

УДК 531.395:539.198:539.231:519.6

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРОПРОНИЦАЕМОСТИ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ВЕЩЕСТВА С ОДНОРОДНОЙ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРОЙ<sup>1</sup>

© 2020 г. Э. Г. Никонов<sup>а, \*</sup>, М. Поповичова<sup>б</sup>

<sup>а</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна,  
Московская область, 141980 Россия

<sup>б</sup>Университет Прешова, Прешов, 08001 Словакия

\*e-mail: e.nikonov@jinr.ru

Поступила в редакцию 26.06.2019 г.

После доработки 15.07.2019 г.

Принята к публикации 15.07.2019 г.

Одной из самых важных характеристик пористого вещества является проницаемость по отношению к газам и жидкостям. В зависимости от величины проницаемости пористое вещество по-разному может взаимодействовать с протекающими через него газами и жидкостями. Значительный практический интерес вызывают исследования взаимодействия водяного пара с материалами с равномерно распределенными порами. Многие из них являются строительными и конструкционными материалами. Интерес обусловлен также возможностью распространения результатов исследований индивидуальной поры на пористую среду, если среда с достаточной точностью может быть представлена в виде структуры с равномерно распределенными порами. Проведено исследование зависимости проницаемости индивидуальной цилиндрической поры от ее радиуса, длины и характеристик процесса взаимодействия молекул воды со стенками поры.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, диффузия, проницаемость, взаимодействие воды и пористых материалов.

DOI: 10.31857/S1028096020030139

### ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальные и теоретические исследования диффузионных свойств пористых веществ и материалов имеют большое практическое значение в различных областях науки и технологий. Диффузионные характеристики, включая коэффициент диффузии и проницаемость, существенно зависят от таких свойств материала, как пористость, средний размер и связность пор, локализация пор по объему образца, распределение по величине сечения пор, степень извилистости пор и других [1]. Отличительной особенностью пористых систем является неупорядоченность их структуры [2]. Точное аналитическое решение газодинамических уравнений, описывающих процессы взаимодействия пара или газа с пористой средой, практически невозможно. Поэтому при теоретическом исследовании заменяют реальную пористую среду упрощенными упорядоченными моделями с эквивалентными гидравлическими свойствами. Точные решения уравнений газовой динамики и гидродинамики могут быть получены

для случая течения вязкой жидкости или плотного газа по цилиндрической трубе соответствующих размеров. Данное обстоятельство было использовано при конструировании моделей для описания диффузии вязких жидкостей и плотных газов [3–5]. Другой подход к описанию процессов взаимодействия газообразного вещества с пористыми материалами основан на решении, например, нелинейного уравнения диффузии со ступенчатой аппроксимацией полученного в результате экспериментальных измерений коэффициента диффузии [6]. В связи с интенсивным развитием нанотехнологий [7] широкое распространение получили материалы с равномерно распределенными порами заданного поперечного сечения [8], что привело к значительному повышению актуальности развития моделей, основанных на использовании индивидуальной поры соответствующей геометрической конфигурации для исследования диффузионных характеристик взаимодействия пористого материала с газом или паром. Полученные с использованием упомянутых моделей диффузионные характеристики могут быть использованы в дальнейшем для исследова-

<sup>1</sup> ЛИТ ОИЯИ № 05-6-1118-2014/2019, протокол № 4596-6-17/19.

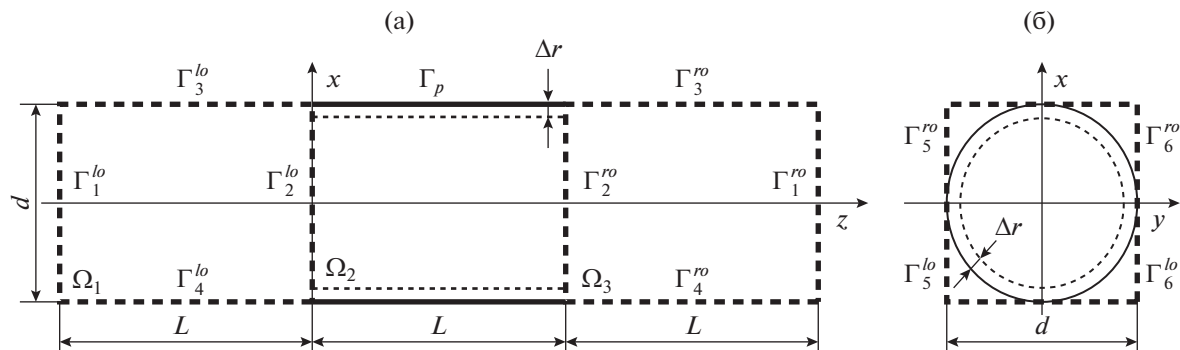


Рис. 1. Модель сквозной цилиндрической поры, вид: а – спереди; б – слева.

дования крупных образцов пористых материалов [9, 10]. Данные исследования особенно актуальны для решения практических задач фильтрации в экологии, защите окружающей среды от воздействия потенциально опасных, с точки зрения химического и радиоактивного загрязнения, объектов промышленного и научно-исследовательского назначения. Поскольку используемые в научных исследованиях, строительстве и промышленном производстве пористые материалы содержат в себе микро- и мезопоры, очень редко макропоры, при рассмотрении физической картины процессов взаимодействия газа с порой или стенками поры должна учитываться молекулярная структура протекающего через пору газа, так как длина свободного пробега молекулы газа не превышает размер индивидуальной поры [11]. Поэтому в настоящей работе моделирование процесса взаимодействия водяного пара с порой проведено методом молекулярной динамики [12]. В качестве модели была использована сквозная пора цилиндрического типа. Было проведено численное исследование зависимости величины проницаемости индивидуальной цилиндрической поры от ее радиуса, длины и характеристик процесса взаимодействия молекул воды со стенками поры.

### МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОДЯНОГО ПАРА И СКВОЗНОЙ ПОРЫ

В рамках классической молекулярной динамики любой физической объект может быть представлен в виде многочастичной системы. Составляющие данную систему частицы (атомы или молекулы) являются материальными точками. Поведение отдельной частицы в системе описывается классическими уравнениями движения Ньютона:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{f}_i. \quad (1)$$

Здесь  $i$  – номер частицы ( $1 \leq i \leq N$ ),  $N$  – полное число частиц,  $m_i$  – масса частицы,  $\mathbf{f}_i$  – равнодействующая всех сил, действующих на частицу:

$$\mathbf{f}_i = \frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i} + \mathbf{f}_i^{\text{ex}}, \quad (2)$$

где  $U$  – потенциал взаимодействия между частицами,  $\mathbf{f}_i^{\text{ex}}$  – сила, обусловленная внешними полями.

Для моделирования диффузии водяного пара через сквозную пору была использована трехмерная модель. Молекулы воды – материальные точки, движение которых описывается классическими уравнениями Ньютона (1). Модель поры представляет собой цилиндр длиной  $L$  и диаметром  $d$  (рис. 1). Боковая поверхность цилиндра непрозрачна для молекул воды. Основания цилиндра открыты для движения молекул в обе стороны. Внешнее по отношению к поре пространство моделируется прямоугольными параллелепипедами с размерами  $d \times d \times L$ , примыкающими квадратными гранями к обоим основаниям цилиндра.

При моделировании методом молекулярной динамики использовали следующие граничные условия. Боковая поверхность цилиндра  $\Gamma_p = [x^2 + y^2 = r^2; 0 \leq z \leq L]$ , где  $r$  – радиус основания цилиндра, абсолютно непрозрачна для молекул воды. Основания цилиндра абсолютно прозрачны для молекул воды. Зафиксированы периодические условия на границах  $\Gamma_1^{\text{lo}}, \Gamma_2^{\text{lo}}, \Gamma_3^{\text{lo}}, \Gamma_4^{\text{lo}}, \Gamma_5^{\text{lo}}, \Gamma_6^{\text{lo}}$  и  $\Gamma_1^{\text{ro}}, \Gamma_2^{\text{ro}}, \Gamma_3^{\text{ro}}, \Gamma_4^{\text{ro}}, \Gamma_5^{\text{ro}}, \Gamma_6^{\text{ro}}$ , которые являются, соответственно, гранями левого и правого параллелепипедов и моделируют внешнее по отношению к поре пространство.

Для моделирования процессов взаимодействия молекул водяного пара между собой внутри и вне поры был использован потенциал Леннарда-Джонса [13]:

$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (3)$$

с постоянными  $\epsilon = 6.74 \times 10^{-3}$  эВ и  $\sigma = 3.17$  Å. Здесь  $r$  – расстояние между центрами частиц,  $\epsilon$  – глубина потенциальной ямы,  $\sigma$  – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю. Параметры  $\epsilon$  и  $\sigma$  являются характеристиками атомов соответствующего вещества. Минимум потенциала находится в точке  $r_{\min} = 2\sigma^{1/6}$ . Потенциал Леннарда-Джонса широко используется при молекулярно-динамическом моделировании воды и насыщенного водяного пара [14].

Взаимодействие молекул воды со стенками поры моделируется также с использованием потенциала Леннарда-Джонса, но с параметрами  $\sigma_{wf}$  и  $\epsilon_{wf}$ , полученными для учета взаимодействия молекул газа с молекулами стенки [15]:

$$U(\xi) = 4\epsilon_{wf} \left[ \left( \frac{\sigma_{wf}}{\xi} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{wf}}{\xi} \right)^6 \right]. \quad (4)$$

Здесь  $\sigma_{wf}$  и  $\epsilon_{wf}$  – параметры длины и энергии, используемые для учета взаимодействия молекул воды с молекулами материала поры без учета молекулярной структуры стенок поры. Переменная  $\xi$  представляет собой расстояние от молекулы воды до стенки поры. В случае цилиндрической модели поры  $\xi$  – это расстояние от молекулы воды до боковой поверхности цилиндра (рис. 1).

Для интегрирования уравнений движения (1) был использован модифицированный метод Верле [16]. Интегрирование проводится по следующей схеме. В начале каждого шага задают или рассчитывают на предыдущем шаге по времени  $t$  следующие величины:  $\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t), \mathbf{f}(t)$ . Затем вычисляют скорости частиц в момент времени  $t + \frac{\Delta t}{2}$  и координаты нового местонахождения частиц:

$$\mathbf{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \mathbf{v}(t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\mathbf{f}(t)}{m},$$

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \Delta t \mathbf{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right).$$

После этого пересчитывают силы, действующие на частицу в момент времени  $t + \Delta t$ :

$$\mathbf{f}(t) \rightarrow \mathbf{f}(t + \Delta t).$$

Далее рассчитывают значения скоростей на следующем шаге:

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\mathbf{f}(t + \Delta t)}{m}.$$

