

Excel 解析

冶金物理化学及应用

袁章福 张 涛 谢珊珊 张艳维 侯新梅 编著



冶金工业出版社
www.cnmp.com.cn

Excel 解析冶金物理化学及应用

袁章福 张 涛 谢珊珊 张艳维 侯新梅 编著

北 京
冶 金 工 业 出 版 社
2018

内 容 提 要

本书是《Excel 解析化学反应工程学》(冶金工业出版社, 2016) 的姊妹篇。结合冶金化工过程与材料领域的冶金物理化学应用基础研究内容, 本书第 1~6 章分别针对物质状态变化、热力学、相平衡、化学平衡、化学反应速率、电化学等进行了 Excel 的数值方法解析, 并对每章对应内容举例详解习题; 第 7、8 章为实际应用研究结果的实例, 分别论述了质能转换过程中物理化学计算和冶金过程 CO_2 资源化应用基础的科研成果。

本书适合于冶金工程、材料工程、资源与能源工程、化学工程与技术等相关专业的本科生、研究生和科研人员学习阅读, 对于一般工程科学和生物工程技术等方面的科研工作者学习使用 Excel 软件解决问题也具有参考价值。

图书在版编目(CIP)数据

Excel 解析冶金物理化学及应用/袁章福等编著. —北京:
冶金工业出版社, 2018. 10

ISBN 978-7-5024-7912-1

I. ①E… II. ①袁… III. ①表处理软件—应用—冶金—
物理化学 IV. ①TF01-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 237601 号

出 版 人 谭学余

地 址 北京市东城区嵩祝院北巷 39 号 邮编 100009 电话 (010)64027926

网 址 www.cnmp.com.cn 电子信箱 yjcs@cnmp.com.cn

责任编辑 刘小峰 美术编辑 彭子赫 版式设计 孙跃红

责任校对 石 静 责任印制 李玉山

ISBN 978-7-5024-7912-1

冶金工业出版社出版发行; 各地新华书店经销; 固安华明印业有限公司印刷

2018 年 10 月第 1 版, 2018 年 10 月第 1 次印刷

787mm×1092mm 1/16; 13.75 印张; 332 千字; 211 页

56.00 元

冶金工业出版社 投稿电话 (010)64027932 投稿信箱 tougao@cnmp.com.cn

冶金工业出版社营销中心 电话 (010)64044283 传真 (010)64027893

冶金书店 地址 北京市东四西大街 46 号(100010) 电话 (010)65289081(兼传真)

冶金工业出版社天猫旗舰店 yjgychs.tmall.com

(本书如有印装质量问题, 本社营销中心负责退换)



前 言

科学技术研究都要收集记录数据、编辑加工数据、分析统计数据、以适当的形式表达数据,来解释某个科学现象或者论证某一理论。这些科研数据处理过程和工程放大设计均可在 Microsoft Excel 软件中进行。Excel 集文字、数据、图表和图形为一体,对数据做计算、分析和统计。其特点是:操作简单易行、模型简明直观、函数种类繁多、易生成图表,并且备有一系列数据分析工具,故智能程度高、数据处理能力强。Excel 另一特点是通用性强,能与其他数学分析软件相互传递以及能直接输入现代仪器以 ASCII 语言记录的实验数据。本书重点是 Excel 软件在数值分析上的应用,关于 Excel 的介绍,可参考作者于 2016 年出版的《Excel 解析化学反应工程学》。读者可尝试使用书中未介绍的 Excel 指令,也可应用 Excel 强大的数据库管理功能分析、归纳、总结和存放浩瀚的文献资料和数据信息的功能,遇到困难可利用 Excel 的“帮助”菜单。

本书融入了北京科技大学、北京大学工学院和中国科学院大学本科生和研究生部分课程的教学实践,包括冶金熔体界面物理化学、化学反应工程学、清洁生产过程原理、资源化工原理和工业生态学等,同时结合冶金工程和材料领域的相关科研成果积累,展示了应用 Excel 数值处理和解析冶金物理化学的习题实例,期望能够满足相关课程的教学与科研需求。

