

## Solvent-water-2-propanol 삼성분계의 액-액평형

정 상 훈 · 이 진 우\* · 박 동 원

동아대학교 공과대학 화학공학과, \*동의공업전문대학 화학공업과  
(1997년 4월 21일 접수, 1997년 5월 30일 채택)

### LLE of Solvent-Water-2-Propanol Ternary Systems

Sang-Hoon Jeong, Jin-Woo Lee\*, and Dong-Won Park

Dept. of Chem. Eng., College of Eng., Dong-A Univ., Pusan 604-714, Korea

\*Dept. of Chemical Industry, Dong-Eui Technical Junior College, Pusan 614-715, Korea

(Received April 21, 1997, Accepted May 30, 1997)

**요 약 :** 에너지 비용의 상승에 따라 추출에 기본원리를 둔 새로운 분리공정에 대한 연구가 많이 진행되고 있으며, 이에 따라 액-액평형 조성의 계산 및 예측에 대한 필요성이 매우 증가하고 있다. 본 연구에서는 공비혼합물을 형성하는 2-propanol 수용액에 용매로서 methyl ethyl ketone, methyl isobutyl ketone, ethylacetate, butylacetate, toluene 및 o-xylene을 첨가한 삼성분계에 대하여 25°C에서 용해도곡선, tie line, plait point, 분배계수와 선택도를 실험을 통해 구하였다. Tie line 데이터의 열역학적 건전성을 확인하였으며 실험값을 NRTL 및 UNIQUAC 모델식으로 구한 계산값과 비교하였다.

**Abstract :** Due to the rising cost of energy, new separation processes based on extraction are becoming more attractive than before. Thus, the need for calculating and predicting liquid-liquid equilibria(LLE) compositions has very much increased. The purpose of this study is to determine the binodal curves, tie lines, plait point, distribution and selectivity for the ternary systems of 2-propanol-water with methyl ethyl ketone, methyl isobutyl ketone, ethylacetate, butylacetate, toluene and o-xylene as solvents at 25°C. And those tie line data were used to examine thermodynamic consistency. The experimental tie line data were correlated with NRTL and UNIQUAC models.

### 1. 서 론

액체 혼합물이 공비현상을 나타내며 수용액 상태로 존재하는 경우에는 물보다 유기용질에 친화력이 강한 유기용매를 첨가함으로써 수용액으로부터 유기용질을 분리하는 액-액 추출공정이 대부분 적용되고 있다. 특히 에너지 비용의 상승을 고려하여 추출에 기본원리를 둔 새로운 분리공정이 다양하게 개발됨에 따라 액-액평형 분야에 대한 관심이 더욱 고조되고 있으며 액-액추출 장치를 설계하기 위한 필수적인 요소인 상평형 데이터의 필요성이 보다 증가되어 현재까지 많은 연구결과들이 문헌을 통해 발표되고 있다[1-5].

이러한 평형 특성치를 구하기 위하여 이전부터 액-액평형 데이터를 상호 연관시키는데 사용되고 있는 방법으로는 다음 두가지 영역의 모델들이 있다. 그중 하나는 조성의 함수로서 성분의 분배율을 경험적으로 설명해 주는 모델들로서 Bachman-Brown[6], Hand[7], Othmer-Tobias[8], Ishida[9] 및 Major-

Swenson[10]의 방법 등이며, 또다른 영역의 모델들은 혼합물의 상평형을 열역학적으로 고찰한 것으로서 액상모델에 국부 부피분율 개념을 도입한 Wilson식, 완전혼합계 뿐만 아니라 부분혼합계에 대해서도 적용하기 위하여 randomness 개념을 적용한 Renon과 Prausnitz의 NRTL식[11]과 국부 면적분율의 개념을 도입한 Abrams와 Prausnitz의 UNIQUAC식[12] 등이 주로 이용되고 있다.

본 실험을 통해 분리하고자 하는 2-propanol은 화학공업에 관련된 여러분야에서 유기반응 및 고분자 중합반응의 용제, 중간제, 의약품 제조와 아세톤의 제조에 주로 이용되고 있다. 특히 폴리부타디엔의 중합과정에서 반응조절을 위한 용매로 사용된 후 수용액 상태로 회수되는 2-propanol-water계에서 2-propanol을 분리하기 위하여 용매를 첨가한 삼성분 액-액추출계를 구성하였으며 추출용매는 케톤, 에스테르 및 방향족 화합물로 구분하여 사용함으로써 용매의 종류에 따른 상분리 거동을 고찰하였다. 또한 실험에서 구해진 용해도곡선과 tie line

데이터를 Hand 식을 이용하여 건전성을 확인하였으며 NRTL 및 UNIQUAC 모델식의 파라미터를 계산하여 실험치와 계산치를 비교하였다. 또한 각각의 삼성분계에 대한 분배계수와 선택도를 측정함으로써 용매의 추출성능에 대하여 고찰하였다.

