



## AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mme (elle) **ACHNINE Noura**  
Soutiendra : le **Samedi 29/06/2024 à 10H00**  
Lieu : **FSDM – Département de Géologie**

Une thèse intitulée :

**« Confrontation des techniques électrochimiques destructives et non destructives et approches théoriques dans l'appréhension du processus d'inhibition de la corrosion d'aciers doux en milieux acides par un dérivé de la pyridazine : avantages et limitations »**

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 OUAMMOU Abdelkrim	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Président
Pr BEN ALLAL Laïla	Faculté des Sciences et Techniques, Tanger	PES	Rapporteur & Examineur
Pr AMMARI Mohammed	Faculté des Sciences et Techniques, Tanger	PES	Rapporteur & Examineur
Pr TOUIMI BENJELLOUN Adil	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr LAKBAIBI Zouhair	Faculté polydisciplinaire , Safi	MCH	Examineur
Pr BENZAKOUR Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr MCHARFI Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr EL HALLAOUI Mennana	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr SFAIRA Mouhcine	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse



## Résumé :

Les travaux de recherche menés, dans le cadre de la présente thèse, ont débuté par la synthèse de la 6-chloro-2-phénylimidazo[1,2-b]pyridazine. Parmi les différentes méthodes décrites dans la littérature, la condensation du 2-aminopyridazine et des  $\alpha$ -halocétones au reflux de l'éthanol reste la plus couramment utilisée. D'autres voies d'accès, ont également été décrites, mais elles restent rudimentaires. Ainsi, la condensation du 2-amino-6-chloropyridazine et l' $\alpha$ -bromoacétophénone au reflux de l'éthanol en présence d'hydrogénocarbonate de sodium conduit à la 6-chloro-2-phénylimidazo[1,2-b]pyridazine avec un très bon rendement de 89%.

Dans un second volet, nous avons testé le pouvoir inhibiteur de ce composé contre la corrosion d'acier doux (le XC38) en milieu chlorhydrique molaire. Pour ce faire, plusieurs techniques telles que les techniques DC {la potentio-polarisation (PP), la résistance de polarisation linéaire (LPR)} les techniques AC {la micro-polarisation sinusoïdale à amplitude constante (CASP) et la micro-polarisation sinusoïdale à amplitude variable (VASP)...} ont été envisagées pour la compréhension et l'analyse du comportement de la corrosion de cet acier. Les paramètres électrochimiques caractérisant l'interface tels que le potentiel de corrosion,  $E_{corr}$ , le courant de corrosion,  $I_{corr}$ , La résistance de polarisation  $R_p$ , les constantes de Tafel  $ba$  (coefficient anodique) et  $bc$  (coefficient cathodique) pour les réactions anodiques et cathodiques, respectivement, ont été estimés à l'aide de ces mesures.

L'utilité et les limites des diverses techniques de polarisation électrochimique en courant continu {LPR et PP} pour étudier la corrosion en présence des inhibiteurs sont aussi discutées. En outre, contrairement à la majorité des travaux de la littérature, nous avons oeuvré à mettre en exergue les avantages aussi bien que les inconvénients de la SIE à l'instar de la confrontation des différentes représentations graphiques des données de la SIE à travers les méthodes d'analyse qualitative et quantitative. Aussi, les différentes ambiguïtés liées au développement de modèles physico-chimiques CEE qui peuvent conduire à des conclusions erronées, ont fait l'objet d'une discussion exhaustive.

Notre objectif est de fournir les outils nécessaires à une analyse plus sophistiquée des données issues des différentes techniques {LPR, VAS $\mu$ P, CAS $\mu$ P, TP, SIE} afin de permettre aux chercheurs de tirer pleinement profit des informations pouvant être extraites dédites techniques.

Dans la troisième partie, des calculs théoriques par le biais de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), la théorie des orbitales de liaison naturelles (NBO), la théorie quantique atomique dans les molécules (QTAIM) et la méthode de simulation de la dynamique moléculaire (MD) ont été raisonnablement réalisés pour mieux comprendre le mécanisme d'adsorption des molécules inhibitrices à la surface de l'acier.

**Mots clé :** LPR, TP, SIE, VASP, CASP, QTAIM, GDET, NBO



## Comparison of destructive and non-destructive electrochemical techniques and theoretical approaches to understanding the process of corrosion inhibition of mild steels in acid media by a pyridazine derivative: advantages and limitations.

### Abstract

The research work carried out as part of this thesis began with the synthesis of 6-chloro-2-phenylimidazo[1'2-b]pyridazine. Of the various methods described in the literature, condensation of 2-aminopyridazine and  $\alpha$ -haloketones under refluxing ethanol remains the most commonly used. Other routes have also been described, but they remain rudimentary. Condensation of 2-amino-6-chloropyridazine and  $\alpha$ -bromoacetophenone under refluxing ethanol in the presence of sodium hydrogen carbonate leads to 6-chloro-2-phenylimidazo[1'2-b]pyridazine in 89% yield.

Secondly, we tested the inhibiting power of this compound against the corrosion of mild steel (XC38) in a molar hydrochloric environment. To this end, several techniques such as DC techniques {potentio-polarisation (PP), linear polarisation resistance (LPR)} and AC techniques {constant amplitude sinusoidal micro-polarisation (CASP) and variable amplitude sinusoidal micro-polarisation (VASP)} were considered to understand and analyse the corrosion behaviour of this steel. The electrochemical parameters characterising the interface, such as the corrosion potential,  $E_{corr}$ , the corrosion current,  $I_{corr}$ , the polarisation resistance  $R_p$ , the Tafel constants  $b_a$  (anodic coefficient) and  $b_c$  (cathodic coefficient) for the anodic and cathodic reactions, respectively, were estimated using these measurements.

The usefulness and limitations of the various DC electrochemical polarisation techniques {LPR and PP} for studying corrosion in the presence of inhibitors are also discussed. In addition, unlike the majority of works in the literature, we have endeavoured to highlight the advantages as well as the disadvantages of EIS by comparing the various graphical representations of EIS data using qualitative and quantitative analysis methods. The various ambiguities associated with the development of EEC physico-chemical models, which can lead to erroneous conclusions, were also discussed in detail.

Our aim is to provide the tools needed for a more sophisticated analysis of the data from the various techniques {LPR, VAS $\mu$ P, CAS $\mu$ P, TP, SIE} in order to enable researchers to take full advantage of the information that can be extracted from these techniques.

In the third part, theoretical calculations using Density Functional Theory (DFT), Natural Bond Orbital Theory (NBO), Quantum Atomic Theory in Molecules (QTAIM) and Molecular Dynamics (MD) simulation methods were reasonably carried out to gain a better understanding of the adsorption mechanism of inhibitor molecules on the steel surface.

**Keywords :** LPR, TP, SIE, VASP, CASP, QTAIM, GDET, NBO