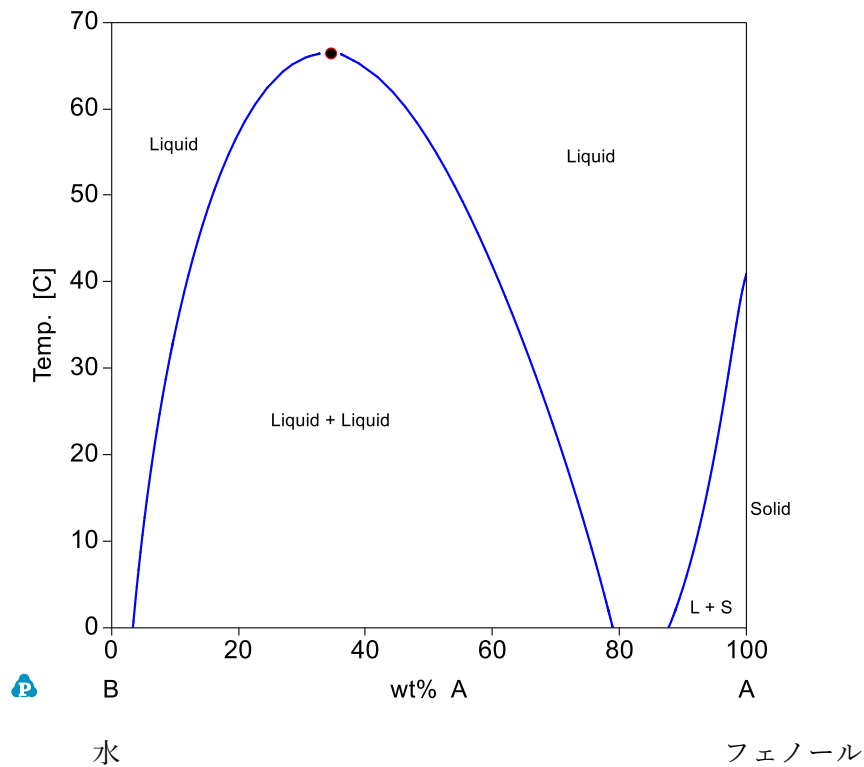


Q： フェノールと水 二成分 相図を計算できますか？

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 の概念が無いので、フェノール (C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>OH) を A とし、水 (H<sub>2</sub>O) 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)

ミクロ組織の熱力学、西澤泰二、日本金属学会、(2005). 99 ページ.

改訂 6 版 化学便覧 基礎編、丸善出版、(2021). 709 ページ.