

## Computersimulation von Tensiden (Teil 1)

Dr. Thomas Engels, Henkel KGaA



Dr. Thomas Engels,  
Jahrgang 1960.  
Chemiestudium an der  
Universität Köln.  
1989 Promotion und  
Eintritt in die Henkel  
KGaA, Düsseldorf,  
Forschung „Physikalische  
Chemie“ (Emulsionen,  
Phasenverhalten, Schaum,  
Computersimulation).

Herr Professor Geiger und ich haben uns die Vorträge über unser Projekt so eingeteilt, daß ich etwas über das „Warum“ und „Wo“ erzähle. **Warum** machen wir Computersimulation? **Wo** sind die Anwendungsfelder, die Projekte, die sich bei uns in der Firma ergeben? Herr Professor Geiger wird dann zum „Was“ und „Wie“ Stellung nehmen. **Was** ist im Einzelnen gemacht worden? **Wie** wurde es gemacht, welche Methoden wurden eingesetzt ?

Die Frage nach dem „Warum“ möchte ich mit folgendem Zitat von Emil Fischer beantworten:

*„Im vorausgegangenen Winter 1890/91 hatte ich mich mit der Aufgabe beschäftigt, die Konfiguration der Zucker aufzuklären, ohne ganz zum Ziel zu gelangen. Da kam mir in Bordighera der Gedanke, die Entscheidung über die Konfiguration der Pentosen durch ihre Beziehung zu den Trioxyglutarsäuren zu treffen. Leider konnte ich wegen Mangel eines Modelles nicht feststellen, wieviel solcher Säuren nach der Theorie möglich seien und ich legte die Frage deshalb Baeyer vor. Er griff solche Dinge mit großer Wärme auf und konstruierte gleich aus Zahnstochern und Brotkügelchen Kohlenstoff-Atome. Aber nach langem Probieren gab auch er die Suche auf, angeblich, weil es ihm zu schwer wurde. Es ist mir erst später in Würzburg durch lange Betrachtung von guten Modellen gelungen, die endgültige Lösung zu finden.“*

An diesem Zitat werden zwei sehr wichtige Dinge deutlich: die Zeiterparnis, die er mit einem guten Modell hätte gewinnen können und die Visualisierung von komplexen Strukturen mit Hilfe von Modellen.

Die Computersimulation ist mittlerweile keine isolierte Simulationstechnik mehr, sondern dank der enorm gestiegenen Rechnerleistungen in den letzten Jahrzehnten zu einer dritten tragenden Säule neben Theorie und Experiment geworden. Die Computer sind so leistungsstark, daß man selbst sehr komplexe Systeme berechnen kann. Wir haben uns deshalb gefragt: Wo können wir diese neue Technik einsetzen? In unserem Projekt „Computersimulationen von Tensideigenschaften und Grenzflächen“ (Abbildung 1) wollen wir eine Vielzahl einzelner Fragestellungen betrachten. Wir stehen dabei ganz am Anfang und bearbeiten natürlich nicht alle Projekte gleichzeitig mit einer hohen Priorität. Wir konzentrieren uns zunächst auf das Dringende und das Machbare und stellen heute einen Teil vor, der eine spezielle Anwendung herausgreift. Das ganze Projekt befaßt sich mit Grenzflächenphänomenen und Tensiden. Wir können das Projekt willkürlich unterteilen in drei Äste: binäre Systeme, also Tensid/Wasser, ternäre komplexere Systeme, also Öl/Tensid/Wasser (Emulsionen) und Grenzfläche fest/flüssig. Man sollte dabei nicht vergessen, daß hinter diesen drei Ästen konkrete Produkte stehen, die durch Computersimulationen verbessert oder vielleicht sogar erst möglich gemacht werden.

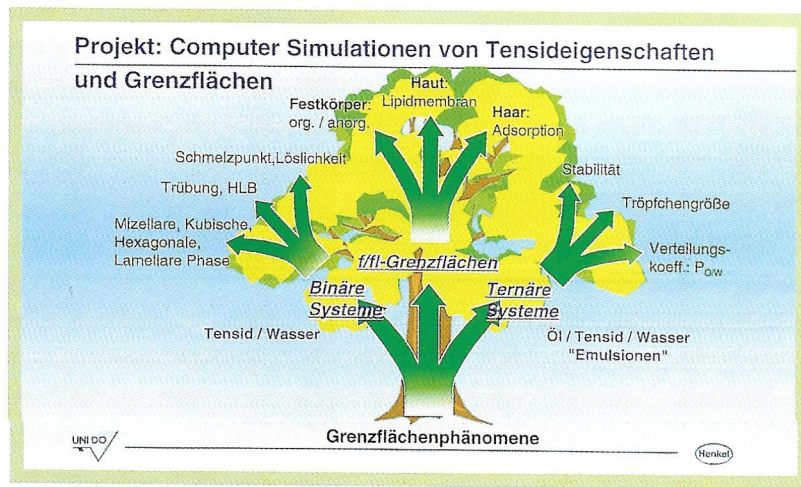


Abbildung 1  
Computersimulationen können bei der Beantwortung zahlreicher Fragestellungen helfen

