

298.15 K에서의 Cyclohexane-alcohol계의 과잉 몰 부피

박소진[†] · 오종혁

충남대학교 화학공학과
(1994년 3월 8일 접수, 1994년 7월 13일 채택)

Excess Molar Volumes for the Systems Cyclohexane-Alcohol at 298.15 K

So-Jin Park[†] and Jong-Hyeog Oh

Department of Chemical Engineering, Chungnam National University
(Received 8 March 1994; accepted 13 July 1994)

요 약

액상 혼합물의 용액거동은 혼합물 구성분자들 사이의 인력에 의존하며, 혼합시의 과잉 몰부피(V^E)는 따라서 각 구성 성분간의 상호관계를 이해하는데 뿐만 아니라 열역학적 설계에도 중요한 의미를 지닌다. 본 실험에서는 25°C 등은 하에서 cyclohexane-alcohol(C_1 - C_4) 혼합계의 과잉 몰부피를 digital vibrating tube densimeter를 이용하여 측정하였다. 본 실험에서 측정한 모든 cyclohexane-alcohol 혼합계의 과잉 몰부피값은 모두 이상용액으로부터 양의 편차를 보였으며, cyclohexane-methanol 혼합계에서는 불용영역을 나타내었다. 실험으로 얻은 데이터는 6개의 매개변수를 사용한 Redlich-Kister 다항식을 이용하여 합치시켜 보았으며, 실험값과의 평균편차(S_d)는 약 0.009 cm³/mol 미만이었다.

Abstract—Solution behavior of liquid mixtures are depend on the interactions of constituent molecules in solution, excess molar volume(V^E) is therefore very important in the thermodynamic design as well as understanding the relation between constituent components. In this work, excess molar volumes have been measured for binary mixtures of cyclohexane-alcohol(C_1 - C_4) at 298.15 K by using digital vibrating tube densimeter. Excess molar volume values show positive deviation from the ideality in all the measured cyclohexane-alcohol systems and especially cyclohexane-methanol mixture has immiscible region. Experimental data were fitted with 6 parameter Redlich-Kister equation, and their standard deviations(S_d), from the experimental data were less than 0.009 cm³/mol.

1. 서 론

유체와 혼합물의 volumetric property는 공정설계에 중요한 변수로 작용된다. 이들은 동점도나 표면장력과 같은 유용한 thermophysical property와 연관이 되며 또한 정압하의 열량적 측정값들을 등용하의 데이터로 바꾸는데도 이용될 뿐만 아니라, 상태방정식 이론에 사용되는 interaction parameter 등의 결정에도 사용되고

있다[1, 2].

혼합물의 열역학적 성질은 혼합물을 구성하는 각 성분의 분자간력(interaction force)에 의존하며 이에 따라 전 농도 범위에서 측정된 과잉 몰부피(V^E)는 혼합물 조성들 사이의 상호작용을 이해하는데 뿐만 아니라 열역학적 설계에도 중요한 의미를 지니게 된다. Alkane 혼합계의 열역학적 데이터들은 적은 관능기를 갖는 구조적인 단순성 때문에 새로운 이론의 접근이나, 기액

평형 데이터의 상관관계 연구, 그리고 검증 등에 자주 사용되는 자료이다.

따라서 Qin[3], Choudary[4], Ormanoudis[5] 등 많은 연구자들에 의해 alkane 혼합물 및 alkanol 혼합물에 대한 과잉부피의 온도도 농도 의존성 등에 대한 연구가 진행되었으나, cycloalkane 계에 관한 정보는 상대적으로 미미한 형편이다.

본 연구에서는 따라서 정유산업에서 파라핀 naphtha의 cyclization에 의해 형성되어 벤젠 및 나일론 66 등의 제조원료로 사용될 뿐만 아니라, 플라스틱 공업에서 용매로 쓰이는 등 그 응용범위가 다양한 물질인 cyclohexane[6]과 C₁-C₄ alcohol 혼합계의 과잉 몰부피를 digital densimeter를 이용하여 측정된 밀도로부터 구하고, 측정된 과잉 몰부피값은 Redlich-Kister 다항식에 합치하여 상관관계를 검토하고자 한다.

