

عنوان مقاله:

شبیه سازی ضد خوردگی ترکیبات آلی بر روی سطح فلز و مقایسه پارامترها با داده های تجربی

محل انتشار:

دومین همایش ملی تکنولوژی های نوین در شیمی و پتروشیمی (سال: 1394)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

فرشید شکیباییام - دانشجو کارشناسی ارشد رشته مهندسی شیمی پلیمر، دانشگاه آزاد اسلامی واحد فراهان؛

هادی شفیعی - استاد راهنما، دانشگاه آزاد اسلامی واحد اراک؛

خلاصه مقاله:

در این تحقیق به دنبال این مسئله هستیم که ماده آنتی کروژن مربوطه، که یکی از روشهای جلوگیری از خوردگی میباشد، چگونه، اثرات ضد خوردگی خود را اعمال می کند جهت نیل به این هدف در یک فضای شبیه سازی شده با بهره گیری از نرم افزار گوسین 2002 برای توضیح مکانیسم مهار خوردگی با استفاده از روش های محاسباتی مکانیک کوانتومی در سطح تئوری B3LYP/6-311+G**، برای مشتقات تیوفن، پارامترهای مانند انرژی الکترونی، ممان دوقطبی، الکترون گاتیویته، نرمی و پلاریزاسیون، که همگی به سطوح انرژی هومو و لومو مربوط میشوند استخراج شدند. در نهایت پارامتر اساسی که ضریب بازدارندگی (EI%) میباشد محاسبه شده و با ضریب بازدارندگی تجربی موجود در مراجع مقایسه و تحلیل گردید. در این تحقیق ترکیب تیوفن پایینترین درصد ضد خوردگی و ترکیب 2 تیوفن کربوکسیلیک اسید متیل استر بالاترین درصد - ضد خوردگی را به خود اختصاص دادند. بنابراین مشخص میشود که نتایج حاصل از محاسبات مکانیک کوانتومی با نتایج تجربی تا حد قابل قبولی همخوانی دارند.

کلمات کلیدی:

مکانیک کوانتومی، گوسین، خوردگی، ضریب بازدارندگی، انرژی هومو، انرژی لومو، پلاریزاسیون، ممان دو قطبی، مشتقات تیوفن

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/391866>