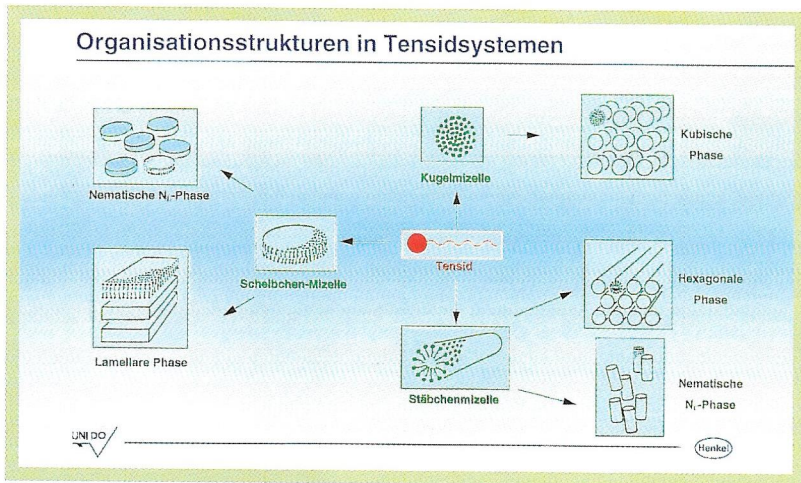


Abbildung 2

Tenside zeigen als Funktion der Konzentration ein sehr komplexes Phasenverhalten

Tenside sind Systeme mit einem sehr komplexen Phasenverhalten. In kleiner Konzentration liegt ein Einzeltensid in Wasser monomer gelöst vor. Wenn man die Konzentration schrittweise erhöht, dann organisiert sich das System auf recht komplexe Art und Weise (Abbildung 2). Es bilden sich zunächst die Primäraggregate: Kugelmizellen, Scheibchenmizellen oder Stäbchenmizellen. Natürlich sind mit der Bildung von Primäraggregaten auch Eigenschaftsänderungen verbunden. Wenn man die Konzentration weiter erhöht, erreicht man höhere Aggregationsstufen. Es bilden sich Sekundärstrukturen aus wie zum Beispiel kubische Phasen, hexagonale Phasen, lamellare Phasen oder einige Spezialphasen.

Konkret heißt das: Wenn man ein mizellares Produkt haben möchte – z. B. eine niedrigviskose, schäumende Lösung – dann kann man bei ganz leichten Änderungen, etwa in der Konzentration, in andere Phasen mit ganz anderen als den gewünschten Eigenschaften hineinrutschen. Da unterschiedliche Eigenschaftsprofile im Phasendiagramm nicht sehr weit voneinander entfernt liegen, muß man alle diese Eigenschaften kennen und gezielt beeinflussen können, um das Produkt zu optimieren. Man braucht hier ein grundlegendes Verständnis der Systeme und wir denken, daß uns hier Computersimulationen weiterhelfen können.

Man kann sich natürlich fragen, ob sich bei den Produkten des täglichen Bedarfs solche Simulationen überhaupt lohnen. Denn Simulationen sind sehr zeitaufwendig und kostenintensiv. Andererseits steigen die Anforderungen an die Leistungen der Produkte ständig, dies umso mehr, je stärker man sich vom Konkurrenten differenzieren möchte. Aber wenn man Hochleistungsprodukte anbieten will, und das wollen wir, dann handelt es sich dabei um komplexe Systeme, die man verstehen und letztlich auch beherrschen muß. Und deshalb nutzen wir jede Möglichkeit, etwas über die Systeme zu lernen.

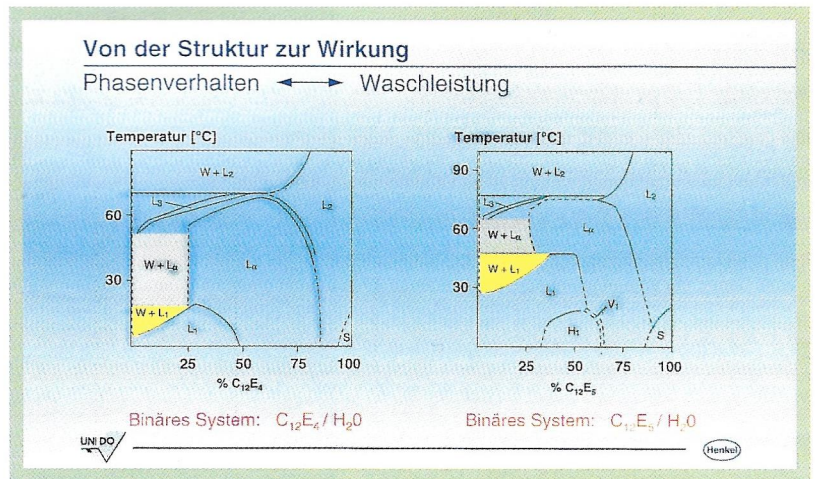


Abbildung 3  
Nichtionische Tenside (z. B. Fettalkoholethoxylate in Wasser) zeigen bei Temperatur- und Konzentrationsveränderungen ein komplexes Phasenverhalten, wobei die Phasen mit der Waschleistung korreliert sind. Das sogenannte Entmischungsgebiet ( $W+L_1$ ) ist in der Abbildung gelb markiert.

