

ĐẠI HỌC QUỐC GIA TP. HỒ CHÍ MINH
TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA

PHẠM THANH HẢI

NGHIÊN CỨU ẢNH HƯỞNG CỦA CẤU TRÚC PHÂN TỬ MỘT SỐ
HỢP CHẤT HỮU CƠ LÊN HIỆU QUẢ ỨNG DỤNG CHẾ ẨM MÒN
KIM LOẠI ĐỒNG

Ngành: Kỹ thuật hóa học

Mã số ngành: 9520301

TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SĨ

TP. HỒ CHÍ MINH - NĂM 2025

Công trình được hoàn thành tại **Trường Đại học Bách Khoa – ĐHQG-HCM**

Người hướng dẫn 1: PGS. TS. **ĐỖ NGỌC SƠN**

Người hướng dẫn 2: PGS. TS. **TRẦN TẤN VIỆT**

Phản biện độc lập:

Phản biện độc lập:

Phản biện:

Phản biện:

Phản biện:

Luận án sẽ được bảo vệ trước Hội đồng đánh giá luận án họp tại

.....

.....

vào lúc giờ ngày tháng năm

Có thể tìm hiểu luận án tại thư viện:

- Thư viện Trường Đại học Bách Khoa – ĐHQG-HCM
- Thư viện Đại học Quốc gia Tp.HCM
- Thư viện Khoa học Tổng hợp Tp.HCM

DANH MỤC CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ

Tạp chí quốc tế

1. **Thanh Hai Pham**, Phung Thi Kim Le, and Do Ngoc Son, “A data-driven QSPR model for screening organic corrosion inhibitors for carbon steel using machine learning techniques,” *RSC Adv.*, vol. 14, no. 16, pp. 11157–11168, 2024. (SCIE, Q1, IF=3.9)
2. **Thanh Hai Pham**, Ong Kim Le, Viorel Chihaiia, Phung Thi Kim Le, and Do Ngoc Son, “Computational Prediction of Electrochemical Corrosion Rates of Copper in the Presence of Corrosion Inhibitors,” *J. Electrochem. Soc.*, vol. 170, no. 11, p. 111504, Nov. 2023. (SCIE, Q1, IF=3.1)
3. **Thanh Hai Pham**, Viorel Chihaiia, Phung Thi Kim Le, and Do Ngoc Son, “Experimental and Computational Insights into the Effects of -NH₂ and -Cl Functional Groups on the Copper Corrosion Inhibition of Benzotriazole,” *J. Electrochem. Soc.*, vol. 171, no. 11, p. 111502, Nov. 2024. (SCIE, Q1, IF=3.1)
4. **Thanh Hai Pham**, Viorel Chihaiia, and Do Ngoc Son, “Unravelling the effects of functional groups on the adsorption of 2-mercaptobenzothiazole on a copper surface: a DFT study,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 26, no. 24, pp. 17345–17358, 2024. (SCIE, Q2, IF=2.9)

Báo cáo hội nghị quốc tế

1. **Thanh Hai Pham** and Do Ngoc Son, “Prediction of Adsorption Energies for Corrosion Inhibitors on Cu (111) Surface Using Machine Learning,” *10th Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry Conference (APATCC-10)*, Feb. 2023. (Poster)

MỞ ĐẦU

Mối liên hệ giữa cấu trúc phân tử của các hợp chất hữu cơ với hiệu quả ức chế ăn mòn (UCAM) kim loại là vấn đề khoa học cốt lõi trong nghiên cứu phát triển chất UCAM mới. Tuy nhiên cho đến nay, mối tương quan rõ ràng và nhất quán giữa cấu trúc và hiệu quả UCAM của các hợp chất hữu cơ vẫn chưa được đưa ra. Luận án này kết hợp giữa phân tích dữ liệu thực nghiệm (đã được công bố và tự thực hiện) với một số phương pháp mô hình hóa như học máy, tính toán lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) và mô phỏng động học phản ứng để nghiên cứu ảnh hưởng của cấu trúc phân tử các hợp chất hữu cơ đến hiệu quả UCAM đồng trong dung dịch axit, từ đó đưa ra các luận cứ khoa học trong thiết kế và lựa chọn các hợp chất UCAM mới hiệu quả hơn cho đồng.

CHƯƠNG 1 TỔNG QUAN

1.1 Ức chế ăn mòn kim loại

Chất UCAM kim loại là hợp chất hóa học mà khi thêm vào môi trường một lượng nhỏ sẽ làm giảm tốc độ ăn mòn kim loại đến một mức độ có thể chấp nhận được. Chất UCAM được sử dụng rộng rãi để bảo vệ kim loại trong nhiều ngành công nghiệp. Khả năng UCAM của một hợp chất thường được đánh giá bằng hiệu quả UCAM xác định thông qua các phương pháp thực nghiệm như thử nghiệm giảm khối lượng, đường phân cực thế động, điện trở phân cực, hoặc phổ tổng trở điện hóa. Hiệu quả UCAM phụ thuộc vào nhiều yếu tố như chủng loại kim loại, điều kiện môi trường, nồng độ chất ức chế và bản chất chất ức chế. Trong đó ảnh hưởng của bản chất chất ức chế đến hiệu quả UCAM là vấn đề nghiên cứu trọng tâm trong lĩnh vực này.

1.2 Ảnh hưởng của cấu trúc các hợp chất hữu cơ đến hiệu quả UCAM

Nghiên cứu phát triển các hợp chất UCAM mới đòi hỏi phải tiến hành sàng lọc và thử nghiệm trên một số lượng lớn các hợp chất hữu cơ, rất tốn thời gian và kinh phí. Cơ chế UCAM và mối liên hệ giữa cấu trúc của các hợp chất hữu cơ

và hiệu quả UCAM là cơ sở khoa học quan trọng để lựa chọn, thiết kế và thử nghiệm các chất UCAM mới.

Các thông số hóa lượng tử đã được sử dụng rộng rãi trong việc giải thích xu hướng biến đổi hiệu quả UCAM của các hợp chất hữu cơ. Mặc dù các mối quan hệ định tính giữa các thông số hóa lượng tử với hiệu quả UCAM đã được đưa ra trong rất nhiều nghiên cứu, nhưng các nghiên cứu này chỉ khảo sát một số lượng rất ít các hợp chất (thường chỉ 2-3 hợp chất). Các kết quả khảo sát trên một số lượng lớn các hợp chất cho thấy không tồn tại một mối tương quan phổ quát giữa các thông số hóa lượng tử với hiệu quả UCAM.

Các kết quả nghiên cứu đã công bố cũng cho thấy năng lượng tương tác giữa chất ức chế với bề mặt kim loại có mối tương quan nhất định với hiệu quả UCAM. Tuy nhiên, năng lượng tương tác cũng không phải là yếu tố duy nhất quyết định đến khả năng UCAM, mối tương quan phổ quát giữa năng lượng tương tác với hiệu quả UCAM cũng không tồn tại.

Các nhóm chức trong cấu trúc phân tử chất ức chế cũng có ảnh hưởng rõ rệt đến hiệu quả UCAM kim loại. Đã có nhiều nghiên cứu khảo sát ảnh hưởng của các nhóm chức đến hiệu quả UCAM kim loại của nhiều nhóm chất hữu cơ. Các nghiên cứu cho thấy ảnh hưởng của các nhóm chức đến hiệu quả UCAM đồng có sự khác biệt so với thép. Mặc dù đã có những giải thích khác nhau được đưa ra, tuy nhiên bản chất vật lý của vấn đề trên vẫn chưa được làm sáng tỏ.

1.3 Mô hình định lượng tương quan giữa cấu trúc và hiệu quả UCAM của các hợp chất hữu cơ

Bên cạnh các xu hướng định tính, các mô hình định lượng ảnh hưởng của cấu trúc phân tử đến hiệu quả UCAM kim loại của các hợp chất hữu cơ cũng đã được nghiên cứu. Trong đó có các mô hình QSPR (Quantitative structure-property relationship) được xây dựng dựa trên kết hợp phân tích dữ liệu với phương pháp học máy và các mô hình đẳng nhiệt hấp phụ được suy ra dựa trên lý thuyết cân bằng hấp phụ.

Các mô hình QSPR giữa cấu trúc và hiệu quả UCAM của các hợp chất hữu cơ thường được xây dựng dựa trên sự kết hợp giữa dữ liệu và thuật toán học máy thông qua một quy trình học máy bao gồm nhiều bước như thu thập dữ liệu đầu ra, tính toán dữ liệu đầu vào, lựa chọn thuật toán, lựa chọn thông số đầu vào, đánh giá mô hình... Có hai nhóm mô hình QSPR đã được đề xuất gồm: các mô hình QSPR dựa trên thông số hóa lượng tử và các mô hình QSPR dựa trên thông số cấu trúc.

Mặc dù các thông số hóa lượng tử và năng lượng tương tác có mối tương quan nhất định với hiệu quả UCAM, tuy nhiên các mô hình QSPR dựa trên các thông số này nhìn chung vẫn chưa có độ chính xác cao. Mặt khác, do tính toán các thông số hóa lượng tử hoặc năng lượng tương tác cần sử dụng các phương pháp tính toán hóa lượng tử như DFT nên tốn nhiều thời gian và tài nguyên tính toán. Do vậy, các mô hình QSPR dựa trên thông số này mới chỉ được xây dựng trên các tập dữ liệu khá nhỏ, chỉ đến vài chục hợp chất.

Các mô hình QSPR dựa trên thông số cấu trúc đã được xây dựng trên các tập dữ liệu lớn hơn do các thông số cấu trúc có thể tính toán dễ dàng và nhanh chóng hơn rất nhiều. Mặt khác các mô hình QSPR loại này cũng có độ chính xác khả quan. Tuy nhiên tính giải thích kém là một hạn chế lớn của các mô hình QSPR dựa trên thông số cấu trúc do số lượng thông số cấu trúc rất nhiều và ý nghĩa vật lý không rõ ràng như các thông số hóa lượng tử. Ngoài ra mô hình học máy cần một số lượng lớn các dữ liệu thực nghiệm, tuy nhiên số lượng dữ liệu được công bố hiện tại vẫn còn khá hạn chế, đặc biệt là dữ liệu ở mức hiệu quả UCAM thấp vì hầu hết các nghiên cứu được công bố đều tập trung vào các hợp chất UCAM có hiệu quả cao.

Các mô hình đẳng nhiệt hấp phụ được suy ra từ lý thuyết và kiểm chứng qua kết quả thực nghiệm. Tuy nhiên một thông số quan trọng trong đẳng nhiệt hấp phụ là năng lượng tự do hấp phụ tiêu chuẩn ΔG_{ads}^0 cho đến nay vẫn chưa có phương pháp xác định trực tiếp bằng thực nghiệm, hoặc tính toán được từ các phương pháp tính toán mô phỏng. Do vậy việc sử dụng mô hình đẳng nhiệt hấp

phụ để dự đoán hiệu quả UCAM vẫn chưa thể thực hiện. Tuy nhiên đáng nhiệt hấp phụ là mô hình có cơ sở vật lý rõ ràng, các mô hình dạng này cũng cho thấy tiềm năng trong nghiên cứu tương quan giữa cấu trúc phân tử và hiệu quả UCAM kim loại của các hợp chất hữu cơ.

1.4 Đặt vấn đề nghiên cứu

Tổng quan cho thấy nghiên cứu phát triển các hợp chất UCAM mới có hiệu quả ức chế cao hơn, ít độc hại và thân thiện hơn với môi trường là nhu cầu cấp thiết đang được đặt ra trong lĩnh vực UCAM kim loại. Mối liên hệ giữa cấu trúc phân tử và hiệu quả UCAM là căn cứ khoa học cốt lõi để sàng lọc hoặc thiết kế chất UCAM mới. Tuy nhiên một mối liên hệ rõ ràng và nhất quán vẫn chưa được tìm thấy. Cho thấy *ảnh hưởng của cấu trúc phân tử đến hiệu quả UCAM kim loại của các hợp chất hữu cơ* vẫn còn nhiều vấn đề chưa được làm sáng tỏ.

Tổng quan cũng cho thấy, việc kết hợp giữa khảo sát thực nghiệm với các phương pháp mô hình hóa như học máy hoặc tính toán DFT có thể định lượng được ảnh hưởng của cấu trúc phân tử đến hiệu quả UCAM hữu cơ. Tuy nhiên cho đến hiện tại vẫn chưa có một mô hình tính toán nào cho thấy tính phổ quát và giải thích được cơ chế vật lý ảnh hưởng của cấu trúc phân tử đến hiệu quả UCAM của các hợp chất hữu cơ. Do vậy *mô hình hóa ảnh hưởng của cấu trúc phân tử đến hiệu quả UCAM kim loại của các hợp chất hữu cơ* là một vấn đề nghiên cứu có ý nghĩa về mặt khoa học và có tiềm năng ứng dụng để phát triển chất UCAM mới trong thực tiễn.

CHƯƠNG 2 PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1 Vật liệu và hóa chất

Các mẫu kim loại và các loại hóa chất sử dụng trong luận án đều có sẵn trên thị trường và được liệt kê chi tiết trong luận án.

2.2 Các phương pháp thực nghiệm

Các phương pháp như thử nghiệm tổn hao khối lượng và phép đo điện hóa xác định đường phân cực thể động được sử dụng để xác định hiệu quả UCAM.

Ngoài ra các phương pháp phân tích bề mặt như chụp ảnh kính hiển vi điện tử quét (SEM), quét ảnh kính hiển vi lực nguyên tử (AFM), đo phổ hồng ngoại biến đổi Fourier phản xạ toàn phần suy giảm (ATR-FTIR) và đo góc thấm ướt cũng được sử dụng để đánh giá khả năng UCAM của các dẫn xuất benzotriazol (BTAH) và 2-mercaptobenzothiazol (MBTH) thông qua hình thái và cấu trúc bề mặt mẫu đồng trước và sau thử nghiệm ăn mòn.

2.3 Phương pháp học máy

Phương pháp học máy được sử dụng để xây dựng mô hình QSPR giữa cấu trúc và hiệu quả UCAM thép cacbon và đồng của các hợp chất hữu cơ. Quy trình học máy bao gồm các bước như: thu thập dữ liệu thực nghiệm hiệu quả UCAM, tính toán các thông số miêu tả phân tử, lựa chọn thuật toán học máy, tối ưu siêu tham số của mô hình, lựa chọn các thông số miêu tả phân tử, đánh giá hiệu quả của mô hình và dự đoán hiệu quả UCAM cho các hợp chất mới.

2.3.1 Thu thập dữ liệu thực nghiệm

Tập dữ liệu thực nghiệm về hiệu quả UCAM thép cacbon trong dung dịch HCl 1 M bao gồm dữ liệu của 317 hợp chất hữu cơ ở nhiệt độ 25-30 °C với nồng độ chất ức chế là 1 mM.

Tập dữ liệu thực nghiệm về hiệu quả UCAM đồng trong dung dịch H₂SO₄ 0.5 M bao gồm dữ liệu của 75 hợp chất hữu cơ ở nhiệt độ 25 °C ở các nồng độ chất UCAM khác nhau.

2.3.2 Tính toán các thông số miêu tả phân tử

Trong nghiên cứu này, hai loại thông số miêu tả thường dùng là thông số cấu trúc (structural descriptor) và dấu vân tay phân tử (molecular fingerprints) được sử dụng để miêu tả cấu trúc phân tử.

2.3.3 Lựa chọn thuật toán học máy

Trong nghiên cứu này thuật toán hồi quy gradient-boosted decision trees (GB) được sử dụng để xây dựng mô hình học máy. GB thuộc nhóm thuật toán học máy kết hợp, với bộ học cơ sở là cây quyết định. Thuật toán GB sử dụng trong

nguyên cứu này được tích hợp vào GradientBoostingRegressor, một mô hình hồi quy trong gói Python scikit-learn. Ngoài ra, nguyên cứu cũng so sánh hiệu quả của GB với một số thuật toán học máy điển hình khác như hồi quy tuyến tính (Linear Regression, LR), hồi quy Kernel Ridge (KR) và rừng ngẫu nhiên (Random Forest, RF) được tích hợp trong các mô hình LinearRegression, KernelRidge và RandomForestRegressor tương ứng của gói scikit-learn.

2.3.4 Tối ưu các siêu tham số của mô hình

Phương pháp đánh giá chéo tìm kiếm lưới (Grid Search Cross Validation) được sử dụng để lựa chọn giá trị tối ưu cho các siêu tham số của mô hình. Phương pháp này so sánh hiệu quả của mô hình trong tất cả giá trị siêu tham số được khảo sát từ đó đề xuất giá trị tối ưu cho các siêu tham số.

2.3.5 Lựa chọn thông số miêu tả cấu trúc phân tử

Bên cạnh việc sử dụng tất cả 208 thông số cấu trúc (tập 2Ddes) làm dữ liệu đầu vào cho mô hình, nguyên cứu này cũng tiến hành lựa chọn các thông số cấu trúc có tính tương quan cao với hiệu quả UCAM để tối ưu hiệu quả dự đoán và nâng cao tính giải thích của mô hình. Việc lựa chọn thông số cấu trúc dựa trên mức độ quan trọng của thông số ước tính bằng phương pháp hoán vị (Permutation Feature Importance, PFI).

2.3.6 Đánh giá hiệu quả của mô hình

Hiệu quả dự đoán của mô hình được đánh giá bằng phương pháp đánh giá chéo K-fold (K-fold CV) hoặc K-fold nhóm (Group K-fold CV) với K bằng 10. Hiệu quả dự đoán của mô hình được đánh giá dựa trên giá trị trung bình của các chỉ số gồm sai số căn bậc hai bình phương trung bình (Root Mean Square Error, RMSE), sai số tuyệt đối trung bình (Mean Absolute Error, MAE) và hệ số xác định (Coefficient of Determination, R^2) của tập đánh giá qua 10 lần chia.

2.4 Phương pháp mô phỏng động học phản ứng

2.4.1 Mô phỏng đường phân cực catot

Phương pháp mô phỏng vi động học (microkinetic) được sử dụng để mô phỏng đường phân cực catot khi đồng ăn mòn trong dung dịch axit. Để mô phỏng vi động học, tất cả các bước cơ bản của ORR đều được xem xét.

Sau khi tính được tốc độ phản ứng của các bước cơ bản theo điện thế U , mật độ dòng điện (i) do ORR sinh ra được tính theo công thức sau:

$$i = e\rho_{\text{orr}}\text{TOF}_{e^{-}}, \quad (2.25)$$

trong đó $\text{TOF}_{e^{-}}$ là tổng tần số chuyển đổi (turn over frequency) electron của tất cả các bước phản ứng, e là điện tích cơ bản, ρ_{orr} là mật độ của vị trí hoạt hóa trên bề mặt.

2.4.2 Mô phỏng đường Tafel anot

Đường Tafel anot được mô phỏng dựa trên phương trình Butler-Volmer theo một công bố trước đây của Ma và đồng nghiệp:

$$i = i_0 \left\{ \exp \left[\frac{\alpha n F (U - U_e)}{RT} \right] - \exp \left[- \frac{(1 - \alpha) n F (U - U_e)}{RT} \right] \right\}, \quad (2.26)$$

Khi xem xét ảnh hưởng của chất ức chế sẽ thu được phương trình sau:

$$\ln i = \ln \left(c_M n F \frac{k_B T}{h} \right) + \frac{\alpha n F U - \Delta G_0}{RT} + \frac{E_{\text{surf}}}{\rho k_B T} + \frac{\rho_{\text{orr}} \theta_{X,e} \Delta G_{\text{ads},X}}{RT}. \quad (2.30)$$

Phương trình (2.30) miêu tả mối quan hệ tuyến tính giữa $\ln i$ và U ở anot, tức đường Tafel anot.

2.5 Phương pháp tính toán DFT

2.5.1 Tính toán tính chất điện tử của các hợp chất ức chế

Để khảo sát các tính chất điện tử của các hợp chất ức chế, các thông số hóa lượng tử của phân tử như phân bố và mức năng lượng các obitan biên, mô men lưỡng cực, điện tích nguyên tử được tính toán trên phần mềm ORCA 5.0 sử dụng hàm trao đổi tương quan B3LYP và bộ hàm cơ sở Def2-TZVP.

2.5.2 *Tính toán tương tác giữa hợp chất ức chế với bề mặt đồng*

Tương tác giữa chất ức chế với bề mặt đồng được tính toán trên các mô hình tuần hoàn thông qua phần mềm VASP sử dụng hàm trao đổi tương quan GGA-PBE và giả thế theo phương pháp PAW.

2.5.3 *Tính toán các phản ứng ăn mòn*

Các phản ứng ăn mòn bao gồm phản ứng khử oxy và phản ứng oxy hóa hòa tan đồng được tính toán để mô phỏng đường phân cực và khảo sát ảnh hưởng của các chất ức chế hấp phụ trên bề mặt. Để mô phỏng đường phân cực, các phản ứng ăn mòn được tính toán trên mô hình bề mặt đồng sạch. Để khảo sát ảnh hưởng của chất ức chế, các phản ứng ăn mòn được tính toán trên mô hình bề mặt đồng bị hấp phụ bởi một đơn lớp chất ức chế.

2.5.4 *Tính toán một số thông số khác*

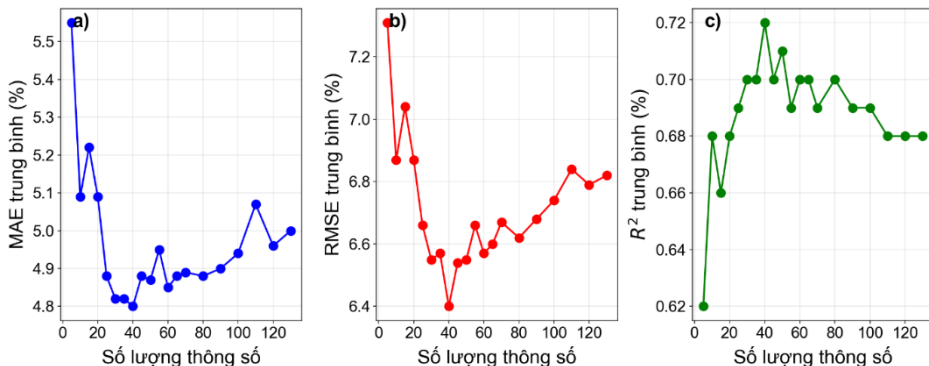
Phương pháp DFT cũng được sử dụng để tính toán một số thông số khác có liên quan như năng lượng bề mặt, hàm công, sai khác mật độ điện tích và tương tác phi cộng hóa trị.

CHƯƠNG 3 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1 *Mô hình QSPR giữa cấu trúc và hiệu quả UCAM thép và đồng của các hợp chất hữu cơ*

3.1.1 *Mô hình QSPR giữa cấu trúc và hiệu quả UCAM thép cacbon trong dung dịch HCl 1 M của các hợp chất hữu cơ*

Sử dụng phương pháp lựa chọn thông số PFI, luận án đã tìm ra được nhóm thông số cấu trúc cho hiệu quả dự đoán tối ưu gồm khoảng 40 thông số có chỉ số PFI cao nhất như Hình 3.1 thể hiện.



Hình 3.1 MAE, RMSE và R^2 trung bình của các mô hình sử dụng N thông số cấu trúc có chỉ số PFI cao nhất.

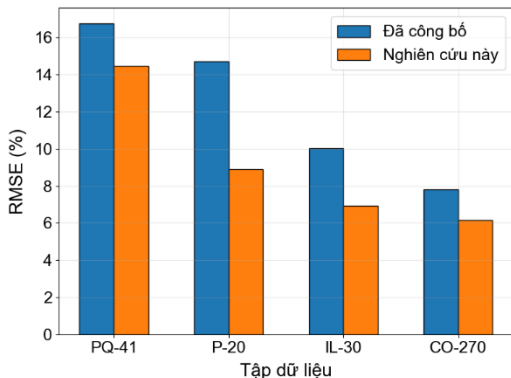
Mô hình sử dụng nhóm 40 thông số cấu trúc có chỉ số PFI cao nhất (GB/2Ddes40) cũng cho hiệu quả dự đoán tốt hơn so với các mô hình sử dụng các loại thông số miêu tả khác như 2Ddes, ECFP4 và 2Ddes40-ECFP4. Ngoài ra, Bảng 3.1 cho thấy mô hình GB/2Ddes40 có sai số dự đoán thấp hơn rõ rệt so sánh với các mô hình khác đã công bố.

Bảng 3.1 So sánh hiệu quả của mô hình GB/2Ddes40 với các mô hình khác đã công bố.

