



Софийски университет “Св. Климент Охридски”
Физически факултет
Катедра Атомна физика

*Изследване структурни свойства на
тънък филм толуен във водна среда под
действието на външно електрично
поле*

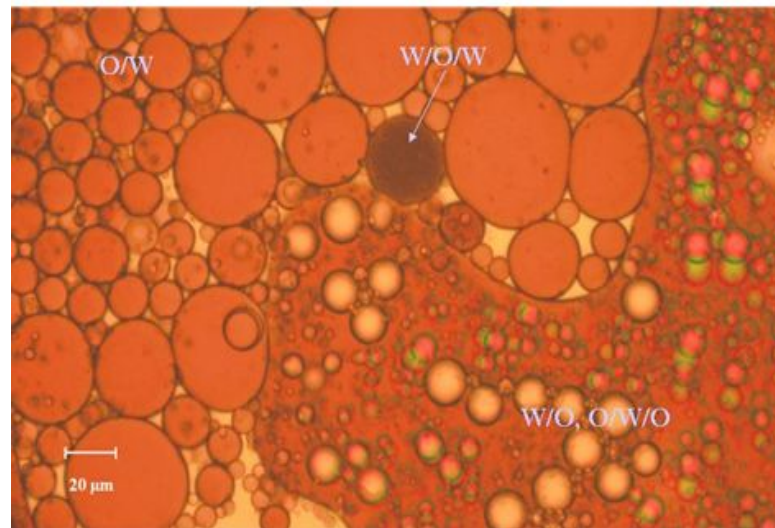
докторант: Десислава Димова
научен ръководител: проф. дфзн. Ана Пройкова
научен консултант: гл. ас. д-р Стоян Писов

Съдържание:

1. Мотивация
2. Моделна система
3. Резултати от числените пресмятания
4. Заключение

Мотивация

- Петролодобив - при извличане на петролни продукти в тях е диспергирана (разтворена) вода под формата на малки мехурчета
- Козметика и фармация
- В практиката се използва прилагане на високо напрежение върху сместа с цел образуване на по-големи водни мехурчета и по-лесното им извличане за получаване на по-чист продукт.



Цел:

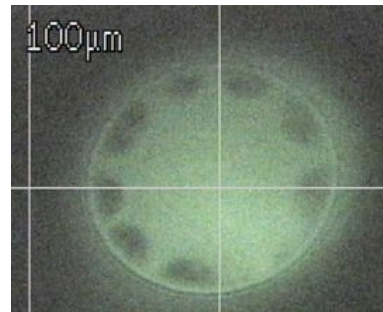
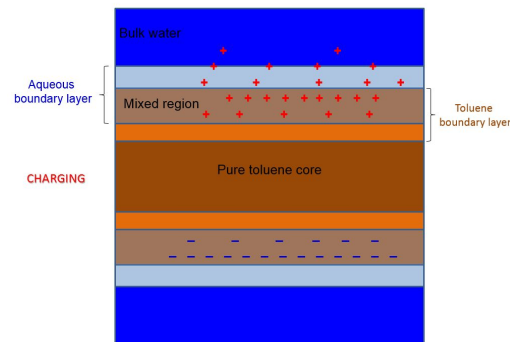
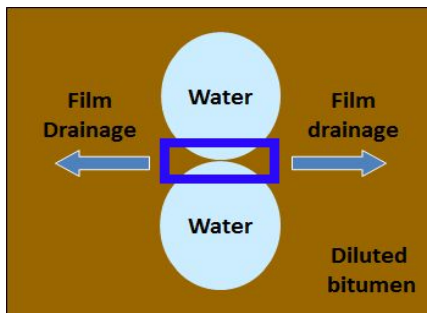
Изясняване механизма на действие на електричното поле върху тънък филм толуен и получаване на по-големи мехури вода

Моделна система - приближен модел

Приближение на експерименталната система - две мехурчета разделени от контактна повърхност