2. 이론적 고찰

모든 유체를 상태방정식으로 편리하게 취급할 수 있다면 이미 제시된 열역학적 성질의 관계식만으로써 충분히 상관관계를 규정 지을 수 있게 된다. 그러나 용액의 경우 mixing rule 등의 불완전으로 이의 완벽한 적용이란 요원하게 보이며, 이상용액의 성질이 순수한 구성성분의 성질에만 의존한다 할 때, 실제용액의 이해를 위해서는 이상용액으로부터 벗어나는 정도를 나타내는 과잉성질(excess property)을 사용하는 것이 더 편리할 때가 많다.

혼합물의 과잉성질은 용액의 실제값과 같은 온도, 압력 및 조성에서 이상용액이 갖는 값과의 차로 정의되며, 시랑 열역학적 과잉성질 중에 과잉 몰부피와 과잉 몰엔탈피(H^E)는 직접 측정이 가능한 항으로써 여러 다른 과잉성질에 비해 특히 유용하다. 과잉 몰성질의 일반 식으로부터 몰당 과잉부피에 대한 표현식은 식 (1)과 같으며 상첨자 id는 이상용액의 값을 표시한다.

$$V^E \equiv V - V^{id} \quad (1)$$

몰당 과잉부피의 측정은 일반적으로 밀도를 측정하여 환산하는 방법을 취하며 밀도측정 방법 중에 정확성 면에서 좀더 인정받고 있는 방법 중에는 magnetic method와 vibrator method의 두 가지가 있다. 이 중 본 실험에서 사용한 방법인 vibrator method는 다음과 같다.

2-1. Vibrator method

시료의 밀도가 진동하는 튜브의 진동수 f와 관계있다고 O. Kratky가 제안한 방법으로 진동수 f는 튜브와 시료의 질량 m의 제곱근에 반비례하고 이를 식으로

나타내면 다음과 같다.

$$f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{y}{m}} \quad (2)$$

여기서 y는 탄성계수(elasticity coefficient)이다.

밀도와 진동주기와 관계는 식 (2)로부터 식 (3)과 같이 쓸 수 있으며,

$$\Delta p = K \Delta T^2 \quad (3)$$

여기서 K는 비례상수이고, T는 진동주기를 나타낸다.

밀도를 알고 있는 기준 유체(액체, 기체) 물질 두 가지를 사용하여 장치의 특성치 K를 구할 수 있으며, 기체로 공기를 기준물질로 사용할 시에, 공기는 압축성 유체이므로 온도와 압력의 영향을 고려한 식 (4)를 사용하여 공기의 밀도를 계산할 수 있다[7]. 식 (4)에서 P와 t는 각각 압력(mmHg)과 온도(°C)를 나타낸다.

$$\rho_{Air} = \frac{0.001293}{(1 + 0.00367t)} \times \frac{P(\text{mmHg})}{760} \quad (4)$$

Densimeter로 측정된 두 기준유체의 진동주기와 각각의 밀도를 식 (3)과 연결하면 식 (5)와 같이 되고, 이로써 기기의 특성치인 비례상수 K값을 구할 수 있으며,

$$\rho_{1ref} - \rho_{2ref} = (T_{1ref}^2 - T_{2ref}^2)K \quad (5)$$

순수성분 및 혼합물의 밀도(ρ)는 따라서 측정된 진동주기와 식 (5)에서 구한 K값을 식 (6)에 대입하여 구할 수 있다.

$$\rho = K(T_i^2 - T_{2ref}^2) + \rho_{2ref} \quad (6)$$

2-2. 과잉 몰부피 환산

순수성분 및 혼합물의 밀도가 구해지면 식 (7)을 이용하여 과잉 몰부피를 계산할 수 있으며, ρ_m은 혼합물의 밀도를 나타낸다.

$$V^E = \left(\frac{x_1 M_1 + x_2 M_2}{\rho_m} \right) - \frac{x_1 M_1}{\rho_1} - \frac{x_2 M_2}{\rho_2} \quad (7)$$

식 (8)은 실험결과의 상관관계를 보기 위한 Redlich-Kister의 다항식[8]이며, 실험값과 Redlich-Kister 다항식을 이용하여 합치한 값과의 평균편차(S_d)는 식 (9)를 이용하여 계산할 수 있다. 여기서 N은 실험 데이터의 수, 그리고 n은 Redlich-Kister 다항식의 매개변수의 수로써 본 실험에서는 6개의 매개변수를 이용하여 합치해 보았다. 한편 무한 희석시의 각 성분 i의 몰당 과잉부피($\bar{V}_i^{E,\infty}$)는 식 (10)의 기울기로서 계산할 수 있다.

