

**BỘ GIÁO DỤC  
VÀ ĐÀO TẠO**

**VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC  
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM**

**HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ**

---



**TRẦN THANH NHÃ**

**NGHIÊN CỨU THÀNH PHẦN HÓA HỌC VÀ ỨNG DỤNG ỨC CHẾ  
ĂN MÒN CHO THÉP CỦA CAO CHIẾT XUẤT TỪ CÂY LỘC  
VÙNG THUỘC HỌ LECYTHIDACEAE**

**TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SĨ KHOA HỌC VẬT CHẤT**

**Ngành: Hóa hữu cơ**

**Mã số: 9 44 01 14**

***Hà Nội - 2025***

Công trình được hoàn thành tại: Học viện Khoa học và Công nghệ - Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam

Người hướng dẫn khoa học:

1. Người hướng dẫn 1: PGS. TS. Nguyễn Đăng Nam, Viện Nghiên cứu Khoa học Tự nhiên và Công nghệ - Trường Đại học Duy Tân;
2. Người hướng dẫn 2: TS. Lê Thị Phương - Viện Khoa học Vật liệu Ứng dụng - Viện Hàn lâm KHCNVN

Phản biện 1: PGS. TS. Bạch Long Giang

Phản biện 2: PGS. TS. Lê Tiến Dũng

Phản biện 3: PGS. TS. Bùi Xuân Vương

Luận án được bảo vệ trước Hội đồng đánh giá luận án tiến sĩ cấp Học viện họp tại Học viện Khoa học và Công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam vào hồi 9 giờ 00, ngày 29 tháng 07 năm 2025

Có thể tìm hiểu luận án tại:

1. Thư viện Học viện Khoa học và Công nghệ
2. Thư viện Quốc gia Việt Nam

## MỞ ĐẦU

### 1. Tính cấp thiết của luận án

Ăn mòn kim loại là một vấn đề nghiêm trọng trong nhiều ngành công nghiệp như dầu khí, hóa chất, xây dựng và giao thông vận tải. Quá trình ăn mòn của thép carbon và các hợp kim không chỉ gây thiệt hại lớn về kinh tế mà còn ảnh hưởng đến hiệu suất vận hành và tuổi thọ thiết bị, cũng như sức khỏe và tính mạng con người. Hiện nay, các chất ức chế ăn mòn tổng hợp như chromate, phosphonate, imidazoline, được sử dụng rộng rãi, nhưng lại tiềm ẩn nhiều nguy cơ như độc hại với môi trường và sức khỏe con người, cũng như chi phí xử lý chất thải cao. Trong bối cảnh đó, chất ức chế ăn mòn có nguồn gốc tự nhiên ngày càng được quan tâm nhờ vào hiệu quả ức chế cao và đặc biệt thân thiện với môi trường, an toàn cho người sử dụng và có khả năng phân hủy sinh học. Các hợp chất hữu cơ từ thực vật, đặc biệt là alkaloid, flavonoid, terpenoid và tannin, có thể hấp phụ lên bề mặt kim loại thông qua các cơ chế khác nhau để tạo lớp màng bảo vệ hiệu quả cho thép khỏi sự tấn công của môi trường bên ngoài. Ngoài ra, nguồn nguyên liệu thực vật vô cùng phong phú và dễ tái sinh, giúp tăng tính sẵn có và giảm chi phí sản xuất. Do đó, việc nghiên cứu và phát triển chất ức chế ăn mòn từ thực vật không chỉ góp phần bảo vệ kim loại khỏi ăn mòn mà còn hướng đến mục tiêu phát triển bền vững, thay thế dần các hóa chất độc hại trong công nghiệp và tận dụng nguồn nguyên liệu có sẵn, giá thành thấp, cũng như giảm thiểu rác thải ảnh hưởng đến môi trường. Mặt khác, cây Lộc vùng thường được trồng khá phổ biến ở Việt Nam, có thể xem là nguồn nguyên liệu dồi dào. Tuy nhiên, các nghiên cứu ứng dụng và chuyên sâu về các bộ phận của cây còn hạn chế. Đặc biệt, trong lĩnh vực hợp chất thiên nhiên, hiện nay chưa có nghiên cứu nào trên hoa Lộc vùng và các nghiên cứu liên quan đến lá đã thực hiện từ lâu nhưng chưa đầy đủ và toàn diện. Trong lĩnh vực ăn mòn, chưa có ghi nhận nào về sử dụng các bộ phận Lộc vùng làm chất ức chế ăn mòn. Điều

này, mở ra hướng nghiên cứu mới tiềm năng trong việc khảo sát thành phần hóa học và ứng dụng kết quả khảo sát để giải thích cơ chế liên quan đến ức chế ăn mòn. Trong đề tài này, trên cùng một đối tượng nghiên cứu (hoa và lá Lộc vùng) được thực hiện, khảo sát thành phần hóa học và đánh giá khả năng ức chế ăn mòn cho thép carbon trong môi trường acid HCl 1 M. Ngoài ra, tính toán mô phỏng và kết hợp với nghiên cứu các mô hình đẳng nhiệt cũng được thực hiện để củng cố cơ chế bảo vệ của lớp màng hữu cơ hình thành trên bề mặt thép carbon. Nghiên cứu lựa chọn dung dịch khảo sát là HCl 1 M ( $\text{pH} = 0$ ) vì đây là môi trường có khả năng ăn mòn mạnh, giúp đánh giá hiệu quả bảo vệ của chất ức chế một cách rõ ràng. Trong công nghiệp, HCl được xem là hóa chất phổ biến được sử dụng đa dạng trong nhiều lĩnh vực. Nồng độ 1 M đảm bảo quá trình ăn mòn diễn ra đủ nhanh nhưng vẫn kiểm soát được, phù hợp với các phương pháp phân tích điện hóa như EIS, PDP và LPR. Ngoài ra, HCl 1 M là hệ dung dịch gần với điều kiện thực tế và thường được sử dụng phổ biến trong nghiên cứu ức chế ăn mòn, điều này giúp so sánh kết quả với các nghiên cứu trước đây và tiến gần đến các ứng dụng thực tế. Từ những cơ sở đó NCS lựa chọn đề tài nghiên cứu: “Nghiên cứu thành phần hóa học và ứng dụng ức chế ăn mòn cho thép của cao chiết xuất từ cây Lộc vùng thuộc họ Lecythidaceae”

## **2. Mục tiêu nghiên cứu của luận án**

Đánh giá hiệu quả ức chế ăn mòn cho thép carbon trong môi trường HCl 1M từ cao chiết xuất nước được điều chế từ hoa và lá cây Lộc vùng (*Barringtonia acutangula*) thông qua điều chế và đánh giá tiềm năng cao chiết xuất, xác định chính xác thành phần hóa học, các phương pháp điện hóa hiện đại và phân tích bề mặt tiên tiến. Làm rõ cơ chế ức chế ăn mòn thông qua tính toán mô phỏng dựa vào thành phần hữu cơ đã được làm sáng tỏ và các mô hình hấp phụ đẳng nhiệt.

### **3. Các nội dung nghiên cứu chính của luận án**

- Nội dung 1: Thu mẫu, định danh tên khoa học và điều chế cao phân đoạn từ hai bộ phận hoa và lá Lộc vùng;
- Nội dung 2: Đánh giá đặc tính phù hợp của cao chiết xuất nước đã điều chế khi làm chất ức chế ăn mòn bằng phương pháp định lượng flavonoid, polyphenol và terpenoid, LC-MS và FT-IR;
- Nội dung 3: Khảo sát thành phần hóa học và sáng tỏ cấu trúc thành phần hữu cơ trên cao nước và cao ethyl acetate của hoa và cao nước của lá Lộc vùng;
- Nội dung 4: Thử nghiệm cao nước hoa và lá làm chất ức chế ăn mòn cho thép carbon trong dung dịch HCl 1 M ( $\text{pH} = 0$ ) bằng phương pháp điện hóa;
- Nội dung 5: Phân tích bề mặt thép carbon sau khi ngâm trong dung dịch HCl 1 M khi có/không có sự xuất hiện của chất ức chế ăn mòn bằng các phương pháp phân tích bề mặt;
- Nội dung 6: Định lượng thành phần hóa học đã cô lập từ cao nước hoa Lộc vùng bằng hệ thống HPLC kết hợp mô hình tính toán MD và nghiên cứu các mô hình đẳng nhiệt để củng cố cơ chế bảo vệ ăn mòn cho thép carbon.

