



<https://doi.org/10.15407/polymerj.47.03.111>  
УДК 541.26:678.01:678.664:66.011

**Лариса ГОРБАЧ**

ORCID: 0000-0003-2711-7244

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України  
48, Харківське шосе, Київ, 02155, Україна  
e-mail: gorbachla@ukr.net

**Тетяна СЕРГЕЄВА**

ORCID: 0000-0003-3486-2701

Інститут молекулярної біології і генетики НАН України  
вул. Заболотного, 150, Київ, 03143, Україна

**Олександр БРОВКО**

ORCID: 0000-0003-0238-1137

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України  
48, Харківське шосе, Київ, 02155, Україна

## СТВОРЕННЯ КОЛОРИМЕТРИЧНОЇ СЕНСОРНОЇ СИСТЕМИ ДЛЯ ШВИДКОГО ПОЗАЛАБОРАТОРНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АТРАЗИНУ

Детально досліджено формування рецепторних сайтів зв'язування в атразин-селективних молекулярно-імпринтованих полімерних мембранах і створено на їх основі колориметричну сенсорну систему для швидкого позалабораторного визначення атразину. Поєднували здатність молекулярно-імпринтованих полімерів (МІП) селективно зв'язувати сполуку-аналіт (атразин) і генерувати колориметричний сенсорний відгук при взаємодії з відповідним реагентом. Особливості формування сайтів зв'язування в МІП досліджено методом ІЧ-спектроскопії. Детально досліджено ІЧ-спектри й підтверджено характеристичні смуги вихідних сполук: функціонального мономеру — метакрилової кислоти (МАК), атразину та композицій на їх основі. Доведено наявність міжмолекулярної взаємодії між молекулами атразину та МАК. Невелика енергія таких зв'язків (1—2 ккал/моль) дає змогу легко видаляти атразин при екстракції з утворенням сайту зв'язування. Молярне співвідношення між атразином і функціональним мономером у вихідній суміші мономерів становило 1:2. Загальний вміст атразину в полімерній сітці становив 5 мас.%. Показано, що МІП селективно зв'язує атразин і генерує колориметричний сенсорний відгук, тобто забарвлює плівки МІП в інтенсивно-пурпуровий колір при взаємодії з реагентом забарвлення бромфеноловий синій /AgNO<sub>3</sub>. Продемонстровано селективність створеної сенсорної системи при використанні структурних аналогів атразину: метрибузину, десметрину й симазину. Цифрові зображення забарвлених зразків отримували за допомогою камери смартфона. Інтенсивність забарвлення оцінювали за допомогою програмного забезпечення Color Grab у кольоровій моделі RGB. Межа визначення атразину за створеною колориметричною сенсорною системою становить 0,9 мкМ, лінійний динамічний діапазон 0,9—2,3 мкМ.

**Ключові слова:** атразин, колориметрична сенсорна система, молекулярно імпринтовані полімери.

Цитування: Горбач Л., Сергєєва Т., Бровко О. Створення колориметричної сенсорної системи для швидкого позалабораторного визначення атразину. *Полімерний журнал*. 2025. № 3. С. 111—117. <https://doi.org/10.15407/polymerj.47.03.111>

© Publisher PH “Akadempriodyka” of the NAS of Ukraine, 2025. This is an open access article distributed under the CC BY-ND 4.0 licence

