

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université de RELIZANE
Faculté des Sciences et de la Technologie
Département : Génie des procédés



جامعة غليزان
RELIZANE UNIVERSITY

MEMOIRE

En vue de l'obtention du diplôme de MASTER en :

Génie chimique

Intitulé

Extraction des huiles essentielles de la carotte sauvage et prédiction de ses
activités biologiques

Présenté par :

Mr : ZOUAOUI ABDELKADER

Mr : CHOUGRANI SALEM

Devant les grades du jury :

Président : Dr. Cherrak Rachida

Maître de conférences (B) (U. Relizane)

Encadreur : Dr. Rahmani Rachida

Maître de conférences (A) (U. Relizane)

Examineur : Dr. Larbaoui Salima

Maître de conférences (B) (U. Relizane)

Année universitaire : 2024/2025

Remerciements

Tout d'abord, nous remercions et louons notre Créateur Allah, Tout-Puissant, le Grand et le Miséricordieux, pour nous avoir donné l'opportunité et le privilège d'étudier et de suivre le chemin de la connaissance et pour nous avoir donné le courage d'achever ce travail.

Nous tenons à exprimer notre profonde gratitude au **Dr Rahmani Rachida** pour ses conseils avisés et précieux, témoignant de son efficacité et de son humanité, qui ont grandement contribué à l'aboutissement de ce modeste travail.

Nous tenons à remercier **Dr Cherrak Rachida** de nous avoir honorés en présidant le comité d'examen, ainsi que **Dr Larbaoui Salima** qui a accepté d'examiner ce travail.

Enfin, nous remercions tous les professeurs du département de Génie des Procédés et nos camarades de promotion pour leur soutien et leurs encouragements constants. Nous exprimons également notre profonde gratitude à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à ce travail, nous leur sommes profondément reconnaissants du fond du cœur.

Dédicace

Je remercie tout d'abord « Allah » le tout puissant de m'avoir donné, la patience et la volonté pour réaliser ce modeste travail.

Du profond du mon coeur, je dédie ce travail à tous ceux qui me sont chers et à ceux qui ont légué un sens à mon existence. À mes chers parents, frères et sœurs, aucune dédicace ne peut exprimer mon éternel respect, mon amour et ma gratitude pour les sacrifices que vous avez faits pour mon éducation, mon bien-être et pour arriver là où je suis aujourd'hui.

Chère maman, merci pour ton amour, ta patience, ta compréhension, ta présence constante, tes prières et ton soutien sans égal pendant les moments les plus difficiles de ma vie. Je te dois tout ce que j'ai accompli aujourd'hui.

اللهم ارزق أمي فوق عمرها عمرا وفوق صحتها عافيه ولا تحرمني من وجودها ورضاها واجعل
سعادتها كظلها ترافقها دعوة

Enfin, je voudrais exprimer mes sincères remerciements et ma reconnaissance à tous mes professeurs, amis, collègues et à tous ceux qui m'ont aidé à réaliser cette mémoire.

ABDELKADER

Dédicace

À La Mémoire De Mon Cher Père « Que Dieu ait son âme »

À Ma Chère MÈRE « Que Dieu la maintienne en bonne

santé et lui accorde longue vie »

À La Mémoire De Mes Grands Parents « Que Dieu ait leurs âmes »

À Mes Chers Sœurs Et Frères

À Mes Chers Nièces Et Neveux

À Toute Ma Famille

À Tous Mes Amis (es)

À Tous Mes Chers

JE DÉDIE CE TRAVAIL

SALÈM

Résumé

Ce travail de Master s'inscrit dans une démarche de valorisation de la flore médicinale à travers l'étude de la carotte sauvage (*Daucus carota* L.). Il a porté sur l'extraction des huiles essentielles de cette plante par vapo-distillation, l'analyse de leur composition chimique ainsi que l'évaluation de leurs activités biologiques potentielles. La plante étudiée présente une teneur intéressante en composés volatils bioactifs. Par ailleurs, une approche *in silico*, fondée sur des outils de bio-informatique, a permis de prédire des propriétés pharmacologiques notables, telles que des effets antimicrobiens, antioxydants et anti-inflammatoires.

Cette double approche, expérimentale et théorique, met en évidence l'intérêt thérapeutique potentiel des huiles essentielles de *Daucus carota* L. et ouvre des perspectives d'applications dans les domaines pharmaceutique, cosmétique et agroalimentaire. Les résultats obtenus constituent une base solide pour des recherches futures, notamment des études *in vitro* et *in vivo*, en vue d'une exploitation plus ciblée de cette précieuse ressource naturelle.

Mots clés :

Carotte sauvage – *Daucus carota* – Huile essentielle – Vapo-distillation – Activités biologiques – Extraction

Abstract

This Master's thesis is part of a broader effort to promote the value of medicinal flora through the study of wild carrot (*Daucus carota* L.). It focused on the extraction of essential oils from this plant using steam distillation, the analysis of their chemical composition, and the evaluation of their potential biological activities. The studied plant showed a noteworthy content of bioactive volatile compounds. Furthermore, an *in-silico* approach based on bioinformatics tools was employed to predict significant pharmacological properties, such as antimicrobial, antioxidant, and anti-inflammatory effects.

This dual approach, combining experimental and theoretical methods, highlights the therapeutic potential of *Daucus carota* L. essential oils and opens up promising avenues for applications in the pharmaceutical, cosmetic, and food industries. The results provide a solid foundation for further research, particularly *in vitro* and *in vivo* studies, aiming at a more targeted exploitation of this valuable natural resource.

Keywords:

Wild carrot – *Daucus carota* – Essential oil – Steam distillation – Biological activities – Extraction

ملخص

يهدف هذا البحث إلى دراسة الإمكانيات العلاجية لنبات الجزر البري (*Daucus carota* L.) من خلال استخراج زيوتة الأساسية وتقييم خصائصها البيولوجية. تم اعتماد تقنية التقطير بالبخار لاستخلاص الزيت، تلتها دراسة تحليلية لتركيبته الكيميائية، والتي أظهرت غناه بمركبات طيارة فعالة.

كما تم استخدام أدوات المعلوماتية الحيوية ضمن مقارنة حاسوبية (*in silico*) سمحت بالتنبؤ بالنشاطات الدوائية المحتملة للمركبات، مثل التأثير المضاد للميكروبات، والخصائص المضادة للأكسدة والالتهابات.

وتُبرز نتائج هذا العمل أهمية الجمع بين التجربة المخبرية والتحليل النظري لتقييم القيمة العلاجية للنباتات الطبية. كما تفتح آفاقاً واعدة نحو تطبيقات في مجالات الطب البديل، والصناعات التجميلية، وحفظ الأغذية. وتشكل هذه النتائج قاعدة أولية لأبحاث مستقبلية مخبرية وسريية أكثر تعمقاً.

الكلمات المفتاحية:

الجزر البري، *Daucus carota*، الزيوت الأساسية، التقطير بالبخار، الخصائص البيولوجية، النتمين النباتي

Sommaire

Remerciements	
Dédicaces	
Résumé	
ملخص	
Liste des abréviations	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Introduction.....	1

Chapitre I : Généralités sur la plante étudiée

1. La famille des Apiaceae	3
1.1. Historique	3
1.2. Définition	3
1.3. Distribution.....	3
2. L'espèce <i>Daucus carota</i> L (Carotte sauvage)	4
2.1. Définition	4
2.2. Classification.....	4
2.3. Description morphologique.....	5
2.4. Caractéristiques naturelles et applications	7
2.5. L'huile essentielle extraite du <i>Daucus carota</i> L.....	8
2.6. La composition chimique de l'huile essentielle de <i>Daucus carota</i>	8
3. Les bienfaits et les méfaits de <i>Daucus carota</i> L (Carotte sauvage)	9
3.1. Bienfaits de <i>Daucus carota</i> L (la Carotte Sauvage).....	9
3.1.1. Propriétés diurétiques.....	9
3.1.2. Propriétés digestives.....	9
3.1.3. Propriétés anti-inflammatoires	9
3.1.4. Propriétés antioxydantes.....	9
3.1.5. Propriétés de soutien au foie	10
3.1.6. Effet contraceptif (traditionnel).....	10

3.2. Méfaits de <i>Daucus carota</i> L (la Carotte Sauvage).....	10
3.2.1. Réactions allergiques.....	10
3.2.2. Effets sur la peau	10
3.2.3. Interaction avec les médicaments.....	10

Chapitre II : Les huiles essentielles

1. Huiles essentielles	11
1.1. Historique	11
1.2. Définition	11
1.3. Classification des huiles essentielles.....	12
1.3.1. Classification botanique (famille botanique)	12
1.3.2. Classification chimique	12
1.3.3. Classification thérapeutique	12
1.3.4. Classification selon l'odeur (notes olfactives)	13
1.4. Distribution et emplacement des huiles essentielles	13
1.5. Propriétés physiques.....	13
1.5.1. Densité.....	13
1.5.2. Point d'ébullition	13
1.5.3. Solubilité	14
1.5.4. Couleur	14
1.5.5. Indice de réfraction.....	14
1.6. Étude des huiles essentielles	14
1.7. Les procédés d'extraction des huiles essentielles.....	15
1.7.1. L'hydrodistillation	15
1.7.2. Distillation à vapeur saturée (entraînement à la vapeur d'eau).....	16
1.7.3. Diffusion hydro	16
1.7.4. Expression à froid.....	17
1.7.5. Extraction par solvant organique.....	17
1.7.6. Extraction par micro-ondes	18
1.8. Domaines d'utilisation des huiles essentielles	19
1.8.1. En pharmacie.....	19
1.8.1.1. Antibactérien et Antiseptique	19

1.8.1.2. Activité antifongique	19
1.8.2. En cosmétologie	19
1.8.3. En industrie agroalimentaire	20
1.8.4. En agriculture	20
1.9. Toxicité des huiles essentielles.....	20
1.10. Conservation des huiles essentielles	21

Chapitre III : Partie expérimentale

Partie N°01 : Etude expérimentale

1. Introduction	22
2. Matériel végétal.....	23
2.1. Lieu de collecte	23
2.2. Période de collecte	23
2.3. Partie de la plante utilisée.....	23
2.4. Préparation	23
3. Méthodes	25
3.1. Extraction de l'huile essentielle de la carotte sauvage	25
3.2. Rendement.....	28
3.3. Composition chimique de l'huile essentielle	29
3.4. Caractéristiques organoleptiques et physiques.....	30

Partie N°02 : Etude théorique

1. Introduction	31
2. Acétate de Géranyle, α -Pinène et Sabinène : Structures et Caractéristiques.....	31
2.1. L'acétate de géranyle.....	31
2.2. L'alpha-pinène.....	32
2.3. Le sabinène.....	32
3. Etude des activités biologiques	33
3.1. Propriétés physicochimiques.....	33
3.2. Propriétés médicamenteuses.....	35
3.3. Propriétés pharmacocinétiques (ADME)	38
3.4. Propriétés toxicologiques et interactions biologiques.....	39

3.5. Prédiction in silico des activités biologiques des composés majoritaires de l'huile essentielle de carotte sauvage par la méthode PASS.....	40
Conclusion générale	45
Bibliographie	46

Liste des abréviations

HE : Huile essentielle.

TPSA : Surface polaire topologique

ADME : Absorption, Distribution, Métabolisme, Excrétion

Pa : Probabilité d'activité

Pi : Probabilité d'inactivité

Lipo : lipophilie

Flex : flexibilité moléculaire

Insatu : insaturation

Insolu : insolubilité

Size : taille moléculaire

Polar : polarité

GC-MS : Chromatographie en phase gazeuse – Spectrométrie de masse

LogP : Coefficient de partage octanol/eau

MW : Masse moléculaire (Molecular Weight)

PASS : Prediction of Activity Spectra for Substances

TPSA : Surface polaire topologique

Ro5 : Règle de Lipinski (Rule of Five)

MIC : Concentration minimale inhibitrice

PubChem : Base de données chimique du NIH (National Institutes of Health (États-Unis))

Liste des figures

Figure 1 : Distribution globale des Apiaceae.[9].....	4
Figure 2 : les feuilles de la carotte sauvage (photo personnelle, 2024).....	6
Figure 3 : Les fleurs de la carotte sauvage (photo personnelle, 2024).....	6
Figure 4 : Les graines de la carotte sauvage (photo personnelle, 2024).....	7
Figure 5 : Appareillage utilisé pour l'hydrodistillation des HE.[58]	15
Figure 6 : Distillation par entraînement à la vapeur d'eau.[60]	16
Figure 7 : Montage d'extraction sous micro-ondes.[67]	18
Figure 8 : Les sommités fleuries, fraîches et séchées, de la carotte sauvage.	24
Figure 9 : Les graines de la carotte sauvage.....	25
Figure 10 : Schéma d'un alambic distillateur pour huiles essentielles (vapo-distillation) ...	26
Figure 11 : Introduction de la matière végétale dans l'alambic.....	27
Figure 12 : Huile essentielle dans le séparateur pendant la distillation.	27
Figure 13 : Huile essentielle décantée dans le séparateur.	28
Figure 14 : Structure chimique de l'acétate de géranyle.....	32
Figure 15 : Structure chimique de l' α -pinène.	32
Figure 16 : Structure chimique de sabinène.....	32
Figure 17 : Radar des propriétés physicochimiques des 3 molécules étudiées.....	34
Figure 18 : Diagrammes BOILED-Egg des trois composés étudiés.....	38

