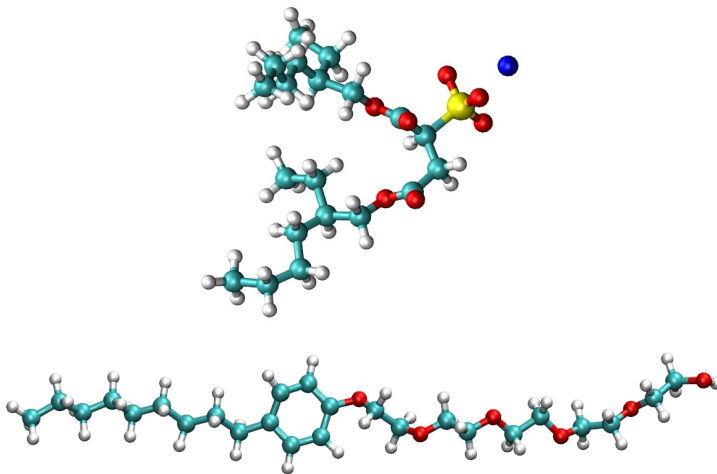


Изучение возможности формирования
сферических обратных мицелл
поверхностно-активным веществом
цилиндрической формы в присутствии воды

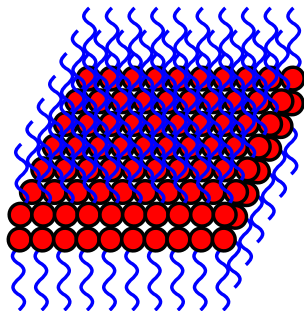
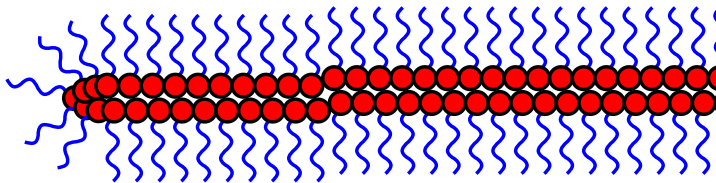
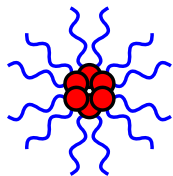
Невидимов А.В., Разумов В.Ф.

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

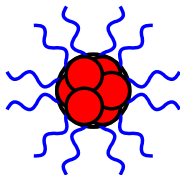
Поверхностно-активное вещество



Молекулы ПАВ в растворе



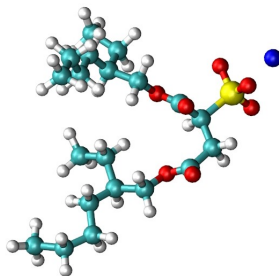
Сферическая обратная мицелла



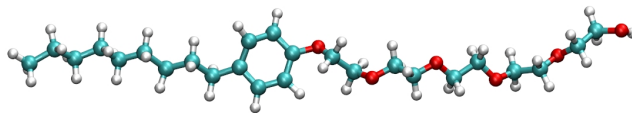
$$\begin{cases} \frac{4}{3}\pi R^3 = NV_p \\ 4\pi R^2 = NS_p \end{cases} \implies R = \frac{3V_p}{S_p} \leq L_p$$

$$P = \frac{V_p}{S_p L_p} \leq \frac{1}{3}$$

Примеры параметра упаковки

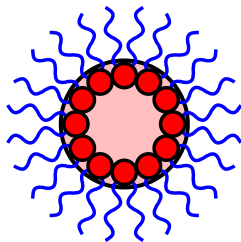


$$P \approx 0.3$$



$$P \approx 0.5$$

Водная обратная мицелла



$$\begin{cases} \frac{4}{3}\pi R^3 &= NV_p + N_w V_w \\ 4\pi R^2 &= NS_p \end{cases} \implies N_w = \frac{4\pi}{3V_w} R^3 - \frac{4\pi V_p}{V_w S_p} R^2$$

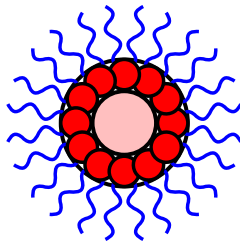
$$N_w V_w \geq \frac{4}{3}\pi (R - L_p)^3$$

Решение неравенства

$$R \geq \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{P - \frac{1}{4}}}{1 - P} \cdot L_p$$

$$\frac{N_w}{N} \geq \left(\frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{P - \frac{1}{4}}}{3P(1 - P)} - 1 \right) \cdot \frac{V_p}{V_w}$$

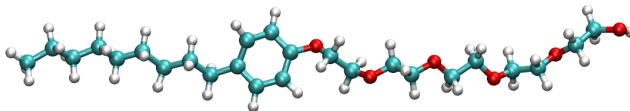
Когда достигается равенство?



$$R = \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{P - \frac{1}{4}}}{1 - P} \cdot L_p$$

