

純水と電解質水溶液の熱力学的性質を計算するプログラム (その2) —塩化ナトリウム水溶液に関する計算プログラム—

Computer Programs for the Calculation of Thermodynamic Properties of Water and Aqueous Electrolyte Solutions. Part 2. A Computer Program Relevant to Aqueous Solution of Sodium Chloride

澁江 靖 弘*
SHIBUE Yasuhiro

Pitzer et al. (1984) が与えた塩化ナトリウム水溶液の熱力学的性質に関する計算式に基づいて澁江 (2007a, 2007b) は BASIC/98 で記述した計算プログラムを作成した。これらの報告中で記した 25 °C で 1.01325 bar で標準状態における塩化ナトリウムの部分モルエンタルピーの値が 0 にならなかった問題点を解消する計算プログラムを新たに作成した。

キーワード : Pitzer–Peiper–Busey 式, 塩化ナトリウム水溶液, 熱力学的性質

Key words : Pitzer–Peiper–Busey formulation, aqueous solution of sodium chloride, thermodynamic properties

1 はじめに

Pitzer 達は塩化ナトリウム水溶液の熱力学的性質を Pitzer 式によって表した (Pitzer et al., 1984)。Pitzer 達が求めた式 (以下, PPB 式) の適用可能温度は 0 °C から 300 °C, 圧力は 1000 bar まで, 質量モル濃度は 6 mol kg^{-1} までである。PPB 式では Haar 達が求めた純水の状態方程式 (Haar et al., 1980, 1982) が使用されている。澁江 (2007a, 2007b) は後年の Haar 達の式 (Haar et al., 1984) と組み合わせて PPB 式に基づく計算プログラムを作成した (以下, 1984 年の Haar 達の式を HGK 式と略す)。この時に澁江 (2005a, 2005b) が示した HGK 式を用いる計算プログラムを組み込んだ。

PPB 式で用いられている気体定数や水のモル質量の値は Haar 達が用いた値 (Haar et al., 1980, 1982, 1984) とは異なっている。これらの値を用いると PPB 式で計算できる純水の性質の値が HGK 式から求められる値と食い違う。純水のエンタルピーの値を塩化ナトリウムの標準状態における部分モルエンタルピーの値を計算する時に使用するの、25 °C で 1.01325 bar での塩化ナトリウムの標準状態における部分モルエンタルピーの値が Pitzer et al. (1984) の定義値である 0 にならなかった (澁江, 2007b)。その後, 澁江 (2012) は気体定数と水のモル質量の値を PPB 式で用いられている値にすれば, この問題は解消できることを記した。そして, 気体定数の値が違っている限り純水の性質を正確には計算できないと記した。そこで, 澁江 (2019) が示した HGK 式に基づく純水の性質を求める計算プログラムを用いて PPB 式のための計算プログラムを新たに作成し,

澁江 (2007b) が記した問題点を本報告で解消する。

澁江 (2007a) は過剰ギブスエネルギー, 塩化ナトリウムの見かけのモル体積, 標準状態における塩化ナトリウムの部分モルギブスエネルギーと部分モル体積の計算式を示し, 澁江 (2007b) は標準状態における塩化ナトリウムの部分モルエンタルピーと部分モルエントロピーの計算式を示した。しかしながら, これらの報告中では過剰エントロピーと標準状態における塩化ナトリウムの部分モル定圧熱容量に関する計算式が示されていない。これらの計算式を澁江 (2007a, 2007b) への補足として本報告で示す。そして, 澁江 (2007b) 中になかった定圧熱容量の計算と飽和水蒸気圧条件での計算を新たに作成した計算プログラムに含める。

2 熱力学的性質の計算式

2.1 過剰エントロピーと標準状態における塩化ナトリウムの部分モル定圧熱容量

過剰エントロピーは過剰ギブスエネルギーと見かけの相対モルエンタルピーの値を用いて, 表 1 中の式 (1) で求めることができる。そして, 標準状態における塩化ナトリウムの部分モル定圧熱容量は, 表 1 中の式 (2) を用いて求めることができる。計算には定圧熱容量に関するデバイーヒュッケルのパラメータ A_j の値が必要である。 A_j は表 1 中の式 (3) で定義されている A_ϕ を用いて表 1 中の式 (4) で計算することができる。 A_ϕ や A_j の計算に用いる純水の比誘電率式として Pitzer et al. (1984) と同じく Bradley and Pitzer (1979) が与えた式を用いる。

*兵庫教育大学大学院・教育実践高度化専攻・理数系教科マネジメントコース 教授

令和元年10月21日受理

2.2 水の浸透係数, イオンの平均活量係数, 見かけの相対モルエンタルピー, 見かけの定圧モル熱容量, 見かけのモル体積

水の浸透係数, イオンの平均活量係数, 見かけの相対モルエンタルピー, 見かけの定圧モル熱容量, 見かけのモル体積の計算式を表2中の式(5), 式(6), 式(7), 式(8), 式(9)として示す。式(8)の右辺から標準状態における塩化ナトリウムの部分モル定圧熱容量の値を引いた値は電解質1モル当たりの過剰定圧熱容量(過剰定圧モル熱容量)の値と等しい。なお, 表2で示した計算式は陽イオンと陰イオンのどちらかあるいは両方が1価である電解質が溶解している水溶液に適用できる一般式である (Pitzer, 1995)。

式(5)や式(6)中の $\beta^{(0)}$, $\beta^{(1)}$, C の計算式を塩化ナトリウム水溶液に関して澁江(2007a)が式(12), 式(13), 式(14)として示している。式(7)中の $\beta^{(0)L}$, $\beta^{(1)L}$, C^L は次の関係式を用いて求めることができる (Pitzer, 1995)。

$$\beta^{(0)L} = (\partial \beta^{(0)} / \partial T)_p$$

$$\beta^{(1)L} = (\partial \beta^{(1)} / \partial T)_p$$

$$C^L = (\partial C / \partial T)_p$$

そして, 式(8)中の $\beta^{(0)J}$, $\beta^{(1)J}$, C^J の計算式は $\beta^{(0)}$, $\beta^{(1)}$, C の計算式の温度に関する2階の偏導関数を用いて次の関係式から求めることができる (Pitzer, 1995)。

$$\beta^{(0)J} = (\partial^2 \beta^{(0)} / \partial T^2)_p + (2/T) (\partial \beta^{(0)} / \partial T)_p$$

$$\beta^{(1)J} = (\partial^2 \beta^{(1)} / \partial T^2)_p + (2/T) (\partial \beta^{(1)} / \partial T)_p$$

$$C^J = (\partial^2 C / \partial T^2)_p + (2/T) (\partial C / \partial T)_p$$

塩化ナトリウム水溶液に関して式(9)中の $\beta^{(0)V}$ の計算式を澁江(2007a)が式(22)として示し, $\beta^{(1)V}$ の値は常に0であり, C^V の計算式を澁江(2007a)が式(23)として示している。また, 式(9)の右辺の第一項は標準状態における塩化ナトリウムの部分モル体積を表し, その計算式を澁江(2007a)が式(24)として示している。

3 計算プログラム

3.1 改良点

澁江(2007a, 2007b)が示した計算プログラムへの主

表1 過剰エントロピー S^E と標準状態における塩化ナトリウムの部分モル定圧熱容量 \bar{C}_p° の計算式, デバイーヒュッケルのパラメータ A_ϕ および A_J の計算式*

$$S^E = \frac{m^\phi L - G^E}{T} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \bar{C}_p^\circ = & -10C_{p,w}^\circ - A_J \frac{\ln(1+1.2I_r^{1/2})}{1.2} + 2m_r RT^2 \left\{ \beta^{(0)J} + \frac{1}{2I_r} \left[1 - (1+2I_r^{1/2}) \exp(-2I_r^{1/2}) \right] \beta^{(1)J} \right\} + 2m_r^2 RT^2 C^J \\ & - z_9 R - 2(z_{10} + z_{11}p + z_{12}p^2)RT - 6(z_{13} + z_{14}p)RT^2 - \frac{2z_{15}RT}{(T-227)^3} - \frac{12z_{16}RT}{(680-T)^5} \quad (2) \end{aligned}$$

$$A_\phi = \frac{1}{3} \left(\frac{2\pi N_A d_w}{1000} \right)^{1/2} \left(\frac{e^2}{\epsilon k T} \right)^{3/2} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} A_J = & A_\phi RT^2 \left[\frac{2}{d_w} \left(\frac{\partial^2 d_w}{\partial T^2} \right)_p - \frac{1}{d_w^2} \left(\frac{\partial d_w}{\partial T} \right)_p^2 - \frac{2}{d_w T} \left(\frac{\partial d_w}{\partial T} \right)_p - \frac{6}{\epsilon} \left(\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial T^2} \right)_p \right] \\ & + A_\phi RT^2 \left[\frac{15}{\epsilon^2} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial T} \right)_p^2 + \frac{6}{\epsilon T} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial T} \right)_p - \frac{6}{\epsilon d_w} \left(\frac{\partial d_w}{\partial T} \right)_p \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial T} \right)_p + \frac{3}{T^2} \right] \quad (4) \end{aligned}$$

