

УДК 53.01; 53.096; 532.74; 533; 538.931; 539.196.3; 541.24

**ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛЫХ НАНОЧАСТИЦ
МЕЖДУ СОБОЙ И С МОЛЕКУЛАМИ НЕСУЩЕЙ СРЕДЫ****В.Я. Рудяк, С.Л. Краснолуцкий***Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет
(Сибстрин)*

Наножидкости, т. е. дисперсные жидкости с наночастицами, – новый тип дисперсных жидкостей, изучение которых началось около двух десятилетий тому назад. Эти исследования показали, что они имеют нестандартные свойства и не описываются классическими теориями для обычных дисперсных жидкостей. В частности, моделирование процессов переноса в них удается осуществить лишь методом молекулярной динамики. Это требует, однако, знания соответствующих потенциалов взаимодействия. Важным классом наножидкостей являются флюиды с полыми частицами. На практике такие наножидкости уже широко применяются в медицине и при создании косметических и парфюмерных препаратов. Целью данной работы является вывод потенциалов взаимодействия полых твердой наночастицы с молекулой несущей среды и двух полых наночастиц между собой. Рассмотрена наножидкость, состоящая из несущего флюида (газа или жидкости) и полых наночастиц. Частицы предполагаются твердыми и сферическими. Взаимодействие атомов полых наночастицы и молекул несущей среды описывается потенциалом Леннарда-Джонса. Таким же потенциалом описывается и взаимодействие атомов наночастиц между собой. Потенциал взаимодействия молекулы несущей среды с данной наночастицей ищется в виде суммы потенциалов этой молекулы со всеми атомами наночастицы. Аналогично определяется и потенциал взаимодействия наночастиц. При этом твердое тело аппроксимируется континуальной моделью. Полученные потенциалы предназначены для моделирования процессов переноса в наножидкостях, содержащих в качестве дисперсного элемента полые наночастицы и их течений.

Ключевые слова: потенциал взаимодействия, наночастицы, полые наночастицы, наножидкости, наногазовзвеси, процессы переноса.

DOI: 10.17212/1727-2769-2017-2-32-42

Введение

Непрерывно возрастающий интерес к наножидкостям, т.е. дисперсным жидкостям с наночастицами (по определению это частицы с характерным размером от 1 до 100 нм), связан, прежде всего, с уже существующим или планируемым их использованием в химических процессах, включая катализ, для охлаждения различных устройств, в био-, МЭМС- и нанотехнологиях различного назначения, при создании новых систем транспортировки и производства тепловой энергии, новых лекарственных и косметических препаратов, систем распознавания загрязнений различного типа и очистки воздуха и воды, новых смазочных материалов, лаков и красок, для доставки лекарственных препаратов, наносенсоров и наноактюаторов и т. д. С другой стороны, почти сразу после начала их изучения, а это произошло около двадцати лет тому назад, выяснилось, что они имеют необычные свойства переноса, которые не описываются классическими теориями. В частности, диффузия наночастиц в газах и жидкостях не описывается соотношениями, применяющимися для броуновских частиц [1–5]. Вязкость и теплопроводность наножид-

Исследование выполнено при частичном финансировании РФФИ (грант № 17-01-000040).

костей зависит не только от объемной концентрации частиц, но и от их размера и материала и не описываются формулами Эйнштейна и Максвелла, разработанными для крупнодисперсных суспензий [6–14]. Сегодня уже можно констатировать, что экспериментальная информация относительно свойств переноса наножидкостей с обычными частицами получена достаточно обширная и вполне адекватная. Получены весьма надежные и теоретические данные: для наногазовзвесей с помощью кинетической теории, а для наносуспензий – посредством метода молекулярной динамики [1, 2, 15, 16].

Тем не менее существует важный класс наножидкостей практически вообще не исследованный. Это наножидкости с полыми частицами. На практике такие наножидкости уже широко применяются в медицине и при создании косметических и парфюмерных препаратов. Очень простым способом получения полых наночастиц (hollow nanoparticles) является следующий. Берут полимерные наночастицы и био- или химическим способом покрывают их раствором вещества, содержащим кремний. Затем ядро полученной композитной частицы (полимер/SiO₂) растворяется. Идеологически близкий процесс реализован в работе [17], где для синтеза полых частиц сначала получены наночастицы ядро–оболочка Cu/SiO₂, а затем в результате их нагрева расплавленное медное ядро вытекало через дефекты в оболочке и удалялось химическим способом. Получающиеся полые частицы содержат отверстия, что особенно важно с практической точки зрения (для закладки активных веществ).

