ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 7, № 4 (2006) С. 748-750

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 7, № 4 (2006) P. 748-750

УДК 547.791.8

ISSN 1729-4428

Р.М. Вишневський[1], Б.Л. Литвин[1], А.Л. Романюк[2]

Фенольні похідні бензотриазолу як нові інгібітори корозії металів в кислому середовищі

[1]Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника
[2]Івано-Франківський державний медичний університет

Вивчення антикорозійної дії нових класів речовин – це важливий шлях для формування чіткої теорії антикорозійного захисту, а отже і пошуку ефективних, економічно доступних антикорозійних засобів.

В даній статті розглянуто новий клас речовин - фенольні похідні бензотриазолу, як можливі інгібітори корозії металів. Проведено випробовування антикорозійних властивостей деяких з цих речовин в солянокислому середовищі.

Ключові слова: інгібітор корозії, 1,2,3-бензотриазол, фенольні похідні бензотриазолу, квантовохімічні розрахунки.

Стаття поступила до редакції 07.04.2006; прийнята до друку 15.09.2006.

Захист металів від корозії базується на властивостях деяких сполук або їх сумішей під час введення їх в певних концентраціях в агресивне середовище зменшувати швидкість корозійного процесу або повністю його зупиняти. Ефективність інгібітора визначається як його природою, так і природою кородуючого металу. Крім того, вона істотно залежить від складу і властивостей корозійного середовища, його температури [1-3].

В даній роботі наведено результати вивчення захисних властивостей фенольних похідних бензотриазолу (рисунок 1).

1,2,3-Бензотриазол здавна відомий як ефективний інгібітор корозії металів [3]. З метою вивчення механізму взаємодії його з поверхнею металу ми виміряли інгібіторні ефекти деяких його фенольних похідних.

Антикорозійні дослідження проводились згідно ГОСТу [4], в середовищі 12-% соляної кислоти для залізних пластинок, які попередньо обробляли абразивним матеріалом різної зернистості, шліфували і знежирювали ацетоном. Випробовування проводили при 60оС, оскільки при цій температурі спостерігається максимум

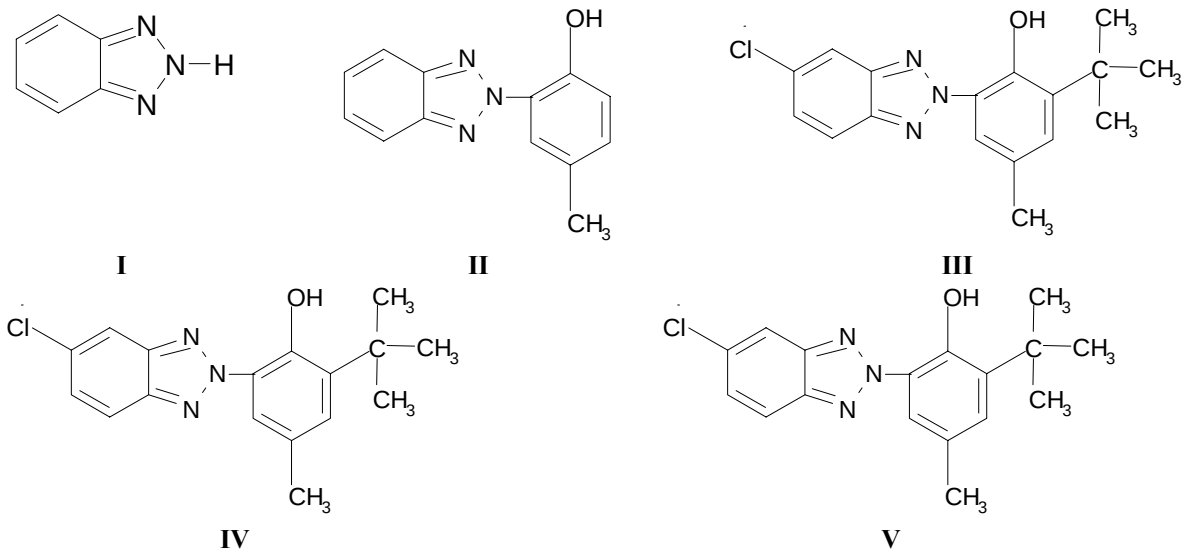

Рис. 1. Фенольні похідні бензотриазолу.

інгібіторного ефекту для більшості відомих інгібіторів описаних в літературі [2]. Зразки попередньо розчиняли в метилцелозольві в співвідношенні 1:1, переносили в розчин кислоти. Інгібіторний ефект вимірювали при концентрації досліджуваної речовини рівній 0,5%.

Отримані результати вказують на те, що дані сполуки виявляють захисний ефект в кислому середовищі.

Таблиця 1

Інгібіторні ефекти фенольних похідних бензотриазолу.

Сполука	Заряд на атомі азоту			Інгібіторний ефект	Розчинність у 12% HCl, г/100 г
	N1	N2	N3		
I				5,5	25
II	-0,079904	-0,005227	-0,026345	6,7	1,34
III	-0,03656	0,003744	-0,020007	3,4	0,88
IV	-0,05434	-0,020733	-0,039846	4,9	1,20
V	-0,061142	-0,009051	-0,035566	5,2	1,32

Як видно з даних, що наведені в таблиці 1 фенольні похідні бензотриазолу виявляють інгібіторні ефекти близькі до самого бензотриазолу. Якщо порівняти два параметри: розчинність – інгібіторний ефект, видно, що фенольні похідні бензотриазолу виступають ефективними інгібіторами корозії, хоча їх розчинність менша від розчинності бензотриазолу в 19 – 28 разів. Це можна пояснити виходячи з самої структури фенольних похідних. В своїй структурі вони містять електронодонорний бензотриазольний фрагмент, яким вони адсорбуються на поверхні заліза за рахунок утворення донорно-акцепторних зв’язків між неподільними парами електронів атомів азоту та вакантними орбіталями поверхневих атомів заліза. На відміну від самого бензотриазолу молекули фенольних похідних містять в своїй структурі гідроксильну групу, яка може також утворювати зв'язок з поверхнею металу. Тобто дані молекули зв’язуються з поверхнею в кількох місцях.