## **Chương 1. TỔNG QUAN NGHIÊN CỨU**

### **1.1. Tổng quan về thép carbon**

Thép carbon là hợp kim chủ yếu gồm sắt và carbon (từ 0,02% đến 2,14%), trong đó carbon đóng vai trò quan trọng quyết định đến độ cứng, độ bền và khả năng chống mài mòn của vật liệu. Ngoài ra, thép còn chứa các nguyên tố như mangan, silic, lưu huỳnh, photpho... với hàm lượng nhỏ, nhưng có ảnh hưởng lớn đến cơ tính và khả năng gia công. Dựa vào hàm lượng carbon, thép được phân thành ba nhóm: thép carbon thấp, trung bình và cao. Tính chất của thép có thể được điều chỉnh thông qua các phương pháp nhiệt luyện như tôi, ram hoặc ủ nhằm tối ưu hóa độ cứng, độ bền và độ dẻo dai.

Thép carbon được ứng dụng rộng rãi trong nhiều lĩnh vực như công nghiệp dầu khí, hóa chất, xử lý nước thải và cơ khí nhờ ưu điểm nổi bật là giá thành thấp, dễ gia công, chịu tải tốt và có độ bền kéo cao. Tuy nhiên, hạn chế lớn nhất của thép carbon là khả năng chống ăn mòn kém, đặc biệt trong môi trường có chứa ion chloride hoặc acid loãng. Với thép carbon cao, độ cứng lớn đi kèm với độ giòn, dễ gãy khi chịu va đập, đồng thời độ ổn định cơ học cũng giảm ở nhiệt độ cao. Do đó, các biện pháp như phủ lớp bảo vệ, sử dụng chất ức chế ăn mòn hoặc hợp kim hóa với các nguyên tố như crom và niken thường được áp dụng để nâng cao khả năng chống chịu trong điều kiện làm việc khắc nghiệt. Mặc dù còn tồn tại một số nhược điểm, thép carbon vẫn giữ vai trò then chốt trong công nghiệp nhờ tính linh hoạt, hiệu suất cao và khả năng tối ưu chi phí sản xuất.

### **1.2. Ăn mòn điện hóa**

Ăn mòn điện hóa là quá trình phá hủy kim loại trong môi trường điện ly do các phản ứng oxi hóa - khử xảy ra đồng thời tại anode và cathode, có bản chất là các phản ứng điện hóa liên quan đến sự trao đổi electron. Bốn

yếu tố cần thiết để quá trình này diễn ra gồm: anode, cathode, chất điện ly và đường dẫn electron. Ăn mòn xảy ra khi kim loại bị oxi hóa tại anode, giải phóng ion kim loại vào dung dịch, trong khi tại cathode diễn ra phản ứng khử, thường là khử ion  $H^+$  hoặc  $O_2$ . Trong một số trường hợp, sản phẩm ăn mòn rắn như oxit hoặc hydroxide có thể hình thành và tạo nên lớp màng thụ động giúp giảm tốc độ ăn mòn. Ăn mòn điện hóa có thể biểu hiện dưới nhiều dạng như: ăn mòn đồng đều, ăn mòn lỗ, ăn mòn khe, ăn mòn galvanic, ăn mòn xói mòn, ăn mòn ứng suất, ăn mòn biên hạt và ăn mòn hình chỉ. Mỗi dạng ăn mòn có cơ chế riêng và chịu ảnh hưởng bởi đặc tính kim loại cũng như điều kiện môi trường. Việc hiểu rõ các cơ chế ăn mòn này là cơ sở quan trọng để lựa chọn giải pháp kiểm soát và bảo vệ vật liệu trong các hệ thống công nghiệp.

### **1.3. Các phương pháp chống ăn mòn điện hóa**

Các phương pháp chống ăn mòn điện hóa bao gồm: bảo vệ cathodic (dùng anode hy sinh hoặc dòng điện áp dụng để giữ kim loại ở trạng thái cathode), lớp phủ bảo vệ (hữu cơ, vô cơ và lớp phủ tự lành nhằm tạo rào chắn chống tác nhân ăn mòn), kiểm soát môi trường (điều chỉnh pH, loại bỏ oxy và giảm ion ăn mòn), thiết kế và bảo trì hợp lý (chọn vật liệu bền, tránh hình dạng dễ ăn mòn và kiểm tra định kỳ), cùng với sử dụng chất ức chế ăn mòn (ức chế anode, cathodic hoặc hỗn hợp) nhằm làm chậm các phản ứng điện hóa gây ăn mòn.

### **1.4. Chất ức chế ăn mòn**

Chất ức chế ăn mòn là các hợp chất có khả năng làm chậm quá trình ăn mòn kim loại thông qua cơ chế hấp phụ lên bề mặt, tạo lớp màng bảo vệ hoặc cản trở phản ứng điện hóa. Có thể được phân loại thành: chất ức chế vô cơ (như chromate, phosphate – tác động anode/cathode), chất hữu cơ (chứa nhóm amino, carboxyl, phosphonate – hấp phụ vật lý hoặc hóa học), chất lai

vô cơ–hữu cơ (kết hợp đất hiếm với hợp chất hữu cơ) và chất từ nguồn gốc tự nhiên (như flavonoid, alkaloid). Cơ chế hoạt động gồm hấp phụ, hình thành lớp màng bảo vệ và ức chế phản ứng điện hóa, góp phần giảm tốc độ hòa tan kim loại và ngăn tác nhân ăn mòn.

### **1.5. Tổng quan về cây Lộc vừng**

Cây Lộc vừng (*Barringtonia acutangula*) là loài thực vật thân gỗ thuộc họ Lecythidaceae, phân bố chủ yếu tại khu vực Nam Á và Đông Nam Á, trong đó có Việt Nam. Loài cây này được trồng phổ biến không chỉ với mục đích cảnh quan mà còn được biết đến với nhiều tiềm năng dược lý, bao gồm hoạt tính chống viêm, kháng khuẩn, chống oxy hóa và ức chế enzyme. Các bộ phận của cây như vỏ, lá, hoa và hạt chứa nhiều hợp chất hữu cơ có hoạt tính sinh học cao như flavonoid, saponin, triterpenoid và polyphenol. Tuy nhiên, thành phần hóa học chi tiết và tiềm năng ứng dụng của hoa và lá Lộc vừng trong lĩnh vực vật liệu và chống ăn mòn kim loại vẫn chưa được nghiên cứu đầy đủ, mở ra hướng khai thác mới giàu tiềm năng cho khoa học và công nghệ vật liệu

## Chương 2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

### 2.1. Đối tượng nghiên cứu

#### 2.1.1. Thu mẫu và định danh

Mẫu lá và hoa Lộc vùng được thu thập tại Phường Long Phước, Thành phố Thủ Đức, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam vào tháng 10 năm 2021. Tên khoa học của loài cây này được xác định bởi Tiến sĩ Đặng Văn Sơn, Viện Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

#### 2.1.2. Hóa chất và thiết bị

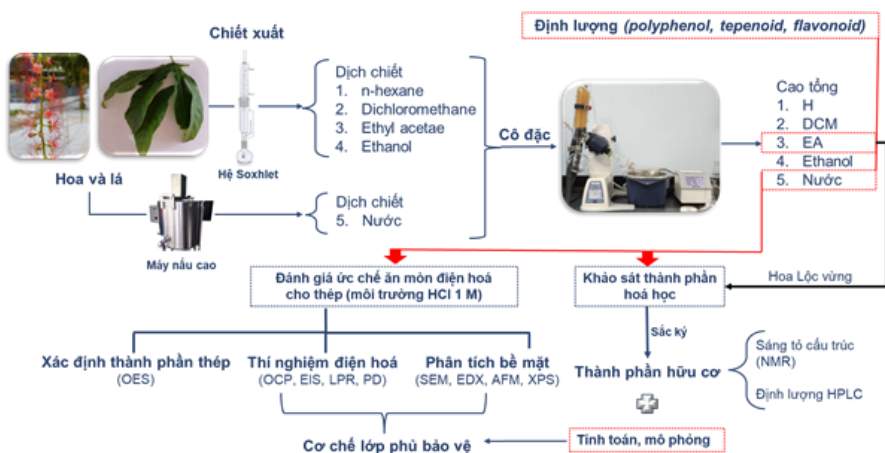
Các dung môi như *n*-hexane, dichloromethane, ethyl acetate, và ethanol, HCl. Thiết bị sử dụng trong quá trình trích ly và sắc ký (hệ thống Soxhlet, TLC, HPLC, sắc ký cột,...). Hệ thống điện hoá (VSP), các thiết bị phân tích bề mặt (SEM, EDX, XPS, OES, FT-IR,...), và các hoá chất và thiết bị khác.

