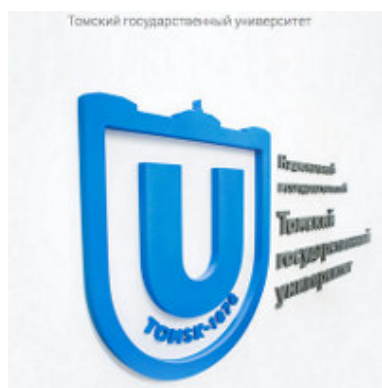




МИНИСТЕРСТВО НАУКИ
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Национальный исследовательский
Томский государственный университет
НИИ прикладной математики и механики ТГУ



**X Всероссийская научная конференция с международным участием
«Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и
небесной механики – 2020», 18–20 ноября 2020**

**X All-Russian Scientific Conference with international participation
«Current issues of continuum mechanics and celestial mechanics – 2020»,
November 18–20, 2020**

Томск
2021

РАЗДЕЛЕНИЕ ИЗОТОПОВ ГЕЛИЯ С ПОМОЩЬЮ ДВОЙНОЙ МЕМБРАНЫ НИТРИДА УГЛЕРОДА

В.А. Потеряева, М.А. Бубенчиков

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Россия
E-mail: valentina.poteryaeva@gmail.com

Ключевые слова: разделение изотопов, туннелирование, полиномы Эрмита.

Аннотация. В работе изучается задача разделения смеси изотопов гелия с помощью двухслойных мембран графитового нитрида углерода (graphitic carbon nitride). Потенциальная энергия взаимодействия мембраны с гелием получена на основе модифицированного потенциала Леннарда–Джонса. Проницаемость мембраны определяется из решения уравнения Шредингера с применением полиномов Эрмита. Построенное на их основе решение интегрального уравнения Шредингера обладает высокой точностью, поскольку в этом случае волны материи могут свободно проходить по всей действительной оси, при этом отсутствует необходимость "сшивки" решений на конечном интервале.

HELIUM ISOTOPE SEPARATION THROUGH THE BI-LAYER CARBON NITRIDE MEMBRANE

V. Poteryaeva, M. Bubenchikov

National Research Tomsk State University, Russian Federation
E-mail: valentina.poteryaeva@gmail.com

Keywords: isotope separation, tunneling, Hermite polynomials.

Abstract. The helium isotope separation through bi-layer membranes of graphitic carbon nitride has been studied. The potential energy is obtained based on the modified LJ potential. The permeability of a membrane is calculated solving Schrödinger equation with the use of Hermite functions. The solution of the Schrödinger integral equation constructed on their basis is highly accurate since, in this case, waves of matter can freely pass along the entire real axis, and moreover, there is no need for “matching” solutions on the finite interval.

Актуальность. Несмотря на широкую распространенность гелия во Вселенной, его земные источники ограничены. В настоящее время гелий добывается из природного газа с помощью криогенной дистилляции, адсорбции при переменном давлении, а также мембранного метода. Последний является более предпочтительным ввиду его меньшей стоимости и простоты. В свою очередь, разделение изотопов также является актуальной проблемой. Изотоп ^4He составляет основную часть гелия, в то время как ^3He является весьма редким и ценным элементом. В настоящее время гелион получают как продукт радиоактивного распада трития, что далеко не удовлетворяет спрос на него. ^3He находит применение в криогенной про-

мышленности, медицине (магнитно-резонансная томография), для детектирования нейтронов.

Цель и задачи. Решить задачу разделения изотопов гелия и определить оптимальные условия данного процесса.

Задачи:

- создать алгоритм решения уравнения Шредингера, основанный на применении полиномов Эрмита;
- найти потенциальную энергию взаимодействия двухслойной мембраны нитрида углерода с гелием;
- провести расчеты проницаемости мембраны для изотопов гелия;
- найти резонансные условия прохождения компонент.

Методология. Изотопы одного элемента имеют идентичные химические свойства, поэтому их разделение возможно лишь с помощью зависящих от массы процессов, например, использующих квантовые эффекты. В отличие от классического способа определения проницаемости мембраны, когда однозначно известно, преодолит ли молекула с заданной кинетической энергией потенциальный барьер или нет, в квантовомеханическом случае всегда существует вероятность прохождения молекулой мембраны. Разделение достигается благодаря небольшим различиям вероятностей прохождения двух изотопов через узкий потенциальный барьер подходящей формы, который напрямую зависит от выбора материала и конструкции наномембраны. Использование двойного барьера позволяет увеличить разницу в прохождении изотопов при определенных условиях за счет возникающего резонансного эффекта. При расстоянии между двумя пиками потенциальной энергии, кратному длине волны де Бройля одного из изотопов, его способность преодолевать барьер существенно увеличивается, в то время как другая компонента еще более задерживается вторым барьером [1].

Разделение изотопов более требовательно к выбору материала и конструкции мембраны в отличие от разделения смесей обычных газов в виду их близких размеров и свойств. Недавние исследования показывают, что пористые графеновые и графеноподобные мембраны (например, нитрида углерода [2]), а также мембраны из цеолита и полимерные материалы успешно разделяют изотопы [3]. Кроме того, хорошо себя показывают и различные конструкции углеродных аллотропов: нанотрубки, нанонити, нанорожки.

Вероятность прохождения атома через барьер определяется из решения стационарного уравнения Шредингера. Уравнение обычно решается численно с помощью конечно-разностного метода. Однако в данной работе предлагается аналитический способ получения решения уравнения Шредингера, который основан на использовании многочленов Эрмита.

