

MC-CT-6

Modelamiento de la dispersión de partículas inorgánicas en una matriz polimérica.

José de Jesús Infante Rivera, Laura Ortiz Rivera, Carlos Guerrero Salazar, Virgilio González González, Tomas Lozano¹, Pierre Lafleur¹.

Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica.

Pedro de Alba S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México. C.P.66450.

jesus_infante_rivera@hotmail.com

¹Ecole Polytechnique de Montréal, Génie Chimique, CRASP

Resumen

En este trabajo se pretende validar un modelo matemático de ruptura violenta de partículas de carbonato de calcio dispersas en polipropileno isotáctico. El planteamiento matemático propuesto, basado en el mecanismo cinético de una reacción química asume que las partículas más grandes presentan una mayor rapidez de rompimiento y siendo este proceso secuencial sin formar directamente partículas pequeñas; es decir, sin que se de el proceso de erosión en el sistema.

Procedimiento experimental

Se empleó polipropileno isotáctico como matriz polimérica y carbonato de calcio como carga. Para la dispersión de este ultimo en la primera, se uso un extrusor de doble husillo contra rotatorio.

La evaluación del modelo se realizó específicamente en el dado del extrusor, manejándose tres relaciones L/D distintas y en total 16 flujos incluyendo la purga del sistema.

Se toman muestras de los diferentes flujos, las cuales se preparan para microscopía óptica mediante la elaboración de tabletas en una prensa con unidad de calentamiento (a baja

presión para no dañar los tamaños originales de las partículas), obteniéndose imágenes a 50x, de las cuales se mide el diámetro y área de partícula clasificándose en tres grupos: n1 para aquellas entre 15 –50 µm, n2 para 50-80 µm y n3 para 80 µm o mayores.

Modelo matemático

La velocidad en la que se lleva a cabo una reacción química se representa en función de ecuaciones diferenciales que proporcionan la concentración de reactivos y productos con respecto al tiempo. Si se Aplica este mismo concepto al rompimiento de las partículas podríamos decir que las partículas de tamaño n3 rompen en dos, una tamaño n2 y otra de tamaño n1, o bien en tres partículas cada una de tamaño n1, a su vez las partículas de tamaño n2 rompen en dos de tamaño n1. entonces:

$$\frac{dn_1}{dt} = (K_{32} + 3K_{31})n_3 + 2K_{21}n_2 \quad (1)$$

$$\frac{dn_2}{dt} = K_{32}n_3 - K_{21}n_2 \quad (2)$$

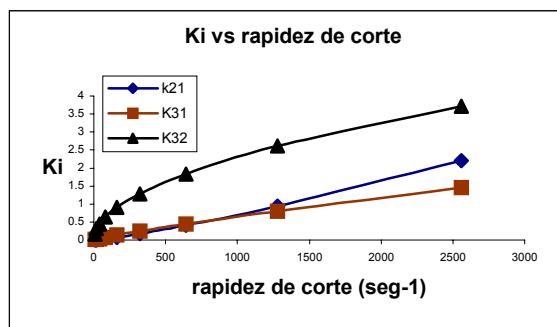
$$\frac{dn_3}{dt} = -(K_{32} + K_{31})n_3 \quad (3)$$

Donde las diferentes Ki representan la rapidez de rompimiento. En nuestro caso, el sistema se soluciona utilizando función FMINSEARCH dentro del software Matlab R12. La constante de

rapidez de rompimiento se puede relacionar con la rapidez de corte generado en el dado utilizando una ecuación de potencia similar a la de la Ley de Ostwald-De Waele.

Resultados

Para todos los ensayos se clasificaron las partículas, se encontraron las ecuaciones diferenciales y se calcularon las constantes de rapidez de rompimiento. Con la rapidez de corte para cada dado, evaluado considerando fluido Newtoniano, y la constante de rapidez de rompimiento se realizó un gráfico de K_i vs γ , tratándose de ajustar los datos a una ecuación de potencia:



Conclusiones

La constante de rapidez de rompimiento de las partículas aumenta junto con la rapidez de corte lo cual habla de una relación directamente proporcional entre ambas como la propuesta con la ecuación de potencia, aun sin embargo el ajuste es pobre presentándose mejores resultados para K21 y K32, lo cual nos indica que el rompimiento de las partículas se realiza en secuencia y no abruptamente. Como se puede observar en el gráfico el efecto de la rapidez de corte es mayor para las partículas grandes y decrece en gran medida para las partículas pequeñas esto quiere decir que solamente se va alcanzar hasta cierto tamaño de partícula mediante este procedimiento.

Bibliografía

- T. Lozano, P.G. Lafleur, M. Grmela, S.R. Tremblay, CRASP, The use of elongational flow to produce proper dispersion of agglomerates, Ecole Polytechnique de Montreal, 2001.
- F. Berzin, Quelques exemples de calcul de la dispersion de charges minérales dans une extrudeuse, Ecole Polytechnique de Montreal, August 1999.
- A. Nebuloni, Techniques to determine the dispersion of a filler in a polymeric matrix, Ecole Polytechnique de Montreal, June 2001.

<p>Ruptura Violenta</p> <p>K_{21}</p> <p>Mecanismo 1</p>	<p>Regresión de potencia</p> <p>$K_{21} = C_{21} \gamma^{a_{21}}$</p> <p>$C_{21} = 1.450 \times 10^{-4}$</p> <p>$a_{21} = 1.2269$</p> <p>$R^2 = 0.8836$</p>
<p>K_{31}</p> <p>Mecanismo 2</p>	<p>$K_{31} = C_{31} \gamma^{a_{31}}$</p> <p>$C_{31} = 1.760 \times 10^{-3}$</p> <p>$a_{31} = 0.8566$</p> <p>$R^2 = 0.5550$</p>
<p>K_{32}</p> <p>Mecanismo 3</p>	<p>$K_{32} = C_{32} \gamma^{a_{32}}$</p> <p>$C_{32} = .4770$</p> <p>$a_{32} = 0.5099$</p> <p>$R^2 = 0.7436$</p>

Graficando las tres ecuaciones para cada rompimiento de partículas se obtiene: