

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 01/03/2024 à la Faculté des Sciences de Kénitra

La Thèse sera présentée par **Mme EL BARKI ASMAE**

Sous le thème :

**ÉTUDE DE L'INHIBITION DE LA CORROSION DE L'ACIER AU CARBONE PAR DES COMPOSES
ORGANIQUES DE TYPE 8-HYDROXYQUINOLEINE ET HYDANTOINE EN MILIEU ACIDE
CHLORHYDRIQUE MOLAIRE ET APPROCHE THEORIQUE**

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Titre	Etablissement
LAKHRISSI BRAHIM	Président	Faculté des Sciences, Kénitra
ALLALI MUSTAPHA	Rapporteur	ISPITS, Fès
EL HEZZAT MOUNIR	Rapporteur	Faculté des Sciences, Kénitra
TOUIR RACHID	Rapporteur	CRMEF, Kénitra
ZARROK ABDELKADER	Examineur	Faculté des Sciences, Rabat
ASSOUAG MOHAMED	Examineur	ENSAM, Meknès
RAMLI YOUSSEF	Examineur	Faculté de Médecine et de Pharmacie, Rabat
ZARROK HASSAN	Invité	Faculté des Sciences, Kénitra
OUDDA HASSAN	Directeur de thèse	Faculté des Sciences, Kénitra

Nom et Prénom : EL BARKI ASMAE
Date de soutenance : 01/03/2024
Directeur de Thèse : OUDDA HASSAN

Sujet de thèse:

ÉTUDE DE L'INHIBITION DE LA CORROSION DE L'ACIER AU CARBONE PAR DES COMPOSES ORGANIQUES DE TYPE 8-HYDROXYQUINOLEINE ET HYDANTOINE EN MILIEU ACIDE CHLORHYDRIQUE MOLAIRE ET APPROCHE THEORIQUE

Résumé :

L'acier au carbone est l'un des matériaux qui présentent une grande variété d'applications industrielles. Cependant, ils peuvent être corrodés dans des milieux agressifs. L'utilisation des composés organiques comme inhibiteurs de la corrosion acide de l'acier éveille un intérêt considérable de recherche, et constitue un outil de choix pour lutter contre ce phénomène. Les travaux menés dans cette thèse ont eu pour objectif d'étudier le pouvoir protecteur des composés organiques à base de 8-hydroxyquinoléine et Hydantoin contre la corrosion d'un acier au carbone dans le milieu acides HCl 1M. L'étude a été effectuée à travers la méthode de perte de masse, les techniques électrochimiques (stationnaires et transitoires), ainsi que les analyses de surface (MEB-EDX). Une étude théorique utilisant la méthode DFT au niveau (B3LYP)/ 6-31G (d, p) et la simulation dynamique moléculaire a été effectuée afin d'apporter une contribution significative à la détermination des mécanismes d'interactions les plus probables des molécules inhibitrices avec la surface métallique. Ainsi, nous avons montré que ces composés organiques peuvent être classifiés comme des très bons inhibiteurs de corrosion dans le milieu acide HCl 1M. Les résultats obtenus expérimentalement révélés que l'efficacité d'inhibition de la corrosion suivie l'ordre : BDIQ > HDIQ pour les dérivées 8- hydroxyquinoléines tandis que pour les Hydantoin: MPIM > ADM. Les résultats électrochimiques ont montré que les inhibiteurs produisent une résistance élevée aux transferts de charges à travers l'interface métal-électrolyte agissent généralement comme des inhibiteurs de type mixte. L'influence de la concentration et de la température ont été examinées et le mode d'adsorption de ces inhibiteurs sur la surface du métal a été mis en évidence en lui assignant l'isotherme appropriée et en déterminant les grandeurs thermodynamiques correspondantes. Les images MEB, EDX ont confirmé cet effet. Les résultats de l'étude théorique ont fourni de renseignements très importants sur la compréhension du mécanisme d'actions des dérivées de 8- hydroxyquinoléines et Hydantoin testés dans ce travail. La possibilité de formation de liaisons hydrogène (prouvé théoriquement) entre ces dérivées de 8-hydroxyquinoléines et Hydantoin et la surface de l'acier métallique en phase liquide. Une bonne corrélation a été trouvée entre l'étude expérimentale et l'étude théorique.

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

Abstract:

Carbon steel is one of the materials with the widest range of industrial applications. However, they can corrode in aggressive environments. The use of organic compounds as inhibitors of acid corrosion in steel is attracting considerable research interest, and represents a tool of choice for combating this phenomenon. The aim of the work carried out in this thesis was to study the protective power of organic compounds based on 8-hydroxyquinoline and Hydantoin against corrosion of carbon steel in 1M HCl acids. The study was carried out using the mass loss method, electrochemical techniques (stationary and transient), and surface analysis (SEM-EDX). A theoretical study using DFT at the (B3LYP)/ 6-31G (d, p) level and molecular dynamics simulation was carried out to make a significant contribution to determining the most likely interaction mechanisms of inhibitor molecules with the metal surface. Experimental results revealed that corrosion inhibition efficiencies followed the order: BDIQ > HDIQ for 8- hydroxyquinoline derivatives, while for Hydantoin: MPIM > ADM. Electrochemical results showed that inhibitors producing high resistance to charge transfer across the metal-electrolyte interface generally act as mixed-type inhibitors. The influence of concentration and temperature was examined, and the mode of adsorption of these inhibitors on the metal surface was highlighted by assigning the appropriate isotherm and determining the corresponding thermodynamic quantities. SEM and EDX images confirmed this effect. The results of the theoretical study provided very important information for understanding the mechanism of action of the 8- hydroxyquinoline and hydantoin derivatives tested in this work. The possibility of the formation of hydrogen bonds (theoretically proven) between these 8- hydroxyquinolines and Hydantoin derivatives and the surface of metallic steel in the liquid phase. A good correlation was found between the experimental and theoretical studies.

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