

저압하에서 2성분 1-Propanol-Propylacetate 계에 대한 기-액 평형치의 추산

심홍섭[†] · 김종식

계명대학교 화학공학과
(2000년 7월 20일 접수, 2000년 10월 11일 채택)

The Prediction of Vapor-Liquid Equilibrium Data for 1-Propanol-Propylacetate Systems at Subatmospheric Pressure

Hong-Seub Shim[†] and Jong-Shik Kim

Department of Chemical Engineering, Keimyung University, Taegu 704-701, Korea
(Received 20 July 2000; accepted 11 October 2000)

요 약

혼합용액의 분리공정에서 증류탑 설계에 필요한 기-액 평형에 관한 연구로서 2성분 1-propanol-propylacetate 계에 대하여 감압하 즉, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700 및 760 Torr에서의 기-액 평형치를 측정하고, 그 측정치를 이용하여 기-액 평형치를 추산하는 추산식을 이끌어 내었다. 측정치와 추산치를 비교 검토한 결과 ± 0.0019 의 작은 오차 범위내에서 잘 일치하고 있다.

Abstract – For the binary system of 1-propanol-propylacetate mixture vapor- liquid equilibrium data, which are the necessary ones for the design of the distillation columns in separation process, are measured at subatmospheric pressure of 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700 and 760 Torr. An empirical relation to predict vapor-liquid equilibrium data is obtained from above measured data. The predicted values are compared with the measured ones to be in a good agreement within accuracy of ± 0.0019 .

Key words: Subatmospheric Pressure, V-L-E Prediction, 1-Propanol-Propylacetate

1. 서 론

화학공업의 여러 가지 공정중에 혼합용액을 분리하기 위한 공정으로 증류, 추출 및 흡수공정 등이 있다.

이 중에서 현대산업 구조의 근간인 석유화학 공업의 기초로써 대규모의 연속분리 공정인 증류공정이 일반화 되어있다.

증류는 휘발성의 액체혼합물을 가열비등시킬 때 액상과 기상중에 공존하고 있는 성분조성의 차이를 이용한 성분분리 조작이다.

따라서 휘발성액체 혼합물의 분리에는 분리장치로서 정류장치가 필요하게 되고, 이 정류장치를 설계하는데는 기-액 평형치가 필수적인 자료이다.

이와 같은 기-액 평형치를 얻기 위하여 많은 연구가 이루어져 오고 있다. 즉 측정장치[1, 2], 측정치의 건전성 검토[3] 및 기-액 평형치의 추산에 관한 연구[4-15]가 이루어지고 있다.

기-액 평형치의 측정에는 많은 시간과 정밀도가 필요하고, 또한 까다롭고 힘든 작업이다.

따라서 기-액 평형치의 추산에 관한 연구가 많이 이루어져 오고 있고, 좋은 결과를 얻고 있다.

본 연구에서는 1-propanol-propylacetate 2성분계에 대하여 저압하의 기-액 평형치를 추산하는 추산식을 구하고자 한다.

2성분계의 기-액 평형치의 추산에 대한 것으로 활동도 계수와 액조성의 관계로부터 Wohl식[6], Margules식[7], van Laar식[8], Wilson식[9], NRTL식[10] 및 UNIQUAC식[11] 등이 있고, 화학식의 관능기에 의한 추산법으로 ASOG법[12], UNIFAC법[13] 등이 있다. 휘발도와 액조성의 관계로부터 Prahl[14]과 Park[15]에 의하여 추산식이 제안된 바 있다. Prahl은 3정수 추산식을 Park은 분자구조가 비슷한 2성분계로 이루어진 계에 대하여 대기압상태에서 2정수 추산식을 발표한 바 있다.

본 연구는 Park에 의하여 발표된 방법을 응용하여 1-propanol-propylacetate 계에 대하여 저압하, 즉 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700 및 760 Torr에서 기-액 평형치를 측정하고, 이 측정치를 이용하여 기-액 평형치를 추산하는 식을 구하였다. 또한 이 추산식으로부터 구한 추산치와 측정치를 비교 검토하였다.

2. 실험장치 및 방법

저압하에서 기-액 평형치를 얻기 위하여 본 실험에 사용한 장치를 Fig. 1에 상세하게 표시하였다.

[†]E-mail: hsshim@yjnet.yeungnam-c.ac.kr

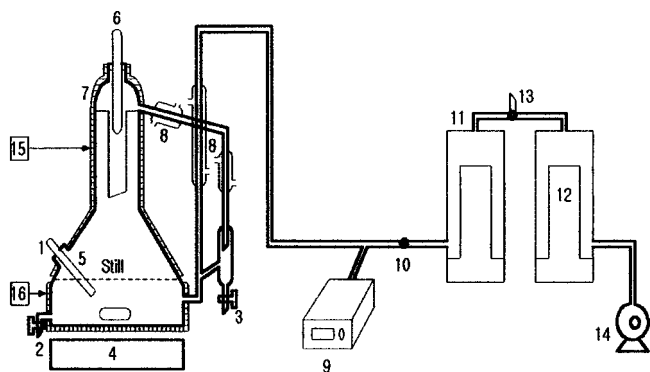


Fig. 1. Schematic diagram of the experimental apparatus.

