

A monomer kezdeti cseppméret-eloszlásának hatása a polimer termékek átlagos molekulatömegére

Bárkányi Ágnes, Németh Sándor, Lakatos G. Béla

**Pannon Egyetem
Mérnöki Kar, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék
8200, Veszprém
Egyetem u. 10.**

AIK'11, Kaposvár, 2011.02.25.



Tartalomjegyzék

- Cél
- Szuszpenziós polimerizáció
- Polimerizáció modellezése
- Eredmények
- Következtetések



Cél

- Végtermék tulajdonságainak tervezhetősége
- Matematikai modell és szimulátor
- Paraméter optimalizálás

Modellezés lépései

- Folyamatok megismerése
- Változók és változók közötti kapcsolatok meghatározása (lehetőleg mérhető)
- Megfelelő egyenletek megalkotása és megoldása



Szuszpenziós polimerizáció

- Alapanyagok: monomer, iniciátor, stabilizátorok
- Diszperz fázis kialakítása intenzív kevertetéssel
- Polimerizációs folyamatok a diszpergált monomer cseppekben

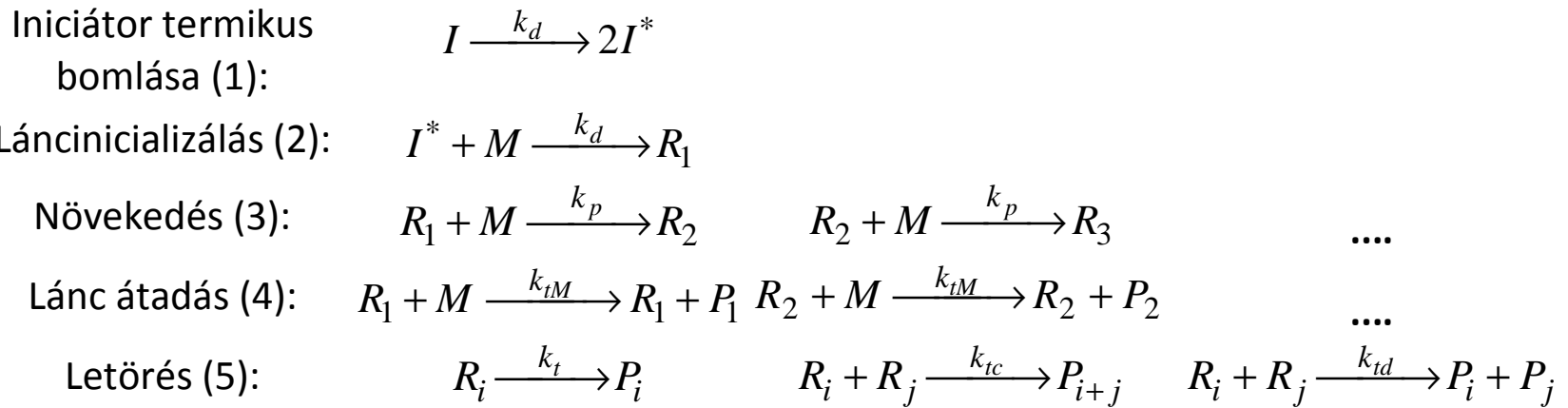
Polimerizáció három szakasza

- Monomerben gazdag fázis ($X < 0,1\%$)
- Monomerben és polimerben gazdag fázisok ($0,1\% < X < X_{krit}$)
- Polimerben gazdag fázis ($X > X_{krit}$)

Modellezés

- Populációmérleg-modellel
 - Nagy számítás igény
 - Sok információ
- Momentum módszer
 - Kisebb számítás igény
 - Átlag tulajdonságok (pl. tömegátlagos molekulatömeg)