Liste des tableaux

Tableau 1 : Classification de la carotte sauvage (<i>Daucus carota</i> L).[11]	5
Tableau 2 : Conditions opératoires et rendements de la distillation de la carotte sauvage par vapo-distillation.....	29
Tableau 3 : Profil chimique typique de l'huile essentielle de carotte sauvage.	30
Tableau 4 : Caractéristiques organoleptiques et physiques typiques de l'huile essentielle de carotte sauvage (<i>Daucus carota</i>).....	30
Tableau 5 : Propriétés chimiques et physiques des trois composants.	33
Tableau 6 : Propriétés physicochimiques des composés étudiés.	34
Tableau 7 : Résultats de Lipinski pour les trois molécules étudiées.	36
Tableau 8 : Analyse des Propriétés et de la Conformité aux Règles Pharmaceutiques.....	37
Tableau 9 : Analyse comparative des propriétés ADME des trois composés étudiés.	38
Tableau 10 : Propriétés toxicologiques et interactions biologiques des trois composés étudiés.....	39
Tableau 11 : Prédiction de l'activité biologique de l'acétate de géranyle.	40
Tableau 12 : Prédiction de l'activité biologique de α -Pinène.	41
Tableau 13 : Prédiction de l'activité biologique du Sabinène.	42

Introduction générale

Introduction

Au fil des années, les plantes médicinales ou préparations à base de plantes ont été utilisées avec un succès croissant. En conséquence, on estime que 80 % de la population mondiale dépend principalement de la médecine traditionnelle.[1]

Les plantes sont des usines biologiques naturelles pour des thérapies traditionnelles et efficaces. Ils produisent des substances biochimiques actives : huiles essentielles (HE), phénols (ex : flavonoïdes), glycosides, alcaloïdes, saponines, quinones, vitamines, etc. et les fournissent à l'homme pour sa santé et pour répondre à ses besoins importants. Dans l'Antiquité, certaines plantes étaient vénérées pour leurs vertus reconnues. Personne n'a essayé de savoir pourquoi et comment ils agissent, mais c'est un fait incontestable qui semble magique. Actuellement, les recherches sur les bienfaits des plantes aromatiques et médicinales se développent, notamment sur l'oxyde d'éthylène, qui a un large éventail d'applications, notamment en médecine, en pharmacie et dans d'autres domaines tels que l'industrie alimentaire et l'industrie chimique. Il a été démontré que les effets bioactifs des HE et des extraits sont largement liés à leur grand nombre de composés terpéniques et aromatiques, dont la structure chimique est très diverse.[2]

L'Algérie possède une flore particulièrement riche et diversifiée en raison de sa situation géographique et de son climat, utilisée depuis longtemps par ses habitants en médecine traditionnelle. La flore comprend environ 4000 taxons regroupés en 131 familles et 917 genres. Il existe 464 espèces de plantes endémiques dans le pays (387 espèces, 53 sous-espèces, 24 variétés). Par ailleurs, on ne peut que se réjouir que l'Algérie soit un bon exemple de pays en développement ayant pris conscience de la richesse et de l'importance de sa médecine traditionnelle, car elle, tout en s'efforçant de moderniser son système de santé selon les modèles occidentaux, privilégie la recherche sur les plantes médicinales dans les laboratoires de recherche universitaires pour rationaliser leur utilisation.[1]

La famille des Apiaceae, auparavant connue sous le nom d'ombellifères, regroupe des plantes comestibles telles que la carotte sauvage, le céleri et le fenouil, ainsi que des plantes aromatiques comme le carvi, la coriandre et le cumin. C'est une famille riche en huiles essentielles.[3]

Pour notre recherche, nous avons sélectionné une plante du genre *Daucus* (*Daucus carota*). Ce genre regroupe plus de 22 espèces dont plusieurs sont réputées et employées en médecine traditionnelle à travers de nombreux pays. Toutefois, les recherches concernant celui-ci du point de vue phytochimique et biologique restent relativement limitées.[4]

Introduction

Ce travail explore le potentiel des huiles essentielles extraites des sommités fleuries de *Daucus carota* L., plus connue sous le nom de carotte sauvage. La matière végétale a été soigneusement récoltée, séchée, puis soumise à une extraction par hydrodistillation, une méthode simple et efficace permettant de récupérer les composés volatils sans altération thermique.

Dans notre étude, l'huile obtenue a été analysée d'un point de vue physico-chimique à travers des critères tels que la densité, l'aspect visuel, la couleur et la stabilité, afin d'évaluer sa qualité globale. En l'absence d'analyses instrumentales, une approche *in silico* a été adoptée pour étudier les principales molécules supposées présentes, notamment l'acétate de géranyle, l' α -pinène et le sabinène, dans le but de valoriser cette essence.

Grâce aux plateformes numériques SwissADME, PASSonline et PubChem, ces composés ont été évalués pour leurs propriétés pharmacocinétiques, leur compatibilité avec les règles de drug-likeness, ainsi que leurs activités biologiques potentielles.

Ce travail met ainsi en lumière la richesse biochimique d'une plante souvent sous-estimée, et démontre qu'une synergie entre extraction naturelle et modélisation moléculaire peut contribuer efficacement à la valorisation de la flore médicinale. Il ouvre également la voie à des recherches futures visant à confirmer expérimentalement le potentiel thérapeutique de ces composés volatils.

Ce travail est structuré en trois principaux chapitres, précédé d'une introduction générale et suivi d'une conclusion : le premier présente les généralités sur la plante étudiée, le deuxième est dédié aux huiles essentielles, et le troisième regroupe les résultats et discussions, répartis entre une partie expérimentale et une autre théorique.

Chapitre I

Généralités sur la plante étudiée

1. La famille des Apiaceae

1.1. Historique

La famille des Apiaceae, autrefois dénommé Ombellifères, était déjà connu de civilisations antiques telles que celles du Mexique, de la Chine et de l'Inde, ainsi que des Grecs et des Romains. Il paraît qu'elle a été la première famille de plantes à fleurs identifiée comme telle par les botanistes vers la fin du XVIe siècle. C'était également le premier groupe de végétaux à faire l'objet d'une étude systématique publiée par Robert Morison en 1672.[5]

1.2. Définition

Les végétaux appartenant à la famille des Apiaceae sont principalement des herbacées annuelles, bisannuelles ou généralement pérennes. Ces plantes sont généralement non ligneuses et arbustives, ont un agencement floral fixe, produisent des fleurs hermaphrodites, sont peu souvent dioïques ou polygames, se présentent en ombelles et sont fréquemment entourées à leur base d'un verticille de bractées involucres ou composées de plusieurs ombelles simples (ombellules), presque toujours dotées de bractéoles (involucelles).[6]

Les Apiacées sont simples à identifier, mais il est en revanche compliqué de les différencier les unes des autres (par exemple, il est ardu de distinguer la cigüe (*Conium maculatum* L.) de la carotte sauvage (*Daucus carota* L.).[7]

1.3. Distribution

La famille des Apiacées (Apiaceae), qui regroupe les plantes aromatiques du Moyen Âge, appartient au groupe des dicotylédones. Elle contient près de 3000 espèces classées en 420 genres, principalement situées dans les zones tempérées du globe (Figure 01). En Algérie, on compte 55 genres, 130 espèces et 27 sous-espèces qui la représentent. Ces espèces ont une répartition bipolaire (dans toutes les zones tempérées), mais la plupart d'entre elles sont localisées dans l'hémisphère Nord tempéré.[8]

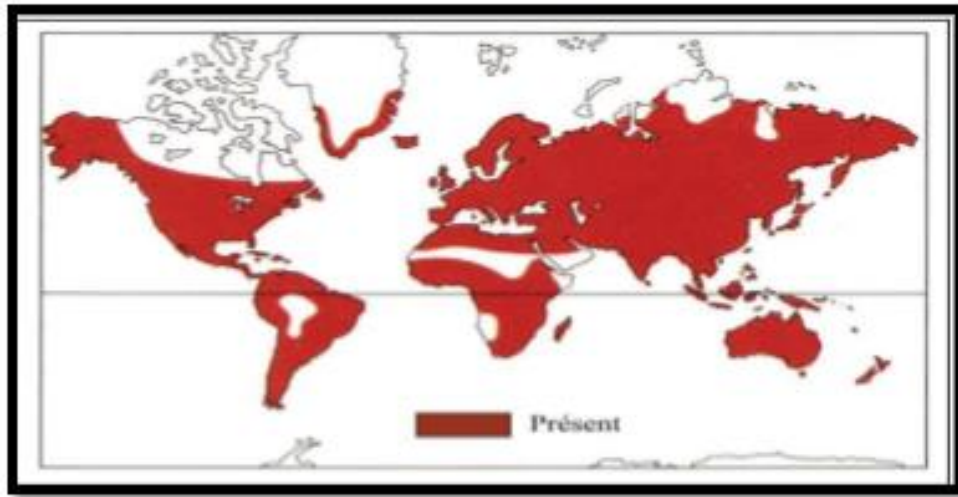


Figure 1 : Distribution globale des Apiaceae.[9]

2. L'espèce *Daucus carota* L (Carotte sauvage)

2.1. Définition

En arabe, la carotte sauvage (*Daucus carota* L) est appelée « Sennayriä » et en berbère, on l'appelle « Asfarnaïa ». Cette plante pousse naturellement dans les zones méditerranéennes, ainsi qu'en Europe, en Asie et en Afrique. On la trouve également en Amérique du Nord, en Sibérie, ainsi qu'au nord et à l'est de l'Inde.

En Algérie, on la retrouve le long des routes, sur les coteaux, dans les prairies de sable et de roche, ainsi que sur les rivages et dans les montagnes.[10]

2.2. Classification

D'après le tableau 01, la classification de la carotte sauvage est la suivante :

Tableau 1 : Classification de la carotte sauvage (*Daucus carota* L).[11]

Empire	Eukaryota
Règne	Plantae
Sous-règne	Viridaeplantae
Embranchement	Tracheophyta
Sous-embranchement	Euphyllophytina
Infra-embranchement	Radiatopses
Classe	Magnoliopsida
Sous-Classe	Cornidae
Superordre	Aralianae
Ordre	Araliales
Famille	Apiaceae
Sous famille	Apioideae
Tribu	Caucalideae
Genre	Daucus
Espèce	Daucus carota L

2.3. Description morphologique

La Plante : mesure généralement entre 0,6 et 2 mètres lorsqu'elle est en fleur. On la reconnaît pour sa racine pivotante qui se développe en un organe de réserve, charnu, cassant, coloré (rarement de couleur blanche), savoureux et non ramifié (dans le sol meuble, sans entrave).[12]

Les feuilles : elles sont généralement fines, souvent non brillantes et présentent une bordure triangulaire. Elles sont très divisées-pennées, à divisions écartées très allongées, étroites, linéaires ou lancéolées-linéaires (Figure 02).[12]



Figure 2 : les feuilles de la carotte sauvage (photo personnelle, 2024)

Les fleurs : les inflorescences se composent de vastes ombelles comportant des fleurs blanches teintées de jaune (Figure 03), à pollinisation croisée et protandre, rassemblées en ombellules. Chaque fleur est composée de cinq sépales, cinq pétales, cinq étamines et deux carpelles.[13]



Figure 3 : Les fleurs de la carotte sauvage (photo personnelle, 2024)

Les graines : les fruits (communément appelés graines de façon abusive) sont des diakènes albuminés de forme elliptique qui contiennent des flavonoïdes (Figure 04), des polyphénols et une huile essentielle constituée d'asarone, de carotol, de pinènes, de limonène, de sesquiterpènes, et de β -bisabolène. Les graines contribuent à la réduction du stress oxydatif et ont montré une réduction significative du taux de cholestérol total, de triglycérides et des HDL et VLDL.[13]



Figure 4 : Les graines de la carotte sauvage (photo personnelle, 2024)

2.4. Caractéristiques naturelles et applications

La *Daucus carota* L est une plante aromatique qui a été employée depuis des temps immémoriaux dans la médecine traditionnelle. Elle était particulièrement reconnue parmi les Grecs et les Romains qui l'employaient déjà en tant que remède.[10]

Stimule l'activité hépatique et la production d'urine. La vision est améliorée grâce à la présence de la vitamine A. La racine est un remède contre les oxyures chez l'enfant. Les feuilles possèdent des propriétés diurétiques, sont employées dans le traitement des cystites et aident à résoudre les problèmes digestifs.[14]

Divers éléments participent à la défense contre les maladies cardiovasculaires, tels que la vitamine C et les flavonoïdes.[15]

Une multitude d'études scientifiques ont démontré que les caroténoïdes présents dans la carotte contribuent à la lutte contre le cancer du poumon, du sein et de la prostate, ainsi que des tumeurs de l'estomac, de l'intestin ou de l'œsophage.[16]

Elle est aussi utilisée en tant qu'épice. Les coumarines et les esters sesquiterpéniques sont ses composés les plus typiques. Selon une étude menée par Jabran et ses collaborateurs, *Daucus carota* L est fréquemment employée dans la médecine traditionnelle tunisienne pour ses vertus carminatives, apéritives, émménagogues et diurétiques. De plus, cette espèce est connue pour ses propriétés anti-diarrhéiques et a été employée pour traiter diverses infections de la peau ainsi que les coliques néphrétiques.[10]

2.5. L'huile essentielle extraite du *Daucus carota* L

L'essence, qui est légèrement jaune ou incolore et fluide, a une odeur distinctive de carotte sauvage. Elle est souvent utilisée comme ingrédient dans de nombreuses recettes culinaires. C'est aussi un ingrédient essentiel dans le secteur cosmétique et pharmaceutique, notamment en raison de ses qualités de conservation. [10, 17]

2.6. La composition chimique de l'huile essentielle de *Daucus carota*

Plusieurs enquêtes sur la composition chimique de l'huile essentielle de *D. carota*, ont été réalisées. En particulier, la composition de l'huile des graines, qui a diverses applications dans la formulation de certaines boissons alcoolisées, et des parfums.[18]

