

Влияние межслоевого расстояния на транспорт воды в мембранах оксида графена

Лесных А.А.¹, Гурьянов К.Е.¹, Елисеев Ан.А.¹, Елисеев Ар.А.¹

lesnykhaa@my.msu.ru

¹ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Мембранные технологии широко применяются в процессах разделения газов и жидкостей, однако для традиционных полимерных мембран характерен компромисс между проницаемостью и селективностью. В связи с этим перспективным направлением является разработка новых материалов, в частности мембран на основе оксида графена (ОГ).

В работе проведено полуэмпирическое квантово-химическое моделирование сорбции и транспорта молекул воды в структуре ОГ с различным межслоевым расстоянием и степенью гидратации. Установлено, что увеличение содержания адсорбированной воды приводит к линейному росту межслоевого расстояния (в диапазоне $\sim 0,72$ – $1,22$ нм), при этом влияние степени окисленности на данный параметр незначительно. Показано, что при $C/O < 2,5$ наблюдается избыточная теплота адсорбции (~ 10 ккал/моль), что указывает на сильное взаимодействие воды со структурой ОГ.

Расчёты, как и эксперимент демонстрируют существенное увеличение проницаемости по воде (от $\sim 1,8 \cdot 10^{-8}$ до $\sim 3,1 \cdot 10^{-5}$ моль·м⁻²·Па⁻¹·с⁻¹ в эксперименте) с ростом межслоевого расстояния. Это связано с увеличением числа подвижных молекул воды (до $\sim 1,24$ на атом углерода) и ростом коэффициента диффузии (до $\sim 2,0 \cdot 10^{-9}$ м²/с), сопоставимого с самодиффузией воды. Одновременно наблюдается снижение энергии активации транспорта (с $\sim 0,5$ до $\sim 0,12$ эВ), обусловленное уменьшением числа водородных связей между водой и слоями ОГ.

Дополнительно показано, что структурные колебания слоёв ОГ могут приводить к снижению плотности интеркалированной воды и дальнейшему уменьшению энергетических барьеров переноса. Это сопровождается более высокой степенью упорядочения молекул воды в межслоевом пространстве.

Таким образом, межслоевое расстояние и степень гидратации являются ключевыми параметрами, определяющими транспортные свойства мембран на основе оксида графена. Полученные результаты позволяют глубже понять механизм массопереноса и могут быть использованы при разработке высокоэффективных мембранных материалов.

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

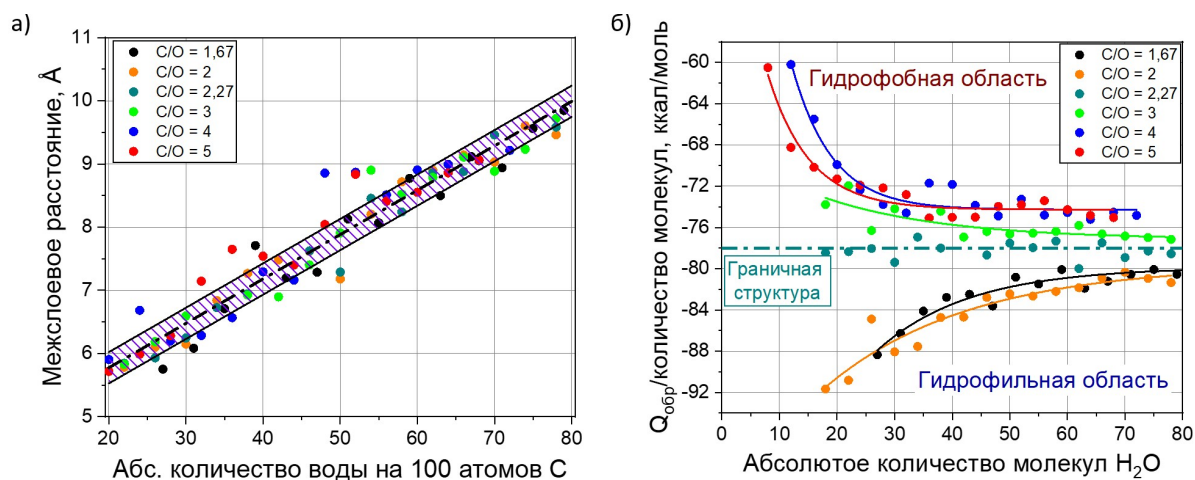


Рис. 1. Зависимость межслоевого расстояния от количества сорбированной воды (а) и кривые сорбции воды в оксид графена с разной степенью окисленности (б).