

Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия газовой смеси с графеновыми мембранами

Челнокова Анна Сергеевна

Региональный научно-образовательный математический центр Томского государственного университета

smolina-nyuta@mail.ru

Соавторы: Бубенчиков Алексей Михайлович

Секция: Прикладная математика и математическое моделирование

Наноструктуры на основе углерода, такие как графен, углеродные нанотрубки и фуллерены, привлекли широкое внимание исследователей по всему миру благодаря своим уникальным свойствам. В наномасштабе одним из устоявшихся подходов к изучению подобных структур является молекулярно-динамическое моделирование. Оно особенно полезно для количественной оценки основных взаимодействий и динамических процессов, определяющих коэффициенты адсорбции или диффузии.

В настоящее время в качестве перспективного фильтрующего материала рассматриваются графеноподобные мембраны, и существует необходимость в разработке теоретических подходов для изучения диффузии и сорбции, которые включают межчастичные взаимодействия для предоставления точной информации о массопереносе.

В докладе будет представлена математическая модель взаимодействия компонент газовой смеси He, Ar и Xe с графеновыми листами, в том числе имеющими дефекты. Силы взаимодействия описаны с использованием потенциалов Леннарда-Джонса и Бреннера второго рода. Приведено сравнение коэффициентов проницаемости различных газовых компонент через графеновые листы с дефектами с применением вышеуказанных потенциалов. Представлены оценки температуры газовой смеси и графеновой мембраны.