

УДК 51.72:519.62

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯВЛЕНИЙ ПЕРЕНОСА ФУЛЛЕРЕНОВ В ЖИДКОСТИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

© 2011 Е.Д. Гайдук, В.А. Салеев¹

В рамках метода классической молекулярной динамики проведен расчет коэффициентов диффузии и вязкости фуллеренов в жидкости (бензоле) в зависимости от температуры наносuspензии. Используемый при расчетах эффективный потенциал взаимодействия "фуллерен-молекула" получен в предположении аддитивности взаимодействия молекул фуллерена и жидкости, при котором фуллерен рассматривается как жесткая частица.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, наносuspензия "фуллерен-бензол", коэффициент диффузии, коэффициент вязкости.

Введение

Быстрое развитие нанотехнологий сделало необходимым изучение процессов переноса наночастиц в жидкостях [1]. Наночастицы имеют характерные размеры от одного до десятков нанометров. Сегодня они привлекают внимание широкого круга теоретиков и экспериментаторов в связи с перспективами использования в электронной, химической, авиационнокосмической, медицинской промышленности, в биотехнологиях, для изготовления катализаторов и других материалов с уникальными свойствами. При исследовании процессов переноса ключевым пунктом является изучение диффузии и вязкости наночастиц и вычисление соответствующих коэффициентов. В настоящей работе вычисление транспортных коэффициентов для фуллеренов в жидкости осуществляется методом молекулярной динамики (ММД).

Метод классической молекулярной динамики — это метод, в котором временная эволюция системы взаимодействующих молекул описывается уравнениями классической механики с заданным потенциалом взаимодействия между частицами. ММД на протяжении последних десятилетий эффективно используется для моделирования физико-химических свойств веществ [2]. В настоящее время потенциалы межатомного взаимодействия достаточно хорошо известны, что позволяет моделировать динамику молекулярных систем с высокой степенью точности.

¹Гайдук Екатерина Дамировна (ek_gayduk@mail.ru), Салеев Владимир Анатольевич (saleev@ssu.samara.ru), кафедра математического моделирования в механике Самарского государственного университета, 443011, Российская Федерация, г. Самара, ул. Акад. Павлова, 1.

ММД позволяет моделировать статические и временные характеристики молекулярных систем. Для моделирования наносuspензий данным методом необходимо задать потенциал взаимодействия молекул с дисперсной частицей. В общем случае для решения такого взаимодействия необходимо решать квантовомеханическую задачу. Однако в широком диапазоне изменения параметров дисперсной системы взаимодействие может описываться классически на языке модельных потенциальных функций. Именно так, как правило, описывается взаимодействие атомов с твердыми поверхностями [3]. Подобные модели неплохо зарекомендовали себя в различных аэрокосмических приложениях, в некоторых технологических областях, таких, например, как микроэлектроника, реакторное материаловедение. Твердая поверхность в такой модели рассматривается как совокупность атомов или молекул, и потенциал взаимодействия молекулы жидкости или газа с поверхностью ищется в виде суммы потенциалов данной молекулы со всеми атомами поверхности. Такой же подход реализуется для моделирования потенциала взаимодействия "молекула-твердая частица".

В настоящее время существует ряд работ, посвященных изучению и моделированию процессов переноса наночастиц в газах и жидкостях. Например, работа [4] посвящена экспериментальному изучению зависимости коэффициента диффузии наночастиц в газах от температур, также в ней приведены зависимости от температуры экспериментально измеренного коэффициента диффузии частиц WO_3 , $NaCl$ в воздухе. В обзоре [1] рассмотрены явления и процессы, связанные с поведением фуллеренов в растворах. Представлены имеющиеся данные о растворимости фуллеренов C_{60} и C_{70} в большом числе растворителей при различных температурах, а также о коэффициенте диффузии фуллеренов в растворах. В частности, изучена зависимость коэффициента диффузии фуллерена C_{60} от концентрации с учетом образования кластеров. Изучение эффективной вязкости наносuspензий в последние два десятилетия оказалось весьма актуальным. Прежде всего это было связано с созданием разнообразных микроэлектромеханических систем и нанотехнологий различного назначения. Вместе с тем, несмотря на значительные усилия за эти десятилетия не удалось сколько-нибудь заметно продвинуться ни в получении систематических экспериментальных данных, ни в получении теории эффективной вязкости наносuspензий. Связано это с несколькими обстоятельствами. Получение экспериментальных данных по вязкости наножидкостей осложнено рядом факторов: трудностью создания моносuspензий, различными методическими проблемами точного измерения размера частиц, их концентрации, степени однородности распределения и т. п. Еще одна принципиальная сложность состоит в том, что с увеличением концентрации наночастиц наножидкость может изменить реологию и из ньютоновской жидкости стать неньютоновской. По этой причине все еще отсутствуют систематические экспериментальные данные и их число невелико. Известно всего несколько экспериментальных работ по измерению вязкости наносuspензий; полученные там результаты достаточно противоречивы.

