


Evaluación de inhibición a la corrosión del acero API 5L X52 en presencia de IRGAMET 42 en H₂SO₄ 0.5M

Benítez Galván José Rodrigo, Ezeta Mejía Araceli, Ramírez Rodríguez Claudia, Corrales Luna Mónica, Rangel Olivares Francisco Ricardo, Cabrera Sierra Román

Instituto Politécnico Nacional, ESIQIE, Departamento de Ingeniería en Metalurgia y Materiales. UPALM Ed.7, CDMX, 07738.

*Autor para correspondencia: aezetam@ipn.mx

ORCID : 0000-0001-6529-6592

Recibido:

30/abril/2024

Aceptado:

20/agosto/2024

Palabras clave:

Inhibidor de corrosión,
aminoácidos,
electroquímica

Keywords:

Corrosion inhibition,
aminoacids,
electrochemical

RESUMEN

Se estudió el comportamiento de inhibición del aminoácido IRGAMET 42 para el acero API 5LX52 en medio ácido (0.5 M H₂SO₄) a temperatura ambiente. La eficiencia de inhibición se determinó mediante pruebas electroquímicas. Los análisis demostraron que con la adición del IRGAMET 42 al medio corrosivo, reduce significativamente la velocidad de corrosión del metal, bloqueando las reacciones de oxidación y reducción, por la adsorción espontánea de las moléculas del inhibidor sobre la superficie del metal, obteniendo una eficiencia del 85.1%. EIS demostró que el aumento en la resistencia a la transferencia de carga es directamente proporcional a la concentración, obteniendo la mayor eficiencia a 75 ppm. El análisis termoquímico obedece a la isoterma de Langmuir indicando que la adsorción del IRGAMET 42 es mediante un proceso de quimisorción. Las técnicas de análisis de superficie demostraron que el inhibidor formó una película protectora sobre la superficie del acero, mostrando una rugosidad y un menor daño con la adición del inhibidor de corrosión.

ABSTRACT

The amino acid IRGAMET 42 inhibition behavior was studied for API 5LX52 steel in an acid medium (0.5 M H₂SO₄) at room temperature. The analyses showed that the addition of IRGAMET 42 to the corrosive medium, significantly reduces the corrosion rate of the metal, blocking the oxidation and reduction reactions due to the spontaneous adsorption of the inhibitor molecules on the metal surface, obtaining an efficiency of 85.1. %. EIS demonstrated that the increase in charge transfer resistance is directly proportional to the concentration, obtaining the highest efficiency at 75 ppm. The thermochemical analysis obeys the Langmuir isotherm indicating that the adsorption of IRGAMET 42 is through a chemisorption process. Surface analysis techniques demonstrated that the inhibitor formed a protective film on the surface of the steel, showing roughness and less damage with the addition of the corrosion inhibitor.

Introducción

En la actualidad los yacimientos de petróleo y gas que entran en su etapa de madurez son propensos a problemas ocasionados por corrosión con un mayor impacto en daños materiales, costos operativos, seguridad y ambientales (Costa et al., 2023). Esto se debe a que los yacimientos están expuestos a distintos contaminantes por periodos prolongados. A pesar de que existen materiales altamente resistentes a diferentes medios corrosivos como es el caso del acero API 5LX52, es necesario implementar métodos de protección para mitigar la corrosión y mejorar las actividades preventivas, evitando accidentes operativos debido a las pérdidas ocasionadas por corrosión (NACE International, 2023; Oil & Gas Journal, 2023).

El uso de H_2SO_4 desempeña un rol importante en la industria petrolera, debido a que, en las diferentes etapas de refinamiento del crudo, las tuberías de transporte y almacenamiento se encuentran expuestas a este medio agresivo. Etapas como la neutralización de alcalinidad, limpieza de pozos y la mejora de la calidad del crudo son las que se encuentran más afectadas, debido a un alto contenido de H_2SO_4 . El deterioro ocasionado por la presencia de este medio ha incrementado en los últimos años el interés de una búsqueda intensiva para encontrar las condiciones óptimas de prevención y control en los procesos de corrosión ocasionados por medios ácidos, buscando siempre la sustentabilidad y el cuidado al medio ambiente (Amin et al., 2007).

Uno de los métodos de prevención de corrosión más populares, económicos, eficientes y amigables con el medio ambiente, son los inhibidores de corrosión (IC), los cuales son sustancias químicas que se agregan en concentraciones muy pequeñas al medio agresivo, reduciendo la velocidad de corrosión de forma significativa (Ali y Al-Muhanna, 2020).

El uso de inhibidores orgánicos ha presentado buenas propiedades de inhibición, debido a que la mayoría de estos compuestos contienen electrones π y grupos funcionales como $-C=C-$, $-OR$, $-OH$, $-NR_2$ y $-SH$ y heteroátomos como P, S, O y N, que facilitan la adsorción de estos compuestos en la superficie del metal (Migahed y Mohamed, 2023).

