수소결합을 포함한 그룹기여 방법 격자 유체 상태 방정식의 개발

강정원*, 유성식[1], 신헌용[2], 유기풍[3], 이철수
고려대학교; [1]한국기술교육대학교; [2]서울산업대학교;
[3]서강대학교
(jwkang@korea.ac.kr*)

상평형 계산을 위한 그룹기여 방법은 그 편의성과 유연성으로 인하여 실제 공정의 설계에 널리 사용되고 있다. 상평형을 계산하기 위하여 다양한 그룹기여 방법들이 제안되어 왔지만 과잉 깁스 에너지 모델을 기반으로 한 경우 그 적용 범위가 저압범위로 제한되어 있고, 그룹 기여 상태방정식 모델의 경우 화학이론 (chemical theory)등을 이용하지 않으면 수소결합을 포함한 극성 분자를 적절히 표현하지 못하는 문제점을 가지고 있다. 본 연구에서는 수소결합이 포함된 기존의 격자 유체 상태 방정식 (Lattice Fluid Equation of State)을 보다 편리하게 이용하기 위하여 이를 그룹기여 방법으로 확장하였다. 그룹기여 방법의 매개변수를 구하기 위하여 대용량의 상평형 데이터베이스인 DDB (Dortmund Databank)와 KDB (Korea Thermophysical Properties Databank)를 이용하였다. 새로이 개발된 상태방정식은 극성 분자를 포함한 고압 상평형계에도 적용이 가능하며 고분자용액의 고압 상평형계에도 적용이 가능하다.