

SI 化学量与单位

● 李慎安 编著



中国计量出版社

化学量与单位

李慎安 编著

中国计量出版社

新登(京)字024号

内 容 提 要

自1971年国际计量大会通过把物质的量作为国际单位制的基本量以来，引起了化学中一些量和单位的变化和改革。目前正处于改革的深化之中。本书从实用出发，介绍了有关量和单位的概念、定义、用法、换算，并给出了一些计算的实例和供查阅的手册性资料。

本书可供化学领域的科研技术人员、教师、标准化与计量工作者、编辑、作者、翻译人员参考。

化 学 量 与 单 位

李慎安 编著

中国计量出版社出版

北京和平里西街甲 2 号

中国计量出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

开本 787×1092/32 印张 4.5 字数 98 千字

1992 年 8 月第 1 版 1992 年 8 月第 1 次印刷

印数 1—5 000

ISBN 7-5026-0527-4/TB·404

定价 3.20 元

前　　言

以 cm, g, s 作为基本单位, 用于力学领域的计量单位制以及以长度、质量和时间作为基本量构成的量制自 18 世纪末就开始了。在这个基础上加进摄氏温度而构成用于热学的量制以及加进℃构成的热学领域的单位制, 还有在这个基础上加进真空磁导率等于 1 或真空介电系数等于 1 这样的假设而构成的用于电学和磁学的电磁单位制和静电单位制在 18 世纪中期就已开始。尽管后来证明它们存在某些不合理因素, 电学和磁学有理化的, 并以四个基本单位为基础的单位制于 20 世纪开始之际亦已提出, 但是在化学这个领域, 尽管其兴起与发展的历史并不见得晚多少, 却是自 1971 年才建立起能导出这个学科中各个量的量制, 能导出所需单位的单位制。1971 年 10 月, 第 14 届国际计量大会决定把摩尔 (mol) 作为一个基本单位补充进国际单位制 (SI) 之中, 用以表示物质的量。从此, 在 SI 中, 就由 1960 年创立时的六个基本单位 (m, kg, s, A, K, cd) 发展到了现在的七个, 这不能不说是一个大的改进。把物质的量作为一个基本量, 独立于其它六个基本量, 有它特殊之处。从某些意义上说, 它比其它的六个基本量显得独特。其它六个, 较长期以来, 就是某些量制的基本量, 而且对应于它们的基本单位, 在不同单位制中, 多有好几个。物质的量则不同, 它只有 mol 作为它的基本单位, 而 mol 却又不只是从有了物质的量这一概念才开始使用的; 早在这个量未出现 (至少是未明确) 之前, 就在作为单位使用。可惜, 它表达的却是另外

的概念，而用于表达物质的量的单位，在过去却有一批不同的术语。这就给在化学这个领域中，采用 SI 以及某些新的量的概念造成了困难。

摩尔 mole 这一名称可以追溯到 Wilhelm Ostwald (1853.9.2~1932.4.4)。过去，把物质的量当作质量一类量来理解，这一观点在他给出的摩尔的定义中也有所体现。自那以后，摩尔等于分子量（原子量）作为数值，以质量单位 g 所表示的量。关于物质的量，其性质长期以来就在讨论之中。有三种不同的理解：

- a. 它是质量一类的量；
- b. 它只是一个数量，指某种基本单元的粒子数；
- c. 它以自身为量纲，独立于其它基本量的一个物理量（或称可测量，即可以用单位定量表达的一个量）。

现在，国际计量大会在国际理论化学和应用化学联合会 (IUPAC) 以及国际理论物理和应用物理联合会 (IUPAP)，国际标准化组织 (ISO) 关于必须定义一个物质的量的单位的提议的基础上，作出了决定，并把这个单位 mol 作为基本单位之一。不言而喻，上述的第三种理解是最适当的，从而解决了化学这个领域的量制与单位制的问题。

