

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК

Том 3. Математика

Сборник научных трудов

XVIII Международной конференции студентов, аспирантов
и молодых ученых

27–30 апреля 2021 г.

PROSPECTS OF FUNDAMENTAL SCIENCES DEVELOPMENT

Volume 3. Mathematics

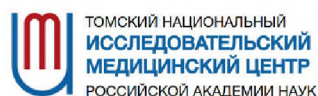
Abstracts

XVIII International Conference of students, graduate students
and young scientists

April 27–30, 2021



Национальный
исследовательский
**Томский
государственный
университет**



Томск 2021

УДК 539.21

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОДЕЛЬНОЙ МОЛЕКУЛЫ
ВОДЫ СО СТРУКТУРОЙ, СОСТАВЛЕННОЙ ИЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК**

Е.А. Тарасов, И.С. Демиденко, М.Д. Хильчук

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: diomedis@mail.ru

**MATHEMATICAL MODELING OF THE INTERACTION OF A MODEL WATER MOLECULE
WITH A STRUCTURE CONSISTED OF CARBON NANOTUBES**

E.A. Tarasov, I.S. Demidenko, M.D. Khilchuk

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: diomedis@mail.ru

Abstract. *In this work, the process of interaction of a cell of four double-walled nanotubes with a water molecule was numerically simulated. The simulation results show that, under normal conditions, water molecules pass through a cell of nanotubes in a plane parallel to the length of the tubes, and in a plane perpendicular to the length, the structure for such molecules is not passable.*

Введение. В предыдущих работах нашей научной группы [1-2] было показано, что использование модифицированного потенциала Леннарда-Джонса [3] подходит для задач, в которых описывается взаимодействие различных атомов и молекул со структурами, размеры которых лежат в пределах нанометрового диапазона. В работах [4-5] показано, что углеродные наноструктуры хорошо подходят для задач мембранного разделения газов. В работе [6] показано, что такой подход, с некоторыми уточнениями справедлив и для водяного пара. В этой работе мы показываем процесс создания и работы с модельной молекулой воды и её взаимодействие с выбранной углеродной структурой.

Материалы и методы исследования. В этой статье описано численное моделирование процесса движения модельной молекулы воды около ячейки, составленной из четырех двухслойных углеродных трубок, которые уложены в квадратную наноструктуру. Модель была создана как описание движения такой молекулы с помощью законов классической механики и потенциала для такого объекта молекула воды. В данной работе использовался только модифицированный потенциал Леннарда-Джонса. Далее численная схема полученных уравнений движения в поле потенциальных сил решалась с помощью метода Рунге-Кутты 4 порядка. Данное решение было реализовано с помощью авторского кода на языке Fortran.

Результаты. В процессе моделирования изучалось взаимодействие молекулы водяного пара и выбранной структуры следующим образом. Тестовая молекула размещалась на достаточном удалении от углеродной структуры, в области, в которой можно считать, что потенциальное поле структуры никак не влияет на характер движения молекулы. Затем молекула с выбранной скоростью двигалась в направлении к структуре и взаимодействовала с ней тем или иным способом. Результаты этих взаимодействий представлены на рисунка 1-3. На рисунке 1 можно видеть, что две молекулы, размещенные на расстоянии более 3 нм от структуры начинали свое движение со скоростью 450 м/с по

двум траекториям – осевой, относительно центра системы и осевой относительно центра нижней левой трубки. Обе молекулы успешно преодолели данную структуру, что видно и на рисунке 2.

