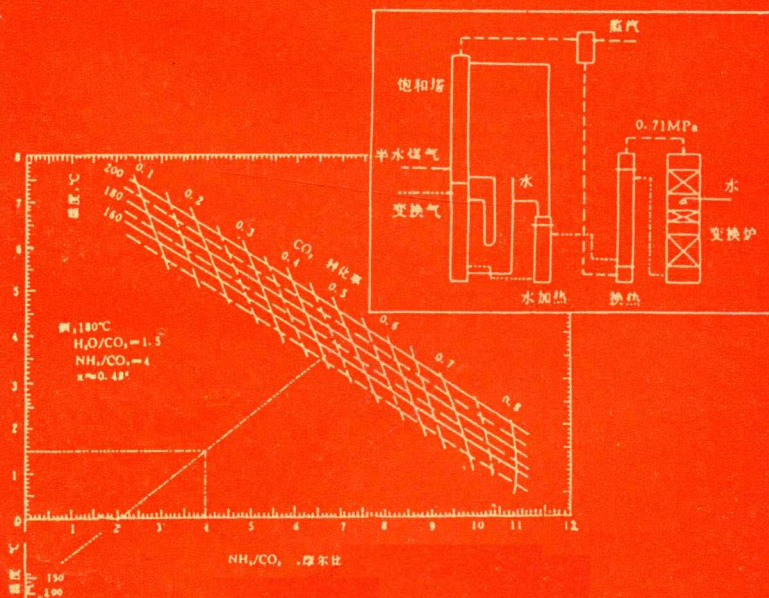


# 化工工艺计算

(上册)

蒋家俊 崔英德 编著



华南理工大学出版社

# 化工工艺计算

(上册)

蒋家俊 崔英德 编著

华南理工大学出版社

[粤]新登字 12 号

高等院校教学参考书

# 化工工艺计算

(上、下册)

崔英德 蒋家俊 编著

责任编辑 谢树琪

\*

华南理工大学出版社出版发行

广州市怡和电子印刷厂印刷

850×1168 毫米 32 开 18.625 印张 450 千字

1995 年 8 月第 1 版 1995 年 8 月第 1 次印刷

ISBN 7 - 5623 - 0889 - 6

TQ · 37 定价:16.80 元

# 目 录

|       |                  |       |
|-------|------------------|-------|
| 第一章   | 单位和一些基本概念 .....  | (1)   |
| § 1-1 | 物理量、量纲和单位 .....  | (1)   |
| § 1-2 | 一些基本概念 .....     | (11)  |
| § 1-3 | 化工过程开发概述 .....   | (20)  |
| 第二章   | 工艺实用计算方法 .....   | (29)  |
| 第三章   | 物料衡算和能量衡算 .....  | (61)  |
| § 3-1 | 稳态下的物料衡算 .....   | (61)  |
| § 3-2 | 热量衡算 .....       | (87)  |
| § 3-3 | 非稳态物料衡算 .....    | (98)  |
| 第四章   | 物性和物化参数的计算 ..... | (112) |
| § 4-1 | 物性计算 .....       | (112) |
| § 4-2 | 物化参数的计算 .....    | (131) |
| § 4-3 | 基本反应器的计算 .....   | (150) |
| 第五章   | 合成氨生产工艺计算 .....  | (160) |
| § 5-1 | 原料气制备 .....      | (161) |
| § 5-2 | 原料气的净制和变换 .....  | (184) |
| § 5-3 | 氨的合成 .....       | (224) |

# 第一章 单位和一些基本概念

## § 1-1 物理量、量纲和单位

1、物理量是表征物质性质、状态、其运动形式和特性、以及与周围环境关系等物理现象的参数。

化学工艺过程中重要的物理量有如下：

|             |                 |
|-------------|-----------------|
| 密度、比容       | 流速、流量           |
| 摩尔质量、相对摩尔质量 | 含量、浓度           |
| 粘度、表面张力     | 压强、蒸气压          |
| 扩散系数、导热系数   | 速率(传热、扩散、传质、反应) |
| 温度、热容、比热容   | 平衡常数(化学反应、相平衡)  |
| 相变热、反应热     | 反应级数、活化能        |

