

doi: 10.3969/j.issn.1001-3849.2025.03.008

含巯基杂环化合物在酸性蚀刻液中的缓蚀性能研究

杜永杰^{1,2}, 丘梓炜¹, 王红平¹, 王跃川², 肖龙辉³,崔红兵⁴, 王小丽³, 陈苑明^{3*}

(1.珠海市能动力科技光学产业有限公司, 广东 珠海 519055; 2. 四川大学高分子科学与工程学院, 四川 成都 610065;
3. 电子科技大学材料与能源学院, 四川 成都 610054; 4. 东莞康源电子有限公司, 广东 东莞 523932)

摘要: 缓蚀剂是一种能够在腐蚀介质中有效抑制金属表面腐蚀的一种化学物质或多种物质的混合物。在印制电路板线路蚀刻工艺中, 含有缓蚀剂的酸性蚀刻液能抑制线路的侧向蚀刻, 而不改变对线路的纵向蚀刻速率。巯基苯并咪唑类化合物是一类具有抗氧化活性的杂环化合物, 对金属表面腐蚀具有良好的抑制效果。探究含有巯基及取代基不同位置的苯并咪唑: 2-巯基-5-甲基苯并咪唑和 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑作为缓蚀剂, 通过量子化学计算和分子动力学模拟研究这两种缓蚀剂可能的吸附位点; 结合电化学极化曲线和阻抗谱对比分析两种缓蚀剂对于铜腐蚀的抑制效果和缓蚀机理。该研究将为后续关于含有巯基类的缓蚀剂的筛选和机理分析提供参考。

关键词: 蚀刻液; 缓蚀剂; 含巯基苯并咪唑类化合物; 蚀刻因子

中图分类号: TQ153.1

文献标识码: A

Exploration of corrosion inhibiting capabilities of heterocyclic compounds containing mercaptogroups in acidic etching solutions

Du Yongjie^{1,2}, Qiu Ziwei¹, Wang Hongping¹, Wang Yuechuan², Xiao Longhui³,
Cui Hongbing⁴, Wang Xiaoli³, Chen Yuanming^{3*}

(1. Zhuhai Dynamic Technology Optical Industry Co., Ltd, Zhuhai 519055, China; 2. College of Polymer Science and Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China; 3. School of Materials and Energy, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China;
4. Dongguan Hong Yuen Electronics Co., Ltd, Dongguan 523932, China)

Abstract: The corrosion inhibitor is a chemical substance or a mixture of substances capable of effectively inhibiting corrosion on metal surfaces in corrosive media. In the circuit etching process of printed circuit board(PCB) production, acidic etching solutions containing inhibitors can suppress lateral etching of the circuits without altering the longitudinal etching rate. Mercaptobenzimidazole compounds are a class of heterocyclic compounds with antioxidant activity that exhibit excellent corrosion inhibition effects on metal surfaces. This paper aims to investigate benzimidazole compounds containing mercapto

收稿日期: 2024-12-19

修回日期: 2025-01-08

基金项目: 珠海市产学研合作项目(2220004002678); 东莞市重点领域研发项目(20231200300172)

作者简介: 杜永杰(1986—), 男, 本科, 中级工程师, 研究方向为新材料研发与制造, email: duyongjie@nengdongkeji.cn.

通信作者: 陈苑明, email: ymchen@uestc.edu.cn

引用信息: 杜永杰, 丘梓炜, 王红平, 等. 含巯基杂环化合物在酸性蚀刻液中的缓蚀性能研究[J]. 电镀与精饰, 2025, 47(3): 53-59.

Du Yongjie, Qiu Ziwei, Wang Hongping, et al. Exploration of corrosion inhibiting capabilities of heterocyclic compounds containing mercaptogroups in acidic etching solutions [J]. Plating and Finishing, 2025, 47(3): 53-59.

groups and substituents at different positions, specifically 2-mercapto-5-methylbenzimidazole and 5-methoxy-2-mercaptobenzimidazole, as inhibitors. Quantum chemical calculations and molecular dynamics simulations are employed to study the possible adsorption sites of these two inhibitors. Combined with electrochemical polarization curves and impedance spectroscopy, a comparative analysis is conducted to evaluate the corrosion inhibition effects and mechanisms of these two inhibitors on copper corrosion. This research provides a reference for subsequent screening and mechanism analysis of inhibitors containing mercapto groups.

