

# Új kolonna konfigurációk nyomásváltó szakaszos desztillációhoz

## II. Részletes számítások

### *New column configurations for pressure swing batch distillation II. Rigorous Simulation*

Modla G., Láng P., Kopasz Á.

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Gépészeti Eljárások Tanszék*

---

#### **Summary**

The pressure swing distillation in different batch column configurations is investigated by rigorous simulation calculations. The calculations are made by a professional flow-sheet simulator for the separation of a minimum (ethanol–toluene) and a maximum boiling (water– ethylene-diamine) azeotropic mixture. Besides studying the well known configurations (rectifier, stripper) we also investigate two novel configurations such as double column batch rectifier and double column batch stripper. The alternate application of a batch rectifier and a batch stripper is also studied. The different column configurations are compared.

---

#### **Absztrakt**

Részletes számításokat végeztünk különböző szakaszos kolonna konfigurációkra nyomásváltó desztillációra. A számításokat egy professzionális folyamatszimulátort használva végeztük minimális (etanol-toluol) és maximális forráspontú (víz-etilén-diamin) azeotrop elegyekre. A jól ismertek (rektifikáló, szakaszos sztripper, középső tartályos oszlop) vizsgálata mellett két új konfigurációra (kétkolonnás szakaszos rektifikáló és a kétkolonnás szakaszos sztripper) is javaslatot tettünk. Megvizsgáltuk a rektifikálás és sztippelés időben váltakozó alkalmazását is. Végül összehasonlítottuk a különböző konfigurációkat.

#### **1. Bevezetés**

Azeotropot képző komponensek (*A* és *B*) szétválasztásához valamilyen speciális desztillációs eljárást kell alkalmaznunk. A nyomásváltó (NYVD) desztillációt, amely nyomásérzékeny azeotropok szétválasztó ágens alkalmazása nélküli elválasztását teszi lehetővé, először Lewis javasolta 1928-ban, folyamatos üzemmódban.

A NYVD szakaszos alkalmazását vizsgálták Repke és mtársai 2006-ban. Egy minimális forrpontú homoazeotrop elegy (acetonitril-víz) szétválasztását vizsgálták szakaszos rektifikálás és sztippelés esetére. Félüzemi mérések és részletes modellező számítások eredményeit közölték.

Modla és munkatársai 2007-ben -maximális szétválasztás feltételezése mellett-, különböző szakaszos oszlop konfigurációkra a NYVD megvalósíthatóságát vizsgálták binér minimális és maximális forrpontú azeotrop elegyek esetére. A különböző nyomásokat egymástól elválaszthatjuk: - időben, egy oszloprészt (szakaszos rektifikáló és sztripper), illetve

- térben, két oszloprészen (pl. középső tartályos oszlop (KTO)) alkalmazva.

Megállapították, hogy a KTO nem alkalmas a binér NYVD-ra. Két új konfigurációt is javasoltak: a kétoszlopos szakaszos rektifikálót (DOSZR) és a kétoszlopos szakaszos sztripper (DOSZSZ), melyeknek számos előnyük van, így például nincs időbeli nyomásváltás a folyamat során, és mindkét oszlop állandósult állapotban üzemelhet.

Megállapították, hogy mind a maximális, mind a minimális forrpontú azeotropok szétválasztása lehetséges a sztippelés és a rektifikálás felváltva történő alkalmazásával is.

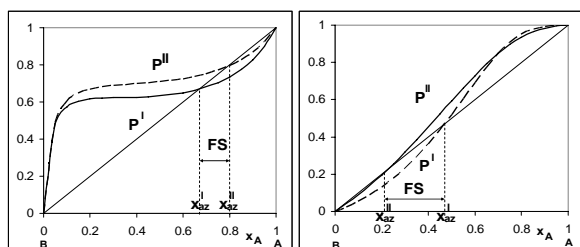
E munka céljai a következők:

- a megvalósíthatósági vizsgálatok következtetéseinek igazolása részletes modellezéssel,
- a megvalósítható konfigurációk hatékonyságának vizsgálata valós körülményekre,
- a különböző konfigurációk összehasonlítása.

