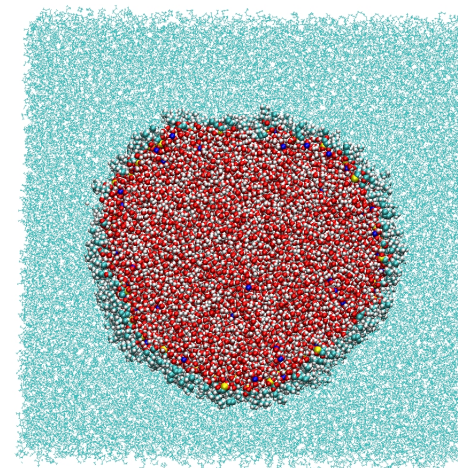


Зависимость свободной энергии обратных мицелл от их размера: МД моделирование на суперкомпьютере «Ломоносов»

Невидимов А.В., Товстун С.А., Разумов В.Ф.

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

e-mail: *nevidimovsasha@yandex.ru*



Введение

Обратные микроэмульсии представляют собой термодинамически стабильные жидкости, структура которых может быть представлена как совокупность диспергированных в неполярном растворителе (масле) **обратных мицелл** — наноразмерных капель воды, покрытых монослоем поверхностно-активного вещества. Качественно объяснить формирование ОМ можно следующим образом. Молекула ПАВ имеет полярную и неполярную части, поэтому ей энергетически выгодно располагаться на границе вода/масло. Количество воды в системе определяет общий объём дисперсной фазы, а количество ПАВ — общую площадь межфазной поверхности. Зависимость свободной энергии системы (σ) от радиуса кривизны межфазной поверхности (r) определяет форму и размер конечных объектов. Наша работа направлена на изучение такой зависимости $\sigma(r)$, при которой формируются обратные мицеллы.

Описание подхода

Используется формула Лапласа для разности давлений внутри и снаружи ОМ:

$$\Delta P = \frac{2\sigma}{r} + \frac{d\sigma}{dr}$$

Зависимость $\Delta P(r)$ рассчитывается в результате обработки данных МД моделирования ОМ разного радиуса. Сейчас проведены расчёты для ОМ одного радиуса и для неё вычислена величина ΔP .

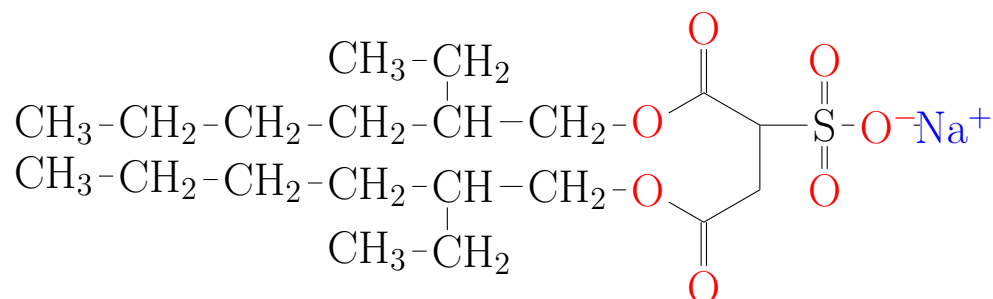
Параметры моделирования

Использовали пакет NAMD¹ и вычислительные мощности суперкомпьютера МГУ «Ломоносов»² с задействованием графических процессоров.

Использовали полноатомные модели для всех молекул — воды, ПАВ и гексана в роли масла. В качестве ПАВ взяли Аэрозоль ОТ.

Результаты моделирования

Аэрозоль ОТ



Вычисление $\Delta P(r)$ из результатов МД моделирования проводили для ОМ, содержащей **1142 молекулы воды и 78 молекул Аэрозоля ОТ**. Согласно³, такая мицелла имеет приблизительно сферическую форму, а оболочка не содержит открытых контактов между водой и маслом.

Расчёт давления осуществляли следующим образом. Измеряли средний удельный объём молекулы воды в заданном малом элементе пространства вокруг интересующей точки. Для этого усредняли количество принадлежащих воде атомов, попавших в заданный элемент объёма. Зная удельные объёмы воды в заданной точке мицеллы и в объёме обычной воды, и зная её сжимаемость, рассчитывали давление.

Среднее значение удельного объёма чистой воды равно $28.812 \pm 0.005 \text{ \AA}^3$, воды в центре водного ядра указанной обратной мицеллы — $28.61 \pm 0.06 \text{ \AA}^3$. Из этих данных следует, что избыточное давление в центре этой ОМ составляет $110 \pm 34 \text{ атм}$.

Выводы

1. Проведён расчёт $\Delta P(r)$ для ОМ одного радиуса.
2. Для достижения большей точности требуется накопление более длинных МД траекторий.

Литература

1. NAMD ks.uiuc.edu/Research/namd
2. Воеводин Вл.В. Открытые системы. 2012. 7. 36.
3. Невидимов А.В. Коллоидный журн. 2013. 2. 213.