Приближение на контактната повърхност - тънък филм

Разгледан е плосък толуенов филм, разделящ две водни среди



Моделна система - изграждане на изчислителна кутия

- Начална структура - кубична кутия изпълнена само с толуенови молекули.
 - размери: $4.95 \times 4.95 \times 4.13 \text{ nm}$
 - брой молекули - 610 толуенови молекули
- Увеличаване на размерите последователно в xy -равнина и в z -направление
- Крайни параметри на изчислителната кутия
 - размер - $24.77 \times 24.77 \times 24.77 \text{ nm}$
 - брой молекули:
 - $15\ 190$ молекули толуен
 - $421\ 060$ молекули вода
 - 2000 Na^+ йони
 - 2000 Cl^- йони
- Общ брой атоми в системата - $1\ 028\ 400$

Изчислителна процедура

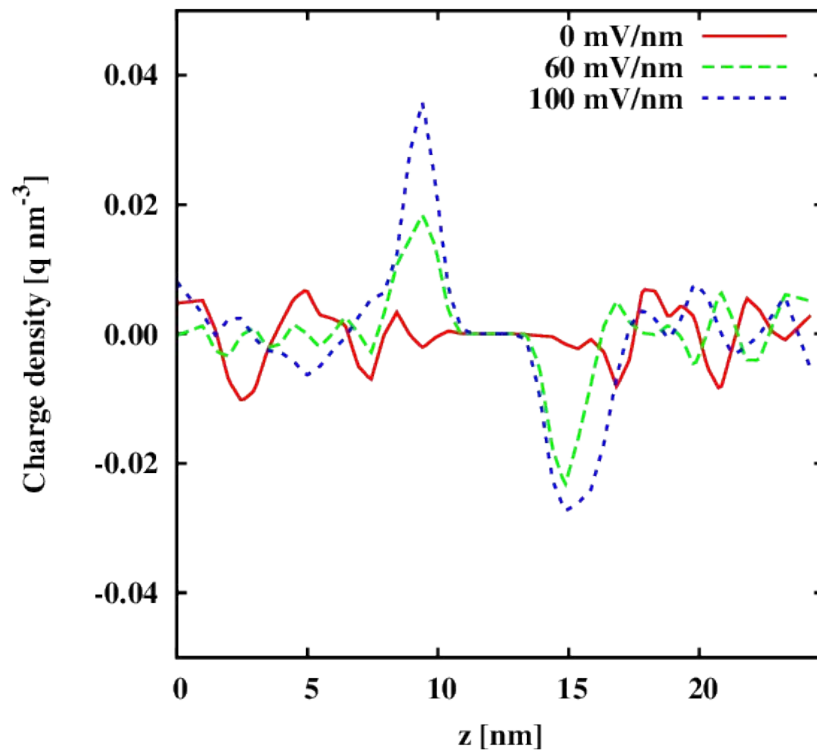
NVT ансамбъл

- Обем - $24.8 \times 24.8 \times 24.8 \text{ nm}$,
Температура - 289 K
- Обща продължителност на симулациите - 35 ns , с интеграционна стъпка - 2 fs
- Стъпаловидно повишаване на интензитета на полето от 0 до 120 mV/nm , със стъпка 20 mV/nm , на всеки 5 ns
- Интензитета на полето на H атом - 10^5 mV/nm
- Експериментални стойности - 50 mV/nm

NPT ансамбъл

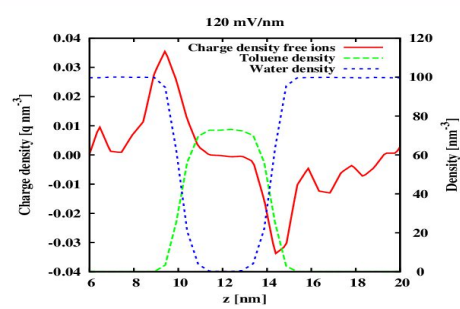
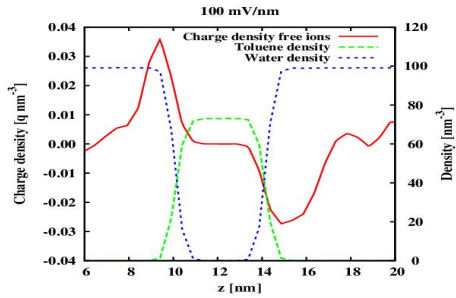
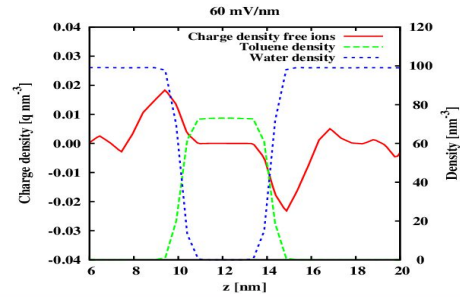
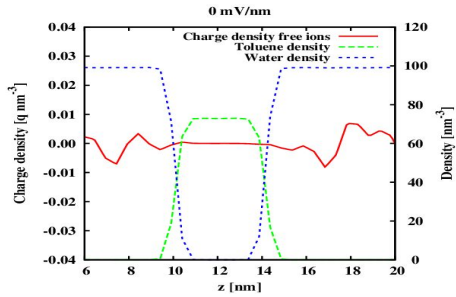
- Налягане - xy -равнинна повърхностно напрежение - 36.4 mN/nm^2 , z -направление - 1.013 bar , Температура - 289 K
- Обща продължителност на симулациите - 16 ns , с интеграционна стъпка - 2 fs
- Стъпаловидно повишаване на интензитета на полето от 0 до 75 mV/nm , със стъпка 25 mV/nm , на всеки 4 ns

