

**Матофонов Владимир Витальевич,**  
магистрант, Ангарский государственный технический университет,  
e-mail: Matofonov.vova@mail.ru

**Ковалюк Елена Николаевна,**  
к.х.н., доцент, Ангарский государственный технический университет,  
e-mail: ken.agta@mail.ru

## **МЕТОДЫ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО РАСЧЕТА ДЕСКРИПТОРОВ ИНГИБИТОРОВ**

**Matofonov V.V., Kovalyuk E.N.**

## **METHODS OF QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION OF INHIBITOR DESCRIPTORS**

**Аннотация.** Рассмотрены методы квантово-химического расчета, сравнение их преимуществ и недостатков, оптимальные объекты для расчета.

**Ключевые слова:** квантовая химия, ингибиторы коррозии, структура молекулы, дескрипторы.

**Abstract..** Methods of quantum-chemical calculation, comparison of their advantages and disadvantages, optimal objects for calculation are considered.

**Keywords:** quantum chemistry, corrosion inhibitors, molecular structure, descriptors.

Ингибиторы коррозии используют для защиты металлического оборудования, находящегося в замкнутом объеме коррозионной среды.

Опубликован ряд работ (в рамках кратких тезисов их невозможно перечислить), в которых авторы привлекают метод корреляционного анализа для поиска взаимосвязи между ингибирующим действием органических веществ и дескрипторами их молекул. Однако существующие в настоящее время представления о влиянии структуры на защитные свойства органических ингибиторов относятся лишь к отдельным классам соединений и не в полной мере объясняют все аспекты ингибирования [2].

Теория и методы квантовой химии дают возможность продвигаться к более точным решениям и интерпретировать их в понятиях, близких к понятиям классической теории химического строения. В результате этого появляется возможность построения корреляций между рассчитанными характеристиками и экспериментальными данными [3].

Краткая характеристика методов квантово-химического расчета *CNDO*: расчет практически любых органических соединений, состоящих из атомов органогенов (С, Н, N, О); удовлетворительный расчет электронного распределения, дипольных моментов, геометрии молекулы, неудовлетворительно оцениваются теплоты образования, потенциалы ионизации, спиновая плотность [1].

*INDO*: расчет больших молекул с неспаренными электронами, в том числе в возбужденном состоянии, тех же дескрипторов, что для метода *CNDO*, включая спиновую плотность; к недостаткам можно отнести отсутствие термодинамиче-

ской параметризации и низкую точность при расчете энергетических характеристик (кроме спиновой плотности).

*MINDO/3*: рассчитывает карбкатионы, полинитросоединения, силаны; удовлетворительный расчет большинства стандартных характеристик молекул; расчет водородных связей неудовлетворителен, стабильность трехцентровых связей переоценивается, стабильность ароматических соединений, а также отталкивание неподелённых электронных пар недооценивается. Значения валентных углов завышены на 6-8 градусов.

*MNDO*: рассчитывает фосфор- и борсодержащие молекулы; устранены недостатки метода *MINDO/3* (кроме неудовлетворительного расчета водородных связей); результаты расчета карбкатионов и полинитросоединений хуже, чем в методе *MINDO/3*; расчет водородных связей неудовлетворителен; отталкивание между атомами на больших расстояниях переоценивается, энергия трехцентровых связей недооценивается; можно отметить неудовлетворительные результаты расчета барьеров внутреннего вращения.

*AM1, PM3*: расчет органических молекул, содержащих элементы из главных подгрупп 1 и 2 групп периодической системы, в том числе систем с водородными связями, позже для других групп элементов, в частности – и для переходных металлов; устранены основные недостатки метода *MNDO*; методы позволяют получить энтальпию образования вещества в идеально-газовом состоянии; результаты расчета фосфор- и борсодержащих молекул хуже, чем в методе *MNDO*, карбкатионы и полинитросоединения рассчитываются хуже, чем в методе *MINDO/3* [1].

В заключение можно сделать вывод, что выбор метода расчёта определяется принадлежностью изучаемых соединений к тому или иному классу органических веществ и требуемой точностью расчета. Полученные корреляции между эффективностью ингибиторов и дескрипторами их молекул помогут научно обоснованно подходить к выбору перспективных ингибиторов коррозии, сократить затраты на синтез и проведение коррозионных исследований.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Квантово-механические расчеты молекул с использованием программного комплекса GAUSSIAN [Электронный ресурс] / Библиофонд: [сайт]. URL: <https://www.bibliofond.ru/view.aspx?id=584773>.

2. Кларк Т. Компьютерная химия: Практическое руководство по расчетам структуры и энергии молекулы / Т. Кларк; Перевод с англ. А.А. Коркина; Под ред. В.С. Мاستрюкова, Ю.Н. Панченко. М.: Мир. 1990. 381 с.

3. Практические аспекты прикладной квантовой химии [Электронный ресурс] / Студми. Учебные материалы для студентов: [сайт]. URL: [https://studme.org/273105/matematika\\_himiya\\_fizik/prakticheskie\\_aspekty\\_prikladnoy\\_kvantovoy\\_himii](https://studme.org/273105/matematika_himiya_fizik/prakticheskie_aspekty_prikladnoy_kvantovoy_himii).