Chemical Engineering Thermodynamics-1 3rd Project

화학공학과 2020027929 이수경
건설환경공학과 2020098659 홍민정

<목차>

1. Abstract

2. Introduction
   2.1 공정 선정 이유
   2.2. 물질 설명
   2.3. 하버-보슈 공정
   2.4. 하버-보슈 공정의 실제와 발전된 기술

3. Theory
   3.1. EOS 선정 이유
   3.2. PV diagram 분석
   3.3. 온도와 압력 설정
   3.4. 계산 과정 설명

4. Results and discussion
   4.1. Calculation
   4.2. 오차 분석
      4.2.1. 오차 발생 원인 분석

5. Conclusion

6. Reference

7. Appendix

8. Contributions of the members

9. Meeting minute

1. Abstract

최근 화석연료를 기반으로 하는 산업에서 발생하는 환경 문제와 기후 변화에 따른 온실 가스 증가 등에 대응하기 위해 신재생 에너지 활용에 관한 연구가 활발하게 진행되고 있다. 재생 에너지는 발전량이 높아짐에 따라 전력 계통 연계의 한계로 많은 잉여 에너지가 손실이 되고 있다. 이를 해결하기 위해서는 에너지 저장 시스템이 필요하다. 그 중 수소가 연소될 때 부산물로 온실 가스가 배출되지 않기 때문에 청정 에너지 운반체로 관심을 가지고 있지만 부피당 에너지 밀도가 낮기 때문에 저장을 하거나 운송할 때 매우 낮은 온도와 높은 압력이라는 극한 환경을 필요로 한다. 그에 반해 암모니아는 수소보다 높은 에너지 밀도를 가지고 있기에 상온에서 액체 상태로 수소보다 이용하기 쉽게 대용량 저장 및 이송이 가능하다. 따라서 암모니아 기반된 에너지 저장 및 무탄소 연료 또는 수소 캐리어로 암모니아의 이용이 주목받고 있다. 현재까지도 암모니아는 하버-보슈 공정을 통해 세계적으로 생산 및 소비가 되고 있다. 암모니아 생성을 위해 많은 에너지를 소비하고 온실가스를 배출하고 있기 때문에 이를 보완하는 방법들을 연구하기 시작했다.

이번 프로젝트에서는 암모니아를 합성하게 된 하버-보슈 공정을 선택하여 공정에서 사용되는 물질과 만들어지는 물질에 대해 설명하고 하버-보슈 공정은 어떤 것인지, 하버-보슈 공정을 단점을 보완하고 실제로 어떻게 발전되고 있는지를 살펴볼 것이다. 그리고 암모니아의 특성에 관한 값들과 Van del Waals 식에서 다양하게 보정한 식들을 이용하여 실제 암모니아와 이상적인 암모니아의 엔트로피와 엔탈피 값을 구해보려고 한다. 이 과정은 실제 기체가 이상기체가 되는 단계, 이상기체 상태에서의 변화 단계, 실제 기체와 이상기체 사이의 변화 단계, 포화 증기에서 포화 액체 상태로 가는 단계, 총 4단계에 걸쳐 구할 것이다.

2. Introduction

2.1 공정 선택 이유

수소는 현재 인류가 당면하고 있는 에너지 문제와 환경 문제를 동시에 해결할 수 있는 에너지원으로 주목받고 있다. 따라서 수소를 생산하고 저장하며 운송하는 기술을 개발하는 것은 미래의 수소 사회를 구축하고 지구온난화를 해결하는 데 필수적이다. 하지만 한국의 자연환경 상 풍력, 태양광 등 신재생에너지를 활용해 수소를 생산하는 것은 한계가 있다. 따라서 질소와 산소 원자만으로 이루어진 암모니아를 활용해 수소 생산과 유통의 효율을 높일 수 있다. 암모니아는 화학 구조상 연소할 때 탄소를 배출하지 않고 청정 수소를 생산할 수 있다. 이렇듯 암모니아는 친환경 연료로의 가치가 충분히 있기 때문에 암모니아 자체를 연소시켜 연료로 사용하고자 하는 연구가 활발히 진행되고 있다. 또한 암모니아는 액화수소에 비해 부피당 수소 저장 용량이 1.7배 크고 상온에서 비교적 쉽게 액화하기 때문에 미래의 수소운반체로 평가받고 있다. 따라서 국내의 정유. 석화 업계는 암모니아 유통망 확보에 공을 들이고 있다. 또한 암모니아는 우리 주변에서 다양하게 이용되고 있다. [1] 화학 공업 원료, 암모니아수 제조, 반도체 및 전자부품 제조, 산업 폐수 처리 등 많이 곳에서 다양하게 활용되고 있다. 또 과거에 암모니아로 비료를 생산해서 전 세계의 식품 생산에 큰 영향을 미쳤다. 이때 암모니아를 합성하는 데 사용된 화학 처리법은 “하버-보슈법”이다. 하버-보슈법은 1913년 프리프 하버와 카를 보슈가 개발한 암모니아 유기 합성법이다. 비록 하버보슈법은 암모니아를 생산하는 과정에서 CO_2가 발생해서 친환경적이지는 않지만, 현존하는 암모니아 생산 방법 중 가장 경제적인 방법이다. 오래전에 개발된 공정임에도 불구하고 현재에도 많은 기업에서 암모니아를 생산할 때 쓰고 있다. 따라서 암모니아가 다양하게 활용되는 만큼 생산하는 것이 중요하므로 본 프로젝트에서는 하버-보슈 공정을 분석하고 설명하고자 한다.

2.2. 물질 설명

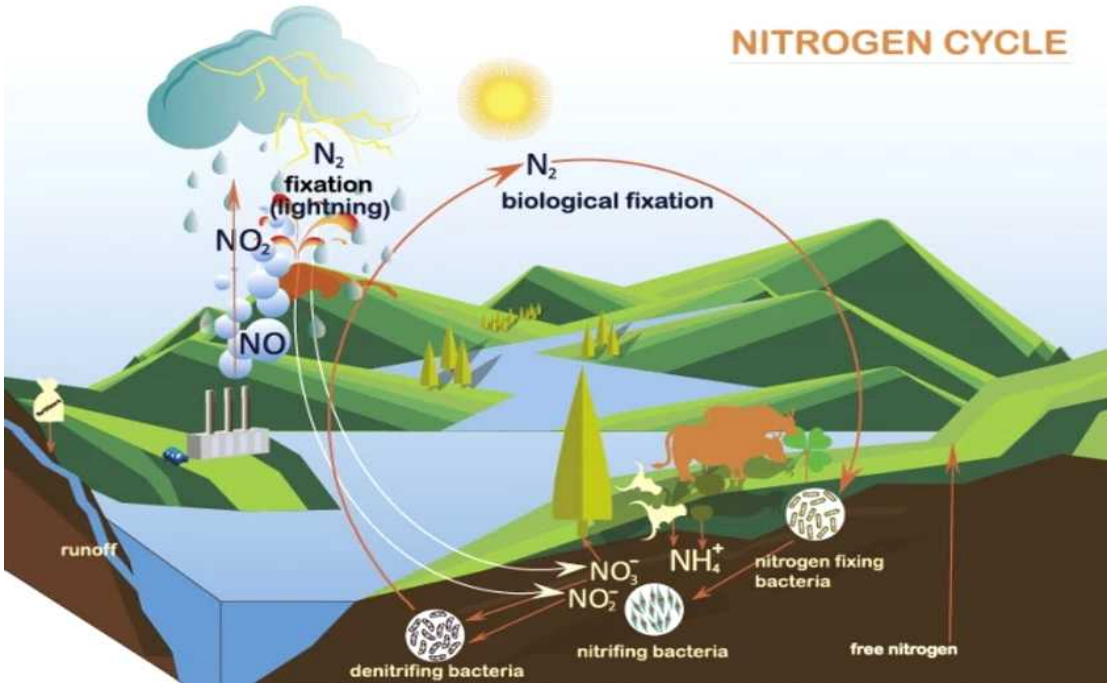


Fig 1. 질소의 순환 과정 [1]

이번 프로젝트에서 고른 하버보슈 공정은 질소와 수소로부터 철을 촉매로 사용하여 고온 및 고압에서 암모니아를 대량으로 합성하는 것이다. 질소는 생물체내에서 단백질, 핵산 등을 구성하는 중요한 원소이다. 대부분의 생물체는 공기 중의 질소 기체를 직접 체내로 흡수하지 못하기 때문에 질소는 먼저 다른 원소들과 결합하여 생물체가 이용할 수 있는 형태로 전환되어야 한다. 질소 고정 세균은 많은 에너지를 사용하여 공기 중의 질소를 암모니아로 만든다. 식물은 질소 고정 세균이 만들어 놓은 암모니아나 질산염을 흡수하여 단백질을 합성하며, 동물은 식물성 단백질이나 동물성 단백질을 섭취함으로써 몸에 필요한 질소 성분을 얻는다. 이렇게 생물체내로 흡수된 질소 화합물은 배설 과정을 통해 암모니아나 요소의 형태로 다시 방출되고 배설물과 생물의 사체에 포함된 유기 질소 성분은 미생물에 의해 암모니아로 분해되어 다시 흙으로 돌아간다. 토양 속 암모늄염 일부는 식물에 직접 이용되기도 하지만, 대부분은 세균에 의해 아질산염이나 질산염 등으로 산화시켜 식물에 흡수된다. 또 다른 세균 집단은 산소가 없는 상태에서 질산염을 질소 기체로 환원시켜 대기로 보내게 된다.

식물은 보통 토양으로부터 암모니아나 질산염을 흡수하는데, 토양이 척박해지면 이러한 질소 화합물이 부족해진다. 그래서 공업적으로 질소를 수소와 반응시켜 암모니아를 합성하고 이를 이용해 비료를 제조하여 사용한다. 위에서 말했듯 질소는 상온에

서 어떤 비금속과도 반응하지 않는 매우 안정한 기체이다. 그러나 1908년 독일의 화학자 하버가 높은 압력과 온도에서 무기물 촉매를 이용하여 질소와 수소를 직접 반응시켜 암모니아를 합성하는데 성공했다. 질소는 화학 반응성이 적지만 자연계의 뿌리혹 박테리아와 남조류 같은 일부 생명체는 질소 화합물을 스스로 합성하는 방법을 진화시켰다. 생물체가 공지 중의 질소를 비료가 되도록 반응시키는 것을 '질소 고정'이라 한다.

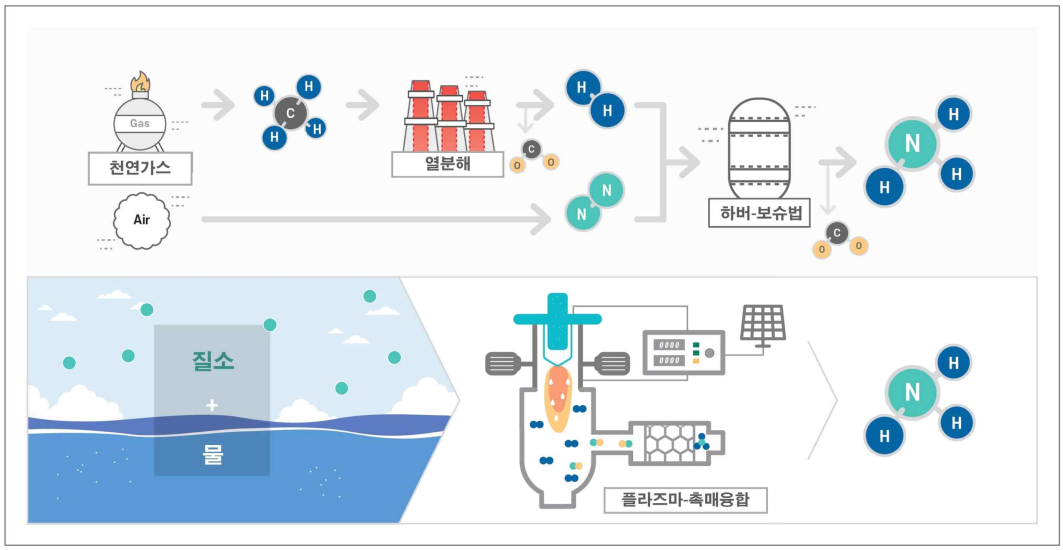


Fig 2. (위) 하버-보슈 공정과 (아래) 그린 암모니아 공정 [2]

암모니아는 수소 원자 3개가 한 변당 1.6A의 길이로 이루어진 정삼각형의 중심에서부터 질소 원자가 0.38A 만큼 떨어진 삼각뿔 구조를 가지고 화학식은 NH_3 이다. 암모니아의 질소 원자에 있는 비공유 전자쌍 1쌍으로 극성을 띄며 양성자를 받고 염기로 작용할 수 있다. 비공유 전자쌍의 반발 효과로 질소 원자와 수소 원자 사이 결합각은 기존 정사면체 구조보다 줄어들어 107°이다.

