

12.1-1. Langmuir adsorption isotherms for glucose

주어진 실험데이터를 Langmuir 흡착평형식으로 모델링하고자 한다면, 다음과 같다.

$$q = \frac{q_0 c}{K + c} \quad (1)$$

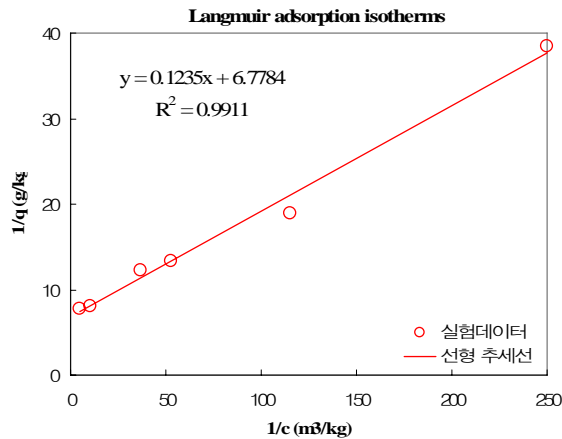
여기에서 q 는 흡착제 기공속에 흡착된 용질의 농도이고, c 는 액상의 용질농도이다. 이 Langmuir 흡착 평형식은 2개의 모델인자 (q_0 and K) 를 갖고 있고, 실험데이터로부터 예측해야 한다. 주어진 실험데이터로부터 두 모델인자를 예측하는 방법은 교재 765쪽에서도 설명하였듯이, 모델식을 역수로 취하고, 정리한 후 기울기와 절편을 이용하는 것이다.

$$\frac{1}{q} = \frac{K}{q_0} \cdot \frac{1}{c} + \frac{1}{q_0} \quad (2)$$

식(2) 는 x 축을 $1/c$, y 축을 $1/q$ 로 할 때, 기울기는 K/q_0 이고, y절편은 $1/q_0$ 인 직선의 식을 뜻한다. 실험데이터를 이용하여 $1/c$ 와 $1/q$ 를 구하면,

c	g/cm	0	0.004	0.0087	0.019	0.027	0.094	0.195
q	g-solute/g-adsorbent	0	0.026	0.053	0.075	0.082	0.123	0.129
1/c	cm/g	-	250	114.9425	52.63158	37.03704	10.6383	5.128205
1/q	g-adsorbent/g-solute	-	38.46154	18.86792	13.33333	12.19512	8.130081	7.751938

엑셀을 이용하여, $1/c$ 에 대하여 $1/q$ 를 그래프로 그리면, 다음과 같다.

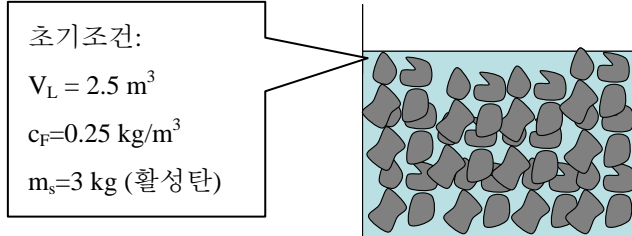


추세선을 추가하여, 직선의 방정식을 구하면, 위 그림에서도 보여주듯이 상관계수 $R^2=0.9911$ 이고, 직선식은 다음과 같다.

$$\frac{1}{q} = 0.1235 \cdot \frac{1}{c} + 6.7784$$

따라서, $\frac{1}{q_0} = 6.7784 \Rightarrow q_0 = 0.1475 \frac{g - glucose}{g - adsorbent}$, $\frac{K}{q_0} = 0.1235 \Rightarrow K = 0.01822 \frac{g - glucose}{cm^3}$ 이다.

12.2-1. 페놀용액의 회분식 흡착

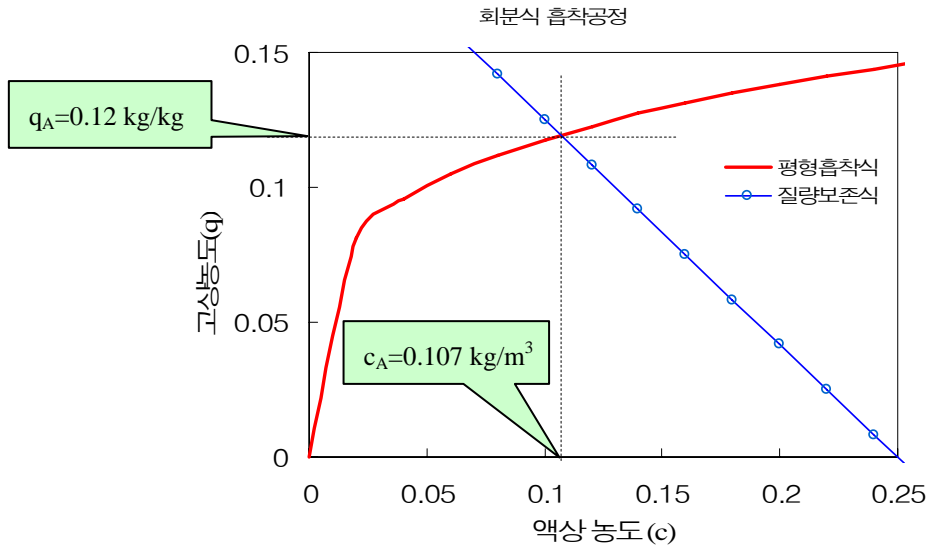


$$q_A = 0.2c_A^{0.23} \text{ where } c = [\text{kg/m}^3], q = [\text{kg/kg}] \quad (3)$$

