

BIOVIA COSMOtherm 液液平衡推算

BIOVIA COSMOtherm では任意の化合物の混合系の液液平衡 (LLE) を予測することが可能です。特に、近年、注目されるイオン液体を取り扱えることが特長の一つです。また、2 相平衡に限らず、多相平衡も検討できます。本紙では、2 成分、および 3 成分 LLE や 3 成分 3 相平衡の予測事例を紹介します。

■ 2成分系液液平衡推算

25~200℃の温度範囲の水とアニリンのLLEの推算値と実測値を図1に示します。図1より、推算値が実測値と概ね一致していること、また、上部臨界溶液温度 (UCST) を再現していることが分かります。BIOVIA COSMOthermのような自由エネルギーに基づき物性予測する方法では、熱ゆらぎが含まれないため、臨界溶液温度を精度良く再現することが難しいことが多いのですが、定性的・半定量的な予測は可能です。

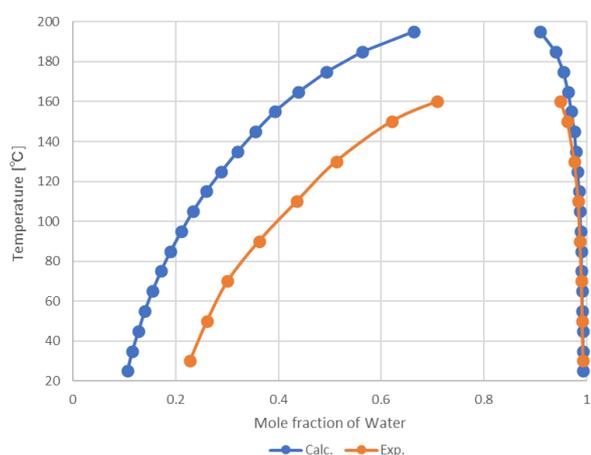


図 1. 水とアニリン混合系の LLE

■ 3成分系液液平衡推算

25℃における水、エタノール、トルエンの混合系、ならびにイオン液体 (IL: 1-hexyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate)、エタノール、1-ヘプテン混合系のLLEの推算値と実測値を図2,3に示します。図2,3ともに、相分離が生じる組成範囲が概ね一致していることが分かります。また、タイラインの傾きも概ね一致しており、図2の系ではエ

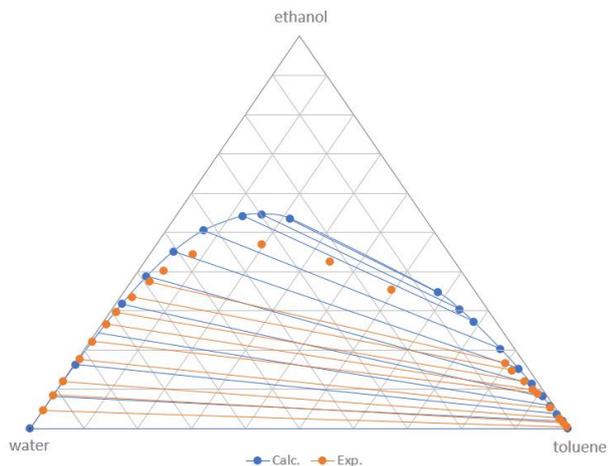


図 2. 水-エタノール-トルエン混合系の LLE

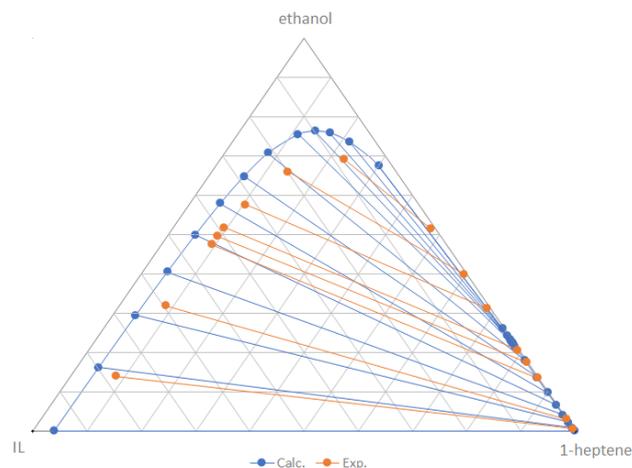


図 3. イオン液体-エタノール-1-ヘプテン混合系の LLE

タノールが水に選択的に溶解することを再現しています。一方、図3の系では、エタノールが選択的にILに溶けやすく、有機相からエタノールを抽出する溶媒としてILが適している傾向を推算にて再現しています。BIOVIA COSMOthermを使用することで実験することなく混合系の相図が得られますので、効率的な実験計画の立案が可能になります。加えて、検討対象の化合物の変更や添加物の影響なども検討できますので、幅広い化合物探索等をコスト・時間を掛けずに行えます。

■ 3成分3相平衡推算

40℃における水、フェノール、およびオクタン³の3成分3相平衡の組成の推算値 (上段) と実験値 (下段) を表1に示します。3成分系の場合、3つの液相に分離する可能性があり、その際の平衡組成の予測をBIOVIA COSMOthermを用いて行えます。表1より、各相の組成の推算値が実測値とよく一致していることが分かります。3相分離が起こることを予測できるだけでなく、各相の組成をほぼ正確に推算しています。

表1. 40℃における水、フェノール、およびオクタン³の3相平衡の組成の推算値 (上段) と実測値 (下段)

成分	水相	中間相	オクタン相
水	0.9845	0.5637	0.0017
	0.9754	0.6820	0.0038
フェノール	0.0155	0.4273	0.0396
	0.0236	0.3106	0.0265
オクタン	0.0000	0.0090	0.9587
	0.0010	0.0074	0.9697