



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 06/07/2024 à la Faculté des Sciences, Kénitra

La Thèse sera présentée par Mr MELIAN REDOUANE

Sous le thème :

**Etude expérimentale et approche théorique de l'adsorption d'inhibiteurs de corrosion
respectueux de l'environnement sur la surface de l'alliage d'aluminium AA2024-T3,
largement utilisé dans l'industrie aéronautique**

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Titre	Etablissement
B. HAMMOUTI	Président	Faculté des Sciences, Oujda
M. TALEB	Rapporteur	Faculté des Sciences, Dhar El Mahraz, Fès
B. OUAKI	Rapporteur	ENSMR
A. CHAHINE	Rapporteur	Faculté des Sciences, Kénitra
R. A. BELAKHMIMA	Examineur	ENSCK
N. DKHIRECHE	Examineur	Faculté des Sciences, Kénitra
I. CHAOUKI	Invité	ENSCK
MOHAMED EBN TOUHAMI	Directeur de thèse	Faculté des Sciences, Kénitra





Nom et Prénom : MELIAN REDOUANE
Date de soutenance : 06/07/2024
Directeur de Thèse : MOHAMED EBN TOUHAMI

Sujet de thèse :

Etude expérimentale et approche théorique de l'adsorption d'inhibiteurs de corrosion respectueux de l'environnement sur la surface de l'alliage d'aluminium AA2024-T3, largement utilisé dans l'industrie aéronautique

Résumé:

Les alliages d'aluminium de la série 2000 jouent un rôle essentiel dans la structure d'un avion. Ils présentent de hautes caractéristiques mécaniques ce qui permet leur utilisation en tant que matériaux de structure. Ces alliages sont particulièrement sensibles à la corrosion localisée lorsqu'ils sont exposés à un environnement agressif. Cette étude est basée sur l'inhibition de corrosion de l'alliage d'aluminium AA2024-T3, dans une solution de NaCl à 3,5 %, en utilisant différents inhibiteurs. Le nihydrine (P1), l'acide 2-amino-3-phénylpropanoïque (P2), l'acide 5,5'-dithiobis-(2-nitrobenzoïque) (ER) et le sulfite de sodium (SUL). Les résultats montrent que tous les inhibiteurs étudiés agissent comme des inhibiteurs cathodiques. Leur efficacité d'inhibition augmente avec la concentration, atteignant des valeurs maximales à des concentrations spécifiques. Pour P1 et P2 atteignent respectivement des efficacités de 89,1 % et 96,3 % à une concentration de 10-2 M, tandis que ER et SUL atteignent des efficacités de 93 % et 98 % à des concentrations de 10-2 M et 5.10-3 M, respectivement. Les inhibiteurs s'adsorbent à la surface de l'alliage d'aluminium conformément au modèle d'adsorption de Langmuir, comme le démontrent les analyses SEM/EDX révélant la formation d'une couche protectrice par les inhibiteurs. En outre, des simulations DFT utilisant B3LYP/6-311G (d,p) sont également réalisées afin d'établir une corrélation entre les propriétés d'inhibition de corrosion des composés utilisés et leurs structures moléculaires. Les simulations MD confirment l'adsorption des inhibiteurs. En résumé, cette étude met en évidence l'efficacité significative de P1, P2, ER et SUL dans l'inhibition de la corrosion d'alliage AA2024-T3. De plus, les profils toxicologiques des inhibiteurs ont été évalués grâce à des outils en ligne tels que PKCSM et SwissADME.

Abstract:

Aluminum alloys from the 2000 series play a crucial role in aircraft structures. They possess high mechanical characteristics, making them suitable for use as structural materials. However, these alloys are particularly susceptible to localized corrosion when exposed to aggressive environments. This study investigates the corrosion inhibition of AA2024-T3 aluminum alloy in a 3.5% NaCl solution using different inhibitors: nihydrine (P1), 2-amino-3-phenylpropanoic acid (P2), 5,5'-dithiobis-(2-nitrobenzoic acid) (ER), and sodium sulfite (SUL). The results show that all the studied inhibitors act as cathodic inhibitors. Their inhibition efficiency increases with concentration, reaching maximum values at specific concentrations. P1 and P2 achieve inhibition efficiencies of 89.1% and 96.3%, respectively, at a concentration of 10⁻² M, while ER and SUL reach efficiencies of 93% and 98% at concentrations of 10⁻² M and 5.10⁻³ M, respectively. The inhibitors adsorb onto the surface of the aluminum alloy following the Langmuir adsorption model, as evidenced by SEM/EDX analyses revealing the formation of a protective layer by the inhibitors. Additionally, DFT simulations using B3LYP/6-311G (d,p) are performed to establish the correlation between the corrosion inhibition properties of the examined compounds and their molecular structures. MD simulations confirm the adsorption of the inhibitors. In summary, this study highlights the significant effectiveness of P1, P2, ER, and SUL in inhibiting the corrosion of AA2024-T3 alloys. Moreover, the toxicity profiles of the inhibitors were assessed using online tools such as PKCSM and SwissADME.