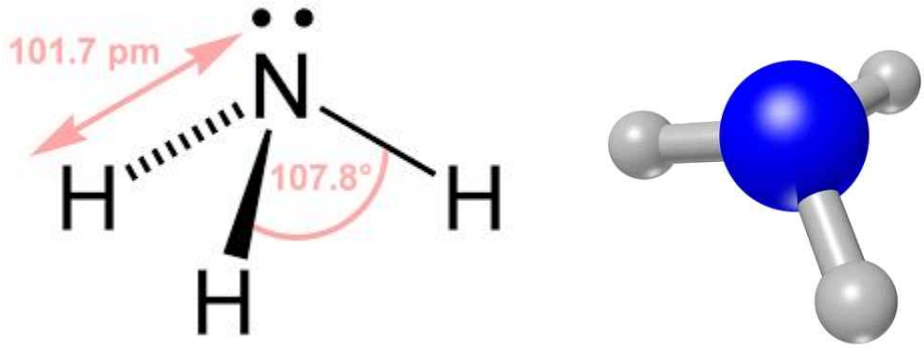


Fig 3. 암모니아 구조 [3]

암모니아는 무색의 기체 상태로 존재하며 녹는점은 -77.7°C, 끓는점은 -33.4°C, 임

계 온도는 132.5℃이고, 임계 압력은 112.5atm이다. 암모니아의 생성열은 46.23 kJ/mol, 융해열은 5.653 kJ/mol, 기화열은 23.35 kJ/mol이다. 25℃에서 응축되는 압력은 9.9atm이고, 발열량은 18.6MJ/kg, 단열 불꽃 온도는 1800℃, 최대 연소속도는 0.07m/s, 최소 자연발화 온도는 650℃이다.

암모니아는 질산, 요소, 환산암모늄의 원료로서 공업 상 중요한 가스이다. 물리적인 성질은 상온, 상압에서는 자극이 강한 냄새를 가지고 물에 용해되며 냉각에 의해 액화되기 쉽다. 암모니아의 비중은 0.771이다. 화학적 성질은 그 자체로는 비교적 안정하나 산이나 헬로겐과 매우 잘 반응하고 물에 녹였을 때 수산화암모늄을 발생시키고 알칼리성 반응을 나타낸다. 산업안전보건법 및 고압가스 안전관리법에서 가연성 가스, 독성 가스로 취급받고 있다. 3차 또한 공기 중에서 쉽게 연소되지는 않으나 열을 받든지 화염을 접하면 연소하며 공기 중에서의 폭발한계는 15~28%이다. 액체 암모니아의 수가 누설될 경우에는 급격한 기화에 의해 고농도의 암모니아 가스가 되며 이것을 흡입하면 사망할 정도로 위험하다. 무수 암모니아는 흡수식이나 압축식 냉동기의 냉모로서 이용되고 공기 중에서 태우면 순수 질소를 얻을 수 있다.

최근에는 암모니아에서 수소를 추출하여 연료 전지에 공급해서 전기를 생산하는 등 수소의 운반체로서 새롭게 연구하고 있다. 암모니아는 여러 기준으로 분류해 볼 수 있는데 먼저 암모니아의 순도에 따라 분류하면 블루 암모니아와 화이트 암모니아가 있다. 블루 암모니아는 정제 과정을 거치고 순도 99.9999% 이상의 순도가 높은 암모니아를 말한다. 화이트 암모니아는 정제 과정을 거치고 이보다 더 정제하여 99.99999% 이상의 초고순도의 암모니아를 말한다.

또 암모니아를 생산 방법에 따라 분류해보면 브라운 암모니아, 블루 암모니아, 그린 암모니아 등이 있다. 브라운 암모니아의 경우 통상 천연가스를 개질하여 생산한 수소와 대기 중 질소를 특정 온도와 압력에서 촉매를 이용해 생산하는 방법으로, 현재 대부분의 암모니아를 이렇게 생산하고 있다. 블루 암모니아는 천연가스를 개질하는 과정에서 발생되는 이산화탄소를 별도로 추출하여 원유를 뽑아낸 땅속에 다시 집어 넣거나 다른 화학 제품의 원료로 사용한다. 이를 통해 온실 가스인 이산화탄소를 대기 중에 버리지 않고 재활용하거나 땅속에 묻는 방법으로 생산된 암모니아를 말한다. 그린 암모니아는 풍력이나 태양광 발전으로부터 잉여의 전기를 이용해 물을 전기분해하여 수소를 생산하고, 이를 대기 중의 질소와 합성하여 암모니아를 생성된 것이다. 이 3가지의 암모니아 생산 방법들은 모두 합성을 원활히 하기 위해 촉매가 사용되고 그 중 그린 암모니아를 만드는 방법이 생산 비용이 가장 높다.

대기 중에 질소는 78%로 가장 많지만 두 개의 질소 원자가 삼중결합을 하고 있기 때문에 단단하게 묶여있어 화합물에 반응하거나 고정되기 어렵다. 암모니아가 생성되

기 위해서는 1개의 질소와 3개의 수소가 필요한데 이 때 활성화 에너지가 매우 높기 때문에 자연 상태에서는 생물이나 번개에 의해서 암모니아가 만들어졌다. 인공적으로 이를 적절한 속도로 일어나게 하려면 1000℃ 이상의 고온이 필요하다.

2.3. 하버-보슈 공정

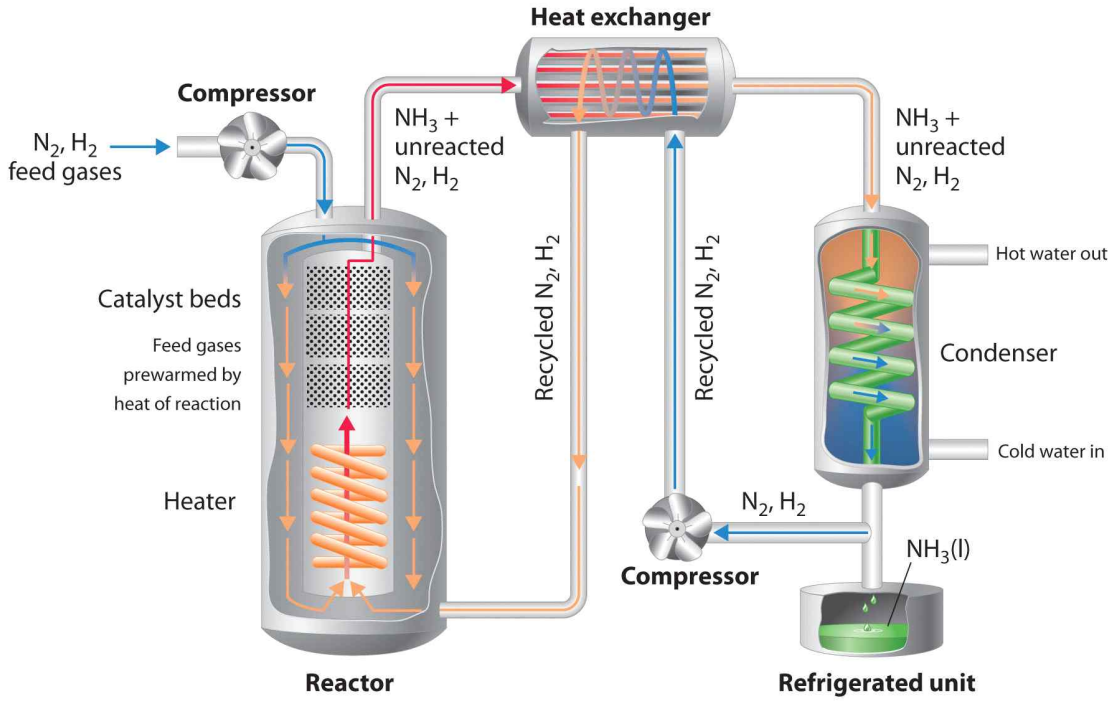


Fig 4. Haber-Bosch process [4]

천연가스를 열분해해서 추출한 수소와 대기 중의 질소를 반응물로 하여 고온, 고압의 조건에서 촉매를 활용해 암모니아를 생산하는 공정이다. 하버-보슈법은 1913년 프리프 하버와 카를 보슈가 개발한 암모니아 유기 합성법(하버-보슈법)으로 암모니아를 비료로 사용하여 농업 생산성을 크게 높이면서 농업혁신의 바탕이 된 발견으로 평가받는다. 하버 공정은 고온 고압에서 철 촉매를 사용하여 암모니아를 대량으로 합성하는 방법인데, 화학반응식은 아래와 같다.

$$N2(g) + 3H2(g) \leftrightarrows 2NH3(g)$$

위 반응식에서 질소와 수소는 1:3의 몰 비율로 반응하여 2몰의 암모니아를 생성한다. 이때 암모니아를 생성하는 반응은 발열반응이므로 냉매로 물이 condenser에서 사용된다. 평형 반응혼합물에서 암모니아를 최대로 생산하기 위해서는 평형의 위치를 가능한 오른쪽으로 최대로 옮겨야 하며, 열역학적 평형 이동은 르샤뜨리에 원리에 따라 일어난다. 여기서 르샤뜨리에 원리란 평형 상태에 있을 때 외부에서 농도, 온도, 압력 등 평형의 조건을 변화시키면 반응은 그 변화를 없애고자 하는 방향으로 움직여 새로운 평형에 도달하는 것을 의미한다. 위 반응식에서 암모니아를 생산하는 정반응은 발열반응이기 때문에 평형혼합물에서 암모니아를 가능한 최대로 얻으려면 르샤뜨리에 원리에 따라 반응온도를 낮추어야 한다. 즉 열의 조절이 필수적이다. 그러나 온

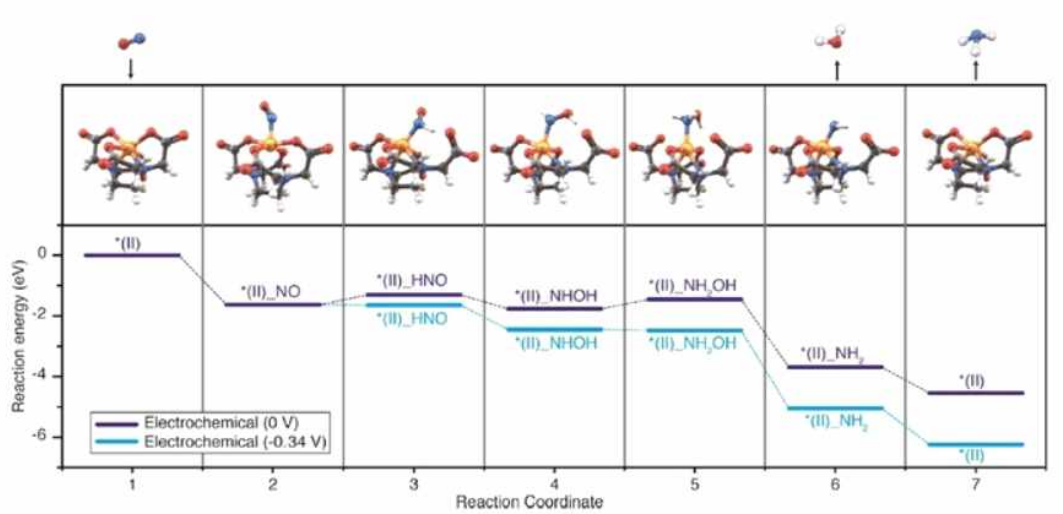
도를 낮추면 반응속도가 느려지고 반응이 진행되지 않는다는 문제점이 있다. 따라서 평형의 위치와 반응속도를 잘 절충한 온도는 400~500℃ 범위이다. 위의 그림에서 Heater는 반응이 진행되게 하기 위해 온도를 400~500℃로 맞춰주기 위함이다. 또한 철 촉매를 사용하면 평형의 위치에는 아무런 영향을 주지 않지만 활성화 에너지를 낮추어 반응을 촉진시킬 수 있다. 따라서 하버-보슈 공정의 반응기에서는 철 촉매도 사용된다. 또 다른 실험변수는 압력이다. 위 반응식은 왼쪽에서 4몰의 기체가 반응하여 오른쪽에 2몰의 기체가 생성된다. 압력을 높이면 기체의 몰수가 큰 쪽에서 작은 쪽으로, 즉 정방향으로 반응이 진행되며 압력을 낮추면 반응이 역방향으로 진행된다. 그러므로 암모니아의 수율을 높이기 위해선 고압을 써야 한다. 하지만 플랜트를 짓고 기계를 작동할 때의 위험성을 최소화하려면 200기압 정도가 적당하다. 따라서 암모니아의 수율은 200bar, 450℃에서 철을 촉매로 사용했을 때 10~20% 정도가 된다. 이때 고압에서 암모니아를 합성할 수 있도록 기술적인 문제를 해결한 엔지니어가 카를 보슈이다.

