

Ионный транспорт через нанопористые среды

Аспирант 2 з/о ФНМ Берекчиян Михаил Вартанович

Рецензент: к.х.н., в.н.с. Дорофеев Сергей Геннадиевич

Диффузия – процесс переноса молекул, атомов или ионов, обусловленный их направленным движением под действием градиента концентрации или внешнего электростатического поля. Данное явление происходит во всех агрегатных состояниях. Однако наиболее интересной представляется диффузия ионов в жидкостях, так как она сочетает признаки как диффузии в твёрдом теле, так и в газовой фазе.

Если же ионный транспорт происходит через жидкость в порах нанометрового размера, то в этом случае нельзя пренебрегать взаимодействием жидкость/мембрана, а коэффициент диффузии (количественная характеристика скорости диффузии) теперь называется эффективным коэффициентом диффузии, который зависит также от свойств мембраны (поверхностная плотность заряда, мембранный потенциал, диаметр пор). За счёт подобных эффектов удаётся разделять ионы не только по размеру, но и по заряду.

Причиной возникновения различных эффектов при проникновении ионов через пористый материал является адсорбция на поверхности твёрдого тела, образование двойного электрического слоя и возникновение мембранного потенциала.

Наиболее общим уравнением, описывающим диффузию ионов через пористые среды, является уравнение Нернста-Планка. Согласно данной теории, суммарный поток можно разложить на две составляющие: диффузию и конвекцию. Несомненной ценностью данного уравнения является его фундаментальность и учёт многих факторов. Однако оно не имеет предсказательной способности, так как экспериментально невозможно измерить ни скорость движения ионов, ни их концентрацию внутри поры.

Одной из наиболее серьёзных проблем в изучении данной темы является разрозненность и несистематичность результатов. Нередко выходит, что огромное количество публикаций, посвящённых ионному транспорту, не только не помогает, но и даже затрудняет развитие этой области исследований. Для решения данной проблемы сейчас есть два пути: теоретическое моделирование и экспериментальное изучение диффузии.

Среди теоретических расчётов наибольшее внимание уделяется диффузии ионов через нанотрубки, дефекты в графеновых листах или цеолиты. Главным преимуществом данного подхода по сравнению с экспериментом является возможность изучения ионного транспорта через единичные нанообъекты и учёт таких факторов, как геометрия пор и взаимодействие ионов с порами. Однако есть и серьёзные недостатки, связанные со сложностью интерпретации и проверки корректности смоделированных данных.

Эмпирические модели условно можно разделить на два блока: общие и частные. Первые направлены на поиск ответов на фундаментальные вопросы (наиболее распространены модель пространственного заряда и теория Теорелла-Мейера-Сиверса), вторые возникают при решении определённой прикладной задачи. Преимуществами обоих методов по сравнению с теоретическим моделированием являются простота проверки полученных данных и возможность непосредственного применения результатов. Известно, что они уже сейчас успешно используются при очистке воды, в молочной промышленности, геологии и многих других сферах деятельности человека.

Из возможных путей решения описанной проблемы можно предложить систематическое исследование влияния различных параметров на ионный транспорт, предполагающее переход от свойств пористой среды к эффективному коэффициенту диффузии.