Наряду с обычными наночастицами в косметической отрасли используются липосомы, самопроизвольно образующиеся в смесях фосфолипидов с водой пузырьки. Их стенка состоит из одного или нескольких бислоев фосфолипидов и имеет толщину в две молекулы (существуют липосомы и с существенно более толстыми стенками). В стенку могут встраиваться другие вещества, например, белки. Внутри липосом содержится вода или раствор. Диаметр липосом варьируется, начиная примерно от 20 нм. В современной косметологии липосомы наполняются биологически активными веществами и жидкостью, в которых нуждается кожа. Обычно эти биологически активные вещества имеют большую молекулярную массу и не способны проникать в глубокие слои кожи. Тем более они не могут проникать внутрь клетки. Липосомы же легко проникают в кожу в самые глубокие слои и способны доставлять биологически активные вещества в клетку. По этой причине они применяются, прежде всего, для изготовления различных кремов (см., например, [18]). Стоит сказать, что наряду с обычными в косметике широко используются липидные наночастицы [19]. Обычно применяющиеся липидные наночастицы являющиеся твердыми при температуре тела.

Исследовать свойства наножидкостей с полыми частицами экспериментально до сих пор в силу разных причин не удавалось. Нет и попыток изучить эти свойства с помощью различных методов моделирования. Последнее связано с тем, что отсутствуют какие-либо данные о потенциалах взаимодействия молекул несущей жидкости с такими частицами и между собой. Применять же для этой цели часто используемый при моделировании обычных наножидкостей подход, когда наночастица моделируется просто некоторым кластером (см., например [20] и цитированную там литературу) молекул, нельзя, поскольку такой кластер просто не стабилен как по числу молекул, так и по форме. Практически не удается создать полый кластер.

Цель данной работы и состоит в выводе потенциалов взаимодействия полкой твердой наночастицы с молекулой несущей среды и двух полых наночастиц между собой.

1. Потенциал взаимодействия молекулы с полой сферически симметричной наночастицей

Полая сферически симметричная наночастица моделируется твердой сферической оболочкой конечной толщины с внешним радиусом R и внутренним R_{in} , которая рассматривается как совокупность атомов (или молекул). Потенциал взаимодействия молекулы несущей среды с данной наночастицей ищется в виде суммы потенциалов этой молекулы со всеми атомами наночастицы. Этот потенциал с выделенным атомом k наночастицы описывается парным потенциалом $\Phi(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_m|)$, где \mathbf{r}_m и \mathbf{r}_k – радиус-векторы соответственно налетающей молекулы и k -го атома наночастицы. Тогда, считая потенциал взаимодействия молекулы с атомами наночастицы попарно аддитивным, ее потенциал взаимодействия с наночастицей равен

$$\Phi(|\mathbf{r}|) = \sum_{k=1}^N \Phi(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_m|), \quad (1)$$

где N – число атомов наночастицы.

В дальнейшем в этой работе в качестве потенциала взаимодействия молекул несущей среды с атомом наночастицы используется потенциал Леннарда-Джонса

$$\Phi_{LJ}(r) = 4\varepsilon_{12} \left[\left(\sigma_{12} / r \right)^{12} - \left(\sigma_{12} / r \right)^6 \right], \quad (2)$$

где $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ – расстояние между центрами частиц i и j ; σ_{12} – эффективный размер атома; ε_{12} – глубина потенциальной ямы.

Просуммировать ряд (1) аналитически обычно не удается. Поэтому на практике суммирование в формуле (1) заменяют интегрированием [21]. Физически это означает, что твердое тело аппроксимируется континуальной моделью. Вычисление потенциала сводится к вычислению тройного интеграла, происходит усреднение потенциала по текущим координатам интегрирования: радиусу a и двум углам – полярному θ и азимутальному. Схема интегрирования показана на рисунке. Темное кольцо показывает расположение атомов частицы на сфере радиуса a , равноудаленных от молекулы несущей среды. Если потенциал взаимодействия молекулы несущей среды – атом наночастицы не зависит от их ориентации, то формула (1) сводится к следующему интегралу

$$\Phi_{mp}(z) = V_p^{-1} \int_{R_{in}}^R \int_0^\pi \Phi_{LJ} \left(\sqrt{(z - a \cos \theta)^2 + a^2 \sin^2 \theta} \right) 2\pi a^2 da \sin \theta d\theta, \quad (3)$$

где z – расстояние от молекулы до центра сферы, в котором помещено начало координат; Φ_{LJ} – потенциал Леннарда-Джонса (2) взаимодействия молекулы несущего газа с атомом (молекулой) дисперсной частицы; V_p – эффективный объем,

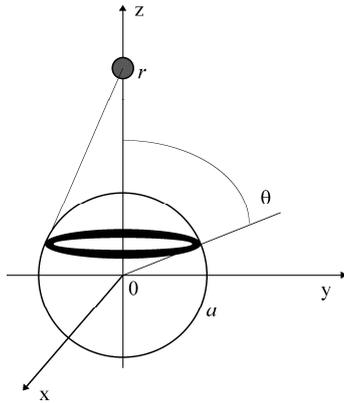


Схема интегрирования потенциала взаимодействия (3)

