

回収溶媒計算ソフトについて

ItokenProgramming

2024 年 5 月 26 日

1 目的

このソフトは回収溶媒使用時の計算を自動化し、有機化学者の定時帰宅を支援することを目的とする。

2 原理

混合比が既知のヘキサン-酢酸エチル混合溶媒 (以下回収溶媒) に、純粋なヘキサン又は酢酸エチルを加え、任意の混合比の溶媒 (以下調整済み溶媒) を調製する。調整済み溶媒の体積を V_{tol} 、回収溶媒のヘキサン/酢酸エチル体積比を R_k 、調整済み溶媒のヘキサン/酢酸エチル体積比を R_a とする。この時、回収溶媒の体積 V_k は以下の様に表せる。

$R_k < R_a$ の時、

$$V_k = V_{tol} \frac{R_k + 1}{R_a + 1} \quad (1)$$

$R_k > R_a$ の時、

$$V_k = \frac{V_{tol}}{\frac{1}{R_a} - \frac{1}{R_a(R_k+1)} - \frac{1}{R_k+1} + 1} \quad (2)$$

となる。ただし、すべて理想溶液であるとする。

3 実装

CASIO 製プログラム関数電卓「fx-5800P」を用いて実装を行った。本電卓は独自規格のプログラミング言語を用いてプログラムを作成、実行を行うことができる。この独自言語を用いて作成した回収溶媒計算プログラムを Listing 1 に示す。ただし、紙面の都合上改行した箇所には「_」(アンダーバー)を用いた。

Listing 1 回収溶媒計算プログラム

```

1  "VOLUM SUM="?"→ V
2  "KAISHU H/E="?"→ K
3  "IDEAL H/E="?"→ A
4  CLS
5  LOCATE 1,1,"KAISHU="
6  IF B<A:THEN LOCATE 8,1,V*(K+1)/(A+1):LOCATE 1,2,"HEXANE="
7      _:LOCATE 8,2,V-V*(K+1)/(A+1):LOCATE 15,1,"ML":LOCATE 15,2,"ML"
8  ELSE LOCATE 8,1,V/(1/A-1/(A*(K+1))-1/(K+1)+1):LOCATE 1,2,"ETAC="
9      _:LOCATE 8,2,V-V/(1/A-1/(A*(K+1))-1/(K+1)+1):LOCATE 15,1,"ML":LOCATE 15,2,"ML"
10 IFEND:ANS

```

4 終わりに

今回は関数電卓のプログラム機能を用いて回収溶媒計算の自動化を行った。今後も同様に計算ソフトを作成し、さらなる実験操作の効率化を図りたい。