

УДК 538.93

ОБ АНИЗОТРОПИИ ДИФФУЗИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ЖИДКОСТИ*

А.А. Белкин^{1,2}, Н.Я. Мачин¹, А.Е. Молчанова¹

¹Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (Сибстрин)

²Институт теплофизики им. Кутателадзе СО РАН

В статье рассматриваются методика и результаты молекулярно-динамического моделирования диффузии углеродных нанотрубок в воде. Целью работы являлось изучение продольной и поперечной относительно оси нанотрубки диффузии гибких нанотрубок, определение автокорреляционных функций скорости и коэффициентов диффузии в этих направлениях. Взаимодействие молекул воды друг с другом описывалось потенциалом Леннард–Джонса, а молекул углеродной нанотрубки – потенциалом AIREBO. Диаметры нанотрубок принимали значения 1,15 и 1,44 нанометра, их длина варьировалась от 5 до 15 нанометров. Количество молекул воды в ячейке моделирования достигало ста тысяч. Показано, что автокорреляционная функция скорости центра масс нанотрубки в продольном направлении затухает существенно медленнее, чем в поперечном. Соответствующие значения коэффициентов диффузии различаются в 2–4 раза, это различие возрастает при увеличении отношения длины нанотрубки к ее диаметру. Осредненный по направлениям коэффициент диффузии гибких нанотрубок уменьшается с увеличением длины нанотрубок. Его значения превышают соответствующие значения для твердых аналогов этих нанотрубок. Обнаружено немонотонное затухание автокорреляционной функции скорости центра масс нанотрубок. Характерное время между точками перегиба этой функции совпадает с периодом изгибных колебаний нанотрубки.

Ключевые слова: диффузия, углеродные нанотрубки, анизотропия, молекулярно-динамическое моделирование.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-4-7-17

Введение

Интенсивное развитие нанотехнологий поставило задачу изучения механизмов процессов переноса в наножидкостях, двухфазных системах, состоящих из базовой жидкости и наночастиц с характерными размерами до ста нанометров. Наножидкости уже сегодня применяются в устройствах теплообмена и теплопередачи, технологиях создания уникальных композитных материалов, медицинских и других технологиях [1]. Типичными базовыми жидкостями являются вода, масла, различные хладагенты и биологические жидкости. Наночастицы, как правило, состоят из металлов и их оксидов и имеют форму, близкую к сферической. Вместе с тем в последнее время возрастает интерес к наножидкостям с углеродными наноструктурами, такими как пластины графена или нанотрубки. Для них часто характерна сильная анизотропия размеров. Так, например, отношение длины к диаметру углеродной нанотрубки (УНТ), представляющей собой свернутый лист графена, может составлять несколько тысяч. При этом диаметр одностенных УНТ меняется обычно от одного до 3...4 нм. УНТ обладают уникальными свойствами, в частности чрезвычайно высокой прочностью и теплопроводностью, что позволяет использовать наножидкости с УНТ в трибонике, для устройств теплопередачи, при создании уникальных нанокомпозитов [2, 3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 20-19-00043).

© 2023 Белкин А.А., Мачин Н.Я., Молчанова А.Е.

Основными проблемами при использовании наножидкостей на базе УНТ является получение информации об их коэффициентах переноса и управление процессами переноса. Ключевым коэффициентом является коэффициент диффузии. Изучить экспериментально диффузию НТ достаточно тяжело, это связано с нестабильностью наножидкостей, агрегацией УНТ, влиянием используемых поверхностно-активных веществ. Тем не менее такие исследования ведутся [4, 5]. Важно, что диффузия УНТ анизотропна, можно выделить диффузию в направлении вдоль оси трубки (продольная диффузия) и перпендикулярно ей (поперечная диффузия). Экспериментальное изучение анизотропии диффузии практически невозможно.

В такой ситуации разумной альтернативой становится моделирование диффузии УНТ методом молекулярной динамики (МД) [6, 7]. В частности, именно с его помощью был установлен неклассический механизм диффузии сферических наночастиц [8]. Наряду с изучением физико-механических свойств самих УНТ [9], с помощью метода МД изучались и свойства переноса, в частности вращательная [10] и трансляционная [11] диффузия УНТ в жидкостях. В [11] была предложена методика и измерены продольный и поперечный коэффициенты диффузии нанотрубок. Однако ранее этим методом никак не изучалось влияние на диффузию изменений формы УНТ, связанных с их гибкостью, рассматривались твердые нанотрубки сравнительно небольших размеров.