Для контроля температуры при обмене энергией между моделируемой системой и окружающей средой в молекулярной динамике используют специальные алгоритмы, называемые термостатами. В настоящей работе для контроля температуры моделируемой системы был исполь-

зован термостат Берендсена [17]. Он реализуется в уравнениях движения (1) путем включения в результирующую силу дополнительного переменного нелинейного трения. В результате уравнения движения преобразуются к следующему виду:

$$\frac{d\mathbf{r}_i(t)}{dt} = \mathbf{v}_i(t), \quad \frac{d\mathbf{v}_i(t)}{dt} = \frac{\mathbf{f}_i(t)}{m_i} - \lambda(t)\mathbf{v}_i(t). \quad (5)$$

Коэффициент пересчета скорости в каждый момент времени  $t$ :

$$\lambda = \left[ 1 + \frac{\Delta t}{\tau_B} \left( \frac{T_0}{T(t)} - 1 \right) \right]^{1/2}, \quad (6)$$

зависит от так называемого “времени нарастания”  $\tau_B$  термостата, значение которого находится в закрытом интервале [0.1, 2] пс. Параметр  $\tau_B$  описывает силу связи моделируемой системы с гипотетическим тепловым резервуаром, моделирующим бесконечную внешнюю среду. При увеличении  $\tau_B$  сила связи системы с тепловым резервуаром уменьшается, что приводит к увеличению времени достижения заданной температуры  $T_0$  в системе, если в данный момент времени  $t$  система находится в термодинамическом состоянии при температуре  $T(t)$ . Алгоритм Берендсена, будучи достаточно простым в численной реализации, очень эффективен для достижения целевой температуры в состояниях системы, далеких от термодинамического равновесия.

Для моделирования учета взаимодействия молекул воды со стенками поры вплоть до ее конденсации на стенках был использован термостат Андерсена [18]. Помимо возможности моделировать процесс прилипания молекул воды к стенкам поры термостат Андерсена (один из самых простых термостатов) позволяет корректно моделировать канонический ансамбль с сохранением числа частиц ( $N$ ), объема системы ( $V$ ) и температуры ( $T$ ). Он действует на молекулы воды в тонком слое толщиной  $\Delta r$  около стенки поры (рис. 1). В каждый момент времени скорости (импульсы) всех частиц, попавших в упомянутый выше слой, приравниваются случайной величине с равномерным распределением при заданной температуре. Данный алгоритм имитирует столкновение молекул воды с частицами теплового резервуара при определенной температуре  $T$ . Сила сцепления с тепловым резервуаром определяется частотой столкновений  $\nu$ . Для каждой частицы случайная переменная, пропорциональная числу столкновений, выбирается из интервала от нуля до единицы. Если значение этой переменной меньше, чем  $\nu \Delta t$ , где  $\Delta t$  – временной шаг, то скорость частицы  $\mathbf{v}(t + \Delta t)$  становится равной случайному числу  $\zeta \in N[0; T]$ , где  $N[0; T]$  – распределение Гаусса с дисперсией  $T$ . В этом случае скоростная

схема Верле с учетом термостата Андерсена может быть представлена в следующем виде: для момента времени  $t + \Delta t$  вычисляются координаты положения частицы

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{\mathbf{f}(t)}{2m}(\Delta t)^2,$$

затем вычисляются значения скоростей частиц в момент времени  $t + \frac{\Delta t}{2}$ :

$$\mathbf{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \mathbf{v}(t) + \frac{\Delta t \mathbf{f}(t)}{2m},$$

после этого вычисляется скорость частицы в момент времени  $t + \Delta t$ :

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\Delta t \mathbf{f}(t + \Delta)}{2m}.$$

Скорость частицы выбирают в зависимости от частоты столкновений  $\nu$ . Если случайно выбранная величина  $\xi < \Delta t$ ,  $\xi \in U[0;1]$ , где  $U[0;1]$  – равномерное распределение вещественной случайной величины, то  $|\mathbf{v}(t + \Delta t)| = \zeta$ , где случайная величина  $\zeta \in N[0;T]$ ,  $N[0;T]$  – распределение Гаусса с дисперсией  $T$ . Для вычисления давления в поре используется формула, следующая из вириального уравнения [19]:

$$P = \frac{1}{3V} \left( \langle 2K \rangle + \left\langle \sum_{i < j} \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{r}_{ij}) \right\rangle \right).$$

Здесь  $V$  – объем поры,  $\langle 2K \rangle$  – удвоенная кинетическая энергия, усредненная по ансамблю частиц,  $\mathbf{f}(\mathbf{r}_{ij})$  – сила взаимодействия между частицами  $i$  и  $j$  на расстоянии  $\mathbf{r}_{ij}$ .

## ОПИСАНИЕ МОДЕЛИРУЕМОЙ СИСТЕМЫ

В настоящей работе исследование процессов диффузии водяного пара через пористую поверхность проводили путем моделирования потока молекул воды через сквозную цилиндрическую пору объемом  $V = L\pi d^2/4$ , где  $L = 400$  нм – высота цилиндра,  $d = 40$  нм – диаметр его основания. Моделирование осуществляли при температуре окружающей среды  $T = 35^\circ\text{C}$  слева и справа от поры и определенных давлений и концентрации на открытых концах поры. Слева от поры (рис. 1) находится 100% насыщенный пар при атмосферном давлении  $p_L = 5.622$  кПа, концентрация  $\rho_L = 0.03962$  кг/м<sup>3</sup>. Справа от поры – 20% насыщенный водяной пар при атмосферном давлении  $p_R = 1.124$  кПа,  $\rho_R = 7.9 \times 10^{-3}$  кг/м<sup>3</sup>. В приведенных единицах имеем следующие значения:

$$L^* = 1264, \quad d^* = 126.4, \quad T^* = 3.94, \quad p_L^* = 1.65183 \times 10^{-4}, \quad p_R^* = 3.3 \times 10^{-5}.$$

