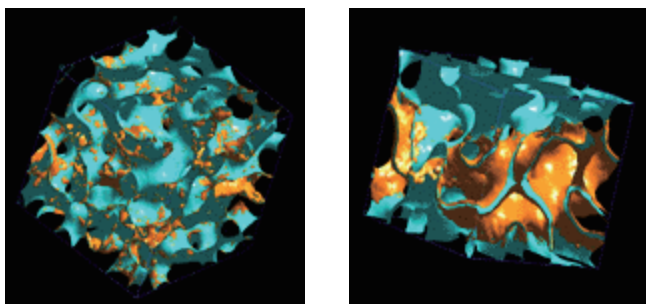


## ポリマーブレンド相溶化剤

BASF 社の研究者は、濃密なポリマーブレンドの動力学をシミュレーションするために MesoDyn コードを使用して、ポリスチレン-ポリイソプレン系の弱い領域の所在を解明することに成功しました。



これらの図は、相溶化剤を加えた混合後のPS / PIポリブレンドの初期段階(左)と後期段階(右)を示しています。青色で表示された表面はブレンドの2つの成分を分けており、オレンジ色の表面は相溶化剤が中濃度ないし高濃度の領域を表しています。相溶化剤の好ましくない相分離、いわゆる「中央相」が存在することがすぐにわかります。

ポリマーブレンドの相溶化は BASF 社にとって重要なビジネス分野です。たとえば、BASF 社の相溶化剤は、高衝撃ポリスチレンの製造に使用されています。BASF 社の Olaf Evers 博士は、相溶過程の基礎にある物理学および化学について、早期に見通しを得るため MesoDyn ソフトウェアを使用しています。

ポリマー系相溶化剤は、界面活性剤に似た挙動を示し、ブレンド内部のホモポリマー間の界面に集まって界面張力を下げると考えられています。しかし、この過程を詳細に解明することは不可能であるとされており、そのことが相溶化剤の設計を阻んでいました。

BASF社で行われているポリマーブレンドの相溶化剤研究の追跡調査で、研究者は、2ブロック共重合体と相溶するブレンドの配合をさらに改良する方法を解明するため、MesoDyn 法を使用しました。

初期の理論的な研究に基づいて[1]、この系の複雑な三成分系相図の特定の領域に、相溶化剤が相溶化剤自身の第三相、もしくは「中央」相に相分離する三相領域が形成されることに着目しました。この相分離はブレンドの性能を弱める恐れがあるため、できればこうした配合は避けるべきです。

MesoDynは、異なる化学種の密度に関する拡散方程式を解くことによって濃密なポリマーブレンドで起きる動力学をシミュレーションします。分子結合は、フローリー・ハギンス相互作用と共にガウス鎖モデルの形で取り入れられます。

MesoDynと理論的推定値とを組み合わせると、ホモポリマーと同じ分子量(約 80,000)の相溶化剤を含むポリスチレン-ポリイソプレン系における中央相の所在を決定することができます。

現在の研究では、相溶化剤がホモポリマーよりずっと大きい(ポリマーマイクロエマルジョン相が発生し易い)場合に起こりうる、より複雑な挙動を調べています[1]。

## Organization

BASF

## Products

BIOVIA Materials Studio MesoDyn

## 参考文献

1. D. Broseta and G.H. Fredrickson, J. Chem. Phys., 93, 2927 (1990)