Tập dữ liệu	Số lượng hợp chất	Phương pháp đánh giá	MAE (%)	RMSE (%)	R^2	TLTK
Pyridin và quinolin	41	5-fold CV	-	16,74	-	[24]
Quinoxalin	40	5-fold CV	-	15,97	-	[184]
Pyridazin	20	5-fold CV	-	14,69	-	[141]
Chất lỏng ion	30	5-fold CV	-	10,01	-	[33]
Hợp chất hữu cơ	270	10-fold CV	5,30	7,82	0,41	[130]
Hợp chất hữu cơ	317	10-fold CV	4,80	6,42	0,72	NC này

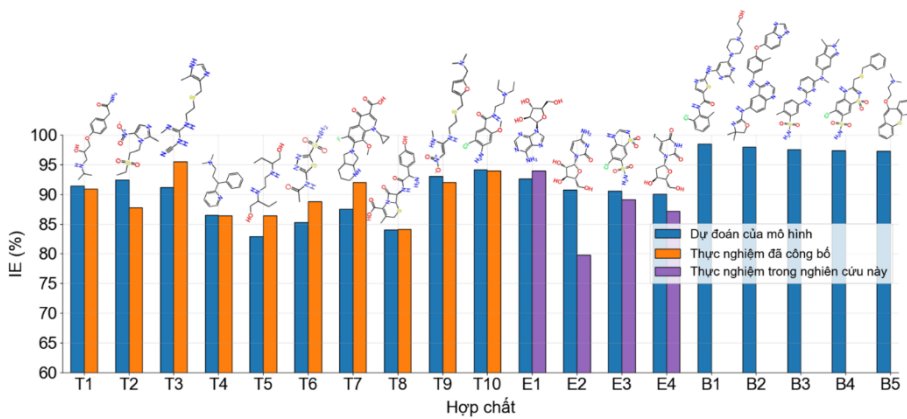
Kết quả cũng cho thấy, trong số 40 thông số cấu trúc có mức độ quan trọng cao nhất chủ yếu bao gồm các thông số topo (Chi, Kappa, BertCZ và BalabanJ), thông số BCUT2D và thông số MOE. Các nhóm thông số trên miêu tả các tính chất có liên quan đến hiệu quả UCAM như tính chất điện tử, cấu trúc hình học, tính kỵ nước, tính phân cực...

Kết quả đánh giá trên các tập dữ liệu đã công bố (Hình 3.6) cho thấy, khi sử dụng quy trình học máy và mô hình GB/2Ddes N được đề xuất bởi luận án này, độ chính xác trong dự đoán hiệu quả UCAM tăng lên rõ rệt so với các mô hình đã công bố.



Hình 3.2 So sánh RMSE của mô hình GB/2Ddes N với các mô hình đã công bố trên các tập dữ liệu có sẵn.

Độ chính xác của mô hình GB/2Ddes40 cũng được đánh giá thông qua các hợp chất thuốc được sử dụng làm chất UCAM. Kết quả đánh giá trên 10 hợp chất thuốc đã công bố cho thấy sai số tuyệt đối khá thấp, từ 0,1 đến 4,6 %. Kết quả đánh giá trên 4 hợp chất thuốc chưa được công bố cho thấy mô hình dự đoán chính xác được hiệu quả UCAM của 3 hợp chất gồm vidarabin, chlorothiazid và idoxuridin với sai số lần lượt là 1,4 %, 1,5 % và 2,9 %.



Hình 3.3 So sánh IE dự đoán và thực nghiệm của 10 hợp chất đã công bố (T1-T10) và 4 hợp chất chưa công bố (E1-E4) và 5 hợp chất thuốc có giá trị IE dự đoán cao nhất (B1-B5).

3.1.2 Mô hình QSPR giữa cấu trúc và hiệu quả UCAM đồng trong dung dịch H_2SO_4 0,5 M của các hợp chất hữu cơ

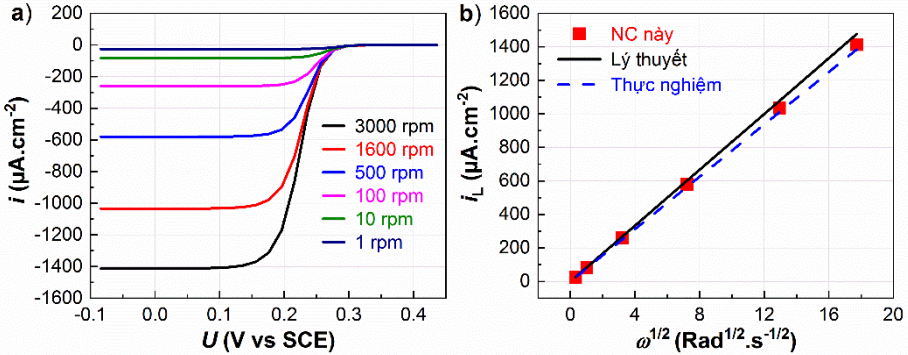
Mô hình QSPR cho đồng trong dung dịch H_2SO_4 0,5 M cũng được xây dựng khi kết hợp thuật toán GB với phương pháp lựa chọn thông số PFI, với dữ liệu đầu vào gồm khoảng 15 thông số cấu trúc. Mô hình này cũng cho hiệu quả tốt hơn rõ rệt so với các mô hình sử dụng các loại thông số miêu tả phân tử khác, tương tự kết quả thu được đối với thép cacbon.

Tuy nhiên, khi so sánh với kết quả giữa hai mô hình QSPR cho đồng và thép cacbon cho thấy các thông số cấu trúc quan trọng đối với đồng và thép cacbon có sự khác biệt, chỉ trùng khớp 6 thông số. Trong khi Chi0n và Chi2n là hai thông số quan trọng nhất trong mô hình QSPR cho thép nhưng lại không xuất hiện trong 15 thông số quan trọng nhất của mô hình QSPR cho đồng. Ngược lại cả 3 thông số Kappa đều nằm trong 15 thông số quan trọng nhất đối với đồng, nhưng chỉ có Kappa1 nằm trong 40 thông số quan trọng nhất đối với thép. Kết quả này cho thấy thông số Chi quan trọng hơn đối với thép, thông số Kappa quan trọng hơn đối với đồng. Các thông số Chi thể hiện tính liên kết trong cấu trúc phân tử, miêu tả được các tính chất điện tử của phân tử, còn các thông số Kappa miêu tả hình dạng hình học của phân tử. Do vậy, có thể nhận định rằng hiệu quả UCAM thép phụ thuộc nhiều hơn vào tính chất điện tử, còn hiệu quả UCAM đồng phụ thuộc nhiều hơn vào cấu trúc hình học của chất ức chế. Kết quả này có thể xuất phát từ cơ chế ăn mòn khác nhau của đồng và thép. Phản ứng khử oxy là phản ứng catot chính đối với đồng, còn phản ứng khử proton là phản ứng catot chính đối với thép trong môi trường axit. Kích thước của oxy lớn hơn rất nhiều so với proton, do vậy ngăn chặn oxy phụ thuộc nhiều hơn vào hiệu ứng không gian và cấu trúc hình học của phân tử hơn so với ngăn chặn proton.

3.2 Mô phỏng đường phân cực của đồng trong dung dịch axit khi có mặt chất UCAM

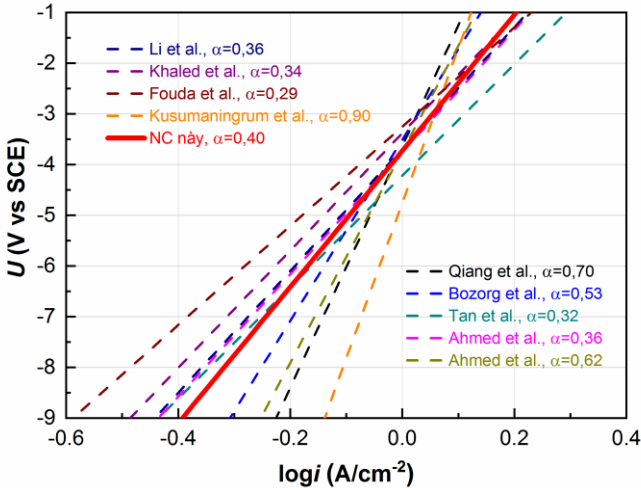
3.2.1 Đường phân cực của đồng trong dung dịch axit

Kết quả mô phỏng đường phân cực catot và đường Levich (Hình 3.16a,b) cho thấy khá phù hợp với kết quả thực nghiệm đã công bố.



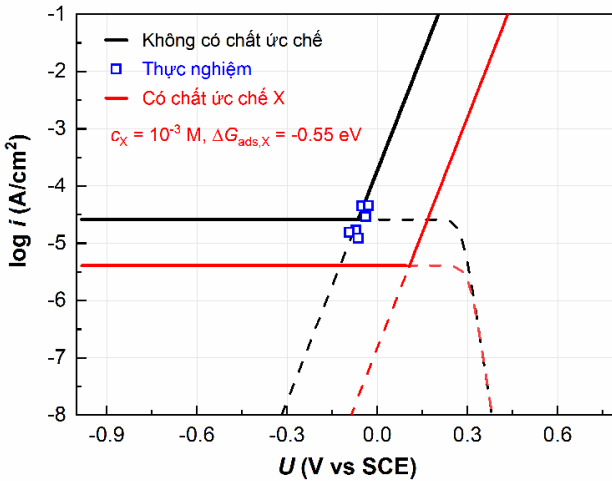
Hình 3.4 a) Đường phân cực catot và b) Đường Levich.