*式(1)中の m は質量モル濃度, ϕL は見かけの相対モルエンタルピー, G^E は過剰ギブスエネルギー, T は絶対温度を表す。式(2)中の $C_{p,w}^\circ$ は純水の定圧モル熱容量, A_J は定圧熱容量に関するデバイーヒュッケルのパラメータ, I_r と m_r は基準とするイオン強度と基準とする質量モル濃度で, いずれも5.550825である。 R は気体定数, $\beta^{(0)J}$, $\beta^{(1)J}$, C^J はPitzerパラメータ, z_9 から z_{16} はPPB式の係数, p は圧力(単はbar)を表す。式(3)中の π は円周率(3.14159265), N_A はアボガドロ定数, d_w は純水の密度(単位は g cm^{-3}), e は素電荷(単位はesu), ϵ は純水の比誘電率, k はボルツマン定数を表す。 N_A と e と k の値はPPB式が公表された時に広く使用されていたCohen and Taylor(1973)が与えた物理定数の値を本計算プログラムでは使用する。なお, 単位をesuにとった時の素電荷の値を求める時にCohen and Taylor(1973)が与えた光速の値を用いて換算している。

な改良点は次の通りである。まず、HGK 式中の係数の一部を 0 とおいた。次に、気体定数と水のモル質量の値を改めた。そして、PPB 式の係数を Pitzer (1987) が示した値に改めた。あわせて、飽和水蒸気圧条件下での計算を行うことができるようにした。以下に概要を示す。

PPB 式で使用している Haar 達の式 (Haar et al., 1980, 1982) には Haar et al. (1984) で使用されている臨界点付近での補正項が含まれていない。この補正項は澁江 (2019) 中の計算プログラムでは HGKG (37) から HGKG (40) に相当するので、これらの変数値を 0 に改めた。Haar et al. (1980, 1982) と Haar et al. (1984) の間でのその他の相違点は、Haar et al. (1984) は係数の有効桁数を増やしていることと Haar et al. (1980) 中の係数値の誤植を正している点である。本報告では Haar et al. (1984) 中の係数値をそのまま使用した。

気体定数と水のモル質量の値を PPB 式で用いられている値に改めて 1 g 当たりの気体定数の値を Haar et al. (1984) が用いた 0.461522 ではなく 0.461518 にした。この結果、純水の性質を求めようとすると HGK 式から求めることができる値とわずかに食い違ってくる。そこ

で、質量モル濃度が 0 を超えていない時には質量モル濃度を再入力するように改めた。

Pitzer (1987) は Pitzer et al. (1984) を解説する中で全温度範囲用係数の一部を有効桁数を増やして示している。そこで、本プログラムでは Pitzer (1987) が示した係数値を使用した。

飽和水蒸気圧条件での計算を行う場合には予め純水の飽和蒸気圧を求めておく必要がある（水溶液については「飽和水蒸気圧」、純水については「飽和蒸気圧」と以下では記す）。入力温度での純水の飽和蒸気圧の計算プログラム（澁江, 2019）を用いて、温度と飽和蒸気圧と質量モル濃度の値から浸透係数を計算し、浸透係数の値から水溶液の飽和水蒸気圧を計算するサブルーチン（澁江, 2010）をプログラムに組み込んだ。PPB 式は 300 °C までで適用できる式であるが、646.3 K まで外挿計算できるようにした。以上の改良点に加えて以下の点を修正した。

まず、澁江 (2007a, 2007b) 中の計算プログラムで他の電解質水溶液でも使用できる箇所をいくつかのサブルーチンとしてまとめた。

表 2 陽イオンと陰イオンのどちらかあるいは両方が 1 価である電解質が溶解している水溶液に関する水の浸透係数 ϕ 、イオンの平均活量係数 γ_{\pm} の自然対数、見かけの相対モルエンタルピー ${}^{\phi}L$ 、見かけの定圧モル熱容量 ${}^{\phi}C_p$ 、見かけのモル体積 ${}^{\phi}V$ の計算式*

$$\phi = 1 - |z_c z_a| A_{\phi} \frac{I^{1/2}}{1 + 1.2I^{1/2}} + \left(\frac{2\nu_c \nu_a}{\nu} \right) m \left[\beta^{(0)} + \beta^{(1)} \exp(-2I^{1/2}) \right] + \frac{4(\nu_c \nu_a)^{3/2} |z_c z_a|^{1/2}}{\nu} m^2 C \quad (5)$$

$$\ln \gamma_{\pm} = -|z_c z_a| A_{\phi} \left[\frac{I^{1/2}}{1 + 1.2I^{1/2}} + \frac{2 \ln(1 + 1.2I^{1/2})}{1.2} \right] + \left(\frac{2\nu_c \nu_a}{\nu} \right) m \left\{ 2\beta^{(0)} + \frac{1}{2I} \left[1 - (1 + 2I^{1/2} - 2I) \exp(-2I^{1/2}) \right] \beta^{(1)} \right\} + \frac{6(\nu_c \nu_a)^{3/2} |z_c z_a|^{1/2}}{\nu} m^2 C \quad (6)$$

$${}^{\phi}L = \frac{\nu |z_c z_a|}{2} A_H \frac{\ln(1 + 1.2I^{1/2})}{1.2} - 2\nu_c \nu_a m RT^2 \left\{ \beta^{(0)L} + \frac{1}{2I} \left[1 - (1 + 2I^{1/2}) \exp(-2I^{1/2}) \right] \beta^{(1)L} \right\} - 2\nu_c^2 \nu_a z_c m^2 RT^2 C^L \quad (7)$$

$${}^{\phi}C_p = \bar{C}_p^{\circ} + \frac{\nu |z_c z_a|}{2} A_J \frac{\ln(1 + 1.2I^{1/2})}{1.2} - 2\nu_c \nu_a m RT^2 \left\{ \beta^{(0)J} + \frac{1}{2I} \left[1 - (1 + 2I^{1/2}) \exp(-2I^{1/2}) \right] \beta^{(1)J} \right\} - 2\nu_c^2 \nu_a z_c m^2 RT^2 C^J \quad (8)$$

$${}^{\phi}V = \bar{V}^{\circ} + \frac{\nu |z_c z_a|}{2} A_V \frac{\ln(1 + 1.2I^{1/2})}{1.2} + 2\nu_c \nu_a m RT \left\{ \beta^{(0)V} + \frac{1}{2I} \left[1 - (1 + 2I^{1/2}) \exp(-2I^{1/2}) \right] \beta^{(1)V} \right\} + 2\nu_c^2 \nu_a z_c m^2 RT C^V \quad (9)$$

* z_c は陽イオンの電荷数、 z_a は陰イオンの電荷数、 ν_c は 1 モルの電解質が完全電離した時に生じる陽イオンの物質量 (モル)、 ν_a は 1 モルの電解質が完全電離した時に生じる陰イオンの物質量 (モル)、 ν は ν_c と ν_a の和を表す。その他の記号は Pitzer 式 (Pitzer, 1995) で通常用いられている意味を表す。

澁江 (2019) の HGK 式を用いる計算プログラムでは、入力単位を指定して出力単位を入力単位に合わせるようにしていた。本計算プログラムでは、入力単位の指定を温度と圧力だけにして、出力単位として密度が g cm^{-3} 、見かけの相対モルエンタルピーが J mol^{-1} 、過剰モルエントロピー（電解質 1 モル当たりの過剰エントロピー）が $\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$ 、見かけの定圧モル熱容量が $\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$ となるようにした。また、標準状態における部分モル体積については $\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$ 、その他の標準状態における部分モル量については気体定数あるいは気体定数と絶対温度の積で割って無次元化した値で出力するようにした。

水の密度の温度に関する偏導関数の値を求めるために澁江 (2008, 2014) が示したサブルーチン *SECDERIV を微修正し、名前を *DERIV に改めた。その他にも澁江 (2007a, 2007b) 中の計算プログラム中で不要な変数や不要な演算が認められたので、これらを修正した。

3.2 プログラムリスト

作成した計算プログラムを表 3 として示す。表 3 中の行番号の増分は 50 である。HGK 式を用いる計算で澁江 (2019) 中で示したサブルーチンと同じものを使用している。これらのサブルーチンについては最初の行番号のみを示している。澁江 (2019) で示したサブルーチンの内容を写し、GOTO 文を含む場合には指定する行番号を改めることでプログラム全体を作成することができる。

本報告で使用した言語 BASIC/98 で作成した計算プログラムを動かしたり修正を加えたりした後に List コマンドで表示させると一部の数値型定数に付けていた倍精度型の型宣言記号 # が消えることがある。表 3 中でもそのような箇所が含まれているが、# を付け加えていない。実際の計算では # が付いていない数値も倍精度型数値として取り扱われている。

