На правах рукописи

Челнокова Анна Сергеевна

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПРОХОЖДЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ГАЗОВЫХ КОМПОНЕНТ ЧЕРЕЗ НАНОПОРИСТЫЕ СТРУКТУРЫ

1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2025

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

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

Официальные оппоненты:

Поляков Сергей Владимирович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук», заместитель директора по научной работе

Кузнецов Гений Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Научно-образовательный центр И.Н. Бутакова, профессор

Матвиенко Олег Викторович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», кафедра физической и вычислительной механики, профессор

Защита состоится 21 ноября 2025 года в 14 ч. 30 мин. на заседании диссертационного совета «НИ ТГУ.1.1.01», созданного на базе физико-технического факультета федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина 36 (учебный корпус № 10 ТГУ, 407).

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: https://dissertations.tsu.ru/PublicApplications/Details/1faf1652-5417-4d2c-816c-1d79a612840e

Автореферат разослан « _____ » октября 2025 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета Усанина Анна Сергеевна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследования. Современная наномеханика требует, помимо всего прочего, изучения наночастиц, а также изучения их взаимодействия с различными средами. В настоящем исследовании рассмотрен класс такого рода задач, имеющих актуальные технические приложения: молекулярная фильтрация (газоразделение на нанопористых мембранах); физическая сорбция индивидуальных наночастиц; конструирование нанопористых мембран различных структур; определение состояния газа из крупных макромолекул фуллеренов. Для достижения более высокой производительности требуется микроскопический механизм фильтрации, такой как взаимодействие между твердыми частицами и компонентами газа.

Молекулярно-динамическое моделирование является мощным инструментом для получения представления о поведении систем частиц и обеспечивает максимальную детализацию для решения конкретных вопросов, касающихся внутреннего механизма в наномасштабе. Для понимания механизмов взаимодействия атомов и молекул газовых смесей с макромолекулами, составляющими ультратонкие слои мембран, методы молекулярно-динамического моделирования подходят наилучшим образом. Основной идеей мембранных технологий высокой селективности остаётся применение сверхтонких компактируемых слоев, либо наноструктурных элементов. Показано, что режим движения среды может быть принят как свободномолекулярный. При разделении многокомпонентных газовых смесей углеродной мембраной селективными оказываются поры с линейным размером порядка 1 нм. В диссертации показывается, что при некоторых условиях задача фильтрации может быть решена методами и подходами классической механики методами молекулярно-динамического моделирования без учета реакций химических взаимодействий.

Степень разработанности темы исследования. Исследования в области переноса ультрамелких частиц в газообразных средах всегда имеет ограничения по их размерам. Большинство работ по указанному направлению посвящена синтезу новых функциональных материалов, однако теоретическое исследование процесса переноса наночастиц и газовых сред через наноструктуры зачастую сводятся к решению индивидуальных задач молекулярной динамики с помощью программных пакетов. Так, для задач газоразделения В. Я. Рудяк разработал подход потенциалов для сферических наночастиц, содействующий продолжению работ по теоретическому и практическому конструированию нанопористых систем для газоразделения. В. М. Фомин провел большую работу по обоснованию и совершенствованию сорбционной технологии разделения газов с использованием ценосфер. Ю. Ю. Божко предлагает практический способ газоразделения с помощью образования гидратов, который должен являться эффективной технологией. Современные методы молекулярно-динамического моделирования позволяют решать широкий класс задач по взаимодействию различных атомарных и молекулярных структур, в том числе по описанию характера взаимодействия газов с нанопористыми мембранами.

Цель работы заключается в разработке и реализации численных моделей взаимодействия атомов и молекул газов с нанопористыми структурами и построении методики расчета их проницаемости и селективности.

Для достижения заявленной цели решены следующие **задачи**:

1. Разработать общую численную модель, описывающую взаимодействие двухкомпонентных газовых смесей с пространственной нанопористой мембраной с учетом основных принципов молекулярной динамики.
2. Определить энергию воздействия на молекулу или атом газа от поверхности нанопористой мембраны.
3. Предложить приближенные схемы расчета проницаемости нанопористых структур.
4. Исследовать проницаемость некоторых идеальных углеродных структур, имеющих регулярное расположение пор.

Методы исследований. В работе использованы методы классической молекулярной динамики, методы квантовой механики, численные методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных. Для описания межмолекулярного взаимодействия была взята модель описания энергии частицы с использованием потенциала Леннарда-Джонса в дискретном и континуальном случаях. Для определения проницаемости мембран использовались метод “стрельбы” и метод свободных площадей.

Основные положения, выносимые на защиту. На защиту выносятся следующие результаты исследования:

1. Процедура численного решения определения поворотов неизменяемой молекулярной конструкции.
2. Неравновесные термодинамические свойства газа фуллеренов.
3. Сорбция фуллереновой компоненты графеновой поверхностью и отсутствие сорбции в отношении более простых молекул газовой смеси.
4. Метод свободных зон прохождения молекул и атомов для сверхтонких углеродных нанопористых мембран.
5. Результаты численного моделирования проницаемости туннельных нанопористых структур.

Научная новизна заключается:

1. В разработке нового способа нахождения вращений каркасных молекулярных конструкций, обеспечивающего возможность расчетного определения вращательной температуры крупных многоатомных молекул.
2. В найденных термодинамических свойствах неравновесного газа фуллеренов.
3. В аналитическом определении потенциальной энергии воздействия от крупных молекулярных фрагментов наноразмерных структур, позволяющем существенно упростить расчеты в задачах прохождения частиц через сверхтонкие пористые слои.
4. В систематических расчетах, подтверждающих отсутствие сорбционных накоплений одно и двухатомных молекул газовых смесей на углеродных структурах.

5. В разработке приближенных способов расчета проницаемости нанопористых структур.

Теоретическая значимость результатов.

Диссертационная работа носит теоретический характер с перспективой Диссертационная работа носит теоретический характер с перспективой практического применения в газовой промышленности. Полученные результаты могут быть применены в качестве рекомендаций при разработке мембран для газоразделения, а также базой для дальнейших исследований в области молекулярной физики, наномеханики и нанофильтрации.

Результаты диссертационной работы нашли отражение в научных отчетах следующих проектов: Российского фонда фундаментальных исследований № 19-31-90087 «Аспиранты», руководитель А. М. Бубенчиков (2019–2021 гг.); Российского научного фонда № 19-71-10049, руководитель М. А. Бубенчиков (2019–2024 гг.); № 075-02-2025-1728/2 «Реализация программы развития Регионального научно-образовательного математического центра Томского государственного университета», выполненный при поддержке Минобрнауки России, руководитель А. Ю. Веснин (2025 г.).

Практическая значимость состоит в применении результатов аналитических и квазианалитических построений в практике инженерных и исследовательских работ для создания новых технологий мембранного разделения газовых смесей.

Степень достоверности данных, полученных в работе, результатов проведенных исследований обеспечивается строгостью математических постановок задач, выполнением законов сохранения. Численные результаты тестировались на простейших примерах и сравнивались с точными и приближенными решениями. Теоретические данные, полученные автором, хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Проведены проверки проницаемости найденной различными способами: статистическим методом, барьерной теорией и с использованием закона площадей.

Личный вклад автора. Теоретические и практические результаты, представленные в диссертационном исследовании, получены лично автором. Постановка целей и задач осуществлялась совместно с научным руководителем.

Соответствие паспорту специальности. Данная диссертационная работа выполнена в соответствии с паспортом специальности 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы (физико-математические науки) по направлениям исследований: «Динамика разреженных газов и молекулярная газодинамика» (п. 6 паспорта специальности) и «Численные и комбинированные методы исследования уравнений кинетических моделей однородных и многофазных сред» (п. 19 паспорта специальности).