2、物理量中，可选定某些物理量作为基本物理量(简称基本量)，其他物理量可由这些基本量组合得到。如密度由物质质量与体积组合而成，摩尔热容则由热量与物质的量和温度组合而成。

这些基本量可以用一定的或特定的符号表示，如用  $L$ 、 $M$ 、 $T$ 、 $\theta$  分别表示四个基本量：长度、质量、时间、温度。如密度的量纲(即因次式)用  $ML^{-3}$  表示，其指数 1 和 -3 称为量纲指数。同理，速度的量纲为  $LT^{-1}$ ，加速度为  $LT^{-2}$ ，表面张力为  $MT^{-2}$ ，压强为  $ML^{-1}T^{-2}$ ，导热系数为  $MLT^{-3}\theta^{-3}$ 。当力和热量(功)也选为基本量并以  $F$  和  $Q$  表示时，压强的量纲可写成  $FL^{-2}$ ，导热系数的量纲可写成  $Q(LT\theta)^{-1}$ 。

3. 表示物理量的方程，在选定基本量后，其方程等号的左右两侧的量纲指数必然相等。例如力等于质量乘加速度，方程可

写成：

$$F^{\alpha} a = m^{\beta} \cdot a^{\gamma}$$

用量纲表示时：

$$(MLT^{-2})^{\alpha} = (M)^{\beta} (LT^{-2})^{\gamma}$$

根据量纲指数相等原则，解得

$$\alpha = \beta \quad \alpha = \gamma \quad -2\alpha = -2\alpha\gamma$$

方程成为：

$$F = ma$$

这也是因次分析(量纲分析)法的原理之一。

4、物理量的大小可用各种单位度量。由一系列的单位组成的度量系统称为单位制。我国规定统一实行法定计量单位制，包括有：

(1) 国际单位制的基本单位和辅助单位，其中与化工较密切有关的基本单位列于表 1-1。

(2) 国际单位制中具有专门名称的导出单位有 19 个，其中与化工较密切有关的列于表 1-2。

表 1-1 与化工较密切有关的国际单位制基本单位

| 量     | 单 位    | 单位符号 |
|-------|--------|------|
| 长 度   | 米      | m    |
| 质 量   | 千克(公斤) | kg   |
| 时 间   | 秒      | s    |
| 热力学温度 | 开[尔文]  | K    |
| 物质的量  | 摩[尔]   | mol  |
| 电 流   | 安[培]   | A    |

表 1-2 与化工较密切有关的具有专门名称的导出单位

| 量         | 单 位   | 单位符号     | 其他表示式            | 基本单位表示式                            |
|-----------|-------|----------|------------------|------------------------------------|
| 频 率       | 赫[兹]  | Hz       |                  | $s^{-1}$                           |
| 力,重力      | 牛[顿]  | N        |                  | $kg \cdot m \cdot s^{-2}$          |
| 压强,压力     | 帕[斯卡] | Pa       | $N \cdot m^{-2}$ | $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-2}$     |
| 能量,功,热量   | 焦[耳]  | J        | $N \cdot m$      | $kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}$        |
| 功 率       | 瓦[特]  | W        | $J \cdot s^{-1}$ | $kg \cdot m^2 \cdot s^{-3}$        |
| 摄氏温度      | 摄氏度   | ℃        |                  |                                    |
| 电荷量       | 库[仑]  | C        |                  | $A \cdot s$                        |
| 电位,电压,电动势 | 伏[特]  | V        | W/A              | $kg \cdot m^2 \cdot s^{-3} A^{-1}$ |
| 电 阻       | 欧[姆]  | $\Omega$ | V/A              | $kg \cdot m^2 \cdot s^{-3} A^{-2}$ |

表 1-3 国家选定的非国际单位的单位

| 量    | 单 位  | 单位符号   | 换算关系                               |
|------|------|--------|------------------------------------|
| 时 间  | 分    | min    | 1min=60 s                          |
|      | [小时] | h      | 1h=3600 s                          |
|      | 天[日] | d      | 1d=86400 s                         |
| 旋转速率 | 转每分  | r/min  | 1 r/min=(r/60)s <sup>-1</sup>      |
| 质 量  | 吨    | t      | 1t=10 <sup>3</sup> kg              |
| 体 积  | 升    | L, (l) | 1L=10 <sup>-3</sup> m <sup>3</sup> |

