

# 油溶性咪唑啉类缓蚀剂 对金属材料的缓蚀行为研究

韩士文, 周文彬, 李梦冉, 周欣

(沈阳理工大学, 环境与化学工程学院, 沈阳 110159)

**摘要:** 为探究油溶性咪唑啉类缓蚀剂十七烯基胺乙基咪唑啉 (AMZL) 和十七烯基羟乙基咪唑啉 (QMZL) 对金属材料的缓蚀行为, 以 25# 变压器油为基础油配制防锈油, 通过盐雾实验分析 AMZL、QMZL 对紫铜和 10# 钢的缓蚀性能, 使用扫描电子显微镜 (SEM) 观察其腐蚀形貌, 通过 X 射线光电子能谱 (XPS) 分析盐雾实验后紫铜和 10# 钢试片中各元素的化学组成和状态, 并结合量子化学计算与分子动力学模拟, 探讨缓蚀剂与金属表面的相互作用机理。结果表明: 两种缓蚀剂均有良好的疏水性能, 均可以自发地以化学吸附的形式吸附在金属表面, 吸附点位主要在咪唑环和氨基或羟基上; 盐雾环境下, AMZL、QMZL 对紫铜和 10# 钢均有良好的缓蚀效果, 且 AMZL 的缓蚀效果更好。

**关键词:** 盐雾实验; 量子化学计算; 分子动力学模拟; 缓蚀性能

中图分类号: TG178

文献标志码: A DOI: 10.3969/j.issn.1003-1251.2025.06.011

## Research on the Corrosion Inhibition Behavior of Oil-soluble Imidazoline Corrosion Inhibitors on Metals

HAN Shiwen, ZHOU Wenbin, LI Mengran, ZHOU Xin

(Shenyang Ligong University, Shenyang 110159, China)

**Abstract:** To investigate the corrosion inhibition behavior of oil-soluble imidazoline corrosion inhibitors, heptadecenyl aminoethyl imidazoline (AMZL) and heptadecenyl hydroxyethyl imidazoline (QMZL), on metallic materials, rust preventive oils were prepared using 25# transformer oil as the base oil. The corrosion inhibition effects of AMZL and QMZL on copper and 10# steel were systematically studied. The corrosion inhibition performance was evaluated through salt spray tests, while the corrosion morphology was characterized by scanning electron microscopy (SEM). X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) was employed to analyze the chemical composition and states of elements on copper and 10# steel specimens after salt spray exposure. Combined with quantum chemical calculations and molecular dynamics simulations, the interaction mechanisms between the inhibitors and metal surfaces were elucidated. The results show that both corrosion inhibitors have good hydrophobic properties and can spontaneously adsorb on the metallic surface in the form of chemical adsorption, with the adsorption sites mainly located on the imidazole ring, amino group, or hydroxyl group. Under the salt spray environment, both AMZL and QMZL have good corrosion inhibition effects on red copper and 10# steel, and AMZL exhibits a more excellent corrosion inhi-

bition effect.

**Key words:** salt spray test; quantum chemical calculation; molecular dynamics simulation; corrosion inhibition performance

传统无机缓蚀剂石油磺酸钡是从石油磺酸油馏分经磺化和醇水萃取的产物<sup>[1-2]</sup>,因其良好的缓蚀性广泛应用于工业领域,但因其含有铅、硫、锌、多氯联苯等有害元素,不仅对环境造成严重污染<sup>[3-4]</sup>,而且生产过程中副产物较多,纯度和结构稳定性难以控制。现寻找一款环保、高效、适用于变压器油的绿色环保油溶性缓蚀剂的替代品。在有机缓蚀剂中咪唑啉类化合物因其优异的油溶性和缓蚀性,近年来受到广泛关注。与传统无机缓蚀剂相比,咪唑啉类缓蚀剂不含重金属(如铅、钡等),分子结构中也不含毒性较强的多氯联苯等有害物质,因此更加环保。其分子中的咪唑啉环含有氮原子及其他极性基团(如羟基、胺基等)能够与金属表面发生强烈的配位作用,显著增强分子对金属表面的吸附能力,从而在金属表面形成致密且稳定的保护膜,有效隔绝腐蚀介质的侵入,显著降低腐蚀速率。

本文通过盐雾实验<sup>[5]</sup>对 AMZL 和 QMZL 的缓蚀性能进行分析。通过扫描电子显微镜(SEM)观察腐蚀形貌<sup>[6]</sup>,并结合量子化学计算和分子动力学模拟<sup>[7]</sup>,探讨 AMZL、QMZL 对紫铜和 10#钢的缓蚀机理<sup>[8]</sup>。研究结果可为开发绿色环保的油溶性缓蚀剂提供理论支持,并为工业应用提供参考。

## 1 实验部分

### 1.1 实验材料

实验材料为 T2 紫铜和 10#钢,试样尺寸为 10 mm × 25 mm × 3 mm。T2 紫铜成分(质量分数)为:Cu + Ag > 99.9%, Sb 0.002%, As 0.002%, Fe 0.005%, Pb 0.005%, S 0.005%, O < 0.1%; 10#钢成分(质量分数)为: C 0.07% ~ 0.13%, Si 0.17% ~ 0.37%, Mn 0.35% ~ 0.65%, S ≤ 0.035%, P ≤ 0.035%, Cr ≤ 0.15%, Ni ≤ 0.25%, Cu ≤ 0.25%。实验的溶剂油为 25#变压器油(沈阳防锈包装有限公司),实验中所用药品为纯度 99% 的十七烯基胺乙基咪唑啉(鸿博化工有限责任公司)和十七烯基羟乙基咪唑啉(秦皇岛悦翔科技有限公司)。

### 1.2 防锈油配置

将 AMZL 和 QMZL 两种缓蚀剂与 25#变压器油分别按质量分数 1%、3%、5% 比例混合后倒入烧杯中,使用加热台进行加热,温度为 50 °C,加热时间为 10 min,磁力搅拌至完全均匀溶解,待烧杯中的防锈油冷却 10 min 后,无沉淀析出方可使用。

### 1.3 盐雾实验

首先对紫铜和 10#钢进行打磨,再用无水乙醇清洗。除被测面外的表面采用硅橡胶密封,将其全部浸入配制好的防锈油中 1 min,缓慢提拉,置于阴凉干燥处静置 24 h 后放入盐雾箱中。按照 GB/T 1012—2012 进行盐雾实验。实验完毕后取出,先用清洗油清洗,再用无水乙醇清洗三次,冷风吹干。剥去硅橡胶后使用 SL302 电子天平(上海民桥精密科技仪器有限公司)称重,测量三次,取平均值。腐蚀速率( $V$ )和缓蚀效率( $\eta$ )的计算式为

$$V = \frac{W_0 - W}{St} \quad (1)$$

$$\eta = \frac{V_0 - V}{V_0} \times 100\% \quad (2)$$

式中: $W_0$  和  $W$  为试样实验前后的质量; $S$  为试样的表面积; $t$  为浸泡时间; $V_0$  和  $V$  分别为空白溶液和添加缓蚀剂的溶液中铜或碳钢的腐蚀速率。

### 1.4 扫描电子显微镜表征

扫描电子显微镜(SEM)用于观察金属材料的微观形貌<sup>[9-10]</sup>,对盐雾实验后的紫铜和 10#钢片的微观形貌进行分析,在测试前采用去离子水和无水乙醇清洗试片表面,然后进行干燥处理后测试<sup>[11-12]</sup>。

### 1.5 X 射线光电子能谱测试

通过 X 射线光电子能谱(XPS)对盐雾实验后的紫铜和 10#钢表面进行测试,并对 XPS 谱图进行分峰处理和拟合,得出试样表面元素的价态变化、腐蚀产物成分、缓蚀剂成键的信息并进行分析。

### 1.6 量子化学计算

使用密度泛函理论(DFT)量化方法模拟计算缓蚀剂分子电子性质来分析分子的活性。通过对缓蚀剂分子结构、前线轨道分布、电荷分布等参数研究该分子的反应活性位点、吸附性位点以及与金属相互作用时吸附构型来分析其缓蚀效率<sup>[13-14]</sup>,然后导入 Gaussian 09W 中,采用 6-311G

(d) 基组(Ba 原子采用 SDD 基组并添加膺势),同时用庚烷溶剂对缓蚀剂分子进行结构优化,再进行计算,确定所找到的点无虚频出现量<sup>[15-16]</sup>。

### 1.7 分子动力学分析

使用 Material Studio 2019 中的 Forcite 组件进行分子动力学仿真。研究对象为 5 层 Cu(111) 或 Fe(110) 面、水分子或正辛烷分子(变压器油的主要成分)和一个缓蚀剂分子<sup>[17-18]</sup>。Cu(111) 和 Fe(110) 面具有最低的密勒指数和紧密的堆积方式,可以代替 Cu 和 Fe 表面。采用传统的凝聚态优化分子势场(COMPASS)正则系综(NVT),温度 308 K,时间步长 1.0 fs,模拟步长 500 ps,固定全部的 Cu 原子,相互作用能( $E_{interact}$ )的计算式为

$$E_{interact} = E_{tot} - (E_{sub} + E_{inh}) \quad (3)$$

式中: $E_{tot}$  为总能量; $E_{sub}$  为 Cu 基底和所有正庚烷分子的能量; $E_{inh}$  为缓蚀剂分子的能量。

## 2 结果及分析

### 2.1 盐雾实验

分别添加 AMZL 和 QMZL 两种缓蚀剂,通过盐雾实验得到 10#钢和紫铜的腐蚀速率,结果见表 1~4,可见加入缓蚀剂后两种金属的腐蚀速率均减小。

表 1 添加 AMZL 后 10#钢的腐蚀速率

Table 1 Corrosion rate of 10# steel by adding AMZL

浓度/%	4 h	8 h	12 h
0	0.100	0.150	0.270
1	0.034	0.058	0.097
3	0.029	0.043	0.061
5	0.006	0.012	0.024

表 2 添加 AMZL 后紫铜的腐蚀速率

Table 2 Corrosion rate of copper by adding AMZL

浓度/%	1 d	3 d	5 d	7 d
0	0.080	0.150	0.200	0.280
1	0.005	0.022	0.059	0.167
3	0.003	0.010	0.018	0.054
5	0.002	0.006	0.015	0.045

表 3 添加 QMZL 后 10#钢的腐蚀速率

Table 3 Corrosion rate of 10# steel by adding QMZL

浓度/%	4 h	8 h	14 h
0	0.100	0.150	0.270
1	0.032	0.057	0.103
3	0.030	0.048	0.084
5	0.009	0.019	0.027

