

Polar PC-SAFT 모델을 이용한 초산, 에탄올, 물, 그리고 에틸 아세테이트 이성분계의 상평형 계산

이나현, 박종기^{*1}, 김권일¹, 조성철¹, 박종찬²
충남대학교; ¹한국에너지기술연구원; ²유니온 화성(주)
(jngkprk@kier.re.kr^{*})

PC-SAFT 상태 방정식에 극성항(dipole moment contribution term)을 추가한 상태 방정식을 이용하여 초산, 에탄올, 에틸 아세테이트, 그리고 물을 포함하는 이성분계의 기액 상평형을 계산하였다. 동시에 각 이성분계에 대하여 이성분 상호작용변수를 구하였다. Polar PC-SAFT 상태 방정식의 성능을 확인하기 위하여 NRTL모형을 이용한 결과와 비교하였다. Polar PC-SAFT 상태방정식은 NRTL모형의 것 과 비교하여 시스템의 압력 계산에 있어서 우수한 성능을 나타내었다.