表 1-4 常用的构成十进倍数和分数单位的词头

| 所表示的因数           | 名 称  | 符 号   |
|------------------|------|-------|
| 10 <sup>6</sup>  | 兆    | M     |
| 10 <sup>3</sup>  | 千    | k     |
| 10 <sup>-1</sup> | 分    | d     |
| 10 <sup>-2</sup> | 厘    | c     |
| 10 <sup>-3</sup> | 毫    | m     |
| 10 <sup>-6</sup> | 微    | $\mu$ |
| 10 <sup>-9</sup> | 纳[诺] | n     |

(3) 国家选定的非国际单位制单位有 14 个,其中与化工较密切有关的列于表 1-3。

(4) 用于构成十进倍数和分数单位的词头有 16 个,其中常用的列于表 1-4。

5. 为准确使用法定计量单位,有国家标准规定其使用方法,下面作部分摘录并附说明:

(1) 单位与词头的名称(即文字的名称,如千牛顿)一般只宜在叙述性文字中使用。单位和词头的符号,在公式、数据表、曲线图等需要简单明了的地方使用,也可以用于叙述性文字中。应优先采用符号。

单位名称和单位符号都必须作为一个整体使用。

(2) 单位符号一律用正体字母。除来源于人名的符号的第一个字母要大写外,其余均为小写字母(升的符号 L 除外)。

单位符号后不附加省略点,也无复数形式。

单位符号应在全部数值之后,与数值间留半个数字的间隙。

(3) 词头符号一律用正体字母,大于  $10^3$  者为大写字母,小于  $10^3$ (包括  $10^3$ )者为小写字母。

词头符号与单位符号间不留空隙。

(4) 组合单位的名称与其符号表示的顺序一致,符号中的乘号没有对应的名称,除号的对应名称为“每”字,无论分母中有几个单位,“每”字都只出现一次。

书写组合单位名称时,不加任何表示乘或除的符号或其他符号。

乘方形式的单位名称,其顺序是指数名称在前,单位名称在后,指数名称由相应的数字加“次方”两字而成。但当长度的二次和三次幂分别表示面积和体积时,相应的指数名称为“平方”和“立方”。

(5) 当组合单位是由两个或两个以上的单位相乘所构成时(如力矩单位“牛顿·米”),可表示为下列形式之一:

$$\text{N} \cdot \text{m} \quad \text{Nm}$$

其中文符号间须加中圆点:“牛·米”。

若组合单位符号中其单位的符号同时又是某词头的符号,可能混淆时,单位符号应尽量置于右侧。

(6) 由两个或两个以上单位相除所构成的组合单位(如密度),可表示为下列形式之一:

$$\text{kg}/\text{m}^3 \quad \text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \quad \text{kgm}^{-3}$$

在可能发生误解时,尽量用居中圆点或斜线的形式。在一个组合单位中,斜线不得多于一条。当分母中包含两个以上单位符号时,整个分母加圆括号以免混淆。

在运算时,除号可用水平横线表示:  $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ 。

分子无量纲而分母有量纲的组合单位(即分子等于1的组合单位)的符号,一般用负数幂而不用分数式的形式。

(7) 选用的倍数单位,一般应使量的数值处于 0.1~1000 的范围内,如

$$1.2 \times 10^4 \text{N} \quad \text{写成} \quad 12 \text{kN}$$

$$3.1 \times 10^{-8} \text{s} \quad \text{写成} \quad 31 \text{ns}$$

习惯使用的单位和为对照方便而使用相同单位时,不受此限制。

(8) 不得使用重叠的词头。

(9) 对于组合单位,最好只使用 1 个词头,而且尽可能是组合单位中的第一个词头。分母中一般不用词头(面积和体积单位除外)。

一般不在组合单位的分子分母中同时采用词头,但质量单位 kg 除外。

(10) 法定单位制中,允许用汉字与单位的符号构成组合形式的单位,如:元/d, 万 t · km。

※        ※        ※        ※

[1-1]试写出以下物理量的量纲和单位,以长度  $L$ 、质量  $M$ 、时间  $T$  为其本量。

|    |     |      |
|----|-----|------|
| 力  | 流 速 | 质量流速 |
| 功  | 功 率 | 扩散系数 |
| 压强 | 粘 度 | 表面张力 |

