

УДК 53.01; 538.931

Моделирование коэффициентов переноса аэрозолей и наножидкостей с полыми наночастицами

В.Я. Рудяк, С.Л. Краснолуцкий*

Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (Сибстрин)
630008, г. Новосибирск, ул. Ленинградская, 113

Поступила в редакцию 29.12.2018 г.

Изучены диффузия полых наночастиц в разреженных и плотных газах и вязкость аэрозолей с такими частицами с помощью кинетической теории и метода молекулярной динамики. Рассмотрены аэрозоли на базе азота с полыми и сплошными наночастицами из алюминия и урана при температуре 300 К и атмосферном давлении. Диаметр наночастиц варьировался от 5 до 100 нм; толщина стенок полых наночастиц равнялась 1 нм. Показано, что коэффициенты диффузии полых наночастиц всегда больше, чем коэффициенты диффузии сплошных частиц одного размера из одного и того же материала, но их разница не превышает 1%. Вязкость аэрозоля с полыми наночастицами всегда ниже, чем со сплошными. Методом молекулярной динамики установлено, что коэффициенты диффузии полых и сплошных наночастиц одного диаметра из одного и того же материала в плотном аргоне совпадают.

Ключевые слова: наночастицы, полые наночастицы, аэрозоль, наноаэрозоль, наногазовзвесь, наножидкость, диффузия, вязкость; nanoparticles, hollow nanoparticles, aerosol, nanoaerosol, gas nanosuspension, nanofluid, diffusion, viscosity.

Введение

Наножидкости — это двухфазные системы, состоящие из несущего флюида и наночастиц. Уже сегодня можно констатировать, что они представляют собой чрезвычайно перспективный материал. Наножидкости с успехом используют или планируют использовать в химических установках и реакторах, включая каталитические, для охлаждения различных устройств, в новых системах транспортировки и производства тепловой энергии, в био-, МЭМС- и нанотехнологиях различного назначения, для доставки лекарственных препаратов, при создании новых лекарственных и косметических препаратов, систем распознавания загрязнений различного типа, очистки воздуха и воды, новых смазочных материалов, лаков и красок, строительных материалов и др. [1].

Наногазовзвеси, или наноаэрозоли, — это наножидкости, несущим компонентом в которых является газ. В случае разреженного несущего газа для наноаэрозолей можно построить последовательную кинетическую теорию. С помощью этой теории была изучена диффузия наночастиц и показано, что КМД-корреляция [2–6], обычно используемая для определения размера наночастиц по их коэффициенту диффузии, для малых наночастиц дает существенные систематические ошибки [7, 8]. Она, так же как и полуэмпирическая формула Эпштейна [9]

и другие подобные (см., например, [10]), хорошо работает только для достаточно крупных частиц. Кроме того, КМД-корреляция применима лишь в очень узком диапазоне температур [11]. Выяснилось также, что коэффициент диффузии наночастиц в общем случае зависит не только от диаметра, но и от материала частиц [12].

Нестандартное поведение наноаэрозолей особенно ярко проявилось при изучении их вязкости: выяснилось, что она может быть не только больше, но и меньше вязкости несущего газа. Увеличение или уменьшение вязкости наногазовзвеси по сравнению с чистым газом зависит главным образом от размера наночастиц и отношения плотностей материала наночастицы и молекул несущего газа [12–14]. С уменьшением радиуса наночастиц и увеличением температуры среды изменение (повышение или понижение) коэффициента вязкости наногазовзвеси во всех случаях существенно увеличивается.

Коэффициенты переноса в наножидкостях, в которых несущий компонент — плотный газ или жидкость, также не описываются классическими теориями [15–17]. К настоящему времени надежно установлено, что коэффициенты переноса таких наножидкостей зависят не только от концентрации наночастиц, но также от их размера и материала (см. [1, 18–21] и цитируемую литературу).

Все указанные выше результаты были получены как экспериментально, так и теоретически для наноаэрозолей и наножидкостей с твердыми сплошными частицами. Однако последние годы стали использоваться полые наночастицы (в различных биомедицинских технологиях, при создании косметических

* Валерий Яковлевич Рудяк (Valery.Rudyak@mail.ru); Сергей Леонидович Краснолуцкий (sergius-l@mail.ru).

