

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
БУРЯТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ДОРЖИ БАНЗАРОВА
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ГЕОМЕТРИЯ МНОГООБРАЗИЙ И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

*Материалы Шестой научной конференции
с международным участием*

(Улан-Удэ — оз. Байкал, 27–29 августа 2020 г.)

Улан-Удэ
Издательство Бурятского государственного университета
2020

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОЛЕКУЛ МЕТАНА И АТОМОВ ГЕЛИЯ С МЕМБРАНОЙ, СОСТАВЛЕННОЙ ИЗ ПОЛИКУМУЛИНОВЫХ КАРБИНОВЫХ НИТЕЙ

Аннотация. В работе рассматривается способность мембраны, составленной из поликумулиновых карбиновых нитей, разделять бинарную смесь газов метан-гелий. Рассмотрена ячейка мембраны, составленная из 10 карбиновых нитей по 100 атомов углерода каждая. Расчеты показывают, что ячейка с шагом между нитями, равным 0,55 нм способна эффективно разделять такую смесь газов, при нормальных условиях.

Ключевые слова: проницаемость ячейки наномембраны, поликумулиновая карбиновая нить, молекулярная баллистика, наномеханика.

© М. Zinkevich, E. Tarasov

INTERACTION OF METHANE MOLECULES AND HELIUM ATOMS WITH A MEMBRANE COMPOSED OF POLYCUMULIN CARBINE CHAINS

Abstract. The paper considers the ability of a membrane composed of polycumulin carbine chains to separate a binary mixture of methane-helium gases. A membrane cell composed of 10 carbin chains of 100 carbon atoms each is considered. Calculations show that a cell with a pitch between filaments of 0.55 nm is capable of effectively separating such a mixture of gases under normal conditions.

Keywords: cell permeability of a nanomembrane, polycumulin carbine chain, molecular ballistics, nanomechanics.

Введение

Развивая направление, связанное с подходами молекулярной динамики, которое описано, в том числе в работах В.Я. Рудяка [1], и продолжая исследования проницаемости различных наноструктур, идущие в нашей научной группе под руководством профессора А.М. Бубенчикова [2-6], интересной представляется задача создания

потенциально возможных ячеек мембран, составленных углеродными наноструктурами и сравнение их эффективности [7].

Поликумулиновые карбиновые нити и создание ячейки наномембраны на их основе

В данной статье будем рассматривать мембрану, составленную из карбиновых нитей. Карбин – аллотропная форма углерода на основе sp - гибридизации углеродных атомов. В молекуле карбина атомы углерода соединены в цепочки либо поочерёдно тройными и одинарными связями (полииновое строение), либо постоянно двойными связями (поликумулиновое строение). Карбин может быть, как линейным, так и образовывать циклические структуры (см. рисунок 1).

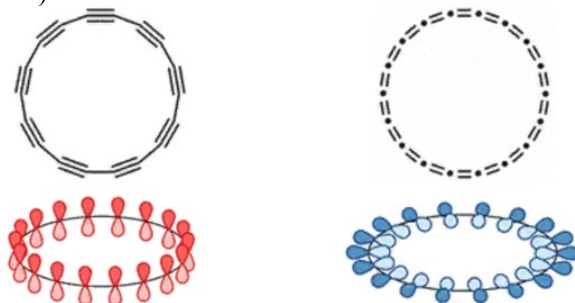


Рис.1. Полииновое и поликумулиновое строение карбиновой нити.

Потенциал от дискретной совокупности атомов углерода, составляющих карбиновую нить, определяется простым суммированием потенциалов парных взаимодействий [8]:

$$U(x, y, z) = 4\varepsilon \sum_{j=1}^N \left[\left(\frac{\sigma}{\rho_j} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{\rho_j} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где $\rho_j = \sqrt{(x - x_j)^2 + (y - y_j)^2 + (z - z_j)^2}$ – расстояние между пробной молекулой газа с координатами x, y, z и j -тым атомом структуры с координатами; N – число атомов структуры; σ и ε – параметры потенциала Леннарда-Джонса (LJ -потенциала)[8].