Por lo que en el presente trabajo se llevó a cabo el estudio de inhibición de la molécula derivada de aminoácidos con forma molecular $C_{12}H_{18}N_4O_2$ (IRGAMET 42, figura 1) para el acero API 5LX52 en H_2SO_4 0.5 M.

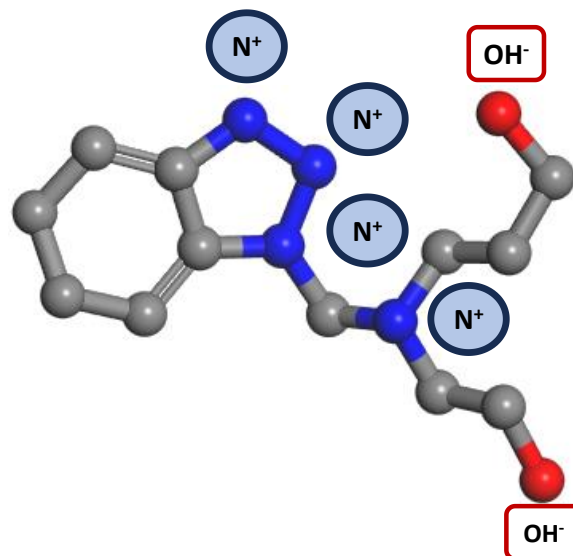


Figura 1. Estructura molecular IRGAMET 42.

Metodología

Mediciones electroquímicas

Las pruebas electroquímicas se llevaron a cabo en un Potenciostato/Galvanostato Autolab PGSTAT30, utilizando una celda convencional de tres electrodos. El sistema de celda consistió en un cilindro de acero API 5LX52 encapsulado en resina epoxi con un área de 0.541 cm^2 como electrodo de trabajo (WE), un electrodo de calomel saturado (SCE) como electrodo de referencia, el cual fue acoplado a un capilar de Luggin, con la finalidad de estar lo más próximo a la superficie del WE y una barra de grafito como contraelectrodo. Cada prueba se repitió por triplicado para garantizar la reproducibilidad.

Todas las pruebas electroquímicas se realizaron a la misma temperatura ($25^\circ \pm 0.1^\circ\text{C}$) utilizando soluciones frescas para cada prueba. Se obtuvieron curvas de polarización de Tafel en un rango de potencial de $\pm 250 \text{ mV}$ vs el potencial de circuito abierto (OCP) con una velocidad de barrido de 0.166 mV s^{-1} después de estabilizar el OCP (40min). La eficiencia del inhibidor ($\%EI_T$) derivada de la extrapolación de las pendientes de Tafel, se determinó mediante la siguiente expresión (About, et al., 2023):

$$\%EI_T = \frac{j_{corr\ blanco} - j_{corr\ inh}}{j_{corr\ blanco}} \times 100 \quad (1)$$

donde $j_{corr\ blanco}$ y $j_{corr\ inh}$ son la densidad de corriente de en ausencia y presencia del inhibidor, respectivamente.

Las mediciones de espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS) se llevaron a cabo en el rango de frecuencia de 100 kHz A 10 mHz con una amplitud de ± 10 mV de pico a pico utilizando una señal sinusoidal de perturbación de ± 0.01 V. Se determino el área de cobertura a partir de la siguiente expresión (El Caid, et al., 2024):

$$n(\%) = \frac{(R_{ct})^{-1} - (R_{ct(inh)})^{-1}}{(R_{ct})^{-1}} \times 100 \quad (2)$$

donde R_{ct} y R_{ctinh} son la resistencia a la transferencia de carga en presencia y ausencia del IRGAMET 42.

Análisis superficiales

El análisis superficial del acero API 5LX52 se obtuvo mediante técnicas de microscopía electrónica de barrido (MEB) y microscopía de fuerza atómica (AFM). El análisis se realizó después de un tiempo de inmersión (120 h) en 0.5 M H_2SO_4 con y sin inhibidor para ambas técnicas. Para las micrografías se utilizó un microscopio SEM JEOL JSM-6701F. El análisis elemental de los productos de corrosión formados en la superficie de la muestra del acero se determinó mediante energía de dispersión de rayos X (EDS) acoplado al MEB. Se obtuvieron imágenes de AFM para explorar el perfil de rugosidad de la superficie del acero estudiado en presencia y ausencia de inhibidor después de 120 h usando Multimode 8 AFM (Bruker) en modo tapping. Los parámetros de rugosidad de la superficie se obtuvieron mediante el software NanoScope analysis versión 1.5.

Simulación dinámica molecular

La simulación se realizó utilizando el software Material Studio 6.0 de Accelrys Inc., USA. Las estructuras se construyeron y optimizaron utilizando el módulo de cálculo DMOI3. La estructura y optimización ayuda a describir las interacciones entre molécula/sólidos, siendo de gran aporte para el estudio entre el metal/inhibidor, esto permite establecer un posible mecanismo del proceso de corrosión/inhibición. La simulación nos permitió visualizar el orbital de más alta energía (HOMO), así como el orbital molecular de más baja energía (LUMO).