Так, в работе [5] измерялась вязкость моносuspензий циклогексан- SiO_2 с диаметром частиц 28, 46 и 76 нм. Вязкость сuspензии этиленгликоля с частицами CuO , характерные размеры которых изменялись от 10 до 30 нм, изучалась в [6]. Здесь при объемных концентрациях наночастиц порядка 0.002 наблюдается резкое изменение характера зависимости вязкости от концентрации частиц, эффективная вязкость очень быстро возрастает. Однако в экспериментальных данных отсутствует дифференциация по размерам. В работе [7] получены зависимости от объемной концентрации коэффициента

вязкости двух наножидкостей: этиленгликоль– Al_2O_3 и вода– Al_2O_3 . Указывается, что средний размер частиц около 28 нм. Полученные результаты, однако, столь различны, что не описываются никакой корреляцией, и авторы отмечают, что измеренные значения существенно зависят, по-видимому, не только от концентрации, но и от дисперсности суспензии. Последнее перекликается с теоретическими результатами, полученными для разреженных наногазовзвесей с помощью кинетической теории, когда коэффициент эффективной вязкости наногазовзвеси существенно зависел от соотношения размеров и масс несущего газа и наночастиц [8; 9].

В настоящей работе построен потенциал взаимодействия ”дисперсная частица-молекула” для случая сферической дисперсной частицы, с помощью которого методом молекулярной динамики вычислены коэффициенты диффузии и вязкости фуллеренов C_{60} в бензоле. Также исследован характер зависимости этих коэффициентов от температуры.

1. Модель

Пусть твердая дисперсная частица моделируется совокупностью атомов твердого тела, заключенных в сферу радиуса R . Потенциал взаимодействия налетающей молекулы жидкости с выделенным атомом i частицы описывается парным потенциалом $U_i(|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_i|)$, где \mathbf{r}_m и \mathbf{r}_i — радиус-векторы соответственно налетающей молекулы и атома частицы. Тогда, если предположить, что взаимодействие молекулы с атомами частицы аддитивно, ее потенциал взаимодействия с твердой частицей $U(|\mathbf{r}|)$ имеет вид

$$U(|\mathbf{r}|) = \sum_{i=1}^N U_i(|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_i|), \quad (1.1)$$

где N — число атомов(молекул) частицы.

Существует много различных моделей парных потенциалов взаимодействия [10], причем в численном моделировании и в расчетах чаще всего используется потенциал Леннарда-Джонса.

$$U_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (1.2)$$

Для моделирования потенциала молекула-дисперсная частица также будем использовать потенциал (1.1). Просуммировать ряд (1.1) аналитически обычно не удастся. Поэтому на практике суммирование в формуле (1.1) заменяют интегрированием [11]. Физически это означает, что твердое тело аппроксимируется континуальной моделью. В работе [12] был получен потенциал взаимодействия молекула-дисперсная частица в случае однородной и шарообразной наночастицы радиуса R .

В нашем случае дисперсная частица — фуллерен, который представляет собой замкнутый выпуклый многогранник. В этом случае задача сводится к суммированию ряда, который содержит конечное число членов. При переходе к континуальной модели вычисление потенциала сводится к вычислению двойного интеграла. В этом случае происходит усреднение потенциала по текущим координатам интегрирования: полярному φ и азимутальному углам. Если, кроме того, потенциал взаимодействия ”молекула-молекула” не зависит от их ориентации, что строго

справедливо лишь для одноатомных и неполярных молекул, то формула (1.1) сводится к следующему интегралу:

$$U(r) = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \varphi U_{LJ} \left(\sqrt{(x - a \cos \varphi)^2 + a^2 \sin^2 \varphi} \right) d\varphi, \quad (1.3)$$

где x — расстояние от молекулы до центра сферы, в котором помещено начало координат, U_{LJ} — потенциал Леннарда-Джонса взаимодействия молекулы жидкости с атомом (молекулой) дисперсной частицы, φ — текущая координата интегрирования. Потенциал (1.3) вычисляется и имеет вид

$$U(r) = \frac{\varepsilon_{ij} \sigma_{ij}^{12}}{5rR} \left[\frac{1}{(r-R)^{10}} - \frac{1}{(r+R)^{10}} \right] - \frac{\varepsilon_{ij} \sigma_{ij}^6}{2rR} \left[\frac{1}{(r-R)^4} - \frac{1}{(r+R)^4} \right]. \quad (1.4)$$

Полученный потенциал (1.4) зависит, таким образом, от параметров парного потенциала взаимодействия молекул несущей жидкости и дисперсной частицы $\varepsilon_{ij}, \sigma_{ij}$ и от размеров последней. В случае если частицы достаточно крупные с характерными размерами больше 10^{-5} см, то вместо формулы (1.4) можно использовать значительно более простой потенциал взаимодействия молекул с твердой поверхностью [11; 13].

$$U(r) = \frac{\varepsilon_{ij} \sigma_{ij}^{12}}{5rR} \cdot \frac{1}{(r-R)^{10}} - \frac{\varepsilon_{ij} \sigma_{ij}^6}{2rR} \cdot \frac{1}{(r-R)^4}. \quad (1.5)$$

Он получается из (1.4) в пределе больших R .

Установим связь между некоторыми макроскопическими и микроскопическими параметрами системы. В результате моделирования методом молекулярной динамики в каждый момент времени мы знаем положение и скорость каждой частицы. Если требуется вычислить макроскопические параметры, такие как внутренняя энергия, температура, давление и т. д., то необходимо применить методы статистической механики.

А. Температура

Кинетическое определение температуры вытекает из теоремы о распределении средней кинетической энергии по степеням свободы. Температура T системы в трехмерном пространстве определяется соотношением

$$T = \frac{m}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{v}_i^2 \rangle, \quad (1.6)$$

где сумма берется по всем N частицам системы и $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по времени, k_B — постоянная Больцмана. Выражение (1.6) представляет собой пример связи макроскопической величины, в данном случае температуры, с временным средним по траекториям частиц. Заметим, что соотношение (1.6) справедливо только в том случае, если движение центра масс исключено.

В. Теплоемкость

Еще одной тепловой характеристикой является теплоемкость при постоянном объеме $C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V$, где E — полная энергия. Как хорошо известно, в случае канонического ансамбля Гиббса теплоемкость вычисляется через флуктуацию потенциальной энергии системы:

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{3}{2} + \frac{1}{N(k_B T)^2} (\langle E_P^2 \rangle - \langle E_P \rangle^2), \quad (1.7)$$

где T и E_P – температура и потенциальная энергия системы.

С. Давление

Формула для вычисления давления может быть получена из теоремы о среднем вириале:

$$PV = Nk_B T + \frac{1}{3} \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{f}_i \rangle, \quad (1.8)$$

где \mathbf{r}_i – координата i -й частицы, \mathbf{f}_i – полная сила, действующая на частицу i со стороны всех остальных частиц, и сумма берется по всем N частицам.

Д. Диффузия

В состоянии равновесия плотность каждой из компонент во всех точках фазы одинакова. При отклонении плотности от равновесного значения в некоторой области в системе возникает движение компонент вещества в таких направлениях, чтобы сделать плотность каждой из компонент постоянной по всему объему системы. Связанный с этим движением перенос вещества компонент, составляющих фазу, называется диффузией.