활성탄에 흡착하는 용질, 페놀은 초기조건과 나중조건에서 같은 질량을 갖어야 하므로, 다음과 같은 질량보존식이 유도된다.

$$\begin{aligned} (\text{초기의 액상/고상에 있는 페놀의 질량}) &= (\text{나중의 액상/고상에 있는 페놀의 질량}) \\ V_L \cdot c_F + m_s \cdot q_F &= V_L \cdot c_A + m_s \cdot q_A \\ 2.5 \text{ m}^3 \cdot 0.25 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} + 3 \text{ kg} \cdot 0 &= 2.5 \text{ m}^3 \cdot c_A + 3 \text{ kg} \cdot q_A \\ 2.5c_A + 3q_A &= 0.625 \end{aligned}$$

위에서 주어진 평형식과 질량보존식을 그래프로 그리면 다음과 같다.



평형식과 질량보존식을 연립하여 풀면, 평형상태의 액상과 고상의 농도를 알 수 있다. 평형식을 질량보존식에 대입하면, 다음과 같다.

$$\begin{aligned} 2.5c_A + 3(0.2c_A^{0.23}) &= 0.625 \\ 2.5c_A + 0.6c_A^{0.23} - 0.625 &= 0 \end{aligned}$$

윗식은 비선형식으로서 시행착오법으로 풀어야 하며, 엑셀의 해 찾기 기능을 이용하면 쉽게 풀 수 있다. 엑셀의 해 찾기 기능으로부터, 최종평형상태에서 액상의 농도, $c_A = 0.107 \text{ kg/m}^3$, 이다. 평형식 (3) 으로부터

고상의 농도는 $q_A=0.12 \text{ kg/kg}$ 이다. 따라서 흡착된 페놀의 양은

$$m_{\text{phenol_in_adsorbent}} = q_A \cdot m_s = 0.12 \frac{\text{kg_phenol}}{\text{kg_adsorbent}} \times 3(\text{kg_adsorbent}) = 0.36(\text{kg_phenol})$$

이고, 초기 용액속의 페놀양은

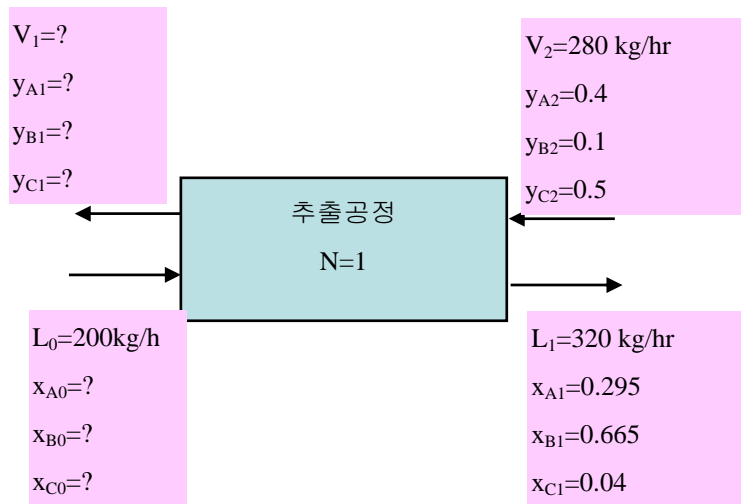
$$m_{\text{phenol_in_solution}} = c_F \cdot V_L = 0.25 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \times 2.5\text{m}^3 = 0.625\text{kg}$$

이다. 따라서 흡착제속으로 분리된 페놀의 비율은

$$\frac{\text{흡착제속으로 흡착된 페놀양}}{\text{초기 용액내 페놀양}} = \frac{0.36}{0.625} = 0.576$$

이다. 즉, 57.6% 의 페놀이 용액속에서 제거되었다.

