

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ И ОБЩАЯ БИОЛОГИЯ / PHYSICAL-CHEMICAL AND GENERAL BIOLOGY

Оригинальная статья / Original article

УДК 627.257:621.3.035.221.727:621.315.617.1

DOI: 10.21285/2227-2925-2017-7-2-60-74

КОМПЛЕКСОНЫ В МИССИИ ИНГИБИРОВАНИЯ МИКРОБИОЛОГИЧЕСКОЙ КОРРОЗИИ С СОДЕРЖАНИЕМ *DESULFOVIBRIO DESULFURICANS*

© А. А. Сикачина*, С.М. Белоглазов*, Л.К. Ягунова**

*Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Российская Федерация, 239000, г. Калининград, ул. Университетская, 2.

**Калининградский государственный технический университет, Российская Федерация, 239000, г. Калининград, ул. Герцена, 5.

В статье описан процесс адсорбции органических азотсодержащих и фосфорсодержащих соединений на атомах железа, имеющегося в стали Ст3 в количестве 97%. Процесс адсорбции смоделирован при помощи квантовохимического пакета HyperChem 8.0.7 с использованием полуэмпирического метода ZINDO/1 и 2 методов молекулярной механики для оптимизации геометрии. Было обнаружено, что такой подход с высокой точностью отражает процесс защиты стали от коррозии с микробиологическим контентом посредством хемосорбции органического соединения на поверхности металла с образованием комплексного аддукта. В процессе исследования были получены и проанализированы: заряды на гетероатомах, плотность заряда (усредненного на 1 атом железа), состав получившихся соединений, а также энергетические диаграммы при образовании адсорбционного комплекса-аддукта на основе исследуемой молекулы.

Ключевые слова: микробиологическая коррозия, хемосорбция, адсорбция, квантовохимические дескрипторы, плотность заряда, сульфатредуцирующие бактерии.

Формат цитирования: Сикачина А.А., Белоглазов С.М., Ягунова Л.К. Комплексоны в миссии ингибирования микробиологической коррозии с содержанием *desulfovibrio desulfuricans* // Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология. 2017. Т. 7, N 2. С. 60–74. DOI: 10.21285/2227-2925-2017-7-2-60-74

CHELATORS INVOLVED IN INHIBITING MICROBIOLOGICAL CORROSION WITH *DESULFOVIBRIO DESULFURICANS*

© А.А. Sikachina*, S.M. Beloglazov*, L.K. Yagunova**

*Immanuel Kant Baltic Federal University, 2, Universitetskaya St., Kaliningrad, 239000, Russian Federation

**Kaliningrad State Technical University 5, Gertsen St., Kaliningrad, 239000, Russian Federation

The process of adsorption of organic nitrogen-containing and phosphorus-containing compounds into iron atoms, which amounts to 97% in St3 steel, is described. The adsorption process was modelled using the HyperChem 8.0.7 quantum chemical package using the semi-empirical ZINDO / 1 and two molecular mechanics methods to optimise the geometry. It was found that this approach accurately reflects the process of protecting steel from corrosion with microbiological content by chemisorption of an organic compound on the metal surface to form a complex ad-duct. In the course of the study, charges were obtained and analysed according to heteroatoms, the charge density (averaged per iron atom), the composition of the resulting compounds and energy diagrams of the adsorption complex-adduct formation on the basis of the studied molecule.

Keywords: microbiological corrosion, chemisorption, adsorption, quantum chemical descriptors, charge density, sulfate-reducing bacteria

For citation: Sikachina A.A., Beloglazov S.M., Yagunova L.K. The complexones in mission of inhibiting of microbiological corrosion with *desulfovibrio desulfuricans*. *Izvestiya Vuzov. Prikladnaya Khimiya i Bio-*

Список принятых авторами сокращений:

СРБ	сульфатредуцирующие бактерии
К	скорость коррозии
ОС	органическое соединение
NP ОС	органическое соединение класса полиаминополифосфонаты
N ОС	органическое соединение класса полиаминополикарбонаты
N(ac):N (d)	отношение, показывающее баланс между количеством акцепторных и донорных групп исследуемых молекул
FF _{Δη}	функции Фукуи, вычисленные по жесткости молекул
O ^h	атом кислорода гидроксигруппы
O ^k	атом кислорода кетогруппы
O ^f	атом кислорода фосфорильной группы
Σq	величина суммарного заряда на конкретном гетероатоме, представляется как Σq = ₁ q + ₂ q
VЗМО	величина энергии высшей заполненной молекулярной орбитали
НСМО	величина энергии низшей свободной молекулярной орбитали
1 НСМО	величина энергии орбитали, следующей по энергии за НСМО
ω	величина глобальной электрофильности
ω ΣΔq	величина локальной электрофильности на конкретном гетероатоме
Feρ _q	величина эффективного заряда на атомах железа в пересчете на 1 атом железа («плотность заряда на атоме железа»)

ВВЕДЕНИЕ

Текущее состояние данных о комплексах (или хелатирующих агентах, или хелаторах), применяющихся в качестве ингибиторов коррозии стали очень среднее. В основном, соединения этого класса исследованы в качестве ингибиторов обычной электрохимической коррозии в системах охлаждения [1], системах горячего водоснабжения [2], в водных средах с неполярной присадкой [3] для очистки поверхности металлов и сплавов от коррозионных пленок [4], в концентрированных рассолах и умягченных водах [5], а также исследовано влияние катионов и анионов на проявление защитного антикоррозионного эффекта [6, 7]. Обширные исследования были проведены только для некоторых представителей хелаторов, таких как НЕМРА, АТМР, EDTA.

Ученые Института физической химии и электрохимии (ИФХЭ РАН, Москва), защитный эффект комплекса Zn²⁺-НЕМРА объясняют образованием смешанных плохо растворимых комплексных соединений Zn²⁺ и Fe³⁺ с НЕМРА и частичного осаждения Zn(OH)₂ на металлической поверхности. Zn²⁺-НЕМРА является ингибитором смешанного действия, тормозящим, в основном катодный процесс, кинетика которого очень мало зависит от наличия Cl⁻ [8]. Высока эффективность Zn²⁺-НЕМРА в миссии ингибирования коррозии многих видов сталей в водных растворах, а также алюминия и других цветнометаллических сплавов [1, 2, 8].

Не слишком много проведено исследова-

ний микробиологической коррозии металлов [1, 9]. Значительная часть исследований была проведена в Тамбовском государственном университете и Балтийском федеральном университете (Россия). Коррозия различных металлов в агрессивных кислых [10-16] и солевых [26] средах исследована большим количеством ученых по всему миру.

Многие органические соединения, которые выполняют миссию защиты от коррозии [10, 12, 16], были исследованы с помощью подхода «структура-свойство» с использованием коэффициента корреляции Пирсона [9, 10, 17, 18]. Хелаторы в качестве ингибиторов микробной коррозии, вызываемой сульфатредуцирующими бактериями, были впервые исследованы в [19]. Кроме того, авторами был смоделирован процесс адсорбции молекул хелаторов на железе; железо является основной частью стали. В прошлом проводилось моделирование по реакционной способности органических соединений, в частности, моделирование адсорбции на поверхности металла ОС, в котором поверхность металла описывалась гипотетическим кластером [20, 21]. Апробируемые авторами изменения метода кластерного моделирования отображают донорную емкость органического соединения в отношении железа стали, и, следовательно, возможно ввести понятие «плотности заряда на железе», т.е. доле электронной плотности, смещающейся с гетероатомов ОС, в пересчете на 1 атом железа [22].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Выбор системы микробиологической коррозии

В статье исследуется гетерогенная термодинамическая система закрытого типа «Ст3 / питательная среда Постгейт "В" + суспензия клеток СРБ» [21]. Образцы стали имели параметры 20x50x1 мм. Они были взяты из одной партии, что гарантировало авторам одинаковый химический состав [3].

