



## Avis de Soutenance

Madame Souhila MESSAILI

Chimie

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

*Criblage de molécules naturelles d'intérêt cosmétique par combinaison d'outils analytiques, bioinformatiques et métabolomiques.*

dirigés par Madame Emilie DESTANDAU

Ecole doctorale : Santé, Sciences Biologiques et Chimie du Vivant - SSBCV

Unité de recherche : ICOA - Institut de Chimie Organique et Analytique

Soutenance prévue le **vendredi 20 novembre 2020** à 14h00

Lieu : DEG Université d'Orléans UFR Droit Économie et Gestion Rue de Blois 45100 Orléans

Salle : des thèses - en visioconférence

### Composition du jury proposé

Mme Emilie DESTANDAU	Université d'Orléans	Directrice de thèse
M. Mehdi BENIDDIR	Université de Paris Saclay	Rapporteur
M. Cédric BERTRAND	Université de Perpignan	Rapporteur
M. Olivier GROVEL	Université de Nantes	Examineur
Mme Jane HUBERT	NatExplore Reims	Examinatrice
M. Thomas MICHEL	Université de Nice	Examineur

**Mots-clés :** Chimie analytique, Produits naturels, Métabolomique, Réseaux moléculaires, Phytochimique, Spectrométrie de masse,

### Résumé :

Les produits naturels d'origine végétale sont devenus une source majeure de composés bioactifs pour les industries cosmétiques. Cependant, la détermination du principe actif, c'est-à-dire l'identification, l'isolement et le test de chaque molécule, est complexe, longue et fastidieuse compte tenu de la diversité moléculaire des extraits. Dans ce contexte, ces travaux de thèse portent sur la combinaison d'outils analytiques, bioinformatiques et métabolomiques dans le but de développer des approches simples, rapides et efficaces pour cibler et identifier des molécules d'intérêt. Par conséquent, ces travaux ont conduit d'abord à la mise en place de réseaux moléculaires quantitatifs afin d'étudier l'accumulation de métabolites spécialisés dans des calcs cellulaires de lin. Ensuite, au développement d'une étude métabolomique par UHPLC-HRMS, associée aux informations de déréplication et de similarités structurales obtenues par les réseaux moléculaires afin de mettre en évidence les variations chimiques par des analyses statistiques, et de caractériser les composés discriminants de deux extraits de plante à différents stades de développement. Enfin, à l'association des réseaux moléculaires et du fractionnement des extraits

par chromatographie de partage centrifuge pour la caractérisation phytochimique de deux extraits de plante ayant montré des propriétés d'intérêt pour des applications cosmétiques par des tests chimiques, enzymatiques et cellulaires. Cette combinaison a permis d'obtenir et de tester des fractions simplifiées facilitant ainsi le criblage et l'identification des molécules responsables de l'activité biologique des extraits de plante étudiés.