정리하자면, 하버-보슈법으로 암모니아를 합성하려면 압력이 200기압 이상, 온도가 450℃ 이상의 고압, 고온 조건을 갖춰야 한다. 이러한 조건에서 암모니아가 합성되고, 이때의 반응은 발열 반응이므로 열을 조절해주는 것이 중요하다. 또한 암모니아 추출 과정은 액화 과정을 통해 진행된다. 따라서 반응에 참여하지 않은 수소와 질소의 액화점은 암모니아의 액화점과 다르다는 점을 이용하면 암모니아를 추출할 수 있다. 암모니아의 액화점은 8.53bar, 20℃이다.

2.4. 하버보슈 공정의 실제와 발전된 기술

최근 암모니아는 수소를 저장하고 운반하는 수소 캐리어로의 역할로 주목받고 있다. 암모니아가 연소 될 때 이산화탄소를 발생시키지 않기 때문에 대체 연료로도 연구되고 있다. 흔히 알고 있는 하버보슈 공정은 고압의 환경이 요구되기 때문에 에너지 소모가 많다. 수소를 연료로 사용하면 비용이 많이 드는 단점이 있어 새로운 대체 방법이 연구되고 있었다. 기존에 연구된 기술은 질소로부터 암모니아를 합성하는 데에 성공했으나, 질소의 분해 반응 속도가 매우 느려 암모니아 합성 효율이 낮아 활용성이 떨어졌다고 판단했다.

UNIST 에너지화학공학과에서 미세먼지의 주요 원인 물질 중 하나인 일산화질소(NO)를 탄소 배출 없이 100% 순수한 암모니아(NH3)로 전환하는 기술을 만들었다. 일산화질소 원료를 상온 및 상압에서 100% 암모니아로 변환시키는 전기화학 시스템을 개발하였다.



▲ FeIIEDTA가 NO와 결합해 은 전극 표면에서 암모니아가 생성되는 반응을 나타낸 연구 자료. FeIIEDTA에 NO가 결합되어 FeIIEDTA-NO가 형성되고, 결합된 NO가 NH3로 전환되어 초기의 FeIIEDTA로 돌아오는 전기화학반응을 담고 있다.(그림=UNIST)

Fig 5. 암모니아 생성 반응

금속착화합물(FeIIEDTA)을 투입하여 전해질 속에서 일산화질소를 흡착하는 역할을 하게 하고 일산화질소 용해도 100배 이상 개선되고 부산물도 생성되지 않았다. 금속착화합물은 금속 이온에 유기물이 꼬리처럼 결합한 물질로, 이번 금속착화합물은 Fe2+와 유기물인 에틸렌디아민테트라아세트산을 결합한 화합물이다. 기존의 전기화학적 변환 기술은 일산화질소가 전해질에 잘 녹지 않아 반응 속도가 매우 느렸고, 일산화질소끼리 짝을 이뤄 질소기체 등이 생성되는 부반응 부산물이 많아 활용성이 떨어졌다. 하지만 이번 기술은 기존 하버보슈 공정에서 온실가스인 이산화탄소를 배출하

는 단점도 극복했다. 또 공정 반응을 유도하기 위한 고온 및 고압의 복잡한 설비와 비용 부담도 크게 개선할 수 있는 기술이다. 이 전기화학 시스템은 표면에 나노 구조가 형성된 은 촉매 전극에서 100시간 이상 100%에 가까운 일산화질소-암모니아 전환율을 보였다. 용해도와 반응선택성을 높이는 금속착화합물도 철 기반 물질이라 안정성이 매우 높고 재사용이 가능하다. 잉여 신재생 전기에너지를 이용하면 개발된 시스템이 장기적으로 기존 하버보슈법과 비교할 만한 경제성을 갖출 것이라 전망된다.

또 한편에서는 광촉매 효율과 안정성을 보완하여 그린 암모니아를 개발하는 연구를 진행하고 있다. 암모니아 합성 과정에서 나오는 온실 가스도 잡고, 폐수 속의 질산염 또한 처리할 수 있는 기술로, 재생에너지인 태양광을 직접 활용하는 방법이다. 전기 대신 자체 개발한 광촉매를 사용하여 광촉매가 햇빛을 직접 받아 만든 광전자로 질산염을 환원시켜 암모니아가 합성되는 방식이다. 실제 실험에서 광촉매를 이용해 매우 낮은 전압에서도 95.6%라는 높은 선택으로 질산염을 환원시켜 암모니아를 합성할 수 있었다. 반응 선택 정도가 높은 것은 광전자가 질산염 환원 반응에 효율적으로 쓰였다는 것이다. 실리콘 나노와이어가 고르게 정렬된 광촉매의 구조 특성과 나노와이어 표면에 잘 부착된 미량의 금 입자 성분 덕분에 높은 효율을 얻었을 것이라 예상했다.

다른 기술로는 최근 볼 밀링 공정으로 암모니아를 생산하는 신기술도 개발되었다. 작은 용기에 쇠구슬과 쇳가루를 넣고 회전시키는 볼 밀링 공정으로 이 용기에 질소 기체와 수소 기체를 넣으면 쇠구슬에 부딪혀 활성화된 쇳가루 표면에서 질소 기체가 분해되고 거기에 수소가 달라붙으면서 암모니아가 만들어진다고 한다. 기존의 하버보슈법에서도 철을 촉매로 이용하여 높은 온도에서 수소와 질소를 합성해 암모니아를 만드는데 이를 생산하는 데에 전 세계 에너지의 2%가 사용되었고 이 과정에서 배출되는 CO_2는 전 세계 배출량의 1.8%를 차지한다고 한다. 개발된 볼 밀링 공정은 저압 및 저온 환경에서도 높은 수득률을 보이고, 기존 하버보슈법과 비교했을 때, 1/200의 압력, 1/10 의 온도에서 3배나 높은 수득률을 보인다. 또 크고 복잡한 설비가 필요없이 볼 밀링 장비만 갖추면 바로 암모니아 생산이 가능하고, 암모니아 가스를 액화 운송 및 저장할 때 발생하는 비용 또한 최소화할 수 있다.

3. Theory

3.1. EOS 선정 이유

공정을 분석하기에 앞서, 어떤 단계에서 어떤 EOS(Equation of State)를 사용하여 계산할지 정해야 한다. 우리는 앞선 1차, 2차 프로젝트에서 VdW, RK, SRK, PR EOS를 분석했다. 또한 분석을 통해 각각의 EOS의 특징과 언제 어떻게 사용하는 게 적합한지 알 수 있었다.

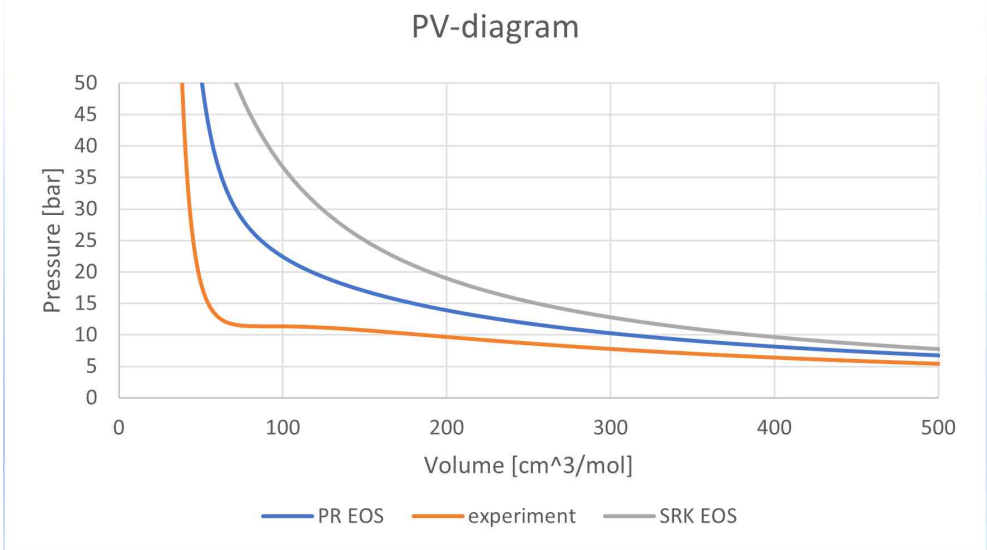
SRK EOS는 분자 간의 인력 및 척력 외에 분자 간의 구조적 차이점과 분자의 비구형성을 나타내기 위해 이심인자 ω를 도입해 RK EOS를 보정한 방정식이다. 이심인자는 순수성분에 대한 증기압 추산을 좀 더 개선하기 위해 도입된 개념으로 순수성분의 끓는점, 분자량, 극성 등의 특성을 포괄적으로 나타낸 온도에 대한 함수이다. 즉 분자의 특성을 더 잘 나타내준다. SRK EOS는 낮은 압력에서 실험값과 매우 유사한 결과를 나타낸다는 장점이 있으며 탄화수소 계열 분자를 포함하여 이심인자가 0.6을 초과하지 않는 범위에서 상대적으로 정확한 결과를 얻을 수 있다.

PR EOS는 압력과 체적 간의 상관관계를 고려하여 정확한 상태량을 예측하고자 한 방정식으로 임계점에서 압축인자의 값을 0.3075가 되도록 변형하였다. 또한 PR EOS는 분자 사이의 상호작용을 온도에 관한 함수로 표현하였다. 이는 온도가 높을수록 분자의 운동속도가 빨라지는 것을 고려해서 표현된 것이다. 따라서 PR EOS는 이심인자가 중간 수치를 나타내는 화합물과 중간 크기의 탄화수소 계열 분자의 상태량을 예측하는 데 있어서 매우 정확한 결과를 보이며 개선된 cubic EOS 중 가장 개선된 식이다.

암모니아는 극성분자이며 이심인자가 0.256으로 SRK EOS에 적합한 기준인 0.6보다 크지 않다. 또한 분자량은 17g/mol이다. 따라서 실제 분자의 특성(극성)을 잘 나타내도록 이심인자 ω를 도입한 cubic EOS인 SRK EOS와 PR EOS를 이용해 엔탈피와 엔트로피를 계산할 것이다.

3.2. PV diagram 분석

SRK EOS와 PR EOS가 실제 기체의 거동을 얼마나 잘 나타내는지 알아보기 위해 PV-diagram을 분석해 보았다.

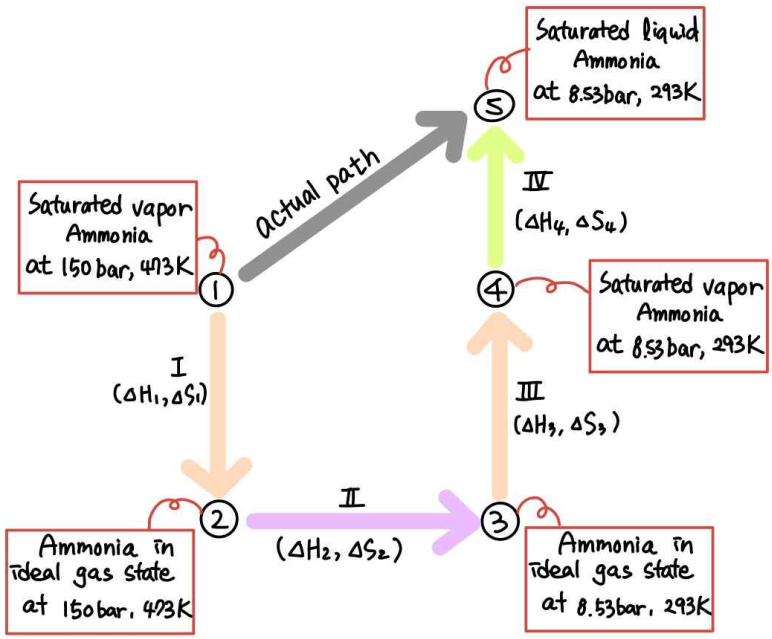


Graph 1. PR EOS, SRK EOS와 실험값을 나타낸 PV Diagram

PR EOS와 SRK EOS는 우리가 설정한 온도인 473K에서, experiment는 Tc인 405.7K에서의 그래프를 그려본 결과, PR, SRK, experiment 그래프 모두가 3차, 곡선형 그래프가 그려짐을 확인할 수 있었다. 설정한 온도에 대한 설명은 뒤에서 다룰 예정이다. excel 계산에 대한 자세한 설명은 appendix에 첨부하였다. 그래프상에서 PR EOS의 그래프가 SRK EOS의 그래프 보다 experiment 값에 근접한 것을 보아, PR EOS가 실제 기체의 거동을 더 잘 나타내는 것을 확인할 수 있다. 따라서 PR로 유도한 HR과 SR이 실제 엔탈피 엔트로피 값과 가장 적은 오차가 보일 것으로 예측할 수 있다. 이어서 각각의 EOS로 HR, SR 식을 유도하여 계산하고 실제 H와 S값과 비교해봄으로써 어떤 EOS의 오차가 적고 실제 기체의 거동을 잘 나타내는지 확인해 볼 것이다.