## Вступ

Атразин — один із найпоширеніших гербіцидів, які використовують для знищення широколистих бур'янів і однорічних трав. Навіть за дуже малих концентрацій він спричиняє забруднення питної води й ґрунту, що може бути шкідливим для живих організмів [1, 2]. Атразин здатний накопичуватися та зберігати свою активність у ґрунті впродовж 1—2 років [3]. За даними Агентства з охорони навколишнього середовища США (US EPA), короточасний вплив атразину, що перевищує максимальний рівень забруднення питної води 3 мкг/л, може призвести до захворювань легень, серця й нирок, низького кров'яного тиску, м'язових спазмів, втрати ваги та пошкодження надниркових залоз, а тривалий вплив може спричинити набагато серйозніші захворювання [4]. Наявність і накопичення залишків пестицидів у навколишньому середовищі — одна з найактуальніших проблем, для вирішення якої потрібні прості та недорогі тест-засоби, що дають змогу проводити якісний або кількісний аналіз поза аналітичними лабораторіями, тобто в місцях, де безпосередньо перебуває об'єкт аналізу й де використання традиційних інструментальних методів, таких як вискоэффективна рідинна хроматографія та газова хроматографія з мас-спектрометрією, утруднене [5, 6].

Більшість таких тест-систем ґрунтуються на хімічних реакціях на поверхні різноманітних сорбентів і легко реєструються, наприклад появою чи зміною забарвлення. Зазвичай вони не потребують істотної підготовки проби до аналізу, використання складних стаціонарних приладів і лабораторного устаткування, залучення висококваліфікованого персоналу. Проте такі системи можуть бути недостатньо селективними.

У цій роботі запропоновано розв'язання проблеми шляхом створення тест-систем на основі молекулярно-імпринтованих полімерних мембран (МІП-мембран) [7—14]. МІП мають високий рівень селективності, що забезпечує можливість їх використання при детектуванні й визначенні концентрації токсинів [12—16], зокрема атразину, за реальних умов. Комбінування МІП з підходами аналітичної хімії, наприклад з використанням якісних реакцій, дає змогу створити ефективні тест-системи для визначення різноманітних органічних спо-

лук. Вибір вихідних компонентів МІП, а також хімічних реагентів, що реагують з молекулою-матрицею (аналітом) і дають кольорову реакцію, здебільшого зумовлений як особливостями її просторової структури, так і наявністю відповідних функціональних груп. При цьому функціональність молекули-матриці має забезпечувати комплексоутворення з функціональними групами сайту зв'язування і реакцію зі сполукою-барвником.

Метою нашої роботи було детальне дослідження особливостей формування рецепторних сайтів зв'язування в атразин-селективних МІП і створення на їх основі колориметричної сенсорної системи для швидкого позалабораторного визначення атразину.

## Експериментальна частина

**Матеріали.** Триетилєнґлікольдиметакрилат (ТЕГДМ), диметилформамід (ДМФА), 2,2'-диметокси-2-фенілацетофенон (99%), метакриловова кислота (МАК), атразин придбано у Sigma-Aldrich (Alsi, Київ, Україна), полі(етилєнґліколь) (Мм 20 000) (ПЕГ, Fluka) Усі реактиви були марки «ч.д.а.» і використовувалися у вихідному стані без додаткового очищення. Олігоуретан акрилат (ОУА) синтезований, як описано в роботі [11].

## Атразин селективні МІП

Для синтезу селективних МІП як матрицю використовували атразин, як акрилатну складову — ТЕГДМ, як ініціатор УФ-ініційованої радикальної полімеризації — 2,2'-диметокси-2-фенілацетофенон. За отриманими нами раніше експериментальними даними МАК забезпечувала формування найбільш афінних до атразину рецепторних сайтів зв'язування [12, 13]. Молярне співвідношення між атразином і функціональним мономером у вихідній суміші мономерів становило 1 : 2. Загальний вміст атразину в полімерній сітці становив 5 мас.%. Гнучкі тонкі плівки, отримували за співвідношення ОУА/ТЕГДМА = 85/15 [11]. Для отримання пор застосовували ДМФА (50 об.%) і ПЕГ (Мм 20000). Суміш мономерів полімеризували у формі з двох скляних пластин, фіксованих на відстані 60 мкм за допомогою тefлонових спейсерів. Опромінювали композицію

за допомогою люмінесцентної лампи (Philips TL 2001 8W × 4,  $\lambda = 365$  нм) протягом 30 хв. Після полімеризації атразин екстрагували етанолом в апараті Сокслета (8 год), а потім у воді для видалення матричних молекул, поліетиленгліколю, компонентів, що не увійшли до складу полімерної сітки ( $T = 80$  °C, 8 год).

**Контрольні зразки.** Контрольні полімерні плівки синтезували з використанням тих самих сумішей мономерів, що й для синтезу МІП, але без матричних молекул (атразину).

**Колориметрична сенсорна система для визначення атразину.** Зразки МІП розміром  $10 \times 10$  мм розташовували в окремих боксах, у які додавали 2 мл розчину атразину концентрації 0,9; 1,4; 1,9 і 2,3 мкМ. Після інкубації зразка в розчині його промивали в дистильованій воді. Зв'язаний з МІП атразин надалі виявляли після взаємодії з сумішшю бромфенолового синього (БФС) та азотнокислого срібла ( $\text{AgNO}_3$ ) за співвідношення БФС: $\text{AgNO}_3 = 1:1$  [17]. Під дією цих реагентів спостерігали негайну появу інтенсивно-пурпурового забарвлення плівки. Інтенсивність забарвлення змінювалась від світло рожевого до інтенсивно пурпурового залежно від концентрації атразину в аналізованому зразку.

## Методи дослідження

Формування рецепторних сайтів зв'язування в МІП досліджували методом ІЧ-спектроскопії з Фур'є-перетворенням, спектрофотометр «Tensor 37» (Bruker). Спектри отримували за  $T = 20$  °C в діапазоні частот  $600\text{—}4000$   $\text{см}^{-1}$ .

Цифрові зображення забарвлених зразків отримували за допомогою камери смартфона Samsung Galaxy J7 SM-J700H Gold, оснащеного операційною системою Android 5.1, а також основною та фронтальною камерами 13 і 5 Мп відповідно.

Інтенсивність забарвлення оцінювали за допомогою програмного забезпечення *Color Grab* (version 3.6.1, Loomatix) у кольоровій моделі RGB [18]. Смартфон закріплювали на штативі таким чином, щоб спосіб області захоплення зображення, освітленість і фокусна відстань зберігалися сталими протягом усіх вимірювань. Інтенсивність ( $I$ ) обчислювали за формулою:

$$I = 0.299R + 0.587G + 0.114B, \quad (1)$$

де:  $I$  — інтенсивність у градаціях сірого;  $R$ ,  $G$ ,  $B$  — змінні значення, які характеризують колір робочого діапазону (за допомогою моделі RGB). Для кожного зразка проводили три паралельних вимірювання.

Абсорбцію ( $A$ ) світла зразком обчислювали за рівнянням Ламберта—Бера [18]:

$$A = \log_{10} \left( \frac{I_0}{I} \right), \quad (2)$$

де:  $I$  — значення інтенсивності, обчислене за формулою (1) у градаціях сірого;  $I_0$  — значення інтенсивності вихідного незабарвленого зразка, отримане з використанням смартфона. Усі RGB дані експортували й обробляли з використанням програми *OriginPro 8*.

## Результати дослідження та їх обговорення

Формування рецепторних сайтів зв'язування в синтезованих МІП вивчали методом ІЧ-спектроскопії. Досліджено ІЧ-спектри вихідних сполук: МАК, атразину й композицій на їх основі. На рис.1 наведені спектри МАК (спектр 2), атразину (спектр 3), комплексу МАК + атразин у ДМФА (спектр 1) і комплексу МАК+атразин із видаленим ДМФА (спектр 4). Характеристичними смугами в спектрі МАК є коливання карбоксильної групи [19, 20]. У МАК і в інших карбонових кислотах карбоксильні групи перебувають у вигляді димерів з дуже сильним водневим зв'язком між карбонільними та гідроксильними групами двох молекул. Такі асоціації зберігаються навіть у розведених розчинах. Утворення асоціатів підтверджує широка смуга валентних коливань груп  $-\text{OH}$  у діапазоні частот  $2200\text{—}3200$   $\text{см}^{-1}$ . Максимуми такої смуги, згідно з літературними даними [19, 20], розташовані за  $2702$  та  $2619$   $\text{см}^{-1}$ . Валентним коливанням групи  $\text{C}=\text{O}$  відповідає смуга з частотою коливань  $1695$   $\text{см}^{-1}$ . Смуга з максимумом за  $1635$   $\text{см}^{-1}$  належить до валентних коливань  $\text{C}=\text{C}$  груп. Положення її максимуму належить від водневих зв'язків, утворених за рахунок карбонільної групи [19, 20]. У діапазоні частот  $1299\text{—}1455$   $\text{см}^{-1}$  лежать деформаційні коливання  $\text{CH}_3$  та  $\text{CH}_2$  груп.

