

Understanding of disagreement of aromatic compound in vapor-liquid equilibria estimation using molecular simulation combined group contribution method

이영돈, 배영찬^{1,*}

한양대학교; ¹한양대학교 화학공학과

(ycbae@hanyang.ac.kr*)

본 연구에서는 group contribution method (GCM)에 molecular simulation(MS) 기법을 도입하였다. 기존의 GCM들은 interaction parameter를 구할 때 필연적으로 실험 data값에 fitting을 해야만 했으나 본 연구에서는 molecular simulation 기법을 활용해 각 functional group들 간의 인력을 구하고 여기에 GCM 기법을 접목해 interaction parameter를 계산하였다. 이렇게 구해진 interaction parameter는 Helmholtz energy 식에 대입되어 기-액평형 (vapor-liquid equilibria)을 구하는데 이용된다.

이 기-액평형식은 298.15K의 다양한 이성분계 고분자용액에 적용이 가능하며, 다른 분자량이나 온도 영역에서도 기액평형을 예측할 수 있다. 하지만 benzene ring을 포함하는 aromatic solvent류에서는 실험값과 큰 차이를 나타내는데, 본 연구에서는 이러한 현상을 설명하기 위해 molecular simulation과정에서 benzene ring을 구성하는 functional group C-H에 이중결합, 혹은 공명현상에 의한 partial double bond등을 도입해 보고, van der Waals 부피도 aliphatic C-H와 다른 값을 적용하는 등의 다양한 시도를 해보았다. 결론적으로 현재의 GCM 기법으로 benzene ring과 같은 특수한 구조적 성질을 표현하는데는 한계가 있음이 밝혀졌다.