Keywords: acidic etching solution; corrosion inhibitor; mercaptobenzimidazole compound; etch factor

在印制电路板蚀刻工艺步骤中,铜线路表面纵向蚀刻的同时,铜导线的侧面也会产生一定的腐蚀,这种现象可以称之为“侧蚀”。侧蚀现象在蚀刻过程中无法完全消除,但可以采取一定的方法来减缓该现象。通过选取高效蚀刻液来减少蚀刻时间、减小侧蚀是常见的措施之一。缓蚀剂是一种能够在腐蚀介质中有效抑制金属表面腐蚀的化学物质或多种物质的复合物^[1]。在PCB酸性蚀刻液中添加缓蚀剂后,缓蚀剂能够吸附在铜表面,抑制线路侧蚀,既能抑制线路侧蚀,又不改变蚀刻液对线路的蚀刻速率。

通过缓蚀剂来抑制金属铜腐蚀在生活 and 工业应用中有着较为广泛的研究^[2],杂环类有机缓蚀剂由于其成本低,添加量少,缓蚀效果好等优点,在抑制铜腐蚀过程中被广泛应用^[3],其中含有 π 键或杂原子(N、P、S、O)的有机杂环化合物,具备多个活性吸附位点,更易吸附在金属铜的表面从而形成保护膜来达到抑制腐蚀^[4-5]。苯并咪唑是一类杂环芳香族有机化合物,其具有苯环和咪唑环的双环结构,环上的H原子可以被其它基团或原子取代。苯并咪唑类衍生物在酸性溶液中对金属及其金属合金的腐蚀有良好的缓蚀作用,其咪唑环和苯环上的取代基及取代位置不同,对金属腐蚀的抑制程度也不同^[6]。巯基苯并咪唑类化合物是一类具有抗氧化活性的杂环化合物,其在金属防腐方面已经有大量的研究,对金属表面腐蚀具有良好的抑制效果^[7]。Hassane等^[8]合成了两种新型含硫苯并咪唑类化合物,探究缓蚀剂在盐酸溶液中对低碳钢的缓蚀性能。结果表明含硫化合物对低碳钢表面的腐蚀具有较好的抑制作用,缓蚀作用随着缓蚀剂浓度的升高而增强,缓蚀效率最高可达93%。

本文主要目的在于探究含有巯基及取代基不同位置的苯并咪唑类缓蚀剂对金属铜的缓蚀效果。为探究含巯基的杂环化合物的缓蚀效果影响差异,选取巯基取代咪唑环上的H原子的有机化合物:

2-巯基-5-甲基苯并咪唑(2-Mercapto-5-methylbenzimidazole, 2M5MBI)、5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑(5-Methoxy-2-mercaptobenzimidazole, 5M2MBI)作为缓蚀剂,分析其在酸性蚀刻液中对铜线路表面的吸附机理和缓蚀效果。

1 实验部分

1.1 主要化学试剂

本论文中所采用的化学试剂2-巯基-5-甲基苯并咪唑和5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑均采购于上海阿拉丁试剂股份有限公司,五水合硫酸铜、双氧水和浓硫酸等试剂采购于成都市科隆化工试剂厂。

1.2 实验方法

1.2.1 量子化学计算

量子化学(Quantum Chemistry, QC)计算方法可以探究缓蚀剂化合物结构中原子、分子和晶体的电子层结构之间的键合作用、电子性质,以及相应的各种光谱、波谱、电子能谱等特征^[9-10]。根据求解Schrodinger方程的不同,量子化学计算方法可分为从头算(ab initio)方法^[11]、密度泛函理论方法(Density functional theory, DFT)^[12]和半经验(Semi-empirical)方法^[13]。