Апробация работы. Основные результаты докладывались на конференциях: V Конференция математических центров России, Красноярск, 11–16 августа 2025 г.; IV Конференция математических центров России, Санкт-Петербург, 5–11 августа 2024 г.; Воронежская зимняя математическая школа С. Г. Крейна, Воронеж, 26–30 января 2024 г.; XX Международная конференция

студентов, аспирантов и молодых ученых, Томск, 25–28 апреля 2023 г.; Научная конференция с международным участием Математика и математическое образование в условиях цифровизации, посвященной 90-летию БГПИ-БГУ, Улан-Удэ, 30 июня – 2 июля 2022 г.; Всероссийская конференция по математике и механике, посвященная 145-летию Томского государственного университета и 75-летию механико-математического факультета, Томск, 2–5 октября 2023 г.; Nanostructured Carbon Compositions / 14th International Conference on New Diamond and Nano Carbons 2020/2021, 7–9 июня 2021 г.; X Всероссийской научной конференции с международным участием «Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики - 2020», Томск, 18–20 ноября 2020 г.; Materials, Methods & Technologies, Бургас, Болгария, 29 августа – 1 сентября 2020 г.; VI научной конференции с международным участием «Геометрия многообразий и её приложения», г. Улан-Удэ – оз. Байкал, 27–30 августа 2020 г.; VI Международной научной конференции «Машиностроение. Технологии. Образование. Безопасность», Болгария, г. Велико Тырново, 29 мая – 01 июня 2019 г.; Smart Nanomaterials 2019, Париж, 10–13 Декабря 2019 г.; Thermophysical Basis of Energy Technologies (TBET 2019), Томск, 7–11 октября 2019 г.; V научной конференции с международным участием, посвященной 100-летию профессора Р.Н. Щербакова «Геометрия многообразий и её приложения», г. Улан-Удэ – оз. Байкал, 3–6 июля 2018 г.

Публикации. По теме диссертации опубликована 32 работы, в том числе 12 статей в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук (из них 8 статей в зарубежных научных журналах, входящих в Web of Science; 4 статьи в российском научном журнале, входящем в Web of Science), 3 статьи в сборниках материалов конференций, представленных в изданиях, входящих в Web of Science и / или Scopus; 11 публикаций в сборниках материалов международных, всероссийских (в том числе с международным участием) и региональной научных конференций; получены 1 патент Российской Федерации и 5 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа изложена на 142 страницах машинописного текста, содержит 77 иллюстраций и 9 таблиц. Она состоит из введения, 3 глав, заключения и списка литературы из 130 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** приведено обоснование актуальность темы исследований, дается краткое изложение разделов работы.

В **первой главе** рассмотрены виды мембран, механизмы газоразделения и приводятся рассуждения о выборе потенциала атом-атомного взаимодействия для дальнейших численных расчетов.

Во **второй главе** описаны математические модели взаимодействия газовой смеси со структурой ультратонкой мембраны, которая рассматривается как большая сумермолекула (рисунок 1).

Реализация этой модели позволила установить, что углеродные поверхности не сорбируют инертных атомов и простых молекул газовых компонент. Сорбции подвержены только крупные молекулы. Если разделяемая смесь не содержит крупных молекул, то углеродные нанопористые мембраны будут “чистыми” в отношении разделения таких смесей. В качестве такой крупной молекулы рассмотрим компактную молекулу стандартного фуллерена C_{60}. Рассмотрим сорбционные свойства графеновой поверхности, по отношению к трехкомпонентной смеси, включающей фуллереновую добавку.

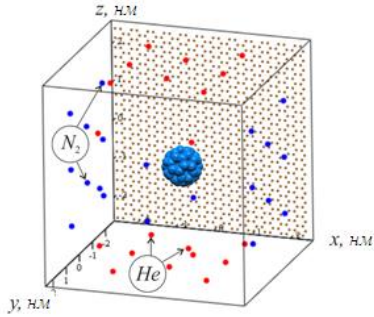


Рисунок 1 – Представительный объем газа: атомы гелия (красные точки) и молекулы азота (синие точки), фуллерен C_{60} и графеновая пластинка (удаленная фронтальная грань)

Пусть в некотором представительном объеме V газовой среды находятся N частиц газа одной компоненты, $M-N$ частиц второй компоненты, одна грань представительного объема выполнена из графена, имеющего $K-M$ атомов углерода, и фуллерен, состоящий из $L-K$ атомов углерода. Тогда уравнения движения частиц первой компоненты будут иметь вид:

$$m_1\frac{du_i}{dt}=-\sum_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{N}\frac{\partial U_{11}(\rho_{ik})}{\partial x_k}-\sum_{k=N+1}^{M}\frac{\partial U_{12}(\rho_{ik})}{\partial x_k}-\sum_{k=M+1}^{L}\frac{\partial U_{13}(\rho_{ik})}{\partial x_k}, \quad (1)$$

$$m_1\frac{dv_i}{dt}=-\sum_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{N}\frac{\partial U_{11}(\rho_{ik})}{\partial y_k}-\sum_{k=N+1}^{M}\frac{\partial U_{12}(\rho_{ik})}{\partial y_k}-\sum_{k=M+1}^{L}\frac{\partial U_{13}(\rho_{ik})}{\partial y_k}, \quad (2)$$

$$m_1\frac{dw_i}{dt}=-\sum_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{N}\frac{\partial U_{11}(\rho_{ik})}{\partial z_k}-\sum_{k=N+1}^{M}\frac{\partial U_{12}(\rho_{ik})}{\partial z_k}-\sum_{k=M+1}^{L}\frac{\partial U_{13}(\rho_{ik})}{\partial z_k}, \quad (i=1,\ldots,N). \quad (3)$$

Здесь u_i, v_i, w_i – проекции скорости i-ой частицы газа; m_1 – масса частицы газа первой компоненты; U_{11} – потенциал парных взаимодействий для частиц первой компоненты газа; U_{12} – потенциал взаимодействия частиц первой и второй компоненты; U_{13} – потенциал взаимодействия частиц первой компоненты с атомами углерода в имеющихся структурах; x_k, y_k, z_k – декартовы координаты k-ой частицы; $\rho_{ik} = \sqrt{(x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2 + (z_i - z_k)^2}$ – расстояние между двумя силовыми центрами.

Аналогично можно записать уравнения движения частиц второй компоненты газа:

$$m_2 \frac{du_i}{dt} = -\sum_{k=1}^{N} \frac{\partial U_{21}(\rho_{ik})}{\partial x_k} - \sum_{\substack{k=N+1 \\ k \neq i}}^{M} \frac{\partial U_{22}(\rho_{ik})}{\partial x_k} - \sum_{k=M+1}^{L} \frac{\partial U_{23}(\rho_{ik})}{\partial x_k}, \tag{4}$$

$$m_2 \frac{dv_i}{dt} = -\sum_{k=1}^{N} \frac{\partial U_{21}(\rho_{ik})}{\partial y_k} - \sum_{\substack{k=N+1 \\ k \neq i}}^{M} \frac{\partial U_{22}(\rho_{ik})}{\partial y_k} - \sum_{k=M+1}^{L} \frac{\partial U_{23}(\rho_{ik})}{\partial y_k}, \tag{5}$$

$$m_2 \frac{dw_i}{dt} = -\sum_{k=1}^{N} \frac{\partial U_{21}(\rho_{ik})}{\partial z_k} - \sum_{\substack{k=N+1 \\ k \neq i}}^{M} \frac{\partial U_{22}(\rho_{ik})}{\partial z_k} - \sum_{k=M+1}^{L} \frac{\partial U_{23}(\rho_{ik})}{\partial z_k}, \quad (i = N+1, \ldots, M). \tag{6}$$

В представленных здесь расчетах используется форма потенциала Леннарда–Джонса для всех парных взаимодействий, а конкретные пары отличаются лишь параметрами выбранного потенциала.

