

Научная статья
УДК 544.723, 544.7
doi: 10.17223/24135542/37/9

Изучение физико-химических показателей взаимодействия ацетофенон оксима с поверхностью железа

Даниил Юрьевич Карачевский¹, Ахат Газизьянович Мустафин²

^{1,2} Уфимский Институт химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Уфа, Россия

¹ DY_Karachevskii@bnipi.rosneft.ru

² agmustafin@gmail.com

Аннотация. В рамках работ по исследованию ингибирующих свойств кетоксимов проведены исследования с целью установления механизма взаимодействия наиболее эффективного ингибитора коррозии – ацетофенон оксима – с поверхностью железа. Для установления механизма измерены скорости коррозии при помощи метода катодной и анодной поляризации углеродистой стали (PDP), импеданса и метода молекулярной динамики. Установлено, что процесс взаимодействия ацетофенон оксима с поверхностью железа заключается в физическом и химическом взаимодействии.

Ключевые слова: ацетофенон оксима, ингибитор, поверхность железа, адсорбция, термодинамика, физическая химия

Для цитирования: Карачевский Д.Ю., Мустафин А.Г. Изучение физико-химических показателей взаимодействия ацетофенон оксима с поверхностью железа // Вестник Томского государственного университета. Химия. 2025. № 37. С. 129–142. doi: 10.17223/24135542/37/9

Original article
doi: 10.17223/24135542/37/9

Study of the physico-chemical parameters of the interaction of acetophenone oxime with the iron surface

Daniil Yu. Karachevsky¹, Akhat G. Mustafin²

^{1,2} Ufa Institute of Chemistry, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russia

¹ DY_Karachevskii@bnipi.rosneft.ru

² agmustafin@gmail.com

Abstract. As part of the research on the inhibitory properties of ketoximes, studies were conducted to establish the mechanism of interaction of the most effective corrosion inhibitor, oxime acetophenone oxime. To establish the mechanism, the corrosion

rate was measured using the carbon steel cathode and anode polarization (PDP) method, impedance, and the molecular dynamics method. As part of the work, it was established that the interaction of acetophenone oxime consists in physical and chemical interaction with the surface of iron.

Keywords: acetophenone oxime, inhibitor, iron surface, adsorption, thermodynamics, physical chemistry

For citation: Karachevsky, D.Yu., Mustafin, A.G. Study of the physico-chemical parameters of the interaction of acetophenone oxime with the iron surface. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Chimia – Tomsk State University Journal of Chemistry*, 2025, 37, 129–142. doi: 10.17223/24135542/37/9

Введение

Из-за постоянного роста агрессивности добываемой, перекачиваемой, перерабатываемой среды область ингибирования оборудования претерпела значительные изменения и сконцентрировалась на развитии нетоксичных, экологически чистых и стабильных в различных средах ингибиторов коррозии.

Органические ингибиторы коррозии являются наиболее распространенным классом ингибиторов коррозии и обладают большим количеством положительных качеств (многофункциональность, лучшая способность к адсорбции относительно неорганических ингибиторов коррозии, бóльшая площадь занимаемой поверхности) [1–5].

Поскольку ингибиторы коррозии становятся все более опасными и токсичными, применение кетоксимов [6–8], в частности ацетофенон оксима, может значительно облегчить экологическую обстановку и повысить эффективность защиты относительно существующих ингибиторов коррозии.

В настоящей работе рассмотрены адсорбционные свойства ацетофенон оксима как нового ингибитора коррозии. Исследования проводились в среде НАСЕ с добавлением сероводорода и углекислого газа при температурах от 20 до 80°C. Для оценки процесса ингибирования был проведен углубленный анализ механизма адсорбции ингибиторов коррозии при помощи методов:

- гравиметрического;
- электрохимического;
- поверхностного сканирования с помощью растрового электронного микроскопа (РЭМ).

Чтобы получить основные сведения о взаимодействии ацетофенон оксима с поверхностью железа, применялось компьютерное моделирование. Были проведены квантово-химические расчеты для исследования реакционной способности отдельных молекул ингибитора в программном комплексе Gaussian 03 [5]; с их помощью изучались механизмы адсорбции молекулы ацетофенон оксима на поверхность металла, а также электронные свойства формирующейся поверхности. Исследование проводилось следующим образом: вначале осуществлялась полная оптимизация структуры для нейтральной структуры, затем аналогично проводились оптимизация структуры для протонированной структуры. Важно отметить, что каждый раз после

оптимизации проводился расчет энергетического положения орбиталей и распределения зарядов по атомам кластера и расчет колебательного спектра. Расчет колебательных спектров кластеров использовался, с одной стороны, чтобы убедиться в том, что полученная структура действительно соответствует локальному минимуму или переходному состоянию, о чем свидетельствовало отсутствие или наличие в спектре колебательной моды с мнимой частотой, а с другой стороны, с целью получить нулевую поправку для энергии, учитывающую нулевые колебания молекул, которая принималась во внимание при расчетах полных энергий для построения энергетических диаграмм химических реакций.

