

интеркаляции. С другой стороны ионы  $\text{Li}^+$  могут быть неустойчивы в позициях Na.

В данной работе явления переноса ионов  $\text{Li}^+$  изучались с помощью комбинации подходов минимизации энергии структуры, молекулярной динамики [4] и DFT (density functional theory) расчетов (VASP) [5]. Стабильность Li в структуре, взаимное влияние ионов  $\text{Na}^+$  и  $\text{Li}^+$  при совместной интеркаляции, последовательность

положений, занимаемых литием, все эти вопросы являются целью настоящей работы. Были рассчитаны коэффициенты диффузии ионов  $\text{Na}^+$  и  $\text{Li}^+$  для различных концентраций вакансий и ионов  $\text{Li}^+$  в структуре. Определены основные направления диффузии. Результаты расчетов были сравнены с данными РФА, ЭДС и гальваностатического циклирования.

### Список литературы

1. Hwang J.Y.; Myung S.T.; Sun Y.K. *Sodium-ion batteries: present and future. Chem. Soc. Rev.* 2017, 46, 3529-3614. DOI: 10.1039/c6cs00776g.
2. Kosova N.V., Belotserkovsky V.A. *ELECTRO-CHIMICA ACTA*, 2018.– V.278.– P.182–195. DOI: 10.1016/j.electacta.2018.05.034.
3. Yao H.-R.; You Y.; Yin Y.-X.; Wan L.-J.; Guo Y.-G. *Rechargeable dual-metal-ion batteries for advanced energy storage. Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016.– 18, 9326-9333. DOI: 10.1039/C6CP00586A F.
4. J.D. Gale, A.L. Rohl. *Molecular Simulation*, 2003.– 29.– 291–341, DOI:10.1080/0892702031000104887.
5. G. Kresse, J. Furthmuller. *Comput. Mater. Sci.*, 1996.– 6.– 15–50. [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0).

## ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ИММУНОФЕРМЕНТНЫХ ТЕСТ-СИСТЕМ

К.Е. Бочарова, А.О. Гусар

Научный руководитель – к.х.н., доцент Е.В. Дорожко

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, karinabocharova7@gmail.com

Уникальные физико-химические свойства наноструктурированных материалов обеспечивают широкие перспективы для сопряжения и биологического распознавания с электронной трансдукцией сигнала и для разработки нового поколения биоэлектронных устройств с новыми функциями. Наночастицы золота (НЧАу) обладают высокой биосовместимостью, уникальными структурными, электронными, оптическими и каталитическими свойствами, благодаря которым НЧАу являются привлекательным материалом для формирования иммуносенсоров [1].

В настоящее время пищевая аллергия стала одной из основных проблем со здоровьем. Яичный белок является одной из наиболее распространенных причин пищевой аллергии у детей, особенно детей до 3 лет. Лидирует среди причин аллергии в некоторых странах, опережая аллергию на коровье молоко. Овальбумин (рис. 1) является самым распространенным белком в яичном белке, составляющим 58% яичного белка;

поэтому его можно использовать как маркер наличия яиц в пищевых продуктах [2].

Цель данного исследования – разработать электрохимический иммуносенсор на основе биоконъюгатов наночастиц золота для определения овальбумина.

Синтез НЧАу проводили по методу Френса. В основе синтеза лежит восстановление НЧАу

