

Министерство образования и науки Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)
Механико Математический факультет
Кафедра теоретической механики

ДОПУСТИТЬ К ПРЕДСТАВЛЕНИЮ ГЭК

Руководитель ООП

д-р физ. мат. наук, профессор

А.В. Старченко

« 19 » 06 2018 г.

НАУЧНЫЙ ДОКЛАД

об основных результатах подготовленной научно – квалификационной работы
(диссертации)

**ПРОНИЦАЕМОСТЬ ИДЕАЛЬНЫХ СИСТЕМ ОТКРЫТЫХ МНОГОСТЕННЫХ
НАНОТРУБОК**

по основной образовательной программе подготовки научно-педагогических кадров в
аспирантуре
направление подготовки 01.02.05 – Механика жидкости газа и плазмы

Колыхалова Ольга Эдуардовна

Научный руководитель

д-р физ. мат. наук, профессор

А.М. Бубенчиков

« 19 » 06 2018 г.

Автор работы

аспирант

О.Э. Колыхалова

подпись

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Природа углеродной связи позволяет образовывать интересные наноструктуры, например, фуллерены и нанотрубки. Вероятно, потенциал использования нанотрубок превосходит потенциал любых других наноструктур. Они широко используются в промышленных, медицинских целях и в научных исследованиях. С другой стороны, существуют газовые смеси, содержащие гелий. В России гелий извлекается из природных и попутных нефтяных газов с низким его содержанием. Газодобывающие регионы с развитой инфраструктурой не утилизируют гелий, содержащийся в добываемом природном газе. Имеется только один завод по получению гелия, находящийся под Оренбургом. Без строительства новых заводов выработка гелия будет неуклонно снижаться. Дальнейшее развитие его производства должно осуществляться на базе богатых гелиеносных месторождений[1-3]. Объемы и сфера потребления гелия напрямую зависят от состояния экономики государства, уровня развития в нем техники и технологии, в частности, нанотехнологий.

Перспективной и интересной представляется проблематика выделения гелия из природного газа с помощью углеродных наноматериалов[4]. Проведенные исследования показали, что множество углеродных нанотрубок по разнообразию структур больше множества других наносистем и наноматериалов, таких как фуллерены или графены. Углеродные нанотрубки представляют интерес для задач фильтрации и адсорбции газов из смесей. Актуальной является задача разделения газов с помощью пассивных фильтров (мембран). Общие свойства мембран схожи со свойствами биологических мембран принципы, работы которых рассмотрены в работе [5]. Мембраны могут быть составлены из открытых нанотрубок. В этом случае открытая нанотрубка выступает как естественный туннель. Естественными и селективными туннелями будут также фрагменты межтрубного пространства при самоупкладке одинаково ориентированных нанотрубок. Когда выяснилось, что необходимая производительность может быть достигнута лишь при использовании сверхтонкого разделительного слоя (порядка 100 нм), то первые попытки получения таких слоев связывались с технологиями, базирующимися на работах по физике поверхностных явлений [6-10], в которых доля теоретических работ невелика. В то время как построение ультратонких слоев потребовало пересмотра классических подходов и перехода от напыления частиц к молекулярному и атомному напылению. Все это существенно увеличило вклад теоретических исследований в работу по конструированию сверхтонких разделяющих слоев.

В настоящее время большой интерес представляют нанотрубки, имеющие особую структуру и физико – химические свойства [11-16]. В данной работе, в рамках ньютоновского

подхода изучается динамика молекул, проходящих через открытые многостенные углеродные нанотрубки.

Степень разработанности темы исследования. Интерес к поверхностным углеродным структурам обусловлен широким спектром возможных приложений. Так, например, в [24] рассмотрены структурные параметры, электронные свойства и квантовая емкость УНТ. Работа [25] освещает работы по фотопроводимости многостенных УНТ. Обеспечивающие очевидный практический результат каталитические свойства УНТ рассмотрены в [26] и [27]. Результаты по разделению газовых смесей представлены в работах [28] и [29]. Энергетические взаимодействия между атомами внутри структуры приводят к задачам механики углеродных структур, решение которых дают данные по упругим свойствам одностенных УНТ [30], по механическим свойствам при растяжении графена [31], по изгибу и вибрации УНТ [32], по неустойчивости УНТ, обернутой молекулой полиэтилена [33]. Перенос энергии колебаний атомов как в чисто углеродных, так и в смешанных структурах, называемый теплопроводностью нанообъектов, рассмотрен в работах [34-40]. В этих работах рассматривается один из аспектов коллективного взаимодействия атомов углеродной структуры, а именно трансляция энергии в выделенном направлении. В задачах прохождения свободных молекул через нанопористые структуры определяющим является аспект взаимодействия отдельных молекул с фрагментами структуры, в качестве которых часто выступают УНТ. Это привело к созданию высокопроизводительных микс-матричных мембран для эффективного разделения газовых смесей [41-43]. Важными также являются работы по каналированию протонов через углеродную трубку [44] и по использованию УНТ для хроматографического разделения [45].

Трубки, не содержащие пор на боковой поверхности являются непроницаемыми в отношении поперечных переходов любых молекул и атомов. В связи с этим газовые компоненты могут двигаться лишь через трубки по межтрубному пространству по треугольным туннелям. Трубки, уложенные параллельно друг другу, образуют некий слой, в котором объем свободного пространства будет пропорционален свободной площади, находящейся в нормальном по отношению к осям трубок сечении. В методе эквивалентного однородного слоя свободное пространство начинается непосредственно от стенки 2D-материала, и это очень удобно, поскольку при нахождении средней энергии можно проводить интегрирование по всей рассматриваемой области.

Необходимо отметить, что нанотехнологии синтеза структурированных углеродных материалов являются очень дорогими. Поэтому для разработки эффективных материалов разумнее будет использовать теоретические подходы, в частности, численное моделирование. Автор настоящей работы имел возможность проводить только конкретные расчеты,

определяющие взаимодействие молекул с атомами углеродной структуры в случае, когда они проходят через нанопористую систему многостенных нанотрубок, уложенных параллельно друг другу.

Цель и задачи исследования. Цель работы заключается в разработке математических моделей взаимодействия молекулярных компонент природного газа с углеродными нанотрубками, а также в создании методики расчета проницаемости и селективности ультратонких нанопористых углеродных слоев. Задачами исследования являлись изучение литературных источников по теме исследования, подбор и модификация существующих потенциалов для описания взаимодействия типа частица-молекула, а также изучение проницаемости слоев составленных открытыми нанотрубками. Главной целью данной работы являлась определение проницаемости систем ориентированных многостенных нанотрубок.

Научная новизна исследования. Настоящая диссертационная работа направлена на разработку теории расчета проницаемости слоев составленных углеродными наноструктурными элементами, такими как нанотрубки. В виду отсутствия законченных теоретических разработок, выполненных в этом направлении, работа имеет большое теоретическое значение. Автором была создана новая математическая модель взаимодействия молекул и атомов с системами нанотрубок. В работе предложен новый способ реализации метода расчета относительной и абсолютной проницаемости укладок открытых одностенных и многостенных нанотрубок. Рассмотрен частный случай пассивации концов нанотрубки азотом и фтором.

Теоретическая и практическая значимость работы. Многовариантность создания регулярных нанопористых структур из углерода требует проведения предварительных расчетов по их проницаемости, а также селективности. Практическая же значимость заключается в разработке основ альтернативной криогенному способу технологии разделения бинарных и многокомпонентных смесей газов на основе углеродных мембран, в частности систем параллельно уложенных открытых нанотрубок.

Методология и методы исследования. В работе используется единый подход для достижения глобальной цели, состоящей в разработке конструкции углеродной мембраны для достижения эффективного разделения смесей, содержащих инертные компоненты. Элементами конструирования выбраны одностенные и многостенные открытые углеродные нанотрубки. Были применены подходы и методы классической механики, составляющие теоретическую основу молекулярной газодинамики. Обычно применение таких методов связано с реализацией большого количества статистических испытаний и расчетов. Однако в настоящей работе мы попытались уменьшить число случайных выборок по скоростям, по прицельным расстояниям и углам обстрела за счет использования таких понятий как наиболее вероятная скорость

движения молекул, предельная минимальная скорость прохождения слоя, предельный радиус захвата частицы (молекулы), а также функция распределения молекул по скоростям движения. Предложен континуальный подход в определении энергии взаимодействия молекул с фрагментами структуры слоя и на его основе найдено 2D-однородное распределение энергии всего слоя, которое используется в дальнейшем для решения 1D-задачи прохождения молекул через энергетический барьер. В принципе слой может быть составлен любыми структурными элементами. Однако в данной работе мы ограничились одно-, двустенными и трехстенными углеродными трубками.

Положения, выносимые на защиту:

1. Математическая модель взаимодействия молекулы (атома) с частицами, из которых состоит углеродная нанотрубка
2. Математическая модель расстановки узлов на поверхности нанотрубки.
3. Методика расчета относительной и абсолютной проницаемостей различных укладок открытых одностенных и многостенных нанотрубок.
4. Схема для подсчета количества сорбционных молекул около нанотрубок.

Степень достоверности результатов исследования. Степень достоверности результатов работы обеспечена строгими формулировками математических постановок, адекватностью вычислительных моделей физическим процессам, оценкой погрешности расчетов, тестированием вычислительных алгоритмов, а также контролем накопившихся ошибок вычислений практически на каждом шаге расчетов по времени.

Апробация результатов диссертации проводилась на Научной конференции студентов и школьников, посвященной 65-летию механико-математического факультета (Томск, 22–25 апреля 2013 г.), IV Международной научно-технической конференции молодых ученых, аспирантов и студентов с международным участием «Высокие технологии в современной науке и технике», 21–24 апреля 2015 г., VI Всероссийской научной конференции с международным участием «Теплофизические основы энергетических технологий», 13–15 октября 2015 г., Международной молодежной научной конференции «Тепломассоперенос в системах обеспечения тепловых режимов энергонасыщенного технического и технологического оборудования» 19–21 апреля 2016 г., VII Всероссийской научной конференции с международным участием «Теплофизические основы энергетических технологий» 26–28 октября 2016г.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 6 работ, в том числе 3 статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук и доктора наук, 3 публикации в сборниках материалов научного семинара,

международных и всероссийских (в том числе с международным участием) научных и научно-практических конференций.

Личный вклад автора. Автор работы принимал участие в постановке задач, разработке физической и численной моделей, проведении расчетов, их обработке и анализе, а также в подготовке статей и докладов на конференциях. Лично автором был проведен обзор научно-технической литературы, касающейся темы диссертации. Совместно с научным руководителем были сформулированы цель, задачи и основные положения диссертационной работы, были проведены обсуждения полученных результатов.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка использованных источников и литературы, и приложений. Работа содержит 123 страницы, 84 рисунка, 5 таблиц и 2 приложения. Список использованных источников и литературы включает 158 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении приводится актуальность темы диссертационного исследования, степень разработанности данной тематики, сформулированы цель и задачи исследования, показаны научная новизна и практическая значимость результатов работы, представлены положения, выносимые на защиту. Также приведена структура диссертации и отмечен личный вклад автора.

В первой главе соискатель приводит свойства, структуру, методы получения и применения наноматериалов. Также были приведены особенности математического моделирования наносистем.

Во второй главе описаны свойства, способы получения и применения углеродных одностенных и многостенных нанотрубок.

В третьей главе описан и представлен модифицированный потенциал Леннарда–Джонса и его применение в рамках задач, связанных с межмолекулярным взаимодействием частиц и молекул газа. Описание стационарного поля консервативных сил нормализованный потенциал Леннарда–Джонса примет следующий вид :

$$\Phi(\rho) = \frac{1}{\rho^{12}} - \frac{1}{\rho^6} \quad (1)$$

где $\rho = \sqrt{(x-a)^2 + (y-b)^2 + (z-c)^2}$, x, y, z, a, b, c – декартовы координаты центров взаимодействующих молекул. Выражение (1) можно видоизменить:

$$\Phi_1(\rho) = \frac{1}{\rho} \operatorname{th} \left(\frac{1 - \rho^6}{\rho^{11}} \right) \quad (2)$$

Преимущество выражения (2) в том, что оно позволяет интегрировать распределение силовых центров - источников поля по объему тела различной формы.

В сферической системе координат ($x = r \sin \theta \cos \phi$, $y = r \sin \theta \sin \phi$, $z = r \cos \theta$) квадрат расстояния между двумя точками выражается как:

$$\rho^2 = r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \alpha, \quad \cos \alpha = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\phi - \phi') \quad (3)$$

Если силовые центры-источники поля распределены внутри сферического слоя равномерно, то поле будет центрально-симметричным, а выражение для энергии поля представляется интегралом:

$$U(r) = 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_{R_1}^{R_2} r'^2 \Phi_1(r'^2 + r^2 - 2rr' \cos \theta) \quad (4)$$

В этом случае высота потенциального барьера практически не зависит от толщины слоя, содержащего силовые центры-источники поля.

Интересным для изучения является способность пробных молекул преодолевать энергетический барьер, имеющийся в зазоре между двумя сферическими наночастицами.

Чтобы смоделировать движение молекул в поровом пространстве, мы сближаем сферические наночастицы на расстояние порядка одного или нескольких нанометров и исследуем способность пробных молекул проникать через полученный зазор.

