Кафедра статистической физики.

А.К. Щекин, Ю.А. Ерошкин, Л.Ц. Аджемян

Результаты представляемой работы опубликованы в статье

[Model of inverse “dry” micelles with coexisting spherical, globular and cylindrical aggregates](https://scholar.google.com/citations?view_op=view_citation&hl=ru&user=9rXyRssAAAAJ&sortby=pubdate&citation_for_view=9rXyRssAAAAJ:0N-VGjzr574C)

YA Eroshkin, LT Adzhemyan, AK Shchekin,

Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 615, 128615 (2023),

doi.org /[10.1016/j.physa.2023.128615](https://ui.adsabs.harvard.edu/link_gateway/2023PhyA..61528615E/doi%3A10.1016/j.physa.2023.128615) IF=3.778 Q2

 Молекулы поверхностно-активных веществ (ПАВ) образуют в полярных растворителях (чаще всего в воде) квазистабильные агрегаты – мицеллы. Причиной мицеллообразования в водных растворах является [гидрофобный](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%93%D0%B8%D0%B4%D1%80%D0%BE%D1%84%D0%BE%D0%B1%D0%BD%D0%BE%D1%81%D1%82%D1%8C) эффект. При достаточно высокой концентрации молекул ПАВ создается состояние агрегативного равновесия мицелл различного размера и мономеров. Вероятность образования мицеллы определяется больцмановским фактором, в показателе которого стоит минимальная работа образования мицеллы, отнесенная к абсолютной температуре.

 В неполярных растворах молекул ПАВ могут существовать так называемые обратные мицеллы. В этом случае движущей силой их образования являются электростатические взаимодействия полярных групп молекул ПАВ. Долгое время считалось, что обратные мицеллы образуются лишь в присутствии хотя бы небольшого количества воды. Эксперимент показал, что существуют и так называемые «сухие» обратные мицеллы, образование которых происходит в отсутствие воды.

 В представляемой работе проведено обоснование возможности существования сухих обратных мицелл на основе моделирования минимальной работы их образования. Эта работа зависит от формы мицеллы и от числа мономеров в ней. Эксперимент показывает, что существуют сферические, сфероцилиндрические, дисковые мицеллы и т.д. При изучении функции распределения мицелл по числу агрегации их форма обычно не детализируется. В настоящей работе такая детализация проведена в рамках модели, включающей сферические, глобулярные и сфероцилиндрические мицеллы. В работе образования были учтены вклады, обусловленные электростатическими взаимодействиями при образовании ядра обратной мицеллы, эффектами конформации углеводородных хвостов в короне и полярных голов в ядре мицеллы, влиянием исключённой поверхности ядра мицеллы на основе учёта уравнения состояния молекулярных групп на поверхности ядра мицеллы в виде двумерного уравнения состояния теории масштабируемых частиц. Было показано, что все три вида рассмотренных мицелл могут сосуществовать в агрегативном равновесии с мономерами, при этом с ростом концентрации ПАВ значительную долю составляют сферические мицеллы, затем глобулярные и при достаточно высоких концентрациях – сфероцилиндрические мицеллы. Были рассчитаны также флуктуации параметров формы мицелл и влияние флуктуаций на общее число мицелл с заданным числом агрегации.

Результат: обоснована молекулярно-термодинамическая модель обратных неионных мицелл из молекул ПАВ в неполярных растворителях, допускающая флуктуационное сосуществование сферических, глобулярных и сфероцилиндрических агрегатов без активационных барьеров между ними.