

АННОТИРОВАННЫЙ ОТЧЕТ
о результатах НИР по гранту за 2024 год

Конкурс 2024 года на соискание грантов
для поддержки научно-исследовательской работы
аспирантов и молодых сотрудников ИГУ.

Направление Химия и химические технологии Шифр гранта 091-24-310

1. Наименование НИР по гранту Использование спектроскопии электрохимического импеданса для расчета термодинамических характеристик адсорбции различных аминокислот на платиновом электроде

2. Структурное подразделение (кафедра, лаборатория)
Научно-исследовательский институт нефте- и углехимического синтеза федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Иркутский государственный университет»

3. Исполнитель НИР Амшеев Дмитрий Юрьевич

4. Координаты исполнителя НИР +79516338900; amsheevd@mail.ru

5. Ожидаемые результаты в соответствии с заявленным планом работы:

- На основании данных о пределе обнаружения и линейном участке изотермы адсорбции, сделать вывод о возможности электроаналитического определения исследуемых аминокислот.
- Сравнить значения энергии Гиббса ΔG^0_{ads} при 298 К, полученные при этой температуре с помощью K_{ads} , а также с помощью нескольких изотерм адсорбции в диапазоне температур от 298 К до 316 К через энтальпию адсорбции ΔH^0_{ads} и энтропию адсорбции ΔS^0_{ads} .

6. Основные полученные научные результаты:

- Результаты импедансной спектроскопии и расчеты степени заполнения поверхности платинового электрода Θ показали, что адсорбция исследуемых соединений (этилмалоновой кислоты ЕМА, глутаминовой кислоты Glu, аспарагиновой кислоты Asp и цистеина Cys) описывается изотермой Темкина в координатах $\Theta = f(\ln C)$.
- Уравнения 1 и 2 позволяют рассчитать энергию Гиббса адсорбции ΔG^0_{ads} двумя путями. Первый заключается в использовании константы равновесия K_{ads} при $T = 298$ К. Во втором применяются значения энтальпии ΔH^0_{ads} и энтропии ΔS^0_{ads} адсорбции, полученные из соответствующих изотерм при различных температурах по наклону и свободному коэффициенту кривых в координатах $\ln K_{\text{ads}} = f(1/T)$.

$$\Delta G_{ads}^0 = -RT \ln K_{ads} \quad (1)$$

$$\Delta G_{ads}^0 = \Delta H_{ads}^0 - T \Delta S_{ads}^0 \quad (2)$$

Полученные результаты представлены в Таблице 1.

Таблица 1. Рассчитанные термодинамические характеристики адсорбции исследуемых соединений на платиновом электроде при $T = 298 \text{ K}$.

	ЕМА	Glu	Asp	Cys
ΔH_{ads}^0 , кДж/моль	-17,18	-18,22	-19,82	-48,91
ΔS_{ads}^0 , Дж/моль·К	26,73	26,00	25,09	-43,03
ΔG_{ads}^0 , кДж/моль (Ур. 1)	-25,15	-25,96	-27,18	-35,80
ΔG_{ads}^0 , кДж/моль (Ур. 2)	-25,15	-25,97	-27,30	-36,08

- Таким образом, значения ΔG_{ads}^0 , полученные с помощью двух методов, свидетельствуют о том, что процесс адсорбции аминокислот является экзотермическим, а оба расчетных подхода дают практически идентичные результаты.

7. Предполагаемое использование результатов, в том числе в учебном процессе:

Полученные результаты могут быть использованы для электроаналитических и термодинамических исследований поверхностно-активных веществ на электродных поверхностях. Результаты исследования могут быть использованы при модернизации курса «Теоретическая и прикладная электрохимия», читаемом на 1-м курсе магистратуры химического факультета ИГУ.

8. Перечень публикаций по результатам работы (статьи, доклады) с приложением оттисков или рукописей, направленных в печать:

Термодинамические аспекты электрохимической адсорбции некоторых аминокислот на платиновом электроде / Д.Ю. Амшеев, Е.В. Ветрова, И.А. Пономаренко, А.В. Кашевский, А.Ю. Сафронов // Химия и химическое образование XXI века: материалы VIII Всероссийской молодежной конференции с международным участием, посвященной 150-летию со дня рождения профессора Ю.С. Залькинда и 85-летию со дня рождения профессора В.М. Берестовицкой / отв. ред.: В. В. Пелипко, Р. И. Байчурин, Е. И. Исаева. — Санкт-Петербург : Изд-во РГПУ им. А. И. Герцена, 2025. — С. 138-139.

Исполнитель НИР по гранту: _____ Амшеев Д.Ю.
(подпись)