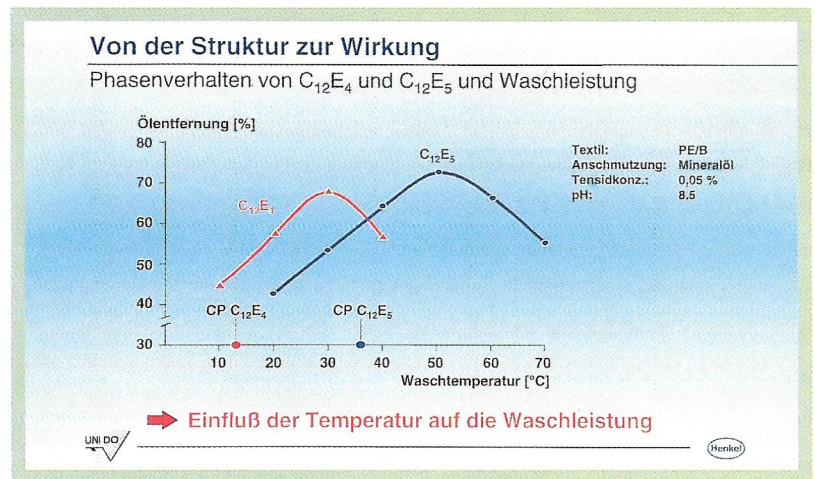


Abbildung 4  
Die Lage des Cloud-points korreliert mit der Waschleistung. Die Abbildung zeigt das Beispiel eines binären Systems, dessen Waschleistung von der Lage der Cloud-points abhängt.

Ich möchte dies an einem Beispiel aus dem Waschmittelbereich verdeutlichen. Der Schlüssel für den Erfolg eines Waschmittels ist die Beantwortung der Frage: Wie komme ich von einer Struktur oder Zusammensetzung zu der gewünschten Wirkung?

Wenn man ein ganz einfaches System nimmt, etwa Fettalkoholethoxylat in Wasser, also ein nichtionisches Tensid, und verändert Konzentration und Temperatur, dann beobachtet man ein komplexes Phasenverhalten (Abbildung 3). Hierbei sind die Phasen mit der Waschleistung korreliert. Wenn man nur eine Ethylenoxideinheit hinzufügt, dann ändert sich das Phasenverhalten sehr stark. Man trifft zwar die gleichen Phasen wieder (lamellare Phase  $L_{\alpha}$ , hexagonale Phase  $H_1$ , mizellare Phase  $L_1$ ) und erkennt auch noch die Verwandtschaft. Dennoch: Der Unterschied ist sehr deutlich, und dies nur durch eine kleine zusätzliche Einheit.

Betrachtet man das sogenannte Entmischungsgebiet ( $W+L_1$ ) (in der Abbildung 3 gelb markiert), so erkennt man folgendes: Wenn man bei einer mizellaren Lösung  $L_1$  mit einer niedrigen Konzentration, wie sie in der Waschflotte vorkommt, die Temperatur erhöht, so entmischt sich eine vollkommen klare Lösung völlig unerwartet in zwei Phasen. Man würde eigentlich erwarten, daß mit

höherer Temperatur die Löslichkeit des Tensides zunimmt. In diesem Fall ist es genau umgekehrt. Bei einer bestimmten Temperatur erreicht man den sogenannten „Cloud-point“, also den Punkt, an dem bei gleichbleibender Konzentration und steigender Temperatur das Tensid „ausfällt“. Die Lösung wird trübe.

Die Lage des Cloud-points ist für die Waschleistung ein entscheidender Punkt, denn die Waschleistung korreliert mit der Existenz des Cloud-points. Abbildung 4 zeigt diese Korrelation am Beispiel eines binären Systems, dessen Waschleistung (in diesem Fall war es die Mineralölentfernung) von der Lage der Cloud-points abhängt. Es handelt sich hier um ein einfaches System, in dem man wirklich nur das nichtionische Tensid in Wasser hat.

Deshalb ist auch die Ölentfernung kleiner als 100 Prozent. Man erkennt ein Maximum der Ölentfernung für  $C_{12}E_4$  bei ungefähr 30 °C. Der Cloud-point liegt ca. 15 °C niedriger. Das heißt, bei 30 °C ist man direkt im Entmischungsgebiet. Wenn man jetzt auf  $C_{12}E_5$  übergeht, hat man das Maximum bei 50 °C und ebenfalls wieder 15 °C vorher die Cloud-point-artige Entmischung des Systems. Das heißt, wir haben hier eine strenge Korrelation. Offensichtlich erreicht man ein ideales Waschverhalten, wenn man genau in diese Mischungslücke hineinsteuert. Nur, wie kommt man gezielt dorthin? Hierüber wollen wir Informationen mit Hilfe der Computersimulation gewinnen.

Man könnte jetzt die Systeme experimentell vermessen und sich damit zufrieden geben. Aber, was kann uns das Experiment eigentlich sagen? Das Experiment sagt uns, welche Eigenschaften de facto vorhanden sind. Über die molekularen Vorgänge kann man dagegen nur mit hohem Aufwand etwas lernen.

