

テスト中

UNIQUACモデルによる フェノールと水の二成分 相図

2023年8月8日
株式会社材料設計技術研究所

文献2013Zubに載っているUNIQUACパラメータを、OpenCalphad ソフトウェアを用いて計算した。 UNIQUAC による液相相分離の計算結果を図1に示す。フェノールを成分Aとし、水を成分Bとした。

文献の温度323.15Kにおける等温断面図から、323.15Kの相互溶解度は約0.32と0.81 (mass fraction)と読み取れる。計算結果の図1はこれを再現できていない。

計算結果の図1では、上部臨界共溶温度が400Kを超えている。

文献

Thermodynamic modeling of ternary Liquid-Liquid systems with forming immiscibility islands. Andre Zuber, et. al., Brazilian Archives of Biology and Technology, 65 (2013), 1034-1042.

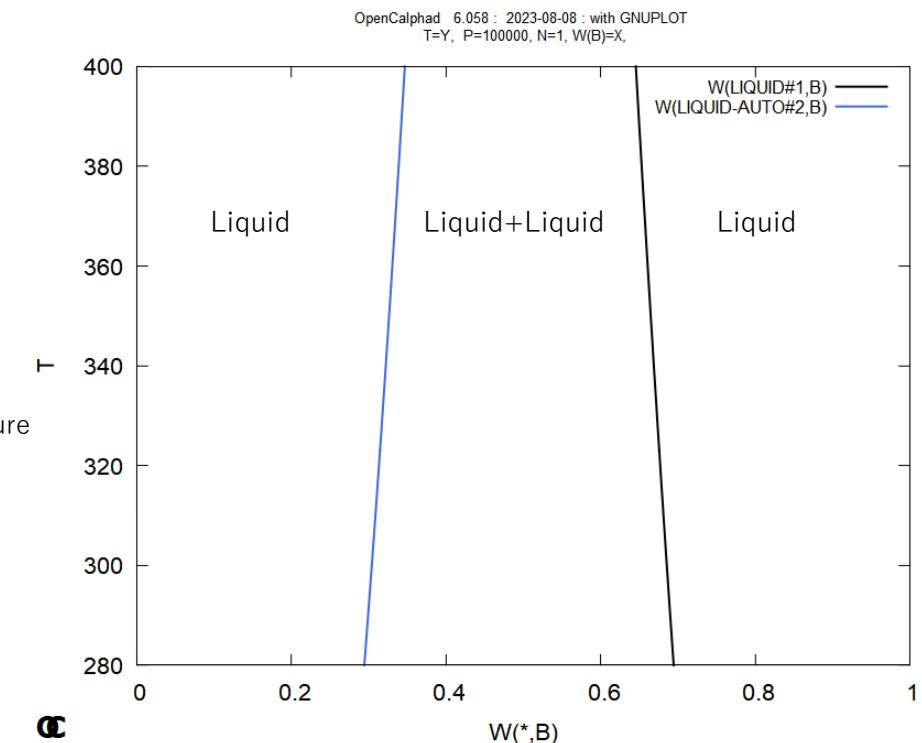


図1 フェノールと水の二成分 相図
横軸：水の mass fraction

テスト中

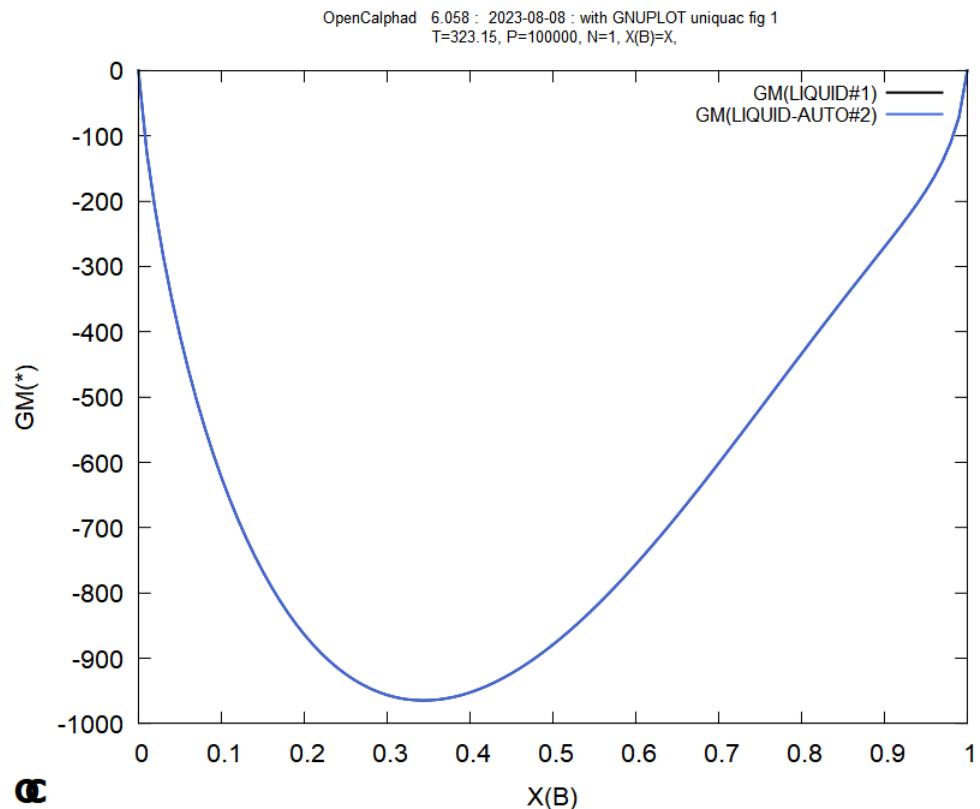


図2 溫度323Kにおける液相の組成・自由エネルギー曲線
横軸：水のmole fraction

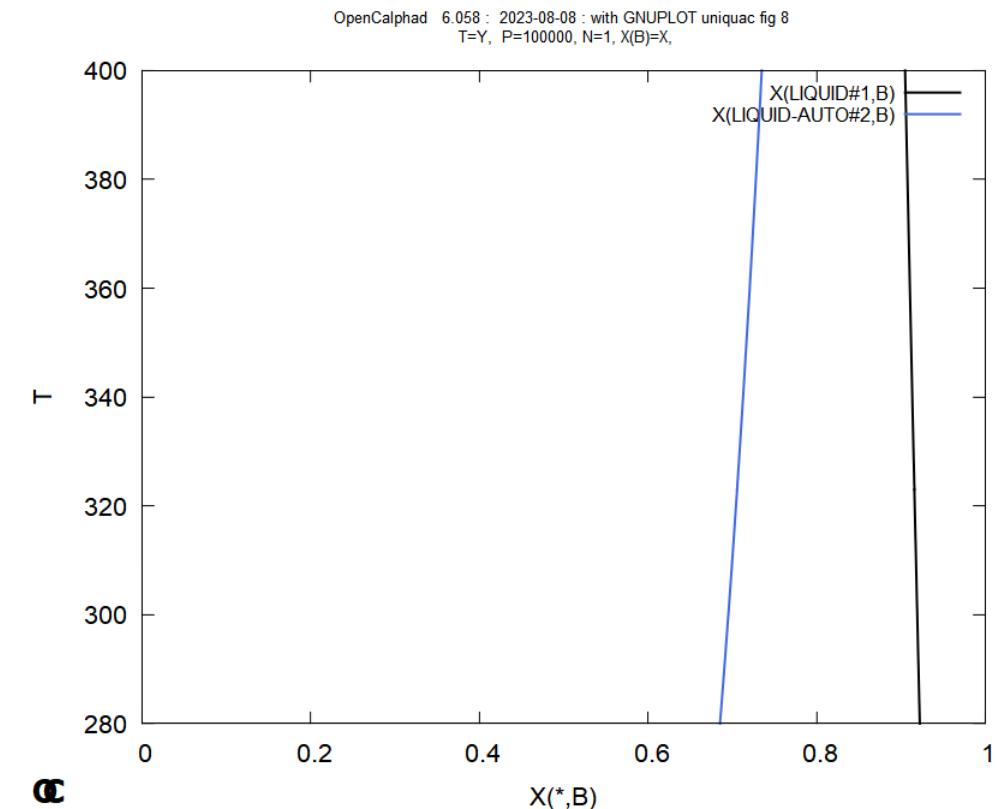


図3 フェノールと水の二成分相図
横軸：水のmole fraction

テスト中

--->OC6:list
LIST what? /RESULTS/
Results output mode /5/: 6

Output for equilibrium: 1, DEFAULT_EQUILIBRIUM 2023.08.08

Conditions

1:T=323, 2:P=100000, 3:N=1, 4:W(B)=0.5

Degrees of freedom are 0

Some global data, reference state SER

