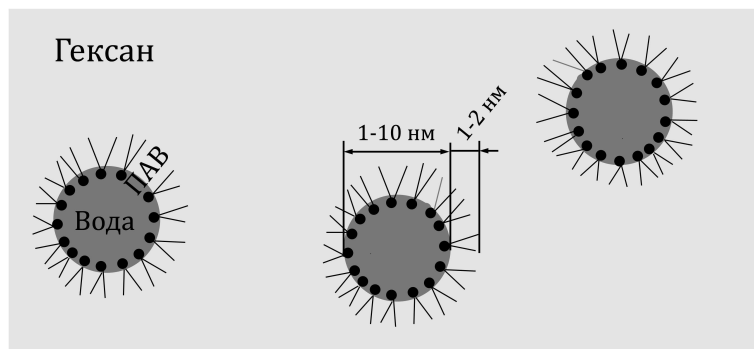


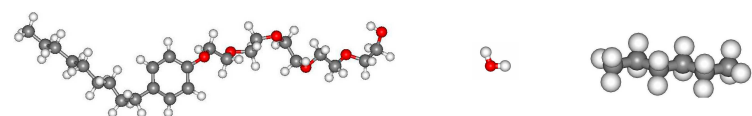
Компьютерное моделирование обратных мицелл с использованием одноатомной модели растворителя

А.В. Невидимов, В.Ф. Разумов

Обратные мицеллы:



В составе одной обратной мицеллы находится:

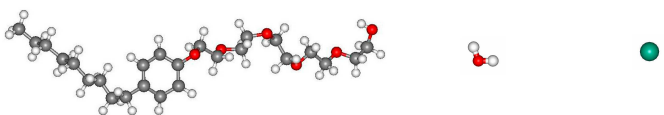


	ПАВ	Воды	Гексана
Молекул	20-500	0-10000	5000-30000
Атомов	1500-37500	0-30000	$1-6 \times 10^5$

Общее число атомов огромно, если использовать
полноатомные модели

при этом ~90% атомов - атомы гексана

Зададим молекулу гексана одним атомом:



	ПАВ	Воды	Гексана
Молекул	20-500	0-10000	5000-30000
Атомов	1500-37500	0-30000	5000-30000

Теперь доступна детальная информация об ОМ
при меньшем времени расчёта (в ~10 раз)

В данной работе подобраны параметры такой
модели гексана, при которых воспроизводятся
важные свойства гексана: плотность, смешение
с полноатомным гексаном, расслоение с водой,
температура кипения.

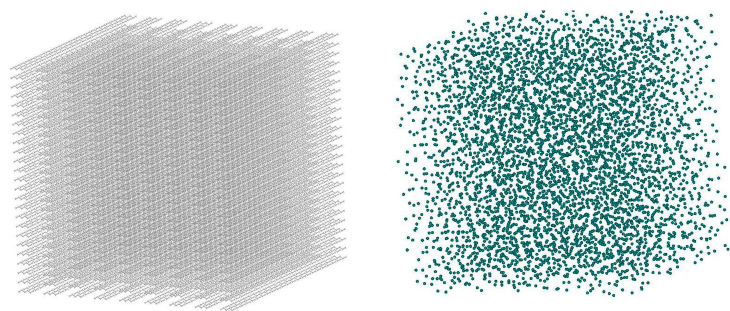
Для этого была использована молекулярная ди-
намика с NAMD [1]. Вычисления проведены на
JSCC [2] и IPSP [3] с привлечением 64 или 8 CPU.

Ссылки:

1. NAMD – <<http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd>>.
2. JSCC – <<http://www.jssc.ru/hard/mvs100k.shtml>>
3. Серверы ИПХФ – <<http://cc-ipcp.icp.ac.ru>>.

Результаты моделирования:

Было взято 2 ячейки гексана по 4913 молекул



Полноатомная модель Одноатомная модель

Объём первой ячейки составил 1070-1080 нм³

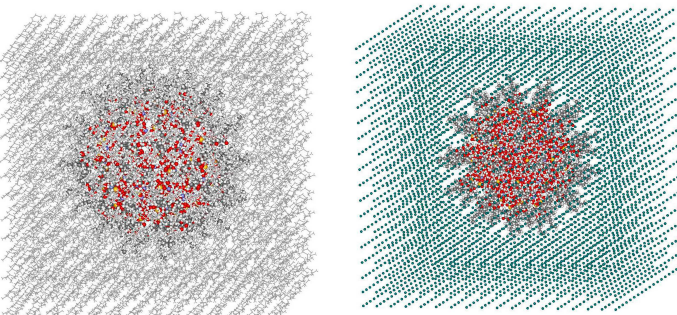
Объём второй ячейки варьировался:

		$R_{\min}/2, \text{ nm}$					
$V, \text{ nm}^3$		0.30	0.31	0.32	0.33	0.34	0.35
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	$2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$

Более точная подборка дала 7 пар параметров:

	$R_{\min}/2, \text{ nm}$	$\epsilon, \text{ ккал/моль}$
I	0.295	0.6
II	0.3	0.63
III	0.31	0.74
IV	0.314	0.8
V	0.319	0.9
VI	0.32	0.93
VII	0.322	1

Затем две ячейки с ОМ были построены:



131 255 атомов

12 360 атомов

Свойства мицелл оказались одинаковыми при
III и IV наборах параметров. При V - VII ОМ ока-
зались сильно вытянутыми. При I and II проис-
ходило сильное увеличение объёма ячейки.