## Phasenverhalten und Grenzflächenspannung von $H_2O$ / Tetradecan / $C_{12}E_5$ -Mischungen

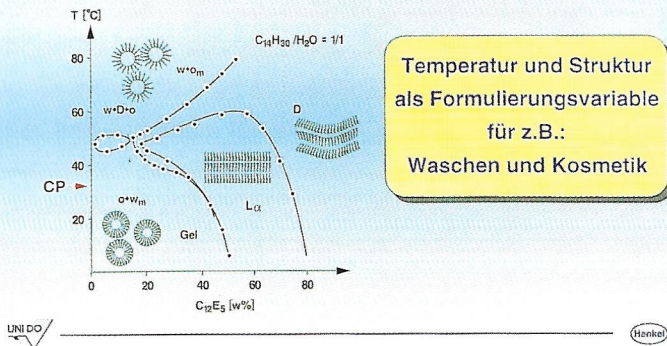


Abbildung 5  
Ternäres System: Wasser / Tetradecan /  $C_{12}E_5$ -Mischungen. Der Cloud-point liegt bei etwa 35 °C. Formulierungsvariable sind Temperatur und Struktur, die gezielt verändert werden, um das System in die gewünschte Richtung zu bringen.

## Von der Struktur zur Wirkung

Phasenverhalten binärer Systeme des Typs: Nichtionisches Tensid (Ethoxyolat) /  $H_2O$

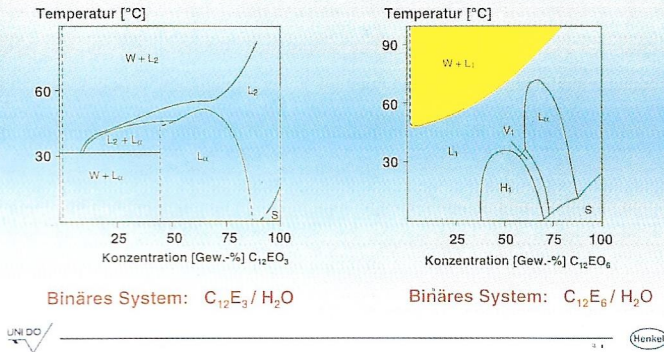


Abbildung 6  
Untersuchung des Cloud-Point-Phänomens: Temperaturabhängige Trübung eines binären System (nichtionisches Tensid in Wasser)

In Abbildung 5 sieht man ein ideales System. Das ideale Feld, in dem man das Produkt positionieren möchte, ist gelb gezeichnet. Bei etwa 35 °C hat man den Cloud-point und darum herum sind Phasen mit sehr komplexen Strukturen, die man verwendet, um das System zu steuern. Wir haben also die Formulierungsvariablen Temperatur und Struktur, die wir gezielt verändern, um unser System in die gewünschte Richtung zu bringen. Die gleichen Fragestellungen gelten übrigens auch für die Kosmetik. Hier hat man ähnliche Systeme, meist Öl-in-Wasser oder Wasser-in-Öl Systeme.

Auch hier hat man lamellare Systeme und man kann die gleichen Gesetzmäßigkeiten auch auf kosmetische Systeme übertragen oder auf verwandte Systeme. Zum Beispiel auf all diejenigen Systeme, die man in Abbildung 1 sieht.

Ich möchte nun, um auf den Teil von Herrn Prof. Geiger überzuleiten, den binären Pfad des Baumes herausgreifen (Abbildung 1). Wir sehen uns bei einem binären System, einem nicht ionischen Tensid in Wasser, die temperaturabhängige Trübung, das heißt das Cloud-point-Phänomen, an.

Im Einzelnen wurden zwei Systeme untersucht (Abbildung 6):

$C_{12}E_3$ , ein Tensid mit einer  $C_{12}$ -er Alkylkette mit drei Ethylenoxid-Einheiten in Wasser. Hier sieht man keine Entmischung.

Bei einem verwandten Tensid,  $C_{12}E_6$  mit sechs Ethylenoxid-Einheiten, sieht man dagegen ganz deutlich eine Entmischungslücke.

Damit ist mein Teil des Vortrages beendet und ich schließe mit einem Zitat von Francis Crick, der gesagt hat: „Ein gutes Modell ist sein Gewicht in Gold wert“. Wenn wir das in der Bilanzsumme ausweisen können, dann haben wir unseren Job getan.

## Computersimulation von Tensiden (Teil 2)

Professor Dr. Alfons Geiger, Universität Dortmund

Ich möchte nun über Simulationsrechnungen berichten, deren Ziel es war, die von Herrn Dr. Engels geschilderten Trübungstemperaturen für eine Klasse von Tensiden, den Fettalkoholetoxylenen, vorherzusagen. Diese Trübung wird, wie gezeigt, durch eine Phasenseparation in zwei strukturell sehr ähnliche Phasen hervorgerufen. Die Phasenseparation wiederum ist sehr eng mit dem Optimum der Waschleistung verknüpft.

Phasenseparation wird hervorgerufen durch die Wechselwirkung zwischen den Konstituenten in der Lösung. Um quantitative Antworten über die Lage des Trübungspunktes zu bekommen, mußten wir bei den heutigen Rechenleistungen zunächst die Komplexität des Systems und der Fragestellung reduzieren.

