

**Pôle des Etudes Doctorales**  
**Centre des Etudes Doctorales Sciences et Techniques et Sciences Médicales**

## **AVIS DE SOUTENANCE DE THESE DE DOCTORAT**

**Monsieur AZGHAY Issam**  
**Présentera ses travaux de recherche en vue de l'obtention du Doctorat**



**Formation Doctorale : Sciences et Techniques de l'Ingénieur (STI)**

**Discipline : Chimie**

**Spécialité : Chimie Physique, Analytique et Computationnelle**

**Le 13/02/2026 à 09H00 à la Salle de Conférences de la Faculté des Sciences et Techniques d'Al-Hoceima, UAE**

**Sous le thème**

**Étude expérimentale, calculs quantiques et simulation dynamique moléculaire des propriétés d'inhibition de la corrosion de l'acier doux par des composés organiques**

**Devant le jury composé de :**

<b>Nom et Prénom</b>	<b>Etablissement</b>	<b>Qualité</b>
Pr. TALHAOUI Abdelmonaem	FS de Oujda, UMP	Président
Pr. OUZIDAN Younes	FST de Mohammedia, UH2	Rapporteur
Pr. EL OUARGHI Hossain	ENSA d'Al-Hoceima, UAE	Rapporteur
Pr. EL KASMI Achraf	ENSA d'Al-Hoceima, UAE	Rapporteur
Pr. AHARI M'hamed	FST d'Al-Hoceima, UAE	Examineur
Pr. EL BARKANY Soufian	FP de Nador, UMP	Examineur
Pr. AMHAMDI Hassan	FST d'Al-Hoceima, UAE	Co-Directeur
Pr. SALHI Amin	FST d'Al-Hoceima, UAE	Directeur

*Structure de recherche : Équipe de Chimie Appliqué, Faculté des Sciences et Techniques d'Al Hoceima*

## Résumé



Cette recherche porte sur l'inhibition de la corrosion de l'acier doux en milieu acide (HCl 1 M) par des composés organiques, afin d'élucider les mécanismes moléculaires et de guider la conception rationnelle d'inhibiteurs efficaces. L'approche combine étroitement des méthodes expérimentales (PDP, EIS, perte de masse ; SEM, EDX, AFM, XPS) et des méthodes théoriques (DFT, DFTB, Monte Carlo, dynamique moléculaire, QSAR) pour une lecture conjointe des interactions à l'interface métal-solution. Une gamme représentative de molécules a été étudiée : bases de Schiff, benzimidazole, imidazopyridines et sels de benzimidazolium, sélectionnés pour leur potentiel d'adsorption et leur capacité à former des barrières protectrices.

Les résultats révèlent le rôle déterminant de la spéciation : l'état de protonation régit le mode et l'efficacité de l'adsorption. Lorsque la physisorption prédomine (bases de Schiff PSB et benzimidazoles NBI), l'inhibition est due à des interactions non covalentes (Van der Waals, liaisons H) et est corrélée au moment dipolaire, à l'énergie totale et à la capacité à tisser un réseau de liaisons hydrogène. À l'inverse, pour les imidazopyridines et les benzimidazoliums, l'adsorption chimique est la clé : le don électronique vers Fe(110), favorisé par un EHOMO élevé, des sites nucléophiles actifs et la délocalisation  $\pi$  (même sous forme cationique), conduit à des liaisons fortes et à des films compacts et performants. Les substituants donneurs renforcent systématiquement ces effets.

Cette étude souligne ainsi l'intérêt de l'intégration expérimental-théorique pour déchiffrer les mécanismes d'inhibition et propose des pistes concrètes : choix raisonné des groupes fonctionnels, contrôle de la protonation, promotion de la planéité et de l'extension  $\pi$  pour favoriser le don électronique. Ce cadre, à la fois explicatif et prédictif, ouvre la voie à la conception rationnelle d'inhibiteurs durables et performants dans les environnements industriels corrosifs.

**Mots clés :** Inhibition de la corrosion, Acier doux, Milieu acide (HCl), Composés organiques, Méthodes électrochimiques, Caractérisation de surface, Modélisation moléculaire, Adsorption.