

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 24/02/2024 à la Faculté des Sciences de Kénitra

La Thèse sera présentée par **Mme ABOUT HAFIDA**

Sous le thème :

L'étude de l'inhibition de la corrosion d'un acier en milieu HCl 1 M par des composés à base de la 8-
hydroxyquinoléine : synthèse, approche expérimentale et théorique

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Titre	Etablissement
DAFALI MY ALI	Président	Faculté des Sciences, Oujda
ALLALI MUSTAPHA	Rapporteur	ISPITS, Fès
TOUIR RACHID	Rapporteur	CRMEF, Kénitra
ASSOUAG MOHAMED	Rapporteur	ENSAM, Meknès
ZARROUK ABDELKADER	Examineur	Faculté des Sciences, Rabat
SHAIM ABDELILAH	Examineur	Faculté des Sciences, Kénitra
ZARROK HASSAN	Invité	Faculté des Sciences, Kénitra
LAKHRISSI BRAHIM	Co-Directeur de thèse	Faculté des Sciences, Kénitra
OUDDA HASSAN	Directeur de thèse	Faculté des Sciences, Kénitra



Nom et Prénom : ABOUT HAFIDA
Date de soutenance : 24/02/2024
Directeur de Thèse : OUDDA HASSAN

Sujet de thèse:

L'étude de l'inhibition de la corrosion d'un acier en milieu HCl 1 M par des composés à base de la 8-hydroxyquinoléine : synthèse, approche expérimentale et théorique

Résumé:

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude de l'effet anti corrosion de nouveaux composés organiques synthétisés à base de la 8-hydroxyquinoléine sur la corrosion de l'acier C22E en milieu d'acide chlorhydrique 1M. Les composés synthétisés sont caractérisés par la Résonance Magnétique Nucléaire (RMN). Ces composés ont été testés comme inhibiteurs de corrosion de l'acier en milieu acide chlorhydrique molaire en utilisant la méthode gravimétrique et les techniques électrochimiques (stationnaires et transitoires). L'analyse de la surface est effectuée à l'aide du microscope électronique à balayage (MEB) couplé 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/B3LYP) et de la dynamique moléculaire (MD). Les courbes de polarisation montrent que le composé HQMC agit comme un inhibiteur anodique. Alors que les composés PTQ, QTB et HQPC sont considérés comme des inhibiteurs de type mixte à un caractère anodique prédominant. L'augmentation de la température peut avoir une diminution de l'efficacité d'inhibition des dérivés de la 8-hydroxyquinoléine. L'adsorption de ces composés sur la surface de l'acier suit l'isotherme de Langmuir. Les résultats de l'étude théorique ont fourni des renseignements très importants sur la compréhension du mécanisme d'action des dérivés de la 8-hydroxyquinoléine testés dans ce travail. Une bonne corrélation a été trouvée entre l'étude expérimentale et l'étude théorique.

Mots clés : Corrosion, Inhibition, 8-Hydroxyquinoléine, MEB, DFT, Dynamique moléculaire

Abstract:

In this study, we were interested in the study of the anti-corrosion effect of new organic compounds synthesized based on 8-hydroxyquinoline on the corrosion of C22E steel in a 1M hydrochloric acid medium. The synthesized compounds are characterized by Nuclear Magnetic Resonance (NMR). These compounds were tested as steel corrosion inhibitors in molar hydrochloric acid medium using the gravimetric method and electrochemical techniques (stationary and transient). Surface analysis is carried out using scanning electron microscope (SEM) coupled with X-ray energy dispersion (EDX) and UV-visible. These studies were complemented by in-depth theoretical calculations using methods based on density functional theory (DFT/B3LYP) and molecular dynamics (MD). The polarization curves show that the HQMC compound acts as an anodic inhibitor. While the compounds PTQ, QTB and HQPC are considered mixed type inhibitors with a predominant anodic character. Increasing temperature may have a decrease in the inhibition efficiency of 8-hydroxyquinoline derivatives. The adsorption of these compounds on the steel surface follows the Langmuir isotherm. The results of the theoretical study provided very important information on understanding the mechanism of action of the 8-hydroxyquinoline derivatives tested in this work. A good correlation was found between the experimental study and the theoretical study.

Keywords: Corrosion, Inhibition, 8-Hydroxyquinoline, SEM, DFT, Molecular dynamics

