



[美] Nicholas P. Chohey 主编

化工计算手册

(第三版)

*Handbook of
Chemical Engineering
Calculations*

(Third Edition)

朱开宏 译

中国石化出版社

化工计算手册

(第三版)

**Handbook of Chemical
Engineering Calculations
(Third Edition)**

【美】NICHOLAS P. CHOPEY 主编
朱开宏 译

中国石化出版社

内 容 提 要

本书通过几百道例题说明了各种化工过程的计算方法。这些例题包括物性估算、相平衡和化学平衡计算、化工过程的物料衡算和能量衡算、各类单元操作(精馏、吸收、萃取、搅拌、结晶、过滤、粉碎等)的计算、化学反应器的设计、化工过程的污染控制,以及技术经济评价。所有例题均提供了详尽的数值计算步骤和完整的答案。

本书可供从事化工及相关领域实际工作的工程技术人员快速查阅,寻找解决工作中突然遇到的各类化工计算问题的方法,也可作为化工及相近专业的学生学习化工计算、化工设计等课程的参考书。

著作权合同登记 图字:01-2004-3487号

Handbook of Chemical Engineering Calculations(Third Edition)

Nicholas P. Chohey

Copyright © 2004, 1994, 1984 by The McGraw-Hill Companies, Inc. All rights reserved. Printed in the United States of America. Except as permitted under the United States Copyright Act of 1976, no part of this publication may be reproduced or distributed in any form or by any means, or stored in a data base or retrieval system, without the prior written permission of the publisher.

中文版权为中国石化出版社所有。版权所有,不得翻印。

图书在版编目(CIP)数据

化工计算手册:第三版/[美]肖佩(Chohey, N. P.)主编;朱开宏译.
—北京:中国石化出版社,2005
书名原文:Handbook of Chemical Engineering Calculations
ISBN 7-80164-719-X

I. 化… II. ①肖…②朱… III. 化工计算-技术手册
IV. TQ015-62

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 021403 号

中国石化出版社出版发行

地址:北京市东城区安定门外大街 58 号

邮编:100011 电话:(010)84271850

读者服务部电话:(010)84289974

<http://www.sinopec-press.com>

E-mail: press@sinopec.com.cn

北京精美实华图文制作中心排版

北京大地印刷厂印刷

新华书店北京发行所经销

*

787×1092 毫米 16 开本 34.75 印张 844 千字

2005 年 3 月第 1 版 2005 年 6 月第 1 次印刷

定价:88.00 元

撰 稿 人

Robert M. Baldwin, 博士 教授, 科罗拉多矿业学院, 化学工程系, 哥尔顿, 科罗拉多
(化学动力学和反应器设计)

James R. Beckman, 博士 副教授兼副主席, 亚利桑那州立大学, 化学和材料工程系,
坦普, 亚利桑那(结晶)

Gerald D. Button, 市场经理, 罗氏制药公司, 费城, 宾夕法尼亚(其它化工计算中的
离子交换)

David S. Dickey, 博士 高级顾问, 混合技术公司, 代顿, 俄亥俄(液体搅拌)

Robert L. Dream, 博士 主任, 制药和生物技术部, 欧洲, 洛克伍德-格林公司, 桑莫瑟特,
新泽西(生物技术)

Otto Frank, 顾问(退休), 空气产品和化学品公司, 阿灵顿, 宾夕法尼亚(精馏)

James H. Gray, 博士 荣誉退休教授, 科罗拉多矿业学院 化学和石油炼制工程系, 哥尔
顿, 科罗拉多(化学计量学)

Michael S. Graboski, 博士 研究教授, 科罗拉多矿业学院, 化学工程系, 哥尔顿, 科罗
拉多(反应动力学和反应器设计)

Avinash Gupta, 博士 高级主任化学工程师, 雪佛龙-鲁姆斯环球公司, 布路姆菲德,
新泽西(物理和化学性质)

Wenfang Leu, 博士 研究科学家, 休斯顿大学, 化学工程系, 休斯顿, 德克萨斯(过滤)

Kenneth J. McNulty, 博士 研究开发部技术主任, 科启膜系统公司, 威敏顿, 马萨诸塞
(吸收和气提)

