

CENTRE D'ETUDES DOCTORALES «SCIENCES ET TECHNIQUES ET SCIENCES MÉDICALES »

مركز الدكتوراء « الطرية» والتقنيات

AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mr Fernine Yasmine Soutiendra : le Samedi 25/01/2025 à 10H00 Lieu : FSDM - Centre Visioconférence

Une thèse intitulée:

« Synthèse et caractérisation des molécules organiques et des nanoparticules, calcul théorique détaillé DFT/simulation moléculaire, et prévention de la corrosion AA2024 T3 en milieu NaCl 3,5% »

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 |
|------------------------|---|-------|-----------------------|
| RAIS Zakia | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès | PES | Président |
| ZARROUK Abdelkader | Faculté des sciences, Université Mohammed V, Rabat | МСН | Rapporteur |
| CHETOUANI Ahmed | Centre régional des métiers et de l'éducation et de la formation, Oujda | PES | Rapporteur |
| TOUIMI BENJELLOUN Adil | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès | PES | Rapporteur |
| BENBOUYA Khalid | Ecole Supérieure de Technologie, Salé | MCH | Examinateur |
| BENZAKOUR Mohammed | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès | PES | Examinateur |
| HAMMOUTI Belkheir | Université Euromed, Fès | PES | Invité |
| EBN TOUHAMI Mohamed | Faculté des Sciences, Université Ibn Tofail, Kenitra | PES | Co-directeur de thèse |
| TALEB Mustapha | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès | PES | Directeur de thèse |



CENTRE D'ETUDES DOCTORALES «SCIENCES ET TECHNIQUES ET SCIENCES MÉDICALES »

مركز الدكتوراء « الطبية» هايقنبإيت عنوالية الطبية الطبية

Résumé:

Le travail présente une étude sur la synthèse de molécules organiques et de nanoparticules d'argent, ainsi que leur utilisation comme inhibiteurs de corrosion pour l'AA 2024-T3 dans un médium neutre qui contient 3,5% de NaCl. L'étude a débuté par des calculs informatiques avancés basés sur la méthode DFT pour déterminer les mécanismes de réaction plausibles dans la synthèse des dérivés de phénolphtaléine. En outre, des études théoriques sur la toxicité et la solubilité des molécules synthétisées ont été menées, suivies de la caractérisation des produits par spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) et résonance magnétique nucléaire (RMN). L'incidence de l'adjonction de composés organiques synthétisés à partir de phénolphtaléine sur le comportement de corrosion de l'AA 2024-T3 dans un environnement neutre à 3,5 % de NaCl a également été étudiée. Des calculs théoriques DFT et des simulations de dynamique moléculaire permettent d'expliquer le phénomène d'inhibition et d'évaluer les performances.

Les résultats expérimentaux ont démontré une efficacité inhibitrice satisfaisante des différents composés, agissant à la fois sur la réduction des oxygènes et sur l'oxydation du métal, ce qui indique un comportement mixte. L'efficacité de l'inhibition a été classée en fonction de la substitution croissante du groupe OH dans la molécule de phénolphtaléine. De plus, les paramètres d'adsorption thermodynamique des dérivés de la phénolphtaléine sur la surface de l'alliage d'aluminium ont été déterminés, montrant que l'adsorption des inhibiteurs étudiés sur la surface de l'aluminium est probablement de nature chimique. La surface de l'AA2024-T3 a été caractérisée à l'aide de la microscopie électronique à balayage (MEB/EDX) et de la spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) pour obtenir des informations sur les groupes fonctionnels associés aux molécules organiques adsorbées à sa surface.

Enfin, des nanoparticules d'argent ont été synthétisées par une méthode écologique et caractérisées à l'aide de différentes techniques. Leur utilisation pour inhiber la corrosion d'un alliage d'aluminium dans un médium neutre de 3,5 % de NaCl a démontré leur capacité à réduire la corrosion en formant une couverture protégeant la surface de l'AA2024-T3, minimisant ainsi son taux de corrosion.

Mots clés : Synthèse, nanoparticule, corrosion, adsorption, DFT, Simulation dynamique, 3,5% NaCl, AA2024-T3



CENTRE D'ETUDES DOCTORALES «SCIENCES ET TECHNIQUES ET SCIENCES MÉDICALES »

حركز الدكتوراء « الطبية» هايقتبايات الطبية»

Abstract:

The work discusses a study on the synthesis of organic molecules and silver nanoparticles, as well as their use as corrosion inhibitors for the aluminum alloy 2024-T3 in a neutral medium containing 3.5% NaCl. The study began with DFT-based computer analyses to determine plausible reaction mechanisms in the synthesis of phenol-derived molecules. Toxicological and solubility studies of the synthesized molecules were then conducted, followed by characterization of the products using infrared spectroscopy (FTIR) and nuclear magnetic resonance (NMR). The impact of the addition of organic compounds synthesized from phenol on the corrosion behavior of the aluminum alloy 2024 in a neutral medium containing 3.5% NaCl was also studied. Theoretical DFT calculations and dynamic simulation methods were used to explain the inhibition mechanism and assess performance.

The experimental results demonstrated the satisfactory corrosion inhibition effectiveness of various compositions, acting on both the reduction of oxygen and the oxidation of the metal, indicating a mixed inhibition behavior in terms of corrosion. The efficiency of inhibition was classified based on the increasing substitution of the hydroxyl group in the phenol derivative molecule. The thermodynamic adsorption parameters of the phenol derivative molecules on the aluminum surface were determined, showing that the adsorption of the studied inhibitors on the aluminum surface is likely of chemical nature. The aluminum surface was characterized using scanning electron microscopy (SEM) and FTIR spectroscopy to obtain information on the functional groups associated with the adsorbed organic molecules on the surface.

Finally, silver nanoparticles were synthesized using an ecological method and characterized using various techniques. Their use as corrosion inhibitors for the aluminum alloy in a neutral medium containing 3.5% NaCl demonstrated their ability to reduce corrosion by forming a protective layer on the aluminum alloy surface, minimizing the corrosion rate.

Key Words: Synthesis, nanoparticle, corrosion, adsorption, DFT, Simulation dynamique, 3,5% NaCl, AA2024-T3ract