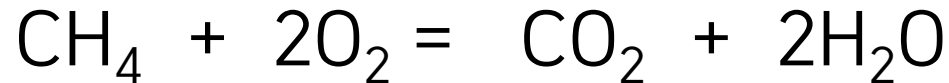


9. 화학반응과 양론

9.1 양론 (Stoichiometry) =

화학반응에서 반응물과 생성물 사이의 정량적 관계



-1 -2 1 2

양론계수 (Stoichiometric coefficient)



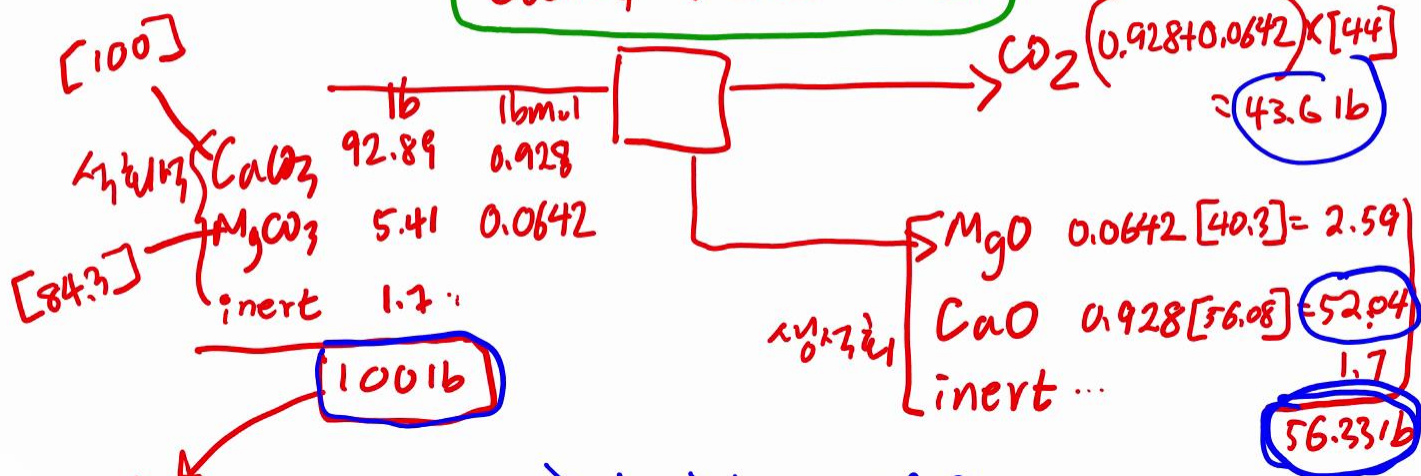
예제 9.3 여러 반응의 양론 관계

석회석의 분석치(질량 %)가 다음과 같다.

CaCO_3	92.89%
MgCO_3	5.41%
불활성물	1.70%

이 석회석을 가열하여 생석회(산화물)를 얻을 수 있다. 다음을 구하라.

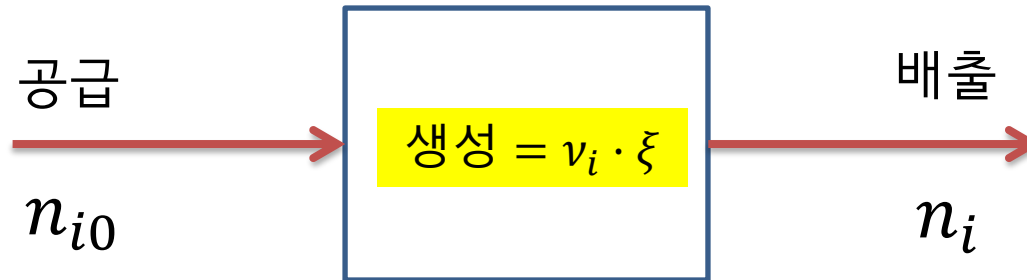
- (a) 석회석 1 ton으로 만들 수 있는 CaO 질량(lb)
- (b) 석회석 1 lb에서 얻을 수 있는 CO_2 질량(lb)
- (c) 생석회 1 ton을 만드는데 필요한 석회석 질량(lb)



- basis
 Ca [40]
 C [12]
 O [16]
 Mg [24.3]

