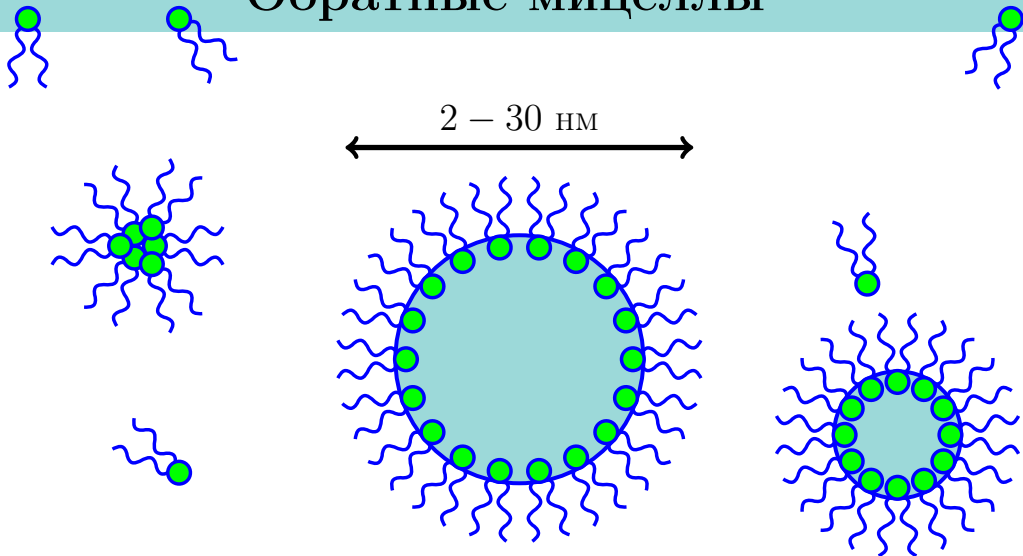


Компьютерное моделирование формы обратных мицелл ионогенного и неионогенного ПАВ

Александр еНевидимов

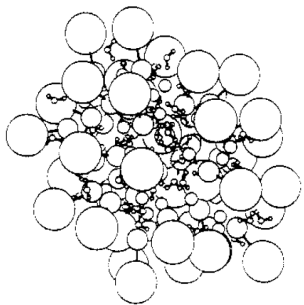
Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

Обратные мицеллы



От первого моделирования...

1988 год (Brown и Clarke):



36 молекул ПАВ

72 молекул воды

1079 молекул неполярного растворителя

1403 всего атомов

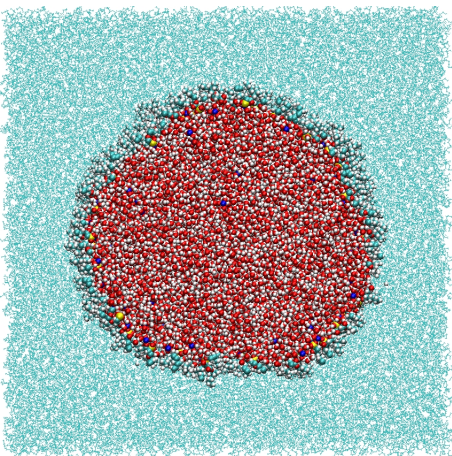
$1.6 \cdot 10^{-10}$ секунд длина траектории

22 часа вычислительного времени

205 CPU

... К моделированию сегодня

2015 год:



