

## 苯并咪唑类缓蚀剂缓蚀性能的理论评价

张军; 赵卫民; 郭文跃; 王勇; 李中谱

中国石油大学物理科学与技术学院, 山东 东营 257061; 中国石油大学机电工程学院, 山东 东营 257061

### 摘要:

采用量子化学计算和分子动力学模拟相结合的方法,对2-巯基苯并咪唑(A)、2-氨基苯并咪唑(B)、2-甲基苯并咪唑(C)和苯并咪唑(D)等四种缓蚀剂抑制HCl对碳钢腐蚀的性能进行理论评价,并对其缓蚀机理进行分析.全局活性指数的计算表明,四种分子中,2-巯基苯并咪唑分子具有最强的反应活性;对于其他三种分子,Fukui指数和全电子密度分布指出,2-氨基苯并咪唑具有两个亲电攻击中心,可在金属表面形成双中心吸附,其缓蚀性能应优于2-甲基苯并咪唑和苯并咪唑;缓蚀剂分子与三层铁原子表面相互作用的分子动力学模拟进一步确认2-甲基苯并咪唑比苯并咪唑在金属表面吸附更稳定.综合量子化学计算和分子动力学模拟的计算结果,四种缓蚀剂分子缓蚀效率的顺序应为A>B>C>D,缓蚀性能的理论评价结论与实验结果相吻合.

关键词: 苯并咪唑 缓蚀剂 理论评价 量子化学计算 分子动力学模拟

收稿日期 2008-01-16 修回日期 2008-03-25 网络版发布日期 2008-05-07

通讯作者: 郭文跃; 王勇 Email: wyguo@hdpu.edu.cn; wangyong@hdpu.edu.cn

### 本刊中的类似文章

1. 杨锐;何水祥;顾爱萍;文振翼;林翔;文辉忠. 铜三元配合物的合成、热稳定性及生物活性[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 610-615
2. 吴一天;刘鸣华.2-烷基-苯并咪唑在硝酸银亚相上的Langmuir膜及LB膜[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 449-453
3. 缪方明;樊志;周卫红;齐丽宁;李爱秀;刘小兰.三(2-苯并咪唑亚甲基)胺合锰的结构和量化计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(09): 775-782
4. 王娅娟;祁学永;李晓燕.双核Cu(I)配合物的热分解非等温动力学[J]. 物理化学学报, 1996,12(07): 668-672
5. 彭洪亮,于贤勇,易平贵,汪朝旭,李筱芳,王涛,周继明.2-(3-巯基-2-吡啶基)苯并咪唑分子内质子转移及溶剂化效应[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 141-148

扩展功能

本文信息

PDF(1561KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 苯并咪唑

▶ 缓蚀剂

▶ 理论评价

▶ 量子化学计算

▶ 分子动力学模拟

本文作者相关文章

▶ 张军

▶ 赵卫民

▶ 郭文跃

▶ 王勇

▶ 李中谱