

コンピュータシミュレーションによる ポリエーテルイミドUltemの凝集物性の決定

米国ニューヨーク州のゼネラルエレクトリック社およびBIOVIAの研究者は、ポリエーテルイミドの凝集特性を決定するため、BIOVIAのMaterial Studioを使用しました。

ゼネラルエレクトリック社のJ.Stein博士は、「私達は、Ultemをプラスチックおよび金属に接合させるために使用できるシリコン系接着剤を開発する目的で、今回の計算を行いました。Ultemの凝集性質を理解することで、Ultemと改質シリコンの接着を支配する基本的な相互作用を理解することが可能になりました」という意見を寄せています。

Ultemは、多くのエンジニアリング・プラスチックと同様に、実験からは求めることが難しい凝集特性を持つポリエーテルイミドである。分子モデリングにより、他の方法で得られるよりも有益で質の高い情報を得ることができます。

ゼネラルエレクトリック社およびBIOVIAの研究者はUltemとその関連分子の凝集特性を決定するために、BIOVIA社のBIOVIA Materials Studioを使用しました。シミュレーションは、Discoverを使用してAmorphous Cellで構築した周期セルで行われました。力はCOMPASSを使用して計算しました。リピートユニットの低分子フラグメント（N-フェニルフトラルイミド、2,2-ジフェニルプロパンおよびジフェニルエーテル）を研究し、4量体までのオリゴマーをシミュレーションしました。得られた結果を組み合わせるとポリマーの性質を推定しました。

シミュレーションからUltemの溶解度パラメーターとして約22.0MPa^{1/2}の値が求められました。接着剤に応用するにはどのような官能基が、このポリマーと好ましい相互作用をするかを明らかにするため、Ultemといくつかの低分子液（酢酸イソアミル、酢酸n-アミル、トルエン、酢酸ベンジルおよびエチレングリコール）との間の界面相互作用も計算しました。シミュレーションによって得られた結果は、溶解度パラメーターから計算した結果と見事に一致しました。最も重要な点は、すべての計算結果と実験結果とが完全に両立し、矛盾しなかったことでした。

ゼネラルエレクトリック社のJ.Stein博士は、「私達は、Ultemをプラスチックおよび金属に接合させるために使用できるシリコン系接着剤を開発する目的で、今回の計算を行いました。Ultemの凝集特性を理解することでUltemと改質シリコンの接着を支配する基本的な相互作用を理解することが可能になりました。」という意見を寄せています。

参考文献

B. E. Eichinger, D. Rigby, and J. Stein, Polymer, 43, 599-607, 2002.

Organization

General
Electric-CRD

Products

BIOVIA Materials Studio Amorphous Cell
BIOVIA Materials Studio Discover
BIOVIA Materials Studio COMPASS