

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ ОТ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВНУТРЕННЕЙ ПОВЕРХНОСТИ НАНОПОР

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

<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Российская Федерация

Одной из самых важных характеристик пористого вещества является проницаемость по отношению к газам и жидкостям. В зависимости от значений величины проницаемости пористое вещество по-разному может взаимодействовать с протекающими через это вещество газами и жидкостями. 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. В данной работе проведено исследование зависимости коэффициента диффузии и проницаемости флюида в нанопоре от кривизны поверхности поры и характеристик процесса взаимодействия частиц флюида со стенками поры в рамках модели простой жидкости.

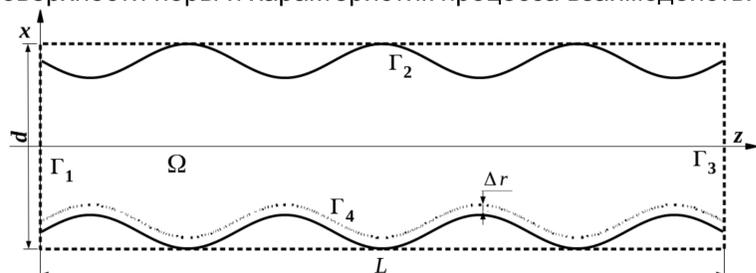


Рис. 1. Модель с криволинейным профилем стенок поры.

## Потенциалы взаимодействия

Для моделирования процессов взаимодействия молекул водяного пара между собой внутри и вне поры использовался потенциал **Леннарда-Джонса** с постоянными  $\epsilon = 6.74 \cdot 10^{-3}$  эВ и  $\sigma = 3.17$  Å. Взаимодействие молекул воды со стенками поры (диоксид кремния) моделируется также с использованием потенциала Леннарда-Джонса, но с параметрами  $\sigma_{wf} = 0.37$  нм и  $\epsilon_{wf} = 3.73 \cdot 10^{-3}$  эВ, полученными для учета взаимодействия молекул газа с молекулами стенки с использованием процедуры Лоренца-Бертло.

## Термостаты

Для контроля температуры моделируемой системы использовался термостат **Берендсена**. Термостат Берендсена реализуется в уравнениях движения путем включения в результирующую силу дополнительного переменного нелинейного трения.

Для моделирования учета взаимодействия молекул воды со стенками поры вплоть до конденсации воды на стенках использовался термостат **Андерсена**. Термостат Андерсена действует на молекулы воды в тонком слое толщиной  $\Delta r$  около стенки поры (Рис.1).

Параметр  $\tau_B$  термостата Берендсена принимался равным  $\tau_B = 0.08$  пс. Параметр  $\nu$  термостата Андерсена принимался равным единице. Взаимодействие со стенкой поры учитывалось для частиц, попавших при движении в пору в слой толщиной  $\Delta r = 0.025d$  вблизи стенки поры.

## Граничные условия

При моделировании методом классической МД использовались следующие граничные условия. Границы поры  $\Gamma_2$  и  $\Gamma_4$  являются абсолютно непрозрачными для молекул воды. Границы  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_3$  абсолютно прозрачны для молекул воды.