Разложение по полиномам Эрмита [4] значительно облегчает решение интегро-дифференциальных [5] и интегральных уравнений, возникающих во многих физических и инженерных задачах. Тот факт, что множество

полиномов Эрмита образуют базис, позволяет раскладывать различные функции в ряд, что облегчает решение множества задач. Полиномы Эрмита сыграли решающую роль в теории флуктуаций света и квантовых состояний и, в частности, проблемах береговой гидродинамики и метеорологии. Метод разложения по полиномам Эрмита используется в биологических и эпидемиологических науках, экономических задачах.

Эти полиномы являются, безусловно, полезными для решения любых задач, в которых решение определено на всей действительной оси. К таким задачам приводит анализ процессов отражения и прохождения волн через заданные потенциальные барьеры. Другими словами, это задачи волновой динамики Шредингера. Их решение позволяет найти вероятность прохождения атомов и молекул, представляемых в виде волн де Бройля, через различные мембраны.

Основные результаты и выводы. Для разделения смеси изотопов гелия была использована двойная мембрана из графитового нитрида углерода. Были проведены расчеты проницаемости мембраны в отношении изотопов гелия для различных значений расстояния между двумя слоями тонких листов b при криогенных температурах в пределах $T=10-60$ К. Для каждого значения b в пределах от 0.1 до 6 нм была вычислена максимальная степень разделения смесей изотопов.

Согласно полученным результатам значение селективности $R = 1046$ достигается при выделении гелиона, в то время как использование однослойной мембраны в тех же условиях дает степень разделения изотопов 1.34. Условия, при которых достигается максимальная проницаемость мембраны: температура $T = 12$ К, расстояние между листами мембраны $b = 4.6$ нм.

Таким образом, в работе найдены условия, при которых достигается максимальная степень разделения изотопов гелия при использовании двухслойной мембраны нитрида углерода. Для получения проницаемости мембраны было решено уравнение Шредингера с помощью разложения функций, используя многочлены Эрмита.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-51-44002).

Литература/References

1. Poteryaeva V.A., Bubenchikov M.A., Jambaa S, D Gankhuyag D. Tsedenbaya. Quantum tunneling of molecules through compound barriers // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1527. P. 012008. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1537/1/012008/meta>
2. Feng Li, Yuanyuan Qu, Mingwen Zhao. Efficient Helium Separation of Graphitic Carbon Nitride Membrane // Carbon. 2015. Doi: 10.1016/j.carbon.2015.08.013
3. Joshua Schrier. Helium Separation Using Porous Graphene Membranes // J. Phys. Chem. Lett. 2010, 1, 2284-2287. DOI: 10.1021/jz100748x
4. (1998) Hermite Polynomials. In: Weyl Transforms. Universitext. Springer, New York, NY. https://doi.org/10.1007/0-387-22778-4_18

5. Akgönüllü, N., Şahin N., Sezer M. A Hermite collocation method for the approximate solutions of high-order linear Fredholm integro-differential equations // Numerical Methods for Partial Differential Equations. 2010. 27(6), 1707–1721. Doi:10.1002/num.20604

МЕТОД ФИКТИВНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ДИНАМИЧЕСКОЙ ЗАДАЧЕ ДЛЯ СЛОЯ, ОСЛАБЛЕННОГО ТРЕЩИНОЙ

И.С. Телятников¹, А.В. Павлова²

¹Федеральный исследовательский центр Южный научный центр
Российской Академии наук, Россия

²Кубанский государственный университет, Россия
E-mail: ilux_t@list.ru

Ключевые слова: упругий слой, трещина отрыва, метод фиктивного поглощения.

Аннотация. Слой или слоистая среда с трещиной или системой трещин служат моделями различных природных структур, например, геологических, и конструктивных элементов. Использование положений теории «вирусов» вибропрочности позволяет строить системы интегральных уравнений для слоистых сред с плоскими дефектами, в свою очередь для решения интегральных уравнений (ИУ) может быть применен метод фиктивного поглощения (МФП). Цель настоящей работы – построение решения интегрального уравнения задачи об установившихся колебаниях упругого слоя вызванных вибрацией берегов внутренней трещины конечных размеров и нулевой толщины с использованием модифицированного МФП. В работе представлен алгоритм решения ИУ с растущим символом ядра задачи о вибрации одиночной плоской трещины в слое, который может быть применен для решения систем уравнений динамических задач для пакета слоев с нарушением сплошности их соединений. МФП, являясь полуаналитическим, дает возможность исследовать особенности решений ИУ и учитывать их при разработке численных алгоритмов.

FICTITIOUS ABSORPTION METHOD IN A DYNAMIC PROBLEM FOR A LAYER WEAKENED BY A CRACK

I. Telyatnikov¹, A. Pavlova²

¹Federal Research Centre The Southern Scientific Centre of the Russian Academy
of The Sciences, Russian Federation

²Kuban State University, Russian Federation
E-mail: ilux_t@list.ru

Keywords: elastic layer, separation crack, fictitious absorption method.

Abstract. A layer or layered medium with a fracture or fracture system serves as a model for various natural structures, such as geological and structural elements. The use of the provisions from the theory of the vibration strength «viruses» allows us to construct systems of integral equations (IE) for layered media with flat defects. And to solve aforementioned inte-