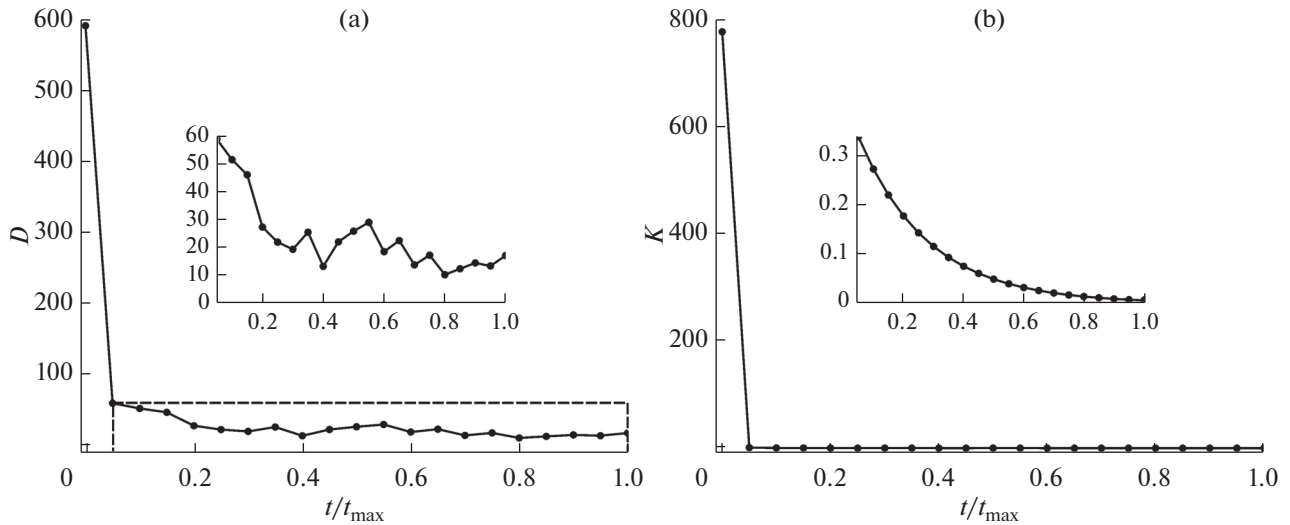
В настоящей работе при исследовании взаимодействия поры и водяного пара выбирали начальные и граничные условия на открытых концах поры. В начальный момент времени давление и концентрация на левом и правом концах поры равны  $p_L, \rho_L$  и  $p_R, \rho_R$  соответственно. Внутри поры водяной пар находится в состоянии термодинамического равновесия. То есть оба конца поры не изолированы от внешней среды. В этом случае давление вдоль оси  $z$  зависит линейно от  $z$ :

$$p(z) = \left(1.65 - \frac{1.32}{L}z\right) \times 10^{-4}, \quad 0 \leq z \leq L.$$

Разность значений давления насыщенного пара на левом и правом концах поры приводит к возникновению внешней силы, действующей на каждую молекулу воды внутри поры. Эта сила также является линейной функцией координаты  $z$ . В общем случае модуль силы определяется как  $F = pS$ , где  $p$  – давление, действующее на плоскую поверхность с площадью  $S$ . В случае частиц внутри поры площадь, к которой приложено давление, равна поперечному сечению молекул воды  $S = \pi d^2/4$ , или в приведенных единицах  $S^* = \pi/4$ , и внешняя сила может быть представлена в следующем виде:

$$F(z) = \frac{\pi}{4} \left(1.65 - \frac{1.32}{L}z\right) \times 10^{-4}, \quad 0 \leq z \leq L.$$

Таким образом, равнодействующая всех сил, действующих на частицу внутри поры, будет включать в себя не только векторную сумму всех сил, порождаемых потенциалом Леннарда-Джонса межмолекулярного взаимодействия (3) и потенциалом взаимодействия со стенками поры (4), но и внешнюю силу, обусловленную разницей давлений и градиентом концентраций между открытыми левым и правым концами поры. В работе при численном моделировании в качестве материала стенки поры использовали диоксид кремния с параметрами  $\sigma = 0.42$  нм и  $\epsilon = 32.59 \times 10^{-23}$  Дж, или в приведенных единицах  $\sigma^* = 1.33$  и  $\epsilon^* = 0.3$ . Применяя процедуру Лоренца–Бертло [20–22], можно получить следующие значения для параметров Леннарда-Джонса (4) при взаимодействии молекул воды с молекулами материала стенки поры:  $\sigma_{wf}^* = 1.16$  и  $\epsilon_{wf}^* = 0.55$ . Вычисления проводили для  $2 \times 10^6$  шагов по времени с шагом  $\Delta t^* = 0.005$ , что в абсолютных единицах соответствует 16663 пс. Параметр  $\tau_B^*$  термо-



**Рис. 2.** Эволюция во времени коэффициента диффузии  $D(t)$  (а) и коэффициента проницаемости  $K(t)$  (б) для цилиндрической поры длиной  $L = 400$  нм и диаметром  $d = 30$  нм,  $t_{\max} = 16663$  пс. На вставках – графики для значений  $t/t_{\max} \in [0.05; 1]$ .

