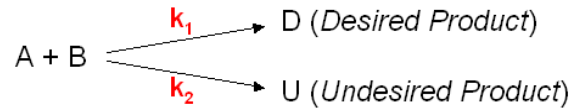


반응공학 I

기말고사

1. [10점] 반응물이 2개인 다음 병렬 반응이 진행되고 있다.



이들 반응의 속도식과 원하지 않는 생성물에 대한 원하는 생성물의 선택성 (S_{DU})은 아래와 같이 표현된다.

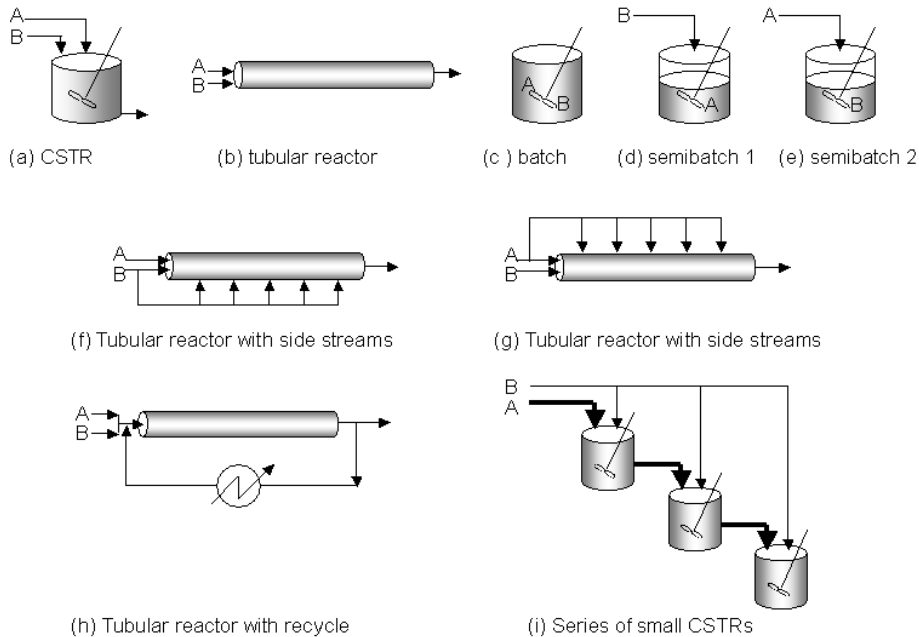
$$-r_A = k_1 C_A^{\alpha_1} C_B^{\beta_1} + k_2 C_A^{\alpha_2} C_B^{\beta_2}$$

$$r_D = k_1 C_A^{\alpha_1} C_B^{\beta_1}$$

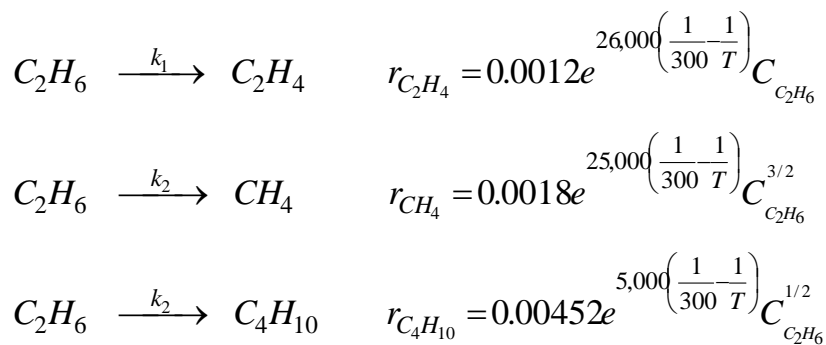
$$r_U = k_2 C_A^{\alpha_2} C_B^{\beta_2}$$

$$S_{DU} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_1}{k_2} C_A^{\alpha_1 - \alpha_2} C_B^{\beta_1 - \beta_2}$$

만약 $k_1 = k_2$ 이고 $\alpha_1 < \alpha_2$, $\beta_1 > \beta_2$ 일 때 S_{DU} 를 최대화할 수 있는 반응계 (reaction scheme)를 아래 그림으로부터 선택하고 그 이유를 설명하라.



2. [10점] 화학공정 (Chemical Process)에서 오염물질 (Pollution)은 일단 만들어지고 환경을 오염시키면 환경을 복원하는 데 막대한 비용이 든다. 따라서 녹색공정 (Green Engineering)의 일환으로 원하지 않는 오염물질을 공정 내에서 원천적으로 줄이기 위한 청정생산 (Cleaner Production)이 최근 보급되고 있다. 사전 오염예방 공정 (Pollution Prevention Process)을 개발하는 데 있어서 화학반응에서 최적의 운전조건을 찾는 것이 매우 중요하다. Ethane ($\text{CH}_3\text{-CH}_3$)를 열분해하면 원하는 생성물인 Ethylene ($\text{CH}_2=\text{CH}_2$)와 원하지 않는 생성물들인 Methane (CH_4)와 Butane (C_4H_{10})이 생성된다. Ethane의 분해 반응식과 반응속도식은 다음과 같을 때, 원하지 않는 Methane (CH_4)와 Butane (C_4H_{10})을 최소화하기 위해서는 아래 반응을 어떤 조건에서 반응을 진행시켜야하는지 설명하라.