#### 2.1.3. Quy trình bố trí thí nghiệm

Quy trình nghiên cứu của đề tài được mô tả trong Hình 2.1. Năm loại chiết xuất với độ phân cực tăng dần (*n*-hexane, dichloromethane, ethyl acetate, ethanol và nước) từ hoa và lá Lộc vùng được điều chế bằng phương pháp chiết xuất soxhlet và sử dụng máy nấu cao.

Cao chiết xuất nước được khảo sát đặc tính sơ bộ nhằm đánh giá tiềm năng của cao khi trở thành chất ức chế ăn mòn bằng các phương pháp như định lượng thành phần tổng (polyphenol, terpenoid, flavonoid), LC-MS, FT-IR. Thành phần hóa học trong cao nước hoa và lá Lộc vùng cùng cao ethyl acetate của hoa Lộc vùng được cô lập thông qua phương pháp sắc ký, và cấu trúc hóa học được làm sáng tỏ bằng phương pháp phổ nghiệm NMR kết hợp với tài liệu tham khảo. Một số hợp chất chọn lọc sẽ được định lượng trong cao bằng phương pháp sắc ký lỏng hiệu năng cao (HPLC). Cao nước hoa và

lá được đánh giá đánh giá khả năng ức chế ăn mòn điện hóa cho thép carbon trong môi trường acid HCl 1 M bằng các phương pháp điện hóa như OCP, EIS, LPR, và PD. Ngoài ra, phân tích bề mặt thép trước và sau khi sử dụng chất ức chế được thực hiện bằng các phương pháp SEM, EDX, AFM, và XPS. Thành phần hóa học của thép thực nghiệm được đánh giá bằng phương pháp OES. Từ dữ kiện điện hóa và phân tích bề mặt thép thu được, cơ chế ăn mòn và ức chế ăn mòn được đề xuất. Tính toán mô phỏng dựa trên các đơn chất đã phân lập kết hợp cùng kết quả phân tích các mô hình đẳng nhiệt sẽ giúp củng cố các cơ chế đã đề xuất.



**Hình 2.1.** Quy trình bố trí thí nghiệm của đề tài.

## 2.2. Phương pháp thí nghiệm

Phương pháp định tính (xác định hàm lượng tổng polyphenol bằng phương pháp Folin-Ciocalteu, xác định tổng hàm lượng terpenoid sử dụng thử vanillin, xác định tổng hàm lượng flavonoid bằng phương pháp so màu với  $\text{AlCl}_3$ ); Phương pháp cô lập và sáng tỏ cấu trúc (sắc ký lớp mỏng, sắc ký cột, phương pháp phổ cộng hưởng từ hạt nhân – NMR); Phương pháp định lượng bằng HPLC; Phương pháp điện hóa như: thế mạch hở (OCP), tổng trở điện hóa (EIS), điện trở phân cực tuyến tính (LPR), phân cực thế động (PD);

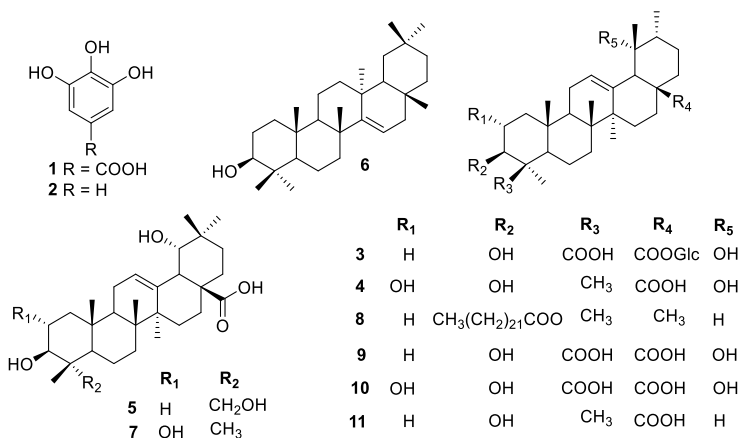
Phương pháp phân tích bề mặt: kính hiển vi điện tử quét (SEM), phổ tán sắc năng lượng tia X (EDS), kính hiển vi lực nguyên tử (AFM), quang phổ điện tử tia X (XPS), Phương pháp huỳnh quang tia X (XRF); Phương pháp tính toán mô phỏng: tính toán lý thuyết và mô phỏng động học phân tử. Phân tích các mô hình đẳng nhiệt hấp phụ Langmuir, Florry-Huggins; El-Awady; Freundlich.

## Chương 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

### 3.1. Đánh giá thành phần và tính chất cao

#### 3.1.1. Thành phần và tính chất của cao chiết xuất

Trong nghiên cứu về chất ức chế ăn mòn kim loại có nguồn gốc tự nhiên, việc đánh giá thành phần và tính chất của cao nước trước khi tiến hành các thí nghiệm điện hóa đóng vai trò quan trọng. Thành phần hóa học của cao nước quyết định cơ chế ức chế ăn mòn thông qua khả năng hấp phụ lên bề mặt kim loại và tác động đến phản ứng oxy hóa – khử trong môi trường ăn mòn.



**Hình 3.1.** Cấu trúc hóa học mười một hợp chất cô lập từ hoa và lá Lộc vùng.

Phân tích bằng phổ FT-IR cho thấy cao nước hoa và lá Lộc vùng chứa các nhóm chức quan trọng như hydroxyl (-OH), carbonyl (-C=O), liên kết đôi -C=C-, và liên kết -C-O-, cho thấy tiềm năng hấp phụ lên bề mặt kim loại để tạo lớp màng bảo vệ. Kết quả phân tích thành phần tổng cho thấy cao nước lá Lộc vùng có hàm lượng flavonoid và polyphenol cao hơn đáng kể so với hoa, với tổng flavonoid đạt  $852,25 \pm 38,89$  mg/g, cao gần 2,8 lần so với hoa, trong khi tổng polyphenol đạt  $261,13 \pm 12,34$  mgGAE/g. Thành phần này

cho thấy khả năng chống oxy hóa mạnh và hỗ trợ hình thành lớp màng bảo vệ trên bề mặt kim loại. Kết quả LC-MS xác định sự hiện diện của nhiều hợp chất hữu cơ có tiềm năng ức chế ăn mòn, trong đó cao nước hoa Lộc vùng chứa Gamabufotalin, Bufotalin, và Vobassan-17-oic acid, trong khi cao nước lá có Beclomethasone, Cortisone, Rescinamine và Pregn-4-ene-3,20-dione. Ngoài ra, sắc ký tự động-MS cho thấy sự xuất hiện của các polyphenol như brevifolin carboxylate, galloyl glucose, quinic acid và gallic acid trong cả hai loại cao nước, làm tăng khả năng chống oxy hóa và bảo vệ kim loại.