Органические соединения – ингибиторы коррозии

В данном исследовании использовали

вещества, молекулы которых проявляют способность ингибировать микробиологическую коррозию в сильной зависимости не только от структуры молекулы, но и от pH [23]. При pH-зависимых структурных модификациях концентрация электронов в молекулах этих веществ не привносится и не удаляется, и для квантово-химических расчетов и оценок, основанных на них, были взяты классические формулы, выбранные по критерию равномерного симметричного усложнения структуры, почти идеально описывающие усредненную pH-зависимую структуру молекулы вещества (табл. 1).

Таблица 1
Исследуемые соединения и принятая (авторами) нумерация значимых гетероатомов

Table 1
Investigated compounds and established (by authors) numbering of significant heteroatoms

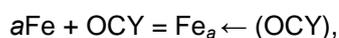
Аббревиатура ингибиторов	Структурная формула	Молекулярная масса
NTA		192,1
EDTA		293,3
ATMP		299,1
EDTMP		436,1

Защитный эффект от коррозии

Данные о скоростях коррозии, полученных стандартным методом гравиметрического анализа [9], были взяты из [19]. Согласно [20], исследуемые молекулы подобраны так, что образуют структурный ряд, поскольку очевидно последовательное усложнение структуры.

Технология квантово-химических расчетов

Определение проводилось при помощи HyperChem 8.0.7. Программно, методом подбора, задавалось предельные число атомов железа: такое число a , когда из $(a + b)$ заданных атомов железа несло нулевой заряд их число b , количество a атомов при этом входило в состав комплекса. Тогда принималось, что донорные возможности ОС исчерпывались. Уравнение электрофильной реакции



где атомы железа – акцепторы электронной плотности, заряженные отрицательно, являясь кислотами Льюиса.

Нахождение величин квантовохимических дескрипторов проводилось уровнем теории OPLS/PM3/ZINDO/1 [5, 18, 22]. Выбор полуэмпирического метода обусловлен в первую очередь его малоемкостью по отношению к ресурсам компьютера, а это важно, поскольку достигается большая мобильность метода, позволяющая тщательнее проследить за «поведением» вводимых усовершенствований в моделировании адсорбции. Плоскость нейтральных атомов железа, задаваемая первоначально, находилась на расстоянии 1,2 Å от плоскости ОС (двумерное пространство) с ожиданием, чтобы программа произвела меньше итераций при комбинировании атомов в трехмерном пространстве, что обеспечивает необходимую точность. Был учтен мезомерный эффект, проявляющийся в разных частях молекул исследуемых ОС. В работе контролировались следующие дескрипторы электронной структуры: заряды на гетероатомах (по Малликену) (q) будут вычислены в виде $\sum q$, т.е. заряды на одинаково расположенных атомах будут суммированы вследствие высокой степени симметричности исследуемых ОС, энергия граничных орбиталей, состав получившихся соединений типа $\text{Fe}_a \leftarrow (\text{OCY})$, где ОС выступает в роли лиганда. Исходя из данных .out файла будут вычислены следующие характеристики: плотность заряда на железе (на 1 атом Fe), глобальные и локальные электрофильности, рассмотрены структуры комплексов. По длине связи «Fe-гетероатом» будут учитываться в пределах 3,00 ангстрем. Данные по скорости

коррозии взяты из [19].

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Сгенерированные квантовохимически молекулярные параметры показаны в виде диаграмм (форма из [24]) на рис. 1–4.

Молекулы изолированных комплексонов – нуклеофильны. В качестве лигандов становятся электрофилами. Жесткость молекулы лиганда (особенно NP ОС) после адсорбции снижается, поэтому $\text{Fe}_a \leftarrow (\text{OCY})$ могут быть поляризуемыми, давая тенденцию к промотированию микробиологической коррозии, несмотря на то, что плотности заряда на железе достаточно высокие. Очевидно, что диаграммы производят впечатление одинакового механизма генерации железоккомплексов, поэтому можно предпологать, что критерий равномерного симметричного усложнения структуры не влияет на процесс адсорбции [22].

Во всех случаях ВЗМО возрастает по сравнению с исходным ОС, а НСМО и 1НСМО, величина энергетической щели – падает. Эффективных заряды (по Малликену) на частях ОСY продуктов реакции показаны в табл. 2.

Распределение весьма характерно, поскольку с гетероатомов происходит донирование электронной плотности на атомы железа (заряды становятся резко положительными). Очевидно, что атомы кислорода фосфорильных групп и кетогрупп обеднены электронами («центры адсорбции»), на остальных атомах исследуемых структур плотность заряда существенно снижена вплоть до нуля (атом азота и фосфора, также «центры адсорбции»). Менее всего это выражено на EDTMP в связи с наличием большого количества отрицательных зарядов. Донирование происходит как за счет их нативной электронной плотности, так и за счет ее перетока от других групп.

Величины ω и ρ_{Fe} NPOC показаны в табл. 3, а величины локальной электрофильности гетероатомов N ОС, [N (ac): N (d)], [(FF_{Δn})] – в табл. 4.

Величина a менее у N ОС, чем у NP ОС, поскольку в первом случае имеется меньше центров электро- и хемосорбции. Наблюдается прямая зависимость между составом железоккомплексов NP ОС и N ОС и величиной лиганда ОСY. ω из N ОС наиболее велика у NTA, а из NP ОС – у АТМР.

В общем случае донорные свойства, которые тем выше, чем ниже локальная электрофильность, являющиеся основополагающими в миссии ингибиторной защиты от коррозии и обратно пропорциональны значению [N (ac) : N (d)] и, видимо, как следствие этого, значению [(FF_{Δn})]. Следует отметить, что донорная активность

фосфорильных атомов кислорода (у NP OC) наиболее низка у АТМР, что может быть связано со стерическими препятствиями. Эта версия подтверждается сравнением N OC, где донорная активность кетогрупп на основании сравнения соответствующих локальных электрофильностей также достаточно одинакова, но стерические препятствия присутствуют и здесь, но судя по структурной формуле NTA, они должны проявляться менее интенсивно,

что и очевидно, поскольку NTA менее донорно активен, чем EDTA.

Особо следует сказать об атомах фосфора. Они сильно нуклеофильны, что связано с уменьшением величины электроотрицательности и большей их валентностью, а также что на них идет отток электронной плотности от атомов железа, ядра атомов железа в связи с этим в более сильной степени притягиваются атомами фосфора.

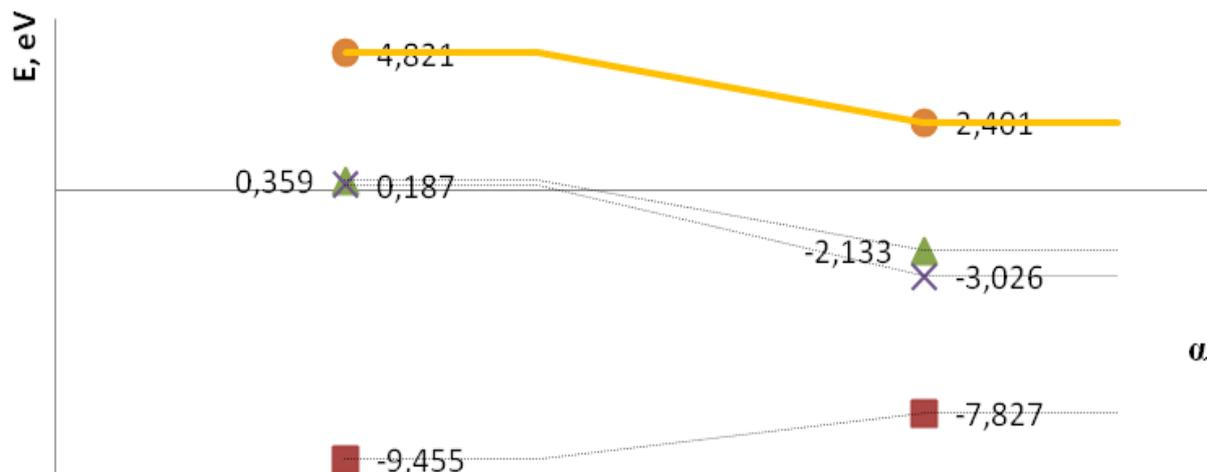


Рис. 1. Изменение энергий орбиталей при образовании адсорбционного комплекса (справа) из АТМР (слева): ■ – ВЗМО; × – НСМО; ▲ – 1НСМО; ● – жесткости молекулы