20 нм

608 молекул ПАВ

30003 молекул воды

28102 молекул гексана

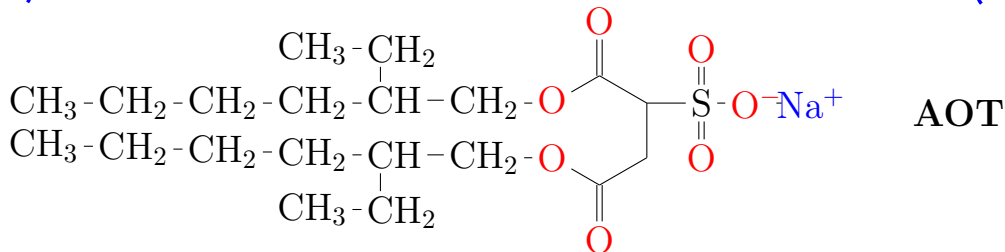
692177 всего атомов

$3 \cdot 10^{-9}$ секунд длина траектории

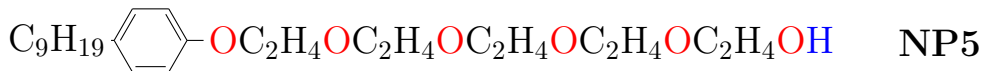
350 часов вычислительного времени

8 CPU + 2 узла GPU

Используемые ПАВ



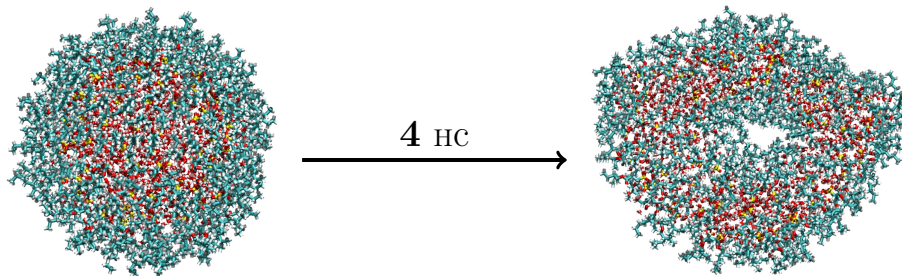
1,4-бис[(2-этилгексил)окси]-1,4-диоксобутан-2-сульфонат натрия



