

P108

石けんを主成分とした泡消火剤の気液界面における分子動力学シミュレーション

(北九市大国際環境工) (正)大河平 紀司*, (学)浦口 大介, (正) 石崎 幸, (部)上江洲 一也

【緒言】

近年、石けんを主成分とした一般火災用の泡消火剤を開発し、現在は林野火災への応用に向け、消火性能に重要な泡安定性の向上を目指し研究を行っている。界面活性剤を主成分とする液体であり、燃焼物自体あるいはその周辺に泡状にして使用する。発泡して可燃物に付着し、その表面を覆うことで酸素の供給を遮断する効果と、水の表面張力を下げて可燃物に迅速に深く浸透することで、水の潜熱を活用した冷却効果と再燃防止効果により、直接消火と防火帯形成の両方に有効である。消火能力の鍵となる泡立ちおよび泡切れは、気液界面の構造によって大きく左右されると考えられる。そこで、気液界面での現象を理解するために分子動力学法 (MD 法) を用いて検討を行った。まずは石けん系泡消火剤の成分であるオレイン酸および라우リン酸 (Fig.1) の気液界面構造に着目し検討した。

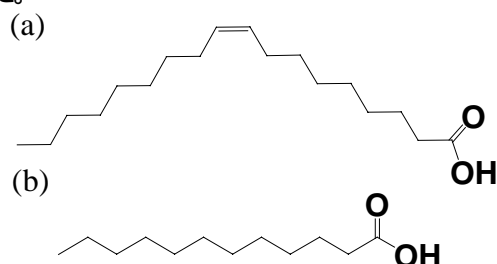


Fig.1 (a)オレイン酸および(b)라우リン酸の化学構造式

【実験条件】

泡消火剤の成分であるオレイン酸および라우リン酸の分子モデルを、分子モデリングソフト Scigress (株式会社 富士通) にて MOPAC AM1 法により構造最適化した。次に構造最適化後の分子モデルを MD シミュレーションソフト eMD² (株式会社インフォグラム) 移動し、電荷を入力した。AMBER 力場である PARM99 パラメータ (J. Wang, P. Cieplak and P.A. Kollman: J. Comput. Chem. 21 (2000) 1049) を使用するにあたり、それぞれの分子に対応したアトムタイプを入力した。水分子は SPCE を使用した。使用するセルは 25 × 20 × 40 の長方形とし、実際の実験条件と存在比を一致させ、水分子と界面を作るようにオレイン酸 5 分子、라우リン酸 4 分子、水分子を約 200 個配置した。カウンターカチオンとして 9

個のナトリウムイオンを水分子とオレイン酸、および라우リン酸の間に配置した。

上記のシミュレーションは全て SHAKE 法を使用し、刻み幅 (Time Step) は 1.5fs、NVT アンサンブル、温度 298K で行った。

【結果と考察】

Fig.2 に 500ps 後のスナップショットを示す。

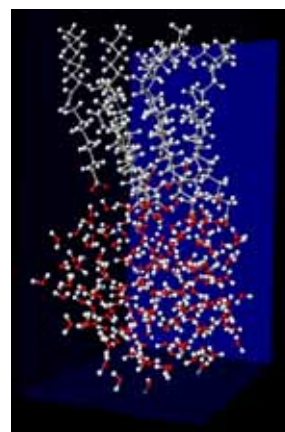


Fig.2 500ps 後のスナップショット

気液界面の構造は若干崩れていたが、ほぼ全てのナトリウムイオンを介し安定に保たれていた。おそらく、オレイン酸および라우リン酸と水分子の間に存在するカウンターカチオンが、界面構造の維持に大きな役割を果たしていると考えられる。

【今後の展望】

今回は非常に小さなスケールでシミュレーションを行ったが、今後はより大きな系でのシミュレーションを行う。更には泡消火剤に入っているキレート剤を含めた系、およびカウンターカチオンの変更、更には合成界面活性剤を含んだ系のシミュレーションを行い、実験結果と比較することで泡安定性および発泡性における影響を考察する。

*TEL&FAX 093-695-3380

E-mail okobira@env.kitakyu-u.ac.jp