جامعة سيدي محمد بن عبد الله بفاس
UNIVERSITE SIDI MOHAMED BEN ABDALLAH DE FES
كلية العلوم ظهر المهراز فاس
FACULTE DES SCIENCES DHAR EL MEHRAZ FES

CENTRE D'ETUDES DOCTORALES «SCIENCES ET TECHNIQUES ET SCIENCES MÉDICALES

مركز الدكتوراه « العلوم والتقنيات والعلوم الطبية»

AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

Mr **BOUKHSSAS Salaheddine**

Soutiendra : **le Samedi 14/01/2023** à **09H30**
Lieu : ***Centre des Etudes Doctorales - USMBA – Salle 4***

Une thèse intitulée :
Synthèse, caractérisation, étude théorique et évaluation de l'activité anticorrosive de quelques composés mono et bihétérocycliques, dérivés du triazole et du tétrazole

En vue d'obtenir le ***Doctorat***
FD : ***Molécules Bioactives, Santé et Biotechnologies***
Spécialité : ***Chimie Organique***

Devant le jury composé comme suit :

Nom et prénom	Etablissement	Grade	Qualité
Pr LACHKAR Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès	PES	Président
Pr ALAMI Anouar	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès	PES	Directeur de thèse
Pr FARAJ Hassan	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès	PES	Co-directeur de thèse
Pr EL ISSAMI Souad	Faculté des Sciences - Agadir	PES	Rapporteur & examinateur
Pr ELAZAMI ELHASSANI Mohammed	Centre Régional des Métiers de l'Education et de la Formation Fès-Meknès	PH	Rapporteur & examinateur
Pr MISBAHI Khalid	Faculté des Sciences et Techniques - Fès	PES	Rapporteur & examinateur
Pr ZOUIHRI Hafid	Faculté des Sciences - Meknès	PH	Examinateur
Pr AOUINE Younas	Faculté des Sciences - Agadir	PH	Examinateur

Résumé :

Le travail de cette thèse s'insère dans le cadre des travaux réalisés au sein du Laboratoire de Chimie Organique (LCO, Accréditation 2014-2019), et du Laboratoire d'Ingénierie des Matériaux Organométalliques, Moléculaires et Environnement (LIMOME, Accréditation 2020-2025), concernant la synthèse et la caractérisation structurale, la réactivité et les études des propriétés physico-chimiques et électrochimiques de nouveaux systèmes hétérocycliques dérivés du triazole et de tétrazole.

Compte tenu de la richesse de la chimie hétérocyclique, et de la diversité des applications qu'elle possède, nous avons réalisé la synthèse et la caractérisation d'un nouverau composé tétrazolique, le *N*-((tétrazol-5-yl)méthyl)cyclohexanamine via la réaction de *N*-alkylation de la cyclohexylamine par le chloroacétonitrile, suivi d'une réaction de cycloaddition dipolaire 1,3- entre la 2-(cycloxylamino) acétonitrile et l'azoture de sodium.

À partir du modèle structural du composé oxazolinique, nous avons conçu et réalisé la synthèse de nouveaux composés bihétérocycliques hybrides (oxazoline-1,2,3-triazole), à savoir le 1-((4-méthyl-2-phényl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)méthyl)-1*H*-1,2,3-triazole-4,5-dicarboxylate de diéthyle, le 1-((4-méthyl-2-phényl-4,5-dihydro-oxazol-4-yl)méthyl)-1*H*-1,2,3-triazole-4,5-dicarboxylate de diméthyle et le 1-((4-méthyl-2-phényl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)méthyl)-1*H*-1,2,3-triazole-4,5-carboxylate d'éthyle via la réaction de cycloaddition dipolaire-1,3 de Huisgen, ainsi que celle catalysée par le Cuivre I (CuAAC) entre le 4-(4'-azidométhyltriazolométhyl) 4-éthyl 2-phényl oxazoline et trois alcynes mono et di-substitués: le but-2-ynedioate de diéthyle, le but-2-ynedioate de diméthyle et le propiolate d'éthyle. Ces trois composés synthétisés ont été caractérisés à l'aide des différentes méthodes spectroscopiques et d'analyse : RMN 1D (^{1}H, ^{13}C), RMN 2D (^{1}H-^{1}H et ^{1}H-^{13}C), MS-ESI et par diffraction aux rayons X.

