



AVIS DE SOUTENANCE D'UNE THESE DE DOCTORAT

Le Doyen de la Faculté des Sciences a le plaisir d'informer le public qu'une soutenance de thèse de Doctorat en

«Chimie Fondamentale et Appliquée»

aura lieu le 01/12/2023 à la Faculté des Sciences, Kénitra

La Thèse sera présentée par Mr FAKHRY HICHAM

Sous le thème :

Etude de l'inhibition de la corrosion de l'acier au carbone par des nouveaux composés organiques de type 8-hydroxyquinoléine en milieu acide chlorhydrique 1M et approche théorique

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Titre	Etablissement
MOUHAMED EBN TOUHAMI	Président	Faculté des sciences , Kénitra
MUSTAPHA ALLALI	Rapporteur	ISPITS-Fès
MOHAMED ASSOUG	Rapporteur	ENSAM- Meknès
RACHID TOUIR	Rapporteur	CRMEF, Rabat
ABDELKADER ZARROUK	Examineur	Faculté des sciences , Rabat
NADIA DKHIRECHE	Examineur	Faculté des sciences , Kénitra
BRAHIM LAKHRISSI	Examineur	Faculté des sciences , Kénitra
FOUAD BENHIBA	Invité	ISPITS, Guelmim
HASSAN OUDDA	Directeur de thèse	Faculté des sciences , Kénitra



Nom et Prénom : FAKHRY HICHAM
Date de soutenance : 01/12/2023
Directeur de Thèse : OUDDA HASSAN

Sujet de thèse

Etude de l'inhibition de la corrosion de l'acier au carbone par des nouveaux composés organiques de type 8-hydroxyquinoléine en milieu acide chlorhydrique 1M et approche théorique

Résumé:

Le présent travail, porte sur la synthèse de nouveaux composés hétérocycliques de la famille de 8-hydroxyquinoléine et leurs caractérisations par la spectroscopie infrarouge (IR) et la résonance magnétique nucléaire (RMN). Les dérivés synthétisés ont été testés comme inhibiteurs de la corrosion de l'acier au carbone en acide chlorhydrique 1M en utilisant la méthode gravimétrique et les techniques électrochimiques (Polarisations potentiodynamique et la spectroscopie d'impédance). L'analyse de surface est effectuée à l'aide du microscope électronique à balayage (MEB) couplée avec la dispersion d'énergie à rayons X (EDX) et UV-visible. Ces études ont été complétées par des calculs théoriques approfondis en faisant appel à des méthodes basées sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) et la simulation de dynamique moléculaire (DM). Les résultats obtenus par l'étude de polarisations potentiodynamique montrent que les dérivés de la 8-hydroxyquinoléine sont de type mixte. Les données obtenues par spectroscopie d'impédance électrochimique ont été analysées pour être modélisées par des modèles de circuits équivalents appropriés. L'augmentation de la température peut avoir une diminution de l'efficacité d'inhibition des composés de 8-hydroxyquinoléine. En outre, l'inhibiteur obéit à l'isotherme d'adsorption de Langmuir et la valeur correspondante de l'énergie d'adsorption (Energie libre standard d'adsorption) est associée aux mécanismes de chimisorption. La microscopie électronique à balayage (MEB) et les analyses EDX ont été effectuées pour caractériser la surface de l'acier. Les résultats de l'étude théorique de DFT et de DM ont fourni de renseignements très importants sur la compréhension du mécanisme d'actions des dérivées de hydroxyquinoléine testés dans ce travail. Une bonne corrélation a été trouvée entre l'étude expérimentale et l'étude théorique.

Mots clés : Corrosion, inhibition, acier au carbone, 8-hydroxyquinoléine, DFT, dynamique moléculaire.

Abstract:

The present work concerns with the synthesis of new heterocyclic compounds of the 8-hydroxyquinoline family and their characterizations by infrared spectroscopy (IR) and Nuclear Magnetic Resonance (NMR). The synthesized derivatives were tested as corrosion inhibitors of carbon steel in molar hydrochloric acid using gravimetric method and electrochemical techniques (potentiodynamic polarizations and impedance spectroscopy), the surface analysis is carried out using scanning electron microscope (SEM) coupled with X-ray energy dispersive (EDX) and UV-visible. These studies have been completed by extensive theoretical calculations using methods based on density functional theory (DFT), molecular dynamics simulation (MD). In fact, the results obtained from the potentiodynamic polarization study show that the 8-hydroxyquinoline derivatives are of mixed type. Moreover, the data achieved by electrochemical impedance spectroscopy were analyzed to be modeled by appropriate equivalent circuit models. The increase in temperature may have a decrease in the inhibition efficiency of 8-hydroxyquinoline compounds. In addition, the inhibitor obeys the Langmuir adsorption isotherm and the corresponding adsorption energy value G_{ads} is associated with chemisorption mechanisms. The SEM/EDX analyses were performed to characterize the surface of the steel. The results of the theoretical study provided very important information on the understanding of the mechanism of actions of the hydroxyquinoline derivatives tested in this work. A good correlation was found between the experimental and theoretical study.

Keywords: Corrosion, Inhibition, Carbon steel, 8-Hydroxyquinoline, DFT, Molecular dynamics simulation.