基于密度泛函理论,运用Gaussian09W软件包中的DFT/B3LYP计算方法,选取6-311G基组,先进进行缓蚀剂分子的最佳优化构型计算。将结构优化完成后的缓蚀剂分子再进行量子化学参量计算,得到缓蚀剂分子的最高占据分子轨道(E_{HOMO})、最低空轨道能(E_{LUMO})和能带隙 ΔE 的计算公式(1)。

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

1.2.2 分子动力学模拟

缓蚀剂分子与金属铜界面形成的吸附膜的致密程度、稳定程度和与腐蚀介质粒子之间的相互作用关系可以决定缓蚀剂的缓蚀性能^[14]。

有机缓蚀剂分子与铜表面的相互作用采用分子动力学模拟(Molecular Dynamics, MD)的方法,选

取晶体Cu(111)晶面为吸附表面^[15], 利用Materials Studio软件进行吸附模拟计算的参数有: 采用Forcite模块和COMPASS力场对铜面及溶液体系进行结构优化, 优化精度为ultrafine, 正则系综(NVT)^[9]的MD模拟通过Discover^[16]模块完成, 模拟时间为1 000 ps, 时间步长为1 fs, 模拟温度为298 K。构建缓蚀剂在Cu表面的吸附模型并计算其吸附能, 吸附能指的是酸性蚀刻液缓蚀剂吸附在铜表面后释放出的能量, 其数值越大, 说明相互作用越强, 越不易脱吸附。

1.2.3 电化学测试

电化学测试采用经典的三电极体系, 使用Autolab电化学工作站进行极化曲线和电化学阻抗谱(Electrochemical impedance spectroscopy, EIS)测试。其中工作电极为铜箔, 有效接触面积为1 cm², 参比电极为汞/硫酸亚汞电极(Mercurous Sulfate Electrode, MSE), 对电极采用铂电极。实验溶液为酸性蚀刻基础液以及含不同缓蚀剂的蚀刻液。酸性蚀刻液由85 g/L五水合硫酸铜(CuSO₄·5H₂O)、70 g/L浓硫酸(H₂SO₄)及25 g/L过氧化氢(H₂O₂)组成, 在基础蚀刻液中分别加入不同的缓蚀剂组成新型蚀刻液。在蚀刻实验及电化学测试中, 均使用上述蚀刻液配方。电化学极化曲线实验的扫描速率为0.005 V/s, 开始扫描时从开路电位方向扫到+0.85 V, 然后从开路电位扫到-0.85 V。阻抗谱实验的频率变化范围选取为10⁻² Hz~10⁵ Hz, 振幅为10 mV^[17]。

1.2.4 缓蚀剂在酸性蚀刻液中的应用

为探究缓蚀剂在酸性蚀刻液中对精细铜线路制作的缓蚀效果, 将不同的缓蚀剂添加到酸性蚀刻液中蚀刻铜线路, 用金相显微镜观察其蚀刻后铜线路横截面图并测量其蚀刻因子(Etch factor), 如图1所示。蚀刻因子可以作为PCB铜线路制作的评价参数之一, 其值越大, 则说明铜线路制作效果越好^[18]。蚀刻因子的计算公式见公式(2)。

$$\text{蚀刻因子} = \frac{2h}{b-a} \quad (2)$$

式中: h 为线路铜厚; a 和 b 分别为铜线路的上部宽度和下部宽度。

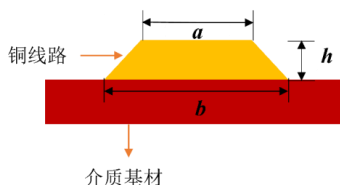


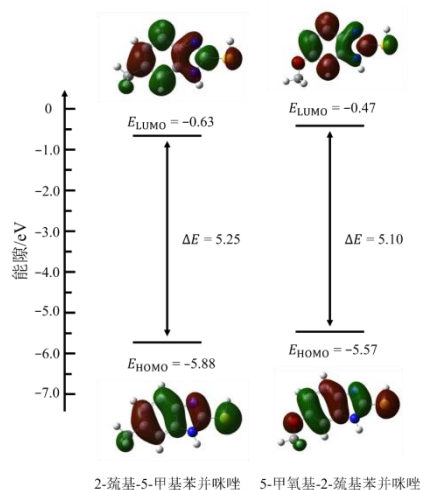
图1 蚀刻因子的计算示意图

Fig.1 Schematic diagram for calculating the etch factor.