Khảo sát thành phần hóa học đã được thực hiện trên cao nước hoa và lá Lộc vùng. Đồng thời các hợp chất chính trong cao ethyl acetate điều chế từ hoa Lộc vùng cũng được đánh giá thành phần hoá học. Tổng cộng 11 hợp chất đã được xác định và xác định cấu trúc. Cấu trúc hóa học của các đơn chất được xác định dựa vào phương pháp phổ nghiệm kết hợp so sánh với tài liệu tham khảo. Cụ thể hơn, ba hợp chất gallic acid (1), pyrogallol (2), ilexosaponin A1 (3) được phân lập từ cao nước của hoa; sáu hợp chất gallic acid (1), arjunic acid (4), ilexosapogenin A (5), taraxerol (6), tormentic acid (7), Urs-12-en-3-ol, 3-docosanoate (8) được phân lập từ cao nước của lá; và ba hợp chất ilexgenin A (9),  $2\alpha$ ,  $3\beta$ ,  $19\alpha$ -trihydroxy-urs-12-ene-23, 28-dioic acid (10), ursolic acid (11) được phân lập từ cao ethyl acetate của hoa Lộc vùng (Hình 3.1). Cho đến thời điểm hiện tại, mười một hợp chất đã cô lập được xác định là hợp chất mới lần đầu tiên được phát hiện từ cây Lộc vùng

### 3.1.2. Phân tích kết quả mô phỏng

Bài nghiên cứu đã sử dụng phương pháp mô phỏng (DP4+ và MD) để phân tích chi tiết khả năng ức chế ăn mòn của các hợp chất phân lập từ cao nước lá và nước hoa Lộc vùng trên bề mặt thép carbon. Các hợp chất như gallic acid (GA), và ilexosaponin A1 (ISA1) đã được xem xét thông qua các tính toán về phân bố Boltzmann và năng lượng liên kết (Bảng 3.1).

**Bảng 3.1.** Tính toán năng lượng liên kết cho quá trình hấp phụ gallic acid (GA), và ilex saponin A1 (ISA1) trên bề mặt Fe(110).

|          | $E_{all}$  | $E_{sub+sol}$ | $E_{inh+sol}$ | $E_{sol}$  | $E_b$      | $E_b$  |
|----------|------------|---------------|---------------|------------|------------|--------|
|          | (kcal/mol) | (kcal/mol)    | (kcal/mol)    | (kcal/mol) | (kcal/mol) | (eV)   |
| GA (1)   | -89667,79  | -89511,24     | -7728,96      | -7669,41   | -97,00     | -4,21  |
| ISA1 (2) | -89215,09  | -88928,65     | -7704,84      | -7672,45   | -254,06    | -11,02 |

**Bảng 3.2.** Tính toán năng lượng liên kết cho quá trình hấp phụ arjunic acid (AJA), tormentic acid (TMA), ilexosapogenin A (ILSG), 3 $\beta$ -Docosanoyloxy-urs-12-ene (DUE), taraxerol (TX), trên bề mặt Fe(110).

|         | $E_{all}$  | $E_{sub+sol}$ | $E_{inh+sol}$ | $E_{sol}$  | $E_b$      | $E_b$ |
|---------|------------|---------------|---------------|------------|------------|-------|
|         | (kcal/mol) | (kcal/mol)    | (kcal/mol)    | (kcal/mol) | (kcal/mol) | (eV)  |
| AJA (4) | -          | -             | -             | -          | -          | -     |
| ILSG(5) | -90008,81  | -89874,61     | -7843,82      | -7822,88   | -113,26    | -2,91 |
| TX (6)  | -          | -             | -             | -          | -          | -     |
| TMA (7) | -89854,99  | -89812,69     | -7710,00      | -7672,40   | -4,69      | -0,2  |
| DUE (8) | -          | -             | -             | -          | -          | -     |

Kết quả cho thấy ISA1 có khả năng hấp phụ mạnh hơn GA trên bề mặt thép, hình thành lớp màng bảo vệ ổn định hơn. Năng lượng liên kết của GA và ISA1 cho thấy đây là các chất ức chế ăn mòn hiệu quả. Mô phỏng cũng chỉ ra rằng gallic acid, khi kết hợp với các hợp chất terpenoid trong cao nước lá, đóng vai trò quan trọng trong việc nâng cao hiệu suất ức chế ăn mòn. Tuy nhiên, một số hợp chất như AJA, TMA, và DUE có khả năng bám dính và ức chế ăn mòn không đáng kể (Bảng 3.2). Kết quả mô phỏng khẳng định rằng sự cộng hưởng giữa các thành phần hữu cơ, đặc biệt là gallic acid và ilex saponin A1, là yếu tố chính giúp tạo ra lớp màng bảo vệ hiệu quả trên bề mặt thép, tăng cường khả năng ức chế ăn mòn trong môi trường axit HCl 1 M.

### 3.2. Kết quả phân tích điện hóa

Thực hiện thí nghiệm đánh giá ức chế ăn mòn điện hóa trong môi trường HCl 1 M mang ý nghĩa quan trọng cả về thực tiễn lẫn khoa học. Trước hết, HCl là acid mạnh, đại diện cho các môi trường ăn mòn phổ biến trong công nghiệp, như hóa chất, dầu khí và xử lý kim loại. Nồng độ 1 M tạo điều kiện khắc nghiệt, giúp đánh giá hiệu quả của chất ức chế trong môi trường dễ gây ăn mòn. Hơn nữa, HCl có tính ổn định cao và dễ pha chế, đảm bảo kết quả thí nghiệm chính xác, có thể lặp lại và kiểm soát tốt các ion  $\text{Cl}^-$ , yếu tố thúc đẩy ăn mòn cục bộ. Trong môi trường này, các phản ứng điện hóa như oxy hóa kim loại và khử  $\text{H}^+$  diễn ra mạnh mẽ, cho phép phân tích rõ ràng cơ chế ức chế thông qua các thông số như thế ăn mòn ( $E_{\text{corr}}$ ), dòng ăn mòn ( $I_{\text{corr}}$ ), và điện trở phân cực ( $R_p$ ). Ngoài ra, HCl 1 M thường được sử dụng trong nghiên cứu quốc tế, giúp dễ dàng so sánh và chuẩn hóa kết quả. Kết quả thu được không chỉ cung cấp dữ liệu để hiểu rõ cơ chế bảo vệ kim loại mà còn là cơ sở ứng dụng thực tế trong các môi trường công nghiệp có tính ăn mòn tương tự.

#### 3.2.1. Hiệu suất ức chế ăn mòn cao hoa

Kết quả phân tích điện hóa bằng phương pháp EIS cho thấy sự ảnh hưởng của chất ức chế ăn mòn BAFE đến tổng trở của thép trong dung dịch HCl 1 M. Biểu đồ Nyquist thể hiện vòng cung bán nguyệt, trong đó độ rộng của vòng cung tỷ lệ thuận với khả năng bảo vệ ăn mòn. Khi không có BAFE, tổng trở thép rất thấp, phản ánh mức độ ăn mòn nghiêm trọng. Ngược lại, khi bổ sung BAFE ở nồng độ 500-4000 ppm, tổng trở tăng dần theo nồng độ, cho thấy sự hình thành lớp bảo vệ trên bề mặt thép. Tuy nhiên, ở 4000 ppm, lớp màng bảo vệ có xu hướng kém ổn định do hiện tượng kết tụ và lắng đọng nhanh. Biểu đồ Bode bổ sung thêm thông tin về giá trị trở kháng và góc pha theo tần số, xác nhận khả năng bảo vệ ăn mòn của BAFE. Phân tích điện trở và điện dung trong mạch tương đương chỉ ra rằng ở 3000 ppm, lớp bảo vệ

đạt hiệu suất tối ưu nhờ sự hình thành lớp hấp phụ đồng nhất, giảm mật độ dòng ăn mòn. Những kết quả này khẳng định rằng BAFE là chất ức chế ăn mòn hiệu quả cho thép trong môi trường axit, với nồng độ tối ưu là 3000 ppm.