$$V^E = x_1 x_2 \sum_{i=1}^n A_i (x_1 - x_2)^{i-1} \quad (8)$$

$$S_d = \left[\frac{\sum_i (V_{calc}^E - V_{exp}^E)_i^2}{(N-n)} \right]^{1/2} \quad (9)$$

$$\bar{V}_i^{E,\infty} = (\partial V^E / \partial x_i)_{x_i=0} \quad (10)$$

3. 실험

3-1. 시약

본 실험에서 사용한 cyclohexane과 C₁-C₄ alcohol은 모두 Aldrich 사와 Merck사의 상용 특급시약을 사용하였다. 과잉부피 측정에 있어 시약의 불순도는 측정의 오차에 미치는 주 요인이 아니나[9], 대부분의 탄화수 소류에 가장 큰 불순물로 물이 포함되어 있으므로 실험에 사용한 모든 성분들은 실험전에 molecular sieve 3 Å를 사용하여 drying한 후 사용하였다. Drying한 후의 각 성분은 가스크로마토그래피에 의해 분석한 결과 모두 99.9 wt% 이상이었으며, 특히 methanol과 ethanol은 Karl-Fischer Titrator로 함유수분을 측정한 결과 모두 30 ppm 이하의 적은 수치를 나타내었다. Densimeter로 밀도 측정에 사용한 기준물질로는 공기와 이온 교환수를 두 번 증류한 bidistilled water(ρ : 0.99705)를 사용하였다.

3-2. 실험장치

실험에 사용한 digital vibrating tube densimeter는 Anton Paar사의 DMA 60과 DMA 602모델 및 SP2 자동 시료공급장치를 연결한 것으로 $\pm 1 \times 10^{-6}$ g/cm³의 정확도로 유체의 밀도를 측정할 수 있었다. DMA 602에는 U자형의 Borosilicate tube가 들어있어 그 안에 자동공급장치에 의해 시료를 채우고 진동주기를 측정하게 된다. 실험은 일정한 온도하에서 행해져야 하므로 항온조에서 항온된 물을 이용하여 U-tube를 항온시키고 이때의 온도를 HP digital resistance thermometer를 이용하여 $\pm 1 \times 10^{-2}$ K의 정확도로 유지시켰다. 혼합시료의 제조시에는 Denver Instrumental사의 microbalance를 사용하여 $\pm 1 \times 10^{-4}$ g까지 정확하게 측정하였다. 한 시료의 밀도 측정후에 U-tube는 ethanol과 acetone으로 세척하고 압축공기로 건조시킨 후, 다음 시료의 측정을 하게 된다.

3-3. 실험방법

Vibrating tube를 이용한 밀도측정은 기준물질의 진동주기와 밀도를 이용한 비교측정법으로, 본 실험에서는

Table 1. Densities(ρ) of pure liquids at 298.15 K

Component	Supplier	ρ (g/cm ³)	
		Present study	Lit. value
Cyclohexane	Aldrich	0.77385	0.77388 ^a
Methanol	Merck	0.78645	0.78637 ^b
Ethanol	Aldrich	0.78503	0.78500 ^b
1-Propanol	Aldrich	0.79948	0.79957 ^b
2-Propanol	Aldrich	0.78101	0.78082 ^b
1-Butanol	Merck		0.78126 ^c
2-Butanol	Merck	0.80584	0.8060 ^d

^aReference 10, ^bReference 11, ^cReference 12, ^dReference 13

기준물질로 건조공기와 물을 선택하여 순수물질 및 혼합시료의 밀도를 측정하였다. Cyclohexane-alcohol 혼합시료의 제조시에는 휘발에 의한 몰수 변화로 발생하는 오차를 줄이기 위해서, 휘발성이 낮은 물질을 먼저 4 ml의 혼합용기에 계산된 양만큼 syringe를 이용하여 주입시킨 후에 밀봉하고 microbalance로 무게를 측정한다. 휘발성이 높은 물질을 septum을 통해 주입하여 전체 약 3 ml의 시료를 만들었다. 제조된 시료는 자동 시료공급장치에 의해 U-tube 내에 공급되고, 온도 평형에 도달한 후의 진동주기를 측정하게 된다.

