**Разработка подхода к разделению протия и трития:**

**численное моделирование и экспериментальная**

**проверка на оксиде графена**

**Руденко М.А.**

*Студент, 6 курс специалитета*

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

*E-mail:* *mikhail.rudenko@chemistry.msu.ru*

В настоящее время, ввиду накопления большого количества тяжелой (HTO) воды, актуальной задачей является ее отделение от чистой (H2O) для дальнейшего использования. Существующие методы имеют ряд недостатков, основным из которых является высокая стоимость очистки. Ввиду использования методов разделения, основанных на физических различиях молекул воды, данные способы имеют очень низкую энергоэффективность. Перспективным методом очистки, ввиду его высокой энергоэффективности, является использование материалов, обладающих высоким кинетическим изотопным эффектом (КИЭ). Данный эффект заключается в различии скоростей протонного переноса 1H и 3H между молекулами воды и очистителя. Это позволяет сделать процесс более энергоэффективным. Поиск подобных материалов требует проведения огромного количества экспериментов, что связано с высокой дозовой нагрузкой персонала и финансовыми затратами. Использование квантово-химического моделирования позволяет существенно снизить время разработки, стоимость, а также практически полностью избавиться от облучения исследователей.

 Для поиска материалов, обладающих высоким КИЭ был разработан подход, основанный на использовании полуэмпирических расчетов PM7. Суть подхода заключалась в моделировании пути реакции обмена протона, посредством его последовательного смещения от молекулы растворителя к молекуле, вещества, выбранного в качестве очистителя. Обмен моделировался через молекулу растворителя – воду. Затем по зависимости теплоты образования от смещения атома водорода определялась координата переходного состояния и с использованием ее энергии нулевого колебательного уровня рассчитывалась величина КИЭ [1,2].

 Одним из перспективных материалов для очистки воды является оксид графена. Для исследования его КИЭ был проведен ряд расчетов, моделирующих движение молекулы воды над слоем оксида графена. При анализе результатов был обнаружен обмен протона, проходящий через молекулу воду. Для экспериментального исследования возможности использования оксида графена для очистки воды, была собрана установка, предназначенная для пропускания воды через мембрану оксида графена и конденсации прошедшей части воды для измерения ее активности. В ходе эксперимента по пропусканию тяжелой воды было отмечено снижение ее активности в 1.4 раза.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 23-73-30006.*

**Литература**

1. Amnon Kohen Kinetic Isotope Effects as Probes for Hydrogen Tunneling in Enzyme Catalysis.// Progress in Reaction Kinetics and Mechanism. 2003. V. 28. P. 119–156.

2. À. González-Lafont and J. M. Lluch Kinetic isotope effects in chemical and biochemical reactions: physical basis and theoretical methods of calculation .//Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.. 2016. V. 6. P. 584–603