Kết quả mô phỏng đường Tafel anot (Hình 3.17) cũng phù hợp với các kết quả thực nghiệm đã công bố.



Hình 3.5 So sánh đường Tafel anot mô phỏng (đỏ) với thực nghiệm.

Mật độ dòng ăn mòn (i_{corr}) trong thực nghiệm thường nằm trong khoảng 10 đến 50 $\mu\text{A}/\text{cm}^2$, trong khi mật độ dòng ăn mòn thu được khi kết hợp đường phân cực catot và đường Tafel anot mô phỏng là 26,02 $\mu\text{A}/\text{cm}^2$. Đồng thời, điện thế ăn mòn mô phỏng được là -74 mV cũng nằm trong khoảng giá trị thu được từ thực nghiệm là -30 đến -90 mV. Cho thấy kết quả mô phỏng tốc độ ăn mòn trên bề mặt Cu (111) phù hợp với các kết quả thực nghiệm trên đồng nguyên chất chưa có chất UCAM (Hình 3.6).

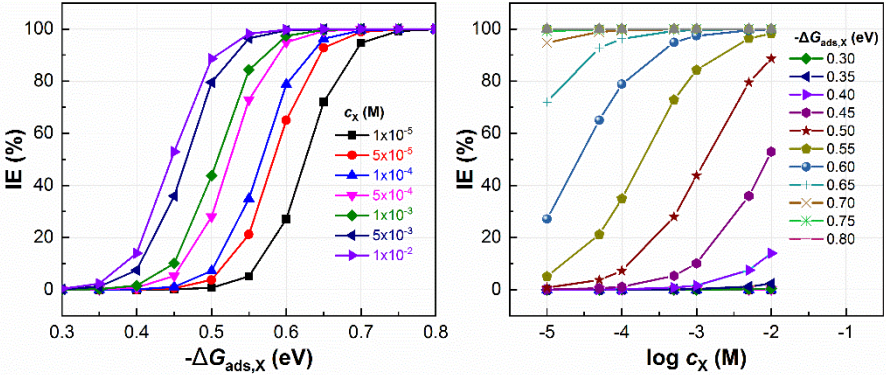


Hình 3.6 Đường phân cực ăn mòn mô phỏng cho bề mặt Cu (111) trong dung dịch axit khi không có và có chất UCAM.

3.2.2 Đường phân cực của đồng trong dung dịch axit có chất UCAM

Đường phân cực ăn mòn cho bề mặt Cu (111) khi có mặt chất UCAM X với $\Delta G_{\text{ads},X} = -0.55 \text{ eV}$ và $c_X = 10^{-3} \text{ M}$ được thể hiện trong Hình 3.6 (đường màu đỏ). Có thể thấy sự có mặt của chất UCAM X ảnh hưởng đến cả đường phân cực catot và đường Tafel anot, điều này phù hợp với các quan sát trong thực nghiệm cho thấy hầu hết các chất UCAM dạng hấp phụ là chất UCAM hỗn hợp tức là ức chế cả catot và anot. Trong mô hình này, ở catot, vị trí phản ứng ORR sẽ bị chiếm giữ một phần bởi X từ đó làm giảm tốc độ ORR. Đồng thời, ở anot, sự có mặt của X làm nguyên tử bề mặt ổn định hơn thể hiện qua đóng góp của phần năng lượng tự do hấp phụ.

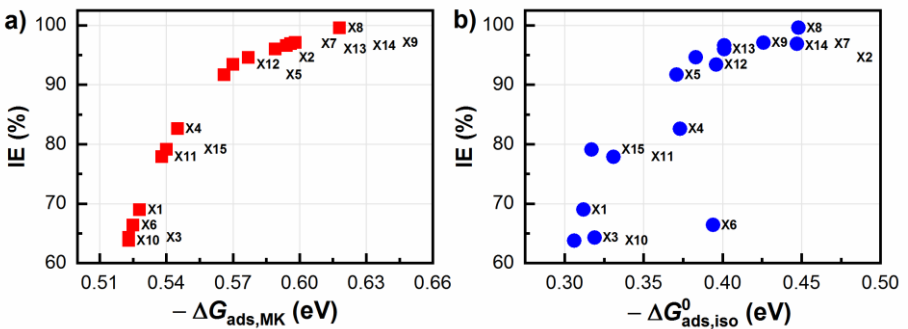
3.2.3 Hiệu quả ức chế ăn mòn



Hình 3.7 Ảnh hưởng của năng lượng tự do hấp phụ (a) và nồng độ (b) của chất ức chế đến hiệu quả UCAM.

Từ Hình 3.7a có thể thấy, ở một nồng độ nhất định, năng lượng tự do hấp phụ càng âm thì hiệu quả UCAM càng cao. Tương quan này phù hợp với mối tương quan giữa hiệu quả UCAM với năng lượng hấp phụ tự do tiêu chuẩn, một giá trị được xác định khi phân tích hồi quy đường đẳng nhiệt hấp phụ trong thực nghiệm. Kết quả mô phỏng ở Hình 3.7b cho thấy với cùng một mức năng lượng tự do hấp phụ thì nồng độ càng cao hiệu quả UCAM càng cao. Kết quả này cũng phù hợp với đa phần các quan sát từ thực nghiệm.

3.2.4 Quan hệ giữa năng lượng tự do hấp phụ và hiệu quả UCAM



Hình 3.8 Tương quan giữa IE với a) $\Delta G_{ads,MK}$ và b) $\Delta G_{ads,MK}^0$

Hình 3.20 cho thấy rằng mối tương quan giữa hiệu quả UCAM (IE) với năng lượng tự do hấp phụ trong mô hình MK ($\Delta G_{\text{ads,MK}}$) và năng lượng tự do hấp phụ tiêu chuẩn trong mô hình đẳng nhiệt hấp phụ ($\Delta G_{\text{ads,iso}}^0$) khá tương đồng, năng lượng càng âm thì hiệu quả UCAM càng cao. Tuy nhiên, năng lượng hấp phụ tính bằng phương pháp DFT như $\Delta E_{\text{ads,PBE}}$ và $\Delta E_{\text{ads,D3}}$ đều không có mối tương quan rõ ràng với IE như $\Delta G_{\text{ads,MK}}$ và $\Delta G_{\text{ads,iso}}^0$. Kết quả này cho thấy có sự khác biệt lớn giữa năng lượng hấp phụ tính toán được bằng DFT với năng lượng tự do hấp phụ sử dụng trong mô hình MK.

3.2.5 Phân tích hạn chế của mô hình

Mô hình MK vẫn còn các giả thiết cần được tiếp tục xem xét như:

- i) Giả thiết chất ức chế chỉ hấp phụ chiếm giữ vị trí bề mặt mà không ảnh hưởng đến năng lượng các bước phản ứng khử oxy.
- ii) Giả thiết sử dụng bước tách nguyên tử đồng từ bề mặt để mô phỏng phản ứng oxy hóa hòa tan đồng.
- iii) Giả thiết $\Delta G_{\text{ads,MK}}$ là năng lượng tự do hấp phụ trên cùng một vị trí bề mặt (vị trí *A) cho các chất hữu cơ khác nhau.

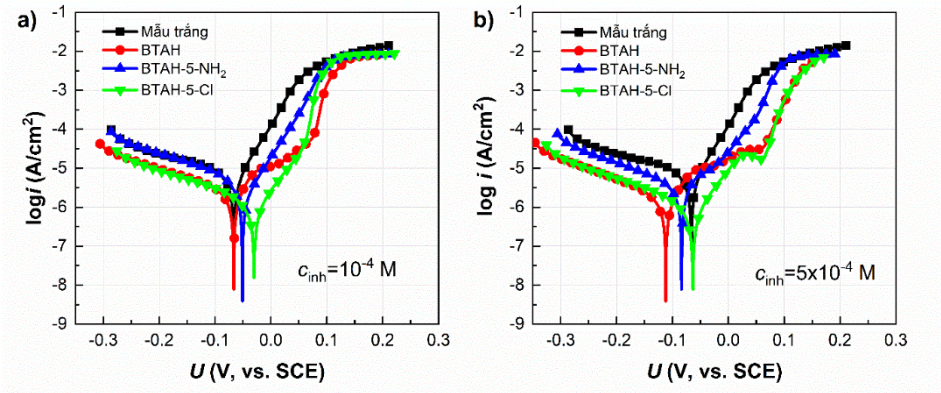
Các hạn chế trên dẫn đến chưa thể áp dụng mô hình MK để dự đoán hiệu quả UCAM. Tuy nhiên khi các giả thiết này từng bước được giải quyết, phương pháp mới này không chỉ có thể áp dụng để dự đoán tốc độ ăn mòn và hiệu quả UCAM cho đồng trong môi trường axit mà còn có thể áp dụng cho các kim loại khác nhau trong các môi trường ăn mòn khác nhau.

