روش نمک‌زدايي تجاري با گرافن نانومتخلخل

روش‌های متنوعی از قبیل حفاری پرتوی یون هلیوم و حکاکی شیمیایی، می‌توان در گرافن نانوحفره‌هایی ایجاد کرد. دانشمندان در شبیه‌سازی‌شان، بوسیله خنثی کردن اتم‌های کربن در گوشه‌های حفره‌ها با پیوند دادن آنها با اتم‌های هیدروژن یا گروه‌های هیدروکسیل نانوحفره‌ها را تثبیت کردند.

این دانشمندان در شبیه‌سازی‌های خود این دو گروه عاملی و همچنین اندازه‌های مختلف حفره‌ها را بررسی کردند. آنها فرض کردند که خوراک این غشاء‌ها آب نمکی با غلظت 72 گرم بر لیتر (حدود دو برابر متوسط غلظت آب دریا) است. این محققان متوجه شدند که اگرچه بزرگ‌ترین حفره‌ها می‌توانند آب را با بیشترین دبی فیلتر کنند، اما نانوحفره‌های بزرگ به بعضی از یون‌های نمک اجازه می‌دهند که عبور کنند. این شبیه‌سازی‌ها گستره‌ی مناسبی از قطر‌های نانوحفره‌ها را مشخص کردند که در آن گستره، نانوحفره‌ها برای عبور مولکول‌های آب به اندازه کافی بزرگ هستند و برای ممانعت از عبور یون‌های نمک به اندازه کافی کوچک هستند

این شبیه‌سازی‌ها همچنین نشان دادند که گرافن هیدروکسیل‌شده قابلیت نفوذ آب را به شدت تقویت می‌کند و دانشمندان آن را به طبیعت آب‌دوستی گروه‌های هیدروکسیل نسبت می‌دهند. در مقابل، از آنجائیکه حفره‌های هیدروژنه‌شده آب‌گریز هستند، برای تعداد محدودی از پیکربندی‌های بسیار منظم، اجازه عبور مولکول‌های آب را می‌دهند