Характеристичними смугами в спектрі атразину (рис. 1, спектр 3) можна вважати такі: смугу з

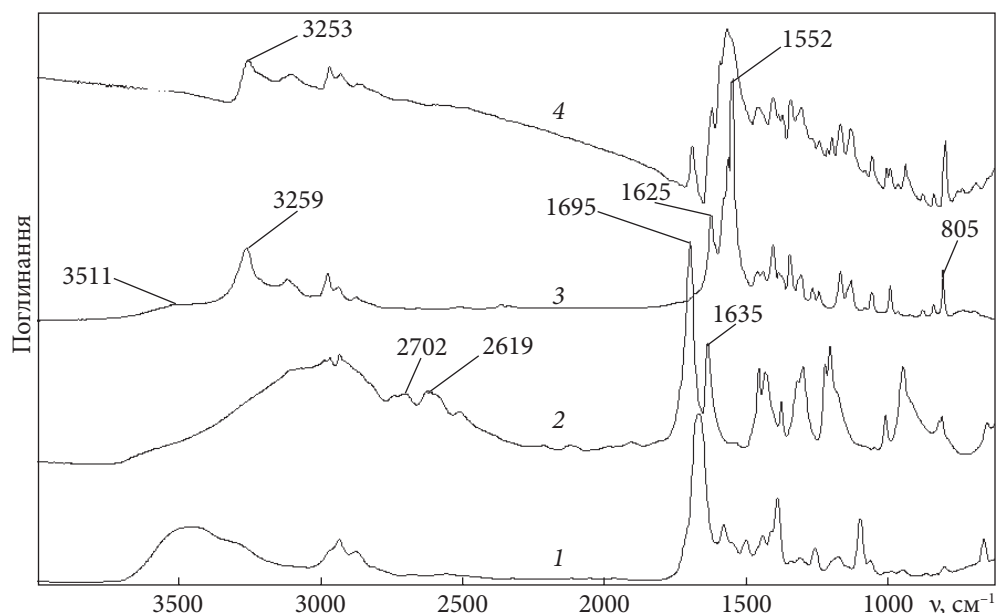


Рис. 1. ІЧ-спектри атразину та його комплексу з ФМ: 1 — МАК + атразин у ДМФА; 2 — МАК; 3 — атразин; 4 — МАК + атразин

максимумом за  $3259\text{ см}^{-1}$  відносять до валентних коливань асоційованих  $\text{-NH-}$  груп, смуги за  $2973$  та  $2936\text{ см}^{-1}$  характеризують валентні коливання груп  $\text{CH}_3$  та  $\text{CH}$ , смуги  $1623$  і  $1549\text{ см}^{-1}$  відносять до скелетних коливань ароматичного циклу. На смугу  $1549\text{ см}^{-1}$  може також впливати коливання  $\text{C-Cl}$ . До валентних коливань  $\text{C-Cl}$  належить також смуга  $805\text{ см}^{-1}$  [19, 20].

