

利用事例紹介 14

脂肪酸エステルの流動点の計算

分子動力学法を用いて各温度における比体積(密度の逆数)を計算することで、脂肪酸エステルの流動点の予測を試みました。計算により得られた脂肪酸エステルの比体積の変曲点を流動点と仮定し、流動点の実測値と比較しました。

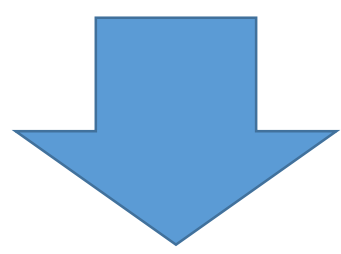
計算フローチャート

モデルの主な設定項目

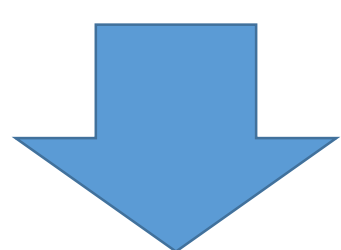
モノマーモデル、ポリマーモデル (今回使用)

全原子モデル、力場: dreiding 400分子

モデル作成

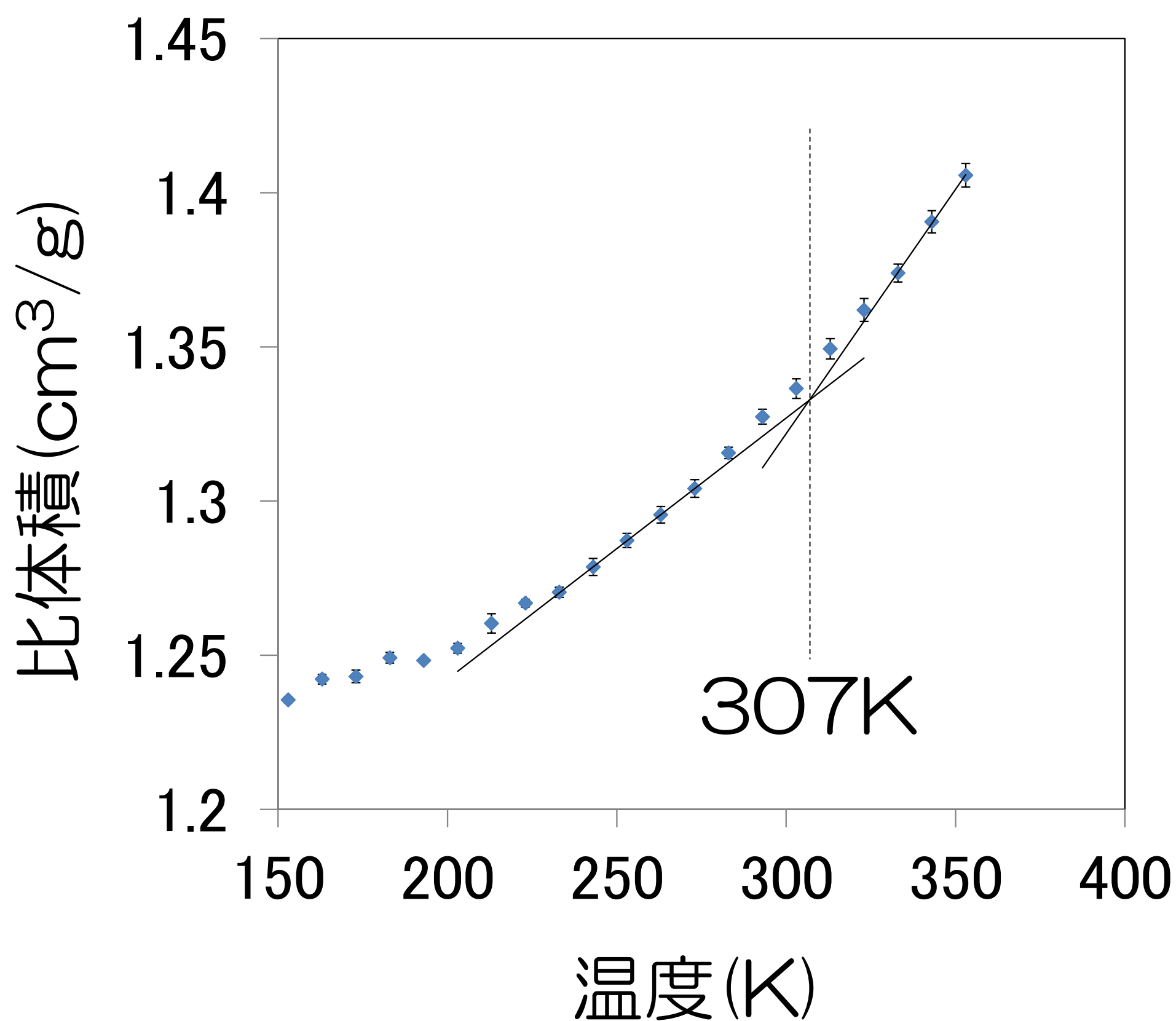


初期配置作製 → 緩和後、圧縮 (温度: 353K)