Пористое тело представляется совокупностью сферических наночастиц, для которых имеется потенциал взаимодействия наночастица – молекула:

$${}^9\Phi(\rho_j) = {}^9\Phi(\rho_j) - {}_3\Phi(\rho_j) \quad (5)$$

Здесь ρ_j – расстояние от j -ой частицы пористой структуры до пробной молекулы, ρ_p – радиус наночастицы.

$${}^9\Phi(\rho_j) = C_9 \left\{ \left[\frac{1}{(\rho - \rho_p)^9} - \frac{1}{(\rho + \rho_p)^9} \right] - \frac{9}{8\rho} \left[\frac{1}{(\rho - \rho_p)^8} - \frac{1}{(\rho + \rho_p)^8} \right] \right\} \quad (6)$$

$${}_3\Phi(\rho_j) = C_3 \left\{ \left[\frac{1}{(\rho - \rho_p)^3} - \frac{1}{(\rho + \rho_p)^3} \right] - \frac{3}{2\rho} \left[\frac{1}{(\rho - \rho_p)^2} - \frac{1}{(\rho + \rho_p)^2} \right] \right\} \quad (7)$$

Выражения (6), (7) определяют соответственно потенциалы отталкивания и притяжения.

Здесь $C_9 = \frac{4\pi\epsilon_{12}\sigma_{12}^{12}}{45V}$, $C_3 = \frac{2\pi\epsilon_{12}\sigma_{12}^6}{3V}$, а V – объем твердого углеродного тела, приходящийся на

одну молекулу. Потенциал (5) получен интегрированием парного потенциала Леннарда-Джонса по объему наночастицы. Значения констант взаимодействия ε и σ , входящих в потенциал Леннарда-Джонса, для некоторых пар веществ приведены в справочнике по химии.

Для параметров ε и σ справедливы следующие правила усреднения Лорентца-Бертло (Lorentz-Berthelot mixing rule):

$$\sigma_{12} = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22}}{2}, \quad \varepsilon_{12} = (\varepsilon_{11} \cdot \varepsilon_{22})^{1/2} \quad (8)$$

В четвертой главе изложены результаты математического моделирования взаимодействия углеродных одностенных нанотрубок с различными компонентами природного газа, в частности гелия и метана. Была рассмотрена дискретная и континуальная модели проницаемости одностенных нанотрубок. Рассмотрен случай, когда концы трубки при пассивировании азотом и фтором.

Модификация потенциала Леннарда - Джонса, которая была описана выше дает возможность получить сходящуюся величину интеграла, определяющего взаимодействие от боковой поверхности трубки:

$$\int_s \Phi_1 \left(\sqrt{r^2 + (r')^2 - 2rr' \cos(\varphi - \varphi') + (z - z')^2} \right) ds \quad (9)$$

где

$$\Phi_1(\rho) = 4\varepsilon \left(\frac{\sigma}{\rho} \right) th \left[\left(\frac{\sigma}{\rho} \right)^{11} - \left(\frac{\sigma}{\rho} \right)^5 \right] \quad (10)$$

при этом σ , ε – параметры потенциала Леннарда-Джонса; $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$, $z = z$, связь цилиндрических координат с декартовыми, ρ – расстояние между центром молекулы и точкой на поверхности нанотрубки, определяемое следующим образом:

$$\rho^2 = (x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2 = r^2 + (r')^2 - 2rr' \cos(\varphi - \varphi') + (z - z')^2 \quad (11)$$

x', y', z' - координаты точек на поверхности трубки.

выражение для потенциала воздействия от всех атомов углерода нанотрубки:

$$U(r, z) = aq \int_0^{2\pi} \int_0^l \Phi_1 \left(\sqrt{r^2 + a^2 - 2ar \cos \varphi' + (z - z')^2} \right) d\varphi' dz' \quad (12)$$

Здесь l – длина трубки. Причем, выражение (12) будет иметь размерность потенциала (энергии). Выражение (12) еще можно переписать следующим образом:

$$U(r, z) = 4\varepsilon aq \int_0^{2\pi} \int_0^l \left(\frac{\sigma}{\rho} \right) th \left[\left(\frac{\sigma}{\rho} \right)^{11} - \left(\frac{\sigma}{\rho} \right)^5 \right] d\varphi' dz' \quad (13)$$

Где $\rho = \sqrt{r^2 + a^2 - 2ar \cos \varphi' + (z - z')^2}$.

Для описания движения молекулы вещества в области потенциала, созданного нанотрубкой, используем следующую форму закона сохранения механической энергии:

$$\frac{mV^2}{2} + U(r, z) = \frac{mV_0^2}{2} + U_0(r, z) \quad (14)$$

$$V(r, z) = \sqrt{V_0^2 - 2U(r, z)/m} \quad (15)$$

Спроецировав векторное уравнение основного уравнения динамики:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -\text{grad}U \quad (16)$$

на оси выбранной системы координат, получим:

$$m \frac{du}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x}, m \frac{dv}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial y}, m \frac{dw}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial z} \quad (17)$$

Если $f(v)$ - функция распределения Максвелла, то:

$$f(v)dv = dN / N. \quad (18)$$

определяет количество молекул, скорости которых находятся в интервале $[v, v + dv]$

величину абсолютной проницаемости $D^{(a)}$, определяющую количество молекул, проходящих через единичную площадку слоя в единицу времени, можно найти следующим образом:

$$D^{(a)} = N_1 D = \frac{S_1 p}{6m} \sqrt{\frac{2}{RT}} D. \quad (19)$$

В рамках дискретной модели траектории движения низкоэнергетических молекул гелия будут выглядеть так:

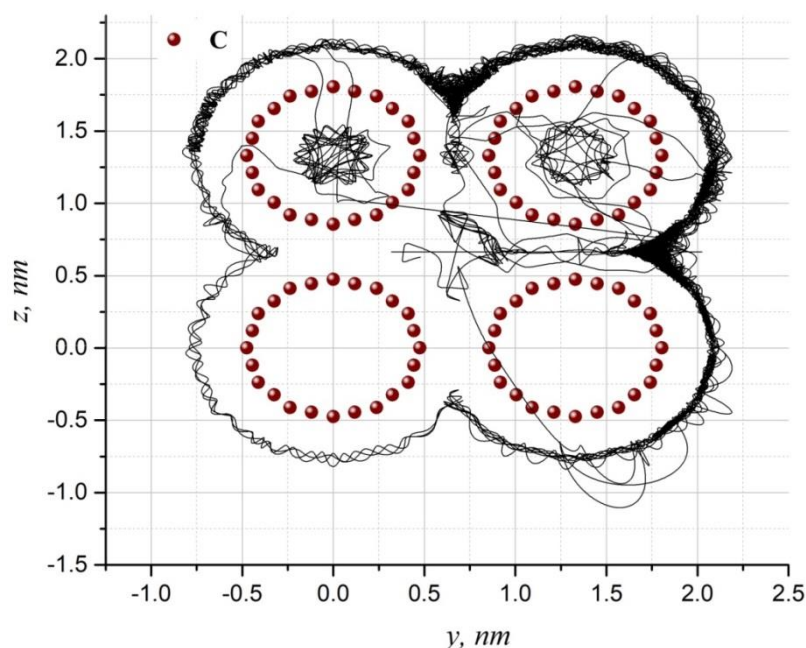


Рисунок 1 – Траектории движения низкоэнергетических молекул гелия

На рис. 2 представлены распределения средней энергии взаимодействия укладки с пробной молекулой по длине трубок, то есть поперек слоя. Видно, что входной и выходной профили инвариантны относительно длины трубок, а в центральной части протяженной части трубки энергия остается постоянной.

