

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»

**ПРОНИЦАЕМОСТЬ РЕГУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ
ИЗ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ**

Бубенчиков М.А.^{1,2}, Бубенчиков А.М.^{1,3}, Шерстобитов А.А.¹,
Малоземов А.В.¹, Худобина Ю.П.³

¹НИ Томский государственный университет, Томск, Россия,

²ООО «Газпром трансгаз Томск», Томск, Россия,

³Научно-исследовательский институт прикладной математики и механики ТГУ, Россия
sherstobitovalexandr@gmail.com, michael121@mail.ru, avmalozemov@gmail.com,
hudobina@mail2000.ru

Компактированные материалы уже находят применения для задачи разделения газов, очистки воды, как катализаторы в химических процессах и имеют большие перспективы использования в современных высокотехнологических процессах. Многообразие форм частиц и способов их соединения делают задачу исследования проницаемости таких материалов чрезвычайно сложной. Многие аспекты работы мембран из компактированных наночастиц схожи с работой биологических мембран [1].

В настоящей работе теоретическими методами изучается прохождение молекул через регулярную структуру из идеальных сферических наночастиц. Целью исследования является изучение дифференциальной проницаемости слоя сферических наночастиц в отношении атомов гелия и молекул метана.

Рассматриваемая структура определяется совокупностью сферических наночастиц одинакового размера, центры которых лежат в одной плоскости. Для используемых частиц имеется потенциал взаимодействия наночастица-молекула В. Я. Рудяка, С.Л. Краснолуцкого:

$${}^3U(\rho_j) = {}_9U(\rho_j) - {}_3U(\rho_j). \quad (1)$$

Здесь ρ_j – расстояние от центра j -ой частицы пористой структуры до пробной молекулы:

$${}_9U(\rho) = C_9 \left\{ \left[\frac{1}{(\rho - \rho_p)^9} - \frac{1}{(\rho + \rho_p)^9} \right] + \frac{9}{8\rho} \left[\frac{1}{(\rho - \rho_p)^8} - \frac{1}{(\rho + \rho_p)^8} \right] \right\}; \quad (2)$$

$${}_3U(\rho) = C_3 \left\{ \left[\frac{1}{(\rho - \rho_p)^3} - \frac{1}{(\rho + \rho_p)^3} \right] - \frac{3}{2\rho} \left[\frac{1}{(\rho - \rho_p)^2} - \frac{1}{(\rho + \rho_p)^2} \right] \right\}. \quad (3)$$

Здесь ρ_p – радиус наночастицы, $C_3 = \frac{2\pi\varepsilon_{12}\sigma_{12}^6}{3V}$, $C_9 = \frac{4\pi\varepsilon_{12}\sigma_{12}^{12}}{45V}$, V – объем тела, приходящийся на один атом кристаллической структуры.

В качестве пористого элемента рассмотрим систему из 20 наночастиц радиуса $r = 4$ нм, в каждой из которых находится $6.4 \cdot 10^4$ молекул углерода, образующих 4 туннеля для двигающейся частицы. Частицы принимаются стационарными, а перемещающаяся молекула (атом) двигаются в совокупном вандерваальсовском поле двадцати наночастиц, следуя основному уравнению динамики Ньютона. Силовое воздействие от каждой наночастицы определяется градиентом потенциала (1) – (3). Уравнение динамики перемещающейся частицы интегрируется с применением технологии Рунге-Кутты.

Поместим начало координат в одну из частиц правого столбца. Пробные молекулы двигаются в положительном направлении оси ОУ с расстояния 10 нм. Проведенные расчеты показали, что проницаемость по гелию рассматриваемого фильтрующего элемента составляет порядка 68% (пробная молекула гелия пущена с позиций: $x_0 = -4.2; -19.3; -31.3; -43.2$ оси ОХ.). При пуске пробных молекул метана с позиций: $x_0 = -4.9; -17.8; -30.8; -41.8$ оси ОХ, было установлено, что проницаемость по метану рассматриваемого фильтрующего элемента составляет порядка 16%.

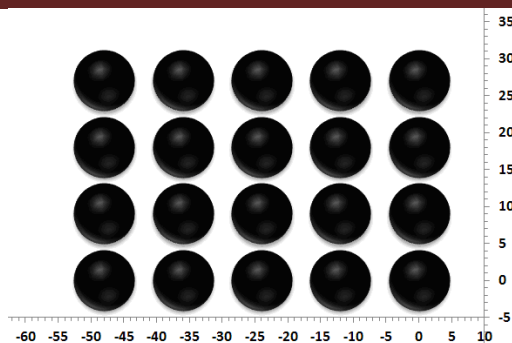


Рис.1. Структура пористого элемента.

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.^{1,3}, Бубенчиков М.А.^{1,2}, Фридман О.Э.¹,
Тарасов Е.А.¹, Худобина Ю.П.³

¹НИ Томский государственный университет, Томск, Россия,

²ООО «Газпром трансгаз Томск», Томск, Россия,

³Научно-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