Fig. 1. Change of orbital energy and rigidity of a molecule when forming adsorptive complex (right) from ATMP (left)

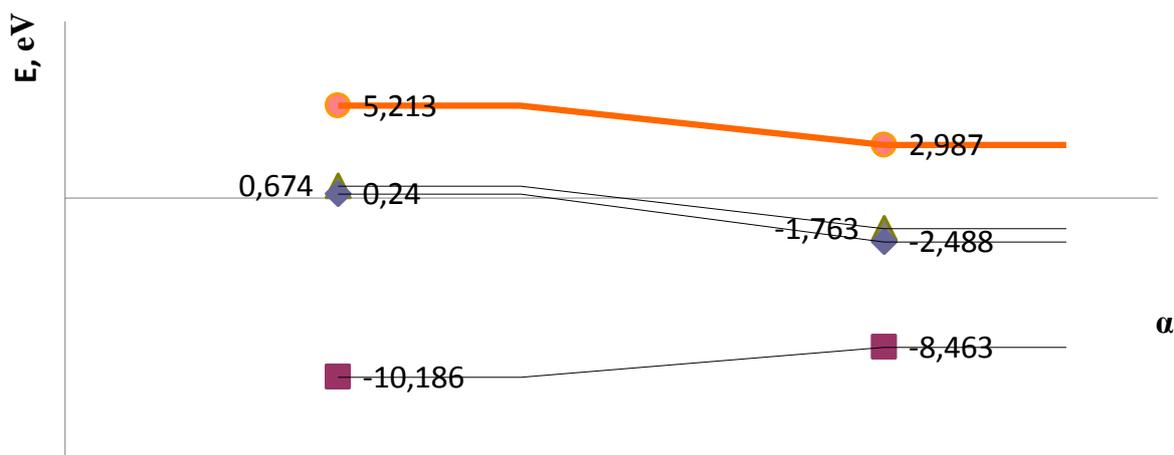


Рис. 2. Изменение энергий орбиталей при образовании адсорбционного комплекса (справа) из NTA (слева): ■ – ВЗМО; × – НСМО; ▲ – 1НСМО; ● – жесткости молекулы

Fig. 2. Change of orbital energy and rigidity of a molecule when forming adsorptive complex (right) from NTA (left)

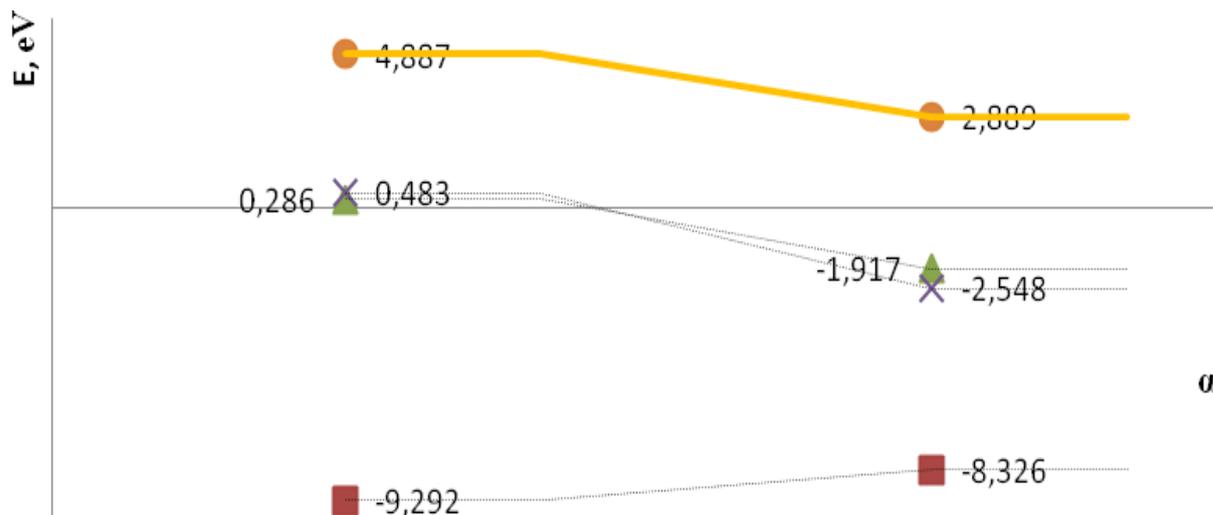


Рис. 3. Изменение энергий орбиталей при образовании адсорбционного комплекса (справа) из EDTMP (слева): ■ – ВЗМО; × – HСМО; ▲ – 1HСМО; ● – жесткости молекулы

Fig. 3. Change of orbital energy and rigidity of a molecule when forming adsorptive complex (right) from EDTMP (left)

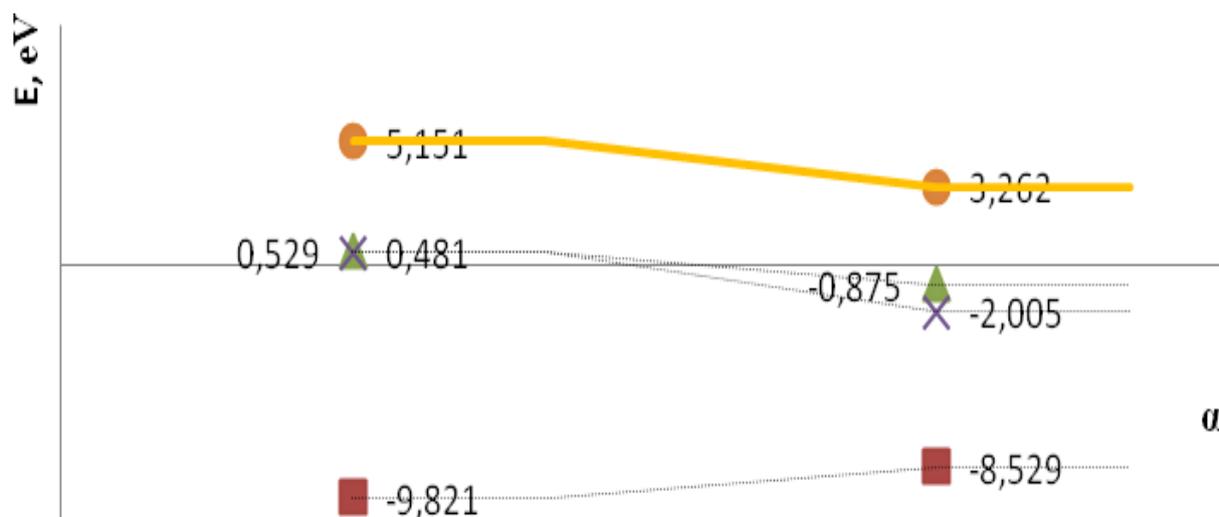


Рис. 4. Изменение энергий орбиталей при образовании адсорбционного комплекса (справа) из EDTA (слева): ■ – ВЗМО; × – HСМО; ▲ – 1HСМО; ● – жесткости молекулы

Fig. 4. Change of orbital energy and rigidity of a molecule when forming adsorptive complex (right) from EDTA (left)

Величина $\omega \sum \Delta q_r$ отрицательна, что связано, во-первых, с традиционно повышенными зарядами на атомах в интерпретации полуэмпирических методов, во-вторых, с хемосорбцией атома фосфора на отрицательно заряженной металлоповерхности, в результате чего на него переходит часть электронной плотности с этой поверхности. Это явление дает вклад в

увеличение плотности заряда на атоме железа, а также подтверждает точку зрения на возможность перехода электросорбции в хемосорбцию.