3.3. 온도와 압력 설정

본 프로젝트에서의 엔탈피와 엔트로피 계산은 다음의 4가지 과정으로 나누어 진행할 것이다.



계산 과정을 설명하기에 앞서 설정한 각각의 온도와 압력을 왜 이렇게 설정했는지 설명하겠다. 앞서 언급했듯이 암모니아 생성 반응은 400~500℃(673~723K), 200bar에서 일어난다. 생성된 vapor 상태의 암모니아는 사진에서 알 수 있듯이 heat exchanger를 거친다. 따라서 이때의 온도는 반응기에서의 온도보다 낮아지게 된다. 따라서 이를 표현하기 위해 첫 번째 단계(Ⅰ)에서의 온도 T1을 약 200K 낮아진 473K으로 설정해 주었다. 또한 암모니아가 condenser로 이동하는 과정에서 pressure drop이 일어날 것이라고 예상하였다. 공압 시스템에서 사용되는 장치의 유량을 표현하기 위한 표준으로 Cv를 사용한다. 이는 특정 압력 차에서의 실제 유속이라고 정의하며, 1psi 차이에서 1분 이내에 장치를 통해 60℉로 물의 부피 유량을 기준으로 한다. 공식은 다음과 같다.

$$C_v = Q\sqrt{\frac{SG}{\Delta P}}$$

여기서 Q는 유량(단위: gallons per min), SG는 유체의 비중($\frac{\rho}{\rho_{H_2O}}$), ΔP는 밸브의 압력 강하(psi)를 나타낸다. 우리가 구하는 것은 압력 강하(pressure drop)이므로 ΔP에 대한 공식으로 다시 정리하면 다음과 같다. [3]

$$\Delta P = (\frac{Q}{C_v})^2(\frac{\rho}{\rho_{H_2O}})$$

암모니아의 ρ는 0.73 kg/m³, ρ(H2O)는 62.43 lb/ft³이다. 이때늬 Q는 1000 gpm으로, Cv는 1로 가정하겠다. 이 값들을 주어진 식에 대입하여 pressure drop을 구하면 다음과 같다.

$$(\frac{0.73kg}{m^3})(\frac{1m^3}{35.31ft^3})(\frac{2.2lb}{1kg}) = 0.045\ lb/ft^3$$

$$\Delta P = (\frac{1000}{1})^2(\frac{0.045}{62.43}) = 720.8$$

720.8 psi를 bar단위로 환산하면 49.7bar이다. 따라서 시스템을 이동할 때 약 50bar의 압력이 낮아진다는 것을 확인할 수 있다. 따라서 암모니아가 합성된 압력인 200bar에서 50bar 낮은 압력인 150bar를 P1으로 설정했다. 암모니아는 8.53bar, 20℃에서 액화된다. 따라서 암모니아가 액체 상태일 때의 최종 온도와 압력을 8.53bar, 273K으로 설정해 주었다.

3.4. 계산 과정 설명

Ⅰ: 먼저 첫 번째 단계는 saturated vapor ammonia(실제 기체)에서 이상기체 상태의 암모니아가 되는 과정이다. 이때 온도와 압력은 473K, 150bar로 유지된다. 실제 기체 상태에서 이상기체 상태로의 변화는 $\Delta H1 = H_1^{ig} - H_1$, $\Delta S1 = S_1^{ig} - S_1$으로 계산한다. 이때 H_1^{ig}과 S_1^{ig}은 ideal 상태일 때의 엔탈피와 엔트로피이고, H_1과 S_1은 실제 기체 상태일 때의 엔탈피와 엔트로피 변화이다. 우리가 구하는 값은 △H1과 △S1이다. 하지만 지금 계산을 통해 구하는 값은 residual property인 HR과 SR이다. $H^{ig} - H = -H^R$, $S^{ig} - S = -S^R$이므로 계산된 HR와 SR에 마이너스(-)를 곱해주면 원하는 값을 얻을 수 있다.

Ⅱ: 두 번째 단계는 이상기체 상태에서의 변화이다. 따라서 △H=Cp△T 공식을 사용해야 한다. $\frac{C_P^{ig}}{R}$ 값은 교재의 Table C.1을 통해 구할 수 있다. 하지만 교재에 나와 있는 조건은 298K 이상을 기준으로 한다. 본 프로젝트에서는 두 개의 액화공정을 다루는데 최종 조건이 293K, 8.53bar로, 교재에 나와 있는 최대 온도 기준 298K보다 5K 정도 차이가 있다. 하지만 다른 방법이 없으므로 오차가 발생할 것을 예상하고 계산을 진행하였다.

Ⅲ: 세 번째 단계도 첫 번째 단계와 같이 실제 기체와 이상기체 사이의 변화이다. 하지만 첫 번째 단계와 다르게 세 번째 단계는 293K, 8.53bar의 이상기체에서 실제 기체로의 변화이다. 우리가 구해야 하는 값은 $\Delta H3 = H_2^{ig} - H_2$, $\Delta S3 = S_2^{ig} - S_2$이고, 우리가 계산할 값은 residual entropy와 residual enthalpy인 $H - H^{ig} = -H^R$, $S - S^{ig} = -S^R$이다. 따라서 Step 1과 다르게 Step 3에서는 우리가 구하는 값과 우리가 계산할 값이 같고 부호도 같다.

Ⅳ: 네 번째 단계는 saturated vapor에서 saturated liquid 상태로 가는 과정이다. 이 과정에서는 액화 잠열(latent heat of liquefaction)을 구해야 한다. 증발 잠열(latent heat of vaporization)은 액화 잠열과 부호가 반대이므로, 우리는 증발 잠열을 구해서 액화 잠열을 구할 것이다. 증발 잠열은 Riedel's equation을 통해 구할 수 있다. 암모니아의 끓는점은 -33.4℃(239.6K)이며, 식은 다음과 같다.

$$\frac{\Delta H_n}{RT_n} = \frac{1.092\left(\ln P_c - 1.013\right)}{0.930 - T_{r_n}}, \quad T_{r_n} = \frac{T_h}{T_c}$$

하지만 우리가 구해야 하는 증발 잠열은 끓는점에서의 증발 잠열이 아닌 293K에서의 증발 잠열이다. Watson's equation은 끓는점에서의 증발잠열을 알 때 다른 온도에서의 증발잠열을 구할 수 있는 공식이다. 따라서 이 식을 활용해 293K에서의 증발잠열을 구할 것이다. 식은 다음과 같다.

$$\frac{\Delta H_2}{\Delta H_1} = \left(\frac{1 - T_{r2}}{1 - T_{rn}} \right)^{0.38}$$

T와 P(sat)가 평형일 때, 엔트로피는 순수한 물질의 깁스 자유에너지와 동일하다. 따라서 엔트로피와 엔탈피의 관계는 $\Delta S_n^{lv} = \frac{\Delta H_n^{lv}}{T}$이다. 이 점을 이용해 엔트로피를 계산할 것이다.

위에서 4단계를 거쳐 계산한 엔트로피와 엔탈피를 합해서 최종적으로 엔탈피와 엔트로피의 변화를 구할 것이다.

4. Results and discussion

4.1. Calculation

SRK EOS와 PR EOS로 HR 식과 SR 식을 유도하는 과정은 appendix 3번에 첨부하겠다. 암모니아에 관한 properties는 다음의 표와 같다. 아래의 값들을 활용하여 단계별로 HR, SR을 구해볼 것이다.

ω	Tc	Pc	Zc
0.253	405.7	112.8	0.242

STEP 1:

1) SRK

SRK EOS의 ε, σ, Ψ, Ω 값들을 정리하면 다음과 같다.

ε	σ	Ψ	Ω
0	1	0.42748	0.08664

$$P_r = \frac{150}{112.8} = 1.3298 \quad , \quad T_r = \frac{473}{405.7} = 1.166$$

$$\alpha = [1 + (0.48508 + 1.55171\omega - 0.15613\omega^2)(1 - \sqrt{T_r})]^2$$

$$= [1 + (0.48508 + (1.55171)(0.253) - (0.15613)(0.253)^2)(1 - \sqrt{1.166})]^2$$

$$= 0.86629$$

$$\beta = \Omega \frac{P_r}{T_r} = 0.08664 \frac{1.3298}{1.166} = 0.09881$$

$$q = \frac{\psi}{\Omega}\frac{\alpha}{T_r} = \frac{(0.42748)}{(0.08664)}\frac{(0.86629)}{(1.166)} = 3.6657$$

$$Z = 1 + \beta - q\beta\frac{Z - \beta}{(Z + \epsilon\beta)(Z + \sigma\beta)}$$

$$= 1 + 0.09881 - (3.6657)(0.09881)\frac{Z - 0.09881}{(Z)(Z + 0.09881)}$$

$$= 0.7154$$

$$I = \frac{1}{\sigma - \epsilon}\ln\left(\frac{Z + \sigma\beta}{Z + \epsilon\beta}\right)$$

$$= \frac{1}{1-0}\ln\left(\frac{0.7154 + 1 \times 0.09881}{0.7154}\right)$$

$$= 0.1294$$

구한 값들을 $\frac{H_1^R}{RT}$, $\frac{S_1^R}{R}$ 식에 대입하고 ΔH_1, ΔS_1을 구하려 한다.

$$\frac{dq}{dT_r} = \frac{\Psi}{\Omega} \cdot \frac{2\left[1 + 0.8714\left(1 - T_r^{0.5}\right)\right](-0.4357 \cdot T_r^{-0.5})\,T_r - [1 + 0.8714(1 - T_r^{0.5})]^2}{T_r^2}$$

$$= 4.9340 \cdot \frac{2[1 + 0.8714(1 - 1.166^{0.5})](-0.4357 \cdot 1.166^{-0.5})1.166 - [1 + 0.8714(1 - 1.166^{0.5})]^2}{1.166^2}$$

$$= -6.8266$$

$$\frac{H^R}{RT} = Z - 1 + T_r\left(\frac{dq}{dT_r}\right)I$$

$$= 0.7154 - 1 + (1.166)(-6.8266)(0.1294)$$

$$= -1.3146$$

$$H^R = -1.3146 \times RT$$

$$= -1.3146(8.314)(473)$$

$$= -5169.6940$$

$$\frac{S_1^R}{R} = \ln(Z - \beta) + \left(q + T_r\frac{dq}{dT_r}\right)I$$

$$= \ln(0.7154 - 0.09881) + (3.6657 + 1.166(-6.8266))(0.1294)$$

$$= -0.6434$$

$$S^R = -0.6434 \times R$$

$$= -0.6434(8.314)$$

$$= -5.349$$

$\therefore \Delta H_1 = 5169.6940\, J/mol$

$\therefore \Delta S_1 = 5.349\, J/mol \cdot K$

2) PR

PR EOS의 ε, σ, Ψ, Ω 값들을 정리하면 다음과 같다.

ε	σ	Ψ	Ω
1-2^(0.5)	1+2^(0.5)	0.45727	0.0778

$$P_r = \frac{150}{112.8} = 1.3298, \quad T_r = \frac{473}{405.7} = 1.1659$$

ω=0.253, $\varkappa = 0.480 + 1.574\omega - 0.17\omega^2 = 0.7476$

$$\alpha(T_r) = [1 + (0.7476)(-0.07981)]^2 = 0.8842$$

$$\alpha' = -\varkappa \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{T_r}} = -0.6510$$

$$\beta = \Omega \frac{P_r}{T_r} = 0.0887$$

$$q = \frac{\Psi}{\Omega} \frac{\alpha(T_r)}{T_r} = 4.45$$

$$Z = 1 + 0.0887 - (4.45)(0.0887) \frac{Z - 0.0887}{(Z + (1-\sqrt{2})0.0887)(Z + (1+\sqrt{2})0.0887)}$$

Z=0.6848

$$I = \frac{1}{2\sqrt{2}} \ln\left(\frac{Z + (1+\sqrt{2})\beta}{Z + (1-\sqrt{2})\beta}\right) = 0.115$$

$$\frac{H_1^R}{RT} = (Z-1) + 5.877\left(\alpha' - \frac{\alpha}{T_r}\right) I$$

$$= (0.6848 - 1) + (5.877)\left(-0.6510 - \frac{0.8842}{1.1659}\right)(0.115) = -1.2677$$

$$\therefore H_1^R = (-1.245)(8.314)(473) = -4985.4126\, J/mol$$

$$\frac{S_1^R}{R} = \ln(Z-\beta) + \frac{T_r}{\alpha}\alpha' q I$$

$$= \ln(0.6848 - 0.0887) + \frac{1.1659}{0.8842}(-0.6510)(4.45)(0.115) = -0.9566$$

$$S_1^R = (-0.9566)(8.314) = -7.95\, J/mol\cdot K$$

$$\therefore \Delta H_1 = 4985.4126\, J/mol$$
$$\therefore \Delta S_1 = 7.95\, J/mol\cdot K$$

STEP 2:

Table C.1을 통해 다음과 같은 식을 구할 수 있다. 또 이를 이용해 엔탈피와 엔트로피를 구하는 식은 다음과 같다.

$$\frac{C_p^{ig}}{R} = 3.578 + 3.020\times 10^{-3} T - 0.186\times 10^{5} T^{-2}$$

$$\Delta H_2 = \Delta H^{ig} = H_2^{ig} - H_1^{ig}$$

$$= R\int_{473}^{293} \frac{C_p^{ig}}{R} dT$$

$$= (8.314)\int_{473}^{293} (3.578 + 3.020\times 10^{-3} T - 0.186\times 10^{5} T^{-2}) dT$$

$$= -6884.67$$

$$\Delta S_2 = \Delta S^{ig} = S_2^{ig} - S_1^{ig}$$

$$= R\int_{473}^{293} \frac{C_p^{ig}}{R}\frac{dT}{T} - R\ln\frac{P}{P_0}$$

$$= (8.314)\int_{473}^{293} (3.578 + 3.020\times 10^{-3} T - 0.186\times 10^{5} T^{-2})\frac{dT}{T} - (8.314)\ln\frac{8.53}{150}$$

$$= 5.6254$$

$$\therefore H_2 = -6884.67\, J/mol$$
$$\therefore S_2 = 5.6254\, J/mol\cdot K$$

STEP 3:

1) SRK

$$P_r = \frac{8.53}{112.8} = 0.07562 \quad , \quad T_r = \frac{293}{405.7} = 0.7222$$

$$\alpha = [1 + (0.48508 + 1.55171\omega - 0.15613\omega^2)(1 - \sqrt{T_r})]^2$$

$$= [1 + 0.48508 + (1.55171)(0.253) - (0.15613)(0.253)^2)(1 - \sqrt{0.7222})]^2$$

$$= 1.2776$$

$$\beta = \Omega \frac{P_r}{T_r} = 0.08664 \frac{0.07562}{0.7222} = 9.072 \times 10^{-3}$$

$$q = \frac{\psi}{\Omega} \frac{\alpha}{T_r} = \frac{(0.42748)}{(0.08664)} \frac{(1.2776)}{(0.7222)} = 8.7284$$

$$Z = 1 + \beta - q\beta \frac{Z - \beta}{(Z + \epsilon\beta)(Z + \sigma\beta)}$$

$$= 1 + 0.009072 - (8.7284)(0.009072) \frac{Z - 0.009072}{(Z)(Z + 0.009072)}$$

$$= 0.9251$$

$$I = \frac{1}{\sigma - \epsilon} \ln\left(\frac{Z + \sigma\beta}{Z + \epsilon\beta}\right)$$

$$= \frac{1}{1 - 0} \ln\left(\frac{0.9251 + 1 \times 0.009072}{0.9251}\right)$$

$$= 9.759 \times 10^{-3}$$

구한 값들을 STEP 1에서 한 것처럼 $\frac{H_3^R}{RT}$, $\frac{S_3^R}{R}$ 식에 대입하고 H_3, S_3를 구하려 한다.

$$\frac{dq}{dT_r} = \frac{\psi}{\Omega} \cdot \frac{2\left[1 + 0.8714\left(1 - T_r^{0.5}\right)\right](-0.4357 \cdot T_r^{-0.5})\, T_r - [1 + 0.8714(1 - T_r^{0.5})]^2}{T_r^2}$$

$$= 4.9340 \cdot \frac{2[1 + 0.8714(1 - 0.7222^{0.5})](-0.4357 \cdot 0.7222^{0.5})0.7222 - [1 + 0.8714(1 - 0.7222^{0.5})]^2}{0.7222^2}$$

$$= -19.4329$$

$$\frac{H^R}{RT} = Z - 1 + T_r\left(\frac{dq}{dT_r}\right)I$$

$$= 0.9251 - 1 + (0.7222)(-19.4329)(0.009759)$$

$$= -0.2116$$

$$H^R = -0.2116 \times RT$$

$$= -0.2116(8.314)(293)$$

$$= -515.3657$$

$$\frac{S^R}{R} = \ln(Z - \beta) + \left(q + T_r\frac{dq}{dT_r}\right)I$$

$$= \ln(0.9251 - 0.009072) + (8.7284 + 0.7222(-19.4329))(9.759 \times 10^{-3})$$

$$= -0.1395$$

$$S^R = -0.1395 \times R$$

$$= -0.1395(8.314)$$

$$= -1.1597$$

$$\therefore \Delta H_3 = -515.3657\ J/mol$$

$$\therefore \Delta S_3 = -1.1597\ J/mol \cdot K$$

2) PR

$$T_r = \frac{293K}{405.7K} = 0.722,\ P_r = \frac{8.53}{112.8} = 0.0756$$

$$w = 0.253,\ \Omega = 0.07780,\ \psi = 0.45727,\ \sigma = 1 + \sqrt{2},\ \epsilon = 1 - \sqrt{2}$$

$$\varkappa = -0.7476$$

$$\alpha(T_r) = \left[1 + \left(0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2\right)\left(1 - T_r^{0.5}\right)\right]^2$$

$$= \left[1 + 0.7476\left(1 - \sqrt{0.722}\right)\right]^2 = 1.0169$$

$$\beta = \Omega\frac{P_r}{T_r} = 0.07780\frac{0.0756}{0.7222} = 0.0081$$

$$\alpha' = (-0.7476)\left[1 + 0.7476\left(1 - \sqrt{0.722}\right)(0.722)^{-0.5} = \right. -0.8465$$

$$q = \frac{\psi}{\Omega}\frac{\alpha(T_r)}{T_r} = 5.877\frac{1.0169}{0.7222} = 8.2752$$

$$Z = (1+\beta) - q\beta\frac{Z-\beta}{(Z+\sigma\beta)(Z+\epsilon\beta)}$$

$$= (1+0.0081) - (8.2752\times 0.0081)\frac{Z-0.0081}{(Z+(1+\sqrt{2})0.0081)(Z+(1-\sqrt{2})0.0081)}$$

$$\therefore Z = 0.9385$$

$$I = \frac{1}{(1+\sqrt{2})-(1-\sqrt{2})}\ln\left(\frac{Z+\sigma\beta}{Z+\epsilon\beta}\right)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}}\ln\left(\frac{0.9581}{0.9351}\right) = 0.0086$$

$$\frac{H_3^R}{RT} = (Z-1) + 5.877\left(\alpha' - \frac{\alpha}{T_r}\right)I$$

$$= (0.9385-1) + (5.877)\left(-0.8465 - \frac{1.0169}{0.722}\right)(0.0086) = -0.1741$$

$$H_3^R = (-0.1741)(8.314)(293) = \quad -424.2172\,J/mol$$

$$\frac{S_3^R}{R} = \ln(Z-\beta) + \frac{T_r}{\alpha}\alpha' qI$$

$$= \ln(0.9385-0.0081) + \frac{0.722}{1.0169}(-0.8465)(8.2752)(0.0086) = \quad -0.115$$

$$S_3^R = (-0.115)(8.314) = \quad -0.9554\,J/mol\cdot K$$

$$\therefore \Delta H_3 = -424.2172\,J/mol$$

$$\therefore \Delta S_3 = -0.9554\,J/mol\cdot K$$

STEP 4: latent heat

$$\frac{\Delta H_n}{RT_n} = \frac{1.092(\ln P_c - 1.013)}{0.930 - T_{r_n}}, \quad T_{r_n} = \frac{T_h}{T_c}$$

$$T_{r_n} = \frac{239.6}{405.7} = 0.5906$$

$$\frac{\Delta H_n}{RT_n} = \frac{1.092(\ln 112.8 - 1.013)}{0.930 - 0.5906} = 12$$

$\therefore \Delta H_n^{lv} = 12(8.314)(239.6) = 23795.1094$ J/mol

$$\frac{\Delta H_2}{\Delta H_1} = \left(\frac{1-T_{r2}}{1-T_{rn}}\right)^{0.38} = \left(\frac{1-0.723}{1-0.5906}\right)^{0.38} = 0.862$$

$$H_4^R = (0.862)(23795.1094) = 20511.3843$$

$$\Delta S_n^{lv} = \frac{\Delta H_n^{lv}}{T}$$

$$S_4^R = \Delta S_n^{lv} = \frac{\Delta H_n^{lv}}{T} = \frac{-20511.3843}{293} = -70 \text{ J/mok·K}$$

$\therefore \Delta H_4 = -20511.3843$ J/mol

$\therefore \Delta S_4 = -70 J/mol \cdot K$

모든 단계에서의 엔탈피와 엔트로피값을 합하면 다음과 같다.

1) SRK

△H = 5181.561 -6884.67 -515.3657 -20511.3843= **-22729.8590 J/mol**

△S = 5.349 -5.625 -1.1597 -70= **-71.4368 J/mol·K**

2) PR

△H = 4985.4126 -6884.67 -424.1072 -20511.3843 = **-22834.7489 J/mol**

△S = 7.95 -5.625 -0.9554 -70 = **-68.6304 J/mol·K**

4.2. 오차 분석

실제 엔탈피 값과 엔트로피 값을 계산된 엔탈피 값과 엔트로피 값과 비교 분석하기 위해서는 실제 엔탈피 값과 엔트로피 값을 알아야 한다. NIST를 통해 실제 엔탈피 값과 엔트로피 값을 얻을 수 있었다. 본 프로젝트에서 진행된 계산은 등적, 등밀도 조건에 진행되었으며, 밀도는 0.73 kg/m^3으로 설정하였다. 이러한 조건에서 초기 온도 473K일 때 암모니아의 엔탈피는 30561 J/mol이고, 엔트로피는 88.730 J/K·mol 이다. 또한 최종 온도인 293K일 때의 엔탈피는 7469.6 J/mol이며, 엔트로피는 30.816 J/mol·K이다. [4] 이 값들을 통해 △H와 △S를 구하면 다음과 같다.

ammonia: 473K, 150bar (vapor) -> 293K, 8.53bar (liquid)
△H = 7469.6 – 30561= -23091.4 J/mol
△S = 30.816 – 88.730= -57.914 J/mol·K

계산한 값과 실제 값에 대한 오차를 다음과 같이 구할 수 있다.
1) SRK

$$\triangle H \text{ 오차: } \left|\frac{-22729.8590+23091.4}{-23091.4}\right|*100 = 1.57\%$$

$$\triangle S \text{ 오차: } \left|\frac{-71.4367+57.914}{-57.914}\right|*100 = 23.35\%$$

2) PR

$$\triangle H \text{ 오차: } \left|\frac{-22834.7438+23091.4}{-23091.4}\right|*100 = 1.11\%$$

$$\triangle S \text{ 오차: } \left|\frac{-68.6304+57.914}{-57.914}\right|*100 = 10.71\%$$

앞에서 예측했듯이 PR EOS로 유도한 식으로 계산한 엔탈피와 엔트로피와 실제 엔탈피와 엔트로피 사이의 오차가 SRK EOS로 유도한 식 사이의 오차보다 적음을 확인할 수 있다. PR EOS로 유도한 식으로 계산한 엔탈피와 엔트로피가 실제 값에 더욱 가까운 이유는 PR EOS가 실험적으로 얻은 Zc를 0.3075로 줄여줌으로써 기존에 Zc가 실험데이터보다 크게 측정된다는 문제점을 보완하였기 때문이다. 이로써 압력과 체적 간의 관계를 밀접도를 높여, 밀도 계산 시에 오차가 발생한다는 기존 EOS의 문제점을 보완하였다. 이처럼 PR EOS는 실제 기체의 특성을 가장 잘 나타내는 가장 개선된 EOS이다. 이론대로 극성분자인 암모니아의 엔탈피와 엔트로피를 SRK EOS와 PR EOS로 구해 실제 엔탈피, 엔트로피 값과의 오차를 분석해 본 결과 PR EOS의 오차가 더 적었다. 이는 PR EOS가 암모니아의 성질을 설명하기에 적합한 EOS라는 것을 의미한다.

