열역학적 섭동이론에 근거한 상태방정식의 혼합물 상평형 계산에 적용

염민선, 신문삼[1], 김화용[1,*]
KISTI; [1]서울대학교 화학공학과
(hwayongk@snu.ac.kr*)

회합성 유체를 포함하여, 유체의 상 거동을 예측하기 위한 상태방정식을 개발하였다. 본 상태방정식은 열역학적 섭동 이론에 근거하며, 기존의 열역학적 섭동이론에 근거한 SAFT에서 새로운 사슬항을 적용하고 Alder식의 분산항에 근거한 순수유체를 위한 기존의 상태방정식을 혼합물에 적용가능하도록 확장한 것으로 기존에 사용된 분산항도 수정된 것이다. 본 상태방정식을 순수 및 혼합물의 상거동을 예측하는데 적용하였다.