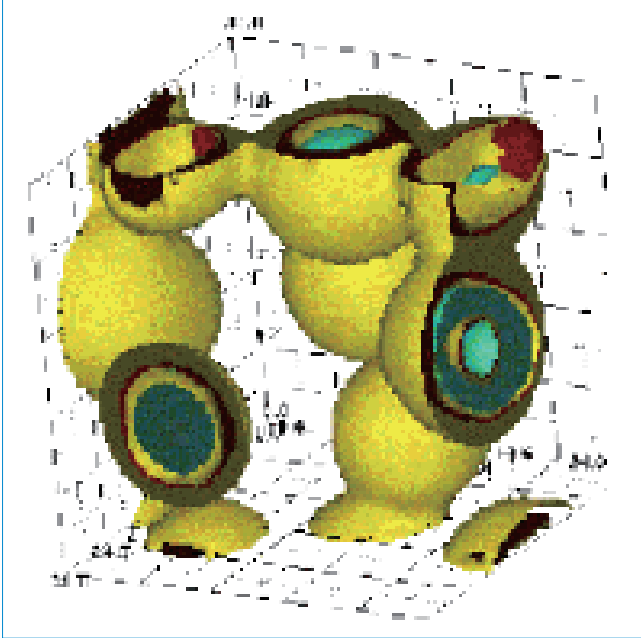


反応性ブレンド

MesoDynプログラムは、フローニンゲン大学において、本当に複雑な材料（この場合、反応ポリマーブレンド）の合理的設計という意欲的な目標に対して適用されました。このシミュレーション結果は、望ましい「シェル」形態をもたらす特別な相分離の動的な組合せ、剪断や反応を明らかにします。



したホモポリマー混合物（最初に90%/10% A8/B8）の三次元シミュレーション。反応にスイッチを入れる前に、28000ステップの剪断が混合物に行われました。それから、剪断が止められ、2500の反応ステップが行われました。図には、反応の最終段階における等密度表面が、未反応Aポリマー（黄色）、AとBの構成物（赤）と反応性生物である（青）のA8B8ジブロックコポリマーとして描かれています。このときの総容積分率は、A8が80.5%、B8が0.5%、A8B8が19%でした。

分子及びマクロスケールモデリングのいずれもがかなりうまくいったにもかかわらず、過去数年間に於いて、多くの材料でメソスケール構造が、大部分の材料特性を決定することがますます明らかになってきました。メソスケール構造とは、通常10~1000nmのサイズのことです。必要な汎用コンピュータ工学ツールが、現在まで無かったにもかかわらず、メソスケールモデリングの工業的妥当性は明らかです。

MesoDynは、メソスケールの柔らかい凝縮材料のコンピューター・シミュレーションに対する汎用法であり、高分子溶液のメソスコピックな相分離の動力学に対する機能的ランゲビン法に基づいています。このアプローチは、化学反応、対流や流動効果、表面や界面のような、化学エンジニアにとって最も重要なトピックスを扱うことができます。高強度ポリスチレン（HIPS）の製造に伴うような反応性混合において、これらの影響の異なった「レンピ」あるいは組合せによって、本質的にメソスケールの形態が変わるために、大きく異なった材料を生成することが可能です。

図は、剪断のかかったポリマーでの二重層液滴の生成の例です。はじめに、2つのホモポリマーの単純な混合物は剪断を受け、細長い液滴を生成します。続いて、剪断を外した後、液滴表面の反応が起こります。剪断の取り外しは、液滴の細長い形が球形になるような緩和を引き起こします。界面

Organization

University of Groningen

Products

BIOVIA Materials Studio MesoDyn

に生成した過剰のポリマーは液滴の内側に入り込み、二重層構造を形成します。

構造が現存している運動であることが知られている他の場合は、複合重合体膜の製造、乳剤重合によるラテックスの製造、生物学的細胞の細胞小器官のプロセスです。これらの結果は、高分子科学者と技術者に、現代的構造材料の特性をますます決定する化学薬品の複雑な相互作用と工程要因の制御を可能にする、定量的メソッドを約束するものです。