

研究论文

1-(2-羟乙基)-2-烷基-咪唑啉缓蚀剂缓蚀机理的理论研究

张 军<sup>a</sup> 胡松青<sup>a</sup> 王 勇<sup>\*,b</sup> 郭文跃<sup>\*,a</sup> 刘金祥<sup>a</sup> 尤 龙<sup>a</sup>

(<sup>a</sup>中国石油大学物理科学与技术学院 东营 257061)

(<sup>b</sup>中国石油大学机电工程学院 东营 257061)

收稿日期 2008-4-24 修回日期 2008-6-26 网络版发布日期 2008-11-28 接受日期 2008-7-28

摘要

采用量子化学计算、分子动力学模拟和分子力学相结合的方法,对6种不同烷基链长的1-(2-羟乙基)-2-烷基-咪唑啉缓蚀剂抑制H<sub>2</sub>S腐蚀的缓蚀机理进行研究,并对其缓蚀性能进行评价.前线轨道分布和Fukui指数表明,6种缓蚀剂分子的反应活性区域均集中在分子的咪唑环上,3个反应活性中心分别位于咪唑环上的N(4),N(7)和C(8)原子,可使咪唑环在金属表面形成多中心吸附.分子的反应活性及活性区域分布对烷基链长并不敏感.单分子吸附能、膜的内聚能、吸附角和链间距的计算数据显示,缓蚀剂膜的稳定性以及膜与金属基体的结合强度随链长的增加而增大;当正构烷基碳链长度大于13时,缓蚀剂可在金属表面形成一层高覆盖度、致密的疏水膜,能有效阻碍溶液中的腐蚀介质向金属表面扩散,从而达到阻碍或延缓腐蚀的目的.

关键词 [咪唑啉](#) [缓蚀机理](#) [量子化学计算](#) [分子动力学模拟](#) [分子力学](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

郭文跃 [wgyuo@hdpu.edu.cn](mailto:wgyuo@hdpu.edu.cn)

作者个人主页:

张 军<sup>a</sup> 胡松青<sup>a</sup> 王 勇<sup>\*,b</sup> 郭文跃<sup>\*,a</sup> 刘金祥<sup>a</sup> 尤 龙<sup>a</sup>

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#)(442KB)

▶ [\[HTML全文\]](#)(0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“咪唑啉”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [张 军<sup>a</sup> 胡松青<sup>a</sup> 王 勇<sup>\\*,b</sup> 郭文跃<sup>\\*,a</sup> 刘金祥<sup>a</sup> 尤 龙<sup>a</sup>](#)