**Мембраны на основе оксида графена для метанольных топливных элементов**

***Лесных А.А.1, Гурьянов К. Е.1, Елисеев Ар. А2***

*Студент, 1 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: lesnyhsasha@yandex.ru*

Разработка и внедрение альтернативных источников энергии является одним из приоритетных направлений современной энергетики. Возобновляемые источники энергии призваны значительно снизить количество вредных выбросов в атмосферу. Одной из перспективных разработок являются топливные элементы, преобразующие энергию химической реакции в электрическую. На сегодняшний день изучен и разработан обширный класс топливных элементов, среди которых весьма перспективным является прямой метанольный топливный элемент. Одним из основных компонентов топливного элемента является протонообменная мембрана, обеспечивающая непосредственный транспорт протонов между анодом и катодом. В качестве основного материала, используемого для таких мембран, является Нафион. Несмотря на высокую протонную проводимость данный материал обладает рядом недостатков, таких как низкая селективность паре H+/H2O, невысокие рабочие температуры и давления. В связи с этим поиск альтернативных материалов для метанольных топливных элементов является перспективной задачей мембранного материаловедения.

Наиболее популярными методами исследования мембранных материалов на основе ОГ являются экспериментальные подходы для установления характеристик проницаемости, толщины мембраны и межслоевого расстояния. Однако, основываясь только на экспериментальных данных не всегда оказывается возможным детальное установление механизмов, протекающих на микроскопическом уровне процессов транспорта молекул и сорбции-десорбции последних в межслоевое пространство. В таком случае данная информация может быть извлечена при помощи теоретических подходов, таким как молекулярная динамика и квантово-химические расчеты. Более того, при достаточном количестве данных и успешной экспериментальной верификации разработанного подхода, последний приобретает предсказательную силу, помогая в постановке эксперимента, а в наилучшем случае даже заменяя его.

В рамках работы исследовалась зависимость межслоевого расстояния оксида графена от количества сорбированной воды и метанола с использованием полуэмпирических моделей, также была вычислена энтальпия образования структуры в зависимости от количества интеркалированных в структуру молекул воды или метанола. Исследование транспортных свойств мембран по метанолу проводили с использованием газового хроматографа.

Проницаемость полученных мембран по метанолу и воде составила 30 Л·м-2·ч-1·бар-1 и 60 м3·м-2·ч-1·бар-1, а идеальная селективность составила ~ 2000. Было выявлено, что межслоевое расстояние линейно зависит от количества сорбированной воды и не зависит от степени окисленности оксида графена. Энтальпия образования полученных структур с водой и метанолом оказалась близкой к табличным величинам с учетом погрешности метода моделирования. Также из энтальпий образования были получены кривые сорбции для воды, которые хорошо согласуются с результатом эксперимента.

*Автор выражает свою благодарность научному руководителю Елисееву Ан. А.*

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