Для замыкания уравнений движения газовых частиц необходимо выписать следующие кинематические соотношения:

$$\frac{dx_k}{dt} = u_k, \quad \frac{dy_k}{dt} = v_k, \quad \frac{dz_k}{dt} = w_k \quad (k = 1, \ldots, M). \tag{7}$$

Фуллерен является крупной углеродной молекулой, которая перемещается поступательно вместе со своим центром масс и вращается вокруг него. Центр масс движется как материальная точка, имеющая массу фуллерена и находящаяся под действием главного вектора внешних по отношению к рассматриваемой молекуле сил. В проекциях на оси абсолютного базиса уравнения движения центра масс фуллерена имеют вид:

$$m_f \frac{du_c}{dt} = -\sum_{i=K+1}^{L} \left(\sum_{k=1}^{N} \frac{\partial U_{13}(\rho_{ik})}{\partial x_k} + \sum_{k=N+1}^{M} \frac{\partial U_{23}(\rho_{ik})}{\partial x_k} + \sum_{k=M+1}^{K} \frac{\partial U_{33}(\rho_{ik})}{\partial x_k} \right), \tag{8}$$

$$m_f \frac{dv_c}{dt} = -\sum_{i=K+1}^{L} \left(\sum_{k=1}^{N} \frac{\partial U_{13}(\rho_{ik})}{\partial y_k} + \sum_{k=N+1}^{M} \frac{\partial U_{23}(\rho_{ik})}{\partial y_k} + \sum_{k=M+1}^{K} \frac{\partial U_{33}(\rho_{ik})}{\partial y_k} \right), \tag{9}$$

$$m_f \frac{dw_c}{dt} = -\sum_{i=K+1}^{L} \left(\sum_{k=1}^{N} \frac{\partial U_{13}(\rho_{ik})}{\partial z_k} + \sum_{k=N+1}^{M} \frac{\partial U_{23}(\rho_{ik})}{\partial z_k} + \sum_{k=M+1}^{K} \frac{\partial U_{33}(\rho_{ik})}{\partial z_k} \right). \tag{10}$$

Здесь m_f – масса фуллерена; u_c, v_c, w_c – проекции скорости центра масс фуллерена. Дифференциальные уравнения (8)–(10) определяют лишь

поступательные скорости фуллерена. Координаты его центра масс могут быть найдены из следующих кинематических соотношений:

$$\frac{dx_c}{dt} = u_c, \quad \frac{dy_c}{dt} = v_c, \quad \frac{dz_c}{dt} = w_c. \tag{11}$$

Уравнения (1)–(11) интегрируются при следующих начальных условиях:

$$\begin{aligned} &t = 0, \ x_k = x_k^0, \ y_k = y_k^0, \ z_k = z_k^0; \\ &u_k = u_k^0, \ v_k = v_k^0, \ w_k = w_k^0, \ (k = 1,...,M); \\ &x_c = x_c^0, \ y_c = y_c^0, \ z_c = z_c^0; \\ &u_c = u_c^0, \ v_c = v_c^0, \ w_c = w_c^0. \end{aligned} \tag{12}$$

Уравнения вращательного движения фуллерена:

$$\frac{d}{dt}\left(A\omega_x + F\omega_y + E\omega_z\right) = L_x, \tag{13}$$

$$\frac{d}{dt}\left(F\omega_x + B\omega_y + D\omega_z\right) = L_y, \tag{14}$$

$$\frac{d}{dt}\left(E\omega_x + D\omega_y + C\omega_z\right) = L_z. \tag{15}$$

Здесь A, B, C, D, E, F – компоненты тензора инерции; ω_x, ω_y, ω_z – компоненты вектора мгновенной угловой скорости; L_x, L_y, L_z – проекции моментов сил, действующих на фуллерен.

Уравнения поворотов молекулярного объекта, взятые в абсолютном базисе, необходимо в процессе расчетов определять компоненты тензора инерции по следующим формулам:

$$\begin{aligned} &A = m\sum_{k=K+1}^{L}\left((y_k - y_c)^2 + (z_k - z_c)^2\right), \quad D = -m\sum_{k=K+1}^{L}(y_k - y_c)(z_k - z_c), \\ &B = m\sum_{k=K+1}^{L}\left((x_k - x_c)^2 + (z_k - z_c)^2\right), \quad E = -m\sum_{k=K+1}^{L}(x_k - x_c)(z_k - z_c), \\ &C = m\sum_{k=K+1}^{L}\left((x_k - x_c)^2 + (y_k - y_c)^2\right), \quad F = -m\sum_{k=K+1}^{L}(x_k - x_c)(y_k - y_c). \end{aligned} \tag{16}$$

Здесь m – масса атома углерода; x_k, y_k, z_k – декартовы координаты k-ого атома углерода в фуллерене ($k = K+1,2,\ldots,L$); x_c, y_c, z_c – координаты силовых центров, являющимися функциями времени.

Правые части уравнений (13)–(15) есть моменты сил, действующих на фуллерен. Эти моменты являются двойными суммами следующего вида:

$$L_x = \sum_{k=1}^{K}\sum_{i=K+1}^{L}\big((y_i - y_c)Z(\rho_{ik}) - (z_i - z_c)Y(\rho_{ik})\big),$$

$$L_y = \sum_{k=1}^{K}\sum_{i=K+1}^{L}\big((z_i - z_c)X(\rho_{ik}) - (x_i - x_c)Z(\rho_{ik})\big), \qquad (17)$$

$$L_z = \sum_{k=1}^{K}\sum_{i=K+1}^{L}\big((x_i - x_c)Y(\rho_{ik}) - (y_i - y_c)X(\rho_{ik})\big).$$

Величины X, Y, Z являются проекциями сил парных взаимодействий атомов углерода с иными атомами или молекулами, находящимися вне фуллерена. Эти проекции определяются следующими формулами:

$$X(\rho_{ik}) = -\frac{\partial U_{13}(\rho_{ik})}{\partial x_k},\ Y(\rho_{ik}) = -\frac{\partial U_{13}(\rho_{ik})}{\partial y_k},\ Z(\rho_{ik}) = -\frac{\partial U_{13}(\rho_{ik})}{\partial z_k},\ (i = 1,...,N)$$

$$X(\rho_{ik}) = -\frac{\partial U_{23}(\rho_{ik})}{\partial x_k},\ Y(\rho_{ik}) = -\frac{\partial U_{23}(\rho_{ik})}{\partial y_k},\ Z(\rho_{ik}) = -\frac{\partial U_{23}(\rho_{ik})}{\partial z_k},\ (i = N+1,...,M) \quad (18)$$

$$X(\rho_{ik}) = -\frac{\partial U_{33}(\rho_{ik})}{\partial x_k},\ Y(\rho_{ik}) = -\frac{\partial U_{33}(\rho_{ik})}{\partial y_k},\ Z(\rho_{ik}) = -\frac{\partial U_{33}(\rho_{ik})}{\partial z_k},\ (i = M+1,...,K).$$

Индекс k во всех отношениях (18) пробегает значения, отвечающие атомам углерода фуллерена: $k = K+1,\ldots,L$.

Динамические уравнения (13)–(15) требуют задания начальных скоростей поворота молекулярной конструкции фуллерена:

$$t = 0,\ \omega_x = \omega_x^0,\ \omega_y = \omega_y^0,\ \omega_z = \omega_z^0. \qquad (19)$$

Следуя теореме сложения скоростей для каждого атома фуллерена можем записать:

$$u_k = u_c + \omega_y(z_k - z_c) - \omega_z(y_k - y_c),$$
$$v_k = v_c + \omega_z(x_k - x_c) - \omega_x(z_k - z_c), \qquad (20)$$
$$w_k = w_c + \omega_x(y_k - y_c) - \omega_y(x_k - x_c),\quad (k = K+1,...,L).$$

Тогда координаты атомов фуллерена найдутся как результат интегрирования следующих дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx_k}{dt} = u_k,\ \frac{dy_k}{dt} = v_k,\ \frac{dz_k}{dt} = w_k \quad (k = K+1,...,L). \qquad (21)$$

Интегрирование этих уравнений требует задания начальных положений силовых центров фуллерена в пространстве:

$$t = 0,\ x_k = x_k^0,\ y_k = y_k^0,\ z_k = z_k^0,\quad (k = K+1,...,L). \qquad (22)$$

Так как графеновая пластина неподвижна, то координаты ее атомов остаются неизменными во все время расчета:

$$t \geq 0,\ x_k = x_k^0,\ y_k = y_k^0,\ z_k = z_k^0,\quad (k = M+1,...,K). \qquad (23)$$

Модель (1)–(23) является основной моделью разработанного координатного способа расчета поворотов молекулярных тел, не использующей углов Эйлера и кватернионов Гамильтона. Этот способ был применен во **второй**

главе для описания движения фуллерена в цилиндрической камере с коническими крышками. Показано, что на искривленной боковой поверхности камеры возникает глубокая потенциальная яма, в которую скатываются и удерживаются в ней крупные молекулы C_{60} и C_{100}.

Полученное по указанной математической модели численное решение в случае вращения по инерции $La_4@C_{100}$ сравнивалось с аналитическим решением, полученным в рамках классического подхода Эйлера (рисунок 2).

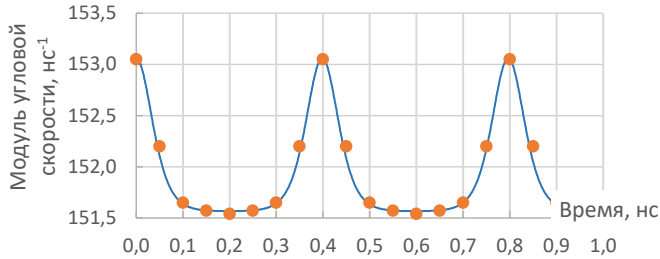


Рисунок 2 – График модуля вектора угловой скорости: сплошная линия – аналитическое решение по подходу Эйлера, точками – численное решение

Две перемещающиеся фуллереновые частицы, заключенные в наноскопический объем, имеют в эргодическом понимании определенную температуру и создают вполне конкретное давление на внутреннюю поверхность рассматриваемого объема. Под температурой вполне уместно понимать приведенную к градусам Кельвина осредненную энергию трансляций частиц. Расчетами показано, что в этой интерпретации рассматриваемый фуллереновый газ является совершенной средой. Если же в представлениях средних величин фиксируется разделение энергии угловых движений и энергии трансляций, то газ фуллеренов является двух температурным.

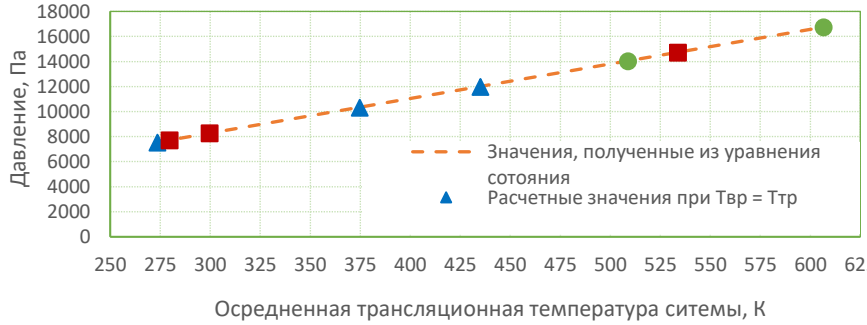


Рисунок 3 – *PT*-диаграмма при $V = 10^3$ нм^3

Расчеты, проведенные по модели (1)–(23) для различных смесей, где варьировались пары простых компонент, показали, что простые компоненты: He, H_2, N_2, O_2, CH_4, CO_2 не сорбируются углеродными мембранами. Эти компоненты

не накапливаются в нанопорах и межслоевом пространстве, поэтому для описания проницаемости углеродных нанопористых мембран может быть использован одиночной проникающей частицы.

Третья глава посвящена описанию методов, разрабатываемых в рамках подходов одиночной частицы или пучка падающих частиц. Показано, что на пять клеток поверхности мембраны общей площадью $5 \cdot 10^{-18}$ м^2 за промежуток времени порядка 1 нс падает в среднем всего две молекулы. Поскольку нет сорбции, то эта ситуация сохраняется в течение всего равновесного периода взаимодействия газовых частиц с мембраной.

Уравнения движения пучка N молекул, взаимодействующего с пористой наноструктурой можно записать в виде:

$$\frac{d\mathbf{r}_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_k}, \quad \frac{d\mathbf{p}_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_k}, \quad k = 1, 2, 3, \ldots N, \tag{24}$$

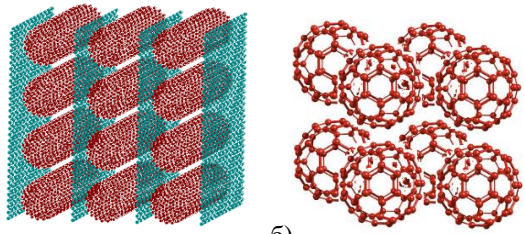
где $\mathbf{r}_k$ и $\mathbf{p}_k$ – радиус-векторы перемещающихся молекул и их импульсы, а полная энергия системы:

$$H = \frac{1}{2m}\sum_{k=1}^{N} p_k^2 + \sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} \Phi\left(r_{kj}\right). \tag{25}$$

Здесь $r_{kj} = |\mathbf{r}_k - \mathbf{c}_j|, \mathbf{c}_j$ отмечают положения силовых центров в структуре мембраны, $\Phi(r_{kj})$ – потенциал парных атом-атомных взаимодействий.

Для получения решения эволюционной задачи на основе выписанных уравнений требуется знание начальных условий, которые должны определять исходные положения и начальные скорости частиц газа.

Такая модель вполне применима при рассмотрении проницаемости молекулярного кристалла низкотемпературного фуллерита, “сэндвич” структуры, составленной из послойно и плотноуложенных нанотрубок и переложенных графеновыми листами, или для плотноуложенных закрытых нанотрубок (рисунок 4).



а) б)

Рисунок 4 – а) “сэндвич” структура, составленная стандартными одностенными углеродным нанотрубками и графеновыми пластинками; б) ПК-решетка фуллерита, составленного фуллеренами C_{60}

Части углеродных молекулярных конструкций – это, как правило, молекулы: нанотрубки, фуллерены, наноторы, графеновые листы. Из этих элементов могут быть собраны различные углеродные системы. Интересны такие

конструкции, в которых при плотной укладке остаются туннельные участки, обладающие свойством селективного прохождения газовых компонент.

В расчетах по методу окон проницаемости были найдены площади свободных зон прохождения молекул, а по ним определены проницаемости и селективность. Эффективные размеры углеродных молекул определялись как суммы собственных размеров с соответствующими дистанциями сближения. Так, например, если говорится об эффективном радиусе нанотрубки, то предварительно необходимо вычислить предельное расстояние или дистанцию сближения какого-либо газового компонента, движущегося с определенной скоростью по нормали к поверхности трубки. Для этого решается отдельная задача по сближению отдельного атома или молекулы с тем или иным фрагментом молекулярной конструкции. На рисунках 5 и 7 представлены зоны свободного прохождения для атомов гелия и молекул метана для 1 представительной ячейки сэндвич структуры, укладки закрытых нанотрубок или фуллерита C_{60}.

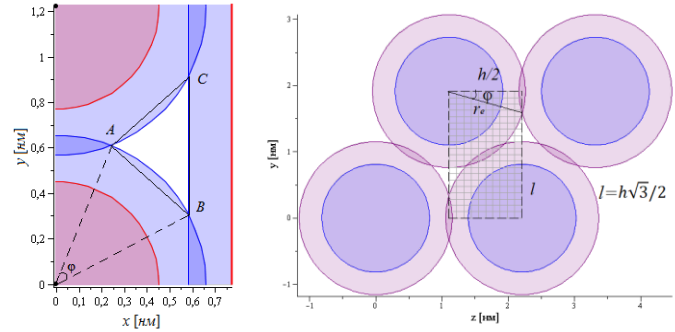


Рисунок 5 – Зоны свободного прохождения для сэндвич структуры (слева) и плотноуложенных нанотрубок (справа), отвечающие средним тепловым скоростям атомов гелия (v=1367 м/с) при T = 300 K

Получены данные для коэффициентов прохождения и степени разделения метан-гелиевой смеси.

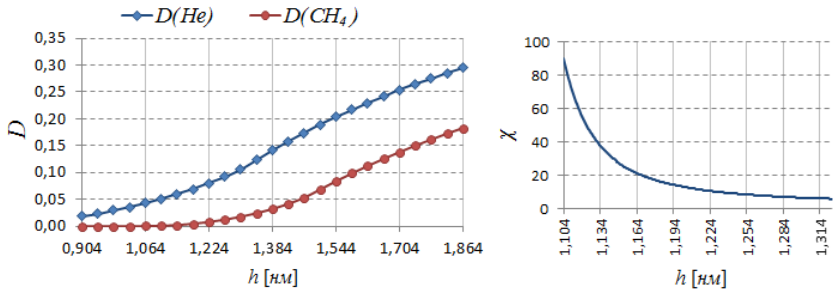


Рисунок 6 – Коэффициенты прохождения гелия и метана в зависимости от расстояния между осями закрытых нанотрубок (слева) и Степень разделения метан-гелиевой смеси (справа)

Получены аналогичные результаты для ПК-решетки фуллерита C_{60} без учета вращения фуллеренов.

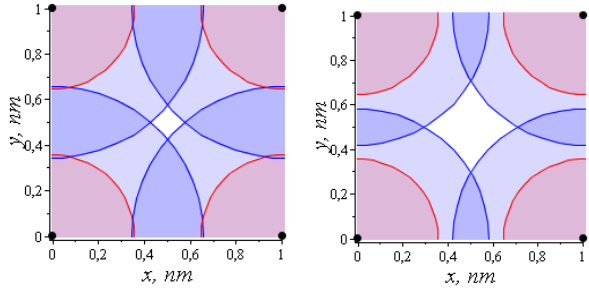


Рисунок 7 – Окна проницаемости для метана при v = 600 м/с(слева) и гелия при при v = 1200 м/с(справа)

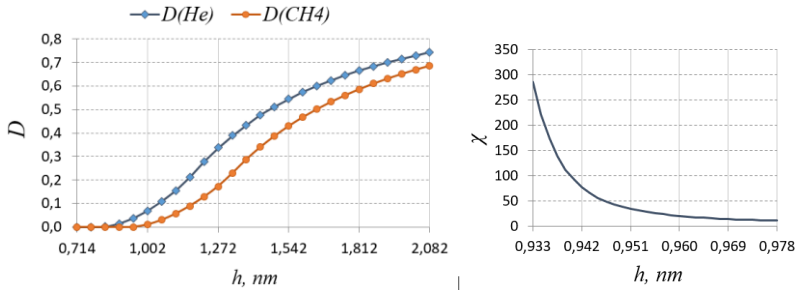


Рисунок 8 – Коэффициенты прохождения гелия и метана в зависимости от расстояния между центрами фуллеренов (слева) и степень разделения метан-гелиевой смеси (справа)

Для параллельной укладки нанонитей Al_2O_3, радиусом 5 и 7,5 нм, получены результаты по степени разделения смеси He/CH_4 также в зависимости от расстояния между осями нанонитей h.

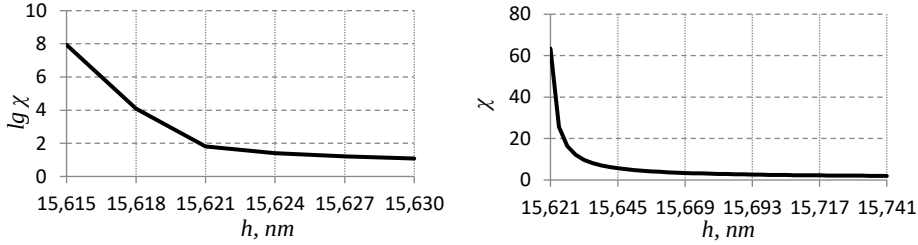


Рисунок 9 – Степень разделения χ метан-гелиевой смеси

Был рассмотрен случай проницаемости ПК-решетки фуллерита C_{36} с учетом вращения фуллеров, составляющих мембрану.

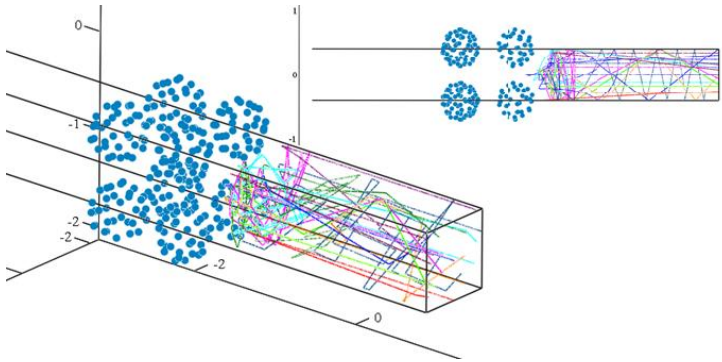


Рисунок 10 – Траектории пробных молекул метана

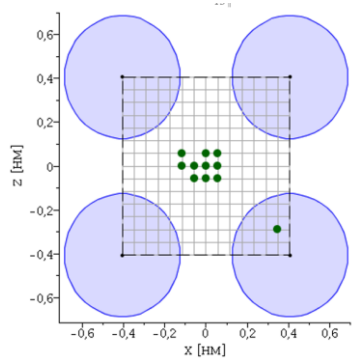


Рисунок 11 – Элементарная ячейка с прошедшими атомами гелия

Синими дисками схематично отмечены фуллерены, черная пунктирная линия – граница туннеля, в узлах сетки располагались начальные позиции 225 атомов гелия, зелеными точками отмечены позиции 11 прошедших структуру атомов гелия. Таким образом проницаемость 2 слоев фуллерита для гелия составила 4,89%, и для молекул метана структура оказалась непроницаемой.

На рисунке 12 представлены результаты расчетов траекторий атома гелия, взаимодействующего с одно, двух и трехслойной структурой нитрида бора, полученные по корпускулярной теории. В каждом листе мембраны имеются регулярные поры в виде удаленных двух углеродных циклов (двенадцать атомов углерода).

