

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОНИЦАЕМОСТИ УГЛЕРОДНОГО НАНОПОЛОТНА

А.В. Уколов, М.А. Бубенчиков

Научный руководитель: Профессор, д. ф.-м. н. А. М. Бубенчиков

Томский государственный университет, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: [Ukolov33@gmail.com](mailto:Ukolov33@gmail.com)

## RESEARCH OF PERMIABILITY CORBON NONOWIRES

A.V. Ukolov, M.A. Bubenchikov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.M. Bubenchikov

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: [Ukolov33@gmail.com](mailto:Ukolov33@gmail.com)

***Abstract.** The design of nanowires with intersecting spherical particles was carried out, after which the constructions determining the cellular structure of the flat web were made. The mathematical model presented in this paper is a classical model of the dynamics of molecules in potential fields of spherical particles. By systematic calculations it was established that in the case of a web composed of diamond threads the relative permeability of the structure is the relative area of the free passage zone of the nanowires cell, found from the effective radius of the nanowires.*

*For a fabric made of diamond nanowires with a diameter of 0.7 nm, it is shown that there is no accumulation of gas components in the potential wells of the structure. Thus, the ideal carbon structure under consideration is "pure". This allows us to hope that the filtration regime of the gas components will be kinetic rather than diffusion. In this case, the network of diamond threads can serve as the main separation layer of the nanoporous membrane. Systematic calculations show that the relative permeability of a component, is the proportion of the area of the permeability window in the total area of the cell web.*

Нанонити являются конструктивным элементов во многих новых материалах. Производство нанонитей, равномерно ориентированных по любой произвольно выбранной оси кристалла, является важной, но нерешенной проблемой в материаловедении. В работе [1] представлено обобщенное решение этой проблемы. Авторами был предложен метод огибающего углового осаждения в сочетании с быстрым изменением направления осаждения между положениями симметрии кристалла. В работе [2] авторами был предложен экономически выгодный способ получения пористых нанонитей на основе кремния методом химического травления. Материал, сконструированный на основе таких нитей обеспечивает хорошую проницаемость как для ионов лития, так и для электронов.

Таким образом, как видно из приведенного краткого обзора, большинство работ посвящено синтезу нанонитей, а также получению материалов на их основе, обладающих заданными свойствами. Работ по математическому моделированию технологий с использованием нановолокнистых материалов крайне мало.

Поскольку селективные поры наносетчатых структур имеют размер  $10^{-9}$  м, а средняя длина свободного пробега молекул газов при нормальных условиях порядка  $10^{-7}$  м, то для описания взаимодействия молекул со структурой необходимо использовать модель разреженного газа либо метод

одиночной частицы, а статистику набирать множественными испытаниями движений молекул. В дальнейшем будем опираться на первый подход, решая задачу проникновения, как задачу множественных испытаний, а задачу физической сорбции как задачу накопления молекул в потенциальных ямах структуры.

Уравнения динамики перемещающейся молекулы запишем в стандартной форме в виде второго закона Ньютона, который в проекциях на оси декартовых координат имеет вид:

$$m \frac{du}{dt} = \sum_{j=1}^{N_p} X_j, \quad m \frac{dv}{dt} = \sum_{j=1}^{N_p} Y_j, \quad m \frac{dw}{dt} = \sum_{j=1}^{N_p} Z_j. \quad (1)$$

Здесь  $m$  – масса пробной молекулы, пропускаемой через фильтр,  $N_p$  – количество частиц, составляющих фрагмент структуры;  $X_j, Y_j, Z_j$  – проекции сил взаимодействия пробной молекулы и  $j$ -той наночастицы, которые определяются следующим образом:

$$X_j = a_j \frac{x - x_j^0}{\rho_j} m, \quad Y_j = a_j \frac{y - y_j^0}{\rho_j} m, \quad Z_j = a_j \frac{z - z_j^0}{\rho_j} m, \quad (2)$$

где  $a_j$  – величина ускорения, приобретаемого пробной молекулой под действием  $j$ -той наночастицы,  $x, y, z$  – координаты определяющие положение пробной молекулы,  $x_j^0, y_j^0, z_j^0$  – координаты частиц образующих полотно.

