

บทคัดย่อ

เอทิลีน 1-โอลิฟินส์ โคพอลิเมอร์ ที่ผลิตด้วยระบบเร่งปฏิกิริยาที่มีหลาย site type โดยทั่วไปจะมีการกระจายตัวของน้ำหนักโมเลกุล (Molecular Weight Distribution, MWD) และการกระจายตัวขององค์ประกอบทางเคมี (Chemical composition distribution) ที่กว้าง เพราะว่าพอลิเมอร์ที่ผลิตขึ้นจากแต่ละ site type มีลักษณะโครงสร้างโมเลกุลที่แตกต่างกัน งานวิจัยนี้ ได้ศึกษาเทคนิค Simultaneous deconvolution สำหรับหาจำนวน Site type และลักษณะโครงสร้างโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ผลิตขึ้นที่แต่ละ Site type ผลการศึกษาพบว่า การทำ Simultaneous deconvolution จากการกระจายตัวร่วมของน้ำหนักโมเลกุลและองค์ประกอบทางเคมี (Bivariate MWD and CCD) เป็นวิธีที่ดีที่สุด

ในกรณีของระบบที่เป็น 2 site type งานวิจัยที่ได้พัฒนาเกณฑ์ในการเกิดการกระจายตัวขององค์ประกอบทางเคมีที่มีสองจุดยอด โดยทดสอบเกณฑ์ที่พัฒนาขึ้นในทางทฤษฎีกับผลการจำลองและในทางการทดลองกับผลจาก เทคนิค Crystallization analysis fractionation (Crystaf) และ crystallization elution fractionation (CEF) เกณฑ์ที่เสนอขึ้นนั้นได้นำไปประยุกต์ใช้ในการศึกษาปรากฏการณ์การตกผลึกร่วมในเทคนิคทั้งสอง ผลการวิจัยพบว่าการตกผลึกร่วมที่แนวโน้มที่จะเกิดขึ้นได้มากเมื่อพอลิเมอร์ที่ผสมกันมีความสามารถในการตกผลึกคล้ายคลึงกัน เมื่อสัดส่วนของพอลิเมอร์ทั้งสองมีความแตกต่างกันอย่างมาก และเมื่ออัตราการลดอุณหภูมิสูง CEF ให้ผลการกระจายตัวขององค์ประกอบทางเคมีได้ดีกว่า CRYSTAF ด้วยระยะเวลาที่สั้นกว่า

คำสำคัญ การกระจายตัวของน้ำหนักโมเลกุล การกระจายตัวขององค์ประกอบทางเคมี พอลิเอทิลีน crystallization analysis fractionation (Crystaf), crystallization elution fractionation (CEF), simultaneous deconvolution

Abstract

Ethylene/1-olefin copolymers produced with multiple-site-type catalytic systems typically have broad molecular weight distribution (MWD) and chemical composition distribution (CCD) because each site type produces molecules with distinct average chain microstructures. In this work, four strategies for simultaneous deconvolution of MWD and CCD were investigated to identify the number of site types and chain microstructures produced on each site type. The simultaneous deconvolution of the complete bivariate MWD and CCD was found to be the best approach to describe the complete microstructure of the model ethylene/1-butene copolymers.

In the specific case of two site-type system, a criterion for CCD bimodality was developed. The proposed criterion was validated theoretically using simulation data and experimentally using crystallization analysis fractionation (CRYSTAF) and crystallization elution fractionation (CEF) of ethylene/1-octene copolymer blends. The proposed criterion was used as a benchmark for describing cocrystallization effects in both CRYSTAF and CEF techniques. Our results showed that cocrystallization in both techniques is more prevalent when the copolymer blend has components with similar crystallizabilities, one of the components is present in much higher amount, and fast cooling rates are used. CEF was found to provide better CCD estimates than CRYSTAF in a much shorter analysis time.

Keywords: chemical composition distribution (CCD), crystallization analysis fractionation (Crystaf), crystallization elution fractionation (CEF), polyethylene, simultaneous deconvolution