我国自 80 年代起，有计划地推行 SI，至今已近 10 年，前后制定了国家标准 GB 3102.8—82 (1986 年作了一次全面修订)，1984 年公布了我国的法定计量单位。ISO 于 1989 年又提出了 ISO 31—8 的修订草案《物理化学和分子物理学的量和单位》。本书将以以上的内容为基础，结合当前存在问题，作一些简明的阐述。此外，并提供某些供查阅的资料，以起到一个手册的作用。

这本书中的某些内容曾先后应邀在黎明化工研究院、国家技术监督局标准物质中心、原子能研究院，威海、青岛、

济南、泰安、杭州等地作过专题讲座的内容。这次以历次讲授提纲为基础，系统化成为本书，并参引了本人近几年的某些已发表的文章。成书中，陈维新同志给予了大量帮助，并审阅了全书，特表感谢。此外，中国标准出版社的付宝琴、张巧华，冶金出版社的刘永琴、化工标准审定委员会的瞿彩丽以及化工出版社的刘衍余等几位专家都对本书的完稿提供了可贵的建议，一并在此致谢。

欢迎读者对本书提出批评或建议。由于本人已离休多年，来函请寄家中。地址：[100013]北京和平里11—33，1—401。将十分感激。有关问题讨论的来信，必复。

李慎安

1990—09—27

目 录

| | |
|---------------------------|------|
| 1 量与量符号 | (1) |
| 1.1 可测量、物理量、基本量、导出量 | (1) |
| 1.2 非量参数 | (2) |
| 1.3 常量与常数 | (4) |
| 1.4 量符号与有关记号 | (4) |
| 1.5 量方程 | (10) |
| 2 单位与数 | (11) |
| 2.1 单位、类似单位的量和符号 | (11) |
| 2.2 数的形式 | (13) |
| 2.3 数值方程与单位 | (15) |
| 3 物质的量 | (19) |
| 3.1 SI 与物质的量 | (19) |
| 3.2 特点与使用 | (20) |
| 3.3 表达形式与运算 | (22) |
| 3.4 物质的量的导出量、摩尔量 | (23) |
| 3.5 摩尔质量 | (24) |
| 4 摩 尔 | (30) |
| 4.1 定义与复现 | (30) |
| 4.2 克分子、克当量的废除 | (33) |
| 5 当量粒子与当量定律 | (36) |
| 5.1 概念 | (36) |
| 5.2 离子的当量粒子 | (39) |
| 5.3 中和反应中的当量粒子 | (40) |
| 5.4 氧化还原反应中的当量粒子 | (41) |
| 5.5 当量定律 | (42) |

| | |
|---------------------------|-------|
| 6 表示含量与成分的量及其单位 | (44) |
| 6.1 分类 | (44) |
| 6.2 物质的量浓度(浓度) | (48) |
| 7 单位与计算举例 | (59) |
| 7.1 气体量的计算 | (59) |
| 7.2 化学热力学结果的表示与单位 | (63) |
| 7.3 溶液性质 | (64) |
| 7.4 H ⁺ 指数与水硬度 | (68) |
| 7.5 电解质电导 | (72) |
| 8 化学中量和单位表 | (75) |
| 9 关于“当量”和“当量浓度”用法的推荐 | (101) |
| 10 生化检验报告的量和单位 | (118) |
| 附录 | (123) |
| 附录 1 量的英文名称索引 | (123) |
| 附录 2 单位的英文名称索引 | (127) |
| 附录 3 我国法定计量单位及 SI 简介 | (129) |
| 附录 4 单位使用方法简介 | (133) |
| 附录 5 参考书目 | (135) |

1 量与量符号

1.1 可测量、物理量、基本量、导出量

可测流量 (measurable quantity) 和物理量 (physical quantity) 在不致与其它概念混淆时，均可称为量 (quantity)。前者国际上定义为：“现象、物体或物质可定性区别并定量确定的一种属性。”量可指广义的量，如：物质的量浓度、渗透压力、化学势；也可指特定量，如：某给定溶液中某给定溶质的浓度，某给定溶液中某纯溶剂的渗透压力。