Потенциал взаимодействия наночастица – молекула выбирается в форме, предложенной В.Я. Рудяком и С.Л. Краснолуцким [3]:

$$\Phi_9^3(\rho_j) = \Phi_9(\rho_j) - \Phi_3(\rho_j). \quad (3)$$

Здесь  $\rho_j$  – расстояние от центра наночастицы до центра пробной молекулы,  $\rho_p$  – радиус наночастицы (эта же величина будет собственным радиусом нанонити).

$$\Phi_9(\rho_j) = C_9 \left\{ \left[ \frac{1}{(\rho_j - \rho_p)^9} - \frac{1}{(\rho_j + \rho_p)^9} \right] - \frac{9}{8\rho_j} \left[ \frac{1}{(\rho_j - \rho_p)^8} - \frac{1}{(\rho_j + \rho_p)^8} \right] \right\}, \quad (4)$$

$$\Phi_3(\rho_j) = C_3 \left\{ \left[ \frac{1}{(\rho_j - \rho_p)^3} - \frac{1}{(\rho_j + \rho_p)^3} \right] - \frac{3}{2\rho_j} \left[ \frac{1}{(\rho_j - \rho_p)^2} - \frac{1}{(\rho_j + \rho_p)^2} \right] \right\}. \quad (5)$$

Значения констант взаимодействия  $\varepsilon$  и  $\sigma$ , входящих в  $LJ$ -потенциал, для некоторых пар одинаковых молекул приведены в таблице 1 [4,5].

Таблица 1

Параметры  $LJ$ -потенциала для различных молекул

| Взаимодействующие молекулы               | Относительная глубина потенциальной ямы | Радиус влияния $LJ$ -потенциала |
|--|---|---------------------------------|
| C – C (1)                                | $\varepsilon/k = 51,2$ К                | $\sigma = 0,335$ нм             |
| He – He (2)                              | $\varepsilon/k = 10,2$ К                | $\sigma = 0,228$ нм             |
| H <sub>2</sub> – H <sub>2</sub> (3)      | $\varepsilon/k = 34$ К                  | $\sigma = 0,29$ нм              |
| O <sub>2</sub> – O <sub>2</sub> (4)      | $\varepsilon/k = 117$ К                 | $\sigma = 0,35$ нм              |
| CH <sub>4</sub> – CH <sub>4</sub> (5)    | $\varepsilon/k = 148$ К                 | $\sigma = 0,38$ нм              |
| Примечание – $k$ – постоянная Больцмана. |   |                                 |

Параметры парных взаимодействий для различных веществ  $\varepsilon_{12}$  и  $\sigma_{12}$  определяются по формулам среднего арифметического и среднего геометрического:

$$\sigma_{12} = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22}}{2}, \quad \varepsilon_{12} = (\varepsilon_{11} \cdot \varepsilon_{22})^{1/2}. \quad (6)$$

Если дополнить уравнения (1) кинематическими соотношениями:

$$\frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v, \quad \frac{dz}{dt} = w, \quad (7)$$

то получим систему шести дифференциальных уравнений первого порядка для движения пробной молекулы через структуру полотна, составленного нанонитями. Эти уравнения с очевидными начальными условиями будем решать численно явными методами пошаговых вычислений.

Для полотна, выполненного из алмазных нанонитей диаметром 0,7 нм показано, что не происходит накопления газовых компонент в потенциальных ямах структуры. Таким образом, рассматриваемая идеальная углеродная структура является «чистой». Это позволяет надеяться, что режим фильтрации газовых компонент будет кинетическим, а не диффузионным. В этом случае сетка из алмазных нитей может выполнять функцию основного разделительного слоя нанопористой мембраны. Систематическими расчетами показано, что относительная проницаемость той или иной компоненты, есть доля площади окна проницаемости в общей площади ячейки полотна.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tao Y., Degen C.L. Growth of magnetic nanowires along freely selectable crystal directions // *Nature Communications*, 2018, 9:339. DOI: 10.1038/s41467-017-02519-8
2. Lui L., Xiong J., Yang T., Qin Y., Yan C. Porous Si nanowires from Cheap Metallurgical Silicon Stabilized by a Surface Oxide Layer for Lithium Ion Batteries // *WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA*, 2015, 25, 6701–6709. DOI: 10.1002/adfm.201503206  
Фамилия И.О. Название статьи // Журнал. – 2012. – Т. 1. – № 11. – С. 71–77.
3. Rudyak V.Y. The calculation and measurements of nanoparticles diffusion coefficient in rarefied gases / V.Y. Rudyak, S.L. Krasnolutskii // *J. Aerosol Science*. – 2003. – Vol. 34, suppl. 1. – P. 579–580. DOI: 10.1016/S0021-8502(03)00148-4 Пат. 2000000 РФ. МПК8 G01N 29/04. Способ определения ... / И.О. Фамилия. Заявлено 10.04.2007; Опубл. 10.02.2008, Бюл. № 4. – 6 с.
4. Глушко В.П. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Том 1. / В.П. Глушко // Москва. – 1971. – 263.
5. Справочник химика. Том 1. / под ред. Б.П. Никольского // М-Л. : Химия. – 1982. – 1072 с.