## 2. 실험

### 2.1. 시료 및 장치

본 실험은 25°C에서 실시하였으며 solvent(1)-water(2)-2-propanol(3) 삼성분계에 사용된 추출용매는 methyl ethyl ketone(MEK), methyl isobutyl ketone(MIBK), ethylacetate(EAc), butylacetate(BAc), toluene과 o-xylene으로서 특급시약을 정제없이 사용하였으며 시료 중의 물은 2차 증류 후 사용하였다. 각 시료들의 물성치는 문헌[13]으로부터 인용하여 Table 1에 나열하였다.

### 2.2. 실험 방법

실험장치는 Haddad와 Edmister[14]의 cloud-point titrator를 응용하여 제작하였으며 Lee 등[15]이 사용한 실험방법과 같이  $\pm 0.1^\circ\text{C}$ 의 오차 범위내에 있는 항온조에서 투명한 자켓내로 물을 순환시켜 항온을 유지하였고, 적정시료의 정확성을 기하기 위하여 최소눈금이 0.01 ml인 마이크로 뷰렛을 사용하였다.

용해도곡선은 Othmer[16]등의 방법에 의해 25°C로 유지되는 자켓내의 200 ml 시료병에 기지의 용매를 넣고 교반하면서 water와 2-propanol을 번갈아 가며 적정하여 맑아지는 영역과 흐려지는 영역의 경계점을 연결하여 결정하였다.

Tie line을 측정하기 위한 혼합시료는 물과 용매를 50:50의 중량비를 유지한 상태에서 2-propanol의 농도를 5% 간격으로 증가시켜 제조하였으며, 충분히 혼합시킨 후 항온조 내에서 24시간 이상 방치하여 분리시켰다.

평형조성은 분리된 각 상을 채취하여 Gas Chromatograph (HP5890 series II)에 의해 직접 측정하였고 TCD detector, 150 mesh의 Porapac-Q를 충전한 6 ft,  $\frac{1}{8}$  in. OD 스테인레스 칼럼을 사용하였다.

## 3. 결과 및 고찰

### 3.1. 실험 데이터와 건전성

용매에 따른 각 삼성분계의 용해도 곡선은 Fig. 1에 도시하였고 대표적으로 butylacetate(1)-water(2)-2-propanol(3) 삼성분계에 대한 tie line 실험결과를 Fig. 2에 나타내었으며 용해도곡선 실험 데이터는 Table 2에, 그리고 tie line 평형조성은 Table 3에 각각 나타내었다.

액-액평형 실험 데이터 건전성을 확인하기 위하여 성분의 분배율을 조성의 함수로 나타낸 Hand식, Othmer-Tobias식과 Major-Swenson식을 적용하여 직선성에 대한 상관계수를 구하였으며 그 결과를 r로 표시하여 Table 4에 나타내었다. 각 경우에서 모두 직선적으로 관계식을 잘 만족시켰으며 이들 중 대표적으로 Major-Swenson식에 대한 결과를 Fig. 3에 나타내었다.

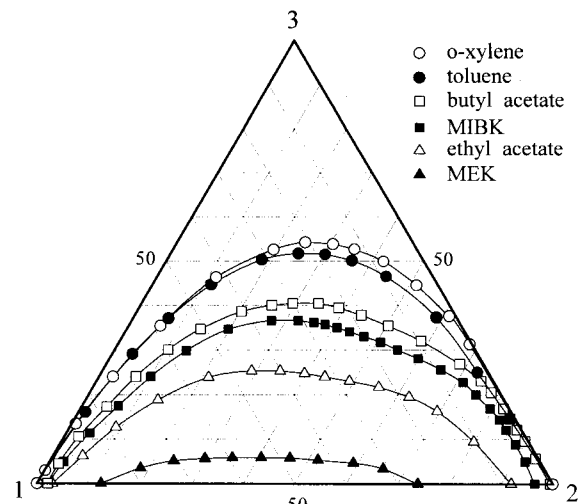


Fig. 1. Comparison of binodal curves for solvent(1)-water(2)-2-propanol(3) system at 25°C(wt%).

