

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

**ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМПОЗИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ
МЕЖДУ СОБОЙ И С МОЛЕКУЛАМИ НЕСУЩЕЙ СРЕДЫ****В.Я. Рудяк, С.Л. Краснолуцкий**
НГАСУ (Сибстрин)

Исследования наножидкостей показали, что они имеют нестандартные свойства. В частности, процессы переноса в наножидкостях, их вязкость и теплопроводность не описываются классическими теориями. Помимо однородных наночастиц, большой практический интерес представляют композитные, в частности состоящие из ядра и оболочки из разных материалов. Для стабилизации наножидкостей и предотвращения агрегации частиц применяют различные поверхностно-активные вещества (ПАВ). В этом случае также фактически имеет место композитная частица. Для моделирования процессов переноса в наножидкостях в настоящее время широко используется метод молекулярной динамики. Этот метод в свою очередь требует задания соответствующих потенциалов взаимодействия. Целью данной работы является вывод потенциалов взаимодействия композитной наночастицы с молекулой несущей среды и двух таких наночастиц между собой. Частицы предполагаются твердыми и сферическими. Взаимодействие атомов наночастицы и молекул несущей среды описывается потенциалами Леннарда–Джонса с соответствующими параметрами. Также потенциалами Леннарда–Джонса 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 покрытые ПАВ или композитные наночастицы, и их течений.

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

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-26-37

Введение

Наножидкость – это двухфазная среда, состоящая из несущего флюида (жидкости или газа) и наночастиц, имеющих размеры от 1 до 100 нм. В качестве несущей жидкости обычно используются вода, различные органические жидкости (этиленгликоль, масло, биологические жидкости и т. п.), полимерные растворы. Постоянно растущий интерес к наножидкостям мотивирован их уже существующими и возможными применениями (см., например, [1, 2]). Обычно в качестве наночастиц используются частицы химически устойчивых металлов и их оксиды, полимерные частицы и т. д.

Важной особенностью наножидкостей является то, что их свойства переноса (диффузия, вязкость, теплопроводность) не описываются классическими теориями. Так, например, вязкость наножидкостей не описывается теориями, развитыми для крупнодисперсных жидкостей Эйнштейном [3], Бэтчелора [4] и т. д. Вязкость наножидкостей оказывается значительно больше, чем у крупнодисперсных жид-

Исследование выполнено при частичном финансировании РФФИ (гранты № 17-01-00040, № 17-58-45023).

костей и зависит не только от концентрации частиц, но также от их размера и материала [5–9]. Подобная ситуация имеет место и для теплопроводности [10–13]. Однако реально изучавшиеся до сих пор наножидкости обычно содержали однородные частицы. Вместе с тем во многих биомедицинских приложениях, при производстве различной косметической продукции, средств экологической защиты и т. п. [2] часто используются неоднородные частицы. Это прежде всего различные композитные частицы [2, 14–17]. Кроме того, на практике при приготовлении наножидкостей, чтобы предотвратить агрегацию частиц, нередко применяют различные дисперсанты – поверхностно-активные вещества (ПАВ) [2, 18, 19]. В этом случае на поверхности наночастиц образуется тонкая пленка ПАВ и фактически частица также превращается в специфическую композитную.

Экспериментальное изучение теплофизических свойств наножидкостей дает сегодня достаточно надежную информацию. Тем не менее эксперимент не позволяет ответить на вопрос о механизмах процессов переноса и их особенностях в наножидкостях, о причинах зависимости этих свойств от материала частиц, не удается, как правило, получать надежные данные в наножидкостях с достаточно малыми частицами. Альтернативой эксперименту здесь выступает метод молекулярной динамики. Однако его применение в данном случае долгое время было осложнено отсутствием надежных потенциалов взаимодействия молекул несущего флюида с наночастицей и наночастиц между собой. В наших работах [20–22] такие потенциалы были разработаны для однородных наночастиц. С их помощью получены данные о различных свойствах наножидкостей, позднее подтвержденных экспериментально. В работе [23] был построен потенциал взаимодействия полых наночастиц. Целью данной работы является вывод потенциалов взаимодействия сферической композитной наночастицы с молекулой несущей среды и двух таких наночастиц между собой.

1. Потенциал взаимодействия молекулы с композитной наночастицей

Рассматривается твердая композитная двухслойная частица. Она считается сферической и состоит из шарообразной сердцевины радиуса R и сферической оболочки конечной толщины Δ . Таким образом, полный радиус наночастицы с оболочкой равен $(R + \Delta)$. Частица и оболочка рассматриваются как совокупности атомов (или молекул) соответствующего вещества. Потенциал взаимодействия молекулы несущей среды с данной наночастицей ищется в виде суммы потенциалов этой молекулы со всеми атомами наночастицы:

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

где N – число атомов наночастицы, \mathbf{r}_m и \mathbf{r}_k – радиус-векторы соответственно молекулы несущей среды и k -го атома наночастицы.

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

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

где $r = |\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_k|$ – расстояние между центрами молекул m и k ; σ_{mk} – эффективный диаметр атома; ε_{mk} – глубина потенциальной ямы.

Просуммировать ряд (1) аналитически обычно не удастся. Поэтому на практике суммирование в формуле (1) заменяют интегрированием [24]. Физически это означает, что твердое тело аппроксимируется континуальной моделью. Нахождение потенциала тогда сводится к вычислению тройного интеграла, потенциал усредняется по текущим координатам интегрирования: радиусу a и двум углам: полярному θ и азимутальному. Схема интегрирования показана на рис. 1.

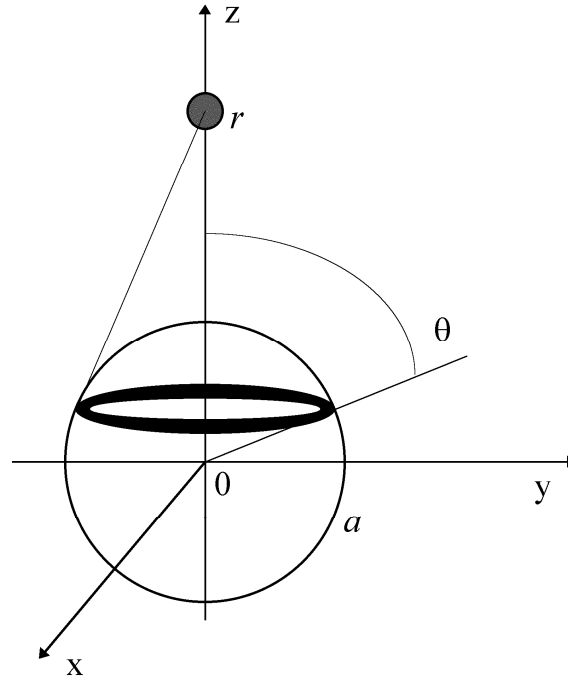


Рис. 1 – Схема интегрирования потенциала взаимодействия (3)

Fig. 1 – Integration diagram of the interaction potential (3)

Темное кольцо показывает расположение атомов частицы на сфере радиуса a , равноудаленных от молекулы несущей среды. Если потенциал взаимодействия молекула несущей среды – атом наночастицы не зависит от их ориентации, то формула (1) сводится к сумме следующих интегралов:

$$\Phi(z) = \Phi_{mp}(z) + \Phi_{ms}(z), \quad (3)$$

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

$$\Phi_{ms}(z) = V_s^{-1} \int_R^{R+\Delta\pi} \int_0^\pi \Phi_{ms}^{LJ} \left(\sqrt{(z - a \cos \theta)^2 + a^2 \sin^2 \theta} \right) 2\pi a^2 da \sin \theta d\theta,$$

где z – расстояние от молекулы до центра сферы, в котором помещено начало координат; Φ_{mk}^{LJ} – потенциал Леннард–Джонса (2) взаимодействия молекулы несущего газа с атомом (молекулой) дисперсной частицы соответствующего сорта;

V_p, V_s – эффективный объем, приходящийся на одну молекулу сердцевин и оболочки наночастицы соответственно, причем $V_p^{-1} = \rho_p N_A / \mu_p$, $V_s^{-1} = \rho_s N_A / \mu_s$, где ρ_p, ρ_s – плотность материала сердцевин и оболочки частицы соответственно, N_A – число Авогадро, μ_p, μ_s – молярная масса атомов (молекул), составляющих сердцевину и оболочку дисперсной частицы соответственно; a, θ – текущие координаты интегрирования, характеризующие положение и радиус окружности интегрирования; $dV = 2\pi a^2 da \sin \theta d\theta$ – элемент объема интегрирования. Индекс p относится к атомам сердцевин, а s – оболочки наночастицы.

В результате интегрирования получаем

$$\Phi(r, R, \Delta) = \Phi_{mp}(r, R) + \Phi_{ms}(r, R, \Delta), \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_{mp}(r, R) &= \Phi_{mp}^9(r, R) - \Phi_{mp}^3(r, R), \\ \Phi_{mp}^n(r, R) &= C_{mp}^n \left\{ \left[\frac{1}{(r-R)^n} - \frac{1}{(r+R)^n} \right] - \frac{n}{(n-1)r} \left[\frac{1}{(r-R)^{(n-1)}} - \frac{1}{(r+R)^{(n-1)}} \right] \right\}, \\ \Phi_{ms}(r, R, \Delta) &= \Phi_{ms}^9(r, R, \Delta) - \Phi_{ms}^3(r, R, \Delta), \\ \Phi_{ms}^n(r, R, \Delta) &= C_{ms}^n \left\{ \left[\frac{1}{(r-R-\Delta)^n} - \frac{1}{(r+R+\Delta)^n} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{n}{(n-1)r} \left[\frac{1}{(r-R-\Delta)^{(n-1)}} - \frac{1}{(r+R+\Delta)^{(n-1)}} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \left[\frac{1}{(r-R)^n} - \frac{1}{(r+R)^n} \right] + \frac{n}{(n-1)r} \left[\frac{1}{(r-R)^{(n-1)}} - \frac{1}{(r+R)^{(n-1)}} \right] \right\}, \\ C_{mp}^n &= \frac{8\pi\epsilon_{mp}\sigma_{mp}^{(n+3)}}{n(n+1)V_p}, \quad C_{ms}^n = \frac{8\pi\epsilon_{ms}\sigma_{ms}^{(n+3)}}{n(n+1)V_s}, \end{aligned}$$

r – расстояние между центрами наночастицы и молекулой несущей среды.

2. Потенциал взаимодействия композитных наночастиц

Выведем теперь выражение для потенциала взаимодействия двух одинаковых композитных сферических наночастиц, рассмотренных в предыдущем разделе. 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 межатомное взаимодействие снова описывается потенциалом (2), искомый потенциал будет иметь вид (4) с соответствующими материалами сердцевин и оболочки наночастиц константами C_{mk}^n .

На втором этапе просуммируем потенциалы взаимодействия первой наночастицы со всеми атомами второй. Поскольку сердцевина и оболочки наночастиц 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. рис. 1). Схема интегрирования аналогична использованной при построении потенциала (3). Таким образом, потенциал взаимодействия двух одинаковых шарообразных композитных наночастиц вычисляется по формуле

$$\Psi(z) = \Psi_{ss}(z) + \Psi_{pp}(z) + 2\Psi_{ps}(z), \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \Psi_{pp}(z) &= V_p^{-1} \int_0^R \int_0^\pi \Phi_{pp} \left(\sqrt{(z - a \cos \theta)^2 + a^2 \sin^2 \theta}, R \right) 2\pi a^2 da \sin \theta d\theta, \\ \Psi_{ps}(z) &= V_p^{-1} \int_0^R \int_0^\pi \Phi_{ps} \left(\sqrt{(z - a \cos \theta)^2 + a^2 \sin^2 \theta}, R, \Delta \right) 2\pi a^2 da \sin \theta d\theta, \\ \Psi_{ss}(z) &= V_s^{-1} \int_R^{R+\Delta} \int_0^\pi \Phi_{ss} \left(\sqrt{(z - a \cos \theta)^2 + a^2 \sin^2 \theta}, R, \Delta \right) 2\pi a^2 da \sin \theta d\theta. \end{aligned}$$

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

$$\Psi(r, R, \Delta) = \Psi^7(r, R, \Delta) - \Psi^1(r, R, \Delta), \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} \Psi^7(r, R, \Delta) &= \Psi_{ss}^7(r, R, \Delta) + \Psi_{pp}^7(r, R) + 2\Psi_{ps}^7(r, R, \Delta), \\ \Psi_{ss}^7(r, R, \Delta) &= C_s^7 \left\{ \frac{(R+\Delta)^2}{r} \left[\frac{1}{(r-2R-2\Delta)^7} + \frac{2}{r^7} + \frac{1}{(r+2R+2\Delta)^7} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{(R+\Delta)}{3r} \left[\frac{1}{(r-2R-2\Delta)^6} - \frac{1}{(r+2R+2\Delta)^6} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{30r} \left[\frac{1}{(r-2R-2\Delta)^5} + \frac{2}{r^5} + \frac{1}{(r+2R+2\Delta)^5} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{2R(R+\Delta)}{r} \left[\frac{1}{(r-2R-\Delta)^7} + \frac{1}{(r-\Delta)^7} + \frac{1}{(r+\Delta)^7} + \frac{1}{(r+2R+\Delta)^7} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{(2R+\Delta)}{3r} \left[\frac{1}{(r-2R-\Delta)^6} - \frac{1}{(r+2R+\Delta)^6} \right] - \frac{\Delta}{3r} \left[\frac{1}{(r-\Delta)^6} - \frac{1}{(r+\Delta)^6} \right] + \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{15r} \left[\frac{1}{(r-2R-\Delta)^5} - \frac{1}{(r-\Delta)^5} - \frac{1}{(r+\Delta)^5} + \frac{1}{(r+2R+\Delta)^5} \right] + \\
& \quad + \frac{R^2}{r} \left[\frac{1}{(r-2R)^7} + \frac{2}{r^7} + \frac{1}{(r+2R)^7} \right] - \\
& - \frac{R}{3r} \left[\frac{1}{(r-2R)^6} - \frac{1}{(r+2R)^6} \right] - \frac{1}{30r} \left[\frac{1}{(r-2R)^5} + \frac{2}{r^5} + \frac{1}{(r+2R)^5} \right] \Bigg\}, \\
\Psi_{pp}^7(r, R) = C_p^7 & \left\{ \frac{R^2}{r} \left[\frac{1}{(r-2R)^7} + \frac{2}{r^7} + \frac{1}{(r+2R)^7} \right] - \right. \\
& \left. - \frac{R}{3r} \left[\frac{1}{(r-2R)^6} - \frac{1}{(r+2R)^6} \right] - \frac{1}{30r} \left[\frac{1}{(r-2R)^5} + \frac{2}{r^5} + \frac{1}{(r+2R)^5} \right] \right\}, \\
\Psi_{ps}^7(r, R, \Delta) = C_{ps}^7 & \left\{ \frac{R(R+\Delta)}{r} \left[\frac{1}{(r-2R-\Delta)^7} + \right. \right. \\
& + \frac{1}{(r-\Delta)^7} + \frac{1}{(r+\Delta)^7} + \frac{1}{(r+2R+\Delta)^7} \Bigg] + \frac{(2R+\Delta)}{6r} \left[\frac{1}{(r-2R-\Delta)^6} - \frac{1}{(r+2R+\Delta)^6} \right] + \\
& \quad + \frac{\Delta}{6r} \left[\frac{1}{(r-\Delta)^6} - \frac{1}{(r+\Delta)^6} \right] - \\
& \quad - \frac{1}{30r} \left[\frac{1}{(r-2R-\Delta)^5} - \frac{1}{(r-\Delta)^5} - \frac{1}{(r+\Delta)^5} + \frac{1}{(r+2R+\Delta)^5} \right] - \\
& \quad - \frac{R^2}{r} \left[\frac{1}{(r-2R)^7} + \frac{2}{r^7} + \frac{1}{(r+2R)^7} \right] + \\
& \quad \left. + \frac{R}{3r} \left[\frac{1}{(r-2R)^6} - \frac{1}{(r+2R)^6} \right] + \frac{1}{30r} \left[\frac{1}{(r-2R)^5} + \frac{2}{r^5} + \frac{1}{(r+2R)^5} \right] \right\}, \\
\Psi^1(r, R, \Delta) = \Psi_{ss}^1(r, R, \Delta) & + \Psi_{pp}^1(r, R) + 2\Psi_{ps}^1(r, R, \Delta),
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
\Psi_{ss}^1(r, R, \Delta) = C_s^1 & \left\{ \ln \left[\frac{r^2 - 4(R+\Delta)^2}{r^2} \right] + 2(R+\Delta)^2 \left[\frac{1}{r^2 - 4(R+\Delta)^2} + \frac{1}{r^2} \right] - \right. \\
& \left. - 2 \ln \left[\frac{r^2 - (2R+\Delta)^2}{r^2 - \Delta^2} \right] - 4R(R+\Delta) \left[\frac{1}{r^2 - (2R+\Delta)^2} + \frac{1}{r^2 - \Delta^2} \right] + \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \ln \left[\frac{r^2 - 4R^2}{r^2} \right] + 2R^2 \left[\frac{1}{r^2 - 4R^2} + \frac{1}{r^2} \right] \Bigg\}, \\
\Psi_{pp}^1(r, R) &= C_p^1 \left\{ \ln \left[\frac{r^2 - 4R^2}{r^2} \right] + 2R^2 \left[\frac{1}{r^2 - 4R^2} + \frac{1}{r^2} \right] \right\}, \\
\Psi_{ps}^1(r, R, \Delta) &= C_{ps}^1 \left\{ \ln \left[\frac{r^2 - (2R + \Delta)^2}{r^2 - \Delta^2} \right] + \right. \\
& + 2R(R + \Delta) \left[\frac{1}{r^2 - (2R + \Delta)^2} + \frac{1}{r^2 - \Delta^2} \right] - \\
& \left. - \ln \left[\frac{r^2 - 4R^2}{r^2} \right] - 2R^2 \left[\frac{1}{r^2 - 4R^2} + \frac{1}{r^2} \right] \right\}, \\
C_s^7 &= \frac{\pi^2}{315} \frac{\varepsilon_s \sigma_s^{12}}{V_s^2}, \quad C_p^7 = \frac{\pi^2}{315} \frac{\varepsilon_p \sigma_p^{12}}{V_p^2}, \quad C_{ps}^7 = \frac{\pi^2}{315} \frac{\varepsilon_{ps} \sigma_{ps}^{12}}{V_s V_p}, \\
C_s^1 &= \frac{2\pi^2}{3} \frac{\varepsilon_s \sigma_s^6}{V_s^2}, \quad C_p^1 = \frac{2\pi^2}{3} \frac{\varepsilon_p \sigma_p^6}{V_p^2}, \quad C_{ps}^1 = \frac{2\pi^2}{3} \frac{\varepsilon_{ps} \sigma_{ps}^6}{V_s V_p},
\end{aligned}$$

r – расстояние между центрами наночастиц.

Закключение

Построенные потенциалы взаимодействия наночастица–молекула и наночастица–наночастица получены в обычных предположениях. Взаимодействие молекулы с наночастицей и наночастиц между собой описывалось классически и в адиабатическом приближении. Помимо этого не учитывались влияние структуры поверхности наночастицы и тепловые колебания ее атомов. Что касается адиабатического приближения, то большая разница в массах электронов и ядер делает его вполне применимым, если только рассматриваются не самые легкие атомы. Имеющийся экспериментальный материал свидетельствует о том, что вплоть до энергий порядка нескольких кэВ взаимодействие молекул вполне описывается в рамках адиабатического приближения [25]. Знания полученного в данном приближении потенциала поэтому вполне достаточно для исследования свойств переноса наножидкостей.

Построенные нами модельные потенциалы можно применять как в квантово-механических, так и в 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.

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

пыления. Что касается адсорбции, то данный потенциал вполне неплохо будет ее моделировать. При не слишком высоких температурах наночастицы – вполне устойчивые объекты и выбивания атомами молекулами несущей жидкости не происходит. Этим наночастицы отличаются от кластеров, которые имеют обычно существенно меньшие размеры. Неупругость взаимодействия в обычных условиях (при не очень высоких температурах) также не будет сказываться на расчете теплофизических свойств наножидкостей.

Выведенные потенциалы, естественно, тесно связаны с потенциалами, полученными ранее для однородных частиц [20, 22]. При стремлении толщины сферической оболочки к нулю потенциал (4) переходит в потенциал молекула–наночастица [20], а потенциал (6) – в потенциал наночастица–наночастица [22]. Последний же потенциал для макроскопических частиц сводится к потенциалу Хамакера [26], но с известными константами взаимодействия.

Потенциал (4) зависит от толщины сферической оболочки Δ , окружающей твердую сердцевину. Однако все указанные потенциалы короткодействующие. Поэтому ясно, что молекула несущей среды (жидкости или газа) при Δ большей некоторой фактически взаимодействует лишь с атомами сферической оболочки и не чувствует атомов сердцевины. Реальный расчет потенциала подтверждает эту точку зрения. В качестве примера на рис. 2 приведен потенциал взаимодействия медной наночастицы диаметром 50 нм с молекулой аргона (сплошная линия). Здесь же показан потенциал взаимодействия углеродной наночастицы того же радиуса с молекулой аргона (штриховая линия). Наконец пунктирной линией нанесен потенциал взаимодействия композитной наночастицы из меди с углеродной оболочкой с молекулой аргоном. Толщина оболочки равна 1 нм (т.е. сферическое медное ядро имеет диаметр 49 нм). Потенциалы Φ (3) измеряются в кельвинах, расстояние от центра наночастицы до молекулы среды r – в ангстремах. С точностью до построения обе последние кривые совпадают.

Указанное обстоятельство принципиально. Процессы переноса в наножидкостях с композитными наночастицами в значительной степени будут определяться материалом ее оболочки. Это, в частности, относится и к наножидкостям, в которых используются различные ПАВ. Обычно пленка ПАВ составляет 1–2 нм. Таким образом, вязкость и теплопроводность наножидкостей, приготовленных с использованием ПАВ и без него, будут различаться. По-видимому, это будет особенно заметно в наножидкостях с малыми частицами.

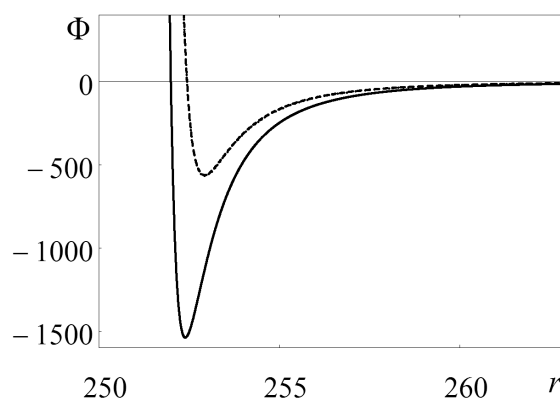


Рис. 2 – Потенциалы взаимодействия наночастица–молекула (3)

Fig. 2 – Nanoparticle–molecule interaction potentials (3)

ЛИТЕРАТУРА

1. **Wong K.V., Leon O. de.** Applications of nanofluids: current and future // *Advances in Mechanical Engineering*. – 2010. – Vol. 2. – Art. 519659. – doi: 10.1155/2010/519659.
2. **Рудяк В.Я.** Современные проблемы микро- и наножидкости. – Новосибирск: Наука, 2016. – 298 с.
3. **Einstein A.** Eine neue bestimmung der moleküldimensionen // *Annalen der Physik*. – 1906. – Vol. 19. – P. 289–306.
4. **Batchelor G.K.** Brownian diffusion of particles with hydrodynamic interaction // *Journal of Fluid Mechanics*. – 1976. – Vol. 74, pt. 1. – P. 1–29. – doi: 10.1017/S0022112076001663.
5. **Murshed S.M. Sohel, Estelléb P.** A state of the art review on viscosity of nanofluids // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. – 2017. – Vol. 76. – P. 1134–1152. – doi: 10.1016/j.rser.2017.03.113. – doi: 10.1016/j.rser.2017.07.016.
6. Effect of particle size on the viscosity of nanofluids: a review / D.H. Koca, S. Doganay, A. Turgutç, I.H. Tavmanc, R. Saidurd, I.M. Mahbululf // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. – 2018. – Vol. 82. – P. 1664–1674. – doi: 10.1016/j.rser.2017.07.016.
7. 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.
8. **Rudyak V.Ya., Krasnolutsii 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.
9. 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, № 3. – С. 289–291.
10. Review and comparison of nanofluid thermal conductivity and heat transfer enhancements / Yu. Wenhua, D.M. France, J.L. Routbort, U.S. Choi // *Heat Transfer Engineering*. – 2008. – Vol. 29. – N 5. – P. 432–460. – doi: 10.1080/01457630701850851.
11. **Kleinstreuer C., Feng Yu.** 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. **Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л.** Моделирование коэффициента теплопроводности наножидкости с малыми частицами методом молекулярной динамики // *ЖТФ*. – 2017. – Т. 87, вып. 10. – С. 1450–1458.
13. The experimental study of nanofluids boiling crisis on cylindrical heaters / A.V. Minakov, M.I. Pryazhnikov, D.V. Guzei, G.M. Zeer, V.Ya. Rudyak // *International Journal of Thermal Sciences*. – 2017. – Vol. 116. – P. 214–223. – doi: 10.1016/j.ijthermalsci.2017.02.019.
14. Thermal stability of Sb/Sb₂O₃ composite nanoparticles / D.W. Zeng, X. Chen, R. Jiang, C.S. Xie, B.L. Zhua, W.L. Song // *Materials Chemistry and Physics*. – 2006. – Vol. 96, N 2–3. – P. 454–458. – doi: 10.1016/j.matchemphys.2005.07.033.
15. Синтез металлических наночастиц на углеродной матрице / В.А. Мальцев, О.А. Нерушев, С.А. Новопашин, С.З. Сахапов, Д.В. Смвж // *Российские нанотехнологии*. – 2007. – Т. 2, № 5–6. – С. 85–89.
16. Hybrid, silica-coated, Janus-like plasmonic-magnetic nanoparticles / G.A. Sotiriou, A.M. Hir, P.-Y. Lozach, A. Teleki, F. Krumeich, S.E. Pratsinis // *Chemistry of Materials*. – 2011. – Vol. 23 (7). – P. 1985–1992. – doi: 10.1021/cm200399t.
17. **Романов Н.А., Калашиников С.В.; Номоев А.В.** Механизмы образования композитных наночастиц (полюе наночастицы) // *Молодой ученый*. – 2012. – № 8 (43). – С. 11–13.
18. **Такетоме С., Тикадзуми С.** Магнитные жидкости. – М.: Мир, 1993. – 272 с.
19. **Mukherjee S., Paria S.** Preparation and stability of nanofluids – a review // *IOSR Journal of Mechanical and Civil Engineering*. – 2013. – Vol. 9, no. 2. – P. 63–69.
20. **Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л.** Диффузия наночастиц в разреженном газе // *ЖТФ*. – 2002. – Т. 72, № 7. – С. 13–20.
21. **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.
22. **Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л., Иванов Д.А.** О потенциале взаимодействия наночастиц // *Доклады Академии наук*. – 2012. – Т. 442, № 1. – С. 54–56.

23. Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л. Потенциалы взаимодействия полых наночастиц между собой и с молекулами несущей среды // Доклады АН ВШ РФ. – 2017. – № 2 (35). – С. 32–42. – doi: 10.17212/1727-2769-2017-2-32-42.
24. Гудман Ф., Вахман Г. Динамика рассеяния газа поверхностью. – М.: Мир, 1980. – 423 с.
25. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – М.: Наука, 1982. – 312 с.
26. 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.

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

Rudyak V.Ya., Krasnolutsky S.L.

*Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering,
Novosibirsk, Russia*

Studies of nanofluids have showed that they have non-standard properties. In particular, transport processes in nanofluids, their viscosity and thermal conductivity are not described by classical theories. At present the molecular dynamics (MD) method is widely used to model transport processes in nanofluids. This method, in its turn, requires knowing appropriate interaction potentials. To stabilize nanofluids, in particular, to prevent aggregation of nanoparticles surfactants are used. In addition to homogeneous nanoparticles, composite nanoparticles are of great practical interest. The purpose of this paper is to construct interaction potentials of surfactant coated nanoparticles and composite ones with each other and with molecules of the carrier medium. A nanofluid consisting of a carrier fluid (gas or liquid) and surfactant coated nanoparticles or composite ones is considered. The particles are assumed to be solid and spherical. The interaction between the atoms of the nanoparticles and molecules of the carrier medium is described by Lennard-Jones potentials with the appropriate parameters. Also, Lennard-Jones potentials describe the interaction of atoms of two nanoparticles with each other. The interaction potential of a molecule of the carrier medium with this nanoparticle is given as a sum of the potentials of this molecule with all the atoms of the nanoparticle. Similarly, the interaction potential of two nanoparticles is determined. In both above cases, the solid is approximated by the continuum model. The potentials obtained are intended for modeling of transport processes in nanofluids containing surfactant coated nanoparticles and composite ones as a dispersed element and their flows.

Keywords: interaction potential, surfactant, composite nanoparticle, nanofluid, gas nanosuspension, transport processes, molecular dynamics.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-26-37

REFERENCES

1. Wong K.V., Leon O. de. Applications of nanofluids: current and future. *Advances in Mechanical Engineering*, 2010, vol. 2, art. 519659. doi: 10.1155/2010/519659.
2. Rudyak V.Ya. *Sovremennye problemy mikro- i nanoflyuidiki* [Modern problems of micro- and nanofluidics]. Novosibirsk, Nauka Publ., 2016. 298 p.
3. Einstein A. Eine neue bestimmung der moleküldimensionen. *Annalen der Physik*, 1906, vol. 19, pp. 289–306.
4. Batchelor G.K. Brownian diffusion of particles with hydrodynamic interaction. *Journal of Fluid Mechanics*, 1976, vol. 74, pt. 1, pp. 1–29. doi: 10.1017/S0022112076001663.
5. Murshed S.M. Sohel, Estelléb P. A state of the art review on viscosity of nanofluids. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2017, vol. 76, pp. 1134–1152. doi: 10.1016/j.rser.2017.03.113.
6. Koca D.H., Doganay S., Turgutç A., Tavmanc I.H., Saidurd R., Mahbubulf I.M. Effect of particle size on the viscosity of nanofluids: a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2018, vol. 82, pp. 1664–1674. doi: 10.1016/j.rser.2017.07.016.
7. 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.

