

## Estudo teórico *ab initio* do benzotriazol como inibidor de corrosão.

Ricardo Celeste<sup>1</sup> (PQ)\*, Paulo Rogério Pinto Rodrigues<sup>1</sup> (PQ).

<sup>1</sup>UNICENTRO - Universidade Estadual do Centro-Oeste  
e-mail: rricardoceleste@yahoo.com.br

Palavras Chave: *ab initio*, corrosão, benzotriazol.

### Introdução

O benzotriazol (BTAH) de fórmula molecular C<sub>6</sub>N<sub>3</sub>H<sub>5</sub>, é um agente inibidor de corrosão consagrado. Existem evidências de adsorção desta molécula na superfície de diversas ligas metálicas e metais, tais como latão, liga Cu-Ni, aços inoxidáveis e ferro<sup>1</sup>.

Esta molécula pode ser encontrada sob três formas diferentes, dependendo do pH da solução em que se trabalha, a saber: forma aniônica (BTA<sup>-</sup>), forma neutra (BTAH) e forma protonada (BTAH<sub>2</sub><sup>+</sup>), conforme mostra a Figura 1.

**Figura 1.** Estruturas moleculares do BTA, BTAH e BTAH<sub>2</sub><sup>+</sup>.



O objetivo deste trabalho é relacionar a estrutura eletrônica destas três espécies, por meio dos respectivos OM de fronteira com a eficiência de inibição de corrosão.

### Resultados e Discussão

As estruturas das espécies BTA<sup>-</sup>, BTAH e BTAH<sub>2</sub><sup>+</sup> foram otimizadas com o programa *Gaussian03* utilizando-se a base 631G+dp para as três espécies. De posse das estruturas otimizadas procedeu-se a análise dos orbitais moleculares (OM) de fronteira HOMO (*highest occupied molecular orbital*) e LUMO (*lowest unoccupied molecular orbital*).

Sabe-se que a eficiência da inibição de corrosão metálica está relacionada aos valores das energias do HOMO e LUMO, sendo que E<sub>HOMO</sub> alta e E<sub>LUMO</sub> baixa favorecem a interação do inibidor com a superfície do metal, aumentando a eficiência da inibição de corrosão<sup>2</sup>, assim, quanto menor a diferença de energia HOMO-LUMO (?E) do inibidor, maior a eficiência deste.

**Tabela 1.** Energias dos orbitais moleculares de fronteira.

	BTA <sup>-</sup>	BTAH	BTAH <sub>2</sub> <sup>+</sup>
E <sub>HOMO</sub>	-0,322	-0,322	-0,341
E <sub>LUMO</sub>	-0,185	-0,188	-0,191
?E	0,137	0,134	0,150

### Conclusões

Os resultados apresentados na Tabela 1 indicam que a espécie mais eficiente na inibição de corrosão é a forma neutra do benzotriazol, mas como os valores das energias dos orbitais moleculares de fronteira e de ?E são muito próximos, o valor do pH da solução de trabalho deve ter influência sobre a espécie que atua de forma mais eficiente como inibidor<sup>3</sup>.

### Agradecimentos

IQSC pelo uso do programa *Gaussian*.

<sup>1</sup>Rodrigues, P. R. P., "O benzotriazol como inibidor de corrosão para ferro e ligas ferrosas em meios de ácido sulfúrico", *Tese de Doutorado*, IQ-USP, São Paulo, SP, **1997**.

<sup>2</sup> Bouayed, M.; Rabaâ, H.; Srhiri, A.; Saillard, J.-Y.; Ben Bachir, A. e Le Beuze, A. *Corr. Sci.* **1999**, 41, 501.

<sup>3</sup> Yao, J. L.; Ren, B.; Huang, Z. F.; Cao, P. G.; Gu, R. A. e Tian, Zhong-Qun *Electchim. Acta*, **2003**, 48, 1263.