

受阻胺在聚烯烃材料中的应用研究进展

吴 琿,王 峰

(安徽省建筑工业学院 材料科学与工程系,安徽 合肥 230022)

摘 要:受阻胺光稳定剂(HALS)是一种新型高效的光稳定剂,在聚烯烃材料中有着广泛的应用。本文阐述了HALS的稳定机理和发展趋势;并介绍了国内外受阻胺在聚烯烃材料中的应用和研究进展。在新研究手段的发展和取得的成果的基础上,展望了受阻胺在聚烯烃材料中的研究方向和应用前景。

关键词:受阻胺;聚烯烃;光稳定剂;老化机理

中图分类号:TQ 325.1 **文献标识码:**A

聚烯烃材料原料丰富,价格低廉,容易加工成型,综合性能优良,作为一种新型材料已广泛深入国民经济各部门以及人民生活各个领域,不仅弥补了部分传统材料质和量方面的不足,而且已成为某些部门技术进步不可缺少的材料。但烯烃材料在使用过程中常会受到光、热和氧的作用,使聚烯烃材料老化,大大缩短制品的使用寿命,严重地影响了材料使用的经济性和环保性,限制其应用范围。

受阻胺光稳定剂(HALS)是一类非常高效的聚烯烃材料的添加剂,是各类光稳定剂中研究最多、发展最快的品种。20世纪70年代中期由日本三共公司研制开发,其光稳定效果是普通光稳定剂的2~4倍,受阻胺类光稳定剂无毒、原料易得,合成简便,与许多树脂具有良好的相容性^[1,2]。

1 聚烯烃材料的老化

高分子材料在其合成、储存及其加工和最终应用的各个阶段都可能发生变质,即材料的性能变坏,例如泛黄、相对分子量下降、制品表面龟裂、光泽丧失,更为严重的是导致冲击强度、挠曲强度、拉伸强度和伸长率等力学性能大幅下降,从而影响高分子材料制品的正常使用。这种现

象称为塑料的老化。从化学角度上看,塑料材料无论是天然的还是合成的,都具有一定的分子结构,其中某些部位具有一些弱键,这些弱键自然地成为化学反应的突破口。塑料老化本质无非是一种化学反应,即以弱键发生化学反应(例如氧化反应)为起点并引发一系列化学反应。它可以由许多原因引起,例如热、光、机械应力、辐射、电场等。可以单独一种因素,也可以多种因素共同作用。其结果是高分子材料的分子结构发生改变及相对分子量下降或产生交联,从而材料性能变坏,以至无法正常使用。最常见的导致老化因素是热和紫外光,因为塑料从生产、储存、加工到制品应用接触最多的环境便是热和阳光。

1.1 聚烯烃材料热氧老化降解机理^[3]

当高聚物与空气接触时,会与空气中的氧进行化学反应而被氧化。这是典型的自由基反应,一般属于自由基连锁反应。高聚物对氧化降解的敏感程度在很大程度上取决于其本身的分子结构,例如含有 α -氢的聚丙烯就比聚乙烯对氧化反应敏感得多。任何高聚物材料的性能都是通过一定相对分子量和分子量分布来达到的,而当高聚物受到自动氧化后其初始分子结构发生了改变,这称为“降解”。广义而言,降解包括相对分子量降低(断链)和相对分子量增加(交联)。描述自动氧化反应须考虑一系列反应,包括产生

收稿日期:2010-11-22

基金项目:安徽省安徽优秀青年基金(06044097)和安徽省教育厅自然科研项目(2006KJ107B)。

作者简介:吴琿(1983-),男,安徽颍上县人,安徽省建筑工业学院硕士生。

王峰(1969-),男,江苏扬州人,博士后,安徽省建筑工业学院副教授,硕士生导师。

初级自由基的链引发反应,带来氧化产物的链增长和链歧化反应以及导致整个体系中消除自由基的链终止反应。

1.2 聚烯烃材料的光老化降解机理^[4,5]

聚合物的光老化是一系列复杂反应的结果。对大多数聚合物而言,一般认为它们是一个由光能引发的自动氧化过程,其历程如下:(1)引发反应,(2)链增长反应,(3)终止反应在光氧化过程中。链的断裂和交联可以同时发生,断裂使固体聚合物相对分子量降低,交联则产生脆性的网状分子,结果使其物理力学性能劣化。同时含羰基分解产物和形成的发色团又加深了其颜色的变化。

2 受阻胺光稳定剂

HALS 出现初期,虽然光稳定性能优良,但大多数产品耐迁移性差,碱性偏高,在酸性条件下效果不好,且不能与其他酸性助剂混用,同时还存在结构简单,功能单一等缺点。另外,在光稳定剂过程中多种副反应也降低了 HALS 的光稳定效率。所以有必要在提高或不损失其光稳定性能的情况下,针对一般 HALS 的结构进行优化,开发出性能更好的 HALS 新品种。

2.1 受阻胺光稳定作用机理

HALS 的作用机理十分复杂,目前关于受阻胺的作用机理仍然没有形成统一的认识,受阻胺光稳定剂自问世以来就因其优异的光稳定性能而引起人们的广泛关注,也激发了各国学者探讨其光稳定机理的兴趣。目前,此方面的研究日趋具体深入,从共性的 HALS 机理研究到各种特定环境下的作用机理都有大量的文献报道^[6-8]。但是,大多数研究都是在模拟系统和特定条件下开展的,结果与大气老化的实际情况相差较远,迄今仍没有完全清楚 HALS 是如何抑制聚合物光氧化的。一般认为,受阻胺稳定过程按以下几种机理进行:

(1) 猝灭激发态

受阻胺能高效地猝灭包括单线态氧在内的高能激发态,而且不因制品的厚度而改变效率,所以比传统的猝灭剂效率更高。研究表明,受阻胺在胺态时,其猝灭效率很低,但当被氧化成稳定氮氧自由基时,其猝灭效率则大大提高,其猝

灭机理至今仍不明确。

(2) 分解氢过氧化物

高分子材料中过氧化氢的存在与积聚是光氧化降解的根源。因此,如能有效地减少或消除过氧化物的存在,就能抑制高分子材料的光老化。

(3) 捕获自由基

受阻胺分子中哌啶环上的仲胺基在热、光等氧化条件下可以转化为相应的氮氧自由基,这种氮氧自由基非常稳定,但是它们能够有效的捕获高分子聚合物中的烷基自由基及烷氧自由基,使之失去活性,生成相应的酯及过氧化酯。这些生成的酯及过氧化酯又会继续的与聚合物中的烷基自由基,烷氧自由基和过氧自由基作用,在生成相应的化合物的同时又重新生成了氮氧自由基。生成的氮氧自由基又可以重新捕获高分子聚合物中光诱导产生的自由基,从而保持了高分子材料的优良性能。受阻胺光稳定剂这种自我再生的能力使受阻胺的一个分子能够捕获多个聚合物中的高分子自由基,从而具有较高的抗光老化性能。氮氧自由基的再生是受阻胺类光稳定剂具有高效性的根本原因。

2.2 受阻胺光稳定剂的发展趋势

近几十年来,受阻胺类光稳定剂一直是非常活跃的研究领域,不断有新产品出现。从近年来发表的有关受阻胺的研究成果看,目前受阻胺光稳定剂的发展方向呈现以下几个显著特征。

2.2.1 相对高分子量化^[9,10]

