На правах рукописи



Тарасов Егор Александрович

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НАНООБЪЕКТОВ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДА С КОМПОНЕНТАМИ ПРИРОДНОГО ГАЗА

01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2017

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» на кафедре теоретической механики.

Научный руководитель**:** доктор физико-математических наук, профессор **Бубенчиков Алексей Михайлович**

Официальные оппоненты:

Алтухов Юрий Александрович, доктор физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный педагогический университет», кафедра теоретических основ информатики, профессор

Смовж Дмитрий Владимирович, кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория разреженных газов, старший научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук

Защита состоится 22 сентября 2017 года в 14 часов 30 минут на заседании диссертационного совета Д 212.267.13, созданного на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36 (корпус № 10 (НИИ ПММ), аудитория 239).

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке и на официальном сайте федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» www.tsu.ru.

Материалы по защите диссертации размещены на официальном сайте ТГУ: http://www.ams.tsu.ru/TSU/QualificationDep/co-searchers.nsf/newpublicationn/TarasovEA22092017.html

Автореферат разослан « _____ » июля 2017 года

Ученый секретарь
диссертационного совета — Пикущак
кандидат физико-математических наук — Елизавета Владимировна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Несмотря на космическое обилие гелия, его наземные источники ограничены. Гелий широко используется в промышленных, медицинских целях, а также для проведения исследований. Первичное производство гелия осуществляется с помощью криогенной дистилляции или напорной адсорбции из природного газа. Однако лишь немногие месторождения природного газа имеют концентрации гелия достаточные для его рентабельного выделения указанными методами. Как альтернатива этим подходам выступает мембранное разделение газов. Эта технология имеет низкие затраты на электроэнергию, поскольку при её реализации не требуется изменения агрегатного состояния вещества и не требуется также такого количества механизмов, как при использовании других методов. Наиболее эффективны мембранные технологии при повторном выделении гелия из смесей, являющихся побочным продуктом рабочих циклов. В настоящее время различные нанообъекты и материалы на их основе представляют особый научный интерес, а кроме того применение подобных материалов в различных отраслях производства представляется крайне перспективным. Крайне интересной представляется проблематика выделения гелия из природного газа с помощью углеродных наноструктур. При конструировании нанопористых мембран могут быть использованы открытые нанотрубки и фуллерены. Нанотрубки были открыты позже графенов и фуллеренов. Это протяженные цилиндрические структуры диаметром от одного до нескольких десятков нанометров и длиной до нескольких микрон, состоящие из одного или нескольких свернутых в трубку графеновых слоев. Проведенные исследования показали, что класс углеродных нанотрубок по разнообразию структур больше класса фуллеренов и тем более, графенов. Настоящее диссертационное исследование посвящено взаимодействию молекул и атомов газовых смесей с нанотрубками и фуллереном. Большая часть исследований относится к проницаемости самих нанотрубок и систем параллельно уложенных структур из открытых нанотрубок.

Степень разработанности темы исследования. Эффективная технология разделения смеси предложена в работах В.М. Фомина (с соавторами). Технология заключается в поглощении атомов гелия ценосферами. Получено экспериментальное обоснование технологии и дается теоретическое описание эффекта поглощения гелия. Поскольку ценосфера является макроскопическим объектом, то теория опирается на развитые авторами модели сплошной среды. Мембранные же технологии высокой селективности связаны с применением нанопористых мембран или сверхтонких компактированных слоев. В том и в другом случае режим движения среды является здесь свободномолекулярным, поскольку характерным размером в такой задаче является размер нанопоры или наночастицы (наноразмер), а средняя длина свободного пробега молекулы газовой фазы больше на два порядка. При этом, однако, элементы структуры слоя могут быть смоделированы с использованием континуального подхода распределения энергии по их поверхности или объему. Значительных результатов в этом отношении добились В. Я. Рудяк, С. Л. Краснолуцкий, определив потенциалы взаимодействия молекула–наночастица, наночастица–наночa-

стица. Такие смешанные молекулярно-континуальные (в отношении элементов структуры) подходы используются в настоящей работе по теоретическому моделированию проницаемости слоев, и они позволяют получить надежные результаты по степени разделения бинарных газовых смесей.

Проницаемость полимерных слоев, а также углеродных нанопористых структур, изучается в настоящее время преимущественно экспериментальными методами.

Проводимые экспериментальные работы, связанные с нанотехнологиями, являются очень дорогостоящими. Поэтому для разработки эффективной и производительной мембраны целесообразно использовать теоретические подходы. Автор настоящей работы имел возможность проводить лишь математическое моделирование по физике взаимодействия молекул с наночастицами и прохождения их через нанопоры.

Цель и задачи исследования. Цель работы заключается в разработке математических моделей взаимодействия молекулярных компонент природного газа с углеродными наночастицами, а также их композициями и создании на их основе методики расчета относительной и абсолютной проницаемости для 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.

Научная новизна исследования, Настоящая диссертационная работа направлена на разработку теории расчета проницаемости слоев составленных углеродными наноструктурными элементами (фуллеренами и нанотрубками). В виду отсутствия законченных теоретических разработок, выполненных в этом направлении, работа имеет большое теоретическое, а также практическое значение. Автором была создана новая математическая модель взаимодействия молекул и атомов с фуллереновыми частицами, а также с нанотрубками. В работе предложен новый способ, позволяющий определить положение атомов углерода на фуллереновой сфере, который заключается во впервые предложенной математической модели расстановки узлов на фуллереновой сфере. Впервые, коллективом с участием автора, была создана и реализована методика расчета относительной и абсолютной проницаемости укладок открытых одностенных и двухстенных нанотрубок. Получены результаты по схеме подсчета количества сорбционных молекул около нанотрубок и фуллеренов.

Теоретическая и практическая значимость работы. Поскольку гелий является элементом, используемым во многих современных технологиях и добывается из природного газа, то задача разработки экономичных и эффективных технологий его выделения является важной практической задачей. Существует множество технологий разделения газов в частности криогенные, сорбционные, мембранные, сверхзвуковой сепарации и т.д. При этом, мембранные технологии обещают быть наиболее экономичными. Однако именно эти технологии требуют наибольшей теоретической проработки вопроса из-за малой изученности явлений прохождения молекул и атомов через нанопоры

в ультратонких проницаемых слоях. Результаты численных расчётов диссертационного исследования нашли применение работе лаборатории «Молекулярной динамики» НИИ прикладной математики и механики Томского государственного университета (г. Томск), что подтверждается актом внедрения методики расчёта проницаемости ультратонких квазиоднородных нанопористых слоев.

Методология и методы исследования. В работе используется единый подход для достижения глобальной цели; состояла в разработке конструкции углеродной мембраны для достижения эффективного разделения смесей, содержащих инертные компоненты. Элементами конструирования выбраны фуллерены и углеродные нанотрубки. В этом случае, как поры, так и элементы пакетирования слоев имеют наноскопические размеры (10^{-9} м). В тоже время средняя длина свободного пробега молекул в нормальных условиях составляет величину 10^{-7} м, поэтому режим течения в окрестностях столь малых пор является свободномолекулярным. В связи с этим, для описания движения молекул в порах в равной степени, как и для расстановки узлов по фуллереновой сфере были применены подходы и методы классической механики, составляющие теоретическую основу молекулярной газодинамики. Обычно применение методов молекулярной газодинамики связано с реализацией большого количества статистических испытаний. Однако в настоящей работе мы попытались уменьшить число случайных выборок, как по скоростям, так и по прицельным расстояниям 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 поход в определении энергии взаимодействия молекул с элементами 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 и двустенными углеродными трубками и фуллеренами.

