

UNIVERSITE SIDI MOHAMED BEN ABDELLAH
FACULTE DES SCIENCES DHAR EL MAHRAZ
FES



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

M^{me(elle)} : **EL ARROUJI Siham**

Soutiendra : **le samedi 23/12/2017** à **10H** **Lieu** : Centre de Conférences

une thèse intitulée :

Effet Inhibiteur des Nouveaux Composés Dérivés de Pyrazole sur la Corrosion de L'acier doux dans un milieu HCI IM : Etude Expérimentale, Approche Théorique et Etude QSAR

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. RAIS Zakia	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Co-Directeur de thèse	Pr. TALEB Mustapha	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Rapporteurs	Pr. OUDDA Hassan	PES	Faculté des Sciences - Kénitra
	Pr. SEFFAJ Taoufiq	PES	Faculté des sciences et Technique - Fès
	Pr. SFAIRA Mouhcine	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Membres	Pr. BAZZI Lahcen	PES	Faculté des Sciences - Agadir
	Pr. LAHBABI Noura	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr. EL BIACHE Abdelmoula	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès

Résumé :

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés d'inhibition des dérivés de Pyrazole contre la corrosion de l'acier doux dans HCl 1M, en utilisant la technique de perte de poids, les courbes de polarisation potentiodynamique et la spectroscopie d'impédance électrochimique. Les résultats expérimentaux montrent que l'inhibition augmente avec la concentration et peut atteindre une valeur limite de 97% pour l'inhibiteur DPA à 10^{-3} M. Les courbes de polarisation montrent que les dérivés de Pyrazole sont de type mixte. Les données obtenues par spectroscopie d'impédance électrochimique ont été analysées pour être modélisées par des modèles de circuits équivalents appropriés. L'augmentation de la température peut avoir une diminution de l'efficacité d'inhibition des composés de Pyrazole. En outre, l'inhibiteur obéit à l'isotherme d'adsorption monocouche de Langmuir et la valeur correspondante de l'énergie d'adsorption (ΔG_0^0) est associée aux mécanismes de physisorption et de chimisorption. La microscopie électronique à balayage (MEB) et les analyses EDX ont été effectuées pour caractériser la composition chimique du film inhibiteur formé sur la surface de l'acier. Les études sur les surfaces ont montré que la couche inhibitrice est constituée d'un mélange oxyde de fer / hydroxyde dans lequel les atomes de N, F sont incorporés.

Les études théoriques ont été entreprises pour fournir un aperçu mécaniste des rôles des différents substituants sur l'inhibition de la corrosion et le comportement d'adsorption des composés étudiés. Les paramètres chimiques quantiques calculés comprennent les énergies HOMO et LUMO, le moment dipolaire, etc. Les propriétés moléculaires calculées ont été comparées entre les structures des sept composés afin d'identifier les tendances liées à leur réactivité et à leur capacité d'inhibition de la corrosion. Ces résultats ont montré un bon accord entre les études expérimentaux et les descripteurs moléculaires. En outre, la relation structure-activité (QSAR) a été développée afin de déterminer une éventuelle corrélation entre les descripteurs moléculaires et le pouvoir inhibiteur.

Mots clés :

Acier doux, Pyrazole, inhibiteur mixte, MEB, Langmuir, étude quantique, QSAR

INHIBITOR EFFECT OF NEW PYRAZOLE DERIVATIVE COMPOUNDS OF CORROSION OF MILD STEEL IN 1M HCL: EXPERIMENTAL STUDY, THEORETICAL APPROACH AND QSAR STUDY

Abstract :

In this work, we studied the inhibition properties of Pyrazole derivatives against the corrosion of mild steel in 1M HCl, using the weight loss technique, potentiodynamic polarization curves and electrochemical impedance spectroscopy. The experimental results show that the inhibition increases with the concentration and can reach a limit value of 97% for the inhibitor DPA at 10^{-3} M. The polarization curves show that the Pyrazole derivatives were a mixed-type inhibitor. The data obtained by electrochemical impedance spectroscopy were analyzed to be modeled by appropriate equivalent circuit models. The increase in temperature may have a decrease in the inhibition efficiency of the Pyrazole compounds. Moreover, the inhibitor obeys the Langmuir monolayer adsorption isotherm and the corresponding value of the adsorption energy (ΔG_{ads}^0) is associated with the mechanisms of physisorption and chemisorption. Scanning electron microscopy (SEM) and EDX analyzes were performed to characterize the chemical composition of the inhibitor film formed on the surface of the steel. Surface studies have shown that the inhibitory layer consists of an iron oxide / hydroxide mixture in which the N, F atoms are incorporated.

Theoretical studies were undertaken to provide a mechanistic insight into the roles of the different substituents on corrosion inhibition and the adsorption behavior of the compounds studied. The calculated quantum chemical parameters include the HOMO and LUMO energies, the dipole moment, etc...The calculated molecular properties were compared between the structures of the seven compounds to identify trends related to their reactivity and corrosion inhibitory capacity. These results showed a good agreement between the experimental studies and the molecular descriptors. Furthermore, the structure-activity relationship (QSAR) was developed in order to determine a possible correlation between the molecular descriptors and the inhibitory power.

Key Words:

Mild steel, Pyrazole, Inhibitor mixte, Langmuir, MEB, Quantique study, QSAR