- | | |
|--------------------------------|----------------------|
| 1. Cock: Raw material inlet | 9. Digital manometer |
| 2. Cock: liquid phase outlet | 10. Cock |
| 3. Cock: vapor phase outlet | 11. Manostat |
| 4. Magnetic stirrer | 12. Trap |
| 5. Thermometer in liquid phase | 13. Cock(capillary) |
| 6. Thermometer in vapor phase | 14. Vacuum pump |
| 7. Ni-Cr wire | 15. Transformer |
| 8. Condenser | 16. Transformer |

실험방법은 미리 조제한 1-propanol-propylacetate 혼합용액을 약 300 ml를 Fig. 1의 cock①로 공급한 후 cock①을 잠그고 cock⑩을 열어 진공 펌프⑭를 작동시킨다.

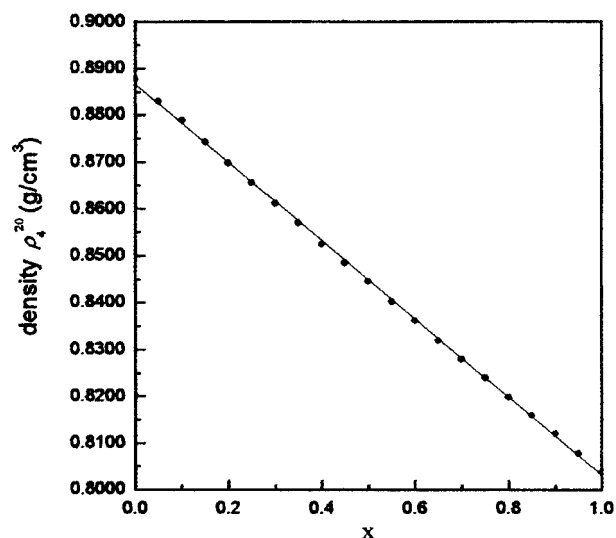
동시에 magnetic stirrer④를 이용하여 액상이 돌비현상이 일어나지 않도록 교반을 하면서 변압기⑬로 전압을 조절하여 가열온도를 조절하였다. Digital manometer⑨가 설정압력에 도달하고, 액상이 끓어서 장치내의 압력이 설정압력으로 고정되면 cock⑩을 잠근다. 이때 cock⑬을 이용하여 보다 정밀하게 압력을 조절한다.

Still 내의 증기상이 응축기⑧으로 완전히 넘어 오기 전에 still내에서 일어나기 쉬운 부분응축을 방지하기 위하여 still의 윗 부분을 보온하였다. 이때 증기상의 온도는 액상의 온도보다 항상 3-5 °C정도 높도록 변압기⑬를 이용하여 조절하였다. 액상과 증기상이 일정한 온도, 즉 평형온도에 도달한 후 약 1시간 정도 더 증류를 계속하여 충분히 기-액 평형상태에 도달시킨 후 가열을 중지한다. Cock⑩을 서서히 열고 cock⑬을 열어서 장치내의 압력을 대기압으로 한 다음 cock②에서 액상을, cock③에서 증기상의 시료를 약 5 ml씩 취하여 조성을 분석하였다.

시료의 조성분석을 위하여 이미 알고 있는 조성에 대하여 밀도를 측정하여 검량곡선을 작성하였으며 측정치와 검량곡선은 Table 1과 Fig. 2에 주어졌다.

Table 1. Density and composition(x_1) for 1-propanol-propylacetate at 20 °C

Mole fraction (1-propanol)	Density ρ_4^{20} (g/cm ³)	Mole fraction (1-propanol)	Density ρ_4^{20} (g/cm ³)
0.00	0.8877	0.55	0.8402
0.05	0.8830	0.60	0.8362
0.10	0.8789	0.65	0.8319
0.15	0.8743	0.70	0.8280
0.20	0.8698	0.75	0.8240
0.25	0.8656	0.80	0.8198
0.30	0.8611	0.85	0.8159
0.35	0.8570	0.90	0.8120
0.40	0.8524	0.95	0.8078
0.45	0.8485	1.00	0.8038
0.50	0.8445		

Fig. 2. Relation between density and composition(x_1) at 20 °C.
(x_1 : mole fraction of 1-propanol).

기-액 평형실험에서 얻어진 시료의 밀도를 측정하여 Fig. 2의 검량곡선을 이용하여 조성을 분석하였다.

여기서 사용한 밀도 측정장치는 Anton Paar사의 제품인 DMA 4500 density meter를 사용하였다. 압력설정은 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700 및 760 Torr로 설정하였다.

3. 실험결과 및 고찰

3-1. 실험결과

본 연구의 2성분 1-propanol-propylacetate계에 대하여 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700 및 760 Torr에서의 기-액 평형치를 측정하였고, 그 측정치는 Table 2와 Fig. 3-10에 주어졌다. 여기서 1-propanol을 제 1성분으로, propylacetate를 제 2성분으로 정리하였다.

3-2. 고찰

기-액 평형의 추산에는 활동도 계수를 이용하는 방법과 비휘발도를 이용하는 방법 등이 있다.

본 연구는 비휘발도와 액조성의 관계로부터 2성분계의 기-액 평형치를 추산하는 식을 얻고자 한다.

비휘발도와 액조성의 관계로부터 기-액 평형치를 추산하는 식으로 Prahl[14]은 3정수 추산식을 발표하였고, Park[15]은 분자구조가 비슷한 2성분계에 대하여 상압하에서 2정수 추산식을 발표 한 바 있다.

본 연구에서는 1-propanol-propylacetate 2성분계에 대하여 저압하, 즉 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700 및 760 Torr에서의 기-액평형치를 측정하고 그 측정치로부터 다음의 식 (1)에서 정의된 비휘발도가 액조성의 관계로부터 기-액평형치를 추산하는 식을 구하고 이 식으로부터 구한 추산치와 측정치를 비교 검토하였다.

$$\alpha_{12} = \frac{y_1/y_2}{x_1/x_2} \quad (1)$$

1-propanol-propylacetate 2성분계의 대기압 이하의 압력변화에 대한 기-액평형치로부터 구한 비휘발도의 대수치($\log \alpha$)와 액조성(x)을 각각 종축과 횡축으로한 직교좌표에 plot하면 Fig. 11과 같이 직선이 이루어 지고 이들을 최소자승법에 의하여 구한 8개의 직선이 각각 그 기울기의 오차가 ± 0.0013 의 범위에서 좌표 $P_1(-0.700, 0.710)$ 에서 한 점에 교

Table 2. Vapor-liquid equilibrium data for 1-propanol(1)-propylacetate(2) system at subatmospheric pressure(x: 1-propanol)

P=100 Torr						P=200 Torr					
t /°C	x	y _{exp.}	y _{calc.}	y _{diff.}	logα ₁₂	t /°C	x	y _{exp.}	y _{calc.}	y _{diff.}	logα ₁₂
46.8	0.065	0.096	0.098	−0.002	0.1840	62.6	0.056	0.095	0.093	0.002	0.2479
46.2	0.132	0.179	0.177	0.002	0.1565	61.8	0.112	0.165	0.167	−0.002	0.1950
45.7	0.183	0.227	0.226	0.001	0.1176	61.2	0.169	0.226	0.229	−0.003	0.1571
45.0	0.273	0.296	0.298	−0.002	0.0491	60.3	0.250	0.305	0.302	0.003	0.1194
44.9	0.337	0.345	0.343	0.002	0.0155	60.1	0.323	0.357	0.358	−0.001	0.0658
44.9	0.375	0.369	0.367	0.002	−0.0112	60.0	0.364	0.385	0.387	−0.002	0.0389
45.0	0.411	0.391	0.390	0.001	−0.0362	59.9	0.428	0.431	0.429	0.002	0.0053
45.1	0.472	0.429	0.426	0.003	−0.0755	60.0	0.494	0.474	0.471	0.003	−0.0348
45.1	0.530	0.460	0.462	−0.002	−0.1218	60.2	0.575	0.524	0.523	0.001	−0.0896
45.6	0.621	0.521	0.520	0.001	−0.1780	60.4	0.627	0.556	0.559	−0.003	−0.1279
46.0	0.670	0.551	0.554	−0.003	−0.2187	60.7	0.685	0.603	0.601	0.002	−0.1559
46.7	0.755	0.625	0.623	0.002	−0.2669	61.2	0.756	0.658	0.659	−0.001	−0.2069
47.9	0.826	0.694	0.695	−0.001	−0.3208	61.9	0.818	0.722	0.720	0.002	−0.2382
48.8	0.884	0.772	0.770	0.002	−0.3523	62.4	0.850	0.754	0.755	−0.001	−0.2669
50.1	0.937	0.855	0.857	−0.002	−0.4018	64.2	0.933	0.873	0.871	0.002	−0.3066
Mean deviation				±0.0019		Mean deviation				±0.0020	
P = 300 Torr						P = 400 Torr					
72.9	0.042	0.073	0.075	−0.002	0.2544	81.0	0.052	0.095	0.093	0.002	0.2819
71.9	0.104	0.167	0.164	0.003	0.2373	79.8	0.107	0.169	0.172	−0.003	0.2298
71.2	0.160	0.227	0.229	−0.002	0.1880	78.7	0.186	0.261	0.263	−0.002	0.1891
70.2	0.245	0.312	0.310	0.002	0.1453	78.2	0.261	0.335	0.333	0.002	0.1542
69.8	0.308	0.360	0.361	−0.001	0.1017	77.7	0.342	0.399	0.397	0.002	0.1063
69.5	0.391	0.424	0.421	0.003	0.0594	77.1	0.394	0.433	0.435	−0.002	0.0699
69.4	0.452	0.463	0.462	0.001	0.0193	77.3	0.450	0.471	0.473	−0.002	0.0367
69.4	0.508	0.503	0.499	0.004	−0.0087	77.0	0.513	0.517	0.515	0.002	0.0070
69.7	0.581	0.545	0.547	−0.002	−0.0636	77.1	0.586	0.562	0.564	−0.002	−0.0426
69.8	0.649	0.596	0.595	0.001	−0.0981	77.3	0.631	0.598	0.596	0.002	−0.0605
70.2	0.732	0.657	0.659	−0.002	−0.1541	77.6	0.691	0.637	0.640	−0.003	−0.1053
70.7	0.775	0.699	0.696	0.003	−0.1712	77.9	0.753	0.688	0.691	−0.003	−0.1407
71.7	0.840	0.763	0.762	0.001	−0.2124	78.4	0.830	0.765	0.763	0.002	−0.1760
72.4	0.892	0.822	0.824	−0.002	−0.2525	79.2	0.877	0.817	0.815	0.002	−0.2033
73.3	0.941	0.895	0.894	0.001	−0.2721	80.1	0.948	0.910	0.911	−0.001	−0.2560
Mean deviation				±0.0020		Mean deviation				±0.0021	
P = 500 Torr						P = 600 Torr					
86.9	0.059	0.105	0.107	−0.002	0.2721	92.6	0.063	0.113	0.115	−0.002	0.2776
85.9	0.113	0.186	0.184	0.002	0.2537	91.2	0.132	0.216	0.213	0.003	0.2581
85.1	0.182	0.267	0.265	0.002	0.2141	90.4	0.197	0.289	0.286	0.003	0.2193
84.2	0.243	0.322	0.325	−0.003	0.1701	89.8	0.238	0.323	0.326	−0.003	0.1840
83.4	0.332	0.398	0.399	−0.001	0.1239	89.3	0.277	0.360	0.361	−0.001	0.1668
82.9	0.397	0.449	0.446	0.003	0.0926	88.8	0.355	0.426	0.424	0.002	0.1298
82.8	0.463	0.490	0.492	−0.002	0.0470	88.3	0.420	0.470	0.471	−0.001	0.0880
82.8	0.520	0.532	0.530	0.002	0.0209	88.2	0.464	0.503	0.501	0.002	0.0679
82.9	0.591	0.577	0.579	−0.002	−0.0250	88.0	0.554	0.562	0.563	−0.001	0.0141
83.0	0.641	0.614	0.614	0.000	−0.0502	88.0	0.622	0.612	0.610	0.002	−0.0184
83.2	0.695	0.655	0.654	0.001	−0.0793	88.2	0.680	0.652	0.652	0.000	−0.0547
83.7	0.760	0.704	0.707	−0.003	−0.1243	88.5	0.752	0.706	0.709	−0.003	−0.1013
84.2	0.833	0.777	0.776	0.001	−0.1558	89.0	0.830	0.782	0.781	0.001	−0.1339
84.8	0.885	0.834	0.833	0.001	−0.1852	89.6	0.884	0.835	0.838	−0.003	−0.1778
85.6	0.940	0.902	0.904	−0.002	−0.2310	90.3	0.948	0.921	0.920	0.001	−0.1942
Mean deviation				±0.0018		Mean deviation				±0.0019	