Wir gehen zunächst von einem System aus, dessen Eigenschaften beherrscht werden durch die Wechselwirkung von Mizellen. Diese Mizellen ihrerseits entstehen durch die Wechselwirkung zwischen einzelnen Tensidmolekülen. Die Tensidmolekül-Wechselwirkung wiederum wird durch die Hydratation, also durch die Wechselwirkung dieser Moleküle mit dem umgebenen Wasser hervorgerufen. Wir haben deshalb zunächst damit begonnen, ein einzelnes Tensid-Molekül in wässriger Umgebung zu untersuchen, also Struktur und Thermo-



Prof. Dr. Alfons Geiger, Jahrgang 1944. Physikstudium an den Universitäten von Freiburg und Karlsruhe. 1973 Promotion. 1981 Habilitation in Karlsruhe und 1982 Umhabilitation RWTH Aachen. 1981 bis 1985 Privatdozent und 1985 bis 1987 Professor für Physikalische Chemie an der RWTH Aachen. Seit 1987 Professor für Physikalische Chemie an der Universität Dortmund.

dynamik der Hydratation zu studieren. Im nächsten Schritt haben wir die Wechselwirkung mit einem hydrophoben Testteilchen, einem Edelgasatom, untersucht. Aufgrund dieser Untersuchungen konnten wir diesen Phasenseparationspunkt dann extrapolieren.

Bei der untersuchten Klasse von Tensiden, den Fettalkoholethoxylaten, handelt es sich um amphiphile Moleküle. Sie haben also sowohl einen hydrophilen, das Wasser liebenden, als auch einen hydrophoben Teil, der eine sehr schlechte Wasserlöslichkeit zeigt (Abbildung 1). Die Lösungseigenschaft des Gesamtmoleküls wird durch eine Balance zwischen diesen beiden Molekülteilen hervorgerufen. Diese Balance wird ihrerseits von der Kettenlänge beeinflusst. Zusätzlich werden die Lösungseigenschaften bei einem gegebenen Molekül mit festgelegter Kettenlänge durch die Temperatur verändert. Dies beruht darauf, daß die Hydrophobie und die Hydrophilie unterschiedliche Temperaturabhängigkeiten haben.

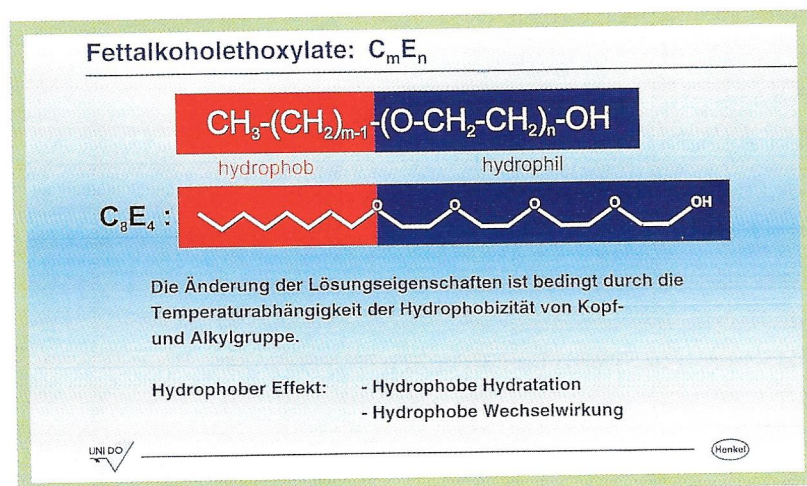
Bevor ich dies näher erläutere, möchte ich zunächst unsere Untersuchungsmethode vorstellen. Sie läßt sich vereinfacht so charakterisieren:

Wir benutzen einen Rechner, mit dessen Hilfe wir einen Film herstellen, der uns einen mikroskopischen Ausschnitt aus unserer Lösung zeigt. In diesem Ausschnitt können wir die Molekülbewegungen über einen gewissen Zeitraum verfolgen. Man könnte auch

sagen, wir benutzen den Rechner als Supermikroskop mit Superzeitlupenkamera. In Wahrheit ist dieser Film ein Datenfile, in dem die Koordinaten und Geschwindigkeiten aller Moleküle gespeichert sind. Wir können diesen Film dazu benutzen, um mit Hilfe der statistischen Mechanik bzw. der statistischen Thermodynamik die uns interessierenden Systemeigenschaften zu berechnen.

Abbildung 1

Fettalkoholethoxylate sind amphiphile Moleküle, deren Lösungseigenschaften durch die Kettenlänge bestimmt werden.



Die Herstellung dieses Filmes geschieht folgendermaßen: Ausgehend von einer momentanen Molekülanordnung werden die Kräfte berechnet, die auf jedes einzelne Molekül von allen anderen ausgeübt werden. Wenn man diese Kräfte hat, setzt man sie in die Newton'schen Bewegungsgleichungen ein und berechnet die nächsten Positionen und Geschwindigkeiten. Dies wiederholt man nun im Computer hunderttausendmal, 1 Million mal. Wenn zwischen zwei solchen Bildern etwa eine Femtosekunde liegt, hat man nach einer Million Wiederholungen einen Film von der Länge einer Nanosekunde. Dies ist der Zeitraum, in dem in normalen Flüssigkeiten mit normalen Viskositäten das Interessanteste

schon passiert ist. (Anmerkung: Zur Illustration wurde an dieser Stelle eine entsprechende Videosequenz vorgeführt.)

