

Zárójelentés
szakmai beszámoló

OTKA nyilvántartási szám: 46460

Pályázat címe: **Molekulatömeg-eloszlás számítása és tervezése**
Vezető kutató: **Dr. Mészéna Zsolt**

A KUTATÁS EREDMÉNYEI

A kutatás célja, előzmények

A műanyagok fizikai-kémiai tulajdonságait - több más paraméter mellett - a molekulatömeg-eloszlás alapvetően befolyásolja. Ezért a molekulatömeg-eloszlás számítása fontos cél a polimerizációs reakciók modellezése során. A molekulatömeg-eloszlást befolyásolja a polimerizációs reakciólépések relatív sebessége, a választott reaktorkonfiguráció és a működtetés körülményei. Ezek alkalmas megválasztásával van módunk a molekulatömeg-eloszlás befolyásolására, hogy a kívánt tulajdonságokat adó eloszlást érjük el.

A molekulatömeg-eloszlás számításának számításgénye nagyon nagy, ezért ilyen feladatokban általában sok egyszerűsítő feltételezést alkalmaznak egyrészt a vizsgált kémiai rendszerrel (reakcióséma) kapcsolatban (például lánchossz-független sebességi állandók), másrészt a reaktorbeli keveredési viszonyok tekintetében. Polimerizáció modellezését tehát jelenleg úgy végzik, hogy tökéletes keveredést vagy dugattyúszerű áramlást tételeznek fel a reaktorban amikor a molekulatömeg-eloszlást becsülik. Ha a monomer konverzió illetve a hőmérsékletprofil becslése az előző számításokhoz képest nagyobb pontossággal szükséges, akkor ezt elkülönítve, a molekulatömeg-eloszlás számítása nélkül végzik, újabban például numerikus áramlástani módszerekkel (például véges térfogatok módszere).

A kutatási témával a University of Bradford (UK), IRC in Polymer Science and Technology kutatócsoportban, A F Johnson professzor úrnál töltött ösztöndíjas tanulmányaim alatt ismerkedtem meg 1993-ban. Bradfordból hazatérve informális együttműködésünk folyamatosan fennmaradt (a kutatócsoport 1996-ban átköltözött Leeds-be, majd 2004-ben a walesi Bangor-ba).

A szerződésben vállaltaktól való eltérések

A 2004-es év folyamán angliai partnerem kutatóhelye megváltozott, a csoport átköltözött Leeds-ből Bangorba (Wales). A költözés, az új laboratóriumok felszerelése elhúzódott, az érdemi munka csak 2005 végén indult be újra. Időközben az elméleti munkát folytattuk, illetve kiegészítő projektekbe kapcsolódtam be.

A tárgykörben kidolgozott elméletek, módszerek, eljárások

Angliai partnerrel együttműködve új molekulatömeg-eloszlás számítási algoritmust fejlesztettük ki szakaszos és folyamatos reaktorban végzett élő polimerizáció modellezésére (egydimenziós modell). Módszerünk érvényességét elméletileg igazoltuk, alkalmazhatóságát kísérleti adatok feldolgozásával demonstráltuk.

Módszerünk egyedülállóan előnyös bonyolult, sok csúcst tartalmazó molekulatömeg-eloszlások számítására. Ilyen eloszlások a polimerek fiziko-kémiai tulajdonságainak tervezésénél játszanak szerepet. Ahogy azt kísérletileg is igazoltuk, sok csúcst tartalmazó molekulatömeg-eloszlást a reaktor nem stacionárius állapotú működtetésével lehet előállítani.

Új algoritmusunk alapján kifejlesztettem egy gyors, közelítő számítási módszert a molekulatömeg-eloszlás közelítő becslésére élő polimerizációs reakciók esetén. A közelítő eljárás egyetlen paraméter (egy pseudo

komponens) figyelembevételével helyettesíteni képes a molekulatömeg-eloszlás számítását. Az eljárás helyesen adja meg a molekulatömeg-eloszlásban szereplő csúcsok helyét (M_n) és relatív nagyságát, speciális esetekben pedig (pl. állandósult állapotú folyamatos kevert tartályreaktor) a csúcs alakját is, vagyis utóbbi esetben egyenértékű a sokkal nagyobb számítási igényű pontos módszerekkel.

Módszerünkre alapozva egyszerű analitikus tervezési eljárást fejlesztettem ki a betáplálási iniciátor és monomer profilok becslésére csőreaktorban illetve folyamatos kevert tartályreaktorokból álló kaszkádban gyártani szándékozott polimer tervezett molekulatömeg-eloszlásából (MTE) kiindulva. Alkalmazott egyszerűsítő feltételezések: ideális élő anionos polimerizáció; pillanatszerű iniciálási reakció; ideális keveredési viszonyok (dugattyú-áramlás illetve tökéletesen kevert tartályok). Számítógépes programot dolgoztam ki a betáplálási profilok számítására egy kívánatos molekulatömeg-eloszlásból kiindulva. Számítások alapján javaslatot tettem laboratóriumi kísérletek elvégzésére.

Kutatás fő irányaihoz kapcsolódó egyéb eredmények

Bekapcsolódtam uretán polimerizációs kísérletek matematikai modellezésébe. Számítógépi programot fejlesztettem ki a polimerizáció fizikai és kinetikai paramétereinek becslésére DSC (differential scanning calorimetry) mérések eredményeiből.

Eredeti munkatervem kiterjesztéseként, együttműködésben a BME Szerves Kémiai Technológia Tanszékével matematikai modellt és számítógépes programot dolgoztunk ki polimerek égésének számítására, az égésgátlás javítása céljából.

Az elért eredmények

- Folyóiratcikkek: 1 nemzetközi folyóiratban megjelent, 6 közlésre benyújtott, 1 hazai folyóiratban megjelent cikk
- Konferencia publikációk: 6 nemzetközi, 3 hazai kiadvány, előadás vagy poszter
- Egyéb előadások: 4 angliai szeminárium
- A kutatásba bekapcsolódó doktoráns, Farkas Eszter az elvégzett munka és publikációk alapján 2007-ben dolgozatot nyújt be PhD fokozat elérése céljából.

A kutatáshoz kapott egyéb támogatások

Az OTKA pénzkeretből felhasznált fő tételek: konferenciák részvételi és utiköltsége, számításokhoz szükséges eszközök (személyi számítógép stb.), szakkönyvek.

A kutatás időtartama alatt 12 alkalommal jártam Leeds-ben illetve Bangorban alkalmanként 1-1 hét időtartamra, a fogadó fél költségére, közös publikációk elkészítése, konzultáció illetve szemináriumi előadások megtartása végett.

A számítások elvégzéséhez szükséges szoftverek közül a Predici molekulatömeg-eloszlás számító program használati jogát a Bangor-i partner biztosította.

A kutatási időszakba eső konferenciák közül egy esetben a részvételi vagy utiköltséget OMFB Mecenatura pályázatból fedeztem.

Budapest, 2007. február 28.