Целью данной работы является определение коэффициентов диффузии гибких нанотрубок в воде в продольном и поперечном направлениях и получение зависимости коэффициента диффузии от длины и диаметра нанотрубок.

1. Постановка задачи

В работе моделировалась диффузия одиночной одностенной гибкой УНТ (рис. 1), окруженной молекулами воды. Для моделирования использовался классический метод МД [6]. Ячейка моделирования представляла собой параллелепипед, длина и ширина которого не изменялись и составляли 10 нм, а высота изменялась в пределах от 10 нм до 27 нм в зависимости от длины помещаемой УНТ. Использовались периодические граничные условия.

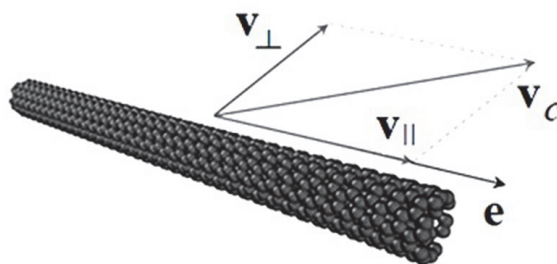


Рис. 1 – УНТ и составляющие скорости ее центра масс

Fig. 1 – CNT and its center of mass velocity components

Структура и диаметр УНТ определяются индексами хиральности [5]. В данной работе УНТ имели структуру типа «кресло» с индексами хиральности (6,6) и (8,8), что соответствует диаметрам 1,15 и 1,44 нм. Длина УНТ составляла 5, 10 и 15 нм, количество атомов в них менялось в зависимости от размеров в диапазоне от 504 до 1984. Расстояние между атомами углерода в гексагональной сетке графита равнялось 0,142 нм. Для описания взаимодействия атомов углерода

использовался потенциал AIREBO, широко используемый при моделировании углеродных наноструктур [12].

Взаимодействие молекул воды друг с другом определялось потенциалом Леннарда-Джонса.

$$\Phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где σ – эффективный диаметр молекулы; ϵ – глубина потенциальной ямы; r – расстояние между молекулами. Параметры потенциала Леннарда-Джонса для молекул воды следующие: $\sigma_w = 0,296$ нм, $\epsilon_w = 545,37$ К [11]. Взаимодействие атомов нанотрубки с молекулами воды описывалось также потенциалом (1), при этом константы потенциала определялись по константам воды и углерода ($\sigma_c = 0,342$ нм, $\epsilon_c = 27,7$ К) с помощью комбинационных соотношений $\sigma_{cw} = \sqrt{\sigma_c \sigma_w}$, $\epsilon_{cw} = \sqrt{\epsilon_c \epsilon_w}$.

Диффузия УНТ исследовалась при температуре $T = 300$ К и атмосферном давлении. В начальный момент молекулы воды располагались в ячейке моделирования равномерно, далее часть молекул удалялась, и в освободившееся место размещалась УНТ. Количество удаленных молекул подбиралось так, чтобы давление в получившейся наножидкости равнялось атмосферному. Давление определялось по теореме вириала [6]. Для поддержания температуры в системе использовался термостат Нозе–Хувера [12]. Расчеты коэффициентов диффузии проводились после того как система переходила в равновесное состояние. Количество молекул в системе зависело от размеров УНТ и менялось от 37 до 98 тысяч. МД-моделирование проводилось с помощью пакета LAMMPS [13], шаг интегрирования был равен одной пикосекунде.

Коэффициент трансляционной диффузии D нанотрубки определяется как интеграл по времени от автокорреляционной функции скорости (АКФС) ϕ_{vv} ее центра масс:

$$D = \int_0^{t_p} \phi_{vv}(t) dt, \quad \phi_{vv}(t) = \frac{1}{3} \langle v_c(t_0) v_c(t_0 + t) \rangle. \quad (2)$$

Здесь v_c – скорость центра масс УНТ; t_p – время затухания АКФС, угловые скобки означают осреднение по результатам, полученным для разных начальных времен t_0 .

Для изучения анизотропии диффузии УНТ было выделено два направления, вдоль и поперек оси нанотрубки (рис. 1). Положение продольной оси нанотрубки (иными словами, вектора \mathbf{e} на рис. 1) определялось в каждый момент. Проектируя текущее значение скорости центра масс УНТ на эти направления, далее подставляя эти проекции в соотношение (2), можно определить коэффициенты диффузии УНТ в продольном направлении $D_{||}$ и в поперечном D_{\perp} .

2. Результаты моделирования АКФС и коэффициентов диффузии

На рис. 2 представлены продольная, поперечная и осредненная по направлению АКФС центра масс УНТ длиной 10 нм и диаметром 1,15 нм.

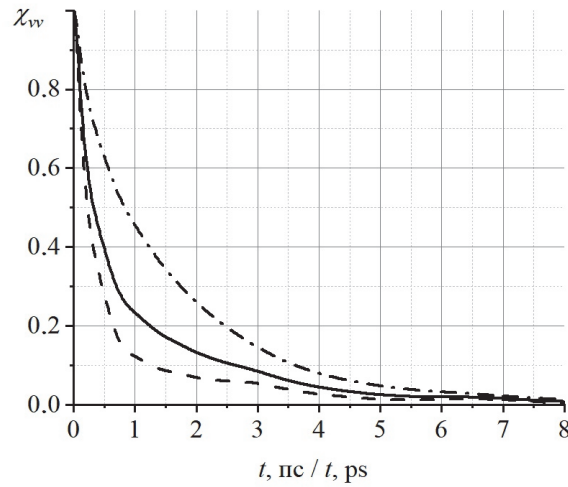


Рис. 2 – АКФС центра масс УНТ длиной 10 нм и диаметром 1,15 нм (сплошная линия), а также ее продольная (штрихпунктирная линия) и поперечная (штриховая линия) составляющие

Fig. 2 – VACF of the center of mass of a CNT with a length of 10 nm and a diameter of 1,15 nm (solid line), as well as its longitudinal (dashed-dotted line) and transverse (dashed line) components

Отметим, что вклад поперечной составляющей в осредненную в два раза больше, чем продольной, поскольку УНТ имеет два поперечных направления. АКФС на этом графике и ниже для удобства нормированы на свое значение в начальный момент $\chi_{vv}(t) = \varphi_{vv}(t) / \varphi_{vv}(0)$. Последнее определяется температурой системы и массой УНТ, для УНТ на рис. 2 оно равно $2,09 \text{ м}^2/\text{с}^2$.

Видно, что характер релаксации всех АКФС близок к экспоненциальному, при этом время релаксации поперечной составляющей скорости существенно меньше. При одинаковом значении $\varphi_{vv}(0)$ это приводит к достаточно высокому различию коэффициентов диффузии в продольном и поперечном направлении (в 2,4 раза, см. данные, приведенные в таблице). Эта разница обусловлена прежде всего различием характерной площади сечения УНТ при движении в разных направлениях. Для продольного направления она примерно равна 1 нм^2 , для поперечного – на порядок больше и определяется длиной нанотрубки.

Естественно, при увеличении длины УНТ различие этих площадей будет возрастать, что должно приводить к увеличению отношения времен релаксации и коэффициентов диффузии в разных направлениях. Это подтверждается приведенными на рис. 3 данными о релаксации осредненной АКФС для УНТ разной длины. Видно, что время релаксации с увеличением длины снижается. При этом $D_{||}$ меняется незначительно, не более чем на 5 % (см. таблицу), а D_{\perp} снижается в 2,25 раза при изменении длины УНТ от 5 до 15 нм. В то же время монотонный характер затухания АКФС для УНТ разной длины сохраняется. Изменения в характере релаксации появляются при увеличении диаметра нанотрубок.

На рис. 4 приведены АКФС для УНТ того же диапазона длин, но с увеличенным в 1,25 раза диаметром. На начальном участке релаксации зафиксированы

перегибы на графиках АКФС, экспоненциальное затухание сопровождается осцилляциями с периодом, примерно равным 0,5 пикосекунды. Причины этих осцилляций будут обсуждаться ниже, здесь же отметим, что они не будут существенно влиять на значения коэффициентов диффузии. Этот коэффициент является интегральной характеристикой, и вклады в него в участках перегибов будут нивелироваться.

