Министерство образования и науки Российской Федерации
Министерство образования и науки Республики Бурятия
Восточно-Сибирский государственный университет технологий и управления
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук
Бурятский государственный университет
Иркутский государственный университет

МАТЕМАТИКА, ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ (МПМО17)

Материалы VI Международной конференции

26 июня – 1 июля 2017 г.

г. Улан-Удэ, Байкал

Улан-Удэ
Издательство ВСГУТУ
2017

Библиография

1. *Гудерлей К.Г.* Теория околозвуковых течений. – М.: Изд-во иностр. лит., 1960. – 419 с.
2. *Черный Г.Г.* Газовая динамика. – М.: Наука, 1988. – 424 с.
3. *Lin C.C., Reissner E., Tsien H.S.* On two-dimensional non-steady motion of a slender body in a compressible fluid // J. of Mathematics and Physics. – 1948. – V.27, № 3. – P. 220-231.
4. *Коул Дж.* Методы возмущений в прикладной математике. – М.: Мир, 1972. – 274 с.
5. *Рыжов О.С.* О нестационарном пограничном слое с самоиндуцированным давлением при околозвуковых скоростях внешнего потока // Докл. АН СССР. – 1977. – Т.236, № 5. – С. 1091-1094.
6. *Рыжов О.С., Савенков И.В.* Об устойчивости пограничного слоя при трансзвуковых скоростях внешнего потока // ПМТФ. – 1990. – № 2. – С. 65-71.
7. *Диесперов В.Н., Липатов И.И.* Модели процессов взаимодействия течения в ламинарном пограничном слое с трансзвуковым потоком // Изв. РАН. МЖГ. – 2003. – № 5. – С. 60-73.
8. *Богданов А.Н., Диесперов В.Н.* Моделирование нестационарного трансзвукового течения и устойчивость трансзвукового пограничного слоя // ПММ. – 2005. – Т. 69, Вып. 3. – С. 394-403.

УДК 538.975

РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОНИЦАЕМОСТИ НАНОПОРИСТЫХ СЛОЕВ

Бубенчиков А.М.*, Цыренова В.Б., Челнокова А.С.*****

**Национальный исследовательский Томский государственный университет, Россия, Томск, hudobina@mail2000.ru*

***Бурятский государственный университет, Россия, Улан-Удэ, v.ts@mail.ru*

****Бурятский государственный университет, Россия, Улан-Удэ, smolina-nyuta@mail.ru*

В настоящей работе выполнено математическое моделирование движения молекул гелия и метана и прохождение молекулярной структуры нанопоры твердофазного слоя, в условиях взаимных динамических (тепловых) флуктуаций. Для определения проницаемости графеновой структуры использован метод эквивалентного однородного слоя. На основе потенциала Пёшля–Теллера определена энергия воздействия двух параллельно расположенных нанопористых слоев графена. Полученные результаты объясняют сорбционные свойства барьерных углеродных систем, позволяющих проводить фильтрацию или сепарацию газов.

Ключевые слова: *молекулярная динамика, потенциал Пёшля–Теллера, метод эквивалентного однородного слоя, проницаемость двойного слоя.*

DEVELOPMENT OF THE MATHEMATICAL MODEL OF NANOPOROUS LAYERS PERMEABILITY

Bubenchikov A.M.*, Tsyrenova V.B., Chelnokova A.S.*****

**National Research Tomsk State University, Russia, Tomsk, hudobina@mail2000.ru*

***Buryat State University, Russia, Ulan-Ude, v.ts@mail.ru*

****Buryat State University, Russia, Ulan-Ude, smolina-nyuta@mail.ru*

In the article we perform mathematical modeling of the motion of helium and methane molecules and the passage of molecular structure of a solid-phase layer nanopore under conditions of mutual dynamic (thermal) fluctuations. The equivalent homogeneous layer method was used to determine the permeability of a graphene structure. The energy of action of two parallel nano-porous graphene layers is determined on basis of Pöshl-Teller potential. The obtained results explain the sorption properties of barrier carbon systems that allow filtration or separation of gases.

Key words*: molecular dynamics, Pöshl -Teller potential, equivalent homogeneous layer method, double layer permeability.*

Введение

В последние годы популярными стали исследования различных аллотропных модификаций углерода и относительно простую структуру имеет открытый недавно графен. Используя регулярную укладку атомов углерода в пространстве, получаем идеальные конструкции, которые удобно изучать с использованием математических методов. Созданные таким образом пространственные конструкции, содержащие непроходимые для молекул скопления атомов углерода и проницаемые наноразмерные поры интересы с точки зрения прохождения газа через сконструированные слои. Несмотря на очевидную идеализацию изучаемых матричных структур, заключения об их проницаемости имеют смысл для развития практических технологий разделения газов. Подходящими для сепарации газов порами являются выемки, содержащие два последовательных углеродных кольца. В настоящей работе эту мембрану предлагается использовать для разделения бинарной смеси He/CH_4.