相对高分子质量 HALS 无论耐抽提方面,还是耐萃取方面,都远远超过小分子 HALS,更能有效地减小物理损失。高分子量化作为提高 HALS 稳定效能的基本思路,成为受阻胺开发的一大趋势,高分子量 HALS 不仅挥发性小,耐溶剂抽提性高,而且无毒性污染,能直接用于食品包装材料。但是高分子量化可能导致 HALS 在聚合物中的扩散速度降低,影响其光稳定活性的充分发挥。高分子 HALS 产品的分子量一般控制在 2000~3000 范围内。从结构看,相对高分子质量受阻胺包括聚合型和单体型。聚合型高相对分子质量受阻胺开发较早,品种繁多,典型的代表品种如 Tinuvin-622、Chi-massorb-944、Cyasorb UV-3346、GW-944 及国内开发的 GFW-100、GW-622 等。

2.2.2 反应型^[1,12]

在分子中引入可与聚合物材料反应的活性基团,使之在应用时可以把稳定剂分子键合到聚合物链上,或者模仿高分子链结构,不仅达到增强相容性的效果,而且克服了以往添加型受阻胺由于无力迁移或挥发而造成的稳定剂的损失。近年来,国外反应型受阻胺光稳定剂的品种开发和应用研究进展十分迅速,主要集中在合成、结构和光稳定化效果关系方面。日本旭电化公司上市的丙烯酸哌啶醇酯、甲基丙烯酸哌啶醇酯品种 ADK Stab LA-82、ADK Stab LA-87。Atochem 公司成功地开发了带草酰肼反应型基团的系列化产品 LuchemHAR100、及 LupersolHA505。此类反应型受阻胺光稳定剂,在显示良好的光稳定作用同时,还赋予产品优异的重金属离子钝化作用。

2.2.3 低碱性化

传统 HALS 碱性较高,不能与酸性的添加剂共用,大大限制了使用范围,当氮烷基化和氮烷氧化后,可使产品碱性大大降低,扩大了其相应的应用范围。20 世纪 80 年代后期,受阻胺的低碱性化研究引起了国内外的普遍关注。常用的降低受阻胺碱性的方法是利用取代基或空间位阻保护碱性氮,如 N-烷基化, N-烷氧化, N-酰基化基团。实验证实, N-H 受阻哌啶化合物的碱性最大, N-取代烷基次之, N-取代烷氧基最小。汽巴-嘉基公司最早开展了 N-烷氧化受阻胺的研究,并推出了世界上第一个 N-烷氧基产品,牌号为 Tinuvin123 ($pK_a = 4.2$), 作为 Tinuvin770 ($pK_a = 9.0$) 的改性品种,其碱性只有 Tinuvin770 的万分之一。目前,汽巴-嘉基公司有多种 N-烷氧基型产品,如 Tinuvin152, CGL074, CGL371, CGL116 等。

2.2.4 功能化^[13]

在同一分子中引入不同种类的活性基团,可使同一分子具有多种功能,增加了 HALS 的使用范围,从目前应用来看,以苯并三唑类紫外线吸收剂和受阻胺类光稳定剂的复合品种居多,已见应用的有受阻胺-苯并三唑型和受阻胺-三嗪型等光稳定剂,这也是目前研究开发的热点之一。

3 受阻胺聚烯烃材料中的应用研究

聚烯烃是聚乙烯(PE)、聚丙烯(PP)及其他

烯烃类聚合物的总称。聚烯烃是目前产量最大的通用型塑料。PE 和 PP 以高性价比及优良的力学性能、热性能、加工性能等成为最主要的聚烯烃塑料品种。但是由于聚烯烃材料对光、热、重金属离子及微生物等物质的很敏感,会产生自动氧化过程,从而发生脆裂、变黄及强度下降等现象,导致影响其制品的寿命,为减缓塑料的老化过程,延长产品的寿命,在加工过程中需要加入添加剂以达到稳定的作用。

3.1 受阻胺在聚乙烯中的应用^[14-18]

聚乙烯(PE)是目前重要的通用塑料之一,以其加工工艺简单、优良的性能和低廉的价格有其广阔的应用前景。我国有着丰富的石油资源,为聚乙烯塑料的发展创造了极其有利的条件。但是 PE 本身光稳定性差,因此,必须在其加工过程中加入适量的光稳定剂,以阻止或延缓其降解。