Paul E. Minton, 主任工程师(退休), 联合碳化物公司, 南查尔斯顿, 西弗吉尼亚
(传热)

Edwards S. S. Morrison, 高级工程师(退休), 联合碳化物公司, 休斯顿, 德克萨斯
(退休)

A. K. S. Murthy, 博士 技术学会特别会员, BOC, 莫瑞山, 新泽西(相平衡)

E. Dendy Sloan, 博士 教授, 科罗拉多矿业学院, 化学工程系, 哥尔顿, 科罗拉多(化
学平衡)

Ross W. Smith, 博士 教授, 雷诺内华达大学, 化学和冶金工程系, 雷诺, 内华达
(粉碎)

Louis Theodore, 博士 教授, 曼哈顿学院, 化学工程系, 瑞富代尔, 纽约(大气污染
控制)

Frank M. Tiller, 博士 荣誉退休教授, 休斯顿大学, 化学工程系, 休斯顿, 德克萨斯
(过滤)

William Vatauvuk, 总裁, 菲塔福克工程公司, 杜亥姆, 北卡罗莱纳(费用工程)

Frank H. Verhoff, 博士 副总裁, 美国技术公司, 辛辛纳提, 俄亥俄(萃取和沥取)

序

这本手册说明如何解决化工实践活动中经常会突然遇到的、与主要过程有关的问题。

本书(现为第三版)是极其成功的《工程计算标准手册》(*Standard Handbook of Engineering Calculations*)的派生产物。《工程计算标准手册》包含致力于各工程领域的独立章节,有关“化学工程”的一章内容相对较短。显而易见有必要出版一本完全集中于化学工程的类似手册。Tyler Hicks,上面提到的《工程计算标准手册》的编撰者是本书第一版的合编者,这有助于保证在运用形成标准手册特色的被普遍接受的方法方面的连续性。

这种方法由采用已求解的数值例题构成。除少数似乎特别适合采用引言的章节中的引言段落外,整本书全由已求解的例题组成。在每一章中,所选择的例题揭示了该章标题所包括的最重要的问题(除了对这种方法太复杂或难处理的问题)。在某些计算案例中,读者可借助计算器直接利用求解方法;在其它情况中,例题将提供执行计算机求解程序所需的对问题的理解。

第三版的主要变化是增加了新的三章:生物技术、费用工程和水污染控制。生物技术和费用工程这二章是专为本手册写的;水污染控制这章则以取自 Metcalf 和 Eddy 编写, McGraw-Hill 出版公司出版的权威手册《废水工程》(*Wastewater Engineering*)的有关例题为基础。除新增加的三章外,其余各章的内容也作了更新,其中大部分都包括了适当的新例题。

Nicholas P. Chohey

译者的话

诚如本书编者所言，本书主要用于解决化工实践活动中突然遇到的计算问题，因此本书主要是一本供匆忙的读者查阅的应急书。

为此，本书采用了一种相当独特的编写方式。除个别章节外，全书几乎没有关于基本概念阐述、公式推导之类的内容，而完全由各种化工过程计算问题的几百道典型例题组成，并提供了这些例题的详尽的数值求解步骤。这种编写方式不仅节省了篇幅，而且便于读者仿照例题的求解方法解决类似的计算问题。

本书涉及的内容相当广泛，虽然在翻译过程中曾就部分章节的译法请教过校内相关领域的专家，但限于译者的专业知识和英语水平，不妥甚至误译之处仍恐难完全避免，敬请读者不吝指正。