Table 2. (continued)

P = 700 Torr						P = 760 Torr					
t °C	x	y _{exp.}	y _{calc.}	y _{diff.}	log α_{12}	t °C	x	y _{exp.}	y _{calc.}	y _{diff.}	log α_{12}
97.6	0.053	0.102	0.100	0.002	0.3074	99.7	0.074	0.134	0.136	-0.002	0.2870
96.4	0.108	0.180	0.183	-0.003	0.2584	98.5	0.137	0.221	0.224	-0.003	0.2521
95.3	0.160	0.250	0.249	0.001	0.2430	97.3	0.209	0.307	0.305	0.002	0.2244
94.2	0.248	0.342	0.339	0.003	0.1976	96.8	0.257	0.350	0.351	-0.001	0.1922
93.6	0.316	0.397	0.397	0.000	0.1538	96.1	0.318	0.401	0.403	-0.002	0.1571
92.8	0.388	0.450	0.452	-0.002	0.1108	95.8	0.369	0.447	0.443	0.004	0.1406
92.6	0.443	0.489	0.492	-0.003	0.0803	95.2	0.448	0.503	0.500	0.003	0.0959
92.4	0.515	0.544	0.541	0.003	0.0506	94.8	0.526	0.552	0.554	-0.002	0.0455
92.1	0.564	0.573	0.574	-0.001	0.0159	94.7	0.572	0.583	0.586	-0.003	0.0196
92.1	0.640	0.626	0.628	-0.002	-0.0262	94.8	0.646	0.639	0.638	0.001	-0.0132
92.2	0.685	0.664	0.661	0.003	-0.0416	94.9	0.720	0.696	0.694	0.002	-0.0504
92.5	0.753	0.717	0.715	0.002	-0.0804	95.2	0.781	0.744	0.744	0.000	-0.0889
92.9	0.817	0.770	0.772	-0.002	-0.1250	95.5	0.833	0.789	0.792	-0.003	-0.1251
93.2	0.865	0.819	0.821	-0.002	-0.1511	95.8	0.891	0.855	0.853	0.002	-0.1419
94.1	0.941	0.914	0.912	0.002	-0.1763	96.6	0.952	0.927	0.929	-0.002	-0.1936
Mean deviation				± 0.0021		Mean deviation				± 0.0021	

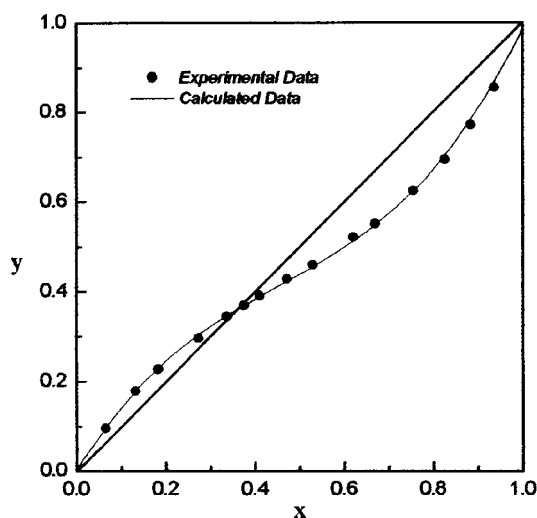


Fig. 3. x-y diagram for 1-propanol(1)-propylacetate(2) system at 100 Torr.

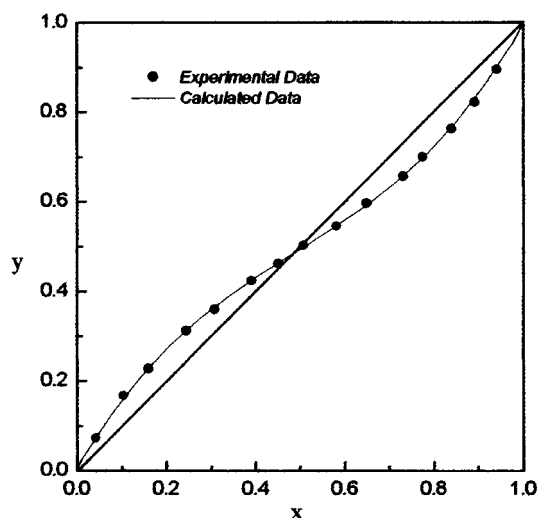


Fig. 5. x-y diagram for 1-propanol(1)-propylacetate(2) system at 300 Torr.

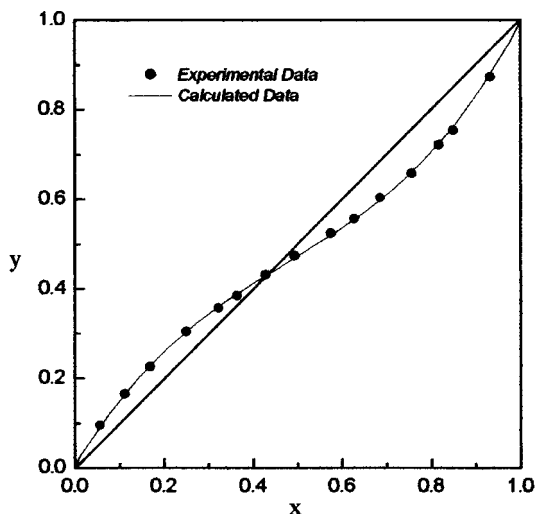


Fig. 4. x-y diagram for 1-propanol(1)-propylacetate(2) system at 200 Torr.

차하는 것을 확인하고 다음과 같이 2정수 추산식을 구하였다.

Fig. 12는 Fig. 11의 축약된 그림으로 액조성(x)을 횡축으로 비휘발도의 대수치(log α)를 종축으로 하여 x에 대한 log α 의 직선이 점 P_i에서 교차할 때 직선의 기울기 m은 다음의 식 (2)가 되고, 식 (2)를 log α 에 대하여 정리하면 식 (3)이 된다.

$$\tan\theta = m \quad m < 0$$

$$-m = \frac{H - \log\alpha}{\chi + L} \quad (2)$$

$$\log\alpha = H + m(\chi + L) \quad (3)$$

1-propanol-propylacetate 2성분계의 대기압 이하의 압력변화에 대하여 Fig. 11에서 구한 H값과 L값(거리)을 식 (3)에 대입하면 다음의 식 (4)가 얻어진다.

이 식 (4)가 1-propanol-propylacetate 2성분계의 대기압 이하 압력변화에 대한 기-액 평형치를 추산하는 추산식이 된다.

$$\log\alpha = 0.710 + m(x + 0.700) \quad (4)$$

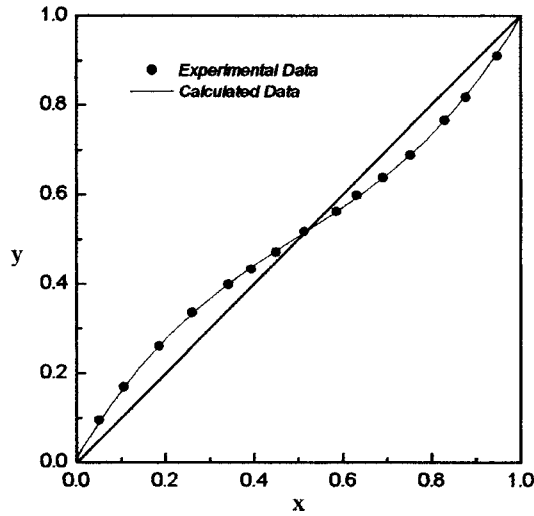


Fig. 6. x-y diagram for 1-propanol(1)-propylacetate(2) system at 400 Torr.