Table 1. Physical Properties of the Chemicals Used

Chemicals	M.W.	B.P. (°C)	Density (g/cm <sup>3</sup> )	Solubility (wt %)		Source	Purity (%)
				in aq	aq in		
2-propanol	60.097	82.26	0.7813		infinite	Aldrich	99.+
methyl ethyl ketone	72.108	79.640	0.7997	24.00	10.00	Yakuri	99.+
methyl isobutyl ketone	100.162	116.500	1.3993	1.70	1.90	Junsei	99.5
ethylacetate	88.107	77.114	0.8946	8.08	2.94	Hayashi	99.+
butylacetate	116.161	126.114	0.8764	0.43	1.86	Junsei	99.5
toluene	92.142	110.625	0.8623	0.05	0.03	Junsei	99.5
o-xylene	106.169	144.411	0.8760	0.02	0.00	Junsei	98.5

Table 2. Binodal Curve Data for Ternary Systems at 25°C(mole %)

$X_1$	$X_2$	$X_3$	$X_1$	$X_2$	$X_3$	$X_1$	$X_2$	$X_3$
MEK-water-2-propanol			MIBK-water-2-propanol			EAc-water-2-propanol		
88.32	40.87	0.00	88.84	11.16	0.00	59.13	12.90	0.00
81.74	51.79	2.93	80.03	12.99	6.98	45.28	22.49	7.23
69.37	59.84	3.82	65.70	19.54	14.76	36.34	31.03	13.21
54.73	66.98	3.88	52.70	27.02	20.28	29.14	41.91	16.89
42.77	71.63	3.55	40.89	34.31	24.80	24.82	53.64	18.06
32.37	76.14	3.26	30.66	42.30	27.04	20.60	63.16	16.49
24.29	80.02	2.97	21.50	52.15	26.35	17.01	68.63	15.04
16.65	83.40	2.53	11.40	66.23	22.37	14.07	76.12	12.48
10.15	87.03	2.04	5.98	77.66	16.36	10.93	83.24	9.75
3.49	89.87	1.37	1.09	91.61	7.30	8.76	98.73	0.00
BAc-water-2-propanol			toluene-water-2-propanol			o-xylene-water-2-propanol		
99.83	11.68	0.00	87.10	0.17	0.00	100.00	0.00	0.00
72.47	10.91	7.35	70.28	5.97	21.56	94.25	0.80	4.94
50.90	14.39	16.24	55.76	15.30	33.80	75.03	4.18	20.79
37.06	21.83	23.43	41.20	23.76	39.18	55.68	12.13	32.19
23.28	28.42	28.81	28.30	36.12	40.60	37.10	23.14	39.76
13.54	36.18	31.46	20.35	50.74	35.72	21.96	35.45	42.59
9.48	43.79	31.91	16.33	58.83	31.69	11.74	48.94	39.32
6.95	53.11	30.23	11.40	64.40	28.65	7.87	55.83	36.30
2.59	63.62	26.23	7.01	76.04	21.37	5.39	61.80	32.81
0.51	79.71	16.80	1.77	90.22	9.27	3.85	66.43	29.72

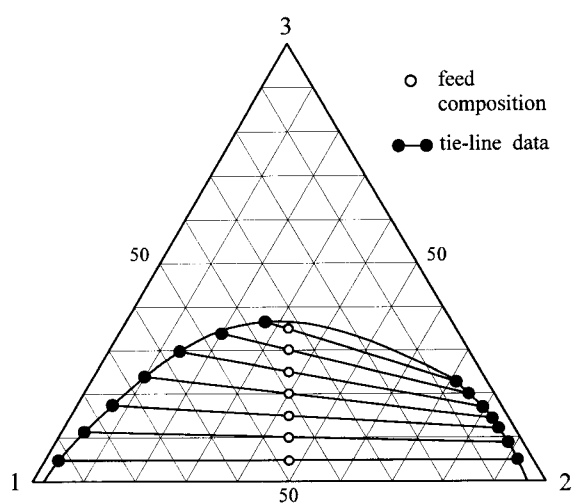


Fig. 2. Experimental tie-line data for BAc(1)-water(2)-2-propanol(3) system at 25°C(wt%).

