

-----*****-----

-----*****-----

THÔNG TIN VỀ ĐÓNG GÓP MỚI CỦA LUẬN ÁN

Tên đề tài: “*Nghiên cứu các chất chống oxy hóa, ức chế ăn mòn kim loại bằng tính toán hóa lượng tử kết hợp với thực nghiệm*”

Chuyên ngành: Hóa vô cơ

Mã số: 9440113

Họ và tên NCS: **Đinh Quý Hương**

Khóa đào tạo: 2017

Người hướng dẫn khoa học: 1. PGS.TS. Trần Dương

2. PGS.TS. Phạm Cẩm Nam

Cơ sở đào tạo: Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

Bản luận án đã có những đóng góp mới sau:

- Nghiên cứu được các ảnh hưởng về khả năng ức chế ăn mòn thép của 1-phenyl-2-thiourea và 1,3-diisopropyl-2-thiourea trong môi trường HCl 1,0 M.
- So sánh được khả năng ức chế ăn mòn thép của 1-phenyl-2-thiourea với chất ức chế truyền thống - urotropine. Kết quả cho thấy khả năng ức chế ăn mòn thép của 1-phenyl-2-thiourea tốt hơn urotropine trong cả môi trường axit và muối.
- Nghiên cứu và so sánh được khả năng bắt gốc tự do DPPH[•], ABTS^{•+} của 1-phenyl-2-thiourea và 1,3-diisopropyl-2-thiourea trong môi trường ethanol. 1-phenyl-2-thiourea có khả năng bắt gốc tự do tốt hơn 1,3-diisopropyl-2-thiourea. Kết quả này cũng phù hợp với các tính toán hóa lượng tử.
- Bằng các tính toán hóa lượng tử, 1-phenyl-2-selenourea cho khả năng chống oxy hóa tốt hơn 1-phenyl-2-thiourea. Trong các dẫn xuất của selenourea, các dẫn xuất chứa nhóm đẩy electron cho khả năng chống oxy hóa tốt hơn các dẫn xuất chứa nhóm hút electron.
- 1-(4-methoxyphenyl)-2-selenourea được lựa chọn là chất vừa có khả năng ức chế ăn mòn thép vừa có khả năng chống oxy hóa tốt trong các dẫn xuất được nghiên cứu.

Huế, ngày 16 tháng 9 năm 2020

Người hướng dẫn

Nghiên cứu sinh

PGS. TS. Trần Dương

Đinh Quý Hương

NEW CONTRIBUTIONS OF THE THESIS

Thesis title: “*A research on antioxidants, metal corrosion inhibitors by quantum chemical calculations and experimental methods.*”

Major: Inorganic chemistry

Code: 9440113

Ph.D. Candidate: **Dinh Quy Huong**

Year: 2017

Supervisor:

1. Assoc. Prof. Dr. Tran Duong

2. Assoc. Prof. Dr. Pham Cam Nam

Institution: College of Education, Hue University.

New contributions of the thesis are as follows:

- Studying the effects on the mild steel corrosion inhibition ability of 1-phenyl-2-thiourea and 1,3-diisopropyl-2-thiourea in 1.0 M HCl.
- Comparing steel corrosion inhibition ability of 1-phenyl-2-thiourea with a traditional inhibitor - urotropine. The results showed that 1-phenyl-2-thiourea was better than urotropine in acidic and salt solution.
- Researching and comparing the capacity to capture DPPH[•] free radicals of 1-phenyl-2-thiourea and 1,3-diisopropyl-2-thiourea in ethanol. 1-phenyl-2-thiourea had a better free radical capturing capacity than 1,3-diisopropyl-2-thiourea. These results were also consistent with theoretical calculations.
- By quantum chemical calculations, 1-phenyl-2-selenourea gave better antioxidant capacity than 1-phenyl-2-thiourea. In selenourea derivatives, the derivatives containing electron donating groups gave better antioxidant capacity than the derivatives containing electron accepting groups.
- Selecting 1-(4-methoxyphenyl)-2-selenourea as a potential corrosion inhibitor and a good antioxidant in studied derivatives.

Hue, 20th July, 2020.

Supervisor

PhD. Candidate

Assoc. Prof. Tran Duong

Dinh Quy Huong