a. 化学中使用的量必须导自 SI 所采用的七个基本量（长度、质量、时间、电流、热力学温度、物质的量与发光强度）。例如：摩尔电导率 A_m 导自长度、质量、时间、电流与物质的量；质量摩尔浓度 b 导自质量与物质的量。

b. 量的定义只能涉及量和数而不得涉及计量单位。例如：物质的量浓度 c 只能定义为：物质的量除以混合物的体积，而决不能定义为：物质的量除以单位“升”。摩尔质量 M 只能定义为：质量除以物质的量，而决不能定义为：1 mol 某物质 B 所具有的质量。这一特点可以理解为：一切量独立于计量单位。正因为如此，也不存在例如“毫摩尔质量”的概念。

c. 量必须能定量地给出，也就是说，能表示为计量单位的若干倍。因此，没有单位和不能用单位描述的某些概念，不能称之为量。例如：感光物质的感光性能、固体表面

的硬度。

d. 量独立于操作，也就是说不能用操作方法来定义量。例如：pH 就是从操作上定义的。pH 不是量，而溶液中的 H^+ 浓度则是量。

e. 量不包括计数量在内。例如：粒子数、分子数、质子数、物质 B 的化学计量数。这些概念，有时也往往称为无量纲量，但它们与七个基本量是没有联系的。它们与那些量纲指数等于零的无量纲量有原则上的区别。相对分子质量 M_r 也是无量纲量，但其量纲为质量的零次方。这个定性的概念把它按数学运算规律称之为“1”，是并不很恰当的。 M_r 并非计数的概念，而是两质量之比。

把物质的量理解为计数的概念也是错误的。

量制 (system of quantities) 是特定基本量及其导出量的组合。

基本量 (base quantity) 是量制的基础。它们的选择是有某种自由性的。但必须彼此之间不能导出 (即相互独立)，而又要能导出其所适用领域中的全部其它的量——导出量 (derived quantity)。基本量中不能有等于 1 的量 (例如：把真空磁导率定为“1”)。

化学领域中，提出物质的量作为基本量之后，与其它物理学科各领域一样，构成了完整的、系统的、合乎逻辑的量制和计量单位制，而纳入 SI 之中。

1.2 非量参数

在科学技术领域中，有一些名词的概念并非量，但它们往往又进入量方程中参与运算。例如：离子电荷数 z ，质子数或原子序数 Z ，绕组匝数 N ，分子数 N 。它们可以作为参数来理解。

在化学中，也还有另一种按给定单位定义的名词用于化学性质。如：

a. 酸度 (acidity) 定义为在规定条件下，中和 100 g 试样中的酸性物质所消耗的 OH^- 的物质的量 $n(\text{OH}^-)$ 有多少 mmol。这里，规定了试样为 100 g，而且用 mmol 表示 $n(\text{OH}^-)$ ，而它实质上是定量地给出试样中 H^+ 含量，所用单位是 mmol/100 g。类似试样中 H^+ 的质量摩尔浓度。这里，是物质的量除以溶液的质量而非除以溶剂的质量。因此，当用 mmol/100 g 作为单位表示试样中的 H^+ 含量时，是量的概念，而按定义所述就是个非量的概念，特别是最后只用“多少毫摩尔”。

b. 酸值 (acid value) 定义为在规定条件下，中和 1 g 试样中的酸性物质所消耗的 KOH 多少 mg。这里规定了用于中和的物质只能是 KOH，而按它的质量进行计算。给出的是中和试样所需 KOH 的质量比 ζ 。它是个无量纲量。在这里，消耗 KOH 多少 mg，实际上是用 mg/g 或 % 来表示中和所需的质量比的。

c. 重铬酸钾指数 (potassium bichromate index) 定义为在规定条件下，氧化 1 mL 试样消耗浓度 c ($\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$) 等于 $(1/60)$ mol/L 的溶液多少 mL (或 $c \left(\frac{1}{6} \text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 \right) = \frac{1}{10}$ mol/L 的溶液多少 mL)。

d. 溴值 (bromine number) 定义为在规定条件下，100 g 试样消耗多少 g 溴，它是用于说明物质不饱和度的。

此外，如碱度、皂化值、酯值、溴指数、碘值、高锰酸钾指数等也都类似。以上 a、b、c、d 四类，往往不能进入量方程而有时只能进入数值方程参与计算（参阅 2.3 节）。

