**Моделирование взаимодействия MeOx (Me=Cu, Ni) с графеновой сеткой в нанокомпозитах MeOx/МУНТ**

***Дмитриев В.О.1, Згерская Ю.В.2, Шматко В.А.1, Яловега Г.Э.1***

*Аспирант, 4 год обучения*

*1Южный федеральный университет, Физический факультет
г. Ростов-на-Дону, Россия*

*2Донской государственный технический университет
г. Ростов-на-Дону, Россия*

*E-mail: vdmitriev@sfedu.ru*

Композиты на основе оксидов переходных металлов и углеродных наноматериалов могут использоваться в качестве катализаторов, сенсоров, суперконденсаторов. Свойства композитов могут зависеть от взаимодействия атомов металла и углерода. Целью работы было исследование механизмов взаимодействия оксидов переходных металлов (Cu, Ni) с графеновой сеткой, методом ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения NEXAFS и XANES.

Анализ экспериментальных спектров рентгеновского поглощения за K-краем углерода, никеля и меди композитов CuOx/УНТ и NiOx/УНТ показал, что локальная структура окружения меди в композите соответствует CuO [1, 3], а никеля - Ni(OH)2 [2].

Проведено моделирование возможных механизмов взаимодействия никеля и меди с графеновой сеткой и расчёт спектров рентгеновского поглощения за К-и L2,3- краями меди и никеля. Теоретический анализ спектров XANES проводился с использованием программного комплекса FDMNES в полном потенциале, методом многократного рассеяния. Были построены различные структурные модели, учитывающие взаимодействие атомов меди и никеля, а также кластеров CuO и NiO, с графеновой плоскостью и для них рассчитаны теоретические спектры XANES. Рассмотрены возможные модели: атомный кластер со структурой NiO и CuO располагался над центром углеродного гексагона, над его вершиной и связью углерод-углерод. На основе согласия экспериментальных и теоретических спектров определены наиболее вероятные пути связывания оксидов никеля и меди с графеновой сеткой.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00459*

**Литература**

1. Shmatko V.A., Ulyankina A.A., Smirnova N.V., Yalovega G.E. X-Ray Spectral Studies of the Interface Interaction in CuOx/MWCNTs Nanocomposite // Opt. Spectrosc. 2018. Vol. 124 (4). P. 478-482.

2. Shmatko V., Leontyeva D., Nevzorova N., Smirnova N., Brzhezinskaya M., Yalovega G. Interaction between NiOx and MWCNT in NiOx/MWCNTs composite: XANES and XPS study // J. Electron Spectros. Relat. Phenomena. 2017. Vol. 220. P. 76-80.

3. Shmatko V., Yalovega G., Barbashova A., Kuriganova A., Bogoslavskaya E., Smirnova N. Investigation of the Morphological, Atomic and Electronic Structural Changes CuOx Nanoparticles and CNT in a Nanocomposite CuOx/CNT: SEM and X-ray Spectroscopic Studies // Key Eng. Mater. 2016. Vol. 683. P. 215-220.