

doi: 10.3969/j.issn.1001-3849.2024.07.008

N,N'-亚甲基双丙烯酰胺与 OP-10 对 Q235 钢在 1 mol/L HCl 中的缓蚀作用

樊林^{1,2}, 王鹏杰^{1,2*}, 宋昱灏^{1,2}, 刘婉颖², 梅宗斌³, 林元华^{1,2,3*}

(1. 西南石油大学 油气藏地质及开发工程国家重点实验室, 四川 成都 610500; 2. 西南石油大学 新能源与材料学院, 四川 成都 610500; 3. 华宇钻采装备有限公司, 四川 泸州 646000)

摘要: 针对在酸洗工况下金属的腐蚀问题,为解决单一缓蚀剂的成本高、效率低的问题,在 N,N'-亚甲基双丙烯酰胺(NN)的最佳缓蚀浓度基础上将其与 OP-10 复配(N&P),采取失重实验、电化学实验、表面分析和理论模拟的方法,研究了 NN 和 N&P 缓蚀剂对 Q235 钢在 1.0 mol/L HCl 溶液中的缓蚀性能。结果表明:在 30 °C 条件下,NN 的交流阻抗谱、动电位极化曲线和失重实验所得的最佳缓蚀率分别为 73.32%、85.57%、77.46%,而将 NN 与 OP-10 复配后的缓蚀效率分别提升至 92.34%、96.26%、90.14%。量子化学表明:N&P 吸附位点主要为 OP-10 分子中的大 π 键和 C-O 键以及 NN 分子中的 C=O 键、C=C 键、C-N 键,具有较好的协同效应。

关键词: N,N'-亚甲基双丙烯酰胺; OP-10; 电化学; 失重实验; 缓蚀性能; 量子化学

Corrosion inhibition of N, N'-methylene bisacrylamide and OP-10 on Q235 steel in 1 mol/L HCl

Fan Lin^{1,2}, Wang Pengjie^{1,2*}, Song Yuhao^{1,2}, Liu Wanying²,
Mei Zongbin³, Lin Yuanhua^{1,2,3*}

(1. State Key Laboratory of Oil and Gas Reservoir Geology and Development Engineering, Southwest Petroleum University, Chengdu 610500, China; 2. School of New Energy and Materials, Southwest Petroleum University, Chengdu 610500, China; 3. Huayu Drilling and Production Equipment Co., Ltd., Luzhou 646000, China)

Abstract: In order to solve the problem of high cost and low efficiency of a single corrosion inhibitor, N,N'-methylene diacrylamide (NN) was combined with OP-10 (N&P) on the basis of the optimal corrosion inhibition concentration, weight loss experiment, electrochemical experiment, surface analysis and theoretical simulation were adopted. The corrosion inhibition properties of NN and N&P on Q235 steel in 1.0 mol/L HCl solution were studied. The results show that at 30 °C, the optimal corrosion inhibition rates obtained by AC impedance spectrum, potentiodynamic polarization curve and weight loss experiment are 73.32%, 85.57% and 77.46%, respectively, while the corrosion inhibition efficiency of NN combined with OP-10 is increased to 92.34%, 96.26% and 90.14%, respectively. Quantum chemistry shows that the adsorption sites of N&P are mainly the big π bond and C-O bond in OP-10 molecule and the C=O bond, C=C bond and C-N bond in NN molecule, and N&P has a good synergis-

收稿日期: 2023-11-21

修回日期: 2023-12-03

作者简介: 樊林(1999—),男,硕士生,从事缓蚀剂的合成与评价, email: 2873274096@qq.com

*通信作者: 林元华, email: yhlin28@163.com; 王鹏杰, e-mail: pjwang15@163.com

基金项目: 国家自然科学基金(52074232); 四川省自然科学基金(2022NSFSC0028)

tic effect.

Keywords: N, N'-methylene bisacrylamide; OP-10; electrochemistry; weight loss experiment; corrosion inhibition performance; quantum chemistry

Q235钢常应用于锅炉、管道、汽车、船舶、建筑等行业^[1],但由于Q235钢服役环境的原因,其表面会产生大量腐蚀产物,吸附各种污垢,故须定期对Q235钢进行酸洗工作。但用酸洗技术去除碳钢表面的铁锈时会对Q235钢造成腐蚀。酸洗过程中对Q235的保护措施有多种,如:等离子喷涂、电镀等方法,其中最为经济实用的方法为添加缓蚀剂。

表面活性剂的结构较为特殊,同时具有憎水和亲水基团,可作为一种特殊的缓蚀剂。刘建祥等^[2]对吐温-80进行缓蚀研究,结果表明,吐温-80在磷酸溶液中属于阴极缓蚀剂,随着浓度增加,缓蚀效果增加。赵宏艳等^[3-4]对酰胺类缓蚀剂研究发现,酰胺基团可与Fe形成配位键,亲水基团吸附在铁表面,憎水基则背向基体形成一层疏水保护层,从而减缓腐蚀。李永红等^[5]发现由于OP-10分子极性弱,单独使用效果不佳,但将其作为副剂使用,可提高整体缓蚀性能。

由于N, N'-亚甲基双丙烯酰胺含有2个C=C双键及2个酰胺基团,可作为一种优异的缓蚀剂,并且价格低、毒性低、化学性能稳定。因此,在获得最佳NN缓蚀浓度后,将其与OP-10进行复配,通过试验与理论相结合的方法深入探究了NN和N&P在1mol/L HCl中对Q235的缓蚀性能及缓蚀机理。

1 试验部分

试验材料为Q235钢,主要化学成分:C 0.17%、Mn 1.4%、Si 0.35%、S 0.035%、P 0.035%。失重和电化学试样的尺寸分别为10.0 mm×10.0 mm×2.0 mm和10.0 mm×10.0 mm×30.0 mm(工作面均为10.0 mm×10.0 mm)。

