

**ВЫБОР ОПТИМАЛЬНОГО СОСТАВА ПОЛИМЕРНОЙ КОМПОЗИЦИИ
НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА И ПОЛИКАПРОАМИДА
МЕТОДОМ ФАКТОРНОГО АНАЛИЗА**

А.А. Павленко, аспирант;

Л.М. Миронович, д-р. хим. наук, профессор

Сумский государственный университет, г. Суми

На основании обобщающей функции желательности методом факторного анализа по экспериментальным данным физико-механических характеристик ПЭТФ, ПА-6, ПКЗТ и композиций полимеров определен оптимальный состав полимерной композиции на основе ПЭТФ и ПА-6.

На основі узагальнювальної функції бажаності методом факторного аналізу за експериментальними даними фізико-механічних характеристик ПЕТФ, ПА-6, ПКЗТ і композицій полімерів визначено оптимальний склад полімерної композиції на основі ПЕТФ і ПА-6

В последнее время большое внимание химиков уделено переработке отходов на основе полимерных материалов, к которым можно отнести отходы полиэтилентерефталата (ПЭТФ) и поликапроамида (ПА-6), наиболее распространенные в быту. Несмотря на большой поток информации по переработке вторичных ПЭТФ или ПА-6, публикаций, посвященных совместной переработке отходов ПЭТФ и ПА-6, практически нет из-за сложности получения полимерных композиций с хорошими физико-механическими свойствами [1,2]. В литературе имеются некоторые сведения о композициях на основе вторичных ПЭТФ и ПА-6 [3], но дальнейшего развития они не получили.

Нами исследована утилизация отходов зонтичной ткани, которые получают при изготовлении зонтиков. Отходы зонтичной ткани представляют собою смесевую цветную тканевую композицию, имеющую в своем составе ПЭТФ (~20 %), ПА (~80 %) и добавки. Отходы зонтичной ткани измельчали при помощи ножевой дробилки до размеров 10-20 мм в поперечнике. Гомогенизация предварительно измельченных отходов осуществлялась в экструдере (ЧП-63х32), имеющем три зоны нагрева: первую – при температуре 180-200° С; вторую – от 200 до 220° С и третью от 220° до 230° С. Три зоны нагрева исключают местный перегрев, возможный при одноступенчатом нагреве, и позволяют не допускать образования непригодного к формованию термореактивного полимера вследствие исключения процессов деструкции, сополимеризации, сшивки цепей. Получена однородная полимерная композиция, пригодная для дальнейшего формования. Образцы полимера для определения физико-механических характеристик получали на литьевой машине ГПП-2 при температуре расплава 285° С. Полученные физико-механические характеристики ПКЗТ удовлетворяют требованиям к эксплуатационным свойствам полимерных композиций [4]. Исходя из хороших эксплуатационных характеристик полимерной композиции на основе отходов зонтичной ткани проведен поиск оптимального состава полимерной композиции на основе ПЭТФ и ПА-6.

Целью работы явилось нахождение обобщенной функции желательности для полимерных композиций с целью поиска оптимального состава композиции на основе ПЭТФ и ПА-6 с хорошими физико-механическими свойствами.

Экспериментально определены разрушающее напряжение, модуль упругости при растяжении, предел текучести при растяжении, ударная вязкость без надреза для вторичных ПЭТФ, ПА-6; ПКЗТ и композиций с различным содержанием ПЭТФ и ПА-6 по методике [6]. Проведено по 5 экспериментов для исследуемых образцов. Результаты испытаний физико-механических свойств представлены в таблице 1 (в таблице 1 указано среднее значение).

