

Владимир В. Ткач<sup>\*1,2</sup>, Марта В. Кушнир<sup>1</sup>, Силвио С. Де Оливейра<sup>2</sup>,  
Лусинда В. Дуж Рейш<sup>3</sup>, Яна Г. Иванушко<sup>4</sup>, Светлана М. Луканева<sup>1</sup>,  
Петр И. Ягодинец<sup>1</sup>, Ольга В. Луганская<sup>5</sup>, Жолт А. Кормош<sup>6</sup>

<sup>1</sup>Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича, Украина

<sup>2</sup>Федеральный университет штата Мату-Гроссу-ду-Сул, Бразилия

<sup>3</sup>Университет Траз-уж-Монтиш и Алту-Доуру, Португалия

<sup>4</sup>Буковинский государственный медицинский университет, Украина

<sup>5</sup>Запорожский национальный университет, Украина

<sup>6</sup>Восточноевропейский национальный университет им. Леси Украинки, Луцк,  
Украина)

\*E-mail: [nightwatcher2401@gmail.com](mailto:nightwatcher2401@gmail.com)

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕОКИСЛЕНИЯ ПОЛИПИРРОЛА В ПРИСУТСТВИИ ИОНОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ. ПРОСТЕЙШИЙ СЛУЧАЙ

Переокисленный полипиррол – форма полипиррола, образованная вследствие необратимого электрохимического окисления нейтрального сопряженного полипиррола [1 – 2]. Реакция происходит при электроокислении полипиррола при потенциале от 1,2 до 1,6 В, в зависимости от рН. При этом образуется полимер, свойства которого будут сильно отличаться от обычного полипиррола.

Несмотря на то, что сопряженная система в переокисленном полипирроле меняет свою конфигурацию, переокисленный полимер приобретает новые полезные свойства, нехарактерные для обычного полипиррола. К примеру, переокисленный полипиррол вступает с ионами переходных металлов в реакции комплексообразования. Подобные комплексы становятся более проводимыми, чем переокисленный полипиррол и, соответственно, могут быть использованы в сенсорике, нанотехнологии и при защите от коррозии [3].

Однако, вследствие изменений ионной конфигурации двойного электрического слоя (ДЭС), система предрасполагает к появлению электрохимических неустойчивостей, характерных для аналогичных систем с синтезом и переокислением (включая «политиофеновый парадокс») проводящих полимеров [3]. Поэтому теоретическое описание поведения данной системы является необходимым для более эффективного практического использования синтеза.

Целью данной работы является теоретический анализ системы с переокислением полипиррола в присутствии иона переходного металла, образующего комплексное соединение с переокисленным полипирролом. В зависимости от природы металла и его поведения в присутствии переокисленного полипиррола при потенциале его образования, существует несколько сценариев поведения.

В простейшем случае, когда металл, образующий комплексное соединение с проводящим полимером, не изменяет валентности при потенциале переокисления полипиррола, поведение системы описывается бивариантной системой балансовых дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dz}{dt} = \frac{2}{\delta} \left( \frac{z}{\delta} (z_0 - z) - r_2 \right) \\ \frac{dp}{dt} = \frac{1}{P} (r_1 - r_2) \end{cases} \quad (1)$$

Анализ данной модели показывает, что автоколебательное поведение при переокислении в присутствии иона переходного металла более вероятно, нежели при переокислении при его отсутствии, ввиду изменения ионной силы и емкости ДЭС. С другой стороны, стационарный режим в данной системе образуется легко. Таким образом, линейная зависимость между значением плотности тока, проходящего через систему в потенциостатическом режиме и концентрацией иона металла наблюдается в широком диапазоне значений параметров, что предполагает использование данной системы в сенсорике.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. H. Hrichi, L. Monser, N. Adhoum, *Int. J. Electrochem.*, 2019(2019), ID: 5394235
2. O. Koyun, H. Gursu, S. Gorduk, Y. Sahin, *Int. J. Electrochem. Sci.*, 12(2017), 6438
3. V.V. Tkach, I. L. Kukovska, S. M. Lukanova *et al.*, *Anal. Bioanal. Electrochem.*, 10(2018), 587