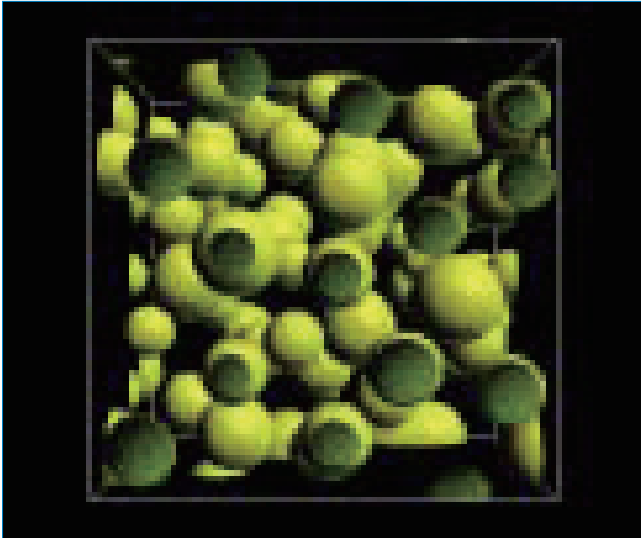


## ラテックスシード形成のメソスケールモデリング

BASFの研究者は、ラテックス粒子形成の初段階に起こる複雑な挙動を解明するために、BIOVIAのMesoDynプログラムを適用しています。



ミセル状界面活性剤相の形態

BASF社のOlaf Evers博士は、ラテックス粒子形成の初段階に起こる複雑な挙動を解明するために、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。プロセスのこの部分は、実験的に解析することができなくらい寿命の短いものです。

BASFの研究者達は、重合と最終的な粒度分布だけでなく、ミセルのサイズや多分散度を制御することを目的としています。彼らは、また、プロセスの初期段階で使われる界面活性剤がどのようにラテックスの最終的な材料物性に影響を及ぼすかについて理解する必要があります。

この研究の重要な最初の一步は、一般的に使われている（BASF社のルテンソルなどのような）ノニオン界面活性剤における親水性の障害物の長さが、ミセルの安定性と単分散性を最適化するために、どのように最適設計されるかを理解することでした。MesoDynシミュレーションは、障害物の長さが増大することは、ミセルの凝集を減らし、多分散度を減少させることにつながることを示しました。続いて、ミセル曲率から起こるラプラス圧をさらに均衡化できるものとして、この結果を理解することができます。

## 結論

わずかに混和可能なポリマー混合物の相分離を検討するために、の相溶化のための候補を選別して、TEMデータを説明する。

## 参考文献

1. J.G.E.M. Fraaije, B.A.C. van Vlimmeren, N.M. Maurits, M. Postma, O.A. Evers, C. Hoffman, P. Altevogt, and G. Goldbeck-Wood, *J. Chem. Phys.*, 106, 4260 (1997).
2. H. Sun, *J. Phys. Chem.*, 102, 7338 (1998).
3. T. Spyriouni and C. Vergelati, *Macromolecules*, 34, 5306 (2001).

## Organization

BASF

## Products

BIOVIA Materials Studio MesoDyn