

Исследование микроструктуры оксида графена с использованием полуэмпирических квантовых расчетов

Лесных А.А.¹, Гурьянов К.Е.¹, Елисеев Ар.А.², Елисеев Ан.А.^{1,2}

lesnyhsasha@yandex.ru

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

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

Технологии мембранного разделения жидких и газообразных смесей широко применяются в промышленности. Среди основных сфер применения можно выделить: очистку и опреснение воды, осушение воздуха, протонообменные мембраны. Считается, что мембраны на основе оксида графена могут значительно превзойти традиционно используемые полимерные материалы, по значениям паропроницаемости и селективности. Несмотря на большое количество работ, посвященных исследованию структуры оксида графена его точное строение и, как следствие, механизм массопереноса до сих пор не до конца изучены.

Современные физико-химические методы исследования такие как ИК-спектроскопия, РФС и ЯМР спектроскопия позволяют лишь частично ответить на вопрос об истинной структуре оксида графена. Это препятствует установлению механизма массопереноса через селективный слой. Комбинирование экспериментальных данных с квантово-химическими расчётами позволит установить оптимальную геометрию оксида графена. Это позволит детально исследовать механизмы транспорта молекул и ионов через структуру мембраны.

В рамках работы были исследованы структуры оксида графена с соотношением C:O = 5:3. В процессе моделирования исследовались структуры, соответствующие двум «крайним» состояниям (только эпоксидные или гидроксильные группы) и некоторые промежуточные. Показано, что структура, содержащая только эпокси- группы, крайне неустойчива и присоединяет воду в виде гидроксильных групп при увеличении содержания молекул воды между слоями (рис. 1а). Структуры, содержащие малое количество гидроксильных групп (до 20), не демонстрируют значительного изменения межплоскостного расстояния при низких относительных влажностях, в отличие от структур, содержащих преимущественно гидроксильные группы (рис. 1б).

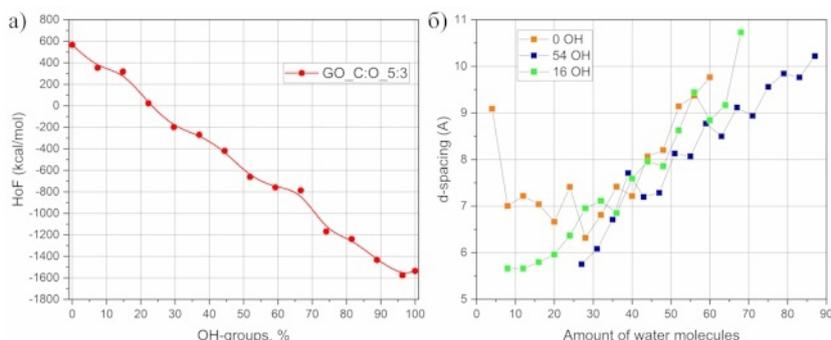


Рисунок 1. Энтальпия образования структуры (а). Изменение межплоскостного расстояния от количества воды в структуре (б).