и парфюмерных препаратов и т.д.) [22, 23]. Свойства переноса подобных аэрозолей и наножидкостей изучены очень мало. Экспериментально это сделать по понятным причинам совсем не просто. Поэтому в данной работе особенности процессов переноса в наноаэрозолях и в наножидкостях с полыми частицами исследуются теоретически с помощью кинетической теории и метода молекулярной динамики. Анализируются диффузия таких наночастиц в разреженных газах, вязкость аэрозолей с такими частицами и диффузия полых наночастиц в плотных газах и жидкостях. С помощью кинетической теории изучаются процессы переноса в аэрозолях на основе азота с полыми и сплошными наночастицами из алюминия и урана. Для моделирования диффузии частиц алюминия в жидком аргоне используется метод молекулярной динамики.

Методика моделирования

Успех применения кинетической теории и метода молекулярной динамики для моделирования процессов переноса в значительной мере определяется используемыми потенциалами взаимодействия. В данной работе взаимодействие молекул несущего газа или жидкости описывается потенциалом Леннарда-Джонса

$$\Phi_{LJ}(r) = 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right]. \quad (1)$$

Здесь $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ — расстояние между центрами молекул i и j ; σ_{ij} — эффективный размер и ε_{ij} — глубина потенциальной ямы межмолекулярного взаимодействия молекул i и j .

Взаимодействие молекул несущего газа с полый наночастицей описывается потенциалом РК [24]:

$$\Phi_{mp}(r, R, R_{in}) = \Phi_9(r, R, R_{in}) - \Phi_3(r, R, R_{in}), \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \Phi_s(r, R, R_{in}) = C_s \left\{ \left[\frac{1}{(r-R)^s} - \frac{1}{(r+R)^s} \right] - \right. \\ \left. - \frac{s}{(s-1)r} \left[\frac{1}{(r-R)^{(s-1)}} - \frac{1}{(r+R)^{(s-1)}} \right] - \right. \\ \left. - \left[\frac{1}{(r-R_{in})^s} - \frac{1}{(r+R_{in})^s} \right] + \right. \\ \left. + \frac{s}{(s-1)r} \left[\frac{1}{(r-R_{in})^{(s-1)}} - \frac{1}{(r+R_{in})^{(s-1)}} \right] \right\}, \quad s = 9, 3, \end{aligned}$$

где R и R_{in} — внешний и внутренний радиусы полый сферически симметричной наночастицы; r — расстояние между центрами наночастицы и молекулы несущей среды; $C_s = 8\pi\varepsilon_{12}\sigma_{12}^{(s+3)}/(s(s+1)V_p)$, V_p — эффективный объем, приходящийся на одну молекулу, причем $V_p^{-1} = \rho_p/m_p$, ρ_p — плотность материала дисперсной частицы, m_p — масса молекул (атомов), составляющих дисперсную частицу. Параметры σ_{12} , ε_{12} определялись с помощью комбинационных соотношений $\sigma_{12} = \sqrt{\sigma_1\sigma_2}$, $\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1\varepsilon_2}$; индекс 1 относится к молекулам несущей среды, 2 — к наночастицам.

Взаимодействие полых наночастиц между собой также описывается потенциалом вида (2), но более сложной структуры (см. [24]). Наконец, взаимодействие молекул несущего газа со сплошными частицами задавалось потенциалом [7, 25], а сплошных частиц между собой — потенциалом [26].

Коэффициенты переноса разреженных наноаэрозолей вычислялись с помощью классической кинетической теории, причем использовались формулы для коэффициента диффузии и вязкости, полученные в первом приближении метода Чепмена—Энскога [27, 28] (см. также [7, 13, 14, 25]).

Для молекул азота использовались параметры потенциала Леннарда-Джонса $\sigma = 3,798 \text{ \AA}$, $\varepsilon/k = 71,4 \text{ K}$ [29] (k — постоянная Больцмана); для урана $\sigma = 3,343 \text{ \AA}$, $\varepsilon/k = 2703 \text{ K}$; для алюминия $\sigma = 2,551 \text{ \AA}$, $\varepsilon/k = 857,6 \text{ K}$. Последние значения были получены на основе данных по модулю Юнга и строению кристаллической решетки (кубическая гранецентрированная) методом, аналогичным описанному в работе [30]. Для атомов аргона $\sigma = 3,405 \text{ \AA}$, $\varepsilon/k = 119,8 \text{ K}$ [27].

Во всех случаях температура наноаэрозолей $T = 300 \text{ K}$, давление $p = 101325 \text{ Па}$, диаметр наночастиц варьировался от 2 до 100 нм; толщина стенок полых наночастиц равнялась 1 нм.

Процессы переноса в наножидкостях моделировались с помощью стандартного метода молекулярной динамики в оригинальном пакете SibMD, ранее применявшемся при решении различных задач теории переноса наножидкостей [1, 14, 20, 31]. Использовалась кубическая ячейка с периодическими граничными условиями. Задание начальных условий, выбор радиусов обрезания потенциалов выполнялись аналогично процедурам, описанным в [20, 31]. Размер ячейки моделирования подбирался таким образом, чтобы давление наножидкости равнялось давлению чистого аргона при плотности $n\sigma^3 = 0,707$. Уравнения Ньютона решались с использованием схемы Шофилда [32].

Коэффициент диффузии наночастиц рассчитывался по формуле типа Грина—Кубо [33]:

$$D = \frac{L_{22}m_2^2}{\rho T} \left(\frac{\partial \mu}{\partial C_2} \right)_{p,T}, \quad L_{22} = \frac{V}{3} \int_0^\tau \langle \mathbf{J}_{d2}(0) \cdot \mathbf{J}_{d2}(t) \rangle dt, \quad (3)$$

где $\mathbf{J}_{d2}(t) = \frac{1}{V} \sum_{\alpha=2, i=1}^{N_2} \mathbf{v}_{2,i}(t)$ — диффузионный поток

наночастиц; N_2 — число наночастиц; $\mu = \frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2}$ —

химический потенциал; $C_2 = \frac{m_2 N_2}{\rho}$ — массовая доля

наночастиц; m_i — масса частицы (молекулы или наночастицы); V — объем системы; ρ — массовая плотность наножидкости; τ — время выхода на плато значение [34]. Угловые скобки в (3) означают усреднение по фазовым траекториям моделируемой системы [35, 36]. В наших расчетах ансамбль систем, по которым проводилось усреднение, включал не менее тысячи независимых траекторий.

Результаты моделирования

Таблица 2

Коэффициенты диффузии и глубина ямы потенциала РК (2) полых и сплошных наночастиц алюминия в плотном аргоне

Тип	d , нм	d_i , нм	ϕ , %	$D \cdot 10^{-9}$, м ² /с	ϵ_{PK} , К
s	2		1	1,343	720,67
h	2	1	1	1,352	709,26
s	4		4	0,647	881,65
h	4	3,2	4	0,645	827,58

Проведенные расчеты коэффициентов диффузии полых и сплошных наночастиц в разреженном газе показали, что они практически одинаковы. Коэффициенты диффузии достаточно малых (диаметром 5–15 нм) полых наночастиц всегда несколько превышают соответствующие значения для сплошных наночастиц того же размера из того же материала, но разница лежит в пределах 1% (табл. 1). С увеличением размера частиц это различие практически исчезает.

Таблица 1

Коэффициенты диффузии и глубина ямы потенциала РК (2) полых и сплошных наночастиц в азоте

Материал	Тип	d , нм	$D \cdot 10^{-9}$, м ² /с	ϵ_{PK} , К	
U	s	5	185,82	1726,2	
	h	5	186,48	1712,4	
	s	10	56,72	1908,4	
	h	10	57,01	1882,5	
	s	20	15,951	2008	
	h	20	16,018	1975	
	s	40	4,254	2060,2	
	h	40	4,267	2023,4	
	s	60	1,9341	2077,9	
	h	60	1,9386	2039,8	
	s	100	0,70930	2092,2	
	h	100	0,71045	2053,1	
	Al	s	5	209,2	827,8
		h	5	210,6	823,0
s		10	60,86	904,0	
h		10	61,13	895,0	
s		20	16,585	945,13	
h		20	16,628	933,81	
s		40	4,3428	966,55	
h		40	4,3493	953,95	
s		60	1,9613	973,81	
h		60	1,9634	960,79	
s		100	0,71536	979,67	
h		100	0,71585	966,3	

Примечание. D – коэффициент диффузии; s – сплошные наночастицы; h – полые; d – диаметр наночастиц; ϵ_{PK} – глубина ямы потенциала РК (2).

