

УНИВЕРСАЛЬНОЕ СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ ПАРНОЙ ЭНТРОПИЕЙ И ВЯЗКОСТЬЮ УГЛЕВОДОРОДОВ

*Кондратюк Н.Д.,^{*1,2,3} Писарев В.В.^{1,2,3}*

¹НИУ ВШЭ, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия,

³ОИВТ РАН, Москва, Россия

*nkondratyuk@hse.ru

Масштабирование между избыточной энтропией и коэффициентами переноса жидкостей – интересное свойство, обнаруженное Розенфельдом. Позже Дзугутов предложил оценивать избыточную энтропию на основе парной энтропии. Было показано, что этот подход хорошо работает для атомарных жидкостей и твердых молекул [1], но существует проблема определения парной энтропии для молекулярных веществ в целом. В данной работе мы предлагаем новый метод оценки парного вклада в избыточную энтропию для углеводородных жидкостей. Расчеты проводятся методом молекулярной динамики. Представлены результаты скейлинга энтропии Розенфельда [2] и вязкостей линейных алканов [3] и ароматических соединений [4, 5] в двух разных силовых полях, подкрепленные сравнением с экспериментальными и корреляционными данными. Показано, что наш метод учитывает 75–90% изменений энтропии в молекулярной жидкости, сравнимых с вкладом парной энтропии в атомарных жидкостях. Для каждого соединения при различных температурах наблюдается универсальная зависимость отмасштабированной вязкости и парной энтропии, показана переносимость между моделями силовых полей.

Работа частично подготовлена в ходе проведения исследования в рамках Программы фундаментальных исследований Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ).

-
1. Кондратюк Н.Д., Писарев В.В. // УФН. 2023. Т. 193. №. 4. С. 437–461.
 2. Nikitiuk B.I., Salikova D.I., Kondratyuk N.D., Pisarev V.V. // J. Mol. Liq. 2022. V. 368. P. 120714.
 3. Kondratyuk N.D. // J. Chem. Phys. 2019. V. 151. P. 074502.
 4. Kondratyuk N., Lenev D., Pisarev V. // J. Chem. Phys. 2020. V. 152. P. 191104.
 5. Kondratyuk N.D., Pisarev V.V. // Fluid Phase Equilib. 2021. V. 544–545. P. 113100.