

Nom et Prénom : OUBAAQA MOHAMED

Date de soutenance : 23/12/2022

Directeur de Thèse : EBN TOUHAMI MOHAMED

Sujet de Thèse :

Étude expérimentale et approche théorique de l'inhibition de la corrosion de l'acier doux en milieu HCl 1M par des composés organiques de type 8-hydroxyquinoléine et des acides aminés

Résumé:

Vu les larges domaines d'utilisation de l'acier sous ses différentes formes, son usage reste toujours tributaire du milieu et des conditions de son utilisation. C'est pour cela que la corrosion de l'acier, ainsi que les diverses voies de son inhibition constituent l'un des champs les plus étendus à explorer. C'est dans cette voie que le laboratoire MAGP de la Faculté des Sciences de Kénitra ne cesse d'appréhender et de réaliser des travaux de recherche sur les inhibiteurs de corrosion aussi bien organiques que minéraux susceptibles de lutter de manière efficace et efficiente contre la corrosion de différents types d'aciers.

Ainsi, ce travail de thèse s'est fixé pour objectif l'étude de l'inhibition de la corrosion de l'acier doux en milieu acide HCl 1M par des composés organiques à base de pyrano-quinoline-3-carbonitriles dérivés du 8-hydroxyquinoléine, ainsi que certains acides aminés. Ces composés, dont l'activité anti bactérienne a été confirmée dans des travaux ultérieurs, ont montré une meilleure efficacité de protection contre la corrosion de l'acier en milieu acide, et peuvent de ce fait être utilisés en tant qu'inhibiteurs de corrosion. L'examen de l'efficacité anti corrosive des molécules étudiées a été réalisée moyennant des techniques électrochimiques telles que les courbes de polarisation (Tafel) et la Spectroscopie d'Impédance Electrochimique (SIE). De même, deux acides aminés, notamment la phénylalanine et l'acide aspartique ont été testés en tant qu'inhibiteurs verts de la corrosion de l'acier doux en milieu HCl 1M. Par ailleurs, il a été constaté que certains dérivés pyraniques ont montré une efficacité inhibitrice remarquable, et que les deux acides aminés ont également prouvé leur pouvoir inhibiteur.

Ces résultats ont été confrontés aux aboutissements des calculs théoriques utilisant la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT). De ce fait, la simulation (Monte Carlo) et la simulation de la dynamique moléculaire ont été appréhendées afin de mieux approcher le mode d'action des molécules inhibitrices, ainsi que le type d'interaction des sites d'adsorption actifs des inhibiteurs avec la surface de l'acier. Les analyses de surface ont été réalisées par différentes techniques de caractérisation (MEB couplé à l'EDX et UV-Visible). Ainsi, en présence des inhibiteurs, une couche adsorbée à la surface de l'acier doux a été constatée, empêchant la dissolution du métal en milieu acide.

L'approche Monte Carlo, ainsi que la simulation de la dynamique moléculaire ont permis de conclure principalement que les hétéroatomes tels que l'azote et l'oxygène restent les sites les plus actifs qui assurent l'interaction molécule/substrat à travers l'établissement de liaisons covalentes ou électrostatiques dues à la présence de doublets libres disponibles, ainsi qu'au nuage électronique des cycles aromatiques...

Mots clés : Inhibiteurs de corrosion, Acier doux, Impédance Electrochimique, courbes de polarisation, DFT, Monte Carlo, MEB-EDX, UV-vis.

Abstract:

Given the wide range of usages of steel in its various forms, it always depends on the environment and conditions of its use. That is why the mild steel corrosion, as well as the various ways of its inhibition, constitute one of the most extensive fields to explore. It is in this way that the laboratory AMPE of the Faculty of Science of Kenitra does not cease to apprehend and to carry out research works on the corrosion inhibitors as well organic as mineral likely to struggle in an effective and efficient way against the corrosion of various types of steels.

Thus, this thesis work was fixed for objective the study of the mild steel corrosion inhibition in acid medium HCl 1M by organic compounds based on pyrano-quinoline-3-carbonitriles derived from the 8-hydroxyquinoléine, and some amino-acids. These compounds, whose anti-bacterial activity has been confirmed in previous works, have shown a better protection efficiency against steel corrosion in acidic medium, and can therefore be used as corrosion inhibitors. Examination of the anti-corrosive efficiency of the studied molecules was carried out using electrochemical techniques such as polarization curves (Tafel) and Electrochemical Impedance Spectroscopy (EIS). Also, two amino acids, namely phenylalanine and aspartic acid were tested as green corrosion inhibitors of mild steel in 1M HCl medium. Furthermore, it was found that pyranic derivatives showed higher inhibitory efficiency, and both amino acids also proved their inhibiting capability.

These results were compared with the outcomes of the theoretical calculations using density functional theory (DFT), as well as molecular dynamics simulation (Monte Carlo) in order to better approach the mode of action of the inhibiting molecules, as well as the type of interaction of the active adsorption sites of the inhibitors with the mild steel surface. The surface analyses were apprehended by different characterization techniques (SEM coupled to EDX and UV-Visible). Hence, in the presence of the inhibitors, an adsorbed layer on the mild steel surface occurs preventing the dissolution of the metal in acidic medium.

The Monte Carlo approach, as well as the simulation of the molecular dynamics, allowed to conclude mainly that heteroatoms such as nitrogen and oxygen remain the most active sites that ensure the interaction molecule/substrate through the establishment of covalent or electrostatic bonds due to the presence of free doublets available, as well as the electronic cloud of aromatic rings...

Key-words: Corrosion inhibitors, mild steel, electrochemical impedance, polarization curves, DFT, Monte Carlo, SEM-EDX, UV-vis.