3.3 Thực nghiệm và mô hình hóa ảnh hưởng của cấu trúc đến hiệu quả UCAM đồng trong dung dịch H_2SO_4 0.5 M của một số hợp chất hữu cơ

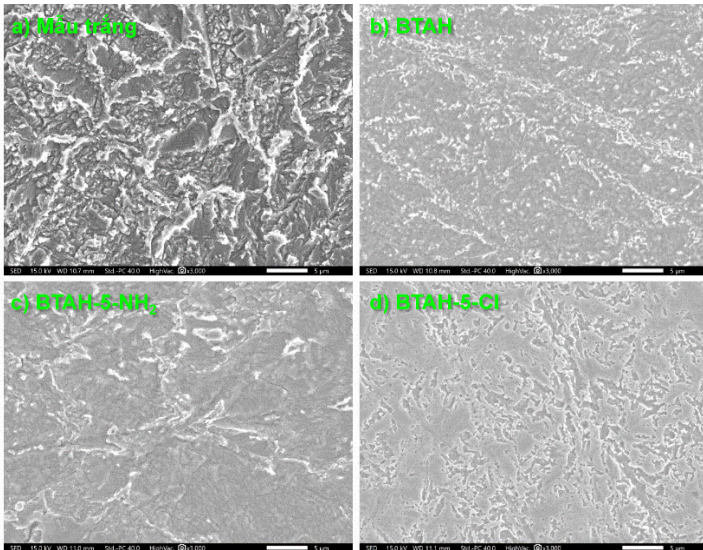
3.3.1 Ảnh hưởng của một số nhóm chức đến hiệu quả UCAM đồng trong dung dịch H_2SO_4 0.5 M của BTAH

Kết quả thử nghiệm tổn hao khối lượng và đường phân cực thể động (Hình 3.22) cho thấy hiệu quả UCAM tăng dần theo xu hướng BTAH-5-NH₂ < BTAH < BTAH-5-Cl. Xu hướng biến đổi hiệu quả UCAM của ba hợp chất không thay

đổi ở hai nồng độ 10^{-4} và 5×10^{-4} M, khẳng định sự khác biệt rõ ràng về hiệu quả UCAM đồng của chúng. BTAH-5-Cl có hiệu quả ức chế cao nhất, tốt hơn rõ rệt so với BTAH, phù hợp với các kết quả đã công bố.



Hình 3.9 Đường phân cực của đồng trong dung dịch H_2SO_4 0,5 M khi không có hoặc có mặt dẫn xuất BTAH với nồng độ a) 10^{-4} M và b) 5×10^{-4} M.



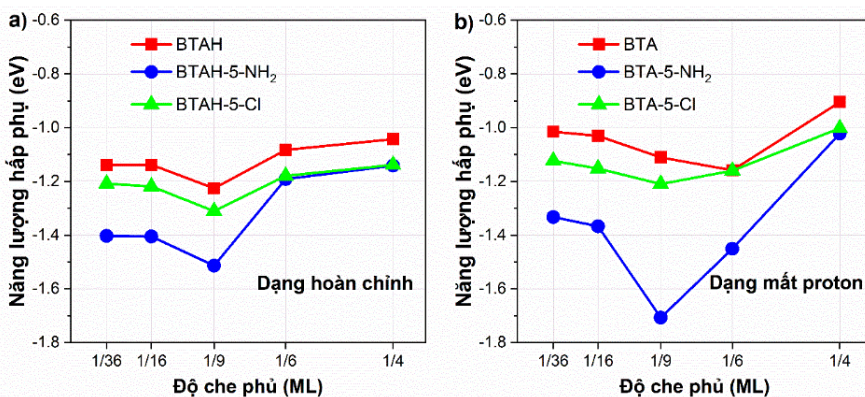
Hình 3.10 Ảnh SEM của bề mặt đồng sau khi ngâm 24 giờ trong dung dịch H_2SO_4 0,5 M khi không có và có dẫn xuất BTAH với nồng độ 5×10^{-4} M.

Kết quả phân tích hình thái bề mặt mẫu đồng (Hình 3.23) cho thấy phù hợp với xu hướng biến đổi của hiệu quả UCAM đã được xác định. Kết quả phân tích

phổ ATR-FTIR cho thấy bề mặt mẫu đồng có hình thành các phức chất giữa chất ức chế với đồng. Ngoài ra, so với mẫu đồng mới trước khi ngâm, các mẫu đồng sau khi ngâm trong dung dịch chứa dẫn xuất BTAH có góc thấm ướt cao hơn, cho thấy bề mặt có tính kỵ nước nhiều hơn. Đồng thời, góc thấm ướt thay đổi theo thứ tự BTAH-5-NH₂ < BTAH < BTAH-5-Cl, cho thấy tính kỵ nước càng cao thì hiệu quả UCAM càng cao.

Sự có mặt của các nhóm chức -NH₂ và -Cl ở vị trí cacbon số 5 không làm thay đổi nhiều đến cấu trúc hình học ở phần còn lại của phân tử BTAH, tuy nhiên làm thay đổi rõ rệt tính chất điện tử của phân tử. Tuy nhiên sự thay đổi của các thông số hóa lượng tử chưa thể giải thích được sự khác biệt trong hiệu quả UCAM của BTAH và hai dẫn xuất.

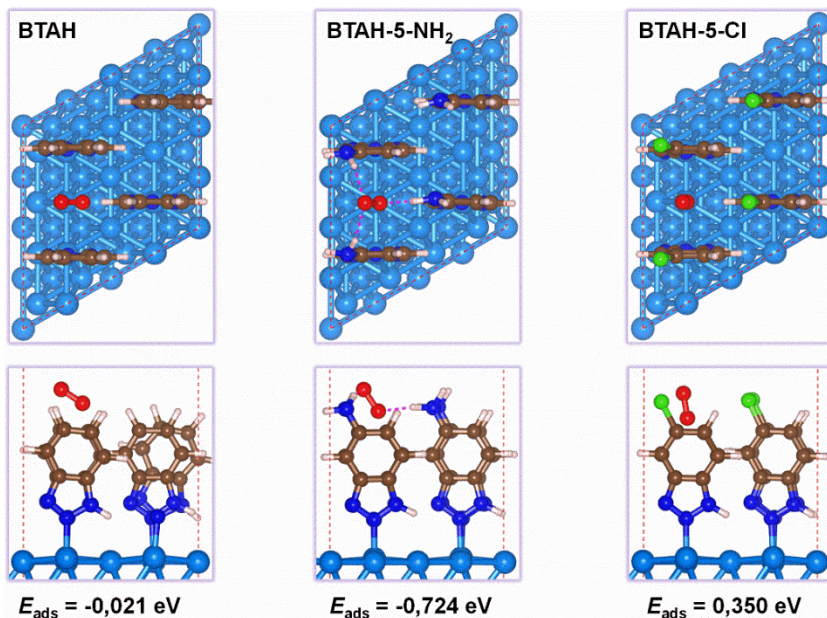
Kết quả tính toán năng lượng tương tác giữa các dẫn xuất BTAH với bề mặt đồng cũng không giải thích được xu hướng UCAM. Ở cả hai dạng hoàn chỉnh và mất proton, dẫn xuất chứa -NH₂ đều có năng lượng hấp phụ âm nhất (Hình 3.28), chứng tỏ tương tác mạnh nhất với bề mặt đồng. Tuy nhiên hiệu quả ức chế ăn mòn của BTAH-NH₂ lại kém hơn nhiều so với hai dẫn xuất còn lại.



Hình 3.11 Năng lượng hấp phụ của các dẫn xuất BTAH dưới dạng a) hoàn chỉnh và b) mất proton trên Cu (111) ở các độ che phủ khác nhau.

