Simulation und Darstellung eines Copolymers aus Styrol, n-Butylacrylat, Hydroxyethylmethacrylat und Acrylsäure mit besonderen Strukturmerkmalen

Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades der
Naturwissenschaften im Fachbereich Chemie
der Universität GH Essen

vorgelegt von
Arthur Hundeshagen
aus Oberhausen

Essen 1999

Vorsitzender:	Prof. Dr. P. Rademacher
1. Gutachter:	Prof. Dr. F. Bandermann
2. Gutachter:	Prof. Dr. R. Sustmann

Tag der mündlichen Prüfung: 13.01.2000

für

Dominik Sebastian Schmitz

meinem Patenkind

Die vorliegende Arbeit wurde in der Zeit von September 1996 bis Juni 1999 am Institut für Technische Chemie der Universität GH Essen unter der Leitung von

Herrn Prof.Dr.F.Bandermann

durchgeführt.

Ihm gilt mein besonderer Dank für die Bereitstellung des Themas und seine Unterstützung während der Durchführung dieser Arbeit.

Weiterhin bedanke ich mich bei:

Herrn Prof. Dr. R. Sustmann für die freundliche Übernahme des Korreferates,

Herrn Dipl. Chem. Ing. D. Jacobi für die gewissenhafte Aufnahme der Gelpermeationschromatogramme,

Herrn Dipl. Chem. Ing. G. Joppich für die Einarbeitung in die Programmiersprache Fortran und viele weitere theoretische und praktische Hilfestellungen,

Herrn F. Marx für die Hilfestellung beim Aufbau des Reaktors,

sowie allen jetzigen und ehemaligen Mitarbeitern des Institutes für die gute Arbeitsatmosphäre sowie die zahlreichen interessanten und hilfreichen Diskussionen.

Abkürzungsverzeichnis:

Abb.	Abbildung	Mol-%	Molprozente
AIBN	Azoisobutyronitril	min.	Minute
n-BA	n-Butylacrylat	$\bar{n}_1$	mittlere Sequenzlänge des Monomers 1
c_0	Konzentration zu Beginn der Reaktion	NMR	Kernresonanzspektroskopie
c(t)	Konzentration zur Zeit t	p_{11}	Homoübergangswahrscheinlichkeit des Monomers 1
c_{HEMA}	Konzentration an HEMA	p_{12}	Übergangswahrscheinlichkeit von 1 nach 2
$c_{Initiator}$	Konzentration des Initiators	P	Polymer
Decalin	Decahydronaphtalin	P·	Polymerradikal
DK	Dielektrizitätskonstante	r	Reaktionsgeschwindigkeit
DMF	Dimethylformamid	r_0	Anfangsreaktionsgeschwindigkeit
DMSO	Dimethylsulfoxid	r(t)	Reaktionsgeschwindigkeit zum Zeitpunkt t
E_{coh}	Kohäsionsenergie	r_1	Copolymerisationsparameter der Substanz 1 (bei 2 Comonomeren)
E_T	Dimroth-Energie	r_{12}	Copolymerisationsparameter der Substanz 1 mit der Substanz 2 (bei mindestens 3 Comonomeren)
exp	Exponentialfunktion (e^x)	R	Abkürzung nach Kélen Tüdös
F	Monomerverhältnis / Faktoren	S	Styrol / Abkürzung nach Kélen Tüdös
f	Copolymerverhältnis / Radikalausbeutefaktor	S_{1n}	Häufigkeit einer Sequenz vom Typ 1 der Länge n
Fa.	Firma	Sdp.	Siedepunkt
g	Gramm	sec.	Sekunden
GC	Gaschromatographie	t	Zeit
GPC	Gelpermeationschromatographie	Tab.	Tabelle

HEMA	2-Hydroxyethylmethacrylat	tech.	technisch
hPas	hekto Pascal	THN	Tetrahydronaphtalin
I	Initiator	U	Umdrehungen
I·	Initiatorradikal	V	Volumen bzw.Spannung in Volt
[I]	Initiatorkonzentration	V_{100}	Volumenabnahme bei 100%igen Umsatz
Iso-durol	1,2,3,5-Tetramethylbenzol	V_{Dil}	Dilatometervolumen
K	Kelvin	V_R	Reaktorvolumen
Kat	Katalysator (1-Methylimidazol)	x, y, z	Exponentialkoefizienten der Geschwindigkeitskonstanten
k_i	Initiatorzerfallsgeschwindigkeits-konstante	z.B.	zum Beispiel
k_p	Wachstumsgeschwindigkeits-konstante	α	Gewichtungsfaktor
k_S	Gesamtgeschwindigkeitskonstante	δ	Hildebrand`sche Löslich-keitsparameter
k_t	Abbruchgeschwindigkeitskonstante	$\Delta\rho$	Dichtedifferenz
L	Liter	$\Delta\rho_{max}$	maximale Dichtedifferenz
Lit.	Literaturquelle	ΔV	Volumenabnahme zum Zeitpunkt t
ln	natürlicher Logarithmus	χ_{12}	Flory Huggins-Parameter
LSM.	Lösungsmittel	∅	Durchschnittswert
M1	Monomer 1	η	Abkürzung nach Kélen Tüdös
[M1]	Molenbruch des Monomers 1	ξ	Abkürzung nach Kélen Tüdös
M_{1n}	Massenanteil einer Sequenz vom Typ 1 der Länge n	Ω	Widerstand
m_x	Multiplikatoren x	*, +, o	benutzte Symbole zur Darstellung eines Copolymerkettenausschnittes
Ma-%	Massenprozente		

Inhaltsverzeichnis