

МД-моделирование взаимодействия газовых частиц с углеродными нанотрубками

Научный руководитель – Челнокова Анна Сергеевна

Кусаинов Расул Гайсаулы

Студент (бакалавр)

Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Механико-математический факультет, Томск, Россия

E-mail: rasulkusainov3@gmail.com

Введение Наноструктуры на основе углерода, такие как графен и углеродные нанотрубки, привлекают внимание исследователей благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам [1]. Изучение взаимодействия газовых смесей с такими наноструктурами имеет важное значение для мембранных технологий, включая процессы разделения газов [2]. Одним из эффективных методов исследования подобных систем является молекулярно-динамическое моделирование, позволяющее количественно оценить процессы адсорбции и диффузии [3].

Методы В докладе представлена математическая модель взаимодействия газовой смеси с лесом нанотрубок. Движение частиц газа в выделенном объеме описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, учитывающих межмолекулярные взаимодействия посредством потенциала Леннарда-Джонса. Численное решение задачи осуществляется методом Рунге-Кутты 4-го порядка. В расчетах используются граничные условия зеркального отражения от стенок рассматриваемого куба, при которых частицы, достигшие границы расчетной области, изменяют направление скорости на противоположное, имитируя переход аналогичной частицы из соседнего виртуального объема.

Результаты Численное моделирование выполнено для смеси атомов гелия и ксенона, взаимодействующих с лесом углеродных нанотрубок. Полученные траектории частиц показывают, что ксенон преимущественно сорбируется на поверхности нанотрубок, тогда как гелий свободно диффундирует сквозь их структуру. Расчеты показали, что на первой наносекунде процесса распределение скоростей частиц соответствует максвелловскому распределению. Вычислительная погрешность сохранялась в пределах 10^{-5} безразмерных единиц, что подтверждает корректность работы численного метода.

Заключение Разработанная модель позволила выявить ключевые особенности взаимодействия газовых смесей с нанотрубками. Полученные результаты могут быть использованы для проектирования новых мембранных материалов, а также для дальнейшего исследования процессов диффузии и адсорбции в углеродных наноструктурах.

Источники и литература

- 1) Lindsey R.K., Rafferty J.L., Eggimann B.L., Siepmann J.I., Schure M.R. Molecular simulation studies of reversed-phase liquid chromatography // Journal of Chromatography A. 2013. Vol. 1287. P. 60–82.
- 2) Rybka J., Holtzel A., Melnikov S.M., Seidel-Morgenstern A., Tallarek U. A new view on surface diffusion from molecular dynamics simulations of solute mobility at chromatographic interfaces // Fluid Phase Equilibria. 2016. Vol. 407. P. 177–187.
- 3) Tomanek D. Guide through the nanocarbon jungle: Buckyballs, nanotubes, graphene and beyond. Morgan & Claypool Publishers, 2014. 163 p.