解 见表 1-5。

表 1-5 一些物理量的量纲和单位

| 物理量  | 定 义                               | 量 纲              | 单 位                                                                         | 专门名称的组合单位 |                  |
|------|-----------------------------------|------------------|-----------------------------------------------------------------------------|-----------|------------------|
|      |                                   |                  |                                                                             | 常 用       | 其他形式             |
| 力    | 质量乘加速度                            | $MLT^{-2}$       | $kg \cdot m \cdot s^{-2}$                                                   | N         |                  |
| 流速   | 单位时间流经的距离                         | $LT^{-1}$        | $m \cdot s^{-1}$                                                            |           |                  |
| 质量流速 | 单位时间单位横截面积上流过的质量                  | $ML^{-2}T^{-1}$  | $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$                                              |           |                  |
| 功    | 力乘距离                              | $ML^{-2}T^{-2}$  | $kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}$                                                 | J         | $N \cdot m$      |
| 功率   | 单位时间内作的功                          | $ML^{-2}T^{-3}$  | $kg \cdot m^2 \cdot s^{-3}$                                                 | W         | $J \cdot s^{-1}$ |
| 扩散系数 | 单位时间单位厚度扩散层在单位面积上单位物质的浓度差时扩散传递的质量 | $L^2T^{-1}$      | $\frac{mol \cdot m}{m^2 \cdot s \cdot mol \cdot m^{-3}} = m^2 \cdot s^{-1}$ |           |                  |
| 粘 度  | 两层流体在单位接触面积单位层间距离时产生单位相对运动速度时所需的力 | $ML^{-1}T^{-1}$  | $\frac{N \cdot m}{m^2 \cdot m \cdot s^{-1}} = kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$ |           | $Pa \cdot s$     |
| 压 强  | 单位面积所受的力                          | $ML^{-1}T^{-2}$  | $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-2}$                                              | Pa        | $N \cdot m^{-2}$ |
| 表面张力 | 使液体表面单位长度上的表面收缩的力                 | $M \cdot L^{-2}$ | $kg \cdot s^{-2}$                                                           |           | $N \cdot m^{-1}$ |

[1-2] 将以下单位换算成法定单位。

(1) 压强: 1150 毫米汞柱。

(2) 粘度: 25 厘泊。

(3) 传热系数: 800 千卡/(米<sup>2</sup>·时·℃)。

(4) 表面张力: 20 达因/厘米。

解 (1) 根据压强定义, 1150 毫米汞柱的压强为:

$$\begin{aligned} p &= H\rho g = 1.15\text{m} \times 13600 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot 9.81 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2} \\ &= 156400 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2} = 0.1534 \text{ MPa} \end{aligned}$$

式中: 13600 kg·m<sup>-3</sup> 为汞的密度。

(2) 泊(P)是物理学中所用 CGS 度量制的粘度单位。1 泊是指: 使相距为 1 cm, 接触面积为 1 cm<sup>2</sup>、产生相对运动速度为 1 m/s 时需力为 1 达因的粘度单位, 其基本单位为:

$$\frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2} \cdot \frac{\text{cm}}{\text{cm/s}} = \frac{\text{g} \cdot \text{cm/s}^2}{\text{cm}^2} \cdot \frac{\text{cm}}{\text{cm/s}} = \text{g}/(\text{cm} \cdot \text{s})$$

法定单位制中, 粘度的单位为 Pa·s, 用基本单位表示时为 kg·m<sup>-1</sup>·s<sup>-1</sup>。由此可得:

$$1 \text{ P} = \frac{\text{g}}{\text{cm} \cdot \text{s}} = \frac{\text{kg}/1000}{(\text{m}/100) \cdot \text{s}} = 0.1 \text{ Pa} \cdot \text{s}$$

