

Deductive determination of interaction parameter of group contribution method without regression to experimental data for solvent activity estimation of polymer solution

이영돈, 배영찬*

한양대학교

(ycbae@hanyang.ac.kr*)

전통적인 group contribution method들은 functional group간 interaction parameter를 구하기 위해 기존의 data에 대한 fitting을 통해 값을 구하는 귀납적인 방법을 사용하지만, 본 연구에선 simulation기법을 이용한 연역적인 방법으로 이론적 interaction parameter 값을 구했다. 이 기법은 필요한 실험 data가 존재하지 않는 신규 system의 거동을 예측해야 할 때 유용하다.

이 제안의 적합성을 확인하기 위해 위의 방법을 이용하여 polymer solution들의 solvent activity를 예측하고 실험 data와의 편차를 비교하였다. 다양한 polymer solution들의 넓은 범위의 온도와 분자량에서 적용가능 함이 확인 되었다.