ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций»

X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/531

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ФИЛЬТРАЦИИ СОЛЕНОЙ ВОДЫ ЧЕРЕЗ ИОН-СЕЛЕКТИВНЫЕ ЩЕЛЕВИДНЫЕ НАНОПОРЫ

Цуканов А.А., Шилько Е.В., Псахье С.Г.

ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

root@ispms.tomsk.ru

Особенности фильтрации флюидов и молекулярного транспорта через субнаметровые поры в нанопористых материалах являются существенным фактором таких процессов, как извлечение нефти и газа, разделение газа, хранение водорода и природного газа, разделение ионов, дезактивация и очистка воды. Разработка наноструктурных материалов с высокой фильтрационной способностью и высокой селективностью, в том числе по отношению к примесям или солям, является сложной нанотехнологической задачей, решение которой актуально для большого количества различных практически значимых областей применения. Одной из таких задач является опреснение морской воды для производства питьевой воды или технического использования, например, при инъекции водяного пара для улучшения добычи тяжелой нефти.

В данном исследовании основной акцент сделан на анализе закономерностей фильтрации соленой воды через природный минерал (гидроксиапатит) с щелевидными нанопорами. Вследствие щелевидной геометрии и субнанометровой ширины пор такой нанопористый материал способен демонстрировать сравнительно высокую водопроницаемость и достаточно высокую степень очистки фильтруемой воды от солей. Исследование проводилось путем компьютерного моделирования с применением подхода неравновесной молекулярной динамики (nonequilibrium molecular dynamics – NEMD). Моделировалась фильтрация соленой воды через две щелевидных нанопоры шириной 4,2 и 7,8 Å, образованные поверхностями {001} гидроксиапатита (HAP). Рассматривались различные значения разности давлений на входе и выходе нанопоры вплоть до 200 МПа. Использовались хорошо известные и верифицированные авторами атомно-молекулярные модели с силовым полем Interface FF. Вычисления осуществлялись с использованием ресурсов ЦКП сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ.

Результаты моделирования, в частности, показали, что щелевидная нанопора шириной 4,2 Å является непроницаемой для ионов Na+ и слабопроницаемой для ионов Cl^- (через нанопору фильтровалось менее 10% ионов Cl^- от общего количества в подаваемом на вход нанопоры водном растворе). При этом такая нанопора демонстрирует стабильную проводимость по отношению к воде, составляющую около 4.7 л/(см^2·день·МПа) (при «плотности» пор ~ 0,3 нм$^{-1}$). Полученное значение проводимости выше, чем у коммерческих мембран и сопоставимо с предсказанной проводимостью мембран на основе MoS_2 и нанопористого графена. Отметим также, что проводимость нанопоры шириной 7,8 Å в 6 раз выше при меньшей селективности по отношению к солевым ионам при высокой разности давлений.

Полученные результаты показывают, что нанопористые материалы с щелевидными нанопорами являются перспективными для применения в качестве основы при разработке эффективных водоочистных систем с достаточно высокой производительностью. Кроме того, полученные результаты указывают на необходимость специальных исследований характеристик проницаемости и селективности нанопор с прямоугольным поперечным сечением (в частности, при больших значениях отношения длин сторон) в минералах с различной поляризацией поверхности, нанолистах графенах, оксиде графена, нитриде бора, MoS_2 и других перспективных соединениях.