

회합항(association term)이 고려된 PHSC(Perturbed-Hard-Sphere-Chain) 상태방정식을 이
용하여
회합성 유체 혼합물에서 상평형관계의 계산

이봉섭, 김미경, 김기창*
강원대학교
(kichang@kangwon.ac.kr*)

본 연구에서는 Perturbed-Hard-Sphere-Chain (PHSC) 상태방정식을 회합성(associating) 유체계에 까지 적용 가능하도록 확장하기 위하여 상태방정식을 $Z = Z^{PHSC} + Z^{ASSOC}$ 와 같이 정의하고, Z^{ASSOC} 항은 SAFT 모델을 사용하였으며 Z^{PHSC} 항은 Song의 관계식(Fluid Phase Equilibria, 117, 69(1996)) 및 Kim의 관계식(Fluid Phase Equilibria, 168, 201(2000)) 등 두 관계식을 사용하였다. 이와 같은 상태방정식에서는 알코올, 물, 아민 및 유기산 등과 같은 회합성 화합물의 경우에는 상태방정식의 파라미터가 5개가 된다. 상태방정식 파라미터는 PVT 데이터를 이용하여 추산하였으며, 추산된 상태방정식 파라미터를 이용하여 알코올/파라핀, 알코올/알코올 계의 기액평형을 계산하였다. 또한 고분자/알코올 및 고분자/물 계의 기액 평형을 계산하고 계산 결과를 검토하였다.