

# ЗАСТОСУВАННЯ ЛІНІЙНОГО МЕТОДУ ГОЛОВНИХ КОМПОНЕНТ В ДОСЛІДЖЕННІ КАТАЛІТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ГРАФЕНОВИХ НАНОМАТЕРІАЛІВ

*Абакумов О. О., Бичко І. Б., Стрижак П. Є.*

Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського НАН України, Київ, Україна  
abakumov0aa@gmail.com

З метою встановлення впливу структури та складу функціональних груп графенових наноматеріалів (ГНМ) на їх каталітичні властивості забезпечують варіювання таких характеристик шляхом контрольованого синтезу ряду зразків ГНМ. Таким чином, отримують набір даних, які представлені *m* параметрами, якими характеризуються *n* зразків.

Отримання інформації з багатовимірних даних може бути суттєво спрощене за допомогою лінійного методу головних компонент (ЛМГК). Метод ЛМГК полягає в представленні *m* характеристик зразку їх лінійною комбінацією, коефіцієнти якої розраховують таким чином, щоб максимізувати дисперсію даних *n* зразків, спроектованих на *вісі* нового *m*-вимірного ортогонального простору, які називаються *головними компонентами (ГК)*. Згідно зі спеціальною термінологією, лінійна комбінація характеристик зразку називається *рахунком ГК*, а її коефіцієнти – *навантаженнями характеристик*. Величина навантаження характеристики на ГК відповідає її вкладу у дисперсію спроектованих на нову вісь точок. Таким чином, застосування ЛМГК дозволяє визначити основні напрямки дисперсії даних та встановити характеристики із найбільшою дисперсією. Побудова контурної карти залежності параметру, який характеризує каталітичну властивість, від рахунків та її комбінування із графіком навантажень дозволяє проаналізувати основний масив даних із застосуванням меншої кількості залежностей.

Дана робота присвячена застосуванню ЛМГК для встановлення залежності каталітичних властивостей відновленого оксиду графену (ВОГ) в реакції гідрування ацетилену в етилен від його структури. Залежність логарифму ефективного передекспоненційного множника ( $A^{ef}$ ) та енергії активації ( $E_a^{ef}$ ) від рахунків перших двох ГК, яка поєднана з графіком відповідних навантажень, наведена на Рис. 1. Перші дві головні компоненти описують 70 % дисперсії даних, таким чином, містять в собі переважну більшість інформації щодо характеристик зразків ВОГ. Аналіз даних, наведених на Рис. 1, показує, що збільшення вмісту латеральних розмірів графенових доменів ( $L_a$ ), піразольних та пірольних циклів призводить до зменшення  $A^{ef}$  та  $E_a^{ef}$  реакції. Збільшення концентрації графітоподібних атомів азоту (G-N) та товщини графенових кристалітів ( $L_c$ ) призводить до збільшення  $A^{ef}$ . Аналіз показує, що збільшення міжшарової відстані ( $d_{002}$ ) в ВОГ супроводжується збільшенням  $A^{ef}$  та зменшенням  $E_a^{ef}$ . Збільшення співвідношення  $sp^2/sp^3$ -дефектів (D) призводить до збільшення  $A^{ef}$  та  $E_a^{ef}$  реакції.

Робота виконана за підтримки Національного фонду досліджень України (*грант №2020.02/0050*).

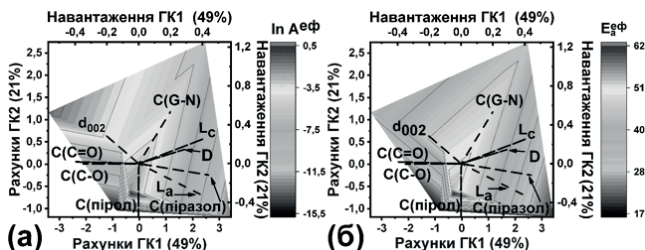


Рис. 1. Графіки залежності  $A^{ef}$  (а) та  $E_a^{ef}$  (б) від рахунків перших двох ГК, комбіновані з графіками відповідних навантажень