12.5-3. 단단 용매추출에서의 조성구하기

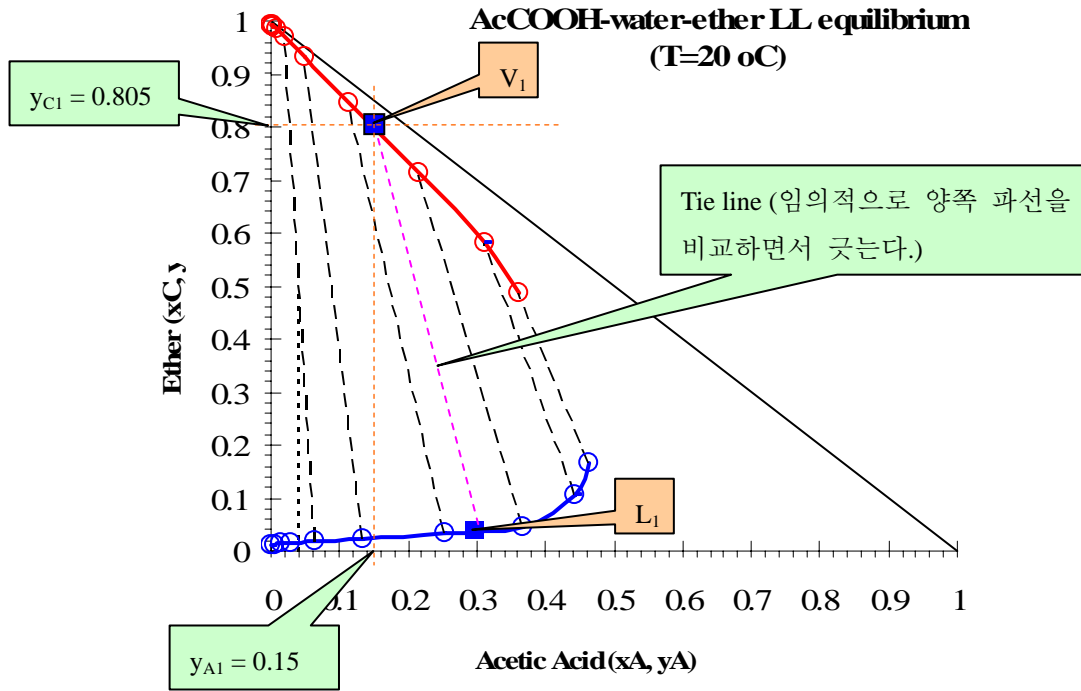


문제에서 알려준 값을 그림으로 표현하면 위 그림과 같다.

원료 L_0 의 조성을 알기위하여, 먼저 L_1 과 평형을 이루고 있는 V_1 의 조성을 삼각평형도로부터 구해야 한다. 다음은 단계적인 풀이순서이다.

- 1) 총괄 물질수지식으로부터, $V_1 = 480 - 320 = 160 \text{ kg/hr}$ 이다.
- 2) 부록에서 주어진 평형데이터를 이용하여, L_1 과 평형을 이루는 V_1 의 조성은 근사적인 tie line 을 임의적으로 다음 그래프와 같이 그려서 구한다. 그래프로부터 V_1 의 조성을 읽으면 그래프에 표시한 바와 같이 다음과 같다.

$$y_{A1} = 0.15, \quad y_{C1} = 0.805, \quad y_{B1} = 0.045$$



3) 원료의 조성은 물질수지식을 이용하여 구할 수 있다. 용질인 아세트산에 대한 성분물질수지식을 세우면 다음과 같다.

$$\begin{aligned}
 L_0 \cdot x_{A0} + V_2 \cdot y_{A2} &= L_1 \cdot x_{A1} + V_1 \cdot y_{A1} \\
 200x_{A0} + 280 \cdot 0.4 &= 320 \cdot 0.295 + 160 \cdot 0.15 \\
 x_{A0} &= \frac{320 \cdot 0.295 + 160 \cdot 0.15 - 280 \cdot 0.4}{200} \\
 &= 0.032
 \end{aligned}$$

유기용매인 에테르에 대하여 성분물질수지식을 세우면 다음과 같다.

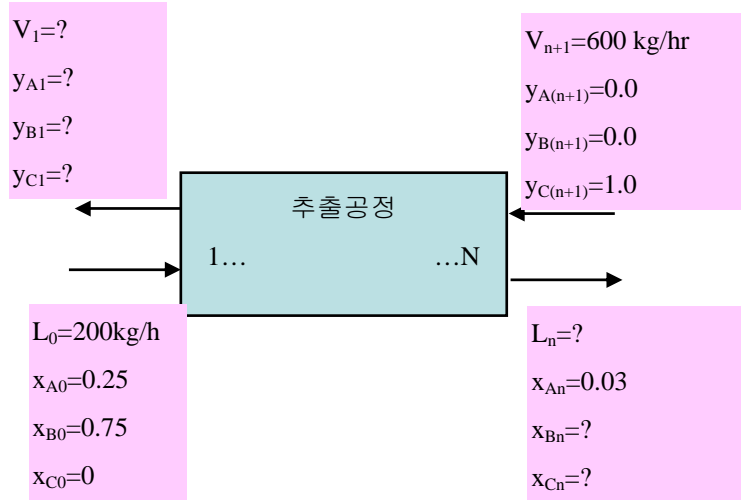
$$\begin{aligned}
 L_0 \cdot x_{C0} + V_2 \cdot y_{C2} &= L_1 \cdot x_{C1} + V_1 \cdot y_{C1} \\
 200x_{C0} + 280 \cdot 0.5 &= 320 \cdot 0.04 + 160 \cdot 0.805 \\
 x_{C0} &= \frac{320 \cdot 0.04 + 160 \cdot 0.805 - 280 \cdot 0.5}{200} \\
 &= 0.008
 \end{aligned}$$

따라서 물의 질량분율은

$$x_{B0} = 1 - (x_{A0} + x_{C0}) = 0.96$$

이다.

12.7-2. 다단 용매추출에서의 조성구하기



문제에서 알려준 값을 그림으로 표현하면 위 그림과 같다.

