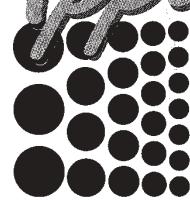


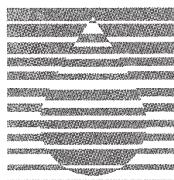
Applied



Rheology

Fließverhalten Steuern - Controlling Flow Properties

H 7790 F



Mega-Rendezvous in Kanada...

Mega-Rendezvous in Canada...

„La Belle“, die Schöne wird sie genannt. Ihr Herz schlägt französisch, das Leben ist kosmopolitisch, ihre Fahne ziert das rote Ahornblatt: Quebec. Die liebenswerte Stadt hoch über dem St.-Lorenz-Strom, mit den verwinkelten Gassen, die an Montmartre erinnern, war in diesem Jahr Standort des „XIIth International Congress on Rheology“. Die Kanadische Rheologische Gesellschaft mit Daniel De Kee an der Spitze, hatte vom 18. bis 23.8.1996 alle Interessierten in das Kongreßzentrum des Hilton-Hotels eingeladen.

Das Echo übertraf alle Erwartungen: es kamen 680 Delegierte aus 44 Ländern, sie hörten und diskutierten 300 Vorträge, sahen sich 150 Poster an und hielten sich mit 5420 Tassen Kaffee und 450 Liter Orangensaft fit. Ein Mega-Rendezvous der Rheologen.

(Fortsetzung auf Seite 225)



Known as "La Belle", French at heart, cosmopolitan, its flag carries the maple leaf: Quebec. This endearing city high above the St Lawrence river with its narrow streets reminiscent of Montmartre was this year's location for the "XIIth International Congress on Rheology". Canadian Rheological Society headed by Daniel De Kee played host at the Congress Center in the Hilton Hotel. The response exceeded all expectations: 680 delegates came from 44 countries to listen to and discuss 300 papers and view 150 posters.

Their spirit was kept high by 5420 cups of coffee and 450 litres of orange juice. A mega rendezvous for rheologists.

(to be continued on page 225)

203

Abhängigkeit der ersten Normalspannungsdifferenz von Silikonölen von der Nullviskosität und dem Molekulargewicht.
Dependance of the first normal stress difference of silicone oils on zero-shear viscosity and molecular weight

209

Fließverbesserer für Betonschlämme
Flow enhancer for concrete suspension

216

Charakterisierung der Farbzügigkeit von Offsetdruckfarben
Characterization of the adhesion of offset printing inks

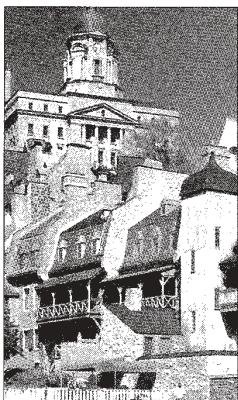


Volume 6
Oktober/October 1996

This is an extract of the complete reprint-pdf, available at the Applied Rheology website
<http://www.appliedrheology.org>

This is an extract of the complete reprint-pdf, available at the Applied Rheology website
<http://www.appliedrheology.org>

5



die Mizellenstabilität durch elektrostatische Abschirmung verbessern läßt. Beobachtungen von M. Nowak (Dortmund) lassen erkennen, daß SIS als nematische Phase auftritt, eine Netzwerkbildung also eher unwahrscheinlich ist. Aufbau und Zerfall der SIS folgen unterschiedlichen Zeitskalen. Aus Viskositätsmessungen ergibt sich, daß SIS innerhalb einiger Sekunden entstehen; auch Spannungsrelaxationsversuche stützen diese Aussage. Nach Autorenansicht sind diese Zeiten aber nicht gleichzusetzen mit jenen für den SIS-Zerfall, denn dieser benötigt in der Regel mehrere Minuten.

Sitzung: Molekular-Dynamik

Computersimulationen der Molekular-Dynamik eröffnen ebenso wie jene der Dynamik Brownscher Bewegungen den Zugang zu einer Vielfalt rheologischer Materialfunktionen für homogene Fließvorgänge; Man erhält so wichtige Informationen über die Brauchbarkeit kinetischer Modellvorstellungen. Scherinduzierte Strukturänderungen bei der intermolekularen Ordnung lassen sich dabei im Detail nach einer Nichtgleichgewichts-Molekuldynamik analysieren; es ergeben sich daraus Informationen über die lokalen Molekülkonformationen. Analog erfaßbar werden so auch die Zusammenhänge zwischen Kettenaufbau und Struktur (siehe auch Applied Rheology No. 4, Titel).

