

0.1. Рыжков И.И., Минаков А.В., Лебедев Д.В., Хартов С.В., Симунин М.М., Шиверский А.В. Моделирование транспорта ионов вблизи наноструктурированных поверхностей и в нанопорах

Полупроницаемые мембраны с наноразмерными порами (наномембраны) являются одним из перспективных технологий разделения веществ. Принцип работы традиционных пассивных мембран основан на геометрическом соответствии размеров пор и размеров пропускаемых молекул. В настоящее время интенсивно изучаются активные мембраны, селективность которых может варьироваться посредством внешнего воздействия. В качестве такого воздействия может выступать электрическое поле, создаваемое заряженными стенками поры. В частности, отрицательный заряд на стенке будет препятствовать прохождению положительных ионов. В работе [1] синтезирована структура на основе пористого анодного оксида алюминия со сквозными порами диаметром 10–40 нм. Стенки пор являются проводящими нанотрубками, подключенными к общему входному электроду. Высказано предположение, что рост неоднородности электрического поля, связанный с морфологией созданной структуры, будет способствовать увеличению ионной селективности мембраны и расширению диапазона допустимой концентрации ионов в обрабатываемом растворе. Следует отметить, на промежуточной стадии формирования наномембраны синтезируется поверхность, покрытая нановорсинками (Активный Нановорсистый Материал). Этот материал может использоваться в качестве концентратора ионов при приложении к нему электрического потенциала.

В настоящей работе проводится математическое моделирование переноса ионов вблизи поверхности АНВ-материала, а также в нанопорах с целью более глубокого понимания соответствующих физико-химических закономерностей и оптимизации процесса. Математическая модель основана на уравнении Пуассона для потенциала и уравнении Нернста-Планка для концентрации ионов. Перенос ионов происходит путем диффузии и электромиграции. Рассмотрены различные подходы к моделированию распределения ионов в двойном электрическом слое (с учетом и без учета конечных размеров ионов). Изучено влияние величины и знака заряда на стенках нанопоры на транспорт положительных и отрицательных ионов в водных растворах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 15-19-10017).

нин А. С. Структуры на основе графитизированных нанотрубок с общим электродом в матрице пористого анодного оксида алюминия для задачи формирования переключаемых электрическим полем мембран // Письма в ЖТФ. — 2015. — Т. 41, вып. 21, С. 52–59.

Список литературы

- [1] Симунин М. М., Хартов С. В., Шиверский А. В., Зырянов В. Я., Фадеев Ю. В., Воро-