

термодинамических функций флюидных систем бурно развиваются на протяжении последних десятилетий: формулируются новые подходы, расширяются границы применимости методов. Это касается круга рассматриваемых систем, диапазона условий, увеличения возможностей предсказания на основе моделей. Характерная особенность развития методов моделирования в последние 20 лет заключается в приложении этих методов к все более сложным объектам. Особое внимание привлекают системы, содержащие полиэлектролиты, ионные жидкости и другие органические соли, разнообразные биологические молекулы, вещества, проявляющие способность к агрегации с образованием пространственных мезоструктур и т. п. Для моделирования фазовых равновесий в системах на основе органических солей и ионных жидкостей наиболее часто используются модели локальных составов, в которые введены дополнительные члены, эмпирически учитывающие электростатические взаимодействия. Так, ранее нами для корреляции данных о парожидкостном равновесии в тройных системах «смешанный растворитель – имидазолиниевая соль» [1, 2] была использована электролитная модель NRTL [3]. В данной работе мы применили электролитную модель UNIQUAC [4], которая учитывает геометрические параметры компонентов тройных систем (в т.ч. катиона и аниона имидазолиниевой соли), наряду с энергетическими взаимодействиями. Параметры модели UNIQUAC рассчитаны исходя из собственных экспериментальных данных о давлении пара и температурах в соответствующих двойных системах. В качестве имидазолиниевых солей выбраны: хлорид 1,3-бис(2,4,6-триметилфенил)имидазолия, а также бромид и гексафторфосфат 1,3-диметил-2-фенилимидазолия, а в качестве смешанных растворителей – двойные неводные азеотропные системы: ацетон–метанол, этилацетат–этанол и метилацетат–метанол. Установлено, что модель UNIQUAC показала большую точность при расчете мольных долей растворителей в паровой фазе, а также температуры в системах, чем модель NRTL.

1. М.А. Феофанова, Ю.И. Софронова, А.Н. Евдокимов, А.В. Курзин. *Вестн. ТвГУ. Сер. «Химия»*, 2020, № 4 (42), 63-69.
2. А.Н. Евдокимов, А.В. Курзин, М.А. Феофанова, Ю.И. Софронова, В.Б. Франчук. *Ж. физ. химии*, 2021, **95**, 958-960.
3. В. Mock, L.B. Evans, C.-C. Chen. *AIChE J.*, 1986, **32**, 1655-1664.
4. B. Sander, A. Fredenslund, P. Rasmussen. *Chem. Eng. Sci.*, 1986, **41**, 1171-1183.

ТИАЗАМЕЩЕННЫЕ ПОРФИРИНОИДЫ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ КОМПОНЕНТЫ ЖИДКОФАЗНЫХ СЕНСОРНЫХ СИСТЕМ

Крук Н.Н.¹, Плотникова А.О.³, Вершиловская И.В.¹, Люлькович Е.С.^{1,2},
Пуховская С.Г.³, Иванова Ю.Б.⁴, Сырбу С.А.⁴

¹ УО «Белорусский государственный технологический университет» 220006, Минск, ул. Свердлова, 13а, Беларусь

² РУП «Белмедпрепараты» 220007, Минск, ул. Фабрициуса, 30, Беларусь;

³ Ивановский государственный химико-технологический университет. 153000, Иваново, пр-т Шереметевский, 7, Российская Федерация;

⁴ Институт химии растворов имени Г.А. Крестова Российской академии наук 153045, Иваново, ул. Академическая, 1, Российская Федерация