表 4 添加 QMZL 后紫铜的腐蚀速率

Table 4 Corrosion rate of copper by adding QMZL

浓度/%	1 d	3 d	5 d	7 d
0	0.080	0.150	0.200	0.280
1	0.010	0.029	0.072	0.157
3	0.009	0.025	0.038	0.092
5	0.007	0.017	0.029	0.055

加入不同浓度的 AMZL 和 QMZL 两种缓蚀剂,盐雾后得到 10#钢和紫铜的缓蚀效率,结果如图 1 和图 2 所示。

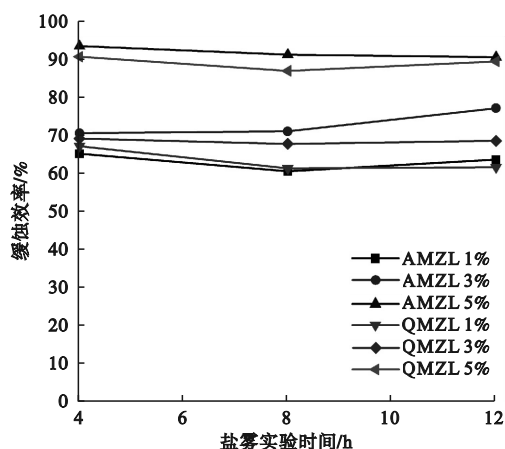


图 1 10#钢盐雾实验后的缓蚀效率

Fig. 1 The corrosion inhibition efficiency of 10# steel after the salt spray test

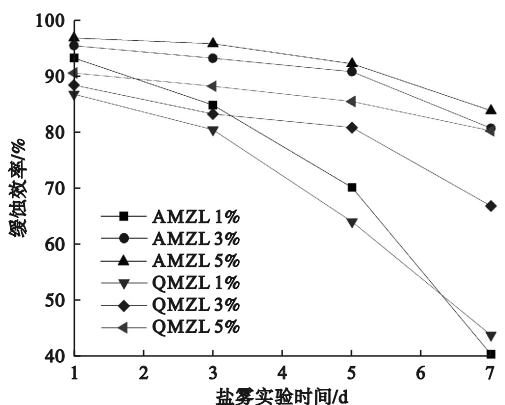


图 2 紫铜盐雾实验后的缓蚀效率

Fig. 2 The corrosion inhibition efficiency of copper after salt spray test

由图 1 和图 2 可知,添加 AMZL 和 QMZL 后,10#钢和紫铜的腐蚀速度均减慢,缓蚀效率随两种试剂浓度的增加而增加。两种缓蚀剂在测试浓度和时间下均有优异的缓蚀效率,有效抑制了氯离子对 10#钢和紫铜的腐蚀。其中,AMZL 的缓蚀效率高于 QMZL,具有更为优异的缓蚀性能。

### 2.2 SEM 表面形貌分析

图 3 为紫铜和 10#钢盐雾实验后的扫描电镜图。由图 3 可知,未添加缓蚀剂的紫铜试片和 10#钢试片经盐雾实验后腐蚀严重,表面明显破裂,有较多的腐蚀产物和腐蚀坑穴。加入 AMZL 和 QMZL 后的紫铜和 10#钢试片表面平整,无明显的腐蚀现象,表明两种试剂均在金属材料上形成保护性薄膜,抑制侵蚀颗粒对金属基体的渗透。其中添加 AMZL 的紫铜和 10#钢试片比添加 QMZL 更为光滑,即 AMZL 对紫铜和 10#钢的缓蚀性能优于 QMZL。

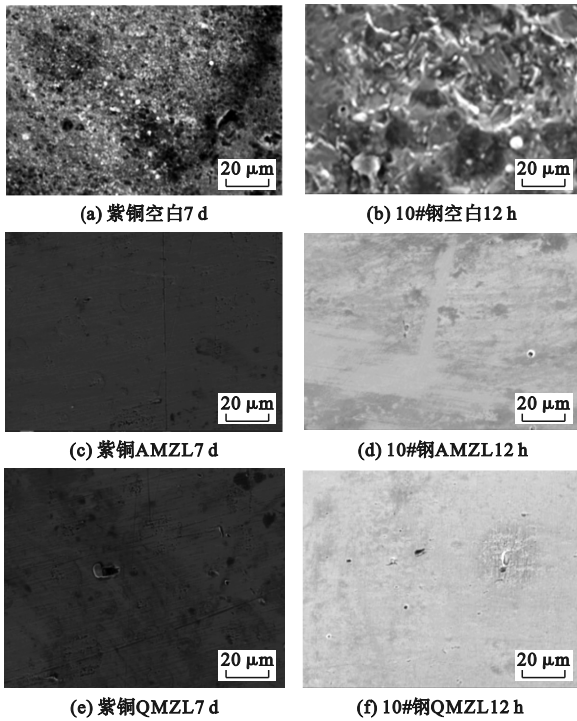


图 3 紫铜和 10#钢经盐雾实验后的 SEM 图

Fig. 3 SEM images of copper and 10# steel after salt spray test

### 2.3 XPS 分析

分别添加质量分数 5% 的 AMZL 和 QMZL,对 10#钢和紫铜经过 12 h 盐雾实验后的表面进行 XPS 分析,得到 10#钢和紫铜的 XPS 图谱,如图 4 和图 5 所示。

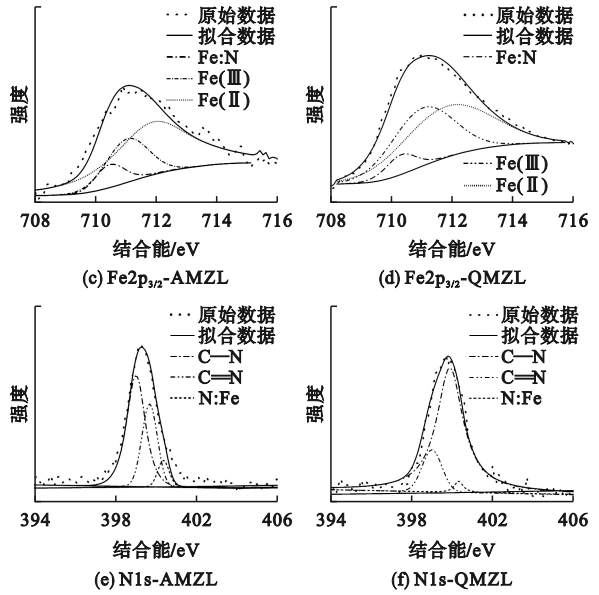
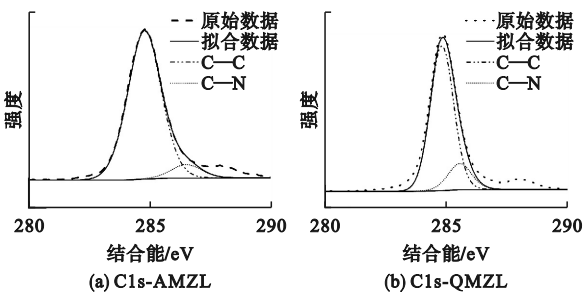
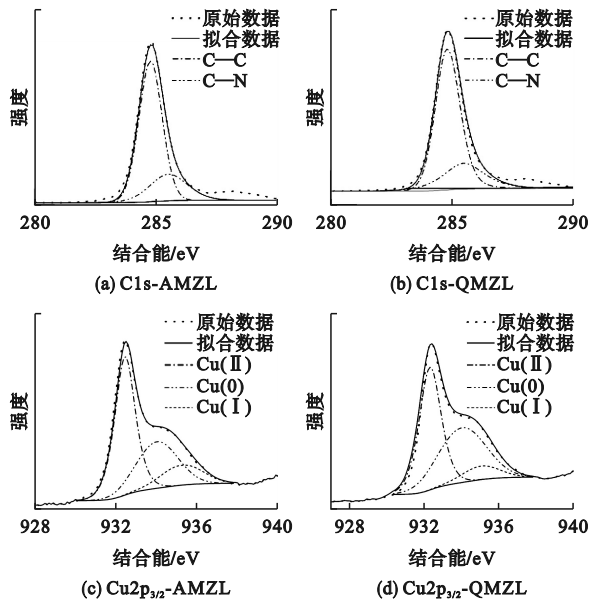


图 4 10#钢的 XPS 图谱

Fig. 4 XPS spectrum of 10# steel

图 4(a)和图 4(b)分别展示了 AMZL 或 QMZL 在 10#钢表面吸附后 C1s 的 XPS 图谱,在结合能 284.8、285.5 eV 处,对应的两个峰分别归属于 C—C、C—N,表明两种缓蚀剂有效地吸附于金属表面<sup>[20]</sup>。由图 4(c)和图 4(d)可知,在约 711.8、711.0 和 710.3 eV 处获得 Fe2p<sub>3/2</sub>峰,这些峰属于 Fe(II)、Fe(III)和 Fe:N 特征峰<sup>[19]</sup>。图 4(e)和图 4(f)分别是 AMZL 和 QMZL 的 N1s 的 XPS 光谱,三个峰的位置在结合能 399、399.7 和 399.9、401.3 eV 处,分别归属于 C=N、C—N 和 N:Fe,表明两种缓蚀剂在 Fe 表面形成配位键。



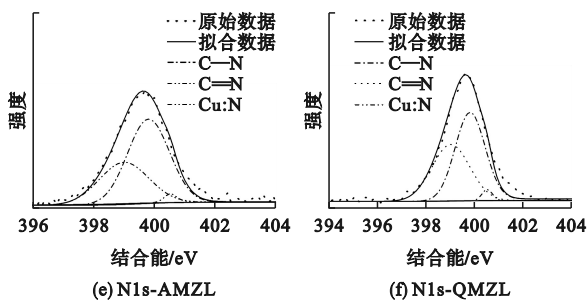


图5 紫铜的XPS图谱

Fig. 5 XPS spectrum of copper

图5(a)和图5(b)分别展示了两种缓蚀剂在Cu表面吸附后C1s的XPS分峰图谱,图谱主要由两个峰组成,在284.8、285.5 eV处,分别归属于C—C、C—N特征峰,证明两种缓蚀剂有效地吸附于金属表面。由图5(c)和图5(d)可知,在约935.2、932.6和934.0 eV处获得Cu2p<sub>3/2</sub>峰<sup>[21]</sup>,这些峰属于Cu(I)、Cu(II)和Cu(0)特征峰,表明腐蚀产物既有Cu(I)又有Cu(II)。图5(e)和图5(f)是N1s的XPS能谱,三个峰分别在399、399.7和399.8、400.5 eV处,分别归属于C=N, C—N和Cu:N<sup>[22]</sup>。在N1s谱中看到两种缓蚀剂在10#钢和Cu表面都形成配位键,表明两种缓蚀剂极有可能在金属表面发生化学吸附。

