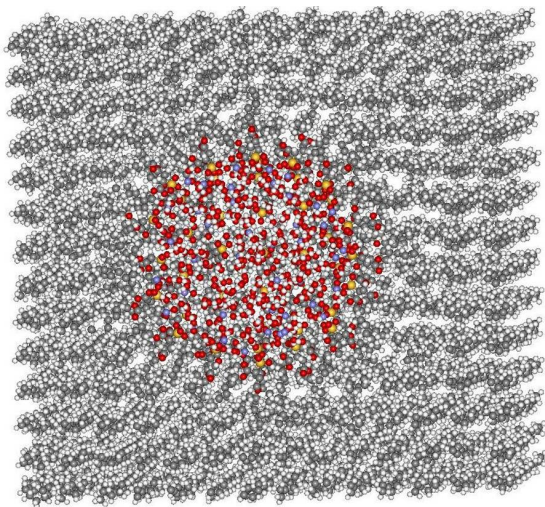


Одноатомная модель растворителя при исследовании обратных мицелл методом молекулярной динамики

А.В. Невидимов
и В.Ф. Разумов

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

Общее число атомов



до **30000** атомов воды

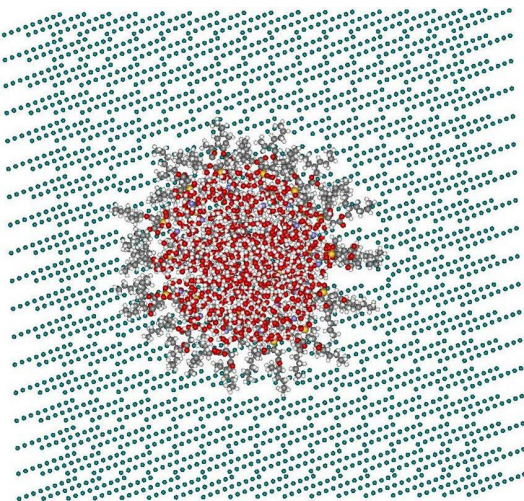
до **30000** атомов ПАВ

до **600000** атомов гексана

если полноатомные модели

для всех молекул

Общее число атомов



до **30000** атомов воды

до **30000** атомов ПАВ

до **30000** атомов гексана

если одноатомная модель

для гексана

Параметры одноатомной модели

m — масса обобщённого атома гексана = **86.4**

q — заряд обобщённого атома гексана = **0**:

$$U_{ij} = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon\epsilon_0 R_{ij}}$$

ϵ и R_{min} — параметры Ван-дер-Ваальса:

$$U_{ij} = \epsilon_{ij} \left(\left(\frac{R_{min}}{R_{ij}} \right)^6 - 2 \left(\frac{R_{min}}{R_{ij}} \right)^{12} \right)$$

Параметры одноатомной модели

Объём ячейки II в зависимости от параметров R_{min} , ϵ

		R_{min} , нм					
ϵ , ккал/моль	V , нм ³	0.6	0.62	0.64	0.66	0.68	0.7
	1.0	860	950	1050	1150	1260	1380
	0.9	890	990	1090	1200	1310	1430
	0.8	930	1030	1140	1250	1360	1500
	0.7	1000	1100	1220	1340	1480	1610
	0.6	1130	1250	1390	1530	1690	1840
	0.5	$2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$

Объём ячейки I равен 1070-1080 нм³

Параметры одноатомной модели

