전산 평형 열역학

FACS
Functional analysis of complex systems

- 담당교수: 임영일

  전화번호: 670-5207, 연구실: N110

  email: limyi@hknu.ac.kr

  Homepage: http://hknu.ac.kr/~limyi/index.htm
- 강의실: **N116**
- 교재: matlab 을 이용한 화학공학 열역학,

  김헌외 4인 공정, 아진
- 평가방법:

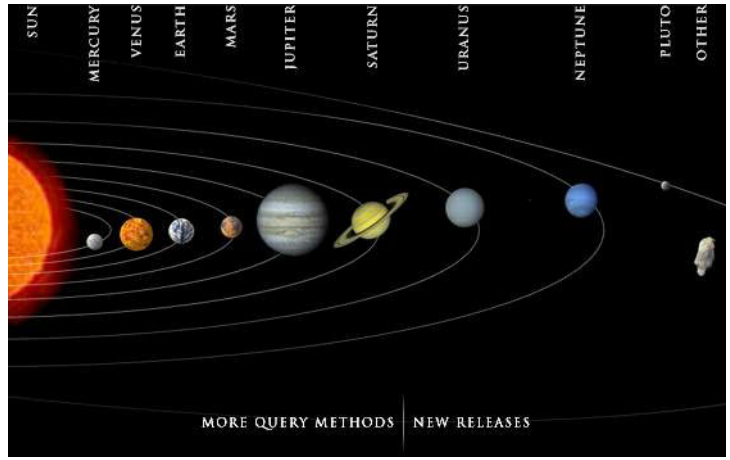
  –출석(8), 과제(12), 발표(0), 중간(40), 기말(40)

- 연구주제: 복잡한 화학/생물 공정의 기능적 해석

  FACS (functional analysis of complex systems)

열역학 개관

- 에너지 보존법칙: 지구와 태양계의 에너지 보존 (닫힌계와 열린계)



