ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ХАРАКТЕРИСТИК ДИФФУЗИОННОГО МАССОПЕРЕНОСА ФЛЮИДА ВДОЛЬ НАНОПОР ОТ ГЕОМЕТРИИ ПОВЕРХНОСТИ ПОРЫ

Никонов Э. Г., Поповичова М.1

Объединённый институт ядерных исследований, РФ, 141980, г. Дубна Московской области, **ул. Жолио-Кюри, 6,** +74962164722, [e.nikonov@jinr.ru](mailto:e.nikonov@jinr.ru)

1Университет г. Прешов, Словакия, 080 01, г. Прешов, ул. Конштантинова, 16, +421948034426, [maria.popovicova@unipo.sk](mailto:maria.popovicova@unipo.sk)

Исследование зависимости диффузионных характеристик пористых материалов от длины и кривизны поверхности поры является одной из актуальных исследовательских задач, успешное решение которых может привести к улучшению понимания процессов массопереноса, происходящих в пористых системах в различных областях науки и технологий. Молекулярно-динамическое моделирование [1] наряду с численно-аналитическими подходами, основанными на решении обобщенного уравнения Фика-Якобса [2] или классического уравнения диффузии, позволяет значительно увеличить точность описания процессов массопереноса флюида в нанопоре. В данной работе проведено исследование зависимости коэффициента диффузии и проницаемости флюида в нанопоре от длины и кривизны поверхности поры и характеристик процесса взаимодействия частиц флюида со стенками поры в рамках модели простой жидкости.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Э. Г. Никонов, М. Поповичова, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2020, № 3, с. 95–102.
2. Ledesma-Durán, A., Hernández-Hernández, S. I., & Santamaría-Holek, I., The Journal of Physical Chemistry C 2016 120 (14), 7810-7821, DOI: 10.1021/acs. jpcc.5b12145.