

PC-SAFT 상태방정식을 이용한 diol 용액 및 diamine
용액계의 기-액 평형 계산

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

알코올, 아민, 유기산 등의 화합물은 각 화합물의 작용기 $-OH$, $-NH_2(-NH)$, $-COOH$ 중의 산소 및 질소원자(전자쌍공여체)와 수소원자(전자쌍수용체)간의 수소결합에 의하여 회합(association)현상이 일어난다. 본 연구에서는 회합자리가 존재하는 작용기가 2개 이상인 화합물의 회합현상에 관심을 갖고 이러한 화합물을 포함하는 용액계의 기-액 평형을 PC-SAFT 상태방정식으로 검토하여 보았다. SAFT 모델(Huang & Radosz)에서는 알코올 및 아민(1차)의 회합자리(association site)를 각각 2개 및 3개로 가정하므로, diol의 경우는 4개의 회합자리, diamine의 경우는 6개의 회합자리를 가정할 수 있으며, 작용기의 개수가 증가하면 회합자리의 수는 더욱 증가되어 SAFT 모델의 회합항의 관련식은 매우 복잡한 관계를 갖게 된다. 이러한 경우를 해결하기 위하여 본 연구에서는 SAFT 모델의 회합항의 관련식에 작용기의 개수를 고려하는 방법을 검토하여 diol/water, diol/alcohol, diamine/ water 용액계의 기-액 평형을 계산하였다. 또한 본 연구에서 검토한 회합항의 관련식에 작용기의 개수를 고려한 방법을 이용하여 자기회합성(self-association) 고분자인 PVAL, PVPh 등의 각 용액에 대한 기-액 평형관계를 검토하여 보았다.