

So sánh khả năng ức chế ăn mòn thép của indole-5-carboxylic acid và 1-benzothiophene-5-carboxylic acid bằng tính toán hóa lượng tử

Nguyễn Như Hậu, Bạch Thị Diệu My, Võ Thị Phương Thảo, Ngô Hồng Cát Vân, Đinh Quý Hương

Khoa Hóa học, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

THÔNG TIN BÀI BÁO

Quá trình xử lý:

Ngày nhận bài: 17/4/2023

Ngày nhận bản chỉnh sửa: 13/11/2023

Ngày nhận đăng: 16/11/2023

Ngày xuất bản: 20/4/2026

Từ khóa:

Indole;

Benzothiophene;

Ức chế ăn mòn;

Tính toán lượng tử;

DFT.

TÓM TẮT

Indole-5-carboxylic acid (ICA) và 1-benzothiophene-5-carboxylic acid (BTA) là hai hợp chất được lựa chọn để đánh giá khả năng ức chế ăn mòn thép. Các thông số hóa lượng tử của chúng bao gồm năng lượng của orbital phân tử bị chiếm cao nhất, năng lượng của orbital phân tử không bị chiếm thấp nhất, khoảng cách năng lượng, độ cứng hóa học, độ mềm phân tử, số lượng electron trao đổi giữa kim loại và chất ức chế ăn mòn indole-5-carboxylic acid và 1-benzothiophene-5-carboxylic acid đã được tính toán ở mức B3LYP/6-311++G(d,p). Kết quả cho thấy ICA là chất ức chế ăn mòn thép tốt hơn BTA. Ngoài ra, các mô phỏng động lực học phân tử cho thấy cấu hình hấp phụ của các chất ức chế proton hóa trên bề mặt Fe(110). Năng lượng liên kết của pICA và pBTA trên bề mặt Fe(110) được tính với các giá trị lần lượt là 574,08 và 572,97 kJ/mol. Các kết quả này một lần nữa khẳng định khả năng bảo vệ bề mặt Fe tốt của ICA so với BTA trong môi trường acid.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Sự ăn mòn là vấn đề thường gặp đối với thép và có tác động trực tiếp đến hoạt động, chi phí và an toàn của nó (Al-Amiery et al., 2014). Để làm chậm quá trình ăn mòn kim loại, một trong những cách tiếp cận được nhiều nhà khoa học quan tâm nhất hiện nay là tìm kiếm các hợp chất hữu cơ có khả năng ức chế ăn mòn kim loại (Al-Mayouf et al., 1998). Tuy nhiên, việc nghiên cứu các chất ức chế ăn mòn bằng phương pháp thực nghiệm thường tốn kém và mất nhiều thời gian. Công nghệ tính toán hóa lượng tử có thể giúp người nghiên cứu thu thập thông tin, dự đoán, giải thích và mô tả các đặc tính quan trọng của hệ thống nghiên cứu (Obot et al., 2016). Vì vậy, đây là phương pháp được các nhà khoa học rất quan tâm, đầu tư và ứng dụng trong việc nghiên cứu về lĩnh vực ăn mòn.

Các tính toán hóa học lượng tử dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) với bộ hàm cơ sở 6-311G++(d,p) đã được sử dụng rất phổ biến để xác định hình học phân tử và điện tử một cách chính xác. Bên cạnh đó, bộ cơ sở B3LYP/6-311++G(d,p) tiêu tốn chi phí tính toán tương đối nhỏ (Wiberg, 2004). Chính vì vậy, trong nghiên cứu này phiếm hàm mật độ B3LYP với bộ hàm cơ sở 6-311++G(d,p) được sử dụng để tối ưu hóa cấu trúc phân tử, tính toán năng lượng các hợp chất hữu cơ và các thông số lượng tử hóa. Tất cả các tính toán được thực hiện bởi phần mềm Gaussian 16 (Frisch et al., 2009).