Величину $\omega \sum_f \Delta q_o$ можно связать также с величиной молярной массы.

Для всех проанализированных случаев было выявлено, что атомы железа не принад-

Таблица 2

Иллюстрация изменения зарядов в различных состояниях комплексонов

Table 2

Charge change in different states of chelators

Аббревиатуры комплексонов	$\Sigma_g \Delta q_O$	$\Sigma_{f/k} \Delta q_O$	$\Sigma \Delta q_N$	$\Sigma \Delta q_P$
Распределение зарядов в исходных молекулах				
ATMP	-4,139	-2,649	0,023	6,311
NTA	-0,864	-1,157	-0,042	–
EDTMP	-5,520	-3,573	-0,046	8,392
EDTA	-1,213	-1,552	-0,108	–
Распределение зарядов в лигандах – конечных состояниях исходных молекул				
ATMP	-0,916	-0,313	-0,033	2,276
NTA	-0,288	-0,170	0,041	–
EDTMP	-1,101	-0,380	0,024	3,166
EDTA	-0,522	-0,237	0,015	–

Таблица 3

Величины электрофильности, плотности заряда, приходящейся на атом железа, составы образовавшихся железокомплексов полиаминополифосфонатов

Table 3

Electrophilicity, charge density per iron atom, composition of polyamine polyphosphonates – iron complexes

Аббревиатуры комплексонов	$Fe\rho_q$	ω	Составы комплексных соединений, число <i>a</i>
ATMP	-0,342	1,113	14
NTA	-0,285	1,185	14
EDTMP	-0,372	0,992	20
EDTA	-0,335	1,059	19

Таблица 4

Величины локальной электрофильности гетероатомов полиаминополифосфонатов*

Table 4

Local electrophilicity of heteroatoms of polyamine polyphosphonates

Аббревиатуры комплексонов	$\omega \Sigma \Delta q_N (\omega \Delta q_N)$	$\omega \Sigma_h \Delta q_O (\omega_h \Delta q_O)$	$\omega \Sigma \Delta q_P (\omega \Delta q_P)$	$[N(ac):N(d)] / [(FF_{\Delta n})]$	$\omega \Sigma_{f/k} \Delta q_O (\omega_{f/k} \Delta q_O)$
ATMP	-0,062 (-0,062)	3,591 (0,598)	-4,492 (-1,497)	[3]/ [-2.44]	2,601 (0,867)
NTA	0,098 (0,098)	0,659 (0,220)	–	[3] / [-2.23]	1,171 (0,390)
EDTMP	0,069 (0,034)	4,332 (0,541)	-5,182 (-1,295)	[2]/ [-1.98]	3,175 (0,794)
EDTA	0,129 (0,064)	0,731 (0,183)	–	[2]/ [-1,89]	1,392 (0,348)

*В скобках показан пересчет величин локальной электрофильности на 1 атом или группу в целях достоверного сравнения

Таблица 5

Характеристика связей в соединении Fe₁₄NTA

Table 5

Characteristic of bonds in Fe₁₄NTA

Заряд конкретного атома железа	Наименование связей с гетероатомами	Длина квантовохимически вычисленных связей, А	Заряд конкретного атома железа	Наименование связей с гетероатомами	Длина квантовохимически вычисленных связей, А
-0,478	Fe- ₉ O ^h	2,30	-0,219	Fe- ₇ O ^h	2,65
	Fe-N	2,23		Fe- ₈ O ^k	2,21
	Fe- ₇ O ^h	2,33			
-0,175	Fe- ₄ O ^h	2,65	-0,426	Fe- ₁₀ O ^k	2,51
	Fe- ₃ O ^k	2,38		Fe- ₇ O ^h	2,68
				Fe- ₈ O ^k	2,42
-0,172	Fe- ₄ O ^h	2,54	-0,194	Fe- ₉ O ^h	2,78
	Fe- ₃ O ^k	2,43		Fe- ₁₀ O ^k	2,27
-0,231	Fe- ₃ O ^k	2,41	-0,247	Fe- ₁₀ O ^k	2,30
-0,278	Fe- ₃ O ^k	2,41	-0,198	Fe- ₉ O ^h	2,41
				Fe- ₁₀ O ^k	2,41
-0,253	Fe- ₇ O ^h	2,43	-0,386	Fe- ₄ O ^h	2,41
				Fe-N	2,33
-0,268	Fe- ₈ O ^k	2,25	-0,461	Fe- ₄ O ^h	2,37
				Fe- ₉ O ^h	2,39
				Fe-N	2,76

лежат в целом той или иной рассматриваемой молекуле, а в значительной степени локализованы силами донорно-акцепторного взаимодействия у частей этой молекулы.

Для NTA структура железокомплекса представлена в табл. 5 (здесь и далее нумерация по табл. 1).

В структуре NTA как N OC очевидно, что атомы железа по отношению к гетероатомам несут координационное число в диапазоне величин I...III. Во многих случаях, чем выше заряд на атоме железа, тем величина координационного числа выше. Наиболее высокие координационные числа наблюдаются у атомов железа с Q(Fe) ≥ -0.4. Наиболее короткие связи – это Fe-O^k и Fe-N (порядка 2,2...2,4 А), наиболее длинные – Fe-O^h (порядка 2,5...2,7А). Дентатность по гидроксильным атомам кислорода равна IV, по атомам кислорода кетогрупп – III...IV, по атому азота – III.

Для АТМР структура железокомплекса представлена в табл. 6.

В структуре АТМР как NP OC очевидно, что атомы железа по отношению к гетероатомам имеют координационное число в диапазоне величин II...VII. Наиболее высокие координационные числа наблюдаются у атомов железа с Q(Fe) = -0.4...-0,5. Пропорциональность зависимости заряда на атоме железа от проявляемой этим атомом валентности наблюдается достаточно нечетко (например,

Fe-5 и Fe-6). Наиболее короткие связи – Fe-O (порядка 2,2...2,5 А), наиболее длинные — Fe-O^h (порядка 2,3...2,9А) и Fe-P (порядка 2,7...3,0 А). В общем случае, связи тем длиннее, чем больше выражена степень их ионности. Дентатность по атомам фосфора равна IV...VI, по гидроксильным атомам кислорода – III...V, по атомам кислорода фосфорильных групп – II...IV, по атому азота – IV.

Для EDTA структура железокомплекса представлена в табл. 7.

Четко не наблюдается показанной ранее зависимости – чем выше заряд на атоме железа, тем выше и величина координационного числа. В структуре EDTA атомы железа по отношению к гетероатомам несут координационное число в диапазоне величин I...IV. Наиболее высокие координационные числа наблюдаются у атомов железа: с Q(Fe) = -0.4...-0,5

Не представляется возможным выделить наиболее короткие связи: это Fe-O^k (порядка 2,2...2,4 А) и Fe-O^h (порядка 2,2...2,5А), за исключением таковых с Fe-10 (2,99) и Fe-15 (2,70) наиболее длинные – Fe-N (порядка 2,2...2,9 А). Дентатность по гидроксильным атомам кислорода равна I...V, по атомам кислорода кетогрупп – III...V, по атомам азота – VII. Все это объясняется простым усложнением молекул.

Для EDTMP структура железокомплекса представлена в табл. 8.

Комплексоны в миссии ингибирования микробиологической коррозии...