각 농도 혼합물에 대하여 densimeter로 측정된 진동주기는 식 (6)에 대입하여 혼합물의 밀도를 계산하고, 이 밀도를 식 (7)에 대입하여 혼합물의 과잉 물부피를 계산하였다. 계산된 과잉 물부피는 매개변수를 6개 사용한 Redlich-Kister의 다항식에 합치시켜 보았다. 실험으로 얻은 과잉 물부피값과 Redlich-Kister 식으로 계산한 과잉 물부피값과의 편차 S_d 는 식 (9)를 이용하여 계산할 수 있으며, 용액거동을 이해하는데 유리한 무한희석시의 과잉 물부피 또한 식 (10)의 기율기로서 구할 수 있다.

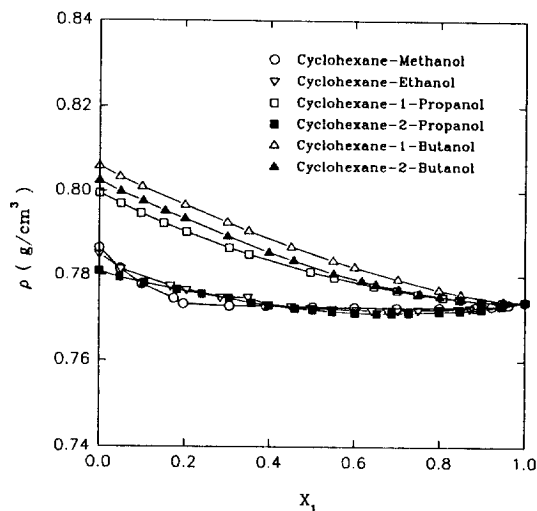
4. 결과 및 고찰

Table 1은 digital densimeter를 사용하여 측정한 각 순수성분의 밀도값과 문헌값을 명시한 비교표로써, 문헌치[10-13]와의 밀도 편차는 cyclohexane, methanol, ethanol과 1-propanol의 경우 모두 1×10^{-4} g/cm³ 이하이었으며, 2-propanol과 1-, 2-butanol의 경우는 이 수치를 약간 상회하는 정도로, 문헌값과의 밀도의 최대 오차는 0.02% 이하로써 본 실험에 사용한 시약과 밀도 측정 방법의 신빙성을 나타내준다.

Table 2에는 실험을 통해 측정된 혼합물의 밀도값과 이 밀도값으로써 식 (7)을 이용하여 계산한 몰당 과잉 부피의 실험값들을 나타내었다. 이 때 cyclohexane-meth-