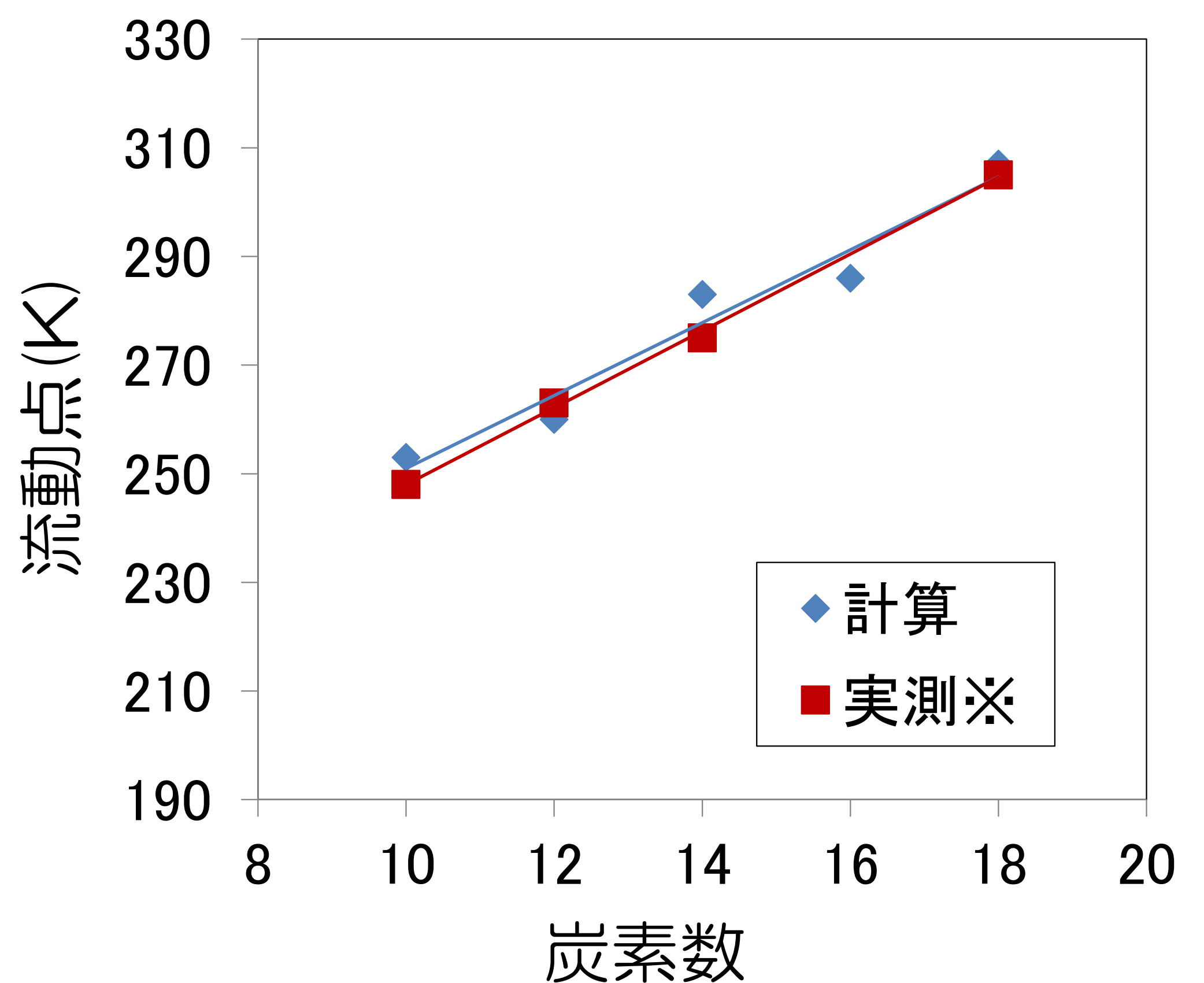


密度計算 (温度: 353K~153K、10K毎)

計算結果



変曲点(流動点)計算結果の例
(ステアリン酸n-ブチル(炭素数:18))



流動点の計算値と実測値
※実測値は築野食品工業(株)より提供

実際の脂肪酸エステルの流動点と同様に炭素の長さに応じた流動点の計算結果が得られました。

本事例のデータは公益財団法人わかやま産業振興財団「平成31年度未来企業育成事業」のもとで取得されたものです。