表 4 から表 7 はサブルーチンでの計算内容などを示す。表 4 はサブルーチン *PTM, *UNIT_INPUT,

表 3 PPB 式による塩化ナトリウム水溶液の性質に関する計算プログラムのリスト*

```

10000 REM PPB
10050 DEFDBL A-H,M-Z
10100 DIM HGKG(40),II(40),JJ(40),BP(7),BQ(7),AST(5)
10150 DIM ATZ(4),ADZ(4),AAT(4),AAD(4)
10200 DIM BR(6),A(8),HGKC(18)
10250 DIM QR(11),QT(10),QZR(9),QZT(9)
10300 DIM FFD(2),FFP(2),NNT$(2),NND$(2),NNP$(2)
10350 DIM DU(9),ZPIT(53),ZPITZ(106)
10400 GOSUB *BLOCKDATA
10450 GOSUB *BRADLEY_PITZER
10500 GOSUB *PARAMETERS_NACL
10550 GOSUB *STOICHIOMETRY
10600 GOSUB *UNIT_INPUT
10650 GOSUB *PTM
10700 GOSUB *PPB
10750 GOSUB *SOLUTION_PROPERTIES
10800 INPUT "Will you continue the calculation? Input Y(or y) or N(or n)";CAL$
10850 IF CAL$="Y" OR CAL$="y" THEN LPRINT:LPRINT:PRINT:GOTO 10650
10900 END
10950 *PTM
11000 SAT$=" "
11050 PRINT "When you calculate at a vapor-saturated pressure, input 0 for the pressure."
11100 INPUT "Pressure";X
11150 INPUT "Temperature";TT
11200 GOSUB *TTTT
11250 RT=GASCON*T
11300 GOSUB *BBT
11350 INPUT "Molality";MOL
11400 IF MOL=<=0 THEN GOTO 11350
11450 IF X>0 THEN GOTO 11650
11500 IF T>646.3# THEN PRINT "T > 646.3 K":GOTO 11000
11550 GOSUB *VLE_WATER
11600 GOTO 12750
11650 PRES=X
11700 PINPUT=PRES/FP
11750 DGSS=PINPUT/(T* 4#)
11800 DLL=0#:DVV=0#:DLIQ=0#:DVAP=0#
11850 GOSUB *PCORR
11900 IF ABS((PINPUT-PPP)/PPP)=<=5D-005 THEN PPP=PINPUT:GOTO 12250
11950 IF PINPUT>PPP THEN DGSS=DL:GOTO 12100
12000 IF PINPUT<PPP THEN PRINT "Input pressure<vap-sat. pressure of pure water."
12050 PRINT "Input 0 for the pressure.":GOTO 11050
12100 D=DGSS:PPP=PINPUT

```

純水と電解質水溶液の熱力学的性質を計算するプログラム (その2)

```

12150 GOSUB *DH
12200 GOTO 12800
12250 IF T>646.3# THEN PRINT "T> 646.3 K":GOTO 11000
12300 D=DL
12350 GOSUB *DH
12400 GLIQ=G
12450 VAPPRES=PPP
12500 PRES=PPP*FP
12550 VWATERLIQ=MW/DOUT
12600 D=DV
12650 GOSUB *DFIND
12700 DWATERVAP=DOUT
12750 SAT$="Y"
12800 RETURN
12850 *DFIND
14250 *IDEALT
15100 *BBT
16200 *BASEDT
17000 *QQTD
20250 *THERMDT
21000 *PCORR
21450 *PST
22100 *CORR
23550 *UNIT_INPUT
23600 PRINT"*****"
23650 PRINT"* Enter units      *"
23700 PRINT"*****"
23750 PRINT A1$
23800 PRINT"Choose from 1=kelvin, 2=deg C"
23850 INPUT IT
23900 IF IT<1 OR IT>2 THEN GOTO 23800
23950 NT$=NNT$(IT)
24000 PRINT A3$
24050 PRINT"Choose from 1=MPa, 2=bar"
24100 INPUT IP
24150 IF IP>2 OR IP<1 THEN GOTO 24050
24200 NP$=NNP$(IP)
24250 FP=FFP(IP)
24300 RETURN
24350 *TTTT
24650 *BLOCKDATA
27800 *BRADLEY_PITZER
27850 FOR I=1 TO 9: READ DU(I):NEXT I
27900 DATA 3.4279D+002,-5.0866D-003,9.4690D-007,-2.0525#,3.1159D+003
27950 DATA -1.8289D+002,-8.0325D+003,4.2142D+006,2.1417#
28000 EPSREF=1000:WKG=1000
28050 RETURN
28100 *VLE_WATER
28150 DLL=0#:DVV=0#:DLIQ=0#:DVAP=0#
28200 GOSUB *PCORR
28250 D=DL
28300 GOSUB *DH
28350 GLIQ=G
28400 VAPPRES=PPP
28450 PRES=PPP*FP
28500 VWATERLIQ=MW/DOUT
28550 D=DV
28600 GOSUB *DFIND
28650 DWATERVAP=DOUT
28700 RETURN
28750 *PVLE
28800 COEF=(WKG/MW)/(NU*MOL*RGAST)
28850 X=VAPPRES
28900 XINPUT=X
28950 XUPPER=X
29000 X=X-.1#*XINPUT
29050 XLOWER=X
29100 PPP=X
29150 DGSS=DWATERVAP
29200 D=DGSS
29250 GOSUB *DFIND
29300 D=DOUT
29350 GOSUB *THERMDT
29400 G=GD*RT
29450 OBJF=OSC+COEF*(0.1#*VWATERLIQ*(XINPUT-X)+MW*(G-GLIQ))

```

```

29500 IF ABS(OBJF)<.0001# THEN GOTO 30350
29550 IF OBJF<0 THEN GOTO 29650
29600 IF OBJF>0 THEN GOTO 28950
29650 X=(XUPPER+XLOWER)/2#
29700 PPP=X
29750 DGSS=DWATERVAP
29800 D=DGSS
29850 GOSUB *DFIND
29900 D=DOUT
29950 GOSUB *THERMDT
30000 G=GD*RT
30050 OBJF=OSC+COEF*(0.1#*VWATERLIQ*(XINPUT-X)+MW*(G-GLIQ))
30100 IF ABS(OBJF)<.0001# THEN GOTO 30350
30150 IF ABS(XUPPER-XLOWER)<1D-010 THEN PRINT "Error":STOP
30200 IF OBJF<0 THEN XLOWER=X
30250 IF OBJF>0 THEN XUPPER=X
30300 GOTO 29650
30350 PVAPSAT=PPP*FP
30400 RETURN
30450 *DH
30500 GOSUB *DFIND
30550 D=DOUT
30600 D1=DOUT
30650 GOSUB *THERMDT
30700 H=HD*RT
30750 S=SD*GASCON
30800 G=GD*RT
30850 GOSUB *DERIV
30900 GOSUB *DEBYEHUCKEL
30950 RETURN
31000 *DERIV
31050 D2PRDDDT=0:D2PRDT2=0:D2PRDD2=0
31100 D2PBDD2X=3#+ALPHAHGK+(3#+4#*ALPHAHGK+3#*BETAHGK)*Y+(ALPHAHGK+3#*BETAHGK)*Y*Y
31150 D2PBDD2X=D2PBDD2X*B1/(2#*XX*XX*XX*XX*XX)+2#*B1*(B2/B1-GAMMAHGK)
31200 D2PBDD2=D2PBDD2X*RT
31250 D2PBDDDT=Z0+8#*Y*(B2/B1-GAMMAHGK)
31300 D2PBDDDT=D2PBDDDT+(Y+B1T*D*T/2#)*((ALPHAHGK+2#*BETAHGK*Y)/(XX*XX*XX)+3#*Z0/XX)
31350 ZX=6#+3#*ALPHAHGK+BETAHGK+3#*ALPHAHGK*Y+4#*BETAHGK*Y+BETAHGK*Y*Y
31400 D2PBDDDT=D2PBDDDT+B1T*D*T*Y*ZX/(2#*XX*XX*XX*XX*XX)
31450 D2PBDDDT=D2PBDDDT+2#*B2T*D*T-2#*B1T*D*T*GAMMAHGK
31500 D2PBDDDT=D2PBDDDT*GASCON
31550 D2PBDDT2X=(ALPHAHGK+2#*BETAHGK*Y)/(XX*XX*XX)+3#*Z0/XX
31600 D2PBDDT2X=D2PBDDT2X*(2#*B1T*D+B1TT*D*T)/4#
31650 D2PBDDT2X=D2PBDDT2X+B1T*B1T*D*D*T*ZX/(8#*XX*XX*XX*XX*XX)+2#*B2T*D
31700 D2PBDDT2X=D2PBDDT2X-2#*B1T*D*GAMMAHGK+B2TT*D*T-B1TT*D*T*GAMMAHGK
31750 D2PBDDT2=D2PBDDT2X*GASCON*D
31800 FOR I=1 TO 36
31850 K=II(I)+1
31900 L=JJ(I)
31950 QK=CDBL(K):QL=CDBL(L)
32000 D2PRDD2X=2#/(D*D)-4#/(D+4#*(QK-1#)*E/(D*Q20)+1#-3#*(QK-1#)*E/Q20
32050 D2PRDD2X=D2PRDD2X+(QK-1#)*(QK-2#)*E*E/(Q20*Q20)
32100 D2PRDD2=D2PRDD2+D2PRDD2X*HGKG(I)*QT(L+1)*QR(K+1)
32150 D2PRDDDT=D2PRDDDT-(QL-1#)*HGKG(I)*QT(L+1)*QR(K+1)*(2#/(D-1#+(QK-1#)*E/Q20)/T
32200 D2PRDT2=D2PRDT2+(QL-1#)*QL*HGKG(I)*QR(K+1)*QT(L+1)/(T*T)
32250 NEXT I
32300 FOR J=37 TO 40
32350 K=II(J)
32400 KM=JJ(J)
32450 QK=CDBL(K):QKM=CDBL(KM)
32500 DDZ=ADZ(J-36)
32550 DEL=D/DDZ-1#
32600 IF ABS(DEL)<1D-010 THEN DEL=1D-010
32650 EX1=(-1#)*AAD(J-36)*(DEL^QK)
32700 DEX=EXP(EX1)*(DEL^QKM)
32750 ATT=AAT(J-36)
32800 TX=ATZ(J-36)
32850 TAU=T/TX-1#
32900 EX2=(-1#)*ATT*TAU*TAU
32950 TEX=EXP(EX2)
33000 Q30=DEX*TEX
33050 QM=QKM/DEL-QK*AAD(J-36)*(DEL^(QK-1#))
33100 D2PRDD2A=QM*(2#/(D*D)+4#*QKM/(D*DDZ*DEL)+4#*QK*EX1/(D*DDZ*DEL))
33150 D2PRDD2B=QM*(QKM*(QKM-1#)+2#*QK*QKM*EX1+QK*(QK-1#)*EX1+QK*QK*EX1*EX1)