Компьютерное моделирование

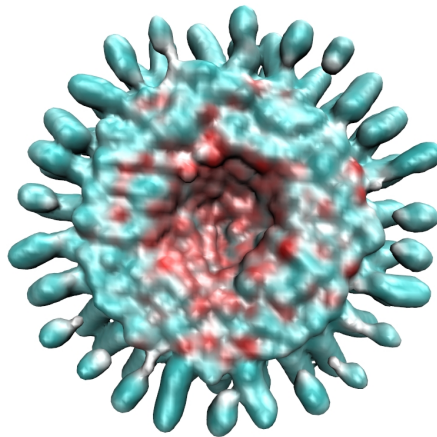
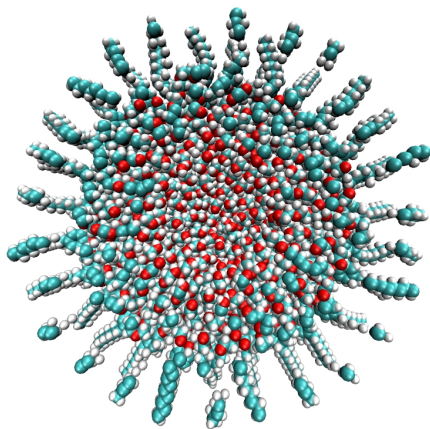
1. Метод классической молекулярной динамики
2. Полноатомное описание молекул ПАВ и воды
3. Учёт химического взаимодействия
4. Молекула ПАВ:



5. $L_p = 2 \text{ нм}$, $S_p = 0.45 \text{ нм}^2$, $V_p = 0.49 \text{ нм}^3$, $V_w = 0.03 \text{ нм}^3$

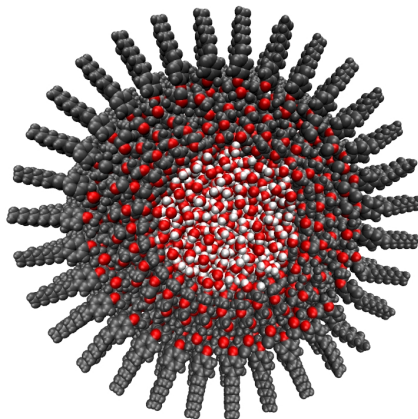
Стартовая геометрия

1. Безводная обратная мицелла: $N = 300$, $R = 3.2$ нм



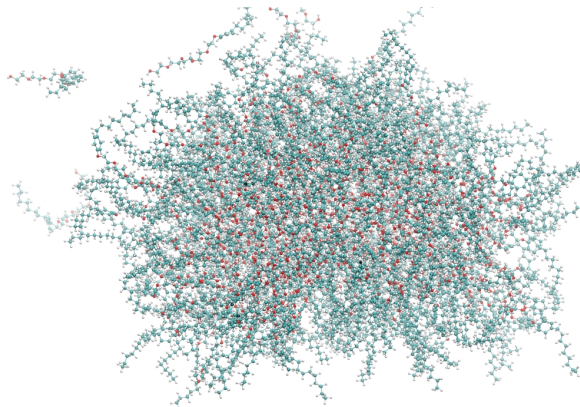
Стартовая геометрия

2. Обратная мицелла с водой: $N = 350$, $N_w = 597$, $R = 3.5$ нм



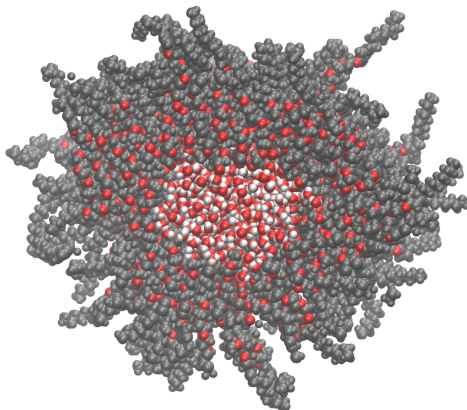
Результат молекулярной динамики

1. Безводная обратная мицелла: сильная деформация



Результат молекулярной динамики

2. Обратная мицелла с водой: гидратация полярных групп



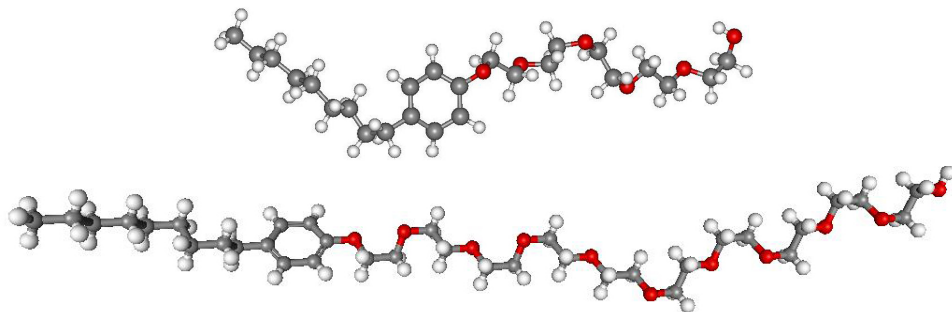
Учёт гидратации

$$R \geq \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{P \left(1 + k \frac{V_w}{V_p} \right) - \frac{1}{4}}}{1 - P \left(1 + k \frac{V_w}{V_p} \right)} \cdot L_p$$

≈ 100 молекул воды гидратирует $N = 350$ молекул ПАВ
 $k \approx 0.3, R = 3.7$ нм, $N = 380, N_w = 830$

Дальнейшая работа

Обратная мицелла из смеси 2 ПАВ:



Спасибо за внимание!