

Estudo Teórico de Heterocíclicos Contendo um Grupo Mercapto como Inibidores da Corrosão de Cobre.

Michele Brandalise (IC), Marcelo Marques Tusi¹ (PG), Julio Murilo Trevas dos Santos¹ (PQ)^{*}

¹UNICENTRO – Universidade Estadual do Centro-Oeste; Departamento de Química; Guarapuava – PR.
e-mail: jtrevas@yahoo.com

Palavras Chave: Corrosão, Semiempírico, Cobre.

Introdução

O benzotriazol tem sua eficiência de inibição diminuída em meio ácido, por isso novos inibidores, derivados do benzotriazol que tenham uma maior atividade em meio ácido, são sintetizados e estudados [1]. Devido à forte adsorção do átomo de enxofre ao cobre, muitos heterocíclicos contendo um grupo mercapto têm sido desenvolvidos como inibidores da corrosão do cobre [1].

O objetivo deste trabalho foi estudar a eficiência de inibição teórica do benzotriazol (BTA), do 2-mercapto-benzimidazol (MBI) e do 2-mercapto-benzoxazol (MBO), todos em fase gasosa, cujas estruturas moleculares são apresentadas na Figura 1, para a corrosão do cobre em meio ácido a partir de cálculos quânticos, avaliando a influência da base de cálculo no resultado.

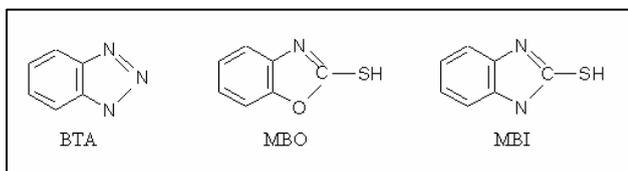


Figura 1. Estruturas dos inibidores de corrosão.

Neste estudo também foi avaliada a eficiência de inibição teórica do benzotriazol como espécie protonada (BTAH⁺) e comparada à eficiência de inibição teórica da espécie não protonada (BTA). Os resultados obtidos foram comparados aos resultados teóricos e experimentais encontrados na literatura [1].

Resultados e Discussão

No pacote Viewmol, montou-se as estruturas moleculares dos inibidores indicados na Figura 1, salvando as estruturas geradas no formato "Biosym". Com o software Vega, fez-se a conversão do formato "Biosym" para coordenadas cartesianas XYZ. Após, utilizando o pacote GAMESS 98, efetuou-se cálculos de otimização de geometria na base de cálculo 321G (método ab initio). Com as coordenadas das estruturas otimizadas, novamente no GAMESS, efetuou-se cálculos de energia em três bases de cálculo diferentes: 321G, AM1 e PM3 sendo as últimas duas bases de cálculo métodos semiempíricos. Após terminados os cálculos, analisou-se a energia do HOMO (*highest occupied molecular* 29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

orbital) de cada molécula. A metodologia citada foi repetida para a molécula de benzotriazol protonada (BTAH⁺).

Os valores da energia do HOMO (E_{HOMO}) obtidos através do cálculo de energia para os inibidores BTA, MBO e MBI estão representados na Tabela 2.

Tabela 2: Energias do HOMO para os inibidores.

INIBIDOR	E_{HOMO} (Hartree)		
	321G	AM1	PM3
BTA	-0,3334	-0,3487	-0,3431
MBO	-0,3293	-0,3372	-0,3432
MBI	-0,3100	-0,3263	-0,3329

Sabendo-se que quanto maior a energia do HOMO (E_{HOMO}) maior é a eficiência de inibição, tem-se que, independente da base de cálculo utilizada, a ordem crescente de eficiência de inibição é MBI > MBO > BTA.

Os valores da energia do HOMO (E_{HOMO}) obtidos através do cálculo de energia para as espécies BTA e BTAH⁺ estão apresentados na Tabela 3.

Tabela 3: Energias do HOMO para as espécies BTA e BTAH⁺.

ESPÉCIE	E_{HOMO} (Hartree)		
	321G	AM1	PM3
BTA	-0,3334	-0,3487	-0,3431
BTAH ⁺	-0,5361	-0,5417	-0,5460

Utilizando o mesmo raciocínio exposto anteriormente, ao analisar os dados da Tabela 3 conclui-se que a eficiência de inibição do benzotriazol não-protonado (BTA) é melhor que da espécie protonada (BTAH⁺).

Conclusões

Os resultados deste estudo são consistentes com os resultados obtidos teoricamente pelo método PPP e experimentalmente por Zhang e colaboradores. A ordem crescente das eficiências de inibição teórica e experimental é BTA < MBO < MBI. Através dos cálculos realizados observou-se que, teoricamente, o benzotriazol tem sua eficiência de inibição diminuída em meio ácido.

¹ Zhang, D.; Gao, L.; Zhou, G. "Inhibition of copper corrosion in aerated hydrochloric acid solution by heterocyclic compounds containing a mercapto group", *Corrosion Science*. 46: 3031 – 3040, 2004.