本书的宗旨是有益于读者从理论基础开始,加深对冶金与材料物理化学及其应用的理解。本书以冶金物理化学等课程教学和科研中遇到的问题为例,着重介绍 Excel 的数值计算、解方程、线性回归和非线性回归等功能的应用。本书在第 1~6 章分别针对物质状态变化、热力学、相平衡、化学平衡、化学反应速率、电化学等进行了 Excel 的数值方法解析,并对每章对应内容举例详解习题;第 7、8 章为实际应用研究结果的实例,分别论述了作者完成的质能转换过程中物理化学计算和冶金过程 CO_2 资源化应用基础的科研成果,这些内容为国家自然科学基金项目或国家“863”高技术研究发展计划课题的部分内容。第 7

章包含转炉渣与 $\text{CO}-\text{CO}_2-\text{H}_2\text{O}$ 气体反应行为、加碳量对转炉渣中生成 CO/H_2 的影响、恒温条件下煤炭与转炉渣和无焓变条件煤炭与炉渣的相关热力学计算。第8章的冶金过程 CO_2 资源化应用基础内容涉及 CO_2 炼钢过程中的应用、转炉石灰石造渣的 CO_2 减排、 CO_2 在 AOD 炉不锈钢冶炼的资源化和转炉炼铜的喷吹原理等。

张涛负责撰写本书第1~3章内容。张涛是复旦大学在职博士生，2008年1月获得大连理工大学应用化学工学硕士学位后，赴日本富士精细化工株式会社工作两年，现任北京振东光明药物研究院副研究员，从事生物化工产品研发及生产工作。

北京科技大学侯新梅教授负责撰写第4、5章内容；袁章福教授负责编撰写第6~8章内容，并与谢珊珊和张艳维共同完成全书的编著，最终由袁章福执笔总纂定稿。

本书的形成得益于作者在北京科技大学、北京大学、中国科学院大学从事冶金工程、能源与资源工程、化学工程与技术本科生和研究生的教学和科研经历。衷心感谢北京科技大学2011钢铁共性技术协同创新中心周国治院士、徐金梧、徐科、孙彦辉、王丽君、何安瑞、陈雨来教授和中国金属学会副理事长赵沛教授等，北京科技大学钢铁冶金新技术国家重点实验室薛庆国、杨天钧、郭占成、胡晓军、包燕平、李京社、李晶、刘青教授和冶金与生态工程学院张立峰、邢献然、郭汉杰、张建良、宋波、王福明、王静松、徐安军教授等专家提供了支持帮助和宝贵意见，借此深表谢意。北京科技大学于湘涛博士、张岩岗博士生、焦楷、齐振、杨竣、王容岳、郭凌波、郝煜辉和施原涛等硕士生，北京大学工学院研究生吴燕、徐秉声、张利娜、傅振祥、战亚鹏、王晨钰、周舟、江涌、吴湖、方艳、吴振华、邱腊松、娄元元和刘敬霞科研助理，中国科学院过程工程研究所王志研究员、赵宏欣副研究员、王文静博士等，对本书的编著进行了文献收集和书稿整理，在此表示感谢。

本书的出版得到国家自然科学基金项目“烧结烟气净化过滤脱硫脱硝一体化集成技术”(U1560101)和“ CO_2 溅渣护炉质能转换和炉渣润湿机理的研究”(51174008)的资助，在此特别感谢工程与材料学部的朱旺喜博士和宝武钢铁

集团公司汪正洁教授级高工。还得到了国家高技术研究发展计划“863”课题“冶金炉窑微孔陶瓷管膜除尘器研制”(2013AA065105)和国家重点研发计划课题“大气污染全过程防治系列新技术研发”(2016YFC0209302)的支持,借此,衷心感谢国家科技部社发司邓小明司长和中国21世纪议程管理中心王磊、裴志永、王顺兵和樊俊博士等。本书在编著过程中得到了日本东京大学月桥文孝教授、森田一澍教授和松浦宏行副教授的指导和极大关照,在此一并深表诚挚的感谢和崇高的敬意。

由于作者水平和经验所限,书中不妥之处,敬请各位读者和专家给予批评指正。

袁章福

2018年6月

目 录

1 物质的状态变化	1
1.1 能量和做功	1
1.2 理想气体的状态方程	4
1.3 实际气体	9
1.4 单位换算	16
参考文献	19
2 热力学	20
2.1 热力学第一定律	20
2.2 焓和热容量	23
2.3 反应热的温度变化	26
2.4 卡诺循环	30
2.5 热力学第二定律	33
2.6 熵	37
2.7 热力学第三定律和自由能	41
习题详解	47
参考文献	54
3 相平衡	55
3.1 液体的蒸气压	55
3.2 固体的相变	58
3.3 吉布斯相律	61
3.4 溶液的热力学	64
3.5 气相-液相间的平衡 (气液平衡)	67
3.6 沸点上升和凝固点下降	70
3.7 渗透压	75
习题详解	77
参考文献	81
4 化学平衡	82
4.1 质量守恒定律	82
4.2 气相化学平衡	86
4.3 平衡常数的温度变化	90