In seinem Beitrag zeigte H.C. Öttinger (Zürich), wie fundamentale Probleme der kinetischen Theorie mit Hilfe stochastischer Simulationstechniken, z. B. auf Basis der Brownschen Dynamik, gelöst werden können. Verfügbar sein muß hierzu ein sehr effektives stochastisches Simulationsverfahren. Damit läßt sich dann aber das Fließverhalten molekulärer Modelle auf direktem Wege berechnen. Vermutlich wird sich aufgrund dieser Möglichkeiten bei der kinetischen Theorie das Interesse nunmehr der Formulierung realistischerer Modell zuwenden, d. h. solchen, die den in der Industrie verwendeten Materialien entsprechen. So ist man in solchen Fällen weniger auf die Nutzung approximativer Zustandsgleichungen angewiesen.

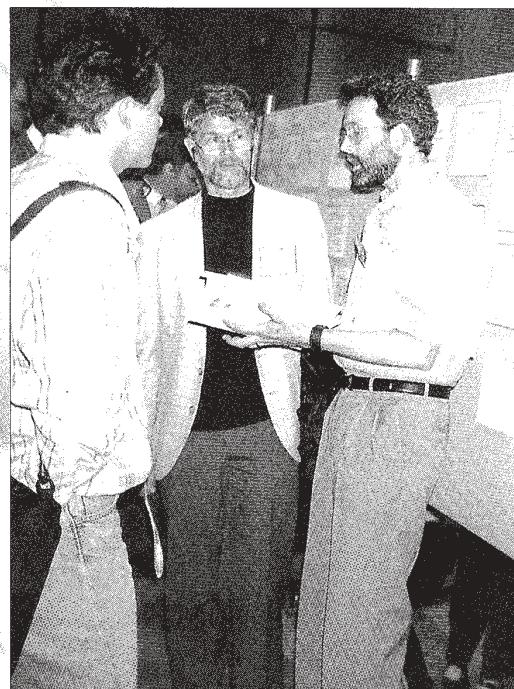
G. Marrucci (Neapel) entwickelte Vorstellungen über den Einfluß topologischer Wechselwirkungen auf die Molekuldynamik in konzentrierten Polymerflüssigkeiten. Danach erneuert sich bei schnellen Fließvorgängen die Topologie hauptsächlich aufgrund von Konvektionen der Kettenverschlingungen und nicht so sehr als Folge thermischer Bewegungen, d. h. auch durch Reptation. Daraus ergeben sich verschiedene Konsequenzen, beispielsweise auch eine Erklärung der Cox-Merz-Regel.

of the SIS take place with different time scales. From viscosimetry is known that the SIS develop within some seconds and stress relaxation experiments also deliver a time-scale of several seconds, which according to their experimental results is definitely not to be set equal to the time of the SIS's decay. These structures, once they are built, disappear within several minutes.

Session: Molecular dynamics

Molecular dynamics, as well as Brownian dynamics computer simulations give access to a variety of rheological material functions in given homogeneous flows, and they hence provide important constitutive information for kinetic theory models. Shear-induced structural changes of intermolecular order can be analyzed in detail by nonequilibrium molecular dynamics, and related to the local conformational properties of molecules. Hence, chain/structure relationships are studied by these methods. (See also Applied Rheology No. 4 1996, cover)

In his review H.C. Öttinger (Zürich) described which fundamental problems of kinetic theory can be cracked by means of stochastic simulation techniques such as Brownian dynamics. His method, which relies on the availability or very efficient stochastic simulation techniques, provides a tool for performing calculations of the flow behavior from molecular models in a very straightforward and direct manner. As a consequence,

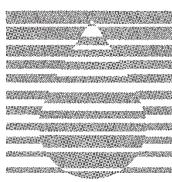


Mit der Spannungsbelastung in Zusammenhang bringen läßt sich die in amorphen Polymeren (nahe des Glasübergangs beobachtbare) dehnungsinduzierte Doppelbrechung, und zwar nach einer modifizierten spannungs-optischen Regel. Deren Gültigkeit versuchte T. Onogi (Kyoto) in Untersuchungen zu verifizieren, die an Polymeren mit unterschiedlicher Seitengruppengestalt ausgeführt wurden. In weiteren Versuchen konnte C. Luap (Straßburg) nachweisen, daß sich derartige Molekülstrukturen auch mit molekulardynamischen Computer-simulationen, wie sie von M. Kröger (Berlin) vorgeschlagen wurden, darstellen lassen.