**Коэффициенты диффузии ($10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}$) УНТ различной длины и диаметра,
 $d = 1,15 \text{ нм}$ и $1,44 \text{ нм}$ (отмечено символом *)**

**Diffusion coefficients ($10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}$) of CNTs of various lengths and diameter,
 $d = 1,15 \text{ nm}$ and $1,44 \text{ nm}$ (marked with *)**

	D	D_{\parallel}	D_{\perp}
$L = 5 \text{ нм} / L = 5 \text{ nm}$	2,29	3,31	1,78
$L = 10 \text{ нм} / L = 10 \text{ nm}$	1,87	3,07	1,27
$L = 15 \text{ нм} / L = 15 \text{ nm}$	1,58	3,13	0,80
$L = 5 \text{ нм} [11] / L = 5 \text{ nm} [11]$	1,70	2,11	1,49
$L = 5^* \text{ нм} / L = 5^* \text{ nm}$	1,96	2,80	1,54
$L = 10^* \text{ нм} / L = 10^* \text{ nm}$	1,43	1,79	1,25
$L = 15^* \text{ нм} / L = 15^* \text{ nm}$	1,17	2,43	0,54

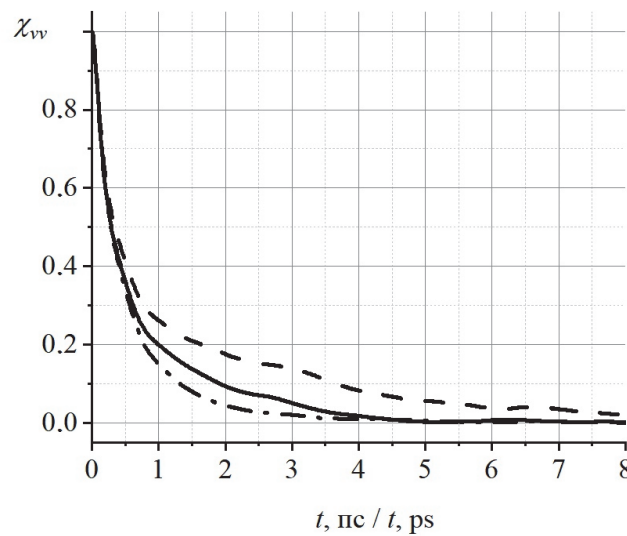


Рис. 3 – АКФС центра масс УНТ диаметром 1,15 нм и различной длины:

$L = 5 \text{ нм}$ (штрихпунктирная линия); $L = 10 \text{ нм}$ (сплошная линия);
 $L = 15 \text{ нм}$ (штриховая линия)

Fig. 3 – VACF of the center of mass of a CNT with a diameter of 1,15 nm and various lengths:

$L = 5 \text{ nm}$ (dashed-dotted line); $L = 10 \text{ nm}$ (solid line); $L = 15 \text{ nm}$ (dashed line)

Коэффициенты диффузии УНТ диаметром 1,44 нм меньше, чем для УНТ такой же длины и меньшего диаметра (таблица; рис. 5). Это отличие во многом определяется разностью тепловых скоростей УНТ разной массы, т. е. значением $\phi_{vv}(0)$.

Однако увеличение массы на 25 % для УНТ большего диаметра не приводит к пропорциональному уменьшению коэффициента D . Для УНТ длиной 10 нм он уменьшается на 30 %, а при увеличении длины до 15 нм различие достигает 35 %. Это объясняется отличиями в характерных временах релаксации АКФС.

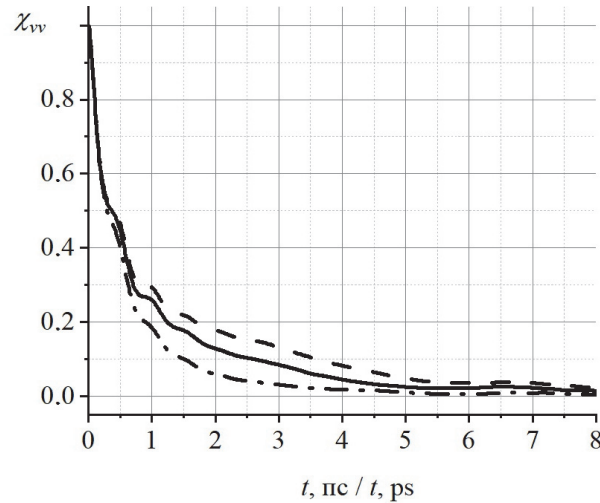


Рис. 4 – АКФС центра масс УНТ диаметром 1,44 нм и различной длины:

$L = 5$ нм (штрихпунктирная линия), $L = 10$ нм (сплошная линия),
 $L = 15$ нм (штриховая линия)

Fig. 4 – VACF of the center of mass of a CNT with a diameter of 1,44 nm and various lengths:

$L = 5$ nm (dashed-dotted line), $L = 10$ nm (solid line), $L = 15$ nm (dashed line)

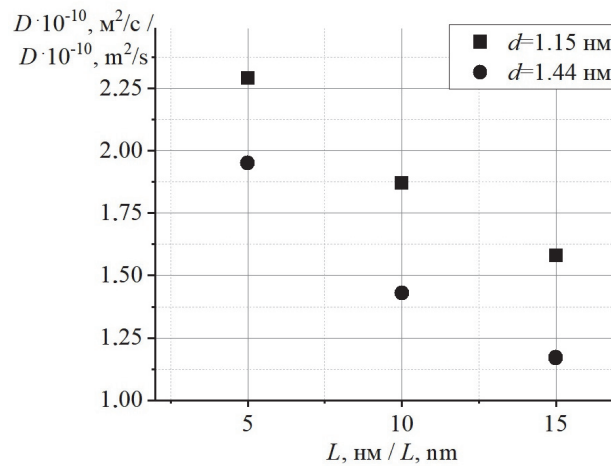


Рис. 5 – Зависимость коэффициентов диффузии УНТ различных диаметров d от длины нанотрубки L

Fig. 5 – Dependence of the diffusion coefficients of CNTs of various diameters d on the nanotube length L

Важно, что коэффициенты диффузии гибких УНТ достаточно сильно превышают значения для их твердых аналогов, полученные в работе [11]. Так, для нанотрубки длиной 5 нм и диаметром 1,15 нм это превышение составляет 35 % (см. таблицу). Отметим, наконец, что значения коэффициентов диффузии монотонно уменьшаются с ростом длины и диаметра УНТ (рис. 6). При этом разница между D_{\parallel} и D_{\perp} снижается с ростом диаметра УНТ.

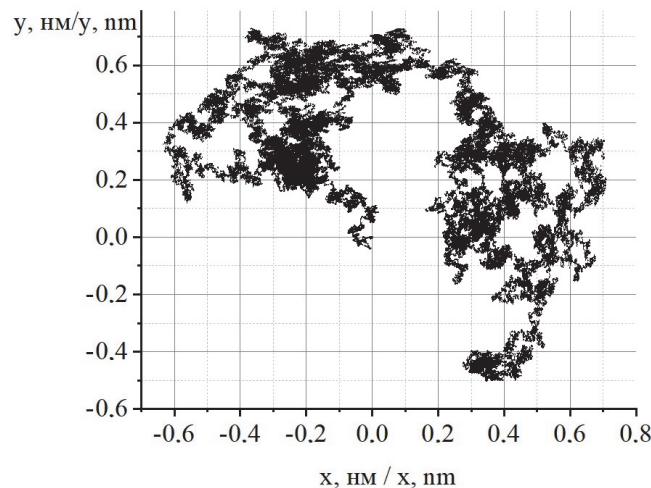


Рис. 6 – Диаграмма движения центральной области УНТ относительно оси нанотрубки

Fig. 6 – Motion diagram of the central region of the CNT relative to the nanotube axis

Заключение

Учет влияния деформаций УНТ на ее диффузию приводит к двум основным закономерностям. Во-первых, коэффициенты диффузии гибких УНТ превышают значения, полученные для твердых моделей [11]. Базовая жидкость является средой, в которой молекулы расположены очень плотно, расстояние между ними примерно равно их диаметру. В такой ситуации движущейся твердой нанотрубке сложнее пройти между молекулами, чем ее гибкому аналогу, который будет лучше подстраиваться под текущее расположение молекул жидкости. Разница в коэффициентах диффузии, как было показано, составляет десятки процентов.

Во-вторых, для АКФС центра масс УНТ диаметром выше 1,3...1,4 нм характерны осцилляции с частотой около 0,5 пикосекунды для диаметра 1,44 нм. Естественно, они должны быть связаны с определенными колебаниями нанотрубки. Продольные колебания УНТ имеют меньшие частоты [2], поэтому ключевую роль здесь должны играть изгибные колебания. Они, в свою очередь, делятся на два типа: изгиб оси УНТ и деформация ее поперечного сечения. На рис. 6 изображена траектория движения центральной области нанотрубки относительно ее продольной оси. Ось проведена через центры крайних сечений УНТ. Видно, что изгиб оси действительно имеет место, характерные отклонения составляют несколько десятых нанометра. Однако преобразование Фурье изображенного на рисунке сигнала не зафиксировало в нем колебания с периодом, близким к одной пикосекунде. Кроме того, осцилляции были обнаружены для УНТ большего диаметра, где изгиб оси должен быть меньше.

Изучение деформаций поперечного сечения нанотрубок выполнено в работе [14]. Там были смоделированы деформационные колебания и измерены частоты различных мод колебаний УНТ нескольких диаметров. В частности, было показано, что период основной моды колебаний УНТ диаметром около полутора нанометров равняется 0.5 пикосекунды, что совпадает с периодом осцилляций АКФС, зафиксированных в данной работе. Таким образом, именно деформации поперечного сечения УНТ будут влиять на релаксацию скорости ее центра масс.

ЛИТЕРАТУРА

1. Колмаков А.Г., Баринов С.М., Алымов М.И. Основы технологий и применение наноматериалов. – М.: Физматлит, 2012. – 208 с.
2. Saeed Ê., Ibrahim Ê. Carbon nanotubes-properties and applications: a review // Carbon Letters. – 2013. – Vol. 14 (3). – P. 131–144. – DOI: 10.5714/CL.2013.14.3.131.
3. Лозовик Ю.Е., Попов А.М. Образование и рост углеродных наноструктур – фуллеренов, наночастиц, нанотрубок и конусов // Успехи физических наук. – 1997. – Т. 167 (7). – С. 751–774.
4. Diffusion of single-walled carbon nanotube under physiological conditions / J. Judkins, H.H. Lee, S. Tung, J.W. Kim // Journal of Biomedical Nanotechnology. – 2013. – Vol. 9 (6). – P. 1065–1070.
5. Rudyak V.Ya., Tretiakov D.S. On diffusion of single-walled carbon nanotubes // Thermophysics and Aeromechanics. – 2020. – Vol. 27. – P. 847–855. – DOI: 10.1134/S0869864320060062.
6. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990. – 176 с.
7. Rapaport D.C. The art of molecular dynamics simulation. – New York: Cambridge University Press, 2004. – 549 p.
8. Rudyak V.Ya., Kharlamov G.V., Belkin A.A. Diffusion of nanoparticles and macromolecules in dense gases and liquids // High Temperature. – 2001. – Vol. 39 (2). – P. 264–271. – DOI: 10.1023/A:1017578917614.
9. Mejía-Rosales S. Mechanical properties of MoS₂ nanotubes under tension: a molecular dynamics study / S. Mejía-Rosales, S.A. Sandoval-Salazar, A. Soria-Sánchez, L.Y. Cantú-Sánchez // Molecular Simulation. – 2021. – Vol. 47 (6). – P. 471–479. – DOI: 10.1080/08927022.2021.1880577.
10. Dong R., Cao B. Investigation of rotational diffusion of a carbon nanotube by molecular dynamics // Journal of Nanoscience and Nanotechnology. – 2015. – Vol. 15. – P. 2984–2988.
11. Belkin A.A., Rudyak V.Ya., Krasnolutsii S.L. Molecular dynamics simulation of carbon nanotubes diffusion in water, molecular simulation // Molecular Simulation. – 2022. – Vol. 48. – P. 752–759. – DOI: 10.1080/08927022.2022.2053119.
12. Hünenberger P.H. Thermostat algorithms for molecular dynamics simulations // Advances in Polymer Science. – 2005. – Vol. 173. – P. 105–149. – DOI: 10.1007/b99427.
13. LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modelling at the atomic, meso, and continuum scales / A.P. Thompson, et al. // Computer Physics Communications. – 2022. – Vol. 271. – P. 108171. – DOI: 10.1016/j.cpc.2021.108171.
14. Собственные частоты изгибных колебаний углеродных нанотрубок / С.В. Дмитриев, И.Р. Сунагатова, М.А. Ильгамов, И.С. Павлов // Журнал технической физики. – 2021. – Т. 91 (11). – С. 1732–1737.

ON THE ANISOTROPY OF DIFFUSION OF CARBON NANOTUBES IN LIQUIDS

Belkin A.A.^{1,2}, Machin N.Ya.¹, Molchanova A.E.¹¹*Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering, Russia*²*Kutateladze Institute of Thermophysics, Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russia*

This article discusses the methodology and results of molecular dynamics simulation of the diffusion of carbon nanotubes in water. The main goals of this work were to study diffusion longitudinal to an axis of the nanotube and transverse to this axis and determine the velocity autocorrelation functions and diffusion coefficients in these directions. The interaction of water molecules with each other was described by the Lennard-Jones potential, and that of carbon nanotube molecules by the AIREBO potential. The diameters of the nanotubes were 1.15 and 1.44 nanometers, their length varied from 5 to 15 nanometers. The number of water molecules in the simulation cell reached one hundred thousand. It is shown that the nanotube center of mass velocity autocorrelation function in the longitudinal direction decays much more slowly than in the transverse direction. The corresponding values of the diffusion coefficients differ by a factor of 2–4; this difference increases with increasing ratio of the nanotube length to its diameter. The directionally averaged diffusion coefficients of flexible nanotubes decrease with increasing nanotube length. Its values exceed the corresponding values for their solid analogues. A nonmonotonic decay of the nanotubes center of mass velocity autocorrelation function was discovered. The characteristic time between the maxima of this function coincides with the period of bending vibrations of the nanotube.

Key words: diffusion, carbon nanotubes, anisotropy, molecular dynamics simulation.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-4-7-17

REFERENCES

1. Kolmakov A.G., Barinov S.M., Alymov M.I. *Osnovy tekhnologii i primeneniye nanomaterialov* [Fundamentals of technology and application of nanomaterials]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2012. 208 p.
2. Saeed Ê., Ibrahim Ê. Carbon nanotubes—properties and applications: a review. *Carbon Letters*, 2013, vol. 14 (3), pp. 131–144. DOI: 10.5714/CL.2013.14.3.131.
3. Lozovik Yu.E., Popov A.M. Formation and growth of carbon nanostructures – fullerenes, nanoparticles, nanotubes and cones. *Physics-Uspekhi*, 1997, vol. 40 (7), pp. 717–737. DOI: 10.1070/pu1997v040n07abeh000253. Translated from *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 1997, vol. 167 (7), pp. 751–774.
4. Judkins J., Lee H.H., Tung S., Kim J.W. Diffusion of single-walled carbon nanotube under physiological conditions. *Journal of Biomedical Nanotechnology*, 2013, vol. 9 (6), pp. 1065–1070. DOI: 10.1166/jbn.2013.1527.
5. Rudyak V.Ya., Tretiakov D.S. On diffusion of single-walled carbon nanotubes. *Thermophysics and Aeromechanics*, 2020, vol. 27, pp. 847–855. DOI: 10.1134/S0869864320060062.
6. Heerman D.W. *Computer simulation methods in theoretical physics*. Springer, 1986. 148 p. (Russ. ed.: Kheerman D.V. *Metody komp'yuternogo eksperimenta v teoreticheskoi fizike*. Moscow, Nauka Publ., 1990. 176 p.).
7. Rapaport D.C. *The art of molecular dynamics simulation*. New York, Cambridge University Press, 2004. 549 p.
8. Rudyak V.Ya., Kharlamov G.V., Belkin A.A. Diffusion of nanoparticles and macromolecules in dense gases and liquids. *High Temperature*, 2001, vol. 39 (2), pp. 264–271. DOI: 10.1023/A:1017578917614.
9. Mejía-Rosales S., Sandoval-Salazar S.A., Soria-Sánchez A., Cantú-Sánchez L.Y. Mechanical properties of MoS₂ nanotubes under tension: a molecular dynamics study. *Molecular Simulation*, 2021, vol. 47 (6), pp. 471–479. DOI: 10.1080/08927022.2021.1880577.

