

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<sup>me(elle)</sup> : ISMAILY ALAOUI Kkadija

Soutiendra : le 13/01/2018 à 10H Lieu : Salle réunion Géologie

**une thèse intitulée :**

**Approche expérimentale et théorique de l'inhibition de la corrosion d'un acier doux en milieu acide chlorhydrique molaire par des composés organiques à base des noyaux azolés : imidazole, pyrazole et thiazole**

**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
<b>Président</b>	Pr. RAIS Zakia	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
<b>Directeur de thèse</b>	Pr. TALEB Mustapha	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
<b>Rapporteurs</b>	Pr. BENTISS Fouad	PES	Faculté des Sciences - El Jadida
	Pr. SFAIRA Mouhcine	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr. MOURAD Youssef	PES	Ecole Supérieure de Technologie - Fès
<b>Membres</b>	Pr. AOUNITI Abdelouahad	PES	Faculté des Sciences - Oujda
	Pr. MCHARFI Mohammed	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr. BELKHEIR Hammouti	PES	Faculté des Sciences - Oujda
	Pr. CHETOUANI Ahmed	PH	Centre régional des métiers et de l'éducation nationale et de formation - Oujda
	Pr. ZARROUK Abdelkadar	PH	Faculté des Sciences - Oujda

## Résumé :

L'utilisation des composés organiques comme inhibiteurs de la corrosion acide de l'acier éveille un intérêt considérable de recherche et constitue un outil de choix pour lutter contre ce phénomène, les performances souhaitées de ces composés s'évaluent en termes de leurs efficacités inhibitrices, leurs faibles coûts et leurs faibles impacts sur l'environnement. Les travaux menés dans cette thèse ont eu pour objectif l'investigation de pouvoir protecteur de trois séries distinctes de composés organiques contenant les noyaux azolés (imidazole, pyrazole et thiazole) vis-à-vis la corrosion d'un acier doux en milieu acide chlorhydrique molaire, au-delà de cet objectif, nous envisageons à travers cette étude apporter une contribution significative à l'explication de mécanisme d'inhibition des composés étudiés.

Pour répondre à ces objectifs, nous avons entrepris une étude expérimentale moyennant les méthodes électrochimiques stationnaires et transitoire, la méthode gravimétrique et l'analyse de surface couplée à une approche quantique permettant d'appréhender le processus d'inhibition tout en exploitant le calcul des descripteurs intrinsèques des inhibiteurs étudiés, il convient de signaler que nous avons pris en considération la susceptibilité des molécules inhibitrices à subir une protonation en milieu acide, nous avons alors entrepris le calcul théorique au niveau DFT (B-3LYP)/ 6-31G (d, p) des molécules sous leurs différentes formes envisageables neutres et protonées.

Les mesures expérimentales montrent que les composés azolés étudiés sont dotés de bonnes propriétés inhibitrices, ces mesures permettent aussi d'avoir des renseignements sur la cinétique de la corrosion et de prévoir le mécanisme d'inhibition et la nature d'interaction des inhibiteurs avec la surface du métal. Par ailleurs, L'étude théorique effectuée au niveau DFT (B-3LYP)/6-31G (d,p) nous a permis entre autre d'établir une corrélation entre les descripteurs quantiques globaux de la réactivité et locaux de la sélectivité des molécules et leurs efficacités inhibitrice, les sites actifs responsables de l'inhibition ont été également déterminés.

**Mots clés :** Inhibiteurs de la corrosion, acier doux, dérivés azolés, Étude électrochimique, SIE, Théorie de la fonctionnelle de la densité, protonation, adsorption

## **Experimental and theoretical approach for corrosion inhibition of mild steel in molar hydrochloric acid medium by organic compounds based on azole rings: imidazole, pyrazole and thiazole.**

### **Abstract :**

The use of organic compounds as inhibitors of steel acidic corrosion arouses a considerable research interest which can be considered as a tool of choice to prevent corrosion, Performance of these compounds is evaluated in terms of their inhibition efficiencies, their low costs and low environmental impacts. The goal of the present thesis is to investigate the inhibitory effect of three series of organic compounds containing azole rings (imidazole, pyrazole and thiazole) on the corrosion of mild steel in molar hydrochloric acid solution, toward this study we aim to make a significant contribution to the understanding of mechanism inhibition of studied compounds.

To achieve these objectives, an experimental study was undertaken using traditional electrochemical techniques (stationary and transient), gravimetric method and surface analysis. For best understanding of the corrosion inhibition process, a quantum chemical approach based on the intrinsic properties of compounds under study was adopted, it should be noted that we are taking into account the susceptibility of inhibitors protonation in acidic media, we are so undertaken the theoretical calculation for the neutral and protonated forms using Density Functional theory DFT at (B-3LYP)/ 6-31G (d, p) level.

Experimental measurements show that azole derivatives investigated reveal excellent inhibition properties, by using these measurements we can provide significant information on kinetic of corrosion process, also the inhibition mechanism and the interaction type between steel surface and inhibitors can be predicted. Moreover, the theoretical study at DFT (B-3LYP)/ 6-31G (d, p) level allows as establishing correlation between inhibition efficiency and global as well as local quantum chemical descriptors, the active sites responsible for the inhibition were also determined.

### **Key Words:**

Corrosion inhibitors, Mild steel, Azole derivatives, Electrochemical study, Density functional theory DFT , protonation, adsorption.