Đáng chú ý là kết quả tính toán năng lượng tương tác của O₂ với các đơn lớp BTAH, BTAH-5-NH₂ và BTAH-5-Cl hấp phụ trên bề mặt Cu (111) lần lượt là -

0,021, -0,724 và 0,350 eV. Kết quả này cho thấy sự khác biệt rõ rệt giữa ba hợp chất, lớp BTAH-NH₂ hấp phụ O₂ rất mạnh, BTAH hấp phụ rất yếu, còn BTAH-5-Cl có xu hướng đẩy O₂. Tương tác hấp dẫn mạnh với O₂ của lớp BTAH-5-NH₂ có thể là yếu tố quan trọng dẫn tới khả năng UCAM đồng kém nhất của BTAH-5-NH₂, mặt dù dẫn xuất này tương tác mạnh nhất với bề mặt đồng.



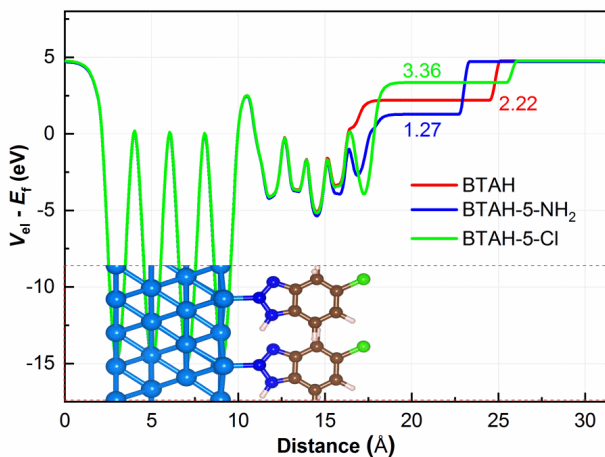
Hình 3.12 Cấu trúc và năng lượng hấp phụ của O₂ trên các đơn lớp dẫn xuất BTAH bao phủ bề mặt Cu (111).

Kết quả tính toán cũng cho thấy lớp BTAH-5-NH₂ tương tác mạnh với H₂O nhờ vào các liên kết hydro O···H giữa O của H₂O với H trên nhóm -NH₂ và N···H giữa N trên nhóm -NH₂ và H của H₂O.

Ngoài ra, kết quả tính toán giản đồ năng lượng tự do của toàn bộ quá trình ORR cho thấy sự khác biệt giữa ba hợp chất nằm ở các bước truyền khối như hấp phụ O₂, khuếch tán và giải hấp H₂O. BTAH-5-Cl hấp phụ O₂ kém nhất và khuếch tán H₂O khó khăn nhất với hàng rào năng lượng 0,627 eV. BTAH-5-NH₂ hấp phụ O₂ mạnh nhất và khuếch tán H₂O ở mức trung bình. BTAH hấp phụ O₂ yếu hơn BTAH-5-NH₂ rất nhiều nhưng khuếch tán H₂O dễ dàng hơn so với BTAH-

5-NH₂, tuy nhiên chênh lệch về năng lượng tự do hấp phụ O₂ lớn hơn rất nhiều so với chênh lệch về năng lượng khuếch tán. Do vậy giản đồ năng lượng tự do ORR cũng cho thấy khả năng ức chế catot tăng dần theo xu hướng BTAH-5-NH₂ < BTAH < BTAH-5-Cl.

Ngoài ra, kết quả tính toán cho thấy có sự khác biệt rõ ràng giữa hàm công (giá trị được liệt kê trên hình 3.34) của các bề mặt đồng bị bao phủ bởi các lớp dẫn xuất BTAH, với giá trị tăng dần theo thứ tự BTAH-5-NH₂ < MBTH < MBTH-5-Cl. Hàm công càng thấp chứng tỏ khả năng mất electron của bề mặt càng cao. Do đó, khả năng mất electron của ba bề mặt tuân theo thứ tự BTAH -5-NH₂ > BTAH > BTAH -5-Cl. Kết quả này phù hợp với xu hướng ức chế anot của ba dẫn xuất này.

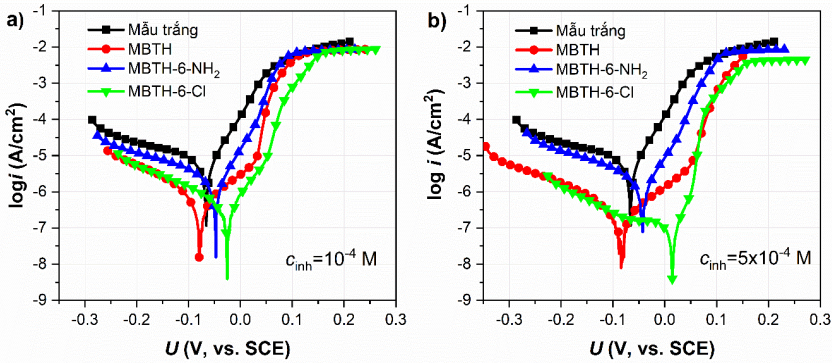


Hình 3.13 Thế tĩnh điện trung bình theo hướng vuông góc với bề mặt Cu (111) được bao phủ bởi lớp dẫn xuất BTAH.

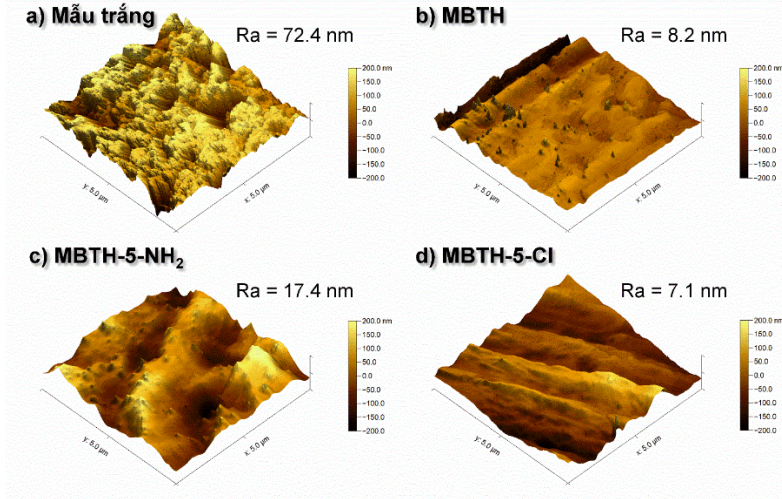
3.3.2 Ảnh hưởng của một số nhóm chức đến hiệu quả UCAM đồng trong dung dịch H₂SO₄ 0.5 M của MBTH

Kết quả thử nghiệm tổn hao khối lượng và đường phân cực thế động (Hình 3.36) cho thấy hiệu quả UCAM của các dẫn xuất MBTH tuân theo thứ tự MBTH-6-NH₂ < MBTH < MBTH-6-Cl. Kết quả phân tích hình thái bề mặt (Hình 3.39) cũng phù hợp với xu hướng UCAM thu được.

Sự thay đổi trong tính chất điện tử của các dẫn xuất MBTH không giải thích được xu hướng UCAM. Năng lượng hấp phụ của các dẫn xuất MBTH trên bề mặt đồng cũng không giải thích được xu hướng UCAM.



Hình 3.14 Đường phân cực của đồng trong dung dịch H_2SO_4 0,5 M khi không có hoặc có mặt dẫn xuất MBTH với nồng độ a) 10^{-4} M và b) 5×10^{-4} M.



Hình 3.15 Ảnh SEM của bề mặt đồng sau khi ngâm 24 giờ trong dung dịch H_2SO_4 0,5 M không có hoặc có mặt dẫn xuất MBTH với nồng độ 5×10^{-4} M.

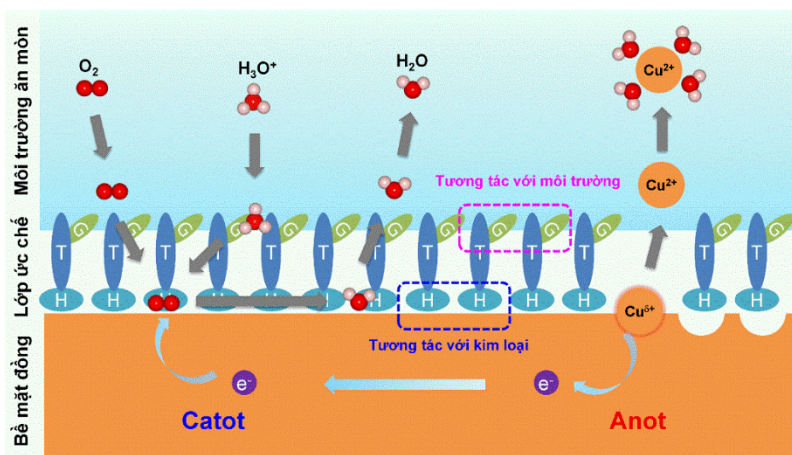
Kết quả tính toán năng lượng tương tác của O_2 với các đơn lớp dẫn xuất MBTH hấp phụ trên bề mặt Cu (111) có sự khác biệt rõ rệt, lớp MBTH-6-NH₂ hấp phụ O_2 rất mạnh, MBTH hấp phụ rất yếu, còn MBTH-6-Cl có xu hướng đẩy O_2 . Kết

quả tính toán cũng cho thấy lớp BTAH-5-NH₂ tương tác mạnh với H₂O nhờ vào các liên kết hydro O...H giữa O của H₂O với H trên nhóm -NH₂ và N...H giữa N trên nhóm -NH₂ và H của H₂O. Ngoài ra, kết quả tính toán gần đờ năng lượng tự do của toàn bộ quá trình ORR cũng cho thấy khả năng ức chế phản ứng ORR tăng dần theo xu hướng MBTH-6-NH₂ < MBTH < MBTH-6-Cl, phù hợp với xu hướng ức chế ăn mòn.