```

```

33200 D2PRDD2A=D2PRDD2A/DDZ+D2PRDD2B/(DDZ*DDZ*DDZ*DEL*DEL)
33250 D2PRDD2C=(QKM-QK*(QK-1#)*EX1)*(4#/D+2*QKM/(DDZ*DEL)+2#*QK*EX1/(DDZ*DEL))
33300 D2PRDD2C=D2PRDD2C/(DDZ*DDZ*DEL*DEL)
33350 D2PRDD2A=D2PRDD2A-D2PRDD2C
33400 D2PRDD2A=D2PRDD2A+(2#*QKM+QK*(QK-1#)*(QK-2#)*EX1)/(DDZ*DDZ*DDZ*DEL*DEL*DEL)
33450 D2PRDD2=D2PRDD2+HGKG(J)*Q30*D2PRDD2A*D*D
33500 D2PRDDDDTC=2#*QM+D*QKM*QM/(DDZ*DEL)+D*QK*EX1*QM/(DDZ*DEL)
33550 D2PRDDDDTC=D2PRDDDDTC+D*(QK*(QK-1#)*EX1/(DEL*DEL)-QKM/(DEL*DEL))/DDZ
33600 D2PRDDDDT=D2PRDDDDT-2#*D*HGKG(J)*ATT*TAU*Q30*D2PRDDDDTC/(TX*DDZ)
33650 D2PRDDT2=D2PRDDT2-2#*D*HGKG(J)*ATT*(1#+2#*EX2)*Q30*QM/(DDZ*TX*TX)
33700 NEXT J
33750 D2PDD2=D2PBDD2+D2PRDD2
33800 D2PDDDT=D2PBDDDT+D2PRDDDT
33850 D2PDT2=D2PBDDT2+D2PRDDT2
33900 D2DDT2A=DPDD*DPDD*D2PDT2-2#*DPDT*DPDD*D2PDDDT+DPDT*DPDT*D2PDD2
33950 D2DDT2=(-1#)*D2DDT2A/(DPDD*DPDD*DPDD)
34000 DDDT=(-1#)*DPDT/DPDD
34050 RETURN
34100 *DEBYEHUCKEL
34150 RGAST=RGAS*T:RGAST2=RGAST*T
34200 T2=T*T:T3=T2*T
34250 PBAR=PPP*FFP(2)
34300 DPBARDD=DPDD*FFP(2)
34350 DPBARDT=DPDT*FFP(2)
34400 EPS1=DU(1)*EXP(DU(2)*T+DU(3)*T2)
34450 EPS2=1#+(PBAR-EPSPREF)/(DU(7)+DU(8)/T+DU(9)*T+EPSPREF)
34500 EPS2=LOG(EPS2)
34550 EPS=EPS1+(DU(4)+(DU(5)/(DU(6)+T)))*EPS2
34600 APhi=SQR(2#*3.14159265#*AVOG*D/WKG)/3#
34650 APhi=APhi*EE*EE*EE/(BC*SQR(BC)*T*SQR(T)*EPS*SQR(EPS))
34700 DE=DU(7)+DU(8)/T+DU(9)*T
34750 DEP=DE+PBAR
34800 DEPREF=DE+EPSPREF
34850 DEPT=DU(4)+DU(5)/(DU(6)+T)
34900 DEPSD=DEPT/DEP
34950 AV=2#*RVGAS*T*APhi*(3#*DEPSD/EP-1#/(D*DPBARDD))
35000 ALPH=DPBARDT/(D*DPBARDD)
35050 DEPT1=(-1#)*DU(5)/((DU(6)+T)*(DU(6)+T))
35100 DEPT2=2#*DU(5)/((DU(6)+T)*(DU(6)+T)*(DU(6)+T))
35150 D2EPSDT=DU(1)*(DU(2)+2#*DU(3)*T)*EXP(DU(2)*T+DU(3)*T2)
35200 DEPSDT=DEPSDT+DEPT1*LOG(1#+(PBAR-EPSPREF)/DEPREF)
35250 DEPSDT=DEPSDT+DEPT*(EPSPREF-PBAR)*(DU(9)-DU(8)/T2)/(DEP*DEPREF)
35300 AH=1#+T*(DEPSDT/EP)+T*ALPH/3#
35350 AH=AH*(-6#)*APhi*RGAST
35400 EPSX1=(DU(9)-DU(8)/T2)*(DU(9)-DU(8)/T2)
35450 EPSX2=1#/(DEP*DEP)-1#/(DEPREF*DEPREF)
35500 D2EPSDT2=DU(1)*(DU(2)+2#*DU(3)*T)*(DU(2)+2#*DU(3)*T)*EXP(DU(2)*T+DU(3)*T2)
35550 D2EPSDT2=D2EPSDT2+2#*DU(1)*DU(3)*EXP(DU(2)*T+DU(3)*T2)
35600 D2EPSDT2=D2EPSDT2+DEPT2*LOG(1#+(PBAR-EPSPREF)/DEPREF)
35650 D2EPSDT2=D2EPSDT2+2#*DEPT1*(DU(9)-DU(8)/T2)*(1#/DEP-1#/DEPREF)
35700 D2EPSDT2=D2EPSDT2+DEPT*(2#*DU(8)/T3)*(1#/DEP-1#/DEPREF)
35750 D2EPSDT2=D2EPSDT2-DEPT*EPSX1*EPSX2
35800 AJ=2#*(D2DDT2/D)-(DDDT/D)*(DDDT/D)-2#*(DDDT/(D*T))-6#*D2EPSDT2/EP
35850 AJ=AJ+15#*(DEPSDT/EP)*(DEPSDT/EP)+6#*(DEPSDT/(EP*T))
35900 AJ=AJ-6#*(DDDT/D)*(DEPSDT/EP)+3#/T2
35950 AJ=AJ*APhi*RGAST2
36000 RETURN
36050 *STOICHIOMETRY
36100 F1=NU*ZC*ZA/2#:F2=2#*NUC*NUA:F3=F2*NUC*ZC:F4=ZC*ZA:F5=F2/NU
36150 F6=2#*F2*SQR(NUC*NUA)*SQR(F4)/NU:F7=F6*(6#/4#)
36200 FF=(NUC*ZC*ZC+NUA*ZA*ZA)/2#
36250 RETURN
36300 *PITZER
36350 HFUNC1=LOG(1#+1.2#*SQR(MI))/1.2#
36400 HFUNC2=SQR(MI)/(1#+1.2#*SQR(MI))
36450 PHIV=V2+F1*AV*HFUNC1+F2*MOL*RVGAS*T*BV+F3*MOL*MOL*RVGAS*T*CV
36500 OSC=1#-F4*HFUNC2*APhi+F5*MOL*BPhi+F6*MOL*MOL*CG
36550 GM=(-1#)*F4*(HFUNC2+2#*HFUNC1)*APhi+F5*MOL*BGAMMA+F7*MOL*MOL*CG
36600 GM=EXP(GM)
36650 PHIL=F1*HFUNC1*AH-F2*MOL*RGAST2*BL-F3*MOL*MOL*RGAST2*CL
36700 PHICP=CP2+F1*HFUNC1*AJ-F2*MOL*RGAST2*BJ-F3*MOL*MOL*RGAST2*CI
36750 CPX=F1*HFUNC1*AJ-F2*MOL*RGAST2*BJ-F3*MOL*MOL*RGAST2*CI
36800 GEX=(-4#)*MI*HFUNC1*APhi+F2*MOL*MOL*BG+F3*MOL*MOL*MOL*CG
36850 GEX=GEX*RGAST