На ІЧ-спектрі комплексу МАК+атразин + ДМФА (рис. 1, спектр 1) проявляються переважно смуги ДМФА, тому детальніше розглянуто спектр комплексу МАК+атразин після відкачування ДМФА (рис. 1, спектр 4). На цьому спектрі вдалося ідентифікувати смуги, пов'язані з коливанням хімічних груп в атразині. Відмічені незначні зсуви цих смуг у низькочастотний діапазон спектра. Так смуга  $805\text{ см}^{-1}$  ( $\nu\text{ C-Cl}$ ) у спектрах комплексу є складною та має два максимуми  $805$  і  $793\text{ см}^{-1}$ . Смуга  $3259\text{ см}^{-1}$  ( $\nu\text{ NH}$ ) зсунута до  $3253\text{ см}^{-1}$  ( $6\text{ см}^{-1}$ ). На цьому спектрі можна ідентифікувати й смуги, що належать до спектра МАК. Так смуга  $947\text{ см}^{-1}$  в ІЧ-спектрі МАК у спектрі комплексу зміщена на  $9\text{ см}^{-1}$  у низькочастотний діапазон спектра до  $938\text{ см}^{-1}$ . Такі зміщення можуть вказувати на міжмолекулярну взаємодію між атразином і МАК [21]. Порівняно незначні зміщення частот в ІЧ-спектрах комплексу характеризують нековалентні взаємодії (дисперсійні, ван-дер-ваальсові зв'язки).

Енергія таких зв'язків невелика ( $1\text{--}2$  ккал/моль), завдяки чому атразин можна легко видалити з полімерної сітки шляхом екстракції з подальшим утворенням рецепторного сайту зв'язування.

Ідея щодо створення колориметричної сенсорної системи для швидкого позалабораторного визначення атразину базувалася на поєднанні здатності МІП селективно зв'язувати сполуку-аналіт (атразин) і генерувати колориметричний сенсорний відгук при взаємодії з відповідним реагентом.

Сполуки, під дією яких атразин утворює кольорові комплекси, обирали з урахуванням його структурних особливостей і функціональності, наявності атома хлору й гетероциклічного атома азоту [17]. Було визначено експериментально, що застосування реагентів для забарвлення  $\text{БФС/AgNO}_3$  для якісного визначення атразину є найбільш інформативним, колориметрична сенсорна система забезпечує найвищий сенсорний відгук і забарвлює плівку МІП в інтенсивно пурпуровий колір. Зафіксовані колориметричні сенсорні відгуки наведено на рис. 2.

Для демонстрації принципової можливості практичного застосування такої тест-системи для визначення атразину отримували шкалу відносного забарвлення, з якою надалі візуально порівнювали забарвлені зразки.

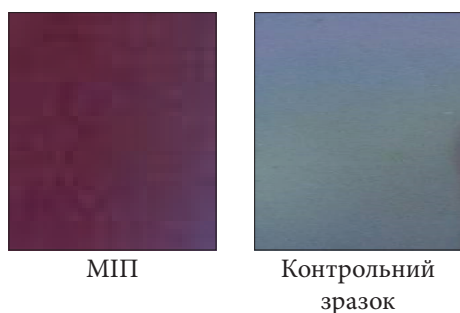


Рис. 2. Фотографії МІП мембран після адсорбції атразину з аналізованих зразків і забарвлення БФС/AgNO<sub>3</sub>

#### Фото забарвлених зразків колориметричної сенсорної системи для визначення атразину

| 2,3 мкМ  | 1,9 мкМ | 1,4 мкМ | 0,9 мкМ |
|----------|---------|---------|---------|
|          |         |         |         |
| МІП      |         |         |         |
|          |         |         |         |
| Контроль |         |         |         |

Для побудови калібрувального графіка й підтвердження принципової можливості практичного застосування МІП мембран як основи колориметричної сенсорної системи паралельно проводили тестування МІП і контрольних мембран, у яких не були сформовані атразин-селективні рецепторні сайти. Для тестування зразки розміром 10 × 10 мм інкубували в розчині атразину за концентрації 0,9; 1,4; 1,9 і 2,3 мкМ. Надалі зразки промивали в дистильованій воді, на кожен зразок наносили по 60 μl розчину реагентів забарвлення — суміші 0,4%-вого водного розчину БФС та 2%-вого водного розчину AgNO<sub>3</sub> за співвідношення компонентів 1:1. Фото забарвлених зразків колориметричної сенсорної системи наведено у таблиці.