Nhiều nghiên cứu đã chỉ ra rằng các hợp chất hữu cơ chứa N, S có khả năng ức chế ăn mòn kim loại rất tốt trong môi trường acid. Indole là một hợp chất dị vòng chứa nguyên tử N. Hợp chất này và các dẫn xuất của nó được đánh giá có khả năng ức chế ăn mòn thép và đồng rất tốt (El-Meligi et al., 2000; Tüken et al., 2006) trong môi trường acid. Chính vì vậy, trong nghiên cứu này, chúng tôi đã lựa chọn indole-5-carboxylic acid (ICA) để làm đối tượng nghiên cứu khả năng ức chế ăn mòn thép. Bên cạnh đó, 1-benzothiophene-5-carboxylic acid (BTA) - một hợp chất dị vòng chứa S, được lựa chọn làm đối tượng để so sánh với khả năng ức chế ăn mòn của ICA nhằm làm rõ ảnh hưởng của các dị tố đến khả năng ức chế ăn mòn thép. Các nghiên cứu được tiến

Tác giả liên hệ: Đinh Quý Hương;

Địa chỉ e-mail: dingquyhuong@dhsphue.edu.vn

DOI: <https://doi.org/10.26459/jse.051.2026>

hành bằng tính toán hóa lượng tử nhằm để quan sát được cấu hình hấp phụ của các phân tử chất ức chế trên bề mặt Fe(110) bằng cách mô phỏng động lực học phân tử.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Các thông số được tính toán để đánh giá khả năng ức chế ăn mòn kim loại bao gồm năng lượng của orbital phân tử bị chiếm cao nhất (E_{HOMO}), năng lượng của orbital phân tử không bị chiếm thấp nhất (E_{LUMO}), khoảng cách năng lượng LUMO–HOMO ($\Delta E_{\text{L-M}}$), độ cứng hóa học (η), độ mềm phân tử (S) và số electron trao đổi giữa kim loại và chất ức chế ăn mòn (ΔN).

Khoảng cách năng lượng LUMO–HOMO tính theo công thức:

$$\Delta E_{\text{L-M}} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}} \quad (1)$$

Theo định lý về DFT của Koopmans, năng lượng ion hóa thứ nhất (IE) là xấp xỉ với số đối của giá trị E_{HOMO} và ái lực electron (EA) là xấp xỉ với số đối của giá trị E_{LUMO} .

$$\text{IE} = - E_{\text{HOMO}} \quad (2)$$

$$\text{EA} = - E_{\text{LUMO}} \quad (3)$$

Giá trị độ cứng hóa học (η) là đại lượng đặc trưng cho độ bền phân tử. Phân tử có η càng lớn thì càng bền, do đó càng khó tham gia tương tác hóa học (Pearson, 1987). Trái ngược với độ cứng hóa học, độ mềm phân tử (S) là đại lượng được sử dụng để đánh giá sự phân cực của đám mây điện tử, là sự phân cực của phân tử. Phân tử có giá trị S càng lớn thì càng phân cực và dễ tham gia các phản ứng hóa học.

Dựa vào định lý Janak (1978), ta có:

$$\eta = \frac{\text{IE} - \text{EA}}{2} \quad (4)$$

$$\eta = \frac{E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}}{2} = \frac{\Delta E_{\text{L-M}}}{2} \quad (5)$$

Giá trị của S được tính bằng nghịch đảo của η

$$S = \frac{1}{\eta} = \frac{2}{E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}} = \frac{2}{\Delta E_{\text{L-H}}} \quad (6)$$

Ngoài ra, khả năng ức chế ăn mòn kim loại còn được đánh giá qua ái lực điện tử tuyệt đối (χ). Giá trị của χ được tính gần đúng như sau (Dinh et al., 2021):

$$\chi = \frac{\text{IE} + \text{EA}}{2} = - \frac{(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}})}{2} \quad (7)$$

Theo nguyên tắc cân bằng điện tử của Sanderson (Obot & Obi-Egbedi, 2010) khi hai chất tương tác với nhau, điện tử dịch chuyển từ chất có ái lực điện tử tuyệt đối thấp sang chất có ái lực điện tử tuyệt đối cao. Quá trình dịch chuyển điện tử chấm dứt khi ái lực điện tử tương đối của hai chất cân bằng nhau. Xét trong quá trình hấp phụ lên bề mặt kim loại, điện tử dịch chuyển từ chất ức chế ăn mòn sang bề mặt kim loại. Số electron trao đổi giữa kim loại và chất ức chế ăn mòn (ΔN) được tính như sau (My et al., 2024):

$$\Delta N = \frac{\chi_{\text{M}} - \chi_{\text{inh}}}{2.(\eta_{\text{M}} + \eta_{\text{inh}})} \quad (8)$$

Trong đó, χ_{M} , χ_{inh} lần lượt là ái lực điện tử tuyệt đối của kim loại và chất ức chế ăn mòn, η_{M} và η_{inh} là độ cứng hóa học của kim loại và chất ức chế ăn mòn.