Резултати - NVT ансамбъл



Разпределение на плътността на заряда на свободните йони при различни стойности на електричното поле

Резултати - *NVT* ансамбъл

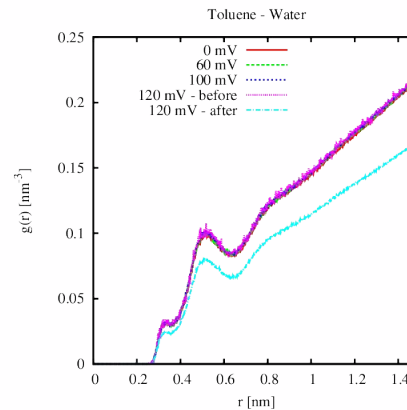
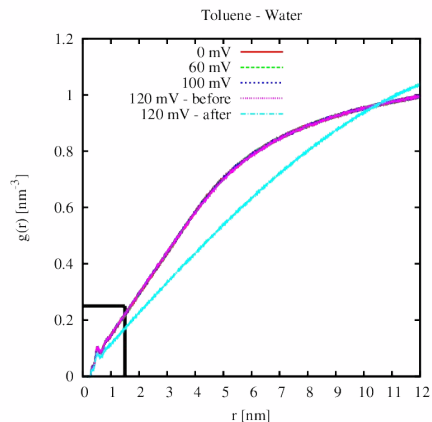


Разпределение на плътността на толуен (зелен) и вода (син) и на плътността на заряда на свободни йони (червен) за различни стойности на електричното поле

Резултати - *NVT* ансамбъл

E [mV/nm]	Q [e]
0	-1
60	12
100	27
120	33

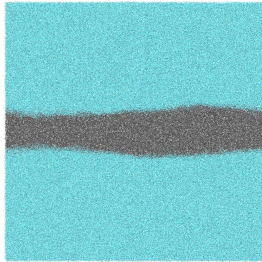
Нагрупан интегрален заряд при различни стойности на приложеното електрично поле



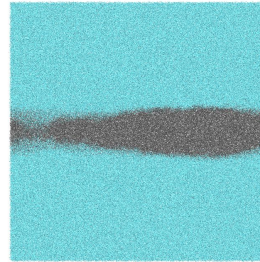
радиално разпределение на водните молекули спрямо молекулите на толуена

Резултати - NVT ансамбъл

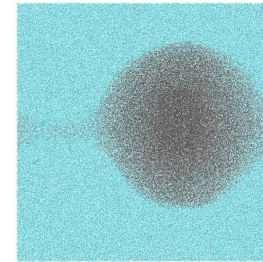
100 ps



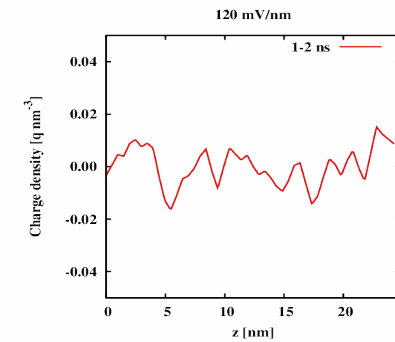
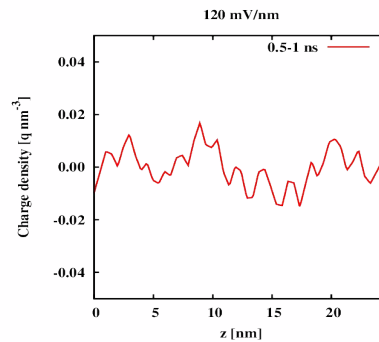
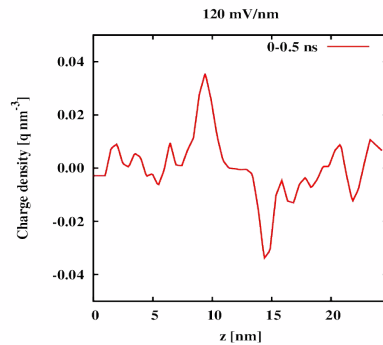
500 ps



