

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
Механико-математический факультет

**Всероссийская молодежная  
научная конференция  
«Все грани математики и  
механики»**

(24–28 апреля 2018 г.)

**Сборник статей**

Под редакцией  
д-ра физ.-мат. наук, профессора А.В. Старченко

Томск  
Издательский Дом Томского государственного университета  
2018

# Взаимодействие компонент природного газа с фуллереновыми частицами

Шестаков А. Е., Тарасов Е. А.

Национальный исследовательский  
Томский государственный университет, Томск  
e-mail: diomedis@mail.ru

## Аннотация

В работе проведен анализ проницаемости ячейки составленной из фуллереновых частиц относительно молекул метана, этана и атомов гелия. Показано, что для ячейки из 8 молекул фуллерена C<sub>60</sub> составленных в виде простой кубической решетки с параметром равным 0.4 нанометра, уже даже первый ряд фуллеренов создает барьер, не проницаемый для метана и этана, имеющих средние скорости движения при температуре 20 градусов Цельсия. Однако гелий (так же движущийся со скоростью характерной для 20 градусов Цельсия) так же не способен пройти второй ряд данной структуры.

**Ключевые слова:** фуллерены, фуллерит, наномембраны, разделение газов.

## Актуальность.

Задача газоразделения при добыче природного газа представляется крайне важной по ряду причин. Входящий в состав природного газа гелий широко используется в медицине, промышленности и в научных исследованиях. Небольшая концентрация, которая к тому же сильно зависит от месторождения, делает привычные технологии его выделения (криогенную дистилляцию и напорную адсорбцию) не рентабельными на большинстве месторождений природного газа. В качестве альтернативы, предполагается использовать мембранные нанотехнологии для выделения гелия. Наномембрану для подобных технологий можно создать на основе фуллереновых наночастиц или же углеродных нанотрубок. Структура состоящая из молекул фуллерена носит название фуллерит. Наиболее изученная система такого рода кристалл C<sub>60</sub>, менее система кристаллического C<sub>70</sub>. Исследования кристаллов высших фуллеренов затруднены сложностью их получения. Наличие такого материала подобного молекулярному кристаллу, позволяет предполагать, что

существует высокая вероятность получить материал подходящий для задач газоразделения.

В рамках данной статьи будет рассмотрен дискретный подход к описанию взаимодействия наночастиц с молекулами метана и атомами гелия. На рисунке 1 приведены три вида частиц - молекула фуллерена C<sub>60</sub>, молекула фуллерена C<sub>540</sub> и молекула фуллерена C<sub>70</sub>.

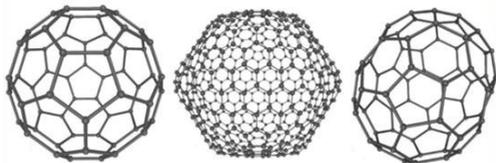


Рис. 1. Аллотропные модификации углерода - фуллерены с различным числом атомов углерода в своей структуре

На рисунке 2 приведен вид кристалла фуллерита.

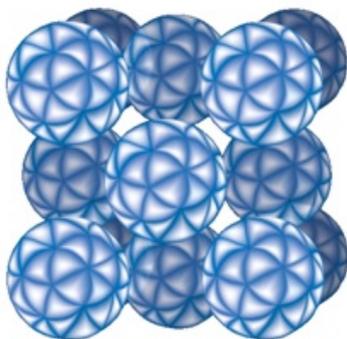


Рис. 2. Кристалл фуллерита

### **Потенциал Леннард-Джонса.**

Потенциал взаимодействия наноструктур с молекулами и атомами в качестве математического аппарата использует на понятие потенциала Леннард-Джонса. Потенциал был предложен Леннард-Джонсом изначально для исследования термодинамических свойств

инертных газов, в частности вириальных коэффициентах. В дальнейшем он широко применялся к исследованию различных систем. Наиболее часто использовался так называемый потенциал (12 – 6) имеющий вид:

$$U(r) = 4 * \varepsilon [(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$$

Если исследуемая система состоит из разнородных молекул (атомов), то для параметров сигма и эpsilon справедливы правила усреднения Лорентца-Бертло. В данной работе используется модифицированная версия потенциала Леннарда-Джонса.

### **Взаимодействие с одиночной молекулой фуллерена.**

В работе [4] показана локализация зоны сорбции для молекулы фуллерена в случае континуального подхода к описанию взаимодействия. В рамках данной статьи численное моделирование выполнено в рамках дискретного подхода. Результаты вычисления по моделированию, приведенные в этой работе, заключаются в том, что взаимодействие молекулы газов происходит с частицей, состоящей из 60 атомов углерода, расположенных в соответствии с классическим представлением о кристаллической структуре фуллерена – бакибол. Молекула газа (гелия или метана) движется по оси X, до попадания в поле потенциала фуллереновой частицы, а затем начинает сорбционные движения около частицы C60. В результате решения по численной модели для случая дискретного описания фуллереновой частицы C60 получены следующие результаты, представленные на рисунке 3.

