

# ВЯЗКОСТЬ ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ СМЕСЕЙ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРАВИЛА СМЕШЕНИЯ

*Писарев В.В.*

*ОИВТ РАН, Москва, Россия*

*pisarevv@gmail.com*

В работе представлены результаты молекулярно-динамических расчетов вязкости жидких смесей в системе метан–н-бутан–н-пентан. Углеводородные флюиды моделировались потенциалом TraPPE-EH [1]. Вычисления проведены методом неравновесной молекулярной динамики [2].

Для чистых углеводородов и смесей показана применимость правила Бачинского  $\eta = C/(v - b)$ , где  $\eta$  — вязкость жидкости,  $v$  — молекулярный объем,  $C$  и  $b$  — константы, характеризующие жидкость. Для предсказания вязкости смесей произвольного состава проверены правила смешения, основанные на уравнении Бачинского, на правиле Арениуса и правиле кубического корня. В качестве базовых состояний, при которых рассчитываются вязкости чистых веществ для правил смешения, предлагается использовать состояния с тем же молярным объемом, что и у компонентов смеси. Для рассмотренных смесей наилучшее согласие прямого расчета вязкости смеси и расчета по правилам смешения получено для правила смешения на основе уравнения Бачинского.

Предлагаемые правила смешения могут использоваться для предсказания вязкости стабильных и метастабильных смесей жидкостей, а также жидкостей с растворенными в них газами.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда №17-79-20391.

- 
1. Chen B. and Siepmann J.I. // J. Phys. Chem. B, 1998. V. 103. P. 5370-5379.
  2. Müller-Plathe F. // Phys. Rev. E. 1998. V. 415. No. 3. P. 604.