Положения, выносимые на защиту:

1. Математическая модель взаимодействия молекулы (атома) с множеством фуллереновых частиц.
2. Математическая модель расстановки узлов на фуллереновой сфере.
3. Методика расчета относительной и абсолютной проницаемостей различных укладок открытых одностенных и двухстенных нанотрубок.
4. Схема для подсчета количества сорбционных молекул около нанотрубок и фуллеренов.

Степень достоверности результатов работы обеспечена строгими формулировками математических постановок, адекватностью вычислительных моделей физических процессов, оценкой погрешности расчетов, тестированием вычислительных алгоритмов, а также контролем накопившихся ошибок вычислений практически при каждом выполненном расчете.

Апробация результатов работы. Основные результаты диссертационного исследования обсуждались на следующих научных мероприятиях: Научной конференции студентов и школьников, посвященной 65-летию механико-математического факультета (Томск, 2013), IV Международной научно-технической конференции молодых ученых, аспирантов и студентов с международным участием «Высокие технологии в современной науке и технике» (Томск, 2015), VI Всероссийской научной конференции с международным участием «Теплофизические основы энергетических технологий» (Томск, 2015), Международной молодежной научной конференции «Тепломассоперенос в системах обеспечения тепловых режимов энергонасыщенного технического и технологического оборудования» (Томск, 2016), VII Всероссийской научной конференции с международным участием «Теплофизические основы энергетических технологий» (Томск, 2016).

Публикации. По теме диссертации опубликованы 13 печатных работ, в том числе 3 статьи в журналах, входящих в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени доктора и кандидата наук, 4 статьи в изданиях, индексируемых в базе данных Web of Science и Scopus, 1 свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ, 5 публикаций в сборниках материалов международных и всероссийских научных 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. Кроме того, вместе с руководителем автор выполнял работы в рамках двух проектов государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации в целях повышения их конкурентной способности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованных источников и литературы, и приложений. Работа содержит 121 страницу, 84 рисунка, 5 таблиц и 3 приложения. Список использованных источников и литературы включает 93 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 историю открытия, свойства, методы получение и применение аллотропных модификаций углерода, таких как графен, фуллерены и углеродные нанотрубки.

Во второй главе описаны наиболее часто встречаемые потенциалы межмолекулярного взаимодействия, приведены важные свойства природного газа, как смеси различных газов. Отдельной частью главы является представление модифицированного потенциала Леннарда–Джонса и его применение для описания простейшего энергетического барьера. Для описания стационарного поля консервативных сил нормализованный потенциал Леннарда–Джонса имеет вид:

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

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:

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

Преимущество выражения (2) в том, что оно позволяет интегрировать распределение силовых центров-источников поля по объему тела различной формы. Чтобы смоделировать взаимодействие молекулы и наночастиц, мы сближаем наночастицы на расстояние порядка нанометров и исследуем способность пробных молекул проникать через полученный зазор. Расчетами был найден размер пор материала, обеспечивающий прохождение атомов гелия и не прохождение более крупных молекул метана, азота и других газов.

В параграфе 2.6 представлена математическая модель взаимодействия перемещающейся молекулы с множеством фуллереновых частиц:

$$m\frac{du}{dt} = \sum_{j=1}^{N} X_j, \quad m\frac{dv}{dt} = \sum_{j=1}^{N} Y_j, \quad m\frac{dw}{dt} = \sum_{j=1}^{N} Z_j. \tag{3}$$

Здесь X_j, Y_j, Z_j – проекции силы взаимодействия молекулы и i-ой наночастицы, которые определяются следующим образом:

$$X_j = a_j \frac{x - x_j^0}{r_j} m, \quad Y_j = a_j \frac{y - y_j^0}{r_j} m, \quad Z_j = a_j \frac{z - z_j^0}{r_j} m, \tag{4}$$

где a_j – величина ускорения, приобретаемого пробной молекулой под действием j-й наночастицы, r_j – расстояние от центра отдельной частицы до центра молекулы. С учетом потенциала, найденного в работе В. Я. Рудяка[1], величина ускорения молекулы, входящая в формулы (4), запишется следующим образом:

---

[1] Рудяк В. Я. Статистическая аэрогидромеханика галогенных и гетерогенных сред. Новосибирск, 2004. Т. 1 : Кинетическая теория. 320 с.

$$a_j = -\frac{\pi a C_{12}}{5 S_1 r_j^2 m}\left(\frac{1}{\left(r_j - a\right)^{10}} - \frac{1}{\left(r_j + a\right)^{10}}\right) - \frac{2\pi a C_{12}}{S_1 r_j m}\left(\frac{1}{\left(r_j - a\right)^{11}} - \frac{1}{\left(r_j + a\right)^{11}}\right) + \\ + \frac{\pi a C_6}{2 S_1 r_j^2 m}\left(\frac{1}{{}_j\left(r - a\right)^{4}} - \frac{1}{\left(r_j + a\right)^{4}}\right) + \frac{2\pi a C_6}{S_1 r_j m}\left(\frac{1}{\left(r_j - a\right)^{5}} - \frac{1}{\left(r_j + a\right)^{5}}\right). \quad (5)$$

Здесь a – радиус фуллерена, m – масса летящей молекулы, S_1 – площадь, приходящая на один атом углерода в кристалле фуллерена; $C_{12} = 4\varepsilon\sigma^{12}$, $C_6 = 4\varepsilon\sigma^6$; $\varepsilon\sigma$ – параметры *LJ*-потенциала.

В третьей главе изложены результаты математического моделирования взаимодействия фуллереновой частицы с различными компонентами природного газа. Была рассмотрена континуальная модель фуллереновой частицы C_{60}. Энергия взаимодействия фуллереновой сферы определяется интегралом:

$$U(r) = q\int_s V_1\left(\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\theta'}\right)ds'. \quad (6)$$

Здесь $V_1(\rho)$ – модифицированный *LJ*-потенциал парных взаимодействий, q – плотность распределения атомов углерода на поверхности частицы, $ds' = H_\varphi d\varphi' H_\theta d\theta'$ – элемент площади на поверхности частицы, $H_\varphi = r'\sin\theta'$, $H_\theta = r'$ – коэффициенты Ляме. Подставляя в (6) выражения, определяющие $V_1(\rho)$ и ds', получим:

$$U(r) = 8\pi\varepsilon a^2 q\int_0^\pi \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)\mathrm{th}\left[\left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^{11} - \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^{5}\right]\sin\theta' d\theta', \quad (7)$$

где в нашем случае $\xi = \sqrt{r^2 + a^2 - 2ar\cos\theta'}$, a – радиус фуллерена. Интегрирование в (7) мы провели с использованием формулы трапеций для элементарного участка по углу θ. На рисунках 1, *а*; 1, *б* представлены траектории движения низкоэнергетических атомов около фуллереновой частицы, имеющей однородную энергию на поверхности (континуальная модель частицы).