- 엔트로피 증가 법칙: 우주의 기원과 팽창

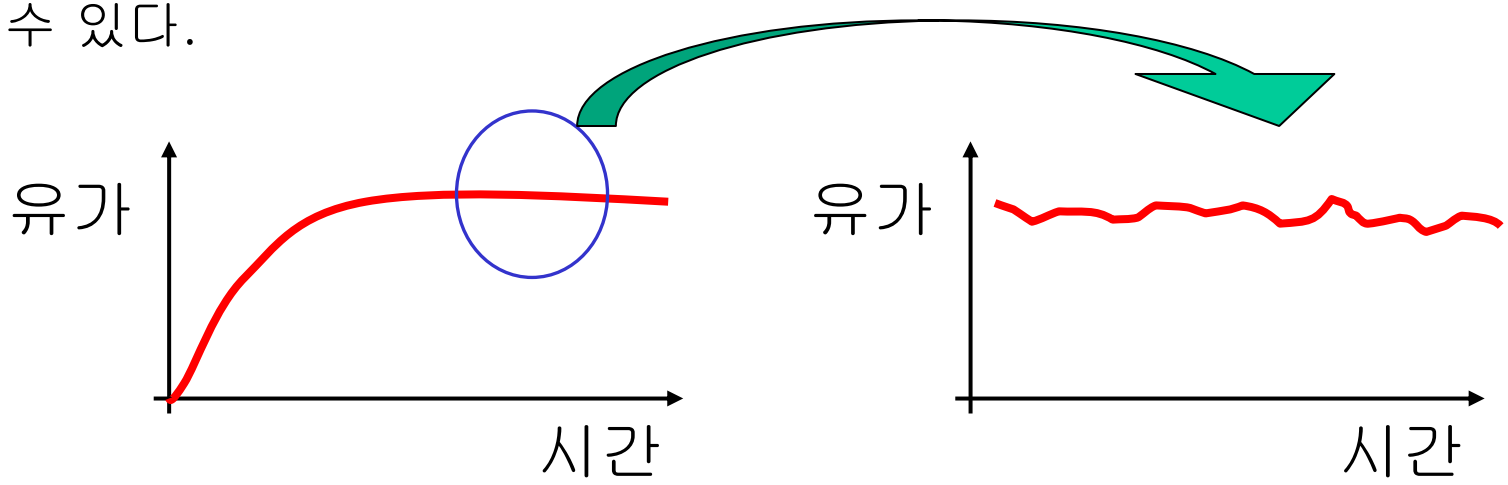
열역학의 응용 목적

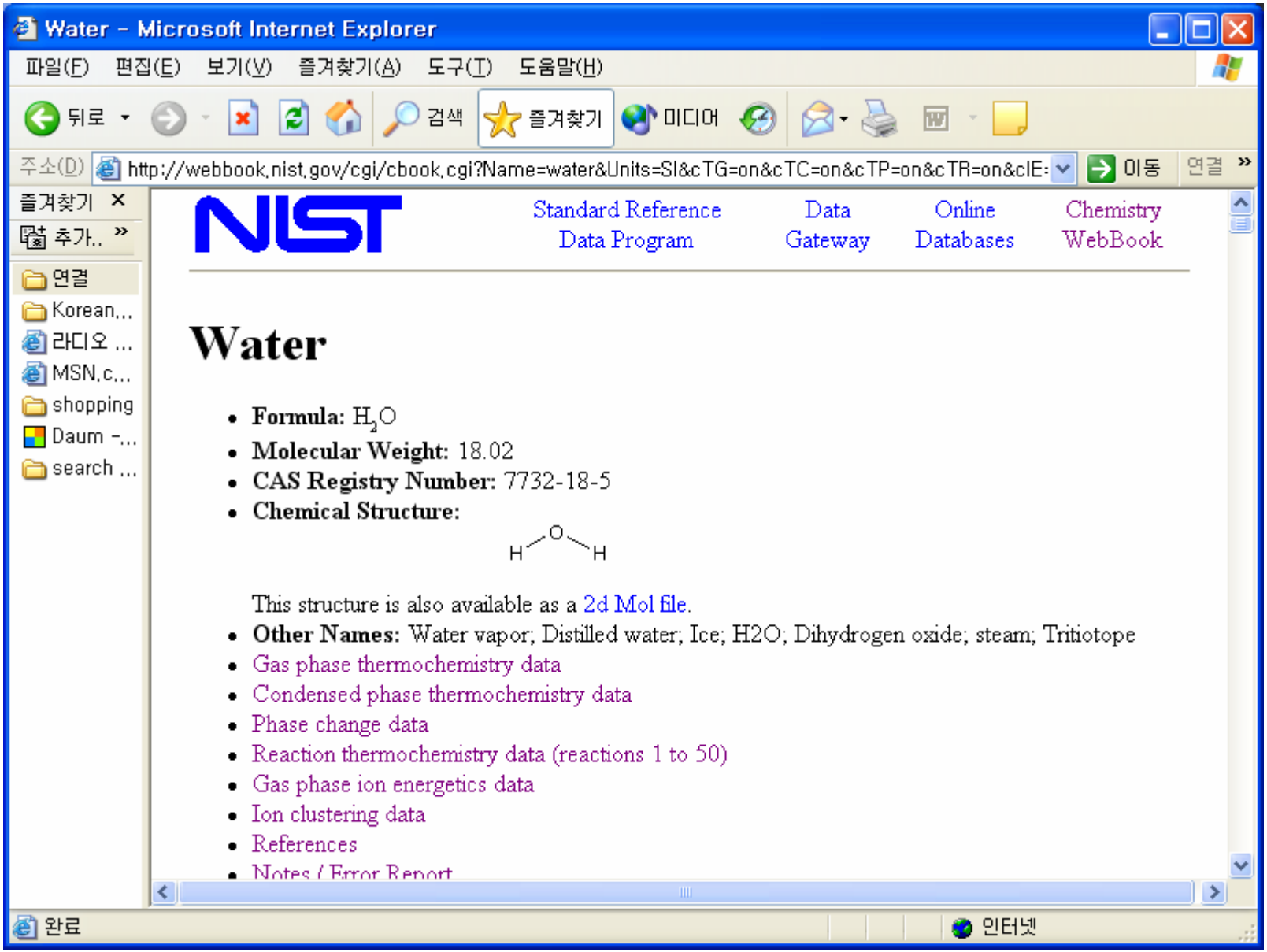
FACS
Functional analysis of complex systems