**Bảng 3.3.** Các thông số ăn mòn quan sát được bằng phép ngoại suy Tafel từ các phép đo phân cực thể động.

| Nồng độ (ppm) | $E_{corr}$ (mV <sub>Ag/AgCl</sub> ) | $i_{corr}$ ( $\mu$ A/cm <sup>2</sup> ) | $\beta_a$ (mV/decade) | $-\beta_c$ (mV/decade) | $\eta$ (%)       |
|---------------|-------------------------------------|----------------------------------------|-----------------------|------------------------|------------------|
| 0             | $-420 \pm 8$                        | $2377,34 \pm 271,51$                   | $189 \pm 15$          | $218 \pm 7$            | -                |
| 500           | $-504 \pm 16$                       | $203,51 \pm 51,28$                     | $185 \pm 14$          | $114 \pm 5$            | $90,91 \pm 3,25$ |
| 1000          | $-485 \pm 36$                       | $137,61 \pm 31,91$                     | $174 \pm 17$          | $109 \pm 7$            | $93,80 \pm 2,03$ |
| 2000          | $-481 \pm 36$                       | $127,16 \pm 33,61$                     | $127 \pm 15$          | $90 \pm 7$             | $94,21 \pm 2,06$ |
| 3000          | $-503 \pm 18$                       | $88,66 \pm 18,52$                      | $119 \pm 16$          | $84 \pm 8$             | $96,00 \pm 1,20$ |
| 4000          | $-494 \pm 21$                       | $112,80 \pm 21,12$                     | $175 \pm 19$          | $109 \pm 6$            | $94,90 \pm 1,40$ |

Bảng 3.4 thể hiện hiệu suất ức chế ăn mòn (%  $\eta$ ) của chất ức chế BAFE ở các nồng độ khác nhau, dựa trên các phương pháp EIS, LPR, PD và phương pháp giảm khối lượng (weight loss, WL). Nhìn chung, xác định hiệu suất theo phương pháp nào thì BAFE đều thể hiện chung một xu hướng. Hiệu suất ức chế tăng dần khi nồng độ BAFE tăng từ 0 ppm đến 3000 ppm. Ở nồng độ 0 ppm, không có hiệu quả ức chế ( $\eta = 0\%$ ), nhưng khi bổ sung BAFE, hiệu suất ức chế cải thiện đáng kể, đạt cực đại tại 3000 ppm với giá trị cao nhất là 94.55% (EIS), 91.88% (LPR), 94.89% (PD), và 96.86% (WL). Sự gia tăng này phản ánh hiệu quả của BAFE trong việc giảm tốc độ ăn mòn thông qua cơ chế hấp phụ trên bề mặt thép. Tuy nhiên, ở nồng độ 4000 ppm, hiệu suất có xu hướng giảm nhẹ (ví dụ: EIS giảm từ 94.55% xuống 93.93%), cho thấy nồng độ tối ưu của BAFE là 3000 ppm. Điều này cũng phù hợp với xu hướng gia tăng trở kháng phân cực ( $R_p$ ) và giảm giá trị dòng ăn mòn ( $i_{corr}$ )

khi nồng độ tăng, đặc biệt nổi bật trong phương pháp EIS và PD. Trong trường hợp của BAFE, hiệu suất ức chế tính từ  $R_p$  không quá khác biệt so với  $i_{corr}$ . Do đó, có thể thấy rằng khi thêm BAFE vào dung dịch HCl 1 M (pH = 0), thì hầu như cao chiết không làm ảnh hưởng tới dung dịch acid mạnh này, và mọi cơ chế ức chế ăn mòn đều tập trung hết vào quá trình hấp phụ tạo màng mỏng để ngăn chặn quá trình chuyển điện tích trên giao diện của thép carbon.

**Bảng 3.4.** Hiệu suất ức chế ăn mòn của BAFE sử dụng các phương pháp khác nhau.

| Nồng độ<br>ppm | EIS    |               | LPR    |               | PD                             |               | WL              |               |
|----------------|--------|---------------|--------|---------------|--------------------------------|---------------|-----------------|---------------|
|                | $R_p$  | $\eta$<br>(%) | $R_p$  | $\eta$<br>(%) | $i_{corr}$<br>( $\mu A/cm^2$ ) | $\eta$<br>(%) | $m_{TB}$<br>(g) | $\eta$<br>(%) |
| 0              | 15,54  | 0             | 20,3   | 0             | 2377,34                        | 0             | 0,2273          | 0             |
| 500            | 130,49 | 88,09         | 104,25 | 80,53         | 203,51                         | 90,91         | 0,0194          | 91,44         |
| 1000           | 195,47 | 92,05         | 186,5  | 89,12         | 137,61                         | 93,80         | 0,0148          | 93,49         |
| 2000           | 243,88 | 93,63         | 208,0  | 90,24         | 127,16                         | 94,21         | 0,0107          | 95,31         |
| 3000           | 284,87 | 94,55         | 250,0  | 91,88         | 88,66                          | 96,00         | 0,0098          | 95,70         |
| 4000           | 256,06 | 93,93         | 236,5  | 91,42         | 112,80                         | 94,90         | 0,0107          | 95,29         |

### 3.2.2. Hiệu suất ức chế ăn mòn cao lá

Kết quả phân tích điện hóa của cao nước lá Lộc vùng được thể hiện qua các biểu đồ Nyquist và Bode. Biểu đồ Nyquist cho thấy tổng trở của hệ tăng khi nồng độ cao nước lá Lộc vùng tăng từ 500 đến 3000 ppm, nhưng giảm nhẹ ở 4000 ppm. Điều này phản ánh khả năng ức chế ăn mòn của BALE, với nồng độ tối ưu là 3000 ppm. Đặc biệt, ở 3000 và 4000 ppm, xuất hiện hai vòng bán nguyệt trong 4 giờ đầu, sau đó hợp nhất, cho thấy quá trình hình thành lớp màng bảo vệ. Trong khi đó, biểu đồ Bode xác nhận xu hướng tăng tổng trở ở tần số thấp, với góc pha gần 90 độ, chứng minh sự hình thành

lớp màng bảo vệ bề mặt thép. Phép đo phân cực thể động cho thấy BALE có vai trò ức chế ăn mòn hỗn hợp, ưu tiên phản ứng cathode. Mật độ dòng điện ăn mòn giảm mạnh khi tăng nồng độ BALE, với hiệu suất ức chế đạt 96,56% tại 3000 ppm. Phép ngoại suy Tafel cho thấy mật độ dòng ăn mòn giảm đáng kể ngay ở 500 ppm, từ 3335,7 xuống 374,93  $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ , với hiệu suất ức chế trên 90% ở nồng độ từ 1000 ppm trở lên. Hiệu suất ức chế đạt cực đại tại 3000 ppm nhưng giảm nhẹ ở 4000 ppm.

**Bảng 3.5.** Các thông số ăn mòn quan sát được bằng phép ngoại suy Tafel từ các phép đo phân cực thể động.

| Nồng độ (ppm) | $E_{\text{corr}}$ (mV <sub>Ag/AgCl</sub> ) | $i_{\text{corr}}$ ( $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ ) | $\beta_a$ (mV/decade) | $-\beta_c$ (mV/decade) | $\eta$ (%)        |
|---------------|--------------------------------------------|-------------------------------------------------|-----------------------|------------------------|-------------------|
| 0             | $-425 \pm 3,3$                             | $3335,7 \pm 10,4$                               | $174 \pm 23,1$        | $205,4 \pm 7,3$        | -                 |
| 500           | $-498 \pm 0,5$                             | $274,58 \pm 10,71$                              | $161,0 \pm 2,0$       | $96,50 \pm 3,5$        | $87,92 \pm 0,32$  |
| 1000          | $-507 \pm 11,5$                            | $223,09 \pm 11,69$                              | $136,0 \pm 4,0$       | $92,5 \pm 1,5$         | $89,69 \pm 0,61$  |
| 2000          | $-504 \pm 3,5$                             | $217,29 \pm 13,64$                              | $123,5 \pm 1,5$       | $87,5 \pm 1,5$         | $91,61 \pm 0,06$  |
| 3000          | $-514 \pm 6,7$                             | $107,9 \pm 3,8$                                 | $113,0 \pm 9,5$       | $89,7 \pm 10,3$        | $96,56 \pm 0,12$  |
| 4000          | $-497 \pm 6,5$                             | $156,36 \pm 7,87$                               | $144,5 \pm 10,5$      | $92 \pm 2,0$           | $92,91 \pm 0,125$ |

Các kết quả đo bằng EIS, LPR, PD và mất khối lượng cũng cho thấy xu hướng tương tự, xác nhận khả năng bảo vệ bề mặt thép của BALE. Khi nồng độ tăng từ 500 đến 3000 ppm, hiệu suất ức chế tăng theo tất cả các phương pháp, nhưng giảm nhẹ hoặc không tăng đáng kể ở 4000 ppm. Điều này cho thấy nồng độ 3000 ppm là tối ưu, đảm bảo hiệu quả bảo vệ cao mà không gây lãng phí chất ức chế. Cơ chế ăn mòn và bảo vệ của BALE sẽ được phân tích sâu hơn trong các phần sau.