Для потенциала взаимодействия вида (1) уравнения движения пробной молекулы можно записать следующим образом:

$$\frac{du}{dt} = \sum_{j=1}^N a_j \frac{x - x_j}{\rho_j}, \quad \frac{dv}{dt} = \sum_{j=1}^N a_j \frac{y - y_j}{\rho_j}, \quad \frac{dw}{dt} = \sum_{j=1}^N a_j \frac{z - z_j}{\rho_j} \quad (2)$$

Здесь $a_j = 24 \frac{\varepsilon}{\rho_j m} \left(\frac{\sigma}{\rho_j} \right)^6 \left[2 \left(\frac{\sigma}{\rho_j} \right)^6 - 1 \right]$ - модуль ускорения,

определяемого j -тым атомом углеродной структуры.

Для численного интегрирования уравнений (2) их необходимо дополнить кинематическими соотношениями, определяющими компоненты скорости точки [8]:

$$\frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v, \quad \frac{dz}{dt} = w \quad (3)$$

Систему уравнений (2), (3) с начальными условиями, определяющими положение и скорость пробной молекулы, можно интегрировать с использованием пошаговых схем высокого порядка точности [8].

Моделирование и результаты

Рассмотрим численную реализацию взаимодействия молекул метана и атомов гелия со структурой, составленной из 10 поликумулиновых карбиновых нитей, каждая из которых состоит из ста, связанных двойной ковалентной связью (длина связи равна 0.1282 нанометра), атомов углерода. Начало декартовой системы координат поместим на начало первой нити, а остальные расположим следующим образом.

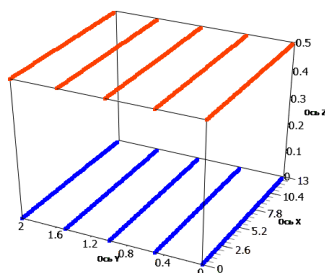


Рис. 2. Конфигурация ячейки мембраны из 10 карбоновых поликумулиновых нитей с шагом 0.5 нанометров.

С переменным шагом (*step*), изменение которого позволит нам изменять основной параметр данной ячейки, равным минимум значению 0,5 нанометра расположим вдоль оси *y* еще четыре нити. Остальные пять нитей расположим над первыми пятью на том же расстоянии, но удаленном по оси *z*. Выбор данного минимального шага обусловлен тем, что в теоретических работах встречается значение максимального сближения подобных наноструктур на основе углерода примерно равное 0,35-0,38 нанометра. Экспериментальные значения находят минимумы на расстояниях 0,4 нанометра.

Для тестирования и верификации результатов, в связи со сложностью нахождения реальных экспериментов с подобными мембранами было сделано два верификационных теста. На рисунках 3-5 видно, что характер движения атома гелия не зависит от выбора шага по времени и можно говорить о том, что все выше представленные результаты, сделанные с шагом по времени 10^{-6} обладают необходимой точностью и сходимостью. На рисунке 6 представлено тестирование выполнения закона сохранения энергии в замкнутой системе.

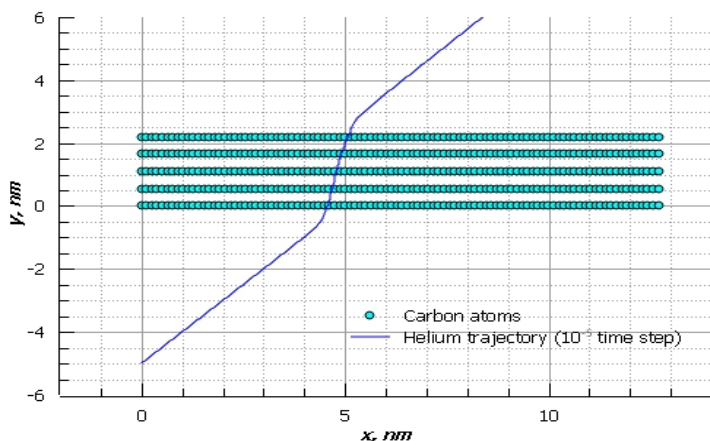


Рис. 3. Траектория движения атома гелия со скоростью 1300 метров в секунду при взаимодействии с ячейкой мембраны из 10 карбоновых поликумулиновых нитей с шагом 0.55 нанометров при шаге по времени, равном 10^{-5}