Nhiều nghiên cứu cho thấy rằng, việc sử dụng đại lượng chức năng làm việc (Φ) của bề mặt kim loại là thước đo thích hợp cho ái lực điện tử tuyệt đối của Fe χ_{Fe} (Cao et al., 2014). Vì vậy, số electron trao đổi giữa Fe và chất ức chế ăn mòn được tính như sau:

$$\Delta N = \frac{\Phi - \chi_{\text{inh}}}{2.(\eta_{\text{M}} + \eta_{\text{inh}})} \quad (9)$$

Với Φ lần lượt có các giá trị là 3,91 eV; 4,82 eV và 3,88 eV tương ứng với các bề mặt Fe (100), (110) và

(111) (Kokalj, 2012).

Tương tác giữa phân tử chất ức chế và bề mặt Fe(110) được thực hiện trong mô phỏng động lực học phân tử. Các mô phỏng này được thực hiện bằng cách sử dụng phần mềm Materials Studio 8.0. Tinh thể Fe được kết hợp và phân cắt dọc theo mặt phẳng Fe(110). Sự mô phỏng được thực hiện trong hộp có kích thước (30,40 x 38,20 x 60,25 Å³) với bước thời gian là 0,1 fs, thời gian mô phỏng là 500 ps. Các trường lực COMPASS được sử dụng cho các mô phỏng của tất cả các nguyên tử và cấu trúc của các phân tử. Bên cạnh đó, mô phỏng động lực học phân tử được sử dụng để dự đoán và phân tích tương tác giữa phân tử chất ức chế và bề mặt Fe(110) trong dung dịch. Trong dung dịch HCl 1,0 M, tỷ lệ tương ứng giữa phân tử H₂O và HCl là 500/9. Dựa trên điều này, 491 phân tử H₂O, 9 Cl⁻, 9 H₃O⁺ được thêm vào hệ thống ức chế trong hộp mô phỏng (Salarvand et al., 2017). Do các phân tử chất ức chế bị proton hóa trong dung dịch acid, tỷ lệ các cấu tử trong dung dịch ăn mòn sẽ gồm 492 phân tử H₂O, 9 Cl⁻, 8 H₃O⁺ và 1 phân tử chất ức chế bị proton hóa. Các tương tác giữa chất ức chế và bề mặt Fe(110) có thể được đánh giá qua năng lượng liên kết ($E_{\text{liên kết}}$) và năng lượng tương tác ($E_{\text{tương tác}}$), các đại lượng này có thể được tính toán theo phương trình sau (Saha et al., 2016):

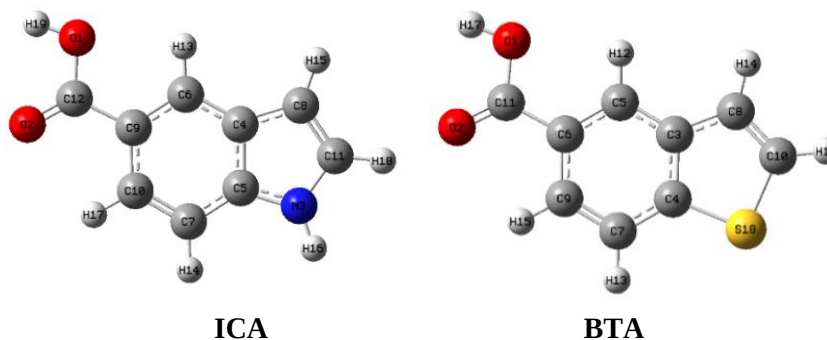
$$E_{\text{tương tác}} = E_{\text{tổng}} - (E_{\text{bề mặt và dung dịch}} + E_{\text{chất ức chế}}) \quad (10)$$

$$E_{\text{liên kết}} = -E_{\text{tương tác}} \quad (11)$$

Trong đó, $E_{\text{tổng}}$ là năng lượng tổng của toàn bộ hệ thống, $E_{\text{chất ức chế}}$ là năng lượng chất ức chế, $E_{\text{bề mặt và dung dịch}}$ là năng lượng tổng của bề mặt Fe(110) và dung dịch khi không có chất ức chế.