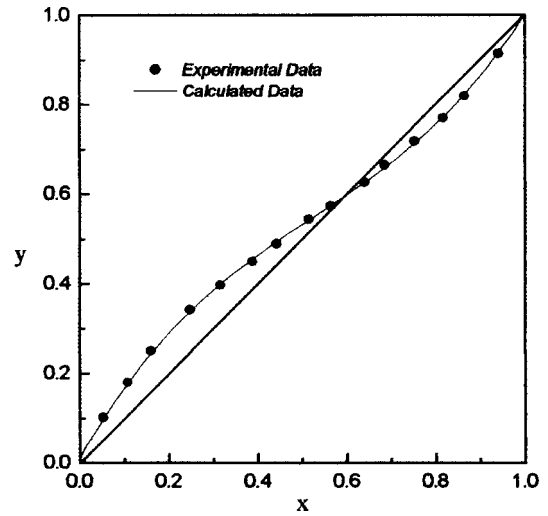


Fig. 9. x-y diagram for 1-propanol(1)-propylacetate(2) system at 700 Torr.

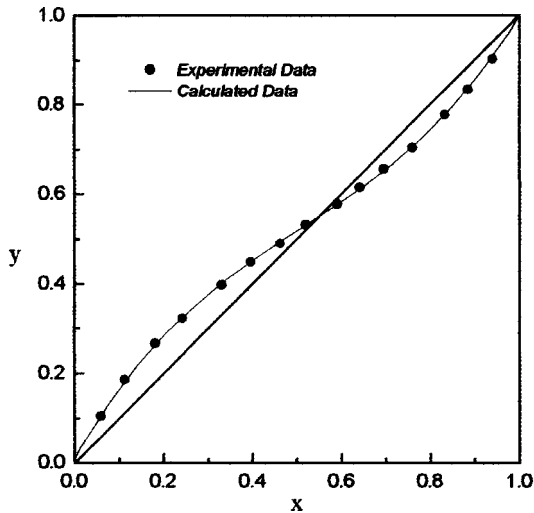


Fig. 7. x-y diagram for 1-propanol(1)-propylacetate(2) system at 500 Torr.

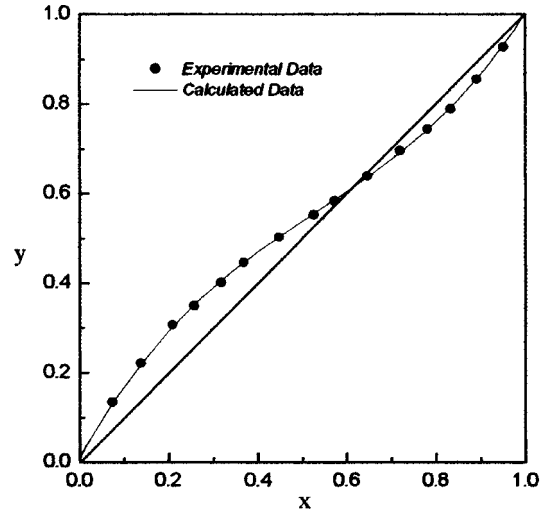


Fig. 10. x-y diagram for 1-propanol(1)-propylacetate(2) system at 760 Torr.

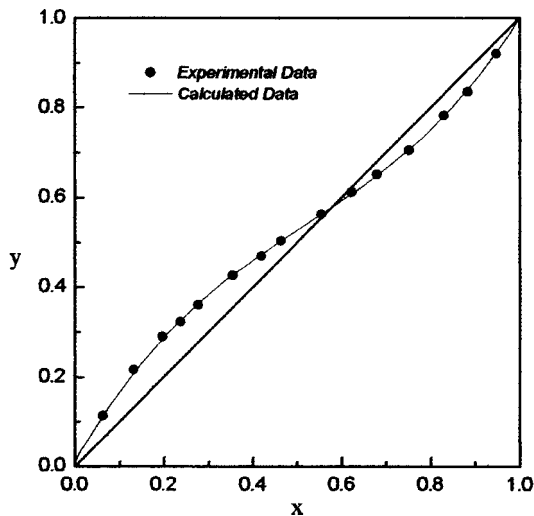


Fig. 8. x-y diagram for 1-propanol(1)-propylacetate(2) system at 600 Torr.