Table 2. Excess molar volumes for cyclohexane-alcohol mixtures at 298.15 K

X_1	$\rho(\text{g/cm}^3)$	V^E (cm^3/mol)	X_1	$\rho(\text{g/cm}^3)$	V^E (cm^3/mol)
Cyclohexane-Methanol					
0.0491	0.78163	0.1857	0.6002	0.77244	-
0.1001	0.77790	0.3462	0.6993	0.77234	-
0.1753	0.77451	0.5019	0.7998	0.77244	-
0.1976	0.77322	-	0.8833	0.77256	0.2462
0.3051	0.77275	-	0.9235	0.77281	0.1898
0.3924	0.77272	-	0.9624	0.77322	0.1117
0.5011	0.77253	-			
Cyclohexane-Ethanol					
0.0513	0.78153	0.1947	0.6050	0.77186	0.5646
0.1668	0.77748	0.3898	0.6405	0.77177	0.5507
0.2053	0.77657	0.4302	0.6780	0.77182	0.5179
0.2844	0.77484	0.5133	0.7019	0.77182	0.5004
0.3492	0.77480	0.3962	0.7498	0.77189	0.4576
0.3962	0.77313	0.5855	0.7997	0.77202	0.4037
0.4504	0.77267	0.5911	0.8446	0.77217	0.3518
0.4978	0.77227	0.5973	0.8714	0.77230	0.3147
0.5474	0.77203	0.5877	0.9406	0.77293	0.1760
Cyclohexane-1-Propanol					
0.0498	0.79701	0.0658	0.6457	0.77754	0.4185
0.0971	0.79469	0.1319	0.7001	0.77655	0.4004
0.1505	0.79233	0.1941	0.7488	0.77563	0.3936
0.2039	0.79023	0.2407	0.8082	0.77488	0.3403
0.3043	0.78655	0.3243	0.8461	0.77439	0.3109
0.3510	0.78502	0.3551	0.8986	0.77393	0.2420
0.4960	0.78096	0.4069	0.9472	0.77375	0.1447
0.5513	0.77956	0.4210			
Cyclohexane-2-Propanol					
0.0479	0.77946	0.1083	0.5466	0.77148	0.6136
0.1053	0.77822	0.1825	0.6010	0.77117	0.6194
0.1824	0.77660	0.2873	0.6525	0.77101	0.6082
0.2408	0.77559	0.3492	0.6871	0.77104	0.5842
0.3045	0.77455	0.4163	0.7270	0.77121	0.5371
0.3569	0.77345	0.5042	0.7997	0.77142	0.4660
0.3978	0.77294	0.5348	0.8482	0.77162	0.4087
0.4590	0.77214	0.5890	0.8981	0.77208	0.3144
0.5008	0.77185	0.5971	0.9455	0.77278	0.1870
Cyclohexane-1-Butanol					
0.0489	0.80335	0.0763	0.5494	0.78350	0.4453
0.1000	0.80103	0.1280	0.6001	0.78202	0.4382
0.2004	0.79680	0.2066	0.7021	0.77919	0.4146
0.2998	0.79259	0.3062	0.7987	0.77666	0.3814
0.3502	0.79050	0.3578	0.8502	0.77560	0.3285
0.4505	0.78686	0.4091	0.9490	0.77393	0.1822
Cyclohexane-2-Butanol					
0.0504	0.79986	0.1069	0.6168	0.77873	0.6579
0.1028	0.79767	0.1641	0.6499	0.77791	0.6511
0.1539	0.79527	0.2562	0.7036	0.77678	0.6170
0.2002	0.79345	0.3017	0.7534	0.77586	0.5680
0.3004	0.78931	0.4361	0.8001	0.77512	0.5084
0.3978	0.78547	0.5635	0.8503	0.77442	0.4321
0.4564	0.78357	0.5947	0.8988	0.77390	0.3393
0.5507	0.78048	0.6600	0.9498	0.77359	0.2071


Fig. 1. Measured densities(ρ) of the binary systems cyclohexane-alcohol at 298.15 K.

anol 혼합계의 경우 불용영역이 존재하였는데, 이 영역에서는 과잉부피의 측정이 의미가 없으므로 과잉부피 데이터는 삭제하고 몰분율과 밀도만을 나타내었다.

Table 3에는 불용영역을 갖는 cyclohexane-methanol계를 제외한 각 이성분계에 대하여 이들 과잉 몰부피값을 식 (8)의 Redlich-Kister 다항식에 상관시켜 얻은 6개의 매개변수값과, 그 매개변수를 식 (7)에 대입하여 재 계산했을 때의 과잉 몰부피값과 실험값과의 편차 S_d 를 명시하였다. 표에서 보는 바와 같이 측정된 전 cyclohexane-alcohol(C_1 - C_4) 혼합물계에서의 과잉 몰부피값들은 모두 전 농도 범위에서 이상성으로부터 양의 편차값을 보이고 있다. 실험값과 Redlich-Kister의 다항식에 의한 계산값과의 S_d 는 모두 $0.009 \text{ cm}^3/\text{mol}$ 미만의 적은 편차로 일치하며, 이는 각 이성분계에 대하여 실험값으로부터 평균 1% 미만의 과잉 몰부피 오차로 합치되었음을 의미한다.

Fig. 1에는 내삽의 용이성을 위해 실험한 모든 혼합계에 대해 densimeter로 측정된 밀도를 도시하였으며, Fig. 2에는 측정된 혼합물의 밀도로부터 계산된 몰당 과잉부피의 농도에 대한 의존성을 나타내었다.

Fig. 2의 밀도와 과잉 몰부피의 도표에 있어서 cyclohexane-methanol 혼합계에서는 Table 2에서 보는 바와 같이 cyclohexane 약 0.18-0.88 농도범위에서 불용영역이 있음에 따라 이 지역에서의 과잉몰부피값은 단순히 직선으로 표시하였다.