2 有机缓蚀剂在铜表面的吸附机理分析

2.1 缓蚀剂分子的量子化学计算

图2为缓蚀剂分子2-巯基-5-甲基苯并咪唑与5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑的最佳优化构型及前线轨道电荷密度分布图。由图3可知, 2-巯基-5-甲基苯并咪唑和5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑的HOMO和LUMO电子云密度分布在分子结构中呈现较为均匀分布趋势, 但其主要集中在苯环、咪唑环以及杂原子上, 因此可以推断出缓蚀剂分子主要通过以上官能团作为吸附活性位点。其中2-巯基-5-甲基苯并咪唑作为吸附活性位点的杂原子是N原子和S原子, 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑作为吸附活性位点的杂原子是N原子、O原子和S原子。



2-巯基-5-甲基苯并咪唑 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑

图2 缓蚀剂分子 2-巯基-5-甲基苯并咪唑和 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑的前线轨道电荷密度分布和轨道能量

Fig.2 Charge density distribution and orbital energy of the frontier orbitals for corrosion inhibitor molecules of 2-Mercapto-5-methylbenzimidazole and 5-Methoxy-2-mercaptobenzimidazole

2-巯基-5-甲基苯并咪唑与5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑的 E_{HOMO} 值顺序为5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑>2-巯基-5-甲基苯并咪唑, 说明5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑的给电子能力更好, 与铜面形成的配位键作用更强; 且2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子和5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子的能带隙 ΔE 值分别为5.25和5.10 eV, 说明5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子在铜表面的吸附效果最好。

2.2 缓蚀剂分子的分子动力学模拟

2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子和5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子经分子动力学模拟前和分子动力

学模拟后在铜表面的平衡吸附构型的侧视图与俯

视图见图3。

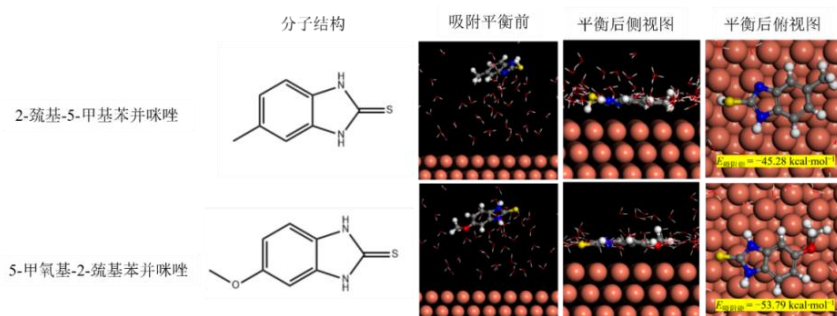


图3 两种缓蚀剂分子在 Cu(111)面的吸附平衡结构

Fig.3 Adsorption equilibrium structures of two corrosion inhibitor molecules on Cu(111) surface

由图3中吸附平衡前缓蚀剂分子位置可以看出,两种缓蚀剂分子在模拟前处于随机分布的位置,但在分子动力学模拟计算后,2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子和5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子均能够有效的平行吸附在Cu(111)面。量子化学计算模拟结果表明,2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子和5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子中含有的有机官能团既能够与金属铜表面的空轨道发生亲电反应形成配位键,又能够接受铜表面的电子发生亲核反应形成反馈键,因此能够以平行的吸附方式作用于铜面,形成较为紧密的保护膜,抑制酸性蚀刻液对铜面的腐蚀。

2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子和5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子的吸附能依次为 $-45.28 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 和 $-53.79 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$,其绝对值均高于咪唑、5-甲基苯并咪唑和5-甲氧基苯并咪唑的吸附能绝对值,表明有机官能团巯基能够增强缓蚀剂在铜表面的吸附性能。并且5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子的吸附能绝对值高于2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子的吸附能绝对值,表明同时含氧和巯基的缓蚀剂在铜面的缓蚀效果最好。