钱梁华等人将国产低摩尔质量受阻胺光稳定剂 GW2110 应用于 PE 农膜,通过与 Chi2massorb944 的自然老化实验结果对比发现, GW2110 可以对 PE 制品起到优异的防老化效果。汪辉亮等人研究了受阻胺类光稳定剂(HALS)对聚乙烯(PE)辐射致色的影响。发现各种 HALS 均能减少 PE 的辐射致色。在辐照剂量低于 100kGy 时,添加五甲基 HALS 的 PE 的黄度比添加相应的四甲基 HALS 的 PE 的黄度略高;而在辐照剂量高于 100kGy 时,结果相反;并且发现,在相同的辐照剂量下,添加聚合物型 HALS 的 PE 的黄度比添加相应的单体型 HALS 的 PE 的黄度低一些。Basfar A A, Idriss Ali K M. 研究了户外自然条件下 HALS 对低密度聚乙烯和线性低密度聚乙烯紫薄膜外稳定作用,结果发现:其一,只加入 HALS 的薄膜比纯薄膜的紫外稳定效果高出 2~42 倍;其二, HALS 和 UVA 联合使用的效果比单独的 HALS 效果好很多,只加入 HALS 的薄膜拉伸强度损失一半时间是 205 天,而加入 HALS 和 UVA 的薄膜拉伸强度损失一半时间长达 590 天。Basfar A A. 等人将线性低密度聚乙烯和低密度聚乙烯薄膜进行一系列辐射,并进行了 1146 小时的加速老化和 165 天的户外环境的老化实验,研究了 HALS、抗氧剂和紫外吸收剂对线性低密度聚乙烯和低密度聚乙烯的紫外稳定性和辐射交联情况的影响。研究发现,加

有添加剂,特别是加有 HALS 的聚乙烯薄膜比纯的交联聚乙烯薄膜的紫外稳定性提高了四倍。

3.2 受阻胺在聚丙烯中的应用^[19-22]

聚丙烯(PolyPropylene,简称 PP)作为重要的聚烯烃材料,是五大类通用塑料之一,也是目前热塑性塑料发展最快的一种。自从实现工业化以来,聚丙烯一直都是当今发展最快的通用树脂品种之一。但是由于聚丙烯叔碳原子上的 α -氢对氧化反应较为敏感,分子链容易发生 β 开裂而导致制品老化,使其应用受到限制,因此聚丙烯制品的防老化问题一直是人们研究和关注的课题之一。聚丙烯的老化由光和热的协同作用引起。阳光中紫外线足以破坏聚合物的化学键或引发自氧化降解反应,使聚丙烯分子链断裂,产生自由基或激发态分子,生成氢过氧化物或羰基化合物或发生交联。羰基含量的提高又使聚丙烯更易发生光降解反应。光和氧所引起的降解反应,不仅改变聚丙烯制品的外观,而且还会恶化其物理力学性能,直至丧失使用功能。为抑制光降解,通常在聚丙烯树脂中添加光稳定剂,如光屏蔽剂、紫外光吸收剂、自由基捕获剂等。在众多光稳定剂品种中,对聚烯烃稳定效率最高的当属受阻胺类光稳定剂。

受阻胺类光稳定剂的开发和应用一直是聚合物稳定化助剂中引人注目的研究课题,因其具有独特的自由基捕获能力,在聚烯烃体系被广泛应用。冯亚青等人制备了对叔丁基杯芳烃、高分子受阻胺类化合物和 PP 共混体系,通过老化性能实验评价了共混体系的抗光氧性能。结果表明,杯芳烃、受阻胺类复合稳定剂能明显提高 PP 的耐光氧性能,且杯芳烃和受阻胺分子间具有明显的协同效应。戚志浩研究受阻胺光稳定剂对聚丙烯(PP)织物抗热老化性能的影响。受阻胺光稳定剂不仅具有优异的光稳定作用,还具有良好的热稳定作用,对 PP 织物的长期抗热老化作用显著;当酚类抗氧化剂与受阻胺光稳定剂以 1:3 的比例组合使用时,达到最佳的配合效果。周大纲等人研究了重质碳酸钙与受阻胺光稳定剂 HALS 相互作用对聚丙烯编织袋防老化性能的影响。结果表明,含有重质碳酸钙 $\leq 1.2\%$ 且受阻胺光稳定剂 Tinuvin770 $\geq 0.16\%$ 的聚丙烯编织袋,可以符合欧洲 EN277-95 中抗紫外线试验的规定要求。F. Gugumus 研究了一系列不同分子

