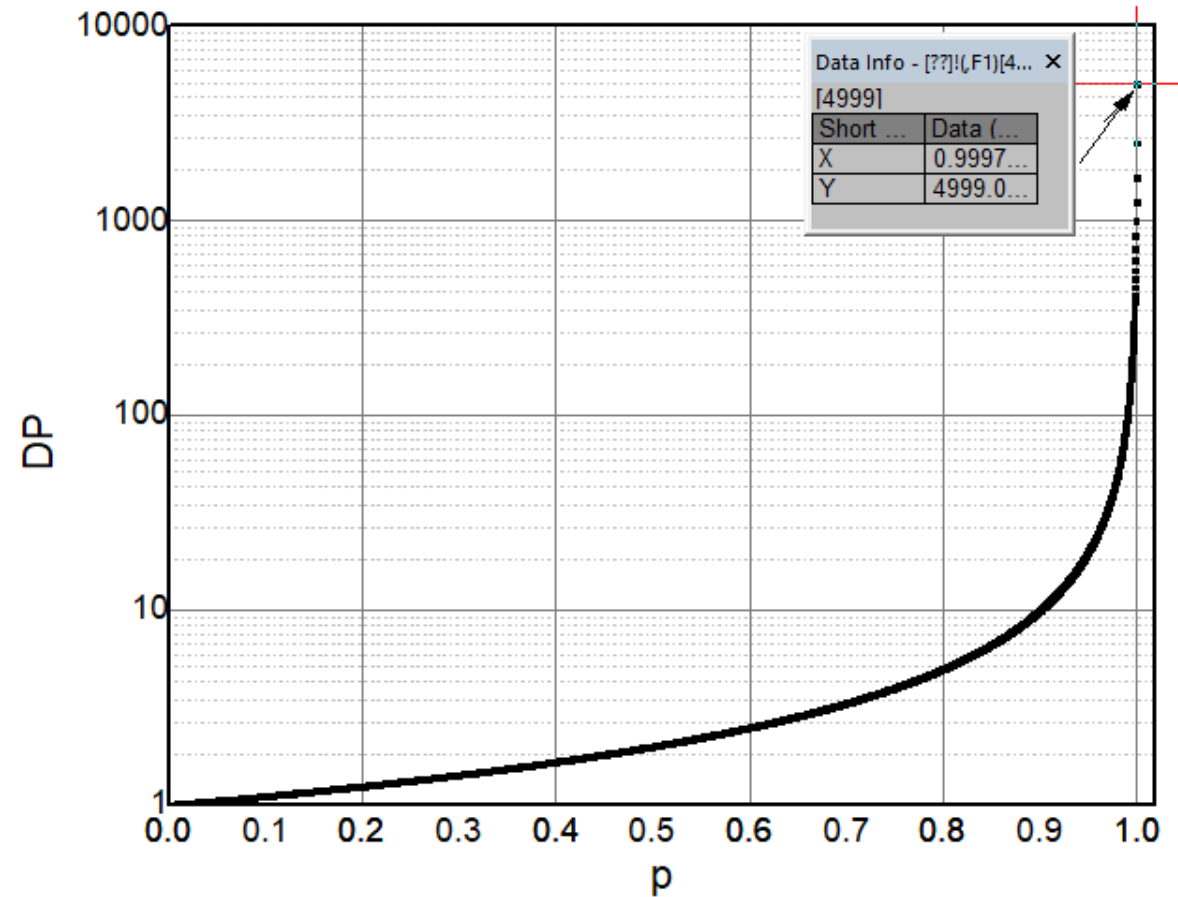
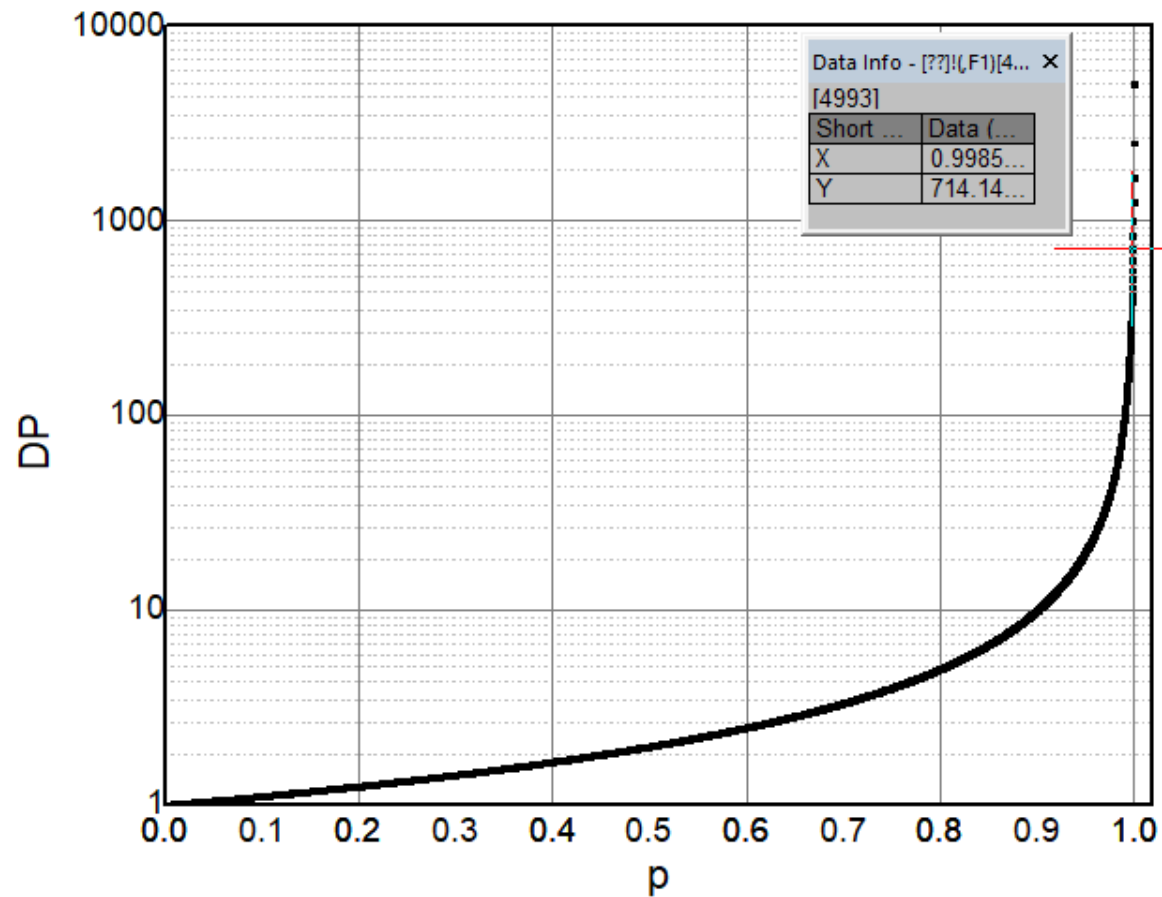