В структуре EDTMP как NP ОС, очевидно, что атомы железа по отношению к гетероатомам несут координационное число в диапазоне величин I...VI. Наиболее высокие координационные числа наблюдаются у атомов железа с $Q(Fe) = -0.5...-0,6$. Наиболее короткие связи – это Fe-O^f (порядка 2,2...2,4 А) и Fe-P (порядка 2,7...2,9 А). Промежуточными по длине можно назвать Fe-O^h (порядка 2,2...2,4А), кроме Fe-4

(2,8 А), Fe-17 и Fe-19 (2,9 А), Fe-O^h (2,6 А). Наличие связи с атомом фосфора является малозначимым в генерировании заряда на атоме железа (поэтому электронная плотность на железе у EDTMP не намного выше, нежели у EDTA). Дентатность по атомам фосфора равна II...V, по гидроксильным атомам кислорода – I...V, по атомам кислорода фосфорильных групп – I...IV, по атомам азота – VIII.

Таблица 6

Характеристика связей в соединении Fe₁₄ATMP

Table 6

Characteristic of bonds in Fe₁₄ATMP

Заряд атома железа	Наименование связей с гетероатомами	Длина квантовохимически вычисленных связей, А	Заряд атома железа	Наименование связей с гетероатомами	Длина квантовохимически вычисленных связей, А
-0,229	Fe-3O ^f Fe-2P Fe-4O ^h	2,38 2,82 2,36	-0,442	Fe-13O ^h Fe-12O ^h Fe-4O ^h Fe-8O ^h Fe-7O ^f Fe-9O ^h Fe-6P	2,19 2,93 2,43 2,35 2,71 2,92 2,97
-0,313	Fe-3O ^f Fe-2P Fe-5O ^h	2,44 2,66 2,99	-0,568	Fe-N Fe-2P Fe-3O ^f Fe-6P Fe-7O ^f	2,88 2,73 2,46 2,70 2,36
-0,193	Fe-4O ^h Fe-5O ^h Fe-2P Fe-12O ^h	2,52 2,28 2,97 2,36	-0,276	Fe-8O ^h Fe-7O ^f	2,47 2,25
-0,547	Fe-5O ^h Fe-12O ^h Fe-10P Fe-N Fe-2P	2,41 2,36 2,69 2,85 2,74	-0,286	Fe-6P Fe-8O ^h	2,79 2,35
-0,366	Fe-11O ^f Fe-10P	2,17 2,69	-0,155	Fe-8O ^h Fe-6P Fe-9O ^h	2,43 2,87 2,26
-0,352	Fe-11O ^f Fe-12O ^h Fe-10P Fe-13O ^h	2,25 2,43 2,64 2,83	-0,518	Fe-6P Fe-9O ^h Fe-N Fe-10P Fe-12O ^h	2,81 2,36 2,75 2,80 2,25
-0,359	Fe-N	2,23	-0,188	Fe-2P Fe-3O ^f Fe-5O ^h	2,82 2,37 2,59

Таблица 7

Характеристика связей в соединении Fe₁₉EDTA

Table 7

Characteristic of bonds in Fe₁₉EDTA

Заряд атома железа	Наименование связей с гетероатомами	Длина квантовохимически вычисленных связей, А	Заряд атома железа	Наименование связей с гетероатомами	Длина квантовохимически вычисленных связей, А
-0,254	Fe-2O ^h	2,30	-0,331	Fe-6N	2,39
-0,386	Fe-3O ^k Fe-8O ^k	2,35 2,18	-0,159	Fe-3O ^k	2,29
-0,352	Fe-8O ^k	2,35	-0,168	Fe-2O ^h Fe-4O ^h	2,41 2,53
-0,302	Fe-7O ^h	2,19	-0,420	Fe-2O ^h Fe-3O ^k Fe-4O ^h	2,55 2,45 2,44
-0,561	Fe-3O ^k Fe-8O ^k Fe-1N	2,25 2,44 2,24	-0,219	Fe-4O ^h Fe-5O ^k	2,73 2,23
-0,468	Fe-3O ^k Fe-9O ^h Fe-10O ^k Fe-6N	2,27 2,65 2,57 2,36	-0,423	Fe-6N Fe-5O ^k Fe-10O ^k	2,65 2,44 2,35
-0,532	Fe-6N Fe-9O ^h	2,83 2,39	-0,235	Fe-4O ^h	2,38
-0,225	Fe-10O ^k Fe-9O ^h	2,24 2,47	-0,588	Fe-6N Fe-2O ^h Fe-4O ^h	2,90 2,48 2,52
-0,264	Fe-9O ^h Fe-10O ^k	2,99 2,62	-0,329; -0,152	Fe-1N; Fe-9O ^h	2,32; 2,32*

* Представлены данные по 2 атомам железа.

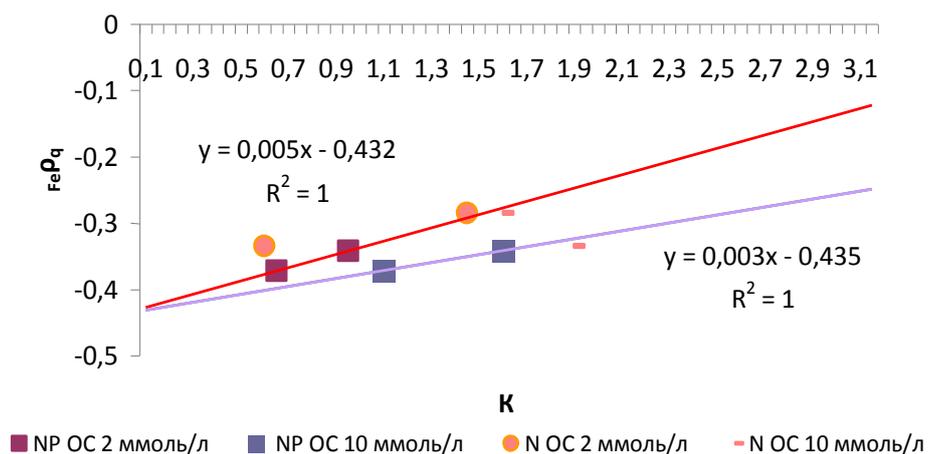


Рис. 5. Зависимость вида Feρq-K

Fig. 5. Feρq-K dependence

Зависимость K в присутствии N OS и NP OS от плотности заряда на железе выражается на рис. 5.

Чем выше глубина оттока электронной плотности с молекулы на атомы железа, тем ниже K. Данная закономерность показывается

применением NP ОС.

Очевидно, что если подавление рассматриваемого типа коррозии обуславливается в большей степени бактерицидностью, чем адсорбцией на стали, построение и рассмотрение подобных рис. 5 зависимостей неосу-

ствимо.

При $K = 0,1$, $Fe\rho_q$ ниже 0,5, ингибирующие свойства теряются при $Fe\rho_q = -0,35...-0,30$, при более высокой плотности начинается промотирование коррозии.