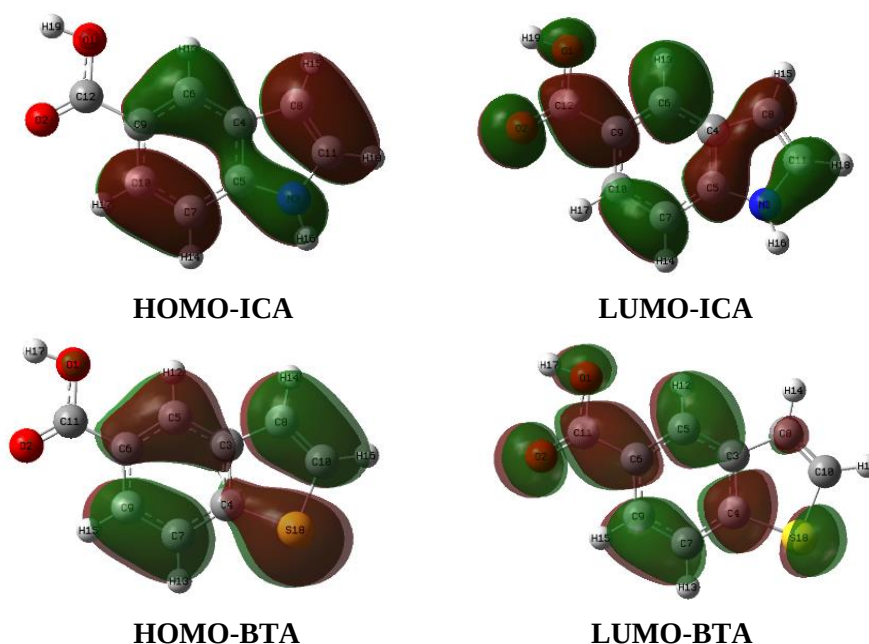
3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Thông số cấu trúc hình học của ICA và BTA



Hình 1. Cấu trúc hình học của ICA VÀ BTA được tối ưu hóa.

Cấu trúc hình học của các phân tử chất ức chế ICA và BTA được tối ưu hóa ở mức tính toán lý thuyết B3LYP/6-311++G(d,p) và được trình bày ở hình 1.



Hình 2. HOMO và LUMO của ICA và BTA.

Orbital phân tử bị chiếm cao nhất (HOMO) chỉ ra vị trí cho electron của phân tử (Khalil, 2003). Hình 2 cho thấy ICA và BTA có thể cho electron với bề mặt kim loại chủ yếu ở nguyên tử S, N và nhân thơm. Mặt khác, orbital phân tử không bị chiếm thấp nhất (LUMO) đại diện cho khả năng nhận electron của phân tử. Các vị trí phản ứng mạnh nhất được tìm thấy ở toàn bộ phân tử của ICA và BTA.

3.2. Đánh giá khả năng ức chế ăn mòn theo các thông số hóa học lượng tử của ICA và BTA trong pha khí

Trước hết, E_{HOMO} là một thông số quan trọng để đánh giá khả năng ức chế ăn mòn. Một phân tử có giá trị E_{HOMO} càng lớn, phân tử đó càng dễ cho điện tử. Theo bảng 1, E_{HOMO} của ICA lớn hơn giá trị này của BTA nên ICA có khả năng ức chế ăn mòn kim loại tốt hơn BTA.

Bảng 1. Các thông số hóa học lượng tử tính trong pha khí của ICA và BTA theo phương pháp B3LYP/6-311++G(d,p)

Hợp chất	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	$\Delta E_{\text{L-H}}$ (eV)	IE (eV)	EA (eV)	χ (eV)	η (eV)	S (eV ⁻¹)	ΔN
ICA	-6,2	-1,4	4,8	6,2	1,4	3,8	2,4	0,4	0,2
BTA	-6,5	-1,7	4,8	6,5	1,7	4,1	2,4	0,4	0,1

Giá trị E_{LUMO} cũng là một đại lượng để đánh giá khả năng ức chế ăn mòn của các chất ức chế ăn mòn. Giá trị E_{LUMO} cho biết năng lượng của orbital không bị chiếm chỗ thấp nhất. Giá trị E_{LUMO} càng bé, phân tử càng dễ nhận điện tử. Xét về E_{LUMO} , BTA có khả năng nhận electron từ bề mặt kim loại dễ hơn ICA. Điều này có nghĩa BTA ức chế ăn mòn kim loại tốt hơn ICA.

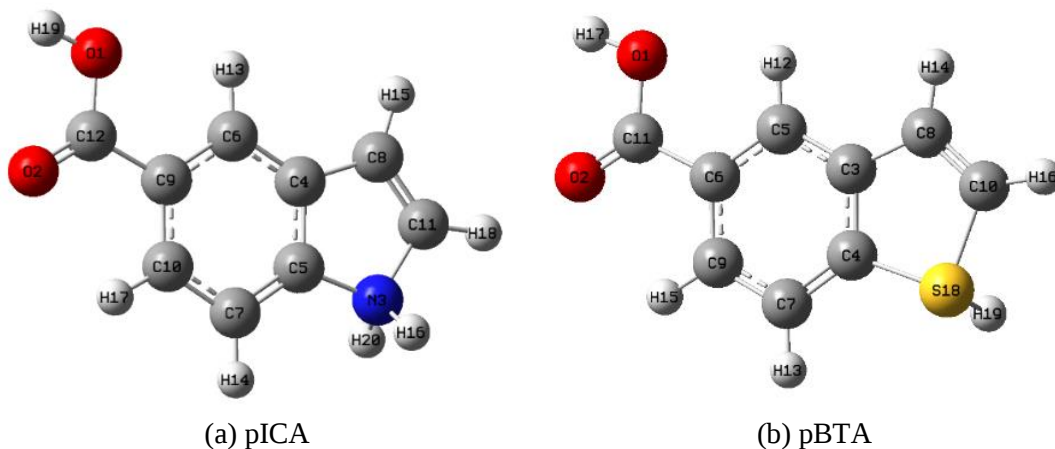
Bên cạnh đó, khả năng ức chế ăn mòn kim loại của một chất còn được đánh giá qua khả năng hấp phụ của nó trên bề mặt sắt. Như vậy, phân tử nghiên cứu càng phân cực, càng dễ hấp phụ lên bề mặt kim loại, khi đó hiệu quả ức chế ăn mòn càng cao. Từ những quan điểm lý thuyết mô tả ở mục phương pháp nghiên cứu, chất có khả năng ức chế ăn mòn tốt là chất có giá trị $\Delta E_{\text{L-H}}$, η thấp và S cao. Dựa vào số liệu tính toán trong pha khí tại B3LYP/6-311++G(d,p) trong bảng 1, ICA và BTA các giá trị này là như nhau với $\Delta E_{\text{L-H}}$ là 4,8 eV, η là 2,4 eV và S là 0,4 eV⁻¹.

Bên cạnh đó, đại lượng ΔN cho thấy khả năng trao đổi electron giữa phân tử chất ức chế và bề mặt Fe(110). ΔN càng lớn cho thấy khả năng ức chế ăn mòn tốt của hợp chất khảo sát. ICA và BTA có các giá trị ΔN lần lượt là 0,2 và 0,1. Như vậy ICA thể hiện là chất ức chế ăn mòn tốt hơn BTA khi khảo sát theo ΔN .

Như vậy, hầu hết các thông số hóa học lượng tử trên chỉ ra rằng ICA có khả năng ức chế ăn mòn sắt tốt hơn so với BTA.