Полная оптимизация геометрии тестируемых соединений была проведена с использованием теории функционала плотности (DFT), функционала GGA и базового набора DNP [4]. В процессе расчета использовался код DMol3 [2, 3], что позволило адекватно и на хорошем уровне описать возможные адсорбционные процессы, а также точно рассчитать все параметры. Вычисленные квантово-химические параметры включают энергию самой высокой занятой молекулярной орбитали (E_{HOMO}), энергию самой низкой незанятой молекулярной орбитали (E_{LUMO}), энергетическую ширину запрещенной зоны (ΔE) и долю перенесенных электронов (ΔN). Эти показатели квантово-химической реактивности рассчитывались при помощи следующих соотношений [4]:

– энергетическая ширина запрещенной зоны

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}; \quad (1)$$

– химический потенциал

$$\chi = -\mu = (E_{\text{LUMO}} + E_{\text{HOMO}})/2; \quad (2)$$

– «мягкость»

$$\sigma = 1/\eta; \quad (3)$$

– электрофильность

$$\omega = \mu^2/2\eta; \quad (4)$$

– нуклеофильность

$$\varepsilon = 1/\omega; \quad (5)$$

– доля перенесенных электронов

$$\Delta N = (\Phi - \chi)/2\eta. \quad (6)$$

Коррозионные испытания проводились в сосудах емкостью 1 л с герметично закрывающейся пробкой. Исследования проводились на стали Ст20 в среде, рекомендованной NACE [8], состава: NaCl – 5 г/л, CH₃COOH – 0,25 мг/л, рН 4,7. Среда насыщалась сероводородом и углекислым газом отдельно. Исследуемую среду помещали в ячейку, при помощи постоянного расхода углекислого газа производилось замещение растворенного кислорода, в дальнейшем сохраняли продувку углекислым газом с расходом 30 мг/л. Сероводород (400 мг/л) получали непосредственно в рабочем растворе (в среду вводились соответствующие количества Na₂S и HCl), концентрация которого контролировалась йодометрическим титрованием. В ходе эксперимента использовались образцы стали размером 30 × 15 × 3 мм, продолжительность испытаний 24, 240 и 720 ч.

Результаты и обсуждение

Измерение потери веса и атомная абсорбция

В табл. 1 приведены результаты испытаний на снижение массы, расчетные значения скорости коррозии (m) и эффективности ингибирования (мас. %) при различных концентрациях ацетофенон оксима в среде NACE + H₂S + CO₂ + O₂ при температуре 293 К в течение 6 ч. Анализ результатов показывает снижение скорости коррозии и увеличение эффективности ингибирования с увеличением концентрации ацетофенон оксима.

Максимальное значение эффективности (95%) было достигнуто в присутствии 100 мг/л ацетофенон оксима. За счет увеличения объема экранированной части стали ацетофенон оксимом можно предотвратить взаимодействие между металлической подложкой и разрушающим раствором [4]. Интересно, что идентичные результаты были получены методом атомной абсорбции, когда мы наблюдали, что концентрация железа в агрессивной среде снижается при добавлении ацетофенон оксима, основная роль которого заключается не только в увеличении площади покрытия поверхности, но и в снижении скорости коррозии.

Таблица 1

Результаты гравиметрических исследований

Концентрация, мг/л	Изменение массы			Показатель адсорбции	
	Изменение массы, г	Скорость коррозии, г/м ² ·ч	Эффективность, %	Концентрация, млн ⁻¹	Эффективность, %
0	11,4	1,902	–	4,776	–
5	3,3	0,551	71	1,563	67
25	2,5	0,218	88	1,162	86
50	1,9	0,123	93	0,908	91
100	1,2	0,109	98	0,686	95

Поляризационные кривые на границе раздела металл–раствор являются фундаментальной характеристикой электрохимической кинетики, но они отражают только самую медленную стадию общего процесса (перенос материала, адсорбция частиц на электроде) на границе электрохимического взаимодействия.

Графики катодной и анодной поляризации углеродистой стали в среде NACE без и с различными концентрациями ацетофенон оксима показаны на рис. 1. Данные кривые были получены после 40-минутного погружения в $E_{\text{сог}}$ при температуре 293 К. На катодной ветви можно заметить, что кривые образуют квазипараллельные линии, что позволяет предположить, что добавление ацетофенон оксима в кислую среду не изменяет механизм выделения водорода. Восстановление ионов H⁺ на углеродистой стали происходит в основном за счет процесса переноса электронов (механизм чистой активации) [4]. Из анализа табл. 2 и поляризационных кривых, представленных на рис. 1, можно видеть, что введение ацетофенон оксима приводит

к снижению плотности как анодного, так и катодного тока, что, вероятно, связано с запретом использования анодного растворенного металла и катодной эволюции H_2 .

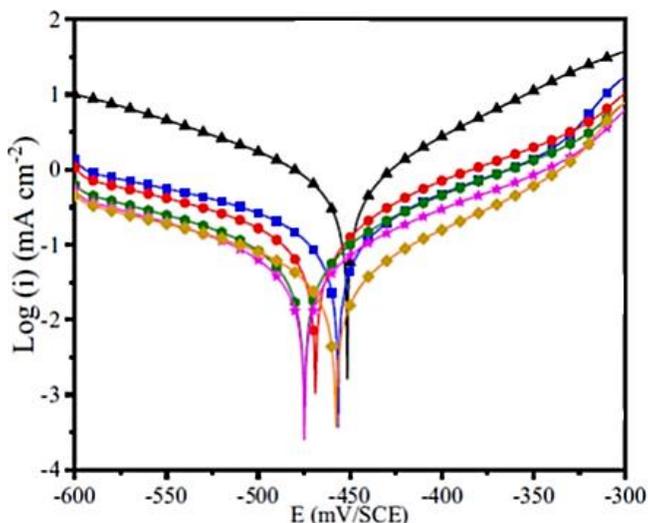


Рис. 1. Электрохимические характеристики, оцененные по графикам PDP углеродистой стали в среде NACE при отсутствии и в присутствии различных концентраций ацетофенон оксима при 293 К