그림에서 보듯이 유출되는 수용액상의 유량 (L_n), 그리고 두 조성 (x_{Bn} , x_{Cn}) 을 구해야 되고, 유출되는 유기용매상의 유량 및 조성도 구해야 한다. 이를 위한 단계적인 풀이순서는 다음과 같다.

- 1) 삼각 평형도를 교재에 있는 부록 3 (964쪽) 의 데이터를 이용하여 그린다.
- 2) 이 삼각평형도 위에 L_0 점, V_{n+1} 점, 그리고 혼합 평균점 (M) 을 표시한다.
- 3) 유출 수용액상의 알려진 조성 (x_{An}) 을 이용하여, L_n 점을 찾는다.
- 4) 질량보존식에 의하여, L_n 점과 M 점을 연결한 선이 평형선과 만나는 점이 V_1 이다.
- 5) L_n 점과 V_1 점의 좌표를 읽어서 조성을 구한다.
- 6) 총괄물질수지식과 용질에 대한 성분물질수지식을 이용하여 V_1 과 L_n 의 유량을 구한다.

자세한 풀이과정은 다음과 같다.

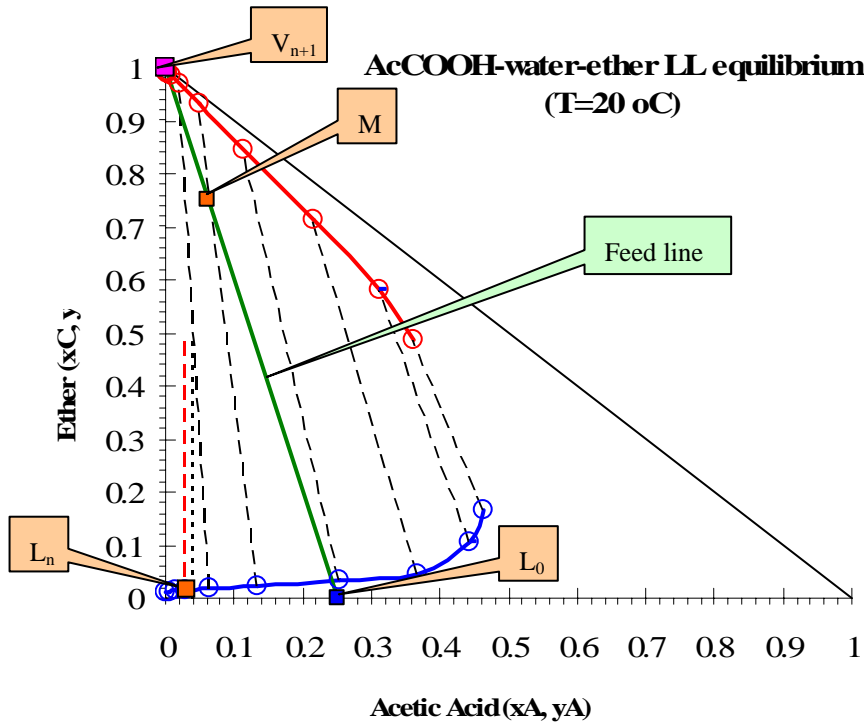
- 1) 부록에서 주어진 평형데이터를 이용하여, 다음과 같은 그래프를 그릴 수 있다.
- 2) 혼합 평균점 M 은 다음과 같이 구할 수 있다.

$$M = L_0 + V_{n+1}$$

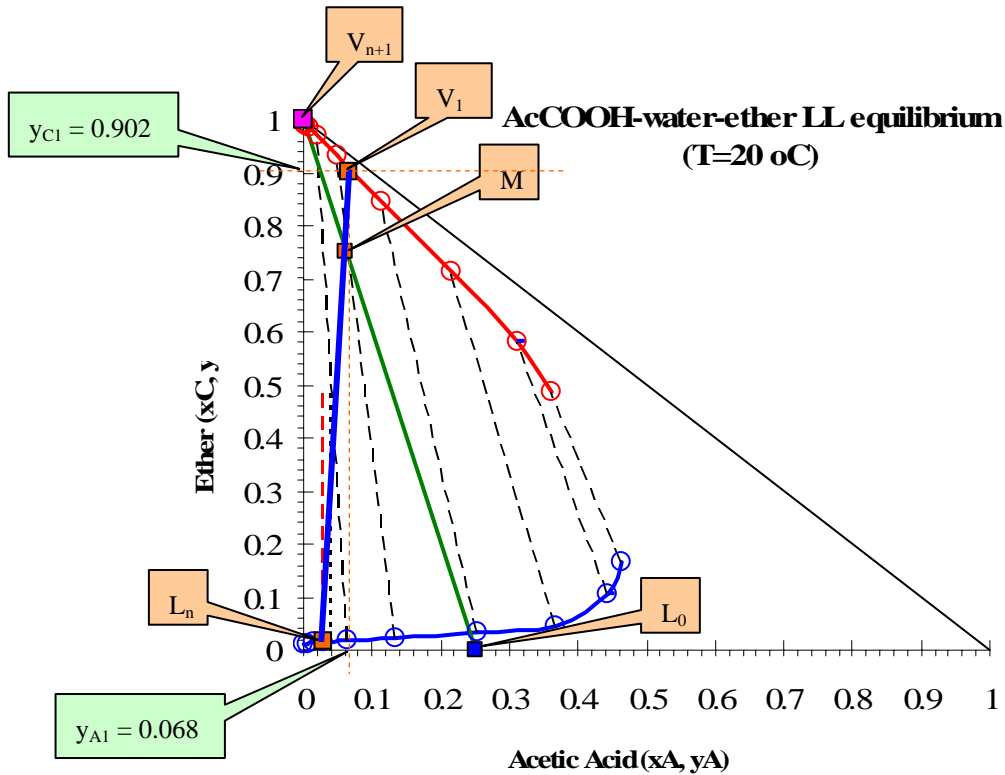
$$x_{AM} = \frac{L_0 \cdot x_{A0} + V_{n+1} \cdot y_{A(n+1)}}{M} = \frac{200 \cdot 0.25 + 600 \cdot 0}{800} = 0.0625$$

