

Аннотация

Оксид графита (ОГ) – это слоистый нестехиометрический материал, состоящий из графеновых слоев, несущих различные кислородсодержащие группы (эпоксидные, гидроксильные и др.). Вследствие высокого содержания окисленных sp^3 – гибридованных атомов углерода, графеновые слои перестают быть плоскими. Из водных дисперсий оксида графита с помощью различных методов можно получить мембраны из оксида графена. Мембраны имеют сложную структуру: оксиграфеновые слои объединяются в ламели, состоящие из 15-30 слоев. Расстояние между ламелями по данным сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) составляет 10-100 нм. Расстояние между слоями в ламели составляет около 10 ангстрем, поэтому отдельные оксиграфеновые слои на СЭМ не видны.

Мембраны из оксида графена обладают уникальной селективной проницаемостью для жидкостей и газов. Так проницаемость воды на несколько порядков выше, чем для других полярных жидкостей. Это позволяет использовать мембраны для обессаливания и других важных практических применений. В то же время механизм избирательной проницаемости практически не изучен. Главной проблемой является отсутствие единой структуры у оксиграфеновых материалов, затрудняющее обобщение и интерпретацию полученных данных. Поэтому разработка новых подходов, позволяющих получать количественную информацию о внутренней структуре оксиграфеновых материалов, а также структуре и динамических свойствах жидкости, интеркалированной в межплоскостное пространство ОГ и мембран, является ключевой задачей.

Для установления внутренней структуры материалов на основе оксида графена, впервые применен метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) в варианте методики спинового зонда и численный анализ микрофотографий СЭМ с использованием машинного обучения. Разработанные подходы были применены для характеристики порошков ОГ и мембран с различной синтетической предысторией, что даст возможность в перспективе изготавливать мембраны с заданными свойствами.

В результате работы были разработаны методы определения ориентационной упорядоченности слоев оксида графена в мембране с использованием техники спинового зонда и изучения микроскопической структуры мембран из оксида графита с помощью численного анализа СЭМ микрофотографий, основанного на машинном обучении. Было показано, что упорядоченность ламелей, определенная с помощью анализа СЭМ изображений значительно превышает упорядоченность спиновых зондов. Для ряда мембран из ОГ, имеющих различную синтетическую предысторию, были определены ориентационные параметры порядка и проведен поиск корреляций упорядоченности с сорбционными свойствами мембран. Показано, что с ростом упорядоченности мембран, сорбция ацетонитрила и воды уменьшается. На примере воды, ацетонитрила, метанола и этанола методом спинового зонда было показано, что в межплоскостном пространстве ОГ и мембран одновременно сосуществует три типа интеркалированной жидкости с различной подвижностью. Относительное количество интеркалятов с различной подвижностью зависит от температуры, степени насыщенности материалов жидкостью, а также синтетической предыстории ОГ. Методом импульсной ЭПР спектроскопии

показано, что малоподвижный интеркалят представляет стеклообразную среду. Установлено, что в ходе проточного эксперимента при прохождении через мембрану паров этанола в межплоскостном пространстве материала находится только малоподвижный интеркалят.