4.4 活化配合物	93
习题详解	95
参考文献	100
5 化学反应速度	101
5.1 速率常数	101
5.2 复杂的化学反应	108
5.3 活化能	112
5.4 吸附等温方程式	116
5.5 光化学反应	121
习题详解	122
参考文献	125
6 电化学	126
6.1 电离和电解	126
6.2 离子迁移数和解离平衡	130
6.3 缓冲作用和溶度积	136
6.4 电池的电压和能斯特方程	143
6.5 浓差电池和分解电压	152
习题详解	156
参考文献	161
7 质能转换物理化学计算	162
7.1 研究背景	162
7.2 转炉渣与 $\text{CO-CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ 气体反应行为	166
7.3 加碳量对转炉渣中 CO 、 H_2O 的影响	171
7.4 恒温条件煤炭与转炉渣的相关热力学计算	175
7.5 无焓变条件煤炭与炉渣的相关热力学计算	179
参考文献	182
8 冶金过程 CO_2 资源化应用基础	185
8.1 CO_2 应用的研究背景	185
8.2 CO_2 炼钢过程中的应用	188
8.3 转炉石灰石造渣的 CO_2 减排	195
8.4 CO_2 在 AOD 炉不锈钢冶炼的资源化	203
8.5 转炉炼铜的喷吹原理	207
参考文献	210

1 物质的状态变化

物理化学是化学学科的理论基础，它从物质的物理现象与化学现象的联系入手，去探究化学变化的基本规律^[1]。热力学是从宏观方面研究物质变化的学科，由于物质的种种变化通常会伴随能量的输入与输出，所以物理化学中首先要研究热力学^[2,3]。化学热力学是物理化学和热力学的一个分支学科，它主要研究物质系统在各种条件下的物理和化学变化中所伴随的能量变化，从而对化学反应的方向和进行的程度做出准确的判断。化学热力学的核心理论：所有的物质都具有能量，能量是守恒的，各种能量可以相互转化，体系总是自发地趋向于平衡态，处于平衡态的物质系统可以用几个可观测的物理量进行描述^[4]。

物质通常有气体、液体和固体三种状态，也称为物质的“三态”。物质的这些状态，因温度、压力等因素的变化而变化。

1.1 能量和做功

质量是物质的固有属性，只要物质发生移动，就需要一定形式的能量对应不同形式的运动，能量分为机械能、分子内能、电能、化学能、原子能、内能等。如图 1-1 所示，质量为 m 的物质在作用力 f 的作用下，沿某个方向移动距离为 dr 时，那么在这个方向上作用力所做的功可以用如下关系式进行表示：

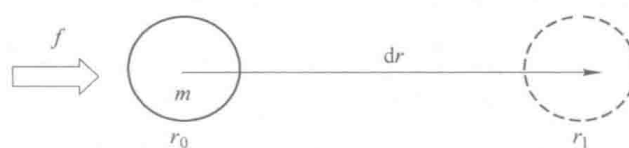
$$\begin{aligned}dW &= fdr \\W &= \int_{r_0}^{r_1} fdr = f(r_1 - r_0) \\f &= ma = m \frac{dv}{dt} \quad v = \frac{dr}{dt} \\W &= \int_{r_0}^{r_1} m \frac{dv}{dt} dr = m \int_{r_0}^{r_1} \frac{dr}{dt} dv = m \int_{v_0}^{v_1} v dv = \frac{1}{2} m (v_1^2 - v_0^2)\end{aligned}$$


图 1-1 质量为 m 的物质的移动

作用力所做的功 W 是作用力 f 与移动距离 r 的乘积，即：

$$W = f \times r = ma \cdot r \left[g \frac{\text{cm}}{\text{s}^2} \text{cm} \right]$$

将单位进行量纲分析，单位换算之后的结果如下所示：

$$g \frac{\text{cm}}{\text{s}^2} \text{cm} = \text{dyne} \cdot \text{cm} = \text{erg} = 10^{-7} \text{J}$$

例题 01

将质量为 8kg 的物体举到 1.5m 的高处时，需要克服重力做多少功？

如图 1-2 所示，将物体上举时，根据加速度 g ，克服重力所做的功为 $W = mgh$ 。计算结果如图 1-3 所示。

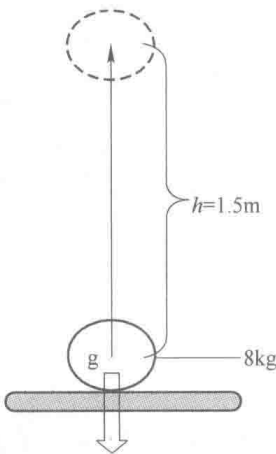


图 1-2 上举物体克服重力做功的示意图

	B6		fx =B3*1000*B5*B4		
	A	B	C	D	E
1	机械能				
2					
3	m	8 kg			
4	h	1.5 m			
5	g	980 cm/s ²			
6	W	11760000 erg			
7		1.176 J			
8		0.2811 cal			

图 1-3 计算结果

单元格的设定

- 单元格 B6 =B3 * 1000 * B5 * B4
- 单元格 B7 =B6/10000000
- 单元格 B8 =B7/4. 184

将机械能所做的功，于工作表中“单位 J 或 cal”前面所对应的单元格中录入计算公式、单位换算公式，即可以求出 erg 单位对应其他单位的功分别为 1.176J、0.2811cal。

例题 02

当 1L 的气体于 1atm 下压缩至 0.55L 时，求需要做多少功？

功 W 是压强 p 和体积 V 变化的乘积，即 $W = p(V_2 - V_1)$ ，计算结果如图 1-4 所示。计算单位中，压强的单位为 atm、体积的单位为 L，则功的单位应为 L · atm。SI 单位体系中，帕斯卡（Pa）是国际单位，所以单位相互之间的转换也很重要。1atm 为 1cm² 上施加 1kg 的作用力，水银的密度 d_{Hg} 为 13595kg/m³、重力加速度 g 为 9.80665m/s²，1atm 下托里拆利试验中的水银柱为 0.760m。

	B7			fx		=B6*E11*E9	
	A	B	C	D	E	F	G
1	气体的压缩						
2							
3	p	1 atm	1atm为1cm ² 上施加1kg的重力				
4	V ₁	1 L	g	9.80665	m/s ²		
5	V ₂	0.55 L	d _{Hg}	13595	kg/m ³		
6	W	-0.450 L.atm	T	237.15	K		
7		-45.6	Pa.m ³	水银柱	0.760 m		
8		-4.56 J	1atm	101324.3	N/m ²		kg.m/s ² .m ²
9		-1.09 cal		101324.3	Pa		kg/s ² .m
10			1L		1 dm ³		
11					0.001 m ³		

图 1-4 计算结果

单元格的设定

- 单元格 E8 =E7 * E5 * E4
- 单元格 B6 =B3 * (B5-B4)
- 单元格 B7 =B6 * E11 * E9
- 单元格 B8 =B6 * E8 * 1000/10000000
- 单元格 B9 =B8/4. 184

在工作表中设定好做功单位的换算公式后进行计算，则压缩所需要做的功为-0.45L·atm，变换单位后为-45.6Pa·m³。如果将单位换成“J”和“cal”，则所做的功为-4.56J、1.09cal。关于单位换算，虽然一直提倡使用 SI 体系中的国际统一单位，但是，现实生活中的常用单位如“L”和大气压“atm”等仍然被广泛使用，对于科学研究工作者来说，应该掌握单位换算的能力，本书的后续例题中也将随时提到单位换算的问题。

电能，按照做功的定义，电子所做的功 W 可表示为电位差 E 与电量 e 的乘积：

$$W = E(\text{volt}) \times e(\text{coulomb})$$

热能，按照做功的定义，可表示为温度 T 与熵 S 的乘积：

$$W = T(\text{K}) \times S(\text{entropy})$$

有关“熵”方面的问题，后续学习中再进行讨论。

另外，化学能，如果按照做功的定义，可表示为化学势 μ 与摩尔数 n 的乘积：

$$W = \mu(\text{chemical potential}) \times n(\text{mol})$$

有关化学势方面的问题，后续学习中再进行讨论。

总结上述不同形式做功的定义，均可表示为强度因子 (f, p, T, μ) 和容量因子 (r, V, s, n) 的乘积。

例题 03

求电压为 150V，2min 内通过 3.5kΩ 的镍铬铁合金线，电流所做的功即电热能为多少？

单位换算：

$1(\text{J}) = 1(\text{V, volt}) \times 1(\text{C, coulomb}), \quad 1(\text{coulomb}) = 1(\text{A, ampere}) \times 1(\text{s})$