1.3 常量与常数

化学领域中经常使用到的物理常量有：阿伏加德罗常量 N_A 、标准状况下理想气体的摩尔体积 V_m 、原子和分子的相对原子质量和相对分子质量 A_r 、 M_r 、摩尔气体常量 R 、玻耳兹曼常量 k 、元电荷 e 、法拉第常量 F 等。这类常量，过去汉语中长期来习惯称为常数。全国自然科学名词委员会 1989 年出版的《物理学名词》中，规定只有那些量纲等于 1 的才可称之为常数。如：圆周率 π 、自然对数的底 e 。

80 年代初，科学技术数据委员会 (CODATA) 中的基本常量组就开始收集和进行一次新的常量值平差的准备工作。直到 1986 年 6 月正式完成这项工作，并于同年 7 月 CODATA 的 20 周年年会上发表。同过去长期来的习惯一样，这些常量的测量不确定度 u 的置信水平取 $p = 1 - \alpha = 68.26\%$ 。并在给出的形式上，把不确定度 u 之值取两位以括弧置于测得结果之后，例如：

$$5.390\,58(34) \times 10^{-44} \text{ s}$$

表示： $(5.390\,58 \pm 0.000\,34) \times 10^{-44} \text{ s}$ ，其中 $u = 0.000\,34 \times 10^{-44} \text{ s}$ 。

下表（见 5, 6 页表）中给出的相对不确定度 u_r 是以 10^{-6} 为单位的值。其中只包括了与化学有密切关系的某些常量。

1.4 量符号与有关记号

量的符号无论出现在什么场合下，都应无例外地印成斜体字母。有时，打字机上只有正体，习惯上在表示量的字母符号下加一条横线以示区别，但这种方式尚未标准化。量符号的附加记号（如角标）中的字母，则未必一定也是斜体。一般只有它们是来自量时才是斜体，否则就是正体。例如：

| 常量 | 符号 | 量值 | $u_r/10^{-6}$ |
|----------|----------------|--|---------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
| 光速 | c | 299 792 458 (00) m/s | 0 |
| 真空磁导率 | μ_0 | $4\pi \times 10^{-7} (00) \text{ N/A}^2$ | 0 |
| 真空介电常量 | ϵ_0 | $8.854 187 817 \dots \times 10^{-12} (00) \text{ F/m}$ | 0 |
| 引力常量 | G | $4.672 59 (85) \times 10^{-11} \text{ m}^3/(\text{kg} \cdot \text{s}^2)$ | 128 |
| 普朗克常量 | h | $6.626 075(40) \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ | 0.60 |
| $h/2\pi$ | \hbar | $1.054 572 66(63) \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ | 0.60 |
| | | $6.582 122 0(20) \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$ | 0.30 |
| 元电荷 | e | $1.602 177 33(49) \times 10^{-19} \text{ C}$ | 0.30 |
| | e/h | $2.417 988 36(72) \times 10^{17} \text{ A/J}$ | 0.30 |
| 玻尔磁子 | μ_B | $9.274 015 4(31) \times 10^{-24} \text{ J/T}$ | 0.34 |
| | | $5.788 382 63(52) \times 10^{-5} \text{ eV/T}$ | 0.089 |
| 精细结构常数 | α | $7.297 353 08(33) \times 10^{-3}$ | 0.045 |
| 里德伯常量 | R _∞ | $10 973 731.534(13) \text{ m}^{-1}$ | 0.0012 |
| 玻尔半径 | a ₀ | $0.529 177 249(24) \times 10^{-10} \text{ m}$ | 0.045 |
| 哈特里能量 | E _h | $4.359 748 2(26) \times 10^{-18} \text{ J}$ | 0.60 |
| | | $27.211 396 1(81) \text{ eV}$ | 0.30 |
| 电子质量 | m _e | $0.910 938 97(54) \times 10^{-30} \text{ kg}$ | 0.59 |
| | | $5.485 799 08(13) \times 10^{-4} \text{ u}$ | 0.023 |
| 电子摩尔质量 | M(e) | $5.485 799 08(13) \times 10^{-7} \text{ kg/mol}$ | 0.023 |
| 康普顿波长 | λ_0 | $2.426 310 63(22) \times 10^{-12} \text{ m}$ | 0.089 |
| 汤姆逊截面 | σ | $0.665 246 16(18) \times 10^{-26} \text{ m}^2$ | 0.27 |
| 质子质量 | m_p | $1.672 623 1(10) \times 10^{-27} \text{ kg}$ | 0.59 |
| 质子摩尔质量 | M(p) | $1.007 276 470(12) \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$ | 0.012 |
| 中子质量 | m_n | $1.674 928 6(10) \times 10^{-27} \text{ kg}$ | 0.59 |
| 中子摩尔质量 | M(n) | $1.008 664 904(14) \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$ | 0.014 |

