

معرفی دو ماده نو ترکیب پایه تiazول برای بازدارندگی خوردگی فولاد ساده ی کربنی

سیاوش مظفری نژاد^{۱*}، مهلا طالاری^۱، علی داودی^۲

چکیده

بازدارندگی خوردگی دو ماده به نام های شیمیایی 2-methyl- و Thiazole-4-carboxylic acid (TCA) 1,3- thiazole-4-carboxylic acid (MTCA) بر روی فولاد ساده ی کربنی در محلول ۰,۱ مولار HCl در دمای 25 °C توسط اندازه گیری های الکتروشیمیایی EIS و Potentiodynamic بررسی شد. آزمایش ها نشانگر درصد بازدهی به ترتیب در غلظت ۱۰۰ ppm MTCA و TCA برابر ۹۱,۲۶٪ و ۸۹,۶۳٪ بود. مکانیزم ممانعت کنندگی با محاسبات شیمی کوانتوم DFT و شبیه سازی آماری مونت کارلو بررسی شد. شبیه سازی مونت کارلو به منظور تحقیق پایدارترین حالت جذب بازدارنده و محاسبه ی انرژی جذب برای واکنش بین بازدارنده و سطح آهن اعمال گشت. با توجه به نتایج محاسبات نظری، MTCA ممانعت کننده ی مناسب تری نسبت به TCA پیش بینی شد که با داده های بدست آمده از نتایج تجربی نیز تطابق داشت.

واژه های کلیدی: خوردگی اسیدی، بازدارنده های خوردگی، شبیه سازی مونت کارلو، کاربرد روش DFT

^۱ دانشجوی کارشناسی مهندسی مواد، دانشگاه فردوسی مشهد، دانشکده مهندسی، دپارتمان مهندسی مواد

^۲ دانشیار مهندسی مواد-خوردگی، دانشگاه فردوسی مشهد، دانشکده مهندسی، دپارتمان مهندسی مواد

*E-mail: siavoshmozafary@gmail.com

مقدمه

اعمال بازدارنده های آلی به منظور کنترل انحلال فلز روشی مرسوم در کنترل خوردگی فلزات می باشد. ترکیبات با حلقه های heterocyclic حاوی اتم های نیتروژن، گوگرد، اکسیژن و پیوند Π ، با تشکیل یک لایه بر سطح فلز از خوردگی آن جلوگیری می کنند [۱، ۲]. مکانیزم واکنش بین مولکول های بازدارنده و سطح فلز توسط محاسبات شیمی کوانتوم مطالعه شد و در این خصوص ارتباط بین ساختار مولکولی و خصوصیات ممانعت کنندگی بازدارنده ها به دست آمده است. شبیه سازی به روش مونت کالو، موقعیت ملکول های آلی جذب شده بر