Korean Chem. Eng. Res., 61(4), 550-554 (2023)
https://doi.org/10.9713/kcer.2023.61.4.550
PISSN 0304-128X, EISSN 2233-9558

상태방정식을 이용한 포화상태 수소의 열역학적 물성 모델링

이봉섭* · 신헌용**,† · 조충희***,†

*강원대학교 화학공학과
24341 강원도 춘천시 강원대학길 1
**서울과학기술대학교 화공생명공학과
01811 서울시 노원구 공릉로 232
***한국가스안전공사 수소제품연구부
27738 충북 음성군 맹동면 원중로 1390
(2023년 7월 24일 접수, 2023년 8월 22일 수정본 접수, 2023년 8월 29일 채택)

Modeling of Thermodynamic Properties of Saturated state Hydrogen using Equation of State

Bong-Seop Lee*, Hun Yong Shin,† and Choong Hee Joe***,†**

**Department of Chemical Engineering, Kangwon National University, Chuncheon, Gangwon 24341, Korea*
***Department of Chemical and Biomolecular Engineering, Seoul National University of Science & Technology, Gongneung-ro, Nowon-gu, Seoul 01811, Korea*
****Hydrogen Product Research Department, Korea Gas Safety corporation, 1390 Wonjung-ro Maengdong-myeon, Eumseong-gun, Chungcheongbuk-do, 27738, Korea*
(Received 24 July 2023; Received in revised from 22 August 2023; Accepted 29 August 2023)

요 약

탄화수소기반의 화석연료 에너지원은 이산화탄소 배출로 인한 지구온난화 문제로 지속적인 이용 및 확장에 제한이 있다. 수소는 전통적인 화석연료에 대한 유망한 대안으로 여겨지고 있다. 수소의 안정적인 장기저장을 위해서 극저온인 포화상태에서 수소의 열역학적 물성에 대한 예측이 요구된다. 따라서 본 연구에서는 비교적 간단한 관계식을 보이는 3차 상태방정식들을 이용하여 포화상태의 열역학적 물성들(포화증기압, 액체 및 기체의 밀도, 엔탈피 및 엔트로피)을 모사하였다. 포화상태 수소에 대한 여러가지 열역학적 물성들을 비교한 결과 3 종류(Redlich-Kwong (RK), Soave-Redlich-Kwong (SRK), Peng-Robinson (PR))의 상태방정식 중 SRK 모델이 비교적 정확한 예측결과를 보였다.

Abstract – Fossil energy sources are limited in their sustainable use and expansion due to global warming caused by carbon dioxide emissions. Hydrogen is considered as a promising alternative to traditional fossil fuels. To ensure the stable long-term storage, it is necessary to accurately predict its thermodynamic properties at cryogenic temperatures. Therefore, this study aimed to investigate thermodynamic properties, such as saturated vapor pressure and density, enthalpy, and entropy of liquid and gas, using cubic equations of state that demonstrate relatively simple relationships. Among the three types of equations of state (Redlich-Kwong (RK), Soave-Redlich-Kwong (SRK), and Peng-Robinson (PR)), the SRK model exhibited relatively accurate prediction results for various physical properties.

Key words: Hydrogen, Cubic equation of state, Saturation

1. 서 론

전통적인 화석 탄화수소기반의 에너지원은 그들의 고갈문제와 이산화탄소 배출로 인한 지구온난화 문제로 인하여 지속적인 이용 및 확장에 제한적이다. 이와 같은 문제들로 인하여 대안으로 제시되고 있는 여러 에너지들 중 수소(hydrogen, H_2) 에너지는 현재 활발하게 연구되고 있다. 에너지 운반체 및 저장 물질로서의 수소는 전통적인 화석연료에 대한 유망한 대안이자 에너지 전환의 촉진제가 될 수 있다.

