

for reaching optimal parameters of immunoassays are formulated. The studies were carried out to optimize various parameters of reagents applying onto nitrocellulose membrane, including operating speed and leading of reagents, pH of buffers used for immobilization of proteins, concentrations of salts and detergents introduced into the working buffer for the application, the protein concentration of the applied reagents. Experimental curves were obtained on the example of immunochromatographic test system for the determination of bacterial antigen, lipopolysaccharide (LPS) of *Brucella abortus*. The given recommendations have common character and may be used for optimization of test-systems for the detection of wide row of antigens.

### ФЛУОРОГЕННЫЕ И ХРОМОГЕННЫЕ ХЕМОСЕНСОРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(4-ВИНИЛПИРИДИНА)

**Федянина А.Ю.<sup>1</sup>, Тихомирова К.С.<sup>1</sup>, Николаева О.Г.<sup>1</sup>, Толпыгин И.Е.<sup>1</sup>,  
Нефедов В.С.<sup>2</sup>, Дергачева Е.В.<sup>2</sup>, Дубоносов А.Д.<sup>3</sup>, Брень В.А.<sup>1</sup>**

- 1 Научно-исследовательский институт физической и органической химии ФГАОУ ВПО «Южный федеральный университет», Ростов-на-Дону, Россия (344090, Ростов-на-Дону, пр. Стачки, 194/2), e-mail: [tolpygin@ipoc.sfedu.ru](mailto:tolpygin@ipoc.sfedu.ru)
- 2 Физический факультет ФГАОУ ВПО «Южный федеральный университет», Ростов-на-Дону, Россия (344090, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5), e-mail: [dubon@ipoc.sfedu.ru](mailto:dubon@ipoc.sfedu.ru)
- 3 ФГБУН Южный научный центр Российской академии наук, Ростов-на-Дону, Россия (344010, Ростов-на-Дону, ул. Чехова, 41), e-mail: [aled@ipoc.sfedu.ru](mailto:aled@ipoc.sfedu.ru)

Разработаны методы синтеза и получен ряд новых полимерных хемосенсорных систем на основе поли(4-винилпиридина) и его сополимера с поли(бутилметакрилатом). Модификация исходных полимеров проводилась путем введения в его структуру фрагментов, содержащих рецепторные и сигнальные центры. Проведенные спектральные исследования полученных полимерных сенсоров позволили установить их структуру, определить основные характеристики и оценить проявляемые ими ионактивные свойства. Синтезированные соединения обладают слабой флуоресценцией в растворах и проявляют высокую хемосенсорную активность по отношению к анионам. Взаимодействие с анионами F<sup>-</sup> и AcO<sup>-</sup> приводит к резкому увеличению интенсивности флуоресценции. Наиболее эффективными и селективными флуорогенными системами для определения фторид-анионов оказываются хемосенсоры, полученные за счет модификации сополимера поли(4-винилпиридина) с поли(бутилметакрилатом). Одновременно с этим соединения на основе данного сополимера являются эффективными хромогенными хемосенсорами для детектирования ионов F<sup>-</sup> и CN<sup>-</sup>.

### FLUOROGENIC AND CHROMOGENIC CHEMOSENSOR MATERIALS BASED ON POLY(4-VINYLPYRIDINE)

**Fedyanina A.Y.<sup>1</sup>, Tikhomirova K.S.<sup>1</sup>, Nikolaeva O.G.<sup>1</sup>, Tolpygin I.E.<sup>1</sup>,  
Nefedov V.S.<sup>2</sup>, Dergacheva E.V.<sup>2</sup>, Dubonosov A.D.<sup>3</sup>, Bren V.A.<sup>1</sup>**

- 1 Research Institute of Physical and Organic Chemistry, Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia (344090, Rostov-on-Don, Stachka Av. 194/2), e-mail: [tolpygin@ipoc.sfedu.ru](mailto:tolpygin@ipoc.sfedu.ru)
- 2 Department of Physics, Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia (344090, Rostov-on-Don, Zorge ct., 5), e-mail: [dubon@ipoc.sfedu.ru](mailto:dubon@ipoc.sfedu.ru)
- 3 Southern Scientific Center of Russian Academy of Sciences, Rostov-on-Don, Russia (344010, Rostov-on-Don, Chekhova st., 41), e-mail: [aled@ipoc.sfedu.ru](mailto:aled@ipoc.sfedu.ru)

