

## **Предсказание антикоррозионных свойств и моделирование новых ингибиторов на основе существующих различных органических соединений по отношению к низкоуглеродистой стали в среде 1 М соляной кислоты**

© Трякин Фёдор Сергеевич<sup>1</sup> и Пурыгин Пётр Петрович<sup>2+\*</sup>

<sup>1</sup> Кафедра безопасности перевозок пассажиров и грузов. Самарский государственный университет путей сообщения. Ул. 1-й Безьямный пер., 18. г. Самара, 443066. Самарская область. Россия.

Тел.: (846) 999-01-62. E-mail: viper5232@gmail.com

<sup>2</sup> Кафедра органической, биоорганической и медицинской химии. Самарский государственный университет. Ул. Академика Павлова, 1. г. Самара, 443011. Самарская область. Россия.

Тел.: (846) 334-54-59. E-mail: puruginpp2002@mail.ru

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** ингибиторы коррозии, низкоуглеродистая сталь, 1 М соляная кислота, метод DFT, корреляция, сплайн-аппроксимация.

### **Аннотация**

В рамках данной работы проведена выборка различных органических ингибиторов коррозии из литературных источников [1-28] с целью классификации по структуре и составления базы численных значений антикоррозионных эффективностей (E). Для каждого из выбранных соединений методом DFT B88-LYP в базисном наборе 6-31G(d, p) (GGA) (программный пакет *Cache Work System Pro 7.52*) определены численные значения поляризуемости ( $\alpha$ ). Полученные данные систематизированы по принадлежности изучаемых органических соединений к определённым классам. Далее с использованием математических методов были определены аналитические формы корреляционных уравнений и систем уравнений, описывающих сплайн-аппроксимации типа « $\alpha$  (ось X) – E (ось Y)».