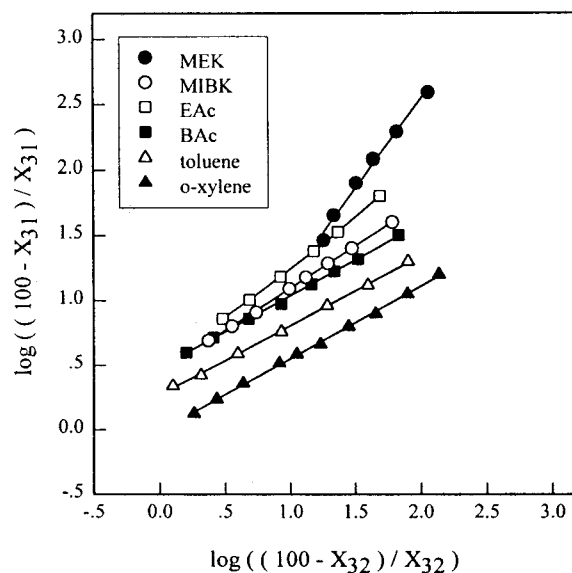


Fig. 3. Major-Swenson correlation for solvent(1)-water(2)-2-propanol(3) system at 25°C.

Table 3. Experimental Tie Line Data for Solvent(1)-Water(2)-2-Propanol(3) Systems at 25°C (mole%)

solvent	solvent layer			water layer			solvent	solvent layer			water layer		
	X <sub>11</sub>	X <sub>21</sub>	X <sub>31</sub>	X <sub>12</sub>	X <sub>22</sub>	X <sub>32</sub>		X <sub>11</sub>	X <sub>21</sub>	X <sub>31</sub>	X <sub>12</sub>	X <sub>22</sub>	X <sub>33</sub>
MEK	69.22	30.78	0.00	7.31	92.69	0.00	MIBK	86.31	11.28	2.41	0.62	98.87	0.51
	60.15	39.13	0.73	8.24	91.66	0.10		75.47	14.71	9.87	0.57	97.44	2.00
	56.65	41.94	1.42	8.36	91.45	0.19		61.30	21.90	16.80	0.58	96.16	3.27
	53.36	44.58	2.06	8.49	91.22	0.29		52.70	27.02	20.28	0.62	95.33	4.06
	50.28	47.06	2.66	8.61	91.00	0.39		40.90	34.30	24.80	0.64	94.43	4.93
	47.86	49.17	2.96	9.06	90.32	0.62		30.66	42.30	27.04	0.78	93.27	5.95
	43.27	53.33	3.40	10.00	88.90	1.09		21.50	52.15	26.35	1.09	91.61	7.30
	41.16	55.22	3.62	10.50	88.16	1.34		14.58	60.86	24.56	1.37	90.01	8.62
EAc	81.13	16.35	2.52	1.88	97.66	0.45	BAc	85.96	11.54	2.50	0.09	99.34	0.57
	75.35	19.67	4.98	1.93	97.12	0.95		77.96	11.48	10.56	0.10	97.70	2.20
	70.28	22.48	7.23	2.05	96.61	1.34		64.40	16.68	18.92	0.12	96.49	3.39
	60.32	28.17	11.51	2.24	95.67	2.09		50.41	24.21	25.38	0.16	95.53	4.31
	50.39	34.73	14.87	2.39	94.80	2.81		39.00	31.21	29.79	0.18	94.60	5.22
	41.21	41.91	16.88	2.61	93.83	3.56		29.63	38.62	31.75	0.24	93.47	6.29
	32.00	49.99	18.01	2.82	92.90	4.28		24.29	43.79	31.91	0.31	92.40	7.29
	24.70	57.60	17.70	3.15	91.71	5.14		16.66	53.11	30.23	0.45	91.10	8.45
toluene	99.85	0.15	0.00	0.01	99.99	0.00	o-xylene	98.53	0.20	1.26	0.01	98.84	1.15
	96.17	1.70	2.13	0.14	97.28	2.57		95.66	0.61	3.73	0.03	96.31	3.67
	91.35	1.92	6.73	0.23	94.32	5.45		89.06	1.71	9.23	0.05	93.84	6.11
	78.97	4.11	16.92	0.47	91.28	8.25		79.47	3.40	17.13	0.07	91.51	8.42
	56.85	12.87	30.28	0.70	88.36	10.94		69.66	6.38	23.96	0.11	89.25	10.65
	39.02	23.03	37.96	0.99	84.79	14.22		60.02	10.35	29.63	0.16	87.10	12.75
	24.80	35.40	39.80	1.64	79.70	18.66		50.38	15.27	34.35	0.34	84.58	15.08
								41.15	20.74	38.11	0.68	81.61	17.72