З другої сторони вуглеводнево-фенольний фрагмент виявляє гідрофобні властивості, що сприяє відштовхуванню агресивного середовища від поверхні металу, що не спостерігається в самого бензотриазолу. Ці фактори пояснюють високу ефективність фенольних похідних бензотриазолу при низькій розчинності.

Як було сказано вище, дані структури утворюють зв’язки з поверхневими атомами заліза за рахунок атомів азоту. З таблиці 1 видно, що інгібіторні ефекти різних фенольних похідних бензотриазолу значно відрізняються. Можна припустити, що вуглеводнево-фенольні фрагменти безпосередньо впливають на заряд атомів азоту. Щоб зрозуміти цей вплив нами було зроблено квантово-хімічні розрахунки за допомогою програми HyperChem (версія 6.01 для Windows). Отримані дані зарядів на атомах азоту бензотриазольного фрагмента (таблиця 1) вказують, що в залежності від вуглеводнево-фенольного фрагмента заряди на атомах азоту відрізняються. Спостерігається також чітка закономірність, показана на рисунку 2:

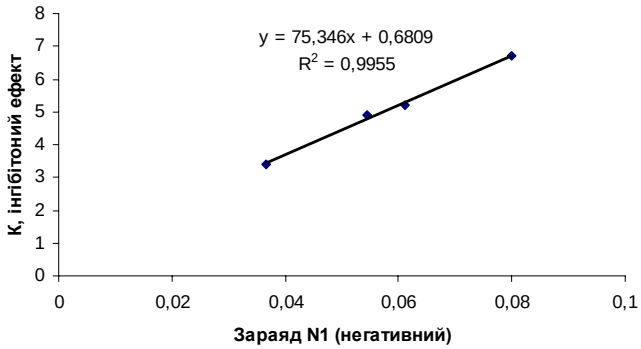

Рис. 2. Залежність інгібіторного ефекту від заряду на атомі N1 в фенольних похідних бензотриазолу.

При зростанні негативного заряду на атомі N1 інгібіторний ефект фенольного похідного бензотриазолу зростає. Для інших атомів азоту N2 та N3 такої закономірності не спостерігається. Дані закономірності доказують, що саме атомом N1 фенольні похідні бензотриазолу утворюють донорно-акцепторні зв’язки з поверхневими атомами заліза.

Для атома N3 така закономірність не спостерігається, що пов’язано, напевне, з здатністю його утворювати водневий зв'язок з гідроксильною групою.

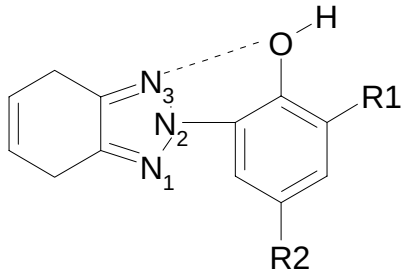

Рис. 3. Утворення внутрімолекулярного водневого зв’язку в фенольних похідних бензотриазолу.

Виходячи з заряду на N3 видно, що він має менше негативне значення ніж N1 в усіх фенольних похідних бензотриазолу, а відповідно і меншу здатність до утворення донорно-акцепторного

зв'язку з атомами заліза.

Виходячи з даних досліджень, можна зробити висновок, що фенольні похідні бензотриазолу адсорбуються на поверхні металу в основному атомом N1, і їхня ефективність зростає порівняно з бензотриазолом за рахунок фенольної частини, яка блокує метал від дії агресивного середовища і підсилює зв'язок молекули з металом за рахунок гідроксильної групи.

Вишневський Р.М. **–** аспірант кафедри теоретичної та прикладної хімії;
Литвин Б.Л. **–** канд. хім. наук, доцент кафедри теоретичної та прикладної хімії;
Романюк А.Л. **–** кан. хім. наук, доцент.

[1] Дж.И. Брегман. *Ингибиторы коррозии*. М., Химия, 310 с. (1966).
[2] Е.С. Иванов, С.С. Иванов. *Ингибиторы коррозии металлов*. М.: Знание, 64 с. (1980).
[3] А.И. Алцыбеева, С.З. Левин. *Ингибиторы коррозии металлов*. Л.: Химия, 256 с. (1968).
[4] ГОСТ 14-15-157-85. *Ингибиторы кислотной коррозии металлов. Методы коррозионных испытаний. Министерство черной металлургии*. М.: Изд-во стандартов, (1985).

R.M. Vyshnevskyy[1], B.L. Lytvyn[1], A.L. Romanyuk[2]

Phenolic derivativ benzolthreeazol as new rust inhibitors of metals in the sour environment

[1] 'Vasyl Stefanyk' Precarpathian National University, 57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76025
[2] Ivano-Frankivsk State Medical Institute, 2, Galitska Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine

This article studied new inhibitors of metals corrosion – phenols derivatives of benzotriazole. Anticorrosion properties some of this substances in presence of hydrochloric acids were studied.