化学试剂:OP-10(C₁₈H₃₀O₃, AR)和NN(C₇H₁₀N₂O₂, AR)均购买于麦克林化学试剂,浓盐酸(37%)购买于四川成都西陇科学有限公司。

缓蚀溶液配置:将0.1 g、0.3 g、0.5 g NN分别加入1.00 mol/L HCl中,配制成0.1 g/L(N-1)、0.3 g/L(N-3)、0.5 g/L(N-5)的缓蚀溶液。在NN最佳缓蚀浓度的基础上加入0.1 g、0.2 g、0.3 g、0.4 g、

0.5 g的OP-10分别配置出0.1 g/L(N&P-1)、0.2 g/L(N&P-2)、0.3 g/L(N&P-3)、0.4 g/L(N&P-4)、0.5 g/L(N&P-5)缓蚀溶液。

失重实验:Q235钢的工作面使用200-2000#的金相砂纸打磨至光亮平整,非工作面用环氧树脂包裹。使用蒸馏水、无水乙醇和丙酮将工作面擦拭后烘干,使用FA2004分析天平精确称量并记录,把Q235钢放入上述配置的缓蚀溶液中,浸泡12.0 h,每组实验进行3次,以减小误差,浸泡完毕后使用除锈剂(主要成分为盐酸与六亚甲基四胺)去除表面的腐蚀产物并干燥,再次称重,腐蚀速率 V 和缓蚀效率 η 计算公式如下:

$$\eta = (V_0 - V) / V \quad (1)$$

$$V = \Delta m / (S \cdot t) \quad (2)$$

式中: Δm 为Q235钢浸泡前后的重量损失,mg; S 为Q235钢腐蚀面的表面积,cm²; t 为Q235钢的浸泡时长,h; V_0 为空白溶液的腐蚀速率; V 为缓蚀剂溶液的腐蚀速率^[6]。

电化学实验:电化学测试采用三电极体系在辰华CHI660e电化学工作站上进行测试,1 cm²的Pt电极作为辅助电极,饱和氯化银电极为参比电极,Q235钢为工作电极,温度为30℃。将三电极浸入缓蚀溶液中,进行1800 s的开路电位测试,直至整个腐蚀体系达到稳定。EIS参数:频率10⁻²~10⁵ Hz,振幅:±5 mV。Tafel的参数设置成扫描速度为1 mV/s,扫描范围为 $V_{ocp} \pm 250$ mV^[7]。

表面分析:将失重后的Q235钢表面进行SEM/EDS(Zeiss Evo 50 XVP model)和Thermo Fisher Scientific K-Alpha(USA)X射线光电子能谱分析。

理论计算:基于密度泛函理论(DFT)对OP-10和NN分子进行前线轨道理论分析,在Material studio 2017中的Dmol³模块中对NN、OP-10进行结构和能量优化。分子动力学在Forcite模块中进行,将Fe晶胞导入并建立110面,在建立超胞后,利用Adsorption Locator模块分别构建一个真空层并包含1个OP-10,1个NN和N&P的晶胞,再进行分子动力学优化。

2 结果与分析

2.1 电化学分析

图 1 为 Q235 钢在不同浓度 NN 和 N&P 溶液中的 Nyquist 图和等效电路图。由图 1 可知,随着 NN 和 N&P 浓度的增加, Nyquist 图沿实轴方向的电容弧半径也随之增加,但容抗弧不是一个标准的半圆,这可能是由于工作电极表面不均匀以及活性位点的分布不均匀引起的频率弥散效应^[8]。

ZsimpWin 软件将所有的原始数据进行拟合,等

效电路如图 1(c)所示,拟合后的数据列于表 1,电化学参数如下: R_s 为溶液电阻、 R_f 为膜电阻、 R_{ct} 为电荷转移阻抗、 CPE_f 为吸附膜容抗、 CPE_{dl} 为双电层容抗^[9]。 χ^2 为卡方,卡方值则表示拟合电路与 Q235 钢在缓蚀溶液中缓蚀机理的相似度,卡方值越小,说明其机理越相近或相似。缓蚀效率 η 和极化阻抗 R_p 计算公式如下:

$$\eta = 100 \times (R_p - R) / R_p \quad (3)$$

$$R_p = R_{ct} + R_f + R_s \quad (4)$$

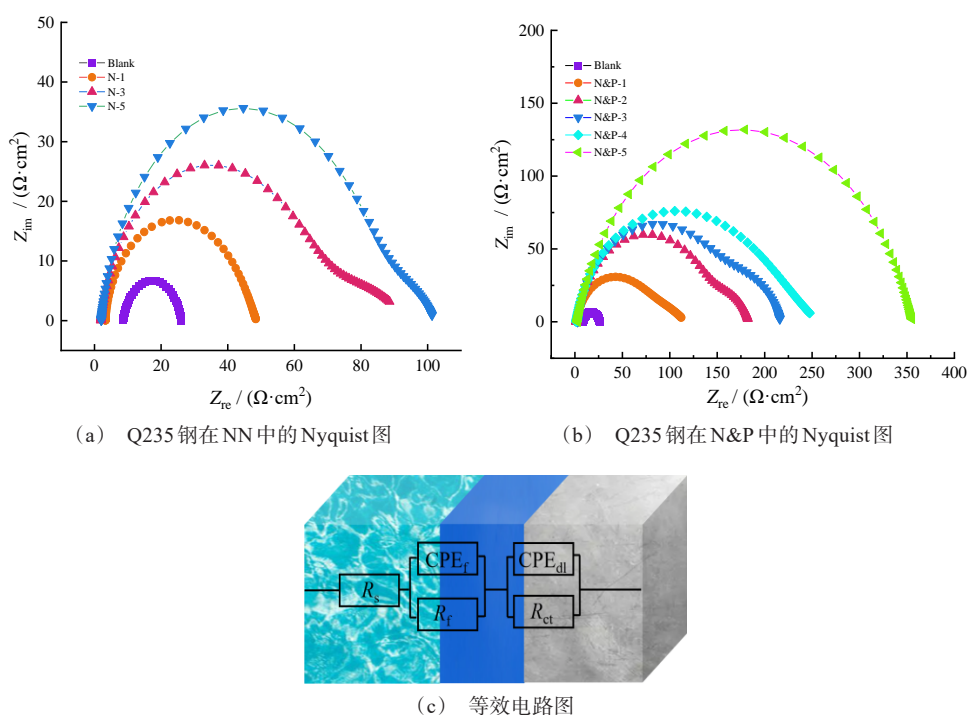


图 1 Q235 钢在不同溶液中 Nyquist 图及等效电路图

Fig.1 Nyquist diagrams of Q235 steel in different solutions and its equivalent circuit diagram