Scheme of integration of the interaction potential (3)

приходящийся на одну молекулу, причем $V_p^{-1} = \rho_p N_A / \mu_p$, где ρ_p – плотность материала дисперсной частицы; N_A – число Авогадро; μ_p – молярная масса молекул (атомов), составляющих дисперсную частицу; a, θ – текущие координаты интегрирования, характеризующие положение и радиус окружности интегрирования; $dV = 2\pi a^2 da \sin \theta d\theta$ – элемент объема интегрирования.

В результате интегрирования получаем

$$\Phi_{mp}(r, R, R_{in}) = \Phi_9(r, R, R_{in}) - \Phi_3(r, R, R_{in}), \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_n(r, R, R_{in}) = C_n \left\{ \left[\frac{1}{(r-R)^n} - \frac{1}{(r+R)^n} \right] - \frac{n}{(n-1)r} \left[\frac{1}{(r-R)^{(n-1)}} - \frac{1}{(r+R)^{(n-1)}} \right] - \right. \\ \left. - \left[\frac{1}{(r-R_{in})^n} - \frac{1}{(r+R_{in})^n} \right] + \frac{n}{(n-1)r} \left[\frac{1}{(r-R_{in})^{(n-1)}} - \frac{1}{(r+R_{in})^{(n-1)}} \right] \right\}, \\ C_n = \frac{8\pi\epsilon_{12}\sigma_{12}^{(n+3)}}{n(n+1)V_p}, \end{aligned}$$

где r – расстояние между центрами наночастицы и молекулой несущей среды.

2. Потенциал взаимодействия полых шарообразных наночастиц

Построим потенциал взаимодействия двух твердых полых шарообразных сферически симметричных наночастиц, которые имеют внешний радиус R и внутренний R_{in} . Этот потенциал определяется как сумма потенциалов взаимодействия атомов первой наночастицы со всеми атомами второй. Его построение можно разбить на два этапа. На первом найдем потенциал взаимодействия первой наночастицы с каждым атомом второй. Считая, что это взаимодействие снова описывается потенциалом (2), искомый потенциал будет иметь вид (4) с соответствующими материалу наночастиц константами C_n . На втором этапе просуммируем потенциалы взаимодействия первой наночастицы со всеми атомами второй. Поскольку наночастицы предполагаются твердыми и однородными, то это суммирование также можно заменить интегрированием по объему второй наночастицы. Для этого разобьем вторую наночастицу на тонкие кольца, положение которых определяется посредством текущего полярного угла θ (см. рисунок). Схема интегрирования аналогична использованной при построении потенциала (3). Таким образом, потенциал взаимодействия двух одинаковых наночастиц с внешним радиусом R и внутренним радиусом R_{in} вычисляется по формуле

$$\Phi_{pp}(z) = V_p^{-1} \int_{R_{in}}^R \int_0^\pi \Phi_{mp} \left(\sqrt{(z-a \cos \theta)^2 + a^2 \sin^2 \theta}, R, R_{in} \right) 2\pi a^2 da \sin \theta d\theta. \quad (5)$$

В результате интегрирования выражения (5) получаем формулу для искомого потенциала

$$\Phi_{pp}(r, R, R_{in}) = \Phi_{pp,7}(r, R, R_{in}) - \Phi_{pp,1}(r, R, R_{in}), \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned}
\Phi_{pp,7}(r, R, R_{in}) = & C_7 \left\{ \frac{R^2}{r} \left[\frac{1}{(r-2R)^7} + \frac{2}{r^7} + \frac{1}{(r+2R)^7} - \right. \right. \\
& - \frac{R}{3r} \left[\frac{1}{(r-2R)^6} - \frac{1}{(r+2R)^6} \right] - \frac{1}{30r} \left[\frac{1}{(r-2R)^5} + \frac{2}{r^5} + \frac{1}{(r+2R)^5} \right] - \\
& - \frac{2RR_{in}}{r} \left[\frac{1}{(r-R-R_{in})^7} + \frac{1}{(r-R+R_{in})^7} + \frac{1}{(r+R-R_{in})^7} + \frac{1}{(r+R+R_{in})^7} \right] + \\
& + \frac{(R+R_{in})}{3r} \left[\frac{1}{(r-R-R_{in})^6} - \frac{1}{(r+R+R_{in})^6} \right] - \\
& - \frac{(R-R_{in})}{3r} \left[\frac{1}{(r+R_{in}-R)^6} - \frac{1}{(r-R_{in}+R)^6} \right] + \\
& + \frac{1}{15r} \left[\frac{1}{(r-R-R_{in})^5} - \frac{1}{(r-R+R_{in})^5} - \frac{1}{(r+R-R_{in})^5} + \frac{1}{(r+R+R_{in})^5} \right] + \\
& + \frac{R_{in}^2}{r} \left[\frac{1}{(r-2R_{in})^7} + \frac{2}{r^7} + \frac{1}{(r+2R_{in})^7} \right] - \\
& \left. - \frac{R_{in}}{3r} \left[\frac{1}{(r-2R_{in})^6} - \frac{1}{(r+2R_{in})^6} \right] - \frac{1}{30r} \left[\frac{1}{(r-2R_{in})^5} + \frac{2}{r^5} + \frac{1}{(r+2R_{in})^5} \right] \right\}, \\
\Phi_{pp,1}(r, R, R_{in}) = & C_1 \left\{ \ln \left[\frac{r^2 - 4R^2}{r^2} \right] + 2R^2 \left[\frac{1}{r^2 - 4R^2} + \frac{1}{r^2} \right] - \right. \\
& - 2 \ln \left[\frac{r^2 - (R+R_{in})^2}{r^2 - (R-R_{in})^2} \right] - 4RR_{in} \left[\frac{1}{r^2 - (R+R_{in})^2} + \frac{1}{r^2 - (R-R_{in})^2} \right] + \\
& \left. + \ln \left[\frac{r^2 - 4R_{in}^2}{r^2} \right] + 2R_{in}^2 \left[\frac{1}{r^2 - 4R_{in}^2} + \frac{1}{r^2} \right] \right\}, \\
C_7 = & \frac{\pi^2}{315} \frac{\varepsilon \sigma^{12}}{V_p^2}, \quad C_1 = \frac{2\pi^2}{3} \frac{\varepsilon \sigma^6}{V_p^2},
\end{aligned}$$

где r – расстояние между центрами наночастиц.

Заключение

В данной работе построены потенциалы взаимодействия наночастица–молекула и наночастица–наночастица. Обсудим основные ограничения, лежащие в их основе. Во-первых, предполагалось, что взаимодействие молекулы с наночастицей и наночастиц между собой можно описать классически, и оно является потенциальным и адиабатическим. Во-вторых, потенциалы взаимодействия молекулы несущей среды с атомом наночастицы и атомов наночастиц предполагались парными и аддитивными. В-третьих, влиянием структуры поверхности наночастицы пренебрегалось. В-четвертых, не учитывались тепловые колебания атомов наночастицы.

Насколько серьезны эти ограничения? В силу квантового характера движения электронов и ядер решение задачи о нахождении потенциалов межмолекулярного взаимодействия сводится, строго говоря, к решению уравнения Шрёдингера для взаимодействующих молекул. Такая задача для большинства систем может быть решена только приближенно. Существенное упрощение достигается при разделении электронного и ядерного движений и введении понятия адиабатических потенциалов. Этот подход, называемый адиабатическим приближением, основывается на большой разнице в массах электронов и ядер, что позволяет исследовать движение электронов при покоящихся ядрах. В уравнении Шрёдингера при этом пренебрегают оператором кинетической энергии ядер, а координаты ядер фиксируют как параметры. В результате удается найти зависимость энергии системы от расстояния между ядрами. Эта энергия служит в качестве потенциальной для ядер, и ее принято называть адиабатическим потенциалом. Знания данного потенциала вполне достаточно для исследования поведения системы взаимодействующих молекул. Имеющийся экспериментальный материал свидетельствует о том, что вплоть до энергий порядка нескольких кэВ взаимодействие молекул вполне описывается в рамках адиабатического приближения [22].

Построенные нами модельные потенциалы можно применять как в квантово-механических, так и классических расчетах. Ограничения классического подхода относятся не к собственно потенциалам, а к применимости их в рамках классических теорий переноса. Критерием применимости классического подхода является малость длины волны де Бройля $\lambda = 2\pi\hbar/p$ по сравнению с характерным пространственным масштабом задачи. Легко убедиться, что при не слишком низких температурах это условие оказывается выполненным.

Потенциалы взаимодействия молекулы несущей среды с атомами наночастицы и атомов наночастиц между собой предполагались парными и аддитивными. В связи с этим стоит отметить, что используемый нами в качестве межмолекулярного (межатомного) потенциал Леннард-Джонса является эффективным и, по крайней мере, частично учитывает и эффекты многочастичности, и неаддитивности взаимодействия.

Учет тепловых колебаний решетки и структуры поверхности может серьезно сказаться на количественных результатах расчетов. Это особенно важно при рассмотрении адсорбции, эффектов неупругости взаимодействия, возможного распыления.