译者

2004年12月于上海华理苑

目 录

第 1 章 物理和化学性质	(1)
1.1 摩尔气体常数	(1)
1.2 用经验关联式估算临界温度	(1)
1.3 用基团贡献法估算临界性质	(2)
1.4 REDLICH-KWONG 状态方程	(6)
1.5 气体混合物的 $P - V - T$ 性质	(7)
1.6 气体混合物的密度	(11)
1.7 液体密度的估算	(11)
1.8 理想气体热容的估算	(12)
1.9 实际气体的热容	(16)
1.10 液体的热容——普遍化关联式	(18)
1.11 理想气体的焓差	(20)
1.12 蒸发热的估算	(20)
1.13 蒸气压的预测	(22)
1.14 焓的估算——普遍化方法	(25)
1.15 与相变有关的熵	(28)
1.16 用热容计算绝对熵	(29)
1.17 等熵条件下的膨胀	(30)
1.18 逸度的计算	(32)
1.19 用 SCATCHARD-HILDBRAND 方程计算活度系数	(34)
1.20 活度系数关联式和液 - 液平衡数据	(38)
1.21 活度系数关联式和气 - 液平衡数据	(39)
1.22 汇聚压力气 - 液平衡 K 值	(41)
1.23 来自元素的生成热	(56)
1.24 标准反应热, 标准自由能变化和平衡常数	(58)
1.25 由生成热计算标准反应热——水溶液	(59)
1.26 由燃烧热计算标准反应热	(60)
1.27 由燃烧热计算标准生成热	(61)
1.28 由溶解度数据计算吸收热	(62)
1.29 高温下液体粘度的估算	(62)
1.30 高压下非极性和极性气体的粘度	(63)
1.31 气体的热导率	(65)
1.32 液体的热导率	(65)
1.33 低压下二组分气体系统的扩散系数	(67)

1.34 纯液体表面张力的估算	(68)
-----------------	--------

参考文献	(68)
------	--------

第 2 章 化学计量学	(70)
-------------	--------

2.1 物料衡算——不涉及化学反应	(70)
-------------------	--------

2.2 物料衡算——涉及化学反应	(71)
------------------	--------

2.3 物料衡算——不完全的组成或流率数据	(72)
-----------------------	--------

2.4 关系元素在物料衡算计算中的应用	(73)
---------------------	--------

2.5 物料衡算——涉及化学反应和循环物流	(74)
-----------------------	--------

2.6 物料衡算——涉及化学反应、循环物流和排放物流	(75)
----------------------------	--------

2.7 能量衡算与物料衡算的应用	(76)
------------------	--------

2.8 物料衡算——将循环物流和排放物流与反应选择性和转化率相联系	(77)
-----------------------------------	--------

