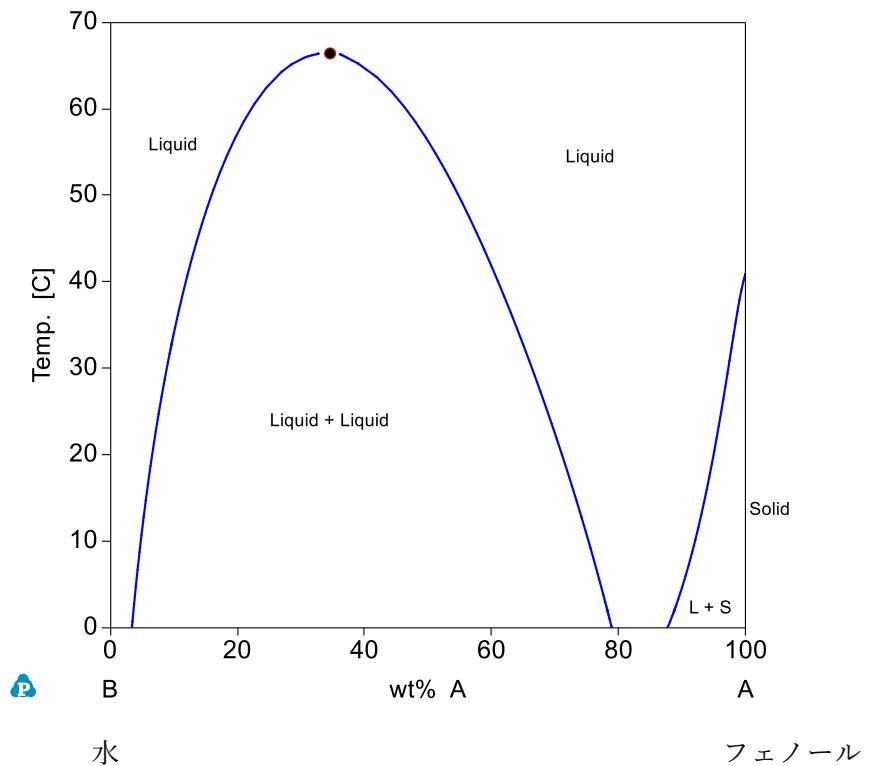


Q： フェノールと水 二成分 相図を計算できますか？

A： 計算できます。

2023年7月7日

株式会社 材料設計技術研究所



Pandat ソフトウェアには Component の概念が無いため、フェノール（C₆H₅OH）をAとし、水（H₂O）をBとする。 フェノールの質量を 94.111 とし、水の質量を 18.015 とする。相図の横軸は溶液中におけるフェノールの質量百分率とする。 系の圧力を 1 気圧とする。

計算モデルは、正則容体モデルを用いた。（2005 西澤）

自由エネルギーは、HSC Chemistry 10.2.2 の比熱データ、dH₂₉₈、dS₂₉₈ を用いて、ギブス自由エネルギーに換算した。液相中の相互作用パラメータは自作した。

図中の黒丸点は、上部臨界共溶温度の溶解度であり、66.4°Cの 34.6%になる。（2021 化学便覧）