3.3.3 *Mối liên hệ giữa cấu trúc và hiệu quả UCAM của các dẫn xuất BTAH và MBTH*

Khi so sánh kết quả trên hai nhóm hợp chất BTAH và MBTH có thể thấy sự khác biệt giữa các dẫn xuất trong cùng một nhóm lớn hơn nhiều sự khác biệt giữa hai hợp chất có cùng nhóm chức. Cho thấy ảnh hưởng của cấu trúc nhóm chức chiếm ưu thế hơn ảnh hưởng của phần cấu trúc tương tác với bề mặt. Ngoài ra, sự khác biệt trong tương tác với bề mặt đồng có thể là nguyên nhân chính dẫn tới sự khác biệt trong hiệu quả UCAM giữa hai dẫn xuất BTAH và MBTH khi có cùng nhóm chức.

3.3.4 *Cơ chế UCAM của các dẫn xuất BTAH và MBTH*



Hình 3.16 Cơ chế UCAM đồng trong dung dịch axit của các dẫn xuất MBTH và BTAH.

Trên cơ sở các kết quả từ thực nghiệm và tính toán mô phỏng ở trên, cơ chế UCAM đồng trong dung dịch axit của các dẫn xuất MBTH và BTAH được đề

xuất như Hình 3.16 thể hiện. Các dẫn xuất MBTH và BTAH tương tác đồng thời với bề mặt đồng và môi trường thông qua ba phần cấu trúc, phần cấu trúc Head (H) tương tác với bề mặt đồng, phần cấu trúc Tail (T) và Group (G) tương tác với môi trường (dung dịch, tác nhân ăn mòn). Phần H liên kết phân tử chất ức chế các nguyên tử đồng trên bề mặt, đóng vai trò chiếm giữ các vị trí bề mặt hoặc làm suy giảm các phản ứng ăn mòn trên bề mặt. Phần T và G liên kết phân tử chất ức chế với các phân tử trong môi trường, đóng vai trò ngăn chặn các tác nhân ăn mòn như O_2 , H_2O , proton và các loại ion.

KẾT LUẬN

Luận án đã nghiên cứu khảo sát và mô hình hóa ảnh hưởng của cấu trúc phân tử các hợp chất hữu cơ lên hiệu quả UCAM kim loại đồng. Qua các kết quả nghiên cứu đã trình bày ở trên, có thể đưa ra được một số kết luận sau:

1) Quy trình học máy kết hợp giữa thuật toán GB và kỹ thuật lựa chọn đặc trưng PFI có hiệu quả tốt trong xây dựng mô hình QSPR giữa cấu trúc phân tử và hiệu quả UCAM của các hợp chất hữu cơ. Mô hình QSPR cho thép cacbon trong dung dịch HCl 1 M mà luận án đã xây dựng có độ chính xác cao hơn so với các mô hình đã công bố. Tuy nhiên mô hình QSPR xây dựng được cho đồng trong dung dịch H_2SO_4 0,5 M có độ chính xác thấp hơn so với mô hình QSPR cho thép cacbon. Sự phức tạp trong tương quan giữa cấu trúc phân tử và hiệu quả UCAM đồng so với thép là vấn đề cần được tiếp tục nghiên cứu.

2) Đường phân cực của đồng trong dung dịch axit có chất UCAM có thể được mô hình hóa thông qua mô phỏng vi động học các phản ứng ăn mòn. Mô hình mà luận án đã xây dựng thể hiện tương quan định lượng giữa nồng độ chất ức chế trong dung dịch và năng lượng tự do hấp phụ của chất ức chế trên bề mặt đồng với tốc độ ăn mòn và hiệu quả UCAM. Mô hình này là cơ sở để phát triển các mô hình vật lý hoàn chỉnh miêu tả chính xác ảnh hưởng của cấu trúc phân tử chất ức chế đến hiệu quả UCAM cho các hệ vật liệu và điều kiện ăn mòn khác nhau.

3) Các nhóm chức $-NH_2$ và $-Cl$ có ảnh hưởng lớn đến hiệu quả UCAM đồng trong dung dịch H_2SO_4 0,5 M của BTAH và MBTH. Hiệu quả UCAM tuân theo xu hướng $BTAH-5-NH_2 < BTAH < BTAH-5-Cl$ và $MBTH-6-NH_2 < MBTH < MBTH-6-Cl$. Hiệu quả UCAM của dẫn xuất MBTH tốt hơn so dẫn xuất BTAH có cùng nhóm chức.

4) Sự khác biệt rõ rệt trong hiệu quả UCAM của các dẫn xuất $-NH_2$ và $-Cl$ được giải thích hợp lý dựa trên mô hình tính toán DFT xem xét ảnh hưởng của chất ức chế hấp phụ đến các phản ứng ăn mòn trên bề mặt đồng. Điều mà các mô hình tính toán tính chất điện tử của phân tử hay năng lượng tương tác đã không giải thích được. Cho thấy ảnh hưởng của chất ức chế đến các động học các phản ứng ăn mòn là yếu tố quan trọng quyết định đến hiệu quả UCAM đồng.

5) Các dẫn xuất $-NH_2$ có hiệu quả UCAM đồng kém do hình thành liên kết hydro với cả O_2 và H_2O , hai tác nhân ăn mòn chính cho đồng trong dung dịch axit. Các dẫn xuất $-Cl$ có hiệu quả UCAM đồng tốt do có tính kỵ H_2O và O_2 cao.

6) Sự khác biệt giữa hiệu quả UCAM của hai nhóm hợp chất BTAH và MBTH cho thấy tồn tại ảnh hưởng đồng thời của phần cấu trúc tương tác với môi trường và phần cấu trúc tương tác với bề mặt đồng trong phân tử chất ức chế đến hiệu quả UCAM đồng. Tuy nhiên, ảnh hưởng của phần cấu trúc tương tác với môi trường chiếm ưu thế hơn.

7) Hợp chất MBTH-6-Cl, có cấu trúc nhóm chức $-Cl$ kỵ H_2O và O_2 đồng thời có cấu trúc MBTH tương tác mạnh với bề mặt đồng, thể hiện hiệu quả UCAM đồng trong dung dịch H_2SO_4 0,5 M rất cao. Cho thấy các hợp chất hữu cơ chứa đồng thời phần cấu trúc tương tác kém với môi trường ăn mòn và phần cấu trúc tương tác mạnh với bề mặt đồng là những chất UCAM tiềm năng cho đồng trong dung dịch H_2SO_4 0,5 M.

Kết quả của luận án cũng cho thấy một số hướng nghiên cứu có thể tiếp tục phát triển như:

1) Áp dụng quy trình học máy kết hợp GB và PFI cho các hệ ăn mòn khác như thép trong dung dịch NaCl, đồng trong dung dịch NaCl, hợp kim nhôm trong dung dịch HCl... để phân tích tương quan giữa cấu trúc phân tử và hiệu quả UCAM của các hợp chất hữu cơ.

2) Phát triển các mô hình mô phỏng đường phân cực cho các hệ UCAM khác nhau khi xem xét đồng thời tương tác giữa chất ức chế với bề mặt kim loại và giữa chất ức chế với môi trường ăn mòn, hướng đến xem xét toàn diện ảnh hưởng của chất ức chế đến các phản ứng ăn mòn.

3) Mở rộng nghiên cứu ảnh hưởng của cấu trúc phân tử đến hiệu quả UCAM của các nhóm hợp chất hữu cơ khác nhau, trong đó xem xét đồng thời tương tác giữa chất ức chế với bề mặt kim loại và giữa chất ức chế với môi trường ăn mòn, hướng đến xem xét toàn diện ảnh hưởng của chất ức chế đến các phản ứng ăn mòn.