

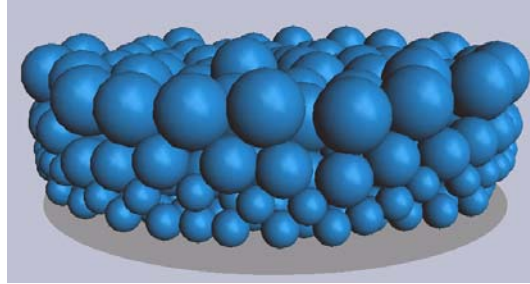
Моделирование протекания газа через наноструктурированную мембрану

Модель мембраны

В качестве модели мембраны строилась модель, состоящая из 3 слоев сферических перекрывающихся частиц (имитация спекания).

Размеры частиц по слоям (снизу вверх): 1.4 нм, 2.1 нм, 2.8 нм.

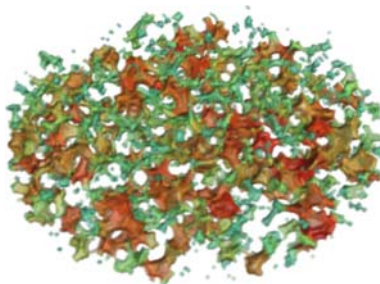
3D модель наноструктурированной мембраны



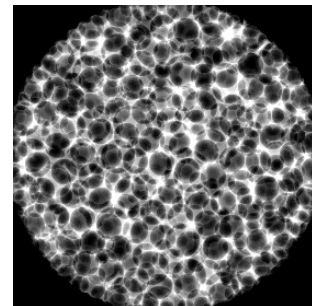
Структура порового пространства мембраны



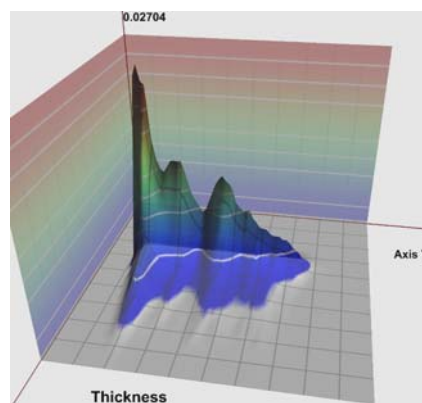
Структуры пор в сечении



Карта распределения локальной ширины пор (красный – самые широкие участки, зеленый – самые узкие)



Псевдо-рентгеновское изображение пор



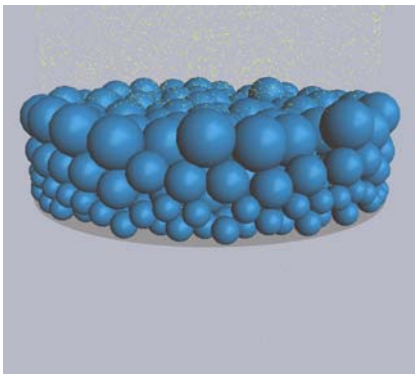
Распределение материала мембраны в развертке по вертикальной оси

Протекание газа через мембрану

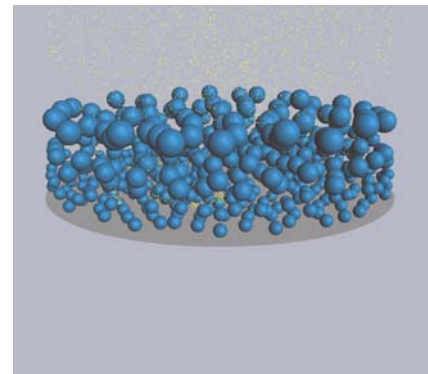
Имитация протекания газа через мембрану производилось в приближении модели взаимодействующих частиц газа в двух вариантах:

1. *Идеальный газ* - молекулы газа между собой не взаимодействуют, соударения с наночастицами абсолютно упругие, диаметр молекулы – 0,3 нм.
2. *Псевдореальный газ* - учитывается инертность движения и формирование потоков, а также имитирующая локальную турбулентность. Частицы газа имеют дальнейшее взаимодействие с наночастицами и между собой. Зависимость силы взаимодействия от расстояния – квадратичная.

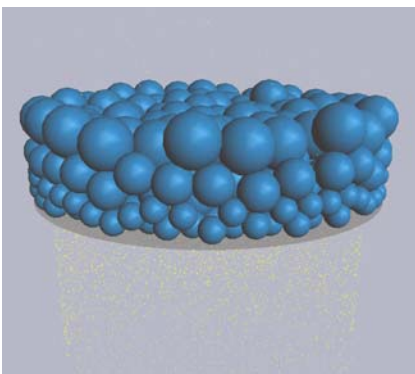
Идеальный газ



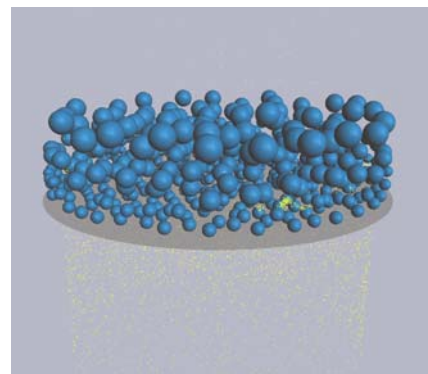
Пропускание газа сверху вниз через 3D модель мембраны



Модель мембраны с визуально уменьшенными частицами для визуального рассмотрения ее внутреннего пространства. В ближней части мембраны видны «газовые ловушки» с запертыми молекулами.



