

Nom et Prénom : ROUIFI ZAKARIA

Date de soutenance : 25/12/2021

Directeur de Thèse : OUDDA HASSAN

Sujet de Thèse :

Étude de l'inhibition de la corrosion de l'acier au carbone par des composés organiques de type hydroxyquinoline et benzimidazole en milieu acide chlorhydrique molaire et approches théoriques

Résumé :

Le présent travail concerne l'étude de l'effet d'addition de deux séries de famille de benzimidazole sur la corrosion de l'acier au carbone. L'étude expérimentale a été réalisée par la méthode gravimétrique et le couplage des techniques électrochimiques. L'étude de la morphologie de surface a été effectuée à l'aide du microscope électronique à rayons X (EDX). Cette étude est accomplie par des calculs théoriques de la fonctionnelle de densité (DFT / B3LYP), la dynamique obtenus par l'étude de polarisations potentiodynamique sont de type mixte. De plus Les résultats expérimentaux ont montré que les séries hydroxyquinoline et benzimidazole HMQN et CBN-2, L'augmentation de la température peut avoir une diminution de l'efficacité d'inhibition. En outre, l'inhibiteur obéit à l'isotherme d'adsorption de Langmuir et la valeur correspondante de l'énergie d'adsorption (mécanismes de chimisorption). La microscopie électronique à balayage (MEB) et les analyses EDX ont été effectuées pour caractériser la surface de l'acier. L'étude théorique effectuée a permis d'établir une corrélation entre les descripteurs quantiques globaux de la réactivité, et locaux de la sélectivité des molécules et leurs efficacités inhibitrices.

Abstract :

The present work concerns the study of the addition effect of two series of 8- hydroxyquinoline and benzimidazole on the corrosion of steel to carbon in HCl 1M acid medium at different concentrations. The experimental part was carried out by the gravimetric method and the coupling of electrochemical techniques. The study of the morphology of surface was performed by using the scanning electron microscope (SEM) coupled with the X-ray energy dispersion (EDX).

This study is accomplished by theoretical calculations in depth using methods based on density functional theory (DFT/ B3LYP), molecular dynamics and monte Carlo method. The results obtained by the potentiodynamic polarization study show that the 8- hydroxyquinoline and benzimidazole derivatives are of mixed type. Moreover, the experimental results showed that HMQN and CBN-2 are the best inhibitors of both hydroxyquinoline and benzimidazole series tested. Where The inhibitory efficiency reaches a maximum of 97% and 95.02% at 10⁻³ M in HMQN and CBN - 2, The increase in temperature can have a decrease in the inhibition efficiency. Furthermore, the inhibitor obeys the Langmuir adsorption isotherm and the corresponding value of adsorption energy (ΔG_{ads}) is associated with chemisorption mechanisms. Besides, Scanning electron microscopy (SEM) and EDX analyses were performed to characterize the steel surface. The theoretical study carried out with the help of DFT (B- 3LYP)/6-31G (d,p) quantum calculations allowed us to establish a correlation between the global quantum descriptors of the reactivity, and the local quantum descriptors of the selectivity of the molecules and their inhibitory efficiencies.