

Résumé :

Les inhibiteurs de corrosion constituent un moyen à part entière de protection contre la corrosion métallique de par l'originalité qu'ils présentent d'être le seul moyen d'intervention à partir du milieu corrosif. La thématique développée, dans le cadre de cette thèse de doctorat, s'articule autour de l'inhibition de la corrosion d'un acier doux en milieu acide chlorhydrique molaire. Dans cet esprit, nous nous sommes attelés à développer des modèles QSAR/QSPR dans le but de corréler l'activité anticorrosion à la structure moléculaire de trois séries de composés organiques hétérocycliques à noyaux benzimidazole, benzodiazepine et pyridazine. A cette fin, nous nous sommes servis des méthodes DFT-B3LYP/6-31G** et DFT-B3LYP/6-311G, comme outils de modélisation moléculaire, afin de remonter aux descripteurs structuraux, électroniques et énergétiques des molécules étudiées. A cela s'ajoutent, les méthodes statistiques à travers l'analyse en composantes principales ACP, la régression linéaire multiple MLR, la régression polynomiale multiple MPR, la régression par les moindres carrés partiels PLS et les réseaux de neurones artificiels ANNs. L'examen des résultats obtenus révèle une forte corrélation entre les valeurs des efficacités inhibitrices expérimentales et celles estimées. Ceci atteste de la fiabilité, la robustesse et la qualité des modèles statistiques développés comme en témoignent les tests de validation interne et externes. De ce fait, il devient aisé d'orienter la synthèse organique vers de nouvelles molécules, de structures similaires, à l'instar de l'application des modèles établis.

Mots clés : *Inhibiteurs de corrosion ; QSAR/QSPR ; DFT-B3LYP/6-31G** ; MLR ; MPR ; PLS ; ANN ; Validation.*

Development and validation of QSAR/QSPR models for prediction of heterocyclic molecules efficiency of anticorrosion interest

Abstract:

Corrosion inhibitors are a full-fledged means of protection against metallic corrosion due to their originality of being the only means of intervention from the corrosive environment. The topic developed in this thesis is based on the corrosion inhibition of mild steel in molar hydrochloric acid medium. To do so, we set out to develop QSAR/QSPR models with the aim of correlating the anticorrosion activity to the molecular structure of three series of heterocyclic organic compounds with benzimidazole, benzodiazepine and pyridazine nuclei. To this end, we used DFT-B3LYP/6-31G** and DFT-B3LYP/6-311G as molecular modelling tools to evaluate the structural, electronic and energetic descriptors of the studied molecules. In addition, statistical methods through principal component analysis PCA, multiple linear regression MLR, multiple polynomial regression MPR, partial least squares regression PLS and artificial neural networks ANNs are used. Examination of the results shows a strong correlation between experimental and estimated inhibiting efficiency values. This fact attests to the reliability, robustness and quality of the statistical models developed as shown by internal and external validation tests. Consequently, it becomes easy to orient the organic synthesis towards new molecules with similar structures, following the application of established models.

Keywords: *Corrosion inhibitors; QSAR/QSPR; DFT-B3LYP/6-31G**; MLR; MPR; PLS; ANN; Validation.*