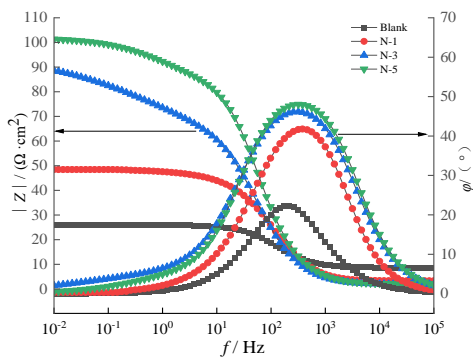
由表 1 可知,随着 NN 和 N&P 浓度的增加, R_s 数值变化不大,证明随缓蚀剂浓度增加,溶液电阻基本不受影响,而 $R_f + R_{ct}$ 的数值明显增大,说明随缓蚀剂浓度的增大,在 Q235 钢表面所形成的保护膜更加稳定,从而降低了腐蚀体系内电荷转移速率。N&P 的缓蚀效率明显高于 NN,说明复配后的缓蚀剂不仅可增加 R_f 也可以增加 R_{ct} ,从而提高整体缓蚀性能。 C_f 随着 NN 和 N&P 浓度的增加而逐渐减小,是由于 NN 与 N&P 分子的烷基链在 Fe 表面形成的疏水层取代了 Fe 表面的水分子而引起的^[10]。

图 2 为 Q235 钢在不同浓度 NN 和 N&P 溶液中的 Bode 图。可以看出, Bode 图的时间常数为 1,表明缓蚀剂在 Q235 钢表面形成的保护膜阻碍了电荷转移速率。同时低频区的模值随着缓蚀剂浓度的增加而增大,证明随着 NN 和 N&P 浓度的增加,其缓蚀效果逐渐提升。N-5 的模值为 $100 \Omega \cdot \text{cm}^2$,但 N&P-5 的模值达到了 $350 \Omega \cdot \text{cm}^2$,说明 OP-10 的加入大幅提高整体缓蚀性能。此外,由于缓蚀剂分子的吸附引起的弛豫现象,在中频区的相位角曲线倾向于变得更宽更高^[11]。

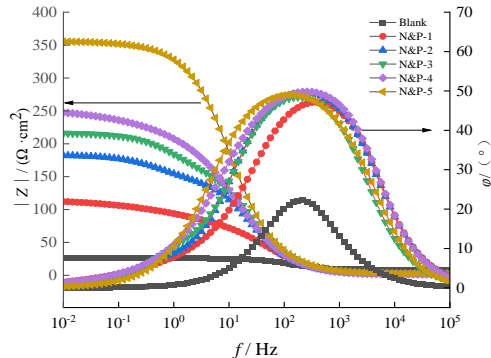
表1 Q235钢在不同浓度NN和N&P溶液中EIS参数

Tab. 1 EIS parameters of Q235 steel in NN and N&P solutions with different concentrations

| 缓蚀剂 | $R_s/(\Omega \cdot \text{cm}^2)$ | n_f | $\text{CPE}_f/(\text{F} \cdot \text{cm}^2)$ | $R_f/(\Omega \cdot \text{cm}^2)$ | n_{ret} | $\text{CPE}_{\text{dl}}/(\text{F} \cdot \text{cm}^2)$ | $R_{\text{ct}}/(\Omega \cdot \text{cm}^2)$ | χ^2 | $\eta/\%$ |
|-------|----------------------------------|-------|---------------------------------------------|----------------------------------|------------------|-------------------------------------------------------|--------------------------------------------|----------|-----------|
| 空白 | 8.590 | 0.99 | 20.22 | 1.48 | 0.81 | 30.37 | 17.14 | 0.001 | — |
| N-1 | 3.265 | 0.91 | 10.00 | 37.89 | 0.79 | 12.29 | 7.53 | 0.003 | 44.11 |
| N-3 | 1.887 | 0.89 | 12.61 | 59.78 | 0.40 | 48.20 | 32.32 | 0.004 | 71.04 |
| N-5 | 2.027 | 0.86 | 14.01 | 82.84 | 0.61 | 35.85 | 17.12 | 0.003 | 73.32 |
| N&P-1 | 1.625 | 0.86 | 14.63 | 64.03 | 0.43 | 42.94 | 42.03 | 0.005 | 74.73 |
| N&P-2 | 1.535 | 0.84 | 15.39 | 139.50 | 0.89 | 46.73 | 42.11 | 0.005 | 85.14 |
| N&P-3 | 2.662 | 0.85 | 15.80 | 148.20 | 0.87 | 62.50 | 65.79 | 0.006 | 87.44 |
| N&P-4 | 1.499 | 0.86 | 15.84 | 170.40 | 0.84 | 14.61 | 72.99 | 0.005 | 88.88 |
| N&P-5 | 2.753 | 0.89 | 15.95 | 323.40 | 0.78 | 19.36 | 29.52 | 0.005 | 92.34 |



(a) Q235钢在NN溶液中的Bode图



(b) Q235钢在N&P溶液中的Bode图

图2 Q235钢在不同浓度NN和N&P溶液中的Bode图

Fig. 2 Bode diagrams of Q235 steel in NN and N&P solutions of different concentrations

