

Nom et Prénom : ABDELLATIF TAZOUTI

Date de soutenance : 09/06/2023

Directeur de Thèse : EBN TOUHAMI MOHAMED

Sujet de Thèse :

Contribution à l'étude de l'inhibition de la corrosion de deux types d'aciers doux dans HCl 1,0 M par des dérivés de quinoxalinone et 8-(n-bromo-R-alkoxy) quinoléine : Etude électrochimique, spectroscopique et théorique.

Résumé :

Dans ce travail et dans un premier temps, nous avons étudié l'effet de trois dérivés de quinoxalinone à savoir : (E)-3-styrylquinoxaline-2 (1H) -one (SQ), (E) -3- (4-méthoxystyryl) quinoxaline-2 (1H) -one (MOSQ) et (E) -3- (4-méthoxystyryl) -7-méthylquinoxaline-2 (1H) -one (MOSMQ) sur la corrosion de l'acier doux dans HCl 1,0 M en utilisant des mesures gravimétriques, méthodes électrochimiques, analyses spectroscopiques et études théoriques. Le tracé des courbes I-E montre que ces composés sont de type mixte avec une prédominance anodique pour le SQ et cathodique pour les deux autres MOSQ et MOSMQ. En outre, nous avons trouvé que l'efficacité inhibitrice dépend de la concentration et de la structure moléculaire de ces composés dont la meilleure inhibition est observée pour le MOSQ par rapport aux MOSMQ et SQ. De plus, les paramètres thermodynamiques d'activation et d'adsorption ont montré que l'adsorption de ces composés se fait selon un processus physique. En fin, ces résultats expérimentaux ont été confirmés par des approches théoriques. Dans un deuxième temps, nous avons étudié l'effet de la longueur d'une chaîne hydrocarbonée d'une nouvelle série synthétisés de trois dérivés de 8-(n-bromo-R-alkoxy) quinoléine à savoir : 8-(2-bromoethoxy) quinoline (QN-C2Br), 8-(3-bromopropoxy) quinoléine (QN-C3Br) et 8-(4-bromobutoxy) quinoléine (QN-C4Br) sur la corrosion d'un autre acier doux dans HCl 1,0 M en utilisant les mêmes méthodes expérimentales et théoriques. Les études électrochimiques ont montré que ces dérivés de quinoléine sont des bons inhibiteurs de la corrosion de l'acier doux dans HCl 1,0 M où leurs inhibitions dépendent de leurs concentrations et de la longueur de la chaîne hydrocarbonée et elles atteignent environ des valeurs maximales de 94,5 % et 95,1 % et 97,2 % à 10⁻³ M en QN C2Br, QN-C3Br et QN-C4Br, respectivement. Ces études ont montré que l'adsorption de ces molécules QN-C4Br, QN-C3Br et QN-C2Br sur la surface métallique est spontanée et se fait selon l'isotherme d'adsorption de Langmuir. En outre, l'analyse par MEB/EDAX de la surface de l'acier doux et par spectroscopie UV-visible de la solution confirment la formation d'une couche protectrice sur cette surface et d'un complexe inhibiteur-ions métalliques dans la solution, respectivement, indiquant une forte interaction métal-inhibiteur-ions de fer. Finalement, les calculs par DFT et les études de simulations MD ont confirmé cette forte interaction métal/solution.

Mots clés : Dérivés quinoxalinone ; Dérivés 8-(n-bromo-R-alkoxy) quinoléine ; Longueurchaine hydrocarbonée ; Inhibition de corrosion ; Deux types d'aciers doux ; HCl 1,0 M ; Études électrochimiques ; Analyses spectroscopiques ; Études théoriques.

Abstract:

In this work and as a first step, we studied the effect of three quinoxalinone derivatives namely: (E) -3-styrylquinoxaline-2 (1H) -one (SQ), (E) -3- (4 -methoxystyryl) quinoxaline-2 (1H) -one (MOSQ) and (E) -3- (4-methoxystyryl) -7-methylquinoxaline-2 (1H) -one (MOSMQ) on mild steel corrosion in HCl 1.0 M by using gravimetric measurements, electrochemical methods, spectroscopic analyzes and theoretical studies. The polarization curves showed that these compounds act as a mixed type inhibitor with an anodic predominance for SQ and cathodic for two others MOSQ and MOSMQ. In addition, it has found that inhibition efficacy depends on their concentrations and their molecular structure, where the best inhibition was observed for MOSQ compared to MOSMQ and SQ. Furthermore, the obtained thermodynamic activation and adsorption parameters have shown that the adsorption of these derivatives occurs through a physical process. Finally, these experimental results were confirmed by theoretical approaches. Secondly, we have investigated the influence of the length of a hydrocarbon chain of a new three synthesized series of 8- (n-bromo-R-alkoxy) quinoline derivatives, namely: 8- (2-bromoethoxy) quinoline (QN-C2Br), 8- (3-bromopropoxy) quinoline (QN-C3Br), and 8- (4-bromobutoxy) quinoline (QN-C4Br) on corrosion of another mild steel in HCl 1.0 M using the same

experimental and theoretical methods. Electrochemical studies have indicated that these quinoline derivatives are good inhibitors for mild steel corrosion in 1.0 M HCl, where their inhibitions depend on their concentrations and the length of the hydrocarbon chain, and they reach approximately maximum values of 94.5 %, 95.1%, and 97.2 % at 10-3 M of QN C2Br, QN-C3Br, and QN-C4Br, respectively. In addition, it is found that the molecules of QN-C4Br, QN-C3Br, and QN-C2Br adsorb on the metal surface spontaneously and act via the Langmuir adsorption isotherm. Moreover, the analysis of mild steel surface by SEM/EDAX and the solution by UV-visible spectroscopy confirm the formation of a protective layer on this surface and an inhibitor-metal ion complex in the solution, respectively, indicating also a strong metal-inhibitor-iron interaction. Finally, the DFT calculations and MD simulation studies confirmed this strong metal/solution interaction.

Keywords: Quinoxalinone derivatives; 8- (n-bromo-R-alkoxy) quinoline derivatives; Long hydrocarbon chain; Corrosion inhibition; Two types of mild steel; 1.0 M HCl; Electrochemical studies; Spectroscopic analyzes; Theoretical studies.