

Väitöstiedote

Väitös 11.11.2022

Simulointeja käänteismisellien käyttäytymiseen vaikuttavista tekijöistä

Väitöskirjan nimi	Molecular Simulations of Reverse Micelles
Väitöskirjan sisältö	<p>Pinta-aktiiviset aineet, kuten saippuat, muodostavat vedessä löyhiä kooltaan nanomittakaavaisia yhteenliittymiä, joita kutsutaan miselleiksi. Misellien muodostuksen kanssa analoginen ilmiö esiintyy orgaanisissa liuottimissa, ja näin syntyneitä rakenteita kutsutaan käänteismiselleiksi. Käänteismisellejä hyödynnetään muun muassa bioteknologiassa ja öljynjalostuksessa liuottamaan normaalisti liukenemattomia aineita. Manipuloimalla käänteismisellien rakennetta voidaan myös liuoksen ominaisuuksiin kuten paksuuteen vaikuttaa. Eri tekijöiden vaikutukset käänteismisellien käyttäytymiseen sekä niiden syntymekanismi tunnetaan kuitenkin vielä verrattain huonosti yksityiskohtien tasolla.</p> <p>Tässä väitöskirjassa tutkittiin simulointien keinoin miten pinta-aktiivisten aineiden rakenne, liuottimen laatu ja liuottimen kosteus vaikuttavat biopohjaisten käänteismisellien käyttäytymiseen ja rakenteeseen. Samalla arvioitiin, kuinka hyvin olemassa olevat mallit soveltuvat pinta-aktiivisten aineiden käyttäytymisen ennustamiseen hiilivety-ympäristössä. Simuloinnit näyttävät, että kosteuden lisääminen edesauttaa käänteismisellien muodostumista sekä kasvattaa niiden keskimääräistä kokoa. Liuottimen vaihtaminen vesihakuisempaan vastaavasti pienentää käänteismisellien kokoa. Lisäksi havaittiin että vesihakuisen pään kokoa kasvattamalla saadaan suurempia käänteismisellejä, ja hiilivety häntiä lisäämällä pienempiä. Simulointien tulosten havaittiin riippuvan käytetystä mallista erityisesti liuottimen ja pinta-aktiivisten aineiden hiilivetyhäntien ja vesihakuisien ryhmien vuorovaikutusten osalta, mutta tuottavan silti hyödyllistä tietoa.</p> <p>Väitöskirjan tulokset auttavat ymmärtämään ja kontrolloimaan pinta-aktiivisten aineiden käyttäytymistä hiilivety-ympäristössä. Lisäksi työn yhteydessä kehitetty yksinkertaistettu liuotinmalli tekee simulointien suorittamisesta nopeampaa.</p>
Väitöskirjan ala	Kemia
Väittelijä ja väittelijän yhteystiedot	Diplomi-insinööri Sampsa Vierros sampsa.vierros@aalto.fi
Väitöksen ajankohta	11.11.2022 klo 12
Etäväitöksen osoite	
Paikka	Aalto-yliopiston kemian tekniikan korkeakoulu, Komppa-Sali (KE2), Kemistintie 1, (sisäänkäynti Biologinkujan puolelta pääovesta), Espoo
Vastaväittäjä(t)	Professori Alberto Striolo, University of Oklahoma, USA
Valvoja	Professori Kari Laasonen, Aalto-yliopiston kemian tekniikan korkeakoulu
Väitöskirjan verkko-osoite	https://aaltodoc.aalto.fi/handle/123456789/51
Avainsanat	käänteismisellit, molekyyliidynamiikka, surfaktantti, itsejärjestäytyminen

Press release

Public Defence on 11 Nov 2022

Simulations on factors affecting the behavior of reverse micelles

Title of the doctoral thesis Molecular Simulations of Reverse Micelles

Content of the doctoral thesis Surface active compounds such as soaps form loosely bound nanoscopic aggregates in water called micelles. An analogous process occurs in organic solvents forming so called reverse micelles. Reverse micelles are utilized in biotechnology and oil refining to solubilize otherwise insoluble substances. The solution properties such as viscosity can be influenced by manipulating the structure of reverse micelles. The factors affecting reverse micelle behaviour and the detailed mechanism of their formation is, however, relatively poorly understood.

In this thesis the effect of the chemical structure of the surface active compound, the solvent quality and moisture content on the structure and behaviour of biobased reverse micelles was studied. Concurrently, the suitability of present day models in describing reverse micelles in hydrocarbon media was assessed. The simulations show that moisture promotes the formation of reverse micelles and increases their size. Changing the solvent to a more hydrophilic one, on the other hand, decreases the size of the aggregates. Moreover, it was observed that increasing the size of the hydrophilic head of the surface active compound yields larger reverse micelles, while adding a second tail decreases the size. The results of the simulations were observed to be model dependent, but nevertheless to yield useful information.

The results presented in this thesis help understand and control the behaviour of surface active compounds in hydrocarbon media. In addition, the new simplified solvent model developed enables simulations to be run faster.

Field of the doctoral thesis Chemistry

Doctoral candidate and contact information M.Sc. (Tech.) Sampsa Vierros
sampsa.vierros@aalto.fi

Public defence date and time 11 November 2022 at 12 o'clock (in Finnish time)

Remote defence

Place of public defence Aalto University School of Chemical Engineering, Lecture hall Ke2 (Komppa-Sali), Kemistintie 1, (main door at Biologinkuja) Espoo

Opponent(s) Professor Alberto Striolo, University of Oklahoma, USA

Custos Professor Kari Laasonen, Aalto University School of Chemical Engineering

Link to electronic thesis <https://aaltodoc.aalto.fi/handle/123456789/51>

Keywords reverse micelle, molecular dynamics, surfactant, self-assembly