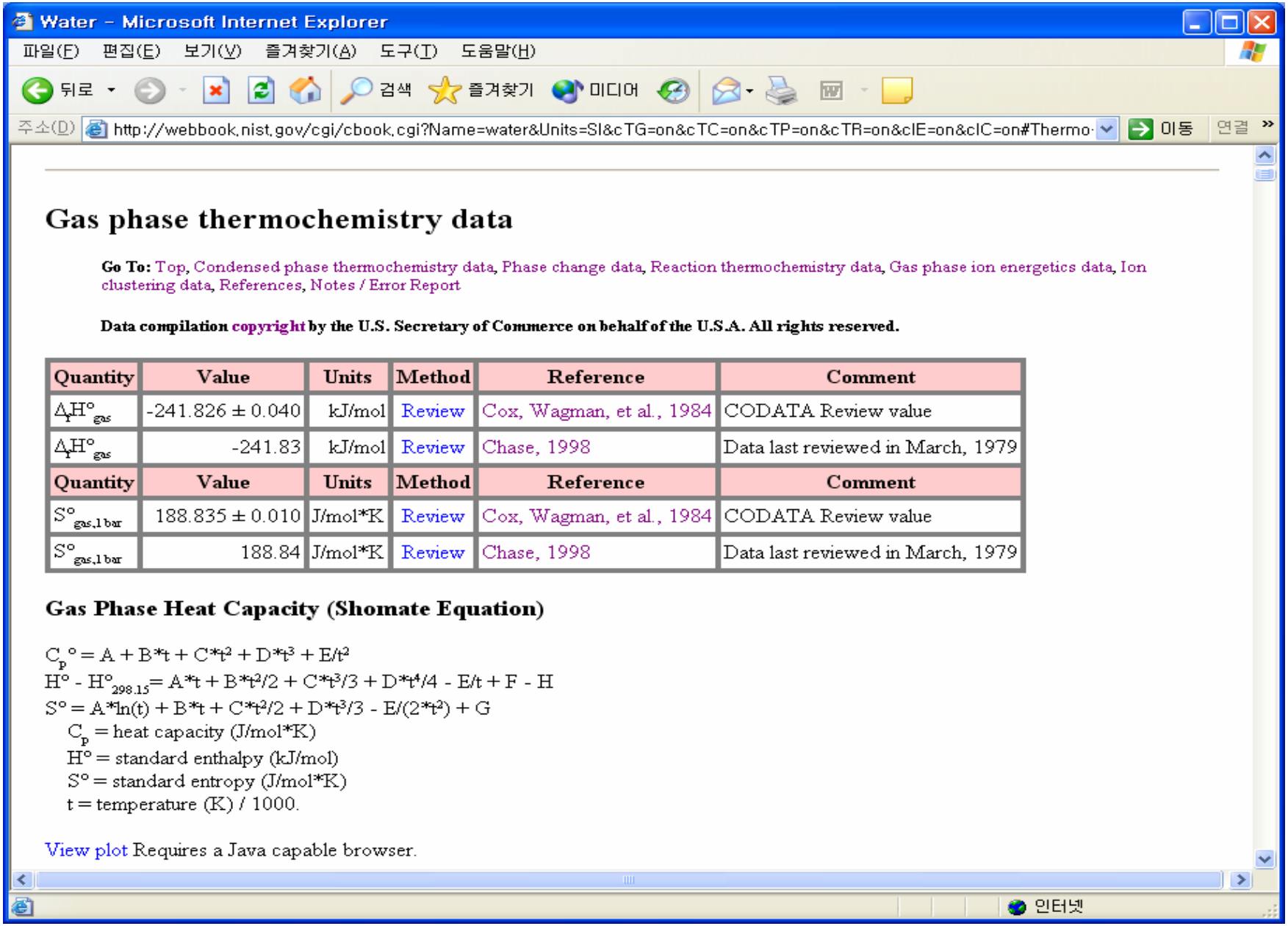
- 화학/생물 분자에 관한 기본 물성치에 관한 정보 구축 (database: NIST, DIPPR)
- 물성치 예측모델 개발
- 물성치 예측
  - NIST: http://webbook.nist.gov/chemistry/,
  - 한국화학공학정보센터: http://www.cheric.org
- 상평형의 이론적 접근
- 활동도 (액상내 실질 농도) 예측
- 공정개발이나 합성에 응용