# Παραδείγματα

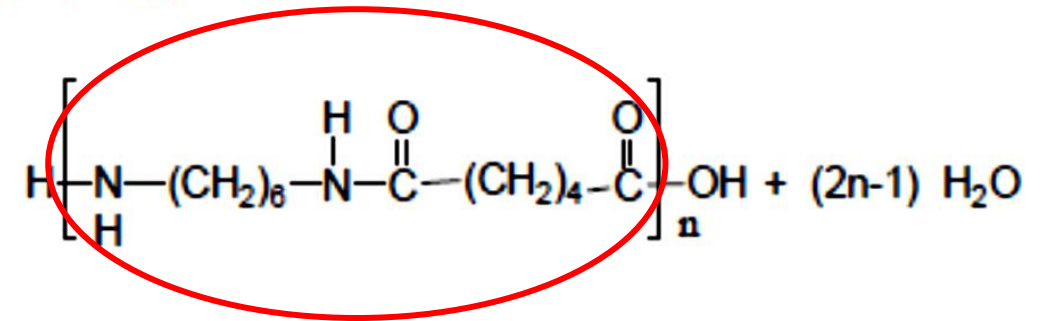
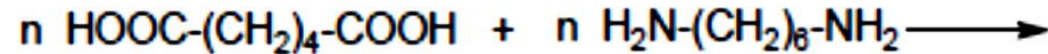
Για μια αντίδραση σταδιακού πολυμερισμού να γίνει διάγραμμα του βαθμού πολυμερισμού έναντι του βαθμού προόδου της αντίδρασης. Τι συμπεράσματα προκύπτουν?