A számításokat az etanol(*A*) – toluol(*B*) minimális és a víz(*A*) –etiléndiamin(*B*) maximális forrpontú azeotrop elegyekre végeztük.

## 2. Gőz-folyadék egyensúlyok

Az egyensúlyi diagramokat és az azeotropok adatait a két különböző nyomáson az 1. ábra ill. az 1. táblázat tartalmazza.



1. ábra Az elegyek y-x diagrammjai  
 a. etanol-toluol ( $P^I=0,1, P^{II}=1,1$  bar)  
 b. Víz-EDA ( $P^I=0,1, P^{II}=8,0$  bar)

Elegy	P bar	$x_{az}$ [%]	$T_{az}$ [°C]	$T_{BP,A}$ [°C]	$T_{BP,B}$ [°C]
Etanol (A)- Toluol (B)	0,1 1,1	67 79	26,4 78,8	29,1 80,4	45,3 113,6
Víz(A)- EDA (B)	0,1 8,0	47 21	62,2 199,5	45,8 170,5	50,8 198,6

1. táblázat Azeotropok adatok

A nyomás változtatásával az azeotrop összetételek eltolhatók. Mindkét elegy esetében az azeotropok közötti különbség több mint 5%, az alkalmazott nyomáskülönbség pedig kisebb mint 10 bar, tehát a nyomásváltással történő szétválasztás gazdaságos lehet (Perry és mtársai, 1998).

### 3. Részletes számítások

A maximális szétválasztás feltételezésével végzett megvalósíthatósági vizsgálatok után (Modla és mtársai 2007) részletes szimulációs számításokat is végeztünk valós működési feltételekre.

#### 3.1 A szimulációs módszer

A következő egyszerűsítő feltételeket alkalmaztuk:

- elméleti tényérok,
- állandó térfogatú folyadék hold-up a tényérokön,
- elhanyagolható gőz hold-up.

A megoldandó modell egyenletek jól ismertek:

- a. nem-lineáris differenciál-egyenletek (anyag- és hőmérlegek),
- b. algebrai egyenletek (gőz-folyadék (VLE) egyensúlyi egyenletek, összegzési egyenletek, hold-up egyenértékűség, fizikai jellemzők modelljei).

A számításokhoz a Chemstations (2006) professzionális folyamatszimulátora dinamikus

modellező részét (CCDCOLUMN) használtuk, a következő modulokat alkalmazva:

- DYNCOLUMN (oszloprészek, szimultán korrekciós módszerrel)
- DYNAMIC VESSEL (tartályok és termékgyűjtők)
- HEAT EXCHANGER, PUMP, VALVE (hőcserélők, szivattyúk, szelepek)
- MIXER, DIVIDER (keverők és elosztók)

#### 3.2 Szimulációs eredmények

A következő konfigurációkat vizsgáltuk:

- SZR, SZR-SZSZ, DOSZR max. azeotropok szétválasztására,
- SZSZ, SZR-SZSZ, DOSZSZ min. azeotropok szétválasztására.

Az elméleti tényérok száma minden oszloprészben 20 volt (kondenzátor és visszaforráló nélkül). Az egyszerűség kedvéért ugyanazokat a reflux- és visszaforrálási arányokat adtuk meg a különböző lépésekre (SZR, SZSZ, SZR-SZSZ) és oszlopokra (DOSZR, DOSZSZ). A hold-up mennyisége egyoszlopos esetekben  $50 \text{ cm}^3/\text{tányér}$ , míg a DOSZR, és a DOSZSZ esetében (a kisebb gőzterhelés miatt)  $25 \text{ cm}^3/\text{tányér}$ . A sarzs mennyisége  $11 \text{ dm}^3$ . Kezdetben a berendezésekben forrponi folyadék van. A felfutás időtartama (tisztítás termékélvétel nélkül) 60 perc. A műveletnek akkor van vége:

- SZR, SZSZ, SZR-SZSZ esetén, ha valamelyik gyártási lépés 15 percnél rövidebb lesz,
- DOSZR, DOSZSZ esetén, ha a sarzs mennyiségének 2 % -nál kevesebb a tartályban lévő folyadék.