1 cP = 0.01 P, 因而:

$$25 \text{ cP} = 0.25 \text{ P} = 0.025 \text{ Pa} \cdot \text{s} = 25 \text{ mPa} \cdot \text{s}$$

(3) 1 卡(cal) = 4.187 J, 因而:

$$1 \frac{\text{kcal}}{\text{m}^2 \cdot \text{h} \cdot ^\circ\text{C}} = \frac{4.187 \times 1000 \text{ J}}{\text{m}^2 \cdot 3600 \text{ s} \cdot \text{K}} = 1.163 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$800 \text{ kcal}/(\text{m}^2 \cdot \text{h} \cdot ^\circ\text{C}) (= 930 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1})$$

(4) 由于: 1 dyn = 1 g·9.81 cm/s<sup>2</sup> = 9.81 g·cm/s<sup>2</sup>

$$1 \text{ N} = 1 \text{ kg} \cdot 9.81 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2} = 9.81 \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-2}$$

得:  $1 \text{ dyn} = 9.81 \cdot \frac{1}{1000} \text{ kg} \cdot \frac{1}{100} \text{ m} \cdot \text{s}^{-2} = 10^{-5} \text{ N}$

$$1 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}} = \frac{10^{-5} \text{ N}}{0.01 \text{ m}} = 10^{-3} \text{ N} \cdot \text{m}^{-1} = 1 \text{ mN} \cdot \text{m}^{-1}$$

$$20 \text{ dyn/cm} = 20 \text{ mN} \cdot \text{m}^{-1}$$

换算中,应按顺序逐项换算,以免混淆或错误。

[1-3] 试判断以下物理量和单位名称有无错误:

(1) 室温为摄氏 20 度。室温为  $20^{\circ}$

(2) 机器转速为 3 千秒 $^{-1}$ 。

(3) 运输任务为 5 万  $\text{t} \cdot \text{km}$ 。

(4) 力矩的单位为牛顿一米。

(5) 气体流速为  $3 \text{ ms}^{-1}$ 。

(6) 水的比重为 1。

(7) 水的重量为 1 克/厘米 $^3$ 。

(8) 氧的分子量为 32。

(9) 一克分子氧的质量为 32 克。

(10) 氧的热容为  $0.81 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。

解 (1) “摄氏度”不能分裂开来用,应作为整体使用。应为“室温为 20 摄氏度”或“室温为  $20^{\circ}\text{C}$ ”。

(2) 若转速为每秒钟 3000 转(超高速),应写成“机器转速为 3 千(秒) $^{-1}$ ”(此处“千”为数词),或“机器转速为  $3000 \text{ s}^{-1}$ ”。

若转速为每千秒钟 3 转(极低速),应写成“机器转速为 3 (千秒) $^{-1}$ ”(此处“千”为词头),或“机器转速为  $3 \text{ ks}^{-1}$ ”。

(3) 国家标准允许将汉字与单位符号构成复合形式的单位,“万  $\text{t} \cdot \text{km}$ ”(万吨公里)允许作用。

(4) 力矩的单位不应写成“牛顿一米”、“牛顿一米”、或[牛顿][米]”,其中文名称为“牛顿米”,其中文符号写成“牛·米”。

(5) 气体的流速宜写成“ $3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ”,以免将 m 混淆为词头,但“气体流速为  $3 \text{ ms}^{-1}$ ”写法并没有错。

(6) “比重”这概念在国际单位制或法定单位制中已废除,应当用“相对密度”的概念。

(7) “重量”这名辞在日常生活或工程口语中还通用,泛指质量。实质上,重量属于力的范畴,该名辞在国际单位制或法定单位中已不用,若指力则用“重力”这概念。应为:“水的密度为 1 克/厘米<sup>3</sup>”。

同理,“重度”这概念在国单位制或法定单位制中也不采用。

(8) “分子量”(及“原子量”)曾广泛使用,至今教材中还沿用。但现规定名称为“相对摩尔质量”或“相对分子摩尔质量”。

(9) “克分子”名辞也已不用,规定名称为“摩尔质量”或“分子摩尔质量”。

(10) 热容的单位为  $\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$ , 比热容的单位为  $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。

[1-4] 指出以下单位的写法有无错误:

