

Н.Д. Кондратюк

«Предсказание транспортных свойств углеводородов методами молекулярной динамики»

«Predicting hydrocarbons transport properties using molecular dynamics methods»

Исследование свойств существующих углеводородных жидкостей, а также поиск новых соединений с необходимыми параметрами представляют большой промышленный интерес, так как они лежат в основе органических масел, топлив и изоляционных жидкостей. В ходе работы проведен самосогласованный молекулярно-динамический расчет коэффициента самодиффузии жидкости C30 в широком диапазоне температур. Решена проблема эквивалентности методов расчета диффузии Эйнштейна-Смолуховского и Грина-Кубо для сложных систем. Проведено сравнение потенциалов взаимодействия по их предсказательной способности. Выполнены расчеты вязкости методами молекулярной динамики для нормальных и разветвленных алканов в диапазоне давлений от 0.1 МПа до 1 ГПа. Исследованы вклады валентных и невалентных взаимодействий в интеграл Грина-Кубо для коэффициента вязкости. Предсказанные вслепую значения вязкости для 2,2,4-триметилгексана совпали с опубликованными позднее экспериментальными данными.

The research of the properties of existing hydrocarbon liquids, as well as the search for new compounds with the required parameters, are of great industrial interest, since they are parts of oils, fuels and insulating liquids. In this work, the self-diffusion coefficient of the C30 liquid is calculated in the self-consistent way. The diffusivities are obtained in wide temperature range. The problem of equivalence of Einstein-Smoluchowski and Green-Kubo methods is solved for the cases of complex systems. Different interatomic potentials are compared by their predictive power. The viscosity is calculated using molecular dynamics methods for normal and branched alkanes in the pressure range from 0.1 MPa to 1 GPa. We analyze the contributions of valence and non-valent interactions to the Green-Kubo viscosity integral. The blindly predicted viscosity values for 2,2,4-trimethylhexane coincide with later published experimental data.