Кроме того, кривая E_{corr} слегка движется в сторону более отрицательных значений, и антикоррозийная плотность тока (i_{corr}) уменьшается, так как ацетофенон оксим повышает концентрацию плотности тока в растворе. Кроме того, уменьшаются как анодный, так и катодный парциальные токи. Эти наблюдения подтверждают смешанный характер взаимодействия ингибиторов (менее 85 мВ).

Таблица 2

Результаты электрохимических исследований

Концентрация, мг/л	E_{corr} , мВ	i_{corr} , (мА/см ²)	β_a , (мВ dec ⁻¹)	β_c , (мВ dec ⁻¹)	Эффективность, %
0	-449,7	699,9	84,4	-120,6	-
5	-454,6	157,9	116	-169,1	77
25	-466,9	146,2	105,5	-178,3	79
50	-473,2	81,5	100,9	-156,4	88
100	-455,9	34,9	88,9	-116,8	95

Переходные электрохимические методы, в частности электрохимическая импедансная спектроскопия, позволяют различать элементарные явления, которые, как ожидается, будут развиваться на границе раздела металл–раствор в соответствии с их кинетикой. На рис. 2 приведены диаграммы Найквиста, полученные для поверхности раздела сталь–раствор при потенциале коррозии в среде NACE при отсутствии и в присутствии ацетофенон оксима.

В табл. 4 приведены соответствующие параметры электрохимического импеданса. Для всех концентраций на диаграммах видно наличие единственного полукруга, правильно центрированного на оси, – действительная часть импеданса. Длина этих петель увеличивается с увеличением концентрации ингибиторов. В целом особенность спектров такого типа может быть объяснена процессом переноса заряда на гетерогенной поверхности [4]. Эквивалентная схема (см. рис. 2) используется для изучения изменений, связанных с электрическим откликом системы.

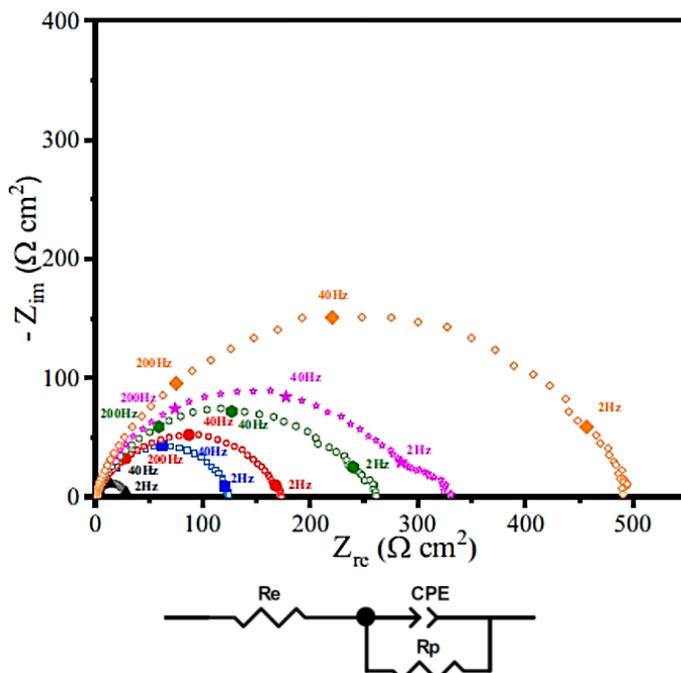


Рис. 2. Диаграммы Найквиста углеродистой стали в среде NACE без ингибитора и при различных концентрациях оксима ацетофенона в течение 40 мин при 293 К и используемая схема для подгонки спектров EIS

Двойной слой емкости (C_{dl}), поляризационное сопротивление (R_p) и электрическое сопротивление (R_e) образуют части цепи.

Полное сопротивление постоянной фазы описанного элемента определяется с помощью следующего уравнения:

$$Z_{CPE} = Q^{-1}(i\omega)^{-n}. \tag{7}$$

Значение C_{dl} можно определить с помощью уравнения

$$C_{dl} = (QR_p^{1-n})^{1/n} \tag{8}$$

где Q , i , ω и n обозначают постоянную CPE, мнимую единицу, угловую частоту и фазовый сдвиг соответственно; n символизирует отклонение от идеального поведения в диапазоне от 0 до 1.

Для проверки точности подобранных данных был выбран элемент Chi-square. Все результаты показали меньшее (10,3) значение критерия Chi-

square (табл. 3), что отражает хорошее соответствие между информацией о подборе и результатами эксперимента. Значения поляризационной стойкости (R_p) и ингибирующей эффективности значительно возрастают по мере увеличения концентрации ацетофенон оксима.