Моделирование коэффициента диффузии наночастиц в плотных газах и жидкостях, выполненное методом молекулярной динамики, фактически привело к таким же результатам, что и для аэрозолей. В табл. 2 в качестве примера приведены коэффициенты диффузии для четырех различных наножидкостей на основе аргона плотностью $\rho\sigma^3 = 0,707$ при температуре $T = 300$ К с частицами алюминия диаметром 2 и 4 нм. Здесь коэффициенты диффузии полых и сплошных наночастиц одного диаметра из одного и того же материала практически совпадают – разница не превышает 1% и сопоставима с точностью расчетов.

Наиболее интересные результаты были получены для коэффициента вязкости аэрозолей. В работах [13, 14] было показано, что вязкость аэрозолей со сплошными наночастицами может быть как выше вязкости несущего газа, так и ниже. В аэро-

Примечание. Обозначения те же, что и в табл. 1; d_i – диаметр шаровой полости внутри наночастицы; ϕ – объемная концентрация наночастиц.

золях с полыми наночастицами также наблюдается подобный эффект. Кроме того, при определенном выборе материала наночастиц в некотором диапазоне их размеров добавление полых и сплошных наночастиц может вызывать противоположные эффекты: добавление полых наночастиц уменьшает вязкость аэрозоля по сравнению с вязкостью чистого несущего газа, сплошных – увеличивает.

В качестве примера на рис. 1 и 2 показаны зависимости эффективного коэффициента вязкости η аэрозолей от объемной концентрации наночастиц алюминия и урана диаметром 5 и 10 нм в азоте.

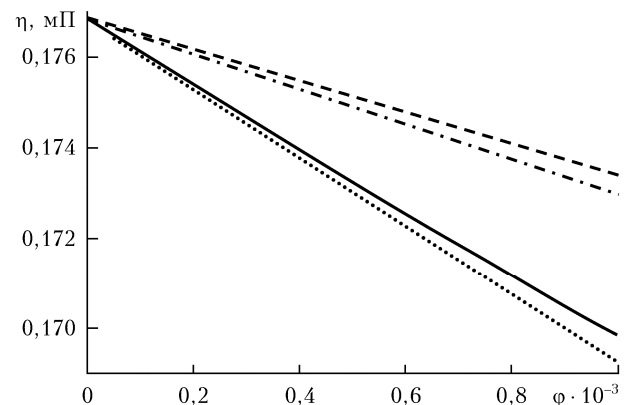


Рис. 1. Зависимость эффективного коэффициента вязкости аэрозолей от объемной концентрации наночастиц алюминия в азоте: сплошная линия соответствует аэрозолям со сплошными наночастицами диаметром 5 нм; штриховая – 10 нм, пунктирная и штрихпунктирная – полым частицам тех же диаметров соответственно

Коэффициент вязкости аэрозоля с наночастицами алюминия всегда ниже, чем азота (рис. 1). При этом полые наночастицы понижают его сильнее. Вязкость аэрозоля с частицами урана (рис. 2) может быть и выше, и ниже, чем базового газа. Добавление в азот сплошных наночастиц урана диаметром менее 12 нм увеличивает вязкость нанозаэрозоля по сравнению с чистым азотом, а частиц диаметром более 12 нм – уменьшает. Добавление полых наночастиц урана диаметром менее 6 нм увеличивает вязкость, более 6 нм – уменьшает. В качестве примера на рис. 3 показана зависимость эффективного коэффициента вязкости аэрозолей от диаметра наночастиц урана в азоте при фиксированной объемной концентрации наночастиц $\phi = 10^{-3}$.