2.9 煤燃料在炉子中的燃烧	(80)
----------------	--------

2.10 燃料油在炉子中的燃烧	(82)
-----------------	--------

2.11 天然气在炉子中的燃烧	(83)
-----------------	--------

第 3 章 相平衡	(87)
-----------	--------

3.1 理想溶液性质的气-液平衡常数	(87)
--------------------	--------

3.2 纯液体的逸度	(88)
------------	--------

3.3 非理想气相混合物	(89)
--------------	--------

3.4 非理想液相混合物	(90)
--------------	--------

3.5 理想液相、非理想气相的 K 值	(92)
-----------------------	--------

3.6 理想气相、非理想液相的 K 值	(92)
-----------------------	--------

3.7 气-液平衡实验数据的热力学一致性	(93)
----------------------	--------

3.8 估算无限稀释活度系数	(95)
----------------	--------

3.9 估算活度系数的 Wilson 方程模型参数	(95)
---------------------------	--------

3.10 液相为理想时计算露点	(97)
-----------------	--------

3.11 气相为理想时计算泡点	(98)
-----------------	--------

3.12 气-液平衡的二元相图	(99)
-----------------	--------

3.13 多组分液-液平衡	(101)
---------------	---------

3.14 等温闪蒸计算	(102)
-------------	---------

参考文献	(103)
------	---------

第 4 章 化学反应平衡	(105)
--------------	---------

4.1 反应热	(105)
---------	---------

4.2 非常见化合物的生成热	(107)
----------------	---------

4.3 反应的标准 Gibbs 自由能变化	(108)
-----------------------	---------

4.4 平衡组成的估算	(109)
-------------	---------

4.5 基于混合标准态的活度	(110)
----------------	---------

4.6 温度和压力对平衡组成的影响	(111)
4.7 同时发生的已知化学反应的平衡组成	(112)
4.8 同时发生的未指明化学反应的平衡组成	(114)
4.9 非均相化学反应	(115)
4.10 计算反应转化率、选择性和产率	(116)
参考文献	(117)
第 5 章 反应动力学和反应器设计	(118)
5.1 由间歇反应器数据的积分分析确定速率表达式	(118)
5.2 由间歇反应器数据的微分分析确定速率表达式	(119)
5.3 求取绝热连续流动搅拌釜反应器的所需体积	(121)
5.4 计算等温活塞流反应器的大小	(124)
5.5 计算间歇反应器需要的反应时间	(126)
5.6 由连续流动搅拌釜反应器数据计算反应速率	(129)
5.7 催化剂的总表面积、活性表面积、孔隙率和平均孔径	(133)
5.8 搅拌釜反应器系统的大小确定和设计	(135)
5.9 由活塞流反应器数据确定反应速率表达式	(138)
5.10 反应 - 分离过程: 最优循环选择方案和最小要求选择性	(141)
参考文献	(144)
第 6 章 流体和固体的流动	(145)
6.1 BERNOLLI 原理和连续性方程	(145)
6.2 流体的相对密度和粘度	(145)
6.3 层流时管内的压力损失	(146)
6.4 确定管内压力损失	(146)
6.5 复杂串联管路的当量长度	(152)
6.6 水力半径和管内的液体速度	(153)
6.7 各种材料水管内的摩擦压头损失	(153)
6.8 管道的相对输送能力	(155)
6.9 压缩空气和气体管道内的流率和压力损失	(155)
6.10 液体流动过程中部分充满管道的计算	(157)
6.11 处理悬浮固体时管内的摩擦损失	(158)
6.12 确定蒸汽管路的压力损失	(159)
6.13 适合过程应用的汽水分离器的选择	(163)
6.14 蒸汽管路的孔板流量计选择	(168)
6.15 用于蒸汽设施的壓力调节阀的选择	(169)
6.16 用于水管路的减压阀的选择	(170)
6.17 离心泵的相似律和类似律	(172)
6.18 离心泵选择中的相似律和类似律	(172)

6.19	离心泵选择中的比速度考虑	(173)
6.20	选择离心泵的最佳操作速度	(176)
6.21	处理不含蒸气的液体时泵的总压头	(176)
6.22	任何泵送系统泵的选择	(179)
6.23	泵和系统特性曲线的分析	(186)
6.24	热液体泵的净正吸入头	(191)
6.25	离心泵的最小安全流量	(193)
6.26	选择处理粘稠液体的离心泵	(193)
6.27	液体粘度对再生泵性能的影响	(196)
6.28	液体粘度对往复泵性能的影响	(197)
6.29	粘度和溶解气体对旋转泵的影响	(197)
6.30	选择强制和诱导排风机	(199)
6.31	从能力表选择电厂排风机	(201)
6.32	最经济风机控制的确定	(203)
6.33	高真空系统真空泵的选择	(205)
6.34	真空系统的泵送速度和管道尺寸	(207)
6.35	粒状物料提升机和输送机的选择	(208)
6.36	螺旋输送机的输入功率和输送量	(211)
	参考文献	(213)

第7章	传热	(214)
7.1	确定辐射防护	(214)
7.2	黑表面盒内的辐射换热	(215)
7.3	阳光的热量对储罐的影响	(219)
7.4	未绝热表面到大气的热损失	(221)
7.5	绝热表面到大气的热损失	(222)
7.6	掩埋管线的热损失	(223)
7.7	非定态的热传导: 冷却时间	(223)
7.8	非定态的热传导: 温度	(224)
7.9	非定态的热传导: 温度分布	(224)
7.10	带式冷却器的热传导	(227)
7.11	确定带式冷却器的尺寸	(227)
7.12	间歇加热: 内蛇管, 等温加热介质	(228)
7.13	间歇冷却: 内蛇管, 非等温冷却介质	(229)
7.14	间歇冷却: 外换热器(逆流), 非等温冷却介质	(229)
7.15	间歇冷却: 外换热器(1-2多程), 非等温冷却介质	(230)
7.16	搅拌容器内的传热	(232)
7.17	自然对流传热	(233)
7.18	管内流体流动的传热系数: 强制对流, 显热	(234)

