

# オレイン酸への水素溶解度の一般化状態式による推算

(法政大環境応化) ○ (正) 西海英雄\*  
 (法政大学サス研) (正) 吾郷健一  
 (日大生産工) (正) 辻 智也

対応状態原理を用いて物性推算を行うときに必要な臨界値等の基本物性は重質成分では推算で求めざるを得ない。今回、オレイン酸への水素の溶解度推算でその可能性を検討した。

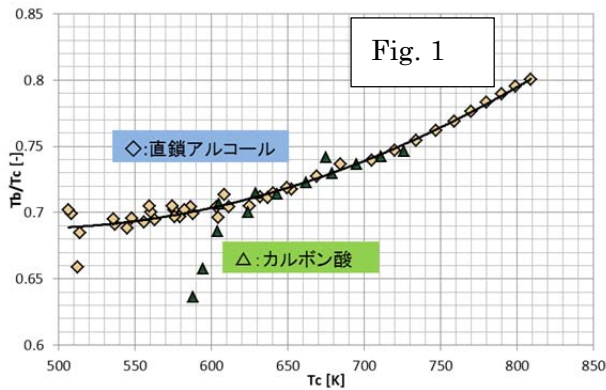
臨界値の推算法としては Joback の方法が有名である。Tc [K]の推算は、次式により行われる。

$$T_c = T_b \left[ 0.584 + 0.965 \sum \Delta_T - (\sum \Delta_T)^2 \right]^{-1} \quad (1)$$

標準沸点 Tb [K]の推算は次式により行われるが精度に問題があり、これは直接 Tc, 飽和蒸気圧, 偏心係数 ω に影響を与えるので改良が望まれる。

$$T_b = 198 + \sum \Delta T_{Tb} \quad (2)$$

講演者は成分ファミリー法により Tb をファミリーごとに相関する成分ファミリー法を提案している。Fig.1 に直鎖アルコールおよびカルボン酸の Tb/Tc vs. Tc 関係を示す。2つのファミリーが同じ曲線上に乗っていると考えられる。



この相関曲線より

$$\frac{T_b}{T_c} = 0.920 - 9.72 \times 10^{-4} T_c + 1.021 \times 10^{-6} T_c^2 \quad (3)$$

(1), (3)より物質の寄与分を与えると Tc は 2 次関数の根として求められる。すなわち、オレイン酸は Tc= 819.2 K と求められる。

これより、Tb=662.4K を得る。一方、Joback の方法によると Tb=913.07 K と大きな値になる。

本研究の Tc, Tb の 2 点を用いて Clausius-Clapeyron の式を求め、定義より ω=1.018 を得る。オレイン酸の沸点データは 100mmHg 以下に与

えられているが倍程度の偏倚を示している。これは低温なので Antoine 式の範囲にあることも一因かと思われる。

溶解度を求めるためには相互作用パラメータ mij が必要であるが、筆者の一人(西海)は BWR 一般化状態式を用いて H2を含む系の mij は単調増加の温度関数となることを既に報告している(1989)。その相関式を当てはめてオレイン酸中への H2 の溶解度を推算したところ、相関値より 0.3 ほど小さな値を持つ温度関数により溶解度を表すことができることを見出した(Fig.2, Fig.3 参照)。

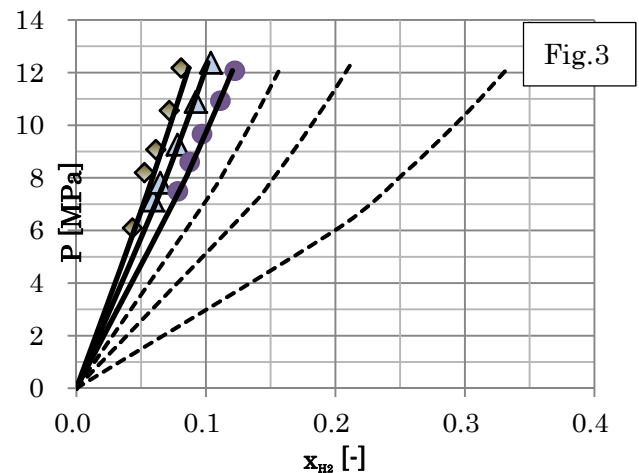
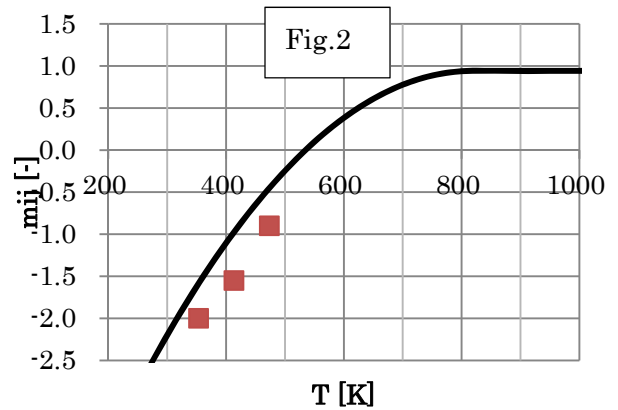


Fig.3の破線は Fig.2の実線(一般化相関式)であり、実線は Fig.2の ■ に対応する。相関が主として無極性物質での溶解度を表していると考えるとき、オレイン酸のような極性物質が同様な挙動を示すことは興味深い。また、無極性物質以外の混合物物性推算可能性の道を開くものと考えられる。

\* nishi@nishilab.jp