Таблица 3

Показатели электрохимического импеданса углеродистой стали в среде NACE, содержащей различные концентрации оксима ацетофенона при 293 К

Концентрация, мг/л	R_e , $\Omega \text{ cm}^2$	R_p , $\Omega \text{ cm}^2$	Q , $\mu\text{F s}^{n-1}\text{cm}^{-2}$	n	C_{dl} , $\mu\text{F/cm}^2$	η_{EIS} , %	χ^2
0	1,04	96,6	198,8	0,825	85,9	70	0,007
5	0,70	130,3	153,2	0,834	70,3	78	0,001
25	0,62	227,4	102,4	0,842	50,6	87	0,003
50	0,93	273,3	78,5	0,852	40,3	91	0,004
100	0,81	305,0	63,9	0,853	32,4	94	0,008

Также из табл. 3 следует, что значение константы CPE Q значительно снизилось, что означает, что ацетофенон оксим взаимодействуют с электродом из углеродистой стали, занимая освобожденные активные участки. Кроме того, повышение значений содержания ацетофенон оксима по отношению к свободному электролиту может быть связано с уменьшением шероховатости поверхности электрода [4–6]. Такое поведение обусловлено образованием защитного слоя на стальной подложке. Кроме того, уменьшается емкость двойного слоя, что свидетельствует об адсорбции органического соединения на металлической поверхности согласно модели Гельмгольца [4–7]. Уменьшение C_{dl} объясняется адсорбцией ацетофенон оксима на поверхности стали, что снижает диэлектрическую проницаемость среды и / или увеличивает толщину двойного электрического слоя:

$$C_{dl} = ((\epsilon_0 - \epsilon)/e) \cdot S. \tag{9}$$

Влияние температуры

Температура может существенно влиять на поведение вещества в агрессивной среде. Действительно, взаимодействие металла с ингибитором в определенных температурных условиях может быть изменено. Чтобы оценить влияние температуры на способность к удержанию ацетофенон оксима, были построены кривые PDP при различных температурах: от 293 до 3 623 К.

Результаты представлены на рис. 3 и в табл. 4. Из табл. 4 видно, что повышение температуры вызывает усиление i_{corr} , в то время как ингибирующая активность остается практически стабильной вследствие сильной адсорбции ингибитора на поверхности металла (хемосорбция) [4–8].

Влияние температуры может быть объяснено выражением Аррениуса, связывающим плотность тока коррозии и температуре [4–9]:

$$i_{\text{corr}} = A \exp((-E_a)/RT),$$

где E_a – энергия активации, A – предэкспоненциальный коэффициент, R – универсальная газовая постоянная, T – абсолютная температура. Изменение

логарифма $i_{\text{сог}}$ в зависимости от величины, обратной абсолютной температуре, дало прямую линию (рис. 4), по которой можно рассчитать энергии активации.

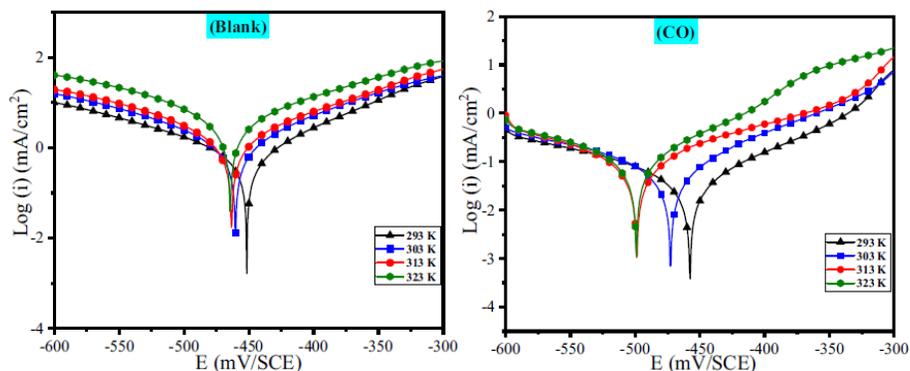


Рис. 3. Графики PDP углеродистой стали в среде NACE, полученные при отсутствии и в присутствии 100 мг/л ацетофенон оксима при различных температурах

Таблица 4

Электрохимические характеристики, определенные по кривым PDP углеродистой стали в среде NACE без и с 100 мг/л ацетофенон оксима при различных температурах

Температура, К	$E_{\text{сог}}$, мВ	$i_{\text{сог}}$, мА/см ²	β_a , мВ dec ⁻¹	β_c , мВ dec ⁻¹	Эффективность, %
Среда без ингибитора коррозии					
293	-449,7	699,9	84,4	-120,6	–
323	-458,4	1206,8	95,3	113,8	–
343	-462,8	2272,9	185,4	-118,3	–
363	-462,0	3717,3	117,2	-108,8	–
Среда с 100 мг/л ацетофенон оксима					
293	-455,9	34,9	88,9	-116,8	95
323	-470,9	75,7	101,5	-166,3	94
343	-497,0	102,1	126,8	-143,3	96
363	-497,2	126,3	92,5	-163,0	97

Таблица 5 показывает, что энергия активации уменьшается в присутствии ацетофенон оксима по сравнению с исходным тестовым раствором.

В соответствии с классификацией, предложенной авторами [10], энергия активации уменьшается в присутствии ингибитора. Ацетофенон оксим относится к классу 2 (E_{ai} меньше, чем E_a) и действует путем хемосорбции.