Создание новых материалов для решения конкретных технологических задач является одной из основных тенденций развития современной химии. Разработка новых эффективных способов установления и определения химических соединений в различных средах путем использования молекулярных сенсоров является одной из актуальных задач современной науки. Эффективность работы любого химического сенсора определяются физико-химическими свойствами соединений, которые используются в качестве источника аналитического сигнала и способствуют распознаванию того или иного субстрата. Важен также способ трансдукции первичного химического сигнала в аналитический сигнал, непосредственно используемый для диагностики, так как он определяет простоту производства и удобство использования сенсора. Оптический метод преобразования аналитического сигнала является одним из наиболее привлекательных по ряду причин. Представители класса тетрапиррольных соединений могут служить в качестве преобразователей первичного аналитического сигнала в оптический отклик сенсора. Они обладают достаточно интенсивной флуоресценцией, которая может быть использована для этих целей. В настоящей работе изучены координационные свойства и спектрально-люминесцентные характеристики 21-тиа-5,10,15,20-тетрафенилпорфирина и 21,23-дитиа-5,10,15,20-тетрафенилпорфирина с использованием методов абсорбционной и люминесцентной спектроскопии. Определены квантовые выходы флуоресценции и проанализирована взаимосвязь измеренных величин со спин-орбитальными взаимодействиями в π -сопряженной системе макроцикла. Тушение флуоресценции гетеропорфиринов интерпретировано на основании представлений об усилении спин-орбитального взаимодействия при гетерозамещении. Показано, что если источником спин-

орбитального возмущения является один из атомов π -сопряженной системы макроцикла, то эффективность спин-орбитального взаимодействия в π -сопряженной макрогетероциклической системе резко возрастает. В работе обсуждаются перспективы использования данных соединений для создания ион-чувствительных сенсорных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-03-00214

АДСОРБЦИЯ МАКРОМОЛЕКУЛ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ В ВОДНОЙ СРЕДЕ НА ПОВЕРХНОСТИ ЧАСТИЦ РАЗЛИЧНОЙ ХИМИЧЕСКОЙ ПРИРОДЫ

Максимова А.Г., Терзиян Т.В.

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

Tatiana.terzian@urfu.ru

В последнее время адсорбция полисахаридов на поверхности дисперсных частиц стала предметом интенсивных исследований. Адсорбционные покрытия природных полимеров на частицах необходимы как для стабилизации самих частиц в жидких средах, так и для защиты среды от контакта с поверхностью частиц. Так, указывается на биомедицинское применение магнитоуправляемых частиц с покрытием из полисахаридов для разработки систем доставки лекарств, концентрирования и сепарирования физиологически активных веществ.

Процесс адсорбции полисахаридов на поверхности частиц в водной среде имеет свои особенности связанные высокомолекулярной природой адсорбируемого вещества и процессами формирования двойного электрического слоя (ДЭС), как на поверхности частиц, так и в клубках макромолекул. Альгинат натрия – полисахарид, состоящий из остатков маннуровой и гулуруновой кислот, где ион водорода карбоксильной группы заменен на ион натрия. Полиэлектролитная природа альгината натрия обеспечивает возможность формирования ДЭС. Двойной электрический слой частиц образуется в результате гидролиза и диссоциации поверхностных групп, природа которых определяется природой самих частиц. Знак и величина электрокинетического потенциала оказывают влияние на механизм и количественные параметры адсорбции. В этой связи, актуальным является изучение процесса адсорбции полисахаридов на поверхности частиц различной химической природы во взаимосвязи с электрокинетическими свойствами компонентов адсорбционных систем.

Целью данной работы стало изучение процесса адсорбции альгината натрия на частицах железа и оксида железа в водной среде, а также измерение дзета-потенциала компонентов адсорбционных систем.

В работе использовали альгинат натрия (SigmaAldrich) с молекулярной массой 190 кДа. Наночастицы железа и оксида железа (FeO_x) были получены методом электровзрыва проволоки в инертной среде для железа и окислительной среде для оксида, на базе Института электрофизики УрО РАН. Удельная поверхность дисперсных порошков составила 7,5 и 6,7 м²/г для железа и оксида, соответственно.

Величина адсорбции была определена методом спектрофотометрии при температуре 25°C. Величину электрокинетического потенциала определяли с помощью прибора динамического светорассеяния Brookhaven ZetaPlus. Получены изотермы адсорбции и значения дзета-потенциала частиц при дробном добавлении алгината натрия в жидкой среде. Изотермы были описаны уравнением Лангмюра, что позволило оценить величину предельной адсорбции, которая оказалась больше для железа, чем для оксида железа. Показано, что адсорбционное равновесие определяется величиной дзета-потенциала частиц в водной суспензии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 20-12-00031).