# Παραδείγματα

**Που πρέπει να σταματήσει η αντίδραση πολυμερισμού για την παραγωγή Nylon 6,6 ώστε να πετύχουμε μοριακό βάρος 12000-13000.**

**Παραγωγή πολυαμιδίων (Nylon 6,6) από αδιπικό οξύ και εξαμεθυλενοδιαμίνη:**



$$DP_n = \frac{\overline{M}_n}{M_0}$$

**όπου  $M_0$  το μοριακό βάρος του μονομερούς:  $2 \times 14 + 12 \times 12 + 1 \times 22 + 2 \times 16 = 226$**

**για  $M_n = 12000 \rightarrow DP_n = 53$**

**για  $M_n = 13000 \rightarrow DP_n = 58$**

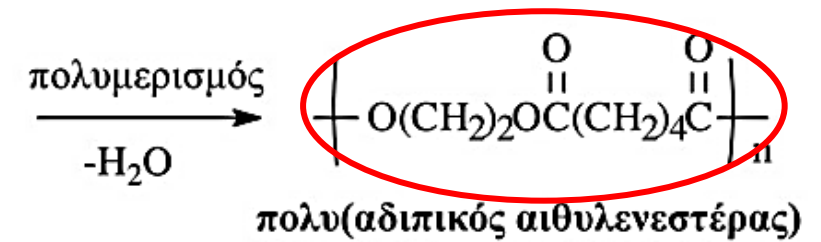
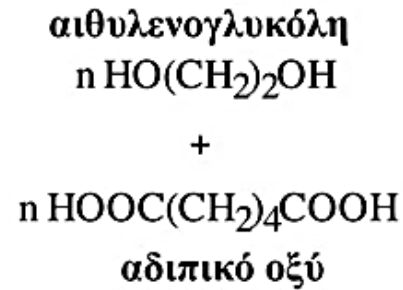
$$DP_n = \frac{1}{2(1-p)}$$

**Και στις δυο περιπτώσεις το  $p$  υπολογίζεται περίπου 0.99 (η διαφορά είναι στο 3<sup>ο</sup> δεκαδικό ψηφίο!).**

# Παραδείγματα

Υπολογίστε το μέσο μοριακό βάρος πολυμερούς που προήλθε από το σταδιακό πολυμερισμό στην περίπτωση αντίδρασης:

αδιπικού οξέος ( $\text{HOOC}-(\text{CH}_2)_4-\text{COOH}$ )  
με αιθυλενογλυκόλη ( $\text{HO}-(\text{CH}_2)_2-\text{OH}$ )



$$M_0 = 8 \times 12 + 1 \times 12 + 4 \times 16 = 172$$

σε βαθμό προόδου της αντίδρασης 90, 99 και 99.9%.