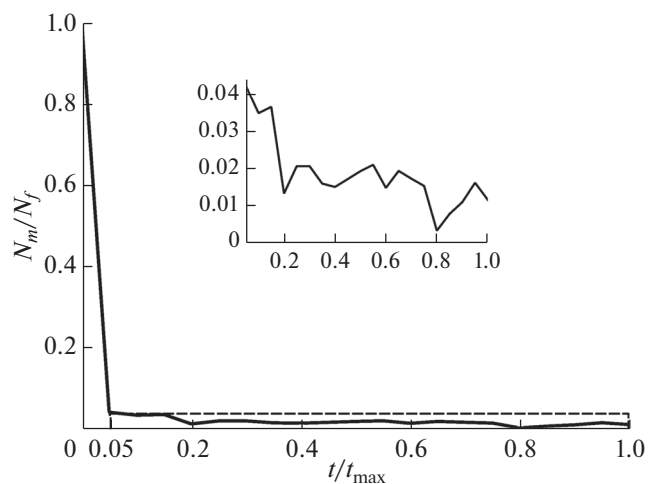
стата Берендсена принимали равным  $\tau_B^* = 0.05$ , параметр  $\nu$  термостата Андерсена – единице. Взаимодействие со стенкой поры учитывали для частиц, попавших при движении внутри поры в слой толщиной  $\Delta r = 0.025d$  вблизи стенки поры.

по объему коэффициента диффузии  $D(t)$  при течении водяного пара через пору представлены на рис. 4 и 5. Как видно из рисунков, с ростом диаметра поры  $d$  увеличивается зависимость коэффициента диффузии  $D(t)$  от длины поры  $L$  (рис. 4). Аналогичная картина наблюдается для зависимо-

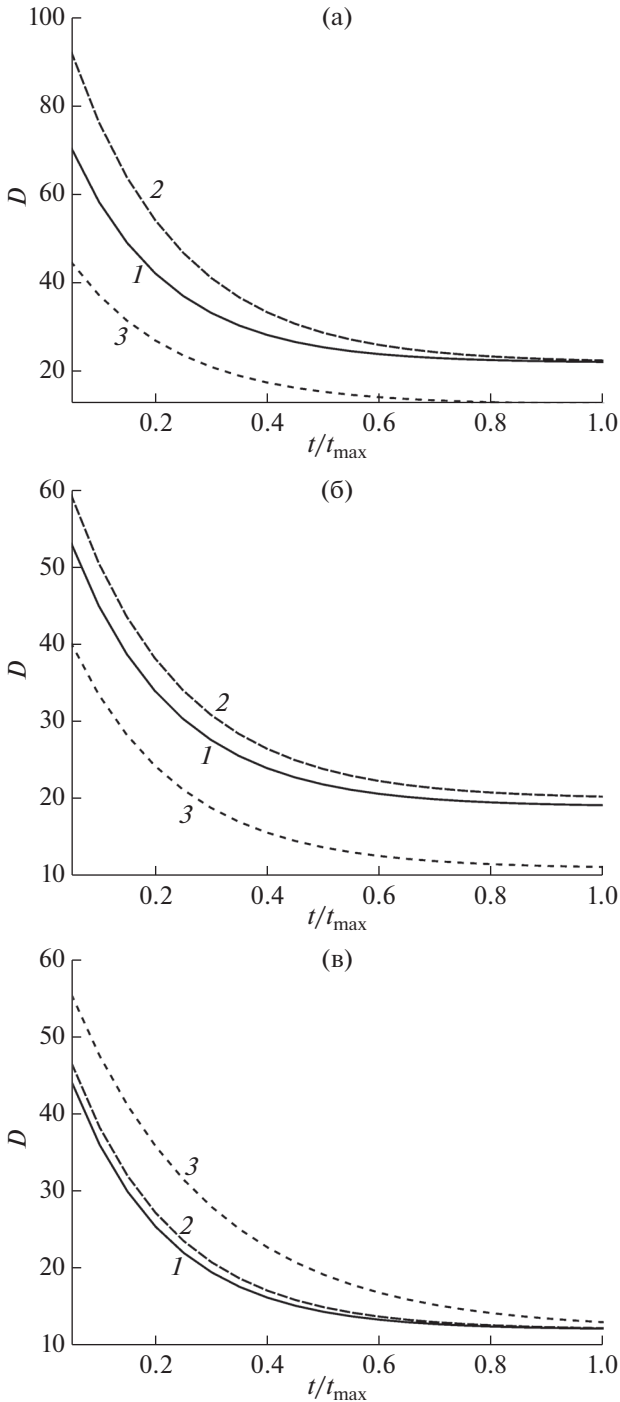
**РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ**

Моделирование проводилось для нескольких вариантов цилиндрической поры длиной  $L = 200, 400, 800$  нм и диаметром  $d = 20, 30, 40$  нм. Как видно из рис. 2, коэффициенты диффузии  $D$  и проницаемости  $K$  резко уменьшаются во временном интервале  $[0; 833]$  пс. Затем они очень медленно эволюционируют к некоторым значениям, обусловленным начальными и граничными условиями задачи. Такой характер эволюции  $D$  и  $K$  не зависит от размеров поры. Качественно поведение усредненных по объему поры коэффициентов диффузии и проницаемости можно объяснить, если проанализировать процесс конденсации молекул воды на стенках поры (рис. 3). К моменту времени  $t = 833$  пс большая часть частиц ( $\approx 96\%$ ), находящихся внутри поры, конденсируется на ее стенках. Поэтому лишь малое количество частиц, находящихся в данный момент внутри поры, дает вклад в процесс диффузии. Именно поэтому (рис. 2) резко падают усредненные коэффициенты диффузии и проницаемости в интервале  $[0; 833]$  пс.