$$x_{CM} = \frac{L_0 \cdot x_{C0} + V_{n+1} \cdot y_{C(n+1)}}{M} = \frac{200 \cdot 0 + 600 \cdot 1}{800} = 0.75$$

삼각평형도에 L_0 점, V_{n+1} 점, 그리고 혼합 평균점 (M) 이 표시되었다.



- 3) 유출 수용액상의 알려진 조성 (x_{An}) 을 이용하여, L_n 점을 찾는다.
 4) 질량보존식에 의하여, L_n 점과 M 점을 연결한 선이 평형선과 만나는 점이 V_1 이다.



- 5) L_n 점과 V_1 점의 좌표를 읽어서 조성을 구하면,
 L_n 점은 $x_{An} = 0.03$, $x_{Cn} = 0.019$, $x_{Bn} = 0.951$ 이고, V_1 점은 $y_{A1} = 0.068$, $y_{C1} = 0.902$, $y_{B1} = 0.03$ 이다.

6) 총괄물질수지식과 용질에 대한 성분물질수지식을 이용하여 V_1 과 L_n 의 유량을 구한다. 총괄물질수지식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} L_0 + V_{n+1} &= L_n + V_1 \\ 200 + 600 &= L_n + V_1 \\ L_n + V_1 &= 800 \end{aligned}$$

아세트산에 대한 성분물질수지식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} L_0 \cdot x_{A0} + V_{n+1} \cdot y_{A(n+1)} &= L_n \cdot x_{An} + V_1 \cdot y_{A1} \\ 200 \cdot 0.25 + 600 \cdot 0 &= L_n \cdot 0.03 + V_1 \cdot 0.068 \\ 0.03L_n + 0.068V_1 &= 50 \end{aligned}$$

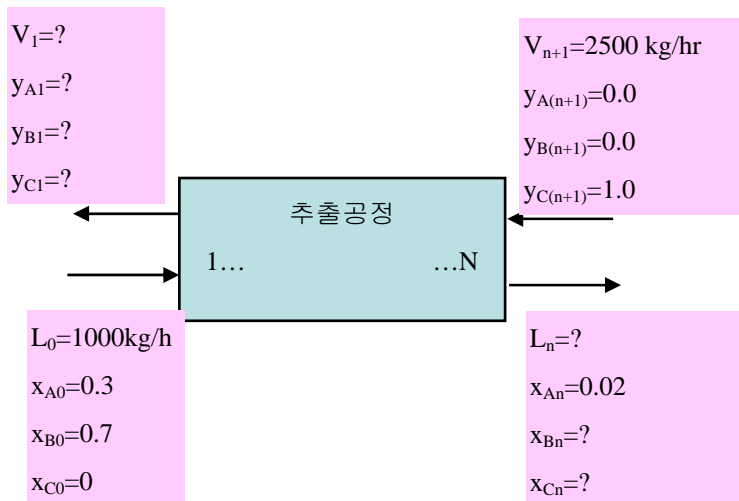
위 두식은 식 2개에 변수가 2개인 경우로, 행렬로 표현하여 역행렬을 이용하여 풀거나, 두식을 연립하여 대입법으로 풀 수 있다. 행렬로 풀 경우,

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0.03 & 0.068 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_n \\ V_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 800 \\ 50 \end{pmatrix}$$

따라서

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} L_n \\ V_1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0.03 & 0.068 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 800 \\ 50 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 115.8 \\ 684.2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

12.7-4. 다단 용매추출에서의 평형단수 구하기



문제에서 알려준 값을 그림으로 표현하면 위 그림과 같다.

평형단수를 구하기 전에 먼저 그림에서 보듯이 유출되는 수용액상의 유량 (L_n), 그리고 두 조성 (x_{Bn} , x_{Cn}) 을 구해야 되고, 유출되는 유기용매상의 유량 및 조성도 구해야 한다. 이를 위한 단계적인 풀이순서는 12.7-2 번 문제와 동일하다.

