

УДК 535.6+543.422.7

DOI: [https://doi.org/10.17721/1728-2209.2023.1\(58\).8](https://doi.org/10.17721/1728-2209.2023.1(58).8)

Людмила КОРЖАН¹, асп.
ORCID ID: 0009-0007-0170-9600
e-mail: ludakorzhan99@gmail.com

Валерія ТИТОВИЧ¹, студ.
ORCID ID: 0000-0002-8765-5693
e-mail: lera.titovich07@gmail.com

Сергій ЛЕЛЮШОК¹, канд. хім. наук, доц.
ORCID ID: 0000-0002-8549-5254
e-mail: lelyshok@ukr.net

Сергій КУЛІЧЕНКО¹, канд. хім. наук, доц.
ORCID ID: 0000-0002-8150-6497
e-mail: skulichenko@ukr.net

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

ПАРАМЕТРИ КОЛЬОРОМЕТРИЧНОГО СИГНАЛУ РОЗЧИНІВ БРОМТИМОЛОВОГО СИНЬОГО ТА БРОМФЕНОЛОВОГО ЧЕРВОНОГО

Вступ. Перспективним напрямом використання цифрової кольориметрії є аналіз забарвлених розчинів. Бромтимоловий синій – це реагент на катіонні поверхнево-активні речовини, які є актуальними об'єктами аналізу, оскільки часто використовуються у складі лікарських засобів, у косметичній хімії та хімії миючих засобів. Додавання поверхнево-активних речовин до аналітичних систем у методах молекулярної спектроскопії поліпшує параметри визначення і стабілізує колоїдно-хімічний стан розчинів. Метою пропонованої роботи було дослідити параметри кольориметричного сигналу водних розчинів бромтимолового синього (БТС) і бромфенолового червоного (БФЧ) у присутності поверхнево-активних речовин і оцінити подальші можливості розроблення методик кольориметричного визначення вмісту іонних ПАР із БТС чи БФЧ у лікарських засобах.

Методи. Дослідження проводили, використовуючи цифрову кольориметрію зі сканером і смартфоном. Для кількісного оцінювання інтенсивності кольору розчинів використовували RGB-характеристику.

Результати. Установлено, що протягом 90 хв зміна величини R-, G-, B-компонент не перевищує $\pm 1\%$ від середнього значення сигналу вимірних проб. Підвищення температури світла від 3000 до 5000 K практично не впливає на величину R- та G-компонент розчинів барвників, а інтенсивність сигналу B-компонента зростає. Дослідження впливу інтенсивності освітлення на RGB-характеристики показало, що при освітленні розчинів барвників 500 Lux і вище значення сигналів R-, G-, B-компонент є сталими. Зі збільшенням висоти шару розчину реагенту в діапазоні 0,5–5 см спостерігається зростання інтенсивності забарвлення розчину, що спричинює зменшення величин

R-, G-, B-компонент. Показано можливість кольориметричного визначення константи дисоціації органічних реагентів. Введення Triton X-100 у систему поліпшує лінійність градувальної залежності визначення БТС, знижує межу виявлення барвника, поліпшує чутливість визначення, забезпечує додаткову стабілізацію колоїдно-хімічного стану системи, що запобігає помутнінню при використанні високих концентрацій реагентів.

Висновки. Досліджено вплив основних параметрів на кольориметричний сигнал сульфогфталейнових барвників. Отримані в роботі дані можуть бути використані при розробленні методик кольориметричного визначення вмісту іонних ПАР у лікарських засобах.

Ключові слова: RGB-характеристика, кольориметрія, смартфон, сульфогфталейнові барвники, Triton X-100.

Вступ

Методи молекулярної спектроскопії розвиваються з удосконаленням параметрів вимірювань, розширенням діапазону визначення аналітів і сфер застосування. Наразі поширюється цифрова кольориметрія у поєднанні із цифровими фотокамерами, вебкамерами, сканерами, планшетами або смартфонами. Смартфони, завдяки сучасному розвитку технології виготовлення апаратного обладнання і програмного забезпечення, еквівалентні мікрокомп'ютерам (Rezazadeh et al., 2019; Roda, 2016). Кольориметрія характеризується конкурентоздатною чутливістю, простотою, низькою собівартістю, можливістю мініатюризації і портативністю обладнання, що дозволяє здійснювати швидкий аналіз на місці відбору проб (Fernandes et al., 2020).

Кількісне визначення виконується шляхом порівняння кольору розчину аналіту із градувальною залежністю. Для оцінювання інтенсивності кольору найчастіше використовують системи CMYK (блакитний, пурпурний, жовтий і чорний), HSV/HSB (відтінок, насиченість, яскравість) і RGB (червоний, зелений і синій як основні кольори). Система RGB складається із трьох компонент: R, G і B, які можна застосовувати для встановлення зв'язку між концентрацією аналіту й компонентами кольору. Для оцінювання

RGB-характеристик використовують різне програмне забезпечення і вебдодатки (Adobe Photoshop, ImageJ, Color Code Picker), а також програми для смартфонів (напр. Colorometer для iPhone і ColorMeter Free, Color Picker для Android) (Fan et al., 2021; Capitán-Vallvey et al., 2015).

Зазвичай кольориметрію застосовують для оцінювання кольору твердих поверхонь сорбентів або реагентного паперу в методах тест-визначень (Hou et al., 2021).