On a rapporté différentes compositions pour l'huile essentielle de cette plante, comprenant un composant dominant, l' α -pinène (atteignant 55%), le sabinène (pouvant aller jusqu'à 60%), le géraniol (jusqu'à 50%), des esters (jusqu'à 81%) et le carotol (jusqu'à 77%). [19]

L'huile extraite des ombelles en fleurs de *D. carota* subsp. Est majoritairement constituée de monoterpènes hydrocarbures (84%), avec l' α -pinène (41%) et le sabinène (18%) étant les éléments les plus prédominants.[20]

L'analyse des huiles essentielles extraites des parties aériennes, à différents stades de développement (stade végétatif, en pleine floraison, et ombelles mûres), révèle que toutes présentent une dominance en monoterpènes hydrocarbures, avec l' α -pinène (16-43%), le sabinène (21-45%) et le myrcène (4-13%) comme composantes majeurs.[21]

Toutefois, d'après une recherche, les huiles essentielles extraites des feuilles, tiges et ombelles de *D. carota* de Corse, récoltées avant et lors de la floraison complète, étaient principalement constituées de monoterpènes tels que l' α -pinène (28-39%) et le sabinène (7-20%). À l'opposé, l'huile extraite des ombelles en phase de floraison a été majoritairement dominée par le (E)-méthylisoeugenol (41%), suivi de près par l' α -pinène (19%) et le sabinène (10%).[22]

3. Les bienfaits et les méfaits de *Daucus carota* L (Carotte sauvage)

3.1. Bienfaits de *Daucus carota* L (la Carotte Sauvage)

3.1.1. Propriétés diurétiques

La carotte sauvage est réputée pour ses effets diurétiques, favorisant l'élimination de l'excès de liquide dans le corps. Cela peut aider à réduire l'hypertension et à traiter les infections urinaires.[23]

3.1.2. Propriétés digestives

Elle aide à stimuler la digestion et à soulager les troubles gastro-intestinaux tels que les ballonnements, les coliques et les indigestions. Les racines et les graines sont particulièrement utilisées à cet effet.[24]

3.1.3. Propriétés anti-inflammatoires

Elle possède des composés anti-inflammatoires, ce qui en fait une plante utile pour réduire l'inflammation, en particulier dans des affections comme l'arthrite.[25]

3.1.4. Propriétés antioxydantes

La carotte sauvage contient des antioxydants qui aident à neutraliser les radicaux libres dans le corps, contribuant ainsi à prévenir les dommages cellulaires et à réduire le vieillissement prématuré.[26]

3.1.5. Propriétés de soutien au foie

Elle est également utilisée pour ses propriétés hépatoprotectrices, aidant à soutenir la fonction du foie, particulièrement dans les cas de désintoxication.[27]

3.1.6. Effet contraceptif (traditionnel)

Bien que non prouvée scientifiquement de manière concluante, la carotte sauvage est souvent utilisée traditionnellement comme plante contraceptive, principalement en utilisant les graines pour prévenir une grossesse.[28]

3.2. Méfaits de *Daucus carota* L (la Carotte Sauvage)

3.2.1. Réactions allergiques

Comme d'autres plantes de la famille des Apiacées, la carotte sauvage peut provoquer des réactions allergiques chez certaines personnes, en particulier celles sensibles aux composés de cette famille.[29]

3.2.2. Effets sur la peau

Le contact avec les feuilles ou les racines fraîches peut provoquer des irritations cutanées, en particulier sous l'effet du soleil, entraînant des brûlures ou des réactions cutanées (phytophotodermatite).[30]

3.2.3. Interaction avec les médicaments

L'utilisation de la carotte sauvage comme remède diurétique peut interférer avec certains médicaments, notamment les médicaments pour la pression artérielle et les diurétiques. Il est important de consulter un professionnel de santé avant de l'utiliser avec des médicaments.[31]

Chapitre II

Les huiles essentielles

1. Huiles essentielles

1.1. Historique

Depuis des milliers d'années, on reconnaît aux huiles essentielles des effets positifs sur l'être humain. Quatre mille ans avant J.C., les Égyptiens employaient déjà ces substances en tant qu'odeur lors de la momification des corps. Ce n'est qu'au XVI^e siècle que leur production et leur usage se généralisent, grâce aux recherches sur les huiles essentielles de romarin, de bois de genièvre et de lavande.[32]

Par la suite, les progrès scientifiques ont profité aux huiles essentielles en matière de méthodes d'extraction et d'analyse de leur composition chimique. En même temps, leur exploitation a également bénéficié de l'essor de l'aromathérapie. En 1928, René-Maurice Gattefosse a inventé le concept d' « aromathérapie » et a entrepris de nombreuses études sur les huiles essentielles, en particulier leurs caractéristiques ; ses travaux ont suscité de nombreuses recherches ultérieures.[33]

1.2. Définition

Les HE, également connues sous les termes « essences » ou « essences aromatiques végétales », sont des substances qui possèdent une odeur prononcée, sont volatiles et ont une texture huileuse, présentes dans les plantes. Ces dernières sont produites à partir des sucres dérivés de la photosynthèse, par l'intermédiaire de cellules sécrétantes généralement localisées dans les fleurs et les feuilles. On peut également faire usage du fruit, du bois ou de la racine de la plante en question. Les huiles essentielles servent simultanément de parfums et de traitements naturels. Il est impératif de les employer en quantités minimales, étant donné que leurs ingrédients actifs sont hautement concentrés. [34, 35]

On a souvent considéré les huiles essentielles comme les agents antimicrobiens les plus performants présents dans les plantes aromatiques. Actuellement, on dénombre à peu près 3000 huiles, dont seulement une trois centaine sont véritablement mises sur le marché, principalement pour l'industrie des arômes et des parfums.[36]

1.3. Classification des huiles essentielles

1.3.1. Classification botanique (famille botanique)

Les huiles essentielles sont souvent classées selon la plante dont elles sont extraites, et cette classification suit les grandes familles botaniques. Exemples :

- Lamiacées : Menthe poivrée, Lavande.
- Rutacées : Citron, Orange douce.
- Asteracées : Camomille romaine.
- Pinacées : Pin sylvestre, Sapin baumier. [37, 38]

1.3.2. Classification chimique

Les huiles essentielles peuvent également être classées en fonction des composés chimiques qu'elles contiennent, ce qui est important pour leur efficacité et leur action thérapeutique.

Exemples :

- Monoterpènes : Pin, Eucalyptus.
- Sesquiterpènes : Camomille romaine, Gingembre.
- Esters : Lavande, Géranium.
- Phénols : Thym, Clou de girofle. [39, 40]

1.3.3. Classification thérapeutique

Les huiles essentielles sont aussi classées en fonction de leurs effets thérapeutiques, qui peuvent être calmants, stimulants, anti-inflammatoires, etc. Exemples :

- Relaxantes : Lavande, Camomille.
- Antibactériennes : Tea tree, Eucalyptus.
- Stimulantes : Menthe poivrée, Romarin.
- Antivirales : Thym, Ravintsara. [41, 42]

1.3.4. Classification selon l'odeur (notes olfactives)

Les huiles essentielles peuvent également être classées en fonction de leur profil olfactif, ce qui est essentiel dans le domaine de la parfumerie. Exemples :

- Notes de tête (fraîches, légères) : Citron, Bergamote.
- Notes de cœur (florales, épicées) : Rose, Géranium.
- Notes de fond (boisées, ambrées) : Patchouli, Bois de cèdre. [43, 44]

1.4. Distribution et emplacement des huiles essentielles

Les huiles essentielles peuvent se trouver dans divers organes de la plante, comme : les sommités fleuries (carotte sauvage, menthe, lavande), les feuilles (eucalyptus, laurier), les rhizomes (gingembre), les fruits (agrumes, badiane, anis), les racines (Vétiver), et même si c'est rare dans les écorces (Cannelier). [45, 46]

1.5. Propriétés physiques

1.5.1. Densité

La densité d'une huile essentielle est une mesure de sa masse par unité de volume. Cela varie en fonction de la composition chimique de l'huile. En général, la densité des huiles essentielles est inférieure à celle de l'eau, mais cela peut varier d'une huile à l'autre. Par exemple, les huiles essentielles qui contiennent des monoterpènes (comme l'huile de citron) sont généralement plus légères, tandis que les huiles riches en sesquiterpènes (comme l'huile de patchouli) ont une densité plus élevée. La densité des huiles essentielles varie entre 0,85 et 1,1 g/cm³. [38, 47]

1.5.2. Point d'ébullition

Le point d'ébullition des huiles essentielles est la température à laquelle elles passent de l'état liquide à l'état gazeux. Les huiles essentielles étant composées de composés volatils, leur point d'ébullition varie en fonction de leur composition. Par exemple, l'huile de menthe poivrée a un point d'ébullition plus bas que l'huile de bois de santal. Le point d'ébullition des huiles essentielles se situe généralement entre 160°C et 200°C, selon la composition chimique des molécules qui les composent. [39, 48]

1.5.3. Solubilité

Les huiles essentielles sont insolubles dans l'eau, mais elles se dissolvent bien dans des solvants organiques tels que l'alcool, l'éthanol, et certains solvants gras. Cette propriété de solubilité est liée à la nature des molécules d'huiles essentielles, souvent hydrophobes. Comme l'huile essentielle de lavande est insoluble dans l'eau mais se dissout facilement dans l'alcool. [41, 49]

1.5.4. Couleur

Les huiles essentielles peuvent varier considérablement en couleur, en fonction de leur origine botanique et des composés qu'elles contiennent. Certaines huiles sont incolores (par exemple, l'huile essentielle de citron), tandis que d'autres peuvent être jaunes, vertes, ou même brunes (par exemple, l'huile essentielle de gingembre). Comme l'huile essentielle de carotte est souvent orange, tandis que l'huile de citron est claire. [43, 50]

1.5.5. Indice de réfraction

L'indice de réfraction est une propriété optique qui mesure la vitesse à laquelle la lumière traverse une huile essentielle. Cela peut être un indicateur de sa pureté, car des variations dans l'indice de réfraction peuvent signaler des contaminants ou une altération. Tell que l'indice de réfraction des huiles essentielles varie généralement entre 1,45 et 1,55. [51, 52]

1.6. Étude des huiles essentielles

Les méthodes suivantes peuvent être employées pour identifier de manière qualitative et quantitative les différents composants d'une huile essentielle : CG, CG/SM, HPLC, RMN, IR et autres. L'analyse des huiles essentielles se fait généralement par chromatographie en phase gazeuse (CG), qui est considérée comme la méthode standard. Elle concerne des échantillons gazeux ou susceptibles d'être vaporisés sans se décomposer dans l'injecteur. La phase mobile est représentée par un gaz (qu'il s'agisse d'hélium, d'azote, d'argon ou d'hydrogène), également connu sous le nom de gaz vecteur. [53, 54]

1.7. Les procédés d'extraction des huiles essentielles

Différentes techniques sont employées pour extraire les huiles essentielles des plantes. Cette diversité est le résultat de l'hétérogénéité des matières premières et de la susceptibilité notable de certains de leurs composants.

1.7.1. L'hydrodistillation

L'extraction d'une huile essentielle se fait le plus souvent par la technique de l'hydrodistillation. La méthode repose sur l'immersion directe du matériau végétal à traiter dans un récipient rempli d'eau qui sera ensuite porté à ébullition. Les vapeurs hétérogènes se condenseront sur une surface froide et l'huile essentielle sera alors isolée par différence de densité. En fin de processus, nous obtiendrons une phase aqueuse (hydrolat) et une phase organique qui flotte (huile essentielle) (Figure 05). Le temps nécessaire pour l'hydrodistillation varie entre trois et six heures, selon le type de végétal à traiter. Elle peut affecter le rendement en huile essentielle et sa composition chimique. [55 - 57]

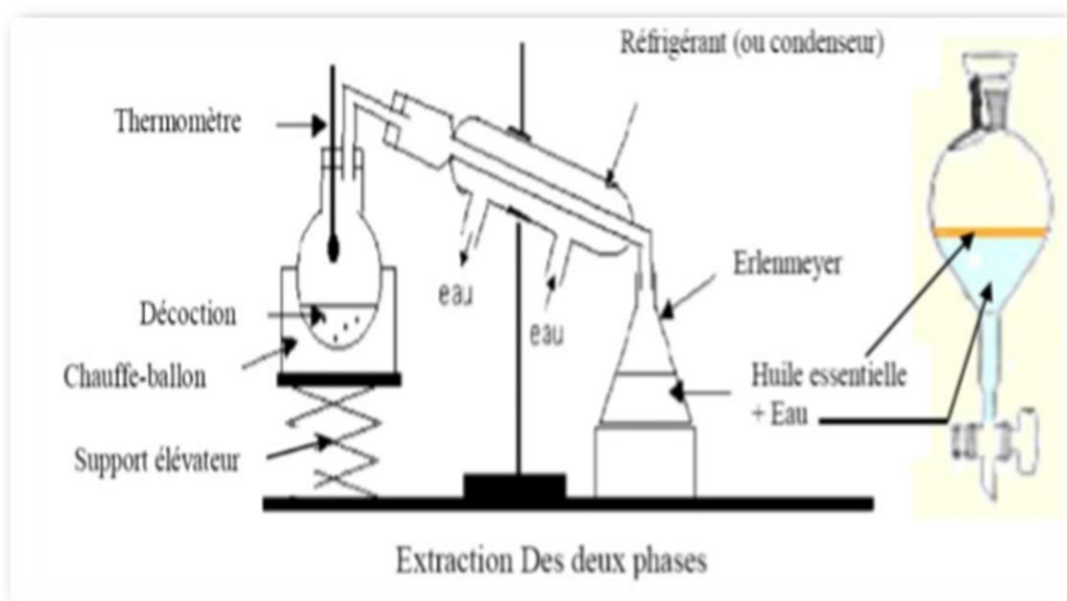


Figure 5 : Appareillage utilisé pour l'hydrodistillation des HE.[58]