Part I: 유량 및 조성구하기

- 1) 삼각 평형도를 교재에 있는 부록 3 (964쪽) 의 데이터를 이용하여 그린다.
- 2) 이 삼각평형도 위에 L_0 점, V_{n+1} 점, 그리고 혼합 평균점 (M) 을 표시한다.
- 3) 유출 수용액상의 알려진 조성 (x_{An}) 을 이용하여, L_n 점을 찾는다.
- 4) 질량보존식에 의하여, L_n 점과 M 점을 연결한 선이 평형선과 만나는 점이 V_1 이다.
- 5) L_n 점과 V_1 점의 좌표를 읽어서 조성을 구한다.
- 6) 총괄물질수지식과 용질에 대한 성분물질수지식을 이용하여 V_1 과 L_n 의 유량을 구한다.

자세한 풀이과정은 다음과 같다.

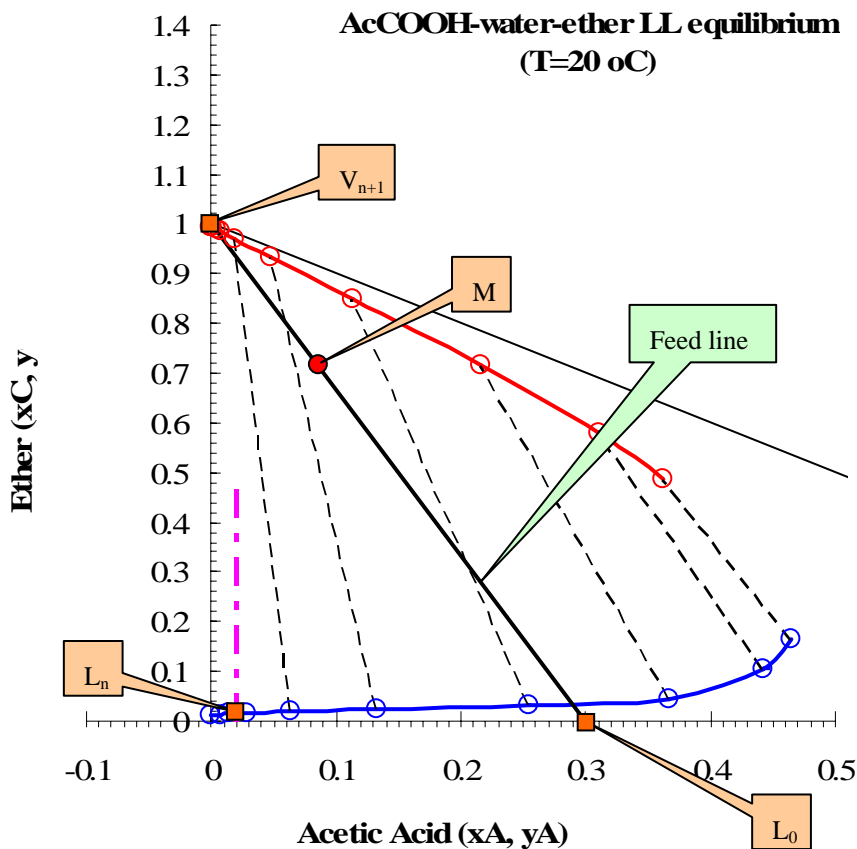
- 1) 부록에서 주어진 평형데이터를 이용하여, 다음과 같은 그래프를 그릴 수 있다.
- 2) 혼합 평균점 M 은 다음과 같이 구한다.

$$M = L_0 + V_{n+1}$$

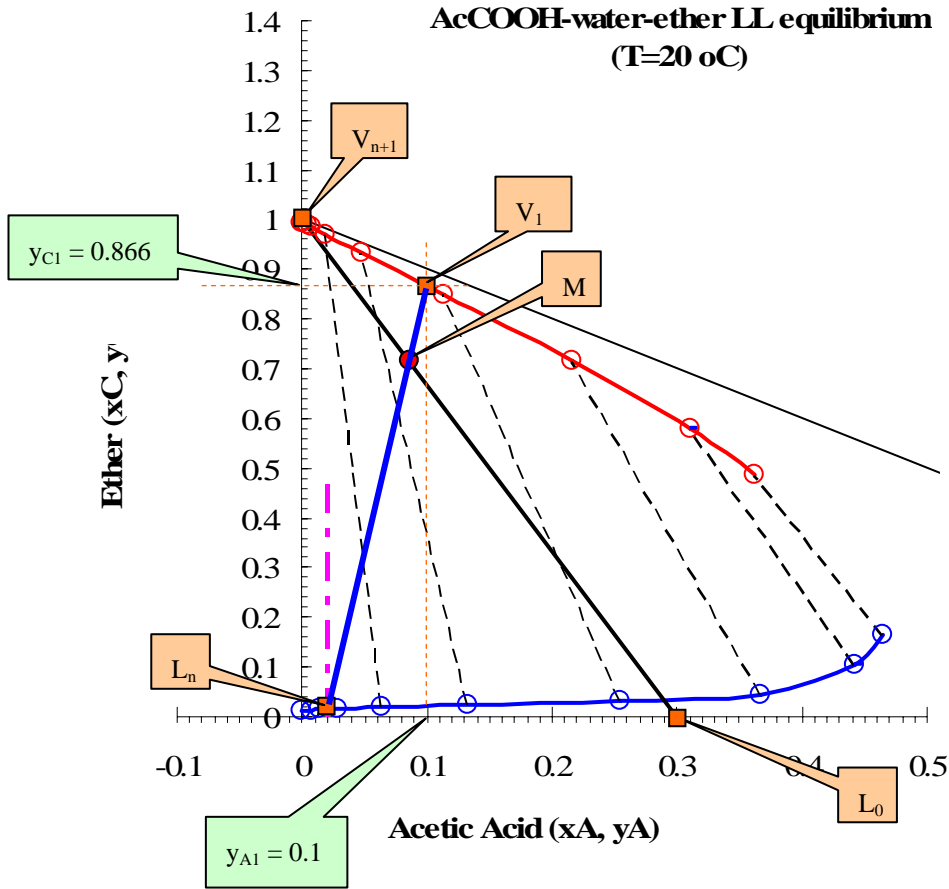
$$x_{AM} = \frac{L_0 \cdot x_{A0} + V_{n+1} \cdot y_{A(n+1)}}{M} = \frac{1000 \cdot 0.3 + 2500 \cdot 0}{3500} = 0.0857$$