- $$\frac{52.04 \text{ lb } CaO}{100 \text{ lb } CaCO_3} \times 2000 \text{ lb } CaCO_3 = 1040.8 \text{ lb } CaO$$
- $$\frac{43.6 \text{ lb } CO_2}{100 \text{ lb } CaCO_3} \times 2000 \text{ lb } CaCO_3 = 872 \text{ lb } CO_2$$
- $$\frac{56.33 \text{ lb } \text{solid}}{100 \text{ lb } CaCO_3} \times 2000 \text{ lb } CaCO_3 = 1126.6 \text{ lb } \text{solid}$$

9.2 화학반응있는 공정, 정상상태



$$\text{축적} = \text{공급} - \text{배출} + \text{생성}$$

$$\text{생성} = \text{배출} - \text{공급}$$

Let Extent of reaction, **반응진행도 = 양론계수당 생성몰수**

$$\xi = \frac{\text{생성몰수}}{\text{양론계수}} = \frac{n_i - n_{i0}}{v_i}$$

$$\text{배출} = \text{공급} + \text{생성}$$

$$n_i = n_{i0} + v_i \cdot \xi$$

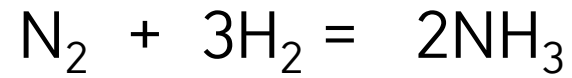
여러 반응이 독립적으로 진행된다면,

$$n_i = n_{i0} + \sum_{k=1} v_{ki} \cdot \xi_k$$

2개의 반응이 독립적으로 진행된다면,

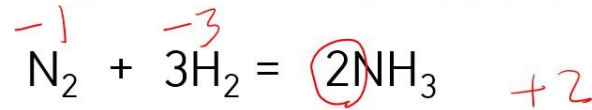
$$n_i = n_{i0} + v_{1i} \cdot \xi_1 + v_{2i} \cdot \xi_2$$

Ex 9.4 공급량과 생성량에 관한 자료를 이용하여 다음 반응의 반응진행도를 구하라.



성분	공급량	생성량
N ₂	100g	
H ₂	50g	
NH ₃	5g	90g

Ex 9.4 공급량과 생성량에 관한 자료를 이용하여 다음 반응의 반응진행도를 구하라.



성분	공급량	생성량
N ₂ [28]	100g / 28 = 3.57 mol	$n_{\text{N}_2} \leftarrow$
H ₂ [2]	50g / 2 = 25	n_{H_2}
NH ₃ [17]	5g / 17 = 0.294	90g / 17 = 5.294 mol

$$\text{for NH}_3, \xi = \frac{n_{\text{NH}_3,0} - n_{\text{NH}_3}}{\nu_{\text{NH}_3}} = \frac{0 - 0.294}{2} = -0.147$$

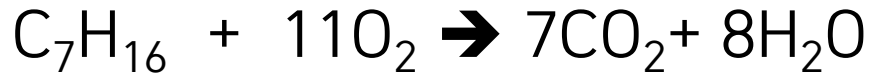
$$n_{\text{N}_2} = n_{\text{N}_2,0} + \nu_{\text{N}_2} \xi = 3.57 + (-1) \cdot (-0.147) = 3.717$$

$$n_{\text{H}_2} = n_{\text{H}_2,0} + \nu_{\text{H}_2} \xi = 25 + (-3) \cdot (-0.147) = 25.441 \text{ mol}$$

+



한정반응물과 과잉반응물



주입량 = 1 mol 12 mol

한정반응물 (limiting reactant): 양론적으로 제일 먼저 소모될 반응물

과잉반응물 (excess reactant): 한정반응물보다 많이 주입되는 반응물

각 반응물의 최대반응도를 구했을때, 적은 값을 갖는 놈이 한정반응물이다!!!

최대반응도 = 주입량이 모두 반응했다고 가정할 때의 반응진행도

$$\xi^{max}_{of \text{ O}_2} = \frac{n_{\text{O}_2} - n_{\text{O}_2,0}}{\nu_{\text{O}_2}} = \frac{0 - 12}{-11} = 1.09$$

$$\xi^{max}_{of \text{ C}_7\text{H}_{16}} = \frac{0 - 1}{-1} = 1.00$$

따라서 heptane 이 한정반응물이다!!

$$\text{과잉율\% (excess\%)} = \frac{\text{공급} - \text{필요}}{\text{필요}} \times 100 = \frac{12 - 11}{11} \times 100 = 9.1\%$$

전화율 (Conversion)이란, 공급물이 생성물로 전화되는 비율이다.