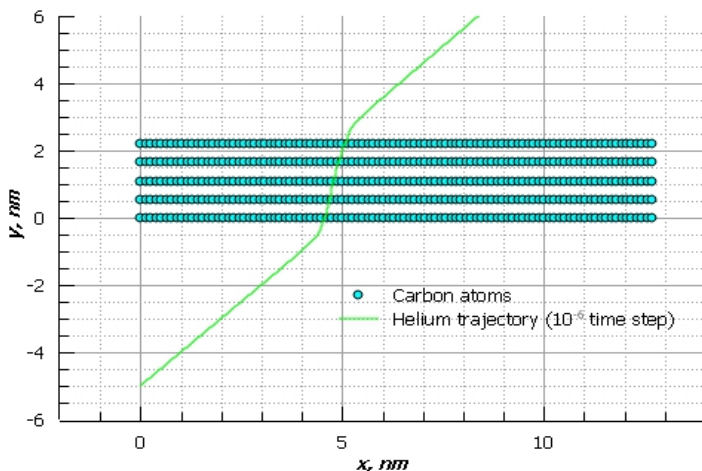


Рис. 4. Траектория движения атома гелия со скоростью 1300 метров в секунду при взаимодействии с ячейкой мембраны из 10 карбоновых поликумулиновых нитей с шагом 0.55 нанометров при шаге по времени, равном 10^{-6}

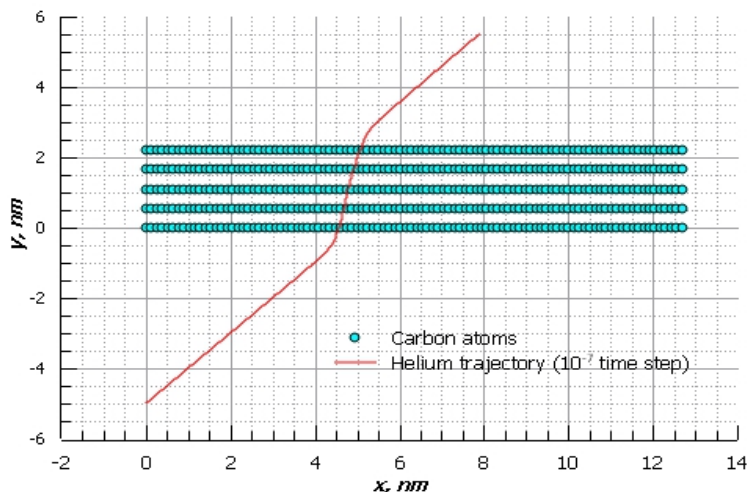


Рис. 5. Траектория движения атома гелия со скоростью 1300 метров в секунду при взаимодействии с ячейкой мембраны из 10 карбоновых поликумулиновых нитей с шагом 0.55 нанометров при шаге по времени, равном 10^{-7}

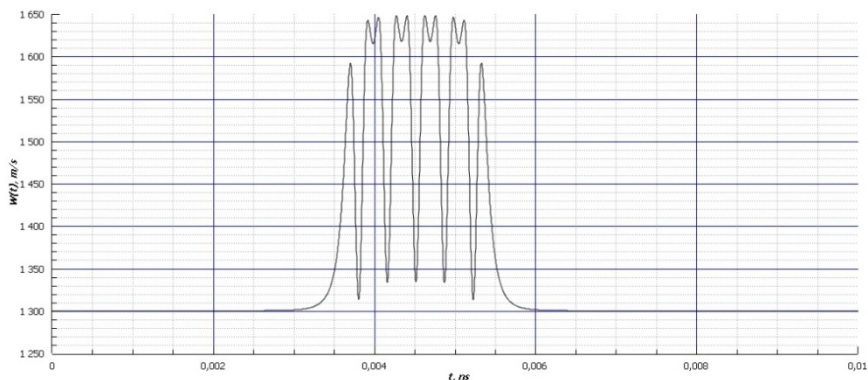


Рис. 6. График зависимости изменения скорости атома гелия от времени при взаимодействии с ячейкой мембраны из 10 карбоновых поликумулиновых нитей с шагом 0.55 нанометров.