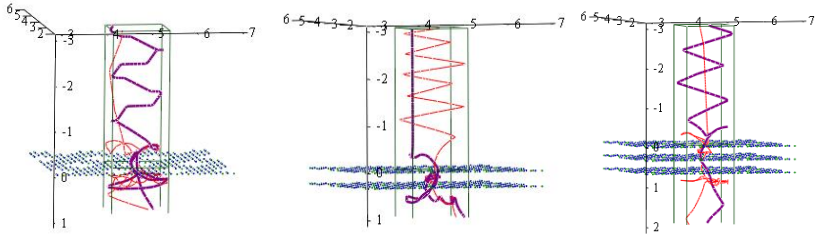


Рисунок 12 – Траектории пробных атомов гелия вблизи BN – мембраны

Молекулы, пущенные с различных позиций входного сечения туннеля, содержащего лишь одну пору, ведут себя по-разному. По центру поры через относительно небольшое окно проницаемости проходят все частицы. Они включаются в сорбционные движения, т.е. задерживаются на некоторое время между или около пластин. Время сорбционного захвата можно оценить по расчетам.

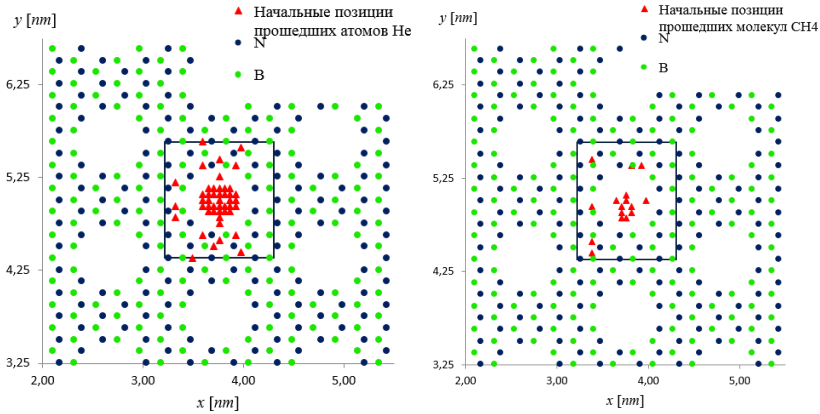


Рисунок 13 – Ячейка нитрида бора для атомов гелия (слева, D = 0,1043) и молекул метана (справа, D = 0,0363)

Селективность, определенная для однослойной системы по методу направленных концентрированных потоков при начальной среднетепловой скорости всех частиц газовой среды, составила 3 единицы. Однако в случае распределенных по Максвеллу начальных скоростей частиц газа расчеты показали более высокую степень разделения в 8 единиц благодаря непрямым ударам частиц о поверхность мембраны.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены математические модели нанопористых мембран, основанные на методах классической молекулярной динамики – дискретная модель атом-атомного взаимодействия и континуальная модели и квантовая модель низкотемпературного разделения изотопов.

Разработан координатный способ расчета поворотов молекулярных тел, не использующий углов Эйлера и кватернионов Гамильтона. Этот способ был применен для описания движения фуллерена в цилиндрической камере с коническими крышками. Показано, что на искривленной боковой поверхности камеры возникает глубокая потенциальная яма, в которую скатываются и удерживаются в ней крупные молекулы C_{60} и C_{100}. При этом состояние крупных молекул характеризуется отсутствием равномерного распределения энергии по поступательным и вращательным степеням свободы.

На основе простейшей модели из двух взаимодействующих фуллеренов, локализованных в наноскопическом представительном объеме, проанализированы свойства газа фуллеренов. Следуя гипотезе эргодичности, величины, осредненные по ансамблю частиц, заменены среднеинтегральными значениями по времени. В результате были найдены давление газа, трансляционная и вращательная температуры. Расчет динамики фуллеренов проводится на основе модели атом-атомных взаимодействий с простейшим потенциалом для углеродных атомов, имеющих более низкое значение энергии взаимодействия по сравнению со свободными атомами углерода. Получено, что на этапе установления равновесия, существенно превышающем время динамической релаксации в обычном газе, фуллереновая система ведет себя как среда, в которой перманентно происходит преобразование энергии трансляций и вращений. При этом зависимость давление – температура трансляций отвечает состоянию идеального газа.

Многие идеальные нанопористые структуры имеют поры в виде прямолинейного туннеля, и большинство из этих структур обладают туннельным эффектом прохождения молекул через поры. Расчеты показывают, что проникающие молекулы и атомы, попадая в потенциальные ямы между фуллереновыми частицами, ускоряются внутри материала, и их средняя скорость становится в несколько раз выше скорости на входе в окно проницаемости. В результате чего время пребывания пришедших молекул всегда меньше времени обновления термодинамического состояния в газовой фазе, и материала как бы очищается от попавших в него молекул и атомов. Нет сорбционных молекул и у поверхности материала. Наряду с этим фиксируется нарушение фундаментального принципа Максвелла о равновероятном выходе молекул из кубической ячейки, лежащем в основе диффузионного описания переноса массы. Поэтому режим прохождения вещества через фуллерит, плотную укладку нанотрубок или “сэндвич структуры” нельзя считать диффузионным, он демонстрирует более высокую скорость прохождения, которая ближе к режиму сверхпроницаемости материала.

Для таких структур рассмотрены эффективные методы расчета относительной проницаемости: метод свободных зон прохождения молекул и метод одиночной молекулы. Применение таких методов является вполне обоснованным, если углеродные материалы, используемые для разделения газов, не сорбируют отдельных компонент смеси. Расчетами определены коэффициенты проницаемости описанных выше структур относительно атомов гелия и молекул

метана для различных расстояний между макромолекулами, составляющими слои углеродных мембран. Определены параметры характерные для высоких степеней разделения метан-гелиевой смеси.

Расчетами динамики газовых частиц около графеновой поверхности установлено, что атомы и простые молекулы газовых смесей не сорбируются плоскими или искривленными графеновыми листами. В то же время достаточно крупные молекулы C_{60} несмотря на свою идеальную форму подвержены сорбции и в том, и в другом случае. Естественно, что более тяжелые и менее симметричные молекулы будут сорбироваться в большей степени. Поэтому разделяемые углеродными материалами смеси должны быть предварительно очищены от крупных молекул.

На основе континуального потенциала взаимодействия от объемной нанонити рассмотрена задача проницаемости гелий-метановой смеси через параллельную укладку нанонитей. Определены степени разделения однослойной мембраны при различных расстояниях между осями соседних нитей. Выделены параметры характерные для режимов высокой селективности.

Рассмотрена задача проницаемости кристалла фуллерита C_{36} с учетов вращения молекул фуллеренов. С учетом колебаний центров масс C_{36} у положения равновесия, а также найденных вращений, рассмотрена возможность прохождения отдельных частиц газа через фрагмент материала фуллерита. Применительно к смеси гелий-метан найдено, что молекулы метана не могут проходить через рассматриваемый фрагмент материала. В то же время для атомов гелия все-таки имеются прямолинейные туннели, обеспечивающие их прохождение через материал в количестве 5 %.

Для многослойной системы мембраны нитрида бора с дефектами рассмотрена задача о проницаемости метан-гелиевой смеси. Медом стрельбы определены коэффициенты относительной проницаемости одно, двух и трехслойной мембран. Показано, что случай начального распределения скоростей по Максвеллу дает большее значения селективности по сравнению со случаем направленного пучка частиц, имеющих одинаковую среднетепловую скорость.