За отриманими цифровими зображеннями обчислювали величину інтенсивності забарвлення.

На основі отриманих показників будували калібрувальний графік залежності величини

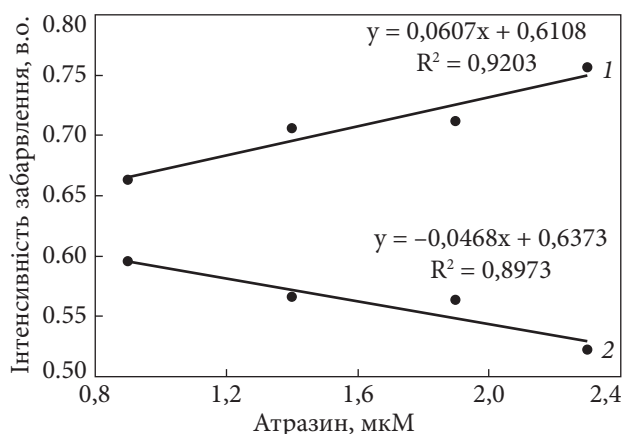


Рис. 3. Залежність величини інтенсивності забарвлення зразків МІП (1) і контрольних зразків (2) від концентрації атразину в аналізованих розчинах

інтенсивності забарвлення зразків від концентрації аналіту (атразину) в аналізованих водних розчинах (рис. 3).

Межа визначення атразину за допомогою створеної колориметричної сенсорної системи становить 0,9 мкМ, лінійний динамічний діапазон 0,9—2,3 мкМ.

Оцінено селективність колориметричної сенсорної системи щодо визначення атразину та його структурно подібних аналогів, наявних в аналізованих зразках. Тестували розчини атразину та його близьких аналогів — симазину, десметрину та метрибузину за сталої концентрації 1,4 мкМ. При застосуванні атразину наявність атразин-селективних рецепторних сайтів зв'язування в МІП мембранах сприяє ефективному зв'язуванню цього гербіциду й генеруванню найвищого сенсорного відгуку після здійснення кольорової реакції. Натомість використання симазину, десметрину й метрибузину як аналітів призводило до генерування значно менш виражених колориметричних сенсорних відгуків, що свідчить про високу селективність створеної колориметричної сенсорної системи.

#### Висновки

Отже за методом ІЧ-спектроскопії детально досліджено формування сайтів зв'язування в синтезованих МІП. Показано, що незначні зміщення частот в ІЧ-спектрах комплексу функціональний мономер — атразин характеризують нековалентну взаємодію (дисперсійні, ван-дер-

ваальсові зв'язки). Завдяки невеликій енергії таких зв'язків (1—2 ккал/моль) атразин легко видаляється при екстракції з утворенням сайту зв'язування. Синтезовані атразин-селективні МІП мембрани в подальшому застосовували як основу для отримання колориметричної сенсорної системи для швидкого позалабораторного визначення атразину. Показано, що

МІП мембрани селективно зв'язують атразин і генерують колориметричний сенсорний відгук при взаємодії з реагентом забарвлення БФС/AgNO<sub>3</sub>, який забарвлює плівки в інтенсивно пурпуровий колір. Межа визначення атразину за допомогою створеної колориметричної сенсорної системи становить 0,9 мкМ, лінійний динамічний діапазон — від 0,9 до 2,3 мкМ.

