

プロセス条件の相分離への影響

フローニンゲン大学は、単純な一定の剪断の元でのポリマー融体と溶液におけるグローバルな配列効果を計算するために、BIOVIAのMesoDynメソスケールモデリングプログラムを使用しています。

一定剪断の元での55%プルロニックL64水溶液の形態を發展。実験と同じで、剪断の面に垂直な1つの格子ベクトルを持った六方格子を形成します。

科学者は、何世紀もの間、材料特性はプロセス条件と同じくらいに化学組成に依存することを知っていましたが、彼らは、プロセッシングどのように、結果として得られる材料に影響を与えるかについて正確に理解し始めたところです。

今まで、プロセッシング条件や組成から材料特性を予測する方法が存在しなかったため、剪断速度や剪断履歴のような正しい条件を見つけることは、常に試行錯誤のプロセスでした。そして今日、BIOVIAの新しいMesoDynコードが、外部から与えられた流動場の中の複雑な液体の微小相分離を予測する方法を提供します。

フローニンゲン大学は、MesoDynメソスケールモデリングプログラムを使って、単純な一定の剪断の元でのポリマー融体と溶液におけるグローバルな配列効果を計算しました。A-Bジブロック共重合体のモデル系と特定のプルロニックL64水溶液の六方相のいずれに対しても、実験的に得られた最も安定な相が見つかりました。

Organization

University of Groningen

Products

BIOVIA Materials Studio MesoDyn

