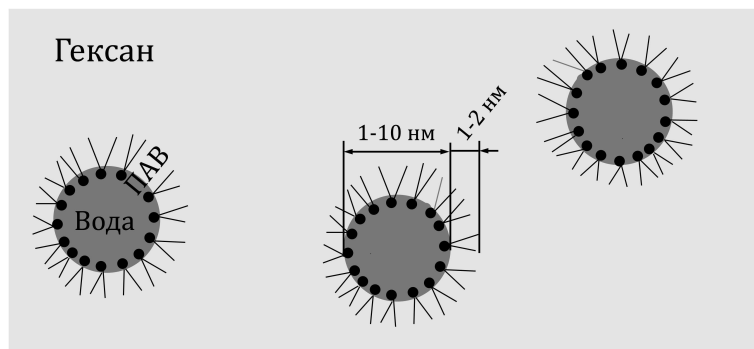


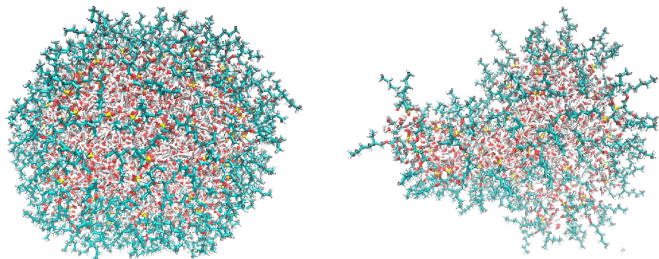
Новые модели для описания формы поверхности обратной мицеллы

Невидимов А.В., Товстун С.А.
nevidimovsasha@yandex.ru

Обратные мицеллы:



Форму обратной мицеллы обычно считают либо идеальной сферической, либо эллипсоидальной. Однако при изучении методом молекулярной динамики форма обратных мицелл может сильно отличаться от идеализированных моделей:



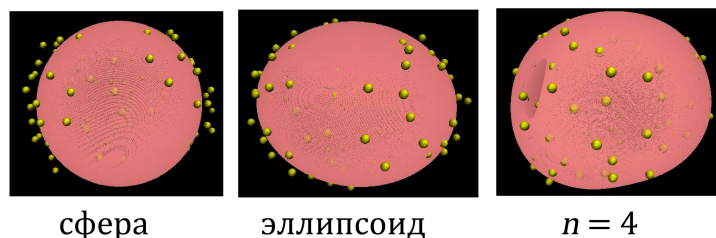
Для детального описания формы обратной мицеллы предлагается использовать следующие модели:

Модель I:

$$\sum_{\substack{i,j,k \geq 0 \\ i+j+k \leq n}} a_{ijk} x^i y^j z^k = 0$$

Поверхность n -го порядка. При $n = 2$ получаем эллипсоид, а при $a_{110} = a_{101} = a_{011} = 0$ - сферу.

Поверхность проводим через некоторые атомы обратной мицеллы. На примере Аэрозоля ОТ это могут быть атомы серы:

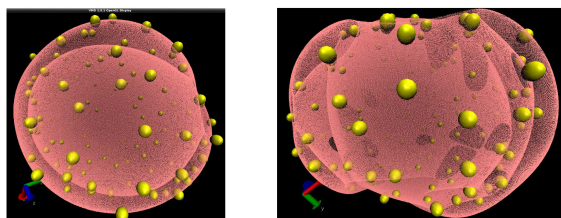


сфера

эллипсоид

 $n = 4$

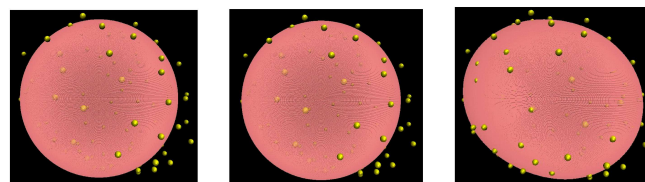
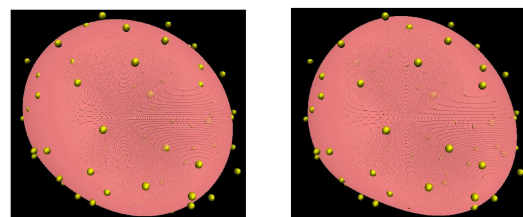
При $n = 4$ или $n = 6$ поверхность слоистая, хоть и проходит почти точно через все атомы серы:

 $n = 4$ $n = 6$

Модель II:

$$r(\theta, \varphi) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=-i}^i a_{ij} Y_i^j(\theta, \varphi)$$

Y - действительные сферические функции.

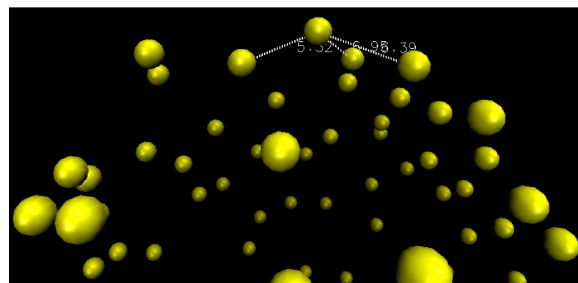
 $n = 0$ $n = 1$ $n = 2$  $n = 3$ $n = 4$

При $n = 0$ или 1 имеем сферу, при $n = 2$ поверхность близка к эллипсоиду, при $n = 3, 4$ получаются более точные поверхности.

Независимых коэффициентов при разных n :

n	Модель I	Модель II
0	-	1
1	-	4
2	9	9
3	-	16
4	34	25
6	83	49
8	164	81

Модель III:



Для каждого атома серы находим 3 соседа и проводим сферу. Так можно оценить локальную кривизну в каждой точке поверхности, где имеется атом серы. Кривизна может быть как положительной, так и отрицательной.

Выводы: с помощью предложенных моделей можно описывать поверхность обратных мицелл более детально, чем просто сферой или эллипсоидом, если того требует задача.