지구의 중력은 대기중 수소의 체류를 위하여 충분히 크지 않기 때문에 지각에는 중요한 수소자원을 포함하고 있지 않다[1]. 따라서 수소는 다른 물질로부터 생산하는 것이 일반적이다. 수소는 생산방법에 따라 상당히 다른 수소생산 비용을 보인다. 화석연료인

†To whom correspondence should be addressed.
E-mail: hyshin@seoultech.ac.kr, jch1128@kgs.or.kr
This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

천연가스의 주성분인 메탄의 열분해 및 수증기(steam)와의 화학반응을 통한 개질을 통하여 주로 생산되는 '그레이수소'(Gray hydrogen)의 생산비용은 비교적 낮은 0.9 US $/kg H_2 값을 보인다. 탄화수소로부터 생산되는 그레이수소는 필연적으로 이산화탄소를 포함하며, 이산화탄소를 분리 및 정제하여 얻은 수소는 '블루수소'(Blue hydrogen)의 생산비용은 1.5 US $/kg H_2 값을 보인다. 또한, 물의 전기분해 과정을 통하여 얻어지는 '그린수소'(Green hydrogen)는 5.4 US $/kg H_2로 가장 높은 생산비용을 보인다[1].

다양한 방법으로 생산된 수소는 단위 질량당 에너지 밀도는 크나 단위 부피당 에너지 밀도는 상당히 낮은 물질이기 때문에 저장 및 운송에 신중해야 한다. 따라서 효율적인 저장 및 운송을 위해서 크게 3가지 수소 저장방식이 고려되고 있다. 첫째로, 수소의 부피당 에너지 밀도를 높이기 위하여 기체상태의 수소를 고압으로 압축하여 저장하는 방식이다. 그러나 다른 기체와 비교하여 수소 분자의 크기가 작아 누출되기 쉬운 단점을 갖는다. 둘째로, 극저온에서 액체상태의 수소를 저장하는 방식으로 에너지적으로 고비용이 요구되는 단점이 있다. 셋째로, 수소를 다른 형태(고체 상태의 금속수소화물, 액체 상태의 유기운반체)로 전환하여 저장하는 방식이 있으나 아직 기술개발의 초기단계에 있다. 이들 방식 중 산업적으로 이용되고 있는 일반적인 방식은 고압 압축수소 저장방식과 액체수소 저장방식이다. 특히, 액체수소 저장방식은 다른 저장방식과 비교하여 단위부피당 에너지 밀도가 8700 MJ/m^3으로 매우 높은 장점을 갖는다[2]. 또한, 수소의 운송횟수와 이에 따른 운송비용을 현저히 낮출 수 있는 장점을 갖으며[3], 저장 시 낮은 저장압력(0.1~0.6 MPa)으로 인하여 단위 부피당 가장 큰 저장 용량을 안정적으로 저장할 수 있다[4-6]. 그러나 수소의 액화를 위해서는 극저온인 20 K까지 온도를 낮추어야 하며 이는 에너지 집약적 공정이다.

수소를 액체 상태로 저장하기 위해서 해결해야할 도전 과제는 액화수소의 증발로 발생하는 증발가스(Boil-off gas, BOG)이다. 이와 같은 현상의 주요 원인으로는 극저온 탱크에서의 열 손실 및 para-수소(para-hydrogen, p-H_2)의 ortho-수소(ortho-hydrogen, o-H_2)로의 전환 시 발생하는 열을 들 수 있다. 액화천연가스(liquid natural gas, LNG)보다 약 0.45배 낮은 증발 엔탈피(18 kJ/g)로 인하여 액체상태의 수소는 지속적으로 기화하여 BOG를 발생시킨다. 이때 BOG 상태의 수소는 액체 상태의 수소와 평형을 이루고 있다[7,8].

