

JOTCSA, volume 2, issue 2, 2015



TURKISH CHEMICAL SOCIETY
Journal of the Turkish Chemical Society, Section A: Chemistry

Owned by the Turkish Chemical Society

Correspondence e-mail: jotcsa@turchemsoc.org

Founded in February, 2014

CORROSION INHIBITION EFFECT OF SOME AMINO SUBSTITUTED THIADIAZOLES ON COPPER: QUANTUM CHEMICAL STUDY

BAKIR ÜZERİNDE BAZI AMİNO SÜBSTİTÜE TİYADİYAZOLLERİN KOROZYON ÖNLEME ÖZELLİĞİ: KUANTUM KİMYASAL ÇALIŞMA

Nihat Karakuş^{1*}, Dilara Özbakır Işın²

¹Department of Chemistry, Faculty of Science, Cumhuriyet Universty, 58140 Sivas, Turkey

² Department of Chemistry, Faculty of Science, Cumhuriyet Universty, 58140 Sivas, Turkey

*Corresponding author. nkarakus@cumhuriyet.edu.tr

SUMMARY

Copper and copper based alloys are of considerable importance as they form the backbone of modern industries. Brass has been widely used for shipboard condensers, power plant condensers and petrochemical heat exchangers [1]. Thiadiazoles which are important compounds in many fields were reported earlier as corrosion inhibitors for metals and their alloys [2-8]. Recently, Joseph Raj et al. [9] was experimentally investigated the inhibition efficiencies of three amino thiadiazole derivatives for brass in natural seawater as shown in Figure 1. The relationships between the quantum chemical parameters and corrosion inhibition of those compounds have not been studied yet.

In this study, corrosion inhibition efficiencies of three amino thiadiazole derivatives namely 2-amino-5-ethyl-1,3,4-thiadiazole (AETD), 2-amino-5-ethyl-1,3,4-thiadiazole (AETTD) and 2-amino-5-tert-butyl-1,3,4-thiadiazole (ATBTD) as corrosion inhibitors on brass known as copper alloy in both gas and water phase were investigated by using B3LYP/6-31G(d,p) and B3LYP/6-31++G(d,p) basis sets by DFT method. Quantum chemical parameters such as the highest occupied molecular orbital energy (EHOMO), the lowest unoccupied molecular orbital energy (ELUMO), energy gap ($\Delta E = ELUMO - EHOMO$), sum of the total negative charge (TNC), electronegativity (χ), global hardness (η), softness (δ), the fraction of electrons transferred (ΔN) and proton affinity (PA) were calculated. Furthermore, the interaction energies of the investigated amino thiadiazole derivatives with the copper metal were obtained. The effect of substituent types and its positions on the thiadiazole ring were investigated for all structures. As a result, the inhibition efficiency of investigated amino thiadiazole derivatives was observed to increase with increasing the electron donor characteristic of the substituted groups. A good correlation was found between the quantum chemical parameters and experimental inhibition efficiencies of the investigated amino thiadiazole derivatives.

Keywords

Amino thiadiazoles, Corrosion inhibitor, Quantum chemical parameters.

ÖZET

Bakır ve bakır esaslı alaşımlar, modern endüstrilerin temelini oluşturduklarından dolayı, ciddi bir öneme sahiptirler. Pirinç, gemi güvertesi yoğunlaştırıcıları, enerji santrali yoğunlaştırıcıları ve petrokimyasal ısı değiştiricilerinde yaygın bir şekilde kullanılmaktadır [1]. Tiyadiyazoller, pek çok alanda önemli bir bileşik sınıfı olup önceki zamanlarda metaller ve alaşımları için korozyon inhibitörleri olarak bildirilmiştir [2-8].

Son zamanlarda, Joseph Raj ve arkadaşları [9] doğal deniz suyunda üç adet amino tiyadiyazol türevinin pirinç için azaltma etkinliklerini incelemiştir. Kuantum kimyasal özellikler ile bu bileşiklerin korozyon azaltma özellikleri arasında henüz bir bağlantı kurulmamıştır.

Bu çalışmada, üç adet amino tiyadiyazol türevinin (2-amino-5-etil-1,3,4-tiyadiyazol, AETD; 2-amino-5-etiltiyo-1,3,4-tiyadiyazol, AETTD ve 2-amino-5-tert-butil-1,3,4-tiyadiyazol, ATBTD) bakır alaşımı olarak bilinen pirinçte korozyon inhibitörü olarak kullanılması hem gaz, hem de su fazında B3LYP/6-31G(d,p) ve B3LYP/6-31++G(d,p) baz setleri kullanılarak DFT yöntemi ile çalışılmıştır.

En yüksek dolu moleküler orbital enerjisi (E_{HOMO}), en düşük boş moleküler orbital enerjisi (E_{LUMO}), enerji farkı ($\Delta E = E_{LUMO} - E_{HOMO}$), toplam negatif yükün toplamı (TNC), elektronegatiflik (χ), global sertlik (η), yumuşaklık (δ), iletilen elektronların kesri (ΔN) ve proton afinitesi (PA) gibi kuantum kimyasal parametreler hesaplanmıştır. Bunun dışında, incelenen amino tiyadiyazol türevlerinin bakır metali ile etkileşim enerjileri elde edilmiştir. Bütün yapılar için tiyadiyazol halkası üzerindeki süstitüent türleri ve konumlarının etkisi de bütün yapılar için incelenmiştir. Sonuç olarak, incelenen amino tiyadiyazol türevlerinin azaltma etkinliği, süstitüe grupların artan elektron donör karakteristiği ile artmaktadır. Araştırılan amino tiyadiyazol türevlerinin kuantum kimyasal parametreleri ve deneysel azaltma etkinlikleri arasında iyi bir bağlantı kurulmuştur.

Anahtar kelimeler

Amino tiyadiyazoller, korozyon inhibitörü, kuantum kimyasal parametreler.

Kaynaklar / References

- [1] M. A. Milan, M. M. Snežana and B. P. Marija, *Corros. Sci.*, 2009.
- [2] J.M. Bastidas and E. Otero, *Mater. Corros.*, 1996.
- [3] E.M. Azhar, B. Mernari, M. Traisnel, F. Bentiss and M. Legrenee, *Corros. Sci.*, 2001.
- [4] E.M. Sherif and S.M. Park, *Electrochim. Acta*, 2006.
- [5] E.M. Sherif and S.M. Park, *Corros. Sci.*, 2006.
- [6] S. Varvara, L. Muresan, K. Rahmouni and H. Takenouti, *Corros. Sci.*, 2008.
- [7] Y. M. Tang, W. Z. Yang, X. S. Yin, Y. Liu, R. Wan and J. T. Wang, *Mater. Chem. Phys.*, 2009.
- [8] R.B. Rastogi and M.Yadav, *Indian. J. Chem. Techn.*,2010.
- [9] X. Joseph Raj and N. Rajendran, *Int. J. Electrochem. Sci.*, 2011.