## Начальные условия

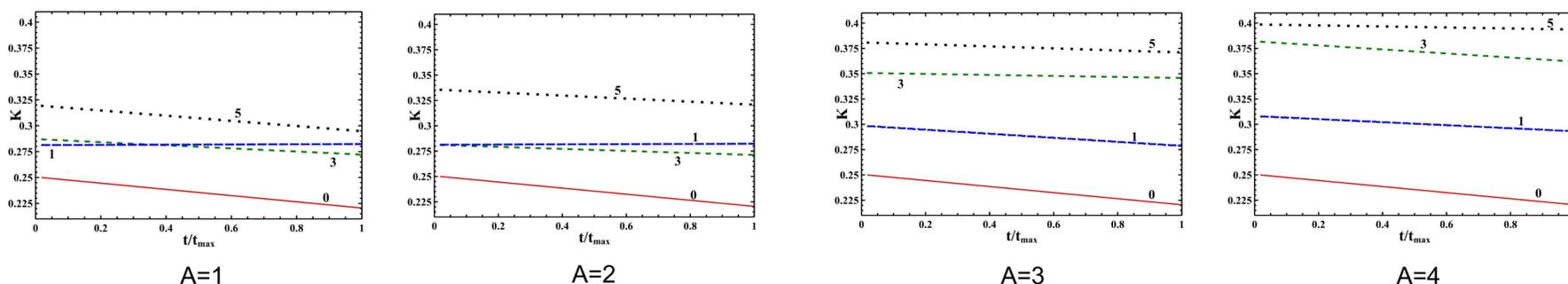
Моделирование проводилось при температуре окружающей среды слева и справа от поры  $T = 35^\circ\text{C}$  и следующих значениях давления и концентрации на открытых концах поры. Слева от поры (Рис. 1) находится 100% насыщенный пар при атмосферном давлении, т. е. давление насыщенного пара и концентрация будут соответственно равны  $p_L = 5.622$  кПа и  $\rho_L = 0.03962$  кг/м<sup>3</sup>. Справа от поры (Рис. 1) находится 20% насыщенный водяной пар при атмосферном давлении с соответствующими значениями давления насыщенного пара и концентрации  $p_R = 1.124$  кПа и  $\rho_R = 7.9 \cdot 10^{-3}$  кг/м<sup>3</sup>. В начальный момент времени давление и концентрация на левом и правом конце поры равны  $p_L, \rho_L$  и  $p_R, \rho_R$  соответственно. Внутри поры водяной пар находится в состоянии термодинамического равновесия. То есть оба конца поры не изолированы от внешней среды. В этом случае давление вдоль оси  $z$  зависит линейно от  $z$ .

$$p(z) = \left( 5.62 - \frac{4.5}{L} z \right), 0 \leq z \leq L.$$

## Интегрирование уравнение движения

Численное интегрирование уравнений Ньютона проводилось скоростным методом Верле для  $5 \cdot 10^3$  шагов по времени с величиной временного шага  $\Delta t = 8$  фс, что соответствует интервалу 40 пс.

## Результаты моделирования



Эволюция коэффициента проницаемости  $K$  [нм] по времени в зависимости от количества «волн» искривленной границы поры при различных значениях амплитуды  $A$ . Искривленность границы поры моделируется функцией  $w(z) = A \cdot \sin(z)$ . Амплитуда  $A = 0, 1, 2, 3, 4$  приведенных единицах.  $A = 0$  соответствует прямолинейным границам  $\Gamma_2$  и  $\Gamma_4$  поры.

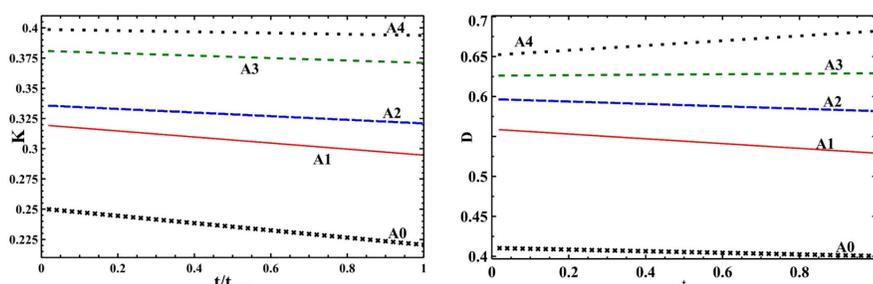


Рис.2. Эволюция коэффициента проницаемости  $K$  [нм] по времени в зависимости от амплитуды для пяти волн.

Рис.3. Эволюция коэффициента диффузии  $D$  [нм/пс] по времени в зависимости от амплитуды для пяти волн.

## Заключение

Анализ результатов моделирования позволяет сделать следующие выводы. При увеличении количества «волн», т.е. при увеличении степени нелинейности границ поры, при фиксированной амплитуде, которая может характеризовать глубину нелинейности границ, коэффициент проницаемости  $K$  поры для молекул водяного пара растет. Аналогичный рост наблюдается и при увеличении амплитуды при фиксированном значении «волн» (Рис.2). При этом во всех перечисленных случаях проницаемость поры с течением времени уменьшается. Для коэффициента диффузии  $D$  наблюдается иная картина (Рис. 3). Для фиксированного значения «волн», в данном случае пяти «волн» на каждой границе поры, при определенном значении амплитуды, начиная с амплитуды  $A=3$ , коэффициент диффузии может с течением времени возрастать.