Resultados y discusión

Mediciones electroquímicas

Las curvas de polarización de Tafel obtenidas en ausencia y presencia en diferentes concentraciones de IRGAMET 42 para el acero API 5L X52 en H_2SO_4 0.5 M a 25°C, son mostradas en la figura 2, donde se observa que en presencia del IC a bajas concentraciones de 5 ppm y 10 ppm la densidad de corriente aumenta ligeramente con respecto a la muestra en ausencia de IC (blanco), lo

cual puede ser atribuido, a que en concentraciones bajas del aminoácido los sulfatos presentes en el medio agresivo se anclan de manera natural sobre la superficie del metal, impidiendo el paso de las moléculas de IRGAMET 42 y promoviendo las reacciones de óxido/reducción. Por lo tanto, la velocidad de corrosión incrementa. Efecto contrario es observado a partir de concentraciones de 50 ppm, donde se observa una disminución en la densidad de corriente, dando paso a la formación de una película protectora sobre la superficie del metal, debido a que el mecanismo de disolución del metal en presencia del IRGAMET 42, fue modificado por la adsorción de moléculas de éste, bloqueando los sitios activos en el medio ácido, disminuyendo la velocidad de corrosión. Obteniendo el mayor grado de cobertura a 75 ppm.

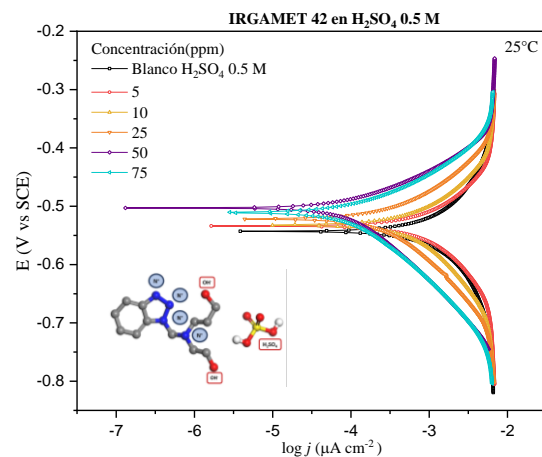


Figura 2. Curva de polarización del acero API 5L X52 en presencia de diferentes concentraciones de IRGAMET 42 en H_2SO_4 0.5 M.

Los valores obtenidos de la extrapolación de las pendientes de Tafel (Tabla 1), mostraron que la pendiente (β_c) disminuye con el incremento en la concentración del IRGAMET 42, los potenciales (E_{corr}) se desplazan hacia potenciales positivos. Sin embargo, el mayor desplazamiento se obtuvo de 38 mV. Estudios han reportado que, si el desplazamiento en el potencial es menor a 85 mV, se trata de un inhibidor de tipo mixto, es decir disminuye tanto la reacción anódica como catódica. Por lo que, se puede establecer que el IRGAMET 42 actúan como un inhibidor de tipo mixto, bloqueando reacciones de oxidación y reducción con tendencia a zonas anódicas. La adición del IRGAMET 42 en el medio ácido promueve la disminución tanto de la disolución del metal (parte anódica) como en la evolución del hidrógeno (parte catódica) mediante el bloqueo de sitios activos. La mayor eficiencia de inhibición se obtuvo a 75 ppm con un 85.1%, es evidente que la adición del IRGAMET 42 en H_2SO_4 0.5 M disminuye los procesos de corrosión, presentando un mayor efecto inhibitorio a partir de 25 ppm.

Tabla 1. Parámetros electroquímicos obtenidos de curvas de polarización potenciodinámicas del acero API 5L X52 en ausencia y presencia de diferentes concentraciones de IRGAMET 42 en H₂SO₄ 0.5 M.

C (ppm)	-β _c (mVdec-1)	-E _{corr} (mV/SCE)	j _{corr} (μA cm ⁻²)	EI _T (%)
Blanco	211	539	1.24E-03	-
5	150	534	1.14E-03	8.2
10	234	532	1.05E-03	15.2
25	151	522	6.55E-04	47.1
50	121	511	2.00E-04	83.5
75	123	501	1.84E-04	85.1

Los procesos que ocurren en la interfase API 5L X52/H₂SO₄ 0.5 M, en ausencia y presencia del aminoácido IRGAMET 42 fueron evaluados mediante la técnica de EIS. El diagrama de Nyquist, figura 3, muestra un comportamiento típico de un sistema de corrosión de un metal en medio ácido. En el diagrama se puede observar que a medida que se incrementa la concentración del IC, el diámetro del semicírculo incrementa. El diámetro está asociado al valor de la resistencia a la polarización (R_p), considerando que esta resistencia toma en cuenta la contribución de la R_{ct}, la resistencia de la película, entre otros fenómenos resistivos. El incremento en el diámetro es inversamente proporcional a la velocidad de corrosión, es decir, un incremento en su valor indica una disminución a la velocidad de corrosión (El Ibrahimy, 2022).

