Всероссийская молодежная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Все грани математики и механики»

(23–27 апреля 2019 г.)

Сборник тезисов докладов

(Тезисы представлены в авторской редакции)

Проницаемость слоистой мембраны нитрида бора молекулами газовой смеси

Бубенчиков А.М., Челнокова А.С.

Томский государственный университет, г. Томск
e-mail: smolina-nyuta@mail.ru

Классическая теория проникновения вещества через пористые структуры хорошо развита и имеет широкое применение в технике. Однако диффузионный перенос вещества не годится для описания переноса в сверхтонких слоях, поскольку в последнем случае мы имеем дело с масштабами, на которых перестают работать модели сплошной среды. Статистическая физика в виде уравнений Больцмана для функций плотности вероятности распределения случайных величин имеет проблемы с замыканием этих уравнений и удовлетворением граничных условий для рассматриваемых функций. Поэтому в рамках данного подхода пока не удалось решить ни одной полезной задачи о мембранном транспорте вещества.

В настоящей работе строится теоретическая модель прохождения атомов и молекул различных газовых компонент через поры соответствующего размера в пленке нитрида бора [1,2]. Для изучения проницаемости такой системы достаточно рассмотреть движение молекул через один прямоугольный туннель. Характер разделения метан-гелиевой смеси анализируется на основе атом-атомных взаимодействий. Используя преобразование Бокса−Мюллера, случайным образом задаются компоненты вектора скорости молекул газа, имеющих распределение Максвелла. Далее, статистическими расчетами определяется проницаемость в отношении отдельных компонент, а также степень разделения бинарной смеси газов. Расчеты показали низкую проницаемость метана и гелия через структуры и селективность около двух единиц.

Список литературы

[1] Покропивный В.В., Ивановский А.Л. Новые наноформы углерода и нитрида бора // Успехи химии. 2008. 77 (10). С. 899–937.

[2] Ultrathin high-temperature oxidation-resistant coatings of hexagonal boron nitride / Zheng Liu, Yongji Gong, Wu Zhou, Lulu Ma, Jingjiang Yu, Juan Carlos Idrobo, Jeil Jung, Allan H. MacDonald, Robert Vajtai, Jun Lou, Pulickel M. Ajayan // Nature Communications. 2013. V. 4. Article number: 2541.