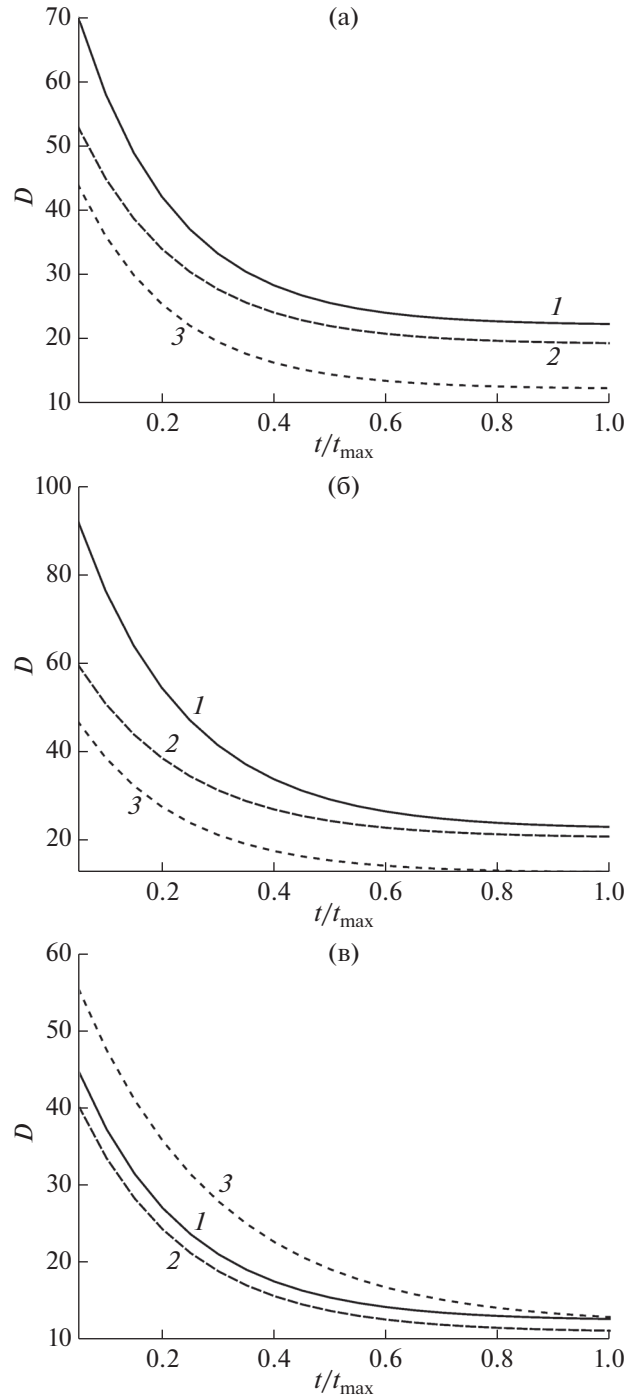
Результаты визуализации эволюции во временном интервале  $[833; 16663]$  пс усредненного



**Рис. 3.** Эволюция во времени отношения числа движущихся частиц  $N_m$  к общему числу частиц  $N_f$ , находящихся в данный момент времени внутри поры,  $t_{\max} = 16663$  пс. На вставке – график для значений  $t/t_{\max} \in [0.05; 1]$ .



**Рис. 4.** Аппроксимация гладкими кривыми зависимости коэффициента диффузии  $D(t/t_{\max})$  ( $t_{\max} = 16663$  пс) при длине  $L$  поры 200 (1), 400 (2), 800 нм (3) и ее диаметре  $d$ : а – 20; б – 30; в – 40 нм.