Коэффициент диффузии можно вычислять, используя так называемое соотношение Эйнштейна [21]:

$$D = \frac{1}{6t} \left\langle \left[\sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i(t+s) - \mathbf{r}_i(s) \right]^2 \right\rangle \quad (1.9)$$

где s – время начала расчета.

Е. Вязкость

Для расчета коэффициента вязкости используется методика, аналогичная методике Эйнштейна для расчета коэффициента диффузии по среднему квадрату пути, проходимому частицей. Можно показать, что коэффициент вязкости определяется соотношением

$$\eta = \frac{m^2}{2Vk_B T t} \left\langle \left[\sum_{i=1}^N \dot{x}_i(s+t)y_i(s+t) - \dot{x}_i(s)y_i(s) \right]^2 \right\rangle, \quad (1.10)$$

Формулы (1.9) и (1.10) показывают, что полученные таким образом коэффициенты диффузии и вязкости являются функцией времени. Строго говоря, они приобретают смысл лишь в пределе $t \rightarrow \infty$. Однако измеримость коэффициентов переноса указывает на то, что эти функции при $t \gg \tau_r$ выходят на некоторое стационарное значение (здесь τ_r – время релаксации соответствующей корреляционной функции).

2. Численный алгоритм

Компьютерное моделирование молекулярной системы может быть условно разбито на три части: инициализация, достижение равновесия и вычисление интересующих характеристик. Первый этап моделирования заключается в задании начальных условий. Плотность системы характеризуется параметром $\alpha = V/V_0$, где V – объем ячейки моделирования, $V_0 = 4\sqrt{2}Nr^3 + (4/3\pi)R_f^3$ – объем плотной

упаковки N молекул радиуса R и молекулы фуллерена C_{60} радиуса R_f . В зависимости от алгоритма процедура инициализации может быть различна. Например, в начальный момент времени молекулы располагаются в узлах решетки и скорости разыгрываются из распределения Максвелла при заданной температуре нановзвеси. Использование периодических граничных условий означает, что в данный момент для каждой частицы с координатами x , y , z , находящейся внутри объема V , существует 26 периодических образов с координатами, полученными из декартовых координат прибавлением или вычитанием L .

Предположим, что взаимодействие между молекулами бензола описывается двухчастичным потенциалом Леннарда-Джонса, а взаимодействие фуллерена с молекулами бензола — потенциалом (1.4)

Пусть x_i и v_i — компоненты координат и скоростей i -ой молекулы бензола, а x_n и v_n — компоненты координат и скоростей фуллерена, тогда проекция на любую декартову ось системы координат можно записать

$$\begin{cases} \frac{dx_i}{dt} = v_i, \\ \frac{dv_i}{dt} = a_i = \frac{1}{m} \sum_{i=1, i \neq j}^N f_{ij} - \frac{1}{m} F_i, \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{dx_n}{dt} = v_n, \\ \frac{dv_n}{dt} = a_n = \frac{1}{M} F_i, \end{cases} \quad (2.1)$$

где

$$f_{ij} = 24 \frac{(x_i - x_j) \varepsilon_{11}}{r_{ij}^2} \left[2 \left(\frac{\sigma_{11}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{11}}{r_{ij}} \right)^6 \right],$$

$$F_i = \frac{\varepsilon_{12} \sigma_{12}^{12}}{5 r_i R} \left[\frac{1}{(r_i + R)^{10}} \left(\frac{1}{r_i} + \frac{10}{r_i + R} \right) - \frac{1}{(r_i - R)^{10}} \left(\frac{1}{r_i} + \frac{10}{r_i - R} \right) \right] + \\ + \frac{\varepsilon_{12} \sigma_{12}^6}{2_i r_i R} \left[\frac{1}{(r_i - R)^4} \left(\frac{1}{r_i} + \frac{4}{r_i - R} \right) - \frac{1}{(r_i + R)^4} \left(\frac{1}{r_i} + \frac{4}{r_i + R} \right) \right],$$

m , M — массы молекул бензола и фуллерена C_{60} соответственно, $\sigma_{11}, \varepsilon_{11}, \sigma_{12}, \varepsilon_{12}$ — параметры потенциала Леннарда-Джонса, первые из которых являются параметрами для бензола и могут быть найдены из соотношений Стилла-Тодоса, а вторые из соотношений $\sigma_{12} = 0,5(\sigma_{11} + \sigma_{22})$, $\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_{11} \cdot \varepsilon_{22}}$, где $\sigma_{22}, \varepsilon_{22}$ — параметры потенциала для углерода.