Таблица 1 - Физико-механические свойства вторичных полимеров и полимерных композиций

Исследуемое вещество	Процентное содержание ПЭТФ в композиции	Разрушающее напряжение σ_b , МПа	Предел текучести при растяжении σ_T , МПа	Модуль упругости при растяжении E , МПа	Ударная вязкость без надреза α , КДж/м ²
ПЭТФ	100	134,5	65	6130	78,2
ПА-6	0	68	76	2350	39
ПКЗТ	20	135,2	120,3	2875	20,83
Композиция 1	17	134,0	105	2828	19,5
Композиция 2	20	134,4	124,2	2820	20,47
Композиция 3	22	133	102	2800	20,10
Композиция 4	30	84	98,0	1350	12,7
Композиция 5	50	76	78,4	990	11,2

Оптимизация осуществлялась методом функции желательности [5,7]. Функция желательности не является функцией какого-то конкретного параметра материала. Она представляет собой сводную функцию и фиксирует для модельных материалов допустимые пределы физико-механических свойств, нарушение верхних и нижних пределов которых отрицательно влияет на качество полученного полимерного материала. Обобщенная функция желательности рассчитывается по формуле [7]:

$$D = \sqrt[4]{d_1 d_2 d_3 d_4},$$

где d_1 -частичная функция желательности по разрушающему напряжению; d_2 - частичная функция желательности по модулю упругости; d_3 - частичная функция желательности по пределу текучести при растяжении; d_4 - частичная функция желательности по ударной вязкости без надреза.

Для построения частичных функций желательности преобразовывают величины измеренных индивидуальных показателей физико-механических свойств $\chi_1, \chi_2, \chi_3, \chi_4$ в значения безразмерной шкалы желательности. Ограничения при этом носят характер $\chi_i \geq \chi_{min}$ и $\chi_i \leq \chi_{max}$. В нашем случае приняты соответствующие показатели физико-механических свойств (таблица 1).

Для преобразования полученных численных значений ФМС в соответствующие отметки на шкале желательности используется метод количественных оценок с интервалом от 0 до 1. Значение $d=0$ соответствует абсолютно неприемлемому значению данного свойства, а $d=1$ – наилучшему значению. Таким образом, безразмерная шкала желательности имеет такой вид: 0.80 – 1.00 – очень хорошо; 0.63 – 0.80 – хорошо; 0.37 – 0.63 – удовлетворительно; 0.20 – 0.37 – плохо; 0.00 – 0.20 – очень плохо. Наиболее целесообразной является оценка параметров в интервале 0.2-0.8, то есть интервал хорошо – плохо [7].

Расчет обобщенной функции желательности показан на примере ПКЗТ.

1. Частичная функция желательности для разрушающего напряжения:

$$\begin{cases} 1,49 = b_0 + 135,2b_1, \\ -0,475 = b_0 + 76b_1, \end{cases} \quad \begin{cases} b_1 = 0,03, \\ b_0 = -2,48, \end{cases}$$

$$d_1 = \exp[-\exp(-2,48 + 0,03 * 135,2)] = 0,8.$$

2. Частичная функция желательности для модуля упругости при растяжении:

$$\begin{cases} 1,49 = b_0 + 2875b_1, \\ -0,475 = b_0 + 990b_1, \end{cases} \quad \begin{cases} b_1 = 0,00105, \\ b_0 = -1,5, \end{cases}$$

$$d_2 = \exp[-\exp(1,51)] = 0,8.$$

3. Частичная функция желательности для предела текучести при растяжении:

$$\begin{cases} 1,49 = b_0 + 124,2b_1, \\ -0,475 = b_0 + 78,4b_1, \end{cases} \quad \begin{cases} b_1 = 0,043, \\ b_0 = -3,76, \end{cases}$$

$$d_3 = \exp[-\exp(1,59)] = 0,77.$$

4. Частичная функция желательности для ударной вязкости:

$$\begin{cases} 1,49 = b_0 + 20,83b_1, \\ -0,475 = b_0 + 11,2b_1, \end{cases} \quad \begin{cases} b_1 = 0,2, \\ b_0 = -2,67, \end{cases}$$

$$d_4 = \exp[-\exp(1,54)] = 0,8.$$

Обобщенная функция желательности

$$D = \sqrt[4]{d_1 d_2 d_3 d_4} = \sqrt[4]{0,8 \cdot 0,8 \cdot 0,77 \cdot 0,8} = 0,79.$$

