

**ANALITIK SEZGIRLIKNI OSHIRISHGA ASOSLANGAN OPTIMAL
PH SENSORINI LOYIHALASH UCHUN KIMYOVIY
MODELLASHDAN FOYDALANISH**

*Eshquvvatova Munira , Nurmagamatova Baxtiniso,
Shavkatova Yulduz , Barkinova Marjona*

*Islom Karimov nomidagi Toshkent Davlat Texnika Universiteti
Olmaliq filiali*

Annotatsiya: Kimyoviy tizimlarning xulq-atvorini kimyoviy model yoki Pivo qonuni bilan birlashganda massa ta'siri qonuni asosida bashorat qilish mumkin. Har xil turlarning muvozanat holatidagi kimyoviy xatti-harakatlari va faol turlarning sof javoblari haqidagi ma'lumotlar ushbu ma'lumotlardan datchiklarni loyihalash uchun tizimli ravishda foydalanish g'oyasini ilgari suradi.

Ushbu hissada biz umumiy pH ko'rsatkichlaridan foydalangan holda pH sensorlarini loyihalash uchun kimyoviy modellashtirishni qo'lladik. Alohida hisoblanganligi sababli ular cheklangan dinamik diapazonni aks ettiradi, odatda keng pH diapazonida pH o'lchovlari uchun yoki undan ortiq pH ko'rsatkichlari talab qilinadi. Ikki xil jihat ko'rib chiqildi: 1) pH ko'rsatkichlarini (ya'ni eritmadagi massiv yoki indikatorlar aralashmasi) kombinatsiyasi uchun optimal yondashuvni topish, bu borada optimallashtirish mezoni sifatida analitik sezgirlik qo'llaniladi va 2) muvozanat konstantalarini sozlash. yangi kerakli pH ko'rsatkichlarini ishlab chiqarish uchun ko'rsatkichlar. Ko'rinadigan konstantalarni sozlash surfaktant eritmasi yordamida amalga oshirildi. Suvli va miselyar fazadagi ma'lum bir indikatorning massivi uning dinamik pH diapazonini oshiradi. Fenol qizil, neytral qizil va metil apelsin kabi uchta pH indikatorlari tanlab olindi va ularning Brij-35 miselyar fazasi bilan o'zaro ta'siri o'rganildi. Miselyar eritmadagi indikatorlarning harakati to'g'risida olingan ma'lumotlarga asoslanib, optimal pH sensori ishlab chiqilgan va pH prognozlash qiymatining o'rtacha kvadrat xatosi 0,1 bo'lgan pH prognoz qilingan.

Kalit so'zlar: pH indikatorlari pH sensorlari Optimallashtirish Sensor massivi Analitik sezuvchanlik Kimyoviy modellashtirish

1. Kirish

pH atrof-muhit, hayot haqidagi fanlar, sanoat va biotibbiyot fanlari kabi turli xil o'rganish sohalarida juda muhim parametrdir.[1]. PH shisha elektrod cheklavlari tufayli[2,3], ko'p harakatlar pH aniqlash uchun spektroskopik usullardan foydalanishga qaratilgan[4,5]. Ushbu usullarda turli xil materiallar, masalan, pH ko'rsatkichlari, sintetik florofor bo'yoqlari[6], va nanozarralar[7-9], pH aniqlash uchun qo'llanilgan. Biroq, pH indikatorlari mavjudligi va barqarorligi tufayli odatda

pHni aniqlash uchun ishlatiladi.[10–12].

PH ko'rsatkichlarining kamchiliklari ularning tor dinamik diapazoni, pH indikatorining chiziqli diapazoni ikki pH birligi bilan cheklangan. Tor dinamik diapazonni yengish va pH ko'rsatkichlarini yanada kengroq diapazonda samarali ishlatish uchun ikki xil usul mavjud. Variant - bu eritmada ko'rsatkichlar aralashmasidan foydalanish[5,11], yana bir muqobil pH ko'rsatkichlari qatoridan foydalanishdir[10,13] Har bir indikator alohida-alohida sensor elementi ekanligini va pH aniqlash uchun barcha sensor elementlarining umumiy javoblaridan foydalaniladi.