```

```

36900 SX=(PHIL-GEX/MOL)/T
36950 RETURN
37000 *SPECIFIC
37050 VSOLN=(WKG/D1)+MOL*PHIV
37100 WSOLN=WKG+MOL*MS
37150 DSOLN=WSOLN/VSOLN
37200 STOTAL=(WKG/MW)*S1+MOL*(S2+SX)
37250 STOTAL=STOTAL+MOL*RGAS*(NU*(1#-LOG(MOL))-NUC*LOG(NUC)-NUA*LOG(NUA))
37300 SSPEC=STOTAL/WSOLN
37350 HSPEC=((WKG/MW)*H1+MOL*(H2+PHIL))/WSOLN
37400 CPSPEC=((WKG/MW)*CP1+MOL*(CP2+CPX))/WSOLN
37450 RETURN
37500 *SOLUTION_PROPERTIES
37550 IF SAT$="Y" THEN GOSUB *PVLE:GOTO 37700
37600 LPRINT USING "T(&    &)=+###.####           P(& &)= +#.#####^~^~^";NT$,TT,NP$,PRES
37650 LPRINT:GOTO 37850
37700 LPRINT USING "T(&    &)=+###.####   Vapor-saturated condition";NT$,TT
37750 LPRINT USING "      P(vap-sat) of pure water  P(& &)= +#.#####^~^~^";NP$,PRES
37800 LPRINT USING "      P(vap-sat) of solution    P(& &)= +#.#####^~^~^";NP$,PVAPSAT:LPRINT
37850 LPRINT USING "APHI=    +#.#####";APHI
37900 LPRINT USING "AH/RT= +###.###";AH/RGAST
37950 LPRINT USING "AJ/R= +###.###";AJ/RGAS
38000 LPRINT USING "AV=    +#.#####";AV
38050 LPRINT USING "&    &";RMS
38100 LPRINT "Standard State"
38150 LPRINT USING "Water    &    &";SPECIES$
38200 LPRINT USING "V=    +###.### (cm3/mol)  V=    +###.### (cm3/mol)";MW/D1,V2
38250 LPRINT
38300 LPRINT USING "G/RT= +###.####           G/RT=    +###.###";G1/RGAST,G2/RGAST
38350 LPRINT
38400 LPRINT USING "H/RT= +###.####           H/RT=    +###.###";H1/RGAST,H2/RGAST
38450 LPRINT
38500 LPRINT USING "S/R=    +###.####           S/R=    +###.###";S1/RGAS,S2/RGAS
38550 LPRINT
38600 LPRINT USING "Cp/R= +###.###           Cp/R=    +###.###";CP1/RGAS,CP2/RGAS
38650 LPRINT
38700 LPRINT USING "m=#.#####   Density(g/cm3)=    +#.#####";MOL,DSOLN
38750 LPRINT USING "      Osmotic coeff=    +.#####";OSC
38800 LPRINT USING "      Activity coeff=    +.#####";GM
38850 LPRINT USING "      phiL(J/mol)=    +.#####^~^~^";PHIL
38900 LPRINT USING "      Ex entr(J/(mol K))= +.#####^~^~^";SX
38950 LPRINT USING "      phiCp(J/(mol K))= +.#####^~^~^";(CP2+CPX)
39000 LPRINT USING "      Hspecific(J/g)=    +.#####^~^~^";HSPEC
39050 LPRINT USING "      Sspecific(J/(g K))= +.#####";SSPEC
39100 LPRINT USING "      Cpspecific(J/(g K))=+.#.#####";CPSPEC
39150 LPRINT
39200 RETURN
39250 *PARAMETERS_NACL
39300 EE=4.803242D-010:BC=1.380662D-016:AVOG=6.022045D+023
39350 FOR I=1 TO 106:READ ZPITZ(I):NEXT I
39400 REM Overall fit (Pitzer, 1987)
39450 DATA -71637.203#,-2.2209012#,-7.7991396D-005,-4.8099272D-009,624.68125#
39500 DATA 6.0159787D-004,3.4069074D-007,2.1962044D-011,-110.74702#,0.039494473#
39550 DATA -6.5313475D-007,-6.4781894D-010,-1.5842012D-005,3.2452006D-009,516.99706#
39600 DATA -5.9960301D+006,-656.81518#,24.86912950#,5.381275267D-005,-5.588746990D-008
39650 DATA 6.589326333D-012,-4.4640952#,0.01110991383#,-2.657339906D-007,1.746006963D-010
39700 DATA 1.046261900D-014,-5.307012889D-006,8.634023325D-010,-4.178596200D-013,-1.579365943#
39750 DATA 2.202282079D-003,-1.310550324D-007,-6.381368333D-011,9.706578079#,-2.686039622D-002
39800 DATA 1.534474401D-005,-3.215398267D-009,119.31966#,-0.48309327#,1.4068095D-003
39850 DATA -4.2345814#,-6.1084589#,0.40217793#,2.2902837D-005,-0.075354649#
39900 DATA 1.531767295D-004,-9.0550901D-008,-1.538600820D-008,8.6926600D-011,0.353104136#
39950 DATA -4.3314252D-004,-0.09187145529#,5.1904777D-004
40000 REM Low-temperature fit
40050 DATA -71659.531#,-2.3483335#,-8.3668484D-005,2.4018168D-009,624.88208#
40100 DATA -5.3697119D-004,3.5126966D-007,0#,-110.74702#,0.038900801#
40150 DATA 2.6973456D-006,-6.2746876D-010,-1.5267612D-005,0#,516.99706#
40200 DATA -5.9960301D+006,-656.81518#,24.879183#,-2.1552731D-005,5.0166855D-008
40250 DATA 0#,-4.4640952#,0.0111087099#,-6.4479761D-008,-2.3234032D-010
40300 DATA 0#,-5.2194871D-006,2.4445210D-010,2.8527066D-013,-1.5696231#
40350 DATA 2.2337864D-003,-6.3933891D-007,4.5270573D-011,5.4151933#,0#
40400 DATA 0#,0#,119.31966#,-0.48309327#,1.4068095D-003
40450 DATA -4.2345814#,-6.1084589#,0.40743803#,-6.8152430D-006,-0.075354649#
40500 DATA 1.2609014D-004,6.2480692D-008,1.8994373D-008,-1.0731284D-010,0.32136572#
40550 DATA -2.5382945D-004,0#,0#

```


純水と電解質水溶液の熱力学的性質を計算するプログラム (その2)

```

40600 MS=58.4428#:MREF=5.550825D+000:YPPB=10#
40650 TLC=227#:THC=680#
40700 SPECIES$="NaCl(aq)"
40750 RVGAS=83.144#:RGAS=8.3144#:MW=18.01534#
40800 NU=2#:NUC=1#:NUA=1#:ZC=1#:ZA=1#
40850 FOR I=37 TO 40:HGKG(I)=0:NEXT I
40900 GASCON=.461518#
40950 RETURN
41000 *PPB
41050 MIREF=FF*MREF
41100 S1=S*MW:H1=H*MW:G1=G*MW
41150 S1=S1+SREF*RGAS:H1=H1+UREF*RGAS:G1=G1+UREF*RGAS-SREF*RGAS
41200 CP1=CPD*RGAS
41250 TL=T-TLC
41300 TH=THC-T
41350 P2=PBAR*PBAR:P3=P2*PBAR
41400 TL2=TL*TL:TH2=TH*TH:TL3=TL2*TL:TH3=TH2*TH:TH4=TH3*TH
41450 HF1REF=LOG(1#+1.2##*SQR(MIREF))/1.2#
41500 IF T<<338.15# THEN PAS$="L" ELSE PAS$="O"
41550 IF PAS$="L" THEN GOTO 41650
41600 FOR I=1 TO 53:ZPIT(I)=ZPITZ(I):NEXT I:RMS$="Parameters from overall fits":GOTO 41700
41650 FOR I=1 TO 53:ZPIT(I)=ZPITZ(I+53):NEXT I:RMS$="Parameters from low-temperature fits"
41700 BETA0V=ZPIT(19)+ZPIT(20)*2##*PBAR+ZPIT(21)*3##*P2
41750 BETA0V=BETA0V+(ZPIT(24)+ZPIT(25)*2##*PBAR+ZPIT(26)*3##*P2)*T
41800 BETA0V=BETA0V+(ZPIT(28)+ZPIT(29)*2##*PBAR)*T2
41850 BETA0V=BETA0V+(ZPIT(31)+ZPIT(32)*2##*PBAR+ZPIT(33)*3##*P2)/TL
41900 BETA0V=BETA0V+(ZPIT(35)+ZPIT(36)*2##*PBAR+ZPIT(37)*3##*P2)/TH
41950 BETA1V=0#
42000 CV=ZPIT(44)
42050 CV=CV+ZPIT(47)*T+ZPIT(49)*T2
42100 CV=CV+ZPIT(51)/TL+ZPIT(53)/TH
42150 CV=CV/2#
42200 V2=RVGAS*(ZPIT(2)+2##*ZPIT(3)*PBAR+3##*ZPIT(4)*P2)
42250 V2=V2+RVGAS*T*(ZPIT(6)+2##*ZPIT(7)*PBAR+3##*ZPIT(8)*P2)
42300 V2=V2+RVGAS*T2*(ZPIT(11)+2##*ZPIT(12)*PBAR)+RVGAS*T2*T*ZPIT(14)
42350 V2=V2-YPPB*MW/D1-F1*AV*HF1REF-F2*RVGAS*T*MREF*BETA0V-F3*RVGAS*T*MREF*MREF*CV
42400 BETA0=ZPIT(17)/T+ZPIT(18)+ZPIT(19)*PBAR+ZPIT(20)*P2+ZPIT(21)*P3+ZPIT(22)*LOG(T)
42450 BETA0=BETA0+(ZPIT(23)+ZPIT(24)*PBAR+ZPIT(25)*P2+ZPIT(26)*P3)*T
42500 BETA0=BETA0+(ZPIT(27)+ZPIT(28)*PBAR+ZPIT(29)*P2)*T2
42550 BETA0=BETA0+(ZPIT(30)+ZPIT(31)*PBAR+ZPIT(32)*P2+ZPIT(33)*P3)/TL
42600 BETA0=BETA0+(ZPIT(34)+ZPIT(35)*PBAR+ZPIT(36)*P2+ZPIT(37)*P3)/TH
42650 BETA1=ZPIT(38)/T+ZPIT(39)+ZPIT(40)*T+ZPIT(41)/TL
42700 CG=ZPIT(42)/T+ZPIT(43)+ZPIT(44)*PBAR+ZPIT(45)*LOG(T)
42750 CG=CG+(ZPIT(46)+ZPIT(47)*PBAR)*T+(ZPIT(48)+ZPIT(49)*PBAR)*T2
42800 CG=CG+(ZPIT(50)+ZPIT(51)*PBAR)/TL+(ZPIT(52)+ZPIT(53)*PBAR)/TH
42850 CG=CG/2#
42900 HF3REF=EXP((-2##)*SQR(MIREF))
42950 HF5REF=(1#-(1#+2##*SQR(MIREF))*HF3REF)/(2##*MIREF)
43000 GEXREF=(-4##*MIREF*APHI*HF1REF+F2*MREF*MREF*(BETA0+BETA1*HF5REF)
43050 GEXREF=GEXREF+F3*MREF*MREF*MREF*CG
43100 G2=(-1##)*YPPB*G1/RGAST-(GEXREF/MREF)+(ZPIT(1)+ZPIT(2)*PBAR+ZPIT(3)*P2+ZPIT(4)*P3)/T
43150 G2=G2+ZPIT(5)+ZPIT(6)*PBAR+ZPIT(7)*P2
43200 G2=G2+ZPIT(8)*P3+ZPIT(9)*LOG(T)
43250 G2=G2+(ZPIT(10)+ZPIT(11)*PBAR+ZPIT(12)*P2)*T+(ZPIT(13)+ZPIT(14)*PBAR)*T2
43300 G2=G2+ZPIT(15)/(T*TL)+ZPIT(16)/(T*TH3)
43350 G2=G2*RGAST
43400 BETA0L=(-1##)*ZPIT(17)/T2+ZPIT(22)/T
43450 BETA0L=BETA0L+(ZPIT(23)+ZPIT(24)*PBAR+ZPIT(25)*P2+ZPIT(26)*P3)
43500 BETA0L=BETA0L+(ZPIT(27)+ZPIT(28)*PBAR+ZPIT(29)*P2)*2##*T
43550 BETA0L=BETA0L-(ZPIT(30)+ZPIT(31)*PBAR+ZPIT(32)*P2+ZPIT(33)*P3)/TL2
43600 BETA0L=BETA0L+(ZPIT(34)+ZPIT(35)*PBAR+ZPIT(36)*P2+ZPIT(37)*P3)/TH2
43650 BETA1L=(-1##)*ZPIT(38)/T2+ZPIT(40)-ZPIT(41)/TL2
43700 CL=(-1##)*ZPIT(42)/T2+ZPIT(45)/T
43750 CL=CL+(ZPIT(46)+ZPIT(47)*PBAR)+(ZPIT(48)+ZPIT(49)*PBAR)*2##*T
43800 CL=CL-(ZPIT(50)+ZPIT(51)*PBAR)/TL2+(ZPIT(52)+ZPIT(53)*PBAR)/TH2
43850 CL=CL/2#
43900 BLREF=BETA0L+BETA1L*HF5REF
43950 PHILREF=F1*AH*HF1REF-MREF*RGAST2*(F2*BLREF+F3*MREF*CL)
44000 H2=(-1##)*YPPB*H1/RGAST-PHILREF/RGAST
44050 H2=H2+(ZPIT(1)+ZPIT(2)*PBAR+ZPIT(3)*P2+ZPIT(4)*P3)/T-ZPIT(9)
44100 H2=H2-(ZPIT(10)+ZPIT(11)*PBAR+ZPIT(12)*P2)*T
44150 H2=H2-2##*(ZPIT(13)+ZPIT(14)*PBAR)*T2
44200 H2=H2+ZPIT(15)*(2##*T-TLC)/(T*TL2)
44250 H2=H2+ZPIT(16)*(THC-4##*T)/(T*TH4)
44300 H2=H2*RGAST

