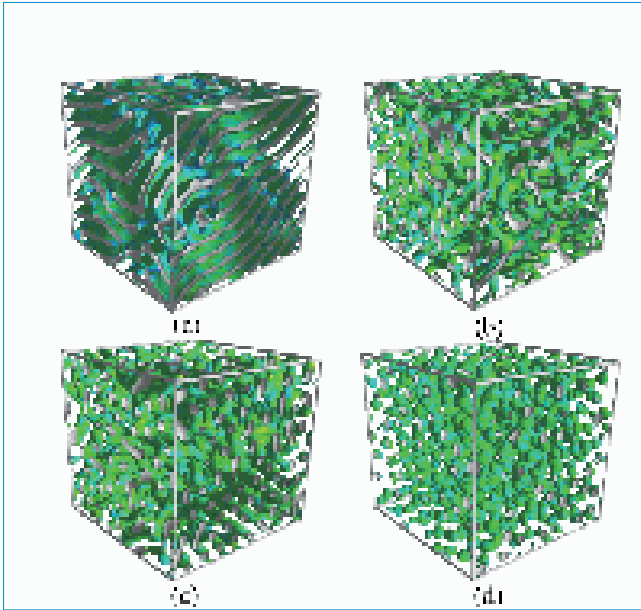


特定の高分子界面活性剤溶液における形態形成

MesoDynプログラムが、フローニンゲン大学でPluronic水溶液のマイクロ相分別動力学に適用されました。4種の異なる相すべてがMesoDynシミュレーションで再現され、実験との優れた一致をみました。



70% (a)、60% (b)、55% (c) および 50% (d) 濃度のプルロニックL64溶液の形態。実験と正確に一致して、これらの形態は、それぞれ、薄板状、共連続型、六角形状、およびミセル状であると判断されます。

界面活性剤分子は途方もないほど様々な構造を取ることができ、最終材料特性はこれらに大きく依存していることがあります。そのような一つの例は、BASFのPluronicのような非イオン性界面活性剤を使用するドラッグデリバリーにあり、ここでは、系がミセル状、六角形、薄板状、または、共連続型形態の一つであるかによって、送達速度が大いに異なることが起ります。

ごく最近、フローニンゲン大学で、MesoDynプログラムが、プルロニック水溶液（乳化剤、安定化剤および湿潤剤としても使用される）のマイクロ相分別動力学に適用されました。

プルロニックL64に関しては、4種の異なる中間相形態が、50~70%の小さい界面活性剤濃度間隔の中に存在します。それらの欠損および時間的发展を含む、4種の異なる位相すべて（ミセル状、六角形状、共連続相型、および薄板状）がMesoDynシミュレーションで再現され、それは実験と優れた一致を見えています。更なる研究では、同じパラメータを用いて、プルロニック25R4の既知の相挙動が同様にうまく再現されました。

これらは、特定の高分子界面活性剤溶液における形態形成の最初の三次元コンピュータ・シミュレーションです。現在まで、塑性流動性液体中の形態を予測する既存の方法は、分子の特性をマイクロ相挙動に結合させる有効な道を提供しませんでした。MesoDynプログラムは、たとえばブロック長さの変化およびブロック間の化学的相違点のような分子特性の変化を説明する、柔軟な方法を提供します。