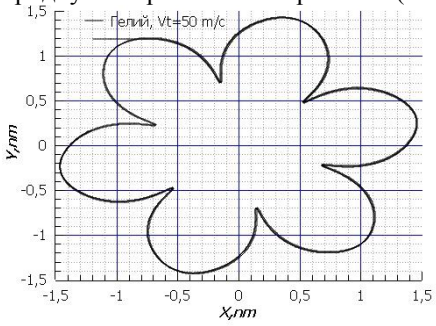


Рис. 1, *а* – Траектория атома гелия около фуллеренновой частицы C_{60} при $v_0 = 50$ м/с

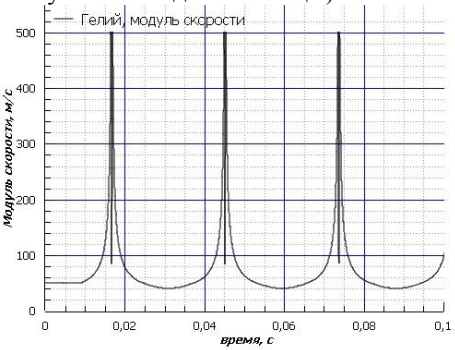


Рис. 1, *б* – Величина абсолютной скорости атома гелия взаимодействующей с фуллеренновой частицей C_{60} при $v_0 = 50$ м/с

В параграфе 3.3 был описан процесс прохождения молекул через пористую сферическую графеноподобную структуру. Предполагая, что поверхностная плотность атомов углерода в такой структуре в два раза меньше, чем в обычном графене, можно рассматривать подобную частицу как основу для материала с выраженной селективностью в отношении разделения газовых смесей.

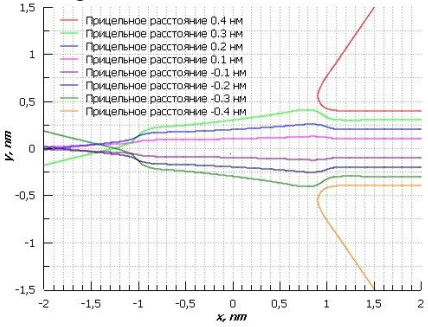


Рис. 2, *а* – Траектории атомов гелия для случая пористой графеновой структуры. Скорость атомов гелия равна 700 м/с, прицельные расстояния показаны на рисунке

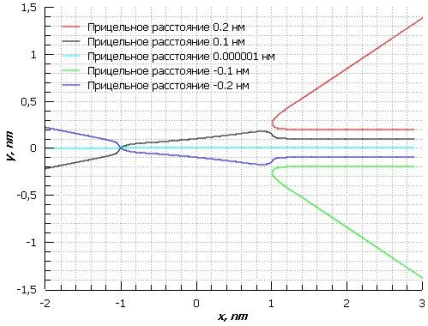


Рис. 2, *б* – Траектории молекул метана для случая пористой графеновой структуры. Скорость молекул равна 850 м/с, прицельные расстояния показаны на рисунке

Как показали расчеты, существуют предельные минимальные скорости прохождения частицы, как для атомов гелия, так и молекул метана. Для гелия эта скорость оказалась ниже и составила величину 700 м/с, для метана 850 м/с. Если учесть, что средняя скорость теплового движения (наиболее вероятная скорость) для гелия 1300 м/с, для метана 650 м/с, то такое различие в предельных скоростях прохождения приводит к достаточно большой степени разделения бинарной смеси CH_4/He.

В параграфе 3.4 диссертационного исследования представлена механическая модель расстановки узлов по фуллереновой сфере. Фуллерен, как и другие макромолекулы углерода, являются поверхностным кристаллом с гексагональным и пентагональным расположением атомов углерода на кристаллической поверхности. Дифференциальные уравнения движения точки по поверхности в проекциях на оси декартовых координат имеют вид.

$$
\begin{aligned}
m\ddot{x}_k &= \sum_{i=1}^{3} X_i + \lambda_i \frac{\partial f}{\partial x_k} - \gamma \left|\lambda_i gradf\right| \frac{\dot{x}_k}{v_k}, \\
m\ddot{y}_k &= \sum_{i=1}^{3} Y_i + \lambda_i \frac{\partial f}{\partial y_k} - \gamma \left|\lambda_i gradf\right| \frac{\dot{y}_k}{v_k}, \\
m\ddot{z}_k &= \sum_{i=1}^{3} Z_i + \lambda_i \frac{\partial f}{\partial z_k} - \gamma \left|\lambda_i gradf\right| \frac{\dot{z}_k}{v_k}, (k = 1,60).
\end{aligned}
\tag{8}
$$

Здесь m – масса атома углерода; x_k, y_k, z_k – проекции радиус вектора положения атома углерода на оси декартовых координат; $\dot{x}_k$, $\dot{y}_k$, $\dot{z}_k$ – проекции скорости точки на те же оси; X_i, Y_i, Z_i – проекции сил упруго деформированной пружины;

γ – коэффициент трения в законе кулоновского трения: $\vec{T} = -\gamma |N| \vec{\tau}$, где $\vec{T}$ – вектор силы трения, $\vec{\tau}$ – орт, направленный в сторону движения точки; N – нормальная реакция поверхности на действие рассматриваемой точки;

$$\lambda = \frac{N}{|gradf|}, \; f(x,y,z) = x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0. \qquad (9)$$

Представленная система из ста восьмидесяти дифференциальных уравнений движения и замыкается шестьюдесятью алгебраическими уравнениями (10). В результате имеем двести сорок уравнений для двухсотсорока неизвестных: $x_k(t)$, $y_k(t)$, $z_k(t)$, $\lambda_k(t)$ (k=1,60). Чтобы начать интегрировать эту систему, необходимо найти удобное выражение для вычисления $\lambda(t)$. Это выражение находится из дифференциального следствия второго порядка, полученного дифференцированием по времени $f(x,y,z)$ = 0 и из всех уравнений движения. Оно имеет вид:

$$\lambda_k = -mU_k^2 / 2R^2, (\mathrm{k} = 1,60). \qquad (10)$$

Решается данная система численно с применением технологии Рунге–Кутты. Решение опирается на базовый шаблон гексагональной сети, состоящий из четырех узлов сети.

В параграфе 3.5 рассмотрено сорбционное движение молекул и атомов при псевдооднородном заселении фуллереновой сферы. Если воспользоваться сферическими координатами и с помощью процедуры ***random*** последовательно выбирать случайным образом углы θ и φ из интервалов [0; π], [0; 2π], то при достаточно большом количестве выборок мы получим однородное заселение частицами по углу φ и сгущающееся к полюсам заселение по θ. Пример такого заселения показан на рисунке 3. Такое заселение нельзя признать вполне однородным.

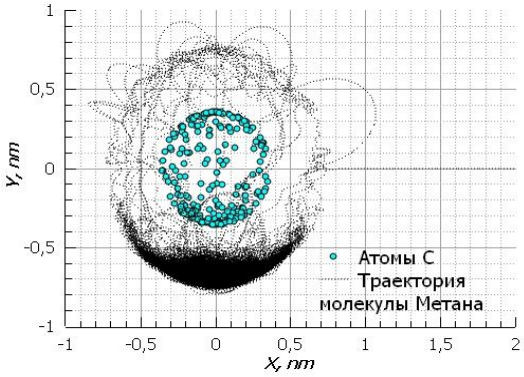


Рис. 3. – Стохастическая модель фуллереновой частицы и сорбционного движения молекулы

В параграфе 3.6 представлено расположение узлов атомов углерода на фуллереновой сфере. Для того, чтобы найти среднее положение углеродных ато-

мов на фуллерене, следует проинтегрировать уравнения движения, определяющие псевдоперемещения каждого из шестидесяти узлов молекулы C_{60} – всего 180 дифференциальных уравнений второго порядка. При применении технологий типа Рунге–Кутты это будет 360 уравнений первого порядка. Решение этих уравнений позволило получить данные по расстановке узлов и далее по сорбционному движению молекул природного газа при реальном расположении атомов углерода на фуллереновой сфере.