Abbildung 2 gibt ein erstes Auswertungsergebnis wieder. Die dargestellte Paarverteilungsfunktion zeigt, daß mit steigender Temperatur die Tendenz zur hydrophoben Assoziation zunimmt. Um diese zu berechnen, fügen wir zu einem Tensid-Molekül in wäßriger Umgebung ein Neon-Atom als hydrophobes Testteilchen hinzu und beobachten, mit welcher Wahrscheinlichkeit man das Neon-Atom wo in der Umgebung findet. Man erkennt, daß das hydrophobe Testteilchen sich bevorzugt in der Umgebung der hydrophoben Alkylketten aufhält. Zudem, und das ist noch

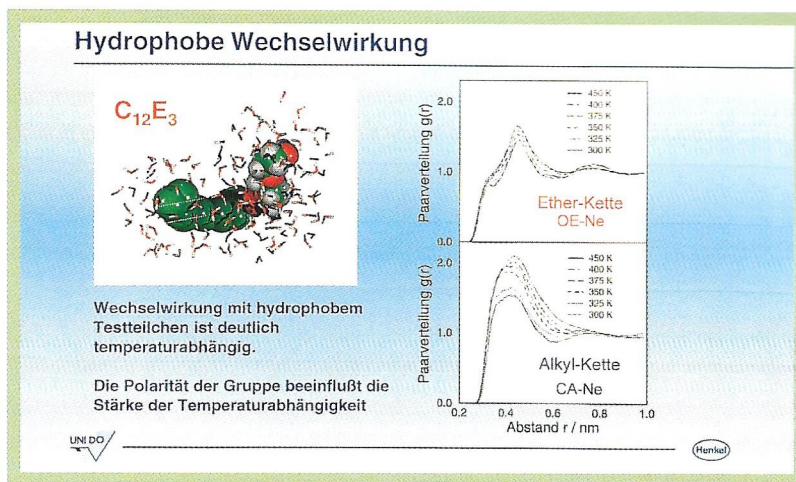


Abbildung 2

Die hydrophobe Wechselwirkung der Testteilchen ist stark temperaturabhängig

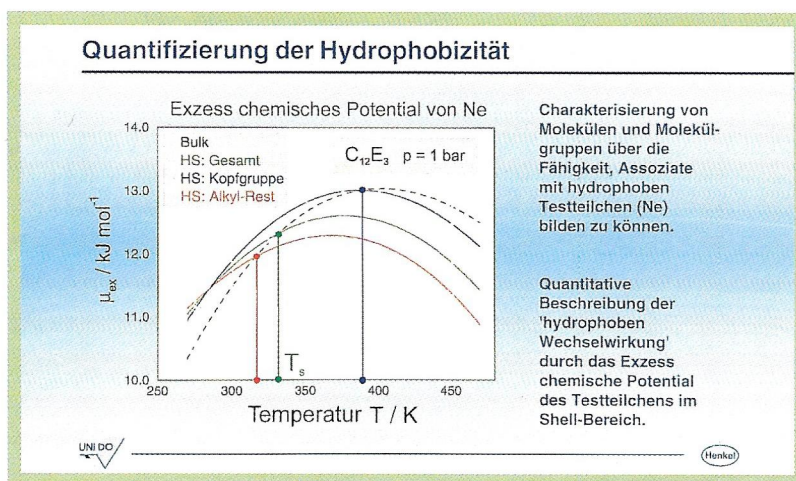


Abbildung 3

Thermodynamische Quantifizierung des Assoziationsverhaltens

wichtiger, nimmt wie gesagt das Assoziationsverhalten mit steigender Temperatur zu. Ein ähnlicher Effekt ist auch für den hydrophilen Teil zu beobachten, allerdings weniger stark. Wir können also bei höherer Temperatur insgesamt mit einer stark erhöhten Tendenz zur hydrophoben Assoziation rechnen.

Die Video-Sequenz zeigte ein entsprechendes Beispiel: Wenn wir in unserem simulierten System mit einem einzelnen Tensid-Molekül die Temperatur auf 450 Kelvin erhöhen, nimmt dessen Hydrophobie zu. Das Molekül möchte dann mit anderen Molekülen aggregieren. Da aber nur ein einziges Molekül vorhanden ist, aggregiert es mit sich selbst,

d. h. es fängt an zu knäulen und aus dem gestreckten Molekül bei tiefer Temperatur wird durch Temperaturerhöhung ein geknäultes Molekül.

Um das Assoziationsverhalten thermodynamisch zu quantifizieren, haben wir das Exzess-chemische Potential des Neons einmal im Wasser weit weg von dem Tensidmolekül (Bulk, unterbrochene schwarze Linie) und einmal in der Hydrathülle des Tensidmoleküls (Shell, grüne Linie) berechnet (Abbildung 3). Man erkennt, daß sich diese beiden Kurven bei der Temperatur  $T_S$  schneiden. Das Testteilchen hält sich bevorzugt in der Umgebung mit niedrigem chemischen Potential auf. Bei tiefen Temperaturen wird es sich also eher

entfernt vom Tensidmolekül aufhalten, bei hohen Temperaturen dagegen in der Hydrathülle des Tensids. Das bedeutet, daß wir bei höherer Temperatur ein verstärktes Assoziationsverhalten aufgrund hydrophober Wechselwirkungen erwarten dürfen. Das durch die grüne Kurve dargestellte mittlere chemische Potential in der Hydrathülle ist natürlich ein gewichteter Mittelwert aus den Beiträgen der hydrophilen Kopfgruppe (blau) und des hydrophoben Alkylrests (rot). Man erkennt, daß die Assoziation am hydrophoben Teil schon bei tieferen Temperaturen beginnt, während der hydrophile Teil sich eher wie das Bulk-Wasser verhält.