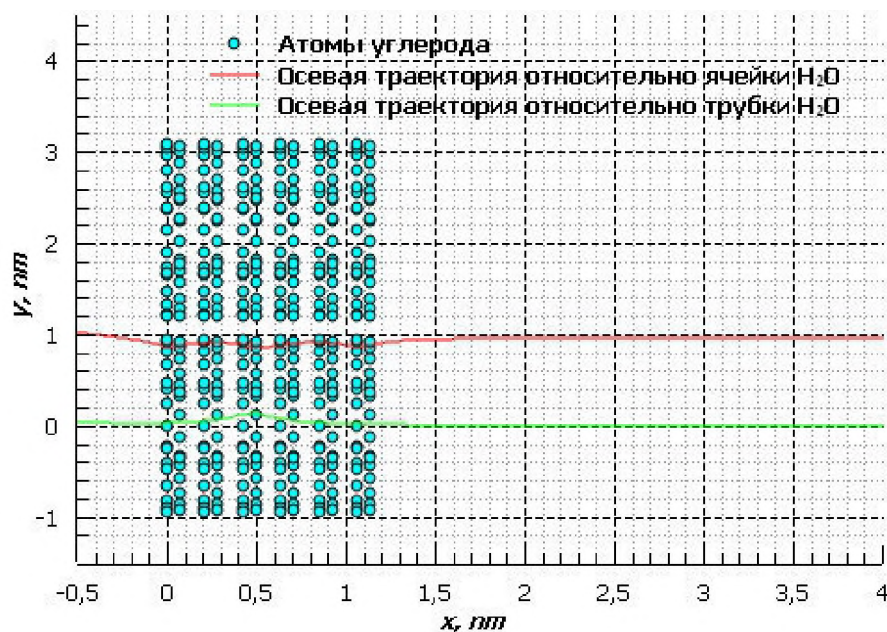


Рис. 1. Траектории движения молекул H_2O в плоскости xy через ячейку мембраны при начальной скорости движения 450 м/с. Красным цветом отмечена траектория, проходящая через ось симметрии ячейки, зеленым – траектория, проходящая через центр нижней левой трубки

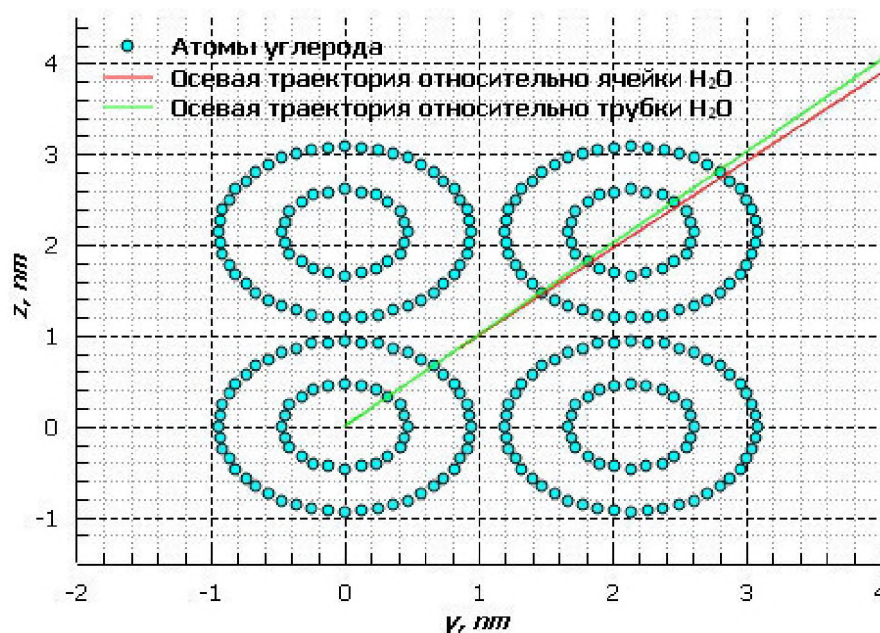


Рис. 2. Траектории движения молекул H_2O в плоскости yz через ячейку мембраны при начальной скорости движения 450 м/с. Красным цветом отмечена траектория, проходящая через ось симметрии ячейки, зеленым – траектория, проходящая через центр нижней левой трубки

На рисунке 3 представлен случай, когда исследуемая структура была повернута на угол в 90 градусов, и взаимодействие происходило по трем сценариям. Первый сценарий — это осевой случай, а два другие — отклонение от оси с шагом в один нанометр вверх и вниз по оси z .

