

цент объясненной дисперсии по первой и второй компонентам для X и Y, среднеквадратичная ошибка RMSE, коэффициент детерминации R²,

а также значения максимальной относительной погрешности результата, полученные в ходе апробации моделей, представлены в таблице 1.

Список литературы

1. *Semenov A.P., Medvedev V.I., Gushchin P.A., Vinokurov V.A. Kinetic Inhibition of Hydrate Formation by Polymeric Reagents: Effect of Pressure and Structure of Gas Hydrates // Chemistry and Technology of Fuels and Oils. – 2016. – 51 (6). – P. 679–687.*
2. *Запорожец Е.П., Шостак Н.А. Расчет эффективности одно- и многокомпонентных антигидратных реагентов // Записки Горного института. – 2019. – Т. 238. – С. 423–429.*

ДИЗАЙН ПЛАЗМОН-АКТИВНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ: ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА В ОРГАНИЧЕСКИХ РЕАКЦИЯХ

Д. Е. Воткина, О. А. Гусельникова, П. С. Постников

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, Томск, пр. Ленина, 30
dev2@tpu.ru

На сегодняшний день эффект поверхностно-плазмонного резонанса сфокусировал на себе внимание исследователей как альтернативный подход к инициации химических трансформаций [1–4]. Введение в реакции плазмон-активных субстратов позволяет проводить процессы селективно, быстрее, а главное при более мягких условиях [5–8]. Однако для тонкого контроля целевого процесса необходимо понимать влияние конструкционных параметров катализатора: формы, размера, состава.

Размер плазмон-активного субстрата является одним из основных критериев эффективности протекания реакции, однако его влияние на общую производительность органических реакций до сих пор плохо изучено. Целью настоящего исследования является установление закономерностей «размер-эффективность» на примере наночастиц золота. Так, мы протестировали сферические AuNP размером 3, 13, 22, 32 и 67 нм в обычных модельных органических реакциях: восстановление 4-нитрофениола, гомотиза алкоксиамина и окисление красителя Бисмарка коричневого (ВВУ).

Для установления связи «размер-эффективность» были рассчитаны квантовый выход (QY) и число оборотов (TOF) катализатора. Анализ выбранных дескрипторов показал, что наночастицы меньшего размера в несколько раз более эффективны в исследуемых модельных реак-

циях по сравнению с наночастицами большего размера, что обуславливается как большей площадью поверхности и меньшим рассеянием падающего света.

Важно отметить, что 3 нм наночастицы обладают высоким потенциалом для дальнейшего применения с точки зрения стоимости и технологической привлекательности, что обусловлено

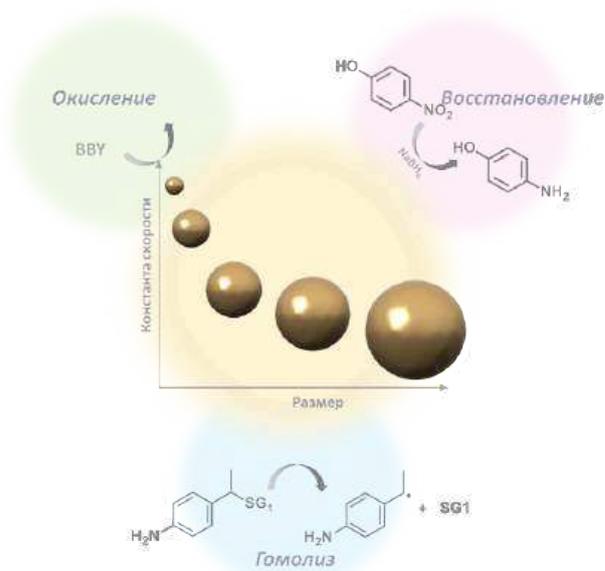


Рис. 1. Исследование влияния размера наночастиц золота в плазмон-иницируемых реакциях восстановления, окисления и гомотиза

простой процедурой их синтеза и меньшим количеством расхода золота. Так, для достижения тех же значений TOF и QY потребуется наночастиц размером 67 нм в 22 раза больше, чем 3 нм. Таким образом, мы предлагаем инструмент для

успешного использования плазмонного катализа в органическом синтезе путем минимизации затрат на энергию и катализаторы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ (проект № 23-73-00117).

