

# CẤU TRÚC ELECTRON VÀ KHẢ NĂNG ỨC CHẾ ẮN MÒN KIM LOẠI CỦA MỘT SỐ DẪN XUẤT AXETOPHENON BENZOYL HIRAZON

Electronic Structure and Metal Corrosion Inhibitor Efficiency of some Acetophenone Benzoyl Hydrazone Derivatives

Vũ Minh Tân\*, Nguyễn Quang Tùng, Ngô Thúy Vân

Đại học Công nghiệp Hà Nội

\* e-mail: tanvm@hau.edu.vn

**TÓM TẮT** Trong công trình này chúng tôi tiến hành nghiên cứu sự ăn mòn Đồng trong môi trường axit  $\text{HNO}_3$  3M với chất ức chế là một số dẫn xuất acetophenon benzoyl hidrazon. Các thông số cấu trúc của hợp chất trên được tính toán bằng phương pháp AM1 trong phần mềm HyperChem 7.0. Các thông số cấu trúc thu được từ tính toán kết hợp với hiệu quả ức chế thực nghiệm (P) đưa vào phần mềm Statgraphic 4.0 để thực hiện phép hồi qui đa biến. Trên cơ sở đó rút ra kết luận mối liên hệ giữa cấu trúc electron và khả năng ức chế ăn mòn kim loại của một số dẫn xuất acetophenon benzoyl hidrazon.

**ABSTRACT** The study investigates the copper corrosion in 3M nitric acid solution that uses some acetophenone benzoyl hydrazone derivatives as inhibitors. The structure parameters of those compounds are computed by AM1 method attached to HyperChem 7.0 software. The computed structure parameters are combined with practical inhibition efficiency (P) to run a multi-variable regression using Statgraphic 4.0 software. Based on regression results, we draw a conclusion on the relation between electronic structure and metal corrosion inhibitor efficiency of some acetophenone benzoyl hydrazone derivatives.