

УДК 544.723.213

АНАЛИЗ СОРБЦИИ МОЛЕКУЛЯРНО-ИМПРИНТИРОВАННОГО И НЕИМПРИНТИРОВАННОГО ПОЛИМЕРОВ

Фам Тхи Гам^{1,2}, Зяблов А.Н.¹, Данг Тхи Ньунг³, Конг Хонг Хань⁴

¹ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», 394018, г. Воронеж;
Университетская пл., 1,
alex-n-z@yandex.ru

²Ханойский университет бизнеса и технологий, г. Ханой, Вьетнам

³ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева»,
г. Москва, Россия

⁴Институт материаловедения, Вьетнамская академия наук и технологий, г. Ханой,
Вьетнам

Молекулярно-импринтированные полимеры (МИП) представляют собой синтетические материалы, способные селективно распознавать и связывать целевые молекулы. Благодаря простому синтезу, низкой стоимости, стабильности и долговечности, они широко востребованы в различных областях науки и техники, включая очистку, сенсорику, технологии разделения и системы доставки лекарственных средств. Синтез МИП включает три стадии: образование предполимеризационного комплекса между функциональным мономером и шаблоном, полимеризацию и удаление шаблона. Условия синтеза (тип сшивающего агента и функционального мономера, время, температура и др.) влияют на морфологию, эффективность и свойства МИП. В связи с этим исследование сорбционных характеристик полимера необходимо для оптимизации условий его синтеза. Цель работы - анализ сорбции стрептомицина сульфата (Strep) молекулярно-импринтированными и неимпринтированными полимерами (НП) из водных растворов.

Молекулярно-импринтированные полимеры синтезировали путем полимеризации смеси, состоящей из сополимера 1,2,4,5-бензолтетракарбоновой кислоты и 4,4'-диаминодифенилоксида (ОАО МИПП НПО «Пластик», Москва) и шаблонной молекулы - стрептомицина сульфата. Неимпринтированный полимер был получен в аналогичных условиях, но без добавления темплата.

Сорбционную способность полученных полимеров оценивали путем измерения изменения концентрации растворов антибиотиков при помощи кондуктометра ССТ-3320Т.

В работе проведено исследование сорбционной способности молекулярно-импринтированных и неимпринтированных полимеров по отношению к стрептомицину сульфата. Экспериментально получены кинетические кривые и изотермы сорбции антибиотика. Показано, что равновесие сорбции стрептомицина сульфата устанавливается в течение 25 минут. Установлено, что изотермы сорбции антибиотика для обоих типов полимеров подобны и описываются моделью мономолекулярной адсорбции (L-тип). В начальной области концентраций наблюдается линейная зависимость сорбции, сменяющаяся плато при высоких концентрациях, что указывает на выход процесса на режим предельного насыщения.

Для оценки сорбционных свойств полимеров рассчитаны степень извлечения (R, %), коэффициент распределения (D), импринтинг-фактор (IF) и коэффициент десорбции (K, %). Молекулярно-импринтированные полимеры демонстрируют более высокую сорбционную способность по сравнению с неимпринтированными полимерами. Так, степень извлечения R для МИП-Strep (20,4%) вдвое выше, чем для НП (9,8%), а коэффициент распределения D у МИП также выше, указывая на более сильное связывание антибиотика. Импринтинг-фактор $IF > 1$ подтверждает избирательность МИП. Коэффициент десорбции K для МИП

(87,8%) превышает показатель НП (77,6%), что свидетельствует о лучшей способности к высвобождению антибиотика и возможности повторного использования. Максимальное количество сорбированного вещества для МИП-Strep составляет 2,89 мг/г.

УДК 543.544

ФОРМИРОВАНИЕ БАЗЫ ДАННЫХ ПО УДЕРЖИВАНИЮ АЗОТИСТЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ В УСЛОВИЯХ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Колосова Е.А., Финкельштейн Е.Е., Курбатова С.В.

Самарский национальный исследовательский университет

имени академика С.П. Королева, ул. Московское шоссе, д. 34, г. Самара, Россия

curbatsv@gmail.com

Азотсодержащие гетероциклы составляют основу современных фармацевтических субстанций, агрохимикатов и функциональных материалов, что требует надежных методов исследования этих веществ и промежуточных продуктов их синтеза. Хроматографический анализ подобных материалов осложнён их особенной молекулярной архитектурой, склонностью к специфическим взаимодействиям с компонентами хроматографической системы и выраженной зависимостью удерживания от состава элюента и природы сорбента. Вариабельность удерживания азотистых гетероциклов обусловлена, в частности, такими особенностями их молекулярного строения, как наличие неподелённой пары электронов атома азота, способность к протонированию, образованию водородных связей, π - π -взаимодействиям и т.п. Отсутствие систематизированных экспериментальных данных существенно затрудняет прогнозирование поведения новых синтезируемых веществ и рациональный подбор условий разделения. Однако, формирование баз данных по удерживанию азотистых гетероциклов (так же, впрочем, как и других классов органических соединений) в жидкостной хроматографии представляет собой сложный процесс и требует современных подходов и альтернативных методов оценки факторов удерживания для включения их в подобные базы, а также использование моделей, учитывающих влияние таких экспериментальных факторов как качественный и количественный состав элюентов, тип хроматографической колонки, сорбента, химической структуры аналитов и т.п. Другими словами, предполагаемая база данных должна включать идентификаторы соединений (структурная формула, заместители, класс гетероцикла); хроматографические условия и экспериментальные параметры удерживания, коэффициенты аппроксимации для различных моделей с указанием границ применимости; сведения о воспроизводимости и статистической достоверности данных. Такой структурированный подход позволяет не только хранить, но и сопоставлять данные, полученные в разных лабораториях на разном оборудовании.

К настоящему времени сформирована база данных, объединяющая физико-химические дескрипторы аналитов ($\log P$, pK_a , площадь полярной поверхности, дипольный момент и пр., наличие специфических функциональных групп), параметры хроматографического режима и экспериментальные значения удерживания. Установлена системная нелинейность зависимостей $\log k$ от концентрации органического модификатора для многофункциональных гетероциклов, проявляющаяся в некоторых случаях в наличии экстремумов при 40–70% (об.) ацетонитрила. Выявлены статистически значимые взаимосвязи между коэффициентами математических уравнений и молекулярной структурой гетероциклов. Очевидно, что формирование базы данных по удерживанию азотистых гетероциклов является необходимым этапом для систематизации накопленного экспериментального материала и унификации подходов к описанию их хроматографического поведения. Приоритетным направлением дальнейших исследований следует считать расширение базы за счёт соединений с различными заместителями и хроматографических систем, включая новые типы сорбентов и элюентов.