

Э. Н. М и ф т а х о в, И. Ш. Н а с ы р о в, С. А. М у с т а ф и н а
(Ишимбай, УГАТУ). Моделирование синтеза бутадиен-стирольного сополи-
мера в эмульсии.

Кинетический метод моделирования полимеризационных процессов заключается в составлении и численном решении кинетических уравнений для концентрации всех типов частиц, участвующих в процессе. При построении модели сополимеризации бутадиена со стиролом в эмульсии будем считать, что реакционная способность активного центра на конце растущей цепи определяется лишь природой концевой звена [1]. Кинетическая схема, предложенная для описания процесса, включает следующие стадии: распад инициатора, инициирование активных центров, рост цепи, передача цепи, обрыв цепи в результате рекомбинации и диспропорционирования.

Математически предложенная кинетическая схема описывается бесконечной (порядка 10^6) системой нелинейных дифференциальных уравнений.

Свойства сополимеров в значительной степени определяются молекулярно-массовым распределением (ММР), основными показателями которого являются среднечисленная (M_n) и среднемассовая (M_w) молекулярные массы. Для их расчета используется метод производящих функций [2].

Поскольку рассматриваемый процесс является сополимеризационным с участием двух мономеров (бутадиен, стирол), то необходимо, чтобы модель также предсказывала состав сополимера, распределение звеньев в цепи. Это обусловлено тем, что свойства сополимеров в большей степени определяются именно составом и распределением звеньев того или иного мономера, т. е. композиционной неоднородностью (КН). На КН существенное влияние оказывают активности мономеров и различные физические факторы.

Если взять произвольную молекулу сополимера, то охарактеризовать ее можно заданием чисел m и n входящих в нее мономерных звеньев M^1 и M^2 , которые рассматривают как компоненты некоторого вектора I , характеризующего химический размер $l = m + n$ и состав $\zeta_1 = m/l$, $\zeta_2 = n/l$ молекулы.

Для описываемого процесса важное значение приобретает размер-состав распределение (РСР) [3], числовое или весовое. Числовое РСР $f_N(I)$ равно доле молекул в образце полимера, характеризуемого вектором I . Весовое РСР $f_W(I)$ равно доле всех звеньев в этих молекулах.

Математическое моделирование позволяет численно производить расчет РСР продуктов сополимеризации, имеющихся в реакционной среде при заданной конверсии p .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семчиков Ю. Д. Высокомолекулярные соединения. М.: Академия, 2003, 368 с.
2. Подвальный С. Л. Моделирование промышленных процессов полимеризации. М.: Химия, 1979, 256 с.
3. Хохлов А. Р., Кучанов С. И. Лекции по физической химии полимеров. М.: Мир, 2000, 192 с.