表2和图3为Q235钢在不同浓度NN和N&P中的Tafel曲线参数和Tafel曲线,表2中Tafel电化学参数有腐蚀电位(E_{corr})、腐蚀电流密度(I_{corr})、阳极斜率(β_a)、阴极斜率(β_c)、缓蚀效率(η),缓蚀效率计算公式如下:

$$\eta = (I_{\text{corr}}^0 - I_{\text{corr}}) / I_{\text{corr}}^0 \quad (5)$$

式中, η 为缓蚀效率, I_{corr}^0 为空白溶液的腐蚀电流密度, I_{corr} 为缓蚀溶液的腐蚀电流密度。

由图3可知,随着缓蚀剂浓度增加,阴极与阳极斜率均减小,说明缓蚀剂可在Q235钢表面吸附并形成保护膜,同时抑制阴极和阳极的反应,证明了NN、N&P均属于混合型缓蚀剂。由表2可知,缓蚀剂浓度增加,腐蚀电位变化不大,相关文献中得出其腐蚀作用机理为“几何覆盖效应”^[12]。同时随着NN浓度的增加,腐蚀电流密度由1.1750 mA/cm²降低为0.5108 mA/cm²,缓蚀效率由66.82%提升至85.57%。

表2 极化曲线参数及缓蚀效率

Tab. 2 Polarization curve parameters and corrosion inhibition efficiency

| 缓蚀剂 | E_{corr}/V | $I_{\text{corr}}/(\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2})$ | $\beta_c/(\text{mV} \cdot \text{dec}^{-1})$ | $\beta_a/(\text{mV} \cdot \text{dec}^{-1})$ | $\eta/\%$ |
|-------|----------------------------|----------------------------------------------------|---------------------------------------------|---------------------------------------------|-----------|
| 空白 | -0.478 | 3.5410 | 143.76 | 150.26 | — |
| N-1 | -0.475 | 1.1750 | 157.95 | 134.25 | 66.82 |
| N-3 | -0.479 | 0.7283 | 135.32 | 112.57 | 79.43 |
| N-5 | -0.478 | 0.5108 | 128.83 | 104.64 | 85.57 |
| N&P-1 | -0.468 | 0.3646 | 130.26 | 138.88 | 89.70 |
| N&P-2 | -0.474 | 0.2788 | 120.82 | 115.70 | 92.12 |
| N&P-3 | -0.461 | 0.1824 | 118.84 | 97.12 | 94.85 |
| N&P-4 | -0.464 | 0.1688 | 116.56 | 102.19 | 95.23 |
| N&P-5 | -0.455 | 0.1324 | 118.48 | 98.91 | 96.26 |

随OP-10的加入,腐蚀电流密度继续降低至0.1324 mA/cm²,缓蚀效率提升至96.26%,说明OP-10与NN具有较好的协同效应^[13]。

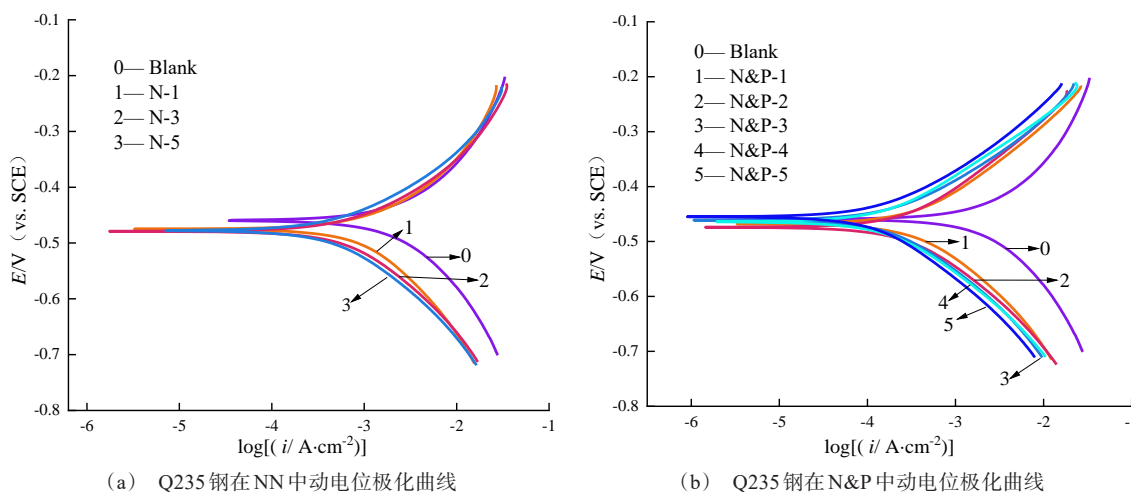


图3 Q235钢在不同浓度缓蚀溶液中的动电位极化图

Fig.3 Potentiodynamic polarization diagram of Q235 steel in corrosion inhibition solutions of different concentrations

2.2 失重实验及吸附行为分析

为进一步确定NN和N&P的缓蚀性能及其在Q235钢表面的吸附形式,进行了失重实验,参数列于表3(C_R 为腐蚀速率, η 为缓蚀效率)。由表3可知,随着缓蚀剂浓度的增加,缓蚀效率也逐步提升,在浓度为0.5 g/L时,NN缓蚀效率为77.46%,加入OP-10后N&P-5的缓蚀效率可达90.14%,主要是NN自身含有较多的吸附位点,可吸附在Q235表面形成稳定的保护膜,加之OP-10是优秀的表面活性剂,使NN在缓蚀溶液中分布更为均匀,从而提高了整体缓蚀效果^[14]。

等温吸附理论对缓蚀剂在缓蚀溶液中的吸附形式具有重要的研究意义,吸附形式可分为:化学、物

理和混合吸附^[15]。根据相关文献,N&P数据均符合Langmuir吸附等温式,拟合后的线性相关系数为0.9978,通过Langmuir吸附方程可求得吸附—解析平衡常数 K_{ads} ,吉布斯自由能 ΔG_{ads}^0 可由下式计算^[16]:

$$K_{ads} = \theta / [C_{inh}(1-\theta)] \quad (6)$$

$$\Delta G_{ads}^0 = -RT \ln(1000K_{ads}) \quad (7)$$

式中: C_{inh} 为缓蚀剂的浓度,g/L; θ 为表面覆盖度,假定NN和OP-10分子在Q235钢表面的覆盖度为失重实验的缓蚀效率,也就是 $\eta=\theta$;T为绝对温度,K;R为摩尔气体常数,J/(mol·K)。

