

Résumé de thèse en français :

Les additifs sont des mélanges complexes de substances chimiques utilisés en petite quantité pour améliorer la production, ou prévenir des problèmes (corrosion des infrastructures, formation d'émulsions, dépôts de cire, etc.). Ces produits sont mal connus des industriels qui les utilisent car les compositions sont gardées secrètes par les fournisseurs, et les méthodes de suivi usuellement employées sont peu sensibles et souvent non spécifiques. L'objectif de la thèse est d'améliorer la connaissance de l'une de ces familles d'additifs, les inhibiteurs de corrosion, et de développer une approche UHPLC-HRMS permettant leur analyse dans des eaux de production.

Dans un premier temps, une méthode UHPLC-HRMS a été développée. Un criblage de colonnes a été mené sur 8 colonnes de chromatographie en phase inverse, afin de trouver celle qui permettrait la meilleure séparation de molécules modèles représentatives de celles retrouvées dans les additifs commerciaux. Pour réaliser cette comparaison multicritère, les fonctions de désirabilité de Derringer ont été utilisées. Dans un second temps, trois additifs commerciaux ont été analysés en HRMS (Orbitrap) et en spectrométrie de masse en tandem. La haute résolution, ainsi que l'étude des mécanismes de fragmentation des ions, ont permis l'élucidation des structures des molécules majoritairement présentes dans les mélanges commerciaux. Ensuite, la méthode UHPLC-HRMS développée a été appliquée pour l'analyse des inhibiteurs de corrosion précédemment étudiés, dans de l'eau pure et dans des eaux de production. Enfin, il a été observé que ces additifs peuvent s'adsorber sur de nombreuses surfaces, incluant le verre des flacons utilisés pour l'injection en chromatographie. La méthode développée a donc été mise en œuvre pour mieux comprendre les phénomènes d'adsorption des inhibiteurs de corrosion à l'aide notamment de plans d'expériences, et ainsi mieux maîtriser leur quantification.