**Сорбция и транспорт молекул этанола в оксиде графена**

***Лесных А.А.1, Гурьянов К.Е.1, Елисееев А.А.2***

*Студент, 2 курс бакалавриата*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
факультет наук о материалах, Москва, Россия*

*2Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: lesnykhaa@my.msu.ru*

Процессы мембранного разделения газов и жидких смесей находят широкое применение в промышленности. К настоящему моменту мембраны широко используются в процессах очистки и опреснения воды, газоразделения, медицине и водородной энергетике. В подавляющем большинстве для процессов разделения используются полимерные мембраны, предельные проницаемости и селективности которых обратно пропорциональны друг другу. В связи с этим, исследование и разработка принципиально нового семейства мембранных материалов является перспективным направлением материаловедения.

Одним из перспективных и хорошо изученных материалов для таких мембран является оксид графена, представляющий собой лист графена атомарной толщины, покрытый с обеих сторон функциональными группами. Несмотря на огромное количество работ, посвященных использованию оксида графена в качестве мембран, изучению их микроструктуры и химического состава уделяется недостаточно внимания. В связи с этим механизм массопереноса через мембраны остается слабоизученным. Одним из весьма перспективных направлений для исследования механизма массопереноса является использование полуэмпирических квантово-химических расчётов. Квантово-химические расчёты, подтвержденные экспериментальными данным о микроструктуре и проницаемости мембран, позволят детально изучить механизм массопереноса через мембрану оксида графена.

С помощью полуэмпирических методов проведено моделирование структуры и транспортных характеристик оксида графена с различным содержанием адсорбированной воды и водно-этанольных смесей. Установлено линейное увеличение равновесного межслоевого расстояния в ОГ с увеличением количества адсорбированной воды (Рисунок 1). Показано, что энергия адсорбции воды в межслоевое пространство оксида графена существенно изменяется с увеличением степени окисленности слоев. Избыточная теплота адсорбции относительно процесса объемной конденсации наблюдается при соотношении C:O<2.5 и составляет до 10 ккал/моль. С помощью моделирования процесса транспорта различных частиц в межслоевом пространстве оксида графена обнаружена значительная разница в энергиях активации транспорта молекул воды (~0.37 эВ/Å), метанола (~0.48 эВ/Å) и протонов (~0.24 эВ/Å). Рассчитанные сорбционные кривые хорошо описываются в рамках уравнения адсорбции Дубина-Астахова (рис. 1).

Рис. 1. Зависимость межслоевого расстояния от количества сорбированной воды и кривые сорбции воды в оксид графена с разной степенью окисленности.

*Работа выполнена при поддержке гранта №23-13-00195.*