수소는 그 화학적 구조에 의하여 불활성에 가까우며 수소결합과 같은 복잡한 수소결합을 고려한 회합항이 요구되지 않는다. 따라서 비교적 간단한 3차 상태방정식(equation of state, EOS)을 이용하여 열역학 물성의 도출이 가능하다. 그러나 모델에 따른 장·단점으로 인하여 수소의 열역학적 물성의 예측에 적합한 모델을 선정하는 것이 중요하다. 이와 같은 연구의 일환으로 Park[9]은 고압상태로 수소를 저장하고자 할 때 안전성을 확보하기 위하여 온도 및 압력에 따른 열역학적 물성들을 3차 상태방정식들(Redlich-Kwong (RK)[10], Soave-Redlich-Kwong (SRK)[11], Peng-Robinson (PR)[12])을 이용하여 모사하였으며, RK와 SRK 상태방정식이 비교적 정확한 예측결과를 보임을 확인하였다. Nasrifa[13]는 많은 상태방정식을 넓은 온도 및 압력 범위에서 수소의 열역학적 물성들을 예측하여 비교 검토하였으며, Redlich-Kwong-Mathias-Copeman (RKMC)[14] 상태방정식을 가장 정확한 모델로서 제시하였다.

많은 연구들에서 고압에서의 수소의 열역학적 물성을 모사하는데 집중하고 있다. 이는 수소의 기체에서 액체로 상전이가 일어나기까지 현열의 의한 효과가 크기 때문이다. 이에 본 연구에서는 액화수소의 저장 시 포화증기(saturated vapor)상태와 포화액체(saturated liquid) 상태의 수소의 열역학적 물성을 상태방정식을 이용하여 모델링함으로써, 액화수소의 저장설비 설계 시 요구되는 열역학적 모델의 유용성을 확인하기 위하여 비교적 간단한 관계식을 갖는 3차 상태방정식들을 이용하여 극저온 조건에서의 열역학적 물성들을 비교 검토하여 합리적인 모델을 제시하고자 한다. 이와 같은 연구의 결과는 수소의 PVT(pressure-volume-temperature)거동, 기체-액체 평형(vapor-liquid equilibrium)과 같은 열역학적 특성에 대한 정확한 정보를 제공하며, 이와 같은 정보는 일반적으로 모든 화학 공장의 설계 및 장비 크기를 결정하는 많은 공정에 활용될 수 있을 것으로 기대된다.

2. 이론적 배경

상태방정식은 활동도계수 모델(activity coefficient model)과 달리 액체뿐 아니라 기체 상태의 열역학적 물성 및 압력에 따른 열역학적 물성의 변화를 묘사할 수 있고 관계식이 비교적 간단하여 산업계에서 활발히 이용되고 있다. 수소 분자는 수소결합(hydrogen bonding)과 같은 강한 상호작용이 존재하지 않기 때문에 CPA (cubic plus association)[15] 및 통계역학적 회합성유체이론(statistical associating fluid theory, SAFT)과[16] 같이 회합(association)항이 요구되지 않아 일반적으로 3차 상태방정식은 다음과 같은 관계식으로 나타낼 수 있다[17].

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a(T)}{(V+\varepsilon b)(V+\sigma b)} \tag{1}$$

$$a(T) = \Psi \frac{\alpha(T_r,\omega)R^2T_C^2}{P_C} \tag{2}$$

$$b = \Omega \frac{RT_C}{P_C} \tag{3}$$

식 (1)-(3)의 매개변수(parameter)들은 상태방정식의 종류에 따라 서로 다른 값을 보이며 이들 값들은 Table 1에 나타내었다. 이때 Ω와 Ψ는 물질의 종류에 독립적인 변수이며, 상태방정식에 따라 결정된다. 또한, $\alpha(T_r, \omega)$는 경험식으로 상태방정식에 따라 다른 관계식을 보인다. T_r와 P_r는 환산온도(reduced temperature, $=T/T_c$)와 환산압력(reduced pressure, $=P/P_c$)를 나타내며, 하첨자 c는 임계상태(critical state)를 의미한다.

식 (1)은 온도와 압력이 주어진 상태에서의 기체 및 액체의 부피(혹은 밀도)를 결정하는데 이용되며, 압축인자 Z ($=PV/RT$)에 대한 관계식으로 주어진다. 기체 상태의 경우, Z의 초기값은 이상기체로 가정하며, 액체 상태의 경우, 분자 크기와 연관된 b 값을 이용하여 초기값($=bP/RT$)으로 가정하여 반복 계산하여 결정한다. 이때, 허용오차(tolerance)는 밀도의 변화량이 10^{-9}이하 일 때의 값으로 결정하였다. 또한, 3차 상태방정식을 이용하여 순수 수소분자의 포화상태에서의 열역학적 물성을 추산하기 위하여 임계물성들이 이용되며 이들은 다른 물성들과 함께 Table 2에 주어졌다.

