

VINIL-KLORID SZUSZPENZIÓS POLIMERIZÁCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA MONTE-CARLO MÓDSZER ALKALMAZÁSÁVAL

Bárkányi Ágnes*, Németh Sándor, Lakatos Béla

*Pannon Egyetem,
8200, Veszprém, Egyetem utca 10.,
barkanyia@fmt.uni-pannon.hu*

A technológia és üzemeltetési paramétereinek megismerése elengedhetetlen ahhoz, hogy a technológiát környezetbarát módon üzemeltethessük. Könnyű belátni, hogy ha tudjuk, hogy melyik üzemeltetési paraméternek milyen hatása van a termék minőségre, akkor adott esetben kevesebb energia felhasználás és káros anyag kibocsátása mellett is megfelelő terméket tudunk előállítani.

A technológia megismeréséhez és a hatások költséghatékony és környezetbarát vizsgálatához nagyon jó eszköz a matematikai modellezés és a számítógépes vizsgálat. Ezekkel a módszerekkel költséges és adott esetben hosszú laboratóriumi mérések helyett, olcsóbb és gyorsabb szimulációkkal elérhetjük ugyanazt az eredményt.

Munkánk során vinil-klorid szuszpenziós polimerizációjának vizsgálatával foglalkozunk. Vinil-kloridból nagy mennyiségben állítják elő a poli-vinil-kloridot, amely fontos műanyag alapanyag. A vinil-klorid szobahőmérsékleten és nyomáson mérgező tulajdonságú gáz. A szuszpenziós polimerizáció során a folyadék fázisú vinil-klorid monomert intenzív kevertetéssel a folytonos vizes fázisban diszpergáltják, melynek hatására körülbelül 50-100 µm átméretű cseppek alakulnak ki. A cseppeket felület aktív anyaggal, általában valamilyen polivinil alkohollal stabilizálják. A polimerizáció során a szabadgyökös mechanizmussal lejátszódó exoterm polimerizációs reakciók a monomer cseppekben mennek végbe. A szabadgyökös reakciót a monomerben oldódó iniciátor inicializálja. A polimerizációs reakciókkal párhuzamosan a turbulens áramlású közegben a monomer cseppek egymással kölcsönhatásba kerülnek, összetapadnak, törnek vagy ütköznek egymással, aminek hatására közöttük valamilyen mértékű komponens és hőtranszport megy végbe.

A kutatás célja e hatások feltárása és vizsgálata a polimer termék minőségére. A szuszpenziós polimerizáció modellezésére több-dimenziós populáció mérleg modellt alkalmaztunk. Az ilyen modellek megoldására a Monte-Carlo módszer nyújt megfelelő eszközt. Kidolgoztunk egy olyan Monte Carlo módszert, ami alkalmas a monomer cseppek kapcsolatának szimulálására és ezzel egyidejűleg a polimerizációs reakciók számítására. Vizsgáltuk az iniciátor kezdeti elkeveredésének hatását, valamint a polimerizáció hőmérsékletének hatását. A hőmérsékletnek jelentős hatása van a polimer termék tulajdonságaira. Mivel a polimerizáció a monomer cseppekben zajlik és ezek a reakciók erosen exotermek, és mivel a hőmérséklet befolyásolja a termék minőséget, ezért érdekes lehet a monomer cseppek hőmérsékletének változása a folyamat során. Azt tapasztaltuk, hogy már kis hőmérséklet különbség is észrevehető különbséget okoz a termék minőségben.