量的 HALS 对聚丙烯性能的影响,结果发现,分子量对 HALS 的性能影响非常大,随着 HALS 分子量的增加的挥发性和耐抽提性能都得到很好的改善,但是,当 HALS 分子量过大时又会阻止分子向材料表面迁移,影响其稳定效果。当 HALS 分子量由 500 增加到 800 时,HALS 对聚丙烯厚质材料的作用明显下降。

3.3 受阻胺在聚氯乙烯中的应用^[23-25]

聚氯乙烯(PVC)是产量仅次于聚乙烯(PE)的第二大通用塑料,具有强度高、可增塑、耐腐蚀、难燃、绝缘性好、透明性高等优点,广泛应用于工业、农业、建筑、包装等领域。一般理论观点认为,PVC 树脂在热加工、热氧化和光氧化降解时,伴随有脱氯化氢(HCl)反应。氯化氢可与含氮的碱性受阻胺发生作用,抑制受阻胺生成活性氮氧自由基 $\text{NO}\cdot$,使受阻胺“中毒”,因而失去稳定性作用或功能。随着 PVC 聚合工艺技术的发展 and PVC 稳定剂效能作用的提高,PVC 树脂因分解而产生的氯化氢已不足以抑制受阻胺的作用了,受阻胺光稳定剂在 PVC 中应用的实例越来越多,而且取得了令人满意的效果。

随着 PVC 聚合工艺技术的发展 and PVC 稳定剂效能作用的提高,PVC 树脂因分解而产生的 HCl 已不足以抑制受阻胺的作用,国外已有大量关于受阻胺型光稳定剂应用于 PVC 制品的专利报道。将受阻胺与硬脂酸盐等混合用于 PVC 制品中,制品的泛黄指数显著降低,取得令人满意的光稳定效果。中国科学院长春应用化学研究所在国内首次进行了受阻胺光稳定剂添加于 PVC 农用棚膜的研究工作。将受阻胺光稳定剂 770、622、GW-540 和紫外线吸收剂 UV-9、UV-531 单独或复合使用,分别与 PVC 树脂经压延制成农用棚膜,经人工模拟气候加速老化实验、自然暴露试验和实际扣棚应用,结论为:①受阻胺型光稳定剂完全可以应用于 PVC 棚膜中,其光稳定效果可以同目前在 PVC 棚膜中普遍应用的 UV-531 和 UV-9 相媲美;②将受阻胺光稳定剂同紫外线吸收型光稳定剂复配应用于 PVC 棚膜中,虽然不能延长棚膜的使用寿命,但在扣棚应用过程中,其防光老化效果优于单独使用的受阻胺型和紫外吸收型光稳定剂;③受阻胺型光稳定剂具有防止棚膜发“背板效应”的作用。

受阻胺光稳定剂不但可以提高光稳定效果,

而且可以有效地抑制制品变色。王佩璋等将受阻胺光稳定剂 GW-944Z 用于 PVC 型材,经紫外灯照射,其抗变色能力略有提高。汽巴精细化工公司开发的新型高效光稳定剂 TinuvinXT 可以针对 PVC 材料的类型及用途进行有效的调整,不易和 HCl 反应,经人工老化后制品颜色保持率和机械性能有明显改进。美国专利报道,低相对分子质量受阻胺 Tinuvin770 和 Tinuvin144 与荧光染料用于 PVC 膜中,以 6500W 氙弧灯照射 100h,制品的颜色保留率提高数倍。