또한, 엔탈피와 엔트로에 대한 관계식은 열역학적 관계로부터 압축인자 Z에 대하여 다음과 같이 주어진다.

$$H^R = RT(Z-1) + \int_{\infty}^{V}\left[T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V - P\right]dV \tag{4}$$

Table 1. Parameters for cubic equation of state

Model	$\alpha(T_r)$	σ	ε	Ω	Ψ	Z_C
Redlich-Kwong (RK)	$T_r^{-1/2}$	1	0	0.08664	0.42748	1/3
Soave-Redlich-Kwong (SRK)	$\alpha_{SRK}(T_r;\omega)^{\dagger}$	1	0	0.08664	0.42748	1/3
Peng-Robinson (PR)	$\alpha_{PR}(T_r;\omega)^{\ddagger}$	$1+\sqrt{2}$	$1-\sqrt{2}$	0.07780	0.45724	0.30740

$^{\dagger}\alpha_{SRK}(T_r;\omega)=[1+(0.480+1.574\omega-0.176\omega^2)(1-T_r^{1/2})]^2$
$^{\ddagger}\alpha_{PR}(T_r;\omega)=[1+(0.37464+1.54226\omega-0.26992\omega^2)(1-T_r^{1/2})]^2$

Table 2. Properties for hydrogen according to the hydrogen type

Type	T_{triple} [K]	P_{triple} [bar]	T_c [K]	P_c [bar]	ρ_c [mol/l]
n-H_2	13.957	0.0736	33.145	12.964	15.508
p-H_2	13.8033	0.07041	32.938	12.858	15.538
o-H_2	14.008	0.07461	33.22	13.1065	15.445

$$S^R = R\ln(Z-B)+\int_{\infty}^{V}\left[\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V-\frac{R}{V}\right]dV \quad (5)$$

3. 포화상태 수소의 열역학적 물성 계산 및 논의

수소는 핵의 스핀 방향에 따라 2가지 종류의 수소 유형이 존재한다. 핵의 스핀 방향이 같은 o-H_2와 전자의 스핀 방향이 서로 반대인 p-H_2이다. 이들은 온도에 따라서 안정성이 다르며 이러한 안정성의 차이에 의해서 온도에 따라서 두 종류의 수소의 존재비율이 다르다. 일반적으로 normal-수소(normal-hydrogen, n-H_2)는 p-H_2와 o-H_2의 3:1 혼합물이지만 혼합에 따른 비이상성은 무시할 정도로 작다[18]. 또한 임계온도에서조차 n-H_2와 p-H_2의 증기압 차이는 약 25 kPa이다. n-H_2는 포화상태 수소의 열역학적 물성의 모델링 목적을 위해서 순수 수소로 간주되었다. 수소의 분자구조의 특성을 고려하기 위하여 도입된 이심인자(acentric factor, ω)는 환산온도 0.7에서의 값에서의 포화 증기압으로부터 추산되었으며, 본 연구에서는 3가지 종류의 수소에 대하여 모두 -0.22007 값을 이용하였다.

앞서 Table 2에서 주어진 순수성분 물성 값과 이심인자의 정의로부터 추산된 값을 이용하여 3 종류의 3차 방정식으로부터 수소의 열역학 물성들을 추산하였다. 포화 증기압 및 포화 액체 및 기체의 밀도에 대한 계산결과는 Table 3에 나타내었다. 상태방정식에 따른 계산된 포화 증기압은 PR이 3.44% 절대평균상대오차(absolute average relative deviation, AARD)를 보이며 실험데이터와 가장 근접한 계산결과를 보였으며, SRK 모델은 6.22%의 절대평균상대오차를 보였다. Fig. 1은 3 종류의 상태방정식에 따른 계산된 포화 증기압(saturated vapor pressure)과 실험데이터를 비교하여 도시하였다. Fig. 1(b)에 도시된 결과에서도 확인할 수 있듯이, RK 상태방정식은 다른 두 모델과 달리 상대적으로 낮은 온도에서 더 낮은 포화 증기압을 예측하였다.