3 缓蚀剂分子作用于铜表面的效果分析

3.1 SEM 测试结果

铜箔在含2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子与5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子的酸性蚀刻液中浸泡1 min后的SEM测试图如图4所示。与未添加缓蚀剂的酸性蚀刻液中浸泡后的SEM图对比,随着缓蚀剂的添加,浸泡后的铜表面平整程度已经大大增加,铜面的腐蚀晶粒呈现较大的块状,表明缓蚀剂是能够在铜表面形成吸附膜从而抑制腐蚀。在酸性蚀刻液中添加2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子与5-甲氧基-2-巯

基苯并咪唑分子浸泡后的铜表面微观形貌图显示,5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子缓蚀效果表现在其铜表面的晶粒更大,腐蚀裂纹更少。因此,可以认为5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子在铜表面吸附膜作用更强,缓蚀效果更好。

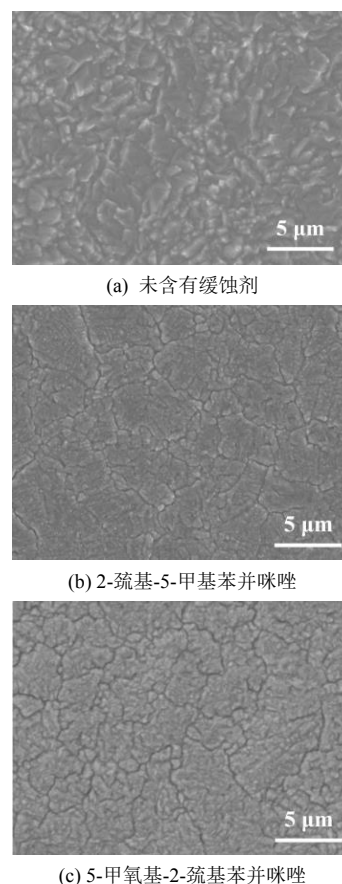
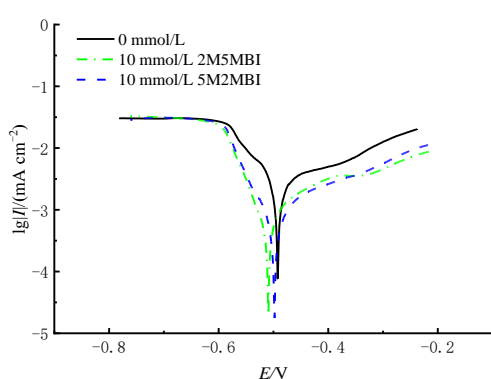


图4 在未含有和含不同缓蚀剂的酸性蚀刻液中处理后的SEM图

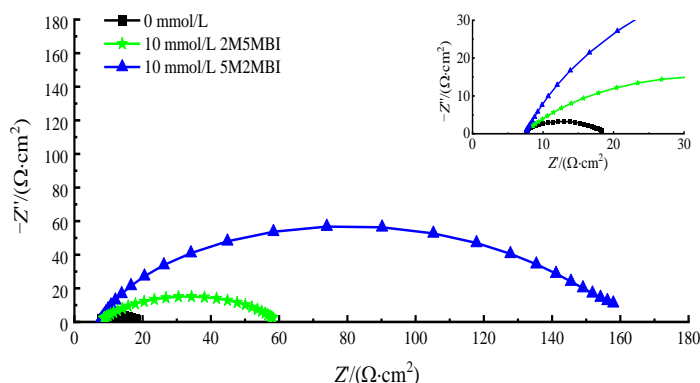
Fig.4 SEM images after treatment in acidic etching solutions without and with different corrosion inhibitors

3.2 电化学测试结果

铜电极在未含有和分别含 2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子、5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子的酸性蚀刻液中所测得的动电位极化曲线和 Nyquist 曲线数据如图 5 所示。从图 5(a) 中可以看出, 随着 2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子与 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子的添加, 缓蚀剂的阴极极化曲线和阳极极化曲线与未添加缓蚀剂的极化曲线相比都发生了一定的变化, 但阳极极化曲线的变化相对来说更加明显。