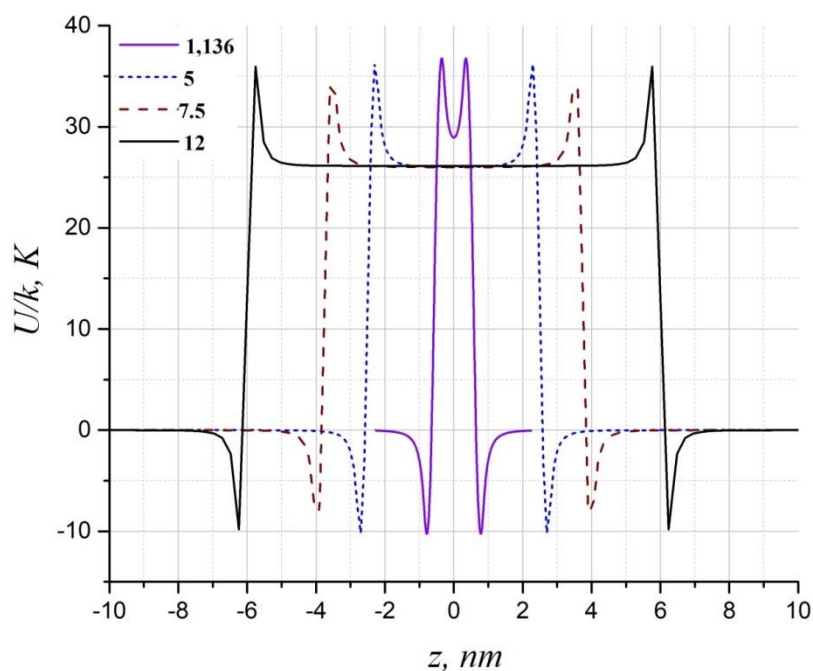


Рисунок 2 – Форма барьера при различной длине трубок,
1 – 1,136 нм, 2 – 5 нм, 3 – 7,5 нм, 4 – 12 нм.

Значения минимальных скоростей для атомов гелия и молекул метана для рассматриваемой прямоугольной укладки трубок приведены на рис. 3.

При этом наиболее вероятные скорости движения отличаются в два раза (650 м/с, 1300 м/с). Эти различия сказываются, в конечном счете, в пользу гелия. В связи с этим проницаемость слоя в отношении гелия существенно выше (рис.4).

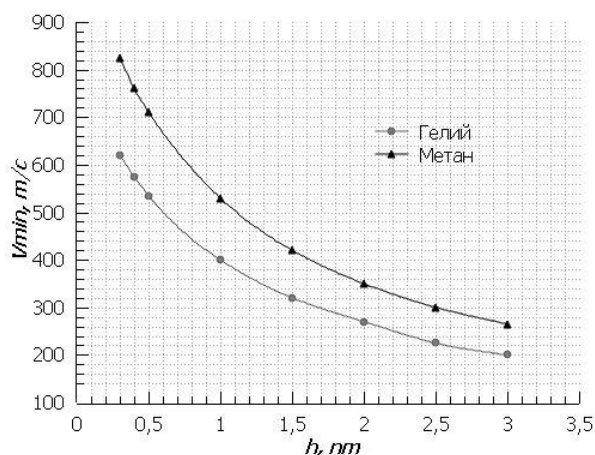


Рисунок 3 – Предельная скорость проницаемости прямоугольной укладки

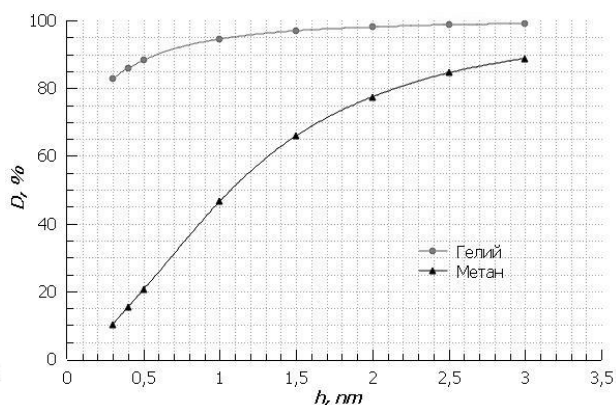


Рисунок 4 – Кривая проницаемости прямоугольной укладки нанотрубок в отношении атомов гелия и молекул метана

В этой главе также изучалось прохождение атомов гелия и молекул метана через нанотрубку, пассивированную на концах азотом и фтором. Были получены характеристики движения перемещающихся частиц и их траектории. При помощи расчетов была установлена зависимость скорости частиц от продольной координаты в трубке при различной пассивации на ее концах.

Векторное уравнение движения в случае перемещающейся молекулы можно представить в следующем виде (20):

$$m \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla\Phi = \sum_{j=1}^{N_p} \frac{d\Phi}{d\rho_j} \nabla\rho_j, \quad (20)$$

$$\text{здесь } \rho_j = \sqrt{(x-x_j^0)^2 + (y-y_j^0)^2 + (z-z_j^0)^2}.$$

Учитывая это, вместо векторного уравнения (20) получим три формулы в скалярном виде:

$$\frac{du}{dt} = \sum_{j=1}^{N_p} a_j \frac{x-x_j^0}{\rho_j}, \quad \frac{dv}{dt} = \sum_{j=1}^{N_p} a_j \frac{y-y_j^0}{\rho_j}, \quad \frac{dw}{dt} = \sum_{j=1}^{N_p} a_j \frac{z-z_j^0}{\rho_j}, \quad (21)$$

$$a_j = 24 \frac{\varepsilon}{m\rho_j} \left(\frac{\sigma}{\rho_j} \right)^6 \left[2 \left(\frac{\sigma}{\rho_j} \right)^6 - 1 \right]. \quad (22)$$

Если исследуемая система состоит из разнородных молекул (атомов), то для параметров ε и σ справедливы следующие правила усреднения Лоренца-Бертло, описанное выше.