1500 ps

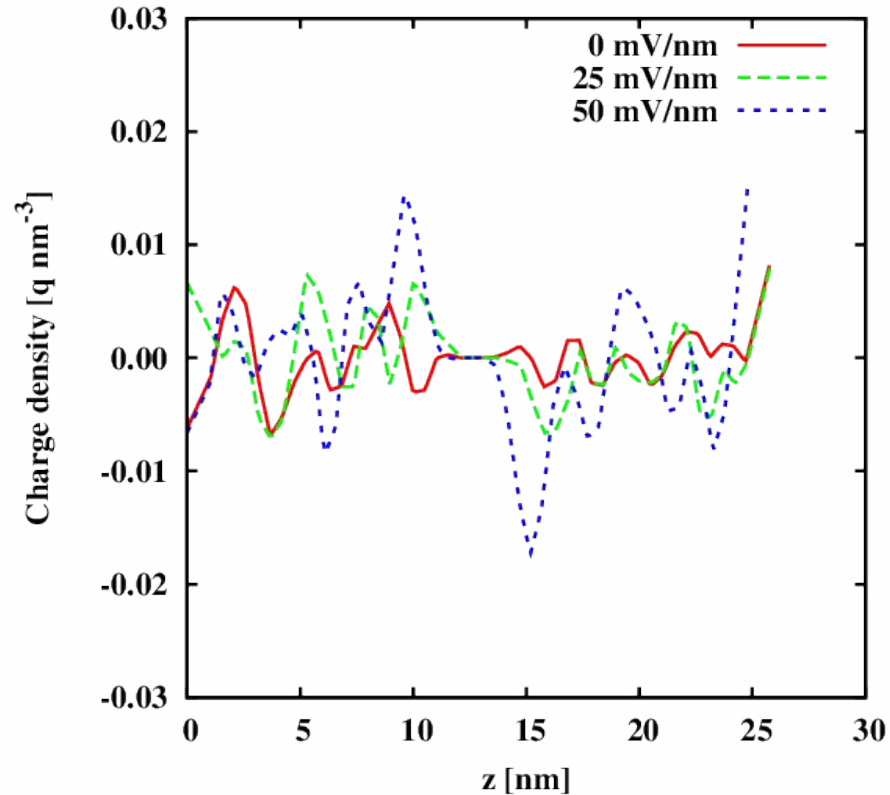


Толуенов филм в zy -равнината при 120 mV/nm



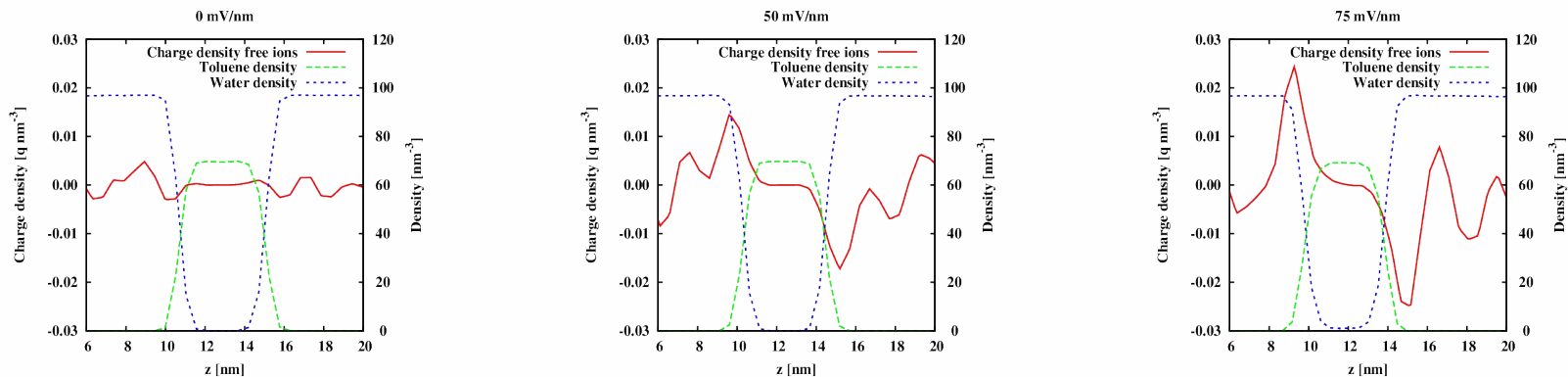
Разпределение на плътността на заряда на свободните йони в z -направление при 120 mV/nm

Резултати - *NPT* ансамбъл

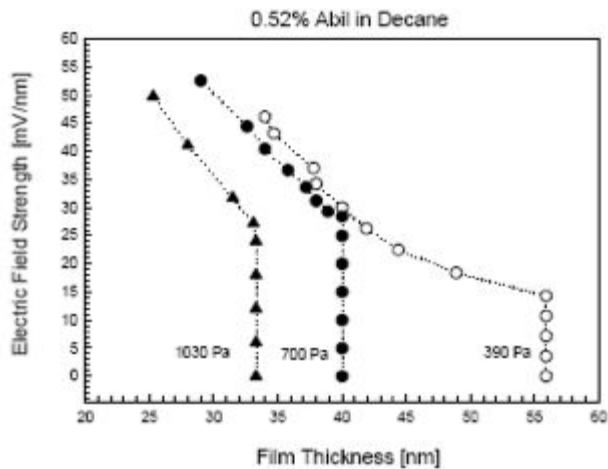


Разпределение на плътността на заряда на свободните йони при различни стойности на електричното поле

Резултати - *NPT* ансамбъл



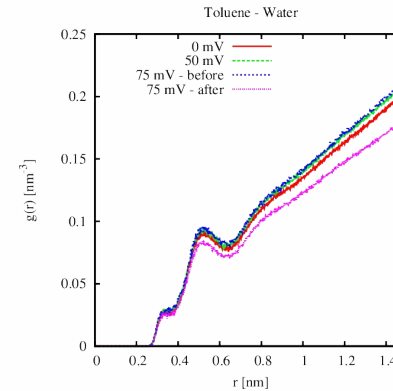
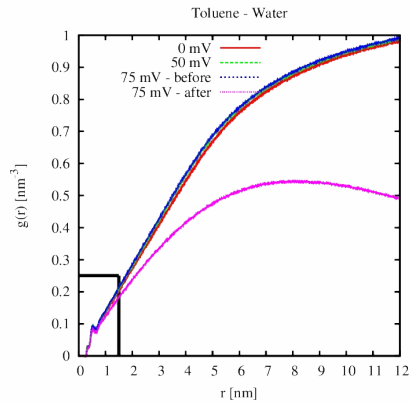
Разпределение на плътността на толуен (зелен) и вода (син) и на плътността на заряда на свободни йони (червен) за различни стойности на електричното поле



Резултати - *NPT* ансамбъл

E [mV/nm]	Q [e]
0	-6
50	44
75	54

Натрупан интегрален заряд при различни стойности на приложеното електрично поле



радиално разпределение на водните молекули спрямо молекулите на толуена

Заключение

Механизъм на скъсване : протичане на заряд

Теоретичните данни се съгласуват добре с експерименталните данни при пресмятане с NPT ансамбъл:

Експериментално - 50 mV/nm

Теоретично - 75 mV/nm

In preparation...

Molecular dynamics simulation of electric field-induced rupture of water-in-toluene emulsion film, Nikolay Panchev, Stoyan Pisov, Desislava Dimova, Ana Proykova, Sergio Madurga, *for JACS (Journal of American Chemical Society)*