4 结语

随着世界经济的飞速发展,我国塑料及其制品产业也快速发展,人们对光稳定剂的数量和品质都提出了更高的要求。目前国内光稳定剂的生产与应用仍存在品种单一、产品档次不高、质量不稳定等问题,今后国内还需加强光稳定剂的基础研究,创新开发出具有良好性能、相容性好、清洁环保的高效产品。要加大应用研究力度,着力于具体应用配方和相关老化实验数据,来指导塑料制品企业合理使用光稳定剂。

参考文献:

- [1] 吕永梅. 我国光稳定剂生产现状与发展趋势 [J]. 化工新型材料, 2002, 30(5): 8-10.
- [2] 王克智. 塑料助剂开发及应用-光稳定剂 [J]. 塑料科技, 1995(4): 37-45.
- [3] Pandey J K, Reddy K R, Kuma A P, *et al.* An overview on the Degradability of Polymer nanocomposites [J]. Polymer Degradation and Stability, 2005, 88(2): 234-250.
- [4] Geuskens G, Kabamba M S. Photo-oxidation of polymers-Part V: A new chain scission mechanism in polyolefins [J]. Polym. Degrad. Stab, 1982, 4(1): 69-76.
- [5] Gugumus F. Mechanisms of photooxidation of polyolefins, Angew. [J]. Makromol. Chem, 1990, 176: 27-42.
- [6] Yoshihiko T, Yasuyuki I, Shin T, *et al.* Structural change of a polymeric hindered amine light stabilizer in polypropylene during UV-irradiation studied by reactive thermal desorption-gas chromatography [J], Polym. Degrad. Stab, 2004, 83: 221-227.
- [7] Cogen J M. Semiempirical prediction of the thermochemistry of intermediates involved in the cyclic mechanism of hindered amine stabilizers [J], Polym. Degrad. Stab, 1994, 44(1): 49-53.
- [8] Gugumus F. Current trends in mode of action of hindered amine light stabilizers [J]. Polym. Degrad. Stab, 1993, 40(2): 167-215.
- [9] 齐邦峰, 班红艳, 曹祖宾, 等. 有机大分子中的光稳定剂 [J], 抚顺石油学院学报, 2002, 22(1): 19-22.
- [10] 吕咏梅. 我国光稳定剂生产现状与发展趋势 [J]. 化工新型材料, 2002, 30(5): 8-10.
- [11] Konstantinova T, Lazarova R, Venkova A L, *et al.* On the synthesis and photostability of some new naphthalimide dyes [J], Polymer Degradation and Stability, 2004, 84: 405-409.
- [12] 胡应喜, 刘霞. 受阻胺光稳定剂的开发研究进展 [J]. 北京石油化工学院学报, 2004(2): 15-22.
- [13] Pospisil J, Nespurek S. Photostabilization of coatings mechanisms and performance [J]. Progress in Polymer Science, 2000, 25(9): 1261-1335.
- [14] 唐军, 董鹏. 聚烯烃复合光稳定剂的应用研究 [J]. 塑料, 2007, 36(4): 13-17.
- [15] 钱梁华, 马洪奎, 顾超然, 等. 国产光稳定剂在 PE 农膜中的应用 [J]. 塑料工业, 2004, 32(12): 46-57.
- [16] 汪辉亮, 王春, 陈文. HALS 对 PE 辐射致色的影响 [J]. 辐射研究与辐射工艺学报, 2001, 19(02): 105-110.
- [17] Basfar A A *, Idriss K M. Natural weathering test for 7 lms of various formulations of low density polyethylene (LDPE) and linear low density polyethylene (LLDPE) [J]. Polymer Degradation and Stability, 2006 (91): 437-443.
- [18] Basfar* A A, Idriss Ali K M, Mofti S M. UV stability and radiation-crosslinking of linear low density polyethylene and low density polyethylene for greenhouse applications [J]. Polymer Degradation and Stability, 2003 (82): 229-234.
- [19] Seiffarth K, Schulz M. Calix [4] arenes—New light stabilizers for polyolefins [J]. Polymer Degradation and Stability, 1989, 24: 73-80.
- [20] 冯亚青, 周立山, 董宁, 等. 杯芳烃-受阻胺及其复合稳定剂对 PP 的抗光氧稳定作用 [J]. 中国塑料, 2003, 17(1): 87-90.
- [21] 戚志浩. 受阻胺光稳定剂对 PP 织物抗热老化性能的影响 [J]. 工程塑料应用, 2007, 35(7): 58-60.
- [22] Gugumus F. Performance of low and high molecular

