

## بررسی تئوری و تجربی اثر بازدارندگی عصاره گیاه پیاز عنصلی بر خوردگی استیل ۳۱۶

فاطمه مقدم دانا<sup>۱</sup>، ابراهیم هنرمند\*<sup>۲</sup>، حسین مستعان زاده<sup>۳</sup>، مریم خیاط کاشانی<sup>۴</sup>

### چکیده

عصاره گیاه پیاز عنصلی به عنوان بازدارنده خوردگی استیل ۳۱۶ در محیط اسیدی HCl ۲ مولار به دو روش تئوری و تجربی مورد بررسی قرار گرفت. در روش تجربی، با استفاده از روش‌های وزن سنجی و پلاریزاسیون، غلظت‌های مختلف از بازدارنده بررسی شد که نتایج، جذب بازدارنده روی سطح استیل را نشان می‌دهد. با انجام محاسبات کوانتومی از اساس، ساختار بهینه ترکیبات اصلی موجود در عصاره به دست آمده و مقادیر انرژی بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (EHOMO)، انرژی پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده (ELUMO)، شکاف انرژی ( $\Delta E$ )، ممان دوقطبی ( $\mu$ )، الکترونگاتیوی ( $\chi$ )، سختی شیمیایی ( $\eta$ ) و تعداد الکترون-های منتقل شده ( $\Delta N$ ) با استفاده از نرم افزار گوسین محاسبه شده و ترکیبی در عصاره که می‌تواند بالاترین اثر بازدارندگی خوردگی را داشته باشد پیشنهاد گردید.

واژگان کلیدی: خوردگی، استیل، عصاره پیاز عنصلی، محاسبات شیمی کوانتومی

### ۱-مقدمه

آهن و آلیاژهای آن به دلیل داشتن خواص مکانیکی عالی و هزینه‌های پایین به عنوان فلز ساختاری در بسیاری از صنایع شیمیایی و پتروشیمی به کار گرفته شده و نقش مهمی در زندگی ما ایفا می‌کنند. محلول‌های اسیدی به ویژه HCl در زمینه‌های مختلف صنعتی از جمله: رسوب زدایی از سطح فلزات آهنی، صنایع شیمیایی، نفتی و هسته ای کاربردهای گسترده‌ای دارند. از طرفی محلول‌های آبی اسیدی خورنده ترین محیط‌ها هستند که به فلزات حمله کرده و باعث آسیب جدی به فلز و تخریب خواص آن می‌شوند. به همین دلیل امروزه مطالعه پدیده خوردگی فولاد به ویژه در محیط‌های اسیدی به یک موضوع مهم صنعتی و علمی تبدیل شده است. در میان روش‌های حفاظت از خوردگی، بازدارنده‌های خوردگی با توجه به کاربرد آسان، هزینه‌های معقول و کارایی مؤثر اخیراً

<sup>۱</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد شیمی تجزیه، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم، قم، ایران

<sup>۲</sup> استادیار، دکتری تخصصی شیمی تجزیه، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم، قم، ایران

<sup>۳</sup> استادیار، دکتری تخصصی شیمی معدنی، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم، قم، ایران

<sup>۴</sup> دکتری تخصصی شیمی تجزیه، گروه شیمی تجزیه، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران