

Доклад: «Моделирование прямых и обратных мицелл в полярном и неполярном растворителях»

Докладчик: Посысов М.В.

Аннотация:

В докладе будут представлены результаты моделирования неионного ПАВ C12E4 (рис.1) в воде и гептане методом молекулярной динамики в полноатомной модели.

Были получены распределения по числам агрегации для мицелл в гептане при различных температурах и размерах моделируемых систем, построены радиальные функции распределения и вычислен электростатический вклад в работу образования в полярном и неполярном растворителях.

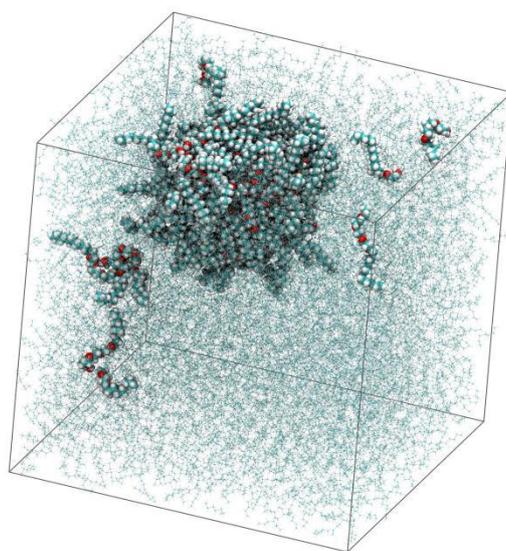


Рис.1.