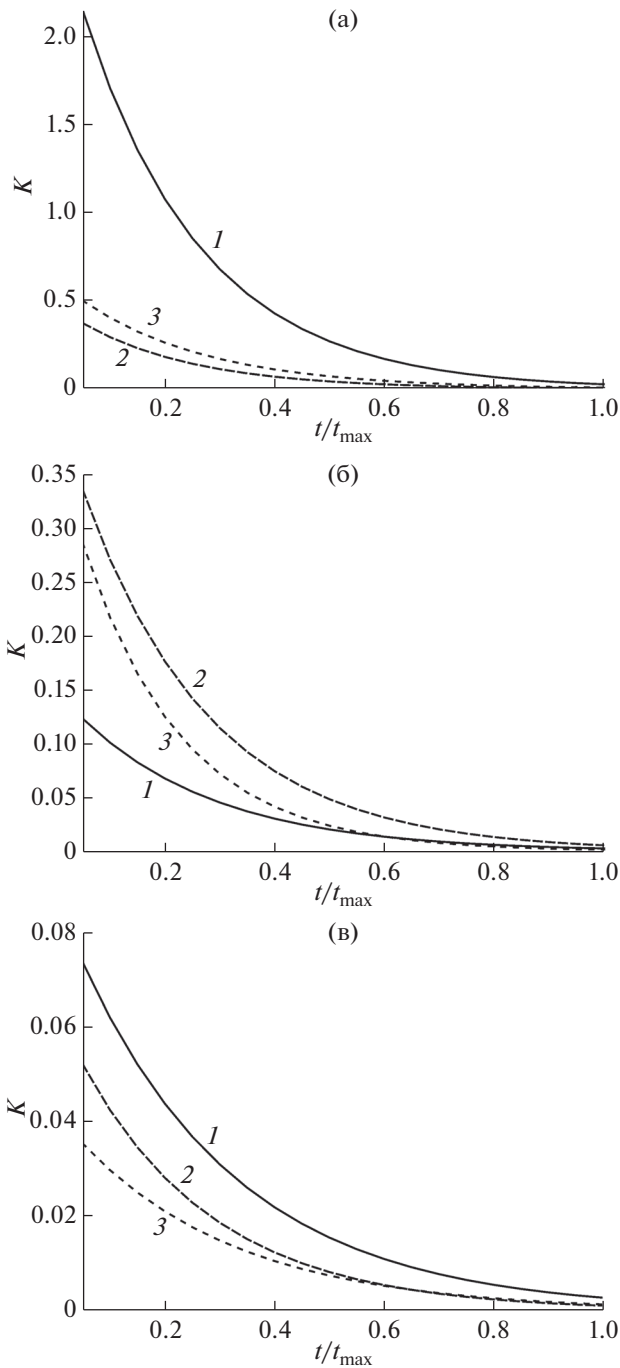


**Рис. 5.** Аппроксимация гладкими кривыми зависимости коэффициента диффузии  $D(t/t_{\max})$  ( $t_{\max} = 16663$  пс) при диаметре  $d$  поры 20 (1), 30 (2), 40 нм (3) и ее длине  $L$ : а – 200; б – 400; в – 800 нм.

сти коэффициента диффузии  $D(t)$  от диаметра поры  $d$  при увеличении длины поры  $L$  (рис. 5).

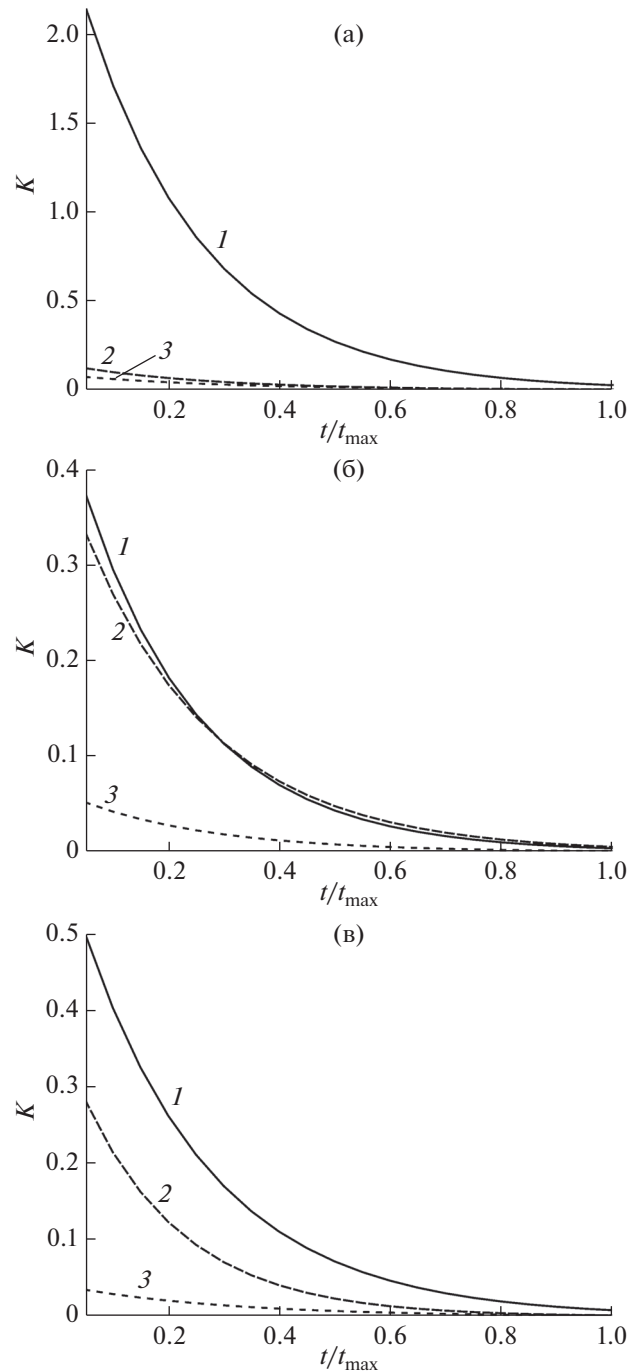
Результаты визуализации эволюции во временном интервале [833; 16663] пс усредненного

по объему коэффициента проницаемости  $K(t)$  при течении водяного пара через пору представлены на рис. 6 и 7. Рисунки демонстрируют зависимость проницаемости  $K(t)$  от времени, качественно отли-



**Рис. 6.** Аппроксимация гладкими кривыми зависимости коэффициента проницаемости  $K(t/t_{\max})$  ( $t_{\max} = 16663$  пс) при длине  $L$  поры 200 (1), 400 (2), 800 нм (3) и ее диаметре  $d$ : а – 20; б – 30; в – 40 нм.

чающуюся от зависимости  $D(t)$ . С ростом диаметра поры  $d$  зависимость коэффициента проницаемости  $K(t)$  от длины поры  $L$  уменьшается (рис. 6). Аналогичная картина наблюдается для зависимости коэффициента проницаемости  $K(t)$  от диаметра поры  $d$  при увеличении длины поры  $L$  (рис. 7).