Процесс ингибирования коррозии органическими веществами связан с их адсорбцией на поверхности металла. Изотерма адсорбции является важным инструментом для определения электрохимического процесса, который обеспечивает адсорбцию этих органических соединений на металлической подложке. Степень покрытия поверхности (h) для разных концентраций была проверена на соответствие различным изотермам Фрумкина, Ленгмюра и

Темкина, а коэффициенты корреляции были использованы для определения наилучшего соответствия.

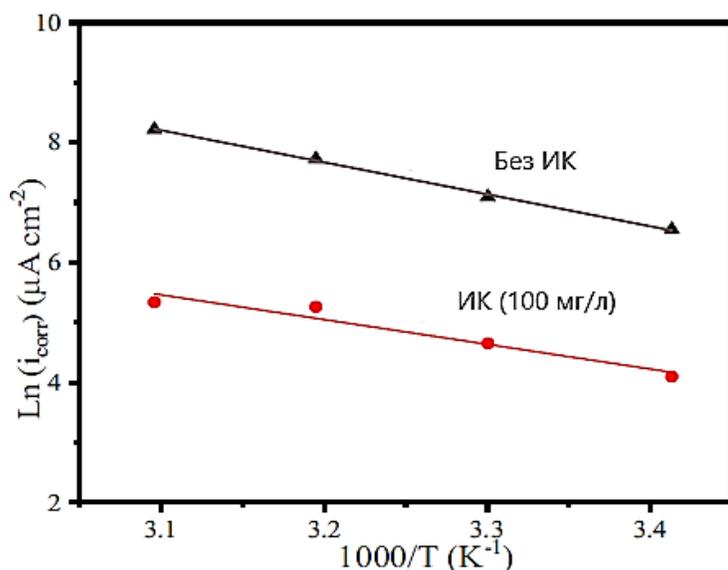


Рис. 4. Зависимости Аррениуса, полученные в углеродистой стали в среде NACE при отсутствии и в присутствии 100 мг/л ацетофенон оксима

Таблица 5

Характеристики термодинамической активации углеродистой стали в среде NACE без и с добавлением 100 мг/л ацетофенон оксима

Среда	E_a , кДж/моль	ΔH_a , кДж/моль	ΔS_a , Дж/моль·К
Без ИК	43,79	41,29	-106,77
Ацетофенон оксим	32,44	29,92	169,15

На основании полученных изотерм можно сделать заключение о том, что значения адсорбции, близкие или ниже 40 кДж/моль, соответствуют переносу заряда между молекулами-ингибиторами и металлическим субстратом (хемосорбция) с образованием ковалентных или координационных связей. В нашем случае отрицательное значение свободных энергий адсорбции (-30,7 кДж/моль) раскрывает, что адсорбция происходит самопроизвольно на поверхности углеродистой стали и что ацетофенон оксим поглощается поверхностью металла как физически, так и химически (смешанная адсорбция) [5–7] с преобладанием второго, поскольку ингибирующая эффективность остается постоянной при повышении температуры. Кроме того, высокие значения равновесной константы адсорбции указывают на сильную адсорбцию на поверхности стали, которая может быть связана с наличием атомов-доноров, таких как кислород и азот [5–8].

Положительные значения энтальпии ΔH_a говорят о эндотермической природе процесса растворения стали, что указывает на то, что реакция анодного

растворения углеродистой стали протекает очень медленно [11]. Высокое значение ΔS_a с отрицательной энтропией в присутствии ацетофенон оксима показывает, что беспорядок уменьшается, когда реагенты превращаются в активированный комплекс железа с молекулами в растворе.

РЭМ исследования

РЭМ-наблюдения были проведены на образцах из углеродистой стали после погружения на 6 ч при температуре 293 К в среду без ИК (рис. 5, *a*), с добавлением ингибитора коррозии в дозировке 50 мг/л (рис. 5, *b*) и с добавлением 100 мг/л (рис. 5, *в*). РЭМ-микрофотография, полученная в среде без ингибитора (см. рис. 5 *a*), показывает, что поверхность сильно изменена, о чем свидетельствуют появление серых комочков и несколько точечных повреждений (от ионов галогенида) [9]. Это ясно показывает, что сталь подвергается коррозии практически по всей поверхности металла в среде без ингибитора коррозии. Серые участки, вероятно, соответствуют пленкам оксида железа. На рис. 5, *b*, 5 *с* можно заметить гладкую однородную поверхность по сравнению с изображениями, полученными без ингибитора. Можно предположить, что в присутствии ингибирующей молекулы на поверхности стали практически не остается продуктов коррозии, что связано с образованием адсорбционной пленки на поверхности стали. Эти наблюдения показывают, что исследуемый ингибитор предотвращает коррозию углеродистой стали, ограничивая доступ электролита к поверхности.

