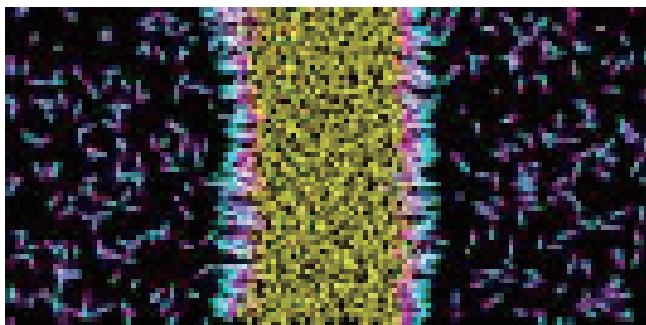


油／水／界面活性剤系のメソスケール・モデリング

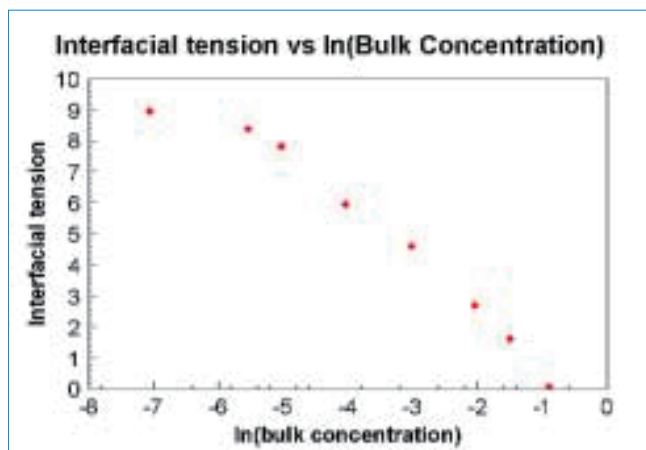
ユニリーバの科学者達は、油／水／界面活性剤系の研究にBIOVIAのDPDコードを使用しています。



油／水の界面の中規模モデルの断面図。
画像提供:ユニリーバ社、Rob Groot博士

ユニリーバ・リサーチ社のMoti Lal博士、Noel Ruddok博士およびRob Groot博士は、油-水界面への界面活性剤の吸着の研究に散逸粒子動力学 (DPD) 法を応用しました。この吸着は、洗浄力およびマーガリンやアイスクリームなどの食品の製造に重要な役割を果たしている過程です。

散逸粒子動力学は、溶液中のポリマーの格子外フローリー・ハギンス理論を直接的に実現したものです。モデル化された特定の界面活性剤は、非イオン性ダイブロック（異なる2つのポリマー鎖の端が互いに共有結合したもの）でした（グラフを参照）。この方法から、吸着の動力学に関する情報に加えて、界面張力と界面過剰の推定値が求められます。そのようなシミュレーションは、現在のところ、従来の分子モデリングの能力のはるかに及ばないところです。



界面張力対バルク濃度
画像提供:ユニリーバ社、Rob Groot博士

ユニリーバ社の3人の博士達は、Gibbsの吸着式に従って界面活性剤は界面に移動して、そのプロセスの界面張力を低下させることを見出しました。さらに、界面張力の変化と界面過剰の変化との間の予想される関係で良好な質的一致があることを見出しました。

そのようなシミュレーションにより、ユニリーバの科学者たちは界面活性剤あるいは油／水系に対する変更事項の主要な性質に及ぼす影響を研究することができます。

Organization

Unilever

Products

BIOVIA Materials Studio DPD