Los espectros de impedancia fueron ajustados mediante el software NOVA 2.1.5 con el circuito equivalente R_s(R_pCPE), mostrado en la figura 4, donde R_s es la resistencia de la solución, R_p es la resistencia a la polarización y CPE es el elemento de fase constante. Este elemento es definido como (Lazrak, et al., 2023):

$$Z_{CPE} = Q^{-1}(i\omega)^{-n} \quad (3)$$

donde Q es el coeficiente de proporcionalidad o admitancia, ω es la frecuencia angular en rads⁻¹, i es la unidad imaginaria, i²= -1, y n es el exponente del CPE, el cual permite conocer la heterogeneidad o rugosidad de la superficie. Dependiendo del valor de n, el CPE puede representar la resistencia (n = 0, Y₀ = R), la capacitancia (n = 1, Y₀ = C), la inductancia (n = -1, Y₀ = L) o la impedancia de Warburg (n = 0.5, Y₀ = W) (Branzoi et al, 2002).

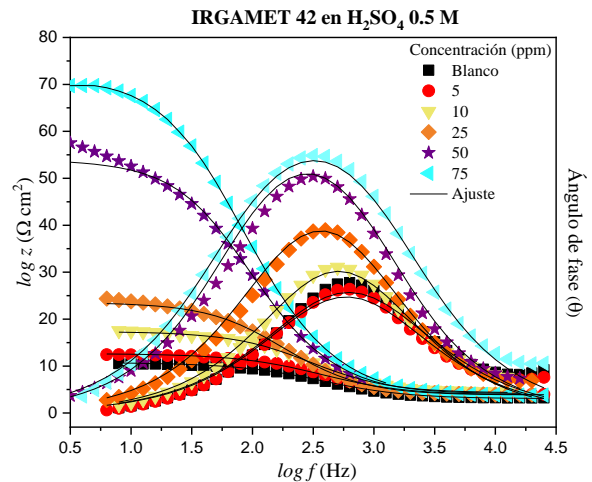
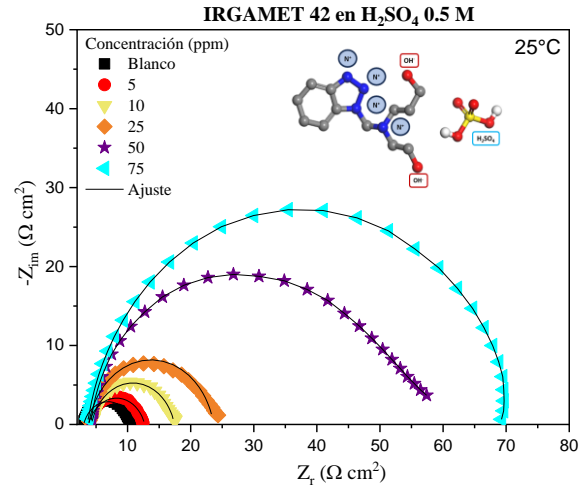


Figura 3. Diagrama de Nyquist y Bode (Fase y Ángulo) del acero API 5L X52 en presencia de diferentes concentraciones del inhibidor de corrosión API 5L X52 en H₂SO₄ 0.5 M.

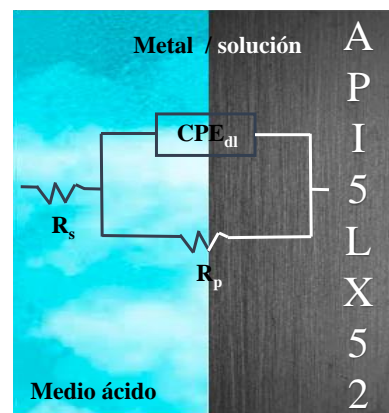


Figura 4. Circuito eléctrico equivalente.

Los parámetros cinéticos obtenidos del ajuste de los espectros de impedancia se muestran en la tabla 2. Para determinar el valor de la capacitancia asociada al semicírculo se consideró el parámetro de la admitancia (Q) debida al CPE con la capacitancia interfacial, y para su cálculo se consideró la ecuación, que establece la relación entre dichos parámetros, así como la eficiencia calculada a partir de la resistencia a la transferencia de carga de acuerdo con la siguiente ecuación (Singh, A., 2024):

$$C_{dl} = (Y_0 2\pi f_{max})^{n-1} \quad (4)$$

El espesor de la capa protectora, d, está relacionada con la C_{dc} , de acuerdo con la siguiente ecuación (Alamiery, A., 2021):

$$C_{dc} = \varepsilon \varepsilon_0 / d \quad (5)$$

donde ε es la constante dieléctrica de la capa protectora y ε_0 es la permitividad del espacio libre. La eficiencia de inhibición se calculó a partir de la siguiente ecuación (Boussalem, et al., 2023):

$$EI_{EIS}(\%) = \frac{R_p - R_p^0}{R_p} * 100 \quad (6)$$

donde R_p y R_p^0 es la resistencia de transferencia de carga en presencia y ausencia de inhibidor, respectivamente.