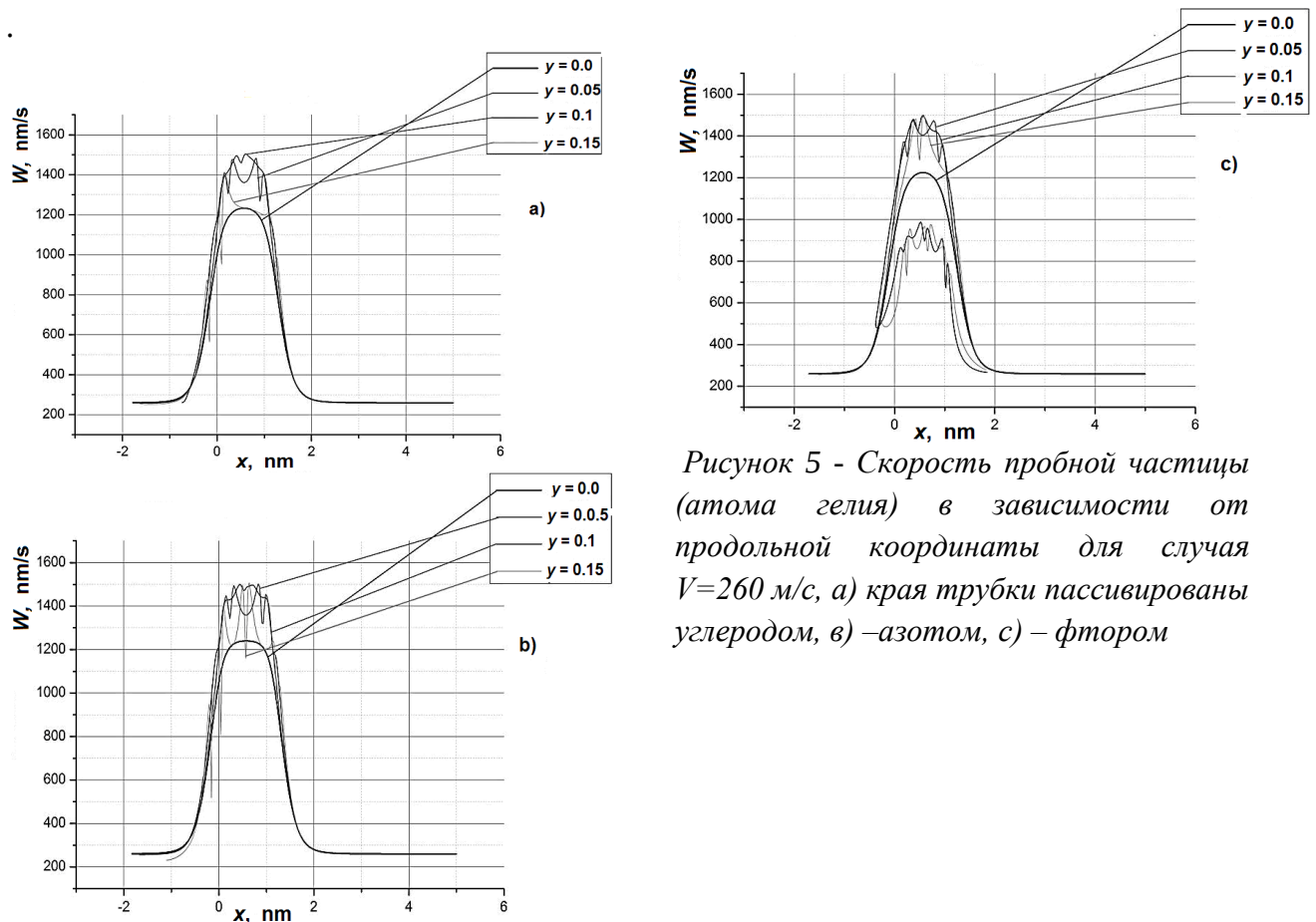


Рисунок 5 - Скорость пробной частицы (атома гелия) в зависимости от продольной координаты для случая $V=260$ м/с, а) края трубки пассивированы углеродом, в) – азотом, с) – фтором

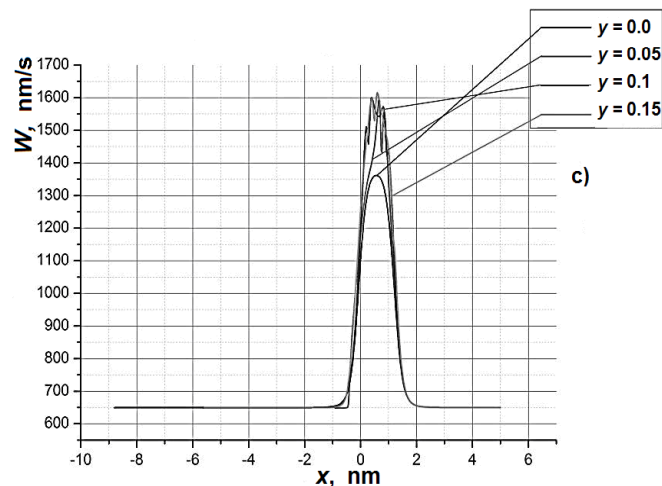
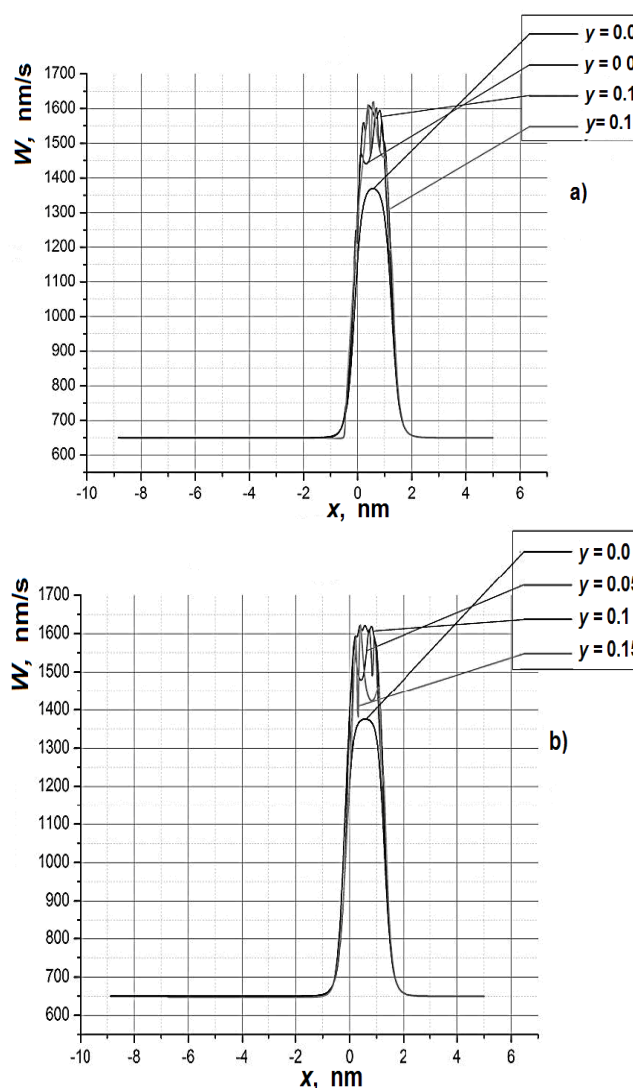


Рисунок 6 -Скорость пробной частицы (атома гелия) в зависимости от продольной координаты для случая $V=650$ м/с, а) края трубки пассивированы углеродом, в) – азотом, с) – фтором

Во всех представленных расчетах вход молекул проходил по траекториям, параллельным оси трубки. Оказалось, что угол выхода траектории по отношению к оси трубки меняется непредсказуемым образом. Пассивация азотом и фтором имеет локальное влияние на динамику молекул. Она нарушает симметрию их движения, но мало сказывается на проходимости трубок.