1-propanol-propylacetate 2성분계의 대기압이하의 압력변화에 대하여 각각의 직선의 기울기 m 만 얻어지면 x 와 $\log \alpha$ 의 관계식을 구할 수

있다. 따라서 Fig. 11에서 각 직선의 기울기를 식 (4)에 대입하여 정리하면 다음의 식 (5)와 같이 2정수 추산식을 얻게 된다.

여기서 액조성(x)은 1-propanol을 나타내고 α 는 propylacetate에 대한 1-propanol의 비휘발도이다.

또한 m 은 직선의 기울기이고, b 는 직선의 절편이 된다.

$$\log \alpha = mx + b \quad (5)$$

식 (5)의 압력 변화에 대한 기울기 m 값과 절편 b 값은 Table 3에 주어졌다.

임의의 액조성(x)에 대하여 식 (5)에서 구한 α 값을 식 (1)에서 정리한 다음의 식 (6)에 대입하여 y 값을 구할 수 있다.

$$y = \frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)x} \quad (6)$$

Table 2와 Fig. 3-10에 주어진 측정치와 추산치인 식 (5)에서 구한 추산치를 비교 검토한 결과 모든 조성 범위에서 ± 0.0019 의 오차 범위 내에서 잘 일치하고 있다. 또한 압력변화에 대한 공비점의 변화도 알 수 있었으며 그 변화 값은 Table 4에 주어졌다.

또한 1-propanol-propylacetate계의 문헌치[16]에 대하여 본 연구에서

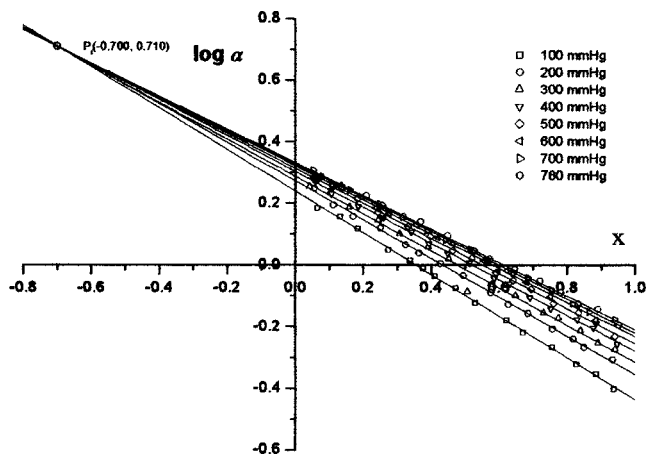


Fig. 11. Relation between $\log \alpha$ and x for 1-propanol(1)-propylacetate(2) system at subatmospheric pressure.

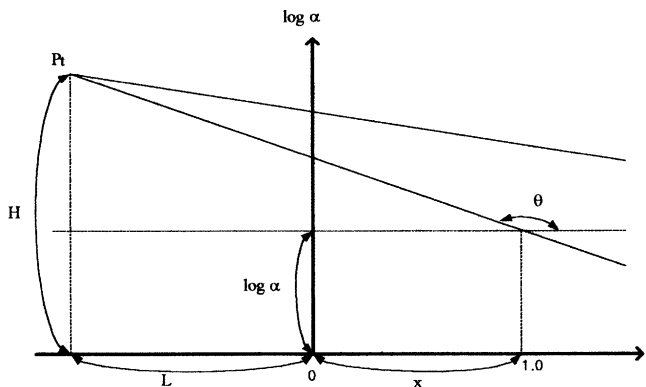


Fig. 12. $\log \alpha$ vs. x .

Table 3. Slope(m) and intercept(b)

Pressure(Torr)	Slope(m)	Intercept(b)
100	-0.674	0.238
200	-0.628(-0.620)	0.270(0.263)
300	-0.601	0.289
400	-0.582(-0.579)	0.303(0.296)
500	-0.567	0.313
600	-0.554(-0.544)	0.322(0.314)
700	-0.547	0.327
760	-0.539(-0.518)	0.333(0.323)

() from Ref.[16]

제안한 식 (4)에 의해 구한 추산치와 비교 검토한 결과는 Table 5에 주어졌고, 비교적 적은 오차범위내에서 잘 일치하고 있다. 이때 문헌치로부터 구한 액조성(x)과 비휘발도의 대수치($\log \alpha$) 관계에서 직선의 기울기와 절편값은 Table 3에 주어졌다.

4. 결 론

1-propanol(1)-propylacetate(2) 2성분계의 대기압이하의 압력변화 즉, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700 및 760 Torr에서의 기-액 평형치를 측정하여 Table 2와 Fig. 3-10에 주어졌고, 압력변화에 대한 공비점의 변화도 확인하고 Table 4에 주어졌다.