```

```

44350 S2=(H2-G2)/T
44400 BETA0J=ZPIT(22)/T2+2#*(ZPIT(23)+ZPIT(24)*PBAR+ZPIT(25)*P2+ZPIT(26)*P3)/T
44450 BETA0J=BETA0J+6#*(ZPIT(27)+ZPIT(28)*PBAR+ZPIT(29)*P2)
44500 BETA0J=BETA0J+2#*TLC*(ZPIT(30)+ZPIT(31)*PBAR+ZPIT(32)*P2+ZPIT(33)*P3)/(TL3*T)
44550 BETA0J=BETA0J+2#*THC*(ZPIT(34)+ZPIT(35)*PBAR+ZPIT(36)*P2+ZPIT(37)*P3)/(T*TH3)
44600 BETA1J=2#*ZPIT(40)/T+2#*TLC*ZPIT(41)/(T*TL3)
44650 CJ=ZPIT(45)/(2#*T2)+(ZPIT(46)+ZPIT(47)*PBAR)/T+3#*(ZPIT(48)+ZPIT(49)*PBAR)
44700 CJ=CJ+TLC*(ZPIT(50)+ZPIT(51)*PBAR)/(T*TL3)
44750 CJ=CJ+THC*(ZPIT(52)+ZPIT(53)*PBAR)/(T*TH3)
44800 BJREF=BETA0J+BETA1J*HF5REF
44850 DPHILREFDT=F1*HF1REF*AJ-F2*MREF*RGAST2*BJREF-F3*MREF*MREF*RGAST2*CJ
44900 CP2=(-1#)*YPPB*CP1-DPHILREFDT-RGAS*ZPIT(9)
44950 CP2=CP2-2#*RGAST*(ZPIT(10)+ZPIT(11)*PBAR+ZPIT(12)*P2)
45000 CP2=CP2-6#*RGAST2*(ZPIT(13)+ZPIT(14)*PBAR)-2#*RGAST*ZPIT(15)/TL3
45050 CP2=CP2-12#*RGAST*ZPIT(16)/(TH4*TH)
45100 GOSUB *PITZER_VIRIAL
45150 GOSUB *PITZER_
45200 GOSUB *SPECIFIC
45250 RETURN
45300 *PITZER_VIRIAL
45350 MI=FF*MOL
45400 HFUNC3=EXP((-2#)*SQR(MI))
45450 HFUNC4=(1#-(1#+2#*SQR(MI)-2#*MI)*HFUNC3)/(2#*MI)
45500 HFUNC5=(1#-(1#+2#*SQR(MI))*HFUNC3)/(2#*MI)
45550 BV=BETA0V+BETA1V*HFUNC5
45600 BPHI=BETA0+BETA1*HFUNC3
45650 BGAMMA=2#*BETA0+BETA1*HFUNC4
45700 BL=BETA0L+BETA1L*HFUNC5
45750 BJ=BETA0J+BETA1J*HFUNC5
45800 BG=BETA0+BETA1*HFUNC5
45850 RETURN

```

*サブルーチン*DFIND, *IDEALT, *BBT, *BASEDT, *QQTD, *THERMDT, *PCORR, *PST, *CORR, *TTTT, *BLOCKDATA
の内容は澁江(2019)中で示したものと同一である。

*BRADLEY_PITZER, *VLE_WATER, *PVLE での計算内容を示し、表5はサブルーチン *DH, *DERIV, *DEBYEHUCKEL, *STOICHIOMETRY, *PITZER での計算内容を示し、表6はサブルーチン *SPECIFIC, *SOLUTION_PROPERTIES での計算内容を示し、表7はサブルーチン *PARAMETERS_NACL, *PPB, *PITZER_VIRIAL での計算内容を示す。

3.3 プログラムでの入力と出力

計算プログラムを起動してからの入力例を表8に示す。表8は150℃で飽和水蒸気圧条件での4 mol kg⁻¹の計算を例にしている。表8中に入力値への説明を「←」以降の文として示している。

表8中の入力に対して得られる出力結果を表9に示す。表9中でも「←」以降の文が出力結果への説明である。

3.4 25℃で1.01325 barにおける塩化ナトリウムの標準状態での部分モルエンタルピー

温度として25℃、圧力として1.01325 barを入力し、任意の値を質量モル濃度として入力して計算を行うと、塩化ナトリウムの標準状態での部分モルエンタルピーを気体定数と絶対温度の積で割った値が+0.000と出力される。気体定数と絶対温度の積で割る前の部分モルエンタルピーの値は+0.002182 J mol⁻¹であり0に極めて近くなっている。澁江(2007b)が記した問題点が解消できていると言える。計算値が-0.00263 J mol⁻¹であ

ると記した澁江(2012)と比べても、澁江(2019)が行った調節によって定義値である0にさらに近づいている。

4 まとめ

Pitzer et al. (1984) が与えた計算式に基づいて塩化ナトリウム水溶液の熱力学的性質を計算するプログラムを新たに作成した。そして、澁江(2007a, 2007b) が作成した計算プログラム中の問題点を解消した。問題点とは、塩化ナトリウムの標準状態における部分モルエンタルピーの値が25℃で1.01325 barの時にPitzer et al. (1984) の定義値である0にならないことであった(澁江, 2007b)。問題点を解消するためにHaar et al. (1980, 1982) に従って、HGK式中の係数の一部を0とおき、気体定数と水のモル質量の値をPitzer et al. (1984) 中の値に改め、さらにHGK式に関して新たに報告した計算プログラム(澁江, 2019)を用いた。また、澁江(2007a, 2007b)には含めていなかった定圧熱容量に関する計算と飽和水蒸気圧条件での計算をプログラムに追加した。