Перспективним напрямом використання цифрової кольориметрії є аналіз забарвлених розчинів (Nelis et al., 2020; Monogarova et al., 2019). Однак кольориметрія розчинів має технічні проблеми й певну специфіку, які потребують детального вивчення.

Додавання поверхнево-активних речовин (ПАР) до аналітичних систем у методах молекулярної спектроскопії підвищує стабільність аналітичного сигналу, поліпшує лінійність градувальної залежності, знижує межу виявлення і стабілізує колоїдно-хімічний стан розчинів завдяки багатоцентровій взаємодії барвника з ПАР і сольолізаційним процесам (Caleb, Alshana 2021; Klovac et al., 2020). Оцінювання чинників впливу на аналітичний кольориметричний сигнал забарвлених розчинів у цифровій кольориметрії дозволить поліпшити метрологічні параметри й оптимізувати умови аналізу.

Мета дослідження. Метою роботи було дослідити параметри кольориметричного сигналу водних розчинів бромтимолового синього (БТС) і бромфенолового червоного (БФЧ) у присутності поверхнево-активних речовин і провести оцінювання подальшої можливості розроблення методик кольориметричного визначення вмісту іонних ПАР із БТС чи БФЧ у лікарських засобах.

Параметри кольориметричного сигналу досліджували на прикладі розчинів бромфенолового червоного та бромтимолового синього – органічних сульфоталеїнових барвників аніонної природи. Бромтимоловий синій є реагентом на катіонні поверхнево-активні речовини (КПАР), а наявність ізопропільних замісників надає підвищену спорідненість реагенту до білка. БФЧ є структурним аналогом БТС меншої гідрофобності. Речовини катіонної природи, зокрема КПАР, є актуальними об'єктами аналізу, оскільки часто використовуються у складі лікарських засобів, у косметичній хімії та хімії миючих засобів (Myers 2020; Abdelkader et al., 2013).

Методи

Використовували бромфеноловий червоний і бромтимоловий синій кваліфікації "ч. д. а", додатково очищені перекристалізацією. Як неіонну ПАР (НПАР) брали препарат Triton X-100 (TX-100) фірми "Merck". Робочі розчини готували розчиненням відповідних точних наважок реагентів у дистильованій воді. Фосфатні буферні розчини готували згідно із (Kuster, Thiel, 2016).

Кислотність розчинів контролювали за допомогою рН-метра "pH-340" зі скляним електродом ЕСЛ 4307. Спектри поглинання розчинів вимірювали за допомогою спектрофотометра UV2401 PC Shimadzu. Оцінювання освітлення проводили за допомогою цифрового люксметра MT-30 Bautech із діапазоном вимірювань 0,1–200000 Lux. Для кількісного оцінювання інтенсивності кольору розчинів використовували RGB-характеристику. Детектування кольориметричного сигналу здійснювали за допомогою сканера "CanoScan LIDE 60" і камери смартфона Samsung Galaxy A30s, використовуючи програму "Color Picker". Оброблення відсканованих зображень здійснювали за допомогою програми "Adobe Photoshop 2021". Смарт-кольориметричне визначення проводили у білому фотобоксі, розробленому для отримання стабільного й відтворюваного сигналу. Знімали аналітичний сигнал розчинів у чашці Петрі ($l = 1$ см, $d = 3$ см) фотографуванням систем камерою смартфона зверху. Фотобокс був оснащений діодним освітленням (SMD 2835 3000–5000 K). У фотобоксі всі досліджувані розчини розміщуються на центральній геометричній осі в системі фотобокс – освітлення – камера смартфона (фотобокс був оснащений поворотним столом, що забезпечувало розміщення розчинів у заданій фіксованій точці).

Результати

У роботі дослідили стабільність RGB-характеристик водного розчину бромтимолового синього, отриманих за допомогою сканера. Використовували лужний розчин БТС ($C_{\text{БТС}} = 1,0 \times 10^{-5}$ моль/л, $\text{pH} = 10,0$) синього кольору, у якому реагент перебував у вигляді діаніону. На центральній осі сканера розміщували шість кювет на однаковій відстані відносно його країв і проводили сканування. Після оброблення зображень було оцінено прецизійність R-, G-, B-компонент для шести паралельних проб розчинів БТС. Отримані значення відносного стандартного відхилення (s_r , %) кольориметричного визначення інтенсивності сигналу водних розчинів БТС для R-, G- та B-компонент становили 0,84, 0,51 та 0,35 %, відповідно, що не перевищує 1 %. У ході дослідження виявили, що встановлення рН розчину за допомогою HNO_3 та NaOH

не є оптимальним. Через поглинання CO_2 з повітря кислотність розчинів змінюється, що зумовлює зміни їхніх R-, G-, B-характеристик, тому в роботі для фіксації рН використовували буферні розчини.

Для оцінювання стабільності аналітичного сигналу в часі шість паралельних зразків бромтимолового синього ($C_{\text{БТС}} = 1,0 \times 10^{-5}$ моль/л, $\text{pH} = 10,0$) сканували протягом 120 хв з інтервалом 10 хв. Дані на рис. 1 показують, що протягом 90 хв зміни величин R-, G-, B-компонент не перевищують ± 1 % від середнього значення вимірюваних проб. Подальше витримання розчинів спричинює поступове зменшення інтенсивності забарвлення. Зростання сигналу суми R-, G-, B-компонент протягом перших 20 хв вимірювань є незначним. Для окремих і паралельних вимірювань зміна значень R-, G-, B-компонент становила ± 1 одиниці у.о. та потрапляла в діапазон похибки ± 1 %.