Table 4. Correlation of Equilibrium Data for the Solvent-Water-2-Propanol System at 25°C

equation	Solvent		Solvent					toluene	o-xylene
			MEK	MIBK	EAc	BAc			
Hand[6]	M=		0.7070	1.4892	1.3042	1.6132	1.7794	1.6031	
$\log(X_{31}/X_{11})$	N=		-0.1603	0.6862	0.6181	0.7509	0.3497	-0.0890	
$=M\log(X_{32}/X_{22})+N$	r=		0.9926	0.9930	0.9972	0.9902	0.9984	0.9877	
Othmer-Tobias[14]	M=		2.0526	1.9034	2.3423	1.5905	1.8094	1.6173	
$\log[(100-X_{11})/X_{11}]$	N=		0.2143	0.9753	1.0525	0.8154	0.3592	-0.0632	
$=M\log[(100-X_{22})/X_{22}]+N$	r=		0.9921	0.9983	0.9990	0.9801	0.9938	0.9877	
Major-Swenson[16]	M=		0.6781	1.3456	1.2055	1.5023	1.7436	1.5972	
$\log[(100-X_{31})/X_{31}]$	N=		0.2073	-0.5101	-0.5025	-0.6095	-0.3217	0.0938	
$=M\log[(100-X_{32})/X_{32}]+N$	r=		0.9891	0.9957	0.9983	0.9920	0.9929	0.9875	

## 3.2. 파라미터 추산과 액-액 평형 조성 계산

25°C에서 3성분계의 액-액평형을 계산하기 위하여 Table 3에 나타낸 tie line 데이터로 부터 NRTL 및 UNIQUAC 모델식의 파라미터를 계산하였다. 모델식을 통하여 실험 데이터를 나타내기 위한 근본적인 목적은 체계적인 내삽과 외삽 등의 방법으로 다성분계에 대한 신뢰성 있는 표현식을 구하기 위함이며, 본 실험에서는 위 두가지 모델식의 계산 과정에서  $k$ 상에서  $j$ 성분의 실험치 tie line의 조성을  $X_{jk}^{exp}(i)$ 라 하고 실제 파라미터를 통한 계산치 tie line의 조성을  $X_{jk}^{cal}(i)$ 라 할 때 다음 목적함수를 최소화 시켰다.

$$F = \sum_i^n \sum_j^3 \sum_k^2 [X_{jk}^{exp}(i) - X_{jk}^{cal}(i)]^2 \quad (1)$$

본 연구에서는 추산하려고 하는 모델내의 파라미터는 Varhegyi와 Eon[30]이 제시한 방법에 의하여 NRTL식에서는  $g_{11}$ , UNIQUAC식에서는  $U_{11}$ 을 고정시키고, 3성분의 액-액 평형계에서 NRTL식은 다음 8개의 파라미터  $g_{22}$ ,  $g_{33}$ ,  $g_{12}$ ,  $g_{13}$ ,  $g_{23}$ ,  $\alpha_{12}$ ,  $\alpha_{13}$ ,  $\alpha_{23}$ 을 초기 파라미터로 정하고, UNIQUAC식은 다음 5개의 파라미터  $U_{22}$ ,  $U_{33}$ ,  $U_{12}$ ,  $U_{13}$ ,  $U_{23}$ 을 초기 파라미터로 설정하여 Hooke-Jeeves[17]의 direct search method로 일정한 증분만큼씩 초기 파라미터에 더하거나 감하여 목적함수  $F$ 를 최소로 할 때의 증분을 취함으로써 tie line이 파라미터 추산과정 중의 각 단계에서 계산되었다. 또한 각 모델에 있는 파라미터가 물리적으로 의미있는 용해도 곡선을 나타내도록 하기 위하여 부분 혼합영역에 들어오는 초기치 파라미터를 정하였고 excess Gibbs energy를 최소로 하는 실제 파라미터의 하한치와 상한치를 정해주었다. 각 모델식에 대한 파라미터 계산결과를 Table 5에 나타내었으며, 파라미터  $g_{ij}$ 와  $U_{ij}$ 는 모두 cal/g-mol 단위로 계산되었다. 또한 실험치와 각 모델에 의하

여 구해진 tie line 계산치에 대한 Root-Mean-Square-Deviation을 식(2)로 부터 계산하여 각 삼성분계를 비교하였다.

$$RMSD = 100 \left[ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^2 (X_{jk}^{exp}(i) - X_{jk}^{cal}(i))^2 / 6N \right]^{1/2} \quad (2)$$

Fig. 4에 대표적으로 UNIQUAC 모델식에 의한 EAc(1)-water(2)-2-propanol(3) 삼성분계의 실험치와 계산치 비교선도를 나타내었다.

