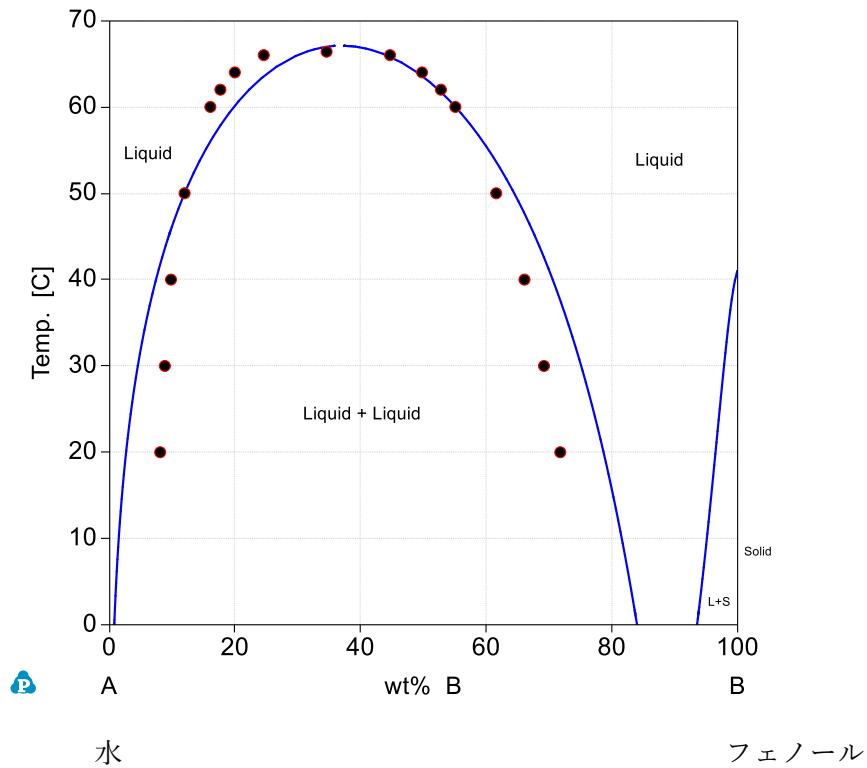


Q： フェノールと水 二成分 相図を計算できますか？

A： 計算できます。

2023年7月22日

株式会社 材料設計技術研究所



Pandat ソフトウェアには Component の概念が無いため、水（H<sub>2</sub>O）を成分 A とし、フェノール（C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>OH）を成分 B とする。水の質量を 18.015 とし、フェノールの質量を 94.111 g/mol とする。相図の横軸は溶液中におけるフェノールの質量百分率とする。系の圧力を 1 気圧とする。

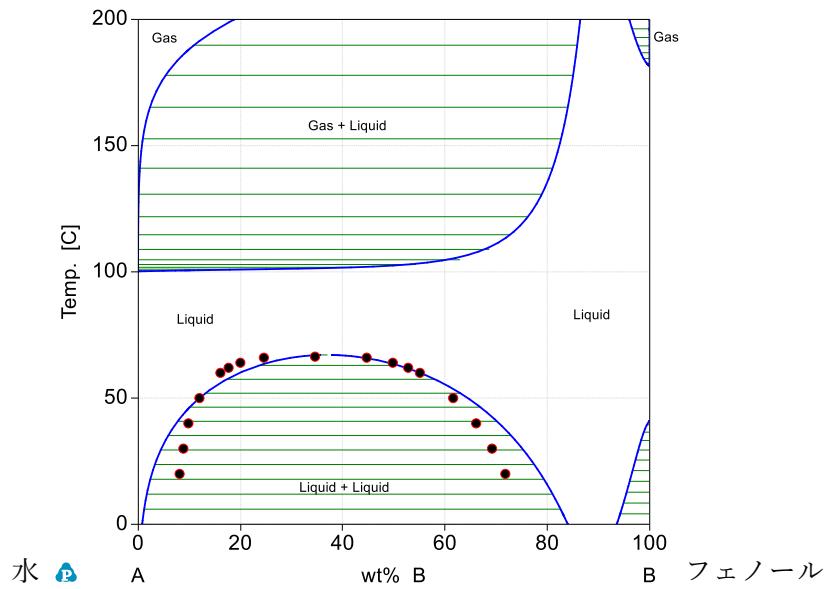
計算モデルは、正則容体モデルを用いた。（2005 西澤）

自由エネルギーは、HSC Chemistry 10.2.2 の [比熱データと dH<sub>298</sub> と dS<sub>298</sub>] 値を用いて、ギブス自由エネルギーに換算した。液相中の相互作用パラメータは自作した。

図中の黒丸点は相互溶解度。（2021 化学便覧）上部臨界共溶温度とフェノールの質量百分率は、66.4°C、34.6%である。

ミクロ組織の熱力学、西澤泰二、日本金属学会、(2005). 99 ページ.

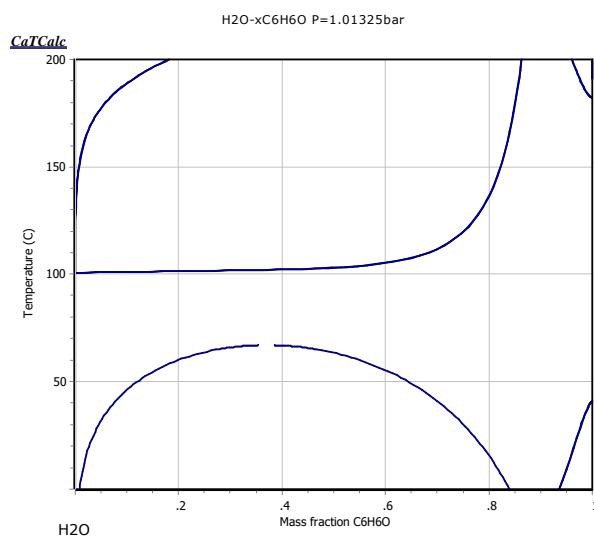
改訂 6 版 化学便覧 基礎編、丸善出版、(2021). 709 ページ.



ガス相を含めた二成分の相図 1気圧 横軸はフェノールの質量百分率

ガス相の構成種を  $\text{H}_2\text{O}$  と  $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$  の 2 個のみとし、ガス種の自由エネルギーを HSC Chemistry の [比熱データと  $dH_{298}$  と  $dS_{298}$ ] 値を用いて換算した。タイライン(共役線)を緑色線で示す。液相中の相互作用パラメータを 50°C の溶解度(実験データ)に合うように自作した。気圧を下げて計算すると、ガス相がより低温度にて安定になることを確認出来る。

仮想成分 A-B を用いず、 $\text{H}_2\text{O}-\text{C}_6\text{H}_6\text{O}$  の二成分を用いた計算が出来る。実在の 3 元素、炭素(C)、水素(H)、酸素(O)を定義し、Species  $\text{H}_2\text{O}$  と  $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}$  を定義することで、平衡計算が出来る。相図を下に示す。



CaTCalc ソフトウェアによる、ガス相を含めた二成分の相図 1気圧 横軸はフェノールの質量分率