

# АНТИКОРОЗІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ КАТІОННИХ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИХ РЕЧОВИН ІЗ 1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОЛЬНИМ ЛІНКЕРОМ

*Фізер М.М.<sup>1</sup>, Фізер О.І.<sup>1</sup>, Сливка М.В.<sup>1</sup>*

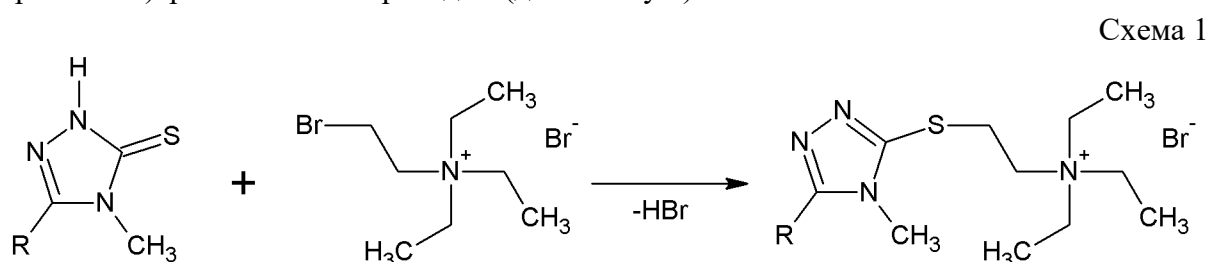
<sup>1</sup>ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород, Україна

e-mail: max.fizer@uzhnu.edu.ua

Розробка синтетичних методів одержання та функціоналізації нових катіонних поверхнево-активних речовин є актуальним завданням сучасної синтетичної органічної хімії. Це зумовлено тим, що ці сполуки володіють широким спектром біологічної активності, і є цікавими з точки зору дослідження їх фізичних властивостей.

Функціоналізовані похідні 1,2,4-триазолів вже знайшли широке застосування в різних галузях промисловості та медицини. Ряд триазол-вмісних систем використовуються як ефективні добавки до фотоемulsій, активні компоненти гербіцидних, фунгіцидних та пестицидних препаратів. У багатьох представників цього класу сполук було виявлено антикорозійні властивості і показано, що композити на їх основі можуть використовуватися в якості інгібіторів корозії металів.

Нашим колективом активно досліджується можливість синтетично простого молекулярного дизайну 1,2,4-триазольних систем, із отриманням перспективних біологічно-активних та функціональних матеріалів [1-4]. Було відмічено можливість простого введення тетраетиламонієвого фрагменту до складу 1,2,4-триазол-3-тіольної системи в умовах реакції алкілювання полізаміщених 1,2,4-триазол-3-тіонів (2-бромоетил)триетиламоній бромідом (див. схему 1).