В случае составных барьеров, состоящих из монослоев одинаковой формы находятся нули коэффициента отражения. Определены характерные расстояния между монослоями для нулевых значений коэффициентов отражения, что дает 100 % вероятность прохождения выбранной компоненты смеси.

Полученные результаты по проницаемости нанопористых ультратонких слоем могут применяться в качестве рекомендаций по выбору материала для селективных мембран при дальнейшей разработке мембранных комплексов очистки воздуха и выделения редких компонент природного газа.

Дальнейшие теоретические исследования возможны в направлении учета влияния деформации макромолекул, составляющих мембраны, на степень разделения газовых компонент и возможности сорбции отдельных компонент газовых смесей.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук:

1. Бубенчиков М. А. Относительная динамика оболочек бифуллеренового комплекса / М. А. Бубенчиков, Д. В. Мамонтов, **А. С. Челнокова** // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. − 2022. − № 77. − С. 54−67. – 0,84 / 0,28 а.л.

Web of Science: Bubenchikov M. A. Relative dynamics of the shells of the bifullerene complex / M. A. Bubenchikov, D. V. Mamontov, **A. S. Chelnokova** // Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika. – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics. – 2022. – № 77. – P. 54–67.

2. Бубенчиков М. А. Аналитическое решение интегрального уравнения Шредингера / М. А. Бубенчиков, А. М. Бубенчиков, С. Жамбаа, А. В. Лун-Фу, **А. С. Челнокова** // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. − 2020. − № 67. − С. 5−17. – 0,78 / 0,16 а.л.

Web of Science: Bubenchikov M. A. Analytical solution of the Schrödinger integral equation / M. A. Bubenchikov, A. M. Bubenchikov, S. Jambaa, A. V. Lun-Fu, **A. S. Chelnokova** // Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika. – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics. – 2020. – № 67. – P. 5–17.

3. Бубенчиков М. А. Исследование проницаемости углеродного нанополотна / М. А. Бубенчиков, А. М. Бубенчиков, А. В. Уколов, Р. Ю. Уколов, **А. С. Челнокова** // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. − 2019. − № 57. − С. 62−75. – 0,84 / 0,17 а.л.

Web of Science: Bubenchikov A. M. Investigation of the carbon nanofabric permeability / M. A. Bubenchikov, A. M. Bubenchikov, A. V. Ukolov, R. Yu. Ukolov, **A. S. Chelnokova** // Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika. – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics. – 2019. – № 57. – P. 62–75.

4. 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. – 0,48 / 0,1 а.л.

Web of Science: Bubenchikov A. M. Separation of a methane-helium mixture by porous graphite / A. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, E. A. Tarasov, O. V. Usenko, **A. S. Chelnokova** // Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika. – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics. – 2017. – № 45. – P. 80–87.

5. Bubenchikov M. A. Stationary model of quantum tunneling through composite layers / M. A. Bubenchikov, S. Zhambaa, V. A. Poteryaeva, A. S. Chelnokova // Russian Physics Journal. – 2023. – Vol. 66, № 8. – P. 920–923. – 0,24 / 0,06 а.л. *(Web of Science).*

6. Borodin I. B. Movement of C_{100} fullerene in a closed carbon nanocontainer / V. I. Borodin, A. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, **A. S. Chelnokova**, D. V. Mamontov // Computational Particle Mechanics. – 2023. – Vol. 10, is. 5. – P. 1161–1170. – DOI: 10.1007/s40571-023-00552-7. – 10 p. – 0,70 / 0,14 а.л. (*Web of Science*).

7. Borodin V. I. Numerical study of the passage of natural gas components through C_{60} fullerite in the low-temperature phase / V. I. Borodin, A. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, V. A. Ovchinnikov, **A. S. Chelnokova** // Crystals. – 2022. – Vol. 12, № 11. – Article number 1653. – 11 p. – URL: https://www.mdpi.com/2073-4352/12/11/1653 (access date: 17.09.2025). – 1,0 /0,2 а.л. (*Web of Science*).

8. Bubenchikov, A. M. Fullerene movement in a carbon nanocontainer / A. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, **A. S. Chelnokova**, D. V. Mamontov, A. V. Lun-Fu // Crystals. – 2022. – Vol. 12, is. 8. – Article number 1179. – 11 p. – URL: https://www.mdpi.com/2073-4352/12/8/11791 (access date: 17.09.2025). – 1,0 / 0,2 а.л. (*Web of Science*).

9. Bubenchikov A. M. An analytical solution to the problem of hydrogen isotope passage through composite membranes made from 2D materials / A. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, **A. S. Chelnokova**, S. Jambaa // Mathematics. – 2021. – Vol. 9, is. 19. – Article number 2353. – 11 p. – 1,0 / 0,25 а.л. (*Web of Science*).

10. Bubenchikov A. M. Movement of fullerenes and their dimers inside carbon nanotubes / A. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, D. V. Mamontov, **A. S. Chelnokova**, S. P. Chumakova // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2021. – Vol. 29, is. 10. – P. 803–809. – URL: https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/1536383X.2021.1900122 (access date: 17.09.2025). – DOI: 10.1080/1536383X.2021.1900122. – 0,48 / 0,1 а.л. (*Web of Science*).

11. Bubenchikov A. M. Low-temperature separation of helium-helion mixture / A. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, S. Jambaa, A. V. Lun-Fu, **A. S. Chelnokova** // Reviews on Advanced Materials Science. – 2020. – Vol. 59, is. 1. – P. 361–370 – DOI: 10.1515/rams-2020-0004. – 0,7 / 0,14 а.л. (*Web of Science*).

12. Bubenchikov M. A. Calculating permeability of the low-temperature phase of a fullerite / M. A. Bubenchikov, A. M. Bubenchikov, E. A. Tarasov, O. V. Usenko, **A. S. Chelnokova** // Diamond and Related Materials. – 2018. – Vol. 86. – P. 146–158 – DOI: 10.1016/j.diamond.2018.04.017. – 1,04 / 0,2 а.л. (*Web of Science*).

Свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ:

13. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2024610306. Gas Condition 1.0. Программа расчета состояния газовой смеси в однородных условиях / Бубенчиков М. А. (RU), **Челнокова А. С.** (RU); правообладатель: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (RU). Заявка № 2023687024; дата поступления – 06.12.2023; дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ – 09.01.2024.

14. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022684766. FulleCont 1.0: Динамика фуллерена в наноконтейнере / Бубенчиков М. А. (RU), **Челнокова А. С.** (RU); правообладатель: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (RU). Заявка № 2022684500; дата поступления – 13.12.2022; дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ – 16.12.2022.

15. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021666173. Fullerite permeability 2.0: Проницаемость кристалла фуллерита C_{36} / **Челнокова А. С.** (RU), Бубенчиков А. М. (RU); правообладатель: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (RU). Заявка № 2021665121; дата поступления – 30.09.2021; дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ – 08.10.2021.

16. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021666174. Fullerite permeability 1.0: Проницаемость статического кристалла фуллерита C_{60} / **Челнокова А. С.** (RU), Бубенчиков А. М. (RU); правообладатель: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (RU). Заявка № 2021665141; дата поступления – 30.09.2021; дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ – 08.10.2021.

17. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020616739. Пластический фуллерит. Расчет естественных вращений фуллеренов в твердом фуллерите / Бубенчиков М. А. (RU), Мамонтов Д. В. (RU), **Челнокова А. С.** (RU); правообладатель: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (RU). Заявка № 2020615289; дата поступления – 01.06.2020; дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ – 22.06.2020.

