



## AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

**Mr AMEZIANE EL HASSANI Anouar**

Soutiendra : **le Samedi 18/03/2023 à 10H00**

Lieu : **Centre des Etudes Doctorales - USMBA - Amphi 2**

*Une thèse intitulée :*

**Etude expérimentale et théorique des processus d'adsorption de dérivés de la phényltétrazole sur un acier doux et du colorant de rhodamine B sur la kaolinite et l'hydroxyapatite**

*En vue d'obtenir le Doctorat*

**FD : Ressources Naturelles, Environnement et Développement Durable**

**Spécialité : Chimie Physique Appliquée**

*Devant le jury composé comme suit :*

Nom et prénom	Etablissement	Grade	Qualité
Pr MCHARFI Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Président
Pr AMMARI Mohammed	Faculté des Sciences et Techniques, Tanger	PES	Rapporteur & Examinateur
Pr BEN ALLAL Laïla	Faculté des Sciences et Techniques, Tanger	PES	Rapporteur & Examinateur
Pr BENZAKOUR Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Rapporteur & Examinateur
Pr EL YAZIDI Mohamed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examinateur
Pr EL KHATTABI Souad	Ecole Nationale des Sciences Appliquées, Fès	PH	Examinatrice
Pr EL HALLAOUI Menana	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examinatrice
Pr TOUIMI BENJELLOUN Adil	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse
Pr SFAIRA Mouhcine	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Co-directeur de thèse



## Résumé :

Le processus d'inhibition de la corrosion est un phénomène complexe qui suscite un intérêt particulier, cependant, la corrosion, représente un impact sur le plan économique et environnemental énorme qui s'ajoute aux dépenses de production. Par conséquent, le budget d'attribution pour la corrosion de l'acier doux a une grande importance. En effet, l'utilisation d'inhibiteurs organiques de la corrosion contenant des atomes d'azote, d'oxygène et de soufre représente généralement un moyen efficace de protection contre la corrosion des aciers doux dans de nombreuses industries. Par ailleurs, la modélisation moléculaire et la dynamique moléculaire, ayant attiré l'intérêt des chercheurs, à exploiter des calculs des propriétés géométriques et électroniques telle que les descripteurs intrinsèques globaux et locaux des inhibiteurs (ligands) et de leurs complexes métalliques. Afin de prévoir et appréhender les mécanismes d'interaction et les paramètres affectant le processus d'adsorption. Dans cet égard, les travaux de la présente thèse ont eu pour objectif de contribuer à l'éclaircissement de l'aspect inhibiteur de la corrosion de quatre dérivés de la phényltétrazole R-substituée dont l'étude expérimentale a été réalisée au sein du laboratoire des Matériaux, Electrochimie et Environnement à Kenitra, de façon à pouvoir encourager l'effet de la substitution sur l'efficacité inhibitrice des molécules inhibitrices étudiés.

L'étude des paramètres géométriques et les descripteurs globaux de la réactivité et des descripteurs locaux de sélectivité ont été optimisées au niveau DFT(B3LYP)/6-31G(d,p), les résultats trouvés de l'analyse comparative a montré un bon accord avec les données expérimentales.

Afin de compléter notre étude quantique la complexation de quatre inhibiteurs avec l'atome de fer a été optimisée au niveau DFT avec six fonctionnelles hybrides corrélation-échange et méta-GGA, B3LYP, B3PW91, CAM-B3LYP, HCTH, ωB97XD et M06-2X, pour mieux comprendre les mécanismes d'interactions entre l'atome de fer et ces inhibiteurs. L'étude de la complexation a montré que les fonctionnelles méta-GGA sont les plus adaptés à notre étude organométallique inhibiteur (ligand) et métal (fer).

Afin de compléter notre étude et de mieux comprendre le processus d'adsorption de ces quatre inhibiteurs dérivés de phényltétrazole avec la surface métallique, nous avons effectué l'étude par la méthode de simulation de Monte Carlo.

Les résultats obtenus par les calculs Monte Carlo montrent que toutes les molécules ont s'adsorbent de nature exothermique et spontanée. Ainsi que, la Cl-Ph-T était adsorbée parallèlement sur la surface de fer.

## Mots clés :

1. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).
2. Fonctionnelles hybrides corrélation-échange et méta-GGA.
3. Simulation de Monte Carlo.
4. Inhibiteurs de la corrosion.
5. Dérivés de la phényltétrazole.
6. Descripteurs de la réactivité.
7. Complexes du Fe.
8. Mécanismes d'adsorption.



## Study of the corrosion inhibition of mild steel in molar acid medium by organic compounds derived from phenyltetrazole

### Abstract:

The process of corrosion inhibition is a complex phenomenon of particular interest; however, corrosion represents a huge economic and environmental impact in addition to production expenses. Therefore, the budget allocation for corrosion of mild steel is of great importance. Indeed, the use of organic corrosion inhibitors containing nitrogen, oxygen and sulfur atoms is generally an effective means of corrosion protection for mild steels in many industries. In addition, molecular modeling and molecular dynamics have attracted the interest of researchers to exploit calculations of geometrical and electronic properties such as global and local intrinsic descriptors of inhibitors (ligands) and their metal complexes. In order to predict and understand the interaction mechanisms and the parameters affecting the adsorption process. In this regard, the work of this thesis has aimed to contribute to the clarification of the corrosion inhibitory aspect of four derivatives of R-substituted phenyltetrazole whose experimental study was conducted in the laboratory of Materials, Electrochemistry and Environment in Kenitra, to be able to encourage the effect of substitution on the inhibitory effectiveness of inhibitor molecules studied.

The study of geometrical parameters and global descriptors of reactivity and local descriptors of selectivity were optimized at the level of DFT(B3LYP)/6-31G(d,p), the results found from the comparative analysis showed a good agreement with the experimental data

To complete our quantum study the complexation of four inhibitors with the iron atom was optimized at the DFT level with six hybrid correlation-exchange and meta-GGA functionals, B3LYP, B3PW91, CAM-B3LYP, HCTH,  $\omega$ B97XD and M06-2X, to better understand the interaction mechanisms between the iron atom and these inhibitors. The complexation study showed that the meta-GGA functionals are the most suitable for our organometallic inhibitor (ligand) and metal (iron) study.

In order to complete our study and to better understand the adsorption process of these four phenyltetrazole-derived inhibitors with the metal surface, we performed the study by the Monte Carlo simulation method.

The results obtained by Monte Carlo calculations show that all the molecules have adsorbed of exothermic and spontaneous nature. Thus, Cl-Ph-T was adsorbed in parallel on the iron surface.

### Keywords:

1. Density Functional theory (DFT).
2. Hybrid correlation-exchange and meta-GGA functionals.
3. Monte Carlo simulation.
4. Corrosion inhibitors.
5. Phenyltetrazole derivatives.
6. Reactivity descriptors.
7. Fe complexes.
8. Adsorption mechanisms.