- Modellezésnél figyelembe vett reakciók





Mikrokeveredés

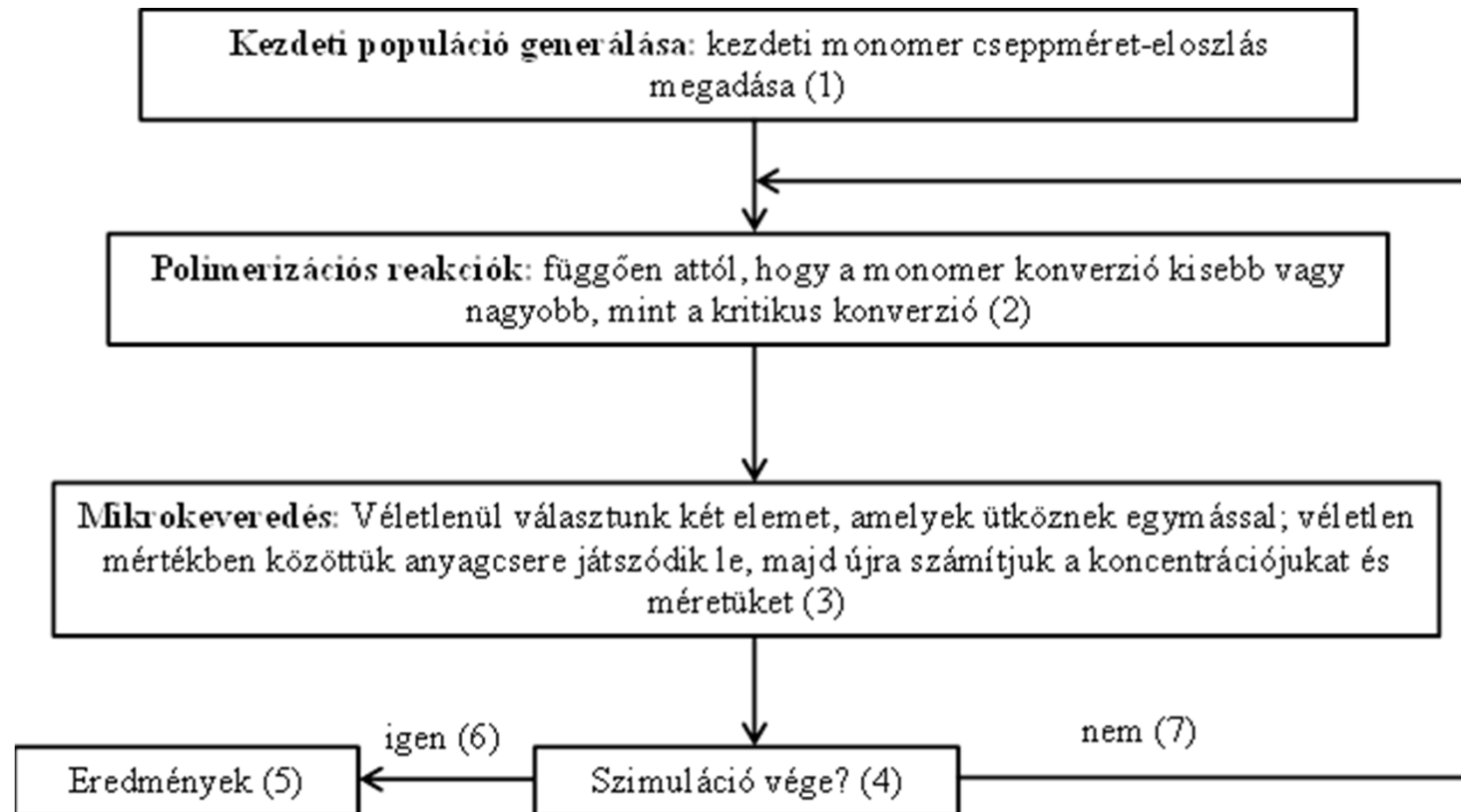
- Cseppek ütközése révén anyagtranszport
- Cseppekben játszódnak le a reakciók
- Leírása: populációmérleg-modell
 - Nagy számítás igény
 - Monte Carlo módszer (sztochasztikus megoldó módszer)

- Mikrokeveredés leírására szolgáló populációmérleg-egyenlet

$$\frac{\partial n(v, \mathbf{c}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{c}} \cdot \left[\frac{d\mathbf{c}}{dt} n(v, \mathbf{c}, t) \right] = -n(v, \mathbf{c}, t) \alpha_b(v) + \int_v^{\infty} \beta_b(v, v) \alpha_b(v) n(v, \mathbf{c}, t) dv - \int_0^{\infty} \beta_a(v, v) n(v, \mathbf{c}, t) n(v, \mathbf{c}, t) dv + \int_0^v \beta_a(v - v, v) n(v - v, \mathbf{c}, t) n(v, \mathbf{c}, t) dv + \mathbf{M}_i^K [n(v, \mathbf{c}, t)]$$