Аналогично сделаны расчеты для полимерных композиций. Результаты приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Функции желательности для полимерных композиций

Функция Композиция	d_1	d_2	d_3	d_4	D
ПКЗТ	0,80	0,80	0,77	0,80	0,79
Композиция 1	0,79	0,60	0,79	0,75	0,73
Композиция 2	0,80	0,80	0,79	0,79	0,79
Композиция 3	0,79	0,56	0,79	0,77	0,72
Композиция 4	0,29	0,50	0,33	0,31	0,35
Композиция 5	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20

По своим физико-механическим показателям ПКЗТ удовлетворяет требованиям, предъявляемым к эксплуатационным характеристикам композиционных материалов, в состав которых входят ПЭТФ или ПА-6. Поэтому выбор оптимального состава композиции будем проводить по сравнению с ПКЗТ (по безразмерной шкале оценка лежит в пределах хорошо). Как видно из таблицы 2, небольшое увеличение или уменьшение концентрации ПЭТФ в составе ПК приводит к уменьшению

обобщенной функции желательности до 0,73-0,72, а при концентрации 50% ПЭТФ она достигает минимального значения (0,20) и дальнейшее увеличение концентрации ПЭТФ в составе ПК нецелесообразно. Действительно, композиция 5 имеет низкий предел текучести при растяжении (78,4 МПа) по сравнению с ПКЗТ (120,3 МПа), а также худшие показатели по разрушающему напряжению и модулю упругости по сравнению с ПКЗТ (табл.1). Наиболее близкую обобщенную функцию желательности имеет композиция 2, содержащая в своем составе 20% ПЭТФ и 80% ПА-6 (0,79), что подтверждается хорошими физико-механическими свойствами (табл. 1).

Анализируя данные по обобщенной функции желательности рассматриваемых полимерных композиций, можно сделать вывод, что оптимальным составом полимерной композиции является композиция, содержащая в своем составе 20% ПЭТФ и 80% ПА-6.

SUMMARY

SELECTION OF THE OPTIMAL STRUCTURE OF THE POLYMERIC COMPOSITION ON THE BASIS OF POLYETHYLEN TEREPHTHALATE AND POLYCAPROAMIDE AND THE METHOD OF THE FACTOR ANALYSIS

A.A. Pavlenko, L.M. Mironovich
Sumy State University

On the basis of generalizing desirability function by the method of the factor analysis on experimental data of physical-mechanical characteristics of polyethelen terephthalate and polycaproamide and polymeric compositions optimal structure of polymeric composition on the basis of polyethelen terephthalate and polycaproamide is defined.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Порфирьева С.В., Петров В.Г., Кольцов Н.И. Переработка отходов ПЭТФ путем использования их кислотных и щелочных растворов при получении полиуретанов //Пластические массы. – 2008. – №2. – С.42-46.
2. Николаева Е.А. Переработка вторичная //The Chemical Journal. – 2003.– №4. – С.34-38.
3. Ушакова О.Б., Кулезнев В.Н. // Конструкции из композиционных материалов. - 2000. - № 1. - С.49-54.
4. Миронович Л.М., Павленко А.А. Композиционный материал на основе отходов зонтичной ткани // Известия ВУЗ. Сер. Химия и хим. технология.–2007.– Т.50, № 12. – С.102-105.
5. Ахназарова С.Л. Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. - М.:Высшая школа, 1978. – 318 с.
6. Практикум по химии и физике полимеров: Учебное изд. / Н.И. Аввакумова, Л.А. Бударина, С.М. Дивгун и др.; Под редакцией В.Ф. Курникова. - М.: Химия, 1990. – 304 с.
7. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский О.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. - М.: Наука, 1978. – 280 с.

Поступила в редакцию 20 февраля 2009 г.