

КИНЕТИКА И МОДЕЛИРОВАНИЕ



INNOVATION

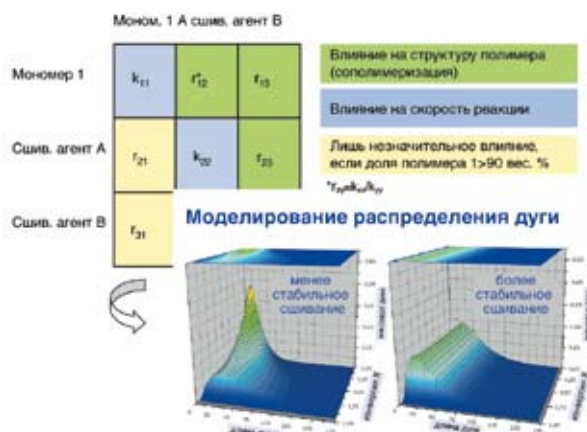
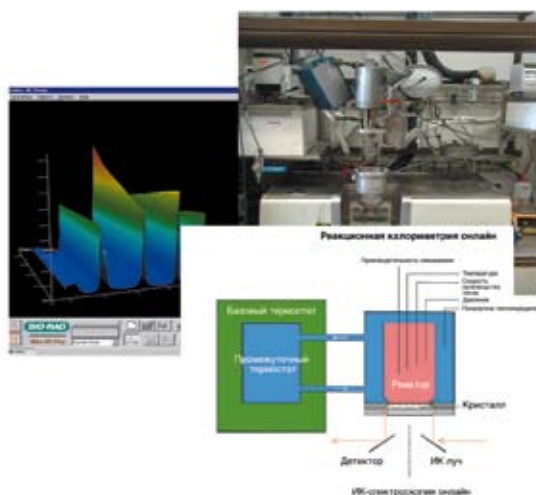
ENGINEERING

OPTIMIZATION

Кинетика и моделирование полимеризации и модификации полимеров

Что мы Вам предлагаем ...

Мы поможем Вам использовать весь потенциал Ваших полимерных продуктов или оптимизировать Ваши специализированные продукты. Мы обладаем многолетним опытом определения взаимосвязей между структурой и свойствами продуктов, а также разработки надежных моделей реакций полимеризации, которые помогут Вам достичь Ваших целей. Ключом к успешной оптимизации процесса и безрисковому масштабируемому увеличению является основополагающее понимание физико-химических процессов, которых мы добиваемся путем использования комбинаций кинетических, аналитических и математических методов. Каждая реакция полимеризации или модификация полимеров представляет собой сложную задачу, но несмотря на этот факт, наша команда опытных физиков, физхимиков и специалистов по реакциям полимеризации выберет для Вас исключительно надежные и правильные методы их проведения.



Ваша выгода ...

Мы Вам поможем и окажем следующие услуги:

- выбор и применение подходящих аналитических методов в режиме реального времени при экстремальных значениях температуры и давления
- переход от периодического лабораторного масштаба к непрерывному процессу
- кинетические исследования и моделирование реакции модификации полимеров
- оптимизация процессов полимеризации с помощью методов, отличных от процедуры „Scale-up by number“ (метод масштабируемого увеличения)
- определение кинетической основы для реакционной модели с тем, чтобы более надежно регулировать и оптимизировать процесс производства в масштабе тыс. т/год
- разработка подходов для оптимизации моделируемых рецептов



Bayer Technology Services
Powering Your Performance

- поддержка перехода на производство нового продукта, изменение объема выпуска, а также процессов освоения новых видов продукции или прекращения производства продукта с помощью использования кинетической модели

Наш подход

С помощью нашего универсального испытательного оборудования и наших опытных специалистов мы можем оказывать поддержку на всех этапах жизненного цикла Ваших продуктов или процессов. Мы консультируем Вас перед началом проекта, определяем ключевые параметры и подходящие экспериментальные методики, обсуждаем возможные физические и технические проблемы, возникающие во время реакций полимеризации, подбираем подходящее окружение моделирования и разрабатываем модели, точно отображающие Ваш процесс.

Методы:

- (Attenuated Total Reflection Fourier Transform Infrared, (ATR-FTIR)) Инфракрасная (далее ИК-) спектроскопия с преобразованием Фурье, функционирующая в режиме измерения ослабления общего отражения, для температур от -40 до +250 °C и давления до 250 бар
- Раман-спектроскопия (длина волны возбуждения 633 и 785 нм)
- Теплобалансовая калориметрия с компенсацией тепловой мощности (изотермическая при тепловой мощности до 1 кВт, изопериболическая/политропная или адиабатическая), температура реакции от -110 до +300 °C, давление до 50 бар
- Онлайн-овая, т.е. в режиме реального времени, взаимосвязка теплобалансовой калориметрии с компенсацией тепловой мощности и (Attenuated Total Reflection Fourier Transform Infrared, (ATR-FTIR)), ИК-спектроскопии с преобразованием Фурье, функционирующей в режиме измерения ослабления общего отражения, или Раман-спектроскопии
- Аппаратура остановленного потока для экспериментов в газовой или жидкой фазе в комбинации с ИК- спектроскопией с преобразованием Фурье, функционирующей в режиме измерения ослабления общего отражения, или с ультрафиолетовой (далее УФ-) спектроскопией, разрешение в диапазоне миллисекунд
- Специальная аппаратура под давлением до 250 бар при температуре до +350 °C

- Новые эффективные методы для определения скорости передачи или параметров сополимеризации
- Высокоэффективная жидкостная хроматография (далее ВЭЖХ, High Power Liquid Chromatography (HPLC), градиентная ВЭЖХ (ИК, УФ, детектор рассеянного света)
- Гель-проникающая хроматография (далее ГПХ, Gel permeation Chromatography (GPC)) (детектирование ИК и УФ)
- Газовая хроматография (далее ГХ, Gas chromatography (GC)), Газовая хромато-масс-спектрометрия, устройство ввода паровой фазы (Headspace) ГХ
- Другие аналитические методы (ГПХ- ВЭЖХ, ГПХ-рассеивание лазерного излучения с кратными углами (Multiple angle laser light scattering, MALLS), ГПХ-VISC, (thermal Field Flow Fractionation (tFFF)) ректификация тепловых полей, различные комбинации с масс-спектроскопией, ядерно-магнитный резонанс (ЯМР), ультра-центрифуга, атомно-силовой микроскоп и т.д.)

Программное обеспечение:

- gPROMS®
- Aspen Custom Modeler®
- PREDICI®
- Speed-up®
- Собственные разработки на основе Windows или Unix (кинетическое моделирование Монте-Карло)

Наш опыт

Мы располагаем многолетним опытом разработки проектов в области:

- катионной, анионной, координативной и радикальной полимеризации, поликонденсации и полиприсоединения
- полимеризации в массе, в растворе, эмульсионной, суспензионной или осадительной полимеризации
- периодических, полупериодических и непрерывных методов полимеризации
- гомополимеризации, сополимеризации (третичной, четверной, пента- ...) и сшивающей полимеризации
- описания реакций модификации синтетических и натуральных полимеров
- определения зависимостей между структурой и свойствами
- применения моделей полимеризации с различной архитектурой программного обеспечения в опытных лабораториях, мини-заводских системах и в промышленных процессах