

# Температуры плавления н-алканов в силовых полях семейства OPLS-AA

Писарев В.В.<sup>1,®</sup> и Вараксин И.М.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Московский институт электроники и математики, Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Таллинская 34, Москва, 123458, Россия

® vprisarev@hse.ru

В данной работе анализируется температура плавления н-алканов в диапазоне C<sub>12</sub>–C<sub>24</sub> в моделях семейства OPLS-AA [1–3], с целью оценки потенциальных улучшений в описании фазовой диаграммы последних модификаций силового поля.

Для расчёта температуры плавления углеводород в жидком состоянии сначала подвергается закалке и кристаллизации, после чего полученная кристаллическая конфигурация нагревается до момента плавления. Фазовое состояние характеризовалось параметрами порядка, такими как локальный параметр порядка  $P_2$ , определяющий соосность молекулы с соседними и отношение транс- к гаус-конформациям, которые претерпевают резкий скачок при плавлении системы.

Результаты показывают, что стандартная параметризация OPLS-AA завышает температуры плавления на десятки градусов, что соответствует известным из литературы данным [4], тогда как более новые параметризации приближают расчётные значения к экспериментальным данным. Комбинация изменённых Л-Дж параметров и модификации атомных зарядов даёт сверхкомпенсацию, и температура плавления в такой модели оказывается ниже экспериментальных значений.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ (HSE-BR-2025-002).

- [1] Jorgensen W L and Tirado-Rives J *PNAS* **102** 6665–6670
- [2] Dodda L S, Vilseck J Z, Tirado-Rives J and Jorgensen W L *J. Phys. Chem. B* **121** 3864–3870
- [3] Ghahremanpour M M, Tirado-Rives J and Jorgensen W L *J. Phys. Chem. B* **126** 5896–5907
- [4] Glova A D, Volgin I V, Nazarychev V M, Larin S V, Lyulin S V and Gurtovenko A A 2019 *RSC Adv.* **9** 38834–38847