(a) 动电位极化曲线



(b) Nyquist 图

图 5 铜电极在未含有和含 10 mmol/L 缓蚀剂的酸性蚀刻液中的动电位极化曲线和 Nyquist 图

Fig.5 Polarization curves and Nyquist plots of copper electrodes in acidic etching solutions without and with 10 mmol/L of corrosion inhibitor

利用直线外推法拟合可以得到极化曲线相关参数, 在酸性蚀刻液中, 10 mmol/L 缓蚀剂 2-巯基-5-甲基苯并咪唑和 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑的缓蚀效率分别为 48.33%、65.44%, 说明所选取的缓蚀剂分子能够对铜表面的腐蚀起到较好的缓蚀作用。

图 5(b) 为铜电极在未含有和含 10 mmol/L 2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子、5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子的酸性蚀刻液中的 Nyquist 图。由图 5(b) 可知, 2-巯基-5-甲基苯并咪唑和 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑在酸性蚀刻液中的腐蚀电化学阻抗谱图拟合得到的是半圆型的容抗弧。容抗弧的半径大小与金属表面在腐蚀介质中的阻抗值和电荷转移电阻有关, 当容抗弧半径越大, 阻抗值和电荷转移电阻也会随之增大^[20]。缓蚀剂的添加使得 Nyquist 图的容抗弧半径逐渐增大, 说明 2-巯基-5-甲基苯并咪唑和 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑的添加能够增大金属在腐蚀介质的阻抗值和电荷转移电阻, 使得酸性蚀刻液对铜表面的腐蚀程度降低; 同时, 含有 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑的蚀刻液的容抗弧的半径更大, 说明 5-甲

在金属腐蚀过程中, 电化学极化曲线中的阴极极化曲线表示析氢反应, 阳极极化曲线表示金属电极溶解的氧化反应^[19]。

结合以上分析, 说明 2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子、5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子主要是以抑制阳极反应为主的有机缓蚀剂。加入 10 mmol/L 的 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子的极化曲线向低电流密度变化的趋势较 2-巯基-5-甲基苯并咪唑更加明显, 可以认为前者的吸附效果更好。

氧基-2-巯基苯并咪唑的缓蚀效果好于 2-巯基-5-甲基苯并咪唑。

3.3 缓蚀剂在酸性蚀刻液中的缓蚀效果分析

向基础蚀刻液中分别加入 10 mmol/L 2-巯基-5-甲基苯并咪唑和 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑组成新型蚀刻液。图 6 是当底铜为种子层铜层时, PCB 线路板在酸性蚀刻液中添加 2-巯基-5-甲基苯并咪唑分子和 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子蚀刻后的线路横截面图。

由图 6 可知, 铜线路横截面底部基铜蚀刻完全, 但线路的侧蚀却相比未添加缓蚀剂的蚀刻液蚀刻后的侧蚀更小, 表明添加缓蚀剂后的新型蚀刻液在蚀刻铜线路有较高蚀刻速率的同时, 还能够抑制铜线路侧蚀。

图 7 为铜线路测量并计算后获得的蚀刻因子。在酸性蚀刻液中添加缓蚀剂 2-巯基-5-甲基苯并咪唑蚀刻后的蚀刻因子最大为 10.47, 在酸性蚀刻液中添加缓蚀剂 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑蚀刻后的蚀刻因子最大为 11.57, 则缓蚀剂分子能够较好地吸附