$$x_{CM} = \frac{L_0 \cdot x_{C0} + V_{n+1} \cdot y_{C(n+1)}}{M} = \frac{1000 \cdot 0 + 2500 \cdot 1}{3500} = 0.7143$$

삼각평형도에 L_0 점, V_{n+1} 점, 그리고 혼합 평균점 (M) 이 표시되었다.



- 3) 유출 수용액상의 알려진 조성 (x_{An}) 을 이용하여, L_n 점을 찾는다.
 4) 질량보존식에 의하여, L_n 점과 M 점을 연결한 선이 평형선과 만나는 점이 V_1 이다.



- 5) L_n 점과 V_1 점의 좌표를 읽어서 조성을 구하면,
 L_n 점은 $x_{An} = 0.02$, $x_{Cn} = 0.018$, $x_{Bn} = 0.962$ 이고, V_1 점은 $y_{A1} = 0.1$, $y_{C1} = 0.866$, $y_{B1} = 0.034$ 이다.

- 6) 총괄물질수지식과 용질에 대한 성분물질수지식을 이용하여 V_1 과 L_n 의 유량을 구한다. 총괄물질수지식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} L_0 + V_{n+1} &= L_n + V_1 \\ 1000 + 2500 &= L_n + V_1 \\ L_n + V_1 &= 3500 \end{aligned}$$

아세트산에 대한 성분물질수지식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} L_0 \cdot x_{A0} + V_{n+1} \cdot y_{A(n+1)} &= L_n \cdot x_{An} + V_1 \cdot y_{A1} \\ 1000 \cdot 0.3 + 2500 \cdot 0 &= L_n \cdot 0.02 + V_1 \cdot 0.1 \\ 0.02L_n + 0.1V_1 &= 300 \end{aligned}$$

위 두식은 식 2개에 변수가 2개인 경우로, 행렬로 표현하여 역행렬을 이용하여 풀거나, 두식을 연립하여 대입법으로 풀 수 있다. 행렬로 풀 경우,

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0.02 & 0.1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_n \\ V_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3500 \\ 300 \end{pmatrix}$$

따라서

$$\begin{pmatrix} L_n \\ V_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0.02 & 0.1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 3500 \\ 300 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 625 \\ 2875 \end{pmatrix}$$