В пятой главе рассматривалась укладка двухстенных и трехстенных нанотрубок. Вычислялась доля проницаемости для этих случаев. Был предложен метод эквивалентного однородного слоя, который использовался и в случае однослойных трубок.

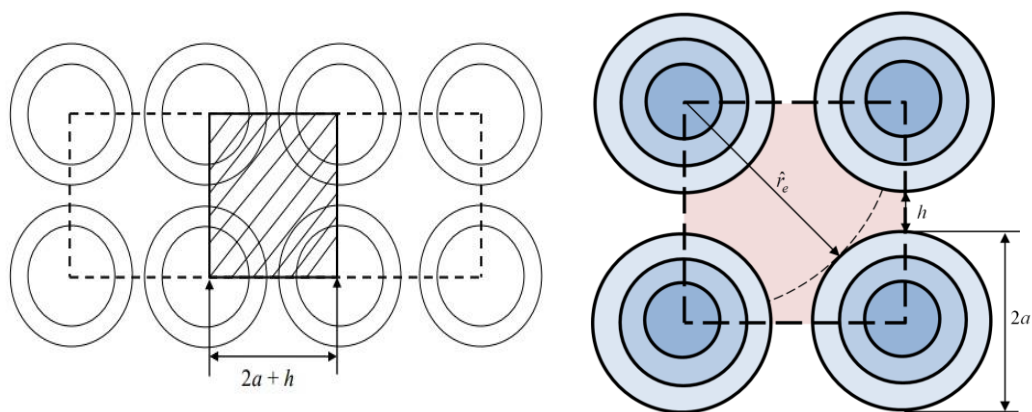


Рис. 7. Фрагмент регулярной 4х угольной укладки двух/трёхстенных нанотрубок.

Опираясь на распределение Максвелла для частиц, находящихся перед мембраной, можно найти долю прошедших через слой молекул, определяющуюся лишь предельной скоростью молекулы:

$$D_o = 2\sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \int_{w_{np}}^{\infty} \exp(-\beta w^2) dw. \quad (23)$$

Здесь w_{np} – предельная скорость молекулы-представителя, $\beta = \frac{m}{2kT}$, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура газовой среды. Распределение Максвелла, справедливое для каждой из подсистем исходной смеси газов, используется здесь как способ набора статистики по исходному состоянию газовых компонент.

На рис. 8 показан энергетический портрет укладки (осредненный по поверхности слоя барьер). Видно, что и в этих примерах форма барьера остается инвариантной относительно длины трубки как в случае двустенных и трехстенных трубок.

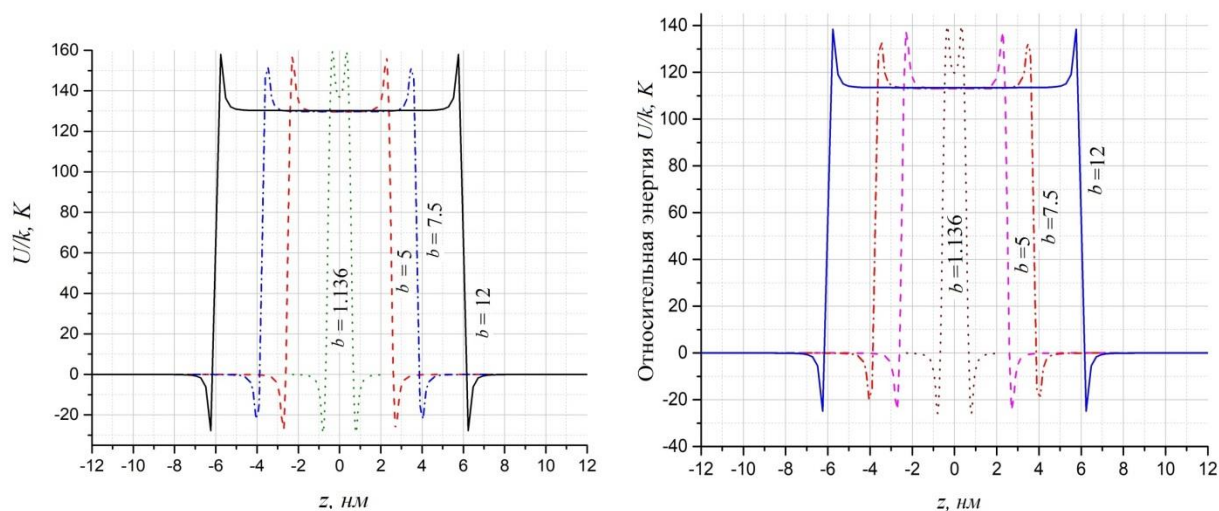


Рис. 8. Распределение энергии в перпендикулярном к слою направлении при различных значениях длины калиброванных трубок.

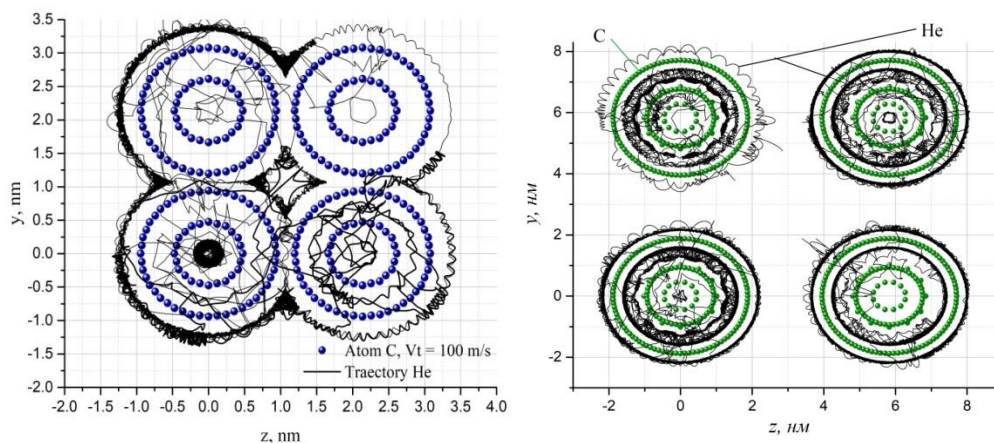


Рис. 9 – Траектории движения низкоэнергетических молекул гелия

На рис. 9 представлены несколько траекторий низкоэнергетических молекул, имеющих начальную скорость 100 м/с. Молекулы были пущены через укладку вдоль осей нанотрубок, однако были вовлечены в сорбционное движение.

В данной главе были проведены расчеты для случая треугольной укладки трехстенных нанотрубок.

