

iCORi: integrativni pristop k inhibiciji korozije

Oznaka in naziv projekta

[J1-70051 iCORi: integrativni pristop k inhibiciji korozije](#)

[J1-70051 iCORi: integrative approach to corrosion inhibition](#)

Logotipi ARIS in drugih sofinancerjev



Javna agencija za znanstvenoraziskovalno
in inovacijsko dejavnost Republike Slovenije

Projektna skupina

Vodja projekta: prof. dr. Anton Kokalj

Sodelujoče raziskovalne organizacije: [Institut »Jožef Stefan« \(IJS\)](#)

Sestava projektne skupine: [Povezava na SICRIS](#)

[Odsek za fizikalno in organsko kemijo \(K3\):](#)

- prof. dr. Anton Kokalj – vodja projekta
- prof. dr. Ingrid Milošev
- doc. dr. Peter Rodič
- dr. Matic Poberžnik
- Barbara Kapun

[Odsek za tehnologije znanja \(E8\):](#)

- prof. dr. Sašo Džeroski
- Sintija Stevanoska
- Boštjan Gec

Vsebinski opis projekta

Cilj predlaganega raziskovalnega projekta je racionalno načrtovanje organskih inhibitorjev korozije z integracijo treh znanstvenih paradig (molekulsko modeliranje, eksperimenti in modeliranje na podlagi strojnega učenja) v funkcionalno shemo. Inhibitorji korozije predstavljajo učinkovito zaščito pred korozijo. Zaradi zapletenosti korozijskih pojavov so bili učinkoviti inhibitorji skoraj v celoti določeni z empiričnimi pristopom poskusa-in-napake na podlagi eksperimentov iz velike skupine organskih spojin. Nasprotno pa bi racionalno načrtovanje novih superiornih inhibitorjev korozije predstavljalo preboj v znanosti o koroziji.

Racionalno načrtovanje inhibitorjev korozije trenutno ovira pomanjkanje razumevanja. Še vedno ne razumemo, katere fizikalnokemijske lastnosti naredijo neko molekulo učinkovit inhibitor korozije in kako se dober inhibitor razlikuje od slabega. Glavni cilj projekta je poskušati odgovoriti na to vprašanje z (1) razvojem integrativnega pristopa, ki bo omogočil (2) globlje razumevanje, kako organski inhibitorji korozije upočasnijo korozijo na molekularni ravni. Z uporabo integrativnega pristopa bomo lahko (3) določiti ustrezne fizikalno-kemijske deskriptorje, ki so pomembni za zaviranje korozije preiskovanih

sistemov. Ti deskriptorji so bistvenega pomena za racionalno načrtovanje novih vrhunskih inhibitorjev korozije.

Glavna hipoteza projekta je, da bo predlagani integrativni pristop odprl pot do racionalnega načrtovanja inhibitorjev korozije. Predlagamo, da lahko kombinacija mehanistično usmerjenih eksperimentov in molekulskega modeliranja sistemov trdnina/inhibitorji/raztopina zagotovi ustrezne deskriptorje ter tako omogoči konstrukcijo napovednih modelov strojnega učenja.

Pristopi strojnega učenja zahtevajo veliko podatkov za učenje modelov. Zato bomo uporabili dvonivojski pristop, pri čemer bo prvi nivo usmerjen v pridobivanje podatkov, drugi pa v mehanističen vpogled. Znotraj nivoja-1 bomo uporabili objavljene eksperimentalne podatke o inhibiciji korozije in izvedli avtomatizirane *"high-throughput"* izračune več sto inhibitorjev korozije z metodo teorije gostotnega funkcionala. Tako bomo zagotovili dovolj podatkov za modele strojnega učenja. Znotraj nivoja-2 se bomo poglobili v podrobnosti in izvedli poskuse in simulacije na skrbno izbranih korozijskih sistemih. Preučevane korozijske sisteme lahko razdelimo na tri osnovne komponente: inhibitor, kovinski material in okolico, kateri je material izpostavljen. Osredotočili se bomo na organske molekule, ki vsebujejo heteroatome N, O, S ali P kot inhibitorje korozije za kovine Al in Cu v vodnih raztopinah klorida.

Arhetipsko strukturo inhibitorjev korozije lahko razdelimo na tri dele: (1) reaktivno glavo, preko katere se inhibitor veže na površino, (2) manj reaktivno ogrodje in (3) stranske skupine, pritrjene na ogrodje, s katerimi lahko dosežemo želene večnamenske lastnosti. V ta namen je molekulsko modeliranje zelo priročno orodje, saj lahko na preprost način sistematično spreminjamo strukturo inhibitorja in se posledično dokopljemo do novih spoznanj glede povezave med molekulsko strukturo inhibitorja in njegovo učinkovitostjo inhibicije v odvisnosti od kovinskega materiala in okolja, ki mu je le-ta izpostavljen. Inhibicijsko učinkovitost inhibitorjev bomo določili s poskusi. Ti bodo zagotovili tudi informacije o medfaznih strukturah, kemični sestavi površin in adsorbiranih slojev inhibitorjev ter vplivu le-teh na korozijske reakcije. Eksperimenti bodo tako usmerjali molekulske simulacije pri izbiri ustreznih modelov. Modeli strojnega učenja pa nam bodo pomagali razumeti, kateri od uporabljenih deskriptorjev so ustrezni. Z molekulskim modeliranjem in metodami strojnega učenja bomo tako preizkušali nove hipoteze in podajali napovedi, katerih veljavnost bomo preverili z nadaljnjimi eksperimenti.