**Bảng 3.6.** Hiệu suất ức chế ăn mòn của BALE sử dụng các phương pháp khác nhau.

| Nồng độ<br>ppm | EIS    |               | LPR   |               | PD                             |               | WL              |               |
|----------------|--------|---------------|-------|---------------|--------------------------------|---------------|-----------------|---------------|
|                | $R_p$  | $\eta$<br>(%) | $R_p$ | $\eta$<br>(%) | $i_{corr}$<br>( $\mu A/cm^2$ ) | $\eta$<br>(%) | $m_{TB}$<br>(g) | $\eta$<br>(%) |
| 0              | 10,93  | 0             | 12,8  | 0             | 3335,7                         | 0             | 0.2554          | 0             |
| 500            | 81,41  | 81,41         | 76,9  | 83,36         | 274,58                         | 87,92         | 0.0154          | 93,18         |
| 1000           | 113,43 | 90,36         | 79,9  | 83,99         | 223,09                         | 89,69         | 0.0094          | 95,84         |
| 2000           | 142,30 | 92,32         | 106,2 | 87,95         | 217,29                         | 91,61         | 0.0079          | 96,51         |
| 3000           | 142,71 | 92,34         | 143,0 | 91,05         | 107,9                          | 96,56         | 0.0071          | 96,86         |
| 4000           | 123,68 | 91,16         | 125,5 | 89,80         | 156,36                         | 92,91         | 0.0088          | 96,10         |

### 3.3. Kết quả phân tích bề mặt

#### 3.3.1. Kết quả phân tích bề mặt của thép sau khi sử dụng cao nước hoa Lộc vùng làm chất ức chế ăn mòn.

Kết quả phân tích bề mặt thép sau 24 giờ ngâm trong dung dịch HCl 1 M với chất ức chế ăn mòn là cao nước lá Lộc vùng (BAFE) được đánh giá qua SEM, AFM, EDS và XPS. Ảnh SEM cho thấy bề mặt thép bị ăn mòn nghiêm trọng khi không có BAFE, trong khi ở các nồng độ 500–4000 ppm, xuất hiện lớp phủ bảo vệ với các hạt kết tụ. Mật độ và kích thước hạt tăng theo nồng độ BAFE, đạt cực đại ở 3000 ppm và giảm nhẹ ở 4000 ppm, phù hợp với kết quả EIS về sự suy giảm trở kháng ở nồng độ cao. Phân tích EDS xác nhận sự hiện diện của Cl, O, C và Fe trên bề mặt, với hàm lượng C cao cho thấy lớp màng bảo vệ chủ yếu hình thành từ hợp chất hữu cơ. Kết quả AFM chứng minh sự hình thành màng bảo vệ với độ nhám ( $R_{ms}$ ) 10,30 nm, chứng tỏ sự giảm đáng kể quá trình ăn mòn. Phổ XPS xác định các thành phần chính như  $Fe_2O_3@C$  và  $FeOOH$ , đồng thời xác nhận sự tương tác giữa ion sắt với các nhóm chức chứa oxy trong hợp chất hữu cơ của BAFE. Cơ

chế bảo vệ của BAFE liên quan đến sự hấp phụ của các hợp chất hữu cơ có nhóm OH, COOH và C=O lên bề mặt thép, tạo thành phức với ion Fe, giúp ức chế quá trình oxy hóa sắt trong môi trường acid mạnh. Dữ liệu XPS và EDX củng cố giả thuyết này, cho thấy sự hình thành lớp màng bảo vệ ổn định, giảm thiểu sự ăn mòn trong môi trường HCl 1 M.

### **3.3.2. Kết quả phân tích bề mặt của thép sau khi sử dụng cao nước lá Lộc vùng làm chất ức chế ăn mòn**

Phân tích bề mặt thép ngâm trong dung dịch HCl 1 M chứa 3000 ppm BALE bằng AFM cho thấy bề mặt thép được bảo vệ hiệu quả bởi lớp hữu cơ với độ nhám (Rms) 14,3 nm. Ảnh SEM chỉ ra rằng khi không có chất ức chế, bề mặt thép bị ăn mòn nghiêm trọng. Khi bổ sung BALE từ 500 đến 2000 ppm, mức độ ăn mòn giảm đáng kể, và tại 3000 ppm, bề mặt thép nhẵn hơn với sự xuất hiện của các hạt bảo vệ phân bố đồng đều. Tuy nhiên, tại 4000 ppm BALE, các hạt kết tụ nhỏ hơn và phân bố không đồng đều, giải thích cho hiệu suất ức chế kém hơn ở nồng độ này. Phổ EDS cho thấy khi có 3000 ppm BALE, các đỉnh của Si, P và Cl bị triệt tiêu do sự hình thành lớp phủ hữu cơ trên bề mặt thép. Thành phần của màng bảo vệ bao gồm các hợp chất hữu cơ giàu oxy như nhóm OH, COOH, COOR,... Phân tích XPS xác nhận sự hiện diện của các nguyên tố C, Cl, Fe và O trên bề mặt thép bị ức chế, với Fe chủ yếu tồn tại ở dạng  $\text{Fe}^{3+}$  ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ,  $\text{FeOOH}$ ). Các tín hiệu đặc trưng trong phổ C 1s và O 1s chỉ ra sự hình thành lớp màng bảo vệ hữu cơ chứa các nhóm chức như C-O, -COO-, C=O, giúp ngăn cản quá trình hòa tan kim loại. Phổ Cl 2p cũng cho thấy sự hiện diện của ion  $\text{Cl}^-$  trên bề mặt thép, đồng thời không có sự xuất hiện của nguyên tố P và N. Nhìn chung, kết quả từ AFM, SEM, EDS và XPS đều chứng minh sự hình thành lớp màng hữu cơ bảo vệ trên bề mặt thép, phù hợp với các kết quả điện hóa trước đó.

### 3.4. Cơ chế ăn mòn và ức chế ăn mòn

#### 3.4.1. So sánh khả năng ức chế giữa cao nước hoa và lá Lộc vùng

Thí nghiệm ức chế ăn mòn thép carbon trong dung dịch HCl 1M sử dụng cao chiết từ hoa và lá Lộc vùng cho thấy sự khác biệt về thành phần nguyên tố giữa hai mẫu thép ảnh hưởng đáng kể đến cơ chế ăn mòn và hiệu quả bảo vệ (Bảng 3.7).