Список литературы

1. Xiao Q., Sarina S., Bo A., Jia J., H. Liu, Arnold D.P., Huang Y., Wu H. and Zhu H. // *ACS Catalysis*. – 2014. – V. 4. – P. 1725–1734.
2. Naya S.I., Kimura K. and Tada H. // *ACS Catalysis*. – 2013. – V. 3. – P. 10–13.
3. Tsukamoto D., Shiraishi Y., Sugano Y., Ichikawa S., Tanaka S. and Hirai T. // *Journal of American Chemical Society*. – 2012. – V. 134. – P. 6309–6315.
4. Naya S., Niwa T., Kume T. and Tada H. // *Angewandte Chemie International Edition*. – 2014. – V. 126. – P. 7433–7437.
5. Guselnikova O., Váňa J., Phuong L.T., Panov I., Rulišek L., Trelin A., Postnikov P., Švorčík V., Andris E. and Lyutakov O. // *Chemical Science*. – 2021. – V. 12. – P. 5591–5598.
6. Erzina M., Guselnikova O., Miliutina E., Trelin A., Postnikov P., Svorcik V., Lyutakov O. // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2021. – V. 125. – № 19. – P. 10318–10325.
7. Zhang X., Li X., Reish M.E., Zhang D., Su N.Q. // *Nano letters*. – 2018. – V. 18. – № 3. – P. 1714–1723.
8. Guselnikova O., Váňa J., Phuong L.T., Panov I., Rulišek L., Trelin A., Lyutakov O. // *Chemical science*. – 2021. – V. 12. – № 15. – P. 5591–5598.

КИНЕТИКА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АНТИОКСИДАНТОВ С ИНДИКАТОРНОЙ СИСТЕМОЙ Cu (II) – НЕОКУПРОИН (Nc), ИММОБИЛИЗОВАННОЙ В ПММ

А. А. Дамзина

Научный руководитель – д.х.н., профессор Н. А. Гавриленко

Национальный исследовательский Томский государственный университет
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36
rector@tsu.ru

Известно, что метод CUPRAC (Cupric Reducing Antioxidant Capacity) является широко применяемым и экспрессным методом для определения суммарного содержания антиоксидантов (Σ_{AO}). Данный подход основан на восстановлении Cu (II) в комплексе с Nc антиоксидантами (АО), что приводит к образованию комплексного соединения желтого цвета, максимум поглощения которого определяют спектрофотометрическим методом при $\lambda = 450$ нм. Максимум поглощения полученного комплекса Cu (I) – Nc соответствует суммарному содержанию антиоксидантов, которое чаще всего определяют по градуировочной зависимости для вещества-стандарт ($X_{ст}$) и выражают как количество $X_{ст}$, например, в виде аскорбиновой, галловой кислоты или тролокса. Расчет с использованием $X_{ст}$ часто приводит к систематической погрешности, вследствие разной чувствительности определения вещества-стандарта и аналитов-ан-

тиоксидантов, присутствующих в анализируемой пробе. Решение – использование алгоритма интервальной оценки (ИО), который предложен В. И. Вершининым с коллегами. Алгоритм ИО основан на формировании веера градуировочных зависимостей и представлении Σ_{AO} в виде интервала.

При этом большой интерес представляет реализация метода CUPRAC с использованием твердых носителей. В проведенной ранее работе [1] индикаторная система Cu (II) – Nc, иммобилизованная в полиметакрилатной матрице (Cu (II) – Nc – ПММ) уже использовалась для определения суммарного содержания антиоксидантов в соковой продукции с применением алгоритма ИО. Однако ширина интервалов, полученных с применением алгоритма ИО, на порядок превышала ширину доверительных интервалов в виде случайной составляющей погрешности, что указывает на необходимость