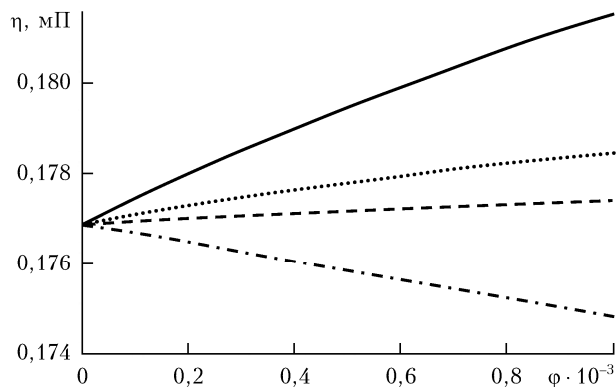


Рис. 2. Зависимость эффективного коэффициента вязкости аэрозолей от объемной концентрации наночастиц урана в азоте (описание кривых см. в подписи к рис. 1)

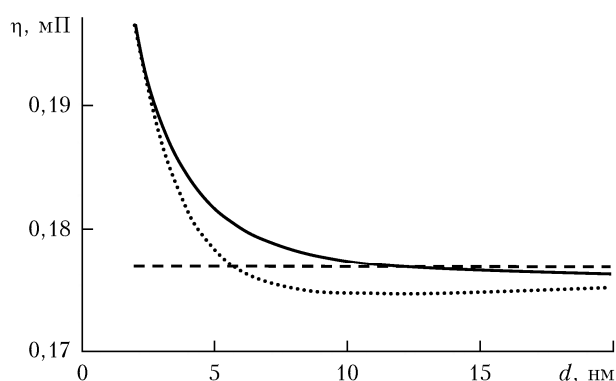


Рис. 3. Зависимость эффективного коэффициента вязкости аэрозолей от диаметра наночастиц урана в азоте при фиксированной объемной концентрации наночастиц $\phi = 10^{-3}$. Сплошной линией показана вязкость аэрозоля со сплошными наночастицами, пунктирной — с полыми частицами со стенками толщиной 1 нм, штриховой — вязкость чистого азота

Заключение

Коэффициент диффузии наночастиц в разреженном газе описывается формулой [27]:

$$D = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi m_1 kT}}{n m_1 \pi R^2 \Omega_{12}^{(1,1)*} (T/\varepsilon_{12}, \sigma_{12}/R)}, \quad (4)$$

где $m_{12} = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ — приведенная масса; m_1 , m_2 — соответственно массы молекулы несущего газа и дисперсной частицы; $\Omega_{ij}^{(l,m)*}$ — приведенные Ω -интегралы [27, 28]; σ_{ij} , ε_{ij} — параметры потенциала взаимодействия молекул несущего газа с атомами (молекулами) дисперсной частицы, используемые в потенциале (2).

Коэффициент диффузии наночастиц в разреженном газе (4) зависит не только от радиуса наночастицы, как в формуле Эйнштейна [15], описывающей коэффициент диффузии броуновских частиц, но и от свойств материала наночастицы, в частности параметров потенциала взаимодействия наночастица — молекула (2). Поэтому уменьшение глубины ямы потенциала (2) приводит к небольшому увеличению коэффициента диффузии полых наночастиц

по сравнению со сплошными (см. табл. 1). Помимо этого, на коэффициент диффузии достаточно малых наночастиц влияет соотношение масс наночастицы и молекул базового газа (см. (4)). Действительно, как нетрудно видеть, коэффициент диффузии $D \sim 1/\sqrt{m_{12}}$, влияние это в общем не велико, а с увеличением размера и массы наночастиц быстро пропадает. Однако масса полых частиц может быть существенно меньше массы соответствующих сплошных. Если к тому же частицы малы, то отношение m_2/m_1 может стать важным фактором диффузии наночастиц.

В плотных газах и жидкостях коэффициенты диффузии полых и сплошных наночастиц одного диаметра из одного и того же материала совпадают, так как в них гораздо больший вклад в силу сопротивления движению наночастицы со стороны несущей среды дают силы отталкивания наночастицы и молекулы несущей среды, которые для плотных и сплошных наночастиц различаются гораздо меньше, чем силы притяжения. Так, для сплошных наночастиц и полых с толщиной оболочки 1 нм радиус отталкивания при энергии налетающих частиц, соответствующей температуре 300 К, различается на величину $\sim 10^{-4}$ нм.

Мы рассматривали наноаэрозоли с полыми наночастицами с толщиной стенки 1 нм. Фактически это минимальная толщина стенки для полых наночастиц. Коэффициенты диффузии таких полых и сплошных наночастиц различаются не более чем на 0,5%. Коэффициенты диффузии полых наночастиц с более толстыми стенками будут отличаться от коэффициентов диффузии сплошных наночастиц еще меньше.