Слои внутри многостенных трубок также уложенных плотно, т.е. в потенциальные ямы смежных слоев (рис. 10). Это приводит к тому, что проникаемой является лишь внутренняя трубка, которая является естественным туннелем для многих атомов и молекул. Кроме того свободные частицы могут проходить через треугольные туннели в межатрубочном пространстве, которые при плотной укладке так же как и сама открытая трубка являются закрытыми для прохождения молекул с боковой стороны. В связи с вышесказанным, финитные траектории в принципе могут появляться лишь на краю укладки, а также внутри трубки и в треугольном туннеле в межатрубочном пространстве.

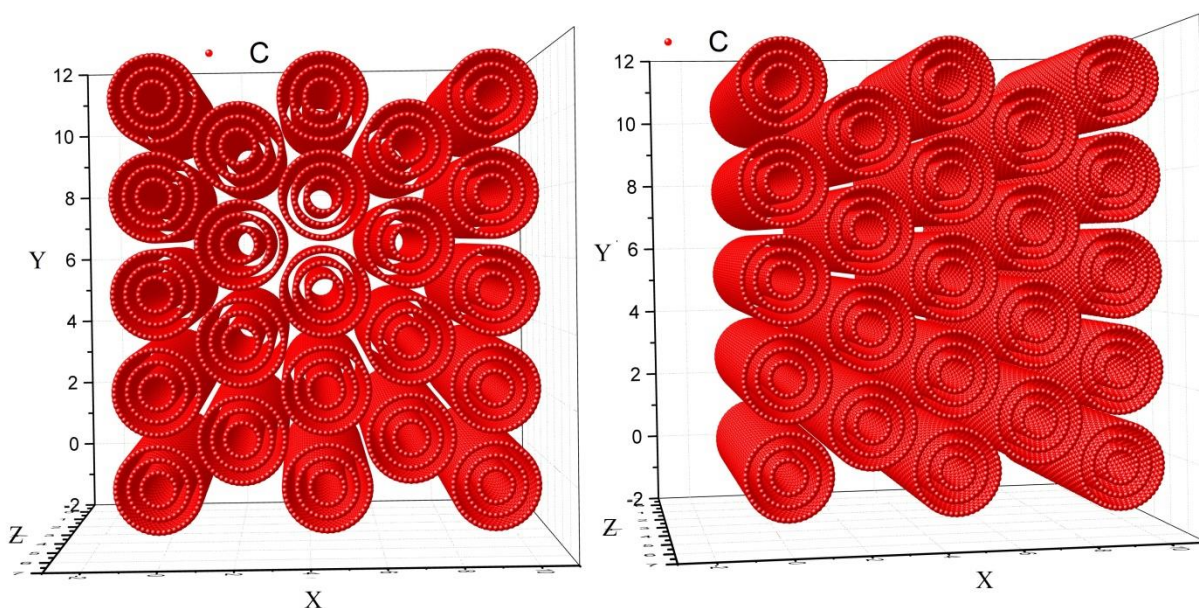


Рисунок 10 - Укладка трехстенных нанотрубок

Практические расчеты показывают, что если при определенной скорости молекула проходит укладку нанотрубок, то она ее проходит и при большей величине скорости. Так что находя минимальную скорость прохождения и интегрируя далее распределение Максвелла от этой величины и до бесконечности мы найдем долю молекул, проходящих через укладку. Значения предельных скоростей для атомов гелия и молекул метана для рассматриваемой треугольной укладки трубок приведены на рис. 11. На следующем рисунке представлены распределения коэффициентов проницаемости также для гелия и метана. Из рис. 12 видно, что

при $0,3 \leq h \leq 1,0$ нм структура дает хорошее разделение по коэффициенту проницаемости, т.е. работает, как сепаратор.

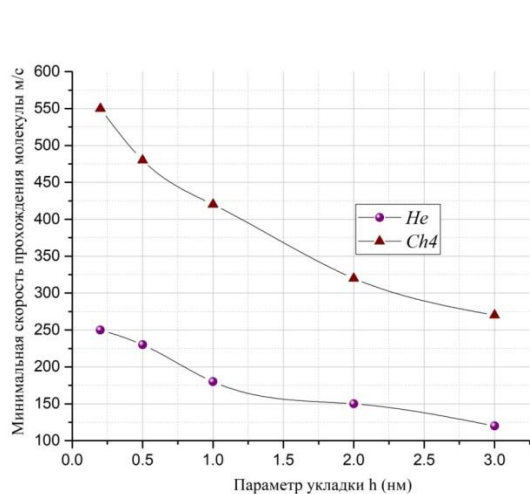


Рисунок 11 – Предельная скорость проницаемости треугольной укладки

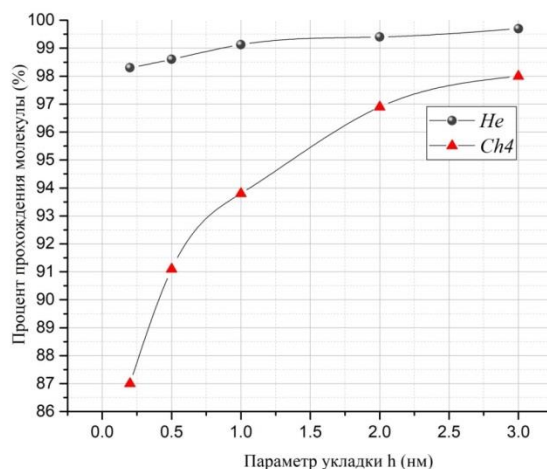


Рисунок 12 – Кривая проницаемости треугольной укладки нанотрубок в отношении атомов гелия и молекул метана

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В работе описаны и рассмотрены такие наноструктуры, как углеродные нанотрубки. Приведены свойства, способы получения, разновидности и их применение в науке, технике и медицине. Показано, что нанотрубки на основе углерода можно использовать для задач, занимающихся разделением компонентов природного газа. Учитывая, что в работе для изучения использовались компоненты природной смеси газов, таких как гелий, то для описания их динамики использовался потенциал Леннарда-Джонса, причем в модифицированном виде. Рассмотрена задача о простейшем энергетическом барьере, решение которой является пригодным для изучения задач о прохождении молекул через нанопористые структуры. Автором по ходу выполнения диссертационного исследования была создана новая математическая модель взаимодействия молекул и атомов с нанотрубками различных структур. В рамках классической механики, учитывая сорбционные свойства частиц во время исследования была приведена постановка задачи о расстановке узлов кристаллической сети на поверхности нанотрубок. Эта постановка приводит к модели динамических систем, реализация которых дает численное решение задачи с наперед заданной точностью. Найдены значения предельных скоростей сорбционного движения для всех основных компонент природного газа. Получены результаты по технологии расчета селективности слоев, составлены одностенными и