포화 액체밀도에 대한 예측결과는 SRK 모델이 9.13% AARD로 가장 정확한 계산결과를 보였으며, PR 모델은 가장 큰 오차를 보였다. Fig. 2(a)는 모델에 따른 계산된 포화 액체밀도의 정확성을 뚜렷하게 확인할 수 있다. Fig. 2(b)에서는 포화 기체밀도의 예측결과를 확인할 수 있다. 도시된 그림에서 RK 모델이 상당히 큰 편차를 보이는 것을 확인할 수 있다.

포화상태에서의 수소의 액체 및 기체의 엔탈피(enthalpy)와 엔트로피(entropy) 계산결과는 Table 4에 나타내었다. 앞서 예측된 포화 증기압 및 포화 액체 및 기체의 밀도의 예측결과 비교하여 약 66% 이상의 상당히 큰 절대평균상대오차를 보인다. 그러나 Fig. 3에서

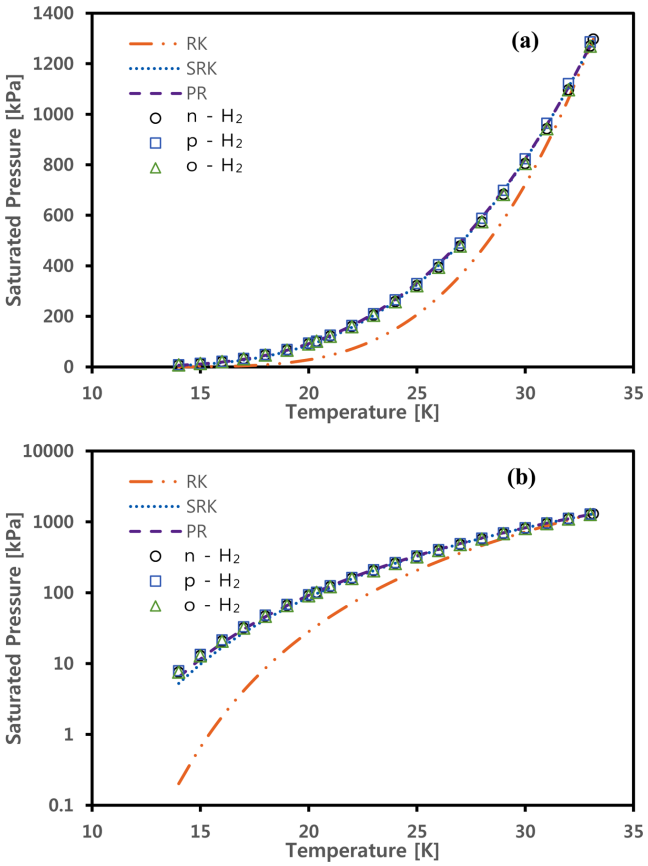

Fig. 1. The comparison of experimental [18] and calculated saturated vapor pressure according to the different cubic equations: RK (dash dotted line, orange color), SRK (dotted line, blue color) and PR (dashed line, purple color); (a) normal scale and (b) log10 scale.

Table 3. Absolute average relative deviation (AARD %) for saturated vapor pressure and density of liquid and vapor

Model	ΔP^{sat}	$\Delta\rho^L$	$\Delta\rho^G$
RK	46.0825	14.1539	50.8994
SRK	6.2240	9.1287	7.2308
PR	3.4366	18.4410	5.5776

$AARD = 100\%/N_p \times \sum_{i=1}^{Np} |X_{exp}-X_{cal}|/X_{exp}$, $X = P^{sat}$, ρ^L and ρ^G

