

**Nom et Prénom : BENALLAL ALLAL**  
**Date de soutenance : 09/11/2024**  
**Directeur de Thèse : ERRAMLI HAMID**

**Sujet de thèse :**

**Contribution à l'étude expérimentale et théorique de l'effet d'inhibition de la corrosion de l'acier ordinaire dans HCL 1M par des dérivés de quinoxalinone**

**Résumé:**

Ce travail s'intéresse à l'étude des effets inhibiteurs de nouveaux composés organiques à base de quinoxalinone, noté Q3 et Q4 sur la corrosion de l'acier ordinaire dans HCl 1M. Cette étude a été réalisée par des mesures gravimétriques, des méthodes électrochimiques, méthodes spectroscopiques d'analyses UV-visible et la microscopie électronique à balayage MEB couplée à l'EDX. Le tracé des courbes des polarisations a montré que les inhibiteurs étudiés à base de quinoxalinone qui ont manifesté un caractère des inhibiteurs du type mixte. De plus les résultats expérimentaux ont montré que Q3 et Q4 sont les meilleurs inhibiteurs testés. Où, L'efficacité inhibitrice atteint un maximum de 96,4 % et 95,7 % à 10-3 M en Q3 et Q4, respectivement. Nous avons montré aussi ces inhibiteurs sont adsorbés à la surface du substrat selon l'isotherme d'adsorption de Langmuir et agissent par adsorption chimique. L'analyse de la surface par MEB révèle une couche adhérente et stable sur la surface de l'acier. Par ailleurs, une étude théorique utilisant les méthodes DFT et la simulation dynamique moléculaire ont été effectuées afin d'appréhender le processus de l'inhibition de la corrosion par l'exploitation des calculs des propriétés intrinsèques structurales et électroniques des molécules étudiées, ainsi que les sites actifs responsables à la protection. Mots clés : Inhibition de la corrosion. Acier ordinaire; dérivés de quinoxalinone ; mesures électrochimiques; Analyses spectroscopiques ; DFT, simulation par dynamique moléculaire.

**Abstract:**

In this work, the effect of new organic compounds based on quinoxalinone derivatives, noted Q3 and Q4 on mild steel corrosion in 1M HCl medium. This study was carried out by using gravimetric technic, electrochemical measurement, UV-visible and SEM/EDX analysis. The potentiodynamic polarization study showed that the studied quinazolinone inhibitors act as cathodic inhibitors, while quinoxaline derivatives act as mixed-type inhibitors. In addition, the experimental results showed that Q3 and Q4 are the best inhibitors of the two tested series of quinoxalinone. It is obtained that, the inhibitory efficiency reaches a maximum of 96,4 % and 95,7 % at 10-3 M of Q3 and Q4, respectively. However, the tested compounds adsorb on the mild steel surface according to the Langmuir adsorption isotherm and act via chemical adsorption. On the other hand, a theoretical study using the DFT calculations at the B3LYP / 6-31G (d, p) level and molecular dynamic simulation were carried out in order to understand the corrosion process by exploiting the intrinsic structural and electronics properties calculations of the studied molecules, as well as the active sites responsible for inhibition.. Keywords: Corrosion inhibition; Mild steel; Acidic medium; Quinoxalinone derivatives; Electrochemical measurements; Spectroscopic analysis; DFT calculations; Molecular dynamic simulation.