##### 3.2.1 Max. azeotropok szétválasztása

A sarzs 40% vizet tartalmaz

a. Szakaszos rektifikáló

A visszaforrálót elhagyó gőz mólárama:  $V_{reb}=340 \text{ mol/h}$ . A nyomásváltozás sebessége:  $dP/dt=1 \text{ bar/min}$ . Feltételek a termék (desztillátum) elvételre:

- indítás:  $R=\infty$  mellett a pillanatnyi termék tisztaság 99% ( $x_w \geq 0,99$  vagy  $x_w \leq 0,01$ ) 3 percig
- leállítás: a tisztaság 0,95 alá esik ( $x_w < 0,95$  vagy  $x_w > 0,05$ )

A nyomás, a termék- és tartályösszetételek ( $x_{WR}$ ) időbeni változása a 2. ábrán látható.

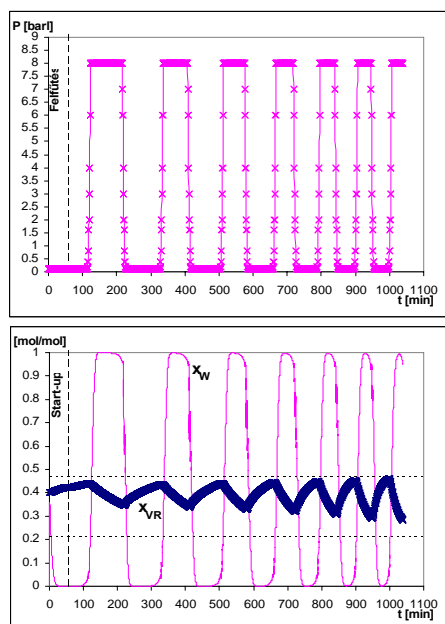
A folyamat során:

- a termelési periódusok rövidülnek,
- a tartály összetétele egyre gyorsabban változik, egyre szélesebb intervallumban.

Az eredményeket a 2. táblázatban foglaltuk össze. Magas terméktisztaságok érhetőek el:  $x_{W,A,av}=99,0\%$   $x_{W,B,av}=99,3\%$ .

Mindkét komponens kinyerése ( $\eta_i$ ) elfogadható:  $\eta_A=88,7\%$  és  $\eta_B=86,2\%$ .

A terméklevétel nélküli periódusok (termék tisztítása, nyomásváltás) hossza tekintélyes (a teljes műveleti idő 44,2%-a).



2. ábra A nyomás (a), a termék- és maradékösszetétel (b) időbeni változása a SZR-nál

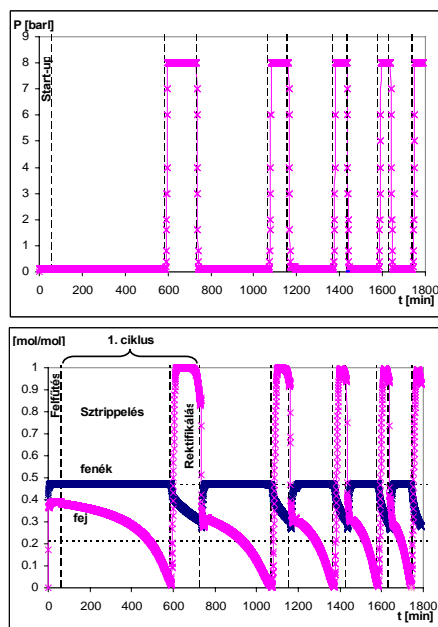
### b. A rektifikálás és sztrippelés kombinációja

A ciklust alacsony nyomású sztrippeléssel kezdjük, előtte a sarzsot a felső tartályba töltjük. A felső tartályt elhagyó folyadékáram:  $L_0=340$  mol/h. A ciklus második lépésében nagy nyomású rektifikálást végzünk. (A betáplálás már az alsó tartályban van, mivel az volt az 1. lépés termékgyűjtője). A visszaforralási arány:  $V_{reb}=340$  mol/h. A rektifikálás után a alsó tartályban lévő maradékot a felsőbe kell tölteni (a következő sztrippelő lépés megkezdése előtt).

A (nem lineáris) nyomásváltozás átlagos sebessége  $dP/dt=1,0$  bar/min. A terméklevétel leállításának feltétele:

- a sztrippelő lépésekben a tartály maradék eléri a 98%-os tisztaságot ( $x_{W,av}=0,02$ ),
- a rektifikáló lépésekben:
- indítás:  $R=\infty$  mellett a pillanatnyi termék tisztaság 3 percig legalább 99% ( $x_W \geq 0,99$  vagy  $x_W \leq 0,01$ )
- leállítás: a tisztaság 0,95 alá esik ( $x_W < 0,95$  vagy  $x_W > 0,05$ )

A nyomás, valamint a (pillanatnyi) fejgőz és fenék-folyadék összetételének változása a 3. ábrán látható. Az első sztrippelés ( $R_S=\infty$  mellett) felfutási szakaszában a fenék-folyadék összetétele gyorsan eléri, és a lépés végéig megtartja az azeotrop értéket.



3. ábra A nyomás (a), valamint a (pillanatnyi) fejgőz és fenék-folyadék összetétel (b) időbeni változása

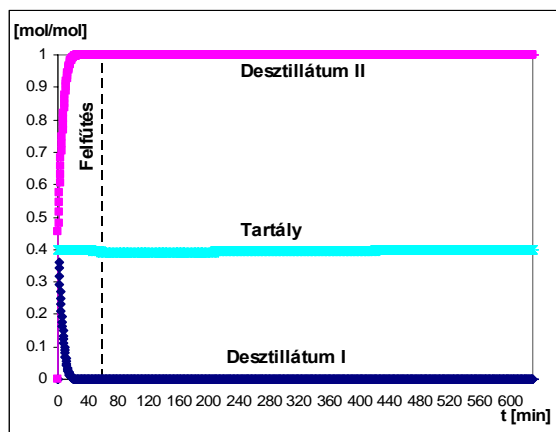
A lépés gyártási szakaszában ( $R_S < \infty$  mellett) a víz koncentrációja a fejgőzben (és természetesen a felső tartályban is) fokozatosan csökken, végül a felső tartály összetétele eléri az EDA-ra előirt tisztaságot. A rektifikálási lépés kezdetén az  $R_S=\infty$  mellett felfutási szakaszban a fejgőz néhány perc alatt kitisztul. A rektifikáló lépésben desztillátumként vizet kapunk, a tartály összetétele pedig a nagynyomású azeotrop pont felé mozdul. Az előirt tisztaságú termékek elfogadható kinyerés mellett (82,7% és 82,0%) gyárthatók. Ezek a

kinyerések azonban alacsonyabbak, mint a szakaszos rektifikáló esetében (magasabb tisztaságú termékek mellett) voltak. A terméklevétel nélküli periódusok (termék tisztítása, nyomásváltás) a hossza tekintélyes (a teljes műveleti idő 19,0 %-a). Minden paraméter mely a folyamat hatékonyságát jellemzi erre a konfigurációra a legkedvezőtlenebb.

### c. Kétoszlopos szakaszos rektifikáló

A visszaforralót elhagyó gőz-móláramok:  $V_{reb}^{II}=0,4 \times 340=136$  mol/h,  $V_{reb}^I=204$  mol/h. Az oszlopok nyomása időben nem változik:  $P^I=0,1$  bar és  $P^{II}=8$  bar. A termék és a tartály-maradék összetételének változása a 4. ábrán látható.