续表

| 常量 | 符号 | 量值 | $u_r/10^{-6}$ |
|------------|----------|---|---------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
| 阿伏加德罗常量 | N_A | $6.022\ 136\ 7(36) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ | 0.59 |
| 原子质量单位 | u | $1.660\ 540\ 2(10) \times 10^{-21} \text{ kg}$ | 0.59 |
| 法拉第常量 | F | $96.485.309(29) \text{ C/mol}$ | 0.30 |
| 摩尔普朗克常量 | $N_A h$ | $3.990\ 313\ 23(36) \times 10^{-10} \text{ J.s/mol}$ | 0.089 |
| 气体常量 | R | $8.314\ 510(70) \text{ J/(mol.K)}$ | 8.4 |
| 玻耳兹曼常量 | k | $1.380\ 658(12) \times 10^{-23} \text{ J/K}$ | 8.5 |
| 理想气体摩尔体积 | V_m | $22.414\ 10(19) \text{ L/mol}$ | 8.4 |
| 积 | | $(T = 273.15 \text{ K}, p = 101325 \text{ Pa})$ | |
| | V_m | $22.711\ 08(19) \text{ L/mol}$ | 8.4 |
| | | (在 $p = 100 \text{ kPa}$ 时) | |
| 斯忒藩-玻耳兹曼常量 | σ | $5.670\ 51(19) \times 10^{-8} \text{ W/(m}^2\cdot\text{K}^4)$ | 34 |
| 第一辐射常量 | c_1 | $3.741\ 774\ 9(22) \times 10^{-16} \text{ W}\cdot\text{m}^2$ | 0.60 |
| 第二辐射常量 | c_2 | $0.014\ 387\ 69(12) \text{ K}\cdot\text{m}$ | 8.1 |
| 维恩位移定律常量 | b | $2.897\ 756(24) \times 10^{-3} \text{ K}\cdot\text{m}$ | 8.4 |

相对原子质量 A_r , 摩尔体积 V_m 的下标均为正体, 而热扩散系数 D_T , 摩尔旋光本领 a_n 的下标均为斜体。

量符号可以用于表示某特定量。在表示特定量时, 其符号一般不另加记号以示区别, 除非某类量的若干不同特定量同时出现。例如: n_1 , n_2 , n_3 分别表示三个不同的物质的量。

量符号不仅可用于式子中表示量，也可在叙述性文字中，在不致误解时，直接用于代替它的名称。特别是在这段文字的前面已交代过某个量的符号的情况下。

当有的量存在不同含义时，用量的符号予以确定有时是重要的。如：重量一词在化学中恒指质量。它的符号应是 m 而不是 W ， G ， P 。因为后者是重力的符号（或者说，重量一词作为力理解时的符号）。