Таблица 8

Характеристика связей в соединении $Fe_{20}EDTMP$

Table 8

Characteristic of bonds in $Fe_{20}EDTMP$

Заряд атома железа	Наименование связей с гетероатомами	Длина квантовохимически вычисленных связей, А	Заряд атома железа	Наименование связей с гетероатомами	Длина квантовохимически вычисленных связей, А
-0,276	Fe- ₂ P Fe- ₄ O ^h	2,82 2,20	-0,338	Fe- ₁₅ P Fe- ₁₆ O ^f	2,70 2,23
-0,314	Fe- ₃ O ^f Fe- ₄ O ^h	2,17 2,46	-0,474	Fe- ₁₈ O ^h Fe- ₁₁ P Fe- ₁₄ O ^h Fe- ₁₀ N Fe- ₁₅ P	2,38 2,87 2,43 2,73 2,86
-0,427	Fe- ₁ N Fe- ₇ O ^f Fe- ₆ P	2,92 2,28 2,69	-0,377	Fe- ₁₀ N	2,30
-0,309	Fe- ₇ O ^f Fe- ₉ O ^h Fe- ₆ P	2,18 2,79 2,69	-0,294	Fe- ₁₂ O ^f Fe- ₁₄ O ^h	2,74 2,31
-0,372	Fe- ₇ O ^f Fe- ₆ P Fe- ₈ O ^h	2,39 2,69 2,30	-0,141	Fe- ₁₄ O ^h Fe- ₁₃ O ^h Fe- ₁₁ P	2,27 2,32 2,88
-0,525	Fe- ₃ O ^f Fe- ₈ O ^h Fe- ₁ N	2,34 2,28 2,21	-0,154	Fe- ₁₄ O ^h Fe- ₁₇ O ^h	2,29 2,31
-0,268	Fe- ₄ O ^h Fe- ₅ O ^h Fe- ₂ P	2,20 2,32 2,87	-0,573	Fe- ₁₂ O ^f Fe- ₁₈ O ^h Fe- ₁₃ O ^h Fe- ₁₇ O ^h Fe- ₁₁ P Fe- ₁₅ P	2,38 2,74 2,67 2,49 2,71 2,76
-0,611	Fe- ₆ P Fe- ₇ O ^h Fe- ₁ N Fe- ₁₀ N Fe- ₁₇ O ^h Fe- ₈ O ^h	2,74 2,63 2,96 2,98 2,40 2,44	-0,447	Fe- ₁₄ O ^h Fe- ₁ N Fe- ₂ P	2,29 2,36 2,91
-0,247	Fe- ₁₆ O ^f Fe- ₁₅ P Fe- ₁₈ O ^h	2,25 2,87 2,45	-0,641	Fe- ₃ O ^f Fe- ₅ O ^h Fe- ₁₂ O ^f Fe- ₂ P Fe- ₁₁ P Fe- ₁₀ N	2,17 2,87 2,41 2,77 2,77 2,95
-0,337	Fe- ₁₈ O ^h	2,41	-0,321	Fe- ₁₁ P Fe- ₁₂ O ^f Fe- ₁₄ O ^f	2,74 2,20 2,47

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Примененные в статье приближения, такие как отсутствие гидратации молекулы, использование атомов кластера чистого железа вместо стали, полуэмпирические методы моделирования и расчета, очевидно, не накладывают отпечатка на точность и предсказательную способность усовершенствованной авторами теории кластерного моделирования. Данное усовершенствование позволяет получить больше сведений о защите металла ингибиторами, чем традиционная и общепринятая теория. Усовершенствованный метод квантово-химического моделирования обеспечивает гораздо более полный набор данных, которые могут служить в качестве эффективного инструмента для прогнозирования. Поскольку железокомплексы не рассматриваются как поверхностные, а рассматриваются в качестве самостоятельного органического соединения (или, вернее, аддукта) с четко определенным химическим составом, то, аналогично т-комплексам, можно проследить исходное и конечное состояние молекулы лиганда, адсорбирующегося ОС. Это таит в себе большие перспективы, поскольку в настоящее время подбор ингибиторов микробиологической коррозии все чаще проводят квантово-химичес-

кими методами прогнозирования [25], а не методом скрининга [26].

Не существует никаких сомнений в том, что существенную роль в формировании улучшений квантово-химического моделирования играет развитие новых версий квантово-химических программ, а также развитие программного обеспечения визуализации. Все более производительные компьютеры все чаще становятся неотъемлемым атрибутом любой области экономики и народного хозяйства, традиционные подходы к проблеме ингибирования коррозии будут менее необходимы наряду с увеличением уровня квантово-химической теории.

Очевидно, что в случае простых НТА и АТМР, где образуются молекулы железосоединения одинакового состава, координационное число железа для $Fe_{14}ATMP$ намного выше, чем в $Fe_{14}NTA$, поэтому первый лучше как ингибитор, чем второй. Также у него более высокая дентатность по азоту. Дентатность по азоту EDTMP крайне высока и имеется большое количество связей железа с фосфором, поэтому такое вещество будет лучшим ингибитором. Далее будет следовать EDTA, последним – NTA.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Дрикер Б.Н., Микрюков А.В., Тарантаев А.Г. Опыт и перспективы применения композиций на основе органофосфонатов в металлургии и энергетике. Инновационные технологии в системах производственного водоснабжения. Сборник статей. Екатеринбург: ООО НПФ «Эко-проект» 2013. С. 153–157.
2. Чаусов Ф.Ф., Раевская Г.А. Комплексонный водно-химический режим теплоэнергетических систем низких параметров. Практическое руководство – М.-Ижевск, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2003 – 280 с.
3. Половняк В. К., Тимофеева И.В. Защитное действие азот-, фосфорсодержащих ингибиторов коррозии стали и их промышленные испытания в условиях нефтедобычи и нефтепереработки // Практика противокоррозионной защиты. 2006. № 3. С. 44-48.
4. Авдеев Я.Г. Физико-химические аспекты ингибирования кислотной коррозии металлов ненасыщенными органическими соединениями/ Авдеев Я.Г., Кузнецов Ю.И.// Успехи химии. 2012. - Т.81, №12. - С. 1133-1145.
5. Кузнецов, Ю. И., Макарычев, Ю.Б., Исаев, В. А. Об особенностях защиты стали гидроксиддиэтилендифосфонатами металлов//Коррозия: материалы, защита, 2005, № 1.- С.17-23
6. Попов К.И., Рудакова Г.Я. и др. «Исследование состава выпускаемых промышленностью фосфонатов». Химическая промышленность №12, 1998 г, стр. 31–34
7. Пантелеева А. Р. Защитные свойства нового водорастворимого ингибитора коррозии-бактерицида НАПОР-1010 / А. Р. Пантелеева, Р. Д. Айманов // Нефтегаз INTERNATIONAL. 2008. С. 62-63.
8. Кузнецов, Ю. И. Чиркунов, А. А. О совместной защите стали от коррозии цинкфосфонатом и лигносульфонатами//Коррозия: материалы, защита, 2006. № 6 .- С. 23-27
9. Beloglazov, Georgy S.; Sikachina, Andrey A.; Beloglazov, Sergei M. Modelling macroscopic properties of organic species on the basis of quantum chemical analysis (on an example of inhibiting efficiency of ureides and acetylides against corrosion) // Solid State Phenomena; 2014, v. 225. P. 7–12 DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.225
10. Al-Amiery A.A., Kadhum A.A.H., Alobaidy A.H.M., Mohamad A.B., Hoon P.S. Novel Corrosion Inhibitor for Mild Steel in HCl [Materials]. 2014. V. 7. P. 662–672. DOI: 10.3390/ma7020662
11. Asegbeloyin J.N.; Ejikeme P.M.; Olasunkanmi L.O.; Adekunle A.S.; Ebenso E.E. A Novel Schiff Base of 3-acetyl-4-hydroxy-6-methyl-(2H)pyran-2-one and 2,2'-(ethylenedioxy) diethyl-

amine as Potential Corrosion Inhibitor for Mild Steel in Acidic Medium // *Materials*. 2015. V. 8. P. 2918–2934. DOI: 10.3390/ma8062918

12. Dibetsoe, M.; Olasunkanmi, L.O.; Fayemi, O.E.; Yesudass, S.; Ramaganthan, B.; Bahadur, I.; Adekunle, A.S.; Kabanda, M.M.; Ebenso, E.E. Some Phthalocyanine and Naphthalocyanine Derivatives as Corrosion Inhibitors for Aluminium in Acidic Medium: Experimental, Quantum Chemical Calculations, QSAR Studies and Synergistic Effect of Iodide Ions // *Molecules*. 2015. V. 20. P. 15701–15734. DOI:10.3390/molecules200915701

13. Kadhum, A.A.H.; Mohamad, A.B.; Hamed, L.A.; Al-Amiery, A.A.; San, N.H.; Musa, A.Y. Inhibition of Mild Steel Corrosion in Hydrochloric Acid Solution by New Coumarin // *Materials*. 2014. 7. P. 4335–4348. DOI:10.3390/ma7064335

