

Зависимость свободной энергии обратных мицелл от их размера: молекулярно-динамическое моделирование на суперкомпьютере «Ломоносов» *

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

Институт проблем химической физики РАН

Одним из важных практически значимых примеров нанодисперсных жидких систем являются растворы обратных микроэмульсий. Обратные микроэмульсии представляют собой термодинамически стабильные жидкости, структура которых может быть представлена как совокупность диспергированных в неполярном растворителе (масле) обратных мицелл (ОМ) — наноразмерных капель воды, покрытых монослоем поверхностно-активного вещества (ПАВ). Качественно объяснить формирование ОМ можно следующим образом. Молекула ПАВ имеет полярную и неполярную части, поэтому ей энергетически выгодно располагаться на границе вода/масло. При этом 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. При некоторых условиях этими объектами являются ОМ. Наша работа направлена на изучение упомянутой зависимости. Для этого мы планируем использовать обобщённую формулу Лапласа для разности давлений внутри и снаружи ОМ (ΔP):

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

Зависимость $\Delta P(r)$ предполагается получить в результате обработки данных моделирования методом молекулярной динамики ОМ разного радиуса. Для этого будет проведено измерение среднего удельного объёма молекулы воды в заданном малом элементе пространства вокруг интересующей точки. Этот объём относительно просто считается из временных траекторий атомов, получающихся в результате моделирования: достаточно усреднить количество принадлежащих воде атомов, попавших в заданный элемент объёма. Имея удельные объёмы воды в заданной точке мицеллы и в объёме обычной воды, а также зная её сжимаемость, можно вычислить интересующее нас давление. Для достижения достаточной точности требуются довольно длинные траектории (более 20 нс), записанные с мелким временным шагом и требующие десятки гигабайт на жёстком диске. Общее число атомов в системах исчисляется сотнями тысяч. Для всех МД расчётов и последующих вычислений давления был выбран суперкомпьютер «Ломоносов» [1]. На данном этапе мы провели расчёты для обратной мицеллы Аэрозоля ОТ одного радиуса и вычислили для неё искомую разность давлений. В настоящее время мы проводим моделирование ОМ других радиусов. Для всех МД расчётов используем программный пакет NAMD [2], для вычисления давления по вышеописанной схеме — собственные параллельные программы.

Литература

1. Воеводин Вл. В. и др. Практика суперкомпьютера "Ломоносов" // Открытые системы. — Москва: Издательский дом "Открытые системы" N 7, 2012. С. 36–39.
2. Phillips J.C. et al. Molecular dynamics with NAMD // J. Comput. Chem. 2005. Vol. 26. N. 16. P. 1781–1802.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 13-03-00681)

The dependence of reverse micelles free energy from their size: a molecular dynamics simulation at “Lomonosov”

Alexander Nevidimov, Sergey Tovstun and Vladimir Razumov

Keywords: Molecular dynamics, reverse micelle, free energy, pressure

Molecular dynamics simulation of pressure into reverse micelles was conducted in our work. All calculations was carried out at "Lomonosov" supercomputer center. Free energy calculations we are going to provide by Laplace formula.