于工作表中将电热能按照单位换算的关系式进行设定，单位可由“J”换算成“cal”。
根据计算结果（如图 1-5 所示），电热能 W 为 771.4J、184.4cal。

	B6		=B3*B3/B4/1000*B5*60			
	A	B	C	D	E	F
1	电热能					
2						
3	电压 E	150 V				
4	电阻 R	3.5 kΩ				
5	时间 t	2 min				
6	电热能 W	771.4 J				
7		184.4 cal				

图 1-5 计算结果

单元格的设定

单元格 B6 $=B3 * B3/B4/1000 * B5 * 60$

单元格 B7 $=B6/4.184$

1.2 理想气体的状态方程

波义耳定律（Boyle’s law，又称 Mariotte’s law）：在定量定温下，理想气体的体积与气体的压力成反比。英国化学家波义耳（Boyle）在 1662 年根据实验结果总结提出：“在密闭容器中的定量气体，在恒温下，气体的压力和体积成反比。”

$$V \propto \frac{1}{p}$$
$$pV = \text{const}$$

随后，有关气体的体积 V 与温度 $t(^{\circ}\text{C})$ 的关系，盖·吕萨克（Gay-Lussac）于 1801 年提出了盖·吕萨克定律：一定质量的气体，在压强不变的条件下，温度每升高（或降低） 1°C ，增加（或减少）的体积等于它在 0°C 时体积的 $100/26666$ （现今为 $1/273.15$ ）：

$$V = V_0 \left(1 + \frac{t}{273.15} \right)$$
$$\frac{V}{273.15 + t} = \frac{V_0}{273.15} = \text{const}$$
$$\frac{V}{T} = \text{const}$$

T 为绝对温度（ $t + 273.15$ ）。绝对温度的单位用“K”表示，是用威廉·汤姆森（William Thomson）受勋后名为凯尔文男爵一世或领主凯尔文（1st Baron Kelvin 或 Lord Kelvin）命名的。他是爱尔兰的数学物理学家、工程师，也是热力学温标（绝对温标）的发明人，被称为热力学之父。波义耳定律和盖·吕萨克定律用图表示，如图 1-6 所示。

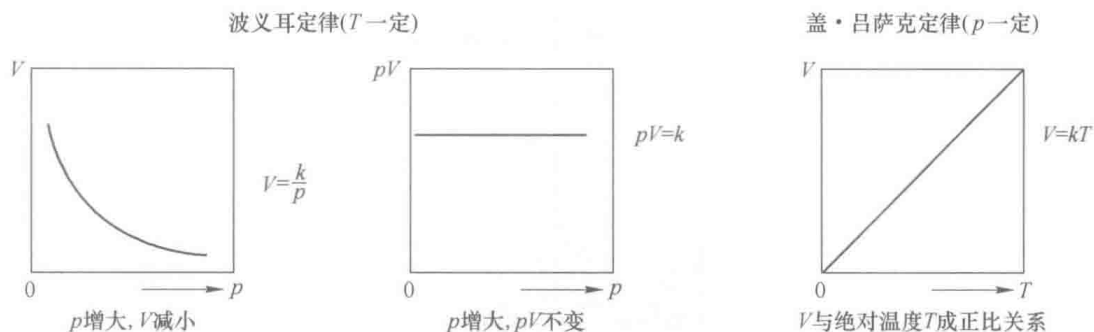


图 1-6 波义耳定律和盖·吕萨克定律图示

体积一定时,可以得到:

$$p = p_0 \left(1 + \frac{t}{273.15} \right)$$

将两个定律总结后得到的状态方程,即理想气体所遵守的状态方程:

$$\frac{pV}{T} = \text{const} = R: \text{gas constant (1mol)}$$

$$pV = nRT$$

R 被称为气体常数,其数值与气体种类无关,只与单位有关。

盖·吕萨克定律,早在 1787 年就被查理 (J. A. C. Charles) 发表了,早年也叫做“查理定律”。理想气体状态方程也被叫做波义耳-查理定律,如图 1-7 所示。