После тестирования полученной численной реализации можно было переходить непосредственно к работе с моделью. Запустим тестовую молекулу метана или атом гелия в плоскости $z_0 = step/2$ нм, то есть по центру данной ячейки, с позиции $x_0 = 6.3509$ нм, $y_0 = -5.0$ нм. При этом начальное значение вектора скорости определялось компонентами: $u_0 = 0$ м/с, $v_0 = Vt$, $w_0 = 0$ м/с. В ходе итерационного процесса решения системы уравнений методом Рунге-Кутты четвертого порядка точности получим следующее результаты, представленные на рисунках 7-9.

На рисунках 7 и 8, когда расстояние между нитями равнялось 0,5 и 0,75 нанометров соответственно, можно видеть, что данная структура при изменении параметра ячейки либо полностью пропускает оба компонента природного газа, со скоростями, отвечающими наиболее вероятным по максвелловскому распределению, либо отражает оба типа тестовых объектов при тех же скоростях.

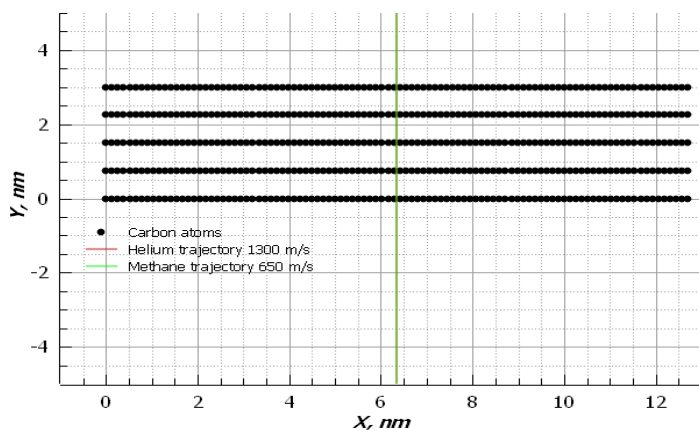


Рис. 7. Траектория движения атома гелия со скоростью 1300 метров в секунду и молекулы метана со скоростью 650 метров в секунду при взаимодействии с ячейкой мембраны из 10 карбоновых поликумулиновых нитей с шагом 0.75 нанометров.

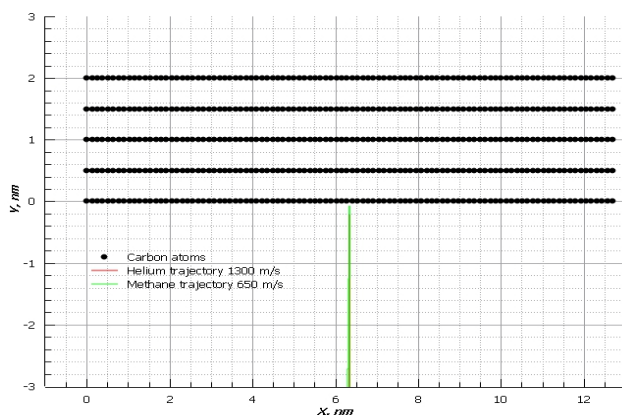


Рис. 8. Траектория движения атома гелия со скоростью 1300 метров в секунду и молекулы метана со скоростью 650 метров в секунду при взаимодействии с ячейкой мембраны из 10 карбоновых поликумулиновых нитей с шагом 0.5 нанометров.

На рисунке 9 показан случай, при котором изменяемый параметр ячейки составляет 0,55 нанометров. Этот случай примечателен тем, что при данном расстоянии между поликумулиновыми карбиновыми нитями, исследуемая элементарная ячейка мембраны

способна пропускать атомы гелия, летящие с наиболее вероятной для нормальных условий скоростью (1300 метров в секунду при 10^5 Па и 20 градусах Цельсия) и задерживать летящие со скоростью 650 метров в секунду молекулы метана.