Mindkét termék gyorsan kitisztul (kevesebb, mint 20 perc alatt), és tiszta is marad hosszú ideig. A tartályösszetétel igen szűk tartományon belül (39,0% és 40,1 % között) marad. Ezzel az új konfigurációval érhetőek el a legnagyobb terméktisztaságok (99,99% és 99,97%), és a legmagasabb kinyerések (90,2% és 92,6%). Csak egy elvétel nélküli periódus van (a művelet elején a desztillátum tisztítása), melynek időtartama a teljes műveleti időnek csupán 10%-a (és ez még tovább is csökkenthető).



4. ábra A termék és tartályösszetétel időbeni változása (DOSZR)

A folyamat hatékonyságát jellemző összes paraméter erre a konfigurációra a legkedvezőbb (2. táblázat). A magasnyomású kolonna kondenzátorának ( $Q_{cond}^{II} = -4,75$  MJ/h,  $T_{cond}^{II} =$  kb.  $170^\circ\text{C}$ ), és az alacsony nyomású kolonna visszaforralójának ( $Q_{reb}^I = 7,5$  MJ/h,  $T_{reb}^{II} =$  cca.  $77^\circ\text{C}$ ) termikus csatlósával további energia

megtakarítás érhető el (a rendszer teljes energiaigényének 34%-a).

### 3.2.2 Min. forrpontú azeotropok szétválasztása

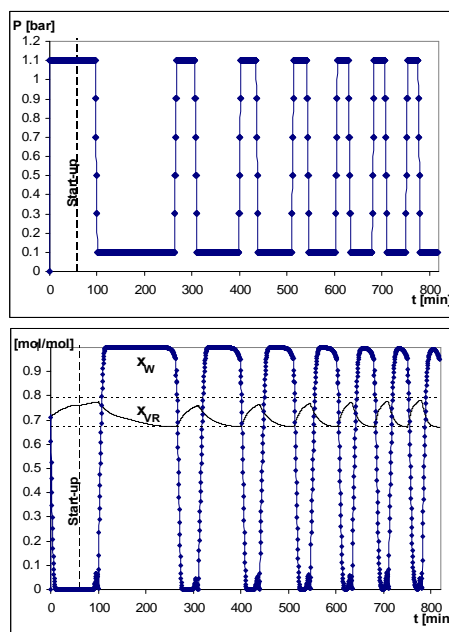
A sarzs 71 mol% etanolt tartalmaz.

#### a. Szakaszos sztripper

A felső tartályt elhagyó folyadék molárama:  $L_0=340$  mol/h. A nyomásváltozás sebessége:  $dP/dt=0,2$  bar/min. A terméklevétel feltételei:

- indítás:  $R=\infty$  mellett a pillanatnyi terméktisztaság 3 percig legalább 99% ( $x_W \leq 0,01$  vagy  $x_W \geq 0,99$ ),
- leállítás: a tisztaság 0,95 alá esik ( $x_W > 0,05$  vagy  $x_W < 0,95$ ).

A nyomás, a termék és tartály összetételek időbeni változása az 5. ábrán látható.



5. ábra A nyomás (a), termék és tartály-maradék összetételének (b) időbeni változása SZSZ esetén

A folyamat során:

- a termelési periódusok rövidülnek,
  - a tartály összetétele egyre gyorsabban változik, egyre szélesebb intervallumban.
- Magas terméktisztaságok érhetőek el (99,4%, 99,4 %) elfogadható kinyerések mellett (80,4%, 78,0 %) A terméklevétel nélküli periódusok (termék tisztítása, nyomás váltás) időtartama nagyon hosszú (a teljes műveleti idő 52,9%-a).