Cyclohexane-ethanol 혼합계에서 과잉 몰부피값은 거의 좌우 대칭형으로 나타나며, cyclohexane 조성 약 0.49

Table 3. Fitted parameters(A_i) and root mean square deviations(S_d) for cyclohexane-alcohol mixtures at 298.15 K

Systems	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	$S_d(\text{cm}^3/\text{mol})$
Cyclohexane-Ethanol	2.39931	-0.21486	-0.06274	0.74175	1.84652	-1.24240	0.00459
Cyclohexane-1-Propanol	1.64165	0.44910	0.52781	0.28888	0.19258	0.21922	0.00458
Cyclohexane-2-Propanol	2.42605	0.82709	-0.65609	0.31202	1.71957	-0.40015	0.00887
Cyclohexane-1-Butanol	1.74001	0.47867	-0.46446	1.17851	1.96419	-0.43677	0.00459
Cyclohexane-2-Butanol	2.55478	1.14254	-0.57418	-0.48524	1.59330	0.74643	0.00878

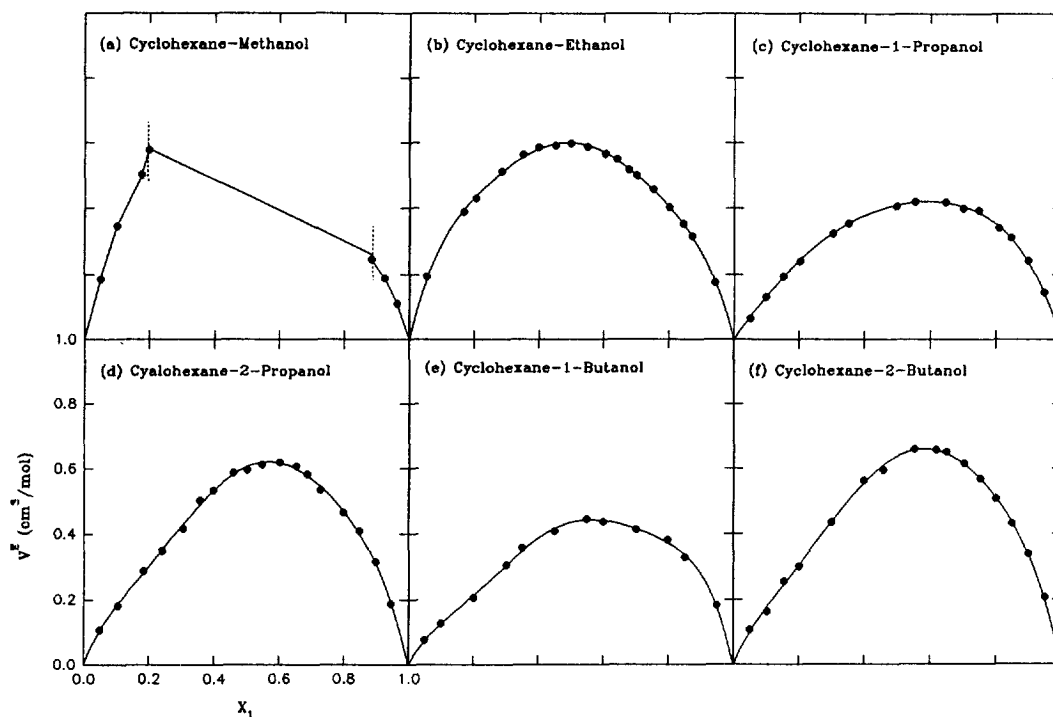


Fig. 2. Excess molar volumes of the binary systems cyclohexane-alcohol at 298.15 K (● : Exptl. data, — : Calc. data)

정도에서 최대 과잉 몰부피값 $0.60 \text{ cm}^3/\text{mol}$ 정도를 갖는다.

그 외의 cyclohexane-1-propanol, +2-propanol, +1-butanol과, +2-butanol 혼합계의 경우에는 과잉 몰부피 분포가 cyclohexane 조성이 농후한 지역으로 약간 편향된 형태의 곡선을 보이며, 각각 cyclohexane 조성 0.68, 0.58, 0.57, 0.62 부근에서 최대 과잉 몰부피값 0.42, 0.64, 0.44, 0.69 cm^3/mol 정도를 보인다. 각 그림에 있어 symbol들은 각 혼합물계의 실험 데이터이며, 실선은 6개의 매개변수를 사용하여 Redlich-Kister 다항식에 의해 계산된 과잉 몰부피값을 나타낸다. 이 때 cyclohexane-methanol 혼합계의 경우는 불용영역의 존재로 인하여 regression없이 측정 데이터 간을 직선으로 단순 연결하였다.

