

УДК 539.196.3

DOI 10.17223/19988621/57/5

М.А. Бубенчиков, А.М. Бубенчиков, А.В. Уколов,
Р.Ю. Уколов, А.С. Челнокова

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОНИЦАЕМОСТИ УГЛЕРОДНОГО НАНОПОЛОТНА¹

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. Систематическими расчетами установлено, что для однослойных структур, составленных центрально-симметричными частицами, относительная проницаемость структуры есть относительная площадь свободной зоны прохождения ячейки нанополотна, найденная по эффективному радиусу нанонити.

Ключевые слова: *нанонить, сферическая частица, потенциал Леннарда-Джонса, молекулярная динамика, эффективный радиус, относительная проницаемость.*

Нанонити являются конструктивным элементом 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] авторы предложили 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. Авторам статьи [3] удалось синтезировать нанонити из карбида титана с помощью хлоридной карботермической реакции с использованием сахарозы. Полученная нанонить имеет длину в десятки микрометров. Нанонити, синтезированные из карбида титана, хорошо проявили себя при поглощении электромагнитных волн в диапазоне 8.2–12.4 ГГц. Авторам [4] удалось получить гибридный наноматериал, состоящий из одномерных сверхтонких платиновых нанонитей, выращенных на двумерном однослойном гидроксиде никеля. В статье [5] обсуждается вопрос получения прозрачного проводящего гибридного пластика, который имеет широкое применение в оптоэлектронике. Авторам удалось создать указанный пластик на основе металлических нанонитей, инкапсулированных между монослоем графена и пластиковой подложкой. В [6] представлен углубленный критический обзор основных экспе-

¹ Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (госзадание № 1.13557.2019/13.1).

риментальных и теоретических работ в области проводящих полимерных нанокompозитов, таких, как углеродные нанотрубки и металлические нанонити. Это универсальный класс материалов, которые представляют интерес для широкого применения. Авторами [7] созданы нанонити на основе оксида железа (~ 20 нм), который при электрохимической обработке переходит в нанонити ультрамалого диаметра (2–5 нм). Продемонстрировано, что сверхмалые нанонити NiFeO_x , индуцированные литием, являются активными бифункциональными катализаторами, обладающими высокой активностью и стабильностью для общего расщепления воды. В работе [8] авторы рассказывают о создании волокнистых, изотропно связанных эластичных аэрогелей с иерархической клеточной структурой путем замораживания нановолокон. Авторы [9] с помощью модифицированного процесса электроспиннинга и использования метода усиления межфазной поляризации получили наночастицы BaTiO_3 с внедренными нановолокнами TiO_2 . В [10] основное внимание уделяется прогрессу в применении метода электроспиннинга в производстве биodeградируемых нановолокон в новую область биомедицины. Авторами обсуждаются вопросы получения и применения широкополосных биоразлагаемых нановолокон и сравнивается скорость разрушения наноразмерных материалов вследствие влияния макромасштабных объектов. В [11] представлен метод получения цинкосодежащих пористых активированных углеродных нановолокон путем одношагового электроспиннинга, с использованием ацетата цинка и полиакрилонитрила с последующей термообработкой. Вопросы математического моделирования проницаемости на базе молекулярно-кинетических моделей рассмотрены в работах [12–16].

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.

Исходя из этого, целью данной работы является оценка фильтрационных свойств нанополотна, составленного алмазными нанонитями, а также определение эффективного радиуса для наиболее вероятного диапазона скоростей молекул метана и атомов гелия.

Уравнение движения проникающей молекулы

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 разряженного газа либо метод одиночной частицы, а статистику набирать множественными испытаниями движений молекул. Существует ещё один подход, основанный на использовании уравнений для функции, определяющей плотность вероятности распределения случайной величины. Однако в случае решения задач прохождения молекул через нанопористую структуру, он требует интегрирования пространственных уравнений переноса с неизвестными условиями на границе. Поэтому 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 -й 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 -й 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 [17]:

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

Здесь ρ_j – расстояние от центра наночастицы до центра пробной молекулы, ρ_p – радиус наночастицы (эта же величина будет собственным радиусом нанонити).

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

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

Тогда величина модуля ускорения a_j , входящая в правые части соотношений (2), будет являться производной от потенциала (3) по ρ_j , деленной на массу m :

$$a_j = \frac{1}{m} \frac{d}{d\rho_j} \Phi_9^3(\rho_j) = \frac{1}{m} \left[\frac{d}{d\rho_j} \Phi_9(\rho_j) - \frac{d}{d\rho_j} \Phi_3(\rho_j) \right]. \quad (6)$$

При этом $C_9 = \frac{4\pi\epsilon_{12}\sigma_{12}^{12}}{45V_1}$, $C_3 = \frac{2\pi\epsilon_{12}\sigma_{12}^6}{3V_1}$, V_1 – объем физического пространства,

приходящийся на один атом углерода в кристаллической структуре алмаза. Потенциал (3) получен интегрированием парного LJ -потенциала по объему наночастицы [17].

Значения констант взаимодействия ϵ и σ , входящих в LJ -потенциал для некоторых пар одинаковых молекул, приведены в таблице [18, 19].

| Взаимодействующие молекулы | Относительная глубина потенциальной ямы | Радиус влияния LJ-потенциала |
|---------------------------------------|---|------------------------------|
| C – C (1) | $\epsilon/k = 51.2 \text{ K}$ | $\sigma = 0.335 \text{ нм}$ |
| He – He (2) | $\epsilon/k = 10.2 \text{ K}$ | $\sigma = 0.228 \text{ нм}$ |
| H ₂ – H ₂ (3) | $\epsilon/k = 34 \text{ K}$ | $\sigma = 0.29 \text{ нм}$ |
| O ₂ – O ₂ (4) | $\epsilon/k = 117 \text{ K}$ | $\sigma = 0.35 \text{ нм}$ |
| CH ₄ – CH ₄ (5) | $\epsilon/k = 148 \text{ K}$ | $\sigma = 0.38 \text{ нм}$ |

Примечание: k – постоянная Больцмана.

Параметры парных взаимодействий для различных веществ ϵ_{12} и σ_{12} определяются по формулам среднего арифметического и среднего геометрического:

$$\sigma_{12} = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22}}{2}, \quad \epsilon_{12} = (\epsilon_{11} \cdot \epsilon_{22})^{1/2}. \quad (7)$$

Если дополнить уравнения (1) кинематическими соотношениями

$$\frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v, \quad \frac{dz}{dt} = w, \quad (8)$$

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 сферических частиц, обладающих центральной симметрией, зависимость потенциала взаимодействия частицы от угла ее ориентации по отношению к направлению движения будет отсутствовать. Это обеспечивает значительные преимущества при нахождении расстояний от перемещающейся молекулы до элементарного фрагмента структуры.

Учет несферической формы проникающих молекул

Взаимодействие молекул с нанопористыми структурами, составленными теми или иными фрагментами, можно представить как взаимодействие системы атомов, входящих в молекулу с теми же фрагментами структуры. Такой подход является простым в реализации. Архитектура расположения атомов известна для каждой молекулы. Поэтому многоатомную молекулярную систему удобно рассматривать как недеформируемую стержневую конструкцию, в узлах которой находятся атомы, а сами стержни моделируют устойчивые химические связи. При этом тепловые колебания атомов составляют не более 10 % от межатомных расстояний.

В результате уравнение движения центра масс многоатомной молекулы можно записать следующим образом:

$$m \frac{d\mathbf{v}_c}{dt} = - \sum_{i=1}^S \sum_{k=1}^{N_p} \text{grad} U(r_{ik}). \quad (9)$$

Здесь m – масса молекулы; \mathbf{v}_c – скорость центра масс перемещающейся молекулы; S – число атомов в этой молекуле; N_p – количество сферических частиц, составляющих структуру рассматриваемого пористого материала;

$$r_{ik} = \sqrt{(x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2 + (z_i - z_k)^2};$$

$U(r)$ – потенциал взаимодействия «атом – сферическая частица», зависящий от сорта атома (в нашем случае либо углерод, либо водород).

Как видим из (9), движение центра масс многоатомной молекулы определяется суммой сферических воздействий на пористый материал, который в нашем случае представлен также сферическими воздействиями от атомов, составляющих молекулу.

Если рассматривается проникновение молекулы метана, то в ней центры атомов водорода находятся в вершинах тетраэдра, а в центре масс этой системы находится атом углерода. Тетраэдрический валентный угол составляет 109° , а расстояние от атома углерода до любого из атомов водорода составляет величину 0.109 нм. Тетраэдр имеет множество плоскостей симметрии. В результате мы имеем компактную укладку атомов, а сама конструкция является высокосимметричной. Поэтому для прохождения такой молекулы через извилистые нанопоры вряд ли будет важна ориентация молекулы в пространстве.

Бывают вытянутые молекулы, ориентация осей которых очень важна в смысле их прохождения через узкие поры. Вытянутыми можно считать все двухатомные молекулы, а также линейные многоатомные молекулы. Однако у метана все линейные размеры, спроецированные на ортогональный декартовый базис, практически одинаковы. Тем не менее движение молекулы метана как пирамидальной конструкции может быть определено более точно, нежели через эффективное молекулярное воздействие. Для этого необходимо использовать атомное представление молекулы и эйлеров подход, ставший классическим при описании движения тел в пространстве.

Согласно этому подходу, положение тела наряду с тремя координатами центра масс определяется еще и тремя углами Эйлера. Следовательно, в общем случае, наряду с уравнением (9) должны использоваться еще три скалярных уравнения для проекций вектора угловой скорости на подвижные, связанные с каркасной структурой, молекулы оси координат (динамические уравнения Эйлера). Полученная таким образом система уравнений динамики дополняется связями проекций вектора мгновенной угловой скорости с углами Эйлера, получившими название кинематических соотношений Эйлера.

В нашем примере с метаном потенциальное поле весьма грубо, но все-таки можно принять сферическим. При этом, однако, атомы следует считать разнесенными в пространстве, тогда ближние взаимодействия молекулы будут реализовываться непосредственно через атомы водорода. Если принять, что повороты молекулы метана не так важны, и рассматривать ее движение как поступательное, то движение пирамидальной конструкции будет определяться уравнением (9), которое необходимо дополнить векторным кинематическим соотношением

$$\frac{d\mathbf{r}_c}{dt} = \mathbf{v}_c. \quad (10)$$

Тогда система (9), (10) будет замкнутой и ее можно будет интегрировать численно.

Система (9), (10) должна интегрироваться со следующими начальными условиями:

$$t = 0, \quad \mathbf{v}_c = \mathbf{v}_c^0, \quad \mathbf{r}_c = \mathbf{r}_c^0,$$

где \mathbf{r}_c – радиус-вектор центра масс молекулы; \mathbf{v}_c – скорость центра масс молекулы; индекс «ноль» относится к начальному моменту времени.

В связи с возможностью описания движения проникающей молекулы метана, как эффективной сферической частицы, индекс «с», отличающий положение центра масс молекулы CH_4 , в дальнейшем будем опускать.

Результаты расчетов

Далее будем считать, что структура составлена алмазными нанонитями, а каждая нить в свою очередь составлена сферическими частицами с пересекающимися объемами, как показано на рис. 1 – 3. Пересечения выполнены таким образом, чтобы впадины между частицами могли быть скомпенсированы двойной массой в местах пересечения сфер.

Рис. 1 – 4 иллюстрируют характер движения молекул метана и атомов гелия около углеродной нанонити. Кривые 1–3 отвечают различным начальным положениям молекул и атомов, пущенных со среднеквадратичной скоростью вдоль нити: 1) $y = 2$ нм; 2) $y = 1.2$ нм; 3) $y = 1$ нм.

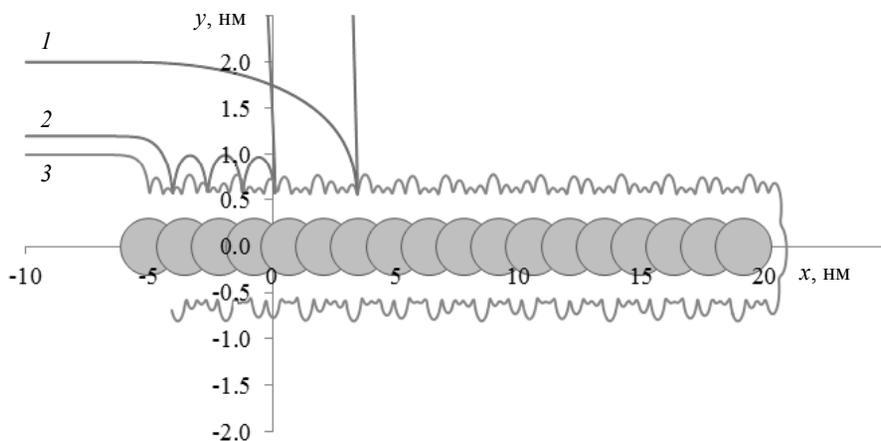


Рис. 1. Траектории движения атомов гелия около нанонити, имеющей собственный радиус 0.355 нм

Fig. 1. Trajectories of helium atoms' motion near the nanowire whose radius is of 0.355 nm

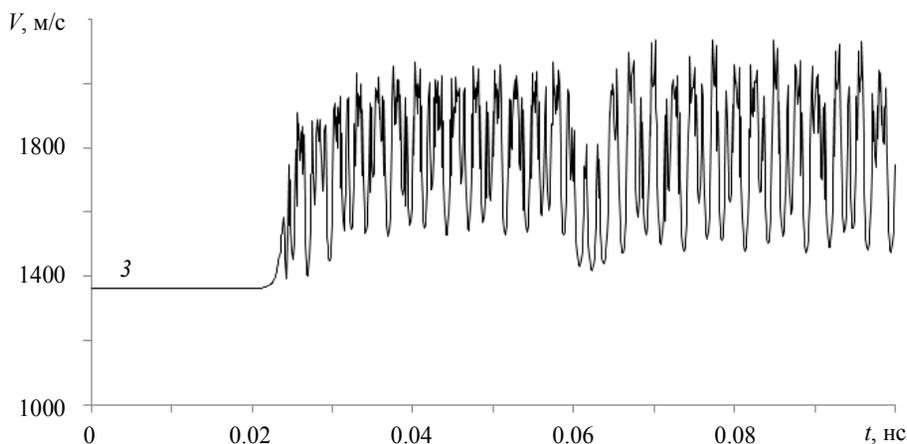


Рис. 2. Значения скорости атома гелия, проходящего через структуру

Fig. 2. Velocity of the helium atom when passing through the structure

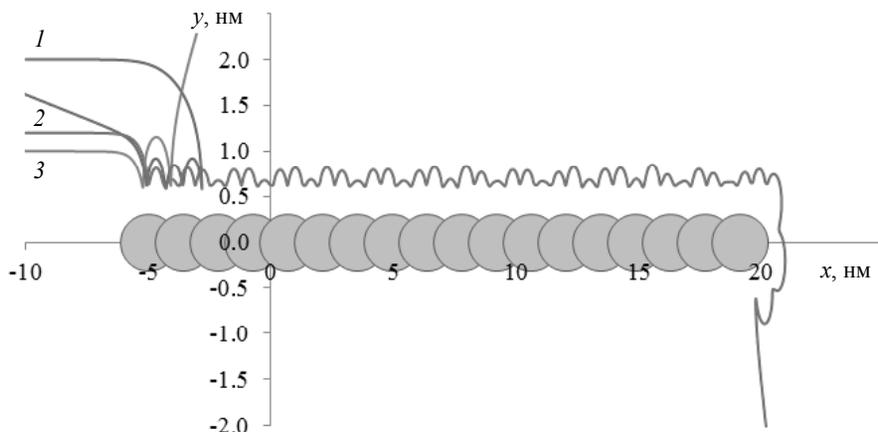


Рис. 3. Траектории движения отдельных молекул метана около углеродной нанонити
Fig. 3. Trajectories of some methane molecules' motion near the carbon nanowire

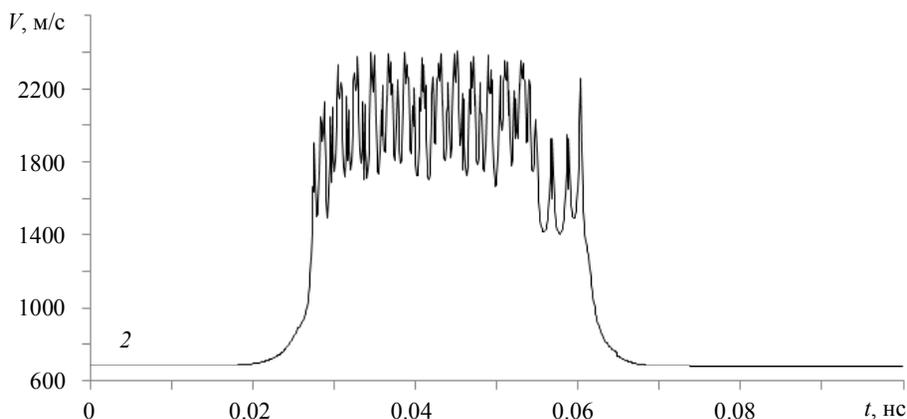


Рис. 4. Значения скорости молекулы метана, проходящей через структуру
Fig. 4. Velocity of the methane molecule when passing through the structure

Как видно из представленных рисунков, при близком прохождении молекул и атомов в направлении, параллельном оси нити, наблюдается их сорбционный захват. Причем, в случае метана, в варианте 2, наблюдается глубокий захват молекулы, при котором она в колебательном режиме перемещается по самому дну потенциальной ямы нити, но в конечном счете выходит из ямы и покидает нанонить. Расчеты показывают, что сорбционные движения характеризуются не полным захватом молекул, а лишь длительностью времени пребывания молекулы около структуры или наночастицы.

Естественно, что эффективный радиус отталкивания молекулы от нанонити зависит от сорта проникающей молекулы. Расчеты показали также, что эта величина зависит и от скорости молекулы. Такие зависимости, выявленные расчетным образом (точки на графиках), и их аппроксимации полиномами третьей степени (сплошные линии) показаны на рис. 5 и 6.

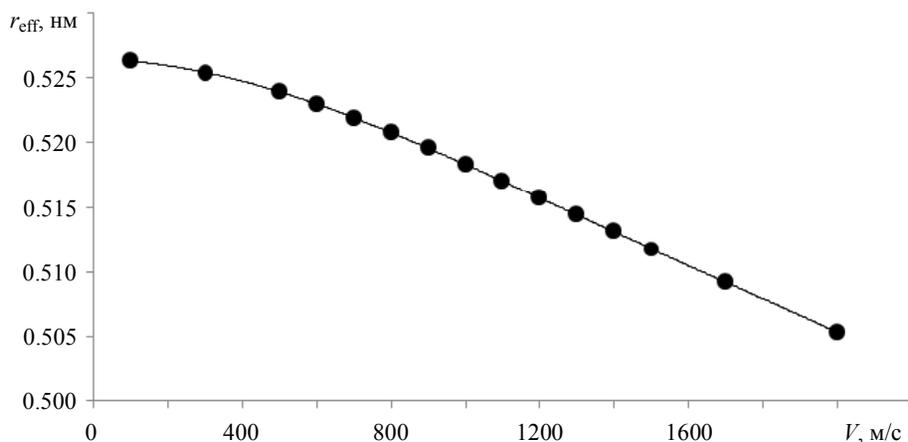


Рис. 5. Эффективный радиус нанонити по отношению к атому гелия
Fig. 5. Effective radius of nanowire as a function of helium atom velocity

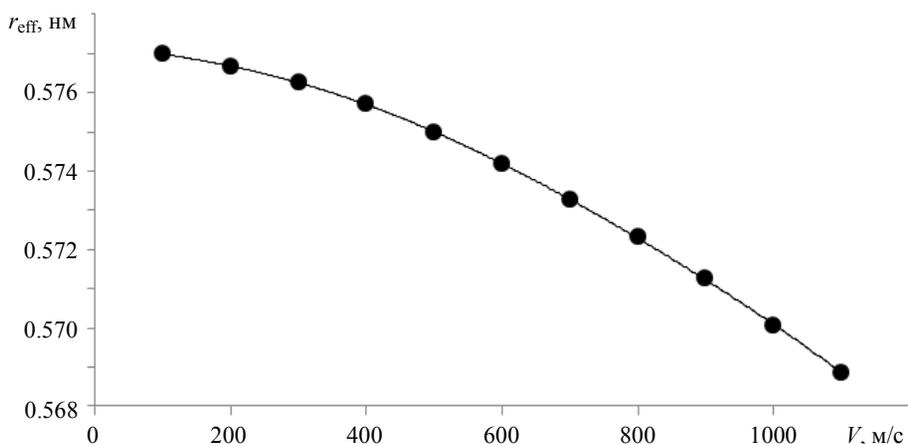


Рис. 6. Эффективный радиус нанонити по отношению к молекуле метана
Fig. 6. Effective radius of nanowire as a function of methane molecule velocity

На основе этих распределений легко найти локальный, отвечающий данной скорости, размер окна проницаемости. Этот размер будет зависеть и от рассматриваемой компоненты, в нашем случае это гелий или метан. Рассчитанные для среднеквадратичной скорости указанных компонент окна проницаемости показаны на рис. 7.

Расчеты показывают, что время пребывания газовых компонент около структуры незначительно и из-за этого не происходит физической сорбции, переводящей режим свободного прохождения молекул (атомов) в диффузионный режим движения.

Поскольку полотно является однослойной структурой, то по площадям окон прохождения можно оценить проницаемость полотна в отношении тех или иных компонент газовой смеси. В этом случае относительная проницаемость

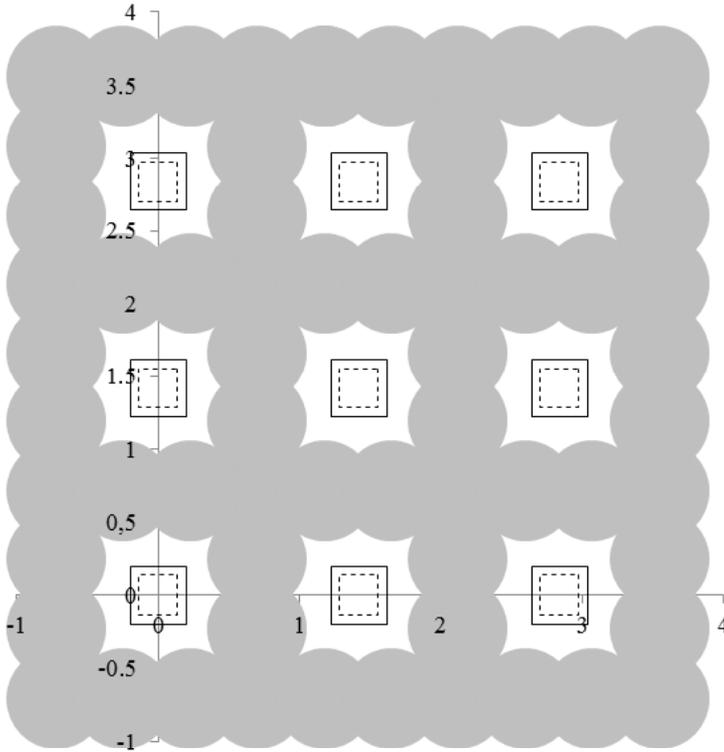


Рис. 7. Окна проницаемости для гелия (сплошная линия), для метана (пунктир)
Fig. 7. Permeability windows for helium (solid line) and methane (dotted line)

определится как доля свободной площади прохождения молекул или атомов в площади ячейки полотна:

$$D(\text{He}) = \frac{S_f(\text{He})}{h^2}, \quad (11)$$

$$D(\text{CH}_4) = \frac{S_f(\text{CH}_4)}{h^2}. \quad (12)$$

Здесь S_f – площадь свободного прохождения молекул, рассчитанная по средней тепловой скорости их движения, h – шаг укладки нитей в полотне. Эта оценка может быть существенно улучшена, если учесть изменение величины эффективного радиуса нити с изменением скорости перемещающейся частицы. Тогда относительные проницаемости полотна, в отношении рассматриваемых компонент, найдутся следующим образом:

$$D(\text{He}) = \frac{4\alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} v^2 \exp(-\alpha v^2) \left[\frac{(h - 2r_{\text{eff}}(v, \text{He}))^2}{h^2} \right] dv, \quad (13)$$

$$D(\text{CH}_4) = \frac{4\alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} v^2 \exp(-\alpha v^2) \left[\frac{(h - 2r_{\text{eff}}(v, \text{CH}_4))^2}{h^2} \right] dv. \quad (14)$$

Здесь $a = m/2kT$, где m – масса проникающей молекулы (атома), k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура; $r_{\text{eff}}(v, \text{He})$, $r_{\text{eff}}(v, \text{CH}_4)$ – аппроксимирующая кубическая функция, построенная по значениям эффективных радиусов нанонити по отношению к соответствующим газовым компонентам.

Если выражение в квадратных скобках принять за единицу и внести под знак интеграла величины, не зависящие от скорости, то под интегралом окажется функция распределения Максвелла по модулю скорости. Проинтегрировав её в указанных пределах, мы получим единицу. Это отвечает случаю полного прохождения всех компонент, т.е. случаю отсутствия барьера на пути прохождения молекул.

Квадратную ячейку полотна с площадью h^2 мы покрываем сеткой 11×11 и отодвигаем гипотетическую сетку, перемещая её по нормали на 10 нм от полотна в ту сторону, где находится смесь газов. В центре построенных сеточных ячеек, мы помещаем пробные молекулы или атомы, выпуская их со среднеквадратичной для каждой из компонент скоростью, а также организуя их движение по нормали к полотну. Результаты таких испытаний показаны на рисунке 8. В случае алмазных нитей диаметром 0.71 нм эти результаты подтверждают теорию окон проницаемости, найденных по эффективному радиусу нанонитей.

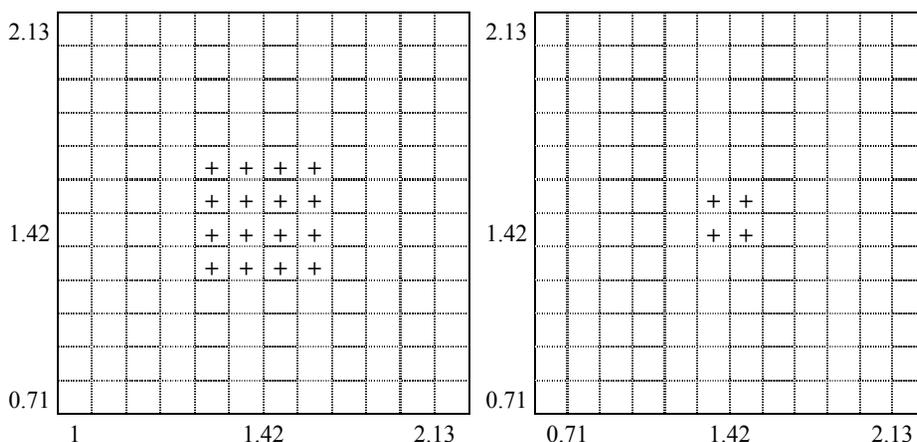


Рис. 8. Окна проницаемости на сетке начальных позиций молекул для гелия (слева) и метана (справа)

Fig. 8. Permeability windows on the grid of initial positions for helium (on the left) and methane (on the right)

Каждый пуск молекулы (атома), направленной в сторону полотна, сопровождается расчетом точности выполнения баланса полной энергии перемещающейся частицы. При этом для молекул, направленных перпендикулярно поверхности мембраны, относительная погрешность расчетов имела величину, не превосходящую 10^{-5} . Однако реализуются случаи, хотя и не имеющие отношения к прохождению молекул через полотно, но характеризующиеся множественными отражениями (молекула движется параллельно оси нанонити, вариант 2). В этом примере погрешность возрастает с каждым новым отражением (рис. 9) и в результате имеет величину существенно большую, чем в случае фронтального обстрела молекулами мембраны. Тем не менее и здесь погрешность не превосходит одного процента.

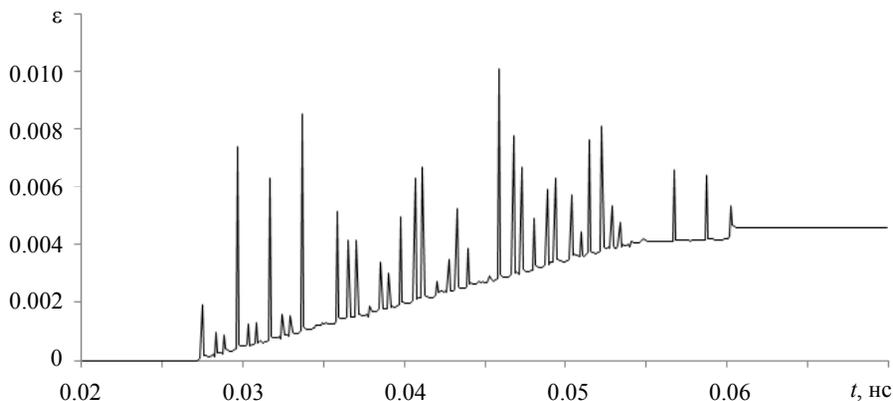


Рис. 9. Относительная величина погрешности расчета баланса полной энергии молекулы метана, перемещающейся вдоль нанонити (вариант 2)

Fig. 9. Relative error of the total energy balance calculated for a methane molecule moving along the nanowire (2nd case)

Заключение

Для полотна, выполненного из алмазных нанонитей диаметром 0.71 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.

Таким образом, для того чтобы рассчитать относительную проницаемость, не проводя многочисленных статистических расчетов, необходимо взять аналитические формы линейных аппроксимаций, представленных на рис. 5 и 6 и подставить их в интегралы (13) и (14).

ЛИТЕРАТУРА

1. Tao Y., Degen C.L. Growth of magnetic nanowires along freely selectable crystal directions // Nature Communications. 2018. V. 9. Art. number: 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 // Advanced Functional Materials. 2015. V. 25 (43). P. 6701–6709. DOI: 10.1002/adfm.201503206.
3. Yuan X., Cheng L., Kong L., et al. Preparation of titanium carbide nanowires for application in electromagnetic wave absorption // J. Alloys and Compounds. 2014. V. 596. P. 132–139.
4. Yin H., Zhao S., Zhao K., et al. Ultrathin platinum nanowires grown on single-layered nickel hydroxide with high hydrogen evolution activity // Nature Communications. 2015. V. 6. Art. number: 6430. DOI: 10.1038/ncomms7430.
5. Deng B., Hsu P.-C., Chen G., et al. Roll-to-Roll encapsulation of metal nanowires between graphene and plastic substrate for high-performance flexible transparent electrodes // Nano Lett. 2015. V. 15. P. 4206–4213. DOI: 10.1021/acs.nanolett.5b01531.
6. Mutiso R.M., Winey K.I. Electrical properties of polymer nanocomposites containing rod-like nanofillers // Progress in Polymer Science. 2015. V. 40. P. 63–84.

7. Wang H., Lee H.-W., Deng Y., et al. Bifunctional non-noble metal oxide nanoparticle electrocatalysts through lithium-induced conversion for overall water splitting // *Nature Communications*. 2015. V. 6. Art. number: 261. DOI: 10.1038/ncomms8261.
8. Si Y., Fu Q., Wang X., et al. Superelastic and superhydrophobic nanofiber-assembled cellular aerogels for effective separation of oil/water emulsions // *American Chemical Society*. 2015. V. 9 (5). P. 3791–3799. DOI: 10.1021/nn506633b.
9. Zhang X., Shen Y., Zhang Q., et al. Ultrahigh energy density of polymer nanocomposites containing BaTiO₃@TiO₂ nanofibers by atomic-scale interface engineering // *Advanced Functional Materials*. 2014. V. 27. P. 819–824. DOI: 10.1002/adma.201404101.
10. Kai D., Liow S.S., Loh X.J. Biodegradable polymers for electrospinning: Towards biomedical applications // *Materials Science and Engineering*. 2014. V. 45. P. 659–670. DOI: 10.1016/j.msec.2014.04.051.
11. Kim C.H., Kim B.H. Zinc oxide/activated carbon nanofiber composites for high-performance supercapacitor electrodes // *Journal of Power Sources*. 2015. V. 274 (15). P. 512–520. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2014.10.126.
12. Бубенчиков М.А. Движение нанотрубок в воздушной среде под воздействием электромагнитного поля // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2010. № 4 (12). С. 68–77.
13. Бубенчиков М.А. Двухфазная фильтрация в анизотропном пространстве // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2013. № 6 (26). С. 70–78.
14. Бубенчиков М.А., Потеекаев А.И. Седиментация наночастиц в поле центробежных сил // *Изв. вузов. Физика*. 2011. № 2. С. 74–80.
15. Бубенчиков М.А. Проницаемость туннеля из сферических наночастиц // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2014. № 5 (31). С. 69–75.
16. Бубенчиков М.А. Об идеальных колебаниях нанотрубок в естественном магнитном поле // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2010. № 2 (10). С. 45–52.
17. Rudyak V.Y., Krasnolutsii S.L. The calculation and measurements of nanoparticles diffusion coefficient in rarefied gases // *J. Aerosol Science*. 2003. V. 34. Suppl. 1. P. 579–580. DOI: 10.1016/S0021-8502(03)00148-4.
18. Глушко В.П. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Т. 1. М., 1971. 263 с.
19. Справочник химика. Т. 1 / под ред. Б.П. Никольского. М.; Л.: Химия, 1982. 1072 с.

Статья поступила 16.03.2018 г.

Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Ukolov A.V., Ukolov R.Yu., Chelnokova A.S. (2019) INVESTIGATION OF A CARBON NANOFABRIC PERMEABILITY. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 57. pp. 63–76

DOI 10.17223/19988621/57/5

Keywords: nanowire; spherical particle, Lennard-Jones potential, molecular dynamics, effective radius, relative permeability.

The theoretical and practical experience of membrane transport shows that the selectivity of membrane increases with a decrease in its thickness at constant surface porosity. The nanowire stacked up in one or two layers determines the minimum thickness of the layer obtained on the basis of the selected structural element, i.e. nanowire. At present, only wires of a certain length and structure are synthesized. Synthesis of such materials as nanofabric is not yet completed. Leaving aside the experimental difficulties of producing such materials, we proceed to describe the passage of mobile particles through the nanofabrics. This work presents a study on the interaction of gas phase molecules and atoms with an ideal structure of two-dimensional stack of

spherical diamond particles. The Rudyak - Krasnolutskiy potential is taken as a “nanoparticle-molecule” interaction potential.

The calculations are carried out using the model of a Hamiltonian system which includes moving molecules and atoms, as well as stationary particles representing the structure of the material. The stationary particles are characterized by a central-symmetric potential of interaction with moving particles which significantly simplifies the calculations. As a result of systematic calculations, it is revealed that in the case of a single-layer fabric structure, relative permeability is proportional to the relative area of free passage of molecules and atoms through the structure, which is determined by the effective radius of the nanowire.

Financial support. This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of Russia (state assignment No. 1.13557.2019/13.1).

BUBENCHIKOV Mikhail Alekseevich (Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor, Gazprom Transgaz Tomsk Ltd., Tomsk, Russian Federation). E-mail: michael121@mail.ru

BUBENCHIKOV Aleksey Mikhaylovich (Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: bubenchikov_am@mail.ru

UKOLOV Anton Vadimovich (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: Ukolov33@gmail.ru

UKOLOV Roman Yur'evich (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: roman_ukolov@bk.ru

CHELNOKOVA Anna Sergeevna (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: smolina-nyuta@mail.ru

REFERENCES

1. Tao Y., Degen C.L. (2018) Growth of magnetic nanowires along freely selectable crystal directions. *Nature Communications*. 9(339). DOI: 10.1038/s41467-017-02519-8.
2. Chen Yu, Lui L., Xiong J., Yang T., Qin Y., Yan C. (2015) Porous Si nanowires from cheap metallurgical silicon stabilized by a surface oxide layer for lithium ion batteries. *Advanced Functional Materials*. 25(43). pp. 6701–6709. DOI: 10.1002/adfm.201503206.
3. Yuan X., Cheng L., Kong L., Yin X., Zhang L. (2014) Preparation of titanium carbide nanowires for application in electromagnetic wave absorption. *Journal of Alloys and Compounds*. 596. pp. 132–139. DOI: 10.1016/j.jallcom.2014.01.022.
4. Yin H., Zhao S., Zhao K., Muqsit A., Tang H., Chang L., Zhao H., Gao Y., Tang Z. (2015) Ultrathin platinum nanowires grown on single-layered nickel hydroxide with high hydrogen evolution activity. *Nature Communications*. 6(6430). DOI: 10.1038/ncomms7430.
5. Deng B., Hsu P.-C., Chen G., Chandrashekar B., Liao L., Ayitimuda Z., Wu J., Guo Y., Lin L., Zhou Y., Aisijiang M., Xie Q., Cui Y., Liu Z., Peng H. (2015) Roll-to-Roll Encapsulation of metal nanowires between graphene and plastic substrate for high-performance flexible transparent electrodes. *Nano Letters*. 15. pp. 4206–4213. DOI: 10.1021/acs.nanolett.5b01531.
6. Mutiso R.M., Winey K.I. (2015) Electrical properties of polymer nanocomposites containing rod-like nanofillers. *Progress in Polymer Science*. 40. pp. 63–84. DOI: 10.1016/j.progpolymsci.2014.06.002.
7. Wang H., Lee H.-W., Deng Y., Lu Z., Hsu P.-C., Liu Y., Lin D., Cui Y. (2015) Bifunctional non-noble metal oxide nanoparticle electrocatalysts through lithium-induced conversion for overall water splitting. *Nature Communications*. 6(261). DOI: 10.1038/ncomms8261.
8. Si Y., Fu Q., Wang X., Zhu J., Yu J., Sun G., Ding B. (2015) Superelastic and superhydrophobic nanofiber-assembled cellular aerogels for effective separation of oil/water emulsions. *American Chemical Society*. 9(5). pp. 3791–3799. DOI: 10.1021/nn506633b.
9. Zhang X., Shen Y., Zhang Q., Gu L., Hu Y., Du J., Lin Y., Nan C.-W. (2014) Ultrahigh energy density of polymer nanocomposites containing BaTiO₃@TiO₂ nanofibers by atomic-

- scale interface engineering. *Advanced Functional Materials*. 27. pp. 819–824. DOI: 10.1002/adma.201404101.
10. Kai D., Liow S.S., Loh X.J. (2014) Biodegradable polymers for electrospinning: Towards biomedical applications. *Materials Science and Engineering*. 45. pp. 659–670. DOI: 10.1016/j.msec.2014.04.051.
 11. Kim C.H., Kim B.H. (2015) Zinc oxide/activated carbon nanofiber composites for high-performance supercapacitor electrodes. *Journal of Power Sources*. 274(15). pp. 512–520. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2014.10.126.
 12. Bubenchikov M.A. (2010) Dvizhenie nanotrubok v vozduшной среде pod vozdeystviem elektromagnitnogo polya [Motion of nanotubes in an air medium under the influence of an electromagnetic field]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 4(12). pp. 68–77.
 13. Dil' D.O., Bubenchikov M.A. (2013) Dvukhfaznaya fil'tratsiya v anizotropnom prostranstve [Two-phase filtration in an anisotropic medium]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 6(26). pp. 70–78.
 14. Bubenchikov M.A., Potekaev A.I. (2011) Sedimentatsiya nanochastits v pole tsentrobeznykh sil [Sedimentation of nanoparticles in the field of centrifugal forces]. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Fizika – Russ. Phys. J.* 54(2). pp. 211–220.
 15. Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Potekaev A.I., Usenko O.V., Sherstobitov A.A. (2014) Pronitsaemost' tunnelya iz sfericheskikh nanochastits [Permeability of the tunnel of spherical nanoparticles]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 5(31). pp. 69–75.
 16. Bubenchikov M.A. (2010) Ob ideal'nykh kolebaniyakh nanotrubok v estestvennom magnitnom pole [On perfect oscillations of nanotubes in the natural magnetic field]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 2(10). pp. 45–52.
 17. Rudyak V.Yu., Krasnolutskii S.L. (2003) The calculation and measurements of nanoparticles diffusion coefficient in rarefied gases. *Journal of Aerosol Science*. 34(1). pp. 579–580. DOI: 10.1016/S0021-8502(03)00148-4.
 18. Glushko V.P. (1974) *Thermodynamic and Thermophysical Properties of Combustion Products*. Israel Program for Scientific Translations.
 19. Nikol'skiy B.P. (1982) *Spravochnik khimika* [Chemist's handbook]. Vol. 1. Moscow; Leningrad: Khimiya.

Received: March 16, 2018