### b. A rektifikálás és sztrippelés kombinációja

A ciklust alacsony nyomású rektifikálással kezdjük; előtte a sarzsot az alsó tartályba töltjük. A visszaforralási gőzárám:  $V_{reb}=340$  mol/h. A ciklus második lépésében nagy nyomású sztrippelést végzünk. (A sztrippelés betáplálása a rektifikálási lépés desztillátuma.) Az oszlopba belépő folyadék árama:  $L_{\theta}=340$  mol/h. A sztrippelési lépések után a felső tartályban lévő maradékot az alsó tartályba kell tölteni (a következő, rektifikálással kezdődő ciklus megkezdése előtt).

A nyomásváltozás átlagos sebessége  $dP/dt=0.2$  bar/min. A terméklevételek leállításának feltételei:

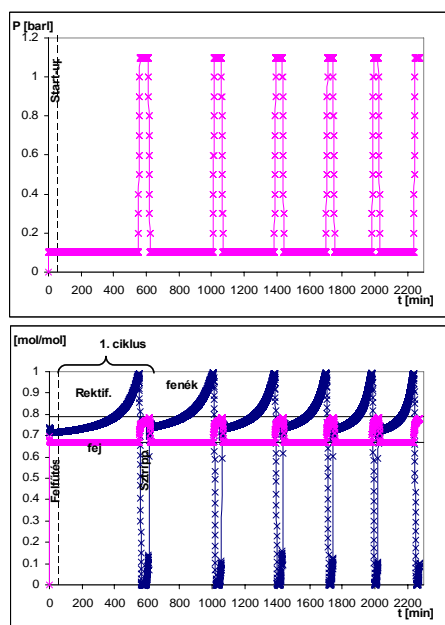
-a rektifikáló lépésben: a tartály maradék eléri a 98%-os tisztaságot ( $x_{VR}\geq 0,98$ )

-a sztrippelő lépésben:

- indítás:  $R=\infty$  mellett a pillanatnyi termék tisztaság **B**-re 3 percig legalább 99% ( $x_W\leq 0,01$ ),

-leállítás: a tisztaság 5% alá esik ( $x_W>0,05$ ).

A nyomás, valamint a (pillanatnyi) fejgőz és fenékfolyadék összetételének időbeni változása a 6. ábrán látható.



6. ábra A nyomás (a), fejjgőz- és fenékfolyadék összetétel (b) időbeni változása SZR-SZSZ kombináció esetén

Az első rektifikálás ( $R=\infty$  melletti) felfutási szakaszában a fejjgőz összetétele gyorsan eléri, és a lépés végéig megtartja az azeotrop értéket. A lépés

termelési szakaszában ( $R_S<\infty$  mellett) az etanol koncentrációja a fenék-folyadékban (és természetesen az alsó tartályban is) fokozatosan növekszik, és végül az alsó tartály folyadéka eléri az előírt etanol tisztaságot.

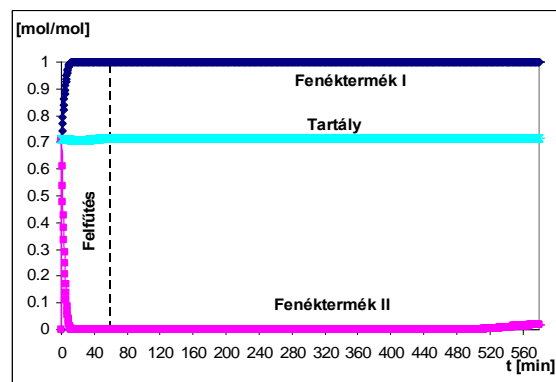
A sztrippelési lépés kezdetén ( $R_S=\infty$  mellett), a felfutási szakaszban a fenékfolyadék etanol tartalma gyorsan esik és tiszta toluol gyártható folyamatosan fenéktermékként. A fejjgőz (és a felső tartály) összetétele a nagynyomású azeotrop pont felé mozdul el.

