**Ориентационная упорядоченность мембран из оксида графита по данным метода спинового зонда и сканирующей электронной микроскопии**

**Матвеев М.В.1, Чумакова Н.А.1,2**

*1- Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*2 – ФИЦ ХФ РАН*

Оксид графита – слоистый материал, состоящий из окисленных графеновых слоев, несущих карбонильные, эпоксидные, гидроксильные группы. Мембраны из оксида графита (GOM) проявляют избирательную проницаемость для жидкостей и газов. Механизм этого явления в настоящее время не изучен. Одним из факторов, определяющих проницаемость мембран, по-видимому, является ориентационная упорядоченность графеновых слоев. На настоящий момент единственной экспериментальной методикой, позволяющей количественно характеризовать упорядоченность слоев в мембранах из оксида графита, является метод спинового зонда. Наиболее перспективными зондами являются стабильные нитроксильные радикалы.

Для моделирования угловых зависимостей спектров ЭПР нитроксильных радикалов в GOM был разработан подход, в значительной степени нивелирующий влияние собственного сигнала оксида графита. Подход основан на варьировании вкладов различных компонент спектра в суммарную невязку – разницу между экспериментальным и теоретически рассчитанным спектром. Результат моделирования угловой зависимости спектров ЭПР радикала H5, сорбированного на внутренней поверхности GOM, представлен на рисунке 1а.

Окисленные графеновые слои в мембранах из оксида графита образуют ламели. Первые попытки определения упорядоченности ламелей путем анализа микрофотографий СЭМ показали, что упорядоченность ламелей значительно превышает упорядоченность спиновых зондов. Микрофотография СЭМ мембраны представлена на рисунке 1б.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| **а** | **б** |
| Рис. 1. а) Угловая зависимость спектра ЭПР стабильного нитроксильного радикала в мембране из оксида графита; черные линии – экспериментальные спектры, красные линии – результат совместного моделирования спектров; б) Микрофотография СЭМ мембраны.  |

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-73-001246*

Авторы благодарны Градову О.В. и Ткачеву Н.А. (ФИЦ ХФ РАН) за разработку программы машинного обучения для анализа микрофотографий СЭМ.