Die Schnittpunkttemperatur  $T_S$  korreliert mit der gesuchten Trübungstemperatur. Wenn man also den Trübungspunkt vorhersagen will, muß man diese Schnittpunkttemperatur  $T_S$  von beliebigen Tensiden  $C_nE_m$  vorhersagen können. Das gelingt, wenn man



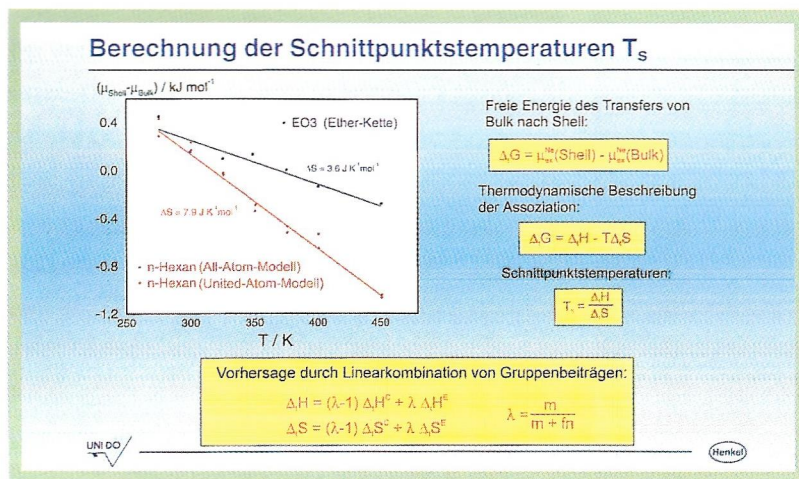


Abbildung 4  
 Berechnung von  
 Schnittpunkttemperaturen  $T_S$

zunächst die Differenzen zwischen dem hydrophoben und dem hydrophilen Teil zu der gestrichelten Kurve anschaut. Diese Differenz, die Freie Energie des Transfers von Bulk nach Shell ( $\mu_{\text{Shell}}^{\text{tr}} - \mu_{\text{Bulk}}^{\text{tr}}$ ) zeigt einen sehr schönen linearen Verlauf (Abbildung 4). Dort, wo diese Geraden die Nulllinie schneiden ist die Schnittpunkttemperatur  $T_S$ . Wenn man nun die Freie Energie in einen enthalpischen und einen entropischen Teil aufteilt, ergibt sich  $T_S$  aus deren Quotienten. Jetzt muß man nur noch diese beiden Anteile, die Transferenthalpie und -entropie, vorhersagen. Das gelingt durch einen Gruppenbeitrags-Ansatz, der diese als gewichtete Mittelwerte der beiden unter

schiedlichen Hydrathüllen (Kopfgruppe E und Alkylrest C) darstellt. Die Gewichtung  $\lambda$  erfolgt über die Kettenlängen  $n$  und  $m$ , wobei der Faktor  $f$  berücksichtigt, daß das Volumen der Hydrathülle der Kopf- bzw. Alkylkette pro Konstitutions-einheit unterschiedlich groß ist.

Zur Bestimmung der fünf Parameter haben wir fünf Simulationen mit unterschiedlichen Tensiden jeweils bei sieben verschiedenen Temperaturen durchgeführt und sie schließlich durch simultane Anpassung an die Simulationsergebnisse erhalten. Wenn wir diese Parameter haben, können wir - sozusagen mit dem Taschenrechner - für jedes beliebige Tensid  $C_nE_m$  die Temperatur  $T_S$  vorhersagen.

Bis zu diesem Punkt haben wir keinen einzigen Anpassungsparameter verwendet und nur die Wechselwirkung mit einem Testteilchen berücksichtigt. Die Mizellenwechselwirkungen fassen wir nun in einem einzigen zusätzlichen Parameter zusammen. Diese Stabilisierungsentropie  $\Delta S_{\text{stab}}$  nutzen wir, um die Korrelation zwischen den berechneten Temperaturen  $T_S$  und den gemessenen Trübungstemperaturen  $T_C$  noch weiter zu verbessern. Dabei haben wir festgestellt, daß die Stabilisierungsentropie nur von der Differenz der Kettenlängen ( $m - n$ ) abhängt.

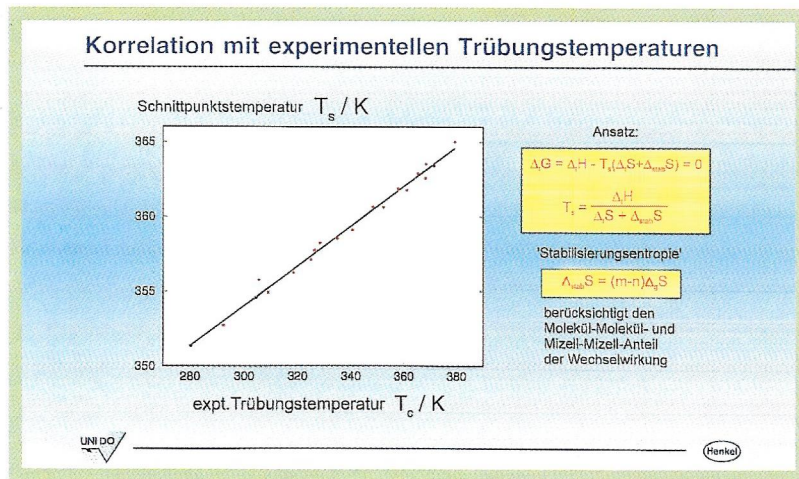


Abbildung 5

Zusammenfassung  
der Ergebnisse:  
Bei Auftragung der  
berechneten

Schnittpunkttemperatur  $T_S$   
gegen die experimentell  
ermittelte

Trübungstemperatur  $T_C$   
erkennt man  
eine hohe Korrelation.

