

NGHIÊN CỨU MỐI TƯƠNG QUAN GIỮA CẤU TRÚC ELECTRON VÀ KHẢ NĂNG ỨNG CHẾ ẮN MÒN KIM LOẠI CỦA MỘT SỐ BENZOYL HIDRAZIT CỦA 1-AXETYL-2-HIDROXI NAPHTALEN

A Study on Relation between Electronic Structure and Corrosion Inhibition Efficiency of some Benzoyl Hydrides of 1-Acetyl-2-Hydroxy Naphthalene Compounds

Vũ Minh Tân^{a*}, Phạm Văn Nhiêu^b, Nguyễn Hải Yến^b

^a Khoa Công nghệ Hoá, Đại học Công nghiệp Hà Nội

^b Khoa Hoá học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội

* e-mail: vuminhtanvn@yahoo.com

TÓM TẮT Trong bài báo này chúng tôi tiến hành nghiên cứu sự ăn mòn đồng trong môi trường axit HNO_3 3M với chất ức chế là một số benzoyl hidrazit của 1-axetyl-2-hidroxi naphtalen. 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 suất 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 hợp chất benzoyl hidrazit của 1-axetyl-2-hidroxi naphtalen.

ABSTRACT The study investigates the corrosion of copper in 3M nitric acid solution using some benzoyl hydrides of 1-acetyl-2-hydroxy naphthalene compounds 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 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 corrosion inhibition efficiency of some benzoyl hydrides of 1-acetyl-2-hydroxy naphthalene compounds.