

## Thermodynamic modeling of complex systems using PC-SAFT and COSMO-SAC

이봉섭<sup>†</sup>

경남대학교

(bslee2514@kyungnam.ac.kr<sup>†</sup>)

열역학 물성 및 상평형의 예측 또는 상관관계는 화학 및 관련 산업에서 중요한 목표로 남아 있다. 이러한 목적을 위해 전통적으로 많이 사용되는 모델로는 상태방정식(PR, SRK, SL, NLF, SAFT, PC-SAFT, CPA), 활동도계수 모델(Wilson, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC) 등이 있으며, 최근 컴퓨터 계산화학을 이용한 방법을 도입한 활동도계수 모델(COSMO-RS, COSMO-SAC) 등도 있다. 삼차방정식 형태를 띠는 PR 또는 SRK 상태방정식들이 오랜 기간 동안 단순 유체 시스템에 국한되어 사용되어 왔지만, 복잡한 화합물에도 적합한 모델에 대한 수요가 현격하게 증가하고 있다. 복잡한 화합물들에는 고분자, 전해질 용액뿐 아니라 회합현상(수소결합) 및 극성(dipolar and quadrupolar) 상호작용과 같은 특정 상호작용을 갖는 화합물이 포함된다. 이러한 복잡한 시스템의 모델링은 다른 분자 특성과 열역학적 물성에 미치는 그들의 영향을 설명할 수 있는 물리적 기반 모델을 필요로 한다. 복잡한 시스템에 적합한 열역학적 모델을 향한 현저한 진전은 통계적 열역학의 이론을 적용한 PC-SAFT 상태방정식과 컴퓨터 계산화학을 이용하여 분자의 표면전하 밀도의 열역학적 통계처리로부터 개발된 COSMO-based 모델들을 통하여 이루어지고 있다. 본 발표에서는 이들을 이용한 복잡한 계들의 적용결과에 대해 발표하고자 한다.