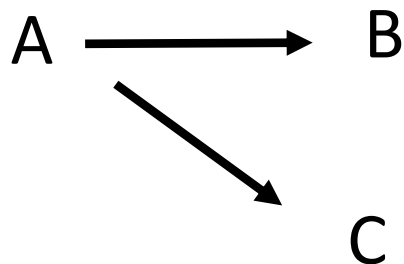
$$\text{전화율} = \frac{\text{소비된 } A}{\text{공급된 } A}$$

$$X = \frac{n_{i0} - n_i}{n_{i0}}$$

$$n_i = n_{i0} - n_{i0} X$$

$$n_i = n_{i0} + \nu_i \xi$$

$$\text{소비된 } A = n_{i0} X = -\nu_i \xi$$

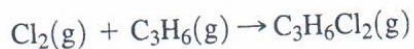
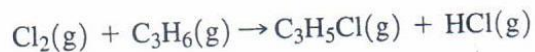


$$\text{선택도}(Selectivity) = \frac{B}{C}$$

$$\text{수율}(Yield) = \frac{B}{A}$$

Ex9.8

염화알릴의 반응 중에서 두 반응을 들면 다음과 같다.⁶⁾



여기에서

C_3H_6 : 프로필렌(프로펜), MW = 42.08

$\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}$: 염화알릴 (3-클로로프로펜), MW = 76.53

$\text{C}_3\text{H}_6\text{Cl}_2$: 염화프로필렌 (1,2-디클로로프로펜), MW = 112.99

반응이 진행된 뒤에 회수한 화학종은 표 E9.8에 보인 것과 같다.

표 E9.8

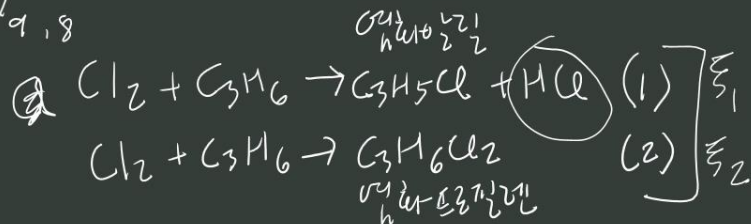
화학종	물질량(mol)
Cl_2	141.0
C_3H_6	651.0
$\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}$	4.6
$\text{C}_3\text{H}_6\text{Cl}_2$	24.5
HCl	4.6

공급물 중에는 염화알릴이 들어있지 않다고 가정하고 다음을 구하라.

- 반응기에 공급한 Cl_2 와 C_3H_6 의 물질량(mol) 222g
- 한정반응물
- 과잉반응물
- C_3H_6 의 $\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}$ 로의 전화율
- $\text{C}_3\text{H}_6\text{Cl}_2$ 에 대한 $\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}$ 의 선택도
- $\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}$ 의 수율(g $\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}$ /g C_3H_6 공급량)
- 첫 반응과 두 번째 반응의 반응진행도

이러한 문제를 풀기 위해 체계적으로 문제를 풀 수 있는 화학

2/9, 8



(a) Mol balance of i

$$n_i = n_{i,0} + \nu_i \xi_1 + \nu_i \xi_2$$

for (1), HCl,

$$\xi_1 = \frac{4.6 - 0}{1} = 4.6$$

for (2), C₃H₆Cl₂,

$$\xi_2 = \frac{24.5 - 0}{1} = 24.5$$

for Cl₂,

$$141 = n_{\text{Cl}_2,0} + (-1)(4.6) + (-1)(24.5)$$

$$\therefore n_{\text{Cl}_2,0} = 170.1$$

for C₃H₆

$$651 = n_{\text{C}_3\text{H}_6,0} + (-1)(4.6) + (-1)(24.5)$$

$$\therefore n_{\text{C}_3\text{H}_6,0} = 680.1 \text{ mol.}$$

(b) ξ_1 and ξ_2 ?

$$\xi_1^{\text{max}} \text{ of } \text{C}_3\text{H}_6 = \frac{0 - 680.1}{-1} = 680.1$$

$$\xi_2^{\text{max}} \text{ of } \text{Cl}_2 = \frac{0 - 170.1}{-1} = 170.1 \rightarrow \text{limit!}$$

(d) C₃H₆ or C₃H₅Cl selectivity

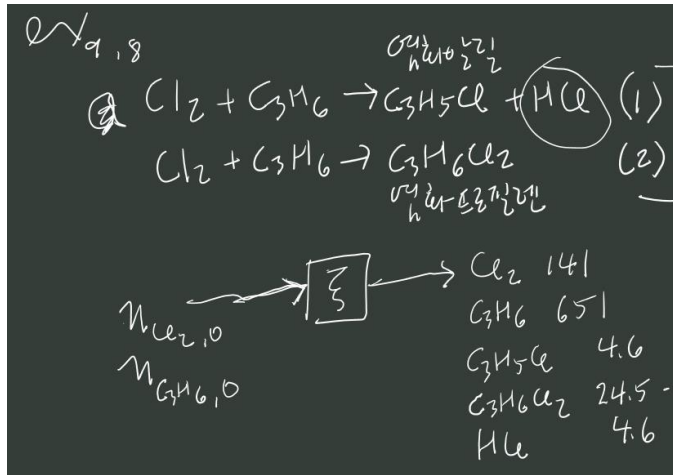
$$X = \frac{\text{mole}}{\text{feed}} = \frac{4.6}{680.1} = 6.76 \times 10^{-3}$$

