

Serina, cisteína e metionina como inibidores de corrosão do aço carbono em meio ácido

Glaydson L. F. Mendonça^{1*} (PG), Roger A. Gomes¹ (PG), José R. C. Júnior¹ (PG), Valder N. Freire² (PQ), André F. de Moura³ (PQ), David L. Azevedo⁴ (PQ), Adriana N. Correia¹ (PQ), Pedro de Lima Neto¹ (PQ)
Zleon9@yahoo.com.br

¹DQAFQ – UFC, Fortaleza - CE; ²DF - UFC, Fortaleza – CE, ³DQ – UFSCar, São Carlos – SP; ⁴DF – UFMA, São Luis, MA;

Palavras Chave: Corrosão, Inibidores, Aminoácidos, Química teórica, Eletroquímica

Introdução

Estudos com moléculas orgânicas para uso como inibidores de corrosão são usualmente restritivamente experimentais, o que não permite a elucidação do mecanismo e nem a previsão da eficiência de inibição de diferentes moléculas. Os métodos computacionais surgem como poderosa ferramenta para solução destas deficiências dos estudos experimentais.

Os aminoácidos possuem potencialidade para aplicação como inibidores de corrosão, com a vantagem de serem não tóxicos. O objetivo deste trabalho é estudar comparativamente a inibição da corrosão do aço carbono pelos aminoácidos serina, cisteína e metionina por meio de técnicas eletroquímicas e fornecer uma explicação da eficiência de inibição por métodos computacionais.

Resultados e Discussão

Os estudos eletroquímicos da corrosão do aço carbono foram feitos em meio H₂SO₄ 0,5 mol/L, concentração 0,01 mol/L dos seguintes aminoácidos: serina, cisteína e metionina. As técnicas experimentais utilizadas foram polarização linear potenciodinâmica (PLP) e a espectroscopia de impedância eletroquímica (EIS). Para os estudos teóricos foram utilizados os seguintes programas: Forcite, DMOL3, Adsorption locator e Gromacs. A Tabela 1 apresenta os valores de eficiência de inibição (EI%) obtidos pelas técnicas PLP e EIS. Esta tabela mostra que a serina não apresenta um bom efeito inibidor, enquanto que a metionina apresenta a maior inibição.

Tabela 1. Eficiência de Inibição (EI%) dos aminoácidos.

Inibidor	EI% (PLP)	EI % (EIS)
Serina	11,49	0,00
Cisteína	59,12	79,47
Metionina	66,80	88,14

O orbital HOMO está relacionado com a facilidade de transferência eletrônica: um acréscimo na energia deste orbital implica em aumento da eficiência de inibição. A análise deste orbital mostra que ele está principalmente localizado nas cadeias laterais dos aminoácidos (Fig. 1). A serina possui uma hidroxila em sua cadeia lateral, o que desfavorece a transferências, já a cisteína e a metionina apresentam átomos de enxofre, o que implica em um favorecimento da doação de cargas.

33ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

A diferença energética (ΔE) entre os orbitais de fronteira está relacionada ao grau de “maciez” da molécula¹. A serina apresenta maior rigidez, possivelmente devido seu menor volume molecular, sugerindo uma menor adsorção, uma vez que a superfície metálica é considerada macia devido à extensão de sua nuvem eletrônica. A energia de adsorção (E_{ADS}) pode ser considerada uma consequência direta das propriedades eletrônicas dos aminoácidos, uma vez que a orientação de interação de todas as moléculas na superfície foi dada pelo orbital HOMO. As moléculas de serina apresentam uma maior energia de interação entre si ($E_{Int. Am.Ac}$), indicando assim uma maior tendência a formação de aglomerados moleculares, dificultando assim sua adsorção na superfície. A Tabela 2 apresenta valores de propriedades moleculares calculados teoricamente.

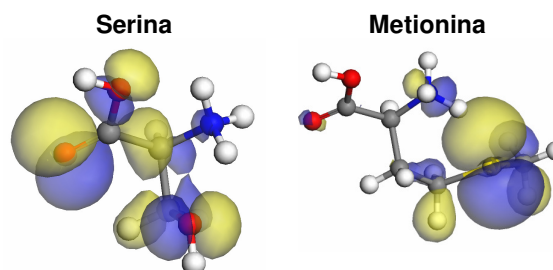


Fig 1: Orbital HOMO da serina e metionina.

Tabela 2: Valores de propriedades calculadas teoricamente.

Inibidor	HOMO (eV)	ΔE (eV)	E_{ADS} (Kcal/mol)	$E_{Int. Am.Ac}$ (Kcal/mol)
Ser	-11,243	5,301	-102,565	-231,439
Cys	-10,498	4,299	-120,057	-190,353
Met	-9,5485	3,972	-145,434	-152,676

Conclusões

Os testes eletroquímicos mostraram que os aminoácidos sulfurados são melhores inibidores, enquanto os cálculos computacionais permitiram estabelecer modelos para a predição da eficiência das moléculas no controle da corrosão.

Agradecimentos

CAPES, FINEP, CNPq, PETROBRAS, FUNCAP

¹Arslan T., Kandemirli F., Ebenso E. E., Love I., Alemu H.; Corrosion Science 51 (2009) 35–47.