



## 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 06/07/2024 à la Faculté des Sciences, Kénitra

La Thèse sera présentée par Mme ALAOUI KHAOULA

Sous le thème :

**Contribution à la protection de l'acier doux en milieu acide: modélisation théorique et  
étude physico-chimique des propriétés inhibitrices de la corrosion de nouvelles Triazepine  
Carboxylate et Carbonitrile**

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Titre	Etablissement
SEDRA MOULAY BRAHIM	Président	ENSA, Kénitra
HABSAOUI AMAR	Rapporteur	Faculté des Sciences, Kénitra
ZARROUK ABDELKADER	Rapporteur	Faculté des Sciences, Rabat
TOUIR RACHID	Rapporteur	CRMEF, Kénitra
BELFAQUIR MUSTAPHA	Examineur	Faculté des Sciences, Kénitra
BOUDALIA MARIA	Examineur	Faculté des Sciences, Rabat
DKHIRECHE NADIA	Co-Directeur de thèse	Faculté des Sciences, Kénitra
EBN TOUHAMO MOHAMED	Directeur de thèse	Faculté des Sciences, Kénitra



**Nom et Prénom : ALAOUI KHAOULA**  
**Date de soutenance : 06/07/2024**  
**Directeur de Thèse : EBN TOUHAMI MOHAMED**

**Sujet de thèse :**

**Contribution à la protection de l'acier doux en milieu acide: modélisation théorique et étude physico-chimique des propriétés inhibitrices de la corrosion de nouvelles Triazepine Carboxylate et Carbonitrile**

**Résumé:**

Les travaux menés au cours de cette thèse ont pour objectif d'étudier le pouvoir inhibiteur de la corrosion de l'acier doux en milieu acide (HCl 1.0 M) par deux séries de molécules organiques de la famille Triazepine. L'évaluation du pouvoir inhibiteur des Triazepine carboxylate et des Triazepine carbonitrile a été réalisée en utilisant la gravimétrie, et les techniques électrochimiques : les courbes de polarisations et la spectrométrie d'impédance électrochimique. Les effets de la concentration en inhibiteurs et la nature du milieu agressif, ont été mises en évidence à température ambiante, les résultats qui en découlent révèlent que les deux séries inhibitrices étudiés sont d'excellentes molécules inhibitrices de la corrosion de l'acier doux, ainsi il a été démontré expérimentalement qu'à de très faibles concentrations (10<sup>-3</sup> M) le pouvoir inhibiteur de ces composés dépasse les 87%. Il a été conclu également que ces molécules procèdent comme des inhibiteurs de la corrosion de type mixte ralentissant à la fois les réactions cathodiques ainsi qu'anodiques avec une prédominance du caractère cathodique, ce qui confirme que ces composés inhibent fortement le processus de la corrosion de l'acier doux dans l'acide chlorhydrique. Les résultats de l'effet de la température sur la vitesse de la corrosion de l'acier doux et l'efficacité inhibitrice montre aussi le comportement positif des Triazepine carboxylate et des Triazepine carbonitrile sur la protection contre la corrosion dans la gamme de température étudiée, ainsi le mode d'adsorption des composés inhibiteurs étudiés sur la surface de l'acier doux limitant l'accès de l'électrolyte (HCl 1.0 M) à la surface de l'acier doux a été identifié en utilisant les isothermes d'adsorption appropriés et en déterminant les paramètres thermodynamiques concordant. La confirmation de la présence de couches adhérentes à la surface du métal a été étudiée moyennant la Microscopie Electronique à Balayage et la Microscopie à Force Atomique (AFM). Ensuite, le mécanisme réactionnel mis en jeu en fonction du mode d'action des deux séries d'inhibiteurs étudiés sont illustrés, discutés et mis en évidence moyennant la Théorie de la fonctionnelle de la Densité (DFT) et démontrés sur la base de la corrélation entre les propriétés inhibitrices et la structure moléculaire des deux séries Triazepine. En outre, les résultats obtenus à partir des descripteurs théoriques des molécules organiques étudiés sont en bon accord avec les données expérimentales. A la fin, l'affirmation du mode d'adsorption des molécules inhibitrices, des types d'interaction entre la surface métallique et les sites actifs des inhibiteurs, les simulations moléculaires par l'approche de Monte Carlo ont été établies. En effet, la présence d'hétéroatomes en particulier l'oxygène et l'azote contribue par transfert de leurs électrons aux orbitales vacantes de la surface du métal étudié, forment ainsi une couche protectrice de l'acier doux par le biais d'une liaison de coordination.

**Abstract**

The objective of this thesis is to study the corrosion inhibitory power of mild steel in an acidic environment (HCl 1.0 M) by two series of molecules Triazepine family. The evaluation of the inhibitory power of Triazepine carboxylate and Triazepine carbonytrile was carried out using gravimetry and electrochemical techniques. The concentration of inhibitors and the Hydrochloridic acidic medium have been demonstrated at room temperature, the results reveal that the two inhibitors series studied are an excellent inhibitors of corrosion in mild steel, thus it has been experimentally demonstrated that at very low concentrations (10<sup>-3</sup> M) the inhibitory power of these compounds exceeds 87%. It was also concluded that these inhibitors act as mixed-type inhibitors delaying cathode and anode reactions with a predominance of cathodic character, confirming that these compounds strongly inhibit the corrosion process of mild-steel in HCl (1.0 M). The results of the effect of temperature on mild steel corrosion rate and inhibitory efficiency as illustrate the positive behavior of Triazepine carboxylate and Triazepine carbonytrile on corrosion protection in the temperature range studied, , thus the mode of adsorption of the inhibitory compounds studied on the surface of the mild steel that limits the access of the electrolyte to the surface of steel was identified using the appropriate adsorption isotherms and by determining the concordant thermodynamic parameters. Confirmation of the presence of adherent layers to the surface of the metal was made using Scanning Electron Microscopy and Atomic Force Microscopy (AFM). Then, the reaction mechanism involved according to the mode of action of two series of inhibitors studied are illustrated, discussed and highlighted using the Density Functional Theory (DFT) and demonstrated on the basis of the correlation between the inhibitory properties and the molecular structure of the two Triazepine series. In addition, the results attained from theoretical descriptors of the molecules studied are in great accord with the laboratory output. Finally, affirmation of adsorption mode of the inhibitory molecules, the types of interaction between the mild-steel surface and active sites of the inhibitors, the molecular simulations by the Monte Carlo method were established. Indeed, the presence of oxygen and nitrogen in Triazepine compounds, contributes by transfer of their electrons to the vacant orbitals of the surface of metal, thus forming a protective layer of the mild steel through a coordination bond.