## 2.4 理论计算分析

量子化学计算是研究缓蚀效率与结构关系的重要方法,通过观察结构发现,缓蚀剂分子倾向于平行排列,有利于吸附后获得较高覆盖度<sup>[23]</sup>。最低未占据分子轨道(LUMO)几乎在咪唑环和氨基或羟基上,可以用来吸收电子,形成闭路。最高占据分子轨道(HOMO)在一个烯基上,可以向铜的杂化轨道空位提供电子,形成共价键,表明主要的吸附点位在咪唑环、氨基或羟基以及烯基上。氨

基的吸附归因于电子共轭效应<sup>[24]</sup>,咪唑环的吸附认为是大π键的吸附,而长链的作用主要是亲油,体现了缓蚀剂分子的高度不对称性。根据相似相容原理,金属具有极性,而基础油则是非极性,因此,极性官能团易于从油层中溢出,另一方面,非极性基团则易于溶于原油中,导缓蚀剂分子在油/金属界面发生定向吸附,其中极性部分吸附在金属表面,而非极性部分溶解于油中。

图6为AMZL和QMZL几何优化构型及轨道分布,图中HOMO为高占据分子轨道,LUMO为最低空分子轨道,ESP为静电势。

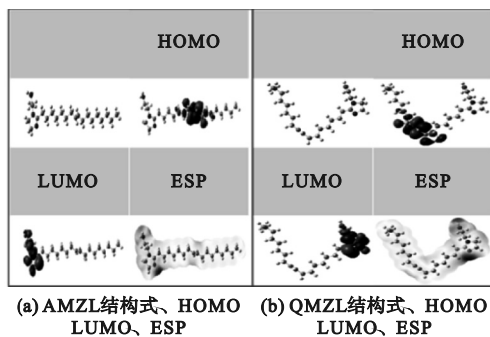


图6 AMZL和QMZL几何优化构型及轨道分布图

Fig. 6 Geometric optimization configurations and orbital distribution diagrams of AMZL and QMZL

由图6可知,ESP负电势主要集中在咪唑环上的N原子及氨基或羟基上。根据前线轨道理论, $E_{HOMO}$ 是一个分子所能占据的最大轨道能级, $E_{HOMO}$ 值越大,说明该分子更易于给出电子。 $E_{LUMO}$ 则表示一个分子中最小的非占满分子轨道的能级, $E_{LUMO}$ 值愈小,表示该分子更易与电子结合,从而获得更多电子。

将模拟后的量子化学参数列于表5中,表中P为分子电离势,AI为电子亲和能, $\chi$ 为电负性, $\gamma$ 为硬度, $\sigma$ 为软度, $\Delta N$ 为电子转移比例。

表5 AMZL和QMZL的量子化学参数

Table 5 Quantum chemical parameters of AMZL and QMZL

样品	$E_{HOMO}/\text{eV}$	$E_{LUMO}/\text{eV}$	$\Delta E/\text{eV}$	$P/\text{eV}$	$AI/\text{eV}$	$\chi/\text{eV}$	$\gamma/\text{eV}$	$\sigma/\text{eV}^{-1}$	$\Delta N - \text{Cu}$	$\Delta N - \text{Fe}$
AMZL	0.58	-5.48	6.06	-0.58	5.48	2.45	3.03	0.33	0.31	1.16
QMZL	0.52	-5.59	6.11	-0.52	5.59	2.54	3.06	0.32	0.31	1.14

由表5可知,AMZL的 $E_{HOMO}$ 值大于QMZL,且远高于铜和铁的费米能级,表明两种缓蚀剂为铜和铁提供电子的能力很强,可以将电子传递到铜原子和铁原子的空轨道,所以两种缓蚀剂有较高的缓蚀效率,并发生了化学吸附。

一个分子的电负性能够反映其对电子的吸引力,电负性越大,其原子在化合物中吸引电子的能

力越强,计算结果表明,两种缓蚀剂的电负性接近,吸引电子能力也较为相近。同时 $\Delta N$ 也是衡量分子供给电子能力的重要标准,两种缓蚀剂 $\Delta N$ 均小于3.6,并且AMZL的 $\Delta N$ 大于QMZL,说明两种缓蚀剂都有能力将自身的电子转移到金属表面<sup>[25]</sup>,同时也证明了AMZL的缓蚀效率应高于QMZL。另外,在软硬酸碱理论中认为铜原子和

铁原子为软酸, AMZL 和 QMZL 为软碱, 软酸与软碱主要的相互作用力为共价键, 有利于缓蚀剂在金属表面吸附。

## 2.5 分子动力学分析

分子动力学模拟可以看出两种咪唑啉类缓蚀剂在两种金属表面的吸附行为, 并可获得吸附能量。AMZL 和 QMZL 与  $H_2O$  分子在 Cu(111) 和 Fe(110) 表面的吸附结果如图 7 和图 8 所示。