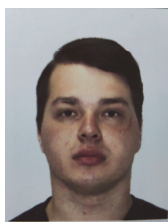
10. Dong R., Cao B. Investigation of rotational diffusion of a carbon nanotube by molecular dynamics. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 2015, vol. 15, pp. 2984–2988. DOI: 10.1166/jnn.2015.9678.
11. Belkin A.A., Rudyak V.Ya., Krasnolutsii S.L. Molecular dynamics simulation of carbon nanotubes diffusion in water, molecular simulation. *Molecular Simulation*, 2022, vol. 48, pp. 752–759. DOI: 10.1080/08927022.2022.2053119.
12. Hünenberger P.H. Thermostat algorithms for molecular dynamics simulations. *Advances in Polymer Science*, 2005, vol. 173, pp. 105–149. DOI: 10.1007/b99427.
13. Thompson A.P., et al. LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modelling at the atomic, meso, and continuum scales. *Computer Physics Communications*, 2022, vol. 271, p. 108171. DOI: 10.1016/j.cpc.2021.108171.
14. Dmitriev S.V., Sunagatova I.R., Ilgamov M.A., Pavlov I.S. Natural frequencies of bending vibrations of carbon nanotubes. *Technical Physics*, 2022, vol. 67, pp. 7–13. DOI: 10.1134/S1063784222010042. Translated from *Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki*, 2021, vol. 91 (11), pp. 1732–1737.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



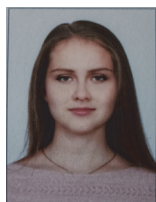
Белкин Александр Анатольевич – родился в 1969 году, д-р физ.-мат. наук, доцент, заведующий кафедрой теоретической механики Новосибирского государственного архитектурно-строительного университета (Сибстрин). Области научных интересов: неравновесная статистическая механика процессов переноса в дисперсных жидкостях, включая наножидкости, микро- и нанотечения жидкостей, моделирование методом молекулярной динамики. Опубликовано более 100 научных работ. (Адрес: 630008, Россия, Новосибирск, ул. Ленинградская, 113. E-mail: a.belkin@sibstrin.ru).

Belkin Alexandr Anatolievich (b. 1969) – Doctor of Sciences (Phys. & Math.), Associate Professor, Head of the Theoretical Mechanics department, Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering. His research interests are currently focused on nonequilibrium statistical mechanics of transport processes in dispersed fluids, including nanofluids, micro and nanoflows, molecular dynamics simulations. He is author of more than 100 scientific papers. (Address: 113, Leningradskaya Street, Novosibirsk, 630008, Russia. E-mail: a.belkin@sibstrin.ru).



Мачин Никита Яковлевич – родился в 2002 году, студент Новосибирского государственного архитектурно-строительного университета (Сибстрин) по специальности «Информационные системы и технологии». Область научных интересов: моделирование методом молекулярной динамики. (Адрес: 630008, Россия, Новосибирск, ул. Ленинградская, 113. E-mail: n.machin@sibstrin.ru).

Machin Nikita Yakovlevich (b. 2002) – Student of the Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering, specializing in information systems and technologies. Research interests: molecular dynamics simulations. (Address: 113, Leningradskaya Street, Novosibirsk, 630008, Russia. E-mail: n.machin@sibstrin.ru).



Молчанова Алена Евгеньевна – родилась в 2002 году, студентка Новосибирского государственного архитектурно-строительного университета (Сибстрин) по специальности «Строительство уникальных зданий и сооружений». Область научных интересов: моделирование методом молекулярной динамики, процессы переноса в наножидкостях. (Адрес: 630008, Россия, Новосибирск, ул. Ленинградская, 113. E-mail: alyona20020114@gmail.com).

Molchanova Alena Evgenievna (b. 2002) – Student of the Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering, specializing in the construction of unique buildings and structures. Research interests: molecular dynamics simulation, transport processes in nanofluids. (Address: 113, Leningradskaya Street, Novosibirsk, 630008, Russia. E-mail: alyo-na20020114@gmail.com).

*Статья поступила 17 октября 2023 г.
Received October 17, 2023[†]*

To Reference:

Belkin A.A., Machin N.Ya., Molchanova A.E. Ob anizotropii diffuzii uglerodnykh nanotrubok v zhidkosti [On the anisotropy of diffusion of carbon nanotubes in liquids]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2023, no. 4 (61), pp. 7–17 . DOI: 10.17212/1727-2769-2023-4-7-17.