1.7.2. Distillation à vapeur saturée (entraînement à la vapeur d'eau)

Le concept de la distillation à la vapeur saturée est comparable à celui de l'hydrodistillation. Cependant, le matériel végétal n'est pas directement en contact avec l'eau ; il est disposé sur une grille trouée au-dessus du fond de l'alambic. La vapeur va endommager les cellules végétales et libérer les molécules aromatiques. Ces composés volatils sont transportés par la vapeur d'eau qui pénètre le végétal ; par la suite, ils sont dirigés vers une spirale de refroidissement. À ce stade, les vapeurs refroidies redeviennent liquides pour former un mélange « eau + huile essentielle » connu sous le nom de distillat. Recueillies dans un essencier, l'huile essentielle et l'eau florale se séparent par simple différence de densité (Figure 06). Le fait que l'eau ne soit pas directement en contact avec la matière végétale, puis avec les molécules aromatiques, prévient certains processus d'hydrolyse ou de détérioration susceptibles de compromettre la qualité de l'huile. [57, 59]

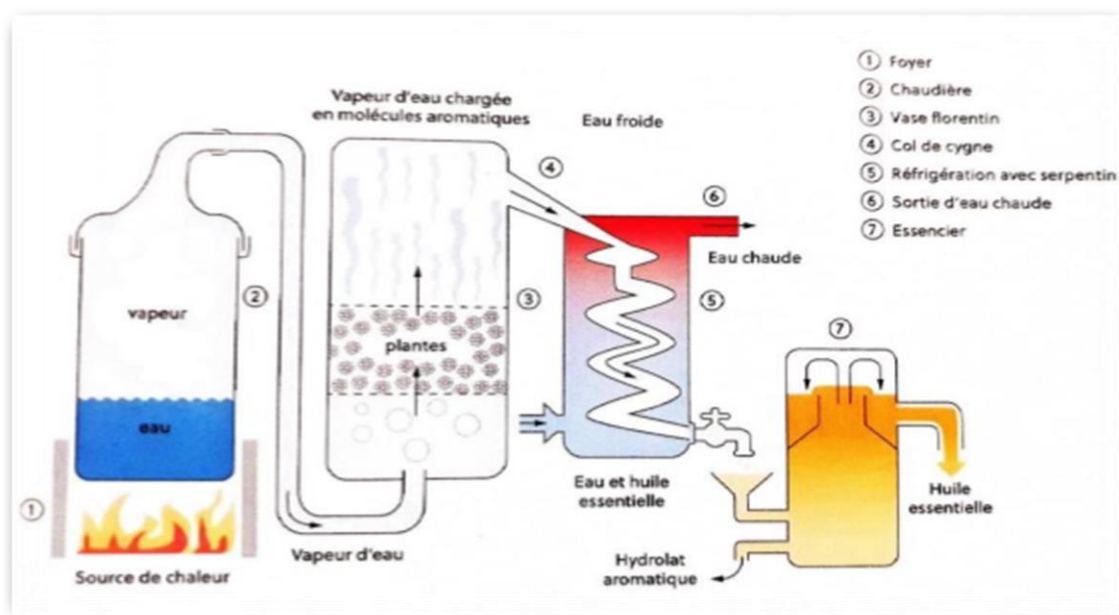


Figure 6 : Distillation par entraînement à la vapeur d'eau.[60]

1.7.3. Diffusion hydro

Elle implique la diffusion de vapeur d'eau à travers une masse végétale, de l'élévation vers la descente. Par conséquent, dans le processus, la vapeur qui traverse la biomasse végétale suit un flux descendant, contrairement aux méthodes traditionnelles de distillation où le flux de vapeur est ascendant. Cette méthode permet une amélioration qualitative et quantitative de l'huile extraite, ainsi qu'une économie de temps, de vapeur et d'énergie. Les industriels utilisent

fréquemment cette méthode ainsi que l'entraînement à la vapeur d'eau pour produire des huiles essentielles et des hydrolats en grande quantité. [57, 61]

1.7.4. Expression à froid

Cette méthode est destinée à l'obtention des huiles essentielles présentes dans les péricarpes d'agrumes en les déchireant par une procédure mécanique. Elle implique la rupture ou la déchiquetage des parois des sacs oléagineux présents dans le mésocarpe, qui se trouve juste sous l'écorce du fruit, l'épicarpe, afin de collecter son contenu qui reste inchangé. L'extraction manuelle des essences de Citrus a été pratiquée pendant une longue période. L'automatisation et l'industrialisation de la méthode d'extraction à froid n'ont été mises en place qu'au début du XXe siècle, dans le but de réduire les coûts de production et d'optimiser les rendements pour répondre à la hausse de la demande. Des systèmes modernes tels que la « Food Machinery Corporation-in-line » (FMC) permettent d'obtenir simultanément le jus de fruit et l'essence sans contact entre les deux. C'est la raison pour laquelle l'extraction de ces essences se fait généralement à froid, d'autant plus que la distillation n'est plus une méthode particulièrement adaptée. Effectivement, la distillation génère des huiles aromatiques de qualité inférieure, essentiellement à cause d'une forte présence d'aldéhydes, qui sont des composés vulnérables à l'oxydation et à la chaleur.[62]

1.7.5. Extraction par solvant organique

L'extraction par solvant organique repose sur la solubilité sélective des composés aromatiques dans un solvant organique, tel que l'éthanol, l'hexane, ou des solvants chlorés comme le dichlorométhane. Le solvant dissout les huiles essentielles contenues dans les cellules végétales. Après extraction, le solvant est éliminé par évaporation, laissant derrière lui une substance concentrée, souvent appelée "absolue". Le procédé d'extraction par solvant organique peut être divisé en plusieurs étapes :

- **Macération** : La matière végétale est d'abord broyée et trempée dans le solvant organique. Ce processus permet au solvant de pénétrer les cellules végétales et de dissoudre les composés aromatiques.
- **Filtration** : Le mélange est ensuite filtré pour séparer le solvant contenant les huiles essentielles de la matière végétale résiduelle.

- **Evaporation du solvant** : Après filtration, le solvant est évaporé, généralement sous vide, afin de récupérer l'huile essentielle concentrée ou "absolue". Ce processus est souvent réalisé sous conditions contrôlées pour éviter la dégradation des composés volatils.
- **Purification** : Parfois, un traitement supplémentaire est effectué pour purifier l'extrait, comme un traitement par des solvants supplémentaires ou un lavage à l'eau pour éliminer les résidus de solvant.

L'extraction par solvant organique présente plusieurs avantages, notamment la capacité d'extraire des huiles essentielles de plantes sensibles à la chaleur, comme les fleurs fragiles (par exemple, la rose ou le jasmin). Cependant, cette méthode présente aussi des inconvénients, notamment la possibilité de résidus de solvant dans l'extrait final, ce qui peut poser des problèmes de sécurité et de pureté. [63 - 65]

1.7.6. Extraction par micro-ondes

Le procédé (Figure 07) implique l'exposition de matière végétale broyée à des micro-ondes en présence d'un solvant qui absorbe fortement les micro-ondes (le méthanol) afin d'extraire des composés polaires, ou en présence d'un solvant qui n'absorbe pas les micro-ondes (l'hexane) pour l'extraction de composés apolaires. Le processus implique de chauffer le système sans jamais atteindre le point d'ébullition, et ce par courtes phases entrecoupées de périodes de refroidissement.[66]

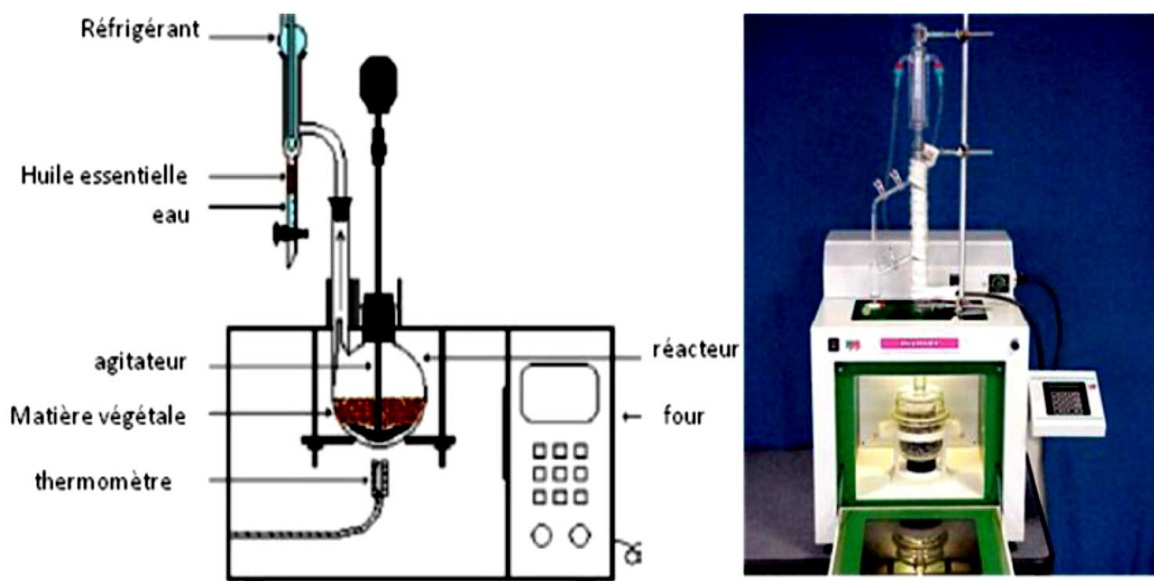


Figure 7 : Montage d'extraction sous micro-ondes.[67]

1.8. Domaines d'utilisation des huiles essentielles

1.8.1. En pharmacie

Les huiles essentielles ont un large éventail d'applications en pharmacie. Elles sont utilisées pour traiter divers maux, notamment pour leurs propriétés antibactériennes, antivirales, analgésiques et anti-inflammatoires. Voici un aperçu des principales utilisations des huiles essentielles en pharmacie :

1.8.1.1. Antibactérien et Antiseptique

Depuis l'époque antique, les essences aromatiques provenant de plantes ont trouvé leur place dans diverses compositions, telles que la pharmacie et la création de parfums. On connaît les propriétés microbiologiques des plantes aromatiques et médicinales. Dans ces plantes, les huiles essentielles ont été reconnues comme les agents antimicrobiens les plus performants. Cependant, c'est en 1881 que Delacroix a d'abord mis en évidence leur action antibactérienne. Depuis, plusieurs huiles ont été caractérisées comme ayant des propriétés antibactériennes.[68]

Les huiles essentielles ont un effet aussi bien sur les bactéries à Gram positif que sur celles à Gram négatif. Cependant, les bactéries Gram-négatif semblent moins réceptives à leur effet, ce qui est lié directement à la composition de leur paroi cellulaire. [68, 69]

1.8.1.2. Activité antifongique

Les propriétés antifongiques de nombreuses huiles essentielles ont été documentées, notamment pour celles extraites du thym, de la citronnelle, de la cannelle et de Melaleuca alternifolia. Des études ont également établi l'efficacité des huiles provenant de différentes espèces d'achillées (*Achillea fragrantissima*, *A. terrefolia* et *A. millefolium*) dans la lutte contre la levure pathogène *Candida albicans*. [68]

1.8.2. En cosmétologie

C'est l'un des plus importants utilisateurs de substances qui dégagent une odeur. Effectivement, les produits de soin personnel (parfums, savons, lotions, shampoings, dentifrices

en pâte ou en poudre) seront jugés sur la base de leur odeur. Toujours en quête de nouveautés, l'homme pousse les secteurs de la parfumerie et des cosmétiques à exploiter largement les composés volatils odorants pour concevoir des lignes de produits toujours plus variées.[70]

1.8.3. En industrie agroalimentaire

L'emploi des huiles essentielles dans la préservation des aliments est en forte augmentation, grâce à leur large activité antimicrobienne qui ne modifie pas leur goût, étant donné que ces aromates font partie intégrante des recettes culinaires.[71]

1.8.4. En agriculture

Les pesticides naturels, qui s'appuient notamment sur les huiles essentielles, constituent une option attrayante pour la défense des cultures face aux insectes, mais aussi contre les mauvaises herbes et les champignons. Dans de nombreuses situations, y compris la lutte contre le *Callosobruchus maculatus* infectant le niébé, les huiles essentielles sont employées comme moyen de biocontrôle. [72 - 74]

1.9. Toxicité des huiles essentielles

Les huiles essentielles ne sont pas sans danger. Tout comme avec tous les produits naturels : « ce n'est pas parce que c'est naturel que ce soit inoffensif pour le corps ». Cet aspect des huiles essentielles revêt une importance croissante, compte tenu de leur popularité grandissante. Certaines huiles essentielles peuvent être nocives lorsqu'elles sont mises sur la peau à cause de leur potentiel irritant (comme les huiles avec une forte concentration en thymol ou en carvacrol), allergène (telles que celles contenant une haute teneur en cinnamaldéhyde), voire phototoxiques (les huiles d'agrumes qui contiennent des furocoumarines). D'autres, comme celles qui contiennent des cétones telles que l'a-thujone, ont un effet neurotoxique. Certaines huiles essentielles contiennent des composés qui peuvent favoriser le développement de cancers.[75]

1.10. Conservation des huiles essentielles

Les huiles essentielles sont des composés délicats et extrêmement vulnérables, rendant indispensable leur conservation pour minimiser les dangers de détérioration et d'altération de leurs caractéristiques. Il est donc nécessaire de les contenir dans un flacon non transparent, protégé de la chaleur et de la lumière.