8. Rudyak V.Ya., Krasnolutskiy 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.
9. 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, no. 3, pp. 152–154. doi: 10.1134/S1028335816030113. Translated from *Doklady Akademii nauk*, 2016, vol. 467, no. 3, pp. 289–291.
10. Wenhua Yu., France D.M., Routbort J.L., Choi U.S. 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., Feng Yu. 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., Krasnolutskiy S.L. Simulation of the thermal conductivity of a nanofluid with small particles by molecular dynamics methods. *Technical Physics*, 2017, vol. 62, iss. 10, pp. 1456–1465. doi: 10.1134/S1063784217100206. Translated from *Zhurnal tekhnicheskoi fiziki*, 2017, vol. 87, iss. 10, pp. 1450–1458.
13. Minakov A.V., Pryazhnikov M.I., Guzei D.V., Zeer G.M., Rudyak V.Ya. The experimental study of nanofluids boiling crisis on cylindrical heaters. *International Journal of Thermal Sciences*, 2017, vol. 116, pp. 214–223. doi: 10.1016/j.ijthermalsci.2017.02.019.
14. Zeng D.W., Chen X., Jiang R., Xie C.S., Zhua B.L., Song W.L. Thermal stability of Sb/Sb₂O₃ composite nanoparticles. *Materials Chemistry and Physics*, 2006, vol. 96, no. 2–3, pp. 454–458. doi: 10.1016/j.matchemphys.2005.07.033.
15. Mal'tsev V.A., Nerushev O.A., Novopashin S.A., Sakhapov S.Z., Smovzh D.V. Sintez metallicheskih nanochastits na uglernoi matritse [Synthesis of metal nanoparticles on carbon matrix]. *Rossiiskie nanotekhnologii – Nanotechnologies in Russia*, 2007, vol. 2, no. 5–6, pp. 85–89. (In Russian).
16. Sotiriou G.A., Hir A.M., Lozach P.-Y., Teleki A., Krumeich F., Pratsinis S.E. Hybrid, silica-coated, Janus-like plasmonic-magnetic nanoparticles. *Chemistry of Materials*, 2011, vol. 23 (7), pp. 1985–1992. doi: 10.1021/cm200399t.
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. Taketomi S., Tikadzumi S. *Magnitnye zhidkosti* [Magnetic fluids]. Moscow, Mir Publ., 1993. 272 p.
19. Mukherjee S., Paria S. Preparation and stability of nanofluids – a review. *IOSR Journal of Mechanical and Civil Engineering*, 2013, vol. 9, no. 2, pp. 63–69.
20. Rudyak V.Ya., Krasnolutskiy S.L. Diffusion of nanoparticles in a rarefied gas. *Technical Physics*, 2002, vol. 47, iss. 7, pp. 807–813. doi: 10.1134/1.1495039. Translated from *Zhurnal tekhnicheskoi fiziki*, 2002, vol. 72, no. 7, pp. 13–20.
21. 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, iss. 3, pp. 520–524. doi: 10.1007/s10891-008-0063-y. Translated from *Inzhenerno-fizicheskii zhurnal*, 2008, vol. 81, no. 3, pp. 76–81.
22. Rudyak V.Ya., Krasnolutskiy 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.
23. 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.
24. 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.).

25. Kaplan I.G. *Vvedenie v teoriyu mezhmolekulyarnykh vzaimodeistvii* [Introduction to the theory of intermolecular interactions]. Moscow, Nauka Publ., 1982. 312 p.
26. 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). 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 7 монографий. (Адрес: 630008, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).

Rudyak Valery Yakovlevich (b. 1945) – Doctor of Sciences (Phys.&Math.), Professor, Honored Worker of Higher School of Russia, member of the MAS HS, member of the American Nano Society. 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 the 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, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: sergius-l@mail.ru).

Krasnolutsky Sergey Leonidovich (b. 1973) – Candidate of Sciences (Phys.&Math.), associate professor at the Department of Theoretical Mechanics, 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 29 мая 2018 г.

Received May 29, 2018

To Reference:

Rudyak V.Ya., Krasnolutsky S.L. Potentsialy vzaimodeistviya kompozitnykh nanochastits mezhdu soboi i s molekulami nesushchei sredy [Potentials of composite nanoparticles interaction 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*, 2018, no. 3 (40), pp. 26–37. doi: 10.17212/1727-2769-2018-3-26-37.