

Résumé :

Ce travail de thèse s'inscrit dans le cadre de la caractérisation spectroscopique et structurale par la diffraction des RX, étude des propriétés optiques non linéaires et biologiques de nouveaux composés organiques à base de triazole, ainsi que le docking moléculaire.

L'optimisation de la synthèse a permis l'obtention de cinq bases de schiff halogénés pour (L1), (L2), (L3), (L4) et un méthoxyle pour (L5).

L'étude biologique prometteuse obtenue auparavant au sein de notre équipe, nous a incité et orienté vers l'étude de l'effet de la substitution sur l'activité biologique, afin de déterminer le ou les groupements responsables de ces activités, d'une part, et procéder à l'investigation et l'optimisation par le docking moléculaire, d'autre part.

L'étude des propriétés biologiques des cinq bases de Schiff obtenus, a révélé une bonne activité antifongique contre un phytopathogène. Tandis que les résultats de l'activité antibactérienne ont montré que nos composés sont inactifs contre certaines souches testées et actifs et moyennement actifs contre d'autres.

L'investigation des propriétés optiques non linéaire, sur les trois bases de Schiff (L1), (L2) et (L3), montre une bonne réponse à la seconde (SHG) et troisième harmonique (TH) dépassant même la référence LiNbO₃.

Le docking moléculaire nous a permis de prédire l'affinité et les modes d'interactions entre les différents ligands et la protéine responsable de l'activation des quatre microorganismes préalablement testés *in vitro*.

Cette approche nous a permis de corréler entre l'étude biologique effectuée expérimentalement *in vitro* et l'approche par simulation théorique *in silico*.

Mots clés : Bases de Schiff halogénés, 1,2,4-Triazole, Diffraction des rayons X, Docking moléculaire, propriétés biologiques, Propriétés optique non linéaire.