Увеличение или уменьшение вязкости аэрозоля по сравнению с чистым газом зависит главным образом от размера наночастиц и соотношения $m_2 \sigma_1^3 / (8 m_1 R^3)$. Уменьшение вязкости аэрозолей с полыми наночастицами объясняется меньшей массой таких наночастиц по сравнению со сплошными. При этом, как указывалось выше, параметры потенциала взаимодействия поляя наночастица — молекула (2) практически не отличаются от соответствующих параметров для сплошных наночастиц.

В целом уменьшение вязкости наногазовзвесей — чрезвычайно любопытное свойство, благодаря которому появляется возможность уменьшать гидродинамическое сопротивление. Подчеркнем в этой связи, что вязкость любых крупнодисперсных газозвесей всегда больше вязкости несущего газа [15, 16].

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты № 17-01-00040 и 17-58-45023).

1. Рудяк В.Я., Минаков А.В. Современные проблемы микро- и нанофлюидики. Новосибирск: Наука, 2016. 298 с.
2. Cunningham E. On the velocity of steady fall of spherical particles through fluid medium // Proc. R. Soc. 1910. V. 83. P. 357–365.
3. Millikan R.A. Brownian movement in cases at low pressures // Phys. Rev. 1913. V. 1, N 3. P. 218–221.
4. Millikan R.A. The general law of fall of a small spherical body through a gas, and its bearing upon the nature

- of molecular reflection from surfaces // Phys. Rev. 1923. V. 22, N 1. P. 1–23.
5. *Davies C.N.* Definitive equations for the fluid resistance of spheres // Proc. Phys. Soc. Lond. 1945. V. 57, part 4, N 322. P. 259–270.
 6. *Friedlander S.K.* Smoke, dust, Haze. Fundamentals of aerosol dynamics. New York, Oxford: Oxford University Press, 2000. 407 p.
 7. *Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л.* Кинетическое описание диффузии наночастиц в разреженном газе // Докл. РАН. 2001. Т. 381, № 5. С. 623–625.
 8. *Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л., Насибулин А.Г., Кауппинен Е.И.* О методах измерения коэффициента диффузии и размеров наночастиц в разреженном газе // Докл. РАН. 2002. Т. 386, № 5. С. 595–597.
 9. *Epstein P.S.* On the resistance experienced by spheres in their motion through gases // Phys. Rev. 1924. V. 23. P. 710–733.
 10. *Baron P.A., Willeke K.* Aerosol measurement: Principles, techniques, and applications. NY: Wiley, 2001.
 11. *Rudyak V.Ya., Dubtsov S.N., Baklanov A.M.* Measurements of the temperature dependent diffusion coefficient of nanoparticles in the range of 295–600 K at atmospheric pressure // J. Aerosol Sci. 2009. V. 40, N 10. P. 833–843.
 12. *Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л., Иващенко Е.Н.* О влиянии физических свойств материала наночастиц на их диффузию в разреженных газах // Инженерно-физический журн. 2008. Т. 81, № 3. С. 496–500.
 13. *Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л.* О вязкости разреженных газозвесей с наночастицами // Докл. РАН. 2003. Т. 392, № 4. С. 435–440.
 14. *Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л.* Эффективный коэффициент вязкости разреженных газозвесей // Оптика атмосф. и океана. 2004. Т. 17, № 5–6. С. 498–503.
 15. *Einstein A.A.* A new determination of molecular sizes // Ann. Phys. 1906. V. 19. P. 289–306.
 16. *Batchelor G.K.* The effect of Brownian motion on the bulk stress in a suspension of spherical particles // J. Fluid Mech. 1977. V. 83, part. 1. P. 97–117.
 17. *Maxwell J.C.* A treatise on electricity and magnetism. Oxford: Clarendon Press, 1881.
 18. *Rudyak V.Ya., Belkin A.A., Tomilina E.A., Egorov V.V.* Nanoparticle friction force and effective viscosity of nanofluids // Defect Diffus. Forum. 2008. V. 273–276. P. 566–571.
 19. *Rudyak V.Ya., Minakov A.V.* Thermophysical properties of nanofluids // Eur. Phys. J. E. 2018. V. 41. 12 p.
 20. *Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L.* Dependence of the viscosity of nanofluids on nanoparticle size and material // Phys. Lett. A. 2014. V. 378. P. 1845–1849.
 21. *Рудяк В.Я., Минаков А.В., Сметанина М.С., Прыжников М.И.* Экспериментальные данные о зависимости вязкости наножидкостей на основе воды и этиленгликоля от размера и материала частиц // Докл. РАН. 2016. Т. 467, № 3. С. 289–291.
 22. *Lohani A., Verma A., Joshi H., Yadav N., Karki N.* Nanotechnology-based cosmetics // ISRN Dermatol. 2014. 14 p. DOI: 10.1155/2014/843687.
 23. *Sharma A., Kumar S., Mahadevan N.* Nanotechnology: A promising approach for cosmetics // Int. J. Recent Adv. Pharm. Rec. 2012. V. 2(2). P. 54–61.
 24. *Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л.* Потенциалы взаимодействия полых наночастиц между собой и с молекулами несущей среды // Докл. АН. 2017. Вып. №2(35). С. 32–42.
 25. *Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л.* Диффузия наночастиц в разреженном газе // Журн. техн. физ. 2002. Т. 72, вып. 7. С. 13–20.
 26. *Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л., Иванов Д.А.* О потенциале взаимодействия наночастиц // Докл. РАН. 2012. Т. 442, № 1. С. 54–56.
 27. *Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., Bird R.B.* Molecular theory of gases and liquids. New York: Wiley, 1954. 1219 p.
 28. *Chapman S., Cowling T.G., Burnett D.* The mathematical theory of non-uniform gases: An account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases. Cambridge: Cambridge University Press, 1990. 423 p.
 29. *Reid R.C., Prausnitz J.M.* The properties of gases and liquids Sherwood. NY: McGraw-Hill, 1977. 688 p.
 30. *Heinz H., Vaia R.A., Farmer B.L., Naik R.R.* Accurate simulation of surfaces and interfaces of face-centered cubic metals using 12–6 and 9–6 Lennard–Jones potentials // J. Phys. Chem. C. 2008. V. 112, N 44. P. 17281–17290.
 31. *Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L., Ivanov D.A.* Molecular dynamics simulation of nanoparticle diffusion in dense fluids // Microfluid. Nanofluid. 2011. V. 11, N 4. P. 501–506.
 32. *Schofield P.* Computer simulation studies of the liquid state // Comput. Phys. Comm. 1973. V. 5, N 1. P. 17–23.
 33. *Зубарев Д.Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. 415 с.
 34. *Рудяк В.Я., Белкин А.А., Иванов Д.А., Егоров В.В.* Моделирование процессов переноса на основе метода молекулярной динамики. I. Коэффициент самодиффузии // Теплофизика высоких температур. 2008. Т. 46, № 1. С. 35–45.
 35. *Норманн Г.Э., Стегайлов В.В.* Метод классической молекулярной динамики: замысел и реальность // Nanoструктуры. Математическая физика и моделирование. 2011. Т. 4, № 1. С. 31–59.
 36. *Норманн Г.Э., Стегайлов В.В.* Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2012. Т. 24, № 6. С. 3–44.

