

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ МЕТОДАХ АНАЛИЗА АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ОРГАНИЧЕСКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ И БИОАКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Болотин А.В.

ФГБОУ ВПО «Вятский государственный университет»,
Биологический ф-т, каф. Биотехнологии,
Россия, 610000, г. Киров, ул. Московская, д. 36
Тел.: 8(332) 38-10-44, E-mail: alexandr_bolotin@mail.ru

Хорошо известно, что поверхность электрода может выступать в качестве катализатора, определяя тем самым некоторые особенности кинетики химических и электрохимических превращений. При этом очень часто могут возникать неустойчивости стационарных состояний электрохимических систем или переход системы из одного стационарного состояния в другое. Характер временного поведения таких систем определяется как особенностями кинетики процессов, протекающих на поверхности катализатора, так и скоростью диффузии реагирующих веществ к этой поверхности, а также электрическими параметрами электролиза. Как показано в классической работе Шноля, наличие концентрационных и температурных градиентов, часто вызывает возникновение автоколебательной неустойчивости, что приводит к периодическому изменению во времени *аналитического сигнала* (АС) – предельного диффузионного тока, и как следствие, к нарушению обычной для аналитической химии линейной зависимости. В анализируемом нами случае, на устойчивость и воспроизводимость АС, кроме перечисленных процессов переноса, также существенно влияет динамика заполнения поверхности микроэлектрода малорастворимым веществом типа $(\text{Kat})_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$, равно как и сопряжение этого процесса с диффузией и нелинейными поверхностными и электрохимическими превращениями. Следует отметить, что наличие такого сопряжения обычно либо вообще не учитывается при разработке методик количественного анализа различных веществ (с использованием реакций осаждения) методами титрования по предельному диффузионному току, либо для решения такого рода задач применяется неадекватный математический аппарат.

В настоящем сообщении приводятся результаты теоретического исследования методами математического моделирования физико-химических причин возникновения неустойчивости АС в системе электроаналитических реакций. Проведенный анализ позволил найти оптимальные условия амперометрического определения и разработать методики количественного анализа ряда азотсодержащих лекарственных и биоактивных веществ в субстанции и промышленной продукции.