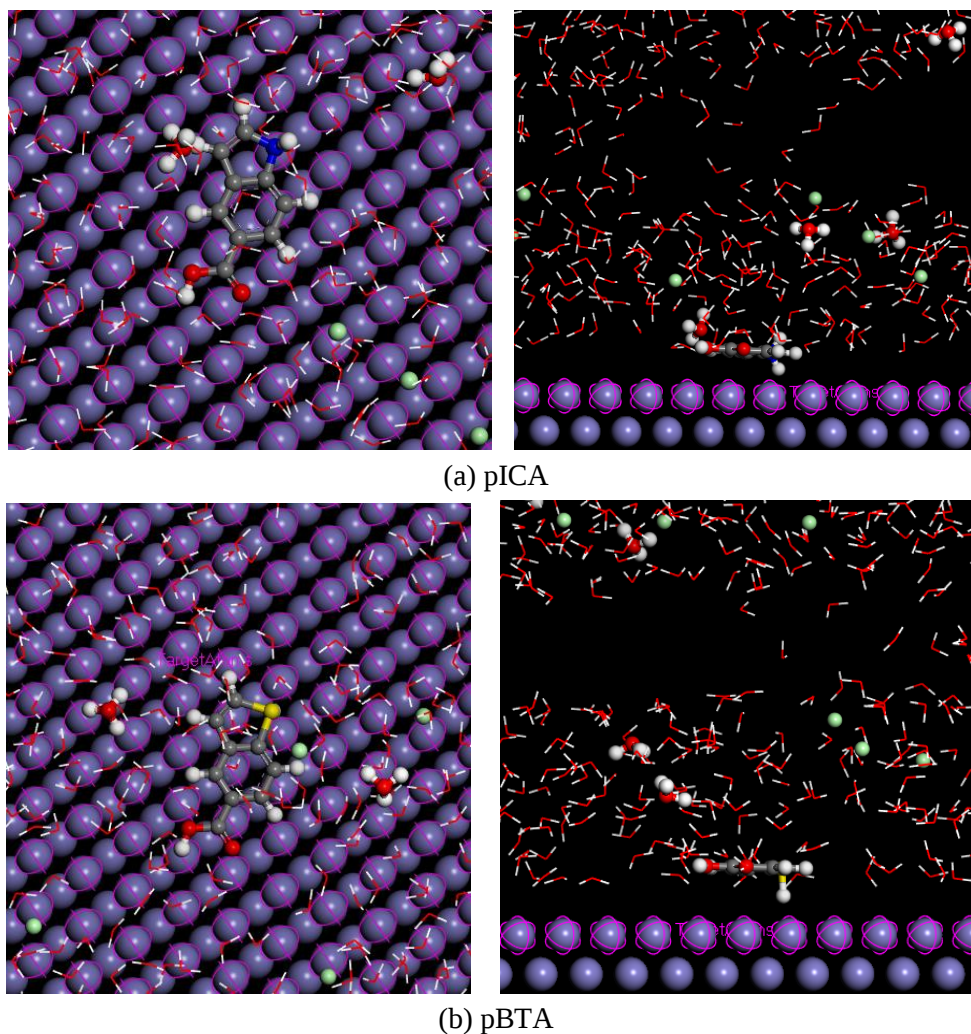
3.3. Mô phỏng động lực học phân tử

Trong phân tử của ICA và BTA, các dị tố N và S là các trung tâm có mật độ điện tích cao. Vì vậy, trong môi trường acid, chúng có thể trải qua quá trình proton hóa tại vị trí của N (pICA) và S (pBTA) (hình 3). Các phân tử bị proton hóa này sẽ tiếp tục được khảo sát trong mô phỏng động lực học phân tử.



Hình 3. Cấu trúc hình học của pICA và pBTA đã được tối ưu hóa.

Mô phỏng động lực học phân tử được áp dụng để nghiên cứu sự tương tác của pICA và pBTA trên bề mặt Fe(110) trong dung dịch HCl 1,0 M ở 303 K. Hình 4 biểu diễn mặt bên và mặt thẳng đứng các cấu hình hấp phụ của các phân tử chất ức chế.



Hình 4. Cấu hình hấp phụ của (a) pICA và (b) pBTA trên bề mặt Fe(110) trong dung dịch HCl 1,0 M.

Các phân tử pICA và pBTA này nằm sát với bề mặt sắt và có diện tích bề mặt lớn. Điều này giúp chúng có khả năng che phủ và hình thành lớp màng bảo vệ Fe khỏi các tác nhân ăn mòn trong dung dịch. Trong sự mô phỏng động lực học phân tử, năng lượng tương tác và năng lượng liên kết là các thông số quan trọng để đánh giá khả năng ức chế ăn mòn của các phân tử chất ức chế (Gupta et al., 2019). Giá trị âm của năng lượng tương tác chỉ ra tương tác giữa phân tử chất ức chế và bề mặt kim loại mạnh trong khi giá trị lớn của năng lượng liên kết cho thấy sự hấp phụ mạnh và bền của các phân tử chất ức chế. Kết quả trong bảng 2 cho thấy pICA có năng lượng liên kết lớn hơn và năng lượng tương tác âm hơn khi so sánh pBTA. Điều này chứng tỏ pICA hấp phụ trên bề mặt Fe(110) mạnh hơn pBTA. Các kết quả nghiên cứu bằng mô phỏng động lực học phân tử hoàn toàn phù hợp với việc so sánh các thông số hóa học lượng tử ở trên.