L'évaluation de l'activité anticorrosive des trois composés synthétisés, a été également évalué en utilisant trois méthodes : la méthode transitoire, la gravimétrie et la méthode stationnaire. Les résultats obtenus montrent que le composé 1-((4-méthyl-2-phényl-4,5(dihydrooxazol-4-yl)méthyl)-1*H*-1,2,3-triazole-4,5-di-carboxylate de diéthyle est un bon inhibiteur contre la corrosion de l'acier doux dans HCl 1M.

Par ailleurs, le calcul de la DFT est réalisé pour prédire la géométrie et reproduire les paramètres de la structure cristalline de la molécule 1-phényl-*N*-(benzométhyl)-*N*-({1-[(2-benzo-4-méthyl-4,5-dihydro-1,3-oxazol-4-yl)méthyl]-1*H*-1,2,3-triazol-4-yl}méthyl)méthanamine. De même, l'étude de la surface de Hirshfeld ont révélé que les interactions H...H et C...H sont plus dominantes dans ce composé.

Mots clés : Hétérocycle, cycloaddition dipolaire-1,3, 1,2,3-triazole, N-alkylation, 1H-tétrazole, activité antibactérienne, activité antioxydante, DFT, surface de Hirshfeld.

Synthesis, characterization, theoretical study and evaluation of the anticorrosive activities of some mono and bi-heterocyclic compounds, derived from triazole and tetrazole

Abstract

The work of this thesis is part of the work carried out within the Organic Chemistry Laboratory (LCO, Accreditation 2014-2019), and the Laboratory of Organometallic, Molecular and Environmental Materials Engineering (LIMOME, Accreditation 2020-2025), concerning the synthesis and structural characterization, the reactivity and the studies of the Physico-chemical and electrochemical of new heterocyclic systems derived from triazole and tetrazole.

Given the richness of heterocyclic chemistry, and the diversity of applications it possesses, we have carried out the synthesis and characterization of a new tetrazole compound, N-((tetrazol-5-yl)methyl)cyclohexanamine via the N-alkylation reaction of cyclohexylamine with chloroacetonitrile, followed by a 1,3- dipolar cycloaddition reaction between 2-(cycloxylamino) acetonitrile and sodium azide.

Based on the structural model of the oxazolinic compound, we designed and synthesized new biheterocyclic hybrid compounds (oxazoline-1,2,3-triazole), namely diethyl 1-((4-methyl-2-phenyl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)methyl)-1H-1,2,3-triazole-4,5-dicarboxylate, 1-((4-methyl-2-phenyl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)methyl)-1H-1,2, 3-triazole-4,5-dicarboxylate and ethyl 1-((4-methyl-2-phenyl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)methyl)-1H-1,2,3-triazole-4,5-carboxylate via Huisgen's dipolar cycloaddition reaction, 3 dipolar cycloaddition reaction, as well as the Copper I (CuAAC), catalyzed reaction between 4-(4'-azidomethyltriazolomethyl)4-ethyl-2-phenyl oxazoline and three mono and di-substituted alkynes: Diethyl but-2-ynedioate, Dimethyl but-2-ynedioate, and Ethyl propiolate. These three synthesized compounds were characterized using different spectroscopic and analytical methods: 1D NMR (1H, 13C), 2D NMR (1H-1H and 1H-13C), MS-ESI, and X-ray diffraction.
The evaluation of the anti-corrosive activity of the three synthesized compounds, was also evaluated using three methods: the transient method, gravimetry, and stationary method. The results obtained show that the compound diethyl 1-((4-methyl-2-phenyl-4,5(dihydrooxazol-4-yl)methyl)-1H-1,2,3-triazole-4,5-di-carboxylate is a good inhibitor against corrosion of mild steel in 1M HCl.

Furthermore, DFT calculation is carried out to predict the geometry and reproduce the crystal structure parameters of the molecule 1-phenyl-N-(benzomethyl)-N-({1-[(2-benzo-4-methyl-4,5-dihydro-1,3-oxazol-4-yl)methyl]-1H-1,2,3-triazol-4-yl}methyl)methanamine. Similarly, the Hirshfeld surface study revealed that H...H and C...H interactions are more dominant in this compound.

Key Words: Heterocycle, dipolar cycloaddition-1,3, 1,2,3-triazole, N-alkylation, 1H-tetrazole, antioxidant activity, DFT, Hirshfeld surface.