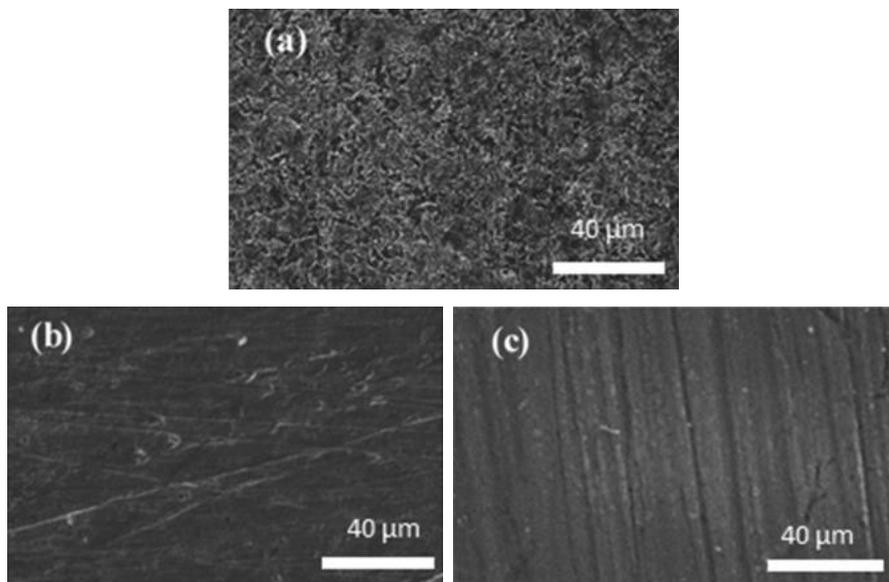


Рис. 5. РЭМ микрофотографии поверхности железа: *a* – в среде без ингибитора коррозии; *b* – в среде с содержанием 50 мг/л ИК; *с* – в среде с содержанием 100 мг/л ИК

Симуляция процесса молекулярной динамики

Проведенное исследование позволило нам понять механизм действия ингибиторов, протестированных на стальной поверхности. На рис. 6 представлена предпочтительная конфигурация адсорбции адсорбентов как в нейтральной, так и в протонированной форме и функции их радиального распределения (RDF) на первом хорошо упорядоченном слое железа.

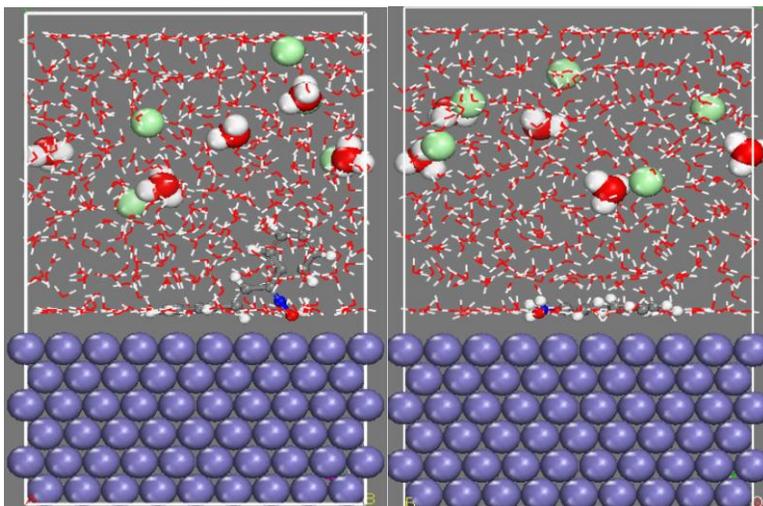


Рис. 6. Предпочтительная конфигурация адсорбентов на поверхности в среде NACE

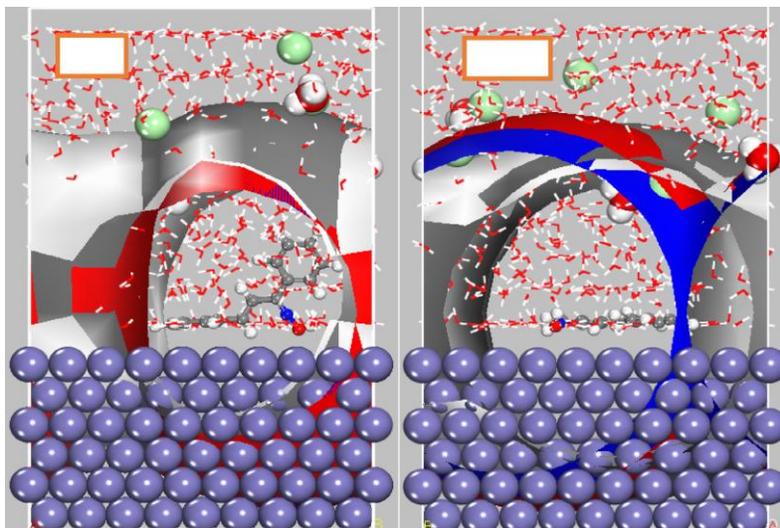


Рис. 7. МД-снимки и распределения поля плотности предпочтительной конфигурации адсорбции изученных молекул в нейтральной и протонированной формах на первом хорошо упорядоченном слое железа

Представленные конфигурации свидетельствуют об эффективности усвоения каждого вида железа на моделируемой железной подложке. Как видно из каждой конфигурации (см. рис. 6), ацетофенон оксим адсорбируется через все их остовы на подложке, что говорит о том, что эти частицы способствуют уменьшению разложения железа в среде НАСЕ в стали. Что касается адсорбционной способности соединения ацетофенон оксима, то хорошо видно, что на поверхности первого слоя железа имеется очень важная не адсорбированная часть. Такое поведение может отрицательно сказаться на ингибирующей способности этого соединения.

Поле плотности адсорбции изученных молекул в нейтральной и протонированной формах на первом хорошо упорядоченном слое железа представлено на рис. 7; видно, что плотный и гидрофобный слой железа представляет собой барьер для защиты стали от коррозии [6, 7].