평형이란?

- 거시적 관점에서는 시간에 따라 어떤 상태가 유지되는 것으로, 가장 안정한 상태 또는 에너지가 최소인 상태를 말한다.
- 미시적으로는 상태 A 에서 상태 B 로 또는 상태 B 에서 상태 A 로 변화가, 작은 시간동안, 거의 비슷한 정도를 유지하는 것을 말한다 (분자상태적 관점).
- 예로서, 유가가 어느 일정기간 동안 안정세를 유지하였다면, 이는 석유의 공급량과 수요량의 평형에 기인한 평형상태라고 말할 수 있다.




Water - Microsoft Internet Explorer
파일(F) 편집(E) 보기(V) 즐겨찾기(A) 도구(T) 도움말(H)
뒤로 검색 즐겨찾기 미디어
주소(D) http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?Name=water&Units=SI&cTG=on&cTC=on&cTP=on&cTR=on&cIE=
이동 연결
즐겨찾기
추가..
연결
Korean...
라디오 ...
MSN.c...
shopping
Daum -...
search ...
NIST
Standard Reference Data Program
Data Gateway
Online Databases
Chemistry WebBook
Water
Formula: H2O
Molecular Weight: 18.02
CAS Registry Number: 7732-18-5
Chemical Structure:
H O H
This structure is also available as a 2d Mol file.
Other Names: Water vapor; Distilled water; Ice; H2O; Dihydrogen oxide; steam; Tritiotope
Gas phase thermochemistry data
Condensed phase thermochemistry data
Phase change data
Reaction thermochemistry data (reactions 1 to 50)
Gas phase ion energetics data
Ion clustering data
References
Notes / Error Report
완료
인터넷


Water - Microsoft Internet Explorer
파일(F) 편집(E) 보기(V) 즐겨찾기(A) 도구(T) 도움말(H)
뒤로 검색 즐겨찾기 미디어
주소(D) http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?Name=water&Units=SI&cTG=on&cTC=on&cTP=on&cTR=on&cIE=on&cIC=on#Thermo
이동 연결
Gas phase thermochemistry data
Go To: Top, Condensed phase thermochemistry data, Phase change data, Reaction thermochemistry data, Gas phase ion energetics data, Ion clustering data, References, Notes / Error Report
Data compilation copyright by the U.S. Secretary of Commerce on behalf of the U.S.A. All rights reserved.
Quantity Value Units Method Reference Comment
ΔfH°gas -241.826 ± 0.040 kJ/mol Review Cox, Wagman, et al., 1984 CODATA Review value
ΔfH°gas -241.83 kJ/mol Review Chase, 1998 Data last reviewed in March, 1979
Quantity Value Units Method Reference Comment
S°gas,1 bar 188.835 ± 0.010 J/mol*K Review Cox, Wagman, et al., 1984 CODATA Review value
S°gas,1 bar 188.84 J/mol*K Review Chase, 1998 Data last reviewed in March, 1979
Gas Phase Heat Capacity (Shomate Equation)
Cp° = A + B*t + C*t2 + D*t3 + E/t2
H° - H°298.15 = A*t + B*t2/2 + C*t3/3 + D*t4/4 - E/t + F - H
S° = A*ln(t) + B*t + C*t2/2 + D*t3/3 - E/(2*t2) + G
Cp = heat capacity (J/mol*K)
H° = standard enthalpy (kJ/mol)
S° = standard entropy (J/mol*K)
t = temperature (K) / 1000.
View plot Requires a Java capable browser.
인터넷

