



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

Mme (elle) : **SAADY Asmae**

Soutiendra : **le 03/04/2021 à 10 H**

Lieu : **Centre de visioconférence**

Une thèse intitulée :

Contribution à l'étude de l'inhibition de la corrosion d'un acier doux en milieu acide chlorhydrique molaire par de nouveaux composés organiques à base d'aniline, d'indanone Et d'imidazopyridine : Etude expérimentale et théorique

En vue d'obtenir le **Doctorat**

FD : Ressources Naturelles, Environnement et Développement Durable (RNE2D)

Spécialité : Chimie Physique Appliquée

Devant le jury composé comme suit :

| | NOM ET PRENOM | GRADE | ETABLISSEMENT |
|------------------------------|--------------------------|-------|--|
| Président | Pr. HAMMOUTI Belkheir | PES | Faculté des Sciences - Oujda |
| Directeur de thèse | Pr. TALEB Mustapha | PES | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès |
| Co-directeur de thèse | Pr. EL BIACHE Abdelmoula | PES | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès |
| Rapporteurs | Pr. AOUNITI Abdelouahad | PES | Faculté des Sciences - Oujda |
| | Pr. CHETOUANI Ahmed | PES | Faculté des Sciences - Oujda |
| | Pr. SFAIRA Mouhcine | PES | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès |
| Examineurs | Pr. ZARROUK Abdelkader | PES | Faculté des Sciences - Rabat |
| | Pr. AINANE Tarik | PES | Ecole Supérieure des de Technologie - Khénifra |
| | Pr. RAIS Zakia | PES | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès |
| | Pr. SAFFAJ Taoufiq | PES | Faculté des Sciences et Techniques - Fès |

Résumé :

L'étude de la corrosion a pris de nos jours une importance considérable étant donnée l'utilisation grandissante des métaux et alliages dans la vie moderne. En effet, l'inhibition de la corrosion représente de véritables enjeux économiques, sécuritaires et scientifiques. Le recours aux inhibiteurs de corrosion de type organique constitue un outil de choix pour lutter contre ce phénomène en raison de leur efficacité élevée même à faible concentrations, et pour des raisons d'écotoxicité.

Ce travail de thèse a pour double objectifs. D'une part, il s'agit d'évaluer la performance de trois séries de composés organiques à base d'aniline, d'imidazopyridine et d'indanone en termes d'inhibition de la corrosion d'un acier doux en milieu acide HCl 1M. À noter qu'à notre connaissance aucune étude n'a été entreprise auparavant sur les dérivés d'indanones dans le domaine de la corrosion. D'autre part, nous envisagerons apporter une explication approfondie au mécanisme d'inhibition de ces composés en faisant appel à l'approche quantique.

Pour répondre à ces objectifs, nous nous sommes servis des techniques électrochimiques stationnaire et transitoire, couplées à la méthode gravimétrique. Des études théoriques complémentaires ont été entreprises pour l'ensemble des molécules étudiées en utilisant la méthode DFT/B3LYP/6-31G (d, p), la méthode QSAR et la simulation de dynamique moléculaire. Notons que le calcul théorique a été également effectué sur les différentes formes protonées envisageables en milieu acide en vue de bien appréhender le mécanisme d'inhibition.

Les différentes techniques expérimentales utilisées montrent que les composés étudiés présentent d'excellentes propriétés inhibitrices contre la corrosion de l'acier utilisé en milieu acide chlorhydrique molaire. L'ajustement des spectres d'impédance par un circuit électrique équivalent permet de modéliser les phénomènes qui s'y produisent à l'interface en présence des inhibiteurs étudiés, et d'extraire les paramètres électrochimiques décrivant le processus d'inhibition. Également, La nature de ces inhibiteurs a été déterminée en faisant appel aux courbes de polarisation. En outre, l'évaluation de l'effet de la température et du temps d'immersion nous a permis d'avoir respectivement des renseignements sur la nature d'interaction métal-inhibiteur, et sur la stabilité de la couche inhibitrice formée en présence des différents composés étudiés.

L'étude quantique au niveau DFT nous a permis d'identifier pour chaque série de molécules les descripteurs quantiques liés au processus d'inhibition, ainsi que les sites actifs responsables de l'inhibition. Également, la simulation de dynamique moléculaire (SDM) nous a permis d'apporter des éléments de réponse sur la nature d'interaction des molécules inhibitrices avec la surface de métal. Par ailleurs, des modèles mathématiques ont été proposés pour relier l'efficacité inhibitrices de ces composés à leurs descripteurs quantiques en utilisant l'approche QSAR.

Mots clés :

Corrosion, Inhibition, Acier doux, Indanone, Aniline, Imidazopyridine, Polarisation, impédance, DFT, QSAR.

Contribution to the study of the corrosion inhibition of a mild steel in molar hydrochloric acid medium of new organic compounds based on aniline, indanone and imidazopyridine : experimental and theoretical study.

Abstract:

Nowadays, the study of corrosion has taken a great amount of importance given the fact the increasing use of metals and alloys in modern life. Indeed, the inhibition of corrosion represents real economic challenges, security and scientific issues. The use of organic corrosion inhibitors is a tool of choice to fight against this phenomenon because of its high efficiency even at low concentrations, and for reasons of Ecotoxicity.

The research under work has a double objective. On the one hand, the performance of three series of organic compounds based on aniline, imidazopyridine and indanone in terms of corrosion inhibition of a mild steel in an acidic 1M HCl medium is evaluated. Bearing in mind that no study was conducted previously on indanone derivatives in the field of corrosion. On the other hand, we will consider providing a thorough explanation of the inhibition mechanism of these compounds using the quantum approach.

To meet these objectives, we used both stationary and transient electrochemical techniques, coupled with the gravimetric method. Complementary theoretical studies were undertaken for all the molecules studied using the DFT/B3LYP/6-31G (d, p) method, the QSAR method and molecular dynamics simulation. Noting that the theoretical calculation was done on the different protonated forms that can be envisaged in an acidic medium in order to understand the inhibition mechanism.

The various experimental techniques used show that the compounds studied have excellent corrosion-inhibiting properties against the corrosion of steel used in molar hydrochloric acid medium. The adjustment of the impedance spectra by an equivalent electrical circuit makes it possible to model the phenomena occurring at the interface in the presence of the studied inhibitors, and to extract the electrochemical parameters describing the inhibition process. Additionally, the nature of these inhibitors was determined using polarization curves. Moreover, the evaluation of the effect of temperature and immersion time allowed us to have information on the nature of metal-inhibitor interaction, and on the stability of the inhibiting layer formed in the presence of the different compounds studied.

The quantum study at the DFT level allowed us to identify for each series of molecules the quantum descriptors related to the inhibition process, as well as the active sites responsible for inhibition. In addition, the simulation of molecular dynamics (MDS) has allowed us to provide answers on the nature of interaction of the inhibitory molecules with the metal surface. Besides, mathematical models that were proposed to link the inhibitory efficacy of these compounds to their quantum descriptors using the QSAR approach.

Key Words:

Corrosion, inhibition, mild steel, indanone, aniline, imidazopyridine, polarization, impedance, DFT, QSAR.