Spektrofotometrik pH aniqlash uchun bir va ko'p o'zgaruvchan usullar qo'llaniladi[5,11]. Ko'p o'lchovli usullar shovqinni kamaytirish va chegarani nazorat qilish kabi afzalliklarga ega[14],

shu munosabat bilan pH ko'rsatkichlari asosida pH ni aniqlash uchun chiziqli bo'lmagan tahlil usullari qo'llanildi[5,13,15]. Biroq, soddaligi tufayli pH ko'rsatkichlarining chiziqli javobidan va chiziqli eng kichik kvadratchalar usullaridan foydalanish jozibador.[16]. Qisman eng kichik kvadratlar regressiyasi (PLS) ko'p qirrali vosita sifatida nochiziqli usullar o'rniga pH aniqlash uchun vakolatli usul bo'lishi mumkin.

Muvozanat reaksiyasining sharti yon reaksiya kabi o'zgaruvchilar tomonidan boshqarilishi mumkin[17], mitsel konsentratsiyasi[18], va hokazo. pH ko'rsatkichlari zaif kislotalar yoki asoslar bo'lib, ular sirt faol moddalar bilan o'zaro ta'sir qilishi mumkin. Ko'rsatkichlarning o'tish nuqtalari, o'tish intervallari va protonatsiya konstantalari mitselyar psevdofaza mavjudligida o'zgarishi mumkin. Ko'rinib turgan muvozanat konstantasining o'zgarishi indikatorning bir yoki ikkala shaklining suvli va miselyar psevdofaza o'rtasida taqsimlanishi bilan bog'liq. PH ko'rsatkichlari va sirt faol moddalar o'rtasidagi o'zaro ta'sir o'rganildi va turli xil moddalarning taqsimlanishining muvozanat konstantalari o'rganildi.

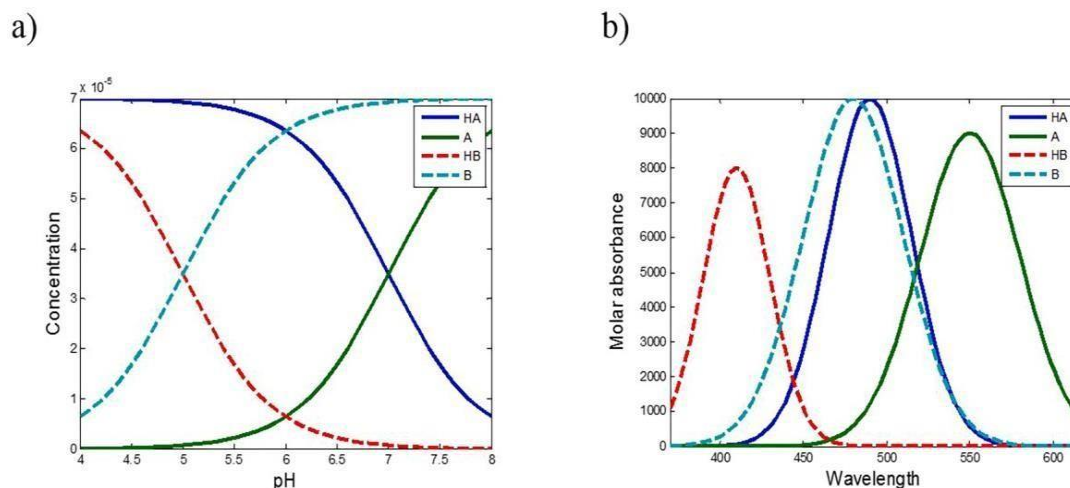
1. Kimyoviy modellashtirish. Kimyoviy modellashtirish yordamida muvozanat holatini nazorat qilish va ko'rinadigan konstantalarni sozlash uchun umumiy strategiya taqdim etilgan. Ushbu strategiyaga muvofiq, kimyoviy modellashtirish to'liq modeldagi ko'rinadigan konstantalar va parametrlar o'rtasidagi ekstraktsiya munosabati uchun qo'llaniladi. Ushbu munosabatlarga asoslanib, ko'rinadigan doimiyning qiymati ma'lum bir eksperimental holat uchun taxmin qilinadi. Shuning uchun ko'rinadigan doimiyning sozlanishi diapazoni hisoblab chiqiladi va to'liq modeldagi turli parametrlarning ta'sirini taxmin qilish mumkin. Xususan, mitselindikator muvozanat tizimida ko'rinadigan muvozanat konstantasi va to'liq model parametrlari o'rtasidagi analitik bog'liqlik hisoblab chiqilgan bo'lib, u sirt faol moddaning turli konsentrasiyalarida indikator protonatsiya konstantasini tizimli ravishda belgilaydi. Asosan, kimyoviy sensor fizik yoki kimyoviy o'zaro ta'sir orqali ma'lum bir tahlil qiluvchiga tanlab javob beradigan va tahlil qilinadigan moddani sifat