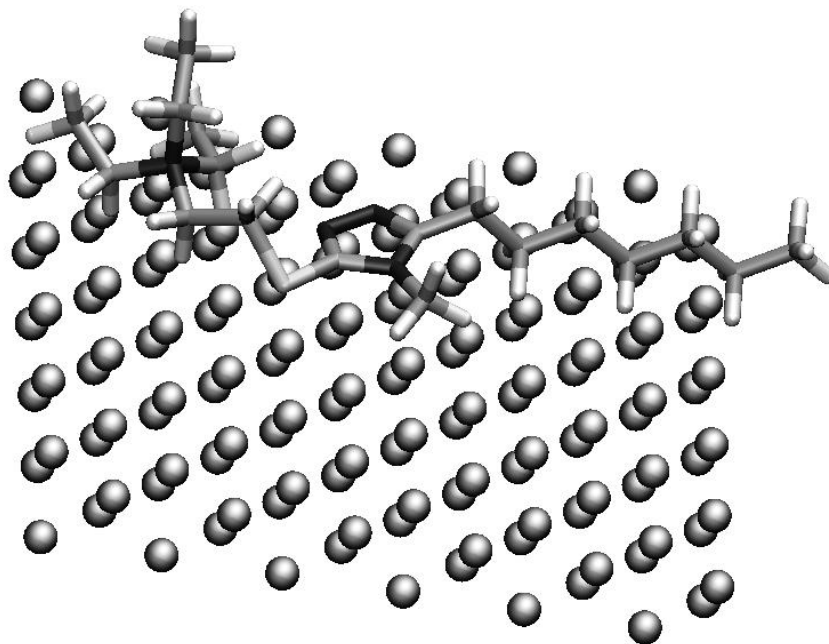


R = CH<sub>3</sub>, C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>, C<sub>7</sub>H<sub>15</sub>, C<sub>15</sub>H<sub>31</sub>, C<sub>17</sub>H<sub>35</sub>

Антикорозійну активність синтезованих сполук досліджували на модельних зразках сталі Ст5кп розміром 50x30x0,8 мм. В якості корозійного середовища використовували 1-, 2-, та 4-% водні розчини соляної кислоти. Швидкість корозійного руйнування визначали гравіметричним методом на п'яти паралельних зразках. Сполуки із довгими алкільними замісниками у п'ятому положенні триазольного циклу (R = C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>–C<sub>17</sub>H<sub>35</sub>) проявили високі антикорозійні властивості при активних концентраціях 10<sup>-5</sup>–10<sup>-4</sup> моль/л.

Для пояснення спостережуваної антикорозійної активності було проведено квантово-хімічні розрахунки з використанням нового методу GFN-FF [5]. Поверхню металу моделювали площиною із 6×6×1 елементарних комірок заліза (144 атоми). В якості модельного триазолу було вибрано катіон N,N,N-триетил-2-[(4-метил-5-гептил-4H-1,2,4-триазол-3-іл)сульфаніл]етан-1-амінію (60 атомів). Розрахована повна енергія асоціату «триазол-метал» (204 атоми) склала –10.7721 Eh. Окремо, повна енергія кластеру для моделювання поверхні металу склала –2.4498 Eh. Повна енергія триазолу

склала  $-8.1173$  Ен. Таким чином, у водному розчині змодельованому за допомогою методу GBSA [6], теплота асоціації «триазол-метал» розрахована як  $128.7$  ккал/моль.



**Рис.1.** Оптимізований асоціат «триазол-метал» за допомогою методу GFN-FF.

#### Література

4. Fizer M., Slivka M., Mariychuk R., Baumer V., Lendel V. 3-Methylthio-4-phenyl-5-phenylamino-1,2,4-triazole hexabromotellurate: X-ray and computational study // *J. Mol. Struct.* – 2018. – 1161. – С. 226–236.
5. Korol N., Slivka M., Fizer M., Baumer V., Lendel V. Halo-heterocyclization of butenyl(prenyl)thioethers of 4,5-diphenyl-1,2,4-triazol-3-thiole into triazolo[5,1-b][1,3]-thiazinium systems: experimental and theoretical evolution // *Monatsh. Chem.* – 2020. – 151. – С. 191–198.
6. Fizer M.M., Slivka M.V., Lendel V.G. Peculiarities of 4-methallyl-5-methallylamino-1,2,4-triazole-3-thione halogenation // *Chem. Het. Compnd.* – 2019. – 55, №4/5. – С. 478–480.
7. Fizer M., Slivka M., Sidey V., Baumer V., Mariychuk R. XRD, NMR, FT-IR and DFT structural characterization of a novel organic-inorganic hybrid perovskite-type hexabromotellurate material // *J. Mol. Struct.* – 2021. – 1235. – С. 130227.
5. Spicher S., Grimme S. Robust atomistic modeling of materials, organometallic, and biochemical systems // *Angew. Chem.* – 2020. – 59(36). – С. 15665–15673.
6. Onufriev A.V., Case D.A. Generalized born implicit solvent models for biomolecules // *Annu. Rev. Biophys.* – 2019. – 48. – С. 275–296.