4.2.1. 오차 발생 원인 분석

오차 발생의 가장 큰 원인은 STEP 2에 있다고 예측할 수 있다. STEP 2는 이상기체 사이의 변화이다. 이때 엔탈피와 엔트로피의 변화를 구하려면 $\frac{C_P^{ig}}{R}$ 값을 구해야 한다. 우리가 알고 있는 $\frac{C_P^{ig}}{R}$를 구하는 방법은 교재의 Table C.1을 통해 구하는 방법이다. 하지만 교재에 나와 있는 조건은 298K 이상을 기준으로 하며 우리가 계산해야 하는 조건은 293K, 8.53bar로 교재에 나와 있는 기준보다 5K 정도 낮다. 하지만 달리 방도가 없으므로 오차가 발생될 것을 예상하고 계산을 진행하였다. 따라서 STEP 2에서 계산된 엔탈피와 엔트로피가 오차에 가장 큰 영향을 미쳤다고 예상할 수 있다.

또한 설정한 초기 온도에 의해 오차가 발생했을 것이다. 우리는 계산 과정에서 vapor 상태의 암모니아의 초기 온도와 압력를 473K, 150bar로 설정하였다. 하버-보슈 공정에서 암모니아는 673~773K의 높은 온도에서 합성되고, 암모니아가 condenser로 이동할 때 heat exchanger와 냉매 물로 인해 온도가 낮아지므로 액화 과정에서 암모니아의 초기 온도는 약 200K 낮아진 473K일 것이라고 예측하여 초기 vapor 상태의 암모니아 온도를 473K으로 설정하였다. 하지만 계산을 모두 진행한 후 NIST에서 saturation properties for ammonia를 찾아본 결과, 암모니아가 vapor 상태로 존재할 때의 최대 온도가 405.21K이라는 것을 확인하였다.

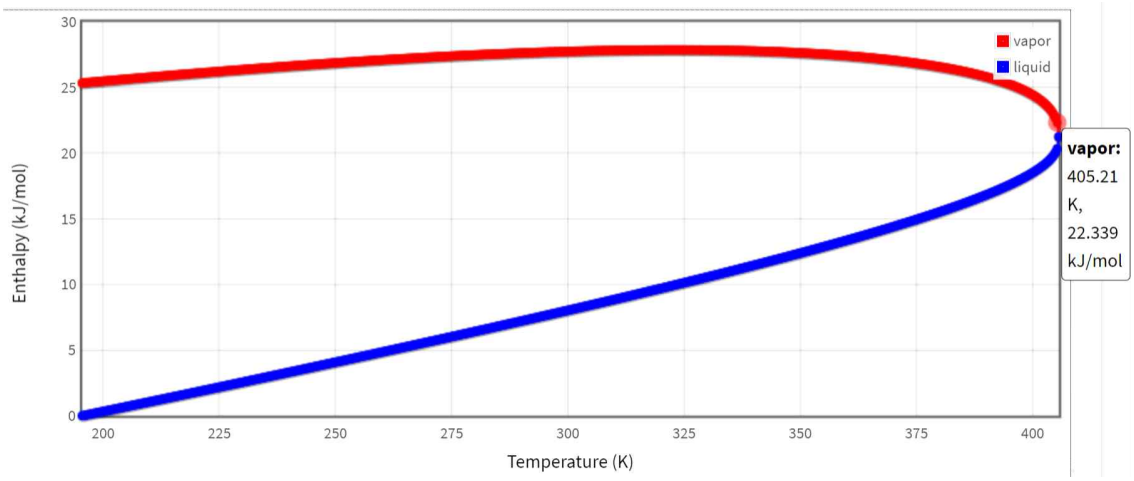


Fig 6. NIST로 분석한 saturated ammonia의 온도 상승에 대한 엔탈피 변화 그래프

우리가 설정한 초기 온도는 473K으로, 이때의 암모니아는 vapor 상태가 아닌 supercritical 상태이다. 따라서 계산에서 설정한 초기 조건을 잘못 설정하였으므로, 이로 인해 발생한 오차가 존재하리라 예측할 수 있다.

마지막으로 암모니아의 분자식은 NH_3로 탄소를 포함하고 있지 않다. 하지만 PR와 SRK EOS는 탄화수소에 특화된 식이다. 따라서 탄소를 가지고 있지 않는 암모니아를 PR과 SRK 방정식으로 계산했을 때 적합하지 않은 부분이 발생했을 것이며, 이러한 부분에서 오차가 발생했을 것으로 예측해볼 수 있다.

5. Conclusion

이번 프로젝트에서는 하버-보슈 공정 중 액화 과정을 분석했다. 액화 과정에서의 엔트로피 S와 엔탈피 H 변화를 분석함으로써 암모니아가 어떤 EOS에서 가장 실제 기체와 가까운 거동을 보이는 확인해보았다. 이전 프로젝트에서 배웠던 내용을 바탕으로 PR과 SRK 두 EOS를 선택해 PV-diagram을 분석하고 PR EOS와 SRK EOS로 HR과 SR 식을 유도해 실제 값과 가까운지 확인해보았다. 액화 과정을 계산 process는 총 4단계로 나누어서 계산했다. 1단계는 saturated vapor ammonia에서 실제 기체 상태로의 변화이며, 두 번째 단계는 이상기체 상태 사이의 변화이다. 세 번째 단계는 이상기체에서 실제 기체로의 변화이며, 4번째 단계는 잠열 변화를 구하는 것이었다. 잠열을 구할 때도 수업 시간에 배운 많은 공식들이 사용되었다. Process를 설정할 때 초기 온도와 압력을 설정하는 데 어려움이 있었지만 많은 자료 조사를 바탕으로 473K, 150bar로 설정할 수 있었다. 이를 통해 공정 분석을 할 때는 많은 요소들을 고려해야 한다는 것을 알았고 이전에 배운 heat exchanger 개념이 분석에 많은 도움이 된다는 것을 깨달았다. 또 압력 강하를 계산하며 유체역학의 개념이 많이 사용된다는 것을 알았다. HR과 SR의 계산하고 SRK와 PR로 유도한 식으로 각각의 엔탈피와 엔트로피를 실제 암모니아의 엔탈피와 엔트로피와 비교하여 오차를 분석했을 때 예상했던 대로 PR EOS가 실제 기체의 거동을 더 잘 나타내는 것을 확인할 수 있었다. 하지만 PR EOS와 실제 기체 사이의 약간의 오차는 존재했으며, 우리는 그 이유를 세 가지라고 예측하였다. 먼저 첫 번째는 STEP 2에서 우리가 설정한 초기 온도가 $\frac{C_P^{ig}}{R}$식의 온도 조건과 맞지 않았기 때문이다. 기회가 된다면 교재의 $\frac{C_P^{ig}}{R}$식의 조건과 맞는 온도를 설정하여 다시 분석해 볼 예정이다. 또 두 번째는 초기 온도 조건을 잘못 설정하였기 때문이다. 초반에 암모니아가 vapor상태일 때의 최대 온도가 405.21K이라는 것을 알지 못해 473K으로 설정하였다. 이때의 암모니아는 supercritical 상태로 vapor 상태가 아니므로 오차가 발생하였을 것이다. 기회가 된다면 암모니아의 온도를 405K으로 낮게 설정해 다시 분석해 볼 예정이다. 또 마지막으로 PR EOS와 SRK EOS는 탄화수소에 특화된 식이므로 NH3인 암모니아를 분석할 때는 약간의 오차가 발생했을 것이라고 예상했다. 이번 프로젝트를 통해 공정을 직접 분석해 보고 계산해봄으로써 많은 것을 배울 수 있었고, 동시에 자신의 부족한 부분을 파악할 수 있는 좋은 기회였다. 따라서 미래의 엔지니어로서 한 단계 성장할 수 있었다.

6. Reference

<Content Reference>

[1] Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics. (n.d.). Retrieved from https://cbe.snu.ac.kr/sites/cbe.snu.ac.kr/files/board/LectureBoard/Thermodynamics%20(3)_0.pdf

[2] 김경미. (2022, January 22). 악취 나는 “암모니아” 귀한 몸 됐다... 정유 석화업계 확보 경쟁. Retrieved from https://www.joongang.co.kr/article/25042675#home

[3] Motion Control. (2019, May). Retrieved from https://motioncontrol.co.kr/default/news_tobe/?nwsid=n3&uid=11641

[4] Thermophysical Properies of Ammonia. (2021). Retrieved from https://webbook.nist.gov/cgi/fluid.cgi?ID=C7664417&Action=Page

[5] 과학기술정보통신부. (2017, December). Science ON. Retrieved from https://scienceon.kisti.re.kr/srch/selectPORSrchReport.do?cn=TRKO201800014202

<Figure Reference>

[1] 녹색미래연구소. (2019, August 30). 유기농업으로 질소로 인한 환경오염을 줄일 수 있다. Retrieved from https://www.gflab.net/post/2018/03/13/%EC%9C%A0%EA%B8%B0%EB%86%8D%EC%97%85%EC%9D%B4-%EC%A7%88%EC%86%8C%EB%A1%9C-%EC%9D%B8%ED%95%9C-%ED%99%98%EA%B2%BD%EC%98%A4%EC%97%BC%EC%9D%84-%EC%A4%84%EC%9D%BC-%EC%88%98-%EC%9E%88%EB%8B%A4

[2] KIMM 한국기계연구원. (2021, August 19). Retrieved from https://www.kimm.re.kr/sub0504/view/id/18977#u

[3] 김용우. (2021, September 9). 가스기술공사, 암모니아 생태계 구축 선도. Retrieved from http://www.ccnnews.co.kr/news/articleView.html?idxno=231037

[4] 15.6 Controlling the Products of Reactions. (2019, August 30). Retrieved from https://saylordotorg.github.io/text_general-chemistry-principles-patterns-and-applications-v1.0/s19-06-controlling-the-products-of-re.html

[5] 성재경. (2020, December 1). 미세먼지 줄이는 암모니아 합성 기술. Retrieved from https://www.h2news.kr/news/article.html?no=8630

모든 유도과정과 계산 과정은 2022년 배영찬 교수님의 화공 열역학1 수업의 강의 노트와 교재(Chemical Engineering Thermodynamic 8th edition-J,M Smith, Van Ness, Abbott, Swlhart)를 참고했으며, EOS에 대한 설명은 이전에 했던 1차, 2차 프로젝트 보고서를 참고했습니다.

7. Appendix

1. PR excel 설명

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a(T)}{V(V+b)+b(V-b)}$$

C11: R= 8.314 J/mol·K

C12: Tc= 405.7 K

C13: Pc= 11.333 Mpa

Vc= 94.12 cm^3mol^-1

G12: b =0.0778*(C11*C12/C13) =23.1553

G13: ω= 0.253

G14: κ =0.37464+1.54226*G13-0.26992*G13^2 =0.74755

a(Tc) =0.45724*C11^2*C12^2/C13 =458339

J11: Tr =473/C12 =1.1658

J16: Tr^0.5 = 1.07976

L11: α=((1+$G$14*(1-J16)))^2 =0.8843

N11: a(T) =L11*G11 =405910

P:

=(($C$11*$B$17)/($A18-$G$12))-($N$11/($A18*($A18+$G$12)+$G$12*($A18-$G$12)))

위 코드로 부피를 30에서 600까지 1씩 변화시켜 그래프를 그렸다.

