**Использование симметрии фуллерена для построения структурной модели мицеллы ионного ПАВ**

***Казанцева М.А.1,2***

*1студентка, 2 курс бакалавриата НИУ «Высшая школа экономики»,*

*Московский институт электроники и математики, Москва, Россия*

*2Лаборант-исследователь,* *Казанский институт биохимии и биофизики*

*ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия*

*E-mail:* *masha353kazan@gmail.com*

В работе [1] представлена усовершенствованная феноменологическая теория мицеллообразования ионного поверхностно-активного вещества (ПАВ). В разработанной теории некоторые структурные и кинетические аспекты мицеллообразования были качественно проанализированы не только на основе общеизвестных сведений о мицеллизации, на которых построена общепринятая теория, но и с привлечением дополнительных предположений, отражающих тенденции современной науки. В частности, при анализе структуры мицелл дополнительно использовались следующие предположения: 1) мицеллярная частица существует в высококонцентрированной ионной среде, образованной диссоциированными ионами и противоионами ПАВ, которые могут быть частично свободными или связанными в ионные пары, причем изменение этих состояний характеризуется релаксационными процессами в пико- и наносекундном диапазоне; 2) мицелла является наноразмерным объектом и поэтому образование мицелл ионных ПАВ не должно противоречить принципам квантовой механики, 3) мицеллярные растворы ПАВ, которые в макромасштабе являются гомогенными, однофазными и термодинамически устойчивыми системами, в наномасштабе являются микрогетерогенными, двухфазными и неравновесными системами из-за постоянных процессов самосборки и распада мицелл, поэтому для их описания может быть применена теория самоорганизации в неравновесных процессах (теория хаоса). Необходимость вероятностного описания процессов в мицеллярных растворах ПАВ, которого требуют как квантовая теория, так и теория хаоса, а также соображения симметрии вносят свои коррективы в описание мицеллизации ионных ПАВ.

Вышеуказанные соображения привели к альтернативной модели, предполагающей те же макроскопические свойства мицеллярных растворов на макроуровне, но видоизмененные структурные характеристики мицелл на наноуровне. Показано, что в усовершенствованной модели мицелла организована как слоистая фуллереноподобная структура с полостью в ее центре, обладающая твердоподобными свойствами в радиальном направлении и жидкоподобными в перпендикулярных. На основе расчетов, проведенных с использованием симметрии фуллеренов, рассчитано расстояние между головными группами ионов ПАВ и показано, что разработанная модель не только допускает проникновение воды между головными и верхними метиленовыми группами ПАВ, но также характеризуется большей структурированностью поверхности углеводородного ядра и увеличенным размером приповерхностной псевдофазы. Оценены размеры наименьшей фуллереноподобной структуры, образованной концевыми атомами водорода метильных групп ПАВ, и образованной ими полости. Увеличение концентрации ПАВ приводит к появлению сфероцилиндрицеских мицелл, описываемых симметрией удлиненных фуллеренов, которые также, как и сферические, участвуют в процессах самоорганизации/распада мицелл, что требует пересмотра механизмов процессов, происходящих в мицеллярных системах ионных ПАВ.

**Литература**

1. Zueva O.S.; Kazantseva M.A.; Zuev Y.F. Nanosized Being of Ionic Surfactant Micelles: An Advanced View on Micellization Process // Colloids Interfaces 2025. Vol. 9. No 15. <https://doi.org/10.3390/colloids9020015>