注:其实查理早就发现压强与温度的关系,只是当时未发表,也未被人注意。直到盖·吕萨克重新提出后,才受到重视。早年都称“查理定律”,但为表彰盖·吕萨克的贡献而称为“查理-盖吕萨克定律”。

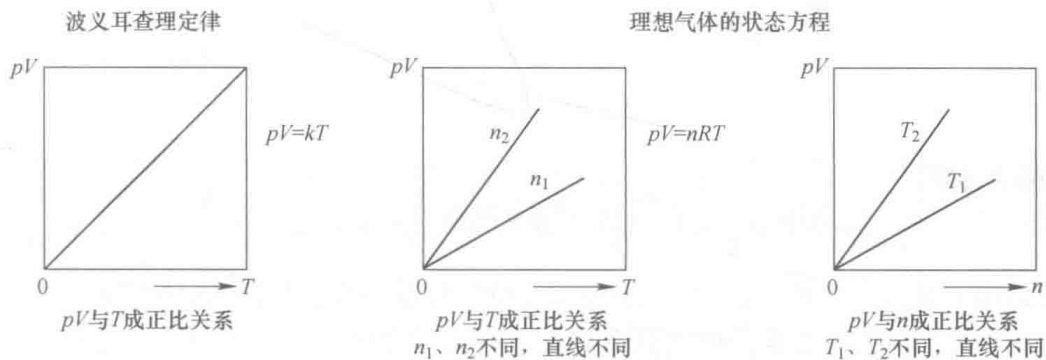


图 1-7 理想气体的状态方程

例题 01

托里拆利实验中水银柱和气压的关系如图 1-8 所示,请换算成气压的单位。

在管内灌满水银,排出空气,用一只手指紧紧堵住玻璃管开口端并把玻璃管小心地倒插在盛有水银的槽里,待开口端全部浸入水银槽内时放开手指,将管子竖直固定,当管内水银液面停止下降时,读出此时水银液柱与水槽中水平液面的竖直高度差,约为 760mm。如图 1-8 所示,管上部的真空部分被称作“托里拆利真空”(Torricellian vacuum),外部气压为 1atm 时,对应水银柱的高度为 760mm。

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ mmHg}$$

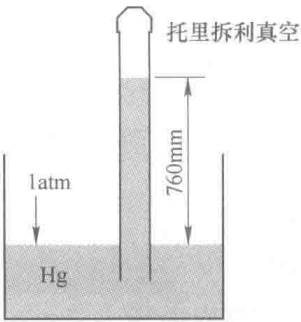


图 1-8 托里拆利真空

将 1atm 换算成帕斯卡 (Pa)，于工作表中设定换算公式，计算结果如图 1-9 所示。

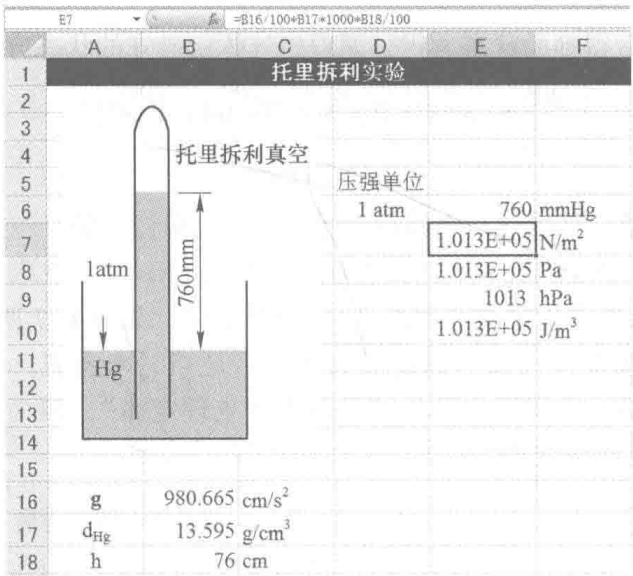


图 1-9 计算结果

单元格的设定

单元格 E7 =B16/100 * B17 * 1000 * B18/100

可以用水银柱的高度 (mmHg) 来表示定量气体的压强，如图 1-10 所示。当容器内的气体剧烈运动时，U 形管的两端就会出现水银柱的高度差，如水银面 *a* 受到气体的压强，会使得另一端的水银柱上升 *p* mmHg，水银柱的高度即表示定量气体的压强。