Однако выражения (2.1) в данной форме не годятся для компьютерного моделирования. Удобно все величины представить в безразмерном виде [14]. Возьмем σ_{11} за единицу длины, а $(\varepsilon_{11}/m)^{1/2}$ за единицу скорости. Тогда x , v , a , x_n , v_n , a_n и t будут соответствовать безразмерные величины ξ , η , α , ξ_n , η_n , α_n и u и уравнения (2.1) примут вид

$$\begin{cases} \frac{d\xi_i}{du} = \eta_i, \\ \frac{d\eta_i}{du} = \alpha_i = \sum_{i=1, i \neq j}^N f_{ij}^* - F_i^*, \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{d\xi_n}{du} = \eta_n, \\ \frac{d\eta_n}{du} = \alpha_n = \frac{m}{M} F_i^*. \end{cases} \quad (2.2)$$

Безразмерный шаг по времени $\Delta u = 10^{-14}(\varepsilon_{11}/m)^{1/2}(1/\sigma_{11})$ соответствует интервалу времени $\Delta t = 10^{-14}$ с.

Численное интегрирование систем уравнений (2.1) проводится следующим образом. После k -го шага по времени известны совокупность координат $\mathbf{r}_i^k, \mathbf{r}_n^k$, скоро-

стей $\mathbf{v}_i^k, \mathbf{v}_n^k$ и ускорений $\mathbf{a}_i^k, \mathbf{a}_n^k$, тогда скорости и координаты на следующем шаге могут быть вычислены

$$\begin{aligned}\bar{\eta}_i^{k+1} &= \eta_i^k + \alpha_i^k \Delta u, \\ \bar{\xi}_i^{k+1} &= \bar{\xi}_i^k + \frac{1}{2} \Delta u (\bar{\eta}_i^{k+1} + \eta_i^k).\end{aligned}$$

Этот результат уточняем следующим образом. По значениям $\bar{\xi}_i^{k+1}$ находят новые ускорения α_i^{k+1} . Затем скорости и координаты снова пересчитываются в предположении, что ускорение изменилось на этом шаге линейно:

$$\begin{aligned}\eta_i^{k+1} &= \eta_i^k + \frac{1}{2} (\alpha_i^{k+1} + \alpha_i^k) \Delta u, \\ \xi_i^{k+1} &= \bar{\xi}_i^k + \frac{1}{6} (\alpha_i^{k+1} - \alpha_i^k) (\Delta u)^2.\end{aligned}$$

В начальном состоянии система не находится в равновесии, так как начальное распределение атомов в пространстве выбрано случайным образом. В дальнейшем равновесие системы достигается в результате эволюции системы за определенное число шагов. После этого энергия отводится из системы или вводится в нее при помощи нормировки скоростей на фактор $\beta = \left(3Nk_B T / \sum_{i=1}^N m v_i^2\right)^{1/2}$, где T — заданная температура. Эта процедура повторяется до достижения требуемой кинетической энергии или, что равносильно, средней температуры.

Реальное вычисление характеристик системы осуществляется на третьем этапе моделирования. Все интересующие величины вычисляются как средние вдоль траектории в фазовом пространстве.

3. Результаты расчетов

Наносuspension моделировалась набором молекул бензола и частиц фуллерена C_{60} , помещенных в кубическую ячейку с периодическими граничными условиями. Взаимодействие между молекулами бензола описывалось парным потенциалом Леннарда-Джонса с параметрами $\varepsilon/k_B = 340, 56\text{K}$ и $\sigma = 5, 66\text{\AA}$, которые были вычислены с помощью соотношений Стилла-Тодоса [26]

$$\frac{\varepsilon}{k_B} = 65, 3T_c Z_c^{18/5}, \quad \sigma = 0, 1866V_{mc}^{1/3} Z_c^{-6/5},$$

где T_c — критическая температура, Z_c — критический коэффициент сжимаемости, V_{mc} — критический мольный объем. Взаимодействие между молекулами бензола и частицей фуллерена C_{60} моделировалось согласно потенциалу (1.4), где $\varepsilon/k_B = 28\text{ K}$ и $\sigma = 10, 198\text{ \AA}$ [27]. Объем ячейки моделирования дисперсной системы определялся таким образом, чтобы обеспечивать плотность системы $\rho = 0, 6088\text{ г/см}^3$ при $T = 295\text{ K}$. Моделирование проводилось для $N = 1000$, при этом характерное время машинного счета одной реализации составляло примерно 4 минуты на компьютере Pentium IV 3,2 Гц. Для обеспечения достаточной устойчивости численного алгоритма временной шаг берется равным $\Delta u = 3, 6 \cdot 10^{-3}$, что соответствует $\Delta t = 10^{-14}\text{ с}$.

Зависимость коэффициента диффузии броуновских частиц от температуры определяется соответствующим изменением вязкости несущей среды и оказывается достаточно слабой. В работе [22] показано, что $D \sim T^{0,35}$. С другой стороны, диффузия молекул растет с температурой значительно быстрее $D \sim T^\alpha$, где

показатель степени зависит от вещества и принимает значение, близкое к максимальному и равному 1,92 для кислорода и аргона.

Из физических соображений ясно, что зависимость коэффициента диффузии наночастиц от температуры должна быть более сильной, чем у броуновских частиц, но слабее, чем у обычных молекул. Зависимость коэффициента диффузии фуллера C_{60} от температуры иллюстрирует рис. 1, кривая соответствует аппроксимации вида $D \sim T^\alpha$, где $\alpha = 1,185$.

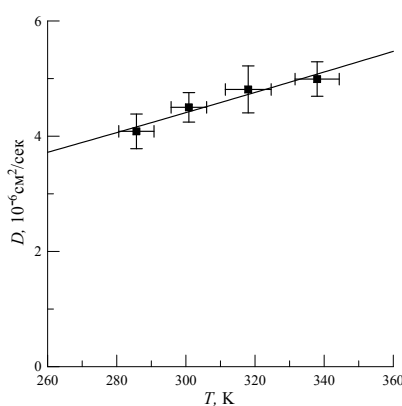


Рис. 1. Зависимость коэффициента диффузии фуллера C_{60} от температуры при объемной доле фуллеренов 0,11 %

На рис. 2 показана зависимость вязкости наносuspензий от температуры. Видно, что в исследуемом диапазоне зависимость очень слабая.

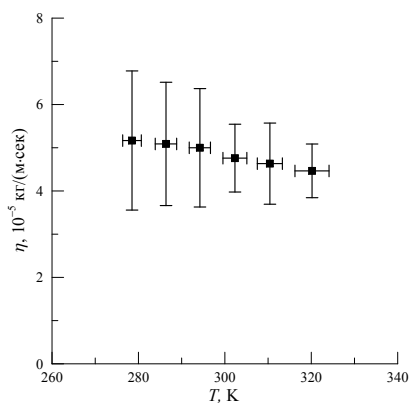


Рис. 2. Зависимость вязкости наносuspензии $C_{60} - C_6H_6$ от температуры при объемной доле фуллеренов 0,11 %

В результате моделирования канонического ансамбля получена зависимость давления бензола и наносuspензии от объема (параметра α), которая аппроксимируется уравнением состояния типа Ван-дер-Ваальса:

$$P(V) = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2}, \quad (3.1)$$

где для бензола $a = 1,84354 \text{ Н} \cdot \text{м}^4/\text{моль}^2$, $b = 3,99442 \text{ см}^2/\text{моль}$, а для наносuspензии $a = 1,78421 \text{ Н} \cdot \text{м}^4/\text{моль}^2$, $b = 4,73759 \text{ см}^2/\text{моль}$. Рассчитанное уравнение состояния для бензола и наносuspензии показано на рис. 3.

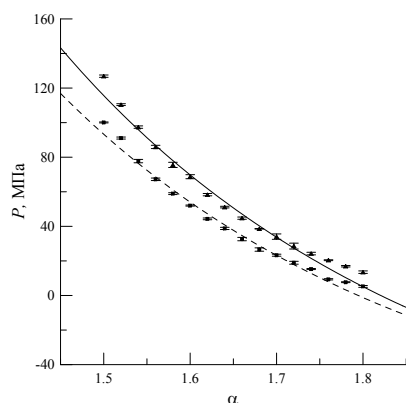


Рис. 3. Зависимость давления от параметра α для бензола (нижние значения на рисунке) и наносuspензии $C_6H_6 - C_{60}$ (верхние значения на рисунке) при $T = 295,4 \text{ К}$. Сплошной линией показана аппроксимация уравнением состояния типа Ван-дер-Ваальса (3.1) для наносuspензии, пунктирной — для бензола

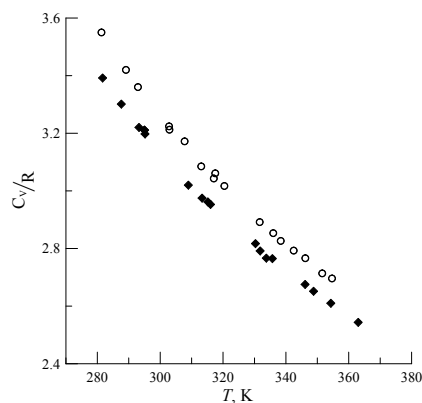


Рис. 4. Зависимость теплоемкости от температуры для бензола (нижние значения) и наносuspензии $C_6H_6 - C_{60}$ при объемной доле фуллеренов 0,11 % (верхние значения)

Очевидно, что наличие в бензоле примеси фуллеренов приводит и к изменению теплоемкости системы. На рис. 4 показаны результаты расчетов для зависимости удельной молярной теплоемкости бензола и наносuspензии от температуры при объемной доле фуллеренов 0,11 %.

Заключение

В рамках метода классической молекулярной динамики проведен расчет коэффициентов диффузии и вязкости фуллеренов в жидкости (бензоле) в зависимости от температуры наносuspензии. Используемый при расчетах эффективный

потенциал взаимодействия "фуллерен-молекула" получен в предположении аддитивности взаимодействия молекул фуллерена и жидкости, при котором фуллерен рассматривается как жесткая частица. В данной работе также получены зависимости давления от объема (параметра α) для бензола и наносuspензии $C_6H_6 - C_{60}$ при объемной доле фуллеренов 0,11 %, аппроксимации данных зависимостей уравнениями состояния типа Ван-дер-Ваальса, зависимости теплоемкости бензола и наносuspензии от объема.

