**Анализ оксида графена методом ИК‑НПВО спектроскопии в сочетании с методами математической статистики**

***Филатов Д.М., Саратовский Н.С*.**

*Студент, 6 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: dim020202@mail.ru*

Оксид графена (ОГ) представляет собой уникальный квази‑двумерный наноматериал с широким набором свойств, позволяющим примененять его во множестве областей: от биомедицины до фотоники. Его структура и распределение функциональных групп (ФГ) на поверхности сильно зависят от способа синтеза и методов постобработки (очистки), что требует детального анализа для изучения поведения в различных средах. Нерешенной является задача анализа инфракрасных (ИК) спектров ОГ в контексте интерпретации максимумов поглощения, что возникает ввиду низкой воспроизводимости резонансных частот, а также соответствующих им значений интенсивностей максимумов поглощения. Устанение подобной неопределенности позволит, с одной стороны, улучшить протоколы описания характеристик оксида графена и, с другой, оптимизировать процессы синтеза и модификации материала под задачи разработки накопителей энергии, наноплатформ для доставки лекарств, сорбентов для хроматографических анализов.

Цель работы — изучение закономерностей в ИК‑спектрах размерных фракций оксида графена с применением методов математической статистики для выявления связи между распределением ФГ и размером частиц, а также для определения спектральных маркеров, описывающих структуру и химический состав материала.

Для анализа использовался набор коммерчески доступных образцов ОГ произодства *RusGraphene*. Процесс фракционирования (микрометровый, субмикрометровый и нано- диапазон размеров) позволял выделить в среднем 7‑8 фракций из одной водной дисперсии размерами от 0.2 до 50 мкм. Далее регистрировали ИК‑спектры с применением приставки нарушенного полного отражения (НПВО) на алмазном кристалле в диапазоне волновых чисел 4000–400 см–1 при температуре 50°C. Для фракций меньших размеров проводилось повторное нанесение до достижения нужного уровня сигнала.

Анализ ИК‑спектров фракций включал постобработку путем сглаживания фильтром Савицкого-Голея, определения наиболее значимых участков, выделения всех возможных информативных признаков: интенсивностей максимумов поглощения и соответствующих им площадей пиков, которые соотносятся колебаниям связей *ν*$C=O$, *β*$H-OH$, *ν*$C=C\_{ар}$, *ν*$C\left(=O\right)-O$, *β*$C(=O)-O-H$, *ν*$C-O-C$, *ν*$C-OH$, *ν*$C-O$. Затем проводился анализ корреляций между признаками и размером фракции, включающий визуализацию данных с использованием диаграмм *box plot* и *violin plot*. Также проводилось построение моделей машинного обучения для выявления скрытых закономерностей, включая нахождение зависимости распределения ФГ от типа фракции и определение спектральных маркеров для сопоставления спектральных характеристик с фракционным составом.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24‑73‑10012).*