



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mme (elle) : **BOUOIDINA Asmae**

Soutiendra : le **20/03/2021** à **10 H**

Lieu : **Centre de Visioconférence**

Une thèse intitulée :

**Inhibition de la corrosion d'un acier doux en milieu acide par les huiles essentielles de Foeniculum vulgare, de la trans anéthole et de ses dérivées :
Étude expérimentale et approche quantique.**

En vue d'obtenir le Doctorat

FD : Ressources Naturelles, Environnement et Développement Durable (RNE2D)

Spécialité : Chimie Physique Appliquée

Devant le jury composé comme suit :

	NOM ET PRENOM	GRADE	ETABLISSEMENT
Président	Pr. HAMMOUTI Belkheir	PES	Faculté des Sciences - Oujda
Directeur de thèse	Pr. TALEB Mustapha	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Rapporteurs	Pr. AOUINITI Abdelouahad	PES	Faculté des Sciences - Oujda
	Pr. ZARROUK Abdelkader	PES	Faculté des Sciences - Rabat
	Pr. SFAIRA Mohcine	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Membres	Pr. CHETOUANI Ahmed	PES	Faculté des Sciences - Oujda
	Pr. AINANE Tarik	PES	Ecole Supérieure des de Technologie - Khénifra
	Pr. RAIS Zakia	EES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr. ABDELLAOUI Abdelfattah	EES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Invité	Pr. CHAOUCH Mehdi	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès

Résumé :

Aujourd'hui, en raison des directives mondiale de plus en plus strictes concernant l'utilisation des molécules présentant une certaine toxicité vis-à-vis de l'environnement ou de leurs utilisateurs, les huiles essentielles, les extraits et les molécules issus de végétaux présentant la caractéristique d'être biodégradables ont devenu une sources des inhibiteurs très efficaces au lieu des produits chimiques synthétiques nocifs. Les inhibiteurs étudiés dans le cadre de cette thèse rentrent dans cette catégorie.

L'objectif de notre travail qui s'intéresse en générale aux problèmes de corrosion posés au niveau des biomatériaux, de l'agroalimentaire, de l'emballage, de la conservation et de l'alimentation animale est de tester les huiles essentielles extraites des trois parties de la plante de *Foeniculum Vulgare* (feuilles, bulbes et graines) comme inhibiteurs de corrosion pour l'acier doux dans une solution de HCl 1M en utilisant les mesures gravimétriques et électrochimiques (stationnaire et transitoire), ainsi les méthodes d'analyses de la surface d'acier. Par la suite, Nous avons toujours visé la détermination de la molécule responsable de la haute efficacité inhibitrice des huiles essentielles de *Foeniculum vulgare*. Pour ce faire, l'analyse phytochimique des huiles a été réalisée et permet d'identifier trois principaux composants dont le trans anéthole est le composé majoritaire.

L'approche quantique des principaux composants des HE a montré les meilleures propriétés moléculaires du trans anéthole, ce qui nous a amenés à confirmer à travers les mesures expérimentales le pouvoir inhibiteur de cette molécule. Les résultats obtenus nous ont permis non seulement d'identifier la molécule responsable de l'efficacité des HE de FV, mais aussi d'obtenir une nouvelle molécule à des fortes propriétés inhibitrices. Par conséquent, nous avons choisi de tester l'efficacité inhibitrice de quatre molécules qui partagent la même base organique du trans anéthole : c'est la base d'anisole.

L'effet de ces nouveaux inhibiteurs sur la corrosion d'un acier au carbone dans l'acide chlorhydrique a été étudié moyennant les différentes méthodes électrochimiques (stationnaires et transitoires) et théoriques (DFT), en plus de la simulation de dynamique moléculaire des différentes formes envisageables des molécules dans le but d'appréhender le processus d'inhibition et de fournir un aperçu mécaniste des rôles des différents substituants sur l'inhibition de la corrosion et le comportement d'adsorption des composés étudiés.

Mots clés :

Inhibiteurs de corrosion, Acier, *Foeniculum vulgare*, DFT.

Experimental and theoretical study of the inhibitory properties of essential oils of *Foeniculum vulgare* and green molecules against mild steel corrosion in an acidic environment.

Abstract :

Nowadays, due to the increasingly strict global directives concerning the use of molecules presenting significant toxicity towards the environment or their users, essential oils, extracts, and molecules derived from plants exhibiting the characteristic of being biodegradable have become a source of very effective inhibitors instead of harmful synthetic chemicals. The inhibitors studied in this research belong to this category.

In general, our work focused on corrosion problems of biomaterials, food, packaging, conservation, and animal feed. Thus, the essential oils extracted from the three parts of the *Foeniculum Vulgare* plant (leaves, bulbs, and seeds) have been tested as corrosion inhibitors for mild steel in a 1M HCl solution using gravimetric and electrochemical measurements (stationary and transient), as well as methods of analysis of the steel surface.

Thereafter, we looked for the molecules responsible for the high inhibitory efficacy of *Foeniculum vulgare* essential oils. To achieve that goal, the phytochemical analysis of the oils was carried out and makes it possible to identify three main components of which the trans-anethole is the majority compound.

The quantum approach of the main components of HEs has shown the best molecular properties of trans anethole, which led us to confirm the inhibitory power of this molecule through experimental measurements. The obtained results allowed us not only to identify the molecule responsible for the effectiveness of HEs of FV but also to obtain a new molecule with strong inhibitory properties. Therefore, we chose to test the inhibitory efficacy of four molecules that share the same organic base of trans anethole: this is the anisole base. The effect of these new inhibitors on the corrosion of carbon steel in hydrochloric acid has been studied using different electrochemical (stationary and transient) and theoretical (DFT) methods, in addition to the simulation of molecular dynamics of the different possible forms of molecules, to understand the inhibition process and to provide a mechanistic overview of the roles of the different substituents on corrosion inhibition and the adsorption behavior of compounds studied.

Key Words :

Inhibitors of corrosion, Steel, *Foeniculum Vulgare*, DFT.