Se observa que a medida que se incrementa la concentración del IC los valores de R_p se incrementan. Los valores de n que indican el estado de la superficie puede caracterizar diferentes fenómenos como la heterogeneidad de la superficie resultante de la rugosidad de esta, la distribución de los sitios activos, la disolución de metal, presencia de impurezas, adsorción del inhibidor o formación de una capa porosa, representado varios valores. En la tabla 2 se puede observar que, para el caso del IRGAMET 42 el menor valor fue de $8.4 \Omega \text{ cm}^{-2}$, correspondiente a la solución en ausencia del IC (blanco) en presencia de $0.5 \text{ M H}_2\text{SO}_4$, este valor indica una alta densidad de corriente, por lo tanto, una velocidad de corrosión elevada, con una superficie no homogénea, resultante de un ataque uniforme y un mayor daño superficial, dando paso a la formación de productos de corrosión. La formación de esta capa de productos de corrosión crea una cierta resistencia a la transferencia de carga, no obstante, esta no inhibe de forma eficiente la corrosión del metal solo la disminuye. En presencia del IC, la R_p se incrementa obteniendo el mayor valor a $67.5 \Omega \text{ cm}^{-2}$ a 75 ppm, este valor indica que el inhibidor minimiza los procesos corrosivos. Para el valor del parámetro n se observa que incrementa con respecto a la concentración del IC, indicando una superficie menos rugosa y, por tanto, más homogénea, dando evidencia de la adsorción del IC sobre superficie.

Los valores de C_{dl} disminuyen con el incremento de la concentración; debido a la sustitución de moléculas de agua por moléculas de inhibidor en la capa de Helmholtz y un cambio en la constante dieléctrica (Boukamp, 1989), confirmando la eficiencia de inhibición. De este análisis puede deducirse que las moléculas de IC sustituyen a moléculas de agua para formar una capa de IC protectora sobre la superficie.

Tabla 2. Parámetros electroquímicos obtenidos por mediciones de EIS para el acero API 5L X52 en H_2SO_4 0.5 M.

C (ppm)	C_{dl} ($\mu \text{ cm}^{-2}$)	N	R_{tc} ($\Omega \text{ cm}^{-2}$)	EI_{EIS} (%)
Blanco	613	0.87	8.4	-
5	623	0.85	8.7	3.3
10	531	0.89	12.8	34.5
25	502	0.89	19.2	56.4
50	463	0.91	46.9	82.2
75	405	0.87	67.5	87.6

Análisis Superficiales

El estudio se realizó para la concentración que presento la mayor eficiencia de inhibición obtenida mediante las pruebas electroquímicas (75 ppm en $0.5 \text{ M H}_2\text{SO}_4$). Los análisis MEB fueron desarrollados a una amplificación de 1000X. En la figura 5a se muestra la micrografía de la superficie del acero API 5L X52 antes de la inmersión en el medio ácido. Se muestra que la superficie presenta una topografía uniforme y con líneas provocadas por el desbaste mecánico de lija grado 600. El EDS muestra los picos característicos del hierro.

En la figura 5b se observa la morfología del acero que fue expuesta al medio corrosivo de $0.5 \text{ M H}_2\text{SO}_4$ después de 120 h de inmersión en ausencia de inhibidor. La superficie muestra la formación de productos de corrosión y una superficie severamente dañada, con pérdida de su homogeneidad obedeciendo a el tipo de corrosión uniforme, confirmando la pérdida de masa de manera homogénea.

Los espectros de EDS muestran señales correspondientes al oxígeno y al azufre, característicos de los productos formados. Cuando se adiciona 75 ppm de IRGAMET 42 en H_2SO_4 0.5 M, figura 5c se observan dos zonas diferentes, una donde la superficie está menos dañada, y otra en la que se observa una superficie más dañada e incluso se observa la presencia de productos de corrosión, lo cual confirma que este compuesto inhibe el proceso de corrosión del acero API 5L X52 bajo las condiciones estudiadas.

Sin embargo y respaldado con las pruebas electroquímicas obtenidas, se obtuvo un 85.1% de eficiencia, demostrando que la película que forma el inhibidor es inestable y por ello en el análisis superficial se observan áreas con procesos de corrosión.

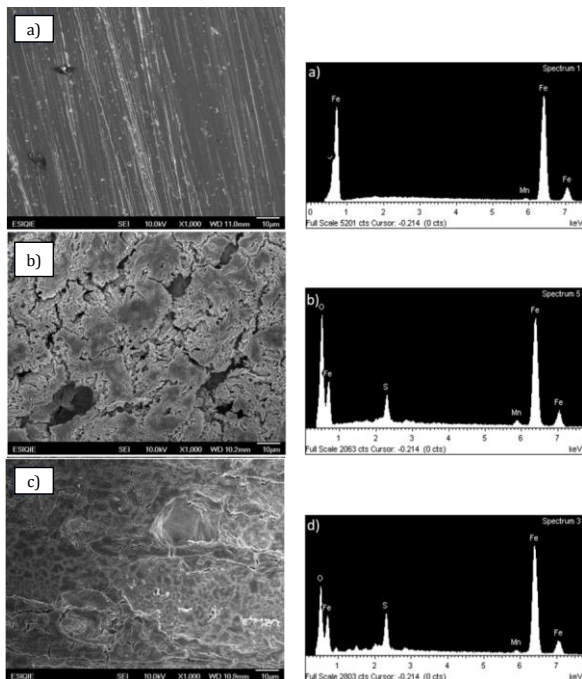


Figura 5. Micrográficas MEB y espectro EDS de **a)** acero API 5L X52 (desbaste 600), **b)** API 5L X52 + 0.5 M H₂SO₄ y **c)** API 5L X52 + IRGAMET 42 + H₂SO₄ 0.5 M.

