

FT-IR 분광법을 이용한 알코올/케톤 용액계의 교차회합도 측정

이봉섭, 김기창*

강원대학교

(kichang@kangwon.ac.kr*)

SAFT 계통의 상태방정식을 회합성 유체 혼합물에 적용하는 경우 알코올, 아민 및 유기산 등과 같은 자기회합성(self-associating)성분으로 이루어지는 혼합물에서는 타성분 분자간의 교차회합(cross-association) 파라미터를 결합법칙에 의하여 정의 할 수 있으나, 자기회합성 성분과 케톤, 에테르 및 알데히드 등과 같은 비 자기회합성(non self-associating)성분으로 이루어지는 혼합물에서는 교차회합 파라미터를 정의 할 수 있는 적절한 근거가 없다. 따라서 이와 같이 자기회합성 성분과 비 자기회합성 성분으로 이루어지는 혼합물에서의 교차회합 파라미터는 i) 상평형 데이터에 의한 추산 ii) 분광학적 방법에 의한 추산 iii) 분자궤도함수 계산에 의한 추산 등과 같은 방법으로 추산이 가능하다. 본 연구에서는 알코올/케톤 용액에서 알코올 분자와 케톤 분자간의 교차 회합도를 FT-IR 분광법으로 측정하고 측정된 교차 회합도로부터 PC-SAFT 상태방정식의 교차회합 파라미터(ϵ/k 및 κ)를 추산하는 방법을 검토하였다. 또한 추산된 교차회합 파라미터를 이용하여 상평형 관계를 계산하고 실험값과 비교하여 보았으며, 이러한 비교를 통하여 본 연구의 방법으로 추산되는 PC-SAFT 상태방정식의 교차회합 파라미터가 상평형 데이터 계산에 유효하게 사용될 수 있는지를 검토하였다.