

VI Международная конференция по коллоидной химии и физико-химической механике (IC SSPCM)



Российская Академия Наук

посвященная 125-летию со дня рождения П.А. Ребиндера
(с международным участием)

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Казань, 23 - 26 октября 2023 г.

УДК 544.72: 544.77: 544.77.03:541.12:541.12.01/.017.3

ББК 24:58:24.6

М 43

VI Международная конференция по коллоидной химии и физико-химической механике (IC ССРСМ), посвященная 125-летию со дня рождения П.А. Ребиндера (Казань, 2023): тезисы докладов. – Казань: ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, 2023. – 205 с.

В сборнике представлены тезисы докладов VI Международной конференции по коллоидной химии и физико-химической механике (IC ССРСМ), посвященной 125-летию со дня рождения П.А. Ребиндера, проходившей в Казани с 23 по 26 октября 2023 года.

Издательство «Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФГБУН «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук».
420088, Казань, ул. Академика Арбузова, 8.

ISBN 978-5-6050079-0-6

© ИОФХ им. А.Е. Арбузова – ОСП ФИЦ КазНЦ РАН, 2023

© Макет, оформление Бурилов О.А., 2023

ОРГАНИЗАТОРЫ

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Российская академия наук

Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова -

обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН

Санкт-Петербургский государственный университет

Республиканское химическое общество им. Д.И. Менделеева Татарстана

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Русанов А.И., академик РАН (Россия) –
почетный председатель

Синяшин О.Г., академик РАН (Россия) –
председатель

Захарова Л.Я., профессор (Россия) –
ученый секретарь

Бойнович Л.Б., академик РАН (Россия)

Галяметдинов Ю.Г., профессор (Россия)

Деркач С.Р., профессор (Россия)

Зуев Ю.Ф., профессор (Россия)

Кабанов А.В., член-корр. РАН (США)

Карасик А.А., член-корр. РАН (Россия)

Королева М.Ю., профессор (Россия)

Куличихин В.Г., член-корр. РАН (Россия)

Максимов А.Л., член-корр. РАН (Россия)

Музафаров А.М., академик РАН (Россия)

Носков Б.А., профессор (Россия)

Сергеев В.Г., профессор (Россия)

Соломонов Б.Н., профессор (Россия)

Хохлов А.Р., академик РАН (Россия)

Хуторянский В.В., профессор (Великобритания)

Чвалун С.Н., член-корр. РАН (Россия)

Штыков С.Н., профессор (Россия)

Щекин А.К., член-корр. РАН (Россия)

Щипунов Ю.А., член-корр. РАН (Россия)

Ярославов А.А., член-корр. РАН (Россия)

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Захарова Л.Я., д.х.н. (Казань) - председатель

Васильева Э.А., к.х.н. (Казань) - ученый секретарь

Миргородская А.Б., к.х.н. (Казань) - ученый секретарь

Бабкин Р.А. (Казань)

Бекренев Д.Д. (Казань)

Валеева Ф.Г., к.х.н. (Казань)

Васильева Л.А. (Казань)

Гаврилова Е.Л., д.х.н. (Казань)

Гайнанова Г.А., к.х.н. (Казань)

Ермакова Л.Э., д.х.н. (Санкт-Петербург)

Жильцова Е.П., к.х.н. (Казань)

Иванова Н.И. (Казань)

Карасик А.И. (Казань)

Каримова Т.Р. (Казань)

Кашапов Р.Р., к.х.н. (Казань)

Кузнецов Д.М., к.х.н. (Казань)

Кушназарова Р.А., к.х.н. (Казань)

Никонова В.Ю. (Казань)

Разуваева Ю.С., к.х.н. (Казань)

CALCULATION OF THE CONTACT ANGLE FOR SESSILE DROPLET ON FLAT SURFACE USING MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS

Polovinkin M.S., Volkov N.A.

Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia
198504, Russia, Saint Petersburg, Stary Petergof, Ulyanovskaya str. 1
polovms@gmail.com

One can estimate the wettability of a surface by the calculation of the contact angle of a droplet formed on it. In this work we use molecular dynamics method to obtain the contact angles of sessile droplets on flat solid surfaces with intention to compare different methods of contact angle calculation. We use GROMACS package [1] to perform molecular dynamics simulations of the following systems: argon in the presence of the impermeable flat wall interacting with argon by the Steele potential and all-atom water represented by the TIP3P model [2] on the flat graphite surface. The model for graphite surface was created within the INTERFACE force field [3]. For both systems the formation of steady sessile nanodroplets was observed. The droplet sizes varied from 3 to 20 nm. Several methods were implemented in computer code to analyse the molecular dynamics trajectories and to calculate the contact angle. To detect the droplets we used the clusterisation by DBSCAN algorithm. In our study we assumed the observed droplets to be spherical. One method of contact angle calculation was based on the geometric parameters of instantaneous droplet configurations. We also used several approaches based on the averaged density profiles for droplets. These profiles confirmed the assumption that the droplets were spherical in shape on average and allowed us to use droplets interfaces to calculate contact angles. The straightforward density-based method and a more complicated approach which used the Sobel filters were employed to detect interfaces of droplets. Then the interfaces were fitted to spheres in order to determine contact angles. In the described approaches for both argon and water systems the dependencies of the contact angle on the liquid-surface interaction parameter, temperature and the droplet size were calculated.

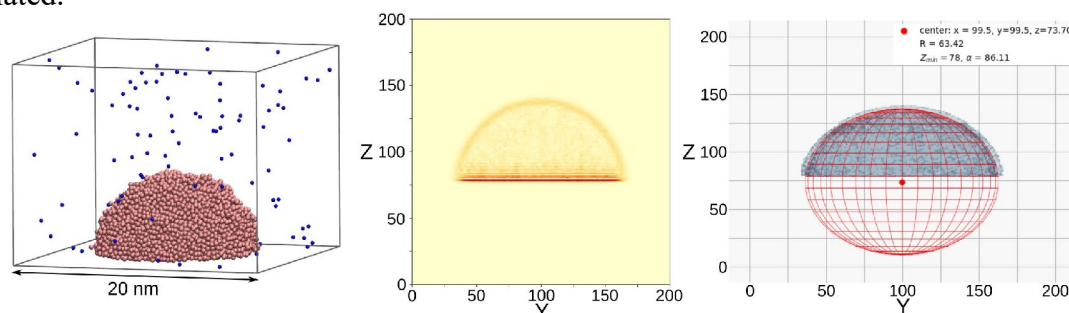


Figure 1. Argon sessile droplet in equilibrium with vapour. Density gradient map obtained using Sobel filters and fitting of droplet interface to sphere.

REFERENCES

- 1 Berendsen H.J.C. et al. *Comp. Phys. Comm.* **1995**, *91*, 43-56.
- 2 Jorgensen W.L. et al. *J. Chem. Phys.*, **1983**, *79*, 926-935.
- 3 Heinz H. et al. *Langmuir*, **2013**, *29*, 1754–1765.

This work has been supported by the grant from the Russian Science Foundation (grant № 22-13-00151).