T= 323.00 K (49.85 C), P= 1.0000E+05 Pa, V= 0.0000E+00 m3

N= 1.0000E+00 moles, B= 3.0241E+01 g, RT= 2.6856E+03 J/mol

G= -3.70829E+02 J, G/N=-3.7083E+02 J/mol, H=-5.4894E+02 J, S=-5.514E-01 J/K

Some data for components

Component name	Moles	Mass-fr	Chem.pot/RT	Activities	Ref.state
A	1.6067E-01	0.50000	-6.5454E-01	5.1968E-01	SER (default)
B	8.3933E-01	0.50000	-3.9219E-02	9.6154E-01	SER (default)

Some data for phases

Name	Status	Mass	Volume	Form.Units	Cmp/FU	dGm/RT	Comp:
------	--------	------	--------	------------	--------	--------	-------

LIQUID#1..... E 1.552E-02 0.00E+00 6.36E-01 1.00 0.00E+00 W:

B 6.75835E-01 A 3.24165E-01

Constitution: There are 2 constituents:

WATER 9.15905E-01 PHENOL 8.40950E-02

LIQUID_AUTO#2..... E 1.472E-02 0.00E+00 3.64E-01 1.00 0.00E+00 W:

A 6.85428E-01 B 3.14572E-01

Constitution: There are 2 constituents:

WATER 7.05669E-01 PHENOL 2.94331E-01

OpenCalphadソフトウェアによる
温度323K、成分Bの濃度50wt%における平衡計算結果

--->OC6: