

0.1. Капитонов А.А. Математическое моделирование нанофильтрации водных растворов с помощью управляемых электрическим полем мембран

На сегодняшний день процессы мембранного разделения смесей широко используются во многих отраслях промышленности. В частности, мембраны применяются для опреснения и очистки воды, что является крайне актуальной задачей.

В мембранах с электропроводящей поверхностью транспорт ионов можно регулировать путём изменения поверхностного потенциала. Такая мембрана проявляет селективность, механизм которой основан на перекрытии нанопоры двойным электрическим слоем (ДЭС), что препятствует прохождению ионов раствора через мембрану. Толщина ДЭС определяется длиной Дебая.

Для описания переноса ионов в проводящих мембранах используются уравнения Навье — Стокса, Нерста — Планка и Пуассона. Если длина Дебая сравнима с радиусом нанопор, то используется модель однородного потенциала, при которой распределения потенциала, концентрации ионов и давления внутри нанопоры зависят только от одной координаты (продольного расстояния) [1].

При моделировании постоянным полагается потенциал, приложенный к стенке поры. Объёмная плотность заряда внутри поры соответствует решению уравнения Пуассона и представляет собой сумму плотностей электронного и химического типов заряда. Величина первого зависит от соответствующего коэффициента (ёмкость слоя Штерна).

Из работ по удалению солей и анионных красителей нанофильтрационными мембранами ПАНИ-ПСС/УНТ [2] и MXene/УНТ [3] были взяты экспериментальные данные. Для их описания была построена математическая модель нанофильтрации водных растворов солей на основе модели однородного потенциала. Также было проведено параметрическое исследование модели.

Для описания «эффективного» заряда мембраны в уравнения математической модели были введён новый коэффициент. Показано, что этот заряд намного меньше измеренного/подогнанного заряда, что может быть объяснено химическими процессами на электрически заряженной поверхности.

В итоге было установлено хорошее согласие расчётных данных на основе модели с результатами эксперимента, что подтверждает предсказательную силу модели и позволяет использовать её для практических целей. Результаты работы были опубликованы в журнале «Membranes» [4].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 23-19-00269).

Научный руководитель — д.ф.-м.н. Рыжков И. И.

Список литературы

- [1] Рыжков И.И., Вяткин А.С., Михлина Е.В. Моделирование проводящих нанопористых мембран с переключаемой ионной селективностью // Мембраны и мембранные технологии. 2020. Т. 10. № 1. С. 13–23.
- [2] ZHANG H., QUAN X., FAN X. ET AL. Improving ion rejection of conductive nanofiltration membrane through electrically enhanced surface charge density // Environmental science and technology. 2019. Vol. 53. P. 868–877.
- [3] YI G., DU L., WEI G. ET AL. Selective molecular separation with conductive MXene/CNT nanofiltration membranes under electrochemical assistance // Journal of membrane science. 2022. Vol. 658. P. 120719.
- [4] КАПИТОНОВ А.А., РЫЖКОВ И.И. Modelling the performance of electrically conductive nanofiltration membranes // Membranes. 2023. Vol. 13. P. 596.