

## NGHIÊN CỨU KHẢ NĂNG HẤP PHỤ CLOXACILLIN VÀ DICLOXACILLIN LÊN BỀ MẶT KIM LOẠI SẮT (Fe) BẰNG PHƯƠNG PHÁP HÓA LƯỢNG TỬ VÀ MÔ PHÒNG ĐỘNG HỌC PHÂN TỬ

**Dinh Tuấn<sup>1,4\*</sup>, Trần Xuân Mậu<sup>1</sup>, Nguyễn Minh Thông<sup>2</sup>, Phạm Cẩm Nam<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế

<sup>2</sup> Phân hiệu Đại học Đà Nẵng tại Kon Tum, Tp. Kon Tum

<sup>3</sup> Khoa Hóa, Trường Đại học Bách Khoa, Đại học Đà Nẵng

<sup>4</sup> Trung tâm Kỹ thuật Tiêu chuẩn Đo lường Chất lượng 4, tp. Buôn Ma Thuột, Đắk Lắk

\* Email: dinhtuan.chem@gmail.com

*Ngày nhận bài: 01/6/2021; ngày hoàn thành phản biện: 02/6/2021; ngày duyệt đăng: 02/11/2021*

### TÓM TẮT

Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng phương pháp hóa lượng tử và mô phỏng động học phân tử để nghiên cứu khả năng hấp phụ cloxacillin (CLOX) và dicloxacillin (DICLOX) lên bề mặt kim loại sắt. Các thông số lượng tử như  $E_{\text{HOMO}}$  và  $E_{\text{LUMO}}$  được tính toán và thảo luận để đánh giá khả năng ức chế ăn mòn của chúng. Mô phỏng Monte Carlo được ứng dụng để tìm cấu hình hấp phụ bền nhất của các hợp chất ức chế ăn mòn trên bề mặt Fe(110). Năng lượng hấp phụ từ kết quả tính Monte Carlo của các hợp chất CLOX và DICLOX lên bề mặt của sắt trong cả pha khí và môi trường axit cũng được tính toán. Kết quả cho thấy dạng proton hóa của hai chất nghiên cứu có sự hấp phụ lên bề mặt Fe (110) tốt hơn so với dạng trung hòa.

**Từ khóa:** cloxacillin, dicloxacillin, sắt, ức chế ăn mòn, hóa tính toán.

**INVESTIGATION OF ADSORPTION CHARACTERISTICS  
OF CLOXACILLIN AND DI CLOXACILLIN ON STEEL SURFACE  
USING THE QUANTUM CHEMISTRY AND MOLECULAR DYNAMIC  
SIMULATION METHODS**

**Dinh Tuan<sup>1,4\*</sup>, Tran Xuan Mau<sup>1</sup>, Nguyen Minh Thong<sup>2</sup>, Pham Cam Nam<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Department of Chemistry, University of Sciences, Hue University

<sup>2</sup>The University of Danang, Kon Tum's Campus

<sup>3</sup>University of Science and Technology, The University of Danang

<sup>4</sup>Quality Assurance and Testing Center 4, Buon Ma Thuot City, DakLak

\* Email: [dinhtuan.chem@gmail.com](mailto:dinhtuan.chem@gmail.com)

**ABSTRACT**

We theoretically investigate structure, property and inhibitory ability of cloxacillin (CLOX) and dicloxacillin (DICLOX) using density functional theory (DFT) and molecular dynamic simulation. The analysis of natural bond orbitals shows that the CLOX and DICLOX may have the capability in donating electrons to unoccupied orbitals of metal and exhibit equal possibility to accept free electrons from metal which might be considered as good corrosion inhibitors. Monte Carlo simulation was applied to find the most stable adsorption configuration of the studied compounds on the surface of Fe (110). All the molecules CLOX and DICLOX adsorbed totally in a parallel at manner on Fe (110), which enhances its surface coverage as good interaction with the steel surface Fe (110). The interaction energies between the cloxacillin and dicloxacillin compounds and the surface of Fe (110) were also calculated by molecular dynamic simulation in both gas phase and acid HCl 1M environment. As the result, the protonated forms of the studied compounds represent lower adsorption energies than the ones of the neutral form. Theoretical calculation results in this study will open new direction to the experimental studies related to corrosion inhibitory action of organic compounds on steel surface.

**Key words:** cloxacillin, dicloxacillin, iron, corrosion inhibitor, computational chemistry.



**Dinh Tuấn** sinh ngày 21/05/1979 tại Đắk Lắk. Năm 2004, ông tốt nghiệp kỹ sư ngành Công nghệ hóa học Dầu và Khí tại Trường Đại học Bách khoa Đà Nẵng. Năm 2013, ông tốt nghiệp thạc sĩ chuyên ngành Công nghệ hóa học tại Đại học Đà Nẵng. Hiện nay, ông làm việc tại Trung tâm kỹ thuật Tiêu chuẩn Đo lường Chất lượng 4, và đang là NCS tại Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế.

*Lĩnh vực nghiên cứu:* Hóa tính toán, hợp chất chống oxy hóa và chống ăn mòn.



**Nguyễn Minh Thông** sinh ngày 16/02/1987 tại Bình Định. Năm 2009, ông tốt nghiệp cử nhân ngành sư phạm Hóa học tại Trường Đại học Quy Nhơn. Năm 2011, ông tốt nghiệp thạc sĩ chuyên ngành Hóa vô cơ tại Đại học sư phạm, ĐH Huế. Năm 2017 ông bảo vệ thành công luận án tiến sĩ tại Trường Đại học Khoa học, ĐH Huế. Hiện nay, ông giảng dạy tại Phân hiệu ĐH Đà Nẵng tại Kon Tum.

*Lĩnh vực nghiên cứu:* Hóa tính toán, hợp chất chống oxy hóa và chống ăn mòn.



**Phạm Cẩm Nam** sinh ngày 24/01/1966 tại Quảng Nam. Năm 2009, ông tốt nghiệp cử nhân ngành sư phạm Hóa học tại Trường Đại học Quy Nhơn. Năm 2011, ông tốt nghiệp thạc sĩ chuyên ngành Hóa vô cơ tại Đại học Sư phạm, ĐH Huế. Năm 2006 ông bảo vệ thành công luận án tiến sĩ tại Katholieke University of Leuven (KUL), Vương quốc Bỉ. Hiện nay, ông giảng dạy tại Đại học Bách khoa Đà Nẵng.

*Lĩnh vực nghiên cứu:* Hóa lý thuyết và Hóa lý; Chất chống oxy hóa, Chất chống ăn mòn kim loại; Bề mặt thế năng của phản ứng hóa học; Động học phản ứng; Sensor và Sensor Huỳnh Quang; Công nghệ vật liệu vô cơ silicat; Vật liệu Nano, Sensor.



**Trần Xuân Mậu** sinh ngày 06/05/1958 tại Thừa Thiên Huế. Năm 1982, ông tốt nghiệp ngành Hóa học tại Trường ĐHKT Slovakia. Năm 1986, ông bảo vệ thành công luận án tiến sĩ chuyên ngành Hóa học và công nghệ các chất cao phân tử tại Trường ĐHKT ở Bratislava Slovakia. Hiện nay ông công tác tại Tạp chí Khoa học Đại học Huế.

*Lĩnh vực nghiên cứu:* Hoá học hữu cơ, Hoá học các chất cao phân tử, Hóa lý thuyết, Vật liệu xúc tác và hấp phụ.