

# 成分ファミリー法による相互作用パラメータ相関の簡易化

(法政大環境応化) ○ (正) 西海英雄\*・(学) 関口秀樹・  
(正) 吾郷健一・(学) 秋定諒亮

筆者は、対応状態原理に基づく一般化 BWR 状態方程式を用いて物性計算を行っている。純物質については、無極性・極性物質に適用できる[1,2]が、混合物物性計算に必要な混合則の一般化は完成していない。筆者は、無極性物質あるいは弱極性物質から成る混合物に Hudson-McCoubrey 理論[3]を適用し、官能基をベースとした成分ファミリー法による相関を行ってきた。混合物の交差第二ビリアル係数部分の臨界温度は次式で示される

$$T_{cij} = m_{ij} \sqrt{T_{ci} T_{cj}} \quad (1)$$

Hudson-McCoubrey 理論によれば[3]、相互作用パラメータ  $m_{ij}$  は  $V_{ci}/V_{cj}$  の関数として示される。

$m_{ij}$  に最も敏感な物性の 173 系の二成分系気液平衡を選び、その挙動を良好に表す  $m_{ij}$  をプロットしたのが Fig.1 である。Hudson-McCoubrey 式の周辺に偏倚しているのがわかる。それを次式に示すように  $k_1, k_2$  なる補正係数を導入し、成分ファミリー法で相関した。

$$m_{ij} = 64 \left[ \left( k_1 \frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right)^{1/6} + \left( k_1 \frac{V_{cj}}{V_{ci}} \right)^{-1/6} \right]^{-6} + k_2 \quad (3)$$

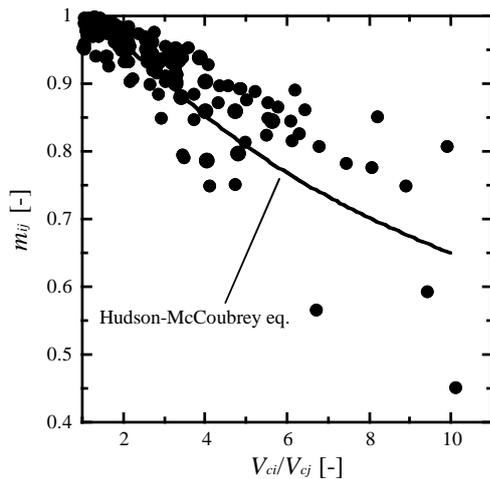


Fig. 1 Optimal  $m_{ij}$  of 173 binary system with the Hudson-McCoubrey relation

その結果、Table 1 に示す組み合わせにより 4 種類に分類できることが示された。それを図示したのが Fig.2 である。

Table 1 成分ファミリー法による  $m_{ij}$  の相関

	CH <sub>4</sub>	alkane alkene cycloalkane	CO <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> H <sub>2</sub> S	N <sub>2</sub> CO	arene
CH <sub>4</sub>	1	F1	F3	F4	×
alkane alkene Cyclo alkane	F1	F2	F3	F4	F1
CO <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> H <sub>2</sub> S	F3	F3	F3	-	F1
N <sub>2</sub> CO	F4	F4	-	F4	×
arene	×	F1	F1	×	F1

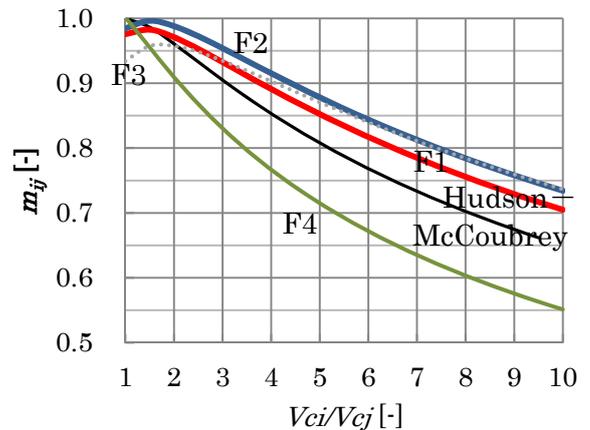


Fig.2 Correlation of  $m_{ij}$  based on modified Hudson-McCoubrey relation

かつて同様な趣旨で相関したことがある。その時は 12 種類の相関式を要した[4]。それが 4 種類へと簡易化できた成功の原因は、CH<sub>4</sub>は最も基本的な炭化水素と思われたが、物性推算からはむしろ例外的な存在であるためだったこと等である。

- [1] 西海ら, JCEJapan (1975) 8, 356
- [2] 西海, 法政工学部研究集報 (1984) 20, 13
- [3] Hudson, *Trans. Faraday Soc.* (1960) 56, 761
- [4] 西海ら, JCEJapan (1977) 10, 176

\* nishi@hosei.ac.jp