Fig. 3은 같은 탄소수의 이성질체에 대한 과잉 몰부피만을 비교 도시한 것으로 cyclohexane-alkane-2-ol 혼합물의 과잉 몰부피가 cyclohexane-alkan-1-ol 혼합물의 과잉 몰부피보다 크게 나타났는데, 이것은 가지달린 형태의 분자 모양은 구형에 가까워지고 분자당 표면적이 줄어들게 되며 결과적으로 분자당 분자간 인력은 작아지게 되는 분자형태에 따른 결과로 추정된다.

한편 양 끝단의 극한 몰분율에서 무한희석시의 과잉 몰부피값($\bar{V}_i^{E,\infty}$)은 cyclohexane의 농도가 희박한 지역과 농후한 지역에서 따로이 측정된 과잉 몰부피값을 농도에 대하여 도시하여 식 (11)의 기울기값으로 구할 수 있으며, Fig. 4, 5는 각각 이들의 도표로써 cyclohexane 몰분율 약 0.01-0.05와 0.95-0.99 사이의 범위에서 측정된 과잉 몰부피값을 농도에 대하여 도시한 도표이다. 직

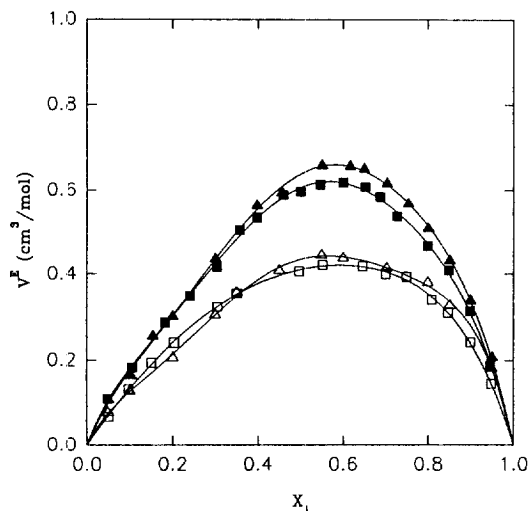


Fig. 3. Comparison of excess molar volume between cyclohexane-alkan-1-ol and cyclohexane-alkan-2-ol at 298.15 K.

(The same symbols and systems are used as in Fig. 1).

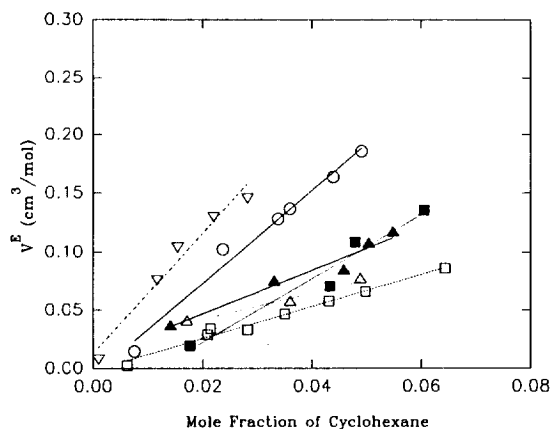


Fig. 4. Excess molar volumes for cyclohexane in C₁-C₄ alcohol at 298.15 K.

(The same symbols and systems are used as in Fig. 1).

선은 실험 데이터를 1차식으로 regression 한 값으로, 이 직선의 기울기로써 계산한 무한희석시의 과잉 몰부피값은 Table 4에 명시한 바와 같다.

5. 결 론

본 실험에서 측정된 모든 cyclohexane-alcohol(C₁-C₄)

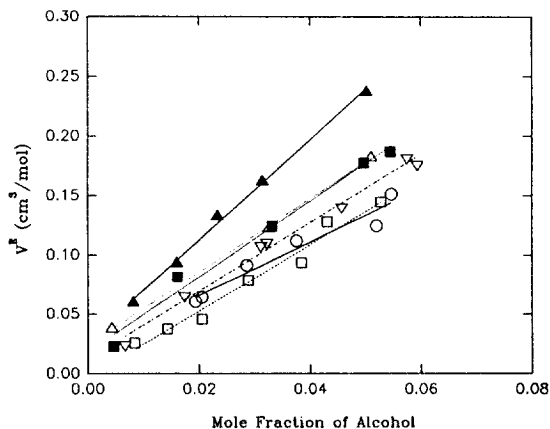


Fig. 5. Excess molar volumes for C₁-C₄ alcohol in cyclohexane at 298.15 K.