실측한 기-액 평형치로부터 구한 비휘발도의 대수치($\log \alpha$)와 액조성(x)의 관계는 각각의 압력에 따라 직선이 되고 이를 직선의 기울기의

Table 4. Azeotropic point of 1-propanol(1)-propylacetate(2) system

Pressure (Torr)	Azeotropic temp. (°C)	Azeotropic composition (mole fraction of 1-propanol)
100	44.9	0.353
200	59.9	0.431
300	69.4	0.481
400	76.9	0.520
500	82.8	0.552
600	88.0	0.582
700	92.1	0.598
760	94.7	0.617

Table 5. Comparison of literature data with calculated data of 1-propanol(1)-propylacetate(2) system

P=200 Torr				P=400 Torr			
x	$y_{lit.}$	$y_{calc.}$	$y_{diff.}$	x	$y_{lit.}$	$y_{calc.}$	$y_{diff.}$
0.162	0.215	0.225	-0.010	0.162	0.232	0.239	-0.007
0.316	0.358	0.357	0.001	0.316	0.381	0.379	0.002
0.407	0.416	0.420	-0.004	0.407	0.443	0.446	-0.003
0.526	0.489	0.497	-0.008	0.526	0.526	0.526	0.000
0.609	0.545	0.552	-0.007	0.609	0.562	0.582	-0.020
0.707	0.615	0.624	-0.009	0.707	0.650	0.655	-0.005
0.792	0.689	0.699	-0.010	0.792	0.726	0.728	-0.002
0.871	0.784	0.786	-0.002	0.871	0.811	0.748	0.063
0.935	0.874	0.877	-0.003	0.935	0.889	0.893	-0.004
Mean deviation			± 0.006	Mean deviation			± 0.012
P=600 Torr				P=760 Torr			
0.162	0.239	0.252	-0.013	0.162	0.249	0.262	-0.013
0.316	0.393	0.399	-0.006	0.316	0.399	0.414	-0.015
0.409	0.467	0.468	-0.001	0.407	0.477	0.485	-0.008
0.526	0.543	0.551	-0.008	0.526	0.554	0.569	-0.015
0.609	0.600	0.608	-0.008	0.609	0.612	0.626	-0.014
0.707	0.670	0.680	-0.010	0.707	0.685	0.698	-0.013
0.792	0.746	0.751	-0.005	0.792	0.756	0.767	-0.011
0.871	0.826	0.829	-0.003	0.871	0.837	0.842	-0.005
0.935	0.899	0.905	-0.006	0.935	0.907	0.913	-0.006
Mean deviation			± 0.007	Mean deviation			± 0.011

오차가 ± 0.0013 의 범위에서 한 점 $P(-0.700, 0.710)$ 에서 교차하는 것을 확인할 수 있었다.

이러한 결과를 이용하여 식 (4)를 유도하고, 식 (4)로부터 각각의 압력에 따른 2성수 추산식인 식 (5)를 얻었다. 식 (5)의 기울기 m 값과 절편 b 값을 구하고 Table 3에 주어졌다. 실측치와 추산식으로부터 구한 추산치를 비교 검토한 결과 그 오차 범위가 ± 0.0019 로서 잘 일치함을 알았고, 문헌치[16]에 적용했을 때에도 Table 5에서와 같이 ± 0.009 의 오차범위내에서 잘 일치하고 있음을 확인하였다.

따라서 본 논문에서 제안한 추산식은 1-propanol(1)-propylacetate(2) 2성분계의 대기압 이하의 압력변화에 따른 기-액 평형치를 추산하는 추산식으로 이용할 수 있음을 확인하였다.

사용기호

- x : mole fraction in liquid phase
- y : mole fraction in vapor phase
- α : relative volatility
- P_i : point

H : height
 m : slope
 b : intercept
 1 : represents 1-propanol
 2 : represents propylacetate
 calc. : calculation
 diff. : difference

참고문헌

1. Omoto, T. and Ezaki, M.: *Chem. Eng. Japan*, **30**, 709(1966).
2. Kojima, K.: *ibid*, **33**, 1201(1969).
3. Herington, E. F. G.: *J. Init. Petrol.*, **37**, 457(1951).
4. Hirata, M. and Hakuta, T.: *Chem. Eng. Japan*, **32**, 45(1958).
5. Ohe, S.: *Chem. Eng. Japan*, **31**, 663(1967).
6. Wohl, K.: *Trans. Am. Inst. Chem. Eng.*, **42**, 215(1946).
7. Margules, M.: *Sitzgsber. Akad. wiss. wien.*, **104**, 1234(1895).
8. Van Laar, J. J.: *Z. Phys. Chem.*, **72**, 723(1910).
9. Wilson, G. M.: *J. Am. Chem. Soc.*, **86**, 127(1964).
10. Renon, H. and Prausnitz, Z. M.: *AIChE J.*, **14**, 135(1968).
11. Abrams, D. S. and Prausnitz, J. M.: *ibid*, **21**, 116(1975).
12. Kojima, K. and Tochigi, K.: "Prediction of Vapor-Liquid Equilibria by the ASOG Method," Kodansha-Elsevier(1979).
13. Fredenslund, A., Gmehling, J. and Rasmussen, P.: "Vapor-Liquid Equilibria using UNIFAC," Elsevier(1997).
14. Prahl, W. H.: *Ind. Eng. Chem.*, **43**, 1767(1951).
15. Park, W. K.: Ph. D. Thesis Inha Univ.(1973).
16. Smimova, N. A.: VFSTN Leningrad. Univ. FIZ KHM, **16**, 80(1959).