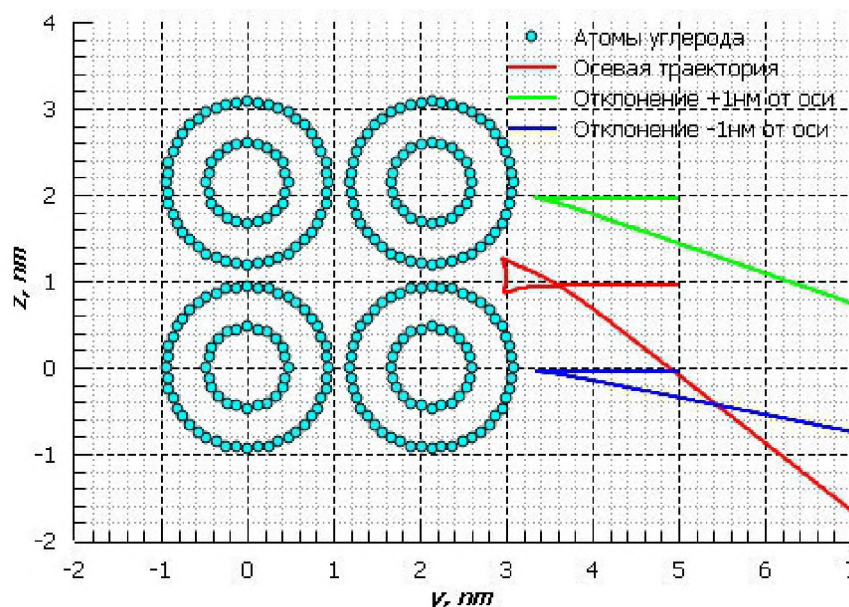


Рис. 3. Траектории движения молекул H_2O в плоскости yz при взаимодействии с повернутой на 90 градусов наноструктурой при начальной скорости движения равной 450 м/с. Красным цветом отмечена траектория, проходящая через ось симметрии ячейки, зеленым — траектория, с отклонением от оси на 1 нанометр вверх по оси z , синим — траектория, с отклонением от оси на 1 нанометр вниз по оси z

Закключение. Результаты моделирования показывают, что в случае движения молекул водяного пара вдоль координаты, соответствующей длине нанотрубок, данная ячейка пропускает молекулы, а в случае её поворота, может быть использована как задерживающая структура.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Libin E.E., Khudobina Y.P. Penetration of particles through multi-barrier systems // MATEC Web of Conferences. Heat and Mass Transfer in the System of Thermal Modes of Energy – Technical and Technological Equipment. – 2016. p.01057. DOI:10.1051/mateconf/20167201057
2. Tarasov, E.A. Comparison of two elementary nanomembranes cells for gas mixture separation problem // Key Engineering Materials. – 2018. – Vol.769, P.128-133. DOI:10.4028/www.scientific.net/KEM.769.128
3. Lennard-Jones, J. E. On the Determination of Molecular Fields: II: From the Equation of State of a Gas / J. E. Lennard-Jones // Proc. Roy. Soc., – 1924, – Vol. A 106, – p. 463.
4. Kim S., Chen L., Johnson J.K., Marad E. Polysulfone and functionalized carbon nanotube mixed matrix membranes for gas separation: theory and experiment // Journal of membrane science – 2007 – Vol.294 – P.147–158.
5. Majidi R. Molecular dynamics simulation of Noble gases adsorption of carbon nanotube bundles / R. Majidi // Fullerene, nanotubes and carbon nanostructures – 2012 – Vol. 22, – P. 520–527.
6. Lin D.T.W., Chen C.-K. A molecular dynamics simulation of TIP4P and Lennard-Jones water in nanochannel // Acta Mechanica – 2004 – Vol.173 – P.181–194 – doi.org/10.1007/s00707-004-0134-x