AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mme **ROUA AMAL**
Soutiendra : **le Samedi 25/10/2025** à **10H00**
Lieu : **FSDM – *Centre Visioconférence***

Une thèse intitulée :

«Etude théorique de l'inhibition de la corrosion d'un acier doux par quelques molécules organiques en milieu acide HCl 1M »

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
SFAIRA Mouhcine	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	PES	Président
GHAILANE Rachida	Faculté des Sciences, Kénitra	PES	Rapporteur
MARAKCHI Khadija	Faculté des Sciences, Rabat	PES	Rapporteur
EL HALLAOUI Menana	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	PES	Rapporteur
AMMARI Mohammed	Faculté des Sciences et Techniques, Tanger	PES	Examinateur
BEN ALLAL Laïla	Faculté des Sciences et Techniques, Tanger	PES	Examinateur
TOUIMI BENJELLOUN Adil	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse
BENZAKOUR Mohammed	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	PES	Co-directeur de thèse

''Etude théorique de l'inhibition de la corrosion d'un acier doux par quelques molécules organiques en milieu acide HCl 1M''

ROUA Amal

Champs Disciplinaire: **Chimie**
FD : **Ressources naturelles, environnement et développement durable (RNE2D)**
Spécialité : **Chimie - physique appliquée**
Soutenu le :

Résumé

Le financement requis pour gérer la corrosion de l'acier doux est considérable. Par extension, l'inhibition de la corrosion constitue un processus complexe qui éveille un intérêt marqué. Ainsi, les inhibiteurs organiques de corrosion, riches en hétéroatomes (N, O, S, Br,…), s'avèrent généralement efficaces pour protéger les aciers doux de la corrosion dans diverses industries.

D'autre part, la dynamique moléculaire et la modélisation moléculaire sont devenue des sujets d'intérêt pour les chercheurs, car ces méthodes permettent d'exploiter les calculs des propriétés géométriques et électroniques, y compris les descripteurs globaux et locaux des inhibiteurs (ligands) et de leurs complexes métalliques, dans le but de prédire et d'analyser les mécanismes d'interaction ainsi que les facteurs influençant l'adsorption.

L'objectif de cette thèse était de mettre en évidence l'effet inhibiteur de la corrosion des molécules organiques. Les paramètres géométriques et les descripteurs globaux de la réactivité et des descripteurs locaux de sélectivité ont été optimisés au niveau DFT(B3LYP)/6-31G(d,p). Les résultats obtenus de l'analyse comparative ont révélé un bon accord avec les données expérimentales. Afin de compléter notre étude et de mieux comprendre les mécanismes d'interactions et l'adsorption de deux molécules organiques avec le fer, nous avons effectué l'étude expérimentale.

Simultanément, nous avons effectué une analyse à l'aide de la méthode de simulation de la dynamique moléculaire. Les résultats révèlent une adsorption spontanée de toutes les molécules organiques étudiées.

Mots clés :

1. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).
2. simulation de dynamique moléculaire.
3. Inhibiteurs de la corrosion.
4. Descripteurs de la réactivité.
5. Mécanismes d'adsorption.

''Theoretical study of corrosion inhibition of mild steel by a few organic molecules in 1M HCl acid medium''

Abstract

The funding required to manage mild steel corrosion is considerable. By extension, corrosion inhibition is a complex process that is attracting considerable interest. Organic corrosion inhibitors, rich in heteroatoms (N, O, S, Br,...), are generally proving effective in protecting mild steels from corrosion in a variety of industries.

On the other hand, molecular dynamics and molecular modelling have become subjects of interest to researchers, as these methods make it possible to exploit calculations of geometric and electronic properties, including global and local descriptors of inhibitors (ligands) and their metal complexes, with the aim of predicting and analysing interaction mechanisms and the factors influencing adsorption.

The aim of this thesis was to demonstrate the corrosion-inhibiting effect of organic molecules. Geometrical parameters, global reactivity descriptors and local selectivity descriptors were optimized at the DFT(B3LYP)/6-31G(d,p) level. The results obtained from the comparative analysis showed good agreement with the experimental data. To complete our study and gain a better understanding of the interaction and adsorption mechanisms of two organic molecules with iron, we carried out an experimental study.

Simultaneously, we carried out an analysis using the molecular dynamics simulation method. The results reveal spontaneous adsorption of all the organic molecules studied.

Key words :

1. Density functional theory (DFT).
2. Molecular dynamics simulation.
3. Corrosion inhibitors.
4. Reactivity descriptors.
5. Adsorption mechanisms.