**Новый алгоритм для расчета контактного угла бинарных смесей в нанопорах**

***Семенчук А.А.1, Копаничук И.В.1,4, Кондратюк Н.Д.1,2,3***

*Студент, 3 курс бакалавриата*

*1Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

*2Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

*3Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", Москва, Россия*

*4АНО "Институт искусственного интеллекта", Москва, Россия
E-mail: semenchuk.aa@phystech.edu*

Поверхностные явления определяют поведение жидкостей в пористых средах и на смачиваемых поверхностях. Правильный учет этих явлений лежит в основе точных континуальных моделей[1]. Контактный угол является ключевой величиной, дающей количественную характеристику поверхностных явлений.

В настоящее время не существует общей теории, позволяющей описывать и предсказывать поведение бинарных смесей в нанопорах. Ранее уже изучался вопрос поверхности в случае полностью не смачивающих жидкостей[2]. В данной работе будет представлено обобщение этой теории для произвольного контактного угла, которая будет лежать в основе нового алгоритм для определения величины контактного угла по профилю плотности.

Для валидации теории, использовались методы численного моделирования (молекулярная динамика). Были рассмотрены системы состоящие из смеси н-декана и воды на подложках из кальцита и мусковита. В результате моделирования и применения нового алгоритма получились следующие результаты: для системы на подложке из кальцита контактный угол – 127º, в литературе приводятся результаты 122º и 116º[3]; в случае системы с подложкой из мусковита угол – 164º, что очень хорошо согласуется с литературой – 163º[4]. Эти результаты показывают корректность разработанной теории и эффективность нового алгоритма.

В будущем теоретическая модель будет также проверена на данных, полученных в результате классического DFT. Как дальнейшее обобщение теории планируется рассмотреть случаи с учетом разной энергии взаимодействия фаз, с учетом молекулярной структуры вещества и получить аналитические формулы для случая динамического контактного угла.

*Работа выполнена при поддержке программы стратегического академического лидерства “Приоритет 2030” (Соглашение 075-02-2021- 1316 от 30.09.2021).*

**Литература**

1. Nichita D.V. Volume-based phase stability analysis including capillary pressure // Fluid Phase Equilib. 2019. Vol. 492. P. 145–160.

2. Kopanichuk I. V., Berezhnaya A. S., Sizova A. A., Vanin A. A., Sizov V. V., Brodskaya E. N. The shape of the liquid-liquid interface for oil/water mixtures in slit pores // Colloids Surf. A: Physicochem. Eng. 2020. Vol. 601. P. 124884.

3. Zhao J., Yao G., Wen, D. Salinity-dependent alterations of static and dynamic contact angles in oil/brine/calcite systems: A molecular dynamics simulation study // Fuel. 2020. Vol 272. P. 117615.

4. Jiménez-Ángeles F., Firoozabadi A. Contact Angle, Liquid Film, and Liquid–Liquid and Liquid–Solid Interfaces in Model Oil–Brine–Substrate Systems // J. Phys. Chem. C. 2016. Vol. 120. P. 11910–11917.