В заключение отметим, что ранее предложенным здесь методом были построены потенциалы взаимодействия молекула–наночастица (ПК) [23] и наночастица–наночастица [24], широко использовавшиеся для расчетов коэффициентов переноса наножидкостей. Полученные с их помощью данные были подтверждены

многочисленными экспериментами. Потенциал РК для макроскопических частиц фактически сводится к потенциалу Хамаккера [25], но с известными константами взаимодействия.

ЛИТЕРАТУРА

1. О методах измерения коэффициента диффузии и размеров наночастиц в разреженном газе / В.Я. Рудяк, С.Л. Краснолуцкий, А.Г. Насибулин, Е.И. Кауппинен // Доклады Академии наук. – 2002. – Т. 386, № 5. – С. 624–627.
2. **Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л., Иващенко Е.Н.** О влиянии физических свойств материала наночастиц на их диффузию в разреженных газах // Инженерно-физический журнал. – 2008. – Т. 81, № 3. – С. 76–81.
3. **Rudyak V.Ya., Dubtsov S.N., Baklanov A.M.** Measurements of the temperature dependent diffusion coefficient of nanoparticles in the range of 295–600K at atmospheric pressure // Journal of Aerosol Science. – 2009. – Vol. 40. – P. 833–843. – doi: 10.1016/j.jaerosci.2009.06.006.
4. **Rudyak V.Ya., Kharlamov G.V., Belkin A.A.** Diffusion of nanoparticles and macromolecules in dense gases and liquids // High Temperature. – 2001. – Vol. 39. – P. 264–271.
5. **Ould-Kaddour F., Levesque D.** Diffusion of nanoparticles in dense fluids // The Journal of Chemical Physics. – 2007. – Vol. 127. – P. 154514. – doi: 10.1063/1.2794753.
6. Particle size and interfacial effects on thermo-physical and heat transfer characteristics of water-based α -SiC nanofluids / E.V. Timofeeva, D.S. Smith, W. Yu, D.M. France, D. Singh, J.L. Routbort // Nanotechnology. – 2010. – Vol. 21. – N 21. – P. 215703. – doi: 10.1088/0957-4484/21/21/215703.
7. **Hosseini S.Sh., Shahrjerdi A., Vazifeshenas Y.** A review of relations for physical properties of nanofluids // Australian Journal of Basic and Applied Sciences. – 2011. – Vol. 5 (10). – P. 417–435.
8. **Mahbubul I.M., Saidur R., Amalina M.A.** Latest developments on the viscosity of nanofluids // International Journal Heat and Mass Transfer. – 2012. – Vol. 55. – P. 874–885. – doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.10.021.
9. Viscosity measurements on colloidal dispersions (nanofluids) for heat transfer applications / D. Venerus, J. Buongiorno, R. Christianson, J. Townsend, I.C. Bang, G. Chen, S.J. Chung, M. Chyu, H. Chen, Y. Ding, F. Dubois, G. Dzido, D. Funfschilling, Q. Galand, J. Gao, H. Hong, M. Horton, L.W. Hu, C.S. Iorio, A.B. Jarzebski, Y. Jiang, S. Kabelac, M.A. Kedzierski, C. Kim, J.H. Kim, S. Kim, T. McKrell, R. Ni, J. Philip, N. Prabhat, P. Song, S.V. Vaerenbergh, D. Wen, S. Witharana, X. Zhao, S. Zhou // Applied Rheology. – 2010. – Vol. 20, N 4. – P. 44582. – doi: 10.3933/ApplRheol-20-44582.
10. **France Yu.W., Routbort J.L., Choi D.M.** Review and comparison of nanofluid thermal conductivity and heat transfer enhancements // Heat Transfer Engineering. – 2008. – Vol. 29, N 5. – P. 432–460. – doi: 10.1080/01457630701850851.
11. **Kleinstreuer K., Yu F.** Experimental and theoretical studies of nanofluid thermal conductivity enhancement: a review // Nanoscale Research Letters. – 2011. – Vol. 6, N 229. – P. 1–13. – doi: 10.1186/1556-276X-6-229.
12. Экспериментальные данные о зависимости вязкости наножидкостей на основе воды и этиленгликоля от размера и материала частиц / В.Я. Рудяк, А.В. Минаков, М.С. Сметанина, М.И. Пряжников // Доклады Академии наук. – 2016. – Т. 467, вып. 3. – С. 289–291.
13. **Angayarkanni S.A., Philip J.** Review on thermal properties of nanofluids: recent developments // Advances in Colloid and Interface Science. – 2015. – Vol. 225. – P. 146–176. – doi: 10.1016/j.cis.2015.08.014.
14. Thermal conductivity measurements of nanofluids / M. Pryazhnikov, A. Minakov, V. Rudyak, D. Guzei // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2017. – Vol. 104. – P. 1275–1282. – doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.09.080.
15. Nanoparticle friction force and effective viscosity of nanofluids / V.Ya. Rudyak, A.A. Belkin, E.A. Tomilina, V.V. Egorov // Defect and Diffusion Forum. – 2008. – Vol. 273–276. – P. 566–571. – doi: 10.4028/www.scientific.net/DDF.273-276.566.

16. **Rudyak V.Ya., Krasnolutski S.L.** Dependence of the viscosity of nanofluids on nanoparticle size and material // *Physics Letters A*. – 2014. – Vol. 378. – P. 1845–1849. – doi: 10.1016/j.physleta.2014.04.060.
17. **Романов Н.А., Калашников С.В., Номоев А.В.** Механизмы образования композитных наночастиц (попые наночастицы) // *Молодой ученый*. – 2012. – № 8 (43). – С. 11–13.
18. Nanotechnology-based cosmeceuticals / A. Lohani, A. Verma, H. Joshi, N. Yadav, N. Karki // *ISRN Dermatology*. – 2014. – Art. 843687. – P. 1–14. – doi: 10.1155/2014/843687.
19. **Sharma A., Kumar S., Mahadevan N.** Nanotechnology: a promising approach for cosmetics // *International Journal of Advances in Pharmaceutical Research*. – 2012. – Vol. 2 (2). – P. 54–61.
20. **Puliti G., Paolucci S., Sen M.** Thermodynamic properties of gold–water nanofluids using molecular dynamics // *Journal of Nanoparticle Research*. – 2012. – Vol. 14. – P. 1296. – doi: 10.1007/s11051-012-1296-4.
21. **Гудман Ф., Вахман Г.** Динамика рассеяния газа поверхностью. – М.: Мир, 1980. – 423 с.
22. **Каплан И.Г.** Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – М.: Наука, 1982. – 312 с.
23. **Rudyak V.Ya., Krasnolutski S.L.** The interaction potential of dispersed particles with carrier gas molecules // *Proceedings of 21st International Symposium on RGD*. – Toulouse, Gépadués-Éditions, 1999. – Vol. 1. – P. 263–270.
24. **Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л., Иванов Д.А.** О потенциале взаимодействия наночастиц // *Доклады Академии наук*. – 2012. – Т. 442, № 1. – С. 54–56.
25. **Hamaker H.C.** The London – van der Waals attraction between spherical particles // *Physica*. – 1937. – Vol. 4, N 10. – P. 1058–1072. – doi: 10.1016/S0031-8914(37)80203-7.

INTERACTION POTENTIALS OF HOLLOW NANOPARTICLES WITH EACH OTHER AND WITH MOLECULES OF THE CARRIER MEDIUM

Rudyak V.Ya., Krasnolutski S.L.

*Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering,
Novosibirsk, Russian Federation*

Nanofluids, i.e. dispersed liquids with nanoparticles, are a new type of dispersed liquids, whose study began about two decades ago. These studies have shown that nanofluids have non-standard properties and are not described by classical theories for ordinary disperse fluids. In particular, it is possible to model the transport processes in them only by molecular dynamics. This, however, requires knowledge of the corresponding interaction potentials. An important class of nanofluids is the fluids with hollow particles. In practice, such nanofluids are already widely used in medicine and in the creation of cosmetic and perfume preparations. The purpose of this paper is to derive the interaction potentials between a hollow solid nanoparticle and a molecule of carrier medium and between two hollow nanoparticles. A nanofluid consisting of a carrier fluid (a gas or a liquid) and hollow nanoparticles is considered. The particles are assumed to be solid and spherical. The interaction of an atom of a hollow nanoparticle and a molecule of a carrier medium is described by the Lennard-Jones potential. The same potential describes the interaction of nanoparticle atoms with each other. The interaction potential of a molecule of a carrier medium with a given nanoparticle is found as a sum of the potentials of this molecule with all the atoms of the nanoparticle. The interaction potential of two nanoparticles is determined in a similar way. In both of the above cases, a solid is approximated by a continuum model. The obtained potentials are intended to simulate transport processes in nanofluids containing hollow nanoparticles as a dispersed element and their flows.

Keywords: interaction potentials, hollow nanoparticles, nanofluids, gas nanosuspensions, transport processes.

DOI: 10.17212/1727-2769-2017-2-32-42

REFERENCES

1. Rudyak V.Ya., Krasnolutskiy S.L., Nasibulin A.G., Kauppinen E.I. Methods of measuring the diffusion coefficient and sizes of nanoparticles in a rarefied gas. *Doklady Physics*, 2002, vol. 47, iss. 10, pp. 758–761. doi: 10.1134/1.1519325. Translated from *Doklady Akademii nauk*, 2002, vol. 386, no. 5, pp. 624–627.
2. Rudyak V.Ya., Krasnolutskiy S.L., Ivashchenko E.N. Influence of the physical properties of the material of nanoparticles on their diffusion in rarefied gases. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2008, vol. 81, pp. 520–524. doi: 10.1007/s10891-008-0063-y. Translated from *Inzhenerno-fizicheskii zhurnal*, 2008, vol. 81, no. 3, pp. 76–81.
3. Rudyak V.Ya., Dubtsov S.N., Baklanov A.M. Measurements of the temperature dependent diffusion coefficient of nanoparticles in the range of 295–600K at atmospheric pressure. *Journal of Aerosol Science*, 2009, vol. 40, iss. 10, pp. 833–843. doi: 10.1016/j.jaerosci.2009.06.006.
4. Rudyak V.Ya., Kharlamov G.V., Belkin A.A. Diffusion of nanoparticles and macromolecules in dense gases and liquids. *High Temperature*, 2001, vol. 39, pp. 264–271. doi: 10.1023/A:1017578917614.
5. Ould-Kaddour F., Levesque D. Diffusion of nanoparticles in dense fluids. *The Journal of Chemical Physics*, 2007, vol. 127, p. 154514. doi: 10.1063/1.2794753.
6. Timofeeva E.V., Smith D.S., Yu W., France D.M., Singh D., Routbort J.L. Particle size and interfacial effects on thermo-physical and heat transfer characteristics of water-based α -SiC nanofluids. *Nanotechnology*, 2010, vol. 21, no. 21, p. 215703. doi: 10.1088/0957-4484/21/21/215703.
7. Hosseini S.Sh., Shahrjerdi A., Vazifeshenas Y. A review of relations for physical properties of nanofluids. *Australian Journal of Basic and Applied Sciences*, 2011, vol. 5 (10), pp. 417–435.
8. Mahbubul I.M., Saidur R., Amalina M.A. Latest developments on the viscosity of nanofluids. *International Journal Heat and Mass Transfer*, 2012, vol. 55, pp. 874–885. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.10.021.
9. Venerus D., Buongiorno J., Christianson R., Townsend J., Bang I.C., Chen G., Chung S.J., Chyu M., Chen H., Ding Y., Dubois F., Dzido G., Funfschilling D., Galand Q., Gao J., Hong H., Horton M., Hu L.W., Iorio C.S., Jarzebski A.B., Jiang Y., Kabelac S., Kedzierski M.A., Kim C., Kim J.H., Kim S., McKrell T., Ni R., Philip J., Prabhat N., Song P., Vaerenbergh S.V., Wen D., Witharana S., Zhao X., Zhou S. Viscosity measurements on colloidal dispersions (nanofluids) for heat transfer applications. *Applied Rheology*, 2010, vol. 20, no. 4, pp. 44582. doi: 10.3933/AppRheol-20-44582.
10. France Yu.W., Routbort J.L., Choi D.M. Review and comparison of nanofluid thermal conductivity and heat transfer enhancements. *Heat Transfer Engineering*, 2008, vol. 29, no. 5, pp. 432–460. doi: 10.1080/01457630701850851.
11. Kleinstreuer K., Yu F. Experimental and theoretical studies of nanofluid thermal conductivity enhancement: a review. *Nanoscale Research Letters*, 2011, vol. 6, no. 229, pp. 1–13. doi: 10.1186/1556-276X-6-229.
12. Rudyak V.Ya., Minakov A.V., Smetanina M.S., Pryazhnikov M.I. Experimental data on the dependence of the viscosity of water- and ethylene glycol-based nanofluids on the size and material of particles. *Doklady Physics*, 2016, vol. 61, pp. 152–154. doi: 10.1134/S1028335816030113. Translated from *Doklady Akademii nauk*, 2006, vol. 467, iss. 3, pp. 289–291.
13. Angayarkanni S.A., Philip J. Review on thermal properties of nanofluids: recent developments. *Advances in Colloid and Interface Science*, 2015, vol. 225, pp. 146–176. doi: 10.1016/j.cis.2015.08.014.
14. Pryazhnikov M., Minakov A., Rudyak V., Guzei D. Thermal conductivity measurements of nanofluids. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, vol. 104, pp. 1275–1282. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.09.080.