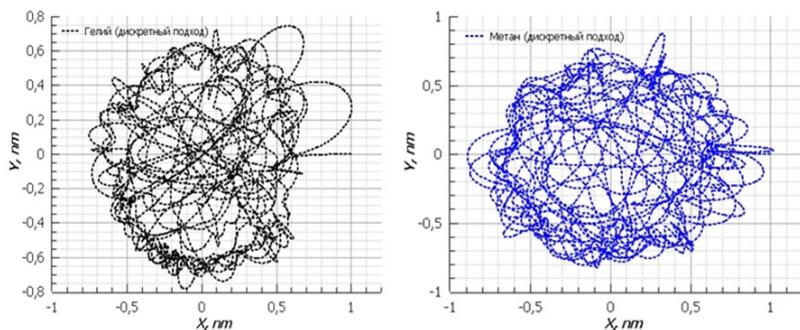


Рис. 3. Траектории сорбционного движения в плоскости XY молекул гелия и метана вокруг наночастицы фуллерена C60 при дискретном подходе описания взаимодействия между ними

### **Моделирование фуллерита.**

При переходе от одиночной молекулы фуллерена к структуре

фуллерита - кристалла состоящего из молекул фуллерена, мы выбрали самый простой вариант её реализации - кристалл с простой кубической решеткой. Результат моделирования расстановки узлов такой структуры приведен на рисунке 4. При этом радиус молекулы фуллерена – 0,357 нм. Минимальное расстояние между объектами данной однопараметрической системы  $h=0,35$  нм. После получения численно искомой структуры было проведено моделирование взаимодействия структуры с молекулами метана и атомами гелия.

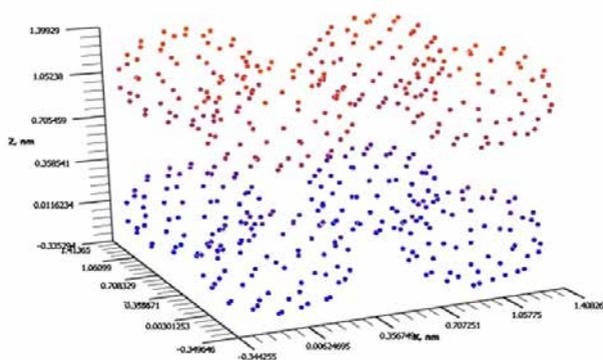


Рис. 4. Кристалл фуллерита, позиции атомов которого получены численно

Результаты численного моделирования процесса взаимодействия атома гелия, молекулы метана и молекулы этана с этим типом структур представлены на рисунках 5 и 6.

Как можно видеть из рисунков, траектории близкие к оси элементарной ячейки являются проницаемыми для каждого типа газа, при скоростях молекулы/атома сравнимых с наиболее вероятными скоростями данных газов, взятых из распределения Максвелла. При нормальных условиях для гелия эта скорость составляет 1300 м/с, а для метана – 750 м/с. Но при отклонении от центра более тяжелые и массивные молекулы метана и этана не способны преодолеть подобный энергетический барьер, а гелий проникает только сквозь первый слой молекул фуллерена.

### **Выводы.**

Результаты моделирования позволяют говорить о том, что в рамках дискретного подхода описания взаимодействия элементар-

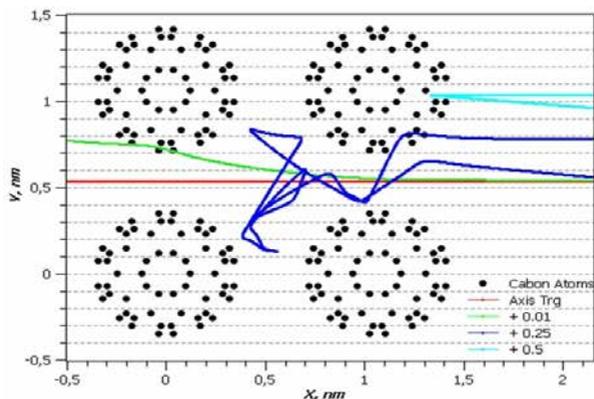


Рис. 5. Кристалл фуллерита взаимодействующий с атомом гелия

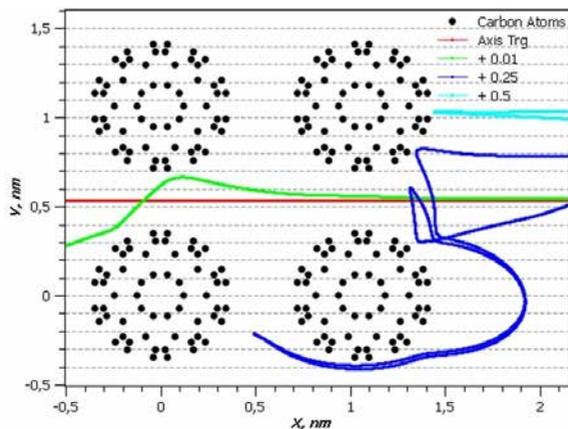


Рис. 6. Кристалл фуллерита взаимодействующий с молекулой метана

ная ячейка мембраны на основе фуллеренов при сближении молекул на расстояние 0,35 нм не пропускает ни один из представленных выше газов в случае отклонения траектории свыше 0.01 нм от осевой.

### Литература

1. А.М. Бубенчиков, М.А. Бубенчиков, А.И. Потехаев, Э.Е. Либин, Ю.П. Худобина Потенциальное поле углеродных тел как ос-

нова сорбционных свойств барьерных газовых систем // Известия ВУЗов. Физика. – 2015. – Т. 58, № 7. – С. 10–15.

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. A. 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. Kim S.-Y., Hwang H.J., Kang J.-W. One-dimensional self-assembly of C60 molecules on periodically wrinkled graphene sheet: A Monte Carlo approach // Physics Letters A, Volume 377. – Issue 43. – 9 December 2013. – P. 3136–3143.