

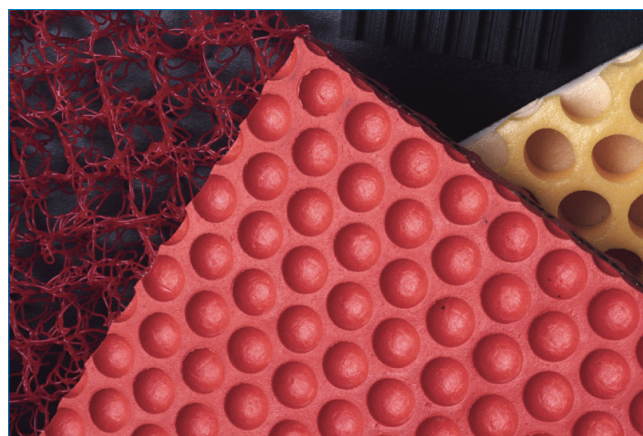
# BLENDs

## データシート

Blendsは溶媒やポリマー系の相溶性挙動の予測や、バルク工業プロセスでのこれらの系の有用な安定性指標を得るために活用されます。この技術は二成分系混合物の化学構造から混合の熱力学を予測するためのシミュレーション手法に基づくものであり、安定領域を示す相図を生成します。Blendsは安定な配合を開発するためのスクリーニングツールとして用いられ、実際の化学物質を用いた実験の必要性を減少させます。

### BLENDsの応用領域

ポリマーや溶媒系の相溶性は、接着剤や医薬、化粧品、金属の特殊表面処理、ガラス、プラスチックなどでのポリマー加工プロセスで非常に重要な事項となります。一般にこのようなタイプの配合作業では、ポリマー・溶媒比が最も高く、かつコスト的に一番有利な配合の開発には非常に多くの実験が必要となります。配合技術者は基本配合の開発を目指すと同時に、製品試験のために融合剤、着色、分散剤の影響やさらには凍結-融解サイクルでの物理変化にも注目します。



熱可塑性プラスチックの配合技術者はポリマーと添加剤のブレンドにより最適な力学物性実現を狙います。



化学工業では分離プロセスに広範囲の有機溶剤を使用します。

また、配合技術者は貯蔵期限を制限したり不安定化するような相分離挙動にも注意を払います。

混合溶媒系は溶媒抽出や再結晶化、共沸分離などの精密化学プロセスでよく使われますが、このような環境下では最も低コストでリサイクルが容易であり、また一方、非常に限られた温度範囲でしか相変化に影響しないように溶媒を選択する

ことが望まれます。また一旦プロセスが決定されると、多くの時間とプラント改造に投資をしない限り混合物組成を変えることは非常に難しくなります。

一方、混合ポリマー系は輸送機材や建設工業での複合材製造面で特に重要です。ポリマーの選択はコストと複合材物性の兼ね合いで決定されますが、配合技術者は、例えば異常な高温、高湿の気候など、通常の使用温度、湿度範囲外でのポリマーと他部材の相溶性改良にも関心を持ちます。低レベルの配合は非常に限られた地域に市場性を限定したり貯蔵期間を制限したりする事になります。

### BLENDsは下記の可能性を提供します：

- 新規な改良された配合の迅速な開発と市場導入
- 輸送中や貯蔵中の相分離や劣化による製品問題発生リスクの軽減
- 精密化学プロセスでの高価な溶剤使用の最適化
- 通常の使用範囲条件外での配合安定性検討、貯蔵期間の最適化

### 概要と機能

- 技術者、エンジニア、配合化学者向けツールです。
- 新製品開発やプロセス改良に向けた低コスト化手法を提供します。
- ポリマー成形機や化学実験室での実化学物質を使用した実験数の低減を、オフィスIT機器を利用し実現します。
- 二成分系混合物での多くの化学成分へ適用可能な使いやすいソフトウェアパッケージです。
- 素早く結果を出しながら幾つかのテーマを同時に処理できるようにします。
- 溶媒抽出や共沸分離などの物理的分離プロセスのシミュレ

ーション向けプロセスエンジニアリングソフトウェアとの併用が可能となります。

- 分子対相互作用ライブラリの構築ツールとして役立ちます。

### BLENDsから得られる情報例

- 相図（臨界点、バイノーダル、スピノーダル線）
- 相互作用パラメータ ( $\chi$ )
- 混合エネルギー
- 等温混合自由エネルギー
- エネルギー分布関数
- 配置のエネルギーソーティング等

### BLENDsの関連する工業分野例

- ポリマーブレンドの相溶性－非晶、半結晶高分子材料
- 添加剤－可塑剤、変性剤、フィラー、染料、酸化防止剤、光安定剤、表面処理剤等
- 溶媒効果－膨潤、溶解、拡散、混合、溶媒 キャスティング等
- 配合研究－安定性への温度や濃度効果
- 接着－ポリマー～ポリマー、金属、セラミックス界面等
- 分配係数－分子構造との相関解析
- 液-液相平衡－分離プロセスの改良解析
- 分離－不整クロマト分離等



実験室での配合研究では非常に多くの溶解度や相溶性の評価実験が行われます。

### BIOVIA MATERIALS STUDIOの優位性

BIOVIA Materials Studioは使いやすく習得の容易な分子モデリング-シミュレーション環境です。Blendsの計算操作を行うユーザーインターフェースBIOVIA Materials Studio VisualizerはWindows®上で動作し、数値シミュレーションのための広範なツール群を備えています。さらにクライアント/サーバー型の柔軟な計算実行方式を採用しており、様々なサーバー技術を利用することで先進の化学・材料科学数値シミュレーションの結果を直接皆様のデスクトップに届けます。

BlendsモジュールをBIOVIA Materials Studioツール群に導入することにより、エンジニアやポリマー技術者、配合技術者達にとって、ポリマーや溶媒の混合系をスクリーニングしたり、基本配合設定やプロセス開発の研究をする時に迅速で使い易い手法を提供することになります。

### 参考文献

Tiller A., Gorrella B., Polymer, 35, 3251-3259, 1994.

Sun H., Macromolecules, 28, 701, 1995.

Fan C.F., Olafson B.D., Blanco M., Hsu S.L. Macromolecules, 25, 3667, 1992.

Flory P.J., Principles of Polymer Chemistry, Cornell University Press, Ithica, NY, 1953.

Kamide K., Matsuda S., Saito M., Polym. J., 17, 1013, 1985.

Blanco M., J. Comput. Chem., 12, 237, 1991.

Fan C.F., Olafson B.D., Blanco M., Hsu S.L., Macromolecules, 25, 3667, 1992.

ダッソー・システムズの3Dエクスペリエンス・プラットフォームでは、12の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、3Dエクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、[www.3ds.com](http://www.3ds.com)（英語）、[www.3ds.com/ja](http://www.3ds.com/ja)（日本語）をご参照ください。