Ein Gitter-Loch-Modell wurde von L. Utracki (Boucherville) vorgestellt; es eignet sich offenbar ausgezeichnet zur quantitativen Beschreibung von p-V-Zusammenhängen, für niedr- und hochmolekulare Systeme gleichermaßen. Anhand des Gitter-Loch-Modells diskutierte H. Higuchi (Cleveland) die viskoelastischen Eigenschaften polymerer Gläser, die auf unterschiedliche Weise gewonnen wurden. Grundlage hierfür waren thermodynamische Merkmale ebenso wie spektroskopische Daten.

Den Nutzen von kinetischer Theorie und Mikrostruktur-Modellen beim Analysieren komplexer Fließvorgänge in viskoelastischen Flüssigkeiten diskutierte R. Armstrong (Cambridge). Eine hierzu entwickelte Methode, unter Verwendung von Wellenbasis-Funktionen, liefert direkte Lösungen der Diffusionsgleichung. Ein Anwendungsbeispiel ist die Funktionsberechnung für die Orientierungsverteilung fester, stäbchenförmiger Moleküle in verdünnter Lösung, unter Annahme eines stetigen Scherprozesses. Ermittelte Ergebnisse für die Viskosität und für die erste Normalspannungsdifferenz wurden mit jenen verglichen, die sich nach früheren Methoden ergeben. Attraktiv ist die neue Methode vor allem deshalb, weil sie keine speziellen Approximationen erfordert. Außerdem eignet sich das benutzte Wellenprinzip besonders zur näherungsweisen Lösung lokalierter Probleme; man erhält so relativ genaue Resultate selbst unter ungünstigeren Bedingungen.

Magneto- und elektrorheologische Fluide lassen sich als einfache Modelle simulieren, unter Anwendung einer molekulardynamischen Methode, die S. Hess und T. Weider (Berlin) erläuterten. Danach nimmt die Viskosität solcher Stoffe mit der Feldstärke zu, außerdem findet man Fließgrenzen. Im Hinblick auf die Strukturmerkmale lassen sich bei solchen Systemen in Feldrichtung orientierte Partikelketten feststellen. Sie sind teilweise zu Aggregaten zusammengelagert, übrigens auch in einer Vorzugsrichtung.



one now may focus attention on the formulation of more realistic kinetic theory models for materials processed in industry rather than on the derivation of approximative constitutive equations.

The idea developed in the work of G. Marrucci (Naples) emphasizes the role played by the topological interactions in the dynamics of concentrated polymer liquids. In fast flows the topology is renewed mostly by convection of the entanglements rather than by thermal motions, i.e., by reptation. Several consequences follow from this idea. He discussed what appears to be a possible explanation of the Cox-Merz rule.

The strain-induced birefringence of amorphous polymers around the glass transition zone can be related to the stress through a modified stress-optic rule. T. Onogi (Kyoto) tried to conclude on the validity of this modified rule through an analysis of polymers with various shapes of side groups. The results presented by C. Luap (Strasbourg) provide a molecular picture for similar results which are supported by molecular dynamics computer simulations by M. Kröger (Berlin).

A lattice-hole model was studied by L. Utracki (Boucherville). The model is found quantitatively successful in describing the P-V-relationships for low as well as for high molecular weight systems. In terms of the lattice-hole model H. Higuchi (Cleveland) discussed the viscoelastic properties of polymer glasses under various formation histories and characteristics, extracted from thermodynamic properties and probe spectroscopy.

The use of kinetic theory and microstructural models in the analysis of complex flows of viscoelastic liquids was reviewed by R. Armstrong (Cambridge). A method that uses wavelet basis functions has been developed for the direct solution of the diffusion equation. This technique is illustrated by calculating the evolution of the orientational distribution function for a dilute solution of rigid rod-like molecules undergoing start-up of steady shear flow. Results for the viscosity and first normal stress difference were also presented and compared with earlier techniques. His method is attractive because it avoids any closure approximations. In addition, the suitability of wavelets for the approximation of localized problems yields highly accurate results even at low resolutions.

Magneto- and electrorheological fluids were simulated as simple model fluids by the nonequilibrium molecular dynamics method by S. Hess and T. Weider (Berlin). They find a viscosity increasing with the field strength and a yield stress. With respect to structure they identify chains of particles in direction of the field, clusters of chains and chains in orientation preference of

