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 TM）是由 Van Krevelen 熔融转变温度关联式计算得出的（TM0DVK 模型）。

$$T_{m,A} = \sum_k n_k Y_{m,k} / \sum_k n_k M_k$$

$$T_m = \sum_A^{Nseg} X_A M_A T_{m,A} / \sum_A^{Nseg} X_A M_A$$

© 2019 Aspen Technology, Inc. All rights reserved.

- Tm,A = A 类型链段的熔融转变温度
- nk = 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
- Ym,k = 基团组 k 的熔融转变温度，来自 Van Krevelen 数据库
- Mk = 基团组 k 的分子量
- Tm = 聚合物的熔融转变温度
- Nseg = 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 Ym,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, TM

© 2019 Aspen Technology, Inc. All rights reserved.