

شبیه سازی کامپیوتری پلیمریزاسیون امولسیون وینیل استات

محسن فیروزی منفرد، سعید پور مهدیان، امیر ارجمند

تهران، دانشگاه صنعتی امیر کبیر، دانشکده مهندسی پلیمر

First Author E-mail : mohsen7732066@yahoo.com

چکیده

مدلی برای پلیمریزاسیون امولسیون وینیل استات در شرایط **starved** در حضور پتاسیم پرسولفات به عنوان شروع کننده ارائه شده است. این مدل شامل شرایط ناپایدار و پایدار می شود. از تئوری ساده شده **Hansen-Ugilestad-HUFT** (Fitch-Tsai) برای توضیح هسته گذاری هموژن استفاده شده. برخلاف کارهای قبلی اختتام در فاز پلیمری نادیده گرفته نشده، همچنین فرض نشده است که ترکیب درصد فاز پلیمری در مرحله II و حجم فاز پلیمری در مرحله III ثابت است. متوسط های جرم مولکولی از روش ممان بدست آمده اند و با روشهای عددی معادلات حل شده است. برنامه کامپیوتری حاصل، قادر به پیش بینی جرم مولکولی و سرعت پلیمریزاسیون و **PDI** وینیل استات در محدوده وسیعی از شرایط پلیمریزاسیون می باشد.

پلیمریزاسیون امولسیون؛ وینیل استات؛ مدل سازی

مقدمه

مهمترین روش برای کنترل و ترکیب کوپلیمر، پلیمریزاسیون تحت شرایط کمبود مونومر¹ می باشد. همچنین در صنایع از شرایط کمبود مونومر برای کنترل گرمای حاصل از واکنش استفاده می شود. ما سعی کردیم پلیمریزاسیون امولسیون وینیل استات همراه با پرسولفات پتاسیم به عنوان شروع کننده را در شرایط کمبود مونومر مدلسازی کنیم. این برنامه کامپیوتری قادر است تا هم شرایط **seeded** و هم شرایط **unseeded** را پیش بینی کند. این برنامه قادر است جرم مولکولی متوسط عددی و وزنی، و سرعت پلیمریزاسیون وینیل استات را در محدوده وسیعی از

Starved monomer¹