НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
МЕХАНИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО МАТЕМАТИКЕ И МЕХАНИКЕ

2 – 4 октября 2018 г.

Тезисы докладов

Издательский Дом Томского государственного университета

2018

Математическая модель проницаемости углеродного нанополотна

Бубенчиков А.М., Бубенчиков М.А., Уколов А.В., Лебедев А.В.

Томский государственный университет

Нанонити являются конструктивным элементов во многих новых материалах. Производство нанонитей, равномерно ориентированных по любой произвольно выбранной оси кристалла, является важной проблемой в материаловедении. В статье [1] представлено обобщенное решение этой проблемы, а в [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.

В настоящей работе проведено конструирование нанонити пересекающимися сферическими частицами, после чего выполнены построения, определяющие ячеистую структуру плоского полотна. Представленная в работе математическая модель является классической моделью динамики молекул в потенциальных полях сферических частиц. Для полотна, выполненного из алмазных нанонитей диаметром 0,7 нм, установлено, 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. Chen Yu, 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. pp. 6701–6709. DOI: 10.1002/adfm.201503206