**Bảng 3.7.** Các thông số ăn mòn quan sát được bằng phép ngoại suy Tafel từ phép đo phân cực thể động sử dụng nồng độ tối ưu 3000 ppm của cao nước hoa và lá Lộc vùng.

| Nồng độ<br>ppm | $E_{corr}$<br>(mV <sub>Ag/AgCl</sub> ) | $i_{corr}$<br>( $\mu A/cm^2$ ) | $\beta_a$<br>(mV/decade) | $-\beta_c$<br>(mV/decade) | $\eta$<br>(%)    |
|----------------|----------------------------------------|--------------------------------|--------------------------|---------------------------|------------------|
| L1             | -517                                   | 108,11                         | 102                      | 69                        | 96,57            |
| 3000 L2        | -501                                   | 115,45                         | 132                      | 95                        | 96,32            |
| Lá L3          | -525                                   | 100,26                         | 105                      | 105                       | 96,78            |
| Tb             | $-514,4 \pm 6,7$                       | $107,9 \pm 3,8$                | $113,0 \pm 9,5$          | $89,7 \pm 10,3$           | $96,56 \pm 0,12$ |
| L1             | -509                                   | 98,21                          | 72                       | 49                        | 97,06            |
| 3000 L2        | -498                                   | 93,01                          | 88                       | 63                        | 97,21            |
| Hoa L3         | -497                                   | 101,39                         | 149                      | 105                       | 96,96            |
| Tb             | $-501,3 \pm 3,8$                       | $97,5 \pm 2,3$                 | $103 \pm 23,0$           | $72,3 \pm 16,3$           | $97,08 \pm 0,07$ |

Kết quả phân tích OES cho thấy mẫu thép sử dụng cho thí nghiệm với hoa Lộc vùng có hàm lượng carbon (C) cao hơn (0,0430% so với 0,0350%), dẫn đến sự hình thành pha carbide  $Fe_3C$ , làm tăng độ cứng nhưng cũng tạo ra các tế bào ăn mòn vi mô trong môi trường HCl. Hàm lượng mangan (Mn) cao hơn (0,7800% so với 0,6900%) giúp cải thiện tính bền kéo nhưng có thể tạo hợp chất ăn mòn  $MnCl_2$ , ảnh hưởng đến khả năng hấp phụ của chất ức chế. Trong khi đó, thép sử dụng cho thí nghiệm với lá Lộc vùng có hàm lượng phosphor (P) cao hơn (0,0156% so với 0,0087%), làm tăng nguy cơ

ăn mòn cục bộ. Ngoài ra, thép này chứa lượng cobalt (Co) và niobium (Nb) cao hơn, giúp ổn định lớp oxit nhưng có thể cản trở sự hấp phụ của chất ức chế. Để đảm bảo so sánh chính xác, thí nghiệm phân cực động (PD) của cao nước hoa Lộc vùng tại nồng độ 3000 ppm được thực hiện trên cùng loại thép với thí nghiệm dùng cao nước lá. Kết quả cho thấy hiệu suất ức chế ăn mòn của cao nước hoa đạt 97,08%, cao hơn không đáng kể so với cao nước lá (96,56%). Sự khác biệt nhỏ này phản ánh thành phần hóa học tương đồng của hai loại cao, trong đó cả hai đều chứa hợp chất vòng đơn và terpenoid.

### **3.4.2. Đường đẳng nhiệt được sử dụng trong nghiên cứu chất ức chế hấp phụ ăn mòn từ cao nước hoa Lộc vùng**

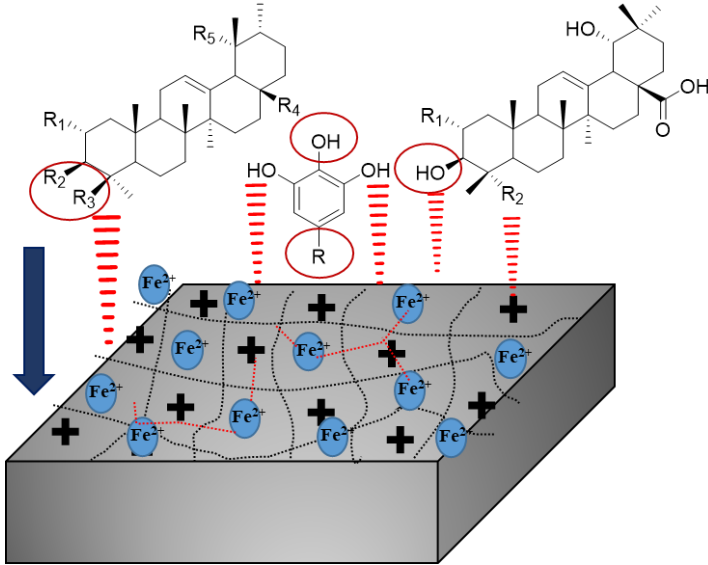
Trong nghiên cứu về khả năng ức chế ăn mòn của cao nước hoa Lộc vùng, các đường đẳng nhiệt hấp phụ đã được xây dựng theo các mô hình Langmuir, Florry-Huggins, El-Awady và Freundlich nhằm tính toán năng lượng tự do Gibbs ( $\Delta G^0_{\text{ads}}$ ). Kết quả đo phân cực thế động (PD) cho thấy tốc độ ăn mòn của thép carbon trong dung dịch HCl 1M tăng mạnh theo nhiệt độ, đặc biệt ở 55°C. Khi có mặt BAFE, tốc độ ăn mòn giảm đáng kể, đạt hiệu quả ức chế tối ưu tại 3000 ppm. Tuy nhiên, ở 4000 ppm, hiệu quả ức chế có xu hướng giảm nhẹ, đặc biệt ở nhiệt độ cao. Dữ liệu mô hình Langmuir cho thấy sự hấp phụ xảy ra theo cơ chế đơn lớp với hệ số hồi quy tuyến tính ( $R^2$ ) cao (0,9994 - 0,99991), đồng thời hằng số hấp phụ  $K_{\text{ads}}$  giảm dần theo nhiệt độ, phản ánh sự suy giảm ái lực của chất ức chế với bề mặt thép. Giá trị năng lượng tự do Gibbs dao động từ -58,15 đến -62,27 kJ/mol, khẳng định cơ chế hấp phụ hóa học. Mô hình Florry-Huggins cho thấy mỗi phân tử chất hấp phụ có thể chiếm nhiều hơn một vị trí hoạt hóa, với xu hướng gia tăng theo nhiệt độ. Trong khi đó, mô hình El-Awady chỉ ra rằng quá trình hấp phụ có thể chuyển từ đơn phân tử sang đa phân tử khi nhiệt độ tăng. Mô hình Freundlich không phù hợp với dữ liệu thực nghiệm, củng cố kết luận về cơ chế hấp phụ đơn lớp không đồng nhất. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến quá trình

ăn mòn được đánh giá thông qua biểu đồ trạng thái chuyển tiếp và phương trình Arrhenius. Khi nồng độ BAFE tăng, năng lượng hoạt hóa  $E_a$  và enthalpy  $\Delta H$  cũng tăng đáng kể, cho thấy chất ức chế tạo ra một rào cản năng lượng cao hơn, làm chậm quá trình ăn mòn. Entropy ( $\Delta S$ ) có giá trị âm nhưng xu hướng ít âm hơn khi có mặt BAFE, chứng tỏ hệ phản ứng trở nên trật tự hơn do sự hình thành lớp hấp phụ ổn định.

### ***3.4.3. Cơ chế ăn mòn và ức chế ăn mòn***

Cơ chế ức chế ăn mòn của cao nước hoa và lá Lộc vùng tương đối tương đồng, đều hoạt động thông qua việc hình thành lớp màng hấp phụ hữu cơ trên bề mặt thép. Trong môi trường HCl 1 M, thép carbon chịu ăn mòn điện hóa tại các điểm khuyết tật do sự chênh lệch điện thế cục bộ. Khi không có chất ức chế, quá trình ăn mòn diễn ra mạnh mẽ, thể hiện qua mật độ dòng cao và hình ảnh SEM cho thấy sự hình thành rỉ sét. Khi bổ sung cao chiết (BAFE hoặc BALE), các phân tử hoạt tính nhanh chóng hấp phụ lên bề mặt thép, đặc biệt tại các vị trí anodic, nhờ vào các nhóm chức phân cực như  $-OH$ ,  $-COOH$ ,  $-C=O$ . Lớp màng hữu cơ này làm giảm tiếp xúc giữa thép và ion  $Cl^-$ , cản trở quá trình truyền điện tích và khuếch tán ion, từ đó giảm tốc độ ăn mòn. Ở nồng độ tối ưu 3000 ppm, hiệu suất đạt tới 97,08% (hoa) và 96,56% (lá), với tổng trở tăng rõ rệt và mật độ dòng ăn mòn giảm mạnh. Dữ liệu EDS/XPS khẳng định sự gia tăng các nguyên tố C và O trên bề mặt thép, minh chứng cho sự hình thành lớp phủ hấp phụ. Nhờ cấu trúc các hợp chất chứa nhiều nhóm chức hoạt động và khả năng tương tác điện tử với  $Fe^{n+}$ , các phân tử này tham gia hấp phụ hóa học, hình thành lớp màng che phủ ổn định. Dữ liệu mô phỏng động lực học phân tử (MD) và năng lượng hấp phụ ( $E_b$ ) cho thấy gallic acid và ilex saponin A1 có khả năng bảo vệ vượt trội. Ngược lại, một số triterpenoid trong cao lá tuy có tiềm năng lý thuyết nhưng không cho thấy hấp phụ bền. Sự cộng hưởng phân tử, đặc biệt giữa các hợp chất vòng đơn và triterpenoid là yếu tố quyết định hiệu quả tổng

thể. Hiệu suất ức chế giảm nhẹ ở 4000 ppm do sự hạn chế hấp phụ của các phân tử khi nồng độ quá cao. Kết hợp dữ liệu thực nghiệm và mô phỏng cho thấy cao nước hoa có hiệu quả vượt trội hơn, nhờ chứa các hợp chất có năng lượng liên kết cao và cấu trúc hấp phụ tối ưu.