表 4 サブルーチン*PTM, *UNIT_INPUT, *BRADLEY_PITZER, *VLE_WATER, *PVLE での計算内容

サブルーチン*PTM

圧力と温度と質量モル濃度を入力し、圧力と温度条件からサブルーチン*DH によってデバイーヒュッケルのパラメータを計算する。飽和水蒸気圧条件で計算を行う場合には圧力の値として 0 を入力する。圧力の値として 0 を入力するとサブルーチン*VLE_WATER に入って純水の飽和蒸気圧を計算する。この時に、飽和蒸気圧条件での圧力、液相および気相の密度、液相のギブスエネルギーも計算する。そして文字型変数 SATS に Y を格納する。0 より大きい値を入力したものの入力温度より求めることができる純水の飽和蒸気圧よりも入力圧力が低い場合には再入力を求める文が画面に現れる。また、入力圧力（変数名 PINPUT）が純水の飽和蒸気圧（変数名 PPP）と等しいと見なせる時（PINPUT/PPP - 1 の絶対値が 5×10^{-5} 以下の時）には、飽和水蒸気圧条件での計算であると出力に表示するようにしている。ただし、入力温度が 646.3 K より高い時に飽和水蒸気圧条件での計算を行おうとすると温度を再入力することになっている。

サブルーチン*UNIT_INPUT

温度と圧力の入力単位を指定する。

サブルーチン*BRADLEY_PITZER

Bradley and Pitzer (1979) が与えた純水の比誘電率の計算式で使用する係数を配列変数 DU(I) として読み込み、定数 1000 (1000 bar) を変数 EPSREF の値として読み込む。このサブルーチンで水 1 kg を g を単位にして表した時の値 1000 を変数 WKG の値として読みこむ。

サブルーチン*VLE_WATER

入力温度から純水の飽和蒸気圧、液相および気相の密度、液相のギブスエネルギーを計算する。このサブルーチンは澁江(2019)中で示した気液二相平衡条件下での計算プログラムと同じ内容である。

サブルーチン*PVLE

飽和蒸気圧条件にある純水の圧力と液相と気相の密度および液相のギブスエネルギーを用いて、浸透係数の値より水溶液の飽和水蒸気圧を計算する。サブルーチン内で VWATERLIQ*(XINPUT-X) を 0.1 倍しているが、係数 0.1 は $\text{cm}^3 \text{bar}$ を J に換算するための係数である。このサブルーチンは澁江(2010)が示した計算プログラムに基づいている。

表 5 サブルーチン*DH, *DERIV, *DEBYEHUCKEL, *STOICHIOMETRY, *PITZER での計算内容

サブルーチン*DH

入力した温度・圧力条件での純水の密度と純水 1 g 当たりのギブスエネルギーとエンタルピーとエントロピーの値を求める。そして、密度の温度に関する偏導関数の値をサブルーチン*DERIV に入って求めた上で、デバイヒュッケルのパラメータをサブルーチン*DEBYEHUCKEL に入って求める。

サブルーチン*DERIV

$(\partial d_w / \partial T)_p$ と $(\partial^2 d_w / \partial T^2)_p$ を計算する。これらの偏導関数の値は圧力の温度や密度に関する偏導関数を用いて求めることができる（澁江, 2008, 表 4）。このサブルーチンは澁江(2008)中のサブルーチン*SECDERIVP を澁江(2014)が修正したものに基いている。ただし、澁江(2014)が示したサブルーチン中で不要な演算を削除している。

サブルーチン*DEBYEHUCKEL

デバイーヒュッケルのパラメータを計算する。このサブルーチンでは単位を bar に取った圧力を変数 PBAR として用いている。

サブルーチン*STOICHIOMETRY

表 2 中の式(5)から式(9)で示した v, v_c, v_a, z_c, z_a を含む項の値を計算する。 $v|z_c z_a|/2$ を計算して変数 F1 の値、 $2v_c v_a$ を計算して変数 F2 の値、 $2v_c^2 v_a z_c$ を計算して変数 F3 の値、 $|z_c z_a|$ を計算して変数 F4 の値、 $2v_c v_a / v$ を計算して変数 F5 の値、 $4v_c^{3/2} v_a^{3/2} |z_c z_a|^{1/2} / v$ を計算して変数 F6 の値、 $6v_c^{3/2} v_a^{3/2} |z_c z_a|^{1/2} / v$ を計算して変数 F7 の値とする。そして質量モル濃度からイオン強度を求めるために $(v_c z_c^2 + v_a z_a^2) / 2$ を計算して変数 FF の値とする。

サブルーチン*PITZER

見かけのモル体積を計算した後、 $\beta^{(0)}, \beta^{(1)}, C$ を用いて式(5)と式(6)から浸透係数とイオンの平均活量係数を計算する。次に、式(7)から見かけの相対モルエンタルピー、式(8)から見かけの定圧モル熱容量を計算する。さらに、過剰ギブスエネルギーを計算し、過剰ギブスエネルギーと見かけの相対モルエンタルピーの値を用いて電解質 1 モル当たりの過剰エントロピーを求める。

表 6 サブルーチン*SPECIFIC,
*SOLUTION_PROPERTIES での計算内容

サブルーチン*SPECIFIC

純水の密度と電解質の見かけのモル体積から水溶液 1 cm³ 当たりの質量を求める。次に、純水のエンタルピー、標準状態における電解質のエンタルピー、過剰エンタルピーから水溶液 1 g 当たりのエンタルピーを求める。その後、純水のエンタルピー、標準状態における電解質のエンタルピー、見かけの相対モルエンタルピーから水溶液 1 g 当たりのエンタルピーを求める。最後に、純水の定圧モル熱容量、標準状態における電解質の部分モル定圧熱容量、過剰定圧モル熱容量から水溶液 1 g 当たりの定圧熱容量を求める。

サブルーチン*SOLUTION_PROPERTIES

入力した温度・圧力・質量モル濃度条件と計算結果を印字する。

5 引用文献

Bradley, D. J. and Pitzer, K. S. (1979) Thermodynamics of electrolytes. 12. Dielectric properties of water and Debye-Hückel parameters to 350 °C and 1kbar. *J. Phys. Chem.*, **83**, 1599–1603.

Cohen, E. R. and Taylor, B. N. (1973) The 1973 least-squares adjustment of the fundamental constants. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **2**, 663–734.

Haar, L. Gallagher, J. S., Kell, G. S. (1980) Thermodynamic properties for fluid water. *Proc. 9th Int. Conf. on the Properties of Steam*, 69–82.

Haar, L., Gallagher, J., and Kell, G. S. (1982) The anatomy of the thermodynamic surface of water: the formulation and comparisons with data. *Proc. 8th Symposium on Thermophysical Properties*, vol. 2, 298–302.

Haar, L., Gallagher, J. S., and Kell, G. S. (1984) *NBS/NRC Steam Tables*. Hemisphere Publishing, 320pp.

Pitzer, K. S. (1987) Thermodynamic model for aqueous solutions of liquid-like density. *Rev. Mineral.*, **17**, 97–142.

Pitzer, K. S. (1995) *Thermodynamics*. McGraw-Hill, 626pp.

Pitzer, K. S., Peiper, J. C., and Busey, R. H. (1984) Thermodynamic properties of aqueous sodium chloride solutions. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **13**, 1–102.

澁江靖弘 (2005a) 気液二相平衡条件下での水の熱力学的性質を計算するプログラム – Haar et al. (1984) の式を用いて –. *兵庫教育大学研究紀要*, **26**, 105–117.

訂正箇所が澁江 (2019) 中の引用文献の所で示されている。

澁江靖弘 (2005b) 水の熱力学的性質を計算するプログラム – Haar et al. (1984) の式を用いて –. *兵庫教育*

大学研究紀要, **27**, 143–154.

訂正箇所が澁江 (2019) 中の引用文献の所で示されている。

澁江靖弘 (2007a) 300°C, 1000bar, 6 mol/kg までの塩化ナトリウム水溶液の密度を計算するプログラム – Pitzer–Peiper–Busey 式を用いて –. *兵庫教育大学研究紀要*, **30**, 115–128.

127 ページの本文右段の下から 4 行目中「350 and 1kbar.」となっているが、正しくは「350 °C and 1kbar.」である。

澁江靖弘 (2007b) 300°C, 1000bar, 濃度 6 mol/kg までの塩化ナトリウム水溶液の熱力学的性質を計算するプログラム – Pitzer–Peiper–Busey 式を用いて –. *兵庫教育大学研究紀要*, **31**, 83–92.

訂正箇所を澁江 (2019) 中の引用文献の所で示しているが、より正確に記すと次の通りである。表 2 中の下から 4 行目中の過剰エンタルピーは見かけの相対モルエンタルピーの意味で用いられている。

澁江靖弘 (2008) 325°C, 500bar, 濃度 6 mol/kg までの塩化カリウム水溶液の熱力学的性質を計算するプログラム – Pabalan–Pitzer 式を用いて –. *兵庫教育大学研究紀要*, **32**, 67–79.

表 4 中の A₁ を表す式に誤りが含まれている。本報告中の式 (4) が正しい。計算プログラムを示している 73 ページの上から 3 行目と 4 行目 (line 24750 と line 24800) は不要であり、39 行目 (line 26550) の最後に「/ DDZ」を付け加える必要がある。76 ページの上から 8 行目 (line 39950) 中に現れている変数「TR」は誤りであり、正しくは「TTR」である。78 ページで示した表 5 中の下から 5 行目で「見かけのモルエンタルピー (kJ/mol)」としている箇所は「見かけの相対モルエンタルピー (kJ/mol)」の意味である。

澁江靖弘 (2010) 電解質水溶液の浸透係数と凝固点や飽和水蒸気圧との関係. *兵庫教育大学研究紀要*, **36**, 97–109.

