**Анализ кислотных центров в оксиде графена: топохимические реакции.**

***Ратова Д-М.В.1, Каплин А.В.1***

*Студент, 6 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,   
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: darmarrat@gmail.com*

Развитие аналитического приборостроения в конце 60-х годов обеспечило прорыв в области изучения химии и физики поверхности твердого тела. Появление первых ИК–спектрометров и дальнейшее развитие эмиссионных спектрометров открыло путь к более детальному изучению поверхностей материалов и их активных центров. Однако, не смотря на прорыв в изучении химии поверхности, оксид графена (ОГ) все еще остается слабо исследованным с точки зрения его структуры и химических свойств. ОГ — сложный, гетерогенный, 2D-материал с широким распределением частиц по размерам и большим количеством дефектов в графеноподобной плоскости наряду с окисленными участками. Эти характеристики значительно затрудняет систематизацию материалов и усложняет контроль качества. Ключевой задачей в этой области является разработка надежных методик оценки поверхности (количества групп их тип), включая определение активных центров, влияющих на химическую активность материала.

Теории кислот и оснований Брёнстеда-Лоури и Льюиса широко применяются для анализа природы взаимодействий в физико-химии поверхности. Эти теории позволяют объяснить: (1) протонные (ионная пара, водородная связь) взаимодействия; (2) донороно‑акцепторные взаимодействия. Для описания подобных взаимодействий с кислотными центрами твердых материалов метод спектрального зонда, который может зачастую, нековалентно взаимодействовать с активными центрами ОГ, что отражается в изменении ИК-спектров материала. Топохимические реакции — такой класс реакций, где твердыми являются хотя бы один продукт и хотя бы один реагент.

Цель работы — предложить условия оценки состава поверхности, изучая топохимические реакции зондов с оксидом графена методом ИК спектроскопии.

В работе для определения кислотных центров на поверхности ОГ использовали метод инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье с применением приставки НПВО (алмаз — кристалл). В качестве рабочего зонда (из 10 предложенных) выбран пиридин (Py) доступный растворитель, позволяющий одновременно определить кислотные центры Брёнстеда и Льюса. В качестве объекта исследования выбран оксид графена, синтезированный методом Хаммерса (HGO) с соотношением С:O 2.2 (из метода РФЭС).

В результате: (1) Обнаружены новые полосы в спектре, характеризующие Брёнстедовские (1550 и 1485 см−1) и Льюивские (1595, 1485 и 1445 см−1) взаимодействия; (2) Установлено оптимальное время экспозиции (ОГ-порошок) и (зонд-жидкий пиридин) для оценки времени достижения сорбционного равновесия молекул зонда с ОГ по двум аналитическим сигналам — масса, сорбированного зонда, и интенсивность характеристических полос ИК спектра; (3) Изучено взаимодействие в топохимических реакциях — изменение интенсивности и уширение полос поглощения в ИК спектрах во времени; (4) предложен способ косвенного определения кислотных центров (L+B) за счет комбинации подходов сорбции и термодесорбции в изотермических условиях (sr аналитического сигнала Брёнстедовских полос при 1550 и 1485 см−1 менее 15%).

*Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-73-10012).*