(The same symbols and systems are used as in Fig. 1).

Table 4. Partial molar excess volumes at infinite dilution for cyclohexane(1)-alcohol(2) mixtures at 298.15 K

System	$\bar{V}_1^{E,\infty}$	$\bar{V}_2^{E,\infty}$
Cyclohexane-Methanol	3.8716	2.2473
Cyclohexane-Ethanol	2.5995	2.8838
Cyclohexane-1-Propanol	1.3782	2.7993
Cyclohexane-2-Propanol	2.7341	3.1868
Cyclohexane-1-Butanol	1.1220	3.0867
Cyclohexane-2-Butanol	1.8785	4.2188

혼합계는 이상성으로부터 양의 편차를 보였다. 같은 탄소수를 갖는 cyclohexane-alcohol 혼합계의 비교에서는 cyclohexane-alkan-2-ol 혼합물이 cyclohexane-alkan-1-ol 혼합물보다 더 큰 음의 과잉 몰부피값을 갖는데 이는 가지달린 형태와 직선형의 이성질체 사이의 분자 구조에 따른 원인으로 생각된다. 불용영역이 존재하는 cyclohexane-methanol 혼합계를 제외하고 실험을 통해 얻은 결과와 Redlich-Kister의 다항식에 의한 상관관계를 살펴본 결과 각 혼합계에 대해 약 1% 미만의 과잉 몰부피 편차로써 잘 합치되었다.

사용기호

- A_i : ith parameter of the Redlich-Kister equation
- f : vibration frequency
- K : proportionality constant
- m : mass of the tube and its contents [g]

M : molecular weight [g/mol]
n : number of fitted parameter for the Redlich-Kister equation
N : number of experimental data
P : pressure [mmHg]
S_d : standard deviation between calc. V^E and exp. V^E [cm³/mol]
t : temperature [°C]
T : vibration period
V : molar volume of the real solution [cm³/mol]
V^E : excess molar volume [cm³/mol]
V^{id} : molar volume of the ideal solution [cm³/mol]
x_i : mole fraction of the component i
y : elasticity coefficient

그리이스 문자

ρ : density [g/cm³]
ρ_{ref} : density of the reference i [g/cm³]

참고문헌

- Papaioannou, D., Ziakes, D. and Panayiotou, C.: *J. Chem. Eng. Data*, **36**, 35(1991).
- Anand, S. C., Grolier, J. E., Kiyohara, O., Halpin, C. J. and Benson, G. C.: *J. Chem. Eng. Data*, **20**, 2(1975).
- Qin, A., Hoffman, D. E. and Munk, P.: *J. Chem. Eng. Data*, **37**, 1(1992).
- Choudary, N. C. and Naidu, P. R.: *J. Chem. Eng. Data*, **30**, 1(1985).
- Ormanoudis, C., Dakos, C. and Panayiotou, C.: *J. Chem. Thermodynamics*, **36**, 1(1991).
- Snell, F. D. and Ettre, L. S.: "Encyclopedia of Industrial Chemical Analysis", John Wiley & Sons, Inc.(1979).
- Weast, R. C.: "CRC Handbook of Chemistry and Physics", CRC Press(1986).
- Redlich, O. and Kister, A. T.: *Ind. Eng. Chem.*, **40**, 345(1948).
- Spanedda, A., Lepori, L. and Matteoli, E.: *Fluid Phase Equilibria*, **69**, 209(1991).
- Arimoto, A., Ogawa, H. and Murakami, S.: *Thermochimica Acta*, **163**, 191(1990).
- Pettenati, C., Alessi, P., Fermeglia, M. and Kikic, I.: *Thermochimica Acta*, **162**, 203(1990).
- Riddick, J. A. and Bunger, E. B.: "Organic Solvents. Physical Properties and Methods of Purification", Wiley-Interscience, New York(1986).
- Dean, J. A.: "Handbook of Organic Chemistry", Donnelly & Sons Co.(1987).