Bảng 2. Năng lượng tương tác và năng lượng liên kết của pICA và pBTA tính toán được từ sự mô phỏng động lực học phân tử

Hợp chất	$E_{\text{tương tác}} \text{ (kJ/mol)}$	$E_{\text{liên kết}} \text{ (kJ/mol)}$
pICA	-574,08	574,08
pBTA	-572,97	572,97

4. KẾT LUẬN

Việc nghiên cứu tính toán hóa lý thuyết bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ ở mức lý thuyết B3LYP/6-311++G(d,p) đã được thực hiện nhằm so sánh khả năng ức chế ăn mòn kim loại của ICA và BTA. Kết quả cho thấy rằng hầu hết các thông số hóa học lượng tử như năng lượng của orbital phân tử bị chiếm cao nhất (E_{HOMO}), số electron trao đổi giữa kim loại và chất ức chế (ΔN) thể hiện ICA là chất ức chế ăn mòn kim loại tốt hơn BTA. Bên cạnh đó, nghiên cứu về động lực học phân tử đã cho thấy cấu hình hấp phụ của các phân tử nghiên cứu ở dạng proton hóa trên bề mặt Fe(110). Năng lượng liên kết của pICA lớn hơn pBTA khi tương tác với bề mặt kim loại, điều này càng khẳng định khả năng ức chế tốt của pICA-N. Các kết quả từ nghiên cứu lý thuyết trong công trình này sẽ góp phần định hướng cho các nghiên cứu thực nghiệm tiếp theo.