14. Mashuga, M.E.; Olasunkanmi, L.O.; Adekunle, A.S.; Yesudass, S.; Kabanda, M.M.; Ebenso, E.E. Adsorption, Thermodynamic and Quantum Chemical Studies of 1-hexyl-3-methylimidazolium Based Ionic Liquids as Corrosion Inhibitors for Mild Steel in HCl // *Materials* 2015, 8, 3607–3632. DOI: 10.3390/ma8063607

15. Nnabuk O. Eddy, H. Momoh-Yahaya, Emeka E. Oguzie. Theoretical and experimental studies on the corrosion inhibition potentials of some purines for aluminum in 0.1 M HCl. // *Journal of Advanced Research*. 2015. V. 6, N. 2. P. 203–217. DOI: 10.1016/j.jare.2014.01.004

16. Peme, T.; Olasunkanmi, L.O.; Bahadur, I.; Adekunle, A.S.; Kabanda, M.M.; Ebenso, E.E. Adsorption and Corrosion Inhibition Studies of Some Selected Dyes as Corrosion Inhibitors for Mild Steel in Acidic Medium: Gravimetric, Electrochemical, Quantum Chemical Studies and Synergistic Effect with Iodide Ions // *Molecules*. 2015. V. 20. P. 16004–16029. DOI:10.3390/molecules200916004

17. Сикачина А.А. Краткие материалы по конкретному аспекту исследования ингибиторной активности органических соединений // Тезисы докладов 69-ой Международной молодежной научной конференции «Нефть и газ – 2015». г. Москва, Россия. 2015. Т. 2. С. 235.

18. Junaedi S.; Al-Amiery A.A.; Kadhum A.; Kadhum A.A.H.; Mohamad A.B. Inhibition Effects of a Synthesized Novel 4-Aminoantipyrine Deriva-

tive on the Corrosion of Mild Steel in Hydrochloric Acid Solution together with Quantum Chemical Studies. *Int // J. Mol. Sci.* 2013. V. 14. P. 11915–11928 DOI:10.3390/ijms140611915

19. Сикачина А.А., Белоглазов С.М. Использование аминополикарбонатов и аминополифосфонатов как биоцидов и ингибиторов микробиологической коррозии, порождаемой *desulfovibrio desulfuricans* / А.А. Сикачина // Вестник КузГТУ. - 2015. - №5. - С. 131-137.

20. Saranya. J, Sounthari. P, Kiruthika. A, Saranya. G, Yuvarani. S, Parameswari. K, Chitra. S. Experimental and Quantum chemical studies on the inhibition potential of some Quinoxaline derivatives for mild steel in acid media. *Orient J Chem* 2014; 30 (4). Available from: <http://www.orientjchem.org/?p=5335>

21. Zilberberg I., Pelmenchikov A., Mcgrath C.J., Davis W., Leszczynska D., Leszczynski J. Reduction of Nitroaromatic Compounds on the Surface of Metallic Iron: Quantum Chemical Study. *Int. J. Mol. Sci.* 2002, 3, 801-813. DOI:10.3390/ijms11062473

22. Sikachina A. (2017). The organic compounds as inhibitors of fungal corrosion of steel: quantum chemical modeling of inhibitor protection. *Bulletin of Science and Practice*, (4), 10–21. <http://doi.org/10.5281/zenodo.546286>

23. Ebenso E.E., Isabirye D.A., Eddy N.O. Adsorption and Quantum Chemical Studies on the Inhibition Potentials of Some Thiosemicarbazides for the Corrosion of Mild Steel in Acidic Medium. *Int // J. Mol. Sci.* 2010. V. 11. P. 2473–2498. DOI: 10.3390/ijms11062473

24. Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. *Органическая химия*. 3-е изд. Москва, Россия: МГУ имени М. В. Ломоносова. Лаборатория знаний, 2010. Т. 1. стр 320-385.

25. Singh, A.; Lin, Y.; Quraishi, M.A.; Olasunkanmi, L.O.; Fayemi, O.E.; Sasikumar, Y.; Ramaganthan, B.; Bahadur, I.; Obot, I.B.; Adekunle, A.S.; Kabanda, M.M.; Ebenso, E.E. Porphyrins as Corrosion Inhibitors for N80 Steel in 3.5% NaCl Solution: Electrochemical, Quantum Chemical, QSAR and Monte Carlo Simulations Studies. *Molecules* 2015, 20, 15122-15146. DOI: 10.3390/molecules200815122

26. Geerlings, P.; De Proft, F. Chemical Reactivity as Described by Quantum Chemical Methods. *Int // J. Mol. Sci.* 2002. V. 3. P. 276–309. DOI: 10.3390/ijms11062476

REFERENCES

1. Driker B.N., Mikryukov A.V., Tarantayev A.G. Opyt i perspektivy primeneniya kompozitsii na osnove organofosfonatov v metallurgii i energetike [Experience and perspectives of using compositions based on organophosphonates in metallurgy and power engineering]. *Innovatsionnyye tekhnologii v sistemakh proizvod-*

stvennogo vodosnabzheniya [Innovative technologies in industrial water supply systems]. Digest of articles. Ekaterinburg, 2013. pp. 153–157.

2. Chausov F.F., Raevskaya G.A. *Kompleksonnyi vodno-khimicheskii rezhim teploenergeticheskikh sistem nizkikh parametrov* [Complex water and chemical regime of low-power heat-

and-power systems]. Izhevsk: NITS «Regulyarnaya i khaoticheskaya dinamika», 2003, 280 p.

3. Polovnyak V.K., Timofeeva I.V. Protective effect of nitrogen, phosphorus-containing corrosion inhibitors of steel and their industrial tests in oil production and oil refining conditions. *Praktika protivokorroziionnoi zashchity* [Practice of anticorrosive protection]. 2006, no. 3, pp. 44–48. (in Russian)

4. Avdeev Ya.G., Kuznetsov Yu.I. Physico-chemical aspects of inhibition of acid corrosion of metals by unsaturated organic compounds. *Uspekhi khimii* [Russian Chemical Reviews]. 2012, vol. 81, no. 12. pp. 1133–1145. (in Russian)

5. Kuznetsov Yu.I., Makarychev Yu.B., Isaev V.A. On the features of the protection of steel hydroxyethylidene diphosphonates of metals. *Korroziya: materialy, zashchita* [Corrosion: materials, protection]. 2005, no. 1. pp. 17–23. (in Russian)

6. Popov K.I., Rudakova G.Ya., [et al.] Investigation of the composition of phosphonates produced by industry. *Khimicheskaya promyshlennost'* [Chemical Industry]. 1998, no. 12, pp. 31–34. (in Russian)

7. Panteleeva A.R. Protective properties of a new water-soluble inhibitor of NAPOR-1010 corrosion-bactericide. *Neftegaz INTERNATIONAL* [Oil and Gas INTERNATIONAL]. 2008, pp. 62–63. (in Russian)

8. Kuznetsov Yu. I. Chirkunov A.A. On the Joint Protection of Steel against Corrosion by Zinc Phosphonate and Lignosulfonates. *Korroziya: materialy, zashchita* [Corrosion: Materials, Protection]. 2006, no. 6, pp. 23–27. (in Russian)

9. Beloglazov G.S., Sikachina A.A., Beloglazov S.M. Modelling macroscopic properties of organic species on the basis of quantum chemical analysis (on an example of inhibiting efficiency of ureides and acetylides against corrosion). *Solid State Phenomena*. 2014, vol. 225, pp. 7–12. DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.225

10. Al-Amiery A.A., Kadhum A.A.H., Alobaidy A.H.M., Mohamad A.B., Hoon P.S. Novel Corrosion Inhibitor for Mild Steel in HCl. *Materials*. 2014, vol. 7, pp. 662–672. DOI: 10.3390/ma7020662