yoki miqdoriy aniqlash uchun ishlatilishi mumkin bo'lgan qurilma deb ta'riflanadi. PH ni aniqlash uchun qurilma pH-metr yoki eritmadagi pH indikatorlari kabi kimyoviy birikmalar yoki matritsada immobilizatsiyalangan bo'lishi mumkin. [1,27,28]. Ushbu tadqiqotda, suvli eritmadagi pH ko'rsatkichlarining kimyoviy harakati yaxshi ma'lum bo'lganligi sababli, kimyoviy sensorsuvli eritmada ishlab chiqilgan. Shuningdek, mitselyar eritmada pH indikatorlari harakatining kimyoviy modellari o'rganildi. Kimyoviy model haqidagi ma'lumotlar analitik usullar va tajribalarni optimallashtirish imkoniyatini beradi.

PH sensorlarini optimallashtirishda ikkita jihat ko'rib chiqildi:(1) uzluksiz keng pH diapazoniga erishish uchun indikatorlarning muvozanat konstantalarini sozlash(2) sezgirlikni boyitish asosida pH ko'rsatkichlarining optimal kombinatsiyasini (massiv yoki aralash) loyihalash. Miselyar eritmaning uchta pH indikatorining ko'rinadigan dissotsiatsiya konstantalariga ta'siri (fenol qizil, neytral qizil va metil apelsin) tekshirildi va Kimyoviy modellashtirish pH ko'rsatkichlarining aniq protonatsiya konstantalarini sozlash va natijada pH ni loyihalash uchun ko'rsatma berdi.

2. Ko'rinadigan muvozanat konstantalari va to'liq model parametrlari o'rtasidagi bog'liqlik

Massa ta'siri qonuni (yoki kimyoviy modellashtirish) kimyodagi asosiy tushunchalardan biri bo'lib, u dinamik muvozanatdagi kimyoviy eritmalarining harakatini tushuntiradi va bashorat qiladi.[29,30]. Muvozanat holatida muvozanat konstantalari reaksiyaga kirishuvchi moddalar kontsentratsiyasining mahsulotiga to'g'ridan-to'g'ri proporsional bo'ladi, boshqacha aytganda, muvozanatda ishtirok etuvchi komponentlarning kontsentratsiyasi muvozanat konstantalari bilan boshqariladi. Shuning uchun kimyoviy muvozanat holatini muvozanat konstantalarini sozlash orqali boshqarish mumkin. Ion kuchi, erituvchining turi va konsentratsiyasi kabi parametrlar muvozanat konstantalarini o'zgartiradi. Ko'rinadigan konstantalar va termodinamik konstantalar o'rtasidagi bog'liqlikni massa harakati tenglamalari orqali aniqlash mumkin. Ko'rinadigan muvozanat konstantalarini sozlash g'oyasini ko'rsatish uchun kuchsiz kislotaning oddiy muvozanat tizimi ko'rib chiqildi. Tenglamada ko'rsatilganidek(1), kuchsiz kislotalar uchun protonlanish muvozanatlari miqdoriy jihatdan massalar ta'siri qonuni bilan tavsiflanadi.



