

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

(24–28 апреля 2018 г.)

**Сборник тезисов докладов**

# О переходе от задачи взаимодействия молекул природного газа с отдельной нанотрубкой к взаимодействию с ячейкой из четырех нанотрубок

Борсук А. С., Тарасов Е. А.

ТГУ, Томск

e-mail: diomedis@mail.ru

В работах [1, 2] показано, что при описании взаимодействия наночастиц на основе углерода, таких аллотропных модификаций как углеродные нанотрубки, фуллерены и графен, с молекулами – компонентами природного газа, можно выделить два подхода в описании этого взаимодействия: континуальный и дискретный. В рамках решения задачи о движении молекулы в поле потенциала открытой нанотрубки в работе [3] определено, что в нанотрубках небольшого радиуса сорбционная зона во внутренней области обладает большим потенциалом сорбции, чем зона вне трубки.

**Результаты моделирования** В данной работе представлено сравнение сорбционной области отдельной нанотрубки, а так же её селективной способности относительно компонентов природного газа и элементарной ячейки материала, которая была представлена системой из четырех нанотрубок. В данной статье приведены результаты численного моделирования этих объектов.

## Литература

1. Жаровцев В.В., Маслов А.С., Овчаренко В.В., Тарасов Е.А., Ямкин А.В. Проницаемость системы из двух наночастиц // Известия высших учебных заведений. Физика. 2014. Т. 57. № 8-2. С. 138-141.

2. M.A. Bubenchikov, A.I. Potekaev, A.M. Bubenchikov, O.V. Usenko, A.V. Malozemov, E.A. Tarasov The interaction potential of an open nanotube and its permeability: Molecular dynamics simulation // EPJ Web of Conferences, Volume 110, 23 February 2016, Article number 01061.

3. E.A. Tarasov Interaction Potential of Open Carbon Nanotube with Natural Gas Molecular Components // Key Engineering Materials, Volume 685, 2016, Pages 534-538.