

## 塩と水 二成分の相図

2023年7月22日

株式会社材料設計技術研究所

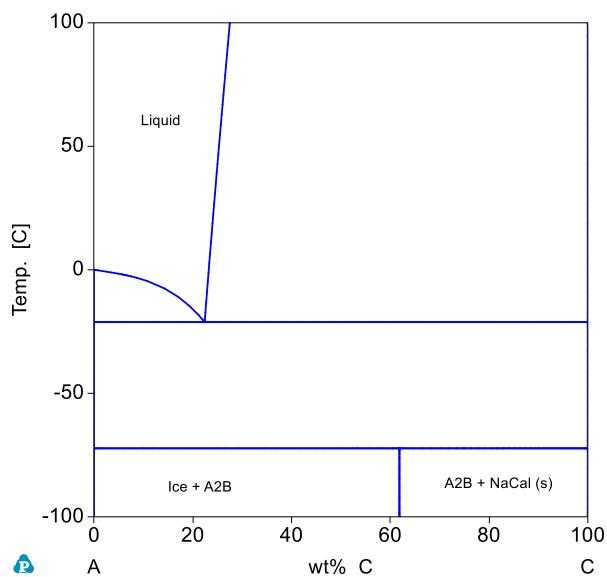


図1 水と塩 二成分の相図 1気圧 (暫定版)  
横軸は溶液中における NaCl の質量百分率  
計算による共晶温度は-21°C、濃度は 22.4wt%.

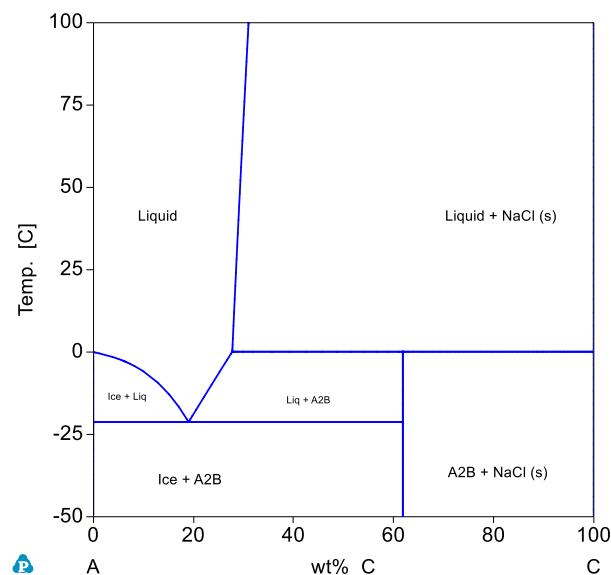


図2 水と塩 二成分の相図 1気圧  
横軸は溶液中における NaCl の質量百分率

水 ( $\text{H}_2\text{O}$ ) を成分 A とし、塩 ( $\text{NaCl}$ ) を成分 C とする。水の質量を 18.015 とし、塩の質量を 58.443 g/mol とする。化合物  $(\text{NaCl}) \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$  を A2B とする。

水の固相と液相、塩の固相と液相、化合物 A2B の自由エネルギーは、HSC Chemistry 10.2.2 の [比熱データと  $dH_{298}$  と  $dS_{298}$ ] 値を用いて、ギブス自由エネルギーに換算した。計算モデルは正則容体モデルを用い、液相中の相互作用パラメータを自作した。計算結果を図 1 に示す。

化合物 A2B が不安定になる理由は不明。そこで、化合物 A2B が +0.1°C まで安定になるようギブス自由エネルギーに -15355 Joule を足した。改良後の計算結果を図 2 に示す。

この策とは別に、「化合物 A2B はそのままにし、液相の自由エネルギーを変更する案」も考えられる。しかしこの案の場合、3 個の固相 (Ice- $\text{H}_2\text{O}$  と  $\text{NaCl}(\text{s})$  と A2B) の自由エネルギーの大小関係になり、HSC Chemistry のデータの検証が必要になる。

水 ( $\text{H}_2\text{O}$ ) のエンタルピー H 変化の計算結果を図 3 に示す。水の融解熱は 6 kJ/mol であることがわかる。-280,659 から -274,652 へ。

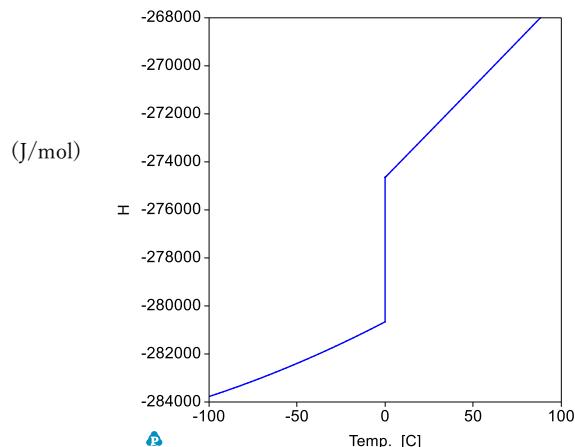


図 3 水 ( $\text{H}_2\text{O}$ ) のエンタルピー H 変化

文献：

状態図・七話、西澤泰二、(2015)、アグネ技術センター。 93 ページ

平衡状態図の基礎 (2)、山口喬、応用物理、58 (1989), 104-113.

塩類の相律 (第 1 回)、岡俊平、日本海水学会誌、25 (1971), 163-175.

理科年表 2023 (机上版)、丸善出版。

#### 溶解度

100g の飽和溶液中に溶存する物質の量をグラム(g)で表した

温度 (°C)	0	20	40	60	80	100
NaCl	26.28	26.38	26.65	27.05	27.54	28.2