100 ページ中の式 (30) と式 (31) で使用されている P に下付き文字 1 が欠落している。そして式 (30) に関する説明文中で「以下の式でも m₂ 一定の条件を || 外に添字 m を付けて表している」と記されているが、この文中の「||」は誤りで「括弧」が正しい。また、飽和水蒸気圧の計算結果を表にしてまとめている表 5 と表 6 の「*」で始まる脚注は純水の飽和蒸気圧を Haar et al. (1984) を用いて求めたことを記している。

澁江靖弘 (2012) 250°C から 600°C における塩化ナトリウム–水系の気液平衡. *兵庫教育大学研究紀要*, **41**, 57–68.

訂正箇所が澁江 (2019) 中の引用文献の所で示されている。

表7 サブルーチン*PARAMETERS_NACL, *PPB, *PITZER_VIRIALでの計算内容

サブブルーチン*PARAMETERS_NACL

デバイーヒュッケルのパラメータの計算に必要な定数（素電荷，ボルツマン定数，アボガドロ定数）を読み込む。素電荷 e を表す変数 EE の値は 4.803242×10^{-10} ，ボルツマン定数 k を表す変数 BC の値は 1.380662×10^{-16} ，アボガドロ定数 N_A を表す変数 AVOG の値は 6.022045×10^{23} である。次に，PPB 式の係数を読み込む。ZPITZ(1)から ZPITZ(53)は 573.15 K まで適用可能な計算式の係数(Pitzer, 1987)，ZPITZ(54)から ZPITZ(106)は 338.15 K 以下の時に適用することを Pitzer et al. (1984)が推奨した計算式の係数である。次に，塩化ナトリウムのモル質量の値 $58.4428 \text{ g mol}^{-1}$ を変数 MS の値，基準とする質量モル濃度の値 $5.550825 \text{ mol kg}^{-1}$ を変数 MREF の値，この時の水と塩化ナトリウムのモル比(10 : 1)の値 10 を変数 YPPB の値，PPB 式で用いる定数 227 を変数 TLC の値，PPB 式で用いる定数 680 を変数 THC の値，電解質の種類を表す文字型変数 SPECIES\$, PPB 式で用いる気体定数(単位は $\text{cm}^3 \text{ bar mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$)の値 83.144 を変数 RVGAS の値，単位を $\text{J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ にした時の気体定数の値 8.3144 を変数 RGAS の値，水のモル質量の値 $18.01534 \text{ g mol}^{-1}$ を変数 MW の値として読み込む。さらに，1 モルの電解質が完全電離した時に生じるイオンの物質質量(モル)の総和の値 2 を変数 NU の値，陽イオンの物質質量(モル)の値 1 を変数 NUC の値，陰イオンの物質質量(モル)の値 1 を変数 NUA の値として読み込む。そして，陽イオンの電荷数 1 を変数 ZC の値，陰イオンの電荷数の絶対値 1 を変数 ZA の値として読み込む。PPB 式では HGK 式で用いる係数の一部を使用していない。そこで，これらの値である HGKG(37)から HGKG(40)の値を 0 に再設定している。さらに，HGK 式を用いる時に Haar et al. (1984)と異なる気体定数値($0.461518 \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1}$)を用いるので，この値を変数 GASCON の値として読み込む。

サブブルーチン*PPB

HGK 式を用いて求めた純水 1 g 当たりのエントロピー，エンタルピー，ギブスエネルギー，定圧熱容量の値を PPB 式で用いる水のモル質量の値を用いて 1 モル当たりの値に換算する計算を最初に行っている。これらの値を標準状態での塩化ナトリウムの部分モル量の計算に用いる。HGK 式では純水の三重点で液相の内部エネルギーとエントロピーの値が 0 になるように定数 UREF と定数 SREF を用いている。他方，PPB 式では 0 K における理想気体状態のエンタルピーを 0，エントロピーの値も 0 K に近づくと 0 になるように取っている。この基準状態の取り方は，定数 UREF と定数 SREF を使用しないで求めることができるエンタルピーとエントロピーの値を使用することに相当する。このために UREF と SREF を使用する計算を最初に行っている。これらの計算の後，PPB 式で使用する β^{0V} ， β^{1V} ， C^V の値と標準状態における塩化ナトリウムの部分モル体積の値を計算する。次に， $\beta^{(0)}$ ， $\beta^{(1)}$ ， C の値と標準状態における塩化ナトリウムの部分モルギブスエネルギーの値を計算する。この時に澁江(2007a)が式(10)として示した標準状態における塩化ナトリウムの部分モルギブスエネルギーを与える式を用いる。そして， $\beta^{(0L)}$ ， $\beta^{(1L)}$ ， C^L の値を計算する。さらに澁江(2007b)中の式(1)より標準状態における塩化ナトリウムの部分モルエンタルピーを計算する。標準状態における部分モルギブスエネルギーと部分モルエンタルピーから標準状態における塩化ナトリウムの部分モルエントロピーの値を計算する。次に， $\beta^{(0J)}$ ， $\beta^{(1J)}$ ， C^J の値を計算する。そして本報告の式(2)より標準状態における塩化ナトリウムの部分モル定圧熱容量の値を計算する。以上の計算を終えた後，サブブルーチン *PITZER_VIRIAL, *PITZER, *SPECIFIC の順に入って様々な熱力学的性質を計算する。

サブブルーチン*PITZER_VIRIAL

イオン強度を計算するとともにPitzer式で用いる $\beta^{(0V)}$ ， $\beta^{(1V)}$ ， $\beta^{(0)}$ ， $\beta^{(1)}$ ， $\beta^{(0L)}$ ， $\beta^{(1L)}$ ， $\beta^{(0J)}$ ， $\beta^{(1J)}$ を含む項を計算する。

澁江靖弘 (2014) 塩化マグネシウム水溶液と塩化カルシウム水溶液の熱力学的性質. その5 いくつかの実験報告及びこれまでの計算式との比較. 兵庫教育大学研究紀要, **44**, 97-109.

澁江靖弘 (2019) 純水と電解質水溶液の熱力学的性質を計算するプログラム (その1) —純水の性質を計算するプログラム—. 兵庫教育大学研究紀要, **55**, 107-120.

表 8 プログラムの入力例と入力値についての説明

```

*****
* Enter units *
*****
Temperature
Choose from 1=kelvin, 2=deg C←入力温度の単位を選ぶ
? 2←2 の摂氏温度を選んだ
Pressure
Choose from 1=MPa, 2=bar←入力圧力の単位を選ぶ
? 2←2 の bar を選んだ
When you calculate at a vapor-saturated pressure, input 0 for the value.←飽和水蒸気圧条件の計算を行う
時には 0 を入力する
Pressure? 0←0 を入力して飽和水蒸気圧条件で計算する
Temperature? 150←温度を 150 と入力した
Molality? 4←塩化ナトリウムの質量モル濃度を 4 と入力した
Will you continue the calculation? Input Y(or y) or N(or n)? n←計算終了と入力した
OK←計算と印刷が終了したことを示すメッセージ
    
```

表 9 表 8 で示した入力値に対する出力*と説明

```

T(deg C)=+150.0000 Vapor-saturated condition←入力温度と飽和水蒸気圧条件での計算であることを示す
P(vap-sat) of pure water P(bar)= +4.75712D+000←純水の飽和蒸気圧
P(vap-sat) of solution P(bar)= +4.06562D+000←水溶液の飽和水蒸気圧

APHI= +0.5295←デバイーヒュッケルのパラメータ  $A_\phi$ 
AH/RT= +2.712←デバイーヒュッケルのパラメータ  $A_h$  を気体定数と絶対温度の積で割った値
AJ/R= +12.45←デバイーヒュッケルのパラメータ  $A_j$  を気体定数で割った値
AV= +7.477←デバイーヒュッケルのパラメータ  $A_v$ 

Parameters from overall fits←全温度範囲用のパラメータを使用する

Standard State
Water NaCl(aq)
V=+19.645 (cm3/mol) V = +10.70 (cm3/mol)←水と塩化ナトリウムの標準状態での部分モル体積

G/RT= -18.6007 G/RT= -13.420←水と塩化ナトリウムの標準状態での部分モルギブスエネルギーを
気体定数と絶対温度の積で割った値
H/RT= -6.9914 H/RT= -2.860←水と塩化ナトリウムの標準状態での部分モルエンタルピーを
気体定数と絶対温度の積で割った値
S/R= +11.6094 S/R= +10.561←水と塩化ナトリウムの標準状態での部分モルエントロピーを
気体定数で割った値
Cp/R= +9.343 Cp/R= -15.95 ←水と塩化ナトリウムの標準状態での部分モル定圧熱容量を
気体定数で割った値

m=4.00000 Density(g/cm3)= +1.05755←入力した質量モル濃度と密度の計算値
Osmotic coeff= +1.044←水溶液中の水の浸透係数
Activity coeff= +0.605←イオンの平均活量係数
phiL(J/mol)= +9.8123D+003←見かけの相対モルエンタルピー
Ex entr(J/(mol K))= +3.2282D+001←過剰モルエントロピー
phiCp(J/(mol K))= -9.4844D+000←見かけの定圧モル熱容量
Hspecific(J/g)= -1.1075D+003←水溶液 1 g 当たりのエンタルピー
Sspecific(J/(g K))= +4.711←水溶液 1 g 当たりのエントロピー
Cpspecific(J/(g K))=+3.464←水溶液 1 g 当たりの定圧熱容量
    
```

*計算値を示す時に使用している D+00n は $\times 10^n$ を表す。