위 결과에 의하면 본 실험에서 측정된 3성분 액-액평형계 중에서 EAc(1)-water(2)-MBK(3) 계에 대한 예측이 가장 잘 이루어졌으며, 각 모델식에 대해서는 NRTL 식의 경우 평균적으로 0.9233 mole %, UNIQUAC 식의 경우 1.1978 mole %의 편차를 나타내어 NRTL 모델식에 의해 보다 나은 결과를 얻을 수 있었다.

## 3.3. Plait point 조성의 결정

용해도 곡선상의 plait point는 tie line이 한 점으로 나타나는 위치이며 실험을 통해 구하기 어려우므로 Hand가 제시한 식 (3)과 (4)를 이용하여 구하였으며 대표적으로 MEK(1)-water(2)-2-propanol(3) 계에 대하여 Fig. 5에 나타내었다. 각 삼성분계에 대한 plait point 조성은 Table 5에 나열하였다.

$$\frac{X_{32}}{X_{22}} = \frac{X_{31}}{X_{21}} = \frac{X_3}{X_2} \quad (3)$$

$$\frac{X_{31}}{X_{11}} = \frac{X_{32}}{X_{12}} = \frac{X_3}{X_1} \quad (4)$$

Table 5. Model Parameters for the Solvent-Water-2-Propanol System at 25°C

(a) NRTL model

Solvent	$g_{11}$	$g_{22}$	$g_{33}$	$g_{12}$	$g_{13}$	$g_{21}$	$\alpha_{23}$	$\alpha_{13}$	$\alpha_{23}$	RMSD
MEK	1000.00	730.27	3000.01	2623.82	50.27	248.29	0.400	0.037	0.144	0.7595
MIBK	1000.00	2147.18	2952.91	3813.74	1471.68	2432.24	0.346	0.974	0.015	0.9641
EAc	1000.00	2211.32	3228.06	4020.29	1488.56	2535.57	0.327	0.772	0.010	1.1705
BAc	1000.00	1896.40	3543.65	3173.47	1353.06	2375.95	0.384	0.674	0.044	0.3441
toluene	1000.00	2011.15	3104.75	4504.27	1677.73	2113.51	0.283	0.999	0.001	1.0068
o-xylene	1000.00	2170.12	2945.86	4698.35	1699.34	2327.06	0.298	0.358	0.169	1.2947

(b) UNIQUAC model

Solvent	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$	RMSD
MEK	1000.00	2882.11	9020.32	2855.63	476.59	221.44	1.9235
MIBK	1000.00	2667.56	4674.09	3872.55	622.19	1807.49	0.6807
EAc	1000.00	2125.82	3813.80	3131.38	763.91	819.19	0.7252
BAc	1000.00	2470.67	4356.71	3447.76	820.01	1576.66	0.9323
toluene	1000.00	2001.72	4063.74	4883.77	855.76	1094.06	1.1406
o-xylene	1000.00	1948.33	3872.67	4162.74	1262.83	1482.65	1.7846

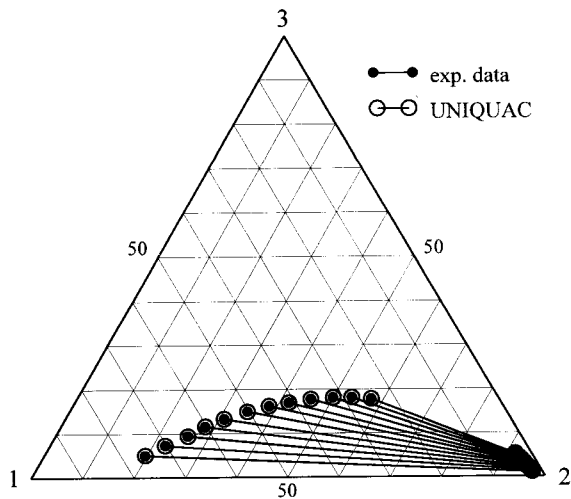


Fig. 4. Comparison of experimental and calculated tie lines for EAc(1)-water(2)-2-propanol(3) system at 25°C (mole %).

