

# PHYSICAL CHEMISTRY

EXAM III B형

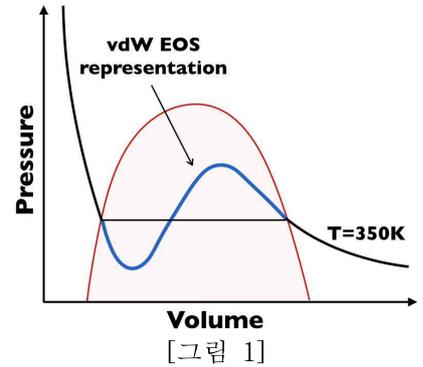
(6/15/2017) 총 150점

Dept. Chem. & Biol. Eng., Korea Univ.

Prof. D. J. Ahn

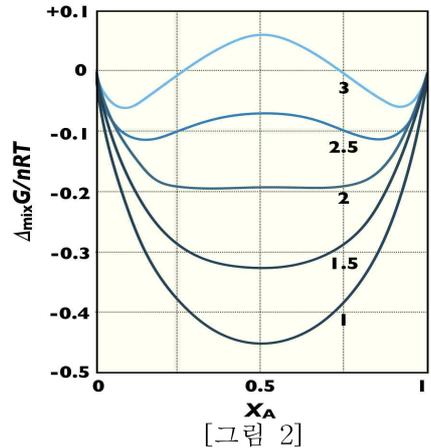
1(20). 350 K에서 n-butane(증기압 9.4573 bar) 의 vapor-liquid equilibrium에 대한 계산을 하고자 한다. vdW EOS( $P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m^2}$ )를 활용하여 액체의 몰부피 및 기체 몰부피를 구하시오. 액상과 기상에서 3회의 trial and error를 시행하시오. 초기 값으로 기체는 이상기체  $V_m^{IG}$ 를, 액체는 b를 활용하시오.

※  $a_{n-butane} = 14.66 L^2 bar / mol^2$ ,  $b_{n-butane} = 0.1226 L / mol$



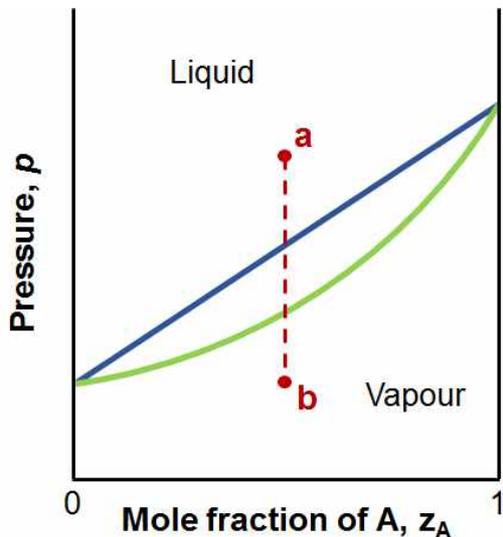
2(20). 두 액상 물질 A와 B가 있다. 이 두 물질의 activity coefficient가 Margules equation을 따를 때 아래 질문에 답하시오.

- ※ Margules equation :  $\ln \gamma_A = \beta x_B^2$ ,  $\ln \gamma_B = \beta x_A^2$ , where  $\beta = w/RT$   
 (a:6) A와 B를 1:1의 비율로 혼합하였다.  $\beta = 2.5$ 일 때, 존재하는 상(들)의 조성을 구하시오. (그림 2 활용)  
 (b:6) 존재하는 상(들)에서 A의 activity를 구하시오.  
 (c:8)  $\Delta_{mix} G/nRT$  표현식으로부터 (a)를 계산하시오.

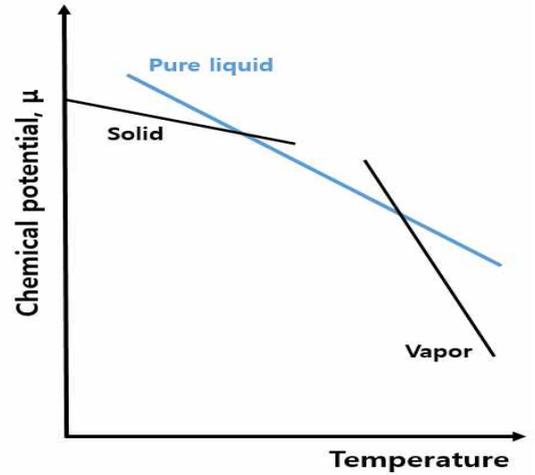


3(25). T=298 K, P=40 kPa에서 물질 A 1.00 mol과 물질 B 1.00 mol을 혼합하려한다. 다음 질문에 답하시오.

- (a:8) 그림 3의 지점 a에서 지점 b로 이동하는 과정에서 발생하는 상변화, DOF의 변화, 조성의 변화에 대해 설명하시오.  
 (b:10) 그림 3의 bubble point line( $P_x$ ) due point line( $P_y$ )를 나타내는 관계식을 유도하시오.  $P_A^* = 30$  kPa,  $P_B^* = 20$  kPa 일 때 bubble point와 due point에서의 전체 압력 및 각각의 분압을 계산하시오.  
 (c:7) 그림 3에서 압력을 변화시켜 물질 A를 95% 이상 순도로 만드는 방법을 고안하시오.