Faze projekta in opis njihove realizacije

1. Faza: Molekulsko modeliranje inhibitorjev korozije

Cilji: (a) Iz objavljenih nizov podatkov inhibitorjev korozije zbrati učinkovitosti inhibicije korozije in molekulske specifikacije SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System). (b) Implementirati skriptni računalniški program za avtomatizacijo izračunov inhibitorjev korozije na podlagi specifikacij SMILES. (c) Izvesti molekulske DFT izračune več sto inhibitorjev korozije in izhodne datoteke spremeniti v obliko, primerno za strojno učenje.

Metodologija: DFT izračuni bodo v glavnem izvedeni s programskim paketom Gaussian (<https://gaussian.com/>) z uporabo modela implicitnega topila SMD. Programski paket OpenBabel (<http://openbabel.org/>) bomo uporabili za pretvorbo SMILES specifikacij v 3D molekulske strukture.

2. Faza: DFT modeliranje korozijskih sistemov kovina/inhibitor/raztopina

Cilji: (a) Razviti modele za opis elektrokemične fazne meje v sistemih kovina/inhibitor/raztopina; (b) Izvesti DFT izračune izbranih sistemov za zaviranje korozije. (c) Izluščiti fizikalno-smiselne deskriptorje za uporabo v modelih strojnega učenja.

Metodologija: Modeliranje bomo izvedli v okviru teorije gostotnega funkcionala predvsem z uporabo približka splošnega gradienta. Uporabili bomo funkcional Perdew-Burke-Erzenhof (PBE) z

dodatkom Grimmovega semi-empiričnega popravka za opis disperznih interakcij in Hubbardovega +U popravka za opis bakrovih oksidov. Večino DFT izračunov bomo izvedli z odprto-kodnim programskim paketom Quantum ESPRESSO (<http://www.quantum-espresso.org/>) in uporabo vtičnika Environ (<http://www.quantum-environ.org/>) za opis vodnega topila. Programsko skriptno okolje PWTK (<http://pwtk.ijs.si/>), razvito s strani vodje projekta, bomo uporabili za poenostavitev visokozmogljivostnih simulacij. Reakcijske pregrade bomo izračunali z metodo CI-NEB (climbing-image nudged-elastic-band). Pri interpretaciji in vizualizaciji rezultatov si bomo pomagali s programom XCrySDen (<http://www.xcrysden.org/>), ki ga je prav tako razvil vodja predlaganega raziskovalnega projekta.

3. Faza: Eksperimentalno testiranje inhibicije korozije in mehanistična analiza

Cilji: (a) Določiti učinkovitost inhibitorjev korozije v specifičnih okoliščinah. (b) Zagotoviti dokaze o delovanju inhibitorjev na specifično korozijsko reakcijo. (c) Pridobiti podatke o strukturah na faznih mejah, kemijskem stanju površin in kemijski sestavi adsorbiranih slojev inhibitorjev.

Metodologija: Učinkovitosti inhibicije korozije bomo prednostno merili s časovno odvisnimi meritvami linearne polarizacijske odpornosti (angl. LPR), v časovnem intervalu vsaj 100 ur, medtem ko bodo metode potenciodinamične polarizacije in elektrokemične impedančne spektroskopije zagotovile tudi informacije o mehanizmi korozije. Interakcije med inhibitorji korozije in površino ter kemijsko sestavo površin bomo raziskali s površinsko-analiznimi tehnikami (FTIR in Raman vibracijska spektroskopija, XPS, ToF-SIMS, FE-SEM, AFM in 3D profilometrija).

4. Faza: Presejalni model na podlagi strojnega učenja

Cilj: Izdelati robusten model na podlagi strojnega učenja za napoved učinkovitosti inhibicije korozije korozijskih sistemov.

Metodologija: Uporabili bomo različne pristope strojnega učenja, vključno z drevesnimi ansambli (npr. naključnimi gozdovi, angl. random forests, RF) in umetnimi nevronskimi mrežami (angl. artificial neural networks, ANN). Za učenje modelov ANN bomo uporabili tudi splošne strukturno-molekulske deskriptorje in prstne odtise molekul, kjer bomo uporabili AlvaDesc (<https://alvascience.com/alvadesc/>) in Chemicalize (<https://chemicalize.com/>). Drevesne ansamble, kot sta bagging in RF za večciljno regresijo, bomo zgradili s programom CLUS+ (<http://source.ijs.si/ktclus/clus-public>) in SciKit Learn (<https://scikit-learn.org/>). Modele ANN bomo implementirali z razpoložljivimi paketi ANN z uporabo Keras API-ja v Pythonu (<https://keras.io/>) ali drugih knjižnic ANN, ki so na voljo v programskem jeziku R.

Bibliografske reference

- Anton Kokalj, A generalized model of corrosion inhibition efficiency for multilayer adsorption, Corrosion Science 261 (2026) 113626.