Chapitre III

Partie N°01

Etude expérimentale

1. Introduction

La recherche scientifique et la bio-industrie connaissent une croissance notable dans le domaine de l'extraction d'huiles essentielles à partir de plantes médicinales et aromatiques, en raison de leurs multiples applications dans les secteurs de la médecine naturelle, des cosmétiques et de l'alimentation. *Daucus carota*, également connue sous le nom de carotte sauvage, est une plante naturelle riche en composés bioactifs qui peuvent posséder des attributs thérapeutiques significatifs. C'est pourquoi l'étude de l'extraction de l'huile essentielle de cette plante revêt une importance capitale. Elle vise à identifier ses constituants et ses caractéristiques, et à évaluer son potentiel d'utilisation en tant qu'ingrédient actif naturel dans les domaines industriels et médicaux.

Ce travail a permis d'adopter la technique de vapo-distillation pour l'extraction de l'huile essentielle à partir des parties aériennes de la plante de carotte sauvage. La plante a été cueillie dans son habitat naturel, séchée à l'ombre afin de conserver ses éléments volatils, puis hachée en petites portions. La masse végétale a été insérée dans un dispositif de distillation et le processus a été réalisé sur une durée déterminée tout en contrôlant la température et la productivité. Suite à l'extraction, un séparateur a été utilisé pour distinguer l'huile de l'eau. L'huile ainsi collectée a été mise dans des bouteilles en verre scellées et entreposée dans un lieu frais et obscur jusqu'à ce qu'elle soit analysée. On a étudié diverses caractéristiques physiques de l'huile et effectué une première analyse de sa composition chimique selon les moyens disponibles, dans le but d'examiner ses propriétés tant physiques que chimiques et d'évaluer ses composants actifs.

Nous avons également pour objectif d'évaluer la valeur biologique et thérapeutique de cette huile. Cette étude pourrait aider à promouvoir l'usage des huiles essentielles naturelles dans différents secteurs, y compris les industries pharmaceutiques, cosmétiques et aromatiques. De plus, elle envisage la possibilité d'une exploitation commerciale de la carotte sauvage en tant que source naturelle d'huiles essentielles.

2. Matériel végétal

2.1. Lieu de collecte

Les parties aériennes de *Daucus carota* L. ont été collectées dans la région de la commune RAMKA, Wilaya de Relizane, en Algérie, plus précisément à Douar Ouled si bouziane, à une altitude d'environ 600 m. Les coordonnées géographiques du site sont : V85J+FG7.

2.2. Période de collecte

La collecte a été réalisée en mois de juin, en période de floraison, correspondant à la fin du printemps.

2.3. Partie de la plante utilisée

Pour cette étude, les graines matures de carotte sauvage ont été utilisées, car elles sont connues pour leur forte teneur en huiles essentielles, plus feuilles, tiges et fleurs.

2.4. Préparation

Dans ce travail, Le matériel végétal utilisé est constitué des parties aériennes (feuilles, tiges et fleurs) de la plante de carotte sauvage (*Daucus carota*), récoltées à l'état spontané dans leur habitat naturel, exactement dans la commune RAMKA. La récolte a été effectuée durant la période de floraison (Figure 08), moment où la concentration en huiles essentielles est généralement optimale. Après la cueillette, le matériel végétal a été soigneusement nettoyé pour éliminer les impuretés, puis séché à l'ombre à température ambiante pendant plusieurs jours afin de préserver les composés volatils. Pour être utilisées par la suite dans l'extraction de l'huile essentielle.



Figure 08 : Les sommités fleuries, fraîches et séchées, de la carotte sauvage.



Figure 09 : Les graines de la carotte sauvage.

3. Méthodes

L'extraction des huiles essentielles est une étape fondamentale permettant d'isoler les composés volatils responsables des propriétés aromatiques et biologiques d'une plante. Pour la *Daucus carota* L. (carotte sauvage), cette opération est réalisée par Vapo-distillation, méthode simple et efficace.

3.1. Extraction de l'huile essentielle de la carotte sauvage

L'extraction de l'huile essentielle de la *Daucus carota* L. (carotte sauvage) a été réalisée au sein de l'entreprise de production d'huiles essentielles et végétales "AESTHETICS NATURA" située au LOCAL N°02 RTE AMMI MOUSSA SECTION 86 GP 04, dans la Daïra de ZEMMOURA, Wilaya de RELIZANE. Le Matériel végétal (les graines plus feuilles, tiges et sommités fleurs) a été soumis à une Vapo-distillation au moyen d'un dispositif d'extraction de type Alambic (Figure 10) ; cette technique repose sur la capacité de la vapeur d'eau à entraîner les huiles essentielles.

L'opération consiste à introduire 100kg de Matériel sèches de la *Daucus carota* L. (carotte sauvage) dans un Alambic en INOX-316L (Figure 11).

La chaudière génère de la vapeur en chauffant l'eau, puis cette vapeur est acheminée par des conduites vers l'alambic où elle entre en contact avec le matériel végétal pour entraîner les huiles essentielles. Les vapeurs enrichies en composés aromatiques remontent ensuite par le tube vertical avant d'être dirigées vers le condensateur.

La vapeur chargée d'huile essentielle se condense dans le condenseur et retrouve son état liquide. Le mélange obtenu est ensuite acheminé vers un séparateur qui permet d'isoler l'huile essentielle d'hydrolat (Figure 12). En raison de sa densité plus faible que celle de l'eau, l'huile essentielle remonte à la surface et peut ainsi être récupérée (Figure 13). Elle est alors collectée et conservée dans un flacon en verre teinté hermétiquement scellé, maintenu à basse température (4,5°C).



Figure 10 : Schéma d'un alambic distillateur pour huiles essentielles (vapo-distillation)



Figure 11 : Introduction de la matière végétale dans l'alambic.



Figure 12 : Huile essentielle dans le séparateur pendant la distillation.



Figure 13 : Huile essentielle décantée dans le séparateur.

3.2. Rendement

La vapo-distillation est une méthode couramment utilisée pour l'extraction des huiles essentielles. Le calcul du rendement est essentiel pour évaluer l'efficacité du processus et est défini comme le rapport entre la masse de l'huile essentielle obtenue et la masse de la matière végétale utilisée, selon la formule suivante :

$$\text{Rendement (\%)} = \left(\frac{m_{\text{huile}}}{m_{\text{plante sèche}}} \right) \times 100$$

✦ Où :

- m_{huile} = masse d'huile essentielle obtenue (en grammes).
- $m_{\text{plante sèche}}$ = masse de plante sèche utilisée pour l'extraction (en grammes).
- Le rendement est généralement exprimé en % (m/m), c'est-à-dire masse sur masse.

Tableau 2 : Conditions opératoires et rendements de la distillation de la carotte sauvage par vapo-distillation.

Paramètre	Valeur estimée
Masse de matière végétale utilisée	100 kg
Température de distillation	~100 °C (vapeur d'eau)
Durée de distillation	3 à 4 heures
Rendement moyen (l'huile/poids)	0,3 à 0,7 %
Volume d'huile essentielle obtenu	300 mL à 700 mL
Masse d'huile essentielle	276 g à 665 g

Les résultats présentés confirment le faible rendement caractéristique de la carotte sauvage en huile essentielle (0,3 à 0,7%), typique des Apiacées. La durée d'extraction de 3 à 4 heures et la température de 100°C correspondent aux paramètres standards de la vapo-distillation. Malgré ce rendement modeste, l'huile essentielle de carotte sauvage reste valorisable compte tenu de sa composition chimique spécifique.

Il est important de noter que le rendement peut varier considérablement en fonction de plusieurs facteurs, notamment l'origine géographique de la plante, les conditions climatiques lors de sa croissance, la partie de la plante utilisée (racines, feuilles, fleurs, graines), et la méthode de séchage et de conservation avant distillation. Ces variations peuvent avoir un impact significatif sur la quantité d'huile essentielle extraite.

3.3. Composition chimique de l'huile essentielle

Dans le cadre de cette étude, nous n'avons pas réalisé la caractérisation chimique de l'huile essentielle. Les données présentées ici sont issues d'une recherche bibliographique approfondie, compilant des informations sur la composition typique de l'huile essentielle de carotte sauvage [76]. Le tableau 03 présente un profil chimique représentatif, incluant les principaux constituants.

Tableau 3 : Profil chimique typique de l'huile essentielle de carotte sauvage.

Composé	Famille chimique	Teneur estimée (%)
Acétate de géranyle	Ester monoterpénique	≤ 60 %
α-Pinène	Monoterpène	≤ 25 %
Sabinène	Monoterpène	≤ 20 %
β-Pinène	Monoterpène	≤ 10 %
β-Bisabolène	Sesquiterpène	≤ 10 %
Myrcène	Monoterpène	≤ 09 %

L'analyse du Tableau 03 met en évidence la diversité et la prédominance de certains composés dans l'huile essentielle de carotte sauvage. On observe une forte concentration en acétate de géranyle, un ester monoterpénique qui confère à l'huile son parfum floral caractéristique.

La présence significative de monoterpènes comme l'α-pinène, le β-pinène, le sabinène et le myrcène est également notable. Ces composés sont fréquemment rencontrés dans les huiles essentielles et contribuent à leurs caractéristiques générales.

3.4. Caractéristiques organoleptiques et physiques

L'huile essentielle de carotte sauvage se distingue par des caractéristiques organoleptiques et physiques bien définies (Tableau 04). Cette HE est de couleur jaune pâle à ambré, avec une odeur épicée et terreuse. Elle présente une densité de 0,880 à 0,905, un indice de réfraction de 1,455 à 1,480, et un point éclair à +54 °C. Ces paramètres confirment sa qualité et son identité.

Tableau 4 : Caractéristiques organoleptiques et physiques typiques de l'huile essentielle de carotte sauvage (*Daucus carota*).

Couleur	Jaune pâle à jaune ambré
Odeur	Caractéristique, épicée, poudrée, terreuse
Densité à 20°C	[0,880-0,905]
Indice de réfraction à 20°C	[1,455-1,480]
Indice de rotation à 20°C	[-20°C-0°]
Point éclair	+54°C

Partie N°02

Etude théorique

1. Introduction

Dans cette partie du travail, nous avons mené une analyse théorique (in silico) approfondie pour prédire les activités biologiques potentielles des trois principaux composés volatils de la carotte sauvage (*Daucus carota* L.) : l'acétate de géranyle, l' α -pinène et le sabinène.

Cette approche s'appuie sur des outils de chémoinformatique avancés, notamment les plateformes PASS Online et SwissADME. Ces outils nous ont permis d'évaluer la bioactivité potentielle, les propriétés pharmacocinétiques (Absorption, Distribution, Métabolisme, Excrétion) et physico-chimiques de ces molécules, qui sont des facteurs déterminants pour leur efficacité et leur sécurité.

Pour compléter ces analyses, nous pourrions également utiliser des techniques de docking moléculaire. Cette méthode de modélisation computationnelle permet d'explorer l'affinité de liaison de ces molécules avec des cibles biologiques spécifiques, comme des protéines ou des enzymes, offrant ainsi des informations précieuses sur leurs mécanismes d'action potentiels.

L'objectif principal de cette démarche est de fournir une compréhension approfondie des effets pharmacologiques potentiels de ces constituants volatils de l'huile essentielle de carotte sauvage. Les résultats de cette étude in silico serviront de base solide pour orienter de futures investigations expérimentales, ouvrant la voie à des applications potentielles dans les domaines pharmaceutique ou cosmétique.

2. Acétate de Géranyle, α -Pinène et Sabinène : Structures et Caractéristiques

2.1. L'acétate de géranyle

Est un ester monoterpénique, produit par estérification du géraniol avec l'acide acétique. Sa formule brute est $C_{12}H_{20}O_2$, et il se présente sous forme de liquide incolore caractérisé par son odeur florale et fruitée, rappelant distinctement la rose et la lavande. Cet arôme agréable en fait un composé très prisé dans l'industrie. Il est produit par estérification du géraniol avec l'acide acétique, une réaction clé dans la chimie organique. Au-delà de ses utilisations déjà mentionnées en parfumerie, cosmétique et comme arôme alimentaire, l'acétate de géranyle est également présent naturellement dans certaines huiles essentielles, comme l'huile de palmarosa et l'huile de citronnelle. Sa structure chimique est donnée dans la figure 14.

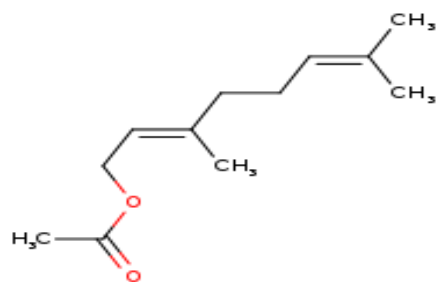


Figure 14 : Structure chimique de l'acétate de géranyle.

2.2. L'alpha-pinène

Un monoterpène bicyclique, est un isomère du bêta-pinène. Sa formule brute est C₁₀H₁₆, et il exhale une odeur fraîche de résine de pin tout en étant très volatil. Ce composé est présent dans les résines de conifères, ainsi que dans plusieurs huiles essentielles comme l'eucalyptus et la carotte sauvage. Sa structure chimique est donnée dans la figure ci-dessous.

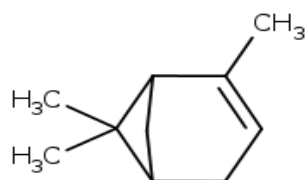


Figure 15 : Structure chimique de l'alpha-pinène.

2.3. Le sabinène

Un autre monoterpène bicyclique, est un isomère du thuyène. Sa formule brute est C₁₀H₁₆, et il se distingue par une odeur épicée, boisée et légèrement citronnée. Il est retrouvé dans les huiles essentielles de carotte, genévrier et poivre noir. Sa structure chimique est donnée dans la figure ci-dessous.

