

СРАВНЕНИЕ ДВУХ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЯЧЕЕК НАНОМЕМБРАНЫ ДЛЯ ЗАДАЧ РАЗДЕЛЕНИЯ СМЕСИ ГАЗОВ

Е.А. Тарасов

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А.М. Бубенчиков
 Национальный исследовательский Томский государственный университет,
 Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
 E-mail: DiomedIS@mail.ru

Актуальность. Задача выделения гелия из природного газа представляется крайне важной по ряду причин. Гелий широко используется в медицине, промышленности, кроме того, необходим для научных исследований. Небольшая концентрация, которая к тому же сильно зависит от месторождения, делает привычные технологии его выделения (криогенную дистилляцию и напорную адсорбцию) не рентабельными на большинстве месторождений природного газа. В качестве альтернативы, предполагается использовать мембранные технологии для выделения гелия. Мембрану для подобных технологий можно создать на основе фуллереновых частиц или же углеродных нанотрубок. При рассмотрении мембран существует два подхода к представлению взаимодействия структуры с молекулой или атомом газа. Континуальный подход позволяет описать взаимодействие интегрально со всей структурой, значительных успехов в этой области добились В.Я. Рудяк и С.Л. Краснолуцкий [1]. Дискретный подход заключается в описании взаимодействия молекулы или атома с каждым атомом структуры. Примеры использования подобного подхода приведены в [2-4]. В рамках данной статьи будет рассмотрен дискретный подход.

Моделирование. Для моделирования были выбраны две элементарные ячейки наномембраны – 4 открытые углеродные нанотрубки и 8 молекул фуллерена, отстоящие друг от друга на равное расстояние. При этом длина нанотрубок составляет 1,136 нм, а радиус молекулы фуллерена – 0,357 нм. Минимальное расстояние между объектами данной однопараметрической системы $h=0,35$ нм. В [4] было показано, что форма барьера для открытой нанотрубки инвариантна её длине. В основе модели в обоих случаях лежит модифицированный LJ -потенциал. Результаты численного моделирования процесса взаимодействия атома гелия с двумя типами структур представлены на рисунках 1 и 2.

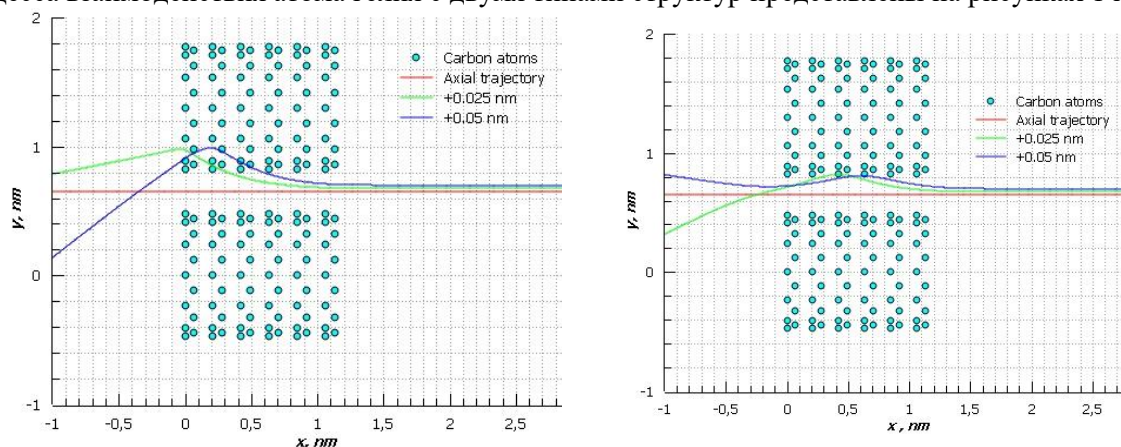


Рис. 1. Взаимодействие атома гелия (а), молекулы метана(б) и элементарной ячейки мембраны, составленной из четырех открытых углеродных нанотрубок

Как можно видеть из рисунков, траектории близкие к оси элементарной ячейки являются проницаемыми для каждой компоненты бинарной смеси гелий-метан, при скоростях молекулы/атома сравнимых с наиболее вероятными скоростями данных газов, взятых из распределения Максвелла. При нормальных условиях для гелия эта скорость составляет 1300 м/с, а для метана – 750 м/с. Однако, характер движения в элементарной ячейке составленной из молекул фуллерена начинает существенно отличаться от движения в ячейке сформированной углеродными нанотрубками. Это связано, прежде всего, с формой барьера, создаваемого подобной структурой. Если для системы нанотрубок форма барьера получена и была показана в [5], то для системы фуллереновых частиц она будет иметь следующий вид, представленный на рисунке 3.