4(25). 순수한 액체 A에 용질 B를 섞어 혼합 용액을 만들었다. 혼합 용액을 ideal solution이라 가정할 때 다음 질문에 답하시오.  
 (a:5) 혼합 용액의 chemical potential을 그림 4 위에 나타내시오.  
 (b:12) B는 액상에만 존재한다. 이 때 고체-액체 및 액체-기체 상평형을 정의하는 식을 chemical potential을 활용하여 표현하시오. 또한 각 상평형에서  $x_A$ 를  $\Delta_{fus}G$  또는  $\Delta_{vap}G$ 의 함수로 표현하시오.  
 (c:8) 1 atm에서의 혼합 용액을 2 atm으로 증가시켰을 때 어는점은 어떻게 변화하는가? 그 이유를 서술하시오.(단, 물질 A는 물이다)



[그림 4] @1 atm

5(30). 일정 압력 조건에서  $A(g)+B(g)\rightarrow 2C(g)$  반응이 350 K에서 진행되고 있다. A, B, C는 각각 1 mol이며, 반응 및 물질에 해당하는 물성치가 아래와 같을 때 다음 질문에 답하시오.

(298K에서 standard enthalpy of formation은  $\Delta_f H_A^\ominus = 294.1 \text{ kJmol}^{-1}$ ,  $\Delta_f H_B^\ominus = 50.3 \text{ kJmol}^{-1}$ ,  $\Delta_f H_C^\ominus = 32.1 \text{ kJmol}^{-1}$  standard gibbs energy of formation은  $\Delta_f G_A^\ominus = 32.4 \text{ kJmol}^{-1}$ ,  $\Delta_f G_B^\ominus = 109.2 \text{ kJmol}^{-1}$ ,  $\Delta_f G_C^\ominus = 12.3 \text{ kJmol}^{-1}$ )

[표. Temperature variation of molar heat capacities,  $C_{p,m}/(\text{JK}^{-1}\text{mol}^{-1}) = a + bT + c/T^2$ ]

	$a$	$b/(10^{-3} \text{K}^{-1})$	$c/(10^5 \text{K}^2)$
<b>A(g)</b>	29.75	25.1	-1.55
<b>B(g)</b>	37.40	0.59	-0.71
<b>C(g)</b>	12.23	0.07	0.21

(a:6)  $\Delta_r H^\ominus$ 를 계산하시오.

(b:6)  $\frac{\partial(\Delta_r G/T)}{\partial T} = -\frac{\Delta_r H}{T^2}$ 를 활용하여  $\Delta_r G^\ominus$  값을 구하시오.

(c:8)  $\frac{d \ln K}{dT}$ 를 나타내는 관계식을 유도하고  $K$  값을 구하시오.

(d:10) 더 높은 온도인 450K에서 반응이 진행될 때,  $K$  값의 변화를 Energy level diagram을 활용하여 정성적으로 분석판단 하시오.

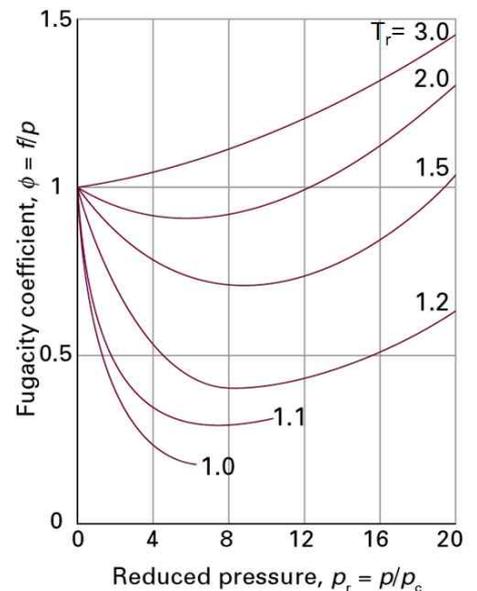
6(30).  $A(g)+B(g)\rightarrow C(g)+2D(g)$ 을 만족하는 반응이 있다. 2 mol A, 1 mol B와 3 mol D가 존재한다. 물질들을 298 K에서 혼합한 뒤 2 bar에서 평형상태에 도달하였을 때, 혼합물 속에는 0.79 mol의 C가 포함되어 있다. 모든 기체를 perfect gas라고 가정할 때, 다음 질문에 답하시오.

(a:5) 평형을 이루고 있는 각 물질들의 몰 분율을 구하시오.

(b:5)  $K$ 의 값과 평형상태에서의  $\Delta_r G^\ominus$ 를 계산하시오.

(c:10) 압력을 1 bar로 낮추었을 때, 평형 상태에서 각 물질들의 몰 분율과  $\Delta_r G^\ominus$ 를 계산하시오.

(d:10) 그림 5는 vdW기체의  $P_r$ 의 변화에 따른 fugacity coefficient ( $\phi$ )를 나타낸 그래프이다. 만일 반응에 참여하는 모든 기체를 vdW 기체라고 했을 때, 질문 (a)~(b)를 답하시오. (단, 기체의  $P_c$ 는 0.125 bar,  $T_c$ 는 248.3 K이다)



[그림 5]