(1) 力矩:  $\text{mN}$

(2) 密度:  $\text{Kg}/\text{m}^3$

(3) 摩尔热容:  $\text{kJ}(\text{kmol} \cdot \text{K})^{-1}$

(4) 比热容:  $\text{J}/\text{kg} \cdot \text{开}$

(5) 摩尔流量:  $\text{gmol}/\text{sec}$

(6) 频率(或波数):  $1/\text{m}$

(7) 功:  $\text{N} \cdot \text{Km}$

(8) 导热系数(热导率):  $\text{W}/\text{m}/\text{K}$

(9) 某物体长:  $1\text{m } 38 \text{ cm}$

(10) 微粒直径:  $10 \text{ m}\mu\text{m}$  (毫微米)

(11) 旋转速度:  $\text{rpm}$

解 (1) 力矩的单位宜写成  $\text{N} \cdot \text{m}$  或  $\text{Nm}$ , 不写  $\text{mN}$ , 以免误解为“毫牛顿”。

(2) 密度的单位为  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$  或  $\text{kg}/\text{m}^3$ ;  $\text{kg}$  的  $k$  为小写。

(3) 摩尔热容的单位应写成  $\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$  或  $\text{J}(\text{mol} \cdot \text{K})^{-1}$ ,

也可以用单位  $\text{kJ}(\text{mol} \cdot \text{K})^{-1}$ , 但不应在分子和分母同时用词头  $k$ 。

(4) 比热容的单位为  $\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$  或  $\text{J}(\text{kg} \cdot \text{K})^{-1}$ , 不能写成“ $\text{J}/\text{kg} \cdot \text{开}$ ”或“ $\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{开})$ ”, 即不能在组合单位中同时用单位符号和中文单位名称来组成, 不属于国际单位制的组合单位则除外。

比热容的单位也可以用  $\text{kJ}(\text{kg} \cdot \text{K})$ , 因为单位  $\text{kg}$  的  $k$  不是词头。

国际单位制中, “比”的涵义为“被除以质量”。

(5) 摩尔流量<sup>①</sup>的单位为  $\text{mol}/\text{s}$ 。克分子( $\text{gmol}$ )名辞在国际单位制中已不用。秒的国际单位制符号是  $\text{s}$ , 不是  $\text{sec}$ 。

(6) 频率的单位是  $\text{m}^{-1}$ , 不应写成  $1/\text{m}$ , 即分子无量纲而分母有量纲的组合单位, 宜用负数幂而不用分数的形式。

(7) 功的单位可用:  $\text{N} \cdot \text{m}$ 、 $\text{J}$ 、 $\text{kNm}$ 、 $\text{kN} \cdot \text{m}$ 、 $\text{kJ}$  等, 但不写成  $\text{N} \cdot \text{km}$ , 因词冠应在第一个单位之前。

(8) 导热系数的单位为  $\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ , 不应写成  $\text{W}/\text{m}/\text{K}$ , 因组合单位中只允许有一条斜线。

(9) 某物体长:  $1.38 \text{ m}$  或  $138 \text{ cm}$ , 不能写成  $1 \text{ m } 38 \text{ cm}$ 。

(10) 微粒直径:  $10 \text{ nm}$ , 不能写成  $\text{m}\mu\text{m}$ , 不许用重叠词头。

(11) 旋转速度:  $\text{r}/\text{min}$ , 不能写成  $\text{rpm}$ 。

### [1-5] 判断以下名称有无错误:

① “摩尔”是单位, 相应的物理量是“物质的量”。严格来说, 应称为“物质的量流量”或“物质质量流量”, 称为摩尔流量, 相当将体积流量称为立方米流量, 将质量流量称为千克流量, 这显然是不合逻辑和文理的。摩尔热容、 $\text{mol}\%$ 等理也如此。但我国国标中已规定采用“摩尔热容”、“摩尔体积”等名辞, 并已习惯引用, 故这里也按例沿用。

- (1) 波数或频率的单位为“负一次方米”。
- (2) 比热容的单位为“焦[耳]每千克每开[尔文]”。
- (3) 体积的单位是“米三次方”。
- (4) 以基本单位表示的力的单位是“千克秒负二次方”。
- (5) 力矩的单位是“牛[顿]乘米”。