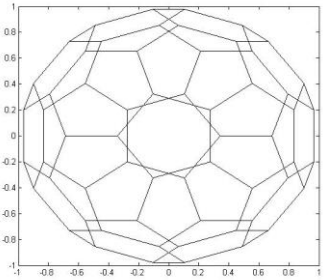


Рис. 4, *а* – Гексо и пентогональная сеть фуллерена, построенная по рассчитанным координатам узлов на единичной сфере

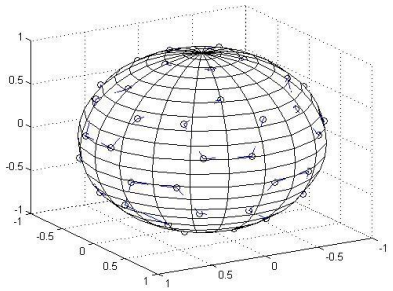


Рис. 4, *б* – Рассчитанные позиции стационарных узлов фуллерена на единичной сфере

Кинематические портреты взаимодействия молекул с фуллереновой частицей при высоких и низких скоростях сближения показаны на рисунках 5, *а* и 5, *б*.

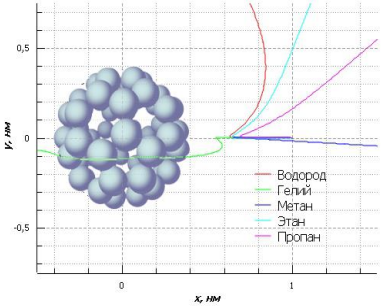


Рис. 5, *а* – Траектории молекул, составляющих смесь природного газа при высокой скорости сближения с фуллереновой частицей. Начальная скорость молекул равна 600 м/с

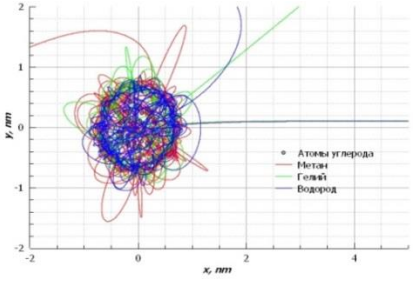


Рис 5, *б* – Траектории молекул при низких скоростях сближения с фуллереновой частицей. Начальная скорость молекул равна 25 м/с, прицельное расстояние равно 0.1 нм

Для тестирования вычисленной технологии мы провели расчет полной энергии пробной молекулы до взаимодействия с фуллереном, во время взаимодействия, а также после того как частица уйдет из поля тяготения фуллерена. В результате оказалось, что величина вносимой ошибки составляет значения порядка пятого знака после запятой (10^{-5} степени).

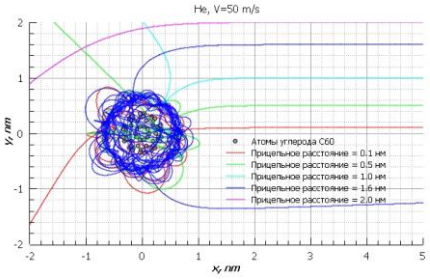


Рис. 6, *а* – Траектории низкоэнергетических атомов He около фуллереновой частицы (начальная скорость молекул равна 50 м/с)

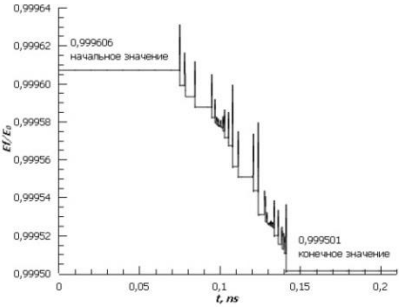


Рис. 6, *б* – Относительное значение полной энергии системы для случая взаимодействия атома гелия с фуллереном

Как видно из рис. 6, *а* если в качестве летящей частицы рассматривается атом гелия радиус её захвата при скорости 50 м/с равен 1,5 нанометра. При этом орбитальное движение также является не долгим и не имеет четко выраженной скорости полета.

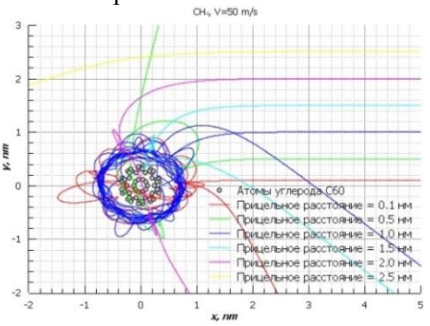


Рис. 7, *а* – Траектории низкоэнергетических молекул CH_4 около фуллереновой частицы (начальная скорость молекул равна 50 м/с)

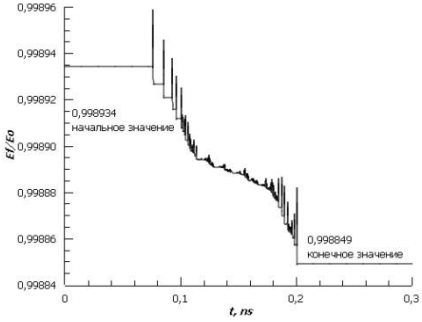


Рис. 7, *б* – Относительное значение полной энергии системы для случая взаимодействия молекулы метана с фуллереном

Ситуация меняется если летящей частицей является более инерционная молекула метана. В этом случае орбитальное движение является существенно более продолжительным и на участке времени отвечающем режиму вращения молекулы около фуллереновой частицы вполне можно выделить орбитальную скорость, для метана она составляет величину 800 м/с.

В параграфах 3.7 и 3.8 приведено определение доли частиц попавших в сорбционную зону фуллерена, а так же определение количества сорбционных молекул. Как показывают расчеты, траектории быстрых молекул, за исключением непосредственной окрестности точки сближения с фуллереном, являются прямолинейными. Траектории низкоэнергетических молекул вне некоторой сорбционной зоны $r < r_з$ (радиус захвата) искривляются, но лишь незначительно. Поэтому, область свободномолекулярного движения около фуллерена разобьем на две: $r_p < r < r_з$ (сорбционная зона) и $r_з < r < r_з + \lambda$ (λ-слой, где λ – средняя длина свободного пробега молекул). После чего, с применением модели прямолинейных траекторий, удобно рассматривать взаимодействие сорбционных молекул с захватывающей их псевдочастицей

радиуса $r_з$, то есть частицей вместе с присоединенной массой сорбционных молекул. Объем λ-внешности сорбционной зоны определяется как объем сферического слоя следующим образом:

$$V_\lambda = \frac{4}{3}\pi\left[\left(r_з + \lambda\right)^3 - r_з^3\right], \tag{11}$$

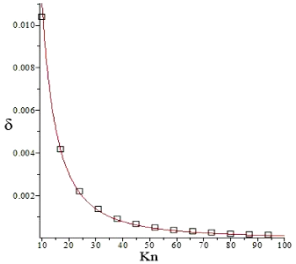


Рис. 8. Доля столкнувшихся с псевдочастицей частицей молекул. Символы – расчет по описанной технологии, сплошная линия – распределение (12)

По определению, $\delta_1 = N'/N$ – безразмерная величина, составляющая долю ударившихся о выделенную сферу молекул. Безразмерная δ_1 может быть функцией только безразмерного комплекса $Kn = \lambda / r_з$. Статистические расчеты, выполненные по модели прямолинейных траекторий, позволили найти для сферической частицы

$$\delta_1 = \frac{4}{3}\frac{1}{\left(1 + Kn\right)^2}. \tag{12}$$

Последняя формула получается из рассмотрения процессов взаимодействия молекул λ-слой с псевдочастицей, слагающихся из фуллерена и сорбционного слоя. Для обоснования последней формулы сделаем следующие построения.