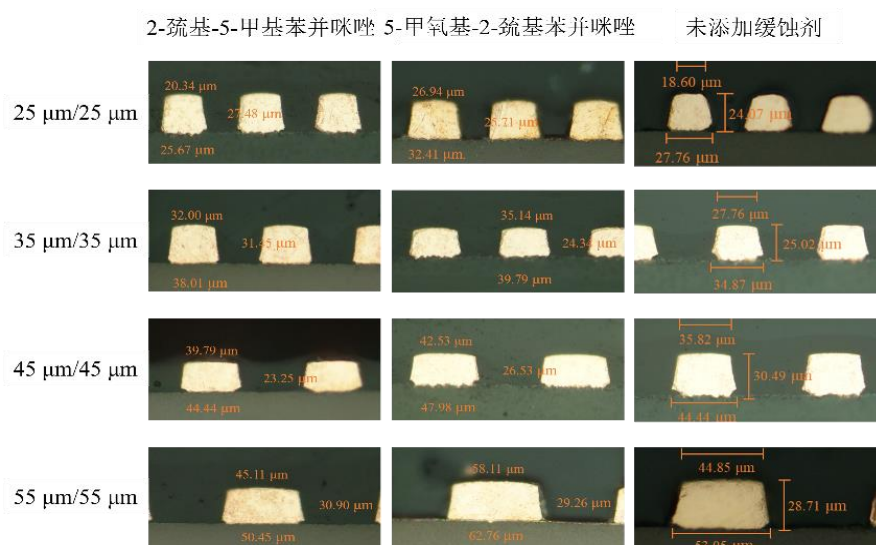


图6 不同线宽/线距的铜线路在不含缓蚀剂和含不同缓蚀剂的蚀刻液中蚀刻后的横截面切图

Fig.6 Cross-sectional images of copper circuits with different line widths/spaces after etching in etching solutions containing no corrosion inhibitor and different corrosion inhibitors

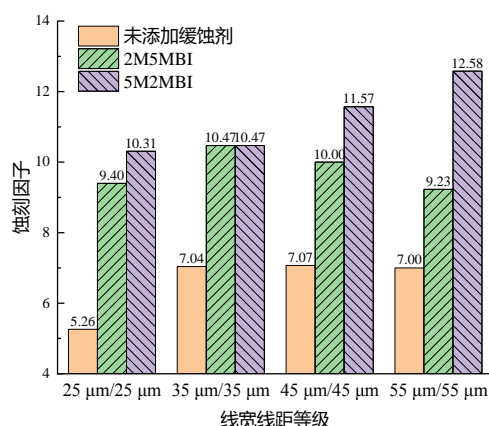


图7 在未含有和含不同缓蚀剂的酸性蚀刻液中蚀刻后的蚀刻因子

Fig.7 Etch factors after etching in acidic etching solutions without and with different corrosion inhibitors

在铜表面抑制铜线路腐蚀。

4 总结

本文研究了含巯基的两种咪唑类化合物(2-巯基-5-甲基苯并咪唑、5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑)作为缓蚀剂在酸性蚀刻液中对金属铜表面的缓蚀性能,以及缓蚀剂对精细铜线路制作的应用效果,得到结论如下:

(1) 量子化学计算结果表明,两种咪唑类化合物均具有较强亲电活性和亲核活性, ΔE 值分别为5.25 eV和5.10 eV; 5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子在铜表面的吸附效果更好。

(2) 分子动力学模拟计算表明2-巯基-5-甲基苯并咪唑和5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子均能够有效地平行吸附在铜面,吸附能分别为 $-45.28 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 和 $-53.79 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$,说明后者具有更好抑制铜面腐蚀的效果。

(3) 动电位极化曲线和电化学阻抗谱测试表明两种缓蚀剂均能够吸附在铜表面,抑制蚀刻液对铜表面的腐蚀,达到更好的缓蚀效果,且5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑对铜面的缓蚀效果更好。

(4) SEM和蚀刻线路后的金相切片结果表明,两种咪唑类化合物能够抑制酸性蚀刻液对铜面的腐蚀,因此可以增大精细铜线路的蚀刻因子,且5-甲氧基-2-巯基苯并咪唑分子提高蚀刻因子的效果更好。

参考文献

- [1] 张天胜. 缓蚀剂[M]. 北京: 化学工业出版社, 2008: 150-180.
- [2] Yan T, Zhang S T, Feng L, et al. Investigation of imidazole derivatives as corrosion inhibitors of copper in sulfuric acid: Combination of experimental and theoretical researches[J]. Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, 2019, 106:118-129.
- [3] Zhang S T, Tao Z H, Li W, et al. The effect of some triazole derivatives as inhibitors for the corrosion of mild steel in 1 M hydrochloric acid[J]. Applied Surface Science, 2009,

255(15):6757-6763.