7.19 蛇管内流动流体的传热系数	(235)
7.20 通过管束的流体流动的传热系数: 强制对流, 显热	(236)
7.21 换热器的平均温差	(238)
7.22 列管式换热器的总传热系数	(241)
7.23 逆流换热器的出口温度	(244)
7.24 1-2 多程换热器的出口温度	(245)
7.25 垂直管的冷凝	(247)
7.26 水平管内的冷凝	(250)
7.27 水平管外的冷凝	(254)
7.28 存在不凝性气体时的冷凝	(257)
7.29 有上流蒸气冷凝器的最大蒸气速度	(260)
7.30 泡核沸腾传热	(260)
7.31 达到泡核沸腾的最小温差	(262)
7.32 釜式再沸器的最大热通量	(263)
7.33 用裸管的套管换热器	(264)
7.34 用纵向翅片管的套管换热器	(265)
7.35 低翅片管传热	(267)
7.36 翅片管束传热	(270)
7.37 空冷换热器	(272)
7.38 管内流动的压降: 单相流体	(275)
7.39 管内流动的压降: 两相流体	(278)
7.40 通过管束流动的压降: 单相流体	(280)
7.41 通过管束流动的压降: 两相流体	(285)
7.42 冷凝器-过冷器试验数据	(288)
7.43 换热器网络化	(291)
参考文献	(294)
第 8 章 精馏	(296)
8.1 平衡级的计算	(296)
8.2 精馏塔板选择和设计	(303)
8.3 塔效率	(311)
8.4 填料塔设计	(313)
8.5 间歇精馏	(316)
8.6 间歇塔设计	(317)
8.7 整个塔的选择和设计	(322)
第 9 章 萃取和沥取	(327)
9.1 多级逆流液-液萃取	(327)
9.2 多级逆流沥取	(330)

第 10 章 结晶	(335)
10.1 冷却产生无水盐固相	(335)
10.2 沸腾产生无水盐固相	(336)
10.3 冷却产生水合盐固相	(336)
10.4 沸腾产生水合盐固相	(338)
10.5 结晶分离苯和蔡	(339)
10.6 已知晶体大小分布(CSD)的分析	(341)
10.7 淤浆样品的晶体大小分布	(342)
10.8 加晶种结晶器产物的晶体大小分布	(344)
10.9 混合悬浮-混合产物排除结晶器的数据分析	(345)
10.10 产物筛分效率	(347)
参考文献	(348)
第 11 章 吸收和气提	(349)
11.1 填料塔的流体力学设计	(349)
11.2 填料塔的流体力学评价	(353)
11.3 用直平衡线和操作线确定吸收所需的填料高度	(353)
11.4 用直平衡线和操作线确定气提所需的填料高度	(358)
11.5 用平衡曲线和操作曲线确定吸收所需的填料高度	(361)
11.6 用模型系统的数据确定空气气提的传质单元高度(HTU)	(365)
11.7 存在实际瞬间不可逆化学反应时吸收所需的填料高度	(366)
第 12 章 液体搅拌	(369)
12.1 使搅拌器叶轮旋转所需的功率	(369)
12.2 设计混合二种液体的搅拌器	(371)
12.3 达到均匀混合所需的时间	(375)
12.4 搅拌槽内的传热	(377)
12.5 搅拌固体悬浮系统的放大	(378)
12.6 气体分散的搅拌器设计	(380)
12.7 涡轮搅拌器轴的设计	(382)
12.8 由搅拌器功率确定粘度	(385)
12.9 液体搅拌器的非几何相似放大	(388)
参考文献	(394)
第 13 章 粉碎	(395)
13.1 粉碎或磨碎物料的颗粒大小分布	(395)
13.2 由间歇球磨试验获得的破碎和选择函数	(396)
13.3 由进料数据预测产品颗粒大小分布	(398)
13.4 闭路研磨的物料衡算	(399)

