

# 利用事例紹介 15

## 脂肪酸エステルの粘度の計算

分子動力学法を用いて運動量の流れ替えを行うことで、運動量流束と速度勾配の関係式から、粘度を計算することができます。本事例では、炭素の長さを変えた脂肪酸エステル速度分布から求めた粘度の計算結果を紹介します。

### 計算フローチャート

モデルの主な設定項目

モデル作成

モノマーモデル、ポリマーモデル（今回使用）

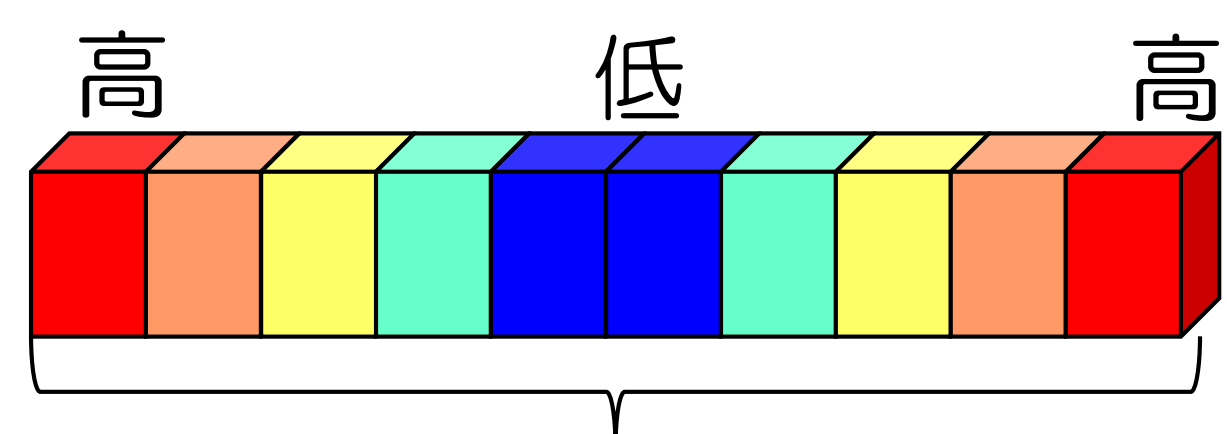
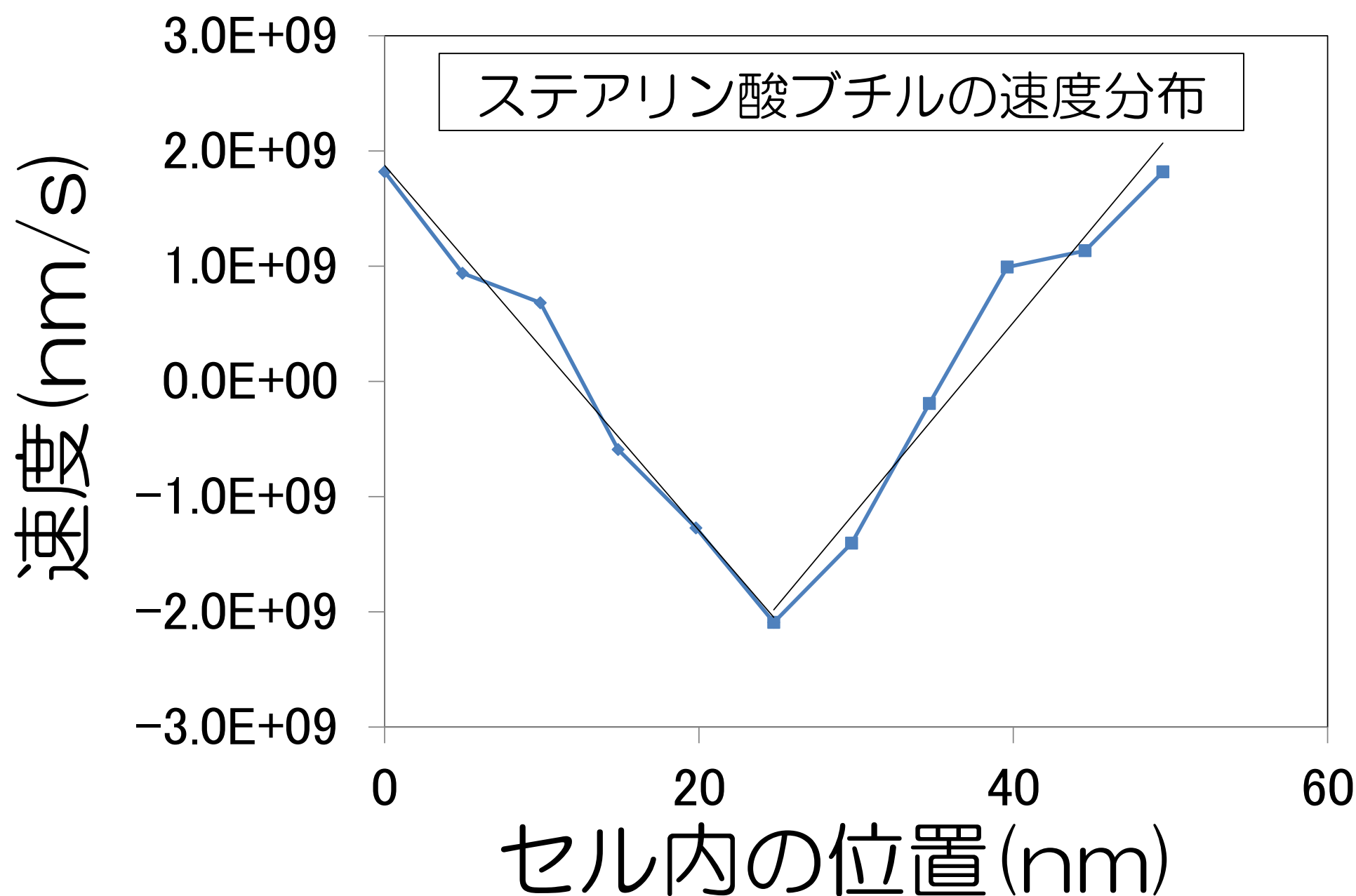
全原子モデル、力場：PCFF

→ 粗視化 1,600~1,900分子(総粒子数:約26000個)

初期配置作製 → 緩和後、圧縮（温度：313K）

粘度計算（温度：313K）

### 計算結果



セル内のエネルギー差のイメージ

粘度=運動量流束/速度勾配

運動量流束： $9.68 \times 10^5$  Pa (=kg·m/(m<sup>2</sup>s<sup>2</sup>))

速度勾配： $1.58 \times 10^8$  s<sup>-1</sup>

粘度：6.11mPa·s

	デカン酸ブチル	ミリスチン酸ブチル	ステアリン酸ブチル
炭素の長さ	10	14	18
流束(Pa)	$9.24 \times 10^5$	$7.96 \times 10^5$	$9.68 \times 10^5$
速度勾配(s <sup>-1</sup> )	$3.96 \times 10^8$	$2.25 \times 10^8$	$1.58 \times 10^8$
粘度(mPa·s) (計算)	2.33	3.41	6.11
粘度(mPa·s) (実測)※	2.22	3.86	6.33

※実測値は築野食品工業(株)より提供

炭素の長さを変えて粘度を計算した結果、実際の脂肪酸エステルの挙動と同様の傾向が得られました。

本事例のデータの一部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。