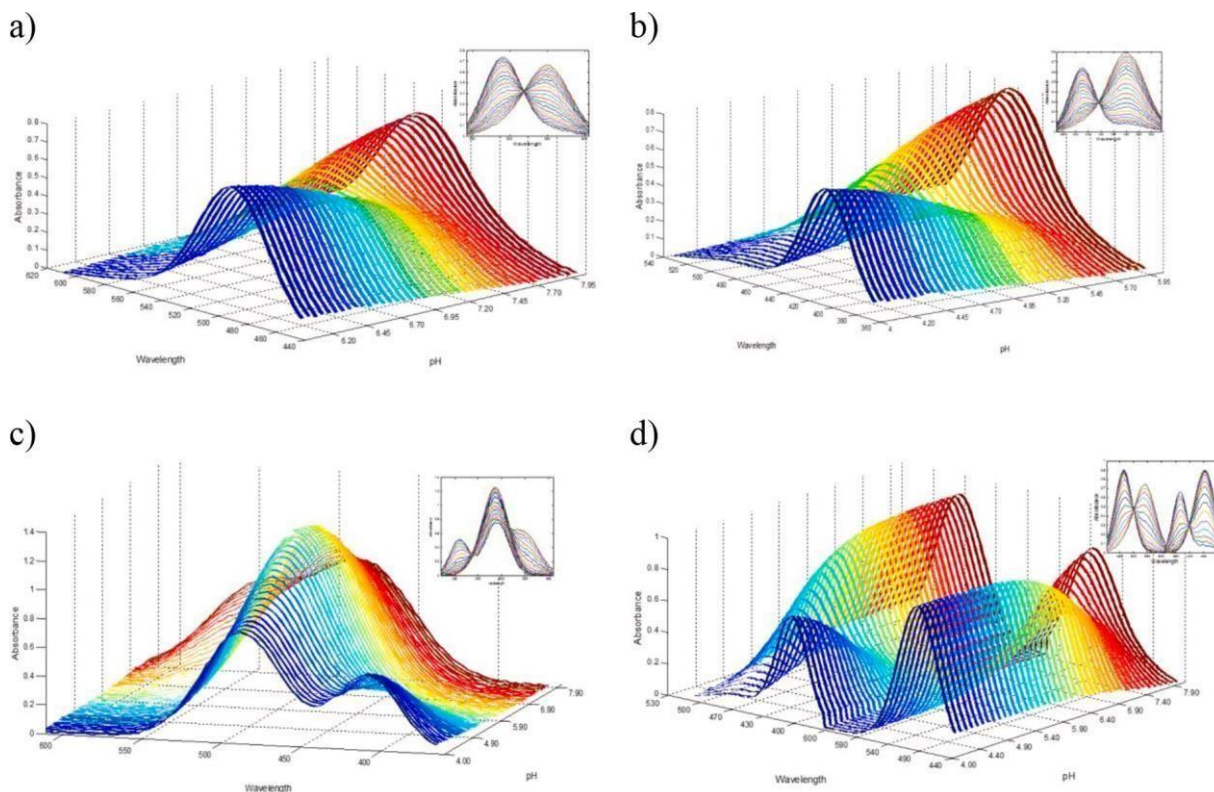
Sxema 1. Suvli mitselyar eritmalarda kislota-ishqor muvozanati

3. Optimallashtirish mezonini sifatida umumlashtirilgan analitik sezgirlik

Sezuvchanlik analitik usullarni baholash va taqqoslash, shuningdek sensorning samaradorligini baholash uchun eng muhim parametrlardan biridir.[25]. Birinchi tartibli kalibrlash usullarida sezuvchanlik tushunchasi aniq analit signalini (NAS) aniqlash orqali tushuntiriladi. NAS qiziqtirgan analitga tegishli signalning bir qismi sifatida aniqlanadi va shuning uchun analit konsentratsiyasining birlik o'zgarishi uchun NAS o'zgarishi aniqlanadi.

