

Väitöstiedote

Väitös 12.12.2023

Itsejärjestäytymisen ja adsorption mallinnus bioöljyissä

Väitöskirjan nimi	Computational modelling of adsorption and aggregation in bio oils at multiple length scales
Väitöskirjan sisältö	Bioöljyissä pinta-aktiiviset molekyylit, mukaan lukien erilaiset lipidit, itsejärjestäytyvät spontaanisesti monimuotoisiksi rakenteiksi. Nämä rakenteet, sekä pinta-aktiivisten molekyyliden vuorovaikutus neste – kiinteä aine raja-pinnassa vaikuttavat bioöljyjen virtaus- ja viskositeettiominaisuuksiin ja kemialliseen reaktiivisuuteen, jotka ovat tärkeitä öljyjen jatkojalostuksen kannalta. Väitöskirjassa mallinnetaan monimuotoisin menetelmin ja eri mittaskaaloilla lipidien ja muiden bioöljyille tyypillisten epäpuhtauksien itsejärjestäytymistä ja adsorptiota mineraali- ja mallisavipinnoille. Työssä hyödynnetään monimuotoisesti atomiskaalan molekyyliidynamiikka- ja mesoskaalan dissipatiivinen partikkelidynamiikkasimulaatioita, sekä termodynaamisen tasapainotilan mallinnusta. Työssä esitetään atomitasoisen vuorovaikutusten, kuten vety-sidosten, sähköstaattisten vuorovaikutusten, ja molekyylin atomitasoisen rakenteen vaikutusta adsorptioon ja itsejärjestäytymiseen. Suuren mittaskaalan adsorptiosimulaatiot luovat kosketuspinnan kokeellisen tutkimusdatan lisätulkintaan ja mahdollistavat pinnan peiton rakenteen muokkaamisen esimerkiksi molekyylin pääryhmän rakenteen, pinnan hydrofiilisyyden ja öljyn vesipitoisuuden funktiona. Väitöskirjassa esitetyt tulokset tarkentavat kuvaa bioöljyissä ja yleisemmin apolaarisissa liuottimissa tapahtuvasta itsejärjestäytymisestä, sekä vuorovaikutuksesta kiinteän pinnan kanssa. Kemian prosessitekniikan kannalta oleellista on tutkittujen bioöljysysteemien ja rakenteiden herkkyys öljyn mahdollisille lisäaineille, kuten vedelle, adsorptiomekanismien ja pinnan rakenteiden monimuotoisuus, sekä öljyn komponenttien erilaiset kilpailuasetykset.
Väitöskirjan ala	Pehmeän aineen mallinnus
Väittelijä ja väittelijän yhteystiedot	Diplomi-insinööri Maisa Ilona Vuorte mais.vuorte@gmail.com
Väitöksen ajankohta	12.12.2023 klo 12
Etäväitöksen osoite	https://aalto.zoom.us/j/65849665956
Paikka	Aalto-yliopiston kauppätieteiden korkeakoulu, Jenny ja Antti Wihurin Rahasto luentosali, Ekonomianaukio 1, Espoo
Vastaväittäjä(t)	Professori Mark Wilson, Durham University, Iso-Britannia
Valvoja	Professori Kari Laasonen, Aalto-yliopiston kemian tekniikan korkeakoulu
Väitöskirjan verkko-osoite	https://aaltodoc.aalto.fi/handle/123456789/51
Avainsanat	käänteismiselli, itsejärjestäytyminen, adsorptio, surfaktantti, mirkoemulsio, bioöljy, molekyylihallinnus