15. Rudyak V.Ya., Belkin A.A., Tomilina E.A., Egorov V.V. Nanoparticle friction force and effective viscosity of nanofluids. *Defect and Diffusion Forum*, 2008, vol. 273–276, pp. 566–571. doi: 10.4028/www.scientific.net/DDF.273-276.566.
16. Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L. Dependence of the viscosity of nanofluids on nanoparticle size and material. *Physics Letters A*, 2014, vol. 378, pp. 1845–1849. doi: 10.1016/j.physleta.2014.04.060.
17. Romanov N.A.; Kalashnikov S.V.; Nomoev A.V. Mekhanizmy obrazovaniya kompozitnykh nanochastits (polye nanochastitsy) [Mechanisms of formation of composite nanoparticles (hollow nanoparticles)]. *Molodoi uchenyi – The Young Scientist*, 2012, no. 8 (43), pp. 11–13.
18. Lohani A., Verma A., Joshi H., Yadav N., Karki N. Nanotechnology-based cosmeceuticals. *ISRN Dermatology*, 2014, art. 843687, pp. 1–14. doi: 10.1155/2014/843687.
19. Sharma A., Kumar S., Mahadevan N. Nanotechnology: a promising approach for cosmetics. *International Journal of Advances in Pharmaceutical Research*, 2012, vol. 2 (2), pp. 54–61.
20. Puliti G., Paolucci S., Sen M. Thermodynamic properties of gold–water nanofluids using molecular dynamics. *Journal of Nanoparticle Research*, 2012, vol. 14, p. 1296. doi: 10.1007/s11051-012-1296-4.
21. Goodman F., Wachman H. *Dynamics of gas-surface scattering*. New York, Academic Press, 1976. 326 p. (Russ. ed.: Gudman F., Vakhman G. *Dinamika rasseyaniya gaza poverkhnost'yu*. Moscow, Mir Publ., 1980. 423 p.).
22. Kaplan I.G. *Vvedenie v teoriyu mezhmolekulyarnykh vzaimodeistvii* [Introduction to the theory of intermolecular interactions]. Moscow, Nauka Publ., 1982. 312 p.
23. Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L. The interaction potential of dispersed particles with carrier gas molecules. *Proceedings of 21st International Symposium on RGD*. Toulouse, Gépadués-Éditions, 1999, vol. 1, pp. 263–270.
24. Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L., Ivanov D.A. The interaction potential of nanoparticles. *Doklady Physics*, 2012, vol. 57, pp. 33–35. doi: 10.1134/S1028335812010053. Translated from *Doklady Akademii nauk*, 2012, vol. 442, no. 1, pp. 54–56.
25. Hamaker H.C. The London – van der Waals attraction between spherical particles. *Physica*, 1937, vol. 4, no. 10, pp. 1058–1072. doi: 10.1016/S0031-8914(37)80203-7.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Рудяк Валерий Яковлевич – родился в 1945 году, д-р физ.-мат. наук, профессор, заслуженный работник высшей школы РФ, действительный член МАН ВШ, действительный член Американского нанообщества (American Nano Society), заведующий кафедрой теоретической механики НГАСУ (Сибстрин). Основные научные направления исследований: неравновесная статистическая механика, кинетическая теория газов, теплофизика процессов переноса, физика наножидкостей, гидромеханика, ламинарно-турбулентный переход, математическое моделирование. Имеет более 500 публикаций, в том числе 6 монографий. (Адрес: 630008, Россия, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).

Rudiak Valerii Iakovlevich (b. 1945) – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Honored Worker of Higher School of Russia, member of the MAS HS, member of the American Nano Society, Head of the Department of Theoretical Mechanics NGASU (Sibstrin). His research interests are currently focused on: non-equilibrium statistical mechanics, kinetic theory of gases, thermal transfer processes, nanofluids physics, fluid mechanics, laminar-turbulent transition, mathematical modeling. He is author of more than 500 publications, including 6 monographs. (Address: 113, Leningradskaya st., Novosibirsk, 630008, Russia. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).



Краснолуцкий Сергей Леонидович – родился в 1973 году, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры теоретической механики НГАСУ (Сибстрин). Область научных интересов: кинетическая теория газов, неравновесная статистическая механика, физика и механика процессов переноса, процессы переноса в наножидкостях. Опубликовано более 50 научных работ. (Адрес: 630008, Россия, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: sergius-l@mail.ru).

Krasnolutskiy Sergey Leonidovich (b. 1973) – Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor of the Department of Theoretical Mechanics of Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering (Sibstrin). His research interests are currently focused on kinetic theory of gases, nonequilibrium statistical mechanics, physics and mechanics of transport processes, transport processes in nanofluids. He is the author of more than 50 scientific papers. (Address: 113, Leningradskaya st., Novosibirsk, 630008, Russia. E-mail: sergius-l@mail.ru).

*Статья поступила 19 апреля 2017 г.
Received April 19, 2017*

To Reference:

Rudyak V.Ya., Krasnolutskiy S.L. Potentsialy vzaimodeistviya polykh nanochastits mezhdu soboi i s molekulami nesushchei sredy [Interaction potentials of hollow nanoparticles with each other and with molecules of the carrier medium]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2017, no. 2 (35), pp. 32–42. doi: 10.17212/1727-2769-2017-2-32-42