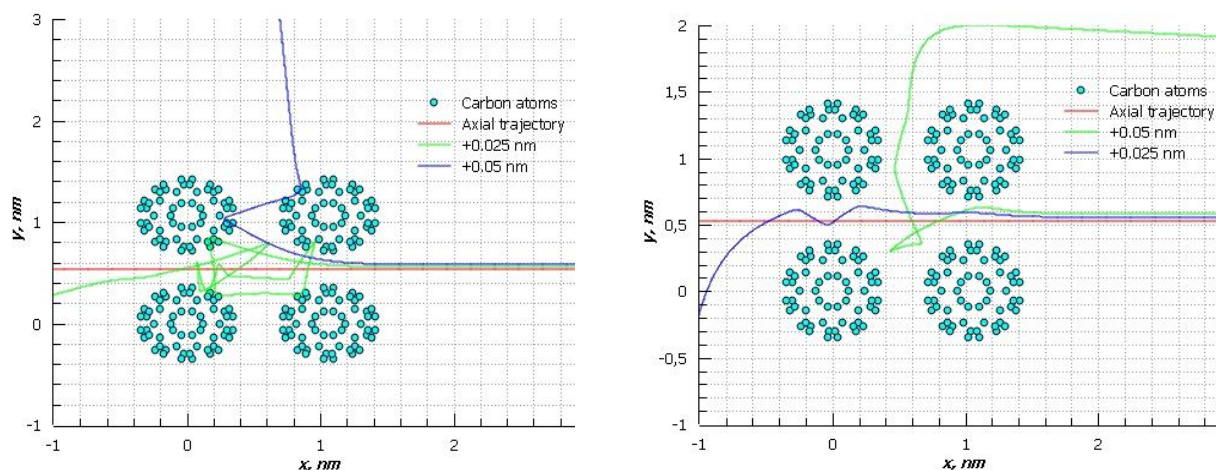


Рис. 2. Взаимодействие атома гелия (а), молекулы метана(б) и элементарной ячейки мембраны, составленной восьми молекул фуллерена

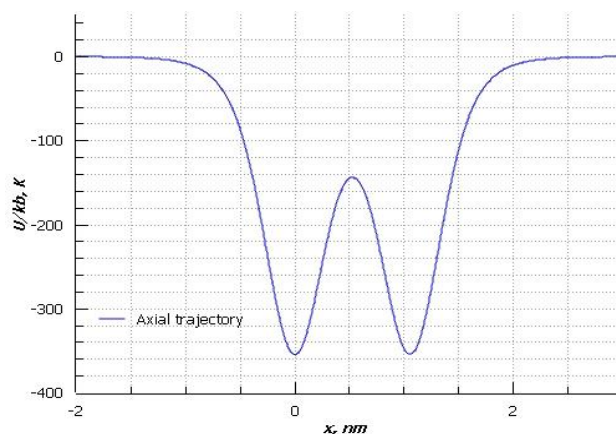


Рис. 3. Форма барьера для системы фуллереновых частиц

Как видно из рисунка 3, распределение потенциала внутри данной системы, хоть и является потенциальной ямой, но в области между молекулами фуллерена имеет явно выраженный максимум, который усложняет траекторию движения атома или молекулы внутри системы. При увеличении числа слоев материала созданного на основе подобной ячейки, траектория будет усложняться.

Выводы. Результаты моделирования позволяют говорить о том, что в рамках дискретного подхода описания взаимодействия элементарная ячейка мембраны на основе нанотрубок удобнее для использования в силу инвариантности формы барьера длине трубки, в то время как материал на основе фуллерена будет иметь более сложную форму барьера при увеличении его длины.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рудяк В.Я. О потенциале взаимодействия наночастиц / В.Я. Рудяк, С.Л. Краснолуцкий, Д.А. Иванов // Доклады Академии наук – 2012 – Т. 442. – № 1. – С. 54-56.
2. Бубенчиков М.А. Режимы взаимодействия низкоэнергетических молекул с открытой нанотрубкой. / М.А. Бубенчиков, А.М. Бубенчиков, О.В. Усенко, Е.А. Тарасов // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2016. – № 3 (41). – С. 58-64.
3. Борсук А. С. Движение молекулы в поле потенциала открытой нанотрубки / А. С. Борсук, Е. А. Тарасов, В. Б. Цыренова // Геометрия многообразий и её приложения : материалы четвертой научной конференции с международным участием. Улан-Удэ – оз. Щучье – оз. Байкал, 27–30 июня 2016 г. – Улан-Удэ, 2016. – С. 90–94.
4. Тарасов Е.А. Взаимодействие нанообъектов на основе углерода с компонентами природного газа: Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук. – Томск, 2017. – 24 с.