$$\mathbf{M}_i^K [p(\mathbf{c}, t)] = -\frac{S_{col}}{\pi_0(t)} \int_0^{\mathbf{c}_m} \int_0^{\mathbf{c}_m} \int_0^1 \prod_{k=1}^K \frac{2^K}{\omega_k} \delta_{c_k} \left[\left(\frac{2(c_k' - c_k)}{\omega_k} + c_k \right) - c_k \right] F_{\omega}(d\omega) p(\mathbf{c}', t) p(\mathbf{c}'', t) d\mathbf{c}' d\mathbf{c}'' + \frac{S_{col}}{\pi_0(t)} \int_0^{\mathbf{c}_m} \int_0^{\mathbf{c}_m} \int_0^1 \prod_{k=1}^K \frac{2^K}{\omega_k} \delta_{c_k} \left[\left(\frac{2(c_k - c_k')}{\omega_k} + c_k' \right) - c_k \right] F_{\omega}(d\omega) p(\mathbf{c}', t) p(\mathbf{c}'', t) d\mathbf{c}' d\mathbf{c}''$$

A szimulátor sémája



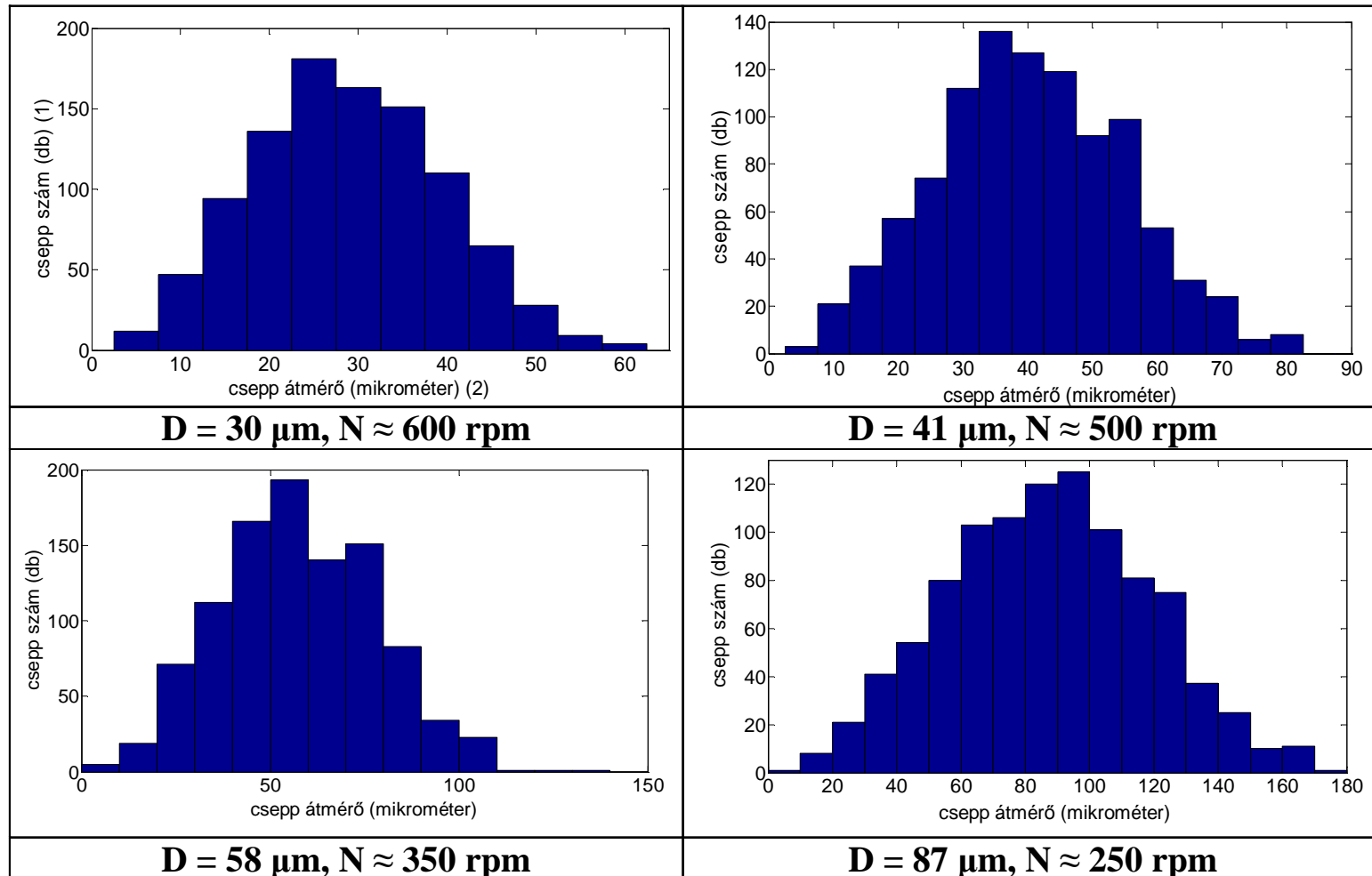


Kezdeti cseppméret-eloszlás

- Fontos: cseppekben zajlik a polimerizáció
- Függ: keverő fordulatszámától
- Különböző fordulatszám – különböző cseppméret
- Kisegítő program