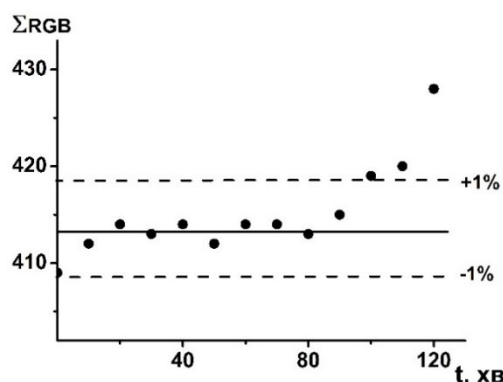


Рис. 1. Зміна сигналу суми R-, G-, B-компонент розчину БТС у часі. $C_{\text{БТС}} = 1,0 \times 10^{-5}$ моль/л, $\text{pH} = 10,0$

У роботі вивчено вплив добавок неіонної ПАР TX-100 на стабільність кольориметричного аналітичного сигналу досліджуваних розчинів у часі. Проведено статистичний аналіз шести паралельних вимірювань розчинів бромтимолового синього ($\text{pH} = 10$) у часі протягом 90 хв. Отримані дані (табл. 1) показують поліпшення надійності кольориметричного сигналу у присутності НПАР.

Таблиця 1
Відносне стандартне відхилення (s_r , %) RGB-характеристик розчинів БТС у часі за відсутності й у присутності TX-100. $C_{\text{БТС}} = 1,0 \times 10^{-5}$ моль/л, $C_{\text{TX-100}} = 1$ %, $t_{\text{max}} = 90$ хв, $\text{pH} = 10$, сканер

Канал	s_r , %	
	БТС-буфер	БТС-TX100-буфер
R	0,62	0,39
G	0,55	0,40
B	0,27	0,20

При реєстрації кольориметричних характеристик розчинів жовтої та синьої форм БТС за допомогою сканера спостерігали погіршення якості передавання сигналу, що може бути зумовлено наявністю прошарку повітря між розчином і робочою поверхнею сканера. Поверхня сканера має безпосередньо контактувати з поверхнею об'єкта, який сканують, що неможливо при роботі з розчинами. Тому колір розчину знімали з використанням камери смартфона й білого фотобоксу. Камера смартфона не має такої проблеми, оскільки її оптичні й сенсорні характеристики не потребують контактного знімання, а вимірювання у фотобоксі забезпечує рівномірне освітлювання. Для смарт-кольориметричного аналізу за допомогою фотобоксу проведено аналогічне оцінювання прецизійності.

Значення s_r , % кольориметричного визначення інтенсивності сигналу за допомогою фотобоксу у водних розчинах БТС для R-, G- та B-компонент становили 0,83, 0,47 і 0,38 %, відповідно. Отримані результати зіставні з результатами вимірювань за допомогою сканера. Крім цього, перевага вимірювань у фотобоксі полягає у швидкості отримання аналітичного сигналу.

Дослідили вплив температури світла й інтенсивності освітлення розчинів на їхні RGB-характеристики. Дослідження проводили з використанням розчинів барвників у діапазоні концентрацій $1,0 \times 10^{-6}$ – $1,0 \times 10^{-5}$ моль/л при контрольованому значенні кислотності. Барвник існував у відповідній протолітичній формі: БТС при pH = 2,0 (HR⁻) та pH = 11,0 (R⁻²) – жовтий і синій розчини, відповідно, БФЧ при pH = 7,5 (R⁻²) – пурпурний. Установлено, що підвищення температури світла від 3000 до 5000 K практично не впливає на величину R- та G-компонент. Водночас інтенсивність сигналу B-компоненти дещо зростає, що пояснюється зростанням інтенсивності синьої компоненти у спектрі світлодіодів із підвищенням температури кольору світла (рис. 2). На основі отриманих даних зроблено висновок про недоцільність використання світлодіодів із температурою світла вище 5000 K для освітлення розчинів. Далі в роботі визначення проводили з температурою світла 3000 K.

Оцінювання впливу інтенсивності освітлення на кольориметричні характеристики розчинів БТС та БФЧ проводили за допомогою цифрового люксметра у фото-

боксі для різних протолітичних форм барвників. Отримані дані показали, що збільшення інтенсивності освітлення спричинює зростання RGB-сигналу систем і після досягнення 500 Lux залежність виходить на плато (рис. 3). Отже, мінімальною для досягнення стабільних і відтворюваних результатів є інтенсивність освітлення розчинів на рівні 500 Lux.

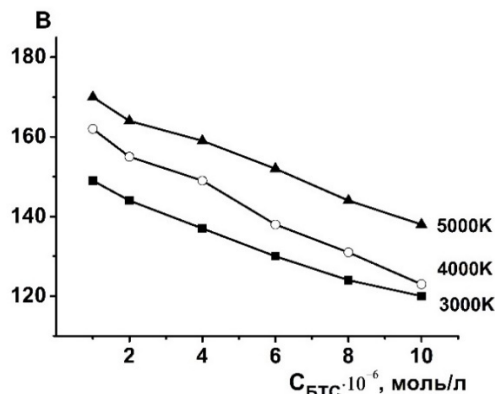


Рис. 2. Залежність B-компоненти RGB-сигналу розчину бромтимолового синього (pH = 2) від його концентрації

Дослідили також вплив висоти стовпа розчинів бромтимолового синього та бромфенолового червоного на інтенсивність RGB-сигналу (рис. 4).