Потенциал взаимодействия

Потенциал Пёшля–Теллера хорошо описывает дальние взаимодействия молекул, что является важным при исследованиях прохождения молекул через нанопористые структуры. Этот потенциал записывается следующим образом [1]:

$$U(r)=\varepsilon\left[\frac{sh^4\left(\frac{\alpha r_m}{2}\right)}{sh^2\left(\frac{\alpha r}{2}\right)}-\frac{ch^4\left(\frac{\alpha r_m}{2}\right)}{ch^2\left(\frac{\alpha r}{2}\right)}\right], \quad (1)$$

где ε – глубина потенциальной ямы, $r_m=\sqrt[6]{2}\sigma$ – расстояние от центра пробной молекулы до точки минимума энергии взаимодействия, $\alpha=10 нм^{-1}$.

Потенциал Пёшля–Теллера, являясь интегрируемым по объему, имеет такой же характер стремления к бесконечности при $r\to 0$, как r^{-2}. Однако при интегрировании по поверхности, будучи примененным к поверхностным кристаллам, он дает рассеянные значения.

Чтобы избежать этой неопределенности, мы модифицировали потенциал (1). Не изменяя характера действия ван-дер-ваальсовских сил в определяющей области межмолекулярных расстояний, мы уменьшили величину особенности до значений r^{-1}. Модифицированный потенциал выглядит следующим образом:

$$U(r)=\frac{\varepsilon}{r}th\left\{r\left[\frac{sh^4\left(\frac{\alpha r_m}{2}\right)}{sh^2\left(\frac{\alpha r}{2}\right)}-\frac{ch^4\left(\frac{\alpha r_m}{2}\right)}{ch^2\left(\frac{\alpha r}{2}\right)}\right]\right\}. \quad (2)$$

В реальности расстояние между центрами взаимодействующих молекул из-за конечности их размеров не может быть равным нулю. Можно сказать, что гиперболический тангенс в записи (2) «исправляет» потенциал Пёшля–Теллера в области несуществующих взаимодействий. При этом он позволяет получать определенные значения интегрального воздействия способом сплошного интегрирования по поверхности кристалла.

Интегральное воздействие, определяемое потенциалом (2), находится следующим образом:

$$U_G(z)=q\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}U(r)dx'dy' \ . \quad (3)$$

Здесь $U_G(z)$ – воздействие от бесконечного листа графена на пробную молекулу, z – расстояние до поверхности по нормали, q – количество атомов углерода на одном квадратном нанометре, $r=\sqrt{(x-x')^2+(y-y')^2+z^2}$, x,y,z – декартовы координаты центра пробной молекулы, причём z направленна перпендикулярно плоскому однородному слою, x',y' – переменные интегрирования.

Вероятность прохождения молекул через однородный слой

Вероятность прохождения слоя будем определять на базе функции распределения Максвелла как долю молекул, прошедших энергетический барьер, из числа падающих на поверхность барьера час-

тиц. Тогда для слоя с нулевой энергией, т.е. абсолютно проницаемого слоя, можем записать:

$$b\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{0}^{\infty}\exp\left[-\frac{m}{2kT}\left(u^2+v^2+w^2\right)\right]dudvdw=1. \quad (4)$$

Здесь m – масса молекулы, k – постоянная Больцмана, T – температура в газовой среде, b – нормирующий множитель, который находится из условия, что абсолютно все молекулы, падающие на абсолютно прозрачную пленку, проходят через нее.

Подынтегральная функция в (4) есть функция распределения Максвелла молекул по компонентам скоростей.

Учитывая интеграл Гаусса

$$\int_{0}^{\infty}\exp\left(-\beta x^2\right)dx=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}, \quad (5)$$

найдем значение нормирующего множителя b, подставив (5) в (4)

$$b=2\left(\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\right)^3.$$

Практические расчеты показывают, что если при определенной скорости молекула проходит сквозь слой, то она её 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 слой:

$$D=2\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\int_{w_{np}}^{\infty}\exp\left(-\beta w^2\right)dw. \quad (6)$$

Здесь $\beta=\frac{m}{2kT}$, w – нормальная компонента скорости пробной молекулы, w_{np} – минимальная скорость прохождения пробной молекулой слоя.

Соотношение (6) с найденным значением w_{np} учитывает всю статистику ударяющихся о слой молекул и по величинам их скоростей, и по углам наклона траекторий этих молекул к поверхности плоского слоя.

Уравнение движения молекул

Предложенное континуальное описание взаимодействия атомов слоя с пробной молекулой газовой компоненты смеси позволяет решить идеализированную задачу от перемещения молекулы в направлении, перпендикулярном слою, т.е. записать одномерную постановку для этой задачи:

$$m\frac{dw}{dt}=-\frac{dU_G(z)}{dz},\frac{dz}{dt}=w.$$

Здесь m – масса пробной молекулы, $z(t)$ и $w(t)$ – нормальные компоненты её координат и скорости, $U_G(z)$ – потенциал взаимодействия слоя с молекулой, найденный по (3).

Результаты расчетов

Были проведены расчеты для прохождения гелием одиночного графенового барьера при $q=14,\alpha=10нм^{-1},T=300K$ и начальном положении молекул $z_0=-1,25нм$. Получена минимальная скорость прохождения молекулы гелия, равная 1172 м/с, и процент прохождения молекулами барьера 13,5. При тех же параметрах $q=14,\alpha=10нм^{-1},T=300K,z_0=-1,25нм$ для гелия, имеющего минимальную скорость прохождения 573 м/с, процент прохождения двойного графенового барьера равен 46,5. Второй графеновый лист находится на расстоянии 0,25 нм от начала координат. Для метана двойной барьер непроницаемый.

На рис. 1 последовательно изображены барьеры двух графеновых слоев, отвечающие степени разрежения в 12 атомов углерода. Видно, что в таком положении координаты максимумов энергии совпадают с точкой минимума потенциального взаимодействия от смежного листа.

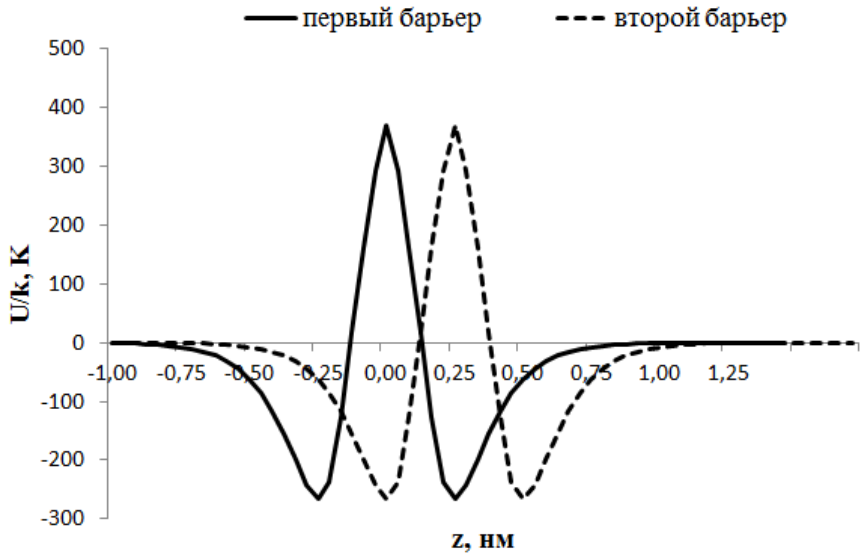

Рис. 1. Два барьера для гелия

На рис. 2 показаны нормальные компоненты скоростей и координаты по оси z пробных молекул гелия и метана. Видно, что при $w_{np} = 1172$ м/с слой является непроницаемым для молекул метана.

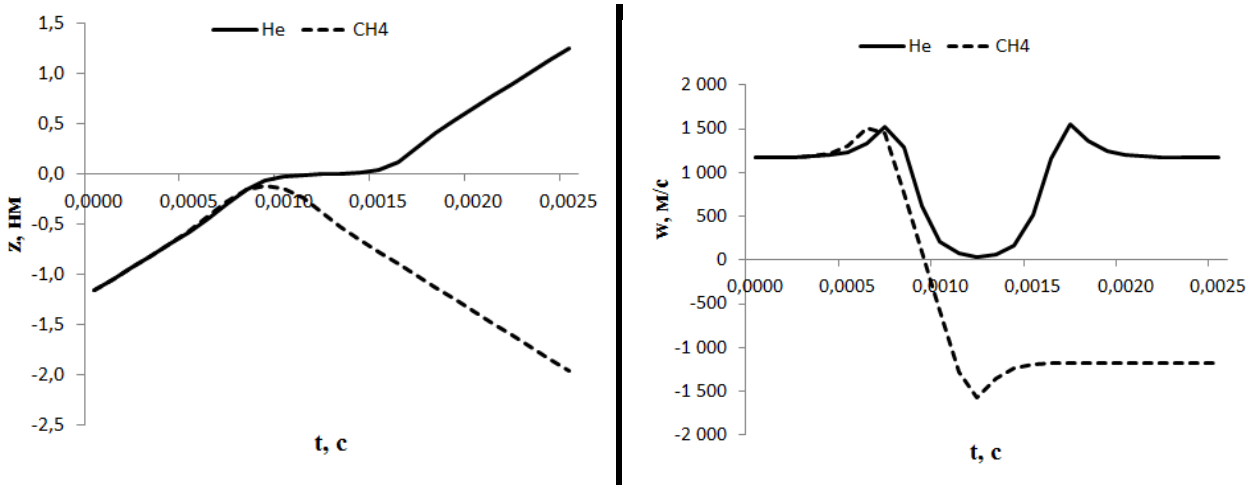

Рис. 2. Координаты и нормальные компоненты скорости
пробных молекул гелия и метана для одинарного слоя графена

О величине суммарного воздействия от двух параллельных разряженных листов графена можно судить по рис. 3. Видно, что произошло поглощение максимумов ямами. Это привело к снижению общего уровня положительной энергии барьера более чем в три раза от значений 371 единица до значений 104 единицы.

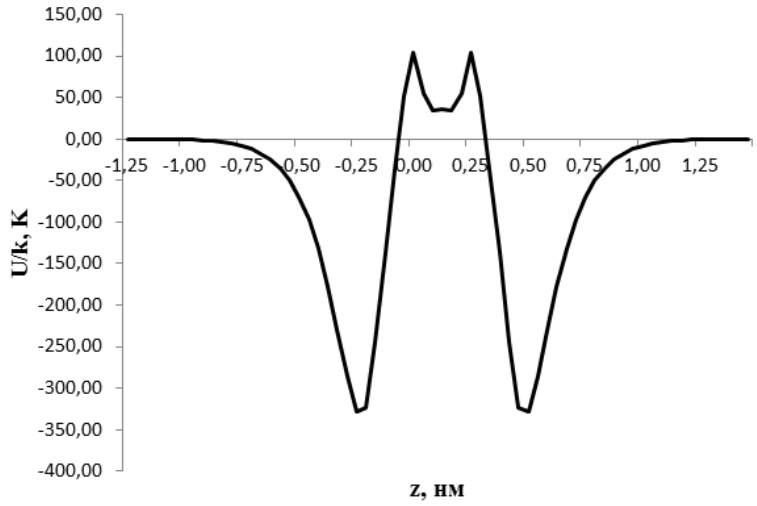

Рис. 3. Двойной графеновый барьер для гелия

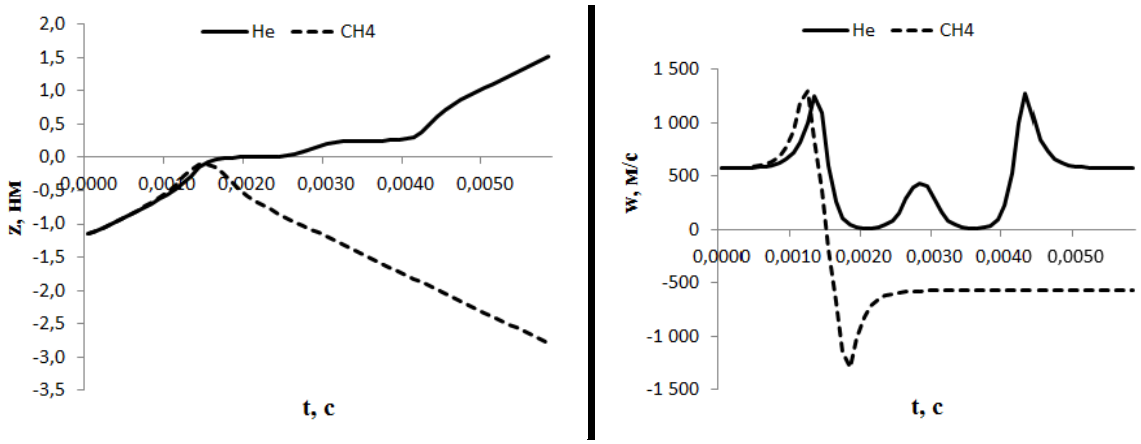

Рис. 4. Координаты и нормальные компоненты скорости
пробных молекул гелия и метана для двойного слоя графена

