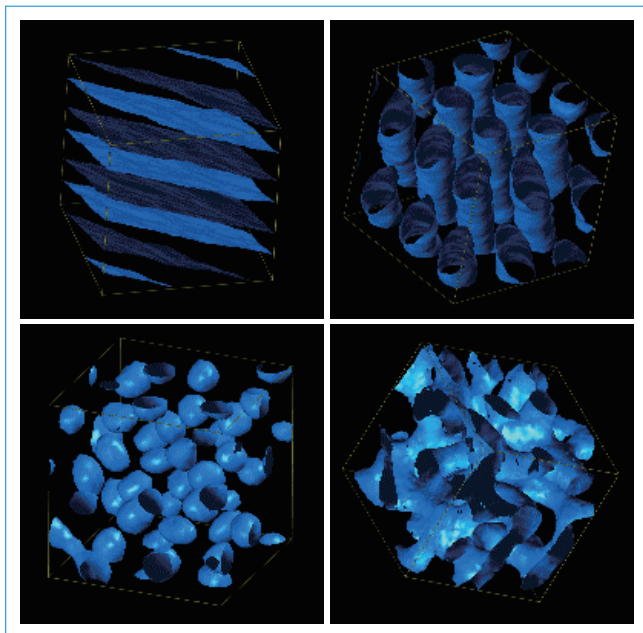


## 共重合体の相分離

ユニリーバ社の科学者達は、ブロック共重合体系の複雑なミクロ相分離の挙動を解明するために、メソスケールモデリングを使用しています。



さまざまな割合の頭-尾基サイズを持つ共重合体混合物の形態。

最近JChem. Phys.に掲載された研究で、ユニリーバ・リサーチのRob Groot博士とTim Madden博士は散逸粒子動力学(DPD)法を使って、ブロック共重合体系の複雑なミクロ相分離を明らかにしました[1]。

本質的には界面活性剤に適したこれらの物質は、ユニリーバ社の食物、洗剤およびパーソナルケア製品の多くに使われています。たとえば、食品において、それらはアイスクリーム、ミートスナック、マーガリン、チーズや冷凍食品の重要な成分です。

界面活性剤の頭-尾基の相対的サイズ、その化学的相違点を変えることは、系の形態に強い影響を与えます。形態(即ち分子がバルクの中でそれ自身を配列させる方法)は、また、最終製品の特性に強い影響をもっています。

DPDを使って、ポリマーのオフ格子フローリー-ハギンズモデルの直接的なシミュレーションをすることができます。もっと重要なことは、これがブラウン動力学のようなメソスケールモデリングを使った従来の試みとは異なる流動力学を含んでいることです。

Groot氏とMadden氏は、これが異なった系(図を参照してください)の形態を正確に予測するために、またそれぞれの系がミクロ相に分離する複雑な経路を理解するために、不可欠の構成要素であることを見出しました。流体力学モードは、シミュレーションによれば、ネマチックとスメクチック秩序化転移が起こることが示されたポリマーの大規模な集合運動の原因となります。

## Organization

Unilever

## Products

BIOVIA Materials Studio DPD

## 参考文献

1. R. D. Groot and T. J. Madden, J. Chem. Phys. **108**, 8713 (1998).