Table 5. Estimated Plait Point Data for Solvent(1)-Water (2)-2-Propanol(3) System at 25°C (mol %)

Solvent	Hand correlation		
	X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>
MEK	15.94	81.05	3.01
MIBK	3.80	83.00	13.20
EAc	6.01	85.44	8.55
BAC	4.80	76.07	19.23
toluene	9.42	60.09	30.49
o-xylene	7.58	58.34	34.08

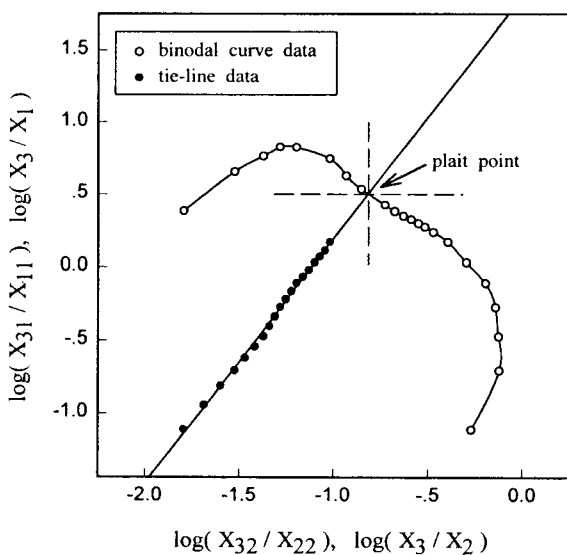


Fig. 5. Determination of plait point for MIBK(1)-water (2)-2-propanol system at 25°C(mole %).

3.4. 용매의 선택

액-액추출 공정에서 가장 중요한 것은 용매의 선택으로서, 회수성, 화학적 안전성, 비점 및 응고점, 부식성과 밀도차 등을 고려한 후 용질에 대한 분배계수와 선택도가 큰 물질을 선택해야 한다. 이러한 성질 중 가장 중요한 것은 분배계수(D)와 선택도(S)로서 식(5)과 (6)에 각각 나타내었다.

$$D = \frac{\text{2-propanol wt \% in solvent layer}}{\text{2-propanol wt \% in water layer}} = \frac{X_{31}}{X_{32}} \quad (5)$$

$$S = \frac{\text{2-propanol wt \% in solvent-free solvent layer}}{\text{2-propanol wt \% in solvent-free water layer}} = \frac{X_{31}/(X_{31}+X_{21})}{X_{32}/(X_{32}+X_{22})} \quad (6)$$

본 실험에 사용한 6가지 용매 중에서는 Fig. 6과 7에서 보는 바와 같이 o-xylene의 분배계수와 선택도가 가장 크며 toluene > BAc > MIBK > EAc > MEK 순으로 나타났으며, 관능기 종류에 의한 용매의 추출성능은 방향족 > 에스테르 > 케톤류의 순서에 따라 용매로서 효과가 우수함을 알 수 있었다.

4. 결 론

25°C에서 수용액 중의 2-propanol을 분리하기 위한 solvent (1)-water(2)-2-propanol(3) 액-액추출계를 설정하여 용해도곡선 실험 데이터와 tie line의 평형 조성 데이터, plait point 조성을 구하여 각 삼성분계에 대한 분배계수 및 선택도를 측정하였다. 용매는 관능기별로 구분하여 대표적인 methyl ethyl ketone(MEK), methyl isobutyl ketone (MIBK), ethylacetate (EAc), butylacetate(BAC), toluene 및 o-xylene을 사용하였으며 본 실험에 사용된 6가지 용매 중 o-xylene의 추출성능이 가장 우수하며 toluene > BAc > MIBK > Eac > MEK 순서로

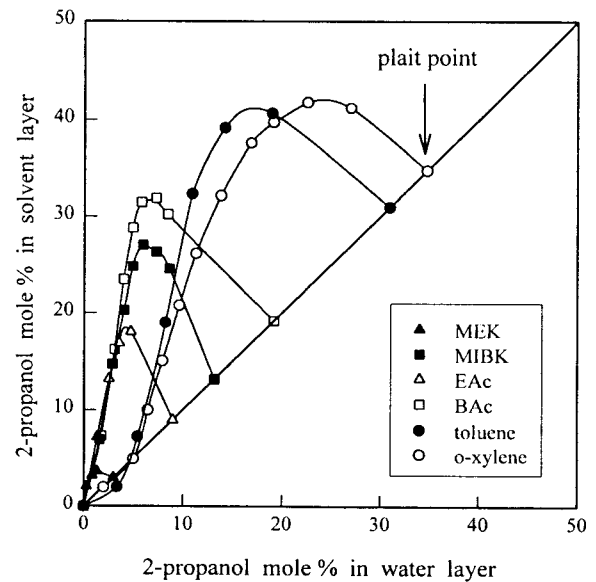


Fig. 6. Distribution of 2-propanol between water layer and solvent layer at 25°C.

