

Закономерности изопиестической сорбции индивидуальных растворителей на оксиде графена: анализ с использованием методов машинного обучения

Ульянов Г.С.¹, Ратова Д.-М.В.¹, Проскурнин М.А.¹, Коробов М.В.¹, Михеев И.В.¹

grexory371@gmail.com

¹ МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия

Оксид графена (ОГ) представляет интерес как функциональный углеродный материал для задач сорбции и анализа поверхности. Исследование его активных центров, однако, затруднено из-за структурной неоднородности, влияния локального окружения на свойства функциональных групп и отсутствия стандартных образцов. В таких системах важную роль играют молекулярные зонды, сорбционное поведение и спектральные характеристики которых чувствительны к определённым типам взаимодействий с поверхностью. Использование зондов позволяет косвенно судить о природе и силе активных центров в тех случаях, когда их прямое определение затруднено; при этом для разных типов центров может требоваться индивидуальный подбор зонда, что повышает селективность анализа. В то же время стандартные подходы, разработанные преимущественно для цеолитов и других жёстких пористых систем, требуют адаптации к оксиду графена, поскольку этот материал способен к межплоскостному расширению при сорбции.

Целью работы являлся поиск корреляций между равновесной изопиестической сорбцией индивидуальных растворителей на оксиде графена типа Хаммерса и их физико-химическими параметрами. Для анализа данных использовали методы машинного обучения, включая иерархическую кластеризацию и робастную регрессию. В качестве одного из базовых дескрипторов была рассмотрена диэлектрическая проницаемость, поскольку при существенном вкладе неспецифических электростатических взаимодействий сорбция должна зависеть от полярности среды. Наряду с этим были проанализированы параметры Камлета-Тафта и донорное число Гутмана-Майера, характеризующие способность растворителей к донорно-акцепторным, кислотно-основным и дипольным взаимодействиям.

Показано, что сорбция не описывается только величиной диэлектрической проницаемости: отсутствие выраженной корреляции указывает на то, что процесс не сводится к одним лишь электростатическим взаимодействиям. Этот результат позволяет перейти от упрощённой интерпретации, основанной только на полярности, к химически более содержательному рассмотрению, учитывающему донорно-акцепторные, кислотно-основные и специфические координационные взаимодействия с функциональными группами поверхности ОГ. Наиболее интерпретируемые результаты дала иерархическая кластеризация, позволившая выделить группы растворителей со сходным сорбционным поведением, тогда как метод sequential RANSAC выявил устойчивые линейные зависимости для отдельных классов соединений. В докладе будут представлены результаты кластеризации и обсуждение химической природы обнаруженных корреляций, а также их возможная связь с типами поверхностных центров оксида графена.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 24-73-10012.