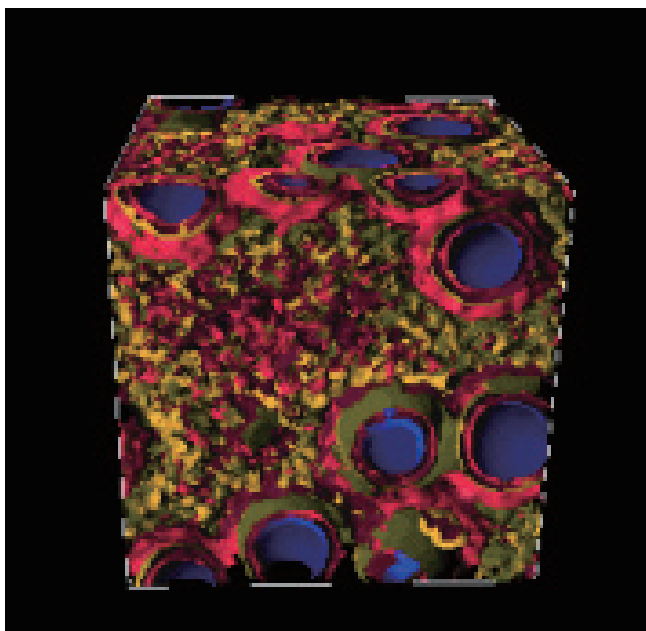


逆ミセルのメソスケールモデリング

BASF社の科学者達は、界面活性剤の挙動を理解するために、メソスケールモデリング法を使用しています。



A2B8 70%溶液の疎水性Bビード(黄色)、親水性Aビード(赤色)と水(青色)のイソ密度面。
BASF社のOlaf Evers博士よりご提供いただいた画像。

界面活性剤分子は、あきれるほどバラエティーに富んだ構造をとることができます。研究者達は、所望の特性を持った製品を作るためにこれらの構造をコントロールする方法を探しています。たとえば、ラテックス粒子を覆ったブロック共重合体が二重の連続した相の中にある場合にだけ、水中の粒子の溶解度が実質的に増大することが知られています。

特に、溶剤キャストのような方法は、所望の構造を得るのに用いられていますが、これは通常何ヶ月もかかります。今では、このような方法をMesoDyn法を使って、コンピュータ上ですばやく探索することができ、また、特定の組合せは、どれが相分離の動力学を大きく増大させることができるのかを求めることができます。この増大の主要因は、わずかに質が劣る溶剤でも本質的にトポロジー規則を取り除いてメソスケール構造の間に挿入できるという点であると分かりました。

特異な、しかし期待されている形態の一つに、逆ミセル形態があります。この形態は、多くの化粧品や食物用の薬剤において大いに歓迎されています。これらは、今、BASFで研究されている系で見られます。：高濃度の水のノニオン界面活性剤(図をご覧ください)。逆ミセル、または水滴が形成され、好ましくない表面積を共有することによって、その自由エネルギーを下げるために一体化します。

Organization

BASF

Products

BIOVIA Materials Studio MesoDyn