

Aspen Plus 如何计算聚合物熔点？能否进行修改？

编者按

- 1) 这篇[中文技术支持文章](#)将会告诉我们 Aspen Plus 如何计算聚合物熔点？能否进行修改。
- 2) 您也可以从 AspenTech 技术支持网站[链接](#)中找到对应的中/英文版技术支持文章。
- 3) 欢迎您点击下方 AspenTech 培训中心链接，查看 AspenTech 中文公开课程安排：
[北京公开课程安排](#)
[上海公开课程安排](#)
[中国其他地区 / 网络虚拟课程安排](#)
- 4) 在您使用我们的软件，或者查看我们的技术支持文章时，遇到任何问题，欢迎联系 AspenTech 技术支持：
邮箱: esupport@aspentech.com
网址: esupport.aspentech.com
电话: (86) 10 53875867
- 5) 言归正传，请您欣赏我们的中文技术支持文章：

Aspen Plus 如何计算聚合物熔点？能否进行修改？

问题描述

Aspen Plus 如何计算聚合物熔点？能否进行修改？

解决办法

聚合物的熔融转变温度（熔点 T_m ）是由 Van Krevelen 熔融转变温度关联式计算得出的（TM0DVK 模型）。

$$T_{m,A} = \sum_k n_k Y_{m,k} / \sum_k n_k M_k$$
$$T_m = \sum_A^{Nseg} X_A M_A T_{m,A} / \sum_A^{Nseg} X_A M_A$$

- $T_{m,A}$ = A 类型链段的熔融转变温度
- n_k = 基团组 k 在链段中出现的次数，链段可来自链段数据库或用户自定义的链段结构
- $Y_{m,k}$ = 基团组 k 的熔融转变温度，来自 Van Krevelen 数据库
- M_k = 基团组 k 的分子量
- T_m = 聚合物的熔融转变温度
- N_{seg} = 共聚物的链段类型数量
- XA = A 类型链段在共聚物中的链段摩尔分率
- MA = A 类型链段的分子量
- 基团组的 $Y_{m,k}$ 数值可以在 Van Krevelen Functional Groups 中查看.

关键词

熔点, 熔融转变温度, 聚合物, Van Krevelen, T_m