

Численное исследование мицеллярных систем с цилиндрическими мицеллами

Проведено численное исследование кинетики релаксации полидисперсных цилиндрических мицелл с различными начальными условиями, соответствующими быстрому концентрированию и разбавлению раствора поверхностно-активного вещества (ПАВ). За основу кинетического описания была взята система разностных уравнений Смолуховского, учитывающая как захват и испускание мицеллами мономеров ПАВ, так и слияние и распад мицелл. Зависимости коэффициентов слияния цилиндрических агрегатов от чисел агрегации были построены на основании формул Бюргерса-Озеена для поступательного движения сфероцилиндрических частиц в вязкой жидкости. Полученное решение обобщенных кинетических уравнений Смолуховского для неравновесного распределения по числам агрегации цилиндрических мицелл было сопоставлено с численным решением кинетических уравнений Беккера-Дёринга для цилиндрических мицелл с теми же начальными условиями при молекулярном механизме агрегации через захват и испускание мономеров ПАВ.

Numerical study of micellar systems with cylindrical micelles

The kinetics of relaxation of polydisperse cylindrical micelles with various initial conditions corresponding to rapid concentration and dilution of the surfactant solution has been numerically studied. The basis for the kinetic description was the system of Smoluchowski's difference equations, which takes into account both the capture and emission of surfactant monomers by micelles, and the fusion and decay of micelles. Dependences of the fusion coefficients of cylindrical aggregates on aggregation numbers were constructed on the basis of the Burgers-Oseen formulas for the translational motion of spherocylindrical particles in a viscous liquid. The resulting solution of the generalized Smoluchowski kinetic equations for the nonequilibrium distribution by the aggregation numbers of cylindrical micelles was compared with the numerical solution of the Becker-Döring kinetic equations for cylindrical micelles with the same initial conditions under the molecular mechanism of aggregation through capture and emission of surfactant monomers.