$$DP_n = \frac{\overline{M}_n}{M_0}$$

$$DP_n = \frac{1}{2(1-p)}$$

$$\overline{M}_n = DP_n M_0 = \frac{M_0}{2(1-p)}$$

$$p = 0.9$$

$$\overline{M}_n = 860$$

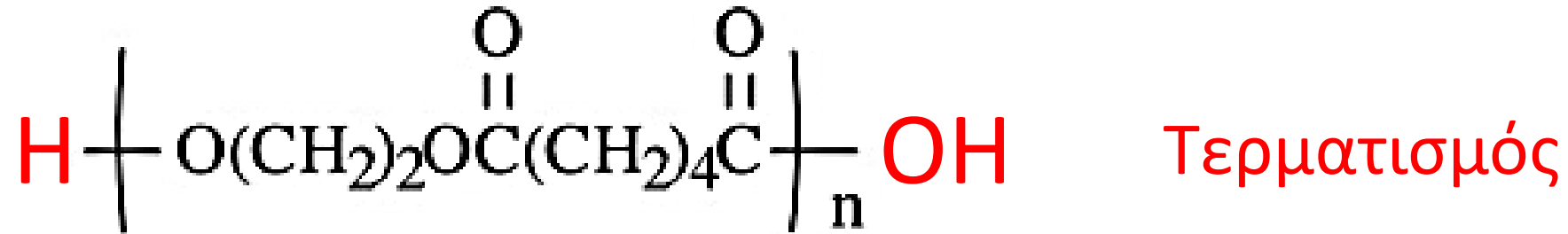
$$p = 0.99$$

$$\overline{M}_n = 8600$$

$$p = 0.999$$

$$\overline{M}_n = 86000$$

*Υπολογισμός Μοριακού Βάρους και πλευρικές ομάδες*



***Μοριακό Βάρος τερματικών ομάδων: 18 g/mol***

*Άρα τα προηγούμενα αποτελέσματα αναδιαμορφώνονται σε: 878 g/mol, 8618 g/mol και 86018 g/mol, αντίστοιχα.*

*Το σφάλμα στον υπολογισμό του MB του πολυμερούς χωρίς τον υπολογισμό των πλευρικών ομάδων είναι: 2%, 0.2% και 0.02% αντίστοιχα!*

# Παραδείγματα

Κατά τον πολυμερισμό της εξαμεθυλενοδιαμίνης με το αδιπικό οξύ για την παρασκευή του Νάιλον 6,6, με αρχικές ισομοριακές αναλογίες των δύο μονομερών, υπολογίστε το μέσο μοριακό βάρος σε αριθμό και κατά βάρος του πολυμερούς, καθώς και τη διασπορά της ΚΜΒ σε βαθμό προόδου της αντίδρασης 99%.



$$M_o = (114+112)/2=113$$

$$DP_n = \frac{1}{(1-p)} = 100$$

$$DP_w = \frac{(1+p)}{(1-p)} = 199$$

$$\overline{M}_n = 11300 \text{ g / mol}$$

$$\overline{M}_w = 22487 \text{ g / mol}$$

$$I = \frac{\overline{M}_w}{\overline{M}_n} = 1.99$$

# Παραδείγματα

Κατά τον πολυμερισμό του  $H_2N-(CH_2)_{10}-COOH$  για το σχηματισμό του Νάιλον-11, κάποια δεδομένη χρονική στιγμή έχει αντιδράσει το 95% των δραστικών ομάδων. Υπολογίστε (α) το ποσό του μονομερούς (ως κλάσμα βάρους) που έχει παραμείνει στο αντιδρών μίγμα, (β) το κλάσμα βάρους του αντιδρώντος μίγματος που έχει βαθμό πολυμερισμού 100 και (γ) το βαθμό προόδου της αντίδρασης, στον οποίο τα 100-μερή έχουν μέγιστη απόδοση κατά βάρος.

Η κατανομή μοριακών μεγεθών με βάση το κατά βάρος κλάσμα των μακρομορίων  $W_i$  με  $i$  δομικές μονάδες, είναι:

$$W_i = ip^{i-1}(1-p)^2$$

(α) Για τα μονομερή ισχύει:  $W_1 = 1p^{1-1}(1-p)^2 = 0.05^2 = 2.5 \times 10^{-3}$

(β) Για τα εκατονταμερή ισχύει:  $W_{100} = 100p^{99}(1-p)^2 = 1.56 \times 10^{-3}$

(γ)  $\left. \frac{d(W_i)}{dp} \right|_{i=100} = 0 \longrightarrow p = 0.98$