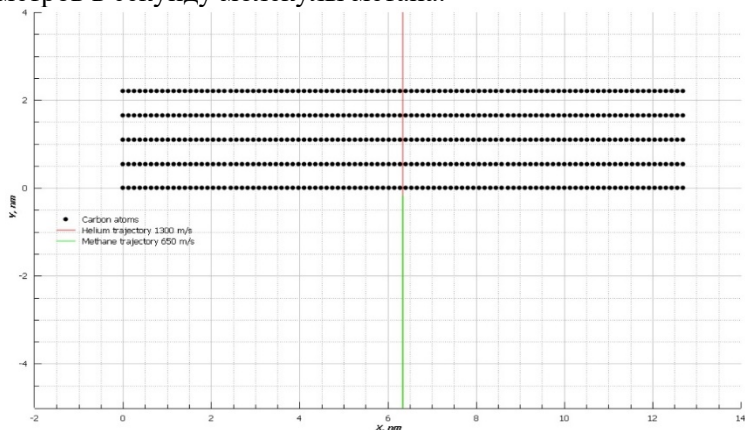


Рис. 9. Траектория движения атома гелия со скоростью 1300 метров в секунду и молекулы метана со скоростью 650 метров в секунду при взаимодействии с ячейкой мембраны из 10 карбоновых поликумулиновых нитей с шагом 0.55 нанометров.

Из всех представленных данных можно сделать однозначный вывод – ячейка мембраны на основе поликумулиновых карбоновых нитей, и мембрана из них построенная могут быть использованы в качестве основы для устройства для разделения бинарных смесей метан-гелий в условиях, близких к нормальным.

Заключение

В результате данного исследования была создана модельная мембрана на основе поликумулиновых карбиновых нитей, каждая из которых состояла из 100 атомов углерода. Данная мембрана представляла собой ячейку из двух слоев по 5 нитей каждый. Полученные результаты взаимодействия смеси газов гелий-метан с данной ячейкой показывают:

Для данного типа мембраны подобрано оптимальное для разделения смеси метан-гелий расстояние между карбиновыми нитями, составляющее 0,55 нм.

Литература

1. Рудяк В. Я. Моделирование диффузии наночастиц в газах и жидкостях методом молекулярной динамики В. Я. Рудяк, С. Л. Краснолуцкий, Д. А. Иванов Оптика атмосферы и океана. 2011. Т. 24. № 6. С. 529-533
2. Жаровцев В. В., Маслов А. С., Овчаренко В. В., Тарасов Е. А., Ямкин А. В. ПРОНИЦАЕМОСТЬ СИСТЕМЫ ИЗ ДВУХ НАНОЧАСТИЦ // Известия высших учебных заведений. Физика. 2014. Т. 57. № 8-2. С. 138-141.
3. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, O. V. Matvienko, E. A. Tarasov, O.V. Usenko, Simple energy Barrier for Component Mixture of Natural Gases // AIP Conference Proceedings, 1698, 060007 (2016).
4. Bubenchikov M. A., Potekaev A. I., Bubenchikov A. M., Usenko O. V., Malozemov A. V., Tarasov E. A. The interaction potential of an open nanotube and its permeability: Molecular dynamics simulation // EPJWeb of Conferences, Volume 110, 23 February 2016, Article number 01061.
5. Tarasov E. A. Interaction Potential of Open Carbon Nanotube with Natural Gas Molecular Components // Key Engineering Materials, Volume 685, 2016, Pages 534-538.
6. Bubenchikov M. A. Calculating permeability of the low-temperature phase of a fullerite M. A. Bubenchikov, A. M. Bubenchikov, E. A. Tarasov, O. V. Usenko, A. S. Chelnokova Diamond and Related Materials. 2018. Т. 86. pp. 146-158.
7. Tarasov E. A., Comparison of Two Elementary Nanomembranes Cells for Gas Mixture Separation Problem, Key Engineering Materials, Vol. 769, pp. 128-133, 2018
8. Борсук А. С. Движение молекулы в поле потенциала открытой нанотрубки / А. С. Борсук, Е. А. Тарасов, В. Б. Цыренова // Геометрия многообразий и её приложения: материалы четвертой научной конференции с международным участием. Улан-Удэ – оз. Щучье – оз. Байгал, 27-30 июня 2016 г. – Улан-Удэ, 2016. – С. 90–94.

Зинкевич Михаил Станиславович, б\с, б\з, студент ММФ ТГУ, Томск пр. Ленина 36, 634050, mike_zin@mail.ru

Тарасов Егор Александрович, к.ф.-м.н., б\з, доцент кафедры теоретической механики ММФ ТГУ, Томск пр. Ленина 36, 634050, 8913 842 90 88, Diomedis@mail.ru

Zinkevich Mikhail Stanislavovich, Student, TSU.

Tarasov Egor Aleksandrovich, PhD, Associate Professor, TSU.