2-(2-(2-(2-(4-нонилфенокси)-этокс)-этокс)-этокс)-этанол

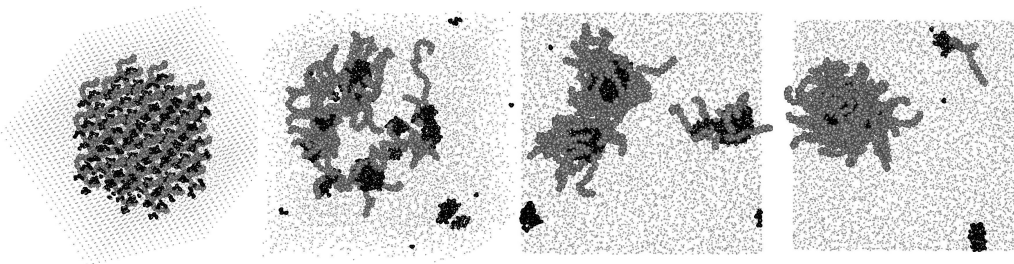
Способы моделирования

1. Эволюция формы предсформированной мицеллы



Способы моделирования

2. Формирование мицеллы из отдельных молекул



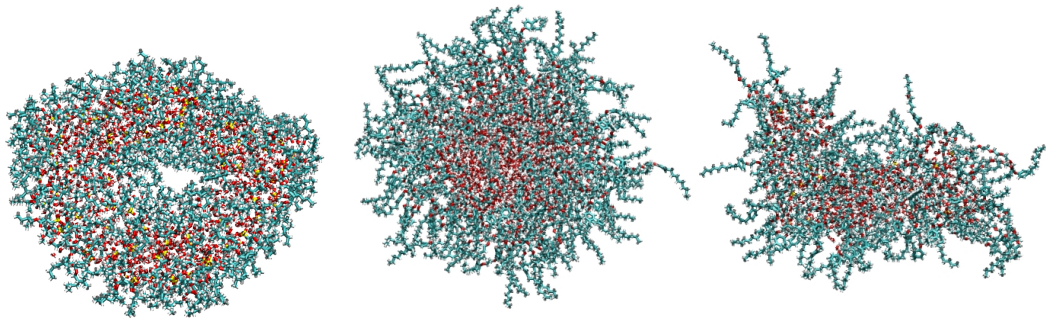
0 нс

5 нс

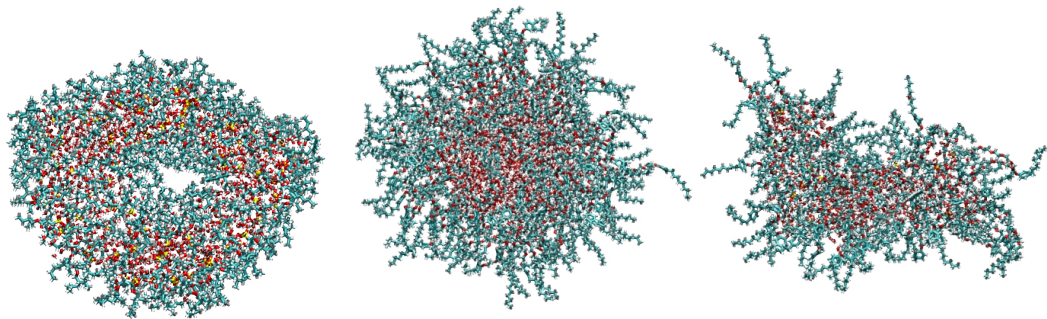
50 нс

100 нс

Результаты моделирования

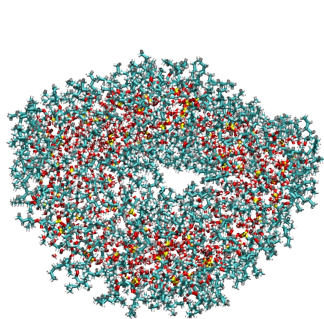


Результаты моделирования

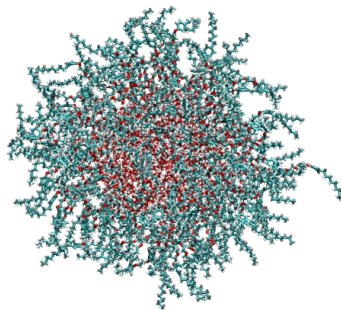


Агрегаты какой формы имеют отношение к тому,
что химики получают в пробирках?

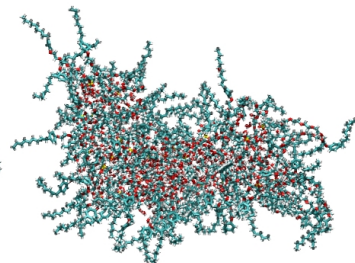
Сравнение с экспериментом



10^{14}



10^{18}

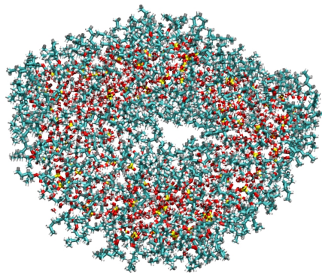


10^{16}

агрегатов в растворе

Сравнение с экспериментом

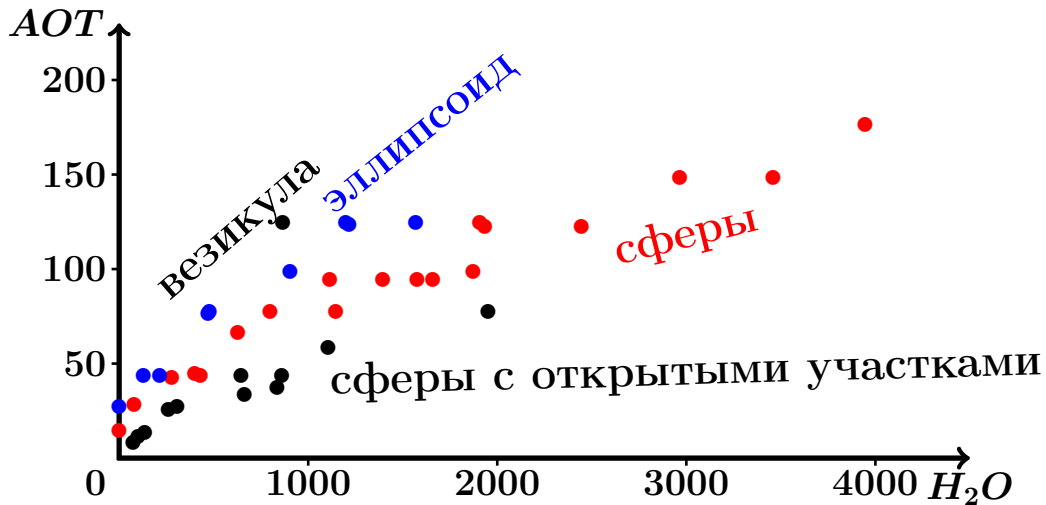
1. Обратные мицеллы **АОТ** — преимущественно сферические
2. Доля мицелл других форм — мала



3. В моделировании агрегаты любой формы
могут существовать бесконечно долгое время

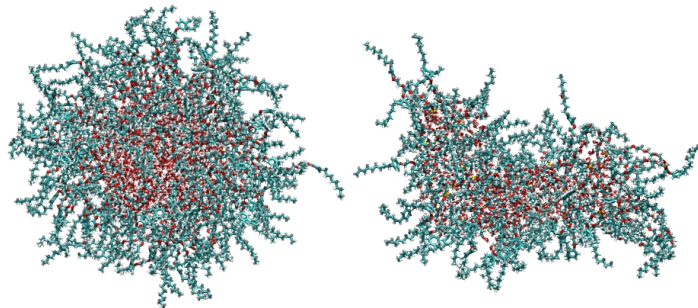
Сравнение с экспериментом для АОТ

Обратные мицеллы АОТ — преимущественно сферические



Сравнение с экспериментом для NP5

Форма обратных мицелл **NP5** — однозначно не известна



сфера

или

эллипсоид?

Спасибо за внимание!