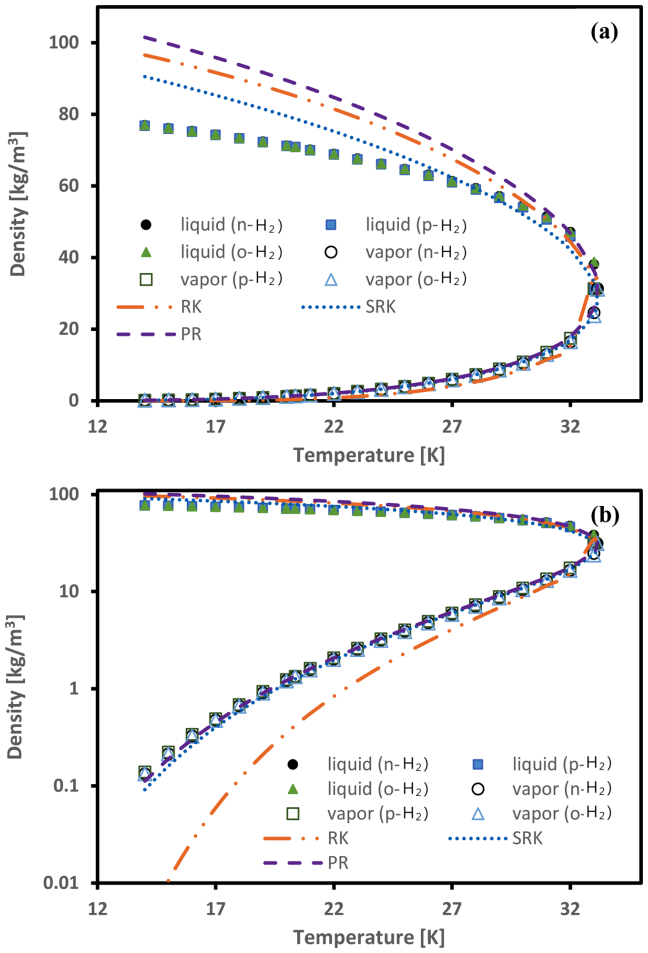

Fig. 2. The comparison of experimental [18] and calculated saturated vapor pressure according to the different cubic equations: RK (dash dotted line, orange color), SRK (dotted line, blue color) and PR (dashed line, purple color); (a) normal scale and (b) log10 scale.

Table 4. Absolute average relative deviation (AARD %) for enthalpy and entropy of liquid and vapor

Model	ΔH^L	ΔH^G	ΔS^L	ΔS^G
RK	152.2498	66.0742	2585.548	690.058
SRK	95.3231	66.3485	804.072	678.636
PR	92.2239	67.9322	692.238	647.366

$AARD = 100\%/N_p \times \sum_{i=1}^{Np} |X_{exp} - X_{cal}|/X_{exp}$, $X = H^L, H^G, S^L$ and S^G

볼 수 있듯이, 온도에 따른 엔탈피의 변화 경향성은 3 종류의 모델이 모두 잘 예측하였다. 액체 상태의 수소의 엔탈피는 비교적 실험데이터와 일치하였나, 기체 상태의 수소의 엔탈피는 실험 데이터보다 더 작은 값을 예측하였다.

T-S 선도(temperautre versus entropy diagram)는 액화공정을 설계할 때 유용하게 사용된다. 따라서 3 종류의 상태방정식에 의해 예측된 포화상태에서의 엔트로피 예측 값은 수소의 액화공정 설계에 유용하게 이용될 것으로 기대된다. 그러나 예측된 엔트로피 값은 실험데이터와 650% 이상의 절대평균상대오차를 보이며 상당한 편차를 보였다. 예측된 결과는 실험데이터와 비교하여 Fig. 4에 도시하였다. 그림에서 볼 수 있듯이, 포화기체 상태에서는 3 종류의 모

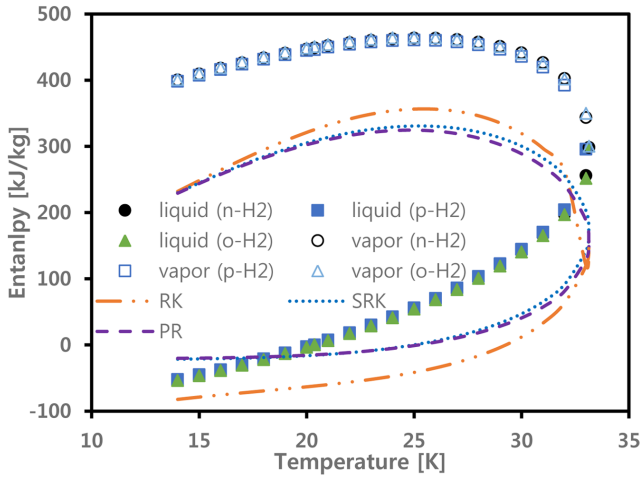

Fig. 3. The comparison of experimental[18] and calculated enthalpy according to the different cubic equations: RK (dash dotted line, orange color), SRK (dotted line, blue color) and PR (dashed line, purple color).

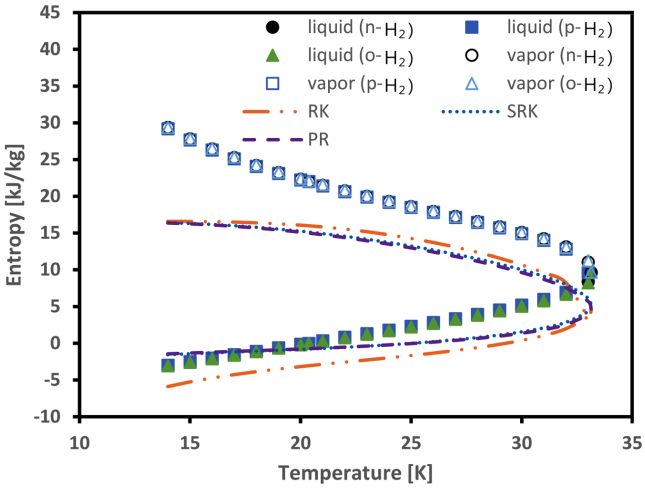

Fig. 4. The comparison of experimental [18] and calculated entropy according to the different cubic equations: RK (dash dotted line, orange color), SRK (dotted line, blue color) and PR (dashed line, purple color).

델 모두 낮게 예측하였으며, 포화액체 상태의 엔트로피 값은 포화기체 상태의 값보다 실험데이터와 더 근사한 값을 보였다.

4. 결 론

극저온 상태, 즉 포화상태 수소의 열역학적 물성들(포화증기압, 포화 액체 및 기체의 밀도, 엔탈피 및 엔트로피)을 예측하고자 비교적 간단한 관계식을 갖는 3차 상태방정식들(RK, SRK, PR)을 적용하였다. 이들 물성들은 액화수소의 처리를 위한 탱크, 펌프, 밸브 및 기화기 등의 장치의 설계와 운전에서 그 유용성이 매우 크다. 포화증기압의 경우, RK 상태방정식을 제외한 SRK와 PR 상태방정식이 비교적 정확한 예측결과를 보였다. 포화상태에서의 기체 및 액체 수소의 밀도는 SRK > PR > RK의 순서로 정확도를 보였다. 또한, 엔탈피 및 엔트로피는 3 종류의 모델 모두 실험데이터와 상당한 차이를 보였으나 RK 모델이 매우 큰 오차를 보였다. 따라서 포

화상태에서 수소의 열역학적 물성들을 예측하기 위한 모델로서 SRK 상태방정식이 합리적인 것으로 판단되었다. 이와 같은 연구의 결과는 극저온에서의 수소를 이용하는 장치의 설계와 안전성의 평가에서 PVT 상거동 및 열역학적 물성의 예측을 위한 열역학적 모델의 선정에 유용할 것으로 기대된다.

감 사

본 연구는 산업통상자원부 및 한국에너지기술평가원(KETEP)의 연구비지원(연구개발 과제번호. 20227310100090)을 받아 수행한 연구 과제입니다.

References

1. Arutyunov, V. S., "Hydrogen Energy: Significance, Sources, Problems, and Prospects (A Review)," *Petroleum Chemistry*, **62**(6), 583-593(2022).
2. Subramani, V., Basile, A. and Veziroglu, T. N., Compendium of Hydrogen Energy: Hydrogen Production and Purification., Woodhead Publishing(2015).
3. Morales-Ospino, R., Celzard, A. and Fierro, V., "Strategies to Recover and Minimize Boil-off Losses During Liquid Hydrogen Storage," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **182**, 113360(2023).
4. Abdalla, A. M., Hossain, S., Nisfindy, O. B., Azad, A. T., Dawood, M. and Azad, A. K., "Hydrogen Production, Storage, Transportation and Key Challenges with Applications: A Review," *Energy Conversion and Management*, **165**, 602-627(2018).
5. Abdin, Z., Zafaranloo, A. Rafiee, A., Merida, W., Lipinski, W. and Khalilpour, K. R., "Hydrogen as an Energy Vector," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **120**, 109620(2020).
6. Ustolin, F., Paltrinieri, N. and Berto, F., "Loss of Integrity of Hydrogen Technologies: A Critical Review," *International Journal of Hydrogen Energy*, **45**(43), 23809-23840(2020).
7. Khurana, T. K., Prasad, B. V. S. S. S., Ramamurthi, K. and Murthy, S., "Thermal Stratification in Ribbed Liquid Hydrogen Storage Tanks," *International Journal of Hydrogen Energy*, **31**(15), 2299-2309(2006).
8. Smith, J. R., Gkantonas, S. and Mastorakos, E., "Modelling of Boil-off and Sloshing Relevant to Future Liquid Hydrogen Carriers," *Energies*, **15**(6), 2046(2022).
9. Park, B. H., "Calculation and Comparison of Thermodynamic Properties of Hydrogen Using Equations of State for Compressed Hydrogen Storage," *Transactions of the Korean Hydrogen and New Energy Society*, **31**(2), 184-193(2020).
10. Redlich, O. and Kwong, J. N. S., "On the Thermodynamics of Solutions. V. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions," *Chemical Reviews*, **44**(1), 233-244(1949).
11. Soave, G., "Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State," *Chemical Engineering Science*, **27**(6), 1197-1203(1972).
12. Peng, D.-Y. and Robinson, D. B., "A New Two-Constant Equation of State," *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, **15**(1), 59-64(1976).
13. Nasrifar, K., "Comparative Study of Eleven Equations of State in Predicting the Thermodynamic Properties of Hydrogen," *International Journal of Hydrogen Energy*, **35**(8), 3802-3811(2010).
14. Mathias, P. M. and Copeman, T. W., "Extension of the Peng-Robinson Equation of State to Complex Mixtures: Evaluation of the Various Forms of the Local Composition Concept," *Fluid Phase Equilibria*, **13**, 91-108(1983).
15. Kontogeorgis, G. M., Voutsas, E. C., Yakoumis, I. V. and Tassios, D. P., "An Equation of State for Associating Fluids," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **35**(11), 4310-4318(1996).
16. Chapman, W. G., Gubbins, K. E., Jackson, G. and Radosz, M., "SAFT: Equation-of-state Solution Model for Associating Fluids," *Fluid Phase Equilibria*, **52**, 31-38(1989).
17. Smith, J. M., Van Ness, H. C., Abbott, M. M. and Swihart, M. T., Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics. 9th ed., McGraw-Hill Singapore(2022).
18. Leachman, J. W., Jacobsen, R. T., Penoncello, S. G. and Lemmon, E. W., "Fundamental Equations of State for Parahydrogen, Normal Hydrogen, and Orthohydrogen," *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **38**(3), 721-748(2009).

Authors

Bong-Seop Lee: Professor, Department of Chemical Engineering, Kangwon National University, Chuncheon, Gangwon 24341, bslee0425@kangwon.ac.kr

Hun Yong Shin: Professor, Department of Chemical and Biomolecular Engineering, Seoul National University of Science & Technology, Gongneung-ro, Nowon-gu, Seoul 01811, hyshin@seoultech.ac.kr

Choong Hee Joe: Deputy general manager, Hydrogen Product Research Department, Korea Gas Safety corporation, 1390 Wonjung-ro Maengdong-myeon, Eumseong-gun, Chungcheongbuk-do, 27738, jch1128@kgs.or.kr