

ESTUDO EXPERIMENTAL E TEÓRICO DA APLICAÇÃO DE AMINOÁCIDOS COMO INIBIDORES DE CORROSÃO EM MEIO NEUTRO

XXXVIII Encontro de Iniciação Científica

Emanuelle Machado Marinho, Pedro de Lima Neto

Aminoácidos tem demonstrado ser bons inibidores da corrosão do aço carbono em meio ácido. Entretanto, a ação inibidora da corrosão do aço carbono por estes compostos em meio neutro é bem inferior a apresentada em meio ácido. Assim, três aminoácidos: serina, cisteína e metionina, foram selecionados e estudados como inibidores de corrosão do aço carbono meio de NaCl 3,5%, com o fim de entender o porquê deste fato. Para isto, foram utilizados testes eletroquímicos usando as técnicas de polarização linear e impedância eletroquímica e monitoramento de potencial de circuito aberto. Todos os ensaios de corrosão foram feitos à temperatura ambiente (\square 25 °C). Adicionalmente, cálculos computacionais utilizando método quântico DFT foram feitos com a finalidade de avaliar que propriedades moleculares, das moléculas selecionadas, estão relacionadas à inibição da corrosão. Os cálculos foram feitos usando o software Orca versão 4.2.1, utilizando o funcional B3LYP e o conjunto de base 6-31G(d,p) para otimizar as estruturas geométricas das moléculas de interesse até o seu mínimo global de energia, de tal modo que seja possível determinar suas propriedades eletrônicas e reatividade. Experimentalmente, elas serão caracterizadas pelas técnicas de impedância eletroquímica, polarização e monitoramento do circuito aberto (OCP). Os testes de corrosão demonstraram que a metionina foi o melhor inibidor de corrosão.

Palavras-chave: Corrosão. Aminoácidos. Eletroquímica. DFT.