

Project Code : TRG4580064

Project Period : 2.5 years

การวิเคราะห์ค่ามวลโมเลกุล (Molecular weight) และการกระจายตัวของขนาดโมเลกุล (Molecular Weight Distribution) โดยใช้วิธีทางรีโอโลยี

Cattaleeya Pattamaprom^a, Anuwat Siriwat^b, and R.G. Larson^c

^a Department of Chemical Engineering, Thammasat University, Pratumani, 12121 Thailand

Phone:(66)2564-3002 ext 3125 Email:cattalee@engr.tu.ac.th

^bThe Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University, Bangkok, 10400 Thailand

^cDepartment of Chemical Engineering, The University of Michigan, Ann Arbor, MI 48109 USA

บทคัดย่อ

จากอดีตถึงปัจจุบัน นักวิจัยจำนวนมากสนใจศึกษาและพัฒนาการคำนวณค่ามวลโมเลกุล (MW) และค่าการกระจายมวลโมเลกุล (MWD) ของโพลิเมอร์สายตรงจากสมบัติการไหลของโพลิเมอร์ (rheological) โดยไม่ต้องอาศัยการวิเคราะห์ทางโครมาโตกราฟีซึ่งทำได้ยากกว่าและต้องใช้ตัวทำละลายที่อันตราย ในปัจจุบันการคำนวณโดยใช้ทฤษฎี “ดับเบิล เรพเทชัน” (double reptation) เป็นที่รู้จักอย่างแพร่หลายและมีการนำมาเผยแพร่ในเชิงพาณิชย์ แต่เนื่องจากทฤษฎีนี้ให้ผลถูกต้องในช่วงของมวลโมเลกุลและการกระจายตัวของขนาดโมเลกุลที่ค่อนข้างจำกัด ทำให้ผู้ใช้ขาดความมั่นใจในการใช้วิธีการนี้ในการวิเคราะห์ค่าการกระจายมวลโมเลกุลของโพลิเมอร์ แม้ว่าจะเป็นวิธีที่ไม่ค่อยซับซ้อนและได้คำตอบในเวลาอันรวดเร็วก็ตาม ดังนั้นงานวิจัยนี้ จึงนำเสนอการวิเคราะห์โดยนำทฤษฎีใหม่มาใช้เพื่อเพิ่มความถูกต้องในการคำนวณค่าการกระจายมวลโมเลกุลของโพลิเมอร์สายตรง โดยทฤษฎีนั้นคือทฤษฎี “ดูอัล คอนสเตรนธ์” (dual-constraint) ซึ่งสามารถทำนายสมบัติทางรีโอโลยีของโพลิเมอร์สายตรงจากการกระจายมวลโมเลกุลได้อย่างถูกต้องแม่นยำค่อนข้างมาก ก่อนนำมาใช้ในการคำนวณเราได้แก้ไขนิยามของจำนวนการพันกันในสายโซ่ (number of entanglement) ในทฤษฎีดูอัล คอนสเตรนธ์ (dual-constraint) ให้สอดคล้องกับคำนิยามแบบเอฟ (F-definition) ในบทความที่เขียนโดย ลาร์สันและคณะในปี ค.ศ. 2003 (Larson et. al.) ในงานวิจัยนี้เรานำผลการทำนายค่ามวลโมเลกุล (MW) และค่าการกระจายมวลโมเลกุล (MWD) ที่ได้จากทฤษฎีนี้เปรียบเทียบกับผลจากการใช้ทฤษฎีดับเบิล เรพเทชัน (double reptation) และการวิเคราะห์ทางโครมาโตกราฟี (GPC) เราพบว่าการวิเคราะห์ค่ามวลโมเลกุลและการกระจายตัวของโมเลกุลโดยอิงทฤษฎี dual-constraint นี้สอดคล้องกับค่าที่ได้จากการวิเคราะห์ทางโครมาโตกราฟีมากกว่าวิธีที่อิงทฤษฎี double reptation เป็นอย่างมาก

คำหลัก: วิธีทางรีโอโลยี, การกระจายตัวของขนาดโมเลกุล, โพลิเมอร์

Project Code : TRG4580064
Project Period : 2.5 years

Determination of the Molecular Weight Distribution of Polymers from Their Rheological Properties

Cattaleeya Pattamaprom^a, Anuwat Siriwat^b, and R.G. Larson^c

^a Department of Chemical Engineering, Thammasat University, Pratumani, 12121 Thailand

Phone:025643002 ext 3125 Email:cattalee@engr.tu.ac.th

^bThe Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University, Bangkok, 10400 Thailand

^cDepartment of Chemical Engineering, The University of Michigan, Ann Arbor, MI 48109 USA

Abstract

Recently, there has been a high level of interest in inferring the molecular weight (MW) and molecular weight distribution (MWD) of a linear polymer melt from its rheological properties alone (without the need for expensive and solvent-related GPC analysis). The most widely known and commercially available is that by the development of the "double reptation" formula which provides a single formula relating the storage and loss moduli (G' and G'') to the MWD (Mead, 1994). While reasonable success has been achieved in extracting MWD from G' and G'' using double reptation and related theories, accurate results for a wide range of molecular weight distributions and a variety of polymers have not been reached. At present, several more advanced models have been proposed to improving the accuracy of this method including ours. Here, we propose to generate the molecular weight distribution of linear polymers based on the theory underlying the dual constraint model (Pattamaprom, 2000, 2001). Dual constraint model is one of the models that provide excellent predictions of linear viscoelastic properties of polymers from their molecular weight distributions. The MW and MWD results obtained from this work and those from double reptation scheme, as well as those from the GPC measurements, were compared. The results indicated excellent agreement between the analyses from our scheme and those from the chromatography technique.

Keywords: Rheological method, molecular weight distribution, polymers