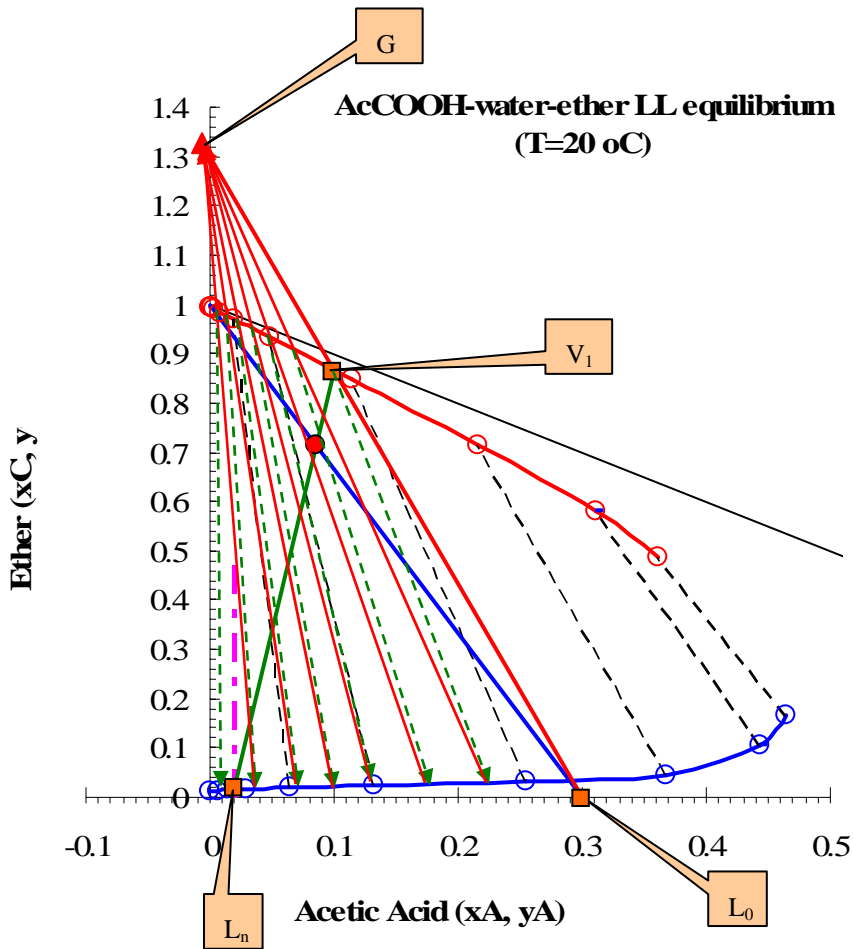
Part II: 평형단수 구하기

1) 각 단에서의 유량의 차이값을 의미하는 G 점을 구한다.

$$x_{AG} = \frac{L_0 \cdot x_{A0} - V_1 \cdot x_{A1}}{G} = \frac{1000 \cdot 0.3 - 2875 \cdot 0.1}{-1875} = -0.0067$$

$$x_{CG} = \frac{L_0 \cdot x_{C0} - V_1 \cdot x_{C1}}{G} = \frac{1000 \cdot 0 - 2875 \cdot 0.866}{-1875} = 1.328$$

2) L_0 -G 을 출발하여 L_n -G 까지의 평형단수를 구한다.



위 삼각평형도에서 평형점을 잇는 tie line 은 이미 그려져 있는 파선을 기준으로 임의적으로 그린다. 그림에서 약 7단의 평형단수가 나온다.

12.11-2. 결정화 공정에서 용해도를 이용한 결정양 구하기.

A 를 KCl 이라고 한다면, 문제에서 주어진 값은

$$F_A = 1000\text{kg}$$

$$T_0 = 363\text{ K}, x_{A0}^* = 0.35\text{ kg_KCl/kg_water}$$

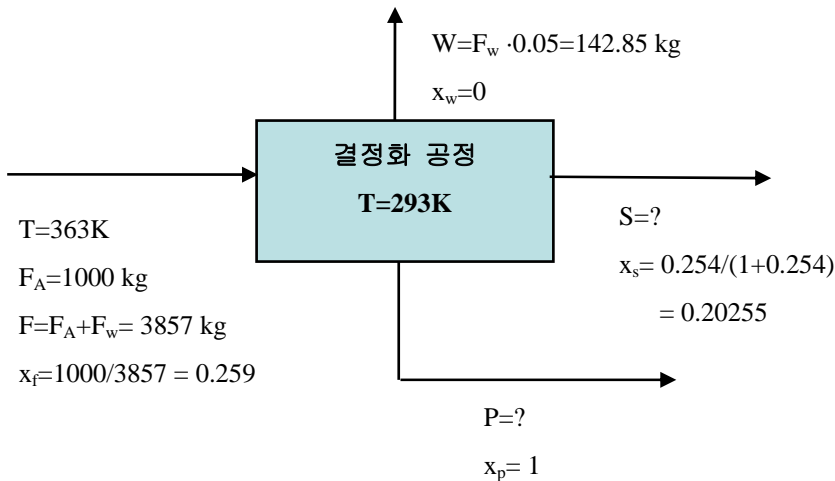
$$T_1 = 293\text{ K}, x_{A1}^* = 0.254\text{ kg_KCl/kg_water}$$

a) 초기 363 K 에서 1000 kg 의 염화칼륨 포화용액을 만들기 위해 필요한 물의 양을 F_w 라고 하면,

$$0.35 \frac{\text{kg_KCl}}{\text{kg_water}} = \frac{1000\text{ kg_KCl}}{F_w}$$

$$F_w = \frac{1000}{0.35} = 2857.14\text{ kg_water}$$

b) 냉각중 원래 물의 5% 가 증발하였을 때 생긴 결정양을 구하기 위하여 다음과 같은 결정화 공정의 개념도를 그려서, 물질수지식을 세운다.



먼저 정상상태에서 총괄물질수지식을 세우면,

$$F = W + S + P$$

$$3857 = 142.85 + S + P$$

두번째로 정상상태에서 염화칼륨에 대한 성분물질수지식을 세우면,

$$F \cdot x_f = W \cdot x_w + S \cdot x_s + P \cdot x_p$$

$$1000 = 0 + 0.20255S + P$$

따라서 위 두식은 변수 2개에 식이 2개인 다음과 같은 연립방정식이다.

$$S + P = 3714.15$$

$$0.20255S + P = 1000$$

행렬을 이용하여 풀면, 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0.20255 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3714.15 \\ 1000 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} S \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0.20255 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 3714.15 \\ 1000 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} S \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3403.5 \\ 310.6 \end{pmatrix}$$

즉, 363K 온도에서 1000kg 의 염화칼륨은 293 K 의 결정화 공정을 거치면서 310.6 kg 의 결정이 형성된다. 따라서 이 결정화 공정의 수율은 31 % 이다.