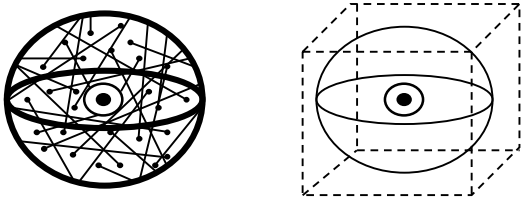


Рис. 9 Псевдочастица, имеющая размер радиуса захвата ($r_з$), окруженная λ-слоем, и отвечающий ей λ-куб

Вокруг сферической частицы строим куб с ребром $2(\lambda + r_з)$, а также λ-сферу, вписанную в куб, соответствующего диаметра. С помощью датчика случайных чисел выбираем начальные координаты молекул, находящихся внутри этого куба. Если молекула не попадает в λ-слой, то запускаем ее в куб случайного выбора повторно. Найденные таким образом координаты будем отмечать индексом «нуль» внизу. После этого каждой из найденных начальных точек случайным образом ставим в соответствие еще одну точку, отвечающую за направление движения молекулы. Координаты этих точек будем

отмечать индексом «один» внизу. Таким образом, для каждой молекулы, которой необходимо приписать начальные координаты и начальное направление скорости движения, датчик случайных чисел будет использован шесть раз.

После того, как определена доля попадающих в сорбционную зону молекул из числа частиц находящихся в λ-слое, окружающем псевдочастицу, мы можем приступить к нахождению числа захваченных фуллереновой частицей молекул. Для этого используем распределение Максвелла по величинам скоростей:

$$f(\upsilon) = \frac{dN}{Nd\upsilon} = \frac{4\upsilon^2}{\sqrt{\pi}}\theta^{3/2}e^{-\theta\upsilon^2} \qquad (13)$$

Здесь f – функция распределения, υ - модуль скорости молекулы, $\theta=m/2kT$, где k – постоянная Больцмана, m – масса молекулы, T – абсолютная температура, N – количество молекул в единице объема, dN – доля молекул, скорости которых находятся в интервале $[\upsilon,\upsilon+d\upsilon]$. Используя (13), мы можем найти вероятность сорбционного захвата молекул фуллереновой частицей:

$$\delta_2 = \frac{4\theta^{3/2}}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\upsilon_{пр}} \upsilon^2 e^{-\theta\upsilon^2} d\upsilon. \qquad (14)$$

Поскольку определяемая формулой (12) есть тоже вероятность, но относящаяся к событию попадания молекул различных энергий в зону захвата, то вероятность сложного события, определяющего захват молекулы, фуллереном определяется как:

$$\delta=\delta_1\delta_2\tilde{\tau}. \qquad (15)$$

Здесь $\tilde{\tau}=\tau/\tau_0$ – время существования сорбционного движения, τ_0 – время обновления динамического состояния около фуллереновой частицы. В случае если мы рассматриваем природный газ, т.е. многокомпонентную смесь простых углеводородов, то доля каждой компоненты в фуллереновом окружении будет определяться по следующему выражению:

$$\delta_{(i)} = \delta_1\delta_2\mu_i\tilde{\tau}. \qquad (16)$$

Здесь μ_i – мольная доля i-ой компоненты в природной смеси. Причем если смесь полная, то $\sum_{i=1}^{n}\mu_i = 1$, где n – число компонент в смеси. В тоже время количества молекул в сорбционной зоне могут быть найдены по формуле $n_i = \delta_1\delta_2\mu_i N_L^{(норм)}V_\lambda\tilde{\tau}$. Здесь V_λ, δ_1, δ_2 определяются соотношениями (11), (12), (14); μ_i - должны быть заданы, поскольку определяют состав конкретной смеси; $N_L^{(норм)}$ – число Лошмидта, определяет количество молекул конкретного газа (в данном случае метана) находящегося при нормальных условиях в единице объема. Величина $\tilde{\tau}$ для сглаженной фуллереновой частицы равна единице.

В четвертой главе диссертационного исследования приведен расчет взаимодействия молекул и атомов компонент природного газа с углеродными нанотрубками и материалами на их основе (представленных в виде укладок этих трубок). В параграфе 4.1 автором рассмотрена одностенная углеродная

нанотрубка, поле потенциала которой оказывало влияние на движение молекул по оси нанотрубки. Расчет потенциала взаимодействия был выполнен с использованием формализма модифицированного *LJ*-потенциала.

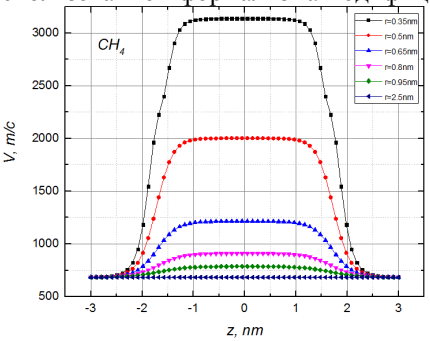


Рис. 10, *а* – Зависимость скорости молекулы CH_4 на оси симметрии одностенной углеродной нанотрубки от осевой координаты при различных значениях радиуса трубки

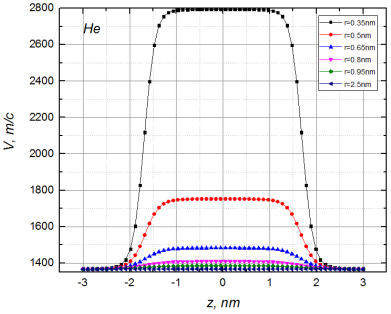


Рис. 10, *б* – Зависимость скорости атома He на оси симметрии одностенной углеродной нанотрубки от осевой координаты при различных значениях радиуса трубки

Как видно из приведенных рисунков из-за большей энергии взаимодействия с трубками, проходящие молекулы метана ускоряются значительно больше в трубках одинакового размера.

В параграфе 4.2 рассмотрены закрытые углеродные нанотрубки. Использовано континуальное описание энергии воздействия от углеродных графеновых структур. В таком подходе закрытая трубка состоит из открытой цилиндрической части и двух фуллереновых полусфер. Такую нанотрубку можно рассматривать как скрученную и замкнутую на себя графеновую сеть, закрытую с обеих сторон фуллереновыми полусферами, а потом сглаженную в отношении распределения энергии по её поверхности.

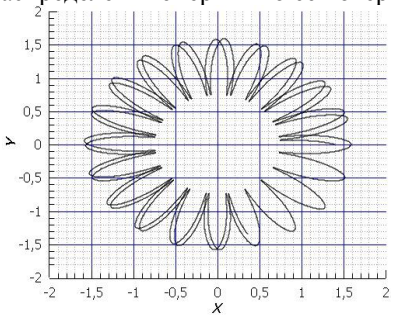


Рис. 11, *а* – Проекция траектории молекулы водорода на плоскости x0y для трубки $l = 10$ нм, $r = 0.5$ нм

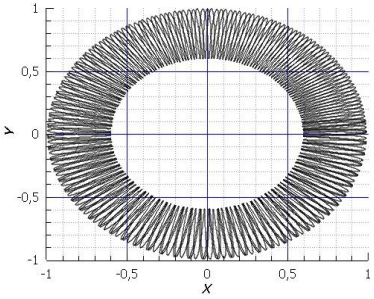


Рис. 11, *б* – Проекция траектории молекулы водорода на плоскости x0y для трубки $l = 10$ нм, $r = 0.35$ нм

Поскольку сглаженная трубка является идеальным геометрическим объектом, и полная энергия системы трубка-молекула остается постоянной, то представленные выше траектории получились тоже идеальными. Если начальная скорость молекулы не лежит в плоскости перпендикулярной оси трубки, то орбита низкоэнергетической молекулы уже не будет плоской.