Lời cảm ơn: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế trong nhiệm vụ mã số T.22-TN.SV-01.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Al-Amiery, A. A., Kadhum, A. A. H., Alobaidy, A. H. M., Mohamad, A. B., & Hoon, P. S. (2014). Novel corrosion inhibitor for mild steel in HCl. *Materials*, 7(2), 662–672. <https://doi.org/10.3390/ma7020662>
- Al-Mayouf, A. M., Al-Ameery, A. K., & Al-Suhybani, A. A. (1998). Corrosion inhibition of 304SS in sulfuric acid solutions by 2-methyl benzoazole derivatives. *Desalination*, 116(1), 25–33. [https://doi.org/10.1016/S0011-9164\(98\)00054-X](https://doi.org/10.1016/S0011-9164(98)00054-X)
- Cao, Z., Tang, Y., Cang, H., Xu, J., Lu, G., & Jing, W. (2014). Novel benzimidazole derivatives as corrosion inhibitors of mild steel in the acidic media. Part II: Theoretical studies. *Corrosion Science*, 83, 292–298. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2014.02.025>
- Dinh, Q. H., Duong, T., & Pham Cam, N. (2021). A study of 1-benzyl-3-phenyl-2-thiourea as an effective steel corrosion inhibitor in 1.0 M HCl solution. *Journal of Chemistry*, 2021, Article 5519411, 14 pages. <https://doi.org/10.1155/2021/5519411>
- El-Meligi, A. A., Turgoose, S., Ismail, A. A., & Sanad, S. H. (2000). Technical note: Effect of corrosion inhibitors on scale removal during pickling of mild steel. *British Corrosion Journal*, 35(1), 75–77. <https://doi.org/10.1179/000705900101501029>
- Frisch, Æ., Hratchian, H. P., Dennington, R. D., Keith, T. A., Millam, J., Nielsen, A. B., Holder, A. J., & Hiscocks, J. (2009). *GaussView 5 reference*. Gaussian, Inc.
- Gupta, R. K., Malviya, M., Ansari, K. R., Lgaz, H., Chauhan, D. S., & Quraishi, M. A. (2019). Functionalized graphene oxide as a new generation corrosion inhibitor for industrial pickling process: DFT and experimental approach. *Materials Chemistry and Physics*, 236, Article 121727. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2019.121727>
- My, B. T. D., Tuan, D., & Huong, D. Q. (2024). Mild steel corrosion inhibition comparison between indole-5-carboxylic acid and benzofuran-5-carboxylic acid: An integrated experimental and theoretical study. *Journal of Molecular Structure*, 1296, 136905. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2023.136905>
- Janak, J. F. (1978). Proof that $\partial E / \partial n_i = \varepsilon_i$ in density-functional theory. *Physical Review B*, 18(12), 7165–7168. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.18.7165>
- Khalil, N. (2003). Quantum chemical approach of corrosion inhibition. *Electrochimica Acta*, 48(18), 2635–2640. [https://doi.org/10.1016/S0013-4686\(03\)00307-4](https://doi.org/10.1016/S0013-4686(03)00307-4)
- Kokalj, A. (2012). On the HSAB based estimate of charge transfer between adsorbates and metal surfaces. *Chemical Physics*, 393(1), 1–12. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2011.10.021>
- Obot, I. B., Kaya, S., Kaya, C., & Tüzün, B. (2016). Density functional theory (DFT) modeling and Monte Carlo simulation assessment of inhibition performance of some carbonylhydrazide Schiff bases for steel corrosion. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 80, 82–90.
- Obot, I. B., & Obi-Egbedi, N. O. (2010). Theoretical study of benzimidazole and its derivatives and their potential activity as corrosion inhibitors. *Corrosion Science*, 52(2), 657–660. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2009.10.017>
- Pearson, R. G. (1987). Recent advances in the concept of hard and soft acids and bases. *Journal of Chemical Education*, 64(7), 561. <https://doi.org/10.1021/ed064p561>
- Saha, S. K., Dutta, A., Ghosh, P., Sukul, D., & Banerjee, P. (2016). Novel Schiff-base molecules as efficient corrosion inhibitors for mild steel surface in 1 M HCl medium: Experimental and theoretical approach. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(27), 17898–17911. <https://doi.org/10.1039/C6CP01993E>
- Salarvand, Z., Amirnasr, M., Talebian, M., Raeissi, K., & Meghdadi, S. (2017). Enhanced corrosion resistance of mild steel in 1 M HCl solution by trace amount of 2-phenyl-benzothiazole derivatives: Experimental, quantum chemical calculations and molecular dynamics (MD) simulation studies. *Corrosion Science*, 114, 133–145. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2016.11.002>
- Tüken, T., Yazıcı, B., & Erbil, M. (2006). The use of polyindole for prevention of copper corrosion. *Surface and Coatings Technology*, 200(16–17), 4802–4809. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2005.04.023>
- Wiberg, K. B. (2004). Basis set effects on calculated geometries: 6-311++G** vs. aug-cc-pVDZ. *Journal of Computational Chemistry*, 25(11), 1342–1346. <https://doi.org/10.1002/jcc.20058>

Iron corrosion inhibition ability comparison of indole-5-carboxylic acid and 1-benzothiophene-5-carboxylic acid: A study of quantum chemical calculation

Nguyen Nhu Hau, Bach Thi Dieu My, Vo Thi Phuong Thao, Ngo Hong Cat Van,
Đinh Quý Hương

Faculty of Chemistry, University of Education, Hue University

ARTICLE INFO

Article history:

Received: 17 April 2023

Received in revised form: 13 November 2023

Accepted: 16 November 2023

Published: 20 April 2026

Keywords:

Indole;

Benzothiophene;

Corrosion inhibitor;

Quantum calculation;

DFT.

Corresponding author:

Đinh Quý Hương

E-mail address:

dinhquyhuong@dhsphue.edu.vn

ABSTRACT

Indole-5-carboxylic acid and 1-benzothiophene-5-carboxylic acid are two selected compounds to evaluate the steel corrosion inhibition ability. Their quantum chemical parameters including highest occupied molecular orbital energy, lowest unoccupied molecular orbital energy, energy gap, chemical hardness, softness, and transferred electrons number between the inhibitor molecule and iron surface are calculated at B3LYP/6-311++G(d,p). The results show that ICA is a better corrosion inhibitor than BTA. Additionally, molecular dynamics simulation reveals the adsorption configurations of the protonated inhibitors on the Fe(110) surface. The binding energies of pICA and pBTA on the iron surface are calculated to be 574.08 and 572.97 kJ/mol, respectively. These results confirm the better iron surface protection ability of ICA compared with BTA in the acidic medium.