

Inhaltsverzeichnis

1 ZUSAMMENFASSUNG	1
2 SUMMARY	3
3 EINLEITUNG UND PROBLEMSTELLUNG	5
4 MODELLIERUNG DER EMULSIONSPOLYMERISATION	7
4.1 Verteilungen und ihre Momente	10
4.2 <i>Smith-Ewart</i>-Gleichung	11
4.3 Verknüpfung von <i>Smith-Ewart</i>-Gleichung und Pseudo-Bulk-Kinetik	13
4.3.1 Herleitung I	13
4.3.2 Herleitung II	14
4.4 Modellierung der Molmassenverteilung	15
4.4.1 Monodisperse Latexphase	15
4.4.2 Polydisperse Latexphase	18
4.5 Radikal-Häufigkeitsverteilung für ein Pseudo-Bulk-Modell	18
4.6 Modellierung der Emulsionspolymerisation von Styrol	21
4.6.1 Das Softwarepaket PREDICI	21
4.6.2 Pseudo-Bulk-Modell	25
4.6.3 Reaktionsschema	26
4.6.4 Monomer-Phasenverteilung	28
4.6.5 Emulgator-Bilanz	30
4.6.6 Teilchenbildung	31
4.6.7 Populationsbilanz	32
4.6.8 Vergleich des Modells mit den experimentellen Daten von Harada	33
5 THERMISCHE EMULSIONSPOLYMERISATION	39
5.1 Thermische Massepolymerisation von Styrol	40
5.2 Selbstinitiierung von Styrol	43
5.3 Populationsbilanz der Selbstinitiation	44
5.4 Erweiterung der Populationsbilanz auf zwei Radikaltypen	51
5.4.1 Thermische Initiierung	52

5.4.2	Desorption	52
5.4.3	Eintritt von (Monomer-)Radikalen in die Latexphase	54
5.4.4	Kettenwachstum der Monomer-Radikale	55
5.4.5	Kettenübertragung aufs Monomer	55
5.4.6	Bimolekulare Termination	56
5.4.7	Radikale der kontinuierlichen Phase	57
5.4.8	Die D_f -Faktoren	58
5.4.9	Das Pseudo-Bulk-Modell	60
5.4.10	Modell-Übersicht und Kontrollmöglichkeiten	62
5.5	Vergleich von Modell und experimentellen Daten	65
5.6	Kritische Betrachtung des Modells von Hui und Hamielec	67
5.6.1	Einleitung	67
5.6.2	Das Modell von Hui und Hamielec	68
5.6.3	Entwicklung eines neuen Modells	70
5.7	Experimentalteil thermische Miniemulsionspolymerisation von Styrol	91
5.8	Erweiterung auf drei Radikal-Spezies	96
5.8.1	Chemische Master Gleichung (Populationsbilanz)	96
5.8.2	Pseudo-Bulk-Modell	102
5.8.3	Modellparameter	105
5.8.4	Kontrollmöglichkeiten	106
5.9	Ergebnisse und Diskussion	108
5.10	Ausblick	122
6	EMULSIONSPOLYMERISATION UND STOFFTRANSPORT	124
6.1	Modellierung des Stofftransports in Emulsionspolymerisationen	125
6.1.1	Modellrahmen und Phasenübersicht	125
6.1.2	Mathematisches Modell	127
6.1.3	Ergebnisse und Diskussion	136
6.2	Einfluss von Emulgatoren auf den Stofftransport	152
7	DEPOLYMERISATION UND PYROLYSE	160
7.1	Gleichgewicht zwischen Polymerisation und Depolymerisation – <i>Ceiling</i>-Temperatur	160
7.2	Thermischer Abbau von Polystyrol	166
8	LITERATUR	170

9 ANHANG	180
9.1 Symbole und Abkürzungen	180
9.2 Stofftransportwege in Emulsionen	188
9.3 Experimentelle Daten zur thermischen Miniemulsionspolymerisation von Styrol	191
9.4 Verwendete Chemikalien	193
9.5 Veröffentlichungen	193