

УДК 536.712

Сопоставление атомистических моделей для описания фазовой диаграммы метан + н-пентан

Б.Ю. Валеев<sup>1,2</sup>, В.В. Писарев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

N-алканы — неполярные насыщенные углеводороды, представляют собой гибкие молекулярные цепи. N-алканы являются основным сырьем для химической промышленности и являются одним из основных строительных блоков для биологических молекул.

Существует два основных подхода описания углеводородов для классического атомистического моделирования.

Первый подход состоит в рассмотрении каждого атома водорода и атома углерода как отдельных силовых центров - TraPPE-EH (Transferable Potentials for Phase Equilibria Explicit-Hydrogen) [1]. Второй подход заключается в объединении друг с другом углерода и водорода и связывает их в одном месте взаимодействия - TraPPE-UA (Transferable Potentials for Phase Equilibria United-Atom) [2]. Это приводит к введению псевдоатомов: CH<sub>4</sub>, CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, CH, C. Полноатомные модели дают более реалистичное описание взаимодействий, однако модели объединенного атома уменьшают количество взаимодействующих частиц примерно в 3 раза, что приводит к снижению вычислительной нагрузки на порядок величины.

В данной работе сопоставляются модели TraPPE-UA с объединенными атомами и TraPPE-EH с явными атомами водорода для описания фазового равновесия системы метан+n-пентан. Также модель метана+n-пентана в виде TraPPE-EH реализована в LAMMPS. Начато тестирование расчетов фазовых диаграмм для рассматриваемой смеси.

Различие в точности моделей, указанное в [1] послужило мотивацией для введения более сложной модели TraPPE-EH для расчетов в LAMMPS.

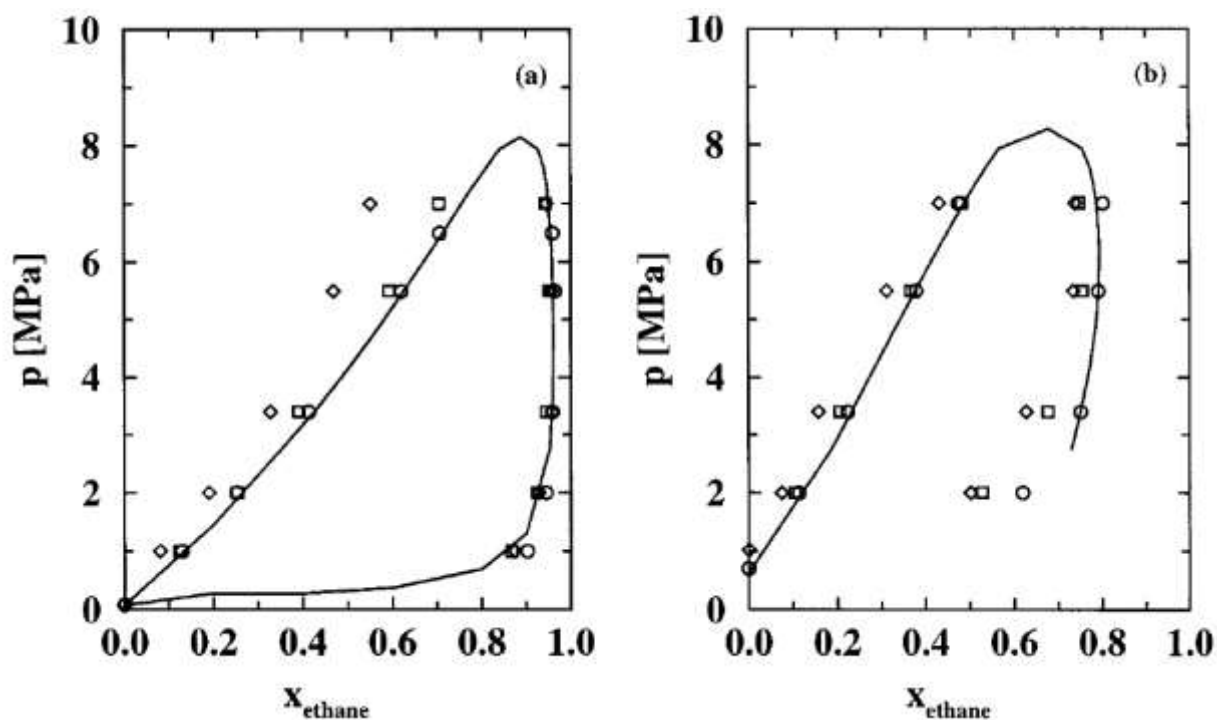


Рисунок 1. (а) зависимость давления от концентрации при  $T=366$  К бинарной смеси, состоящей из сверхкритического этана и н-гептана, рассчитанная методами: TraPPE-EH (открытые круги), TraPPE-UA (открытые квадраты) и OPLS-AA (открытые ромбы). Сплошная линия представляет собой экспериментальные результаты. (б)  $T=450$  К изотерма бинарной смеси этана и н-гептана. Символы как на графике 9(а). Рисунок взят из работы [1]

Авторы выражают благодарность Г.Э. Норману за обсуждение задачи.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта 14-50-00124.

#### Литература

1. Bin Chen and J. Ilja Siepmann. Transferable Potentials for Phase Equilibria. Explicit-Hydrogen Description of Normal Alkanes // J. Phys. Chem.- 1999. - 103, 5370-5379 с.
2. Marcus G. Martin and J. Ilja Siepmann. Transferable Potentials for Phase Equilibria. United-Atom Description of n-Alkanes // J. Phys. Chem. – 1998. - 102, 2569-2577 с.