In Abbildung 5 sind die Ergebnisse zusammengefasst. In der Abbildung wurde die nach unserer Formel berechnete Schnittpunkttemperatur  $T_S$  gegen die experimentell ermittelte Trübungstemperatur  $T_C$  aufgetragen. Man erkennt eine hohe Korrelation. Wir können also jetzt mit relativ guter Genauigkeit für ein beliebiges Tensid aus der Gruppe der Fettalkohol-ethoxylate die Trübungstemperatur, die ihrerseits streng korreliert ist mit dem Optimum der Waschleistung, berechnen.

Lassen Sie mich an dieser Stelle ein Resümee ziehen:

Ich habe gezeigt, daß man mit Simulationsrechnungen die Trübungstemperaturen von nichtionischen Tensiden mit hoher Genauigkeit quantitativ vorhersagen kann.

Zudem ist es möglich, das Aggregationsverhalten von Tensidmolekülen in Wasser, also Mizellbildung oder Solubilisierung, zu berechnen.

Das komplexe Phasenverhalten von Tensiden kann heute qualitativ wiedergegeben werden. Hierfür gibt es statistisch-thermodynamische Modellrechnungen, die allerdings auf sehr einfachen Modellannahmen über die Wechselwirkungen beruhen.

Für die Zukunft erwarten wir, durch Simulationsrechnungen der von mir vorgestellten Art auch eine verbesserte Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen Molekülaggregaten zu erhalten und damit zu quantitativen Vorhersagen des Phasenverhaltens zu kommen. Quantitative Aussagen wären wiederum für die gezielte Planung der Eigenschaften von Kosmetika und Waschmitteln wichtig.

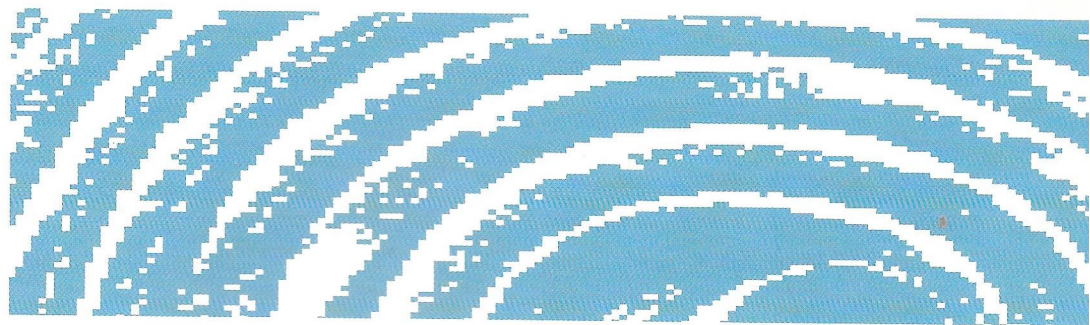
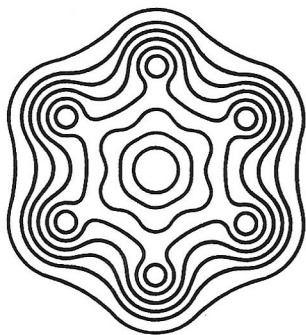


# Von der Invention zur Innovation

Kooperation

zwischen

Wissenschaft und Wirtschaft



Publikationen zum Symposium des Fonds der Chemischen Industrie am 6. Mai 1998 in Köln

# *Inhalt*

4

## **Eröffnungsansprache**

Prof. Dr. Heribert Offermanns, Vorsitzender des  
Kuratoriums des Fonds der Chemischen Industrie

6

## **Vom Molekül zum Hochleistungswerkstoff – neuartige keramische Verstärkungsfasern aus molekularen Vorläufern**

Teil 1: Prof. Dr. Martin Jansen, MPI Stuttgart

Teil 2: Dr. Hans-Peter Baldus, Bayer AG

16

## **Computersimulation von Tensiden**

Teil 1: Dr. Thomas Engels, Henkel KGaA

Teil 2: Prof. Dr. Alfons Geiger, Universität Dortmund

26

## **Kunststoff-Nanocomposite**

Teil 1: Prof. Dr. Rolf Mülhaupt, Universität Freiburg

Teil 2: Dr. Thomas Engelhardt, Süd-Chemie AG

38

## **Miltefosin – Kooperation am Beispiel der Tumorthherapie und Leishmaniasis-Therapie**

Teil 1: Prof. Dr. Jürgen Engel, ASTA Medica AG

Teil 2: Prof. Dr. Clemens Unger, Universität Freiburg

48

## **Intelligenter Pflanzenschutz – die Natur macht's vor**

Teil 1: Prof. Dr. Wolfgang Steglich, Universität München

Teil 2: Dr. Hubert Sauter, BASF AG