

MmeCo14-043

Abordagens experimental e in silico da inibição da corrosão do cobre em meio ácido por derivados de triazóis

Lima-neto, P.(1); Correia, A.N.(1); Casciano, P.S.(1); Costa, S.(1); Almeida-neto, F.Q.(2); Marinho, E.S.(2); Campos, O.(3); Homem- De-melo, P.(4); Mattos, M.C.(1); (1) UFC; (2) UECE; (3) UFES; (4) UFABC;

Este trabalho objetiva investigar quatro moléculas derivadas do triazóis como inibidores de corrosão para cobre em ácido sulfúrico 0,5 mol L⁻¹. Na molécula de triazol, aqui denominada TR, um grupo acetofenona foi adicionado enquanto ao anel benzênico foram adicionados átomos como hidrogênio (TR-1), fluoreto (TR-2), cloro (TR- 3), e um grupo metil (TR-4). Monitoramento de potencial de circuito aberto (Eoc), polarização potenciodinâmica (PP) e espectroscopia de impedância eletroquímica (EIS) foram as técnicas utilizadas para a realização dos ensaios de corrosão. Além disso, métodos computacionais de Monte Carlo (MC) e Teoria do Funcional da Densidade (DFT) foram utilizados para avaliar quais propriedades moleculares foram corrigidas com as eficiências experimentais de inibição de corrosão. As análises dos dados eletroquímicos mostraram que TR-2 apresentou a maior eficiência de inibição (95,12% para PP e 83,55% para EIS). Considerando as simulações de Monte Carlo, a molécula TR-2 é adsorvida na superfície do eletrodo pelo grupo triazol, o que favorece a criação de um filme estável sobre o eletrodo. A análise eletrônica dos cálculos DFT mostra que a polaridade das moléculas e as energias LUMO desempenham um papel importante na criação de um complexo de coordenação entre a superfície do eletrodo e a molécula inibidora de TR-2. Portanto, a modificação química da molécula de triazol criou um melhor inibidor de corrosão para o eletrodo de cobre em condições ácidas.