

РАСЧЕТ СДВИГОВОЙ ВЯЗКОСТИ ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Кондратьюк Н.Д., Писарев В.В.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**kondratyuk@phystech.edu*

Современная индустрия проявляет большой интерес к исследованию свойств жидких углеводородов, так как они входят в состав смазочных, изоляционных и топливных смесей. Одними из определяющих характеристик являются транспортные коэффициенты (диффузия, вязкость и теплопроводность).

Проведенные расчеты вязкости жидких углеводородов продемонстрировали возможность применимости метода Грина–Кубо [1] в случае однокомпонентных систем. Полученные значения коэффициентов вязкости для исследуемых углеводородов совпадают с экспериментальными данными в пределах 10 %. Экспериментальная зависимость вязкости от температуры воспроизводится с помощью используемых методов.

Проведен анализ вкладов различных компонент тензора напряжений в интеграл вязкости. Предложен подход для удобного представления данных в виде таблиц. Показано, что вклады отдельных компонент могут на порядок превосходить итоговое значение интеграла. Также получено, что времена корреляции растут с увеличением количества атомов в молекуле углеводорода.

Выполнено сравнение результатов, полученных методом Грина–Кубо, с результатами из неравновесной молекулярной динамики [2]. Значения совпадают в пределах вычислительной погрешности для всего ряда исследуемых *n*-алканов при различных температурах и давлениях.

В работе выполнено сравнение трех потенциалов взаимодействия: TraPPE-EN, OPLS-AA и COMPASS, который в отличие от TraPPE-EN и OPLS-AA учитывает ангармонизм связей и углов. В случае вязкости, все три потенциала дают схожие результаты.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 17-79-20391.

-
1. Zhang Y., Otani A., Maginn E. J. // J. Chem. Theory Comput. 2015. V. 11. No. 8. P. 3537.
 2. Bordat P., Müller-Plathe F. // J. Chem. Phys. 2002. V. 116. No. 8. P. 3362.