**Рис. 7.** Аппроксимация гладкими кривыми зависимости коэффициента проницаемости  $K(t/t_{\max})$  ( $t_{\max} = 16663$  пс) при диаметре  $d$  поры 20 (1), 30 (2), 40 нм (3) и ее длине  $L$ : а – 200; б – 400; в – 800 нм.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено исследование методом классической молекулярной динамики эволюции во времени коэффициента диффузии  $D(t)$  и проницаемости  $K(t)$  в процессе взаимодействия водяного пара и сквозной цилиндрической поры

в случае ненулевой разности давлений на открытых концах поры. Построена молекулярно-динамическая модель, учитывающая процесс конденсации молекул воды на стенках поры, что позволяет моделировать степень гидрофильности/гидрофобности внутренней поверхности поры в зависимости от химического состава ее материала. Методами численного моделирования установлена зависимость коэффициента диффузии  $D(t)$  и проницаемости  $K(t)$  от длины и диаметра поры. Показано, что скорость резкого уменьшения коэффициента диффузии  $D(t)$  и проницаемости  $K(t)$  на начальных этапах эволюции  $t \in [0; 833]$  обусловлена тем, что большая часть частиц ( $\approx 96\%$ ), находящихся в данный момент внутри поры, конденсируется на ее стенках. Данный эффект полностью определяется характером взаимодействия молекул воды и атомов материала внутренней поверхности поры. Результаты данного исследования могут быть использованы для моделирования тепломассопереноса в однородных пористых материалах в различных областях науки и технологий, связанных с производством строительных материалов и защитой окружающей среды.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Беляев А.Ф., Боболев В.К., Коротков А.И. и др.* Переход горения конденсированных систем во взрыв. М.: Наука, 1973. 292 с.
2. *Rouquerol J., Avnir D., Fairbridge C.W. et al.* // *Pure Appl. Chem.* 1994. V. 66. P. 1739.
3. *Лейбензон Л.С.* Движение природных жидкостей и газов в пористой среде. М.: Гостоптехиздат, 1947. 244 с.
4. *Шейдеггер А.Э.* Физика течения жидкостей через пористые среды. М.: Гостоптехиздат, 1960. 250 с.
5. *Забродский С.С.* Гидродинамика и теплообмен в псевдоожоженном слое. М.: Госэнергоиздат, 1963. 488 с.
6. *Janetti M.B.* // *Transp. Porous Med.* 2018. V. 125. Iss. 3. P. 633.
7. *Суздальев И.П.* Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: КомКнига, 2006. 592 с.
8. *Dong Y.-H., Wang Ch.-A., Hu L.-F., Zhou J.* // *Front. Mater. Sci.* 2012. V. 6. № 1. P. 79.
9. *Suman R., Ruth D.* // *Transp. Porous Med.* 1993. V. 12. P. 185.
10. *Lugo-Méndez H.D., Valdés-Parada F.J., Porter M.L. et al.* // *Transp. Porous Med.* 2015. V. 107. P. 683.
11. *McNaught A.D., Wilkinson A.*, IUPAC. Compendium of Chemical Terminology. Oxford: Blackwell Scientific Publications, 1997.
12. *Gould H., Tobochnik J., Christian W.* An Introduction to Computer Simulation Methods. Addison Valley: Pearson, 2006. 813 p.
13. *Lennard-Jones J.E.* // *Proc. Roy. Soc. A.* 1924. V. 106. P. 463.
14. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. Oxford: Oxford University Press, 1989. 385 p.
15. *Siderius D.W., Gelb L.D.* // *J. Chem. Phys.* 2011. V. 135. P. 084703.
16. *Verlet L.* // *Phys. Rev.* 1967. V. 159. P. 98.
17. *Berendsen H.J.C., Postma H.J.C., van Gunsteren H.J.C. et al.* // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. P. 3684.
18. *Andersen H.C.* // *J. Chem. Phys.* 1980. V. 72. № 4. P. 2384.
19. *Frenkel D., Smith B.* Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications. Academic Press, 2006. 658 p.
20. *Lorentz H.A.* // *Annalen der Physik.* 1881. V. 248. № 1. P. 127.
21. *Berthelot D.* // *Comptes Rendus Hebd. Séances Acad. Sci.* 1898. V. 126. P. 1703.
22. *Nikonov E.G., Popovičová M.* 2018. 14 p. arXiv: 1901.07328.

## Mathematical Study of Surface Vapor Permeability for Homogeneous Porous Media

E. G. Nikonov<sup>1,\*</sup>, M. Popovičová<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow region, 141980 Russia

<sup>2</sup>University of Prešov, Prešov, 08001 Slovakia

\*e-mail: e.nikonov@jinr.ru

One of the most important characteristics of porous materials is permeability for gases and liquids. Depending on the permeability, a porous media can interact with flowing gases and liquids in different ways. Studies of the interaction between water vapor and materials with uniformly distributed pores are of considerable practical interest. Many of them are construction and structural materials. The interest is also due to the possibility to extend the results of individual pore studies to a porous medium, if the medium can be represented with sufficient precision in the form of a structure with uniformly distributed pores. The dependence of the permeability of an individual cylindrical pore on its radius, length and characteristics of the process of interaction of water molecules with pore walls has been studied.

**Keywords:** molecular dynamics, diffusion, permeability, water interaction with porous material.