Analitik sezuvchanlik qiymati to'lqin

HA (sensor 1) va HB (sensor 2). Har bir sensordan yozib olingan spektr uzunliklari soniga bog'liq emas va o'zgaruvchilar soni har xil bo'lgan har birlashtirilib, uzun spektr vektorini hosil qiladi (2-rasm(d)). Taqqoslash ikkala massiv uchun o'xshash qiymatlarga ega. Analitik sezuvchanlik maqsadida, aralashma va massiv uchun pH o'sishi ikki barobarga qiymatiga asoslanib, pH diapazonini kengaytirish uchun ikkitadan oshirildi (0,1) va to'lqin uzunligi o'sishi massiv, aralashma va har bir foydalangan holda xulosa qilish mumkin. sensor element bir xil to'lqin uzunliklariga ega bo'ladigan tarzda tanlangan. Shuning uchun barcha simulyatsiya qilingan ma'lumotlar matritsalarini bir xil o'lchamga ega. Bundan tashqari, har bir sensor elementning to'lqin uzunligiga teng to'lqin uzunliklari o'sishi bilan massiv uchun boshqa ma'lumotlar to'plami qurilgan.



PLS regressiya modelidan foydalangan holda taxmin qilingan pH o'lchangan pHga nisbatan, pH prognozining ildiz o'rtacha kvadrat xatosi bashorat ma'lumotlar to'plami uchun 0,1 ni tashkil qiladi.

Ilgari kimyoviy model moslamasi miqdoriy pH uchun ishlatilgansuvli eritmada bu uch ko'rsatkich aralashmasi yordamida aniqlash. Kimyoviy modelga asoslangan chiziqli bo'lmagan algoritm taklif qilindi va tahlil qilish uchun dastlabki ma'lumot sifatida ko'rsatkichlarning turli shakllari spektrlari talab qilindi.[15]. Bu erda asosiy nuqta sezgirlikni oshirishga asoslangan sensorlarni loyihalashdir (analitik xizmat sifatida). Umumiy analitik sezgirlik eritmada pH indikatorlarining optimal dizaynini (pH indikatorlari eritmaları aralashmasi yoki massivi)

tushunish uchun qo'llanildi. Sezuvchanlik kabi parametrlardan foydalanishning ushbu g'oyasiturli xil sezish elementlari ishlatiladigan turli xil kimyoviy sensorlarni loyihalash uchun qo'llanilishi mumkin.

Yutishga asoslangan boshqa optik sensorlar singari, pH indikatorlarini rangli eritmada ishlatish mumkin emas va yana bir kamchilik shundaki, sirt faol moddalar va indikatorlar o'rtasidagi o'zaro ta'sir murakkab matritsa yoki aralash erituvchilarda o'zgarishi mumkin.

Shuni ta'kidlash kerakki, biz gidrofil pH ko'rsatkichlarining suvli eritmada va mitsel borligida harakatlarini o'rgandik va indikatorlarning pKa qiymatlari oddiygina suvli eritmada titrlash bilan aniqlandi. Biroq, har xil turdagi hidrofobik pH sezgir problar kiritilgan[46], bu holda hidrofobik kolorimetrik pH sezgir zondlarning pKa qiymatlarini aniqlash uchun metodologiya taklif qilindi va u har qanday suv bilan aralashmaydigan nanomateriallarda qo'llaniladi.[47].



a) 0,5 dan 10 pH oralig'ida suvli va mitselyar fazadagi indikatorlar aralashmasi bo'lgan kalibrash to'plamining eksperimental ma'lumotlari;

b) sinov namunalari pH faqat miselyar eritmadagi indikatorlar aralashmasidan foydalangan holda

d) suvli eritmadagi indikatorlar aralashmasidan foydalangan holda sinov namunalari pH prognozi natijasi.

Xulosa

Tizimning kimyoviy modeli turli eksperimental sharoitlarda kimyoviy tizimning harakatini bashorat qilish uchun foydali ma'lumot beradi. Ushbu tadqiqotda kimyoviy model ma'lumotlarini pH sensorini loyihalash uchun qanday qo'llash mumkinligi ko'rsatilgan.