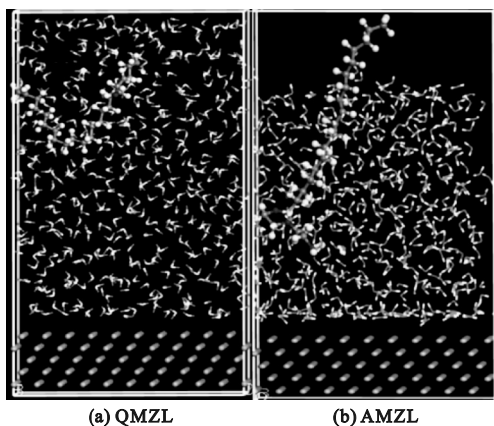


图 7 QMZL 和 AMZL 分子与  $H_2O$  分子在 Cu(111) 上稳定构型的侧视图

Fig. 7 Side view of stable configuration of QMZL and AMZL molecules with  $H_2O$  molecules on Cu(111)

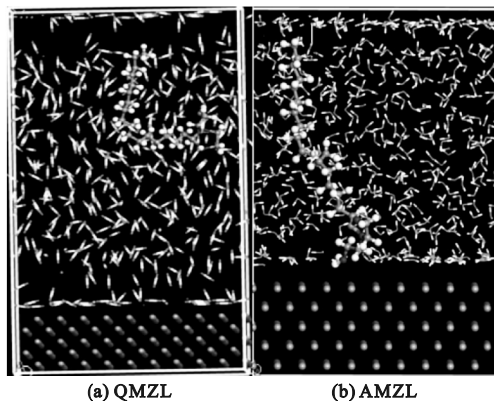


图 8 QMZL 和 AMZL 与  $H_2O$  分子在 Fe(110) 上的平衡吸附形态的侧视图

Fig. 8 Side view of equilibrium adsorption forms of QMZL and AMZL with  $H_2O$  molecules on Fe(110)

由图 7 和图 8 可知, 两种缓蚀剂在 Cu(111) 和 Fe(110) 表面均有亲油憎水作用的非极性长链分子, 表明两种缓蚀剂具有优异的疏水性能, 使两种金属材料免于受水分子的侵蚀, 从而降低金属材料的腐蚀速率。

将水分子替换为庚烷分子后, 得到 QMZL 和 AMZL 与庚烷分子分别在 Cu(111) 和 Fe(110) 上的平衡吸附形态, 结果如图 9 和图 10 所示。

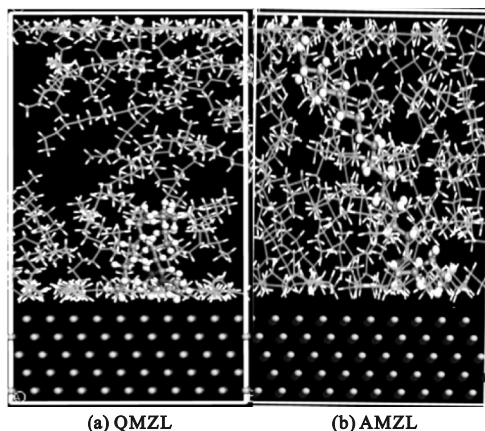


图 9 QMZL 和 AMZL 与庚烷分子在 Cu(111) 上平衡吸附形态的侧视图

Fig. 9 Side view of equilibrium adsorption forms of QMZL and AMZL with heptane molecules on Cu(111)

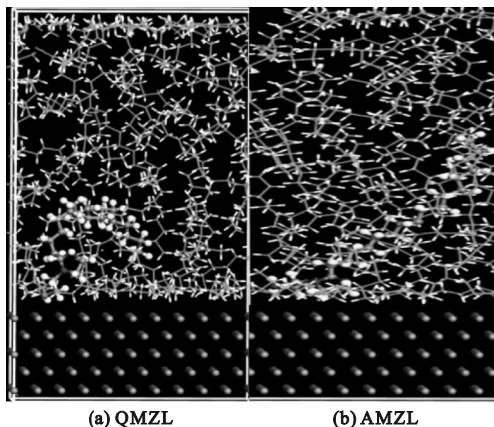


图 10 QMZL 和 AMZL 与庚烷分子在 Fe(110) 上平衡吸附形态的侧视图

Fig. 10 Side view of equilibrium adsorption of QMZL and AMZL with heptane molecules on Fe(110)

由图 9 和图 10 可知, 两种缓蚀剂分子吸附在 Cu(111) 和 Fe(110) 的表面, 从而降低其腐蚀面积, 有效地阻碍了两种金属腐蚀, 且长链在其中起到亲油作用, 可以在金属表面和庚烷分子之间定定向吸附。将模拟后的结合能和相互作用能的数据列于表 6 中。

表 6 AMZL 和 QMZL 的结合能和相互作用能

Table 6 Binding energies and interaction energies of AMZL and QMZL		
	kJ/mol	
研究体系	$E_{\text{binding}}$	$E_{\text{interact}}$
AMZL-Cu	559.44	-559.44
QMZL-Cu	549.15	-549.15
AMZL-Fe	610.03	-610.03
QMZL-Fe	564.64	-564.64

由表6可知:Cu(111)表面与AMZL和QMZL分子间的结合能在308 K时分别为559.44 kJ/mol和549.15 kJ/mol;Fe(110)表面与AMZL和QMZL分子间的结合能在308 K时分别为610.03 kJ/mol和564.64 kJ/mol。可见,两种缓蚀剂在两种金属表面上均有较大的结合能,表明两种缓蚀剂均可自发吸附在金属表面,从而阻碍金属表面腐蚀。其中,AMZL的结合能略高于QMZL的结合能,表明AMZL能更好地吸附于金属表面从而抑制腐蚀<sup>[26]</sup>。