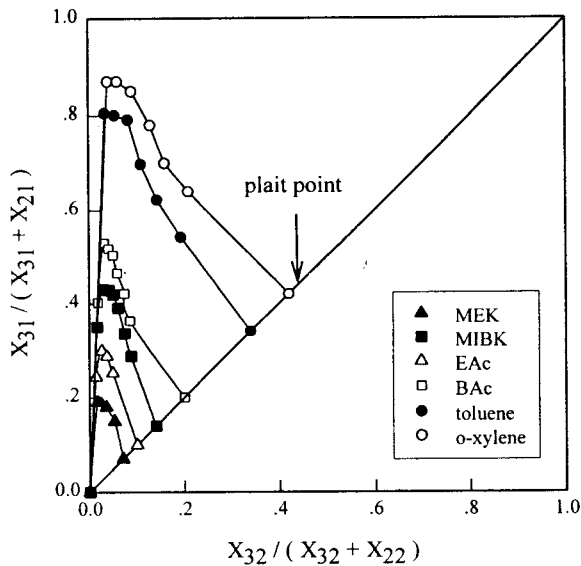


Fig. 7. Selectivity curves for water(1)-2-propanol(2)-solvent (3)-solvent(4) at 25°C.

양호한 결과를 얻을 수 있었다. 실험 데이터는 Hand 등의 방법에 의해 간접적으로 건전함을 확인하였으며 그 결과를 Table 4에 나타내었다. 또한 NRTL 및 UNIQUAC 모델식의 파라미터를 tie line 실험결과로부터 결정하여 Table 5에 나타내었으며 이로부터 tie line 계산치를 구하였다. Table 5의 RMSD값은 실험치와 계산치의 편차를 나타내는 것으로 평균 1.72 mole % 범위내에서 평형조성의 추산이 가능하였다.

## 참고 문헌

- Marcilla, A., Olaya, M. M. and Ruiz, F. : *Fluid Phase Equilibria*, **105**, 71(1995).
- Asensi, J. C., Gomis, V. and Ruiz, F. : *Fluid Phase Equilibria*, **106**, 203(1995).
- Hamad, E. Z. and Salam, A. B. : *Fluid Phase Equilibria*, **108**, 231(1995).
- Alnaafa, M. A., Bakr, A. and Salam, S. H. : *Ind. Eng. Chem. Res.*, **33**, 689(1994).
- Nagata, I. and Tamura, K. : *J. Chem. Eng. Data*, **41**, 873(1996).
- Brown, T.F. : *Ind. Eng. Chem.*, **40**, 103(1948).
- Hand, D. B. : *J. Phys. Chem.*, **34**, 1961(1930).
- Othmer, D.F. and Tobias, P. E. : *Ind. Eng. Chem.*, **34**, 693(1942).
- Ishida, K. : *Bull. Chem. Soc. Japan*, **33**, 693(1960).
- Major, C. J. and Swenson, Q. J. : *Ind. Eng. Chem.*, **38**, 834(1946).
- Renon, H. and Prausnitz, J. M. : *AIChE J.*, **14**, 135(1968).
- Abrams, D.S. and Prausnitz, J.M. : *AIChE J.*, **21**, 116(1975).
- John, A. R. and Wilam, B. B. : *"Organic Solvents"*, John Wiley & Sons, New York(1970).
- Haddad, P. O. and Edmister, W. C. : *J. Chem. Eng. Data*, **17**, 275(1972).
- Lee, J. W. and Park, D. W. : *J. Korean Ind. & Eng. Chem.*, **5**, 1016(1994).
- Othmer, D. F., White, R. E. and Trueger, E. : *Ind. Eng. Chem.*, **33**, 1240(1941).
- Hooke, R. and Jeeves, T. A. : *Assoc. Comp. Mach.*, **8**, 212(1961).