



## AVIS DE SOUTENANCE D'UNE THESE DE DOCTORAT

Le Doyen de la Faculté des Sciences a le plaisir d'informer le public qu'une soutenance de  
thèse de Doctorat en

«Chimie Fondamentale et Appliquée»

aura lieu le 27/02/2024 à 10H à la Faculté des Sciences, Kénitra

La Thèse sera présentée par Mme ADLANI LOUBNA

Sous le thème :

**Contribution à l'étude expérimentale et théorique de l'effet d'inhibition de la corrosion de  
l'acier au carbone dans HCl 1,0M par des dérivés de pyrazoles et de diazépines**

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Titre	Etablissement
BOUKHRIS SAID	Président	Faculté des Sciences, Kénitra
EL HEZZAT MOUNIR	Rapporteur	Faculté des Sciences, Kénitra
TOUIR RACHID	Rapporteur	CRMEF, Kénitra
ASSOUAG MOHAMED	Rapporteur	ENSAM, Meknès
ALLALI MUSTAPHA	Examineur	ISPITS, Fès
SHAIM ABDELILAH	Examineur	Faculté des Sciences, Kénitra
OUDDA HASSAN	Directeur de thèse	Faculté des Sciences, Kénitra



**Nom et Prénom : ADLANI LOUBNA**  
**Date de soutenance : 27/02/2024**  
**Directeur de Thèse : OUDDA HASSAN**

**Sujet de thèse :**

**Contribution à l'étude expérimentale et théorique de l'effet d'inhibition de la corrosion de l'acier au carbone dans HCl 1,0M par des dérivés de pyrazoles et de diazépines**

**Résumé:**

L'acier au carbone est l'un des matériaux qui présentent une grande variété d'applications industrielles. Cependant, ils peuvent être corrodés dans des milieux agressifs. L'utilisation des composés organiques comme inhibiteurs de la corrosion acide de l'acier éveille un intérêt considérable de recherche, et constitue un outil de choix pour lutter contre ce phénomène.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'effet de nouveaux composés organiques à base de pyrazole, noté L4 et L6 et de diazépines, noté SR1 et SR2 sur la corrosion de l'acier au carbone dans HCl 1,0 M. Cette étude a été réalisée par des mesures gravimétriques, des méthodes électrochimiques, UV-visible et la microscopie électronique à balayage MEB couplée à l'EDX. Le tracé des courbes des polarisations a montré que les inhibiteurs étudiés agissent comme des inhibiteurs type mixte. De plus les résultats expérimentaux ont montré que L6 et SR2 sont les meilleurs inhibiteurs des deux séries de pyrazole et diazépines testés. Où, L'efficacité inhibitrice atteint un maximum de 91,5 % et 98,1 % à 10-3 M en L6 et SR2, respectivement. Nous avons montré aussi que ces inhibiteurs s'adsorbent à la surface de l'acier au carbone selon l'isotherme d'adsorption de Langmuir et ils agissent via des adsorptions chimiques. UV-visible ainsi que les analyses MEB couplées par EDX ont permis la visualisation d'une couche adhérente et stable à la surface de l'acier.

Par ailleurs, une étude théorique utilisant la méthode DFT au niveau B3LYP/6-31G (d, p) et la simulation dynamique moléculaire a été effectuée afin d'appréhender le processus de l'inhibition de la corrosion par l'exploitation des calculs des propriétés intrinsèques structurales et électroniques des molécules étudiées, ainsi que les sites actifs responsables à la protection. Ces calculs théoriques sont également en accord avec les résultats expérimentaux et expliquent très bien le pouvoir inhibiteur des molécules pour les différentes familles. Enfin, diverses techniques chimiques et approches théoriques utilisées pour examiner les travaux présentés dans cette thèse de doctorat ont permis d'obtenir une image claire de la performance globale des inhibiteurs et d'explorer sa corrélation avec la structure moléculaire.

Mots clés: Inhibition de corrosion; Acier au carbone; dérivés de pyrazole et de diazépines; mesures électrochimiques; Analyses spectroscopiques ; DFT; simulation par dynamique.

**Abstract:**

Carbon steel is one of the materials with a wide variety of industrial applications. However, they can corrode in aggressive environments. The use of organic compounds as inhibitors of acid corrosion in steel is attracting considerable research interest, and is a tool of choice for combating this phenomenon.

In this work, we investigated the effect of new organic compounds based on pyrazole (L4 and L6) and diazépines (SR1 and SR2) on the corrosion of carbon steel in 1.0 M HCl. This study was carried out using gravimetric measurements, electrochemical methods, UV-visible and scanning electron microscopy (SEM) coupled with EDX. Polarization curves showed that the inhibitors studied act as mixed-type inhibitors. In addition, the experimental results showed that L6 and SR2 were the best inhibitors of the two series of pyrazole and diazépines tested. Inhibitory efficiencies peaked at 91.5% and 98.1% at 10<sup>-3</sup> M for L6 and SR2, respectively. We also showed that these inhibitors adsorb to the surface of carbon steel according to the Langmuir adsorption isotherm and act via chemical adsorptions. UV-visible and SEM analysis coupled with EDX enabled the visualization of an adherent and stable layer on the surface of the steel.

In addition, a theoretical study using the DFT method at the B3LYP/6-31G (d, p) level and molecular dynamic simulation was carried out in order to understand the corrosion inhibition process by exploiting calculations of the intrinsic structural and electronic properties of the molecules studied, as well as the active sites responsible for protection. These theoretical calculations are also in agreement with the experimental results and explain very well the inhibiting power of the molecules for the different families. Finally, various chemical techniques and theoretical approaches used to examine the work presented in this PhD thesis have provided a clear picture of the overall performance of the inhibitors and explored its correlation with molecular structure.

Key words: Corrosion inhibition; Carbon steel; pyrazole and diazépines derivatives; electrochemical measurements; spectroscopic analyses; DFT; dynamic simulation.