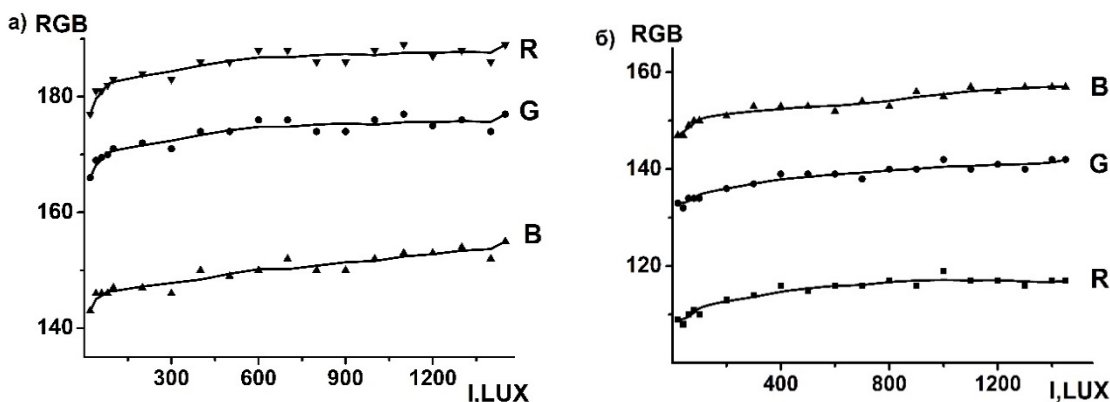


Рис. 3. Залежність RGB-сигналу розчину БТС від інтенсивності освітлення
 $C_{\text{БТС}} = 5,0 \times 10^{-6}$ моль/л; а – pH = 2,0, б – pH = 11,0

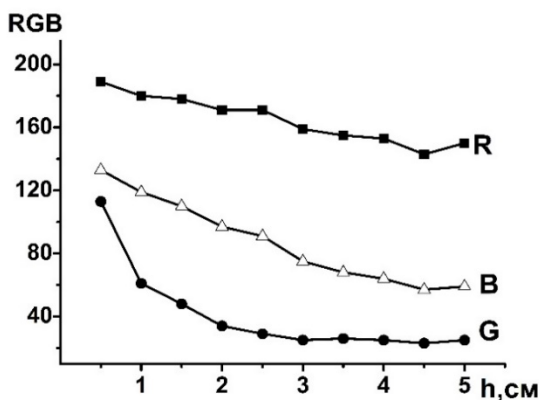


Рис. 4. Залежність RGB-сигналу розчину БФЧ від товщини шару рідин
 $C_{\text{БФЧ}} = 1,0 \times 10^{-5}$ моль/л (червоний колір), pH = 7,0

Установлено, що зі збільшенням висоти шару розчину реагенту в діапазоні 0,5–5 см спостерігається зростання інтенсивності кольору, що узгоджується із законом Бугера – Ламберта – Бера (табл. 2). Це дає можливість підвищити контрастність аналітичних систем шляхом

збільшення товщини поглинаючого шару досліджуваного розчину. Результати показують необхідність дотримання однакової висоти розчинів при визначенні їхніх RGB-характеристик.

Таблиця 2

Залежність RGB-сигналу розчину БТС та БФЧ від висоти шару; pH = 7, фотобокс

R	C _R , моль/л	h, см	R	G	B
БФЧ	1,0×10 ⁻⁵	0,5	189	113	133
	1,0×10 ⁻⁶	5,0	182	112	135
БТС	1,0×10 ⁻⁵	0,5	207	171	90
	1,0×10 ⁻⁶	5,0	202	166	90

У роботі показано можливість смарт-кольорометричного визначення константи дисоціації органічного реагенту. Так, бромтимоловий синій у кислому середовищі (pH = 2) існує в аніонній формі HR⁻, яка має жовте забарвлення. Підвищення pH розчину барвника зумовлює утворення діаніону R²⁻ синього кольору. Спектри поглинання розчинів БТС за різного значення кислотності наведено на рис. 5. Максимум поглинання жовтої та синьої форм реагенту спостерігається в діапазоні довжин хвиль 432–434 та 616 нм, відповідно, що узгоджується з даними літератури (Shimada et al., 2017; Klotz et al., 2014).

Для визначення константи дисоціації БТС проводили вимірювання величини RGB-сигналу його розчинів за різної кислотності (рис. 6а). У літературних джерелах наведено значення константи дисоціації БТС у діапазоні 6,88–7,5, тому для вимірювання експериментальної константи дисоціації обрано діапазон pH 6–10. Знайдене за положенням мінімуму на диференціальній залежності кольорометричного сигналу від pH значення pK_{7,2} узгоджується з диференційною залежністю, отриману спектрофотометричним методом, і

даними літератури (рис. 6) (Shimada et al., 2017). Аналогічно було визначено константу дисоціації БФЧ, що становила 6,42 одиниці.

