

Nghiên cứu hệ chất ức chế xanh từ cao lá Giang và hạt nano TiO₂ cho thép mềm trong xăng sinh học

Nguyễn Sĩ Hoài Vũ^{1,2}, Vũ Thị Hạnh Thu²*

¹Viện Khoa học Cơ bản và Ứng dụng, Trường Đại học Duy Tân

²Khoa Vật lý – Vật lý Kỹ thuật, Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên, ĐHQG-HCM
nguyenshoaivu@dtu.edu.vn, vththu@hcmus.edu.vn

Tóm tắt

Lớp phủ hữu cơ cấu trúc xốp được hình thành từ cao lá Giang (CLG) trên bề mặt thép đã giúp giảm thiểu đáng kể các quá trình ăn mòn trên bề mặt. Hiệu suất bảo vệ của CLG đạt 92% tại nồng độ tối ưu 1000 ppm nhưng vẫn không thể ngăn cản sự ăn mòn cục bộ trên bề mặt thép do các tác nhân gây ăn mòn có trong xăng sinh học. Nhược điểm trên xuất phát từ cấu trúc chứa nhiều lỗ xốp và kênh dẫn của lớp phủ hữu cơ CLG, có thể khắc phục bằng cách thêm chất hiệp trợ ức chế là hạt nano TiO₂ (TNP). Sự thay đổi nồng độ (trong khoảng vài chục ppm) và kích thước của TNP (trong khoảng vài chục nm) đã được khảo sát thông qua các phép đo quang học, điện hóa và phân tích bề mặt. Kết quả thực nghiệm cho thấy CLG và TNP khi kết hợp với nhau đã hình thành lớp phủ hỗn hợp có độ bám dính và độ bền nhiệt được tăng cường, kết quả mô phỏng từ lý thuyết phiếm hàm mật độ và động học phân tử cho thấy sự phù hợp tốt với các kết quả từ thực nghiệm.

Từ khóa: Xăng sinh học, chất ức chế; hạt nano; cao lá; thép; lý thuyết phiếm hàm mật độ; động học phân tử;

A study on Aganonerion Polymorphum Leaf Extract and TiO₂ nanoparticles as green inhibitor for mild steel in biogasoline

Nguyen Si Hoai Vu^{1,2}, Vu Thi Hanh Thu²*

¹Institute of Fundamental and Applied Sciences, Duy Tan University

²Faculty of Physics and Engineering Physics, University of Science, VNU-HCM
nguyenshoaiVu@dtu.edu.vn, vththu@hcmus.edu.vn

Abstract

An organic porous film derived from Aganonerion polymorphum leaf extract (APLE) inhibitor on steel surface has significantly reduced the corrosion processes on it. The protection effectiveness was very good (92%) but only APLE could not have prevented steel surface from localized corrosion by aggressive ions from biogasoline, even an optimum concentration (1000 ppm) of APLE was added. The downside originated from the pores and pinholes of APLE film, that can be filled up by TiO₂ nanoparticles (TNPs) synergistic inhibitor. The TNPs with varied diameters (tenths of nanometers) and concentrations (tenths of ppm) have been examined its synergistic inhibiting effect using optical, electrochemical and surface analysis techniques. Results indicated the enhanced corrosion inhibition of surficial film due to the co-existence of APLE and an appropriate amount of TNPs inhibitors. A direct agreement was observed on density functional theory and molecular dynamics simulation, showcasing good adhesion and thermal stability of the adsorbent film.

Key words: Biogasoline; green inhibitor; mild steel; nanoparticles; leaf extraction; molecular dynamics; density functional theory;