

Выбор молекулярных зондов для ИК-спектроскопической идентификации кислотных центров на поверхности оксида графена

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

darmarrat@gmail.com

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

Растущий интерес к применению ОГ в качестве материала в каталитических, сенсорных и биомедицинских системах обуславливает необходимость анализа природы и количества активных центров поверхности. Несмотря на существование арсенала методов физико-химического анализа, определение типа кислотных центров на поверхности ОГ остаётся затруднённым из-за низкой чувствительности традиционных подходов, таких как титрование, а также сложной интерпретации или малоинформативности данных, получаемых другими методами (РФЭС, КР и т.д.). В химии ОГ сейчас отсутствуют: (1) полные (количественные) структурные модели; (2) полные и достоверные модели физико-химических процессов; (3) надёжные подходы к количественному анализу функциональных групп и/или активных центров. Последний факт особенно важен, так как это необходимо для унификации и верификации методик синтеза и проверки качества коммерческих продуктов.

Перспективным решением вышеуказанных проблем представляется использование метода молекулярного зонда в ИК-спектроскопии. Его принцип заключается в селективном связывании молекулярного зонда (ИК-активной молекулы) с активными центрами исследуемого материала. Это позволяет усиливать сигналы и обеспечивает более тонкую структуру спектра за счёт появления характеристических признаков: смещения и/или образование новых полос в спектре.

В работе предложена методика ИК-спектроскопической оценки кислотных центров в оксиде графена, основанная на сайт-специфичном взаимодействии ИК-активных молекул-зондов с центрами Брёнстеда и Льюиса. Проанализированы девять органических соединений (пиридины, нитрилы), обладающие различной способностью к кислотно-основному взаимодействию. Оценены медианные значения прецизионности площади полос для Брёнстедовских ($s_r < 10\%$) и Льюисовских ($s_r < 40\%$) центров. Предложен подход к количественной оценке кислотных центров на основе анализа спектров комбинации методик сорбции/десорбции пиридина при пониженном давлении (10 мбар) и изотермических условиях [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24-73-10012)

Ссылки

1. Ratova D.-M. V., Kaplin A. V., Khitrov M. D., Eremina E. A., Korobov M. V., Proskurnin M. A., Mikheev I. V. Topochemical Speciation of Acidic Sites in Graphene Oxide via Tailored FTIR Probes // Analytical Chemistry. — 2025. — Vol. 97, N. 45. — P. 25004-25019.