通过式(7)计算可得 $\Delta G_{ads}^0 = -6.28$ kJ/mol, $\Delta G_{ads}^0 \leq 0$ 说明NN和OP-10分子可自发的吸附在Q235钢表面。当 ΔG_{ads}^0 位于-20 kJ/mol左右时,吸附以物理吸附为主,当 $\Delta G_{ads}^0 \geq -40$ kJ/mol,吸附以化学吸附为主,综上,N&P分子是以化学吸附为主的混合型吸附^[17]。

2.3 Q235钢表面分析

图4为在不同浓度N&P浸泡后的SEM和EDS图,图4(a)为空白溶液,Q235表面腐蚀严重,大量的腐蚀产物在Q235钢表面层层堆积,但随着N&P浓度的增加,Q235钢的表面形貌逐渐光滑,说明N&P的加入,有效地减缓了Q235钢的腐蚀,其结果与失重和电化学实验相匹配^[18]。图4(g)、(h)为Q235钢在N&P-5浸泡后的SEM、EDS能谱,EDS分析表明

表3 30 °C时Q235钢在不同浓度NN和N&P的失重参数
Tab.3 Weight loss parameters of Q235 steel at different concentrations of NN and N&P at 30 °C

| 缓蚀剂 | $C_R / (\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{h}^{-1})$ | $\eta / \%$ |
|-------|--------------------------------------------------------------|-------------|
| 空白 | 14.20±0.0011 | — |
| N-1 | 6.60±0.0001 | 53.52 |
| N-2 | 4.60±0.0006 | 67.60 |
| N-3 | 3.20±0.0004 | 77.46 |
| N&P-1 | 3.00±0.0001 | 78.87 |
| N&P-2 | 2.60±0.0003 | 81.69 |
| N&P-3 | 2.30±0.0005 | 83.80 |
| N&P-4 | 1.90±0.0001 | 86.61 |
| N&P-5 | 1.40±0.0003 | 90.14 |

N&P中元素均可以在Q235钢表面检测到,N原子的含量为0.75%,O原子的含量为9.85%,证明NN和

OP-10均可有效的吸附在Q235钢的表面。

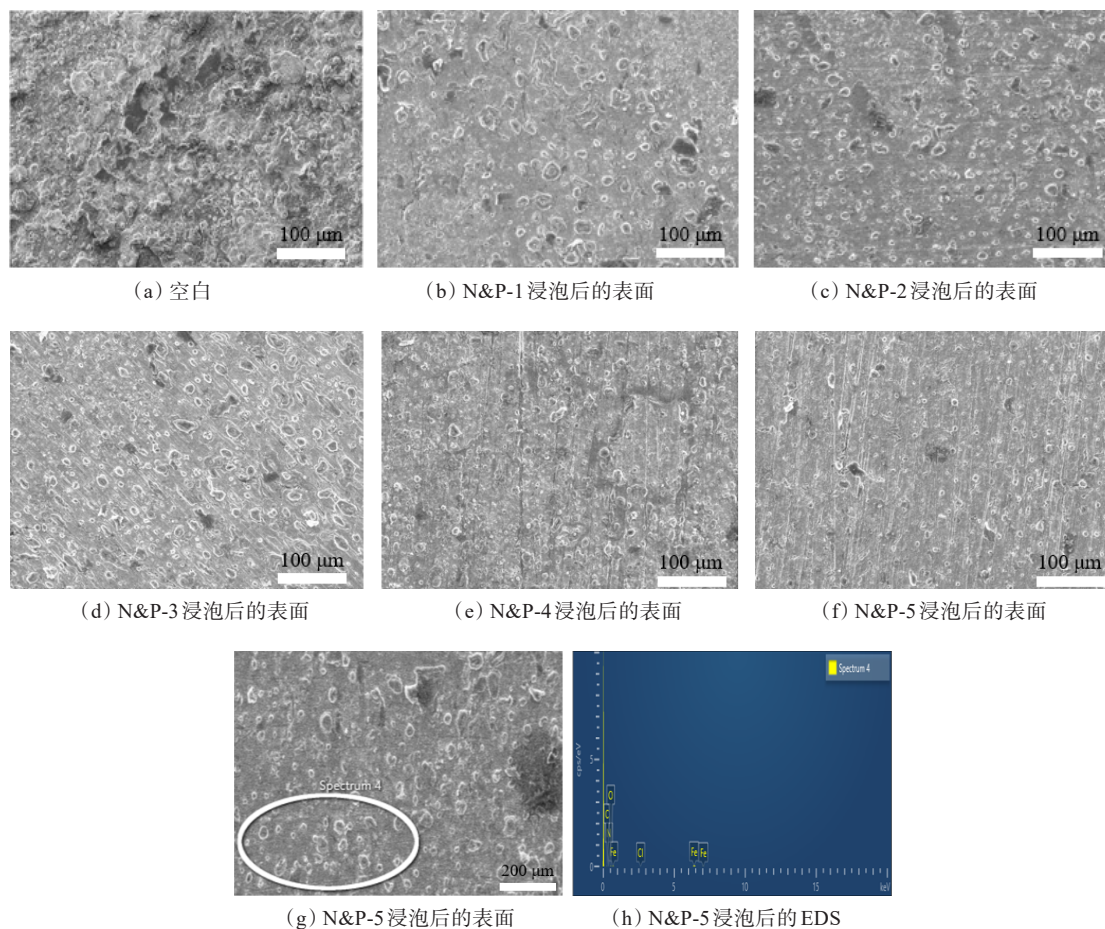


图4 Q235钢在不同浓度N&P失重后的表面形貌

Fig.4 Surface morphology of Q235 steel after weightlessness of N&P at different concentrations