Condensed phase thermochemistry data

Go To: Top, Gas phase thermochemistry data, Phase change data, Reaction thermochemistry data, Gas phase ion energetics data, Ion clustering data, References, Notes / Error Report

Quantity	Value	Units	Method	Reference	Comment
$\Delta_f H°_{liquid}$	-285.830 ± 0.040	kJ/mol	Review	Cox, Wagman, et al., 1984	CODATA Review value
$\Delta_f H°_{liquid}$	-285.83	kJ/mol	Review	Chase, 1998	Data last reviewed in March, 1979
Quantity	**Value**	**Units**	**Method**	**Reference**	**Comment**
$S°_{liquid}$	69.95 ± 0.03	J/mol*K	Review	Cox, Wagman, et al., 1984	CODATA Review value
Quantity	**Value**	**Units**	**Method**	**Reference**	**Comment**
$S°_{liquid,1\ bar}$	69.95	J/mol*K	Review	Chase, 1998	Data last reviewed in March, 1979

Liquid Phase Heat Capacity (Shomate Equation)

$C_p° = A + B*t + C*t^2 + D*t^3 + E/t^2$

$H° - H°_{298.15} = A*t + B*t^2/2 + C*t^3/3 + D*t^4/4 - E/t + F - H$

$S° = A*\ln(t) + B*t + C*t^2/2 + D*t^3/3 - E/(2*t^2) + G$

C_p = heat capacity (J/mol*K)

$H°$ = standard enthalpy (kJ/mol)

$S°$ = standard entropy (J/mol*K)

t = temperature (K) / 1000.

Phase change data

Go To: Top, Gas phase thermochemistry data, Condensed phase thermochemistry data, References, Notes / Error Report

Data compiled as indicated in comments:
TRC - Thermodynamics Research Center, NIST Boulder Laboratories, M. Frenkel director

Quantity	Value	Units	Method	Reference	Comment
T_{boil}	373.17 ± 0.04	K	AVG	N/A	Average of 7 values; Individual data points
Quantity	**Value**	**Units**	**Method**	**Reference**	**Comment**
T_{triple}	0.00136	K	N/A	Hallbrucker, Mayer, et al., 1989	Glass phase; Uncertainty assigned by TRC = 10. K; the GL state is vapor deposited amorphous water, the GL-L transitions starts at 136 K and has a range of 14 K; *TRC*
Quantity	**Value**	**Units**	**Method**	**Reference**	**Comment**
P_{triple}	0.0061	bar	N/A	Sato, Watanabe, et al., 1991	Uncertainty assigned by TRC = 0.01 bar; *TRC*
Quantity	**Value**	**Units**	**Method**	**Reference**	**Comment**
T_c	647. ± 2.	K	AVG	N/A	Average of 7 values; Individual data points
Quantity	**Value**	**Units**	**Method**	**Reference**	**Comment**
P_c	220.6400	bar	N/A	Sato, Watanabe, et al., 1991	Uncertainty assigned by TRC = 0.05 bar; *TRC*
P_c	220.60	bar	N/A	Brunner, 1990	Uncertainty assigned by TRC = 0.12 bar; *TRC*

