ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ ОТ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВНУТРЕННЕЙ ПОВЕРХНОСТИ НАНОПОР

Э. Г. Никонов, М. Поповичова, О. К. Никонова

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

Исследование проницаемости пористых материалов в зависимости от геометрических характеристик 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 профиля 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.