2.4 X射线光电子能谱(XPS)分析

将经过N&P-5缓蚀剂浸泡后的Q235钢进行XPS分析,结果见图5,有C、N、O、Fe元素的峰。Q235钢的C 1s谱由三个峰组成,在248.6 eV处是C-H, C-C, C=C, 285.8 eV处的峰与缓蚀剂中的C-N, C-O相关,而288.3 eV处的峰是NN分子中的C=O键^[19]。在O 1s谱中,539.6 eV的峰是由H₂O分子在Fe表面形成的水合氧化物;在531.1 eV的处的第二个峰被认为是Fe的氧化物(FeO, Fe₂O₃)造成的;由于水氧分子的存在,第三个峰出现在532.2 eV处^[20]。N 1s在398.9 eV处的峰可归因于质子化胺基, 399.9 eV处的峰则为C=N, 401.3 eV处的峰是Fe-N原因导致的,可证明Fe和N相结合,形成稳定的配位键,可在Fe基表面发生吸附并形成一层保护

膜,从而起到了一定的缓蚀作用。Fe 2p谱的峰分别位于710.7 eV, 719.1 eV和725.3 eV处, Fe²⁺的峰出现在710.7 eV和725.3 eV处, Fe³⁺的峰出现在719.1 eV处^[21],证明Q235在腐蚀介质中发生腐蚀。

由图5(a)可知,N&P分子中的所有元素均能被检测到,说明N&P分子能有效地吸附在Q235表面,形成稳定的保护膜,这与EDS分析结果相一致。

2.5 理论计算

量子化学用于分析分子结构与性能之间的联系,对缓蚀机理分析具有重要的意义^[22]。相关文献研究表明, HOMO表示分子的给予电子能力, LUMO表示分子的获得电子能力,从图6可知, NN分子供电子区域分别为C-N键、C=C键和C=O键, OP-10分子的供电子区域为C-O键,其中苯环是供

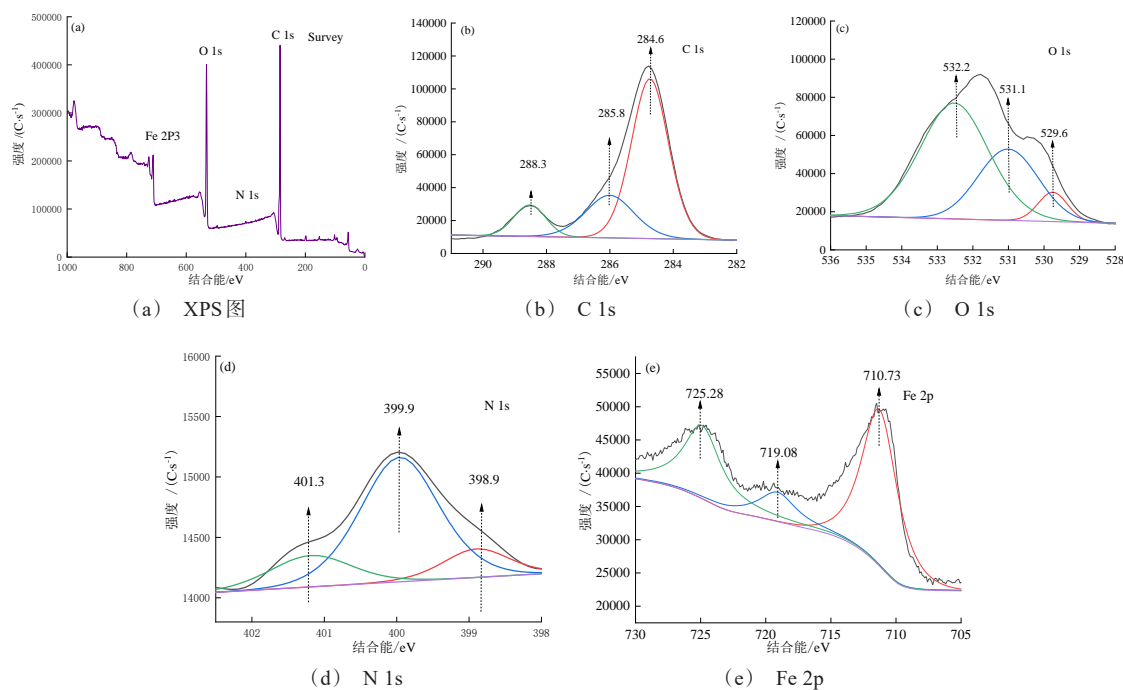


图 5 Q235 经 N&P-5 浸泡后的 XPS 光谱图

Fig. 5 XPS spectra of Q235 soaked in N&P-5

电子区,也是吸电子区^[23]。 $\Delta E(\Delta E=E_{\text{LUMO}}-E_{\text{HOMO}})$ 表明前线 HOMO 和 LUMO 轨道之间的能量差异, ΔE

越小,分子活性越高,越易向金属给予电子和接受来自金属的电子,因此缓蚀能力越强。

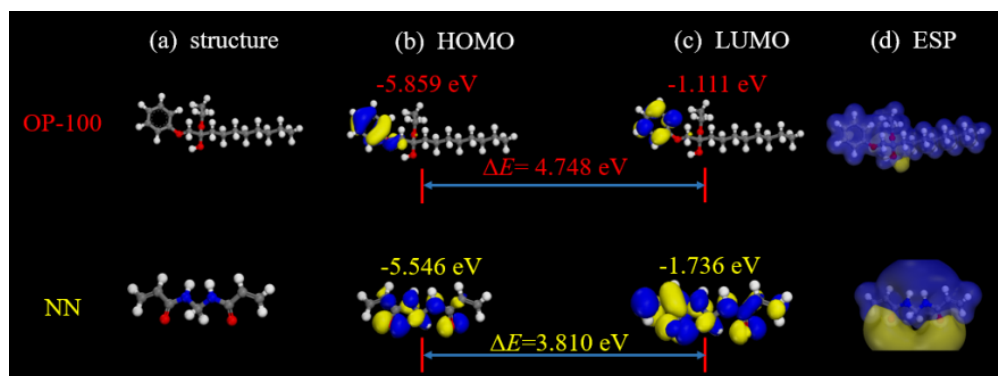


图 6 NN 和 OP-10 分子结构(HOMO, LUMO 和 ESP)