Water - Microsoft Internet Explorer

파일(F) 편집(E) 보기(V) 즐겨찾기(A) 도구(T) 도움말(H)

뒤로 검색 즐겨찾기 미디어

주소(D) http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C7732185&Units=SI&Mask=7&Type=ANTOINE&Plot=on#ANTOINE 이동 연결

Antoine Equation Parameters

Go To: Top, References, Notes / Error Report

$\log_{10}(P) = A - (B / (T + C))$

P = vapor pressure (bar)

T = temperature (K)

Temperature (K)	A	B	C
273. - 303.	5.40221	1838.675	-31.1
304. - 333.	5.20389	1733.926	-39.4
334. - 363.	5.07680	1659.793	-45.8
344. - 373.	5.08354	1663.125	-45.6
293. - 343.	6.20963	2354.731	7.1

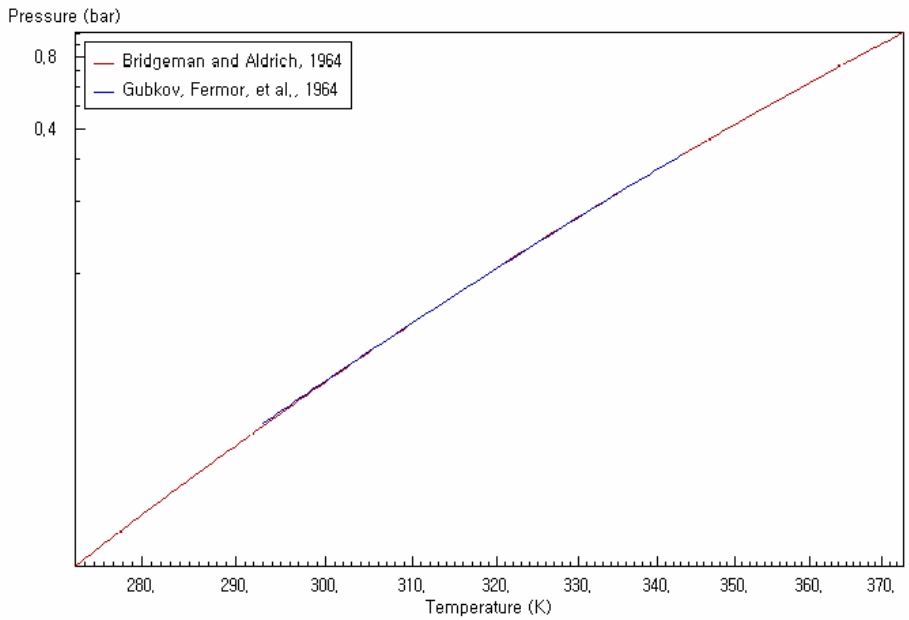
Water - Microsoft Internet Explorer

파일(F) 편집(E) 보기(V) 즐겨찾기(A) 도구(T) 도움말(H)