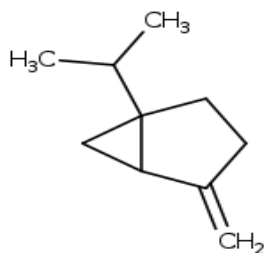


Figure 16 : Structure chimique de sabinène.

Le tableau suivant regroupe quelques propriétés chimiques et physiques des trois composés.

Tableau 5 : Propriétés chimiques et physiques des trois composants.

Propriétés	Acétate de géranyle	α -Pinène	Sabinène
Formule chimique	$C_{12}H_{20}O_2$	$C_{10}H_{16}$	$C_{10}H_{16}$
Masse molaire	196.29 g/mol	136.23 g/mol	136.23 g/mol
LogP (hydrophobicité)	2.95	4.29	4.29
Nombre de rotors	6	0	1
Surface polaire (TPSA)	26.30 Å ²	0 Å ²	0 Å ²
Solubilité dans l'eau	Modérée	Faible	Faible
Point d'ébullition	~220-222°C	~156-160°C	~163-165°C
Point de fusion	< 25°C	-56°C	-60°C
Pression de vapeur	0.02 mmHg	0.44 mmHg	0.38 mmHg

L'acétate de géranyle se distingue par sa plus grande masse et polarité, ce qui entraîne une solubilité modérée dans l'eau et une volatilité plus faible. À l'inverse, l' α -pinène et le sabinène sont plus légers, non polaires, et présentent une faible solubilité dans l'eau, les rendant plus volatils. Ces différences clés impactent directement leurs comportements et usages respectifs.

3. Etude des activités biologiques

3.1. Propriétés physicochimiques

Les composés α -pinène, sabinène et acétate de géranyle présentent des profils physicochimiques globalement favorables à une bonne biodisponibilité. L' α -pinène et le sabinène, tous deux monoterpènes bicycliques, possèdent une petite taille moléculaire et une forte lipophilie, facilitant leur traversée des membranes biologiques. Leur faible polarité traduit une nature apolaire, bien adaptée aux environnements lipidiques, mais pouvant limiter leur solubilité aqueuse. En revanche, l'acétate de géranyle, de structure un peu plus complexe en raison de son groupement ester, présente une polarité légèrement supérieure et une meilleure solubilité, tout en conservant une bonne perméabilité membranaire. Sa flexibilité structurale lui permet potentiellement davantage d'interactions moléculaires. Ainsi, malgré quelques nuances, les trois molécules montrent des caractéristiques prometteuses dans un contexte de développement pharmaceutique, telles que représentées sous la forme des graphiques radars des propriétés physico-chimiques [Figure 17].

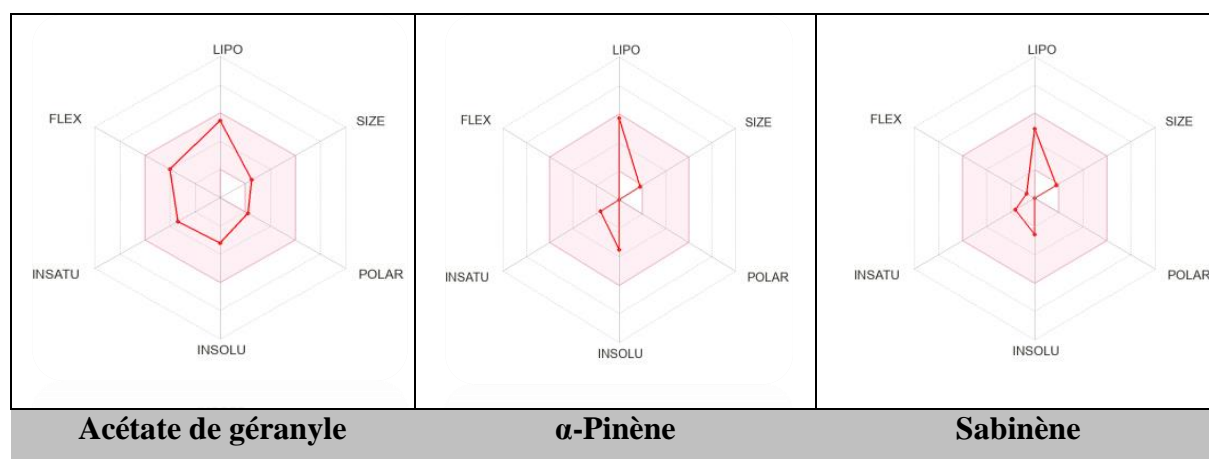


Figure 17 : Radar des propriétés physicochimiques des 3 molécules étudiées.

Le tableau ci-dessous regroupe les propriétés physicochimiques des composés étudiés.

Tableau 6 : Propriétés physicochimiques des composés étudiés.

Propriétés	LIPO	SIZE	POLAR	INSOLU	INSATU	FLEX
Valeurs usuelles	-0,7 <XLOGP3 < +5,0	150g/mo 1 < MV < 500g/mo 1	20Å ² <TPSA < 130Å ²	-6 <logS (ESOL) < 0	0,25 <FractionCsp3 < 1	0 <Liaisons rotatable < 9
Acétate de géranyyl	4,04	196,29	26,30	-3,21	0,58	6
Alpha pinene	4,48	136,23	0	-3,51	0,80	0
Sabinene	3,09	136,23	0	-2,57	0,80	1

- **Lipo (Lipophilie)** : Capacité d'une molécule à se dissoudre dans les lipides ou les milieux gras, influençant son absorption et sa distribution dans le corps.
- **Flex (Flexibilité moléculaire)** : Nombre de liaisons rotatives d'une molécule, influençant sa capacité à adopter différentes conformations et à interagir avec des récepteurs biologiques.
- **Insatu (Insaturation)** : Indique la présence de liaisons doubles dans une molécule, affectant sa réactivité chimique et ses propriétés biologiques.
- **Insolu (Insolubilité)** : Faible capacité d'une molécule à se dissoudre dans l'eau, ce qui peut influencer son biodisponibilité et son transport sanguin.

- **Size (Taille moléculaire)** : Représente la masse moléculaire et le nombre d'atomes, influençant la diffusion de la molécule et son passage à travers les membranes biologiques.
- **Polar (Polarité)** : Réfère à la distribution des charges électrostatiques dans une molécule, influençant son hydrophilie et sa capacité à interagir avec des environnements aqueux.

Le tableau 06 montre que les trois composés étudiés possèdent des propriétés physicochimiques très favorables selon les critères d'admissibilité pour des molécules bioactives. L'acétate de géranyle se distingue par sa légèrement plus grande taille, sa polarité due à l'oxygène et sa flexibilité. L'alpha-pinène et le sabinène sont des molécules plus petites, plus hydrophobes et moins flexibles. Bien que leur TPSA nulle soit hors de la plage "optimale" classique, cela est cohérent avec leur nature d'hydrocarbures et n'est pas nécessairement un désavantage pour toutes les applications, surtout si la perméabilité membranaire est une priorité.

Ces résultats suggèrent que ces composés sont de bons candidats pour des études ultérieures dans des domaines nécessitant une bonne biodisponibilité.

3.2. Propriétés médicamenteuses

La règle des cinq de Lipinski est un concept souvent utilisé dans la découverte de médicaments. Cette règle aide à prédire si une molécule biologiquement active possède les propriétés chimiques et physiques lui permettant d'être biodisponible par voie orale. Elle se base sur des paramètres pharmacocinétiques tels que l'absorption, la distribution, le métabolisme et l'excrétion, en fonction des propriétés physico-chimiques suivantes :

- Pas plus de 5 donneurs de liaisons hydrogène.
- Pas plus de 10 accepteurs de liaisons hydrogène.
- Une masse moléculaire inférieure à 500 Da.
- Un coefficient de partage (LogP) ne dépassant pas 5.

Nous allons examiner les propriétés de type médicamenteux (drug-likeness) et les caractéristiques pharmacocinétiques (ADME) de l'acétate de géranyle, de l' α -pinène et du sabinène, en nous appuyant notamment sur la règle de Lipinski (Tableau 07) et d'autres critères pertinents (Tableau 08).

Tableau 7 : Résultats de Lipinski pour les trois molécules étudiées.

Propriété	Acétate de géranyle	α -Pinène	Sabinène	Valeurs usuelles
Masse moléculaire	196,29	136,23	136,23	≤ 500 g/mol
Donneurs H	0	0	0	≤ 10 NHBD
Accepteurs H	2	0	0	≤ 5 NHBA
LogP (hydrophobicité)	2,95	4,29	4,29	< 5 MLog P
Conformité à Lipinski	✓ Oui	✓ Oui	✓ Oui	≤ 10 rotors

En analysant les résultats regroupés dans le tableau 07, on peut déduire que :

- **Les trois composés étudiés respectent la règle de Lipinski**, ce qui suggère une bonne biodisponibilité orale selon ces critères de base.
- **Acétate de géranyle** : Plus polaire que les deux autres, ce qui peut influencer son absorption et sa distribution.
- **α -Pinène** et **Sabinène** : Très hydrophobes, ce qui favorise leur perméabilité membranaire mais peut limiter leur solubilité dans l'eau.

Les règles de Ghose, Veber et Egan, sont utilisés pour évaluer les propriétés moléculaires des composés.

- **Ghose** : Évalue la biodisponibilité orale en fonction de la masse moléculaire, du LogP et du nombre d'atomes.
- **Veber** : Se concentre sur la flexibilité moléculaire et la surface polaire.
- **Egan** : Prédit l'absorption intestinale.

Le tableau 08 donne les réponses des trois molécules étudiées à ces règles.

Tableau 8 : Analyse des Propriétés et de la Conformité aux Règles Pharmaceutiques

Propriété	Acétate de géranyle	α -Pinène	Sabinène
Masse moléculaire	196,29	136,23	136,23
LogP	2,95	4,29	4,29
Nombre de rotors	6	0	1
Surface polaire (TPSA)	26,30 Å ²	0 Å ²	0 Å ²
Conformité Ghose	✓ Oui	Non	Non
Conformité Veber	✓ Oui	✓ Oui	✓ Oui
Conformité Egan	✓ Oui	✓ Oui	✓ Oui

Le tableau 08 fournit des données essentielles sur les propriétés pharmacocinétiques des composés étudiés, en particulier leur biodisponibilité et leur potentiel d'absorption. On observe que les trois composés – acétate de géranyle, α -pinène et sabinène – sont conformes aux règles de Veber et Egan, ce qui suggère une bonne perméabilité et une absorption orale probable. Toutefois, seule l'acétate de géranyle satisfait également aux critères de Ghose, ce qui renforce son profil favorable en tant que candidat médicamenteux.

Des différences notables apparaissent au niveau de la flexibilité moléculaire : l'acétate de géranyle, avec 6 rotors, présente une plus grande souplesse structurelle, susceptible d'influencer positivement son interaction avec les cibles biologiques, mais aussi son métabolisme. À l'inverse, l' α -pinène et le sabinène, qui possèdent respectivement 0 et 1 rotor, présentent une rigidité moléculaire plus marquée, souvent corrélée à une meilleure stabilité conformationnelle. Leur surface polaire nulle (TPSA = 0 Å²) combinée à une valeur élevée de LogP (4,29) suggère une excellente perméabilité membranaire, favorable à la diffusion passive à travers les membranes cellulaires.

Bien que les trois composés présentent un bon profil d'absorption, l'acétate de géranyle se distingue par un meilleur équilibre entre flexibilité, surface polaire modérée et conformité aux règles, ce qui pourrait en faire un candidat plus prometteur en formulation pharmaceutique.

La figure ci-dessous représente les diagrammes BOILED-Egg pour les trois composés étudiés :

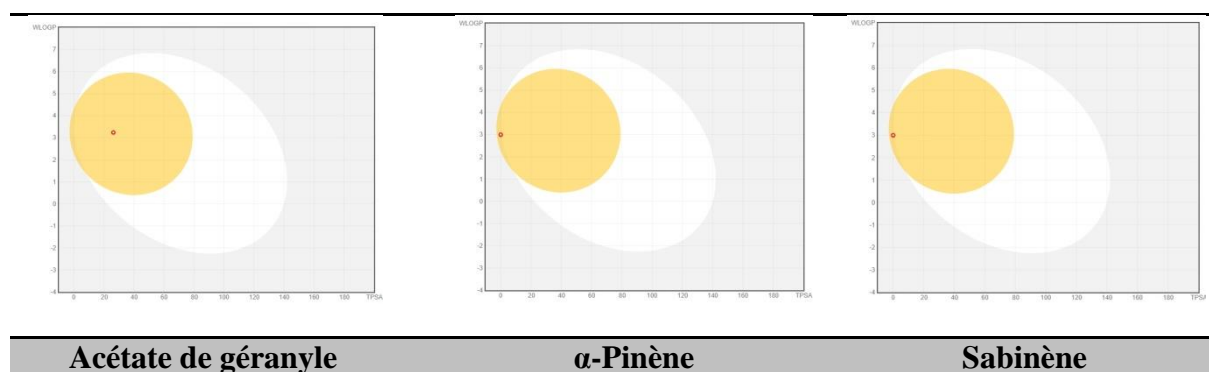


Figure 18 : Diagrammes BOILED-Egg des trois composés étudiés.

La figure 18 montre que l'acétate de géranyle, l' α -pinène et le sabinène ont tous leurs points rouges bien à l'intérieur de la zone jaune centrale. Cela signifie que ces trois composés possèdent des propriétés chimiques et physiques idéales pour une bonne absorption et biodisponibilité dans le corps, ce qui est crucial pour leur efficacité potentielle, notamment en tant que médicaments ou compléments.

3.3. Propriétés pharmacocinétiques (ADME)

Le Tableau 09 présente une analyse comparative des propriétés ADME (Absorption, Distribution, Métabolisme, Excrétion) de l'acétate de géranyle, de l' α -pinène et du sabinène.