Fig. 6 NN and OP-10 molecular structure(HOMO, LUMO and ESP)

Q235 钢主要成分为 Fe, 因此选取较为稳定 Fe (110) 面进行分子动力模拟, 图 7 为 NN 和 OP-10 在 Fe 表面的最佳吸附形态。由图 7 可知, N&P 分子中不饱和键与杂原子与 Fe 形成配位键平行吸附于 Fe 基表面, 形成一层保护膜, 并且分子中烷基链平铺于 Fe 基表面, 形成的疏水膜可有效的阻碍 Cl^- , H^+ 等腐蚀介质对 Fe 基的进一步侵蚀, 从而减缓腐蚀发生, 其缓蚀机理如图 8 所示。

相关文献研究表明^[24], 缓蚀剂与 Fe(110) 的吸

附能的大小决定了缓蚀剂分子在腐蚀介质中的缓蚀性能, 缓蚀剂分子与 Fe(110) 的吸附能由下式计算可得:

$$E_a = E_t - (E_{\text{sur}} + E_{\text{inh}}) \quad (8)$$

E_a 为吸附能, 其值越小, 表明缓蚀剂分子与 Fe(110) 之间的吸附能越大, 缓蚀性能则越优异。根据式 (8) 计算可得, NN 与 OP-10 分别在 Fe(110) 表面的吸附能 -223.838 kcal/mol 和 -234.914 kcal/mol, 将 NN 与 OP-10 进行复配后, 在 Fe 基表面的吸附能

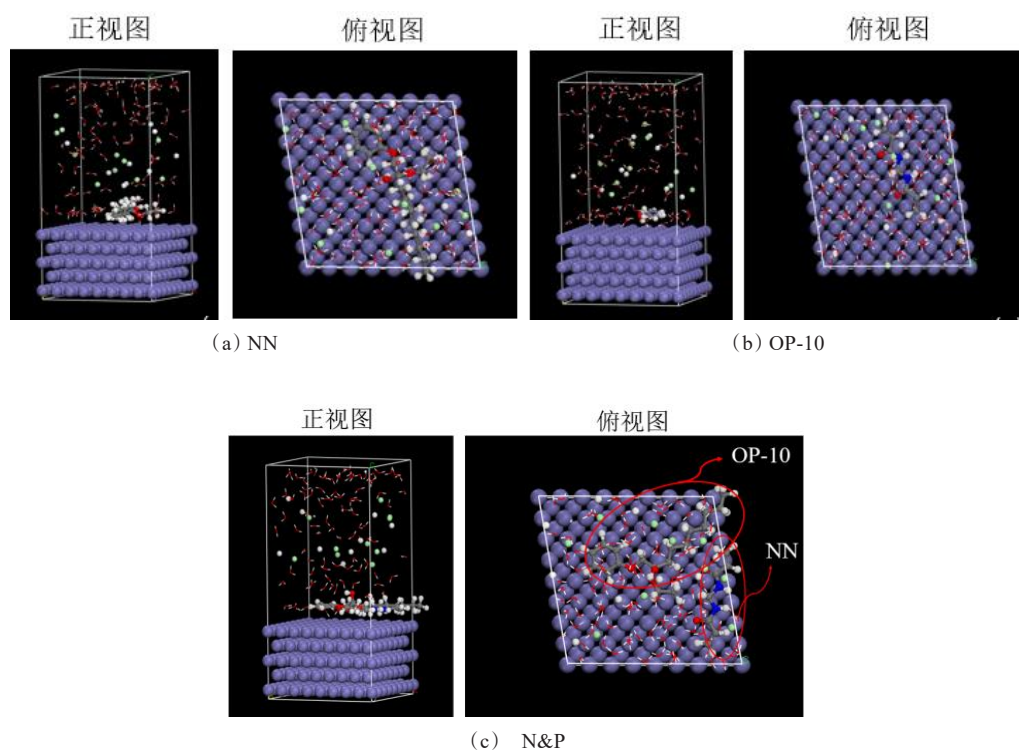


图7 分子在Fe(110)面的最佳吸附构型

Fig. 7 The optimal adsorption configuration of molecules on the Fe (110) surface

为-272.203 kcal/mol,说明NN与OP-10具有较好的协同效应。

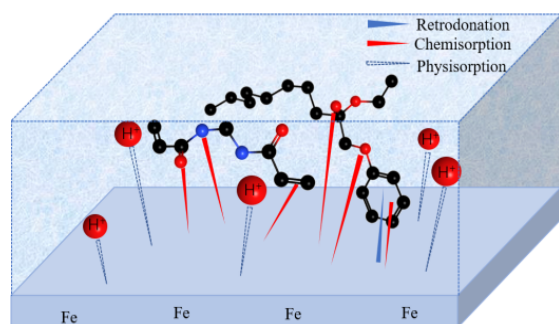


图8 NN和OP-10在Q235钢表面的缓蚀机理图

Fig. 8 Corrosion inhibition mechanism diagram of NN and OP-10 on the surface of Q235 steel

3 结论

(1)电化学实验表明,单独使用NN时,对Q235在HCl溶液具有一定的缓蚀作用,将NN与OP-10复配后,OP-10能有效的将NN分散在溶液中,使吸附

膜更完整,提升整体缓蚀性能。

(2)失重实验与表面分析表明,N&P是以化学吸附为主的混合型吸附,能有效吸附在Q235钢表面,缓蚀效果明显。

(3)量子化学验证,NN和OP-10均可以稳定的吸附在Q235表面,其主要吸附位点为OP-10和NN分子中的不饱和键及杂原子,同时复配后的吸附能小于NN与OP-10单独的吸附能,也进一步说明OP-10与NN具有较好的协同效应。

参考文献

- [1] 王俊霞,刘建华,陆小猛,等.含噻二唑季铵盐表面活性剂对Q235钢的缓蚀性能[J].日用化学工业,2022,52(8):797-804.
- [2] 刘建祥,邓书端,徐昕,等.H₃PO₄溶液中吐温-80在冷轧钢表面上的吸附及缓蚀性能[J].腐蚀科学与防护技术,2018,30(2):119-126.
- [3] 赵宏艳,雷然,赵付会,等.椰油酸二乙醇酰胺对冷轧钢在二氯乙酸溶液中的缓蚀性能[J].化学研究与应用,2022,34(10):2357-2365.