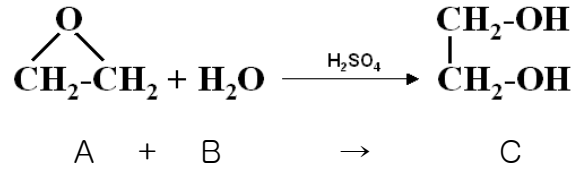


3. [20점] 오존(O_3)이 불활성기체 M내에서 분해하는 반응식은 다음과 같이 표현된다.

$$-r_{\text{O}_3} = \frac{k[\text{M}][\text{O}_3]^2}{[\text{O}_2][\text{M}] + k'[\text{O}_3]}$$

Rule of thumb을 사용하여 여러 개의 elementary reactions을 설정하고 PHHS 가설(pseudo-steady-state hypothesis)을 사용하여 반응 메커니즘을 구하라.

4. [30점] Ethylene glycol (EG)은 Ethylene Oxide (EO)를 수화반응을 통하여 얻는다.



반응차수 (reaction order)와 속도상수 (specific reaction rate)를 얻기 위하여 실험실규모의 회분식 반응기 (batch reactor)에서 등은 하에 이 반응을 수행하여 다음과 같은 결과를 얻었다.

Time (min)	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0
Concentration of EO (kmol/dm ³)	1.000	0.855	0.730	0.624	0.533

일반적으로 물은 과량으로 존재하기 때문에 반응속도식은 다음과 같이 가정할 수 있다.

$$-r_A = kC_A^\alpha C_B^\beta = kC_{B0}^\beta C_A^\alpha = k'C_A^\alpha$$

(1) [10점] 미분법 (Differential Method)을 사용하여 EO에 대한 반응차수 (reaction order)와 속도상수 (specific reaction rate)를 구하고 반응식을 써라.

(2) [20점] 상기 반응을 반응기 부피가 197.3ft³인 CSTR에서 등은 반응을 진행 시키려고 한다. 반응물인 EO는 7.67 lbmol/min의 속도로 공급하며 EO 농도는 1 lb mol/ft³이다. 다른 반응물인 물은 EO 수용액과 같은 부피유량으로 공급된다. 여기에는 촉매로서 0.9wt%의 황산 (H₂SO₄)이 포함되어 있다. 반응 초기에 반응기는 텅 비워있었으며 EO의 농도는 시간이 지나감에 따라 증가하여 정상상태의 농도에 99%에 도달할 때 (C_A=0.99C_{AS}) 걸리는 시간 (Start-up time)을 구하여라.

5. [30점] A의 농도가 1mol/dm^3 인 연속반응이 액상에서 등온으로 다음과 같이 수행된다. 반응은 비가역적이고 A와 B의 농도에 대하여 각각 1차 (first-order)이며 $k_1 = k_2 = 1\text{min}^{-1}$ 이다.



$$-r_A = k_1 C_A$$

$$-r_B = -k_1 C_A + k_2 C_B$$

이 반응을 CSTR과 PFR에서 진행하는 경우 어느 반응기가 더 높은 B의 농도를 얻을 수 있는가? 다음을 따라서 답하라.

- (1) [5점] $k_1 = k_2 = k$ 일 때, CSTR에서의 A와 B의 몰수지를 세우고 설계연산법에 따라서 설계방정식을 세워라.
- (2) [5점] $k_1 = k_2 = k$ 일 때, CSTR에서 C_A 와 C_B 의 농도를 τ 의 함수로 구하여라.
- (3) [5점] $k_1 = k_2 = 1\text{min}^{-1}$ 일 때, CSTR에서의 τ_{opt} 과 $C_{B,\text{max}}$ 을 구하여라.
- (4) [5점] $k_1 = k_2 = k$ 일 때, PFR에서의 A와 B의 몰수지를 세우고 설계연산법에 따라서 설계방정식을 세워라.
- (5) [5점] $k_1 = k_2 = k$ 일 때, PFR에서의 C_A 와 C_B 의 농도를 τ 의 함수로 구하여라.
- (6) [5점] $k_1 = k_2 = 1\text{min}^{-1}$ 일 때, PFR에서의 τ_{opt} 과 $C_{B,\text{max}}$ 을 구하여라.