Tableau 9 : Analyse comparative des propriétés ADME des trois composés étudiés.

Propriété	Acétate de géranyle	α -Pinène	Sabinène
Absorption intestinale	Bonne	Excellente	Excellente
Métabolisme hépatique	Métabolisé par CYP450	Métabolisé par CYP450	Métabolisé par CYP450
Biodisponibilité orale	Bonne	Bonne	Bonne
Perméabilité membranaire	Bonne	Excellente	Excellente
Excrétion	Principalement rénale	Principalement rénale	Principalement rénale

Les trois composés étudiés présentent des profils pharmacocinétiques similaires, caractérisés par une bonne absorption, une large distribution dans les tissus corporels, un métabolisme principalement hépatique via les enzymes du cytochrome P450, et une excrétion principalement urinaire. Ces caractéristiques suggèrent leur potentiel d'activité biologique systémique, justifiant leur étude approfondie dans le cadre de l'évaluation des propriétés thérapeutiques de l'huile essentielle de carotte sauvage (*Daucus carota*).

3.4. Propriétés toxicologiques et interactions biologiques

Le tableau ci-dessous présente une comparaison des principales propriétés toxicologiques et de l'interaction avec les récepteurs biologiques pour les trois composés majeurs de l'huile essentielle de carotte sauvage.

Tableau 10 : Propriétés toxicologiques et interactions biologiques des trois composés étudiés.

Propriété	Acétate de géranyle	α -Pinène	Sabinène
Toxicité cutanée	Faible	Peut provoquer des irritations	Peut provoquer des irritations
Toxicité environnementale	Modérée	Modérée	Modérée
Interaction avec récepteurs biologiques	Modérée	Forte	Forte

Il ressort que l'acétate de géranyle présente une toxicité cutanée faible, tandis que l' α -pinène et le sabinène peuvent entraîner des irritations cutanées. Sur le plan environnemental, les trois composés présentent une toxicité modérée. Enfin, en ce qui concerne leur interaction avec les récepteurs biologiques, l' α -pinène et le sabinène montrent une affinité plus marquée comparée à celle de l'acétate de géranyle, suggérant un potentiel pharmacologique plus élevé pour ces deux monoterpènes.

Ces résultats, bien que basés sur des simulations et des bases de données prédictives, constituent une étape importante avant les essais expérimentaux. Ils renforcent l'intérêt de poursuivre la recherche sur les formulations à base d'huiles essentielles de carotte sauvage.

3.5. Prédiction in silico des activités biologiques des composés majoritaires de l'huile essentielle de carotte sauvage par la méthode PASS

Les tableaux 11, 12 et 13 présentent les valeurs de probabilité d'activité (Pa) et d'inactivité (Pi) pour diverses fonctions biologiques de trois composés majeurs de l'huile essentielle de carotte sauvage, en l'occurrence l'acétate de géranyle, l' α -pinène et le sabinène, respectivement. Ces résultats ont été obtenus à l'aide de l'outil PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances). Une activité biologique est considérée comme probable in vivo lorsque $Pa > 0,7$ et $Pa > Pi$, ce qui indique une forte probabilité d'expression de l'effet. Plus la valeur de Pa est proche de 1, plus la prédiction est jugée fiable et significative.

Tableau 11 : Prédiction de l'activité biologique de l'acétate de géranyle.

Pa	Pi	Activité
0,973	0,002	Protecteur mucomembraneux
0,957	0,003	Régulateur du métabolisme lipidique
0,952	0,001	Inhibiteur de la prényl-diphosphatase
0,933	0,002	Inhibiteur de l'all-trans-rétinyl-palmitate hydrolase
0,932	0,001	Inhibiteur de l'undecaprényl-phosphate mannosyltransférase
0,869	0,001	Inhibiteur de la rétinol déshydrogénase
0,865	0,001	Inhibiteur de la dolichyl-phosphatase
0,866	0,004	Inhibiteur de la phosphatidylcholine-rétinol O-acyltransférase
0,865	0,005	Inhibiteur de la protéine-disulfure réductase (glutathion)
0,824	0,004	Inhibiteur du CYP2E1
0,838	0,023	Inhibiteur de l'aspulvinone diméthylallyltransférase
0,809	0,003	Inhibiteur de l'ecdysone 20-monooxygénase
0,807	0,004	Antiulcéreux
0,797	0,002	Inhibiteur de l'expression de BRAF
0,799	0,021	Substrat du CYP2J
0,779	0,004	Inhibiteur de l'expression du TNF
0,79	0,021	Anti-eczémateux
0,769	0,003	Inhibiteur de la vitamine-K-époxyde réductase
0,758	0,002	Inhibiteur de la cyclooxygénase 3

0,764	0,009	Hypolipémiant
0,754	0,002	Antiviral (Rhinovirus)
0,749	0,004	Inhibiteur de la bêta-carotène 15,15'-monooxygénase
0,766	0,022	Inhibiteur de la sucre-phosphatase
0,753	0,011	Agoniste de l'apoptose
0,743	0,003	Inhibiteur de la gastrine
0,747	0,01	Anti-inflammatoire
0,773	0,042	Agoniste de l'intégrité membranaire
0,767	0,046	Traitement des troubles phobiques
0,729	0,01	Agoniste du facteur stimulant les colonies de macrophages
0,721	0,007	Antithrombotique
0,76	0,047	Inhibiteur de l'ubiquinol-cytochrome-c réductase
0,704	0,002	Inhibiteur de la farnésyltranstransférase
0,717	0,016	Inhibiteur de la carboxypeptidase Taq
0,707	0,008	Inhibiteur de la phénol O-méthyltransférase
0,718	0,023	Antinéoplasique
0,714	0,02	Inhibiteur de la 5-O-(4-coumaroyl)-D-quinat 3'-monooxygénase
0,727	0,037	Inhibiteur de la chymosine
0,727	0,037	Inhibiteur de la saccharo pepsine
0,727	0,037	Inhibiteur de l'acrocylindro-pepsine

Tableau 12 : Prédiction de l'activité biologique de α -Pinène.

Pa	Pi	Activité
0,863	0,012	Inhibiteur de la testostérone 17bêta-déshydrogénase (NADP+)
0,844	0,012	Substrat du CYP2J
0,821	0,004	Analeptique cardiovasculaire
0,792	0,009	Inhibiteur de la 5-O-(4-coumaroyl)-D-quinat 3'-monooxygénase
0,780	0,001	Inhibiteur de l'alpha-pinène-oxyde décyclase
0,764	0,002	Antagoniste de la prostaglandine E1
0,764	0,009	Inhibiteur de la phosphatidylcholine-rétinol O-acyltransférase

0,746	0,01	Antidyskinétique
0,738	0,007	Inhibiteur de l'all-trans-rétinyl-palmitate hydrolase
0,772	0,042	Inhibiteur de l'ubiquinol-cytochrome-c réductase
0,769	0,043	Substrat du CYP2C12
0,739	0,019	Antagoniste du récepteur nicotinique alpha2bêta2
0,741	0,029	Antinéurotique
0,76	0,049	Traitement des troubles phobiques
0,728	0,021	Inhibiteur de la glutamyl endopeptidase II
0,708	0,005	Substrat de l'UGT1A4
0,706	0,006	Carminatif
0,710	0,012	Inhibiteur de la 27-hydroxycholestérol 7alpha-monooxygénase
0,724	0,028	Substrat du CYP2J2
0,722	0,028	Antagoniste du récepteur nicotinique alpha6bêta3bêta4alpha5
0,722	0,028	Inhibiteur de l'alkénylglycérophosphocholine hydrolase
0,704	0,02	Inhibiteur de l'alkylacétylglycérophosphatase
0,717	0,058	Inhibiteur de l'aspulvinone diméthylallyltransférase

Tableau 13 : Prédiction de l'activité biologique du Sabinène.

Pa	Pi	Activité
0,947	0,003	Anti-eczéma
0,891	0,005	Antinéoplasique
0,853	0,005	Anti-inflammatoire
0,840	0,016	Inhibiteur de la testostérone 17bêta-déshydrogénase (NADP+)
0,825	0,011	Inhibiteur de l'acylcarnitine hydrolase
0,800	0,004	Antipsoriasique
0,802	0,009	Inhibiteur de l'alkylacétylglycérophosphatase
0,808	0,017	Inhibiteur de l'alkénylglycérophosphocholine hydrolase
0,799	0,01	Inhibiteur de la prostaglandine-E2 9-réductase
0,796	0,015	Substrat du CYP3A4
0,782	0,005	Traitement des maladies osseuses

0,794	0,022	Substrat du CYP2J
0,769	0,018	Substrat du CYP3A
0,757	0,005	Dermatologique
0,743	0,005	Antiostéoporotique
0,714	0,005	Inhibiteur de l'ovulation
0,708	0,003	Régulateur du calcium
0,705	0,007	Traitement de la polypose adénomateuse
0,747	0,051	Inhibiteur de l'ubiquinol-cytochrome-c réductase
0,720	0,057	Inhibiteur de l'aspulvinone diméthylallyltransférase

Le composé acétate de géranyle (Tableau 11) présente une large diversité d'activités biologiques. Parmi les activités les plus probables, on note son rôle de protecteur mucomembraneux ($P_a = 0,973$) et de régulateur du métabolisme lipidique ($P_a = 0,957$). Il agit également comme inhibiteur enzymatique, ciblant notamment des enzymes telles que le CYP2E1, BRAF ou encore le TNF. Ces propriétés suggèrent un potentiel thérapeutique intéressant, notamment dans les domaines dermatologique, anti-inflammatoire, antiviral et métabolique.

Le composé α -pinène (Tableau 12) montre principalement des activités inhibitrices enzymatiques, telles que sur la 17β -déshydrogénase, la phosphatidylcholine-rétinol O-acyltransférase ou certaines monooxygénases. De plus, il présente des effets sur le système nerveux, notamment dans le traitement des troubles phobiques et comme antinéurotique, ainsi qu'une activité cardiovasculaire de type analeptique. Ces données mettent en évidence un potentiel d'utilisation dans les troubles neurocomportementaux, cardiovasculaires et dermatologiques.

Quant au sabinène (Tableau 13), il présente plusieurs activités dominantes telles que anti-eczéma ($P_a = 0,947$), anti-inflammatoire et antinéoplasique. Il est également identifié comme substrat des enzymes hépatiques CYP3A4 et CYP2J, indiquant un métabolisme hépatique probable. D'autres effets intéressants sont notés, notamment des propriétés antipsoriasiques, antiostéoporotiques, ainsi que des rôles dans la régulation hormonale et calcique. Ce profil biologique met en avant un potentiel thérapeutique dans le traitement des affections cutanées, inflammatoires et hormonales.

Les résultats obtenus révèlent que les trois composés étudiés présentent une vaste gamme d'activités biologiques potentielles, couvrant principalement des effets dermatologiques, anti-inflammatoires, inhibiteurs enzymatiques, antibactérien et antifongique. Ces prédictions mettent en évidence la valeur thérapeutique prometteuse de ces substances, ce qui justifie leur intégration dans des formulations médicinales ou cosmétiques, notamment dans le cadre de la valorisation de l'huile essentielle de carotte sauvage.

Conclusion générale

Conclusion générale

Ce travail de Master a eu pour objectif l'extraction des huiles essentielles de la carotte sauvage (*Daucus carota* L.) et l'évaluation de leurs activités biologiques potentielles. Les résultats obtenus ont permis de mettre en évidence la richesse de cette plante en composés volatils d'intérêt, dont la composition a été déterminée avec précision. La technique d'extraction employée a prouvé son efficacité pour l'obtention d'un rendement acceptable en huiles essentielles.

La prédiction *in silico* des activités biologiques, à l'aide de plateformes bio-informatiques, a permis d'anticiper plusieurs effets thérapeutiques potentiels, renforçant l'hypothèse d'un intérêt pharmacologique de cette huile essentielle. Ces résultats ouvrent la voie à des investigations plus poussées *in vitro* et *in vivo*, en particulier dans les domaines de la dermatologie, de la lutte contre les pathogènes résistants, ou encore de l'antioxydation.

En somme, cette étude contribue à une meilleure compréhension des vertus de la carotte sauvage et ouvre des perspectives intéressantes pour des applications futures. Les résultats suggèrent que les huiles essentielles de *Daucus carota* L. pourraient être valorisées comme agents naturels dans la conservation des aliments, le développement de nouveaux produits cosmétiques ou même comme compléments thérapeutiques. Des recherches complémentaires, notamment des études *in vivo* et des essais cliniques, seraient nécessaires pour confirmer ces potentialités et explorer davantage les mécanismes d'action sous-jacents, pavant ainsi la voie à une utilisation plus large et plus ciblée de cette ressource naturelle.

Ce travail met en lumière la valeur ajoutée de la carotte sauvage comme source naturelle d'huiles essentielles bioactives, et souligne l'importance de la phytoscience couplée aux outils numériques dans la découverte de nouvelles molécules d'intérêt. Il constitue une base solide pour des recherches futures, orientées vers le développement de formulations naturelles à usage thérapeutique ou cosmétique.

