

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
КАК ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ПРИ РАЗРАБОТКЕ
НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИХ
СЕНСОРОВ**

Бухаринова М.А.

Уральский государственный экономический университет
620144, г. Екатеринбург, ул. 8 Марта, д. 62

Наноструктурированные сенсоры нашли широкое использование в современном электроанализе. В целях улучшения аналитических характеристик (снижения предела обнаружения, увеличения чувствительности и селективности) сенсоров наибольшее распространение получили металлические наночастицы, в частности, золотые. Разработка высокоэффективных сенсоров требует комплексного подхода. При этом необходимо учитывать, как электрохимические свойства собственно наночастиц, так и особенности электроокисления анализируемого вещества на их поверхности. Для прогнозирования характеристик наноструктурированных сенсоров предложена физико-математическая модель, рассматривающая процессы электропревращения вещества, диффундирующего из объема раствора к поверхности макро- и наноструктурированного электрода с учетом её энергетических особенностей. Работоспособность и адекватность предложенной модели доказана на примере рассмотрения процессов электроокисления нитрит-ионов, аскорбиновой и мочевой кислот.

Сопоставление экспериментальных вольтамперных кривых с теоретически рассчитанными данными позволило установить, что механизм процесса электроокисления нитрит-ионов включает пассивацию поверхности электрода адсорбированными продуктами реакции, наноэффекты в данном случае не наблюдаются. Показано, что окисление аскорбиновой и мочевой кислот протекает по электрохимическому механизму без каталитических стадий и сопровождается размерными эффектами, которые проявляются в сдвиге потенциала максимума и полутолны тока окисления вещества в катодную область тем больше, чем меньше размер наночастиц и больше их свободная поверхностная энергия Гиббса.

Полученные теоретические данные были использованы для создания сенсора на основе углеродной вуали, модифицированной ПАВ (Triton X-100) для определения нитрит-ионов в колбасных изделиях, природных водах, а также сенсора на основе наночастиц золота для определения аскорбиновой и мочевой кислот в различных объектах. Разработанные сенсоры обладают низкими пределами обнаружения, широкими диапазонами линейности и высокой селективностью. Апробация сенсоров проведена на образцах биологических жидкостей и напитков. Достоверность результатов определений подтверждена хорошей корреляцией с независимыми методами сравнения.

Научный руководитель д.х.н., проф. Н.Ю. Стожко.