



AVIS DE SOUTENANCE D'UNE THESE DE DOCTORAT

Le Doyen de la Faculté des Sciences a le plaisir d'informer le public qu'une soutenance de
thèse de Doctorat en

«Chimie Fondamentale et Appliquée»

aura lieu le 20/07/2024 à la Faculté des Sciences, Kénitra

La Thèse sera présentée par Mr SAHRANE MOHAMED

Sous le thème :

Etude Théorique MEDT des Cycloadditions de Diels-Alder[4+2] Symétriques et
Asymétriques pour la Synthèse des Dérivées de α -cétones Aromatiques

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Titre	Etablissement
GUEDIRA TAOUFIQ	Président	Faculté des Sciences, Kénitra
TOUIMI BENJELLOUN ADIL	Rapporteur	Faculté des Sciences, Fès
BOUZAKRAOUI SAID	Rapporteur	Faculté des Sciences, Kénitra
BOUACHRINE MOHAMMED	Rapporteur	Faculté des Sciences, Meknès
MARAKCHI KHADIJA	Examineur	Faculté des Sciences, Rabat
EL IDRISSE MOHAMMED	Examineur	Faculté Polydisciplinaire, Beni Mellal
HABBADI NOUZHA	Expert	Chercheur Indépendant
GHAILANE RACHIDA	Directeur de thèse	Faculté des Sciences, Kénitra



Nom et Prénom : SAHRANE MOHAMED
Date de soutenance : 20/07/2024
Directeur de Thèse : GHAILANE RACHIDA

Sujet de thèse :

Etude Théorique MEDT des Cycloadditions de Diels-Alder[4+2] Symétriques et Asymétriques pour la Synthèse des Dérivées de α -cétones Aromatiques

Résumé:

La réaction de cycloaddition de Diels-Alder [4+2] est la méthode de synthèse la plus flexible qui conduit à la formation d'un cycle carboné/hétérocycle à six chaînons. Elle contribue donc au développement de la chimie hétérocyclique qui est actuellement l'une des branches scientifiques les plus dynamiques. Pour étudier théoriquement leurs mécanismes réactionnels, plusieurs approches ont été développées afin d'élucider les chemins réactionnels les plus favorables. En effet, La théorie FMO est sollicitée pour déterminer le caractère des interactions orbitales dominantes. Les indices locaux et globaux, dérivant de CDFT ainsi que les fonctions de Fukui et de Parr, permettent la prédiction de la réactivité. La théorie de l'état de transition TST permet de localiser les extrema sur la surface d'énergie potentielle (SEP) et l'analyse topologique ELF permet d'étayer le processus de formation des liaisons.

Notre étude a montré que l'effet de la nature des substituants, qu'elle soit électro-donneur (ED) ou électro-attracteur (EW), dans le cas d'une hétéro-cycloaddition symétrique de Diels Alder (SHDA) entre le 2,3-diméthylbutadiène et six dérivés azodicarbonyles, est accentué d'une part par l'effet mésomère et inductif due à la conjugaison et d'autre part par la possibilité d'établissement d'une liaison hydrogène temporelle "non-classique" au niveau du TS sur le profil réactionnel. Concernant l'investigation de la cycloaddition asymétrique entre le 3-bromo-1-phénylprop-2-ynone avec le furane et le 2-méthylfurane, la régiosélectivité et l'aspect mécanistique des profils réactionnels ont été discutés pour les différents rotamers obtenus. Dans le cas des deux cycloadditions étudiées, il a été montré qu'il s'agit d'un mécanisme concerté (one step in tow stage) suivant un processus à caractère non polaire.

Abstract:

The Diels-Alder [4+2] cycloaddition reaction is the most flexible synthesis method that leads to the formation of a six-membered carbon ring/heterocycle. It therefore contributes to the development of heterocyclic chemistry which is currently one of the most dynamic scientific branches. To theoretically study their reaction mechanisms, several approaches have been developed to elucidate the most favorable reaction paths. Indeed, FMO theory is used to determine the character of the dominant orbital interactions. local and global indices, deriving from CDFT as well as the Fukui and Parr functions, allow the prediction of reactivity. The TST transition state theory makes it possible to locate the extrema on the potential energy surface (SEP) and the ELF topological analysis makes it possible to support the bond formation process.

Our study showed that the effect of the nature of the substituents, whether electro-donor (ED) or electro-attractor (EW), in the case of a symmetric Diels Alder hetero-cycloaddition (SHDA) between the 2,3-dimethylbutadiene and six azodicarbonyl derivatives, is accentuated on the one hand by the mesomeric and inductive effect due to conjugation and on the other hand by the possibility of establishing a "non-classical" temporal hydrogen bond at the level of TS on the reaction profile. Concerning the investigation of the asymmetric cycloaddition between 3-bromo-1-phenylprop-2-ynone with furan and 2-methylfuran, the regioselectivity and the mechanistic aspect of the reaction profiles were discussed for the different rotamers obtained. In the case of the two cycloadditions studied, it was shown that it is a concerted mechanism (one step in tow stage) following a non-polar process.