### 3 结论

1) 盐雾失重实验结果表明,AMZL和QMZL对10#钢和紫铜具有优良缓蚀效果,AMZL比QMZL缓蚀性能更为优异。

2) XPS结果表明,AMZL和QMZL两种缓蚀剂主要以化学吸附的形式吸附在金属表面,主要吸附点位均为N原子。

3) 通过量子化学计算证实,AMZL和QMZL两种缓蚀剂均可自发平行吸附在金属表面,并以化学吸附的形式吸附在金属表面。分子动力学模拟分析表明,AMZL和QMZL两种缓蚀剂都有良好的疏水性能和较高的结合能。

### 参考文献 (References):

[1] 陈鹏, 陈世军, 王波, 等. 硫酸钡溶垢剂体系研究及性能评价[J]. 化工技术与开发, 2020, 49(9): 28-32.  
CHEN P, CHEN S J, WANG B, et al. Compounding and performance evaluation of barium sulfate spraying agent[J]. Technology & Development of Chemical Industry, 2020, 49(9): 28-32. (in Chinese)

[2] LUO H M, CHEN D J, YANG X P, et al. Synthesis and performance of a polymeric scale inhibitor for oilfield application[J]. Journal of Petroleum Exploration and Production Technology, 2015, 5(2): 177-187.

[3] SAHOO P K, POWELL M A, MARTINS G C, et al. Occurrence, distribution, and environmental risk assessment of heavy metals in the vicinity of Fe-ore mines: a global overview[J]. Toxin Reviews, 2022, 41(2): 675-698.

[4] 吴益阳, 陈弘丽. II B族Zn, Cd, Hg稳定同位素在沉积物重金属污染溯源中的发展及应用前景[J]. 安徽化工, 2023, 49(6): 1-4.  
WU Y Y, CHEN H L. Development and application prospects of II B Group Zn, Cd, Hg stable isotopes in traceability of heavy-metal pollution in the sediments[J]. Anhui Chemical Industry, 2023, 49(6): 1-4. (in Chinese)

[5] SANCHEZ GARRIDO R A, VAZQUEZ A E, CAMPECHANO-LIRA C, et al. Evaluation of a non-ionic gemini surfactant as sweet corrosion inhibitor for X100 steel in sweet brine solution[J]. ECS Transactions, 2023, 110(1): 141-147.

[6] 周欣, 李梦冉, 付义东, 等. 月桂酸咪唑啉对铜在盐酸溶液中缓蚀行为研究[J]. 沈阳理工大学学报, 2024, 43

(3): 76-83.  
ZHOU X, LI M R, FU Y D, et al. Study on corrosion inhibition behavior of imidazoline laurate on copper in hydrochloric acid solution[J]. Journal of Shenyang Ligong University, 2024, 43(3): 76-83. (in Chinese)

[7] MAMAND D M, KAK ANWER T M, QADR H M. Corrosion inhibition performance of organic compounds and theoretical calculations based on density functional theory (DFT)[J]. Corrosion Reviews, 2024, 42(1): 1-15.

[8] OUCI H B, BENALI O, GUENDOUZI A. Experimental and quantum chemical studies on the corrosion inhibition effect of synthesized pyrazole derivatives on mild steel in hydrochloric acid[J]. Research on Chemical Intermediates, 2016, 42(9): 7085-7109.

[9] WANG L T, WANG H R, SEYEUX A, et al. Adsorption mechanism of quaternary ammonium corrosion inhibitor on carbon steel surface using ToF-SIMS and XPS[J]. Corrosion Science, 2023, 213: 110952.

[10] 江波, 孙文寿, 蔡杰. N-油基-1,3-丙撑二胺在盐酸环境中对20钢的缓蚀性能及机理研究[J]. 材料保护, 2023, 56(1): 22-29.  
JIANG B, SUN W S, CAI J. Study on the corrosion inhibition performance and mechanism of N-oley-1,3-propanediamine on 20 steel in HCl environment[J]. Materials Protection, 2023, 56(1): 22-29. (in Chinese)

[11] EL AZZOUZI M, AOUNITI A, TIGHADOUIN S, et al. Some hydrazine derivatives as corrosion inhibitors for mild steel in 1.0 M HCl: weight loss, electrochemical, SEM and theoretical studies[J]. Journal of Molecular Liquids, 2016, 221: 633-641.

[12] MURTHY R, GUPTA P, SUNDARESAN C N. Theoretical and electrochemical evaluation of 2-thioureidobenzheteroazoles as potent corrosion inhibitors for mild steel in 2 M HCl solution[J]. Journal of Molecular Liquids, 2020, 319: 114081.

[13] SALEH T A, HARUNA K, ALHARBI B. Diaminoalkanes functionalized graphene oxide as corrosion inhibitors against carbon steel corrosion in simulated oil/gas well acidizing environment[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2023, 630: 591-610.

[14] ZHANG H, WANG M, XU Z M, et al. Scale inhibition mechanism of calcium sulfate by gum Arabic: experimental testing, quantum chemical calculations, and molecular dynamics simulations[J]. Journal of Molecular Structure, 2025, 1319: 139516.