例题 02

表示变换气体常数的各种单位，并对应表示出各单位下的常数值。

虽然国际 SI 单位中推荐使用 J (焦耳, joule)，但是气体常数经单位换算之后有 0.08206L · atm/(K · mol)、8.3144J/(K · mol)、1.987cal/(K · mol)，根据计算的需要分别使用对应的常数值较好。

为了使气体常数 *R* 使用各种单位进行表示，进行了不同单位下的算式设定，如图 1-11 所示。

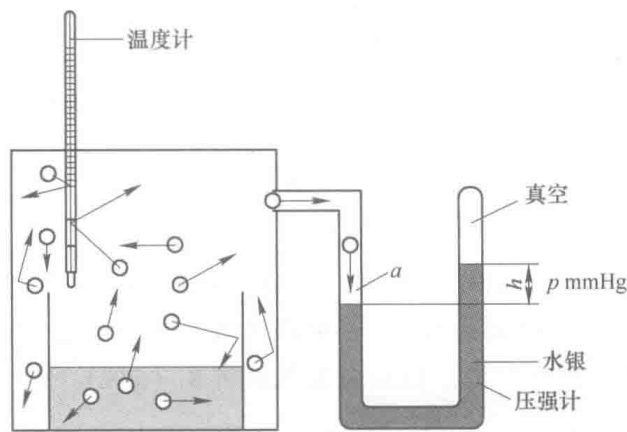


图 1-10 用水银柱表示气体的压强

B9		=B8*E12*E10				
A	B	C	D	E	F	G
1	气体常数 R					
2						
3	气体状态方程式 $pV=nRT$					
4	p	1 atm	1atm为每cm ² 上施加1kg的重力			
5	V	22.414 L	g	9.80665	m/s ²	
6	T	273.15 K	d _{Hg}	13595	kg/m ³	
7	n	1 mol	T	237.15	K	
8	R	0.08206 L.atm/K.mo	水银柱	0.760	m	
9		8.3144 J/K.mol	1atm	101324.3	N/m ²	kg.m/s ² m ²
10		1.987 cal/K.mol		101324.3	Pa	kg/s ² m
11			1L	1	dm ³	
12				0.001	m ³	
13			1 cal	4.184	J	

图 1-11 计算结果

单元格的设定

- 单元格 E9 =E8 * E6 * E5
- 单元格 B8 =B4 * B5/B6/B7
- 单元格 B9 =B8 * E12 * E10
- 单元格 B10 =B9/E13

两种以上的理想气体混合时，混合气体的总压等于各组分分压的和，称之为道尔顿“Dalton”分压定律^[5]。如下公式所示，成分*i*的分压可以通过分压的摩尔分数*x_i*来表示。

$$\begin{aligned} p &= p_1 + p_2 + \cdots + p_n = \sum_{i=1}^n p_i = n_1 \frac{RT}{V} + n_2 \frac{RT}{V} + \cdots \\ &= (n_1 + n_2 + \cdots) \frac{RT}{V} = n \frac{RT}{V} \\ n &= \sum_{i=1}^n n_i \end{aligned}$$

$$\frac{p_i}{p} = \frac{n_i \left(\frac{RT}{V} \right)}{n \left(\frac{RT}{V} \right)} = \frac{n_i}{n} = x_i$$
$$p_i = x_i p$$

例题 03

1atm 下干燥空气的组成 (vol%) 为: N₂ 78.08、O₂ 20.95、Ar 0.93、CO₂ 0.03, 如图 1-12 所示 (包含其他微量气体的成分)。分别求出 N₂、O₂、CO₂ 的分压和摩尔分数。另外, 求出空气的平均分子量和 25℃、1atm 下空气的密度 (g/L)。

各组分气体的相对分子质量分别为: N₂ 28、O₂ 36、CO₂ 44、Ar 39.95。
由各组分气体的分压可以求出各组分所占的摩尔分数, 从而算出空气的平均分子量, 然后再求出 25℃时空气的密度, 计算结果如图 1-13 所示。求得的空气的平均分子量为 28.95, 25℃时空气的密度为 1.2926g/L。