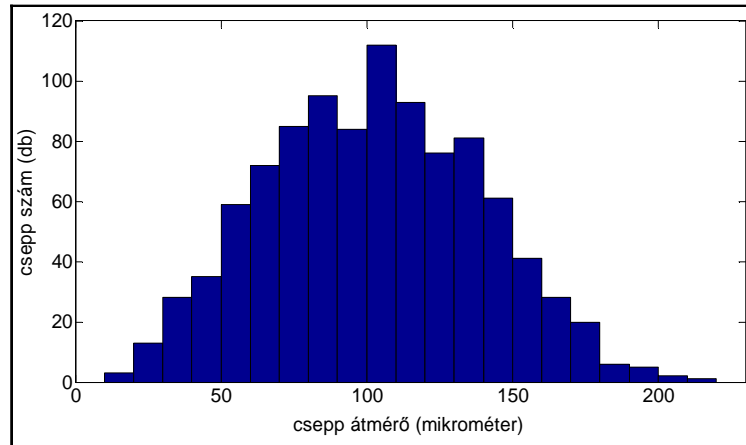


Kezdeti cseppméret-eloszlások

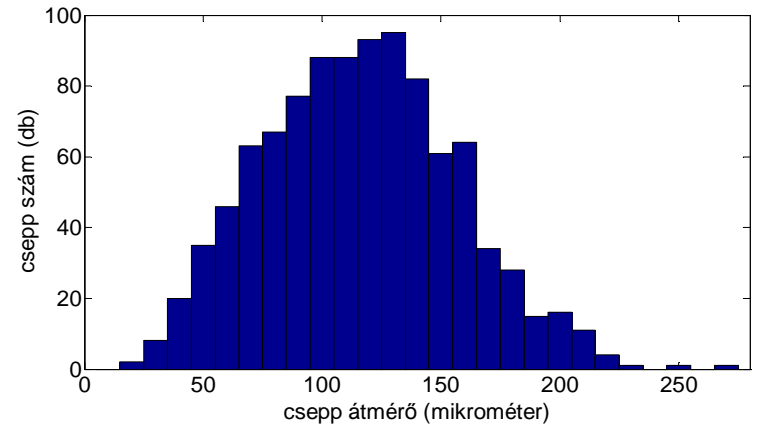




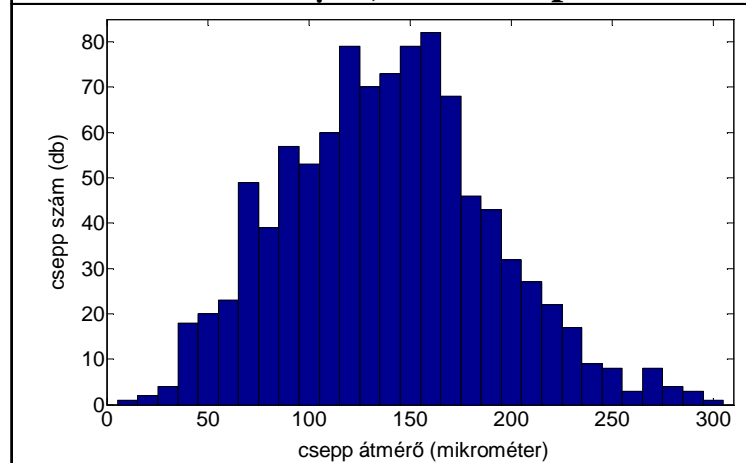
Kezdeti cseppméret-eloszlások



D = 102 μm, N ≈ 150 rpm



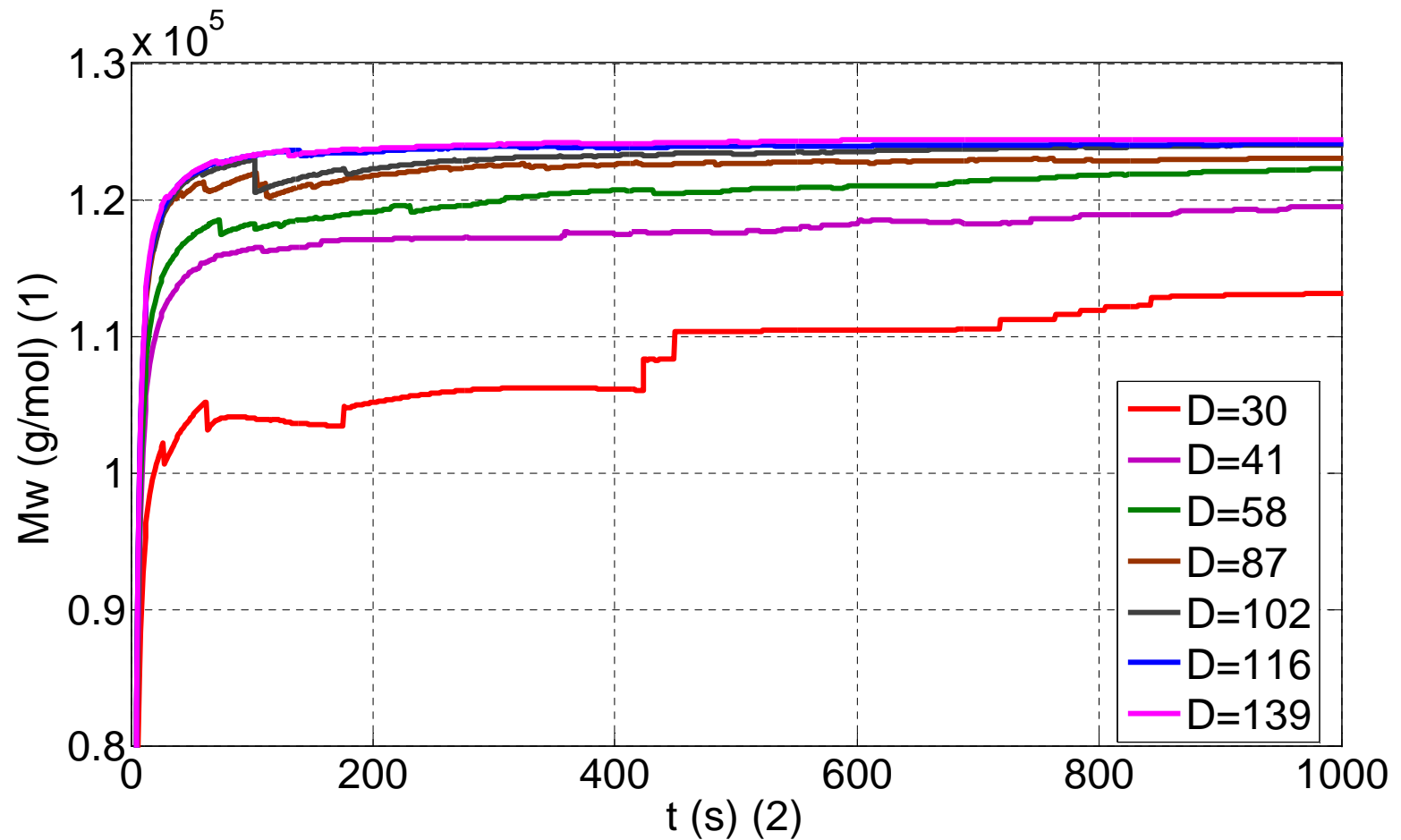
D = 116 μm, N ≈ 100 rpm



D = 139 μm, N ≈ 70 rpm



Tömegátlagos molekulatömeg alakulása





Mekkora is ez a különbség?

- Fikentscher féle K-érték
 - $M_w \approx 110000 \text{ g/mol}$ $K \approx 60$
 - $M_w \approx 125000 \text{ g/mol}$ $K \approx 65$
 - PVC-porok osztályozása felhasználás szempontjából
- Felhasználás szempontjából különböző tulajdonságú termékek
- Tehát minőségi eltérést eredményez a kezdeti cseppméret-eloszlás megváltozása



Következtetések

- Fontos ennek a területnek a további kutatása
- Még számos paraméter hatását vizsgálni kell (pl. iniciátor elosztás, ütközések frekvenciája)
- Hő mérleg beépítése a modellbe (polimerizáció erősen exoterm)
- Validálás lehetőségének megteremtése



Köszönöm a figyelmet!

Köszönetnyilvánítás

- Köszönetet mondunk a **TAMOP-4.2.2-08/1/2008-0018** (Élhetőbb környezet, egészségesebb ember - Bioinnováció és zöldtechnológiák kutatása a Pannon Egyetemen, MK/2) projekt anyagi támogatásáért.
- Ez a munka az **OTKA** támogatásával a **K77955** számú kutatási projekt keretében készült.