- mass HALS in PP [J]. Polymer Degradation and Stability, 1999(66): 133 – 147.
- [23] 白福臣,程凤梅,于恺,等. 受阻胺型光稳定剂在PVC 棚膜中的应用 [J]. 塑料, 2002, 31(5): 31 – 34.
- [24] 石魏,张军. 聚氯乙烯紫外光稳定性研究进展 [J]. 塑料科技, 2007, 35(2): 88 – 95.
- [25] 王晶,郭同全,刘容德,等. 高聚合度聚氯乙烯的光热稳定性 [J]. 现代塑料加工应用, 2007, 19(6): 14 – 16.

Progress in Application research on HALS from being in polyolefin material

WU Hui, WANG Feng

(Dept . of Material Science and Engineering , Anhui Institute of Architecture & Industry , Hefei 230022 , China)

Abstract: Hindered amine light stabitizet (HALS) was a new type of light stabilizer and was widely used in polyolefine material. The stabilizing mechanism and development trend of HALS were introduced in detail. The application and research progress of HALS in polyolefine material at home and abroad were presented. And the research trend and application prospect of HALS were forecast.

Keywords: HALS; Polyolefine; Stabilizing agent; Aging mechanism

(编辑: 张迎元)

(上接第 96 页)

- [27] Sarthak K. Patel, Afsaneh Lavasanifar, Phillip Choi. Prediction of the solubility of cucurbitacin drugs in self-associating poly(ethylene oxide)-b-poly(a-benzyl carboxylate ε-caprolactone) block copolymer with different tacticities using molecular dynamics simulation [J]. Biomaterials, 2010, 31: 345 – 357.
- [28] Sheetal S. Jawalkar, Tejraj M. Aminabhavi. Molecular modeling simulations and thermodynamic approaches To investigate compatibility/incompatibility of poly(L-lactide) And poly(vinyl alcohol) blends [J]. Polymer, 2006, 47: 8061 – 8071.
- [29] Theodora Spyriouni, Caroll Vergelati. A molecular modeling Study of binary blend compatibility of polyamide 6 and poly(vinyl acetate) with different degrees of hydrolysis : An atomistic and mesoscopic approach [J]. Macromolecules, 2001, 34(15): 5306 – 5316.
- [30] P. Choi. Molecular dynamics studies of the thermodynamics of HDPE/butane -based LLDPE blends [J]. Polymer, 2000, 41: 8741-8747.

Research Progress on Molecular Simulation in Compatibility of Polymer Blends

LIU Qian, YUE Hong, ZHANG Hui-jun, ZHUANG Chang-qing

(Applied Chemistry Department of Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: In this paper, the methods of molecular simulation and molecular dynamics simulation were introduced. The simulation of the compatibility of polymer blends from the perspective of molecular modeling was emphasized, and the theories of solubility parameter and Huggins-Flory parameter were described in detail. Then the actuality and application of molecular simulation study of polymer blends at home and abroad were narrated and summed up. Finally, molecular modeling trends were also prospected.

Keywords: Compatibility; Solubility parameter; Huggins-Flory parameter; Molecular dynamics

(编辑: 张迎元)