

AVIS DE SOUTENANCE D'HABILITATION UNIVERSITAIRE

Monsieur TOUIL M'HAMED

Enseignant chercheur à la Faculté des Sciences de Tétouan

Présentera publiquement ses travaux en vue de l'obtention de
l'Habilitation Universitaire

Le 20 Juillet 2023 à 10h

Salle des soutenances– Faculté des Sciences de Tétouan

Devant le jury :

Pr. Mohamed El Amin El Amrani	Faculté des Sciences de Tétouan, Université Abdelmalek Essaâdi	Président
Pr. Driss Riffi Tamsamani	Faculté des Sciences de Tétouan, Université Abdelmalek Essaâdi	Membre
Pr. Abderrahman Bouassab	Faculté des Sciences et Techniques Tanger, Université Abdelmalek Essaâdi	Membre



RESUME

La première étude présentée dans ce manuscrit intitulée "Computational Simulation of the Adsorption Behavior of Benzimidazolone Derivatives as Inhibitors for Ordinary Steel Corrosion in HCl 1M". Ce travail a été effectué au département de chimie, au sein du Laboratoire de Physico-chimie des Matériaux Vitreux et Cristallisés avec l'équipe de Spectroscopie et Chimie Théorique des Matériaux. L'objectif de ce travail est de réaliser une étude théorique sur l'inhibition de la corrosion du fer en milieu acide à l'aide de molécules organiques dérivées de la Benzimidazolone dans un premier temps en appliquant les principes fondamentaux de la physique quantique, tels que la DFT conceptuelle, et les principes de la mécanique moléculaire. Dans une étape ultérieure, nous avons étudié la capacité de ces molécules à s'adsorber sur une surface de fer ainsi que leur mécanisme d'adsorption en utilisant la dynamique moléculaire (DM) et la simulation de Monte Carlo (MC). Nos recherches portent sur l'optimisation de la géométrie des molécules neutres ou protonées en phase gazeuse ou aqueuse. Ici, nous avons brièvement analysé la corrélation entre l'inhibition et les paramètres chimiques quantiques sur la base de la méthode de la relation quantitative structure-activité. Nos contributions théoriques nous ont permis de décrire non seulement la structure moléculaire des molécules liées à des atomes de fer simples, mais aussi à une surface de fer. La deuxième étude présentée dans ce manuscrit est intitulée "A theoretical approach to the corrosion inhibition of iron in acidic solution by a green formulation derived from Nigella sativa L". Dans cet article, nous rapportons la performance inhibitive de la formulation basée sur l'huile extraite des graines de Nigella sativa L., appelée FBN, contre la corrosion du fer en milieu acide, qui a été étudiée expérimentalement par M. Chellouli et al. Cette étude montre que le FBN a une bonne action inhibitrice sur la corrosion du fer en milieu acide, et la meilleure valeur d'efficacité de 99% est obtenue pour la formulation de l'huile extraite des graines de Nigella sativa d'efficacité de 99% est obtenue pour une concentration de 2500 ppm de FBN. Compte tenu des résultats d'études expérimentales, le but de ce travail était d'étudier la relation structurelle entre l'efficacité de l'inhibition de la corrosion et les propriétés moléculaires de plusieurs constituants clés présents dans les acides gras de l'huile de graines de Nigella sativa L, en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), la méthode Monte Carlo (MC) avec le module de localisation de l'adsorption et les simulations de dynamique moléculaire (MD).