Keyinchalik, o'lchovlar kimyoviy modelda bashorat qilingan optimal eksperimental sharoitgamuvoqif amalga oshirildi. Ma'lumotlarni tahlil qilish va pH ni aniqlash uchun qisman eng kichik kvadrat usuli qo'llanildi.

Kimyoviy model eksperimental dizayn uchun foydali qo'llanma bo'lishi mumkin. Bu erda kimyoviy model va protonatsiya konstantalari va ko'rsatkichlarning turli ko'rinishlari spektrlari haqidagi bilimlardan turli xil eksperimental sharoitlarda sezgirlik qiymatlarini aniqlash, so'ngra sezgirlik qiymatlari asosida optimal yondashuvni tanlash uchun foydalanish mumkinligi ko'rsatilgan. Ushbu metodologiya ma'lum kimyoviy modeli bo'lgan har qanday kimyoviy tizim uchun qo'llaniladi.

Adabiyotlar:

- [1] D. Wencel, T. Abel, C. McDonagh, Optik kimyoviy pH sensorlari, Anal. Kimyo. 86(1) (2014) 15–29.
- [2] DW King, DR Kester, dengiz suvining pH ni 1,5 dan 8,5 gacha aniqlash kolorimetrikko'rsatkichlar, Mar. Chem. 26 (1) (1989) 5–20.
- [3] X.-M. Shi, L.-P. Mei, N. Chjan, V.-V. Chjao, J.-J. Xu, H.-Y. Chen, A polimer nuqtalari- asoslangan fotoelektrokimyoviy ph sensori: oddiylik, yuqori sezuvchanlik va keng diapazon ph o'lchovi, Anal. Kimyo. 90 (14) (2018) 8300– 8303.
- [4] RH Byrne, JA Breland, Yuqori aniqlikdagi ko'p to'lqinli uzunlikdagi pH ni aniqlashkresol qizil yordamida dengiz suvi, Deep Sea Res. A qism 36 (5)

- (1989) 803–810.
- [5] A. Safavi, M. Bagheri, yuqori va past pH qiymatlari uchun yangi optik pH sensori, *Sens. Aktuatorlar*, B 90 (1-3) (2003) 143-150.
- [6] J. Qi, D. Liu, X. Liu, S. Guan, F. Shi, H. Chang, H. He, G. Yang, lyuminestsent pH bittafloroforga asoslangan keng diapazonli pH o'lchash uchun sensorlar, *Anal. Kimyo*. 87 (12) (2015) 5897–5904.
- [7] Z. Bai, R. Chen, P. Si, Y. Huang, H. Sun, D.-H. Kim, lyuminestsent pH sensori asosida Ag@ SiO₂ yadrosi-qobiq nanozarrasi, *ACS Appl. Mater. Interfeyslar* 5 (12) (2013) 5856–5860.
- [8] L. Santos, JP Neto, A. Krespo, D. Nunes, N. Kosta, IM Fonseca, P. Barkinya, L. Pereyra, J. Silva, R. Martins, E. Fortunato, WO₃ nanozarrachalari asosidagi mos keluvchi pH sensori, *ACS Appl. Mater. Interfeyslar* 6 (15) (2014) 12226–12234.
- [9] A. Barati, M. Shamsipur, H. Abdullohiy, kuchli qo'zg'aluvchan uglerod nuqtalari- bog'liq floresan pH ga qarab o'zgaradi. Nanosensorlar sifatida qo'llanilishi a keng pH diapazoni, *Anal. Chim. Acta* 931 (2016) 25–33.
- [10] A. Martinez-Olmos, S. Kapel-Kuevas, N. Lo'pes-Ruis, AJ Palma, I. de Orbe, L. F. Capita'n-Vallvey, Sensor massiviga asoslangan optik portativ asbob pH ni aniqlash, *Sens. Aktuatorlar*, B 156 (2) (2011) 840–880.