- [4] Huang H L, Guo X M. The relationship between the inhibition performances of three benzoderivatives and their structures on the corrosion of copper in 3.5 wt.% NaCl solution-Science direct[J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2020, 598(124809):1-14.
- [5] Aljourani J, Raeissi K, Golozar M A. Benzimidazole and its derivatives as corrosion inhibitors for mild steel in 1M HCl solution[J]. Corrosion Science, 2009, 51(8):1836-1843.
- [6] Obot I B, Egbedi N O. Theoretical study of benzimidazole and its derivatives and their potential activity as corrosion inhibitors[J]. Corrosion Science, 2010, 52(2):657-660.
- [7] Damej M, Kaya S, Ibrahim B E, et al. The corrosion inhibition and adsorption behavior of mercaptobenzimidazole and bis-mercaptobenzimidazole on carbon steel in 1.0 M HCl: Experimental and computational insights[J]. Surfaces and Interfaces, 2021, 24:101095.
- [8] Lgaz H, Masroor S, Chafiq M, et al. Evaluation of 2-mercaptobenzimidazole derivatives as corrosion inhibitors for mild steel in hydrochloric acid[J]. Metals, 2020, 10(357):2-14.
- [9] Gece G, Bilgi S, Türken. Quantum chemical studies of some amino acids on the corrosion of cobalt in sulfuric acid solution[J]. Materials and Corrosion, 2009, 61(2):141-146.
- [10] Ak A. Corrosion inhibitors: physisorbed or chemisorbed[J]. Corrosion Science, 2022, 196(109939):1-15.
- [11] Huang X, Braams B J, Bowman J M. Quantum calculations of vibrational energies of H_3O^+ on an ab initio potential[J]. Journal of the Chemical Society, 2004, 126(16):5042-5043.
- [12] Dubnikova F, Lifshitz A. Isomerization of dihydrobenzofuran and isodihydrobenzofuran: Quantum chemical and kinetics calculations[J]. The Journal of Physical Chemistry A, 2002, 106(40):9278-9283.
- [13] Arnason I, Kvaran A, Jonsdottir S, et al. Conformational properties of 1-methyl-1-silacyclohexane: gas electron diffraction, low-temperature NMR, and quantum chemical calculations[J]. Journal of Organic Chemistry, 2002, 67(11):3827-3831.
- [14] Blajiev O L, Breugelmans T, Pintelon R, et al. Potentiodynamic EIS investigation of the 2-methyl-5-mercapto-1, 3, 4-thiadiazole adsorption on copper[J]. Electrochimica Acta, 2008, 53(25):7451-7459.
- [15] Guo L, Dong W P, Zhang S T. Theoretical challenges in understanding the inhibition mechanism of copper corrosion in acid media in the presence of three triazole derivatives[J]. Royal Society of Chemistry Advances, 2014, 4(79):41956-41967.
- [16] Wang Y F, Hong Y, Zhou G Y, et al. Mechanism of a catalytic silver(I)-complex: assisted electroless deposition of inductance coil on poly(ethylene terephthalate) film[J]. Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 2020, 31(11):8165-8173.
- [17] Chen J, Qiang Y J, Peng S N, et al. Experimental and computational investigations of 2-amino-6-bromobenzothiazole as a corrosion inhibitor for copper in sulfuric acid[J]. Journal of Adhesion Science and Technology, 2018, 32(17):1-16.
- [18] Lei S S, Wang S L, Li H L, et al. Effect of benzotriazole and 5-methyl-1-H carboxyl benzotriazole on chemical mechanical polishing of cobalt in H_2O_2 based slurry[J]. ECS Journal of Solid State Science and Technology, 2021, 10(7):1-8.
- [19] Khaled K F, Al-Qahtani M M. The inhibitive effect of some tetrazole derivatives towards Al corrosion in acid solution: Chemical, electrochemical and theoretical studies[J]. Materials Chemistry and Physics, 2009, 113(1):150-158.
- [20] Tao Z H, He W, Wang S X, et al. Electrochemical study of cyproconazole as a novel corrosion inhibitor for copper in acidic solution[J]. Industrial and Engineering Chemistry Research, 2013, 52(50):17891-17899.