

# **Experimentelle Untersuchungen, deterministische Modellierung und Monte-Carlo-Simulation zur Emulsionspolymerisation von Styrol und *n*-BMA**

Ira Fresen, Dissertation Paderborn 2001

Die vorliegende Arbeit behandelt die deterministische wie auch stochastische Modellierung der Kinetik der Emulsionspolymerisation. Zur Prüfung der Modelle wurden umfangreiche experimentelle Untersuchungen an den Monomeren Styrol und *n*-BMA (Polymerisation monodisperser und bimodaler Saaten mittels Saatechnik im Isoperibolkalorimeter) durchgeführt.

Zur Anpassung der experimentellen Wärmeströme wurde ein deterministisches Simulationsprogramm eingesetzt. Es erfaßt die Kopplung von Ein- und Austrittsprozeß und den Wiedereintritt desorbiertener Monomerradikale. Die unter Verwendung der Hochumsatzmodelle von Panke und Buback gelungenen Anpassungen zeigten eine Abhängigkeit jeweils zweier Modellparameter vom Partikelvolumen.

Die Monte-Carlo-Methode ermöglicht eine individuelle Betrachtung von Reaktionen und Reaktionsorten, wodurch ohne rechnerischen Mehraufwand die Molmassen und Volumenverteilung berechnet werden können. Eine hohe Übereinstimmungsqualität mit den deterministischen Simulationsergebnissen konnte durch Berücksichtigung eines Monomeraustauschs zwischen Latexteilchen erreicht werden.

Zur Simulation bimodaler Saaten wurde das Monte-Carlo-Programm erweitert, damit eine Erfassung mehrerer Klassen diverser Latexteilchengrößen möglich ist. Die Analyse von experimentellen und simulierten Volumenverteilungen zeigt, daß das Volumen großer Partikel schneller wächst als das der kleinen.

Abschließend wurden für eine vollständigen Erfassung der Wasserphasenkinetik analog zur Latexphase alle hierin ablaufenden Reaktionen zuzüglich der Phasenaustauschprozesse in das Modell integriert. Mit dem modifizierten Programm konnten die Konzentrationsverläufe aller Spezies in der Wasserphase berechnet werden.