Заключение

В работе рассмотрен вопрос о проницаемости сверхтонких бесконечных однородных пористых углеводородных слоев. Предложен подход, согласно которому энергия воздействия от отдельных атомов материальной структуры слоя заменяется континуальным распределением потенциала взаимодействия. Это позволяет определить статистически среднее движение пробной молекулы через рассматриваемые материальные слои. Полученные результаты позволили локализовать глобальные сорбционные зоны как внутри слоя, так и у его внешних границ. Показано, что за счет поглощения потенциальными ямами максимумов энергии воздействия у двух последовательно расположенных графеновых листов происходит более чем трехкратное увеличение проницаемости по гелию.

Библиография

1. *Каплан И. Г.* Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – М.: Наука. Глав. ред. физ.-мат. лит-ры. – 1982. – 312 с.

2. *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 гос. ун-та. Математика и механика. – 2017. – № 45. – С. 80-87.

3. *Галашев А. Е.* Компьютерное изучение физических свойств медной пленки на поверхности нагретого графена / А. Е. Галашев, В. А. Полухин // Физика твердого тела. – 2013. – Т.55. – Вып. 8. – С. 1620-1625.

4. *Mikhail A. Bubenchikov, Alexey M. Bubenchikov, Olesya V. Usenko, Anton V. Ukolov* About a

permeability of graphene pores // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2015. – V.87 (1). – 012111.

УДК 519.64

ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛА С ПОМОЩЬЮ ВЕСОВЫХ КВАДРАТУРНЫХ ФОРМУЛ

Булгатова Е.Н.*, Павлова Е.Б.**
Восточно-Сибирский государственный университет технологий и управления,
*Россия, Улан-Удэ, * belena77@mail.ru, ** pavlova2607@mail.ru*

В работе рассматриваются весовые квадратурные формулы и весовые квадратурные формулы с оптимальным распределением узлов. Приводятся результаты вычисления интегралов по данным формулам.

Ключевые слова: *квадратурная формула, весовая квадратурная формула, оптимальное распределение узлов.*

CALCULATION OF INTEGRAL WITH THE WEIGHTED QUADRATURE FORMULAS

Bulgatova E.N.*, Pavlova E.B.**
East Siberia State University of Technology and Management, Russia, Ulan-Ude
** belena77@mail.ru, ** pavlova2607@mail.ru*

In the article considers weighted quadrature formulas and weight quadrature formulas with optimal distribution of nodes. The results of calculating integrals with these formulas are given.

Key words*: quadrature formula, weight quadrature formula, optimal distribution of nodes.*

Рассмотрим квадратурные формулы с весом для вычисления интеграла $\int_0^1 g(x) f(x)dx$, где вес $g(x) \in L_{p'}, 1 < p \le \infty$, $f \in W_p^m$.

Пусть $g(x) = x^s, -1 < s < 1$. Составим весовую формулу для $s = -\frac{1}{2}$ и $m = 2$.

$$\int_0^1 x^{-\frac{1}{2}} f(x)dx = \int_0^h x^{-\frac{1}{2}} f(x)dx + \int_h^{2h} x^{-\frac{1}{2}} f(x)dx + \\ + \int_{2h}^{3h} x^{-\frac{1}{2}} f(x)dx + \cdots + \int_{(N-2)h}^{(N-1)h} x^{-\frac{1}{2}} f(x)dx + \int_{(N-1)h}^{Nh} x^{-\frac{1}{2}} f(x)dx \quad (1)$$

Каждый из интегралов в правой части равенства (1) вычислим по формуле

$$\int_{h\beta}^{h\beta+h} x^{-\frac{1}{2}} f(x)dx \cong h \sum_{\gamma=0}^{2} C_\gamma(\beta) f(h\gamma + h\beta), \quad (2)$$

где коэффициенты $C_\gamma(\beta)$ определяются из систем

$$\int_0^1 (xh + \beta h)^{-\frac{1}{2}} x^\alpha dx = \sum_{\gamma=0}^{2} C_\gamma(\beta)\gamma^\alpha,\ \alpha = 0,1,2,\ \beta = 0,1,\ldots,N-1.$$

Определив коэффициенты $C_\gamma(\beta)$ и подставив вместо каждого интеграла в равенстве (1) его выражение по формуле (2), получим

$$\int_0^1 x^{-\frac{1}{2}} f(x)dx \approx h\big[C_0(0) f(0) + \big(C_1(0) + C_0(1)\big) f(h) + \big(C_2(0) + C_1(1) + C_0(2)\big) f(2h) +$$