V.Ya. Rudyak, S.L. Krasnolutskii. Simulation of transport coefficients of aerosols and nanofluids with hollow nanoparticles.

Diffusion of hollow nanoparticles in low-density and rarefied gases and the viscosity of aerosols with such particles are studied with the previously developed kinetic theory and molecular dynamics method. Interaction between molecules of a carrier medium is simulated with Lennard-Jones potential, between these molecules and the nanoparticle, with RK potential, and between the nanoparticles, with RKI potential. Nitrogen-based aerosols with hollow and solid aluminum and uranium nanoparticles are considered at a temperature of 300 K and atmospheric pressure. Diameter of the nanoparticles is varied from 5 to 100 nm; the thickness of walls of hollow nanoparticles is 1 nm. It is shown that the diffusion coefficients of hollow nanoparticles always exceed those of solid particles of the same size and the same material, but this difference does not exceed 1%. The viscosity coefficient of aerosol with hollow nanoparticles is always lower than of aerosol with solid particles. The diffusion of hollow and solid aluminum nanoparticles with diameters of 2 and 4 nm in argon at the density $\rho = 0.707$ at a temperature of 300 K is also molecular dynamics (MD) simulated. It is shown that diffusion coefficients of hollow and solid nanoparticles of the same diameter and the same material in rarefied gases and liquids are the equal.