

# СОГЛАСОВАННЫЙ РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ Н-С<sub>30</sub>Н<sub>62</sub> МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Кондратьюк Н.Д.\* , Норман Г.Э. , Стегайлов В.В.

ОИВТ РАН, Москва,

\*kondratyuk@phystech.edu

Современная промышленность заинтересована в исследовании реологии жидких углеводородов, так как они являются основными составляющими масел и топлив. Существуют работы, детально описывающие расчет транспортных свойств атомных систем [1], но в случае молекулярных жидкостей возникают дополнительные сложности с применением классических методов [2-4].

В данной работе методами классической молекулярной динамики изучаются диффузионные процессы в высшем n-алкане С<sub>30</sub>Н<sub>62</sub>. Расчеты проводятся в четырех наиболее распространенных потенциалах (TraPPE-UA [5], DREIDING [6], OPLS-AA [7], L-OPLS-AA [8]). Использование различных потенциалов необходимо для оценки "систематической погрешности" полученных результатов. Коэффициент самодиффузии центров масс молекул рассчитывается методами Эйнштейна-Смолуховского ( $\langle \Delta \mathbf{r}^2 \rangle = 6D_{ES}t$ ) и Грина-Кубо ( $D_{GK} = \int_0^\infty C_v(t)dt/3$ ).

Процесс самодиффузии в n-алканах отличается от броуновского: в зависимости  $\langle \Delta \mathbf{r}^2 \rangle(t)$  наблюдается субдиффузионный участок. Анализ траекторий отдельных молекул и их динамики позволяет понять причины подобного замедления диффузии. Асимптотики автокорреляционной функции скоростей центров масс молекул  $C_v(t)$ , необходимой для расчета коэффициента диффузии методом Грина-Кубо, при разных температурах сравниваются с классической гидродинамической асимптотикой, предсказанной для атомных жидкостей [9]. Будет продемонстрировано влияние данных аналитических продолжений функции  $C_v(t)$  на сходимость результатов, полученных методами Эйнштейна-Смолуховского и Грина-Кубо. Зависимость коэффициента самодиффузии от температуры также рассматривается в данной работе. Проводится сравнение полученных  $D_{ES}$  и  $D_{GK}$  с экспериментальными данными.

1. Viscardy, S., Servantie, J. and Gaspard, P. // J. Chem. Phys. 2007. V. 126. P. 1.
2. Kowsari, M. H. et al. // J. Chem. Phys. 2008. V. 129. P. 224508.
3. Liu, H. et al. // Ind. Eng. Chem. Res. 2012. V. 51(21). P. 7242.
4. Zhang, Y. et al. // J. Chem. Theory Comput. 2015. V. 11. P. 3537.
5. Martin M. G. and Siepmann J. I. // J. Phys. Chem. B. 1998. V. 102(14). P. 2569–2577.
6. Jorgensen, W. L., Maxwell, D. S. and Tirado-Rives, J. // J. Am. Chem. Soc. 1996. V. 118(45). P. 11225–11236.
7. Mayo S. L., Olafson B. D. and Goddard III W. A. // J. Phys. Chem. 1990. V. 101(540). P. 8897–8909.
8. Siu S. W. I., Pluhackova K. and Bockmann, R. A. // J. Chem. Theory Comput. 2012. V. 8. P. 1459.
9. Alder, B. J. and Wainwright, T. E. // Phys. Rev. A. 1970. V. 1(1). P. 18.