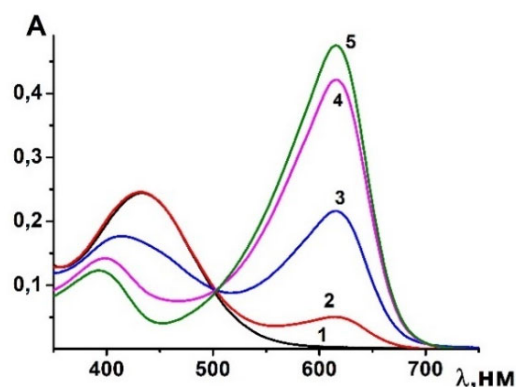


Рис. 5. Спектри поглинання розчину бромтимолового синього
C_{БТС} = 2×10⁻⁵ моль/л, ℓ = 1,0 см; 1 – pH = 2; 2 – pH = 6; 3 – pH = 7; 4 – pH = 8; 5 – pH = 10

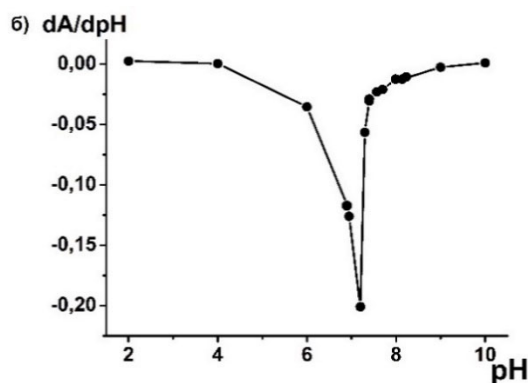
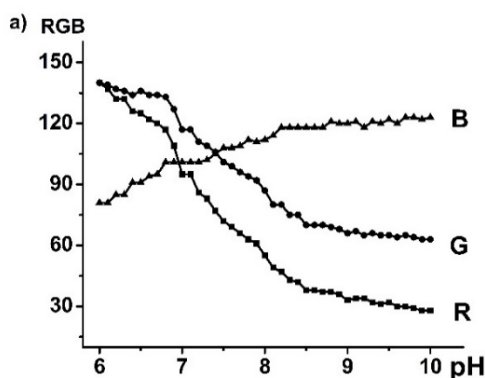


Рис. 6. Залежність RGB-сигналу БТС (а) і диференціальна залежність оптичної густини жовтої форми БТС у розчині (б) від кислотності розчинів. C_{БТС} = 2,0×10⁻⁵ моль/л

Дослідили також вплив концентрації барвника на величину RGB-сигналу його розчинів. Загалом при збільшенні концентрації барвника спостерігається зменшення величини RGB-компонент. Наприклад, при підвищенні концентрації БТС із 1,0×10⁻⁶ до 1,0×10⁻⁵ моль/л спостерігали поглиблення забарвлення, що відповідає поступовому зменшенню значень R- та G-компонент, причому сигнал B-компоненти практично не змінювався (рис. 7 а). Проте підвищення концентрації БФЧ до концентрації 1,0×10⁻⁵ моль/л спричиняло поступове зменшення усіх трьох кольорометричних компонент (рис. 7 б). Подальше підвищення концентрації барвників зумовлювало різке зменшення RGB-сигналу, що можна пояснити їхньою

агрегацією в розчині. Установлено, що для сульфоталеїнових барвників у різних діапазонах їхніх концентрацій чутливість RGB-каналів є різною.

Дослідили вплив неіонної ПАР Triton X-100 на параметри точності й відтворюваності кольорометричного сигналу БТС. В експерименті використовували розчин Triton X-100 із концентрацією 4,0×10⁻⁵ моль/л, що відповідає доміцелярним концентраціям. Виміряли залежності RGB-сигналу розчинів від концентрації барвника за відсутності й у присутності неіонної ПАР. Отримали метрологічні характеристики таких градувальних залежностей (табл. 3).

Дані табл. 3 показують, що введення Triton X-100 поліпшує лінійність градувальної залежності визначення БТС, знижує межу виявлення барвника, чутливість визначення при цьому також поліпшується.

У роботі встановлено стехіометрію взаємодії у системі БТС – TX-100 у доміцелярних розчинах НПАР. Дані рис. 8 показують утворення асоціатів із співвідношенням БТС : TX-100 = 1 : 2.

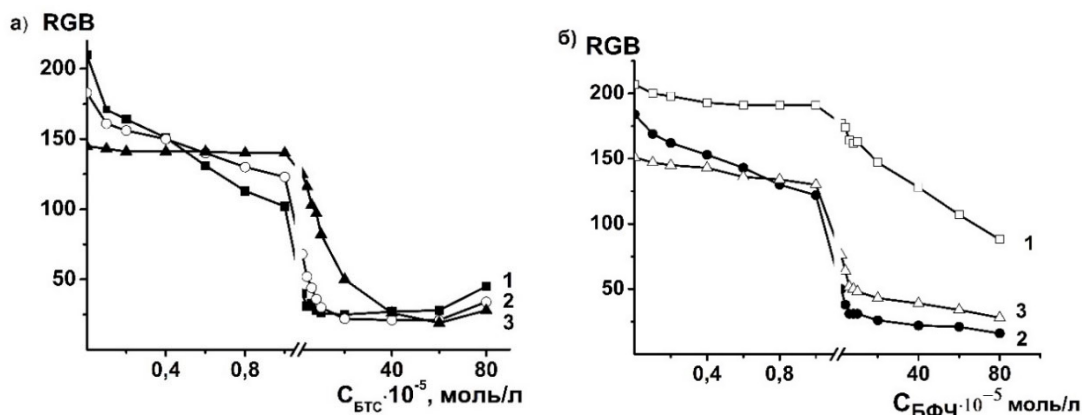


Рис. 7. Залежність RGB-сигналу розчину барвника від його концентрації: 1 – R, 2 – G, 3 – B, фотобокс; а) БТС, pH = 11; б) БФЧ, pH = 7

Таблиця 3

Метрологічні характеристики градувальних залежностей $\sum \Delta I_{RGB} = f(C_{BТС})$ за відсутності й у присутності TX-100. $C_{TX-100} = 4 \times 10^{-5}$ моль/л, $C_{BТС} = (0-6) \times 10^{-6}$ моль/л

Параметр	Буфер – БТС	Буфер – БТС – TX-100
r^2	0,97	0,98
LOD, моль/л	$5,8 \times 10^{-6}$	$4,9 \times 10^{-6}$
Рівняння градувального графіка	$\sum \Delta I_{RGB} = (9,3 \pm 10,7) + (5,5 \times 10^6 \pm 0,4 \times 10^6) \cdot C_{BТС}, \text{ моль/л}$	$\sum \Delta I_{RGB} = (4,6 \pm 9,2) + (5,6 \times 10^6 \pm 0,3 \times 10^6) \cdot C_{BТС}, \text{ моль/л}$

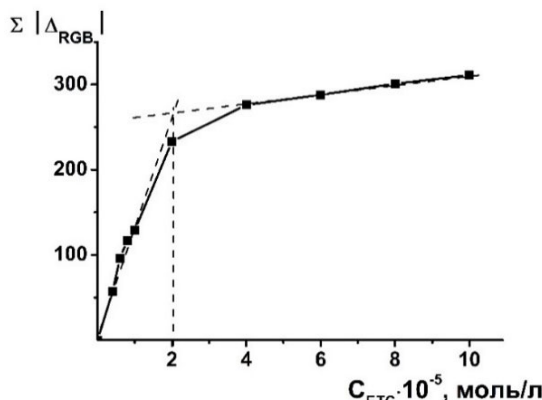


Рис. 8. Залежність аналітичного сигналу $\sum |\Delta I_{R,G,B}|$ розчину БТС – TX-100 – буфер від концентрації БТС: $C_{TX-100} = 4,0 \times 10^{-5}$ моль/л, pH = 8,1, фосфатний буфер, фотобокс

Дискусія і висновки

Під час реєстрації кольориметричних характеристик розчинів жовтої та синьої форм БТС за допомогою сканера виникли проблеми з передаванням сигналу, які можуть бути спричинені наявністю повітряного прошарку між розчином і сканером. Оскільки поверхня сканера має безпосередньо контактувати з поверхнею об'єкта, що сканується, то робота з розчинами стала неможливою. Із цієї причини для фіксування кольору розчину використовували камеру смартфона й білий фотобокс. Використання камери смартфона не потребує контакту з об'єктом, оскільки її оптичні та сенсорні характеристики дозволяють знімати з відстані, а вимірювання у фотобоксі забезпечує рівномірне освітлення.

Досліджено метрологічні параметри аналітичного кольориметричного сигналу бромтимолового синього та бромфенолового червоного у водних розчинах. Показано стабільність аналітичного сигналу розчинів реагентів

протягом 90 хв (зміна сигналу R-, G-, B-компонент становить <1 %). Установлено, що зі збільшенням висоти шару розчину реагенту в діапазоні 0,5–5 см сигнали R-, G-, B-компонент поступово зменшуються. Мінімальною для досягнення стабільних і відтворюваних результатів є інтенсивність освітлення розчинів на рівні 500 Lux. При цьому недоцільно використовувати для освітлення розчинів світлодіоди з температурою світла вище 5000 K. Показано можливість смарт-кольориметричного визначення константи дисоціації органічного реагенту й вибору оптимального кольориметричного каналу для побудови градувальних залежностей. Додавання неіонної ПАР Triton X-100 поліпшує лінійність градувальної залежності й чутливість визначення. Отримані дані можуть бути використані при розробленні умов кольориметричного визначення гідрофобних речовин катіонної природи за реакцією із БТС у лікарських засобах.

Внесок авторів: Людмила Коржан – виконання експериментальних досліджень, формальний аналіз, написання статті; Валерія Титович – виконання експериментальних досліджень; Сергій Куліченко – концептуалізація, постановка задачі, обговорення одержаних результатів, перегляд і редагування; Сергій Лелюшок – постановка задачі, обговорення одержаних результатів, перегляд і редагування.

Список використаних джерел

- Abdelkader, H., Alani, A. W. G., & Alany, R. G. (2013). Recent advances in non-ionic surfactant vesicles (niosomes): self-assembly, fabrication, characterization, drug delivery applications and limitations. *Drug delivery*, 21(2), 87–100. <https://doi.org/10.3109/10717544.2013.838077>
- Caleb, J., & Alshana, U. (2021). Supramolecular solvent-liquid-liquid microextraction followed by smartphone digital image colorimetry for the determination of curcumin in food samples. *Sustainable chemistry and pharmacy*, 21, 100424. <https://doi.org/10.1016/j.scp.2021.100424>
- Capitán-Vallvey, L. F., López-Ruiz, N., Martínez-Olmos, A., Erenas, M. M., & Palma, A. J. (2015). Recent developments in computer vision-based analytical chemistry: A tutorial review. *Analytica Chimica Acta*, 899, 23–56. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2015.10.009>
- Fan, Y., Li, J., Guo, Y., Xie, L., & Zhang, G. (2021). Digital image colorimetry on smartphone for chemical analysis: a review. *Measurement*, 171, 108829. <https://doi.org/10.1016/j.measurement.2020.108829>
- Fernandes, G. M., Silva, W. R., Barreto, D. N., Lamarca, R. S., Lima Gomes, P. C. F., Flávio da S. Petrucci, J., & Batista, A. D. (2020). Novel approaches to colorimetric measurements in analytical chemistry – A review. *Analytica Chimica Acta*. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2020.07.030>
- Hou, P., Deng, R., Guo, J. et al. (2021). A WiFi scanner in conjunction with disposable multiplex paper assay for the quantitation of disease markers in blood plasma. *Anal Bioanal Chem*, 413, 4625–4634. <https://doi.org/10.1007/s00216-021-03234-6>
- Klotz, E., Doyle, R., Gross, E., & Mattson, B. (2011). The Equilibrium Constant for Bromothymol Blue: A General Chemistry Laboratory Experiment Using Spectroscopy. *Journal of Chemical Education*, 88(5), 637–639. <https://doi.org/10.1021/ed1007102>
- Klovak, V., Kulichenko, S., Lelyushok, S. (2020). Influence of colloidal-chemical state of solutions on fluorescence and spectrophotometric analytical signals of surfactants in reaction with eosin Y. *Chem. Pap.*, 74(12), 4337–4344. <http://dx.doi.org/10.1007/s11696-020-01245-8>
- Kuster, F. W., Thiel, A. (2016). Analytik – Daten, Formeln, Übungsaufgaben. Auflage. Berlin, De Gruyter.
- Monogarova, O. V., Chaplenko, A. A., & Oskolok, K. V. (2019). Multisensory digital colorimetry to identify and determination of active substances in drugs. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 126909. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2019.126909>
- Myers, D. (2020). Surfactant Science and Technology, 4th ed; Wiley: Hoboken, N.J.
- Nelis, J. L. D., Tsagkaris, A. S., Dillon, M. J., Hajslova, J., & Elliott, C. T. (2020). Smartphone-based optical assays in the food safety field. *Trac trends in analytical chemistry*, 115934. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2020.115934>
- Rezazadeh, M., Seidi, S., Lid, M., Pedersen-Bjergaard, S., & Yamini, Y. (2019). The Modern Role of Smartphones in Analytical Chemistry. *Trac Trends in Analytical Chemistry*. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2019.06.019>
- Roda, A., Michelini, E., Zangheri, M., di Fusco, M., Calabria, D., & Simoni, P. (2016). Smartphone-based biosensors: a critical review and perspectives. *Trac trends in analytical chemistry*, 79, 317–325. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2015.10.019>
- Shimada, T., & Hasegawa, T. (2017). Determination of equilibrium structures of bromothymol blue revealed by using quantum chemistry with an aid of multivariate analysis of electronic absorption spectra. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 185, 104–110. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2017.05.040>

Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 185, 104–110. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2017.05.040>

References

- Abdelkader, H., Alani, A. W. G., & Alany, R. G. (2013). Recent advances in non-ionic surfactant vesicles (niosomes): self-assembly, fabrication, characterization, drug delivery applications and limitations. *Drug delivery*, 21(2), 87–100. <https://doi.org/10.3109/10717544.2013.838077>
- Caleb, J., & Alshana, U. (2021). Supramolecular solvent-liquid-liquid microextraction followed by smartphone digital image colorimetry for the determination of curcumin in food samples. *Sustainable chemistry and pharmacy*, 21, 100424. <https://doi.org/10.1016/j.scp.2021.100424>
- Capitán-Vallvey, L. F., López-Ruiz, N., Martínez-Olmos, A., Erenas, M. M., & Palma, A. J. (2015). Recent developments in computer vision-based analytical chemistry: A tutorial review. *Analytica Chimica Acta*, 899, 23–56. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2015.10.009>
- Fan, Y., Li, J., Guo, Y., Xie, L., & Zhang, G. (2021). Digital image colorimetry on smartphone for chemical analysis: a review. *Measurement*, 171, 108829. <https://doi.org/10.1016/j.measurement.2020.108829>
- Fernandes, G. M., Silva, W. R., Barreto, D. N., Lamarca, R. S., Lima Gomes, P. C. F., Flávio da S. Petrucci, J., & Batista, A. D. (2020). Novel approaches to colorimetric measurements in analytical chemistry – A review. *Analytica Chimica Acta*. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2020.07.030>
- Hou, P., Deng, R., Guo, J. et al. (2021). A WiFi scanner in conjunction with disposable multiplex paper assay for the quantitation of disease markers in blood plasma. *Anal Bioanal Chem*. 413, 4625–4634. <https://doi.org/10.1007/s00216-021-03234-6>
- Klotz, E., Doyle, R., Gross, E., & Mattson, B. (2011). The Equilibrium Constant for Bromothymol Blue: A General Chemistry Laboratory Experiment Using Spectroscopy. *Journal of Chemical Education*, 88(5), 637–639. <https://doi.org/10.1021/ed1007102>
- Klovak, V., Kulichenko, S., Lelyushok, S. (2020). Influence of colloidal-chemical state of solutions on fluorescence and spectrophotometric analytical signals of surfactants in reaction with eosin Y. *Chem. Pap.*, 74 (12), 4337–4344. <http://dx.doi.org/10.1007/s11696-020-01245-8>
- Kuster, F. W., Thiel, A. (2016). Analytik – Daten, Formeln, Übungsaufgaben. Auflage. Berlin, De Gruyter.
- Monogarova, O. V., Chaplenko, A. A., & Oskolok, K. V. (2019). Multisensory digital colorimetry to identify and determination of active substances in drugs. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 126909. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2019.126909>
- Myers, D. (2020). Surfactant Science and Technology, 4th ed; Wiley: Hoboken, N.J.
- Nelis, J. L. D., Tsagkaris, A. S., Dillon, M. J., Hajslova, J., & Elliott, C. T. (2020). Smartphone-based optical assays in the food safety field. *Trac trends in analytical chemistry*, 115934. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2020.115934>
- Rezazadeh, M., Seidi, S., Lid, M., Pedersen-Bjergaard, S., & Yamini, Y. (2019). The Modern Role of Smartphones in Analytical Chemistry. *Trac Trends in Analytical Chemistry*. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2019.06.019>
- Roda, A., Michelini, E., Zangheri, M., Di Fusco, M., Calabria, D., & Simoni, P. (2016). Smartphone-based biosensors: a critical review and perspectives. *Trac trends in analytical chemistry*, 79, 317–325. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2015.10.019>
- Shimada, T., & Hasegawa, T. (2017). Determination of equilibrium structures of bromothymol blue revealed by using quantum chemistry with an aid of multivariate analysis of electronic absorption spectra. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 185, 104–110. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2017.05.040>

Отримано редакцією журналу / Received: 13.06.23
Прорецензовано / Revised: 16.06.23
Схвалено до друку / Accepted: 28.06.23

Ljudmyla KORZHAN¹, PhD Student
ORCID ID: 0009-0007-0170-9600
e-mail: ludakorzhan99@gmail.com

Valeriia TYTOVYCH¹, Student
ORCID ID: 0009-0002-8765-5693
e-mail: lera.titovich07@gmail.com

Sergey LELYUSHOK¹, PhD (Chem.), Assoc. Prof.
ORCID ID: 0000-0002-8549-5254
e-mail: lelyushok@ukr.net

Sergey KULICHENKO¹, PhD (Chem.), Assoc. Prof.
ORCID ID: 0000-0002-8150-6497
e-mail: skulichenko@ukr.net

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

PARAMETERS OF THE COLORIMETRIC SIGNAL OF BROMOTHYMOL BLUE AND BROMOPHENOL RED SOLUTIONS

Background. The analysis of colored solutions is a promising direction for using digital colorimetry. Bromothymol blue is a reagent for cationic surface-active substances, which are actually objects of study, as they are often used in the composition of medicines, cosmetic chemistry, and the chemistry of detergents. The addition of surface-active substances to analytical systems in molecular spectroscopy methods improves the determination parameters and stabilizes the colloidal-chemical state of the solutions. The work aimed to investigate the parameters of the colorimetric

signal of aqueous solutions of bromothymol blue (BTB) and bromophenol red (BPR) in the presence of surface-active substances and to evaluate the further possibility of developing methods for colorimetric determination of the content of ionic surfactants with BTB or BPR in medicinal products.

Methods. The research was conducted using digital colorimetry with a scanner and smartphone. The RGB characteristic was used to quantitatively assess the color intensity of the solutions.

Results. It was established that within 90 minutes, the change in the value of the R-, G-, and B-components does not exceed $\pm 1\%$ of the average value of the signal of the measured samples. An increase in the light temperature from 3000 to 5000 K practically does not affect the value of the R- and G-components of dye solutions, while the signal intensity of the B-component increases. The study of the influence of lighting intensity on RGB characteristics showed that when lighting dye solutions of 500 Lux and higher, the R-, G-, and B-component signal values are constant. With an increase in the height of the layer of the reagent solution in the range of 0,5 – 5 cm, an increase in the intensity of the color of the solution is observed, which causes a decrease in the values of R-, G-, and B-components. The possibility of smart colorimetric determination of the dissociation constant of organic reagents is shown. The introduction of Triton X-100 into the system improves the linearity of the graduation dependence of BTB determination, lowers the detection limit of the dye, improves the sensitivity of the determination, and leads to additional stabilization of the colloidal chemical state of the system, which prevents turbidity when using high concentrations of reagents.

Conclusions. The influence of the main parameters on the colorimetric signal of sulfophthalein dyes was studied. The data obtained in the work can be used to develop methods for colorimetric determination of the content of ionic surfactants in medicinal products.

Keywords: RGB color model, colorimetry, smartphone, sulfophthalein dyes, Triton X-100.

Автори заявляють про відсутність конфлікту інтересів. Спонсори не брали участі в розробленні дослідження; у зборі, аналізі чи інтерпретації даних; у написанні рукопису; в рішенні про публікацію результатів.

The authors declare no conflicts of interest. The funders had no role in the design of the study; in the collection, analyses or interpretation of data; in the writing of the manuscript; in the decision to publish the results.