

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНОСТИ ХИРАЛЬНОГО МОДИФИКАТОРА ЭЛЕКТРОДА ПО ЭНЕРГИИ АДСОРБЦИИ АНАЛИТОВ

Для создания композитных энантиоселективных вольтамперометрических сенсоров используется хиральный модификатор. Тип и структура модификатора служат важным фактором в формировании энантиоселективности сенсора для данного анализа [1-3]. Хиральный модификатор, за счет образования диастереомерных пар, обеспечивает разность сигналов энантиомеров. В случае твердых модификаторов, разность энергии адсорбции R- и S- энантиомеров служит параметром, связанным с энантиоселективностью хирального модификатора. Мы предлагаем способ теоретической оценки энантиоселективности хиральных модификаторов, основанный на расчете разности между энергиями адсорбции ( $\Delta E_{\text{адс}}$ ) диастереомерных ассоциатов – «Аналит-Селектор».

По данным расчета энергий адсорбции R- и S- энантиомеров ряда аналитов на циклодекстринах [4-5], одностенных углеродных нанотрубках и их кластерах показано, что величина разности энергий адсорбций энантиомеров связана с характером размещения аналита на модификаторе и соотношением размеров полости и аналита. Показано, что корреляция между экспериментальной вольтамперометрической энантиоселективностью и разностью энергий адсорбций энантиомеров на хиральном модификаторе описывается корреляционными уравнениями линейного вида. Наилучшую корреляцию обеспечивает двухпараметрическое уравнение учитывающее в качестве второго параметра линейный размерный коэффициент  $\sigma_D$  (отношение размеров аналита и полости):  $J_{\text{Эксп}} = 0.0999 \cdot \Delta E_{\text{адс}} + 0.8182 \cdot \sigma_D + 0.1377$ ,  $R^2 = 0.7087$ . Адекватность используемого подхода подтверждается сходными корреляционными зависимостями полученными для хроматографической энантиоселективности:  $J_{\text{Эксп}} = -0.0136 \cdot \Delta E_{\text{адс}} + -2.3322 \cdot \sigma_V + 4.4521$ ,  $R^2 = 0.9094$ .

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-13-00169, <https://rscf.ru/project/21-13-00169/>*

## ЛИТЕРАТУРА

1. Майстренко В.Н., Евтюгин Г.А., Зильберг Р.А. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры . г. Уфа: Изд-во БашГУ, 2018. – 188 с. ISBN 978-5-7477-4754-8.
2. Maistrenko V.N., Zil'berg R.A. Enantioselective voltammetric sensors on the basis of chiral materials // *J. Analyt. Chem.* 2020. V. 75. № 12. P. 1514.
3. Maistrenko V.N., Sidel'nikov A.V., Zil'berg R.A. Enantioselective voltammetric sensors: new solutions // *J. Analyt. Chem.* 2018. V. 73. № 1. P. 1.
4. Zilberg R.A., Maistrenko V.N., Kabirova L.R., Dubrovsky D.I. Selective voltammetric sensors based on composites of chitosan polyelectrolyte complexes with cyclodextrins for the recognition and determination of atenolol enantiomers // *Anal. Methods.* 2018. V. 10. P. 1886.
5. Zil'berg R.A., Maistrenko V.N., Yarkaeva Y.A., Dubrovskii D.I. An eantioselective voltammetric sensor system based on glassy carbon electrodes modified by polyarylenephthalide composites with  $\alpha$ -,  $\beta$ -, and  $\gamma$ -cyclodextrins for recognizing D- and L-tryptophans // *J. Analyt. Chem.* 2019. V. 74. P. 1245.