

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения  
Российской академии наук

## **МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ**

**Перспективные материалы  
с иерархической структурой  
для новых технологий  
и надежных конструкций**

**19 - 23 сентября 2016 г.**

**Томск, Россия**

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

Тезисы докладов Международной конференции  
«Перспективные материалы с иерархической структурой  
для новых технологий и надежных конструкций»  
19-23 сентября 2016 г., Томск, Россия.  
ИФПМ СО РАН, 2016. – 488 с.

«Мероприятие проведено при финансовой поддержке Российского  
фонда фундаментальных исследований, Проект №16-08-20575\16 г»

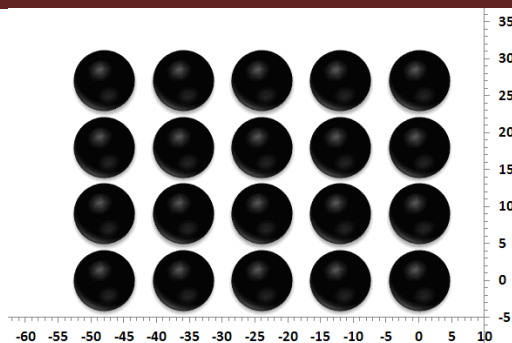


Рис.1. Структура пористого элемента.

Как показывают проведенные вычисления, поле отталкивания в системе наночастица - молекула метана является более мощным. Поэтому более подвижные атомы гелия ближе подходят к покоящимся частицам и, имея большую скорость среднего теплового движения, лучше проникают через пористую структуру. Поэтому, в результате, мы имеем коэффициент проницаемости для гелия 68% против 16% для метана.

#### Литература:

1. Panin V.E. The physical mesomechanics of mass transfer in biological membranes and nanostructural materials / V.E. Panin, V.E. Egorushkin, L.E. Panin // International Journal of Terraspace Science and Engineering. – 2010. – Vol. 3, № 1. – P 39-61.

Работа выполнена в рамках Программы повышения конкурентоспособности Томского государственного университета и при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №16-19-00089).

#### ДВИЖЕНИЕ МОЛЕКУЛ ЧЕРЕЗ МОДИФИЦИРОВАННЫЕ НАНОТРУБКИ

Бубенчиков А.М.<sup>1,3</sup>, Бубенчиков М.А.<sup>1,2</sup>, Фридман О.Э.<sup>1</sup>,  
Тарасов Е.А.<sup>1</sup>, Худобина Ю.П.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>НИ Томский государственный университет, Томск, Россия,

<sup>2</sup>ООО «Газпром трансгаз Томск», Томск, Россия,

<sup>3</sup>Научно-исследовательский институт прикладной математики и механики ТГУ, Россия  
michael121@mail.ru, ms.friol@mail.ru, diomedis@mail.ru, hudobina@mail2000.ru

В настоящее время большой интерес представляют нанотрубки, имеющие особую структуру и физико – химические свойства. В рамках ньютоновского подхода изучается динамика молекул, проходящих через открытую нанотрубку. В реальных ситуациях, когда углеродная сеть не замыкается сама на себя, как это бывает в случае открытой нанотрубки, на краях сети в позициях атомов углерода выстраиваются атомы других веществ, в частности азота и фтора. Такой случай формирования кристаллической сети называют пассивацией соответствующими атомами. Целью настоящей работы было исследование прохождения атомов гелия через открытую нанотрубку, края которой были пассивированы азотом или фтором.

Углеродные нанотрубки представляют интерес для задач фильтрации и адсорбции газов из смесей. С точки зрения построения модели силового взаимодействия, однослойная нанотрубка является объектом, один из линейных размеров которого много меньше двух других, и составляет значения порядка размера (диаметра) атома углерода. В рамках модели континуального описания это позволяет рассматривать их как двумерные объекты. Однако, в настоящей работе мы воспользуемся дискретным описанием энергетического состояния каркаса трубки, при котором вандерваальсовские влияния от узлов структуры трубки будут подобны воздействиям от сферического источника. Таким образом, атомы углерода выстраиваются на

## 10. Материалы и реагенты для повышения нефтеотдачи, транспортировки нефти и переработки углеводородного сырья

поверхности трубки в один слой в гексагональном порядке. Влияние кристаллической поверхности трубки мы заменяем совокупным влиянием отдельных атомов углерода, находящихся в узлах кристаллической сети. Воздействие же трубки на перемещающийся атом гелия есть сумма воздействий каждого атома углерода кристаллической структуры. Поэтому результирующее воздействие может быть определено и представлено в виде потенциала Леннарда-Джонса. В рассматриваемом случае уравнения движения атома гелия есть уравнения динамики частицы в поле вандервальсовских сил, определенных совокупным влиянием атомов углерода, составляющих кристаллическую структуру трубки. Эти уравнения интегрируются численно с использованием метода Рунге – Кутты четвертого порядка точности. Результаты расчетов получены методом одиночной (пробной) частицы. Движение пробной частицы определяется девятью параметрами, среди которых масса молекулы или атома, силовые параметры  $\epsilon$  и  $\sigma$  и шесть начальных параметров: три начальные координаты и три начальные компоненты скорости. Если мы фиксируем сорт частицы, то мы задаем первых три параметра. При этом все равно задача прохождения через трубку остается многопараметрической. Поэтому рассматриваются лишь движения, параллельные оси трубки.

Расчеты показали, что пассивация оказывает незначительное влияние на характер движения атома гелия внутри углеродной нанотрубки. Молекулы гелия, пущенные по оси трубки, имеют гладкий профиль скорости, который определяет сначала ускорение частицы, а затем ее торможение. При этом на выходе – та же скорость, что и на первоначальном удалении от трубки. Однако при более низких начальных скоростях атомов гелия вклад пассивации в процессы прохождения или непрохождения открытой нанотрубки является более значительным. Так, например, при пассивации фтором атом гелия, вошедший в трубку не по осевой линии со скоростью  $V_0=260$  м/с, выходит из трубки в обратном направлении, т.е. трубка для неосевых атомов становится непроницаемой. При нецентрированном входе в трубку молекулы испытывают удары об энергетический барьер атомов углеродного каркаса.

Таким образом, во всех представленных расчетах мы имеем вход молекул по траекториям, параллельным оси трубки. Как показывают вычисления, угол выхода траектории по отношению к оси трубки является непредсказуемым. Пассивация азотом и фтором оказывает локальное влияние на динамику молекул и практически не оказывает влияние на проходимость трубок. Также при малых скоростях в большей мере проявляются стохастические свойства движения на выходе из трубки, а при больших все становится более детерминированными.

Работа выполнена в рамках Программы повышения конкурентоспособности Томского государственного университета и при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №16-19-00089).

### **ОЦЕНКА ЭКОЛОГИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ РАЙОНОВ ПОСТОЯННОЙ ДОБЫЧИ И ТРАНСПОРТИРОВКИ НЕФТЕЙ ЗАПАДНОЙ СИБИРИ ПО СОСТАВУ ДОННЫХ ОСАДКОВ БЛИЗКОРАСПОЛОЖЕННЫХ ОЗЕР**

Красноярова Н.А.<sup>1,2</sup>, Русских И.В.<sup>1</sup>, Стрельникова Е.Б.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт химии нефти СО РАН, Томск, Россия,

<sup>2</sup>НИ Томский политехнический университет, Томск, Россия

natalex@ipc.tsc.ru

Длительное время разрабатываемые районы нефтедобычи, несомненно, подвергают дополнительному риску нефтяного загрязнения природные объекты, находящиеся в непосредственной близости к ним. Экологическая оценка опасности