

界面活性剤を含む水分子気液界面の 分子動力学シミュレーション

■ 開発者or連絡先

- 菊川豪太, 理化学研究所
- 高木周, 東京大学大学院
- 松本洋一郎, 東京大学大学院

■ 概要

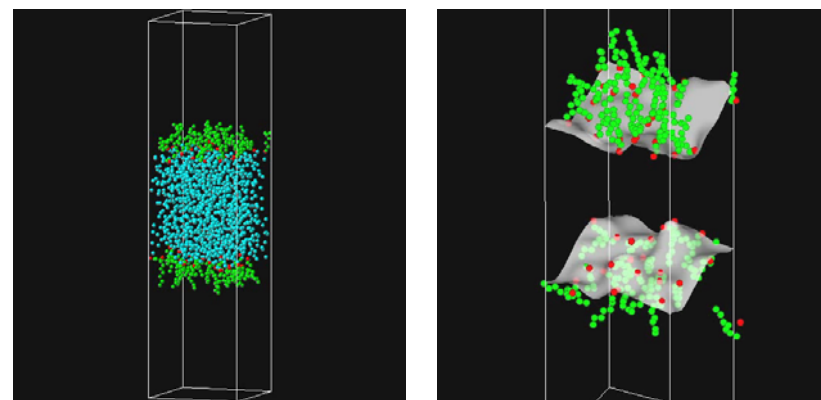
- 水分子気液界面に1-heptanolを含んだ気液平衡系に対する分子動力学シミュレーション
- 微小気泡領域を含むナノバブル系のシミュレーション
- 平面界面を構成した平面系シミュレーション
- ミクロレベルでの界面の抽出

■ アルゴリズム

- 分子動力学法(MD)
- AMBER力場

■ 計算規模

- 分子数 水分子 3861分子,
 1-heptanol 30分子(ナノバブル系)
- 水分子 1024分子,
 1-heptanol 54分子(平面系)
- セルサイズ 52 x 52 x 52 Å(ナノバブル系)
- 30 x 30 x 120 Å(平面系)



■ どんなことが期待されるか？

- 不純物による気液界面の分子構造, 分子挙動に対する影響の解明
- 不純物の界面吸着現象の物理的考察
- 実験測定が困難な界面物理量, 界面物性の評価