为了方便，量符号也经常以同义语的形式紧跟在量名称之后，而且其间不加任何形式的记号，如：重量 m ，其间不用逗号、连字符、引号等。

量符号是否只能读成它的字母名称还是只能读成它的量名称，并未标准化。因此，只要不致误解，既可按字母读，也可按它所表示的量名称读。

量符号无论是泛指某量还是只指某特定量，均暗含单位，即暗示为“数乘以单位”。因此，在它后面不应再给出单位。如：不能写“分子电偶极矩 $pC \cdot m$ ”。但是，如果符号所表示的量为无量纲量时，它后面可以跟单位而构成另一量，如： M_r 为相对分子质量，它是无量纲量，但 $M_r \text{ g/mol}$ 构成了摩尔质量 M ，即 $M = M_r \text{ g/mol} = 10^{-3} M_r \text{ kg/mol}$ 。这是摩尔质量与相对分子质量间十分常用的一个关系式。

最广泛使用的量，其符号均已在 GB·3102 中作了规定。在化学中的，见本书第 8 章。专门领域中使用的量，其符号应在有关 GB 中予以规定，应该采用标准化的符号。只有在尚未标准化的情况下，才可采用作者所给定的符号，但应避免混淆。量符号往往来自量的西文名称，但不是缩写，不得带有省略点。

同一个字母符号用于不同的量这种情况常有。例如： a 可表示相对活度、热膨胀系数、解离度、旋光角……； t 可

表示摄氏温度，时间……有可能混淆时，可采用备用符号或不同字体（大、小写）区别。例如，长度 l ，必要时可改用长度 L 。

量符号可以有六个位置附加记号。即四个角与上下。按标准规定，有些记号有特定的位置。最常用的是右上角与右下角。此外，当量的附加记号比较多时，可用括号齐线地置于量符号之后。方括号、花括号和角括号用于量符号之外时，往往有特殊含义，如：量 Q 表示为 $[Q]$ 时，代表 Q 的某个计量单位， $\{Q\}$ 代表按某单位之数值， $\langle Q \rangle$ 有时表示量 Q 之量纲（标准化的符号是 $\dim Q$ ）。

GB 3101～3102 中出现的非物理量的下角标，除化学中的已见本书第 8 章外，其它的还有：

- a 声的、原子的、轴的
- a, abs 绝对的
- c 特性的、临界的
- e 电的、电子的、辐射的，计示的（表的）
- eff 有效的
- en 吸收的
- eq 等效的
- F 快的
- g 气体的
- k 动的
- l 液体的
- m 力的、力学的、磁的、摩尔的、机械的、平均的、最大的
- max 最大的
- min 最小的
- N 核的

| | |
|-----|-----------------|
| D | 标准的、正常的、中子的 |
| P | 极的、势的、位的、质子的、点的 |
| R | 相对的 |
| S | 慢的 |
| s | 静的 |
| sat | 饱和的 |
| tot | 总的 |
| tr | 转移的、三相的 |
| v | 光的、视觉的、光度的 |

数字零作为下标时表示基础的、初始的、参考的。

当用数码作为量符号下标时，其含有以下几种：

- a. i_1, i_2, i_3 用于表示电流的第一、第二、第三次谐波分量，或在导体 1, 2, 3 中的电流，或在同一导体中的三个不同瞬间电流。
- b. R_{50} 表示摄氏温度 $t = 50$ °C 时的电阻，也可用于表示频率 $f = 50$ Hz 时的电阻。
- c. U_{99} 表示置信概率 $p = 1 - \alpha = 0.99$ 前提下的总不确定度
- d. i_∞ 表示时间无限大的电流。

化学元素符号和分子式作为附加记号时，有时指物质，有时指基本单元。后者，出现在导自物质的量的导出量符号之中。综合其它记号，给出下例：

| | |
|-----------------|-----------------------|
| ρ_{Cu} | 铜的电阻率 |
| $C_{p,B}^*$ | 纯物质 B 的定压摩尔热容（见第 8 章） |
| $\sigma_B^*(l)$ | 纯液体 B 的表面张力 |
| H_B^∞ | 物质 B 在无限稀薄溶液中的偏摩尔焓 |
| $S_{m,B}^*$ | 气体标准摩尔熵 |
| $S_{m,B}^\circ$ | 物质 B 的标准摩尔熵 |