

## Оценка применимости экстракта из отходов производства кокосового волокна в качестве ингибитора коррозии стальной арматуры в бетоне

© Као<sup>1\*</sup> Ньят Линь, Шевцов<sup>2</sup> Дмитрий Сергеевич, Нгуен<sup>1</sup> Ван Чи, Нонг<sup>1</sup> Куок Куанг, Мачнев<sup>2</sup> Дмитрий Александрович, Зарцын<sup>2</sup> Илья Давидович, Козадеров<sup>2</sup> Олег Александрович, Зяблов<sup>2</sup> Александр Николаевич

<sup>1</sup> Приморское отделение. Совместный Российско-Вьетнамский тропический научно-исследовательский и технологический центр. Нгуен Тхьен Тхуат, 30. г. Нячанг, Кхань Хоа, 57127. Вьетнам. Тел.: +7 (486) 245-26-09. E-mail: cnlinh0812@gmail.com

<sup>2</sup> Воронежский государственный университет. пл. Университетская, 1. г. Воронеж, 394018. Воронежская область. Россия. E-mail: shevtsov@chem.vsu.ru

\*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** кокосовая пыль, ингибитор коррозии, стальная арматура, бетон, ИК-спектроскопия, квантово-химическое моделирование.

### Аннотация

Работа посвящена изучению оценки возможности применения экстракта из кокосовой пыли (отхода переработки кокосового волокна, который достигает 35% от массы обрабатываемой кокосовой скорлупы) в качестве ингибитора коррозии стальной арматуры в бетоне в условиях локальной активации под действием хлорид-ионов. Полученный водный экстракт анализировали с применением качественного химического анализа и ИК-Фурье спектроскопии. В результате установлено наличие флавоноидов, таннинов, полифенолов, сапонинов, алкалоидов, флорбатаннинов и антрахинонов в составе экстракта. Показано, что экстракты кокосовой пыли содержат атомы кислорода и азота в функциональных группах (O–H, N–H, C–O и т.д.) и ароматические кольца, что соответствует типичным ингибиторам коррозии. Проведено квантово-химическое моделирование структур катехина и апигенина, как основных компонентов экстракта, с помощью программного обеспечения Gaussian 16 в газовой и водной фазах. Опти-мизированные структуры были получены с использованием метода теории функционала плотности на базовом наборе B3LYP/6-311G++(d,p). 3D-изображения нейтральных форм катехина и апигенина показывают концентрацию электронной плотности НОМО и LUMO на одном ароматическом кольце. Катехин со значением  $E_{НОМО}$  - 6.006 эВ и апигенин со значением  $E_{НОМО}$  -6.323 эВ рассматриваются как молекулы-доноры электронов для незанятых *d*-орбиталей атомов железа. Небольшие значения энергетического зазора связаны с высокой адсорбцией молекул экстракта на границе раздела раствор/углеродистая сталь. Результаты расчетов позволяют предполагать наличие ингибирующего действия по отношению к коррозии, в том числе стальной арматуры в бетоне в присутствии хлоридов.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Као Ньят Линь, Шевцов Д.С., Нгуен Ван Чи, Нонг Куок Куанг, Мачнев Д.А., Зарцын И.Д., Козадеров О.А., Зяблов А.Н. Оценка применимости экстракта из отходов производства кокосового волокна в качестве ингибитора коррозии стальной арматуры в бетоне. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.72. №11. С.30-35. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-72-11-30

или

Cao Nhat Linh, Dmitry S. Shevtsov, Nguyen Van Chi, Nong Quoc Quang, Dmitry A. Machnev, Ilya D. Zartsyn, Oleg A. Kozaderev, Alexander N. Zyablov. Evaluation of the applicability of an extract from the waste during coconut fiber processing as a corrosion inhibitor of steel reinforcement in concrete. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.72. No.11. P.30-35. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-72-11-30. (Russian)