11. Asegbeloyin J.N., Ejikeme P.M., Olasunkanmi L.O., Adekunle A.S., Ebenso E.E. A Novel Schiff Base of 3-acetyl-4-hydroxy-6-methyl-(2H)pyran-2-one and 2,2'-(ethylenedioxy) diethylamine as Potential Corrosion Inhibitor for Mild Steel in Acidic Medium. *Materials*. 2015, vol. 8, pp. 2918–2934. DOI: 10.3390/ma8062918

12. Dibetsoe M., Olasunkanmi L.O., Fayemi O.E.; Yesudass S., Ramaganthan B., Bahadur I., Adekunle A.S., Kabanda M.M., Ebenso E.E. Some Phthalocyanine and Naphthalocyanine Derivatives as Corrosion Inhibitors for Aluminium in Acidic Medium: Experimental, Quantum Chemical Calculations, QSAR Studies and Synergistic Ef-

fect of Iodide Ions. *Molecules*. 2015, vol. 20, pp. 15701–15734. DOI:10.3390/molecules200915701

13. Kadhum A.A.H., Mohamad A.B., Hamed L.A., Al-Amiery A.A., San N.H., Musa A.Y. Inhibition of Mild Steel Corrosion in Hydrochloric Acid Solution by New Coumarin. *Materials*. 2014, no. 7, pp. 4335–4348. DOI: 10.3390/ma7064335

14. Mashuga M.E., Olasunkanmi L.O., Adekunle A.S., Yesudass S., Kabanda M.M., Ebenso E.E. Adsorption, Thermodynamic and Quantum Chemical Studies of 1-hexyl-3-methylimidazolium Based Ionic Liquids as Corrosion Inhibitors for Mild Steel in HCl. *Materials*. 2015, no. 8, pp. 3607–3632. DOI:10.3390/ma8063607

15. Nnabuk O. Eddy, H. Momoh-Yahaya, Emeka E. Oguzie. Theoretical and experimental studies on the corrosion inhibition potentials of some purines for aluminum in 0.1 M HCl. *Journal of Advanced Research*. 2015, vol. 6, no. 2, pp. 203–217. DOI: 10.1016/j.jare.2014.01.004

16. Peme T., Olasunkanmi L.O., Bahadur I., Adekunle A.S., Kabanda M.M., Ebenso E.E. Adsorption and Corrosion Inhibition Studies of Some Selected Dyes as Corrosion Inhibitors for Mild Steel in Acidic Medium: Gravimetric, Electrochemical, Quantum Chemical Studies and Synergistic Effect with Iodide Ions. *Molecules*. 2015, vol. 20, pp. 16004–16029. DOI:10.3390/molecules200916004

17. Sikachina A.A. Kratkie materialy po konkretnomu aspektu issledovaniya ingibitornoi aktivnosti organicheskikh soedinenii [Brief materials on a specific aspect of the study of the inhibitory activity of organic compounds]. *Tezisy dokladov 69 Mezhdunarodnoi molodezhnoi nauchnoi konferentsii «Nef't' i gaz – 2015»* [Proc. 69th Int. Youth Sci. Conf. «Oil and Gas 2015»]. Moscow, 2015, vol. 2. pp. 100–101.

18. Junaedi S., Al-Amiery A.A., Kadhum A., Kadhum A.A.H., Mohamad A.B. Inhibition Effects of a Synthesized Novel 4-Aminoantipyrine Derivative on the Corrosion of Mild Steel in Hydrochloric Acid Solution together with Quantum Chemical Studies. *Int. J. Mol. Sci.* 2013, vol. 14, pp. 11915–11928 DOI:10.3390/ijms140611915

19. Sikachina A.A., Beloglazov S.M. The use of aminopolycarbonates and aminopolyphosphonates as biocides and inhibitors of microbiological corrosion generated by desulfovibrio desulfuricans. *Vestnik KuzGTU* [Bulletin of KuzGTU]. 2015, no. 5., pp. 131–137. (in Russian)

20. Saranya J., Sounthari P., Kiruthika A., Saranya G., Yuvarani S., Parameswari K., Chitra S. Experimental and Quantum chemical studies on the inhibition potential of some Quinoxaline derivatives for mild steel in acid media. *Orient J. Chem.* 2014, vol. 30, no. 4. Available at: <http://www.orientjchem.org/?p=5335>

21. Zilberberg I., Pelmenshikov A., Mcgrath C.J., Davis W., Leszczynska D., Leszczynski J.

Reduction of Nitroaromatic Compounds on the Surface of Metallic Iron: Quantum Chemical Study. *Int. J. Mol. Sci.* 2002, vol. 3, 801–813. DOI:10.3390/i3070801

22. Sikachina A. The organic compounds as inhibitors of fungal corrosion of steel: quantum chemical modeling of inhibitor protection. *Bulletin of Science and Practice*, 2017, no. 4, pp. 10–21. Available at: <http://doi.org/10.5281/zenodo.546286>

23. Ebenso E.E., Isabirye D.A., Eddy N.O. Adsorption and Quantum Chemical Studies on the Inhibition Potentials of Some Thiosemicarbazides for the Corrosion of Mild Steel in Acidic Medium. *Int. J. Mol. Sci.* 2010, vol. 11, pp. 2473–2498. DOI: 10.3390/ijms11062473

24. Reutov O.A., Kurtz A.L., Butin K.P. *Organicheskaya khimiya* [Organic chemistry]. Moscow, 2010, vol. 1, 700 p.

25. Singh A., Lin Y., Quraishi M.A., Olasunkanmi L.O., Fayemi O.E., Sasikumar Y., Ramaganthan B., Bahadur I., Obot I.B., Adekunle A.S., Kabanda M.M., Ebenso E.E. Porphyrins as Corrosion Inhibitors for N80 Steel in 3.5% NaCl Solution: Electrochemical, Quantum Chemical, QSAR and Monte Carlo Simulations Studies. *Molecules*. 2015, vol. 20, pp. 15122–15146. DOI: 10.3390/molecules200815122

26. Geerlings P., De Proft F. Chemical Reactivity as Described by Quantum Chemical Methods. *Int. J. Mol. Sci.* 2002, vol. 3, pp. 276–309. DOI: 10.3390/i3040276

Критерии авторства

Сикачина А.А., Белоглазов С.М., Ягунова Л.К. выполнили экспериментальную работу, на основании полученных результатов провели обобщение и написали рукопись. Сикачина А.А., Белоглазов С.М., Ягунова Л.К. имеют на статью равные авторские права и несут равную ответственность за плагиат.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Принадлежность к организации

Андрей А. Сикачина

Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Аспирант, инженер кафедры химии sikachina@list.ru

Сергей М. Белоглазов

Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Д.х.н., профессор кафедры химии BeloglazovSM@list.ru

Людмила К. Ягунова

Калининградский государственный технический университет, К.х.н., доцент кафедры химии 17121945@mail.ru

Поступила 12.12.2016

Contribution

Sikachina A.A., Beloglazov S.M., Yagunova L.K. carried out the experimental work, on the basis of the results summarized the material and wrote the manuscript. Sikachina A.A., Beloglazov S.M., Yagunova L.K. have equal author's rights and bear equal responsibility for plagiarism.

Conflict of interests

The authors declare no conflict of interests regarding the publication of this article.

AUTHORS' INDEX

Affiliations

Andrei A. Sikachina

Immanuel Kant Baltic Federal University, Postgraduate Student, Engineer Chemistry Department sikachina@list.ru

Sergei M. Beloglazov

Immanuel Kant Baltic Federal University, Doctor of Chemistry, Professor Chemistry Department BeloglazovSM@list.ru

Ludmila K. Yagunova

Kaliningrad State Technical University Ph.D. (Chemistry), Associate Professor Chemistry Department 17121945@mail.ru

Received 12.12.2016