

Electrolyte-PC-SAFT 상태방정식을 이용하여 전해질 수용액에서 밀도, 증기압 및 이온의 활동도계수 계산

의봉섭, 김기창*

강원대학교

(kichang@kangwon.ac.kr*)

전해질 용액에서 이온의 활동도계수에 관한 관계식은 주로 용액론에 근거한 g^E -model에 의하여 유도되었으나, 최근에는 전해질 용액에 적용 가능한 상태방정식을 개발하고 이온의 활동도계수를 정의하고자 하는 노력들이 시도되고 있다. 이러한 연구의 일환으로 Galindo 등(J. Phys. Chem. B, 103, 10272(1999)), Cameretti 등(Ind. Eng. Chem. Res., 44, 3355(2005)), Tan 등(Ind. Eng. Chem., 44, 4442(2005))은 SAFT 계통의 상태방정식을 전해질 용액에 적용 가능하도록 확장하고 개발된 상태방정식의 성능을 검토한 바 있다.

본 연구에서는 이들의 연구를 토대로 하여 PC-SAFT 상태방정식이 전해질 용액에 적용 가능하도록 전해질 용액에서의 Residual Helmholtz 자유에너지를 다음과 같이 정의하고

$$A^{res}/NkT = A^{PC-SAFT}/NkT + A^{ION}/NkT$$

이온들 간의 정전기적 상호작용(electrostatic interaction)을 고려하기 위한 A^{ION}/NkT 항을 Augmented Debye-Huckel 모델, MSA의 RPM 모델 및 PM 모델 등 3 종류의 모델로 정의하였다. A^{ION}/NkT 항의 모델을 달리한 각각의 상태방정식 관계를 사용하여 salt(1:1)의 수용액에 대하여 밀도, 증기압 및 이온의 평균 활동도계수를 계산하였으며, 이러한 계산을 통하여 A^{ION}/NkT 항의 모델을 달리한 각 상태방정식의 특성을 검토하였다.