## REFERENCES

1. Singh S., Khan N. A., Ramadan R. et al. Environmental fate, toxicological impact, and advanced treatment approaches: Atrazine degradation and emphasises on circular economy strategy. *Desalination and Waste Treatment*, 2024, 317: 10020. <https://doi.org/10.1016/j.dwt.2024.100201>
2. Jupinder Kaur, Baby, Jaspreet Kaur Development in Waste Water Treatment Research and Processes. Chapter 5 — Pesticides and their degradation: A microbiological perspective. *Applied Technologies for Clean Up of Environmental Contaminants*, 2025: 95—131. <https://doi.org/10.1016/B978-0-443-13615-3.00031-5>
3. Saha R., Dutta S. M. Pesticides' mode of action on aquatic life. *Toxicology Reports*, 2024, 13: 101780. <https://doi.org/10.1016/j.toxrep.2024.101780>
4. Graziano N., McGuire M.J., Roberson A. et al. 2004 National atrazine occurrence monitoring program using the abraxis ELISA method. *Environ. Sci. Technol.*, 2006, 40, no. 4: 1163—1171. <https://doi.org/10.1021/es051586y>
5. Boyd-Boland A. A., Pawliszyn J. B. Solid-phase microextraction of nitrogencontaining herbicides. *Journal of Chromatography*, 1995, 704 A: 163—172. [https://doi.org/10.1016/0021-9673\(95\)00151-C](https://doi.org/10.1016/0021-9673(95)00151-C)
6. Eisert R., Levsen K.. Determination of pesticides in aqueous samples by solid-phase microextraction in-line coupled to gas chromatography-mass spectrometry. *J. Am. Soc. Mass Spectrom*, 1995, 6: 1119—1130. DOI: 10.1016/1044-0305(95)00527-7
7. Wulff G. Molecular Imprinting in Cross-Linked Materials with the Aid of Molecular Templates — A Way towards Artificial Antibodies. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 1995, 34, no.17: 1812—1832. <https://doi.org/10.1002/anie.199518121>
8. Tokonami S., Shiigi H., Nagaoka T. Micro- and nanosized molecularly imprinted polymers for high-throughput analytical applications. *Analytica Chimica Acta*, 2009, 641: 7—13. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2009.03.035>
9. Guan G., Liu B., Wang Z., Zhang Z. Imprinting of Molecular Recognition Sites on Nanostructures and Its Applications in Chemosensors. *Sensors*, 2008, 8: 8291—8320. <https://doi.org/10.3390/s8128291>
10. Sergeyeva T.A., Piletska O.V., Piletsky S.A. et al. Data on the structure and recognition properties of the template-selective binding sites in semi-IPN-based molecularly imprinted polymer membranes. *Materials Science and Engineering*, 2008, 28, 8: 1472—1479. <https://doi.org/10.1016/j.msec.2008.04.006>
11. Sergeyeva T.A., Brovko O.O., Piletska E.V. et al. Porous molecularly imprinted polymer membranes and polymeric particles. *Analytica Chimica Acta*, 2007, 582, 2: 311—319. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2006.09.011>
12. Sergeyeva T.A., Piletsky S.A., Brovko A.A. et al. Selective recognition of atrazine by molecularly imprinted polymer membranes. Development of conductometric sensor for herbicides detection. *Analytica Chimica Acta*, 1999, 392, 2—3: 105—111. [https://doi.org/10.1016/S0003-2670\(99\)00225-1](https://doi.org/10.1016/S0003-2670(99)00225-1)
13. Sergeyeva T. A., Piletsky S. A., Panasyuk T. L. et al. Conductimetric sensor for atrazine detection based on molecularly imprinted polymer membranes. *Analyst*, 1999, 124: 331—334. <https://doi.org/10.1039/A808484J>
14. Sergeyeva T.A., Gorbach L.A., Piletska E.V. et al. Colorimetric test-systems for creatinine detection based on composite molecularly imprinted polymer membranes. *Anal. Chim. Acta*, 2013, 700: 161—168. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2013.01.048>
15. Sergeyeva T.A., Gorbach L.A., Slinchenko O.A. et al. Towards development of colorimetric test-systems for phenols detection based on computational molecularly-imprinted polymer membranes. *Materials Science and Engineering*, 2010, 30, no. 3: 431—436. <https://doi.org/10.1016/j.msec.2009.12.012>
16. Yarynka D., Honcharenko A., Gorbach L. et al. Validation of a smartphone-compatible MIP-based sensor for bisphenol A determination in wastewater samples. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2024, 416: 7121—7129. <https://doi.org/10.1007/s00216-024-05616-y>
17. Houben-Weyl. *Methoden Der Organischen Chemie. Band II. Analytische Methoden*. Stuttgart, 1953. <https://doi.org/10.1002/ange.19540660615>
18. João A.F., Squizzato A.L., Fernandes G.M. et al. Iron (III) determination in bioethanol fuel using a smartphone-based device. *Microchem. J.*, 2019, 146: 1134—1139. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2019.02.053>

19. Bellamy, L.J The Infrared Spectra of Complex Molecules. 1st Edition, Springer Netherlands, Dordrecht, 1975: 190.
20. Nakanishi K. Infrared Adsorption Spectroscopy (Practical). San Francisco: Holden Day, Inc. 1962.
21. Pakade V., Lindahl S., Chimuka L., Turner Ch. Molecularly imprinted polymers targeting quercetin in high-temperature aqueous solutions. Journal of Chromatography A. 2012, 1230: 15–23. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2012.01.051>

Received 19.06.2025

Larysa Gorbach

ORCID: 0000-0003-2711-7244

Institute of Macromolecular Chemistry, NAS of Ukraine

48, Kharkivske Highway, Kyiv, 02155, Ukraine

e-mail: gorbachla@ukr.net

Tetiana Sergeyeva

ORCID: 0000-0003- 3486-2701

Institute of Molecular Biology and Genetics, NAS of Ukraine

150, Zabolotnogo Str., Kyiv, 03143, Ukraine

Oleksandr Brovko

ORCID: 0000-0003-0238-1137

Institute of Macromolecular Chemistry, NAS of Ukraine

48, Kharkivske Highway, Kyiv, 02155, Ukraine

#### DEVELOPMENT OF A COLORIMETRIC SENSOR SYSTEM FOR RAPID OUT-OF-LABORATORY DETECTION OF ATRAZINE

The aim of the work is to investigate the formation of binding sites in atrazine-selective molecularly imprinted polymers (MIPs) and to develop a colorimetric sensor system based on them for rapid out-of-laboratory detection of atrazine. The ability of MIPs to selectively bind the analyte compound (atrazine) and generate a colorimetric sensor response upon interaction with the appropriate reagent was combined. The features of the formation of binding sites in MIPs were studied by infrared spectroscopy. The infrared spectra were studied in detail, and the characteristic bands of the starting compounds were confirmed: the functional monomer of methacrylic acid (MAA), atrazine, and compositions based on them. The presence of intermolecular nonspecific interactions between atrazine and MAA molecules was proven. The low energy of these bonds (1–2 kcal/mol) facilitates the removal of atrazine during extraction, leading to the formation of a binding site. The molar ratio between atrazine and functional monomer in the initial monomer mixture was 1:2. The total content of atrazine in the polymer network was 5 wt.%. Studies have shown that MIP selectively binds to atrazine, generating a colorimetric sensory response. In other words, MIP films turn an intense purple color when interacting with the bromophenol blue/AgNO<sub>3</sub> color reagent. The resulting colorimetric sensory system provides the highest sensory in comparison to structurally analogous analogues, including metribuzin, desmetrin, and simazine. Digital images of the colored samples were obtained using the camera of smartphone. The color intensity was assessed using the Color Grab software in the RGB color model. The detection limit of atrazine using the developed colorimetric sensor system is 0.9 μM, with an operational range of 0.9–2.3 μM.

**Keywords:** atrazine, colorimetric sensor system, molecularly imprinted polymers.