解 正确的名称为:

- (1) 波数或频率的单位为“每米”。
- (2) 比热容的单位为“焦[耳]每千克开[尔文]”。
- (3) 体积的单位为“立方米”。
- (4) 以基本单位表示的力的单位为“千克米每二次方秒”或“米千克每二次方秒”。
- (5) 力矩的单位是“牛[顿]米”。作为暂时与国际单位制并用的单位时,力矩的单位名称也可以是“千克力米”。

## § 1-2 一些基本概念

工艺计算中,经常用到一些表达原料或反应物特性和利用程度的基本概念:含量和浓度、转化率、产率、选择率和利用率等。

### 1、含量和浓度

含量常指混合物中某组分的量占总量的分率。应强调指出,除注明外,液体和固体中组分的含量一般都指其质量分率,如18-8 不锈钢常指合金钢中含铬 18%(质量)和含镍 8%(质量)左右。气体中组分含量是指其体积分率,也即其摩尔分率,如空气中含氧 21%(指体积)。

以  $x$ 、 $X$  分别表示混合物中组分的质量含量和摩尔含量,其换算关系为:

$$x_A = \frac{X_A M_A}{X_A M_A + X_B M_B + \dots}$$

$$X_A = \frac{x_A / M_A}{x_A / M_A + x_B / M_B + \dots}$$

式中： $M$ ——各组分(A、B、……)的相对摩尔质量。

浓度是指一定体积物料中某组分的量，用  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ 、 $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$  或类似的单位表示。

## 2、平衡转化率

平衡转化率  $x_e$  是指可逆反应中，当反应达到平衡时，初始反应物参加化学变化的分率，即：

$$\text{平衡转化率 } x_e = \frac{\text{到达平衡时转化的某反应组分量}}{\text{初始该反应组分量}}$$

它常对特定的或具有一定经济价值的反应组分而言，如二氧化硫催化氧化反应中常指二氧化硫。

平衡转化率可以用该条件下反应的平衡常数计算，是该条件下反应时物料利用的极限。平衡转化率的值与化学热力学函数有关，与反应速率无关。在适当范围内，可以变动反应条件或工艺参数(如温度、压强、进料配比、浓度、掺合惰性组分或其他组分等)来改变平衡转化率。

对不可逆反应，只要有充分时间，反应物会按化学计量数全部转化，无所谓平衡转化率。

## 3、转化率

转化率是指实际条件下，反应结束时，初始反应组分参与反应的分率，即：

$$\text{转化率 } x = \frac{\text{实际转化的反应组分量}}{\text{初始反应组分量}}$$

转化率也是对特定的反应组分而言的。转化率总小于平衡转化率,因为生产条件下,为获得更多的合格产品,反应总只给以有限的时间。

为得到较高的转化率,要选用有利于反应的条件,如适宜的温度、高活性的催化剂等等。

#### 4、产率

产率的概念主要用于复合反应,并且往往是对产物而言的。在复合或复杂反应进行时,可能有多种产物生成,目的产物仅为全部产物的一部分。产率定义为:将特定反应组分按化学计量关系全部转化时所能生成的目的产物量为1,以实得的目的产物在其中所占的分率表示,即:

$$\text{产率} = \frac{\text{实得目的产物量}}{\text{特定反应组分全部转化时理论能得目的产物量}}$$

由于有副反应发生,产率总比转化率要低。

某些特殊情况下,如物系分离或副反应过于众多的复杂反应中,很难用反应的化学计量关系计算产量或理论产量,这时也用产率、得率或收率来表示产品的实收程度,是指目的产物占初始原料中的质量分率。举例来说,石油原油炼制时,直馏汽油占原油的分率即为其产率或收率。石油油品催化裂化时,裂化汽油占裂化油品的分率即为其产率,因为裂化时有众多的平行和连串反应,不能按化学反应式计算产量,并且石油油品和裂化汽油都不以化学纯度来衡量,而是以特定的指标(如馏程)为准的。

#### 5、选择率

选择率或选择性反映出在有平行反应或连串反应的复合反