A termékek előírt tisztasággal, elfogadható kinyerés (63,1% és 94,5%) mellett gyárthatók. Ugyanakkor ezek a kinyerések alacsonyabbak, mint a szakaszos sztrippelést esetében (magasabb tisztaságok mellett) voltak. A terméklevétel nélküli periódusok (termék tisztítása, nyomásváltás) hossza jelentékeny (a teljes műveleti idő 14,7%-a).

Minden paraméter, mely a folyamat hatékonyságát mutatja, erre a konfigurációra kedvezőtlenebb. (3. táblázat)

### c. Dupla oszlopos szakaszos sztrippel

A közös, felső tartályból az oszlopba belépő folyadék árama  $L_{\theta}^I=0.72 \times 340=244,8$  mol/h és  $L_{\theta}^{II}=95,2$  mol/h. Az oszlopok nyomása időben nem változik:  $P^I=0,1$  bar és  $P^{II}=1,1$  bar. A termék és tartály-maradék összetételének változása a 7. ábrán látható.



7. ábra A termék és tartály-maradék összetételének változása (DOSZR)

Mindkét termék gyorsan kitisztul (kevesebb, mint 10 perc alatt), és sokáig nagyon tiszta is marad. A tartályösszetétel igen szűk tartományon belül (70,6% és 71,6 % között) marad. Ezzel az új

konfigurációval érhető el a legnagyobb tisztaságok (99,99% és 99,86%) és a legmagasabb kinyerések (92,3% és 97,8%). Csak egy terméklevétel nélküli szakasz van (a művelet elején a desztillátum tisztítása), melynek időtartama a teljes műveleti időnek kevesebb, mint 10%-a (és ez még tovább is csökkenthető). Minden paraméter, amely a folyamat hatékonyságát jellemzi, erre a konfigurációra a legkedvezőbb (3. táblázat).

A magasabb nyomású kolonna kondenzátorának ( $Q_{cond}^{II} = -10,38$  MJ/h,  $T_{cond}^{II} =$  kb. 26,4 °C), valamint az alacsonyabb nyomású kolonna visszaforrólójának ( $Q_{reb}^I = 3,44$  MJ/h,  $T_{reb}^{II} =$  kb. 114 °C) termikus csatolásával további energia megtakarítás érhető el (a rendszer teljes energiaigényének 25%-a).

2. táblázat A különböző konfigurációk eredményei (max. azeotrop)

		BR	BR-BS	DCBR
Víz-kinyerés	%	88,7	82,7	90,2
EDA-kinyerés	%	86,2	82,0	92,6
Víz-tisztaság	mol %	98,99	98,02	99,99
EDA-tisztaság	mol %	99,35	98,03	99,97
Víz-termelés fajlagos energia-igénye ( $SQ/SW_A$ )	MJ/mol	5,98	10,8	3,77
EDA-gyártás fajlagos energia-igénye ( $SQ/SW_B$ )	MJ/mol	4,10	7,28	2,45
Össz-energia	MJ	495,6	836,6	316,6
Össz-idő	min	1039	1790	687
Gyártási idő	min	598	1451	627

3. táblázat A különböző konfigurációk eredményei (min. azeotrop)

		BS	BR-BS	DCBS
EtOH-kinyerés	%	80,4	63,1	92,3
Toluol-kinyerés	%	78,0	94,5	97,8
EtOH-tisztaság	mol %	99,4	98,3	99,99
Toluol-tisztaság	mol %	99,4	98,3	99,86
EtOH-gyártás fajlagos energia-igénye ( $SQ/SW_A$ )	MJ/mol	4,22	15,72	3,08
Toluol-gyártás fajlagos energia-igénye ( $SQ/SW_B$ )	MJ/mol	10,6	25,71	7,11
Össz-energia	MJ	369,4	1080	311,5
Össz-idő	min	877	2274	680
Gyártási idő	min	464	1939	620

## Következtetések

A nyomásváltó desztillációt vizsgáltuk a különböző szakaszos kolonna konfigurációk esetére a CCDCOLUMN professzionális folyamatszimulátor alkalmazásával. A korábbi, megvalósíthatósági vizsgálatok (Modla és társai, 2007) eredményei alapján a következő konfigurációkat vizsgáltuk, és hasonlítottuk össze:

- min. azeotropokra: szakaszos sztripper (SZSZ), duplaoszlopos szakaszos sztripper (DOSZSZ),
- max. azeotropokra: szakaszos rektifikáló (SZR), duplaoszlopos szakaszos rektifikáló (DOSZR) és
- mindkét azeotrop típusra a rektifikálás és sztrippelés időben váltakozó alkalmazását.

