



MODELADO COMPUTACIONAL DE LA ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE MOLÉCULAS DERIVADAS DE PIRIDINA Y BENZIMIDAZOL CON CAPACIDAD INHIBIDORA DE CORROSIÓN

Jorge Reyes-Corrales¹, Daniel Glossman-Miknit^{2,3}, Jesús Baldenebro-López¹

¹ Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa. Prol. Ángel Flores y Fuente de Poseidón, S/N, C.P. 81223, Los Mochis, Sinaloa; México

² Departament de Química, Universitat de les Illes Balears, 07122, Palma de Mallorca; Spain

³ NANOCOSMOS Virtual Lab, Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C. Miguel de Cervantes 120, C.P. 31136, Chihuahua, Chihuahua; México

e-mail: jorge.reyes@uas.edu.mx

Una de las principales pérdidas millonarias en las industrias (principalmente petroleras), se debe a la corrosión de los materiales, tales como tuberías, codos, equipos y cualquier otro material metálico que se encuentre en contacto con un medio agresivo. Los inhibidores basados en heteroátomos de nitrógeno han mostrado ser uno de los productos químicos eficaces en la inhibición de la corrosión de metales. Además, se ha reportado que los compuestos orgánicos que contienen nitrógeno en los anillos heterocíclicos, aumentan su eficiencia al agregar más sistemas aromáticos y su disponibilidad de átomos electronegativos¹. El presente trabajo consiste en un estudio teórico a través de la teoría de funcionales de la densidad (DFT) a moléculas inhibidoras de corrosión derivadas de piridina² y benzimidazol³. El estudio se llevó a cabo con los funcionales M11-L, PBE0, MN12-SX y M06-2X, considerando los conjuntos base 6-311G(d), 6-311+G(d) y 6-311+G(d,p). Diversas propuestas fueron planteadas hasta obtener las geometrías de mínima energía, además se calcularon las funciones de Fukui localizando los ataques nucleofílicos y electrofílicos con el análisis poblacional de cargas de Mulliken y Hirshfeld. Finalmente, se llevó a cabo un análisis de diversos parámetros de reactividad química, tales como la dureza química, el poder electrodonador y poder electroceptor, e índice de electrofilicidad con el objetivo de proveer un esquema más completo de las moléculas más reactivas y seleccionar las mejores propuestas moleculares con potencial aplicación como inhibidor de corrosión⁴.

- (1) Bahrami, M. J.; Hosseini, S. M. A.; Pilvar, P. *Corros. Sci.* **2010**, *52* (9), 2793–2803.
- (2) Krim, O.; Elidrissi, A.; Hammouti, B.; Ouslim, A.; Benkaddour, M. *Chem. Eng. Commun.* **2009**, *196* (12), 1536–1546.
- (3) Garcia-Ochoa, E.; Guzmán-Jiménez, S. J.; Hernández, J. G.; Pandiyan, T.; Vásquez-Pérez, J. M.; Cruz-Borbolla, J. *J. Mol. Struct.* **2016**, *1119*, 314–324.
- (4) Kaya, S.; Tüzün, B.; Kaya, C.; Obot, I. B. *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.* **2016**, *58*, 528–535.