La técnica de AFM en la figura 6 se observan las imágenes de alta resolución y tridimensionales obtenidas para los testigos metálicos del acero API 5L X52 en ausencia (H₂SO₄ 0.5 M) y presencia (75 ppm) a 25 °C. En la figura 6a presenta una topografía severamente corroída y con productos de corrosión, la presencia de valles y picos profundos indicando su alto grado de rugosidad. En la figura 6b en presencia del inhibidor se observan superficies más suaves y lisas con un menor daño. La adsorción del IRGAEMT 42 promueve una superficie más homogénea que en su ausencia debido a la formación de la película que actúa como barrera.

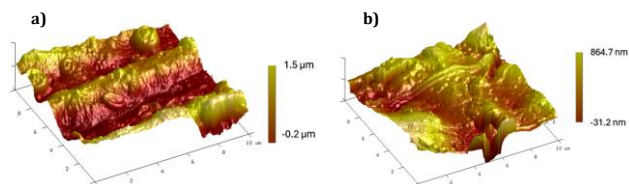


Figura 6. Imágenes de AFM del acero API 5L X52 en presencia y ausencia del IC, **a)** acero API 5L X52 en presencia de H₂SO₄ 0.5 M y **b)** 75 ppm de IRGAMET 42 + en H₂SO₄ 0.5 M, después de 120 h de inmersión.

Se calculó la rugosidad promedio (Ra) de la superficie del acero API 5L X52 en ausencia y presencia de IC. En ausencia del IRGAMET 42 es de 339 nm en H₂SO₄ 0.5 M, en tanto que en presencia es de 168 nm. Es decir, la rugosidad se reduce significativamente al adicionar el IC al medio agresivo. Este efecto se atribuye a la formación de la película del inhibidor adsorbido, pero también es evidente, que la película formada no fue homogénea quedando sitios sin recubrir por lo que en ellos se presentan procesos de corrosión.

Simulación dinámica molecular

El estado geométrico de los orbitales moleculares: HOMO (último orbital molecular ocupado) figura 7 a) y LUMO (primer orbital molecular virtual) figura 7 b) fueron determinados, así como los valores de sus energías E_{HOMO} y E_{LUMO}. Adicionalmente se calcularon los parámetros químicos: momento dipolar (μ), potencial de ionización (*I*) afinidad electrónica (*A*), dureza (η) y suavidad (σ) y se muestra en la tabla 3. Los valores de la E_{HOMO} para el IRGAMET 42 demostraron que el compuesto tiene la capacidad para donar electrones a la superficie metálica, mientras que los valores menores de E_{LUMO} indicaron que presenta una mayor facilidad de la molécula para aceptar electrones.

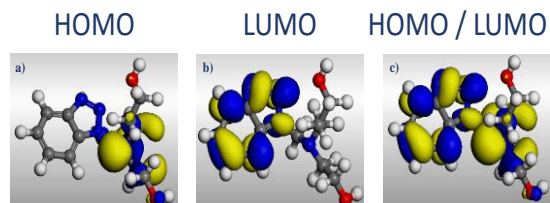


Figura 7. Estructura optimizada de IRGAMET 42, **a)** HOMO, **b)** LUMO y **c)** el total de las energías entradas para la molécula.

Tabla 3. Parámetros químicos cuánticos calculados para IRGAMET 42.

Parámetros	IRGAMET 42
E _{HOMO} (eV)	-0.1664
E _{LUMO} (eV)	-0.0479
Potencial de ionización, I (eV)	0.1664
Afinidad electrónica, A (eV)	0.0479
Dureza (η)	0.4765
Suavidad (σ)	2.098
ΔN	7.0396

Los valores menores obtenidos de ΔE demuestra que la molécula tendrá un buen desempeño como IC y la transferencia de electrones se dará de manera espontánea.

De los parámetros químicos obtenidos indicaron que es una molécula suave, por lo que puede ofrecer electrones más fácilmente que las moléculas duras. La fracción de electrones transferidos de la molécula a la superficie metálica (ΔN) se calcula por el método de Pearson.