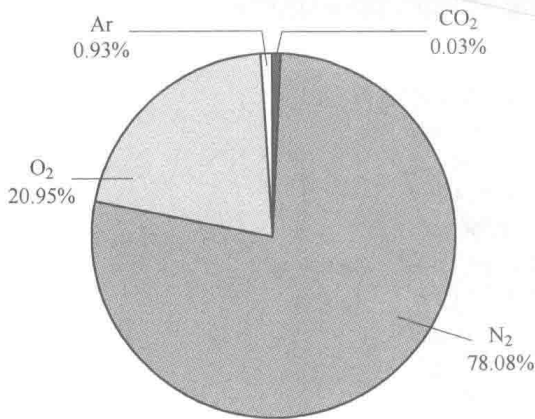


图 1-12 干燥空气的组成

F9		=F8/0.082/(273.15+C9)					
	A	B	C	D	E	F	G
1	干燥空气						
2							
3		vol%	分子量	分压(atm)	摩尔分数	空气	
4	N ₂	78.08	28	0.7808	0.7808	21.862	
5	O ₂	20.95	32	0.2095	0.2095	6.704	
6	Ar	0.93	39.95	0.0093	0.0093	0.372	
7	CO ₂	0.03	44	0.0003	0.0003	0.013	
8					MW =	28.951	
9					25℃时空气密度(g/L)	1.2926 g/L	

图 1-13 计算结果

单元格的设定

单元格 D4

=B4/100

单元格 F4

=D4 * C4

单元格 F5

=D5 * C5

单元格 F6

=D6 * C6

单元格 F7

=D7 * C7

单元格 F8

=SUM(F4;F7)

单元格 F9

=F8/0.082/(273.15+C9)

例题 04

容量为 5.0L 的反应容器中加入 N₂ 和 O₂ 的混合气体, 压强为 2atm 时, 维持混合气体的温度为 25℃。向容器内放入锌线, 通过电流加热使锌线氧化生成 ZnO 的方法将容器内的 O₂ 除去。容器中残留的 N₂ 的压强 25℃时为 1.5atm。求原来容器中 O₂ 的摩尔分数为多少?

如图 1-14 所示, 将混合气体中的 O_2 除去, 体积和温度一定时, 气体的摩尔数与压强成正比。

将混合气体中残留的氮气量减去即可得到氧气所占的量, 从而算出各气体组分的摩尔分数, 计算结果如图 1-15 所示。

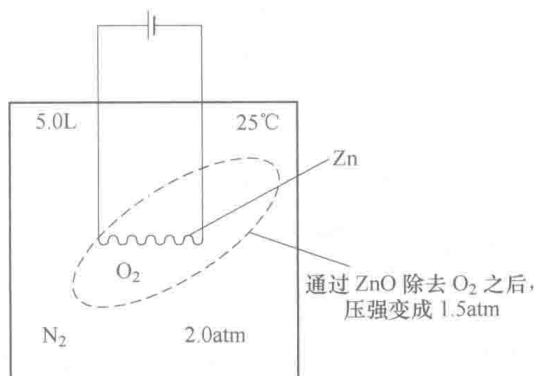


图 1-14 气体反应器

B6		=B4-B5		
	A	B	C	D
1	氧气的摩尔分数			
2				
3		开始时(atm)	摩尔分数	除氧后(atm)
4	混合气体的压强(atm)	2		1.5
5	N ₂	1.5	0.75	1.5
6	O ₂	0.5	0.25	0

图 1-15 计算结果

单元格的设定

单元格 B6 =B4-B5

单元格 C5 =B5/B4

单元格 C6 =B6/B4

根据计算结果, 开始时容器中氧气的分压为 0.5atm, 摩尔分数为 0.25。

1.3 实际气体

前面所研究的气体都是理想气体 (ideal gas), 忽略了气体本身的体积和分子间的作用力。实际上气体分子本身占有容积, 分子与分子间有相互作用力, 如果将其视为是理想气体会产生偏差, 这样的气体我们称之为真实气体 (real gas), 也称为实际气体。气体分子间的平均距离相当大, 分子体积与气体的总体积相比可忽略不计, 只有在低压、高温时的气体分子才可以近似为理想气体; 高压状态下由于分子自身的体积及分子间的相互作用力, 会产生较大的偏差。

为了真实反映出真实气体对理想气体的偏差程度, 引入压缩因子 z ,

$$pV = z \cdot nRT$$

$$z = \frac{pV}{nRT} = 1 + B'P + C'P^2 + \dots$$

$$pV = A + BP + CP^2 + \dots$$

上述方程式为维里 (Virial) 方程式, 为实际气体的状态方程。 $B=0$ 时, $pV=RT$, 此时的温度被称为波义耳温度。将幂级数 P^2 以上的项省略, 摩尔数为 1 时, 方程式就变为 $pV=RT+Bp$ 。