13.5 功耗指数计算	(400)
13.6 作为功耗指数函数的研磨功率消耗	(400)
13.7 球磨机操作参数	(401)
13.8 研磨介质的最大尺寸	(401)
13.9 研磨机牵引功率	(402)
13.10 闭路研磨系统的水需求	(402)
参考文献	(404)
第 14 章 过滤	(405)
14.1 过滤计算基础	(405)
14.2 恒压过滤	(406)
14.3 离心泵过滤	(410)
14.4 滤饼洗涤	(413)
14.5 回转真空鼓过滤机	(416)
14.6 回转真空鼓过滤机的设计	(419)
14.7 颗粒床过滤机的压降和比沉积率	(421)
参考文献	(424)
第 15 章 大气污染控制	(425)
15.1 粒子沉降室的效率	(425)
15.2 旋风分离器的效率	(427)
15.3 确定静电沉降器的大小	(428)
15.4 文丘里洗涤操作的效率	(429)
15.5 袋滤器系统的选择	(430)
15.6 为有气味的蒸汽确定冷凝器大小	(431)
15.7 挥发性有机化合物吸附器所用吸附剂的数量	(432)
15.8 加力燃烧室的性能	(433)
15.9 气体清洁吸收器大小的初步确定	(435)
15.10 估计意外排放的危害距离	(436)
15.11 按未燃可燃性气体的着地浓度	(436)
参考文献	(437)
第 16 章 水污染控制	(438)
16.1 固体数据分析	(438)
16.2 气体浓度单位的转换	(439)
16.3 氧在水中的饱和浓度	(439)
16.4 由实验室数据确定生物化学需氧量(BOD)	(440)
16.5 理论需氧量(ThOD)的计算	(440)
16.6 BOD 持续不变的质量负荷值的开发	(441)

16.7	粗筛中压头损失的构成	(443)
16.8	流率均化体积要求的确定和对 BOD 质量负荷值的影响	(444)
16.9	废水絮凝器的功率需求和搅拌面积	(448)
16.10	活性淤泥沉淀槽大小的确定	(448)
16.11	活性淤泥工艺中苯的气提	(450)
16.12	由未处理废水的化学沉淀估计淤泥体积	(452)
16.13	脱除磷酸盐用明矾剂量的确定	(453)
16.14	根据初级沉淀槽中磷酸盐和石灰的化学沉淀估计淤泥体积	(454)
16.15	反应势的确定	(457)
16.16	实测的生物体生成量和氧消耗量	(458)
16.17	生物体量和固体量的确定	(459)
16.18	预测厌氧反应器产生的甲烷	(460)
16.19	废水特性评价	(461)
16.20	用 NRC 方程确定滴流过滤器的大小	(463)
16.21	过滤介质尺寸的确定	(464)
16.22	去矿物质所需膜面积的确定	(465)
16.23	电渗析的面积和功率需求	(466)
16.24	活性炭吸附数据的分析	(467)
16.25	估计典型二次污水所需臭氧剂量	(468)
16.26	紫外线消毒系统的设计	(470)
16.27	污水组成的估计	(471)
16.28	设计组合的用于原生和废活性污泥的重力增稠器	(473)
16.29	带式压滤机设计	(474)
	参考文献	(476)

第 17 章 生物技术 (477)

17.1	确定接种某生物反应所需的实验室反应器的尺寸	(477)
17.2	估计生物反应器杀菌所需的保持时间	(477)
17.3	确定杀菌器需要的容积	(479)
17.4	求取水中溶解氧的传质系数	(480)
17.5	对水中氧的扩散系数进行估计并评估其结果	(480)
17.6	计算喷射生化反应器的参数	(481)
17.7	确定用于蛋白质溶液微过滤的过滤器的尺寸	(483)
17.8	估计从肉汤中除去细菌的 Westfalia 分离器的能力	(485)
	参考文献	(486)

第 18 章 费用工程 (488)

18.1	利用放大因子估计装置资本费用	(490)
18.2	资本和年度费用的升降	(490)