Bibliographie

Bibliographie

- [1] Noui A, (2018). Etude Phytochimique Et Evaluation Des Activités Biologiques De La Plante *Daucus Muricatus* (Apiaceae). Université Des Freres Mentouri Constantine, 104p.
- [2] Croteau R., Kutchan T et Norman G L, (2000). Natural Products (Secondary Metabolites). American Society of Plant Physiologist. Vol.24p, 1250-1318.
- [3] Landoulsi A, (2016). Etude Chimiotaxonomique Et Activités Biologiques Des Métabolites Secondaires Des Plantes Du Genre *Eryngium*. L'université De Lille 2 Et L'université De Tunis El Manar, 248p.
- [4] Ouis N, (2015). Etude Chimique Et Biologique Des Huiles Essentielles De Coriandre De Fenouil Et De Persil. Université D'oran 1, 239p.
- [5] Heywood V H., Moore D M., Richardson I B K et Stearn W T, (1996). Les plantes à fleurs 306 Familles de la flore mondiale, P. 218- 219.
- [6] Bach D., Mascre M et Deysson G, (1979). Organisation et classification des plantes vasculaires, cours de botanique générale quatrième série, tome II, Paris, pp, 529.
- [7] Jensch D et Poschlod P, (2008). Germination ecology of two closely related taxa in the genus *Oenanthe*: Fine tuning for the habitat. *Aquat Bot.* 89: 345-351.
- [8] Tabanca N., Demirci B., Ozek T., Kirimer N., Baser K H C., Bedir E., Khan I Am et Wedge D E, (2006). Gas chromatographic–mass spectrometric analysis of essential oils from *Pimpinella* species gathered from Central and Northern Turkey. *Journal of Chromatography. A*, 1117, P 194–205.
- [9] Djarri L, (2011). Contribution à l'étude des huiles essentielles et des métabolites secondaires de trois plantes algériennes de la famille des apiaceae. Thèse de doctorat. Chimie Organique. Université mentouride. Constantine.
- [10] Mohammedi H, (2012). Etude Des Extraits Volatils De Quelques Plantes Médicinales Algériennes *Daucus Carota* L., *Ruta Montana* L. Et *Rosa Canina* L. Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, 80.
- [11] Botineau M, (2010). Botanique systématique et appliquée des plantes à fleurs, Tec & Doc, Paris, 1335 pp.
- [12] Reduron J P, (2007). Ombellifères de France - tome 2 (Bulletin de la Société Botanique du Centre-Ouest, 27). Société Botanique du Centre-Ouest, pp 564.
- [13] Tirilly Y et Bourgeois C M, (1999). Technologie des légumes. Éditions Tec & Doc, 558 p 10.
- [14] Bruneton, J. (1999). Pharmacognosie, phytochimie, plantes médicinales. 3^e éd., Lavoisier Tec & Doc, chapitre Apiaceae / Carotte – *Daucus carota* L, pp 350–370.

Bibliographie

- [15] Voutilainen S., Nurmi T., Mursu J. et Rissanen T H, (2006). Carotenoids and cardiovascular health. *American Journal of Clinical Nutrition*. 83, 1265-1271.
- [16] De Groot H, (1998). Comment les caroténoïdes protègent du cancer. *Tabula*. 3, 10-11.
- [17] Lanore F, (2009). Les huiles essentielles propriété et utilisation de l'aromathérapie. Editeur 6 rue de vaugirard,75006 paris, 913p.
- [18] Lanfranchi D A., Laouer H., El Kolli M., Prado S., Maulay-Bailly C et Baldovini N, (2010). Bioactive Phenylpropanoids from *Daucus crinitus* Desf. from Algeria. *Journal Agricultural FoodChemestry*, 58, 2174-2179.
- [19] Djarri L., Medjroubi K., Akkal S., Elomri A., Seguin E et Vérité P, (2006). Composition of the essential oil of aerial parts of an endemic species of the Apiaceae of Algeria, *Daucus reboudii*Coss. *Flavour and Fragrance journal*, 21, 647–649.
- [20] Staniszewska M et Kula J, (2001). Composition of the essential oil from wild carrot. *L.ssp. carota*) growing in Poland. *Journal Essential Oil Research*, 13, 439-441.
- [21] Bauer K., Garbe D et Surburg H, (1990). In *Common Fragrance and Flavor Materials, Preparation, Properties and Uses*, 2nd ed., VCH, Weinheim, 142 p.
- [22] Lawrence-B M, (1994). *Essential Oils*, Allured Publishing Corp. Carol Stream, IL, 28p.
- [23] McCutcheon, A. (2013). "Herbal Medicine: Biomolecular and Clinical Aspects" (2nd ed.). CRC Press.
- [24] Murray, M. T., & Pizzorno, J. E. (1999). "The Encyclopedia of Medicinal Plants". DK Publishing.
- [25] Ríos, J. L., & Recio, M. C. (2005). "Medicinal Plants and Cancer Evidence and Perspectives". *Phytomedicine*, 12(1-2), 93-102.
- [26] Rizzolo, D., et al. (2007). "Antioxidant and antimicrobial properties of *Daucus carota* L. essential oils". *Journal of Medicinal Food*, 10(4), 567-572.
- [27] Niazi, J. H., et al. (2014). "A comprehensive review on the pharmacological properties of *Daucus carota* L." *Pharmacognosy Reviews*, 8(15), 72-79.
- [28] Vahabi, M., et al. (2016). "Ethnobotanical and pharmacological review of *Daucus carota* L." *Journal of Ethnopharmacology*, 193, 111-121.
- [29] De Groot, H., et al. (2013). "The Toxicology of Apiaceae". *Toxicology Reports*.
- [30] Camargo, R., & Silva, L. M. (2002). "Plant-induced phytodermatoses: Identification and clinical management". *Journal of Clinical Dermatology*, 16(5), 389-394.
- [31] Cheng, Y., et al. (2012). "Interaction between medicinal plants and drugs". *Current Drug Metabolism*, 13(8), 1071-1080.

Bibliographie

- [32] Chouitah O, (2012). Composition chimique et activité antibactérienne des huiles essentielles des feuilles de (*Glycyrrhiza glabra*). Université d'Oran, 143p.
- [33] Besombes C, (2008). Contribution à l'étude des phénomènes d'extraction hydrothermomécanique d'herbes aromatiques. Applications généralisées. Thèse de doctorat. Université de La Rochelle, 289p.
- [34] Balz R, (1986). Les huiles essentielles. Éditions Crest, Eygluy-L'escoulin.
- [35] Roulier G, (1990). Les huiles essentielles pour votre santé. Traité pratique d'aromathérapie. Propriétés et indications thérapeutiques des essences de plantes. Éditions Dangles.
- [36] Sipailiene A., Venskutonis P., Baranauskiene R et Sarkinas A, (2006). Antimicrobial activity of commercial samples of thyme and marjoram oils. *Journal of Essential Oil Research*, 18p, 698-703.
- [37] Barel, A. O., Paye, M., & Maibach, H. I. (2014). *Handbook of Cosmetic Science & Technology*. CRC Press.
- [38] Maury, D., & Doss, P. (2007). *Phytothérapie et Aromathérapie*. Éditions Maloine.
- [39] Bakkali, F., Averbeck, S., Averbeck, D., & Idaomar, M. (2008). Biological effects of essential oils – A review. *Food and Chemical Toxicology*, 46(2), 446-475.
- [40] Kremers, P., & Büller, S. (2011). *Les Huiles Essentielles : Pratique de l'Aromathérapie Scientifique*. Éditions Thierry Souccar.
- [41] Tisserand, R., & Young, R. (2014). *Essential Oil Safety: A Guide for Health Care Professionals*. Churchill Livingstone.
- [42] Valnet, J. (1990). *Aromathérapie : Les huiles essentielles, médecine du XXIe siècle*. Éditions Albin Michel.
- [43] Poucher, W. A. (2016). *Perfumes and Flavours: The Science of Aromatics*. Springer.
- [44] Geoffrey, S. H. (2001). **Les Secrets de la Parfumerie*. Éditions Grasset.
- [45] Belakhdar J, (1997). *La Pharmacopée Marocaine Traditionnelle*. Idis Press (Ed). Paris, 764p.
- [46] Gonzalez-Trujano M E., Pena E I., Mart´inez A L., Moreno J., Guevara-Fefer P., Deciga-Campos M et Lopez-Munoz F J, (2007). Evaluation of the antinociceptive effect of *Rosmarinus officinalis* L. using three different experimental models in rodents. *Journal of Ethnopharmacology* 111, 7p, 476–482.
- [47] Bauer, K., et al. (2010). Analysis of the Composition of Essential Oils and their Physical Properties. *Phytochemistry Reviews*, 9(2), 215-234.

Bibliographie

- [48] Roulier, A. (2014). Les Propriétés Physiques des Huiles Essentielles Identification et Utilisation Pratique. Éditions Dangles.
- [49] Van Nguyen, T., & S. Ma. (2012). Solubility of Essential Oils in Solvents: A Comprehensive Study. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 101(3), 1851-1858.
- [50] Chaudhary, S., et al. (2015). Colour of Essential Oils and their Determinants: A Comprehensive Review. *International Journal of Cosmetic Science*, 37(4), 365-370.
- [51] Santos, R., & Silva, P. (2013). Refractometric Characterization of Essential Oils: A Tool for Purity Assessment. *Food Research International*, 51(1), 58-64.
- [52] Mann, C., & Willson, C. (2014). Introduction to the Physical Properties of Essential Oils. *Journal of Esse*.
- [53] Audigie C., Dupont G et Zonszaim F, (1995). Principe Des Méthodes D'analyse Biochimique. Tome 2, Ed. Dunod, Paris, 144 P.
- [54] Lehotay S et Hajšlová J, (2002). Application of gas chromatography in food analysis. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 21(9-10), 686–697.
- [55] Bruneton J, (1993 ;1999). Pharmacognosie : Phytochimie& Plantes médicinales. 2^e ; 3^eéd. Editions techniques et documentation & éditions médicales internationales, Lavoisier, Paris, France.
- [56] Meyer W B, (1984). Natural essential oils: extraction processes and application to some major oils. *Perfum. Flavorist*, 93-104.
- [57] Unido I C S, (2008). Extraction Technologies for Medicinal and Aromatic Plants, United Nations Industrial Development Organization and The International Centre for Science and High Technology.
- [58] Penchev. (2010). Etude des procédés d'extraction et de purification de produits bioactifs à partir de plantes par couplage de techniques séparatives à basse et hautes pressions.
- [59] Neffati A, (2010). Etude de la composition chimique et évaluation d'activités biologiques de l'huile essentielle d'une Apiaceae de Tunisie : *Pituranthos chloranthus*, Thèse de doctorat en Sciences de l'université de Caen.
- [60] Couic-Marinier F et Touboul A, (2017). Le guide terre vivante des huiles essentielles. Terre vivante.
- [61] Bassereau M., Chainetreau A., Duperrex S., Joulain D., Leijs H., Loesing G., OWEN N., Sherlock A., Schippa C., Thorel PJ et VEY M, (2007). GC-MS Quantification of Suspected Volatile Allergens in Fragrances. Data Treatment Strategies and Method Performances. *J Agric Food Chem*, 55, 25-31.

- [62] Belsito E L., Carbone C., Di Gioia M L., Leggio A., Liguori A., Perri F. et Viscomi M C, (2007). Comparison of the volatile constituents in cold-pressed bergamot oil and a volatile oil isolated by vacuum distillation. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 55(19), 7847-7851.
- [63] Buchbauer, G., et al. (2010). "Volatile compounds in essential oils: Extraction and analysis". *Flavour and Fragrance Journal*, 25(5), 259-270. DOI ,10.1002/ffj.1963.
- [64] Chemat, F., et al. (2017). "Solvent extraction of essential oils: From laboratory to industrial applications". *Essential Oils: Chemistry and Therapeutic Applications*. CRC Press.
- [65] Cavalli, J. F., et al. (2009). "Techniques of essential oils extraction". *Phytochemistry Reviews*, 8(3), 453-463. DOI, 10.1007/s11101-009-9149-9.
- [66] Bruneton J, (1993 ;1999). *Pharmacognosie : Phytochimie& Plantes médicinales*. 2^e ; 3^eéd. Editions techniques et documentation & éditions médicales internationales, Lavoisier, Paris, France.
- [67] Lagunez R L, (2006). Etude de l'extraction de métabolites secondaires de différentes matières végétales en réacteur chauffée par induction thermomagnétique directe. Thèse Doctorat, institut national polytechnique de Toulouse, 15-35.
- [68] Toure D, (2015). *Etudes Chimique Et Biologique Des Huiles Essentielles De Quatre Plantes Aromatiques Medicinales De Côte D'ivoire*. Université Felix Houphouët-Boigny, 153p.
- [69] Caillet S et Lacroix M, (2007). *Les huiles essentielles : leurs propriétés antimicrobiennes et leurs applications potentielles en alimentaire*. Laboratoire de recherche en Sciences appliquées à l'alimentation (RESALA) INRS-Institut Armand- Frappier, université de Laval (Québec).
- [70] Obame-Engonga L C, (2009). *Etude Phytochimique, Activités Antimicrobiennes Et Antioxydantes De Quelques Plantes Aromatiques Et Médicinales Africaines*. Université De Ouagadougou, 277p.
- [71] Kurita N et Koike S, (1982). Synergetic antimicrobial effect of sodium chloride and essential oils components. *Agric. Bioi. Chern*, 46, 159-165.
- [72] Isman M B, (2000). Plant essential oils for pest and disease management. *Crop Protection*, 19(8-10), 603–608.
- [73] Dayan F E., Cantrell C L et Duke S O, (2009). Natural products in crop protection. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 17(12), 4022–4034.
- [74] Ilboudo Z, (2009). *Activité Biologique de quatre huiles essentielles contre Callosobruchus maculatus Fab. (Coleoptera : Bruchidae), insecte ravageur des stocks de niébé au Burkina Faso*. Université de Ouagadougou, 150p.

Bibliographie

[75] Piochon M, (2008). Étude Des Huiles Essentielles D'espèces Végétales De La Flore Laurentienne : Composition Chimique, Activités Pharmacologiques Et Hémi-Synthèse. L'université Du Québec À Chicoutimi Comme Exigence Partielle, 213p.

[76] Fiches techniques (2022), huile essentielle, carotte sauvage bio, Je International / Distillerie Florihana, Caussols – France.