Литература

- [1] Безмельницын В.Н., Елецкий А.В., Окунь М.В. Фуллерены в растворах // УФН. 1998. Т. 168. № 11. С. 1195–1220.
- [2] Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990. 176 с.
- [3] Зализняк В.Е. Основы вычислительной физике. Ч. 2. Введение в методы частиц. М.; Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Институт компьютерных исследований. 2006. 156 с.
- [4] Рудяк В.Я., Дубцов С.Н., Бакланов А.М. О зависимости коэффициента диффузии наночастиц от температуры // Письма в ЖТФ. 2008. Т. 34. Вып. 12. С. 48–54.
- [5] Interpretation of the complex viscosity of dense hard-sphere dispersions / J.C. Van der Werff [et al.] // Phys. Rev. A. 1989. Vol. 39. P. 795.
- [6] Kwak K., Kim C. Viscosity and thermal conductivity of copper oxide nanofluid dispersed in ethylene glycol // Korea-Australia Rheology J. 2005. Vol. 17. № 2. P. 35–40.
- [7] Wang X., Xu X., Choi S.U.S. Thermal conductivity of nanoparticle — fluid mixture // J. Thermophys. Heat Transfer 1999. Vol. 13. № 4. P. 474–480.
- [8] Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л. О вязкости разреженных газозвесей с наночастицами // ДАН. 2003. Т. 392. № 4. С. 435.
- [9] Рудяк В.Я. Статистическая механика гетерогенных сред. Ч. I. Кинетическая теория. Новосибирск: НГАСУ. 2004. 316 с.
- [10] Erkos S. Empirical many-body potential energy function used in computer simulation of condensed matter properties // Physics Reports. 1997. V. 278. № 2. P. 80–105.
- [11] Гудман Ф., Вахман Г. Динамика рассеяния газа поверхностью. М.: Мир. 1980. 423 с.
- [12] Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л. Диффузия наночастиц в разреженном газе // ЖТФ. 2002. Т. 72. Вып. 7. С. 13–20.
- [13] Баранцев Р.Г. Взаимодействие разреженных газов с обтекаемыми поверхностями. М.: Наука, 1975. 343 с.
- [14] Rahman A. Correlations in the motion of atoms in liquid argon // Phys. Rev., 1964. V. 136. P. A405.
- [15] Лагунов В.А., Синани А.Б. Образование биструктуры твердого тела в компьютерном эксперименте // Физика твердого тела. 1998. Т. 40. № 10. С. 1919–1924.
- [16] Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. М.: Мир. 1990. Т. 1. 352 с.
- [17] Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. М.: Мир. 1990. Т. 2. 400 с.

- [18] Кривцов А.М., Кривцова Н.В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журнал ДВО РАН. 2002. Т. 3. № 2. С. 254–276.
- [19] Замалин В.Н., Норман Г.Э., Филинов В.С. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. М.: Наука. 1977. 229 с.
- [20] Frenkel D., Smit B. Understanding molecular simulation. New York, 2002. 638 p.
- [21] Alder B.J., Wainwright T.E. Studies in molecular dynamics. VIII. The transport coefficients for hard-sphere fluid // J. Chem. Phys. 1970. Vol. 53. № 10. P. 3813.
- [22] Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л. Статистическая механика гетерогенных сред. Ч. IV. Потенциалы межчастичного взаимодействия. Препринт НГАСУ. Новосибирск, 1998. № 3(13)–98. 35 с.
- [23] Baron P.A., Willeke K. Aerosol Measurement: Principles, Techniques and Applications. New York: John Wiley and Sons, Inc. 2001.
- [24] Рудяк В.Я., Белкин А.А., Томилина Е.А. Сила, действующая на наночастицу в жидкости // Письма в ЖТФ. 2008. Т. 34. Вып. 2. С. 69–74.
- [25] Рудяк В.Я., Белкин А.А., Егоров В.В. Об эффективной вязкости // ЖТФ. 2009. Т. 79. Вып. 8. С. 18–25.
- [26] Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей: справочное пособие. Л.: Химия, 1982. 592 с.
- [27] Магомедов М.Н. О свойствах ГЦК-фуллеритов // Физика твердого тела. 2005. Т. 47. № 4. С. 758–766.

Поступила в редакцию 22/III/2011;
в окончательном варианте — 22/III/2011.

SIMULATION OF TRANSPORT PHENOMENA OF FULLERENES IN THE FLUID BY METHOD OF MOLECULAR DYNAMICS

© 2011 E.D. Gayduk, V.A. Saleev²

In the frameworks of classical molecular dynamics method the coefficients of diffusion and viscosity of fullerenes in fluid (benzol) depending on the temperature of nanosuspension have been calculated. The effective potential of fullerene-molecule interaction used in calculations is obtained under the assumption of additivity of fullerene and fluid molecules interaction, where fullerene is considered as a solid particle.

Key words: molecular dynamics, fullerene-in-benzol nanosuspensions, diffusion coefficient, viscosity coefficient.

Paper received 22/III/2011.
Paper accepted 22/III/2011.

²Gayduk Ekaterina Damirovna (ek_gayduk@mail.ru), Saleev Vladimir Anatolievich (saleev@ssu.samara.ru), the Dept. of Mathematic Simulation in Mechanics, Samara State University, Samara, 443011, Russian Federation.