В параграфе 4.3 и 4.4 был описан метод эквивалентного бесконечного однородного слоя для оценки вероятности прохождения молекул через подобный слой. Метод заключается в нахождении 2D-однородного распределения энергии слоя и в решении 1D-задачи прохождения молекул через слой, а также определении доли прошедших молекул на основании данных о минимальных скоростях прохождения, а также данные о максвелловском распределении молекул по скоростям. В параграфе 4.5 показана связь относительной проницаемости с абсолютным её значением, которое зависит от температуры и давления.

В параграфе 4.6 рассмотрены различные укладки одно и двухстенных углеродных нанотрубок и, с использованием метода бесконечного однородного слоя и проведена оценка их проницаемости в отношении компонент природного газа. Если мы используем регулярную укладку в пространстве, то получившиеся структуры так же будут идеальными и их удобно изучать с использованием математических методов, в частности, метода бесконечного однородного слоя. Получившиеся пространственные конструкции, содержащие непроходимые для молекул скопления атомов углерода и проницаемые наноразмерные поры интересы с точки зрения прохождения газа через сконструированные слои.

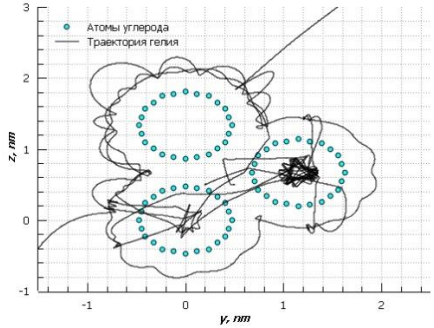


Рис. 12, *а* – Две траектории движения низкоэнергетических атомов гелия около триплета трубок радиуса a = 0,5 нм, при начальной скорости равной 100 м/с

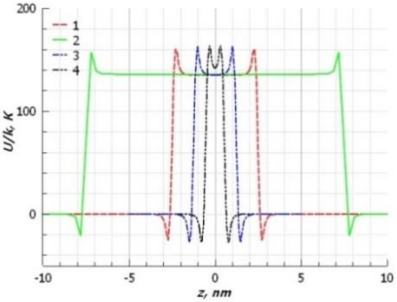


Рис. 12, *б* – Форма барьера при различной длине трубок, 1 – 5 нм, 2 – 15 нм, 3 – 3 нм, 4 – 1,136 нм. Здесь U/k – относительная энергия, измеренная в кельвинах, k – постоянная Больцмана

На рис. 12, *а* представлены две траектории низкоэнергетических атомов гелия, имеющих начальную скорость 100 м/с и различные стартовые позиции. Молекулы были пущены через укладку вдоль осей нанотрубок примерно в её центр, однако не сразу вышли из слоя, составленного трубками, а предварительно были вовлечены в сорбционное движение. В реальности существует равновесие между молекулами покинувшими структуру и вовлеченными в сорбционное движение, поэтому в принципе, можно учесть вклад сорбционных молекул в энергию барьера. На рис. 12, *б* показан энергетический портрет укладки (энергия осреднённая по поверхности слоя укладки). Видно, что

форма барьера остается инвариантной относительно длины трубок, составляющих слой. Расчеты показывают, что проницаемость трубки длиной 1,136 нм такая же, как и трубки 10^3 нм.

Практические расчеты позволяют установить, что если при определенной скорости молекула проходит укладку нанотрубок, то она ее проходит и при большей величине скорости. 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. 13, *а*. На следующем рисунке представлены распределения коэффициентов проницаемости также для гелия и метана. Из рис. 13, *б* видно, что при $0{,}3 \le h \le 1{,}0$ нм структура дает хорошее разделение по коэффициенту проницаемости, т.е. работает, как сепаратор.

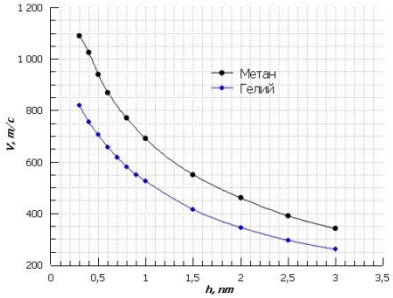


Рис. 13, *а* – Предельная скорость прохождения треугольной укладки

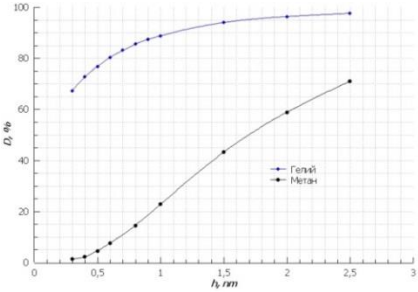


Рис. 13, *б* – Кривая проницаемости треугольной укладки нанотрубок в отношении атомов гелия и молекул метана

Рассмотрим теперь два варианта прямоугольных укладок – прямоугольная укладка одностенных трубок и такая же укладка, но уже составленная из двустенных трубок.

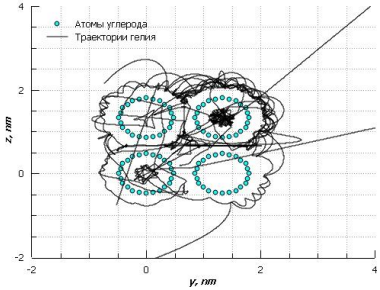


Рис. 14, *а* – Траектории движения низкоэнергетических атомов в случае их сближения с четырьмя одностенными трубками радиуса $a = 0{,}5$ нм

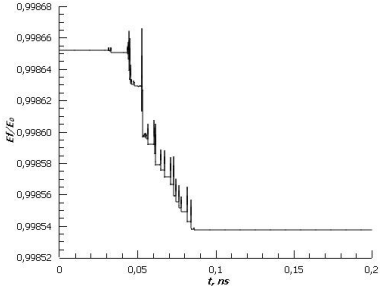


Рис. 14, *б* – Относительное значение полной энергии системы для случая взаимодействия атома гелия с четырьмя одностенными нанотрубками

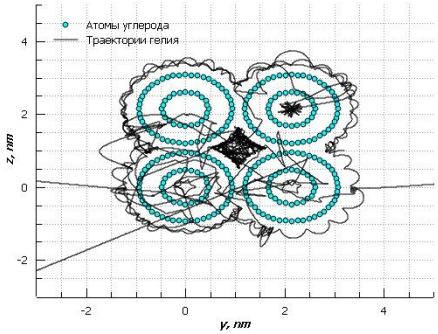


Рис. 15, *а* – Траектории движения низкоэнергетических атомов гелия в случае их сближения с четырьмя двустенными трубками радиуса $a_1 = 0{,}5$ нм, $a_2 = 1$ нм

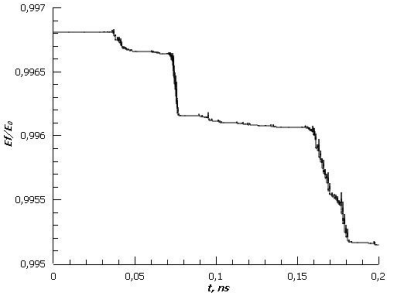


Рис. 15, *б* – Относительное значение полной энергии системы для случая взаимодействия атома гелия с четырьмя двустенными нанотрубками

На рис. 14, *а* и 15, *а* 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. 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 минимальных скоростей для атомов гелия и молекул метана для рассматриваемых прямоугольных укладок приведены на рис. 16, *а* и 16, *б*. На рисунках 17, *а* и 17, *б* представлены распределения по коэффициентам проницаемости также для гелия и метана. Из них видно, что при $0{,}3 \le h \le 1{,}0$ нм структура дает хорошее разделение по коэффициенту проницаемости, т.е. работает как сепаратор.

