



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mme (elle) **LAZRAK Jamila**
Soutiendra : **le Samedi 16/12/2023 à 10H00**
Lieu : **FSDM – Centre Visioconférence**

Une thèse intitulée :

Évaluation du pouvoir inhibiteur de la Cinnamomum cassia, du Trans-cinnamaldéhyde et de ses dérivées, contre la corrosion d'acier doux dans HC1 1M : Étude expérimentale, approche quantique et modélisation QSAR

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 HAMMOUTI Belkheir	Faculté des Sciences, Oujda	PES	Président
Pr ZARROUK Abdelkader	Faculté des Sciences, Rabat	PH	Rapporteur & Examineur
Pr AOUNITI Abdelouahad	Faculté des Sciences, Oujda	PES	Rapporteur & Examineur
Pr BENIKEN Mustapha	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PH	Rapporteur & Examineur
Pr BENTISS Fouad	Faculté des Sciences, El Jadida	PES	Examineur
Pr RAIS Zakia	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr ABDELLAOUI Abdelfattah	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr SAFFAJ Taoufiq	Faculté des Sciences et Techniques, Fès	PES	Co-directeur de thèse
Pr TALEB Mustapha	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse



Résumé :

La présente recherche a pour but d'évaluer les performances de deux extraits de *Cinnamomum cassia* (C. cassia) et de son huile essentielle en tant qu'inhibiteurs écologiques de la corrosion de l'acier doux en milieu HCl 1M, en utilisant des mesures gravimétriques et électrochimiques (stationnaires et transitoires), la technique UV-visible et des méthodes d'analyse de surface (MEB-EDX). Ensuite, et afin d'expliquer la remarquable efficacité inhibitrice de l'huile essentielle de C. cassia, nous avons pensé de réaliser une analyse phytochimique afin d'identifier le composé majoritaire cette huile. Ainsi, les résultats de ce test à permet d'identifier la *Trans-Cinnamaldéhyde* en tant que molécule majoritaire de ladite huile. Dans ce cadre, les résultats expérimentaux et théoriques atteints ont montré de fortes propriétés inhibitrices de ce composé écologique vis-à-vis la dégradation de l'acier choisi. Le bon rendement en termes de protection métallique, nous a encouragés de chercher d'autres dérivés da la famille de cette molécule. Ainsi, notre choix est porté sur une série de trois molécules qui partagent la même base du *Trans-Cinnamaldéhyde*.

Par suite, nous nous sommes servis des techniques gravimétriques et électrochimiques stationnaire et transitoire, couplées à la méthode DFT, au niveau de la base B3LYP/6-31G (d, p) afin d'évaluer l'effet inhibiteur de ces dérivés sur la corrosion d'un acier doux dans le même environnement corrosif et d'appréhender le processus d'inhibition à l'interface électrode/électrolyte. La simulation de dynamique moléculaire a été aussi examinée confirmant la stabilité de ces molécules sur la surface métallique. Par ailleurs, des modèles mathématiques ont été proposés afin d'établir une relation statistique reliant l'efficacité inhibitrice de ces composés et d'autres rassemblé de la littérature, à leurs descripteurs électroniques et structurales, en utilisant l'approche de la relation quantitative structure à activité (QSAR).

Mots clés : Corrosion, acier doux, inhibition, *Trans-Cinnamaldéhyde*, MEB-EDX, DFT, simulation de dynamique moléculaire, QSAR.



EVALUATION OF THE INHIBITING POWER OF CINNAMOMUM CASSIA, TRANS-CINNAMALDEHYDE AND ITS DERIVATIVES, AGAINST MILD STEEL CORROSION IN 1M HCL: EXPERIMENTAL STUDY, QUANTUM APPROACH AND QSAR MODELING.

Abstract :

The aim of the present research was to evaluate the performance of two extracts of Cinnamomum cassia (C. cassia) and its essential oil as ecological inhibitors of mild steel corrosion in 1M HCl medium, using gravimetric and electrochemical measurements (stationary and transient), the UV-visible technique and surface analysis methods (SEM-EDX). Next, in order to explain the remarkable inhibitory efficacy of C. cassia essential oil, we decided to carry out a phytochemical analysis to identify the majority compound in this oil. The results of this test identified Trans-Cinnamaldehyde as the majority molecule in the oil. In this context, the experimental and theoretical results achieved showed strong inhibiting properties of this ecological compound with regard to the degradation of the steel chosen. The good performance in terms of metal protection encouraged us to look for other derivatives in the family of this molecule. We chose a series of three molecules that share the same Trans-Cinnamaldehyde base.

We then used gravimetric and stationary and transient electrochemical techniques, coupled with the DFT method, on the B3LYP/6-31G (d, p) base in order to assess the inhibiting effect of these derivatives on the corrosion of mild steel in the same corrosive environment and to understand the inhibition process at the electrode/electrolyte interface. Molecular dynamics simulation was also examined, confirming the stability of these molecules on the metal surface. In addition, mathematical models were proposed to establish a statistical relationship between the inhibitory efficacy of these compounds and others gathered from the literature, and their electronic and structural descriptors, using the quantitative structure-activity relationship (QSAR) approach.

Key Words: Corrosion, mild steel, inhibition, Trans-Cinnamaldehyde, MEB-EDX, DFT, molecular dynamics simulations, QSAR.