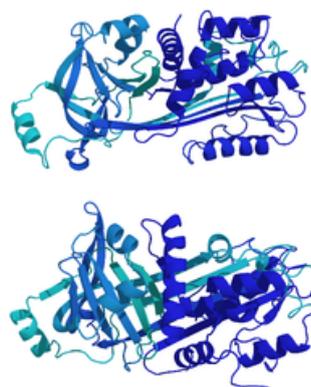


Рис. 1. Трёхмерная модель куриного овальбумина

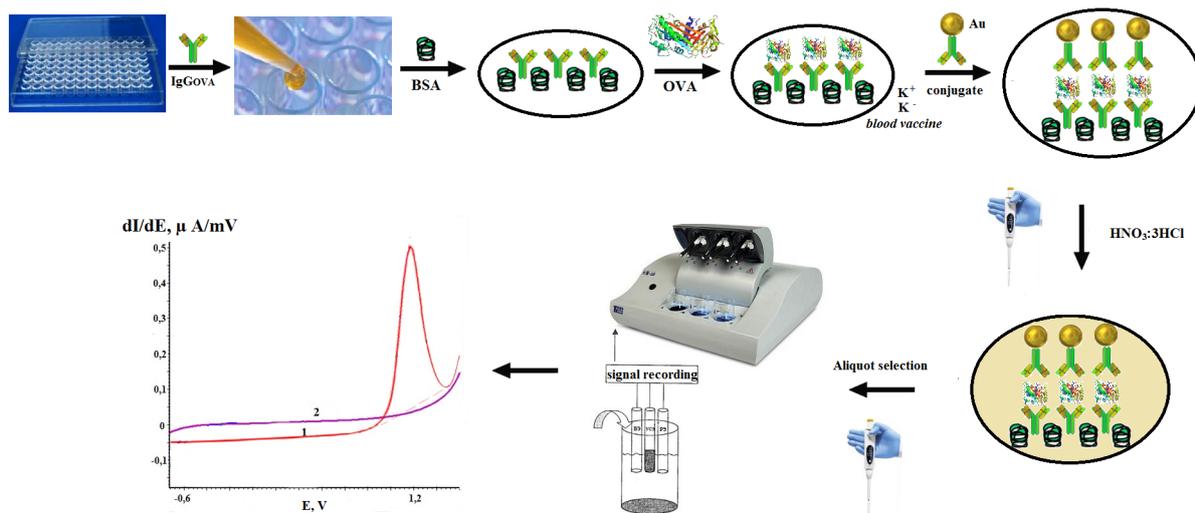


Рис. 2. Схема сборки иммуносенсора для определения овальбумина

из  $\text{HAuCl}_4$  цитратом натрия. НЧ Au имеют сферическую форму со средним размером  $14\text{--}16 \pm 2$  нм (подтверждено результатами просвечивающей электронной микроскопии). Следующим этапом работы было выдерживание белка и коллоидных частиц в различных соотношениях. Подбор соотношения проводили предварительным тестом в титрованном планшете. Он заключался в раститровке антител, введением определенного объема коллоидного золота и введением  $\text{NaCl}$ , для стабилизации золота. Высокие концентрации белка предотвращают коагулирование НЧ Au, изменение окраски при этом не наблюда-

ется. Фиолетовый цвет указывает на недостаток белка, происходит коагулирование коллоидных частиц. На основании полученных данных разработана предварительная сборки иммуносенсора для определения овальбумина (рис. 2).

Таким образом, разработан электрохимический иммуносенсор на основе биоконъюгатов наночастиц золота для определения овальбумина. Подобрано оптимальное соотношение антител к НЧ Au 1:64. Получен анодный сигнал от НЧ Au и их биоконъюгатов при потенциале +1,2 В (формирование оксидной формы НЧ Au).

### Список литературы

1. Daniel M.-C. and Astruc D. // *Chemical Reviews*, 2004. – 104. – P.293–346.
2. K. Sugawara, T. Kadoya, H. Kuramitz, S. Tanaka, *Voltammetric detection of ovalbumin using a peptide labeled with an electroactive compound*, *Anal. Chim. Acta*, 2014. – V.834. – P.37–44.

## АНТИОКСИДАНТНАЯ АКТИВНОСТИ ФЕНОТИАЗИНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

В.С. Вальнкина, А.С. Гуменюк

Научные руководители – к.х.н., доцент О.А. Воронова; к.х.н., доцент С.П. Журавков

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, oaa@tpu.ru

Электрохимическое восстановление кислорода одна из важнейших реакций теоретической и прикладной электрохимии.

Кислород – основной элемент радикально-цепных процессов окисления. Использование антиокислителей – термостабилизаторов, предназначенных для прерывания данных про-

цессов посредством реагирования с самим кислородом или его продуктами: пероксидными или алкильными радикалами, гидропероксидами – перспективное направление прикладной химии кислорода.

Цель данной работы рассмотреть влияние фенотиазина и его производных на процесс