Пропускание газа снизу вверх через 3D модель мембраны

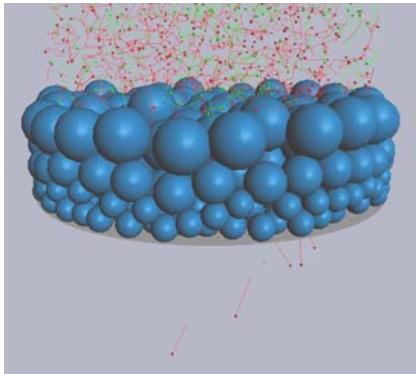


Модель мембраны с визуально уменьшенными частицами для визуального рассмотрения ее внутреннего пространства. В ближней части мембраны видны «газовые ловушки» с запертыми молекулами.

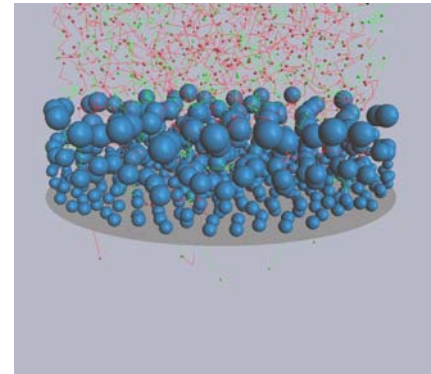
Характеристики системы

| Направление протекания | Концентрация газа над мембраной | Концентрация газа под мембраной | Отношение максимальной концентрации к минимальной |
|------------------------|---------------------------------|---------------------------------|---|
| Сверху вниз | 0,2 | 15,8 | 69,0 |
| Снизу вверх | 17,5 | 0,3 | 60,3 |

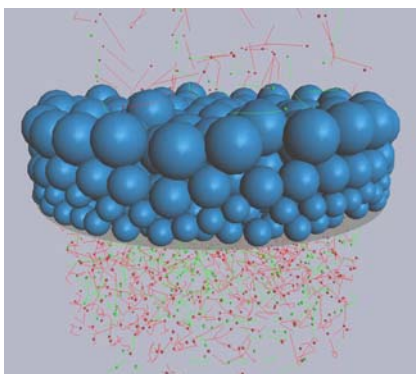
Псевдореальный газ



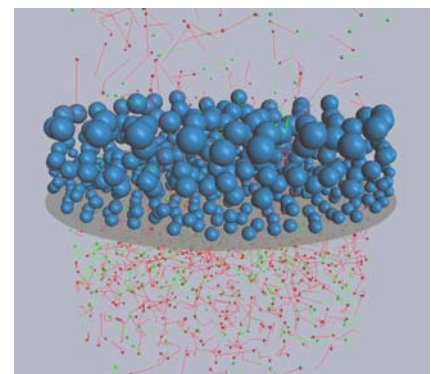
Пропускание газа сверху вниз через 3D модель мембраны. За частицами газа видны треки для визуализации их траектории.



Модель мембраны с визуально уменьшенными частицами для визуального рассмотрения ее внутреннего пространства.



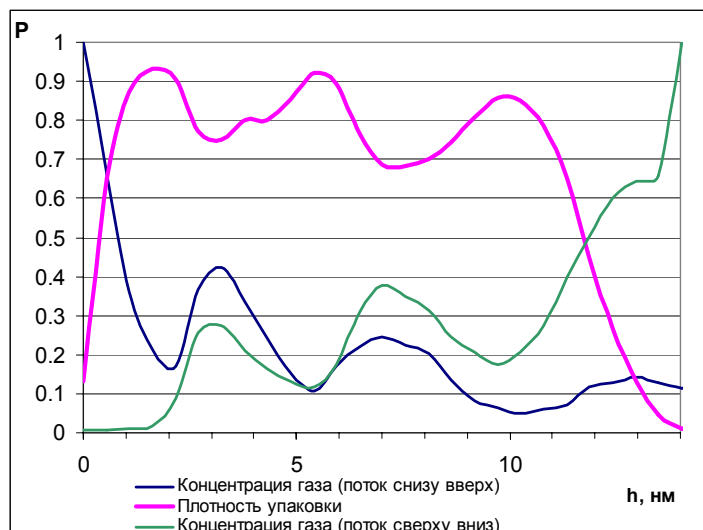
Пропускание газа снизу вверх через 3D модель мембраны. За частицами газа видны треки для визуализации их траектории.



Модель мембраны с визуально уменьшенными частицами для визуального рассмотрения ее внутреннего пространства.

Характеристики системы

| Направление протекания | Концентрация газа над мембраной | Концентрация газа под мембраной | Отношение максимальной концентрации к минимальной |
|------------------------|---------------------------------|---------------------------------|---|
| Сверху вниз | 0,05 | 3,5 | 66,0 |
| Снизу вверх | 3,6 | 0,5 | 7,2 |



Характеристики проницаемости мембраны для псевдореального газа