V /cm^3 mol^{-1}	473	405.7
30	343.000224	230.9613809
31	283.1169535	183.2459037
32	238.5473564	148.3246078
33	204.4064495	122.0517002
34	177.6440877	101.8479057
35	156.2644461	86.03243107
36	138.9113492	73.4683999
37	124.6341765	63.36292753
38	112.748994	55.14869147
39	102.7527064	48.41083962
40	94.26810256	42.84028919
41	87.00760925	38.20298917
42	80.74875695	34.31916308
43	75.31719176	31.04897299
44	70.57467483	28.28242028
45	66.41045251	25.93210461
46	62.73495062	23.92794993
47	59.47510032	22.21330811
48	56.57082782	20.74204349
49	53.97238698	19.47632555
50	51.63831007	18.38494
51	49.53381785	17.44198382
52	47.62957464	16.62584784
53	45.90070519	15.91841694
54	44.32601222	15.30443641
55	42.88734906	14.77100652
56	41.56911324	14.30717647
57	40.35783512	13.90361628
58	39.24184166	13.55235013
59	38.21098009	13.24653836
60	37.25638964	12.98029846

2. SRK excel 설명

$$P=\frac{RT}{V-b}-\frac{a\times\alpha}{V(V+b)}$$

SRK Equation의 경우 PR Equation의 경우와 다르게 식을 a에 대한 식으로 정리하여 Excel에 대입하였다. 과정은 다음과 같다.

$$P=\frac{RT}{V-b}-\frac{a\times\alpha}{V(V+b)}$$

$$P(V-b)V(V+b)=RTV(V+b)-a\alpha(V-b)$$

$$a\alpha(V-b)=RTV(V+b)-PV(V-b)(V+b)$$

$$a\alpha(V-b)=RTV^2+RTbV-PV^3+Pb^2V$$

$$a=\frac{-PV^3+RTV^2+(Pb^2+RTb)V}{(V-b)\alpha}$$

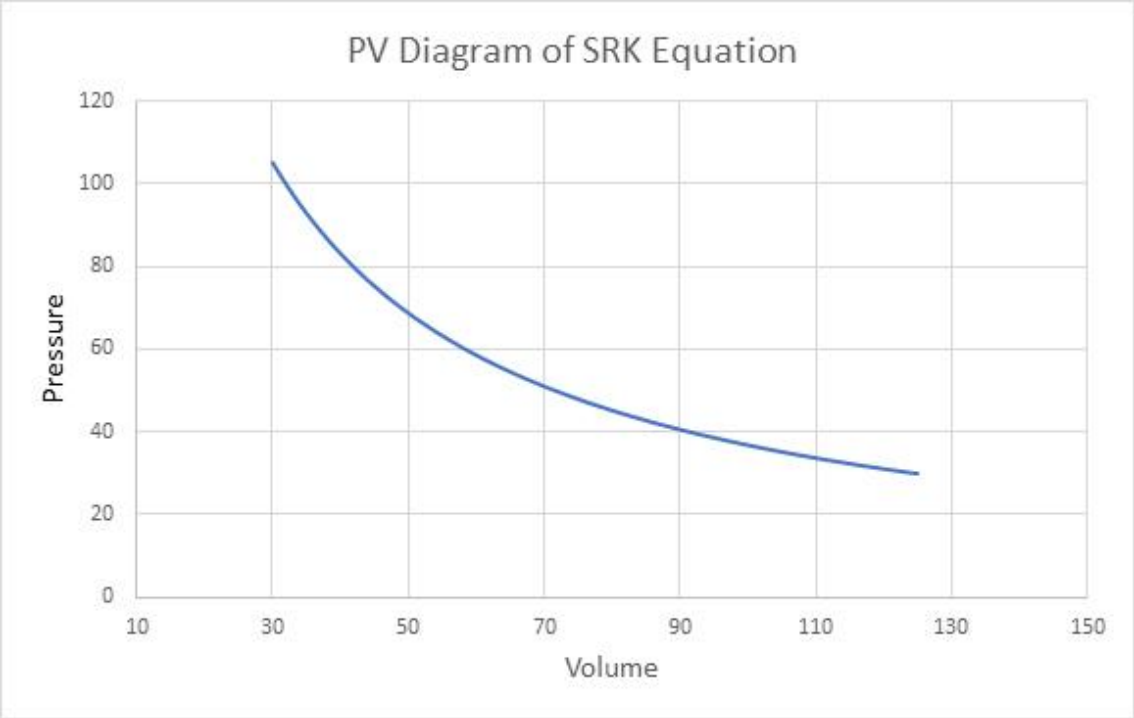
이렇게 구한 a에 관한 식에 각 값을 넣은 뒤 Excel에 대입하여 계산하였다.

	A	B
1	V	P
2	30	105.271096
3	31	102.5537981
4	32	99.97248962
5	33	97.51718669
6	34	95.17887428
7	35	92.94938746
8	36	90.82131077
9	37	88.78789221
10	38	86.84296924
11	39	84.98090482
12	40	83.19653188
13	41	81.48510481
14	42	79.84225699
15	43	78.26396343
16	44	76.74650786
17	45	75.28645353
18	46	73.88061736
19	47	72.52604687
20	48	71.2199997
21	49	69.95992518
22	50	68.74344787
23	51	67.56835279
24	52	66.43257209
25	53	65.33417302
26	54	64.27134714
27	55	63.24240045
28	56	62.24574452
29	57	61.27988837
30	58	60.34343118
31	59	59.43505554
32	60	58.55352136
33	61	57.69766031
34	62	56.86637068

	A	B
34	62	56.86637068
35	63	56.05861274
36	64	55.27340443
37	65	54.50981744
38	66	53.76697358
39	67	53.04404146
40	68	52.3402334
41	69	51.65480264
42	70	50.98704068
43	71	50.33627489
44	72	49.70186626
45	73	49.08320735
46	74	48.47972036
47	75	47.89085533
48	76	47.3160885
49	77	46.75492079
50	78	46.20687633
51	79	45.67150117
52	80	45.14836198
53	81	44.63704495
54	82	44.13715469
55	83	43.64831318
56	84	43.17015889
57	85	42.70234585
58	86	42.24454282
59	87	41.79643256
60	88	41.35771105
61	89	40.92808682
62	90	40.50728035
63	91	40.09502341
64	92	39.69105852
65	93	39.29513844
66	94	38.90702563
67	95	38.5264918
68	96	38.15331745

69	97	37.78729147
70	98	37.42821075
71	99	37.07587976
72	100	36.73011026
73	101	36.39072091
74	102	36.05753699
75	103	35.73039011
76	104	35.40911788
77	105	35.0935637
78	106	34.78357647
79	107	34.47901034
80	108	34.17972455
81	109	33.88558311
82	110	33.5964547
83	111	33.31221241
84	112	33.03273356
85	113	32.75789955
86	114	32.48759568
87	115	32.22171099
88	116	31.96013812
89	117	31.70277313
90	118	31.44951542
91	119	31.20026754
92	120	30.95493512
93	121	30.71342672
94	122	30.4756537
95	123	30.24153016
96	124	30.01097281
97	125	29.78390087

값은 이정도로 구하고 이를 PV그래프로 그려서 아래와 같은 그래프를 얻을 수 있었다.



3. SRK, PR EOS로 HR과 SR 식 유도

PR과 SRK EOS 공동으로 사용되는 Z식과 안에 적용될 parameter들은 다음과 같다. 이때 Z는 dimensionless이다. (교재 P99, eq 3.48, 3.50, 3.51)

$$Z = 1 + \beta - q\beta\frac{Z-\beta}{(Z+\varepsilon\beta)(Z+\sigma\beta)}$$

$$q \equiv \frac{a(T)}{bRT} = \frac{\varphi ln\alpha(T_r)}{\Omega T_r} \quad , \quad \beta \equiv \frac{bP}{RT} = \Omega\frac{P_r}{T_r}$$

또한 이때 대입하는 상수 값은 다음과 같다. (교재 P100)

Table 3.1: Parameter Assignments for Equations of State

Eqn. of State	$\alpha(T_r)$	σ	ε	Ω	Ψ	Z_c
vdW (1873)	1	0	0	1/8	27/64	3/8
RK (1949)	$T_r^{-1/2}$	1	0	0.08664	0.42748	1/3
SRK (1972)	$\alpha_{SRK}(T_r;\omega)^{\dagger}$	1	0	0.08664	0.42748	1/3
PR (1976)	$\alpha_{PR}(T_r;\omega)^{\ddagger}$	$1+\sqrt{2}$	$1-\sqrt{2}$	0.07780	0.45724	0.30740

$^{\dagger}\alpha_{SRK}(T_r;\omega) = \left[1 + (0.480 + 1.574\,\omega - 0.176\,\omega^2)(1 - T_r^{1/2})\right]^2$

$^{\ddagger}\alpha_{PR}(T_r;\omega) = \left[1 + \left(0.37464 + 1.54226\,\omega - 0.26992\,\omega^2\right)\left(1 - T_r^{1/2}\right)\right]^2$

최종 HR, SR 식에서 사용되는 I는 다음과 같이 구할 수 있다.

$$I \equiv \int_0^{\rho}\frac{d(\rho b)}{(1+\varepsilon\rho b)(1+\sigma\rho b)} = \frac{1}{\sigma-\varepsilon}\ln\left(\frac{Z+\sigma\beta}{Z+\varepsilon\beta}\right)$$

이를 이용해 HR과 SR을 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\frac{H^R}{RT} = Z - 1 + T\left(\frac{dq}{dT}\right)I = Z - 1 + T_r\left(\frac{dq}{dT_r}\right)I$$

$$\frac{S^R}{R} = \ln(Z-\beta) + \left(q + T_r\frac{dq}{dT_r}\right)I$$

8. Contributions of the members

이수경	홍민정
1.공정 설명 2.공정 선택 이유 3.EOS 선정 이유 4.PR PV diagram분석 5.계산 과정 설명 6.PR HR SR 계산 7.오차 분석 8.오차 발생 원인 분석 9.Conclusion 10.회의록	1. 서론 2. 공정물질 조사 (질소, 암모니아) 3. 하버-보슈 공정 실제와 발전된 기술 조사 (금속착화합물, 광촉매, 볼밀링) 4. SRK PV diagram 5. SRK SR HR 계산 6. Reference 정리 7. 회의록
70%	30%

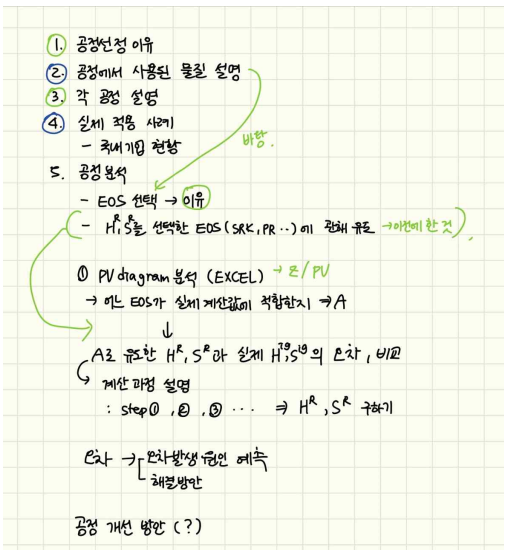
민정 수동적인 태도로 참여했으며 다른 과제로 인해 이 프로젝트의 핵심인 공정 분석과 계산에 많이 참여하지 못했고 온전히 집중하지 못했습니다. 또한 SRK 계산을 거의 같이 했습니다. 민정의 다른 과목 과제가 끝난 후 공정에 대해 더 분석하고 추가할 것을 권유했지만 기본적인 개념만 조사할 뿐 공정에 대한 이해도가 부족해 보였습니다. 프로젝트의 핵심인 공정분석을 같이 하지 못해 힘들었고 아쉬웠지만 민정이 맡은 여러 개념들에 대한 조사는 성실히 했기 때문에 기여도 비율을 70대 30으로 했습니다.