Amint az a megvalósíthatósági vizsgálatok alapján várható is volt, a legjobbnak a két új konfiguráció bizonyult (DOSZR és DOSZSZ), melyek nem igényelnek nyomásváltást a folyamat közben. A rektifikáló-sztripper kombinációnál hatékonyabbnak találtuk ez egyszerűbb konfigurációkat (SZR és SZSZ). Azt is megmutattuk, hogy a DOSZR és DOSZSZ oszlopprészei állandósult állapotban üzemeltethetők.

## Irodalom

- Chemstations, "CHEMCAD User Guide" (2006).
- Lewis W. K., "Dehydrating Alcohol and the Like", U.S. Patent, 1,676,700, July 10, (1928).
- Modla G. and P. Lang "Pressure swing distillation in different batch column configurations I. Feasibility Studies", DYCOPS2007.
- Perry R. H., D.W. Green, J.O. Maloney, "Perry's Chemical Engineer's Handbook" Seventh edition, McGraw Hill, New York, (1998)
- Repke J. U., Klein A., Bogle D., Wozny G., "Pressure Swing Batch Distillation for Homogenous Azeotropic Separation", Proceedings of Distillation and Absorption 2006, London, 709-718.

## Jelölések

- $L_0$  reflux móláram [mol/s]
- $P$  nyomás [bar]
- $Q$  fűtési teljesítmény [W]
- $R$  reflux arány [mol/mol]
- $R_S$  visszaforrálási arány [mol/mol]
- $SD$  fejtermék mennyisége [mol]

$SQ$  hőmennyiség [J]

$SW$  termék mennyisége [mol]

$t$  idő [s]

$V$  gőz móláram [mol/s]

$x$  folyadék móltört [mol/mol]

$y$  gőz móltört [mol/mol]

*Görög betűk*

$\eta$  kinyerés

*Alsó Indexek*

A tiszta **A** komponens

av átlag

az azeotrop

B tiszta **B** komponens

V tartály

VR tartálymaradék

W termék

*Felső Indexek*

1, 2 oszloprész index

HP magasabb nyomás

I, II nyomás index

LP alacsonyabb nyomás

vol térfogati

### A Köszönetnyilvánítás

Munkákat az Országos Tudományos Kutatási Alap (OTKA, T-049184) és a Gazdasági Versenyképesség Operatív Program (KPI, GVOP-3.1.1.-2004-05-0544/3) támogatta.

### Függelék

**Gőz-folyadék egyensúlyi paraméterek:**

a. Antoine-konstansok :

$$\ln(p) = A - \frac{B}{T + C}$$

ahol  $p$  gőznyomás [torr],

$T$  hőmérséklet [K]

komponens	A	B	C
Víz	18.3040	3816.40	-46.13
EDA	16.408	3108.5	-72.15
Etanol	18.912	3804.0	-41.68
Toluol	16.266	3242.4	-47.181

b. UNIQUAC paraméterek

Víz (**A**) – EDA (**B**):

i j	$u_{ij}-u_{ji}$ [cal/mol]	$u_{ji}-u_{ii}$ [cal/mol]
<b>A B</b>	-19.6564	-790.52

Etanol (**A**) – Toluol (**B**):

i j	$u_{ij}-u_{ji}$ [cal/mol]	$u_{ji}-u_{ii}$ [cal/mol]
<b>A B</b>	-174.305	961.671