Centre d'Etudes Doctorales : Sciences et Techniques et Sciences Médicales

Avis de Soutenance

THESE DE DOCTORAT

Présentée par

Madame SONIA HAYANI

Discipline : Chimie d'intérêt biologique
Spécialité : Chimie des molécules bioactives

Sujet de la thèse

Synthèse et réactivité de la quinoléine: Etudes structurales et applications

Formation Doctorale " Sciences et Génie de la matière, de la Terre et de la Vie "

Thèse présentée et soutenue **le mercredi 27 décembre 2023 à 10h** au Centre de Conférence de la Faculté des Sciences et techniques de Fès, devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Titre	Etablissement	
Ahmed BOULAHNA	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Président
El mostapha RAKIB	PES	Ecole Supérieure de Technologie Fkih Ben Salah	Rapporteur
Omar SENHAJI	PES	Faculté des Sciences de Meknès	Rapporteur
Mohamed EL ASRI	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Rapporteur
Faouzi ERRACHIDI	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Examinateur
Fouad OUAZZANI CHAHDI	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Directeur de thèse
Youssef KANDRI RODI	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Co-Directeur de thèse

Laboratoire de recherche : Laboratoire Chimie Organique Appliquée
Etablissement : Faculté des Sciences et Techniques de Fès

Résumé de la thèse

Les dérivés de la quinoléine ont été largement étudiés pour leurs propriétés pharmacologiques. Ces composés ont montré une grande réactivité, ce qui en fait d'excellents précurseurs dans la synthèse de nouveaux systèmes hétérocycliques susceptibles de présenter des propriétés biologiques intéressantes. Par une réaction de cyclo-condensation des dérivés de l'isatine et de l'acide malonique on a pu obtenir les dérivés de l'acide 2-oxo-1,2-dihydroquinoléine-4-carboxylique avec un rendement très élevé. Ces produits obtenus ont été soumis à diverses réactions, notamment l'estérification ensuite une alkylation par transfert de phase afin d'avoir une large gamme de composés différemment substitués. Les structures des composés synthétisés ont été purifiés et identifiées à l'aide de méthodes spectroscopiques telles que la RMN ^{1}H, la RMN ^{13}C, la RMN ^{19}F, et certaines d'entre elles ont été confirmées par diffraction des rayons X.

Des études de Docking ont été réalisées pour évaluer les interactions possibles entre les dérivés synthétisés et les inhibiteurs de la base de données de protéines (PDB: 1M17-EGFR kinase). Des simulations de Monte Carlo en phase aqueuse ont été utilisées pour évaluer l'affinité de ces dérivés pour l'atténuation de la corrosion du fer et du cuivre dans des solutions acides et neutres. Les résultats expérimentaux ont été comparés aux données spectrales attendues à l'aide de la méthode DFT au niveau de théorie B3LYP/6-31G(d,p). Des examens de surface Hirshfeld en deux et trois dimensions ont été réalisés pour révéler les interactions non liantes dans l'emballage cristallin en phase solide et pour identifier les contacts intermoléculaires voisins pour nos molécules synthétisées.

Mots clés : quinoléine, RMN, rayons X, Docking, Monte Carlo, DFT, surface Hirshfeld.