**Hình 3.2.** Cơ chế hình thành lớp màng bảo vệ trên bề mặt thép.

## KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ

### KẾT LUẬN

Cao nước từ hoa và lá cây Lộc vùng đã được chiết tách, phân tích thành phần hóa học, đặc tính hóa lý và đánh giá khả năng ức chế ăn mòn điện hóa của thép carbon trong môi trường HCl 1 M. Đây là một trong những nghiên cứu đầu tiên cung cấp cái nhìn toàn diện, kết hợp giữa kỹ thuật phân tích phổ hiện đại, các phương pháp điện hóa thực nghiệm và mô phỏng nhằm làm rõ cơ chế bảo vệ kim loại. Tổng cộng 11 hợp chất đã được phân lập và xác định cấu trúc, trong đó có một số hợp chất lần đầu được phát hiện ở loài này. Ilexsaponin A1 thể hiện khả năng ức chế vượt trội ( $E_b = -11,02$  eV), cao hơn nhiều so với gallic acid ( $-4,21$  eV), nhờ diện tích bao phủ lớn và các nhóm chức phân cực tạo lớp màng ổn định.

Cả hai loại cao đều hoạt động theo cơ chế ức chế hỗn hợp, thiên về phản ứng cathodic, với hiệu suất tối ưu tại 3000 ppm: 96,00% (hoa) và 96,56% (lá), đi kèm với sự tăng trở kháng và giảm đáng kể mật độ dòng ăn mòn. Kết quả điện hóa hiện đại nhất quán với các phân tích cổ điển. Các mô hình hấp phụ (Langmuir, Freundlich, El-Awady, Flory–Huggins) khẳng định cơ chế hấp phụ hóa học đơn lớp, tự phát. Sự gia tăng  $E_a$ ,  $\Delta H$  và giảm nhẹ  $\Delta S$  cho thấy quá trình hình thành lớp bảo vệ làm giảm mức độ hỗn loạn của hệ. Phân tích SEM, XPS, EDS và AFM xác nhận sự hiện diện của lớp màng ổn định gồm oxide/hydroxide sắt và các gốc hữu cơ. Ở nồng độ 3000 ppm, lớp màng đạt độ bao phủ tối ưu, mang lại hiệu quả chống ăn mòn cao nhất.

### KIẾN NGHỊ

Các bộ phận khác của cây Lộc vùng có thể là nguồn nguyên liệu tiềm năng để khảo sát thành phần hóa học cũng như chất ức chế ăn mòn. Do đó, có thể nghiên cứu thêm các bộ phận như: hạt, thân, vỏ và rễ, đặc biệt là mở rộng ứng dụng các cao và thành phần chính của cao; Thử nghiệm các đặc

tính ức chế ăn mòn cho nhiều điều kiện khác nhau và gần với các điều kiện cụ thể trong công nghiệp để tiếp cận dần với thực tiễn.

## **NHỮNG ĐÓNG GÓP MỚI CỦA LUẬN ÁN**

Đây là một trong những nghiên cứu tiên phong về việc ứng dụng hợp chất có nguồn gốc tự nhiên làm chất ức chế ăn mòn kim loại, hướng tiếp cận đang thu hút sự quan tâm rộng rãi trong cộng đồng khoa học. Luận án đã chứng minh rõ ràng sự hiện diện và vai trò của các hợp chất chính trong cao chiết thông qua các phương pháp phân tích hiện đại có độ tin cậy cao, góp phần làm sáng tỏ một vấn đề còn nhiều tranh luận trong lĩnh vực ăn mòn.

Đặc biệt, nghiên cứu là một trong số ít công trình kết hợp đồng thời cả thực nghiệm và mô phỏng tính toán, cùng với việc ứng dụng các mô hình hóa lý để làm rõ cơ chế hấp phụ và bảo vệ bề mặt kim loại. Các kỹ thuật sử dụng đều là công cụ hiện đại, có độ nhạy cao, giúp nâng cao độ chính xác và giá trị học thuật của kết quả.

Cả hai loại cao chiết từ hoa và lá Lộc vùng đều cho thấy hiệu suất ức chế ăn mòn vượt trội ( $> 96\%$ ) tại nồng độ tối ưu 3000 ppm, với sự hình thành lớp màng hấp phụ hữu cơ ổn định trên bề mặt thép. Về mặt khoa học, kết quả này cung cấp dữ liệu nền vững chắc cho hướng nghiên cứu chất ức chế ăn mòn có nguồn gốc tự nhiên; về mặt thực tiễn, chiết xuất từ cây Lộc vùng thể hiện tiềm năng ứng dụng trong các ngành công nghiệp sử dụng acid như dầu khí và luyện kim, đồng thời góp phần khai thác hiệu quả tài nguyên bản địa theo định hướng kinh tế tuần hoàn và phát triển bền vững.

## DANH MỤC CÁC CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ

1. **Thanh-Nha Tran**, Nguyen Si Hoai Vu, Thien Tri Tran, Deok Su Jo, Thanh Liem Huynh, Thi-Thao-Van Nguyen, Casen Panaitescu, Hoa Thi Thu Nguyen, Van-Kieu Nguyen, Nam Dang Nguyen\*. “*Precise major compounds in Barringtonia Acutangula flower – water extract for mitigating carbon steel corrosion*”. Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers. 155(2024), 105251. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2023.105251>
2. **Thanh-Nha Tran**, Thien Tri Tran, Deok Su Jo, Phan-Si-Nguyen Dong, Van-Kieu Nguyen, Thanh Liem Huynh, Nam Nguyen Dang\*. “*Self-formation of protective layer on carbon steel surface in 1 M HCl solution containing Barringtonia acutangula leaf extract*”. Journal of Industrial and Engineering Chemistry 135 (2024) 175-187. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2024.01.030>
3. Ngoc-Van-Trang Dao, Minh-Khanh Nguyen, Phan-Si-Nguyen Dong, Hoang-Vinh-Truong Phan, Vu-Duy Nguyen, Thi-Kim-Dung Leg, Le-Thuy-Thuy-Trang Hoang, Dinh-Tri Mai, Warinthorn Chavasiri, Van-Kieu Nguyend, **Thanh-Nha Tran\***, Vo-Thi-Minh Thao\*. “*Effect of different solvents on bioactive phenolics and antioxidant, antimicrobial, and  $\alpha$ -glucosidase inhibition activities of Barringtonia acutangula Gaertn. flower extracts*”. Natural Product Research (2025) 1-10. <https://doi.org/10.1080/14786419.2025.2486322>
4. Báo cáo (Oral) hội nghị quốc tế tại Romania: “75 Years of Energy and Performance in Education and Research 2023, Renewable Versus Fossil Fuels. Global Energy Perspectives, November 8-10,

2023. Ploiesti, Rumania” với tên bài báo cáo “*Precise major compounds in Barringtonia acutangula flower – water extract for mitigating carbon steel corrosion*”.