AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mme (elle) **: ARROUSSE Nadia**
Soutiendra **: le 18/12/2021** à **10 H**
Lieu : Centre polyvalent des Etudes doctorales (1er étage)

Une thèse intitulée :

Synthèse, étude théorique, caractérisation et évaluation du pouvoir inhibiteur des molécules organiques non toxiques à base de la fluorescéine contre la corrosion d'acier doux en milieu acide chlorhydrique molaire.

En vue d'obtenir le Doctorat
FD : Ressources Naturelles, Environnement et Développement Durable (RNE2D)
Spécialité : Chimie Physique Appliquée

Devant le jury composé comme suit :

	NOM ET PRENOM	GRADE	ETABLISSEMENT
Président	Pr BENLEMLIH Mohammed	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Directeur de thèse	Pr TALEB Mustapha	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Rapporteurs	Pr RADI Smaail	PES	Faculté des Sciences - Oujda
	Pr EBN TOUHAMI Mohamed	PES	Faculté des Sciences - Kénitra
	Pr SFAIRA Mouhcine	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Examinateurs	Pr HAMMOUTI Belkheir	PES	Faculté des Sciences - Oujda
	Pr ZARROUK Abdelkader	PH	Faculté des Sciences - Rabat
	Pr RAIS Zakia	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr ABDELLAOUI Abdelfattah	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr BENTISS Fouad	PES	Faculté des Sciences- El Jadida

Résumé

Dans le présent travail nous avons envisagé une étude théorique des réactions organiques suivies de la synthèse effective d'une série des esters dérivés de la fluorescéine. L'étude théorique représente une analyse globale qui donne des informations sur plusieurs paramètres, parmi eux : nous trouvons la valeur énergétique de l'enthalpie libre de la réaction qui nous démontre, non seulement la spontanéité de la réaction, mais aussi sa valeur énergétique exacte. Les produits synthétisés dans ce modeste travail sont basés sur des réactions d'O-Alkylation de la forme lactone (NAR1, NAR2, NAR3) et l'estérification de la forme quinoïde de la fluorescéine (NAR4, NAR5, NAR6). Nous avons mis au point des procédures simples permettant l'obtention de ces produits avec un bon rendement.

Ces dérivés de xanthène synthétisés ont été caractérisés par des techniques spectroscopiques conventionnelles, comme la RMN 1H, la RMN 13C, l'infrarouge et la Spectroscopie de masse.

Les résultats théoriques sont en bonne corrélation avec ceux obtenus expérimentalement. Ensuite, nous avons examinés leurs pouvoirs non toxiques sur des rats, et confirmés leurs stabilités en milieu acide avant d'évaluer leurs activités anticorrosives.

Par ailleurs, nous avons prédire l'ordre d'efficacité théoriquement à l'aide des méthodes DFT au niveau B3LYP et la simulation dynamique par la méthode de Monte Carlo en présence et en absence de l'eau.

L'évaluation de l'effet protecteur de ces produits a été réalisée à travers la méthode de différence d'absorbance, les techniques électrochimiques (stationnaires et transitoires), UV-visible ainsi que les analyses de surface (MEB-EDX). Ainsi, nous avons montré que ces produits synthétisés peuvent être classifiés comme des bons inhibiteurs de corrosion dans un environnement acide. Les résultats révèlent que les efficacités inhibitrices pour les inhibiteurs étudiés atteignent des valeurs de l'ordre de 90% dans le milieu HCl 1M à une concentration de 10^{-4}M. Les mesures d'impédance montrent que l'action de ces inhibiteurs sur la surface métallique se fait essentiellement par une adsorption conduisant à un effet protecteur par formation d'un film protecteur qui s'oppose à la dissolution du métal. Les analyses de MEB couplé par EDX ont confirmé la formation d'un film protecteur qui retarde la vitesse de corrosion d'acier doux.

Les résultats expérimentaux obtenus à travers les différentes techniques confirment l'ordre d'efficacité obtenus théoriquement.

Mots clés : Synthèse, toxicité, Acier doux, corrosion, dérivés de la Fluorescéine, adsorption, SIE, MEB-EDX, DFT, Monte Carlo.

Synthesis, Theoretical study, characterization and evaluation of the inhibition efficiency of fluorescein-based as non-toxic organic molecules against corrosion of mild steel in molar hydrochloric acid media

Abstract

In the present work we have investigated a theoretical study of organic reactions followed by the effective synthesis of a series of esters derived from fluorescein. The theoretical study represents a comprehensive analysis that gives information on several parameters, among them: we find the energy value of the free energy of the reaction which demonstrates to us, not only the spontaneity of the reaction, but also its exact energy value. The synthesized products in this work are based on O-Alkylation reactions of the lactone form (NAR1, NAR2, NAR3) and esterification of the quinoïd form of fluorescein (NAR4, NAR5, NAR6). We have developed simple procedures to obtain these products with extraordinary performance.

These synthesized xanthene derivatives have been characterized by conventional spectroscopic techniques, such as 1 H NMR, 13 C NMR, infrared and mass spectroscopy. The theoretical results are in good correlation with those obtained experimentally. Then, we examined their non-toxic powers on rats, and confirmed their stabilities in acidic conditions before evaluating their anticorrosive activities.

In addition, we predicted the order of efficiency theoretically using DFT methods at B3LYP level and dynamic simulation by the Monte Carlo method in the presence and absence of water.

The evaluation of the protective effect of these products was carried out using the difference absorbance method, electrochemical techniques (Polarization curve and impedance), UV-Visible as well as surface analyzes (SEM-EDX). Thus, we have shown that these synthesized products can be classified as good corrosion inhibitors in an acidic environment. The results reveal that the inhibition efficiency for the inhibitors studied attain 90% in 1M HCl medium at 10^{-4}M.

Impedance measurements show that the action of these inhibitors on the metal surface is essentially through adsorption leading to a protective effect by forming a protective film which decreases the dissolution rate of the metal. EDX coupled SEM analyzes confirmed the formation of a protective film which retards the corrosion rate of mild steel.

The experimental results obtained through the different techniques confirm the order of efficiency obtained theoretically.

Keywords: Synthesis, toxicity, Mild steel, corrosion, fluorescein derivatives, adsorption, EIS, MEB-EDX, DFT, Monte Carlo.