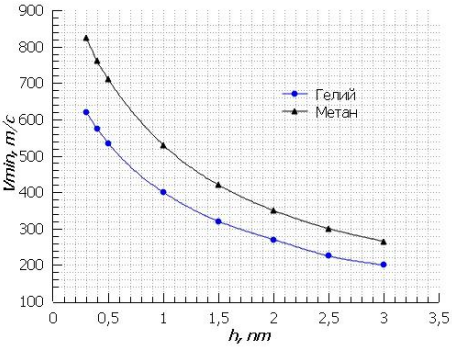


Рис. 16, *а* – Предельная скорость прохождения прямоугольной укладки одностенных нанотрубок

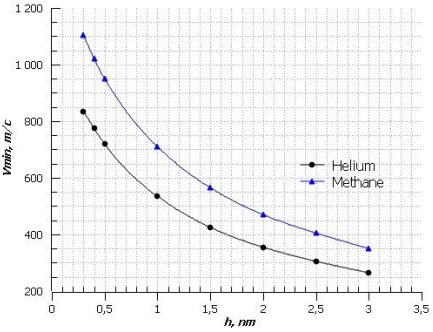


Рис. 16, *б* – Предельная скорость прохождения прямоугольной укладки двустенных нанотрубок

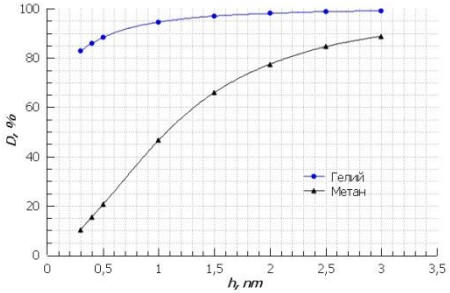


Рис. 17, *а* – Кривая проницаемости прямоугольной укладки одностенных нанотрубок в отношении атомов гелия и молекул метана

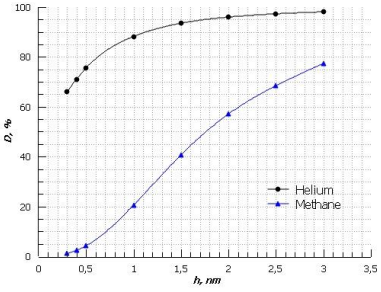


Рис. 17, *б* – Кривая проницаемости прямоугольной укладки двустенных нанотрубок в отношении атомов гелия и молекул метана

Под степенью разделения конкретной двухкомпонентной смеси будем понимать отношение соответствующих проницаемостей. Как видно из рисунков 17, *а* и 17, *б*. и приведенной ниже таблицы 1 двухстенные трубки существенно лучше сепарируют конкретную двухкомпонентную смесь, в сравнении с одностенными трубками.

Таблица 1. Степень разделения метаново-гелиевой смеси

Дистанция между поверхностями, нм	*h = 0,3*	*h = 0,5*	*h = 1,0*	*h = 1,5*	*h = 2,0*
Двухстенные трубки	65	20	4,4	2,3	1,6
Одностенные трубки	8,3	4,5	2,6	1,5	1,3

Проведенные расчеты позволяют для заданного сорта молекул найти предельную минимальную скорость прохождения однородного слоя и по её величине оценить степень прохождения молекул через этот слой. Сопоставляя полученные для различных компонент исходной смеси величины проницаемостей, мы можем сделать заключения о селективных свойствах слоя нанотрубок и структур созданных на их основе. В настоящей работе установлено, что, для всех рассмотренных укладок трубок, слой работает как сепаратор при величинах сближения трубок *h* от 0,3 до 1 нм, но наибольший эффект по степени разделения дают укладки двустенных трубок.

В параграфе 4.7 представлен порядок определения доли частиц, попавших в сорбционную зону закрытой нанотрубки. Будем считать, что продольный размер нанотрубки много больше её радиуса. Тогда без учета концевых эффектов объем λ-внешности сорбционной зоны трубки найдется как объем цилиндрического слоя:

$$V_{\lambda} = \pi h\left[\left(r_{э} + \lambda\right)^2 - r_{э}^2\right]. \qquad (17)$$

Здесь h – длина трубки. Величина $r_{э}$ (внешняя по отношению к трубке граница сорбционной зоны) будет определена как радиус захвата летящей молекулы, то есть как максимальное прицельное расстояние еще обеспечивающее захват молекулы трубкой. Таким образом, решая задачу о цилиндрической мишени, имеющей поперечный размер $r_{э}$ мы можем найти долю столкнувшихся с этой мишенью молекул:

$$\delta_1 = \frac{2}{3}\left(\frac{1}{5+Kn}\right). \quad (18)$$

Здесь $Kn=\lambda/r_э$ – число Кнудсена, определенное по размеру сорбционной зоны. Принимая так же, как и в случае фуллереновой частицы, что существует такая предельная скорость, выше которой летящая пробная молекула проходит мишень насквозь, либо отражается от энергетического поля трубки, мы, исходя из распределения Максвелла, можем указать долю молекул захваченных полем трубки из числа тех молекул, что попали в цилиндрическую мишень:

$$\delta_2 = \frac{4\theta^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\upsilon_{пр}} \upsilon^2 e^{-\theta\upsilon^2} d\upsilon. \quad (19)$$

Здесь $\theta=m/2kT$, k – постоянная Больцмана, m – масса молекулы, T – абсолютная температура. Тогда для мономолекулярной среды доля вовлеченных в сорбционное движение молекул будет равна произведению вероятностей:

$$\delta=\delta_1\delta_2\tilde{\tau}. \quad (20)$$

В то же время количества молекул находящихся в сорбционной зоне в случае, если частица (трубка) окружена многокомпонентной смесью будут:

$$n_i = \delta_1\delta_2\mu_i N_L^{(норм)} V_\lambda \tilde{\tau}. \quad (21)$$

Здесь μ_i – мольные концентрации компонентов смеси; $N_L^{(норм)}$ – число Лошмидта при нормальных условиях в единице объема. Для реальных трубок величина $\tilde{\tau}$ определяется диапазоном от 0,3 до 0,5.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В работе описаны аллотропные модификации углерода – графен, фуллерен и углеродные нанотрубки. Приведены способы получения данных структур, их возможное применение в науке и технике, а так же перечисляются некоторые их свойства. Показано, что поверхностные кристаллы на основе углерода обладают рядом интересных физико-химических свойств, которые можно использовать для процессов разделения компонентов природного газа.

Кроме этого, в работе описаны имеющиеся подходы по определению энергии межмолекулярного взаимодействия. Отмечено, что для описания динамики атомов гелия наиболее подходящим является потенциал Леннарда–Джонса.