Что касается результатов, полученных с помощью RDF, мы можем видеть, что значения первых пиков ниже 3,5 Å, за исключением длины связи Fe–N₁₆ [7]. Это показывает, что ацетофенон оксим адсорбируются на поверхности железа посредством химических и физических связей с атомами железа в первом контактном слое железа.

Данные свойства позволяют усилить адсорбцию исследуемых молекул ингибитора на поверхности металла, следовательно, количество активных участков в этой области сокращается.

Межфазные взаимодействия частицы ацетофенон оксима в незаряженных и нагруженных формах с поверхностью Fe оценивались с использованием энергии взаимодействия ($E_{interaction}$) [7, 8] на основе данных моделирования для расчета энергии взаимодействия, значения этого дескриптора приведены в табл. 6.

Таблица 6

Энергии взаимодействия системы ингибитора на поверхности железа (110)

Система (ингибитор / железо)	Энергия взаимодействия, кДж/моль
Ацетофенон оксим / Железо	–800,234
Ацетофенон оксим (протонированный) / Железо	–889,390

Отрицательное значение $E_{interaction}$ подтверждает значительную спонтанную адсорбцию выбранных молекул на подложке Fe (110) [7–13]. Таким образом, нейтральные и протонированные ингибиторы имеют тенденцию адсорбироваться в раствор кислоты, термодинамически воздействуя на железо в рассматриваемой стали.

Минимальное значение протонированной формы ацетофенон оксима показывает, что эта молекула активно взаимодействует с поверхностью железа. Эти данные подтверждают результаты, полученные в ходе экспериментов.

Список источников

1. Sahin E.A., Tezcan F., Solmaz R., Kardas G. Inhibitive effect of 4-amino-Nbenzylidenebenzamide Schiff base on mild steel corrosion in HCl solution // J. Adhes. Sci. Technol. 2020. Vol. 34 (2). P. 135–152.

- Zhu H., Chen X., Li X. et al. 2-aminobenzimidazole derivative with surface activity as corrosion inhibitor of carbon steel in HCl: Experimental and theoretical study // *J. Mol. Liq.* 2020. Vol. 297. Art. 111720.
- Benmahammed I., Douadi T., Issaadi S. et al. Heterocyclic Schiff bases as corrosion inhibitors for carbon steel in 1 M HCl solution: hydrodynamic and synergetic effect // *J. Dispersion Sci. Technol.* 2020. Vol. 41 (7). P. 1002–1021.
- Zarrouk A., Hammouti B., Zarrok H. et al. Electrochemical impedance spectroscopy and weight loss study for new pyridazine derivative as inhibitor for copper in nitric acid // *Der Pharma Chem.* 2012. Vol. 4 (1). P. 337–346.
- Карачевский Д.Ю., Мустафин А.Г. Исследование квантово-химических параметров адсорбции нейтральной и протонированной формы ацетофенон оксима // *Вестник Башкирского государственного университета.* 2024. № 4. С. 213–217.
- Hammouti B., Zarrouk A., Al-Deyab S.S., Warad I. Temperature Effect, Activation Energies and Thermodynamics of Adsorption of ethyl 2-(4-(2-ethoxy-2-oxoethyl)-2-pTolylquinoxalin-1(4H)-yl)Acetate on Cu in HNO₃ // *Orient. J. Chem.* 2011. Vol. 27 (1). P. 23–31.
- Rbaa M., Benhiba F., Obot I.B. et al. Two new 8-hydroxyquinoline derivatives as an efficient corrosion inhibitors for mild steel in hydrochloric acid: Synthesis, electrochemical, surface morphological, UV–visible and theoretical studies // *J. Mol. Liq.* 2019. Vol. 276. P. 120–133.
- Deyab M.A., Ouarsal R., Lachkar M. et al. Phosphites compound: Novel corrosion inhibitor for radioactive waste container (carbon steel) in simulated Callovo-Oxfordian (COx) groundwater // *J. Mol. Liq.* 2016. Vol. 219. P. 994–999.
- Hamdani I., El Ouariachi E., Mokhtari O. et al. Chemical constituents and corrosion inhibition of mild steel by the essential oil of *Thymus algeriensis* in M hydrochloric acid solution // *Der Pharma Chem.* 2015. Vol. 7 (8). P. 252–264.
- Zarrok H., Zarrouk A., Salghi R. et al. A Combined Experimental and Theoretical Study on the Corrosion Inhibition and Adsorption Behaviour of Quinoxaline Derivative During Carbon Steel Corrosion in Hydrochloric Acid // *Port. Electrochim. Acta.* 2012. Vol. 30 (6). P. 405–417.
- Popova A., Sokolova E., Raicheva S., Christov M. AC and DC study of the temperature effect on mild steel corrosion in acid media in the presence of benzimidazole derivatives // *Corros. Sci.* 2003. Vol. 45. P. 33–58.
- Hu S., Guo A., Geng Y. et al. Zhang, Synergistic effect of 2-oleyl-1-oleylamidoethyl imidazoline ammonium methylsulfate and halide ions on the inhibition of mild steel in HCl // *Mater. Chem. Phys.* 2012. Vol. 134. P. 54–60.
- El Faydy M., Galai M., Ebn Touhami M. et al. Anticorrosion potential of some 5-amino-8-hydroxyquinolines derivatives on carbon steel in hydrochloric acid solution: Gravimetric, electrochemical, surface morphological, UV–visible, DFT and Monte Carlo simulations // *J. Mol. Liq.* 2017. Vol. 248. P. 1014–1027.