La diferencia en las electronegatividades entre los dos sistemas (superficie metálica y molécula inhibidora) es responsable de la correspondiente transferencia de electrones, la eficiencia de inhibición aumenta con el incremento en la capacidad de donación de electrones de la molécula hacia la superficie del metal. La fracción transferencias de electrones a la superficie metálica se calcula mediante la siguiente ecuación (Rasul, et al., 2023):

$$\Delta N = \frac{I_{Fe} - I_{inh}}{2(\eta_{Fe} + \eta_{inh})} \quad (7)$$

donde I es la electronegatividad y η es la dureza. Para el Fe, los valores teóricos de I_{Fe} y η_{Fe} son de 7 eV y 0 eV, respectivamente. Los valores obtenidos de ΔN son positivos lo que indica que la molécula dona su electrón a la superficie de Fe, formando un enlace covalente. Por lo que, estos resultados proponen que el IRGAMET 42 puede presentar buenas eficiencias de inhibición.

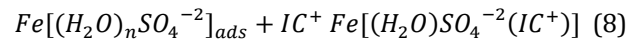
Mecanismo de inhibición

El proceso de inhibición a la corrosión en H_2SO_4 0.5 M da inicio después de la disolución de la película de óxidos/oxihidróxidos de hierro formada por la corrosión, los cambios en la densidad de corriente tienden a ser menores debido a la formación de productos de corrosión de tipo Fe_xO_y y $FeOOH$, los cuales dificultan la difusión de iones sulfatos a la superficie del acero, estos podrían interactuar con las moléculas de IRGAMET 42.

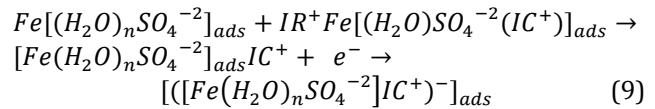
En una solución ácida, los aminoácidos existen predominantemente como especies protonadas para proporcionar especies catiónicas, atacando predominantemente a los átomos de nitrógeno. Estos cationes pueden adsorberse directamente en los sitios catódicos de la superficie del acero bajo carbono y disminuir la evolución de hidrógeno. Por otro lado, es probable que la adsorción en sitios anódicos tenga lugar a través de los electrones π y los pares libres de electrones libres presentes en los heteroátomos (azufre, nitrógeno y oxígeno) que minimizan la disolución anódica del acero dulce. Sin embargo, los restos del IRGAMET 42 adsorbidos aceptarán electrones de átomos de hierro y se neutralizarán.

Los átomos de nitrógeno se protonan fácilmente, por lo que pueden donar sus electrones no enlazantes a los orbitales d de los átomos de hierro de la superficie para formar enlaces coordinados.

Las posibles reacciones que se están llevando a cabo durante los procesos de adsorción en H_2SO_4 0.5 M se presentan a continuación:



Donde: $IC^+ = IRGAMET\ 42$



La adsorción del IRGAMET 42 se ve influenciada por su estructura electrónica, factores estéricos, aromaticidad y electrones donantes que favorecen sitios de unión con la superficie y la formación de complejos con iones metálicos dando paso a un recubrimiento superficial debido a un bloqueo geométrico de las moléculas inhibidoras del IRGAMET 42 en la superficie del acero.

El mecanismo de inhibición de propuesto para el aminoácido en estudio se muestra en la figura 8. En resumen, la adsorción del IRGAMET 42 en la superficie del acero al carbono es completa. El ajuste de isotermas de adsorción reportó una $\Delta G_{ads}^\circ = -32.7$ kJ mol⁻¹ indicando que hay procesos tanto de fisisorción como de quimisorción.

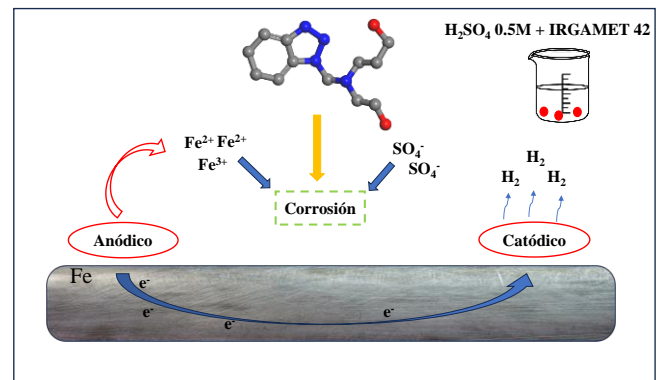


Figura 8. Representación esquemática del proceso de corrosión en 0.5 M H_2SO_4 + IRGAMET 42.

Conclusiones

En el presente estudio se evaluó las propiedades de inhibición de la molécula IRGAMET 42 derivada de aminoácidos para el acero API 5L X52 en H_2SO_4 0.5 M. Los resultados obtenidos mediante diferentes técnicas experimentales como pruebas electroquímicas y simulaciones de dinámica moléculas, permite concluir que:

Las pruebas electroquímicas de polarización de Tafel demostraron que la adición del IC en H_2SO_4 0.5 M reduce la velocidad de corrosión del acero API 5L X52.