(e) selectivity = $\frac{B}{C} = \frac{\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}}{\text{C}_3\text{H}_6\text{Cl}_2} = \frac{4.6}{24.5} = 0.19$

A $\rightarrow$ B $\rightarrow$ C



Ex9.8 을 원소수지(Elemental balance)로 풀어보자!



Elemental balance 에서는 반응을 고려할 필요없다.

원소에 대해서만 mol balance를 세워본다.

$$121215 = 2ca$$

Elemental balance

$$\text{in} = \text{out}$$

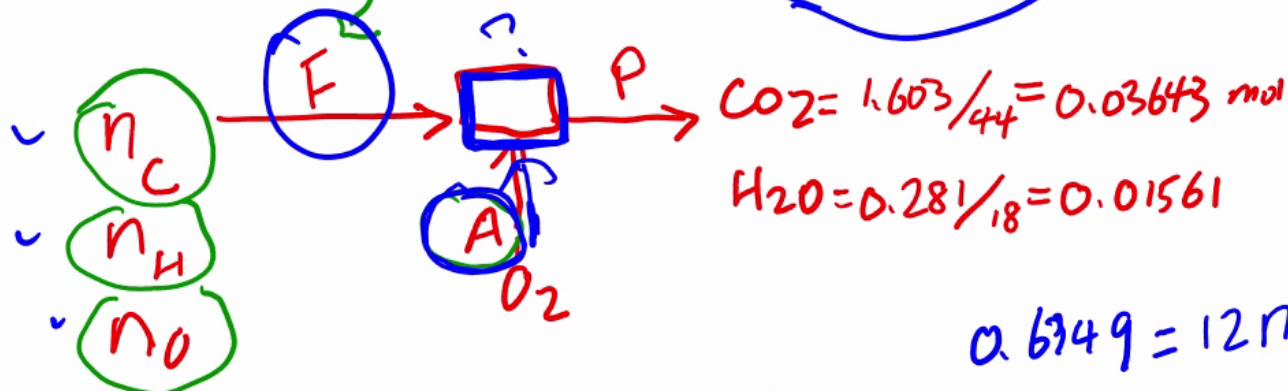
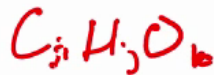
$$\text{C}_3: n_{\text{C}_3\text{H}_6,0} = 651 + 4.6 + 24.5 = 680.1$$

$$\text{Cl}: 2n_{\text{Cl}_2,0} = 2(141) + 4.6 + 2(24.5) + 4.6 = 340.2$$

$$\therefore n_{\text{Cl}_2,0} = 170.1$$

P9.6 탄소,수소,산소로 된 화합물의 식을 구하기 위해 연소장치를 사용한다. 이 화합물 시료 0.6349g 으로부터 CO₂ 1.603g, H₂O 0.281g 이 생성되었다. 이 화합물의 실험식을 구하라.

P9.6 탄소, 수소, 산소로 된 화합물의 식을 구하기 위해 연소장치를 사용한다. 이 화합물 시료 0.6349g 으로부터 CO₂ 1.603g, H₂O 0.281g 이 생성되었다. 이 화합물의 실험식을 구하라.



$$0.6349 = 12n_C + n_H + 16n_O$$

$$\therefore n_O = 0.0104$$

$$n_{O_2} : 4ea = n_{H_2O} + 2n_{CO_2} + \text{given } 1$$

$$\text{Basis: } F = 0.6349 \text{ g}$$

Elemental balances
in = out

$$C: n_C = 0.03643$$

$$H: n_H = 2(0.01561) = 0.03122$$

$$O: n_O + 2A = 2(0.03643) + 0.01561$$

$A = \dots\dots$

$$\frac{n_C}{n_O} = \frac{0.03643}{0.0104} = 3.5 \rightarrow 7$$

$$\frac{n_H}{n_O} = \frac{0.03122}{0.0104} = 3. \rightarrow 6$$

$\rightarrow 2$