многостенными открытыми нанотрубками. Технология опирается на расчет проницаемости нанопористых структур по отношению к отдельным компонентам природного газа. Полную статистику прохождения молекул через ультратонкую нанопористую мембрану удастся собрать лишь на примере однородного слоя. Поэтому предложен новый метод расчета проницаемости слоев, заключающийся в правильном выделении участков в прохождения молекул и осреднение энергии взаимодействия на этих участках. Если слой составлен параллельно уложенным открытым углеродным нанотрубкам, то вся его поверхность является зоной прохождения для определенного типа молекул. Поэтому уместным является применение метода эквипотенциального однородного слоя, который лишь по поперечной форме барьера сортирует 108 молекулы на проходящие и не проходящие. В итоге, коллективом с участием автора, была создана и реализована методика расчета относительной и абсолютной проницаемости укладок открытых одностенных и многостенных нанотрубок. В результате расчетов по предложенной методике установлено, что укладки открытых трубок дают высокую степень разделения смесей CH_4/He при производительности, отвечающей режиму сверхпроницаемости системы. Применение разработанной теории позволило без использования статистических расчетов определить величину относительной проницаемости слоя. Расчетами также установлено, что укладки трехстенных нанотрубок дают более высокую степень разделения смесей CH_4 / He в сравнении с укладками трубок, имеющих меньшее количество внутренних слоев.

В качестве перспектив дальнейшей разработки данной тематики автор считает возможным применить методику расчета проницаемости укладок многостенных углеродных нанотрубок для разделения других газовых смесей. Кроме того, планируется рассмотреть проницаемость закрытых многостенных нанотрубок и выходящих из этого свойств.

Список трудов по теме диссертационного исследования

Статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание доктора наук:

1. Бубенчиков А.М., Бубенчиков М.А., **Колыхалова О.Э.**, Тарасов Е.А. Дифференциальная проницаемость прямоугольной укладки открытых нанотрубок //Вестн. Том. гос. ун-та. Математика и механика. 2017. № 48. С. 49-56. DOI: [10.17223/19988621/48/5](https://doi.org/10.17223/19988621/48/5)
2. Бубенчиков М.А., Колыхалова О.Э., Усенко О.В. Расчет проницаемости укладок многостенных нанотрубок // Вестн. Том. гос. ун-та. Математика и механика. 2018.
3. Бубенчиков А.М., Бубенчиков М.А., **Колыхалова О.Э.** Треугольная укладка расчета проницаемости пучка многослойных углеродных нанотрубок //Вестн. Том. гос. ун-та. Математика и механика. 2018.

Публикации в других научных изданиях:

4. Бубенчиков А.М., Бубенчиков М.А., Тарасов Е.А., **Фридман О.Э.**, Худобина Ю.П. Движение гелия через нанотрубку пассивированную азотом и фтором //Геометрия многообразий и

ее приложения: материалы четвертой научной конференции с международным участием (г. Улан-Удэ - оз. Щучье - оз. Байкал, 27 -30 июня 2016 г.). Улан-Удэ: Изд-во Бурят. ун-та, 2016. С. 112-118. – 0,4 / 0,08 п.л

5. Бубенчиков А.М., Бубенчиков М.А., Тарасов Е.А., **Фридман О.Э.**, Худобина Ю.П. Движение молекул через модифицированные нанотрубки. // Международная конференция «Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций». 19-23 Сентября 2016 г. Томск. Академгородок.

6. **Колыхалова О.Э.**, Тарасов Е.А., Бубенчиков А.М., Бубенчиков М. А. Дифференциальная проницаемость прямоугольной укладки открытых нанотрубок.//IX Всероссийская конференция «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики», посвященная 55-летию полета Ю.А. Гагарина. 21-25 Сентябрь 2016г. НИИ ПММ ТГУ г. Томск

Отчет о проверке на заимствования №1

Автор: Колыхалова Ольга Эдуардовна ms.friol@mail.ru / ID: 5800840

Проверяющий: Колыхалова Ольга Эдуардовна (ms.friol@mail.ru / ID: 5800840)

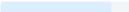
Отчет предоставлен сервисом «Антиплагиат»- <http://www.antiplagiat.ru>

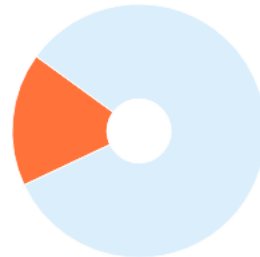
ИНФОРМАЦИЯ О ДОКУМЕНТЕ

№ документа: 4
Начало загрузки: 11.06.2018 17:17:27
Длительность загрузки: 00:00:01
Имя исходного файла:
Научная работа_Колыхалова О.Э
Размер текста: 1551 кБ
Символов в тексте: 28532
Слов в тексте: 3489
Число предложений: 246

ИНФОРМАЦИЯ ОБ ОТЧЕТЕ

Последний готовый отчет (ред.)
Начало проверки: 11.06.2018 17:17:29
Длительность проверки: 00:00:01
Комментарии: не указано
Модули поиска:

ЗАИМСТВОВАНИЯ	ЦИТИРОВАНИЯ	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ
16,77% 	0% 	83,23% 



Заимствования — доля всех найденных текстовых пересечений, за исключением тех, которые система отнесла к цитированиям, по отношению к общему объему документа.
Цитирования — доля текстовых пересечений, которые не являются авторскими, но система посчитала их использование корректным, по отношению к общему объему документа. Сюда относятся оформленные по ГОСТу цитаты; общеупотребительные выражения; фрагменты текста, найденные в источниках из коллекций нормативно-правовой документации.

Текстовое пересечение — фрагмент текста проверяемого документа, совпадающий или почти совпадающий с фрагментом текста источника.

Источник — документ, проиндексированный в системе и содержащийся в модуле поиска, по которому проводится проверка.

Оригинальность — доля фрагментов текста проверяемого документа, не обнаруженных ни в одном источнике, по которым шла проверка, по отношению к общему объему документа.

Заимствования, цитирования и оригинальность являются отдельными показателями и в сумме дают 100%, что соответствует всему тексту проверяемого документа.

Обращаем Ваше внимание, что система находит текстовые пересечения проверяемого документа с проиндексированными в системе текстовыми источниками. При этом система является вспомогательным инструментом, определение корректности и правомерности заимствований или цитирований, а также авторства текстовых фрагментов проверяемого документа остается в компетенции проверяющего.

№	Доля в отчете	Доля в тексте	Источник	Ссылка	Актуален на	Модуль поиска	Блоков в отчете	Блоков в тексте
[01]	6,22%	6,22%	vestmim_4_48_09.pdf	http://journals.tsu.ru	17 Ноя 2017	Модуль поиска Интернет	14	14
[02]	3,75%	3,75%	vestmim_531_beta.pdf	http://journals.tsu.ru	23 Ноя 2016	Модуль поиска Интернет	13	13
[03]	2,09%	2,92%	http://www.lib.tpu.ru/fulltext/...	http://lib.tpu.ru	09 Ноя 2017	Модуль поиска Интернет	8	10

Еще источников: 12

Еще заимствований: 4,7%