뒤로 검색 즐겨찾기 미디어

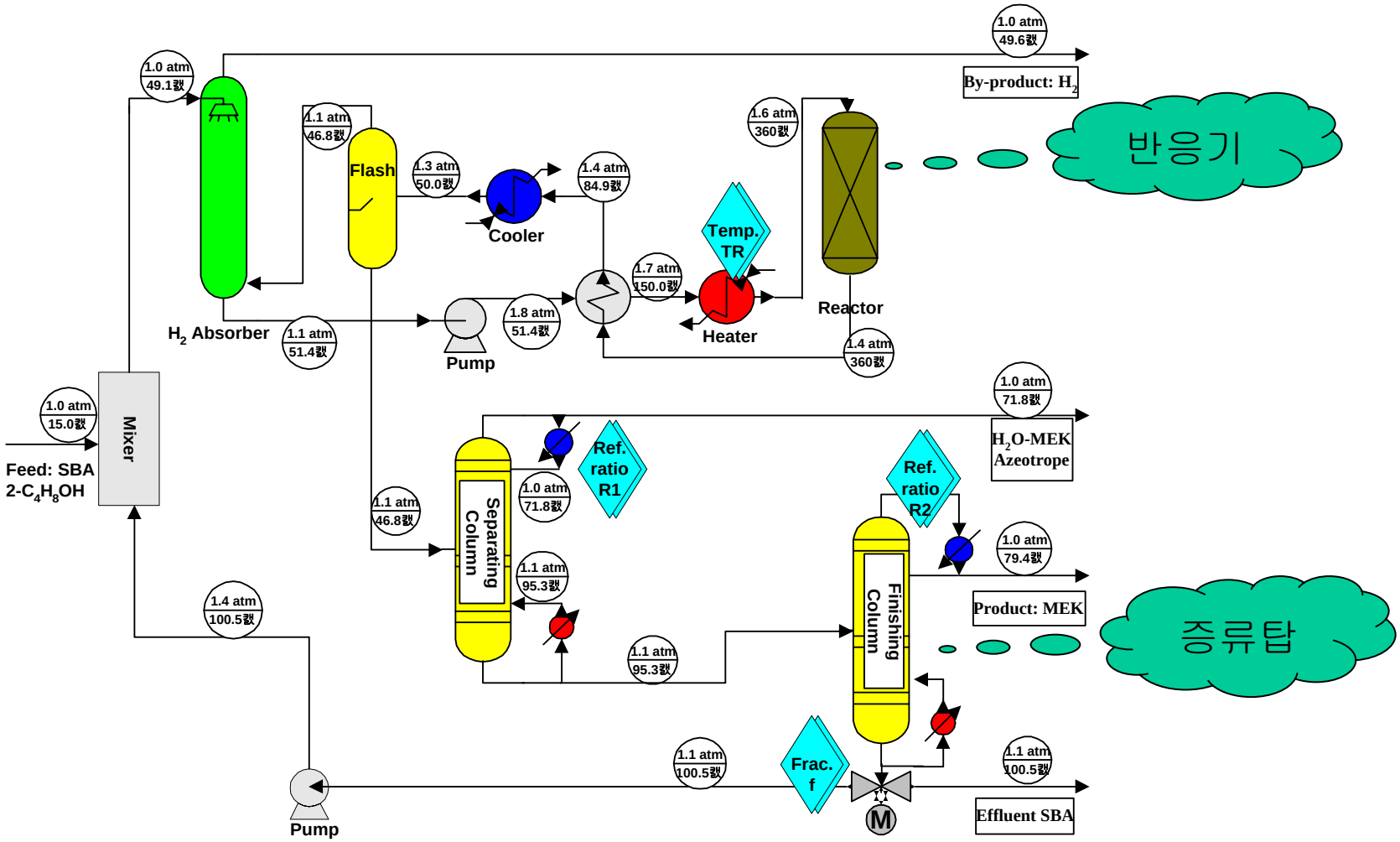
주소(D) http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C7732185&Units=SI&Mask=7&Type=ANTOINE&Plot=on#ANTOINE 이동 연결