- [4] 王恩东. 新型酰胺类缓蚀剂的合成及缓蚀性能的研究[J]. 精细石油化工, 2020, 37(6): 66-70.
- [5] 李永红. 曼尼希碱与 OP-10 及 SO 复配的缓蚀机理研究[J]. 中国科技信息, 2012(21): 49, 52.
- [6] 王浩权, 雷然, 李向红. 十二烷基二甲基苄基氯化铵与 KI 对钢在柠檬酸中的缓蚀协同效应[J]. 化学研究与应用, 2022, 34(8): 1778-1790.
- [7] 常佳宇, 陆原, 赵景茂. 葡萄糖酸钠与二甲氨基丙基甲基丙烯酸酰胺复配对碳钢缓蚀性能的影响[J]. 北京化工大学学报(自然科学版), 2021, 48(4): 33-39.
- [8] Heydari M, Javidi M J C S. Corrosion inhibition and adsorption behaviour of an amido-imidazoline derivative on API 5L X52 steel in CO₂-saturated solution and synergistic effect of iodide ions[J]. Corrosion Science, 2012, 61: 148-155.
- [9] Ansari K R, Chauhan D S, Quraishi M A, et al. Bis(2-aminoethyl)amine-modified graphene oxide nanoemulsion for carbon steel protection in 15% HCl: Effect of temperature and synergism with iodide ions[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2020, 564: 124-133.
- [10] 柳鑫华, 刘会媛, 李繁麟, 等. 酸性介质中菠菜提取物与 KI 对 Q235 钢的缓蚀性能[J]. 材料保护, 2023, 56(2): 24-33.
- [11] Xie Y, He X J C, Physicochemical S A, et al. Asymmetric Gemini surfactants as corrosion inhibitors for carbon steel in acidic medium: Experimental and theoretical studies[J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2023, 660: 130850.
- [12] Cao C J C S. On electrochemical techniques for interface inhibitor research[J]. Corrosion Science, 1996, 38(12): 2073-2082.
- [13] 吴浩, 邓书端, 李向红. 菟丝子提取物与碘化钾对冷轧钢在盐酸中的缓蚀协同效应[J]. 中国腐蚀与防护学报, 2023, 43(1): 77-86.
- [14] 雷然, 石成杰, 李向红. 槐米提取物对 Al 在 HCl 溶液中的缓蚀作用[J]. 中国腐蚀与防护学报, 2022, 42(6): 939-947.
- [15] Tantawy A H, Soliman K A, Abd El-Lateef H M. Novel synthesized cationic surfactants based on natural piper nigrum as sustainable-green inhibitors for steel pipeline corrosion in CO₂-3.5%NaCl: DFT, Monte Carlo simulations and experimental approaches[J]. Journal of Cleaner Production, 2020, 250: 119510.
- [16] 邓志华, 雷然, 张智勇, 等. 香根草提取物对冷轧钢在盐酸溶液中的缓蚀作用[J]. 中国腐蚀与防护学报, 2023, 43(1): 173-178.
- [17] Furtado L B, Nascimento R C, Henrique F J F S, et al. Effects of temperature, concentration and synergism on green Schiff bases synthesized from vanillin in applications as corrosion inhibitors for carbon steel in well stimulation[J]. Journal of Petroleum Science & Engineering, 2022, 213: 110401.
- [18] Ma D, Zhao J, Huang Q, et al. Pyrazole acylhydrazone Schiff bases as magnesium alloy corrosion inhibitor: Synthesis, properties and mechanism investigation[J]. Journal of Molecular Structure, 2023, 1281: 135056.
- [19] Singh A, Ansari K R, Chauhan D S, et al. Anti-corrosion investigation of pyrimidine derivatives as green and sustainable corrosion inhibitor for N80 steel in highly corrosive environment: Experimental and AFM/XPS study[J]. Sustainable Chemistry and Pharmacy, 2020, 16: 100257.
- [20] Gupta S K, Kumar Mehta R, Yadav M. Schiff bases as corrosion inhibitors on mild steel in acidic medium: Gravimetric, electrochemical, surface morphological and computational studies[J]. Journal of Molecular Liquids, 2022, 368: 120747.
- [21] Zhang X, Zhang M, Zhang Z, et al. Bis-Mannich bases as effective corrosion inhibitors for N80 steel in 15% HCl medium[J]. Journal of Molecular Liquids, 2022, 347: 117957.
- [22] Elaraby A, El-Samad S A, Khamis E A, et al. Theoretical and electrochemical evaluation of tetra-cationic surfactant as corrosion inhibitor for carbon steel in 1 M HCl[J]. Scientific Reports, 2023, 13(1): 1-18.
- [23] Allah M H, Balakit A A, Salman H I, et al. New heterocyclic compound as carbon steel corrosion inhibitor in 1 M H₂SO₄, high efficiency at low concentration: experimental and theoretical studies[J]. Journal of Adhesion Science and Technology, 2023, 37(3): 525-547.
- [24] Padash R, Sajadi G S, Jafari A H, et al. Corrosion control of aluminum in the solutions of NaCl, HCl and NaOH using 2, 6-dimethylpyridine inhibitor: Experimental and DFT insights[J]. Materials Chemistry and Physics, 2020, 244: 122681.