

Povzetek

Azoli in njihovi derivati spadajo med učinkovite organske inhibitorje korozije bakra. Z molekulskim modeliranjem na osnovi teorije gostotnega funkcionala (angl. *density functional theory*, DFT) smo obravnavali interakcijo modelnih azolov (imidazola, triazola in tetrazola) z oksidirano površino bakra. V raziskavo smo vključili $\text{Cu}_2\text{O}(111)$ in $\text{Cu}_2\text{O}(110)$ modela oksidirane površine bakra. Proučevali smo nevtralne (nedisociirane) in disociirane oblike omenjenih azolov. Ugotovili smo, da se molekule bistveno močnejše vežejo na koordinacijsko nenasičena (angl. *coordinatively unsaturated*, CUS) mesta bakra kot na nasičena (angl. *coordinatively saturated*, CSA). Disociirane molekule se na obravnavane površine vežejo bistveno močnejše kot nevtralne, čeprav se lahko tudi slednje močno vežejo na specifična mesta CUS. Vse tri obravnavane azolne molekule se v nevtralni obliki vežejo s podobnimi adsorpcijskimi energijami, medtem ko pride do razlik pri vezavi disociiranih oblik azolov. Opazili smo, da je pri cepitvi N–H vezi disociativna adsorpcija ugodna le za triazol in tetrazol, vendar le na kisikovih prazninah, kjer poteka brez bariere (ali z minimalno bariero). Na podlagi tega smo sklepali, da sta triazol in tetrazol—pod nevtralnimi pogoji, kjer je baker pogosto oksidirán—lahko aktivna kot inhibitorja korozije v disociirani obliki, medtem ko je imidazol bolj relevanten v nedisociirani obliki. Nadalje smo proučili vezavo Cl, ki ga lahko obravnavamo kot aktivatorja korozije. Izračuni so pokazali, da se lahko samo disociirana triazol in tetrazol vežeta tako močno, da izpodrineta Cl, ki je vezan na površino. Na osnovi termodinamskega pristopa smo opisali dvo-dimenzionalne fazne diagrame za vse tri molekule. Kljub temu, da se disociirane molekule na površine vežejo močnejše, se nobena od obravnavanih struktur disociiranih molekul ne pojavi na faznih diagramih. Rezultati faznih diagramov za $\text{Cu}_2\text{O}(111)$ model so pokazali, da se vse tri molekule (imidazol, triazol in tetrazol) vežejo na specifična mesta CUS in jih tudi stabilizirajo pod pogoji, kjer je molekularna adsorpcija še stabilna. Rezultati nakazujejo na to, da je inhibicijska učinkovitost azolov morda lahko povezana z njihovo sposobnostjo pasivacije reaktivnih mest na površini. Nadalje smo proučili adsorpcijo nedisociirane in disociirane oblike molekule vode na tri modele $\text{Cu}_2\text{O}(111)$ površine. Nedisociirana molekula vode se veže na površino preko O–Cu vezi le z nenasičenimi mesti bakra. V primeru, da teh mest na površini ni, voda tvori vodikove vezi s kisikom na površini. Ugotovili smo, da je adsorpcija disociiranih molekul vode eksotermna le v primeru vezave na kisikove praznine.

Ključne besede: DFT izračuni, azoli, adsorpcija, bakrov oksid, korozijski procesi.