**Количественное определение ориентационной упорядоченности
мембран из оксида графита методом спинового зонда**

**Матвеев М.В.**

*Студент, 4 курс специалитета*

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

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: matveev2002@yandex.ru*

Оксид графита — слоистый материал, состоящий из графеновых слоев, несущих кислородсодержащие группы. Мембраны из оксида графита проявляют избирательную проницаемость для жидкостей и газов. Одним из факторов, определяющих проницаемость, 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. Данный подход основан на сорбции стабильных парамагнитных молекул на внутреннюю поверхность мембраны, при этом упорядоченность зонда отражает упорядоченность слоев. Наиболее перспективными зондами являются стабильные нитроксильные радикалы.

Оксид графита имеет собственный сигнал ЭПР, который перекрывается с центральной частью сигнала нитроксильных радикалов, что значительно усложняет анализ спектров и установление ориентационной упорядоченности спиновых зондов. В ходе настоящей работы был предложен оригинальный подход, значительно улучшающий качество описания угловой зависимости спектров ЭПР. Методика основана на варьировании вкладов различных компонент спектра в суммарную невязку — разницу между экспериментальным и теоретически рассчитанным спектром.

Одним из нерешенных вопросов являлась равномерность распределения парамагнитных молекул в объеме мембраны. В настоящей работе механическим расслоением мембраны с сорбированным зондом TEMPOL с последующей регистрацией угловых зависимостей спектров ЭПР отдельных фрагментов показано равномерное распределение нитроксильных радикалов по глубине мембраны. Установлено, что упорядоченность фрагментов, прилежащих к фильтру во время получения мембраны, а также центральных и внешних фрагментов, различается незначительно.

Нитроксильные зонды различной структуры обладают разной чувствительностью к упорядоченности окисленных графеновых слоев. Установлено, что зонды, содержащие жесткие ароматические фрагменты, лучше отражают упорядоченность мембран. Увеличение размера ароматического фрагмента не приводит к значительному увеличению чувствительности.

Известно, что окисленные графеновые слои в мембранах из оксида графита упакованы в ламели. Первые попытки численного определения ориентационных параметров порядка ламелей путем анализа микрофотографий СЭМ показали, что упорядоченность ламелей значительно превышает упорядоченность спиновых зондов. Таким образом, ориентационные параметры порядка, полученные методом спинового зонда, по-видимому, отражают особенности упаковки окисленных графеновых слоев на молекулярном уровне.

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-73-001246. Автор благодарен Градову О.В. и Ткачеву Н.А. (ФИЦ ХФ РАН) за разработку программы машинного обучения для анализа микрофотографий СЭМ.*