[15] ECH-CHIHBI E, NAHLÉ A, SALIM R, et al. An investigation into quantum chemistry and experimental evaluation of imidazopyridine derivatives as corrosion inhibitors for C-steel in acidic media[J]. Journal of Bio-and Tribo-Corrosion, 2019, 5(1): 24.

[16] DKHIRECHE N, GALAI M, OUAKKI M, et al. Electrochemical and theoretical study of newly quinoline derivatives as a corrosion inhibitors adsorption on mild steel in phosphoric acid media[J]. Inorganic Chemistry Communications, 2020, 121: 108222.

[17] GHOLIVAND K, SARMADI-BABAEI L, FARAGHI M, et al. Heteroatom-containing phosphoramides as carbon steel corrosion inhibitors: density functional theory and molecular dynamics simulations[J]. Chemical Physics Impact, 2022, 5: 100099.

[18] ZHU Y Q, SUN Q Q, WANG Y, et al. A study on inhibi-

- tion performance of mercaptoalcohols as corrosion inhibitors by first principle and molecular dynamics simulation [J]. Russian Journal of Physical Chemistry A, 2020, 94 (9): 1877 - 1886.
- [19] WANG D Y, LI Z G, LIU Y, et al. Investigation of efficient corrosion inhibitor during acid cleaning of reverse osmosis (RO) desalination plant[J]. Corrosion Science, 2022, 208: 110609.
- [20] ANADEBE V C, CHUKWUIKE V I, SELVARAJ V, et al. Sulfur-doped graphitic carbon nitride (S-g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) as an efficient corrosion inhibitor for X65 pipeline steel in CO<sub>2</sub>-saturated 3.5% NaCl solution; Electrochemical, XPS and Nanoindentation Studies[J]. Process Safety and Environmental Protection, 2022, 164: 715 - 728.
- [21] FINŠGAR M. Advanced surface analysis using GCIB-C60 + + tandem-ToF-SIMS and GCIB-XPS of 2-mercaptobenzimidazole corrosion inhibitor on brass[J]. Microchemical Journal, 2020, 159: 105495.
- [22] KOZLICA D K, KOKALJ A, MILOŠEV I. Synergistic effect of 2-mercaptobenzimidazole and octylphosphonic acid as corrosion inhibitors for copper and aluminium; an electrochemical, XPS, FTIR and DFT study [J]. Corrosion Science, 2021, 182: 109082.
- [23] JIANG L, QIANG Y J, LEI Z L, et al. Excellent corrosion inhibition performance of novel quinoline derivatives on mild steel in HCl media; experimental and computational investigations [J]. Journal of Molecular Liquids, 2018, 255: 53 - 63.
- [24] CAO S R, HUANG J, TIAN J, et al. Deep insight into selective adsorption behavior and mechanism of novel deep eutectic solvent functionalized bio-sorbent towards methcathinone; experiments and DFT calculation [J]. Environmental Research, 2023, 227: 115792.
- [25] MANDAL S, BEJ S, BANERJEE P. Insights into the uses of two azine decorated d10-MOFs for corrosion inhibition application on mild steel surface in saline medium; experimental as well as theoretical investigation [J]. Journal of Molecular Liquids, 2023, 381: 121789.
- [26] MAZLAN N, JUMBRI K, AZLAN KASSIM M, et al. Density functional theory and molecular dynamics simulation studies of bio-based fatty hydrazide-corrosion inhibitors on Fe (110) in acidic media [J]. Journal of Molecular Liquids, 2022, 347: 118321.
- (责任编辑:徐淑姣)
- 
- (上接第71页)
- [22] 金龙文,雷彬,张倩,等.电磁轨道炮热生成机理及温度场数值仿真[J].火炮发射与控制学报,2012,33(4):9-12.  
JIN L W, LEI B, ZHANG Q, et al. Heat generation mechanism analysis and numerical simulation of temperature field in electromagnetic rail Gun [J]. Journal of Gun Launch & Control, 2012, 33(4): 9 - 12. (in Chinese)
- [23] WANG Z H, WAN M, LI X J. Numerical modeling of electromagnetic railgun rail temperature field [J]. International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics, 2016, 51 (2): 173 - 183.
- [24] ZHANG H H, LI S, GAO X, et al. Distribution characteristics of electromagnetic field and temperature field of different caliber electromagnetic railguns [J]. IEEE Transactions on Plasma Science, 2020, 48 (12): 4342 - 4349.
- [25] 向红军,曹根荣,乔志明,等.大口径轨道炮弹药运用中多物理场环境表征[J].陆军工程大学学报,2024,3(1):56 - 62.  
XIANG H J, CAO G R, QIAO Z M, et al. Multi-physical field environment characterization of projectiles in large-caliber railgun launching [J]. Journal of Army Engineering University of PLA, 2024, 3(1): 56 - 62. (in Chinese)
- [26] LIU S W, MIAO H Y, LIU M. Investigation of the armature contact efficiency in a railgun [J]. IEEE Transactions on Plasma Science, 2019, 47(7): 3315 - 3319.
- [27] LIN Q H, LI B M. Numerical simulation of dynamic large deformation and fracture damage for solid armature in electromagnetic railgun [J]. Defence Technology, 2020, 16 (2): 348 - 353.
- [28] LIN Q H, LI B M. Numerical simulation of interior ballistic process of railgun based on the multi-field coupled model [J]. Defence Technology, 2016, 12(2): 101 - 105.
- (责任编辑:宋颖韬)