С использованием модифицированного *LJ*-потенциала была рассмотрена задача о простейшем энергетическом барьере для компонент природной смеси газов, решение которой позволяет утверждать, что подход молекулярной является пригодным для изучения задач о прохождении молекул через нанопористые структуры. Далее рассмотрено взаимодействие молекул с углеродными наноструктурами, такими как углеродные нанотрубки или же фуллерены. В частности, проведено математическое моделирование взаимодействия наночастиц с молекулярными компонентами природного газа.

При исследовании сорбционных свойств частиц, в рамках классической механики, приведена постановка задачи о расстановке узлов кристаллической

сети на сферической поверхности фуллерена. Эта постановка приводит к модели динамических систем, реализация которых дает численное решение задачи с наперед заданной точностью. На основе данных решения этой задачи найдены значения предельных скоростей сорбционного движения для всех основных компонент природного газа. Расчеты динамики одиночных молекул показывают, что их сорбционное движение реализуется в сферическом слое с внешним радиусом в два с лишним раза большем радиуса частицы. На основе данных о размере сорбционной зоны и о величинах предельных скоростей рассчитаны количества сорбционных молекул для каждой из компонент природной смеси в окрестности отдельно взятой наночастицы (нанотрубки или фуллерена).

Предложена технология расчета селективности слоев, составлены двустенными и одностенными открытыми нанотрубками. Технология опирается на расчет проницаемости нанопористых структур по отношению к отдельным компонентам природного газа. Полную статистику прохождения молекул через ультратонкую нанопористую мембрану удается 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 сорта молекул. Поэтому уместным является применение метода эквипотенциального однородного слоя, который лишь по поперечной форме барьера сортирует молекулы на проходящие и не проходящие. В результате расчетов по предложенной технологии установлено, что селективность разделения метаново-гелиевых смесей посредством слоев с двустенными открытыми нанотрубками может быть выше пятидесяти единиц. Этот результат позволяет сократить число стадий в технологи выделения гелия из природной смеси до минимального количества, т.е. до двух единиц.

Автор выражает признательность за помощь в проведении исследований кандидату физико-математических наук, доценту М.А. Бубенчикову и коллективу механико-математического факультета Томского государственного университета.

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 ученой степени доктора наук:

1. Бубенчиков А. М. Разделение метано-гелиевой смеси с помощью пористого графена / А. М. Бубенчиков, М. А. Бубенчиков, **Е. А. Тарасов**, О. В. Усенко,

А. С. Челнокова // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2017. – № 45. – С. 80–87. – DOI: 10.17223/19988621/45/7. – 0,4 / 0,08 п.л.

2. Бубенчиков М. А. Режимы взаимодействия низкоэнергетических молекул с открытой нанотрубкой / М. А. Бубенчиков, А. М. Бубенчиков, О. В. Усенко, **Е. А. Тарасов** // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2016. – № 3 (41). – С. 58– 64. – DOI: 10.17223/19988621/41/6. – 0,44 / 0,09 п.л.

3. Жаровцев В. В. Проницаемость системы из двух наночастиц / В. В. Жаровцев, А. С. Маслов, В. В. Овчаренко, **Е. А. Тарасов,** А. В. Ямкин // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2014. – Т. 57, № 8/2. – С. 138–141. – 0,34 / 0,09 п.л.

Статьи в зарубежных научных изданиях, индексируемых Web of Science и Scopus:

4. Bubenchikov A. M. Simple energy barrier for component mixture of natural gases / A. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, O. V. Matvienko, **E. A. Tarasov**, O. V. Usenko // AIP Conference Proceedings. – 2016. – Vol. 1698. – Article number 060007. – 4 p. – DOI: 10.1063/1.4937862. – 0,23 / 0,05 п.л.

5. Bubenchikov M. A. The interaction potential of an open nanotube and its permeability: molecular dynamics simulation / M. A. Bubenchikov, A. I. Potekaev, A. M. Bubenchikov, O. V. Usenko, A. V. Malozemov, **E. A. Tarasov** // EPJ Web of Conferences. – 2016. – Vol. 110. – Article number 01061. – 9 p. – DOI: 10.1051/epjconf/201611001061. – 0,52 / 0,09 п.л.

6. **Tarasov E. A.** Interaction between hydrogen molecules and a closed nanotube / E. A. Tarasov, Y. P. Khudobina // MATEC Web of conferences. – 2016. – Vol. 72. – Article number 01044. – 4 p. – DOI: 10.1051/matecconf/20167201044. – 0,23 / 0,12 п.л.

7. **Tarasov E. A.** Interaction potential of open carbon nanotube with natural gas molecular components / E. A. Tarasov // Key Engineering Materials. – 2016. – Vol. 685. – P. 534–538. – DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.685.534. – 0,29 п.л.

Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ:

8. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016662808 «Программа для расчета проницаемости слоя открытых нанотрубок» / авторы: Бубенчиков А. М., Бубенчиков М. А., Усенко О. В., **Тарасов Е. А.;** Правообладатель: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (RU). Заявка № 2016660206; дата поступления 30.09.2016; дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ 23.11.2016. – 1 с.

Публикации в других научных изданиях:

9. Борсук А. С. Движение молекулы в поле потенциала открытой нанотрубки / А. С. Борсук, **Е. А. Тарасов**, В. Б. Цыренова // Геометрия многообра-

зий и её приложения : материалы четвёртой научной конференции с международным участием. Улан-Удэ – оз. Щучье – оз. Байкал, 27–30 июня 2016 г. – Улан-Удэ, 2016. – С. 90–94. – 0,29 / 0,1 п.л.

10. Бубенчиков А. М. Движение гелия через нанотрубку пассированную азотом и фтором / А. М. Бубенчиков, М. А. Бубенчиков, **Е. А. Тарасов**, О. Э. Фридман, Ю. П. Худобина // Геометрия многообразий и её приложения : материалы четвёртой научной конференции с международным участием. Улан-Удэ – оз. Щучье – оз. Байкал, 27–30 июня 2016 г. – Улан-Удэ, 2016. – С. 112–118. – 0,4 / 0,08 п.л.

11. Будаев С. О. Движение молекул природного газа внутри и около фуллереновой частицы / С. О. Будаев, **Е. А. Тарасов**, А. Е. Шестаков // Геометрия многообразий и её приложения : материалы четвёртой научной конференции с международным участием. Улан-Удэ – оз. Щучье – оз. Байкал, 27–30 июня 2016 г. – Улан-Удэ, 2016. – С. 129–133. – 0,29 / 0,1 п.л.

12. Диль Д. О. Математическая модель фильтрации метана и флюида в анизотропных пластах / Д. О. Диль, **Е. А. Тарасов** // Электротехника. Энергетика. Машиностроение : сборник научных трудов I международной научной конференции молодых ученых. Новосибирск, 02–06 декабря 2014 г. – Новосибирск, 2014. – Ч. 2 : Секция «Энергетика». – С. 228–231. – 0,34 / 0,17 п.л.

13. **Тарасов**. **Е. А.** Итерационно-разностная технология решения уравнений гидродинамики / Е. А. Тарасов, М. А. Бубенчиков // Научная конференция студентов и школьников, посвященная 65-летию механико-математического факультета. Томск, 22–25 апреля 2013 г. – Томск, 2013. – С. 29–30. – 0,16 / 0,08 п.л.

Подписано в печать 07.07.2017 г.
Формат А4/2. Ризография
Печ. л. 1,0. Тираж 100 экз. Заказ № 19-07/17
Отпечатано в ООО «Позитив-НБ»
634050 г. Томск, пр. Ленина 34а