

NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC, TÍNH CHẤT VÀ KHẢ NĂNG ỨC CHẾ ĂN MÒN Fe (110) CỦA PYRAZINE VÀ DẪN XUẤT BẰNG TÍNH TOÁN HÓA LƯỢNG TỬ

Nguyễn Thị Hà Giang¹, Huỳnh Thị Phương Loan¹, Phan Tứ Quý², Nguyễn Thị Ái Nhung^{1,*}

¹Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế

²Khoa Tự nhiên và Công nghệ, Trường Đại học Tây Nguyên

*Email: ntanhung@hueuni.edu.vn

Ngày nhận bài: 9/9/2020; ngày hoàn thành phản biện: 22/9/2020; ngày duyệt đăng: 02/10/2020

TÓM TẮT

Cấu trúc, tính chất và khả năng ức chế ăn mòn Fe (110) của hợp chất pyrazine (**PY**) và các dẫn xuất 2-(2-oxohydrazinyl)pyrazine (**OHPY**), 2-isopropyl-3-methoxypyrazine (**IPPY**), và 2-isobutyl-3-methoxypyrazine (**IBPY**) được nghiên cứu bằng tính toán hóa lượng tử. Cấu trúc tối ưu của các hợp chất nghiên cứu cho thấy không có sự khác biệt nhiều về độ dài và góc của các liên kết trong các phân tử **PY**, **OHPY**, **IPPY** và **IBPY**. Phân tích orbital liên kết tự nhiên khẳng định các dẫn xuất pyrazine đồng thời có khả năng cho các electron vào orbital trống của kim loại và có khả năng nhận electron tự do từ kim loại và chúng là các chất tiềm năng trong ức chế ăn mòn kim loại. Kết quả mô phỏng Monte Carlo cho thấy năng lượng hấp phụ cao giữa tương tác của chất ức chế và mặt Fe (110). Hợp chất **PY** và các dẫn xuất **OHPY**, **IPPY**, **IBPY** được khảo sát đều được hấp thụ song song định hướng trên bề mặt Fe (110) chứng tỏ có khả năng ức chế ăn mòn kim loại tốt.

Từ khóa: pyrazine, ức chế ăn mòn, lý thuyết phiếm hàm mật độ, mô phỏng Monte Carlo.

QUANTUM CHEMICAL INVESTIGATIONS OF STRUCTURE, PROPERTY, AND CORROSION INHIBITION Fe (110) OF PYRAZINE AND ITS DERIVATIVES

Nguyen Thi Ha Giang¹, Huynh Thi Phuong Loan¹, Phan Tu Quy², Nguyen Thi Ai Nhung^{1,*}

¹ Faculty of Chemistry, University of Sciences, Hue University

² Tay Nguyen University

*Email: ntanhung@hueuni.edu.vn

ABSTRACT

We theoretically investigate structure, property and inhibitory ability of pyrazine (PY) and its derivatives: 2-(2-oxohydrazinyl)pyrazine (OHPY), 2-isopropyl-3-methoxypyrazine (IPPY), and 2-isobutyl-3-methoxypyrazine (IBPY) using density functional theory (DFT) and Monte Carlo simulations. The optimization of equilibrium geometries of PY, OHPY, IPPY and IBPY shows that there are some minor differences in the bond length and bond angles between pyrazine rings of PY and the three derivatives studied. The analysis of natural bond orbitals shows that the three substituted pyrazine derivatives OHPY, IPPY, IBPY may have the capability in donating electrons to unoccupied orbitals of metal and exhibit equal possibility to accept free electrons from metal which might be considered as good corrosion inhibitors. All the molecules PY and its derivatives adsorbed totally in a parallel at manner on Fe (110), which enhances its surface coverage as good interaction with the steel surface Fe (110).

Keywords: pyrazine, corrosion inhibitor, density functional theory, Monte Carlo simulation.



Nguyễn Thị Ái Nhung sinh năm 1980. Bà tốt nghiệp cử nhân Hóa học tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế; nhận bằng thạc sĩ chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý tại trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế; nhận bằng tiến sĩ ngành Hóa lý thuyết tại trường Đại học tổng hợp Philipps, Marburg, Cộng Hòa Liên Bang Đức. Bà được phong học hàm phó giáo sư năm 2018. Hiện nay, bà giảng dạy và nghiên cứu tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa lượng tử và hóa lý thuyết.