9. Meeting minute

<table>
<tr><td colspan="2" rowspan="3">Team Project 3
회의록</td><td rowspan="3">참
여
자</td><td>학번</td><td>이름</td></tr>
<tr><td>2020098659</td><td>홍민정</td></tr>
<tr><td>2020027929</td><td>이수경</td></tr>
<tr><td>일시</td><td colspan="3">22. 05. 14</td></tr>
<tr><td>장소</td><td colspan="3">비대면 연락</td></tr>
<tr><td>주제</td><td colspan="3">조사할 공정 하나씩 찾아오기</td></tr>
<tr><td>내용</td><td colspan="3">- 5월 16일 월요일 대면 회의 약속

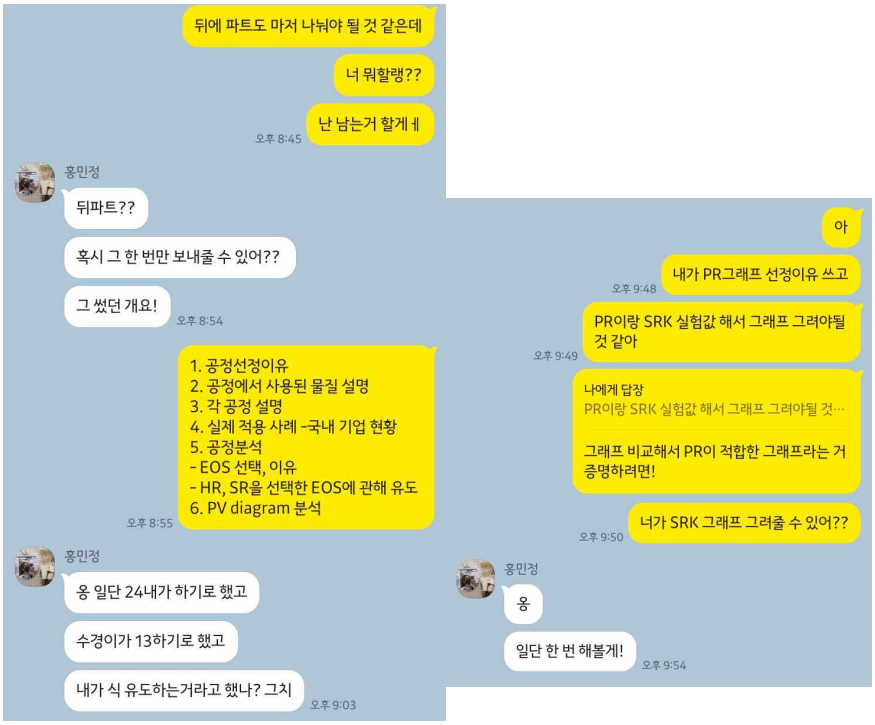
- 그 전까지 조사할 공정을 하나 이상씩 찾아보고 대면 회의 때 조사한 자료를 서로 설명하고 공정을 정하기로 결정함

- 프로젝트 마감 날짜가 27일인 것을 확인하고 24일까지 끝내보자는 제출 계획 설정</td></tr>
<tr><td rowspan="2">해야 할 일
및
해 올 일</td><td>홍민정</td><td colspan="2">공정 하나 이상씩 찾아오기</td></tr>
<tr><td>이수경</td><td colspan="2">공정 하나 이상씩 찾아오기</td></tr>
</table>

<table>
<tr><td colspan="2" rowspan="2">Team Project 3
회의록</td><td rowspan="3">참
여
자</td><td>학번</td><td>이름</td></tr>
<tr><td>2020098659</td><td>홍민정</td></tr>
<tr><td>2020027929</td><td>이수경</td></tr>
<tr><td>일시</td><td colspan="4">22. 05. 16 (회의시간: 1시간)</td></tr>
<tr><td>장소</td><td colspan="4">한양대학교 노천 카페</td></tr>
<tr><td>주제</td><td colspan="4">조사할 공정 정하기</td></tr>
<tr><td>내용</td><td colspan="4">수경:
- 최근 액화수소가 활발히 연구되고 있다는 것을 파악, 액화수소 공정을 분석하는 게 어떠냐고 제안.
- 보고서의 방향성 제시

1. 공정선정 이유
2. 공정에서 사용된 물질 설명
3. 각 공정 설명
4. 실제 적용 사례
- 최신기업 현황
5. 공정분석
- EOS 선택 → 이유
- H, S를 선택한 EOS (SRK, PR ··) 의 편차 유도 → 이전에 한 것
① PV diagram 분석 (EXCEL) → R/PV
→ 어느 EOS가 실제 계산값에 적합한지 → A
A로 유도한 H^R, S^R과 실제 H, S 값의 오차, 비교
계산 과정 설명
: step ① , ② , ③ ··· → H^R , S^R 구하기
오차 → 오차발생 원인 예측
해결방안
공정 개선 방안 (?)
비행.

민정: 여러 공정들의 사진을 찾아옴

자료조사 중 수소액화공정에 대한 자료가 많이 없다는 것을 파악, 하버-보슈 공정을 변경하기로 결정</td></tr>
<tr><td rowspan="2">해야 할 일
및
해 올 일</td><td colspan="2">홍민정</td><td colspan="2">공정에서 사용된 물질, 실제 적용 사례 조사</td></tr>
<tr><td colspan="2">이수경</td><td colspan="2">공정 선정 이유, 공정 설명</td></tr>
</table>

<table>
<tr><td colspan="2" rowspan="2">Team Project 3
회의록</td><td rowspan="3">참
여
자</td><td>학번</td><td>이름</td></tr>
<tr><td>2020098659</td><td>홍민정</td></tr>
<tr><td>2020027929</td><td>이수경</td></tr>
<tr><td>일시</td><td colspan="4">22. 05. 17</td></tr>
<tr><td>장소</td><td colspan="4">비대면</td></tr>
<tr><td>주제</td><td colspan="4">추가 자료 조사</td></tr>
<tr><td>내용</td><td colspan="4">

추가로 SRK와 PR 그래프를 각자 그려오기로 함</td></tr>
<tr><td rowspan="2">해야 할 일
및
해 올 일</td><td>홍민정</td><td colspan="3">SRK 그래프 그리기</td></tr>
<tr><td>이수경</td><td colspan="3">PR 그래프 + experiment 그리기</td></tr>
</table>

<table>
<tr><td colspan="2" rowspan="3">Team Project 3
회의록</td><td rowspan="3">참
여
자</td><td>학번</td><td>이름</td></tr>
<tr><td>2020098659</td><td>홍민정</td></tr>
<tr><td>2020027929</td><td>이수경</td></tr>
<tr><td>일시</td><td colspan="4">22. 05. 18</td></tr>
<tr><td>장소</td><td colspan="4">한양대학교 1공학관 노영백 라운지 (회의시간 1시간)</td></tr>
<tr><td>주제</td><td colspan="4">자료 조사 내용 확인 및 정리</td></tr>
<tr><td>내용</td><td colspan="4">- 서로의 그래프를 확인한 결과, PR 그래프가 실제 기체 상태를 나타내는 데 더 적합한 식이라는 것을 파악함.

자료조사를 했을 때 실제 적용 사례나 기업 현황들에 대한 정보가 많이 없다는 민정의 의견으로 새롭게 발전된 암모니아 합성 기술 관련 조사로 대체하여 진행하기로 함

수경: 2차 프로젝트 때 했던 것처럼 엔트로피와 엔탈피를 계산해 실제 값과 비교해서 암모니아에 적합한 EOS가 어떤 것인지 더욱 확실히 알아보기로 함. (주말 전까지)
하버-보슈 공정 중 condenser에서 일어나는 액화 과정을 분석하는 것이 배운 내용을 활용하기 좋다고 판단. 계산 과정을 4단계로 나눠서 설계하고 온도와 압력을 대강 설정함. 설계한 계산 process를 민정에게 보내줌

민정: 동의하고 조사를 더 많이 하겠다고 함. 영상 촬영 관련 회의를 통해 피피티를 만든 뒤 녹음을 하는 것으로 결정</td></tr>
<tr><td rowspan="2">해야 할 일
및
해 올 일</td><td>홍민정</td><td colspan="3">자료 추가 조사,
SRK Equation 이용한 계산 완료하기</td></tr>
<tr><td>이수경</td><td colspan="3">자료 추가 조사,
PR Equation 이용한 계산 완료하기</td></tr>
</table>

<table>
<tr><td colspan="2" rowspan="3">Team Project 3
회의록</td><td rowspan="3">참
여
자</td><td>학번</td><td>이름</td></tr>
<tr><td>2020098659</td><td>홍민정</td></tr>
<tr><td>2020027929</td><td>이수경</td></tr>
<tr><td>일시</td><td colspan="4">22. 05. 21</td></tr>
<tr><td>장소</td><td colspan="4">비대면(카카오톡)</td></tr>
<tr><td>주제</td><td colspan="4">PR과 SRK Equation을 이용한 HR, SR 유도 및 계산</td></tr>
<tr><td>내용</td><td colspan="4">오전 7시:
수경: 계산 과정에 대한 다른 의견이 없어서 그대로 하는 것으로 간주함. PR EOS로 HR과 SR식을 유도하고 설계한 계산 과정으로 엔트로피와 엔탈피를 단계별로 구하여 합침.

오후 3시:
민정: 계산한 엔트로피가 이상하다며 도움을 요청

오후 4시:
수경: 확인해본 결과, 민정이 사용한 Z=PV/RT 식이 SRK에서 활용하면 안 되는 식이며, dimensionless 상태로 만들지 않은 것을 파악. 새로운 식을 사용할 것을 제안하며 식을 알려줌

오후 7시:
수경: SRK 계산이 아직인지 물어봄, 오늘까지 계산한거 합치고 오차분석하는 게 어떠냐고 물어봄.
민정: 동의하고 내일은 자신이 유립(다른과목 과제)를 해야한다고 함.
수경: 계산한 거 보내주면 오차분석을 하겠다고 함.

오후 10시 20분:
수정된 SRK 계산 파일을 받음
하지만 아까 알려준 Z식으로 계산하지 않고 자신의 틀린 식으로 다시 계산 했음을 파악. 다시 수정할 것을 요청.</td></tr>
</table>

<table>
<tr><td></td><td>


새벽 3시:

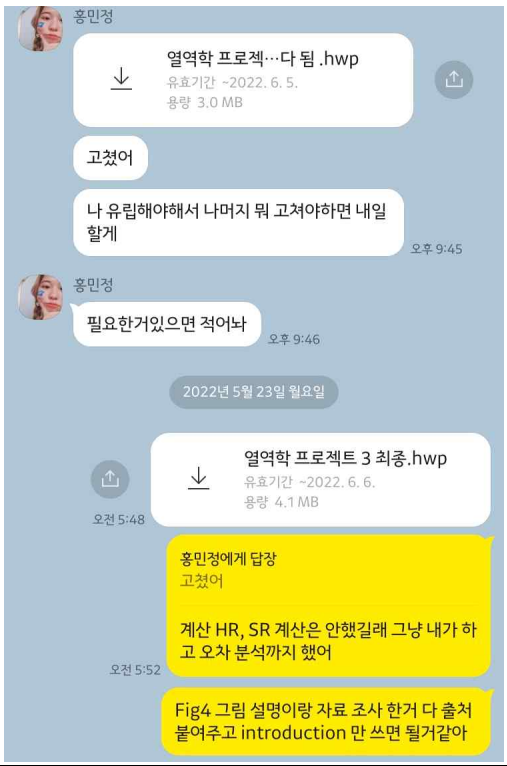
민정: 기존에 풀었던 걸 폐기하고 다시 계산 해서 보내줌

</td></tr>
<tr><td rowspan="2">해야 할 일 및 해 올 일</td><td>홍민정</td><td>내용 다시 확인 후 서론</td></tr>
<tr><td>이수경</td><td>내용 다시 확인 후 결론</td></tr>
</table>

<table>
<tr><td colspan="2" rowspan="2">Team Project 3
회의록</td><td rowspan="3">참
여
자</td><td>학번</td><td>이름</td></tr>
<tr><td>2020098659</td><td>홍민정</td></tr>
<tr><td>2020027929</td><td>이수경</td></tr>
<tr><td>일시</td><td colspan="3">22. 05. 22 (일)</td></tr>
<tr><td>장소</td><td colspan="3">비대면 (카카오톡)</td></tr>
<tr><td>주제</td><td colspan="3">잘못 계산한 SRK 유도 수정 & 오차분석</td></tr>
<tr><td>내용</td><td colspan="3">수경: 오차 분석을 위해 식을 확인하던 중 SRK의 dq/dTr과 다른 계산이 잘못되었음을 파악. 다시 계산해야 되는 부분을 표시해서 전달

민정: 다시 계산해서 전달해줌

수경: 보내준 내용을 바탕으로 SRK HR과 SR을 더 계산하고 오차분석을 함


</td></tr>
</table>

해야 할 일 및 해 올 일	홍민정	서론쓰기, Reference 정리
	이수경	결론 쓰기, reference 정리

Team Project 3 회의록	참 여 자	학번	이름
		2020098659	홍민정
		2020027929	이수경
일시	22. 05. 24		
장소	비대면		
주제	내용 추가 및 피피티 작업 회의		
내용	민정: 내용이 부족하다고 생각되는 공정 물질 설명과 공정의 단점을 보완하는 기술 조사 파트에 내용 추가적으로 기입 - 피피티 및 발표 분량 나누기 - 피피티 템플릿 설정 후 다음날까지 최대한 정리하기로 결정.		

해야 할 일 및 해 올 일	홍민정	내용 보완, 피피티 및 발표 녹음본
	이수경	내용 확인, 피피티 및 발표 녹음본