References

- Sahin E.A., Tezcan F., Solmaz R., Kardas G. Inhibitive effect of 4-amino-Nbenzylidenebenzamide Schiff base on mild steel corrosion in HCl solution. *J. Adhes. Sci. Technol.* 34 (2) (2020) 135–152.
- Zhu H., Chen X., Li X. et al. 2-aminobenzimidazole derivative with surface activity as corrosion inhibitor of carbon steel in HCl: Experimental and theoretical study. *J. Mol. Liq.* 297 (2020) 111720.
- Benmahammed I., Douadi T., Issaadi S. et al. Heterocyclic Schiff bases as corrosion inhibitors for carbon steel in 1 M HCl solution: hydrodynamic and synergetic effect. *J. Dispersion Sci. Technol.* 41 (7) (2020) 1002–1021.
- Zarrouk A., Hammouti B., Zarrok H. et al. Electrochemical impedance spectroscopy and weight loss study for new pyridazine derivative as inhibitor for copper in nitric acid. *Der Pharma Chem.* 4 (1) (2012) 337–346.

5. Karachevskij D.Yu., Mustafin A.G. Issledovanie kvantovo-ximicheskix parametrov adsorbicii nejtral'noj i protonirovannoj formy` acetofenon oksima [Study of quantum-chemical parameters of adsorption of neutral and protonated forms of acetophenone oxime]. Vestnik Bashkirskogo gosudarstvennogo universiteta. № 4. 2024. P. 213–217.
6. Hammouti B., Zarrouk A., Al-Deyab S.S., Warad I. Temperature Effect, Activation Energies and Thermodynamics of Adsorption of ethyl 2-(4-(2-ethoxy-2-oxoethyl)-2-pTolylquinoxalin-1(4H-yl)Acetate on Cu in HNO₃. *Orient. J. Chem.* 27 (1) (2011) 23–31.
7. Rbaa M., Benhiba F., Obot I.B. et al. Two new 8-hydroxyquinoline derivatives as an efficient corrosion inhibitors for mild steel in hydrochloric acid: Synthesis, electrochemical, surface morphological, UV–visible and theoretical studies. *J. Mol. Liq.* 276 (2019) 120–133.
8. Deyab M.A., Ouarsal R., Lachkar M. et al. Phosphites compound: Novel corrosion inhibitor for radioactive waste container (carbon steel) in simulated Callovo-Oxfordian (COx) groundwater. *J. Mol. Liq.* 219 (2016) 994–999.
9. Hamdani I., El Ouariachi E., Mokhtari O. et al. Chemical constituents and corrosion inhibition of mild steel by the essential oil of Thymus algeriensis in M hydrochloric acid solution. *Der Pharma Chem.* 7 (8) (2015) 252–264.
10. Zarrok H., Zarrouk A., Salghi R. et al. A Combined Experimental and Theoretical Study on the Corrosion Inhibition and Adsorption Behaviour of Quinoxaline Derivative During Carbon Steel Corrosion in Hydrochloric Acid. *Port. Electrochim. Acta.* 30 (6) (2012) 405–417.
11. Popova A., Sokolova E., Raicheva S., Christov M. AC and DC study of the temperature effect on mild steel corrosion in acid media in the presence of benzimidazole derivatives. *Corros. Sci.* 45 (2003) 33–58.
12. Hu S., Guo A., Geng Y. et al. Synergistic effect of 2-oleyl-1-oleylamidoethyl imidazoline ammonium methylsulfate and halide ions on the inhibition of mild steel in HCl. *Mater. Chem. Phys.* 134 (2012) 54–60.
13. El Faydy M., Galai M., Ebn Touhami M. et al. Anticorrosion potential of some 5-amino-8-hydroxyquinolines derivatives on carbon steel in hydrochloric acid solution: Gravimetric, electrochemical, surface morphological, UV–visible, DFT and Monte Carlo simulations. *J. Mol. Liq.* 248 (2017) 1014–1027.

Сведения об авторах:

Карачевский Даниил Юрьевич – аспирант Уфимского института химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (Уфа, Россия). E-mail: DY_Karachevskii@bniipi.rosneft.ru

Мустафин Ахат Газизьянович – доктор химических наук, профессор, заведующий лабораторией Уфимского института химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (Уфа, Россия). E-mail: agmustafuin@gmail.com

Вклад авторов: все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Information about the authors:

Karachevsky Daniil Yu. – Postgraduate Student, Ufa Institute of Chemistry, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences (Ufa, Russia). E-mail: DY_Karachevskii@bniipi.rosneft.ru

Mustafin Akhat G. – Doctor of Chemical Sciences, Professor, Head of the Laboratory, Ufa Institute of Chemistry, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences (Ufa, Russia). E-mail: agmustafuin@gmail.com

Contribution of the authors: the authors contributed equally to this article. The authors declare no conflicts of interests.

*Статья поступила в редакцию 20.01.2025; принята к публикации 04.04.2025
The article was submitted 20.01.2025; accepted for publication 04.04.2025*