

成分ファミリー法による BWR 状態式の異種分子間相互作用 パラメータ m_{ij} の相関 (2012)¹

$$T_{cij} = m_{ij} \sqrt{T_{ci} T_{cj}} \quad (1)$$

$$m_{ij} = 64 \left[\left\{ k_1 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) \right\}^{1/6} + \left\{ k_1 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) \right\}^{-1/6} \right]^{-6} + k_2 \quad (9)$$

Table 1 Classification of binary interaction parameter²

	CH ₄	Alkane (>C ₁), Alkene, Cycloalkane	H ₂ S, CO ₂ , C ₂ H ₂	N ₂ , CO	Arene (芳香族炭 化水素)
CH ₄	1.00	G1	G3	G4	温度依存性 G7
Alkane (>C ₁), Alkene, Cycloalkane	G1	G2	G3	G4	G5
H ₂ S, CO ₂ , C ₂ H ₂	G3	G3	G3	–	G6
N ₂ , CO	G4	G4	–	G4	温度依存性 G8
Arene (芳香族炭化 水素)	温度依存性 G7	G5	G6	温度依存性 G8	G5

Table 2 Coefficients in Eq. (9)

	k_1	k_2
G1*	0.751	-0.0240
G2	0.686	-0.00372
G3**	0.370	-0.075
G4	1.68	0.0236
G5	0.893	-0.00797
G6	0.864	0

* ただし、本表 G1 の有効範囲は、 $V_{ci}/V_{cj} \leq 7$ 。全域に適用するためには

$$m_{ij} = 0.9668 - 0.005634 \times (V_{ci}/V_{cj}) - 0.005728 \times (V_{ci}/V_{cj})^2$$

本ソフトではこの2次式を採用。

** ただし、本表 G3 の有効範囲は、 $V_{ci}/V_{cj} \geq 3$ 、 $V_{ci}/V_{cj} \leq 3$ に適用するためには

¹ Ken-ichi Ago, Hideki Sekiguchi, Hideo Nishiumi, 日韓分離技術会議, ICSST11, 2011.11.3-5, Jeju, Korea; 吾郷健一, 秋定諒亮, 西海英雄, 化学工学会第 77 年会, 工学院大学, 東京(2012.3)

² 本書では、ここに示した新しく相関した m_{ij} の値を用いている。

$m_{ij} = 0.96933 - 0.011929 \times (V_{ci}/V_{cj}) - 0.000603 \times (V_{ci}/V_{cj})^2$ が望ましい。

本ソフトでは、この2次式を採用。

温度依存性を持つ系 (本ソフト収納)

G7: CH₄-アレン (芳香族炭化水素) 系

1 員環

$$m_{ij} = 1.257989 - 0.16928 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) + \left\{ -0.36065 + 0.257784 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) \right\} \times \frac{T}{10^3}$$

2 員環

$$m_{ij} = 0.614546 - 0.04273 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) + \left\{ 0.533928 + 0.034144 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) \right\} \times \frac{T}{10^3}$$

G8: N₂-アレン (芳香族炭化水素) 系

1 員環

$$m_{ij} = 0.54143 - 0.1099 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) + \left\{ 1.34098 - 0.0123 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) \right\} \times \frac{T}{10^3}$$

2 員環

$$m_{ij} = -14.398 + 2.85802 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) + \left\{ 22.3029 - 4.2129 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) \right\} \times \frac{T}{10^3}$$