Help



인터넷

MEK (methyl-ethyl-ketone, C_4H_8O) 공정 흐름도



화학/생물 공정 흐름도

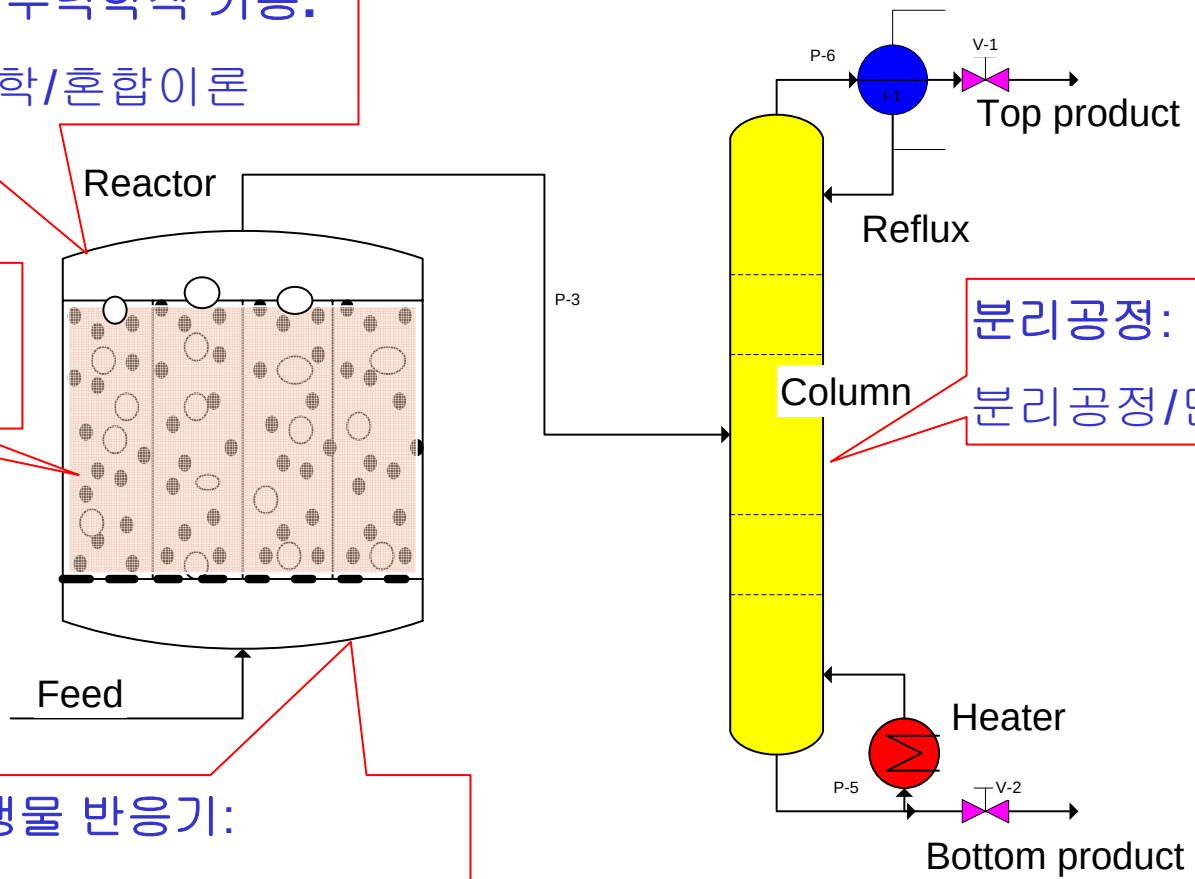
FACS
Functional analysis of complex systems

기포의 수력학적 거동:

유체역학/혼합이론

물질/열전달:

열역학/전달현상



분리공정:

분리공정/단위공정/열역학

화학/생물 반응기:

반응공학/촉매공학/생물공학

공정설계/합성/최적화/제어:

공정시스템 공학 (PSE), 계산과학, 공업수학

단위

단위계	길이 (length)	질량 (mass)	시간 (time)	온도 (temperature	분자수 (unit mole number)
SI	m	kg	s	K	kmol
	cm	g	s	K	Mol
British			s	R	Lb-mol

부피 (V): m^3
속도 (v) : m/s
가속도 (a) : m/s^2
힘 (F=ma) : $kg \cdot m/s^2 = N$

압력 (P=F/A) : N/m^2
일 (W=FL) : $N \cdot m = J$
열 (Q) : 1cal=4.18J
농도 (C=no./V): mol/m^3

화공열역학 개관

- 열역학 제 1법칙 (에너지 보존)
- 열역학 제 2법칙 (엔트로피 증가/무질서도의 증가)
- PVT 상태방정식
- 상평형
- 활동도