Se logró una eficiencia de 85.1% (Tafel) y 87.6% (EIS) a 75 ppm, se observó que la E_{I_T} fue en función de la concentración. Mediante la técnica de EIS, se observó que, en medio ácido, el aumento en la transferencia de carga es directamente proporcional a la concentración del IRGAMET 42. El IRGAMET 42 actúa como inhibidor de tipo mixto y obedece a una isoterma de Langmuir en un proceso de quimisorción.

Los análisis superficiales MEB confirmaron la disminución en los daños por corrosión, en la superficie metálica en presencia del IRGAMET 42 en el medio corrosivo.

Las imágenes AFM presentan una topografía superficial severamente corroída con valles y picos profundos en ausencia de inhibidor, indicando un alto grado de rugosidad, en presencia del inhibidor se observa una superficie más suave y lisa con un menor daño.

El estado geométrico de los orbitales moleculares demostró que el IRGAMET 42 tiene la capacidad para donar y aceptar electrones a la superficie metálica.

Agradecimientos

Los autores del presente trabajo de investigación agradecen el apoyo económico proporcionado por la SIP-IPN, y las becas SNI, BEIFI y CONAHCYT.

Referencias

- Abbout, S., Hsissou, R., Louiza, O., Bourzami, R., Erramli, H., Chebabe, D., & Hajjaji, N. (2023). Anticorrosion propriety of new resin epoxy derived from phosphorus as inhibitor of steel corrosion in 0.5 M H₂SO₄. *Journal of Molecular Structure*, 1294, 136491.
- Alamiery, A. (2021). Corrosion inhibition effect of 2-N-phenylamino-5-(3-phenyl-3-oxo-1-propyl)-1,3,4-oxadiazole on mild steel in 1 M hydrochloric acid medium: Insight from gravimetric and DFT investigations. *Materials Science for Energy Technologies*, 4, 398–406.
- Ali, F., & Al-Muhanna, M. A. (2020). Corrosion Inhibitors for Oil and Gas Industry: A Review. *Journal of Bio- and Tribo-Corrosion*, 6(1), 1-24.
- Amin, M. A., Abd El-Rehim, S. S., El-Sherbini, E. E. F., & Bayoumi, R. S. (2007). The inhibition of low carbon steel corrosion in hydrochloric acid solutions by succinic acid: Part I. Weight loss, polarization, EIS, PZC, EDX and SEM studies. *Electrochimica Acta*, 52(11), 3588-3600.
- Boussalem, O., El Bouazzaoui, Y., Habsaoui, A., El Amri, A., Mhanni, D., Doumane, G., & Touhami, M. E. (2023). The study of the methanolic extract of "Pelargonium graveolens" as a green corrosion inhibitor of mild steel in H₂SO₄ 0.5 M. *Chemical Data Collections*, 48, 101084.

Branzoi, V., Branzoi, F., & Golgovici, F. (2002). A comparative electrodisolution and localized corrosion study of pure aluminium in acidic solutions with different aggressive anions and organic inhibitors. *Revue Roumaine de Chimie*, 47(1/2), 131-138.

Costa, E. M., Dedavid, B. A., Santos, C. A., Lopes, N. F., Fraccaro, C., Pagartanidis, T., & Lovatto, L. P. (2023). Crevice corrosion on stainless steels in oil and gas industry: A review of techniques for evaluation, critical environmental factors and dissolved oxygen. *Engineering Failure Analysis*, 144, 106955.

El Caid, Z. A., Left, D. B., & Zertoubi, M. (2024). An exploratory assessment supported by experimental and modeling approaches for dinitrophenylhydrazine compound as a potent corrosion inhibitor for carbon steel in sulfuric acid solution. *Journal of Molecular Structure*, 1300, 137218.

El Ibrahim, B. (2022). Corrosion inhibitors for oil and gas systems. In *Eco-Friendly Corrosion Inhibitors*. Elsevier, 111–126.

Lazrak, J., Ech-chihbi, E., Salim, R., Saffaj, T., Rais, Z., & Taleb, M. (2023). Insight into the corrosion inhibition mechanism and adsorption behavior of aldehyde derivatives for mild steel in 1.0 M HCl and 0.5 M H₂SO₄. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 664, 131148.

Migahed, M. A., & Mohamed, A. A. (2023). Recent Advances in Organic Corrosion Inhibitors for Acidic Media: A Review. *Journal of Molecular Liquids*, 373, 119634.

NACE International (14 de febrero de 2023). Cost of Corrosion Study. <http://impact.nace.org/economic-impact.aspx>

Oil & Gas Journal (14 de febrero de 2023). Corrosion Management in Oil and Gas Production. <https://www.ogj.com/>

Rasul, H. H., Mamad, D. M., Azeez, Y. H., Omer, R. A., & Omer, K. A. (2023). Theoretical investigation on corrosion inhibition efficiency of some amino acid compounds. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1225, 114177.

Singh, A. K. (2024). Understanding of corrosion inhibition behavior of expired isoniazid modified benzothiazole 2-carboxaldehyde at mild steel/H₂SO₄ 0.5 M interface. *Materials Chemistry and Physics*, 129323.