Series of novel polymeric chemosensor systems based on poly(4-vinyl)pyridine and its copolymer with poly(buthylmethacrilate) were synthesized. Initial polymers were modified by introduction in their framework of fragments containing receptor and signaling centers. Structure, main characteristics and ionochromic properties were investigated by spectral methods. Synthesized compounds reveal weak fluorescence and intense chemosensor activity towards anions. Interaction with F<sup>-</sup> and AcO<sup>-</sup> leads to strong increase of fluorescence intensity. Chemosensors synthesized by modification of poly(4-vinyl)pyridine - poly(buthylmethacrilate) copolymer are the most effective and selective fluorogenic systems for fluoride anions detection. These compounds at the same time display effective chromogenic activity for F<sup>-</sup> and CN<sup>-</sup> recognition.

### КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ И ИОНИЗАЦИИ ХЕЛАТНОГО КОМПЛЕКСА ЛАНТАНА (III)

**Харченко В.И.<sup>1</sup>, Алексейко Л.Н.<sup>2</sup>, Чередниченко А.И.<sup>1</sup>, Курбатов И.А.<sup>2</sup>**

- 1 ФГБУН «Институт химии ДВО РАН», Владивосток, Россия (690022, г. Владивосток, проспект Столетия Владивостока, 159), e-mail: [vikharchenko@ich.dvo.ru](mailto:vikharchenko@ich.dvo.ru)
- 2 ФГАОУ ВПО «Дальневосточный федеральный университет», Владивосток, Россия (690950, г. Владивосток, ул. Суханова, 8), e-mail: [alexeiko.ln@mail.ru](mailto:alexeiko.ln@mail.ru)

С целью описания колебательной структуры и характеристик ионизации хелатного комплекса лантана (III) La(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>(ГМФА)<sub>3</sub> (ГМФА – гексаметилфосфотриамид) квантово-химическим методом в рамках теории функционала плотности изучены его геометрическая структура и электронное строение в основном и ионизированном состояниях. В вакуумном приближении методом DFT с гибридным обменно-корреляционным функционалом

лом PBE0, Штутгартским псевдопотенциалом и базисом ECP46MWB (La) рассчитана колебательная структура данного комплекса, дана интерпретация особенностей его экспериментальных колебательного и рентгеновского фотоэлектронного спектров. По результатам моделирования сделаны выводы о наиболее вероятных центрах ионизации данной молекулярной системы. Определено влияние изменения геометрии комплекса на его колебательную структуру. Сделаны предположения о взаимосвязи между электронными характеристиками лигандов, основными модами колебаний и ионизацией данного хелатного соединения лантана (III).

### QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS OF VIBRATIONAL STRUCTURE AND IONIZATION OF THE LANTHANUM (III) CHELATE COMPLEX

**Kharchenko V.I.<sup>1</sup>, Alexeiko L.N.<sup>2</sup>, Cherednichenko A.I.<sup>1</sup>, Kurbatov I.A.<sup>2</sup>**

1 Institute of Chemistry, Far-Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences, Vladivostok, Russia (690022, Vladivostok, Prospekt Stoletiya Vladivostoku, 159), e-mail: vikharchenko@ich.dvo.ru  
2 Far-Eastern Federal University, Vladivostok, Russia (690950, Vladivostok, Sukhanova Str., 8)

In order to explain the vibrational structure and characteristics of ionization of the chelate lanthanum (III) complex  $\text{La}(\text{NO}_3)_3(\text{HMPA})_3$  (HMPA - hexamethylphosphotriamide), its structural parameters and electronic structure in the ground and ionized states was studied by the quantum chemical method within the density functional theory. The vibrational structure of this complex was calculated by the DFT method with the hybrid exchange-correlation functional PBE0, Stuttgart pseudopotential and basis ECP46MWB (La) in the vacuum approximation. Features of its experimental vibrational and XPS spectra were specified. According to the performed simulations, the conclusions were done about the most likely centers of ionization of this molecular system. An effect of the geometry change on the compound vibrational structure was revealed. Assumptions were suggested about the relationship between the ligand electronic parameters, the main vibrational modes and ionization of this chelate lanthanum (III) compound.

### ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И ОСОБЕННОСТИ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ КОМПЛЕКСА ЛАНТАНА (III): КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

**Харченко В.И.<sup>1</sup>, Алексейко Л.Н.<sup>2</sup>, Курбатов И.А.<sup>2</sup>, Мирочник А.Г.<sup>1</sup>, Чердниченко А.И.<sup>1</sup>, Жихарева П.А.<sup>1</sup>**

1 ФГБУН «Институт химии ДВО РАН», Владивосток, Россия (690022, г. Владивосток, пр. Столетия Владивостока, 159), e-mail: vikharchenko@ich.dvo.ru  
2 ФГАУ ВПО «Дальневосточный федеральный университет», Владивосток, Россия (690091, г. Владивосток, ул. Суханова, 8)

С целью описания особенностей возбужденных синглетных и триплетных электронных состояний и объяснения механизма люминесценции комплекса лантана (III)  $\text{La}(\text{NO}_3)_3(\text{ГМФА})_3$  (ГМФА – гексаметилфосфотриамид) квантово-химическими методами изучены его электронное строение в основном и возбужденных состояниях. В вакуумном приближении методами функционала плотности DFT и TDDFT с гибридным обменно-корреляционным функционалом PBE0, Штутгартским псевдопотенциалом и базисом ECP-MWB смоделированы структура и спектральные свойства данного комплекса, дана интерпретация особенностей экспериментальных электронных спектров поглощения и люминесценции. Для выявления влияния механического воздействия проведено модельное смещение слоев молекул в кластере  $(\text{La}(\text{NO}_3)_3(\text{ГМФА})_3)_4$ , дана оценка эффекта дислокации на электронное строение молекулярной системы. По результатам моделирования сделаны выводы о механизме люминесценции, обсуждена возможность управления люминесценцией в наноструктурированных материалах.

### ELECTRONIC STRUCTURE AND FEATURES OF EXCITED STATES OF THE LANTHANUM (III) COMPLEX: QUANTUM CHEMICAL SIMULATIONS

**Kharchenko V.I.<sup>1</sup>, Alexeiko L.N.<sup>2</sup>, Kurbatov I.A.<sup>2</sup>, Mirochnik A.G.<sup>1</sup>, Cherednichenko A.I.<sup>1</sup>, Zhikhareva P.A.<sup>1</sup>**

1 Institute of Chemistry, Far-Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences, Vladivostok, Russia (690022, Vladivostok, Prospekt Stoletiya Vladivostoku, 159), e-mail: vikharchenko@ich.dvo.ru  
2 Far-Eastern Federal University, Vladivostok, Russia (690091, Vladivostok, Sukhanova Str., 8)

In order to explain features of the excited singlet and triplet electronic states and the luminescence mechanism of the lanthanum (III) complex  $\text{La}(\text{NO}_3)_3(\text{HMPA})_3$  (HMPA - hexamethylphosphotriamide), the electronic structure of the complex in the ground and excited states was studied by quantum chemical methods. The structure and spectral properties of the complex were simulated by the density functional methods DFT and TDDFT with hybrid exchange-correlation functional PBE0, and the Stuttgart pseudopotential and basis ECP-MWB in the vacuum approximation. The explanation was done of features of the experimental electronic absorption and luminescence spectra. To determine an effect of mechanical stress, the simulated shift of the molecular layers was performed in the  $(\text{La}(\text{NO}_3)_3(\text{HMPA})_3)_4$  cluster. The estimation was given for the effect of dislocation on electronic structure of the molecular system. According to the simulations, the conclusions were done on the mechanism of luminescence, possibility of the luminescence control in nanostructured materials was discussed.