

Nom et Prénom : KOULOU AMINE

Date de soutenance : 14 /11/2020

Directeur de Thèse : EL YOUBI MOHAMED SALAH DINE

Sujet de Thèse :

Contribution à l'étude de l'inhibition de la corrosion de l'acier doux dans un milieu acide HCl 1,0 M par des composés verts à base des monosaccharides et d'époxy de glucose : approches expérimentales et théoriques

Résumé :

Dans ce travail et dans un premier temps, nous avons étudié l'effet de cinq composés monosaccharides à savoir : D-mannose (M1), acide D-gluconique- γ -lactone (M2), D-galactono- γ -lactone (M3), monoacétoneglucose (M4) et diacétoneglucose (M5) sur la corrosion de l'acier doux dans HCl 1,0 M. Cette étude a été réalisée par des mesures gravimétriques et des méthodes électrochimiques. Le tracé des courbes de polarisation stationnaires montre que M2, M3, M4 et M5 agissent comme des inhibiteurs de type anodique, tandis que M1 agit comme un inhibiteur de type mixte. En outre, nous avons montré que l'efficacité inhibitrice dépend de la concentration et de la structure moléculaire et la meilleure inhibition est observée pour M2 par rapport à M1 et M5 qui peut être expliquée par la présence du groupe (-OH) dans sa structure. D'autre part, nous avons montré que l'adsorption des molécules de M2 sur la surface métallique est bien décrite par le modèle isotherme d'adsorption de Langmuir et que la valeur de l'énergie libre indique l'adsorption de M2 selon les deux modes d'adsorption physique et chimique.

Dans un deuxième temps, nous avons étudié l'effet d'une nouvelle série synthétisés à base d'époxy de glucose à savoir : 5,6-anhydro-3-O-octa-1,2-O-isopropylidene- α -D-glucofuranose (EGC8) et 5,6-anhydro-3-O-butadécyl-1,2-O-isopropylidene- α -D-glucofuranose (EGC14), sur la corrosion de l'acier doux dans HCl 1,0 M. Cette étude a été réalisée par les mêmes méthodes expérimentales couplées aux études théorique de la méthode DFT (Density Functional Theory) et la simulation de la dynamique moléculaire (DM). Les études électrochimiques ont montré que ces dérivés d'époxy de glucose sont des bons inhibiteurs de la corrosion de l'acier doux dans HCl 1,0 M où leurs inhibitions augmentent avec leurs concentrations pour atteindre environ des valeurs maximales de 93 % et 94 % à 10⁻³ M en EGC8 et EGC14, respectivement. Ces études ont montré que ces deux composés réagissent comme des inhibiteurs de type cathodique, ils s'adsorbent à la surface de l'acier doux selon l'isotherme d'adsorption de Langmuir et ils agissent via des adsorptions physiques. Les résultats des calculs théoriques ont montré que ces molécules sont adsorbées par la fonction active et les hétéroatomes d'oxygène forment des liaisons covalentes avec les atomes de la surface de fer. Finalement, un bon accord a été trouvé entre les résultats théoriques et expérimentaux.

Mots clés : Monosaccharides ; Dérivés époxy de glucose ; Inhibition de corrosion ; Acier doux ; HCl 1,0 M ; Études électrochimiques ; Études théoriques.

Abstract :

In this work and in the first time, we have studied the effect of five monosaccharide compounds namely: D-mannose (M1), D-gluconic acid- γ -lactone (M2), D-galactono- γ -lactone (M3), monoacetonelucose (M4) and diacetonelucose (M5) on the mild steel corrosion in 1.0 M HCl. This study was carried out by gravimetric measurements and electrochemical methods. The polarization curves showed that M2, M3, M4 and M5 act as anodic type inhibitors, while M1 acts as a mixed type inhibitor. Furthermore, it is found that the inhibition efficiency depends on their concentration and the molecular structure and the best inhibition was observed for M2 compared to M1 and M5 which can be explained by the presence of the group (-OH) in its structure. On the other hand, we have shown that the adsorption of M2 molecules

on the metallic surface is well described by the Langmuir's isotherm adsorption and the free energy value indicates that the adsorption of M2 according to the two modes of adsorption physic and chemical.

In a second step, we have studied the effect of a new synthesized series of epoxy glucose namely: 5,6-anhydro-3-O-octa-1,2-O-isopropylidene- α -D-glucofuranose (EGC8) and 5,6-anhydro-3-O-butadecyl-1,2-O-isopropylidene- α -D-glucofuranose (EGC14), on the mild steel corrosion in HCl 1.0 M. This study was carried out by the same experimental methods coupled with theoretical studies of the Density Functional Theory (DFT) method and the simulation of dynamics molecular (DM). Electrochemical studies have shown that these epoxy glucose derivatives are good inhibitors for mild steel corrosion in 1.0 M HCl where their inhibitions increase with their concentrations to reach approximately a maximum values of 93% and 94% at 10⁻³ M of EGC8 and EGC14, respectively. These studies have shown that these two compounds react as cathodic-type inhibitors. It is found also that these compounds adsorb on the mild steel surface according to Langmuir's adsorption isotherm and they act via physical adsorptions. In addition, the theoretical calculations results have shown that these molecules are adsorbed by the active function and the heteroatoms of oxygen form covalent bonds with the iron surface atoms. Finally, a good agreement was found between the theoretical and experimental results.

Keywords: Monosaccharides; Epoxy glucose derivatives; Corrosion inhibition; mild steel ; 1.0 M HCl; Electrochemical studies; Theoretical studies.