**عنوان:**

**مهار خوردگی آهن با برخی از ترکیبات برگهای گیاه مورینگا اولیفرا در محیط اسیدی: مطالعه نظری**

**چکیده**

در این کار تحقیقاتی کارائی چهار ترکیب قابل استخراج از گیاه دارویی مورینگا اولیفرا بعنوان بازدارنده خوردگی از فلز آهن با روش شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی شده است. گیاه مورینگا اولیفرا در منطقه بلوچستان به وفور یافت می شود. انتخاب ترکیبات بر اساس میزان فروانی و ویژگیهای ساختاری بوده است. شبیه سازی ها در بهترین حالت از تنظیمات انجام شده است. نشان داده شده است که هر چهار ترکیب قادر به جذب شیمیای بر سطح فلز آهن هستند و دارای انرژی های برهم کنش مناسب می باشند. از میان چهار ترکیب انتخابی ترکیب آ بهترین مهار کننده بود. این مطالعه مقدمه ای بر انجام کارهای تجربی و استفاده صنعتی از این گیاه باشد.