

УДК 544.275.3

РАЗРАБОТКА СТРАТЕГИИ ПОИСКА ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Рахманов Т.Р. (Альметьевский государственный нефтяной институт)

Научный руководитель – аспирант университета ИТМО Лавриненко А.К.

(Национальный исследовательский университет ИТМО)

Введение. В последние годы большое внимание уделяется внедрению «зеленой» химии. Одними из новых потенциально безопасных для окружающей среды растворителей являются глубокие эвтектические растворители (ГЭР) [1]. Важным отличительным свойством ГЭР является потенциал их использования в качестве адаптируемых к различным задачам растворителей и экстрагентов. ГЭР представляют собой смесь с низкой температурой плавления, благодаря образованию водородных связей между компонентами [2]. Однако, подбор существующих ГЭР или создание новых, обладающих оптимальными свойствами, требует длительного эмпирического подбора компонентов и их состава.

Основная часть. В данном проекте мы предлагаем использовать методы машинного обучения для поиска исходных веществ, способных образовывать ГЭР с оптимальными температурами плавления. В ходе работы над проектом нами мануально была собрана уникальная база данных из доступных литературных источников, содержащая температуру плавления и состав двухкомпонентных ГЭР. Всего база данных содержит порядка 2300 записей. Распределение температуры плавления в базе близко к нормальному. Несмотря на преобладание в литературе экспериментальных данных по ГЭР, состоящих из четвертичных солей аммония или фосфония и доноров водородной связи, наша база данных содержит информацию по всем выделяемым на данный момент классам ГЭР. Для разработки модели, способной прогнозировать температуру плавления ГЭР, мы отобрали ряд дескрипторов – параметров, влияющих на предсказываемую величину. В отобранные дескрипторы входят температура плавления исходных компонентов, параметры, отражающие их геометрические размеры и форму, количество функциональных групп с донорными или акцепторными свойствами, наличие металлов и гидрофильные свойства.

Выводы. Алгоритмы машинного обучения помогут выявить скрытые зависимости между температурой плавления ГЭР и выбранными дескрипторами, что позволит не только прогнозировать свойства новых ГЭР, но и выявить наиболее важные параметры, влияющие на их образование и изменение свойств в точке эвтектики.

Список использованных источников:

1. Samarov A.A., et al. // Phase equilibria and extraction properties of deep eutectic solvents in alcohol-ester systems // Theoretical foundations of chemical engineering, 2020. Vol. 54. P. 551-559.
2. Benworth B.H., et al. // Chemical Reviews, 2021. Vol. 121. P. 1232-1285.