



## AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mme (elle) **ALAOUI MRANI Soukaina**

Soutiendra : le **Samedi 25/11/2023 à 10H00**

Lieu : **FSDM – Centre Visioconférence**

*Une thèse intitulée :*

**Contribution à l'étude de l'inhibition de la corrosion d'un acier doux en milieu acide chlorhydrique molaire par des composés à base de Pyridazine et Imine : Approche quantique, modélisation statistique et étude expérimentale**

*En vue d'obtenir le Doctorat*

**FD : Ressources Naturelles, Environnement et Développement Durable**

**Spécialité : Chimie-physique appliquée**

*Devant le jury composé comme suit :*

Nom et prénom	Etablissement	Grade	Qualité
Pr BENTISS Fouad	Faculté des Sciences, El Jadida	PES	Président
Pr AOUNITI Abdelouahad	Faculté des Sciences, Oujda	PES	Rapporteur & Examineur
Pr ZARROUK Abdelkader	Faculté des Sciences, Rabat	PH	Rapporteur & Examineur
Pr TOUIMI BENJELLOUN Adil	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Rapporteur & Examineur
Pr BENZAKOUR Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr ABDELLAOUI Abdelfattah	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr EL AMRI Hamid	Institut Agronomique et vétérinaire Hassan II, Rabat	PES	Invité
Pr SEFFAJ Taoufik	Faculté des Sciences et Techniques, Fès	PES	Co-directeur de thèse
Pr TALEB Mustapha	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse



## 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 faibles concentrations, et pour des raisons d'écotoxicité.

Ce travail de thèse a pour objectif d'évaluer la performance de deux séries de composés organiques à base de pyridazine et d'imine en terme d'inhibition de la corrosion d'un acier doux en milieu acide HCl 1M.

Tout d'abord, nous avons prédit la toxicité in silico des composés synthétisés à l'aide d'une base de données en ligne, et nous avons confirmé leurs stabilités en milieu acide avant d'évaluer leurs activités anticorrosives.

Après, nous avons prédit théoriquement l'ordre d'efficacité à l'aide des méthodes : DFT au niveau B3LYP et la simulation dynamique par la méthode de Monte Carlo en présence des molécules d'eau pour les deux séries de molécules.

Ensuite, nous avons collecté les résultats de différentes études bibliographiques afin de modéliser statistiquement l'effet inhibiteur des molécules de la famille des imines en utilisant la méthode QSAR/QSPR.

L'évaluation de l'effet protecteur de ces produits a été réalisée à travers la méthode de différence d'absorbance, les techniques électrochimiques (stationnaires et transitoires), UV-visible ainsi que les analyses de surface (MEB-EDX). Ainsi, nous avons montré que ces produits synthétisés peuvent être classifiés comme des bons inhibiteurs de corrosion dans un environnement acide. Les résultats révèlent que les efficacités inhibitrices pour les inhibiteurs étudiés atteignent des valeurs de l'ordre de 90% dans le milieu HCl 1M à une concentration de 10<sup>-3</sup>M. Les mesures d'impédance montrent que l'action de ces inhibiteurs sur la surface métallique se fait essentiellement par une adsorption conduisant à un effet protecteur par formation d'un film protecteur qui s'oppose à la dissolution du métal. Les analyses de MEB couplées par EDX ont confirmé la formation d'un film protecteur qui retarde la vitesse de corrosion d'acier doux. Les résultats expérimentaux obtenus à travers les différentes techniques confirment l'ordre d'efficacité obtenus théoriquement.

## Mots clés :

Corrosion, Inhibition, Acier doux, Imine, pyridazine, DFT, toxicité, QSAR/QSPR, Polarisation, impédance, UV-visible, MEB/EDX.



## CONTRIBUTION TO THE STUDY OF CORROSION INHIBITION OF MILD STEEL IN A MOLAR HYDROCHLORIC ACID MEDIUM BY PYRIDAZINE AND IMINE BASED COMPOUNDS: QUANTUM APPROACH, STATISTICAL MODELING AND EXPERIMENTAL STUDY

### Abstract:

Nowadays, the study of corrosion has taken a considerable importance due to the increasing use of metals and alloys in modern life. Indeed, corrosion inhibition has become a real economic, safety and scientific issue. The use of organic corrosion inhibitors is a valuable tool to prevent this problem because of their high efficiency even at low concentrations, and for eco-toxicity reasons.

The objective of this thesis is to evaluate the performance of two classes of organic compounds based on pyridazine and imine as corrosion inhibitors for mild steel in 1M HCl acid medium.

First, we predicted the *in silico* toxicity of the synthesized compounds using an online database, and confirmed their stabilities in acidic media before evaluating their anticorrosive activities.

Afterwards, we theoretically predicted the order of effectiveness using the methods: DFT at the B3LYP level and dynamic simulation by the Monte Carlo method in the presence of water molecules for the two series of molecules.

Then, we collected the findings of different literature studies in order to statistically model the inhibitory effect of the imine based molecules using the QSAR/QSPR method.

The evaluation of the protective effect of these products was carried out through the absorbance difference method, electrochemical techniques (stationary and transient), UV-visible as well as surface analysis (SEM-EDX). Thus, we have shown that these synthesized products can be classified as good corrosion inhibitors in an acidic environment. The results reveal that the inhibitory efficiencies for the studied inhibitors reach values in the order of 90% in 1M HCl medium at a concentration of 10<sup>-3</sup>M. Impedance measurements show that the action of these inhibitors on the metal surface is essentially by adsorption leading to a protective effect by forming a protective film that opposes the dissolution of the metal. SEM analysis coupled with EDX confirmed the formation of a protective film that delays the corrosion rate of mild steel. The experimental results obtained through the different techniques confirm the order of effectiveness obtained theoretically.

### Key Words :

Corrosion, Inhibition, mild steel, Imine, pyridazine, DFT, toxicity, QSAR/QSPR, Polarization, impedance, UV-visible, MEB/EDX.