Патент Российской Федерации:

18. Патент на изобретение RU 2787318 C1 МПК G01J 5/53 (2022.1). Источник излучения дальнего инфракрасного диапазона / М. А. Бубенчиков (RU), А. М. Бубенчиков (RU), Д. В. Мамонтов (RU), В. А. Овчинников (RU), В. А. Потеряева (RU), **А. С. Челнокова** (RU); правообладатель: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (RU). – № 2022114277; заявл. 27.05.2022, опубл. 09.01.2023, Бюл. № 1.

Публикации в сборниках материалов конференций, представленных в изданиях, входящих в Web of Science и / или Scopus:

19. **Chelnokova A. S.** Permeability of membranes stacked tightly closed carbon nanotubes / A. S. Chelnokova // Journal of Physics: Conference Series. − 2020. − Vol. 1459 : IX All-Russian Scientific conference with international participation «Current issues of Continuum mechanics and Celestial mechanics». Tomsk, Russian Federation, November 18–20, 2019. − Article number 012010. − 7 p. – URL:

https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1459/1/012010 (access date: 17.09.2025). – DOI: 10.1088/1742-6596/1459/1/012010. – 0,28 а.л. (*Web of Science*).

20. Bubenchikov A. M. Permeability of a hybrid structure composed of closed oriented nanotubes and grapheme relative to helium atoms and methane molecules / A. M. Bubenchikov, **A. S. Chelnokova** // AIP Conference Proceedings. − 2020. – Vol. 2212, is. 1 : Thermophysical basis of energy technologies (TBET 2019). Tomsk, Russia, October 09–11, 2019. − Article number 020012. – 4 p. – URL: https://pubs.aip.org/aip/acp/article-abstract/2212/1/020012/611207/Permeability-of-a-hybrid-structure-composed-of?redirectedFrom=fulltext (access date: 17.09.2025). – 0,16 / 0,08 а.л. (*Scopus*).

21. Bubenchikov M. A. Permeability of nanonet structures constructed on the basis of carbon tubes / M. A. Bubenchikov, T. I. Nikipelova, V. B. Tsyrenova, **A. S. Chelnokova** // Journal of Physics: Conference Series. − 2017. − Vol. 919 : 6th International Conference Current issues of continuum mechanics and celestial mechanics (6thCICMCM). Tomsk, Russia, November 16–18, 2016. − Article number 012020. − 8 p. – URL: https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/919/1/012020 (access date: 17.09.2025). − DOI: 10.1088/1742-6596/919/1/012020. – 0,32 / 0,08 а.л. . (*Web of Science*).

Публикации в прочих научных изданиях:

22. **Челнокова А. С.** Моделирование взаимодействия газовой смеси с графеновой поверхностью / А. С. Челнокова, А. М. Бубенчиков // Воронежская зимняя математическая школа С. Г. Крейна – 2024 : материалы международной Воронежской зимней математической школы, посвященной памяти В. П. Маслова. Воронеж, 26–30 января 2024 г. – Воронеж, 2024. – С. 298–299. – 0,08 / 0,04 а.л.

23. Мамонтов Д. В. Исследование динамики C_{60} в газе / Д. В. Мамонтов, **А. С. Челнокова**, О. Д. Носырев // Перспективы развития фундаментальных наук : сборник трудов XX Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Томск, 25–28 апреля 2023 г. – Т. 1 : Физика. – Томск, 2023. – С. 261–263. – 0,12 / 0,04 а.л.

24. **Челнокова А. С.** Неравновесное состояние фуллерена в двухкомпонентной смеси газов / А. С. Челнокова, А. М. Бубенчиков // Всероссийская конференция по математике и механике : сборник материалов конференции. Посвящается 145-летию Томского государственного университета и 75-летию механико-математического факультета. Томск, 02–05 октября 2023 г. – Томск, 2023. – С. 253–255. – 0,12 / 0,06 а.л.

25. Бубенчиков А. М. Динамика фуллерена C_{60} в углеродной нанокамере / А. М. Бубенчиков, **А. С. Челнокова** // Математика и математическое образование в условиях цифровизации : материалы научной конференции с международным участием, посвященной 90-летию БГПИ-БГУ. Улан-Удэ – пос. Энхалук – оз. Байкал, 30 июня – 02 июля 2022 г. – Улан-Удэ, 2022. – С. 114–120. – 0,45 / 0,22 а.л.

26. **Челнокова А. С.** Вращения фуллеренов в семействе фуллеритов от C_{28} до C_{96} / А. С. Челнокова / Актуальные проблемы современной механики

сплошных сред и небесной механики – 2020 материалы X Всероссийской научной конференции с международным участием. Томск, 18–20 ноября 2020 г. – Томск, 2021. – С. 317–320. – 0,16 а.л.

27. Бубенчиков А. М. Динамика фуллеренов молекулярного кристалла на основе (D2d)-C_{36} / А. М. Бубенчиков, **А. С. Челнокова** // Геометрия многообразий и ее приложения : материалы Шестой научной конференции с международным участием. Улан-Удэ – оз. Байкал, 27–29 августа 2020 г. – Улан-Удэ, 2020. − С. 91–98. – 0,4 / 0,2 а.л.

28. Бубенчиков А. М. Многошаговые схемы с переменным шагом интегрирования / А. М. Бубенчиков, **А. С. Челнокова**, Д. Карастоянов // Геометрия многообразии и ее приложения : материалы Шестой научной конференции с международным участием. Улан-Удэ – оз. Байкал, 27–29 августа 2020 г. − Улан-Удэ, 2020. − С. 99–106. – 0,4 / 0,13 а.л.

29. Бубенчиков А. М. Проницаемость слоистой мембраны нитрида бора молекулами газовой смеси / А. М. Бубенчиков, **А. С. Челнокова** // Все грани математики и механики : сборник тезисов докладов Всероссийской молодежной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Томск, 23–27 апреля 2019 г. – Томск, 2019. – С. 79. – 0,02 / 0,01 а.л.

30. Бубенчиков А. М. Проницаемость мембраны из плотно уложенных закрытых углеродных нанотрубок / А. М. Бубенчиков, М. А. Бубенчиков, Д. В. Мамонтов, **А. С. Челнокова** // Геометрия многообразий и ее приложения : материалы Пятой научной конференции с международным участием, посвященной 100-летию профессора Р. Н. Щербакова. Улан-Удэ – оз. Байкал, 03–06 июля 2018 г. – Улан-Удэ, 2018. − С. 89–97. – 0,45 / 0,11 а.л.

31. Бубенчиков А. М. Селективные свойства одной идеальной сэндвич структуры в отношении метан-гелиевой смеси / А. М. Бубенчиков, М. А. Бубенчиков, Д. В. Мамонтов, **А. С. Челнокова** // Геометрия многообразий и ее приложения : материалы Пятой научной конференции с международным участием, посвященной 100-летию профессора Р. Н. Щербакова. Улан-Удэ – оз. Байкал, 03–06 июля 2018 г. – Улан-Удэ, 2018. − С. 98–108. – 0,55 / 0,14 а.л.

32. Bubenchikov A. Permeability of porous graphene composite membrane // A. Bubenchikov, M. Bubenchikov, **A. Chelnokova** // Engineering. Technologies. Education. Security : proceedings of VI International scientific conference. Veliko Tarnovo, Bulgaria, May 29 – June 01, 2019. – Sophia, Bulgaria, 2019. – P. 5–7. – 0,18 / 0,06 а.л.

Издание подготовлено в авторской редакции.
Отпечатано на участке цифровой печати
Издательства Томского государственного университета
Заказ № 7903 от «02» октября 2025 г. Тираж 100 экз.
г. Томск Московский тр. 8, тел. (3822) 53-15-28
publish.tsu.ru