

# BIOVIA COSMOtherm 気液平衡推算

BIOVIA COSMOtherm では任意の化合物の蒸気圧や複数成分の混合系の気液平衡 (VLE) を予測することが可能です。また、純物質の蒸気圧データを与えることで、予測値の補正や予測精度の向上が図れます。ただし、COSMO-RS 法が非圧縮液体を仮定した理論であるため、低圧領域は精度良く予測が行えますが、臨界点近傍の VLE を予測することはできませんでした。しかし、2017 年初頭のバージョンアップにより、状態方程式 (EOS) を組み合わせることで予測が可能になりました。本紙では、典型的な化合物の低圧領域の蒸気圧・VLE の予測事例、ならびに EOS を組み合わせた臨界点近傍の VLE 予測事例について紹介します。

## ■ 蒸気圧推算

25~100℃の温度範囲の1-ブタノールの蒸気圧曲線の推算値と実測値を図1に示します。図1より、推算値が実測値とよく一致していることが分かります。この推算では、実測値と良い一致が見られるため、実測値による補正は不要ですが、誤差が生じる場合には実測データによる補正も行えます。

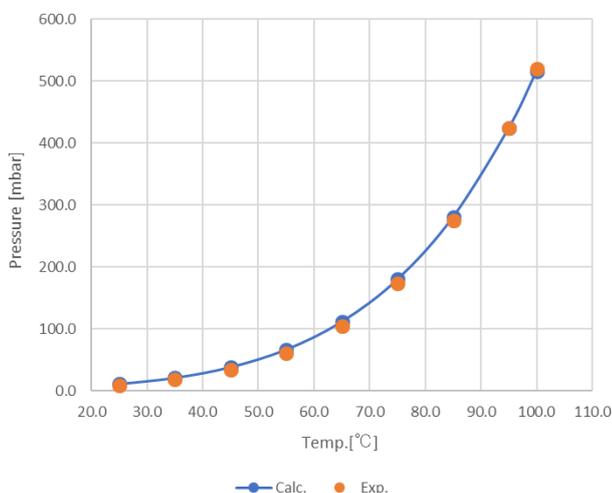
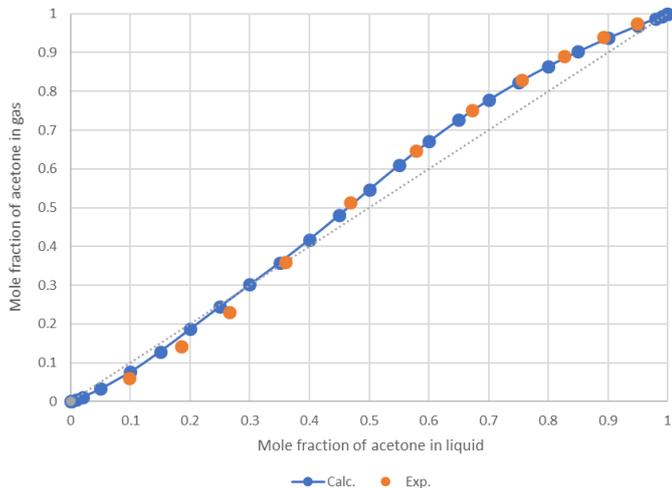


図 1. 1-ブタノールの蒸気圧曲線

## ■ 2成分系気液平衡推算

1気圧におけるアセトンとクロロホルムのVLEの推算結果を図2に示します。推算には純物質の蒸気圧データを使用しています。これにより、推算誤差を軽減し、精度良くVLEを予測することが可能です。図2より、推算値と実測値は概ね良く一致しており、共沸組成 (温度) においても、実測値 0.36 (338 K) に近い推算値 0.29 (336 K) が得られています。



す。BIOVIA COSMOthermを使用することで実験を行う前に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。

## ■ 状態方程式 (EOS) と組み合わせた臨界点近傍の気液平衡推算

275℃における水とエタノールのVLEの推算結果を図3に示します。推算には純物質の臨界パラメータを使用しています。通常のコSMO-RS法による予測では、臨界点近傍の予測は出来ませんが、図3のようにEOSと組み合わせることにより、精度良く予測が可能になります。

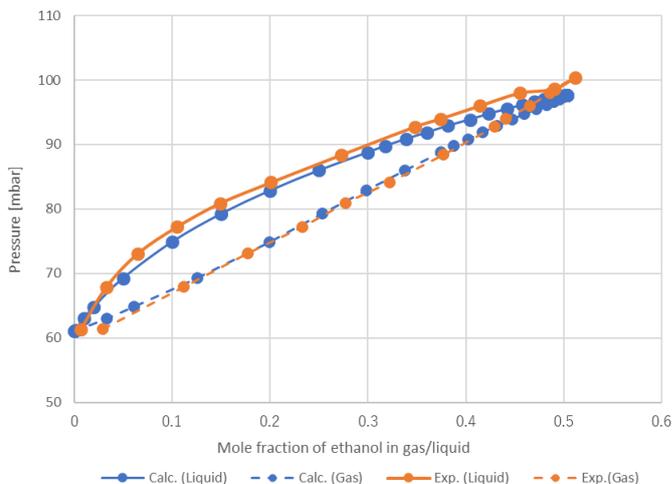


図 3. 275℃における水とエタノールのVLE (P-xy 図)

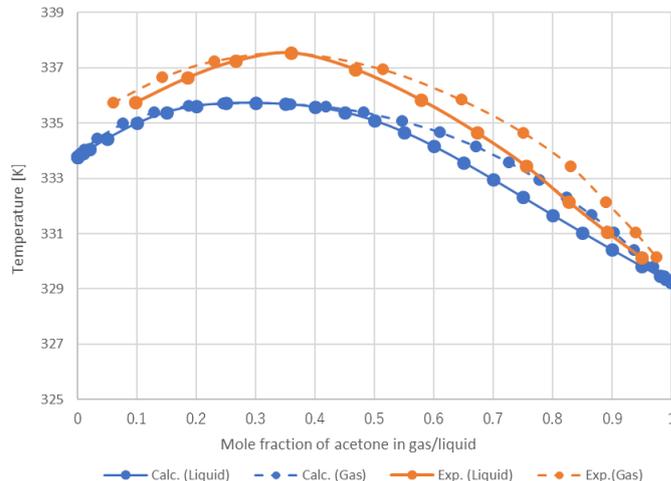


図 2. アセトンとクロロホルムの定圧 VLE (左: xy 図; 右: T-xy 図)