18.3 单元操作总投资	(492)
18.4 过程年度费用	(495)
18.5 净现值(NPW)分析	(496)
18.6 内部收益率(IRR)分析	(498)
18.7 当量均匀年度收益(EUAR)分析	(499)
18.8 评价投资备选方案	(500)
参考文献	(501)
第 19 章 其它化工计算	(502)
19.1 蒸汽 Mollier 图和蒸汽表的应用	(502)
19.2 蒸汽表数值的内插	(504)
19.3 等压蒸汽过程	(506)
19.4 等容蒸汽过程	(508)
19.5 等温蒸汽过程	(509)
19.6 等熵蒸汽过程	(511)
19.7 蒸汽的不可逆绝热膨胀	(512)
19.8 不可逆绝热蒸汽压缩	(513)
19.9 蒸汽和水的节流过程	(515)
19.10 湿度图的应用	(516)
19.11 冷却塔的排污和补充要求	(518)
19.12 水软化器选择和分析	(519)
19.13 水的完全去离子化	(520)
19.14 已知热负荷的冷却池容积	(523)
19.15 过程温度控制分析	(524)
19.16 过程控制的控制阀选择	(525)
19.17 控制阀的特性和可控范围	(527)
19.18 控制器选择中的气蚀、次临界和临界流动考虑	(528)
19.19 固体的间接干燥	(530)
19.20 固体的真空干燥	(533)
19.21 水的热力学和传递性质估算	(534)
19.22 评价容器吊耳的适用性	(536)

第 1 章 物理和化学性质

Avinash Gupta 博士

高级主任化学工程师

雪佛龙-鲁姆斯环球公司

布路姆菲德, 新泽西

1.1 摩尔气体常数

计算采用下列单位的摩尔气体常数 R :

a. $(\text{atm})(\text{cm}^3)/(\text{g}\cdot\text{mol})(\text{K})$

b. $(\text{psia})(\text{ft}^3)/(\text{lb}\cdot\text{mol})(^\circ\text{R})$

c. $(\text{atm})(\text{ft}^3)/(\text{lb}\cdot\text{mol})(\text{K})$

d. $\text{kWh}/(\text{lb}\cdot\text{mol})(^\circ\text{R})$

e. $\text{hp}\cdot\text{h}/(\text{lb}\cdot\text{mol})(^\circ\text{R})$

f. $(\text{kPa})(\text{m}^3)/(\text{kg}\cdot\text{mol})(\text{K})$

g. $\text{cal}/(\text{g}\cdot\text{mol})(\text{K})$

【计算步骤】

1. 假定基准 假定气体处于标准状态, 即 1atm (101.3kPa) 和 0°C (273K 或 492°R) 下的 $1\text{g}\cdot\text{mol}$ 气体占有 22.4L 体积。

2. 计算气体常数 利用适当的转换因子并获得不同单位的气体常数。利用 $PV = RT$; 即 $R = PV/T$ 。于是,

a. $R = (1\text{atm})[22.4\text{L}/(\text{g}\cdot\text{mol})](1000\text{cm}^3/\text{L})/273\text{K} = 82.05(\text{atm})(\text{cm}^3)/(\text{g}\cdot\text{mol})(\text{K})$

b. $R = (14.7\text{psia})[359\text{ft}^3/(\text{lb}\cdot\text{mol})]/492^\circ\text{R} = 10.73(\text{psia})(\text{ft}^3)/(\text{lb}\cdot\text{mol})(^\circ\text{R})$

c. $R = (1\text{atm})[359\text{ft}^3/(\text{lb}\cdot\text{mol})]/273\text{K} = 1.315(\text{atm})(\text{ft}^3)/(\text{lb}\cdot\text{mol})(\text{K})$

d. $R = [10.73(\text{psia})(\text{ft}^3)/(\text{lb}\cdot\text{mol})(^\circ\text{R})](144\text{in}^2/\text{ft}^2)[3.77 \times 10^{-7}\text{kWh}/(\text{ft}\cdot\text{lbf})]$
 $= 5.83 \times 10^{-4}\text{kWh}/(\text{lb}\cdot\text{mol})(^\circ\text{R})$

e. $R = [5.83 \times 10^{-4}\text{kWh}/(\text{lb}\cdot\text{mol})(^\circ\text{R})](1/0.746\text{hp}\cdot\text{h}/\text{kWh}) = 7.82 \times 10^{-4}\text{hp}\cdot\text{h}/(\text{lb}\cdot\text{mol})(^\circ\text{R})$

f. $R = (101.325\text{kPa}/\text{atm})[22.4\text{L}/(\text{g}\cdot\text{mol})][1000\text{g}\cdot\text{mol}/(\text{kg}\cdot\text{mol})]/(273\text{K})(1000\text{L}/\text{m}^3)$
 $= 8.31(\text{kPa})(\text{m}^3)/(\text{kg}\cdot\text{mol})(\text{K})$

g. $R = [7.82 \times 10^{-4}\text{hp}\cdot\text{h}/(\text{lb}\cdot\text{mol})(^\circ\text{R})][6.4162 \times 10^5\text{cal}/(\text{hp}\cdot\text{h})][1/453.6\text{lb}\cdot\text{mol}/(\text{g}\cdot\text{mol})]$
 $(1.8^\circ\text{R}/\text{K}) = 1.99\text{cal}/(\text{g}\cdot\text{mol})(\text{K})$

1.2 用经验关联式估算临界温度

用 Nokay 经验关联式预测 (a) 正二十烷、(b) 1-丁烯和 (c) 苯的临界温度。Nokay 关联式为

$$\lg T_c = A + B \lg SG + C \lg T_b$$

式中 T_c 是以开尔文温度表示的临界温度, T_b 是以开尔文温度表示的常压沸点, 和 SG 是 60°F 下的液态烃相对于同温度水的相对密度。至于 A 、 B 和 C 是表 1.1 所列的关联常数。

表 1.1 Nokay 方程的关联常数

化合物族	A	B	C
烷 烃	1.359397	0.436843	0.562244
环烷烃	0.658122	-0.071646	0.811961
烯 烃	1.095340	0.277495	0.655628
炔 烃	0.746733	0.303809	0.799872
二烯烃	0.147578	-0.396178	0.994809
芳 烃	1.057019	0.227320	0.669286

【计算步骤】

1. 获得常压沸点和相对密度 从例如 Reid、Prausnitz 和 Sherwood 的著作^[1] 获得这三种化合物的 T_b 和 SG 。这些数值是(a)对正二十烷($\text{C}_{20}\text{H}_{42}$), $T_b = 617\text{K}$ 和 $SG = 0.775$; (b)对1-丁烯(C_4H_8), $T_b = 266.9\text{K}$ 和 $SG = 0.595$; 和(c)对苯(C_6H_6), $T_b = 353.3\text{K}$ 和 $SG = 0.885$ 。

2. 利用表 1.1 中的适当常数计算临界温度 于是, (a)对正二十烷:

$$\lg T_c = 1.359397 + 0.436843 \lg 0.775 + 0.562244 \lg 617 = 2.87986$$

所以 $T_c = 758.3\text{K}(905^\circ\text{F})$ 。(b)对1-丁烯:

$$\lg T_c = 1.095340 + 0.277495 \lg 0.595 + 0.655628 \lg 266.9 = 2.62355$$

所以 $T_c = 420.3\text{K}(297^\circ\text{F})$ 。(c)对苯:

$$\lg T_c = 1.057019 + 0.22732 \lg 0.885 + 0.669286 \lg 353.3 = 2.75039$$

所以 $T_c = 562.8\text{K}(553^\circ\text{F})$ 。

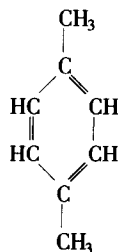
相关计算 本法可用于估算含如表 1.1 所示的一族化合物的多种烃的临界温度。对 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ 的烷烃和 $\text{C}_3 \sim \text{C}_{14}$ 的各种其它烃检验本方程表明平均和最大偏差分别为 6.5 和 35°F (3.6 和 19K) 左右。

1.3 用基团贡献法估算临界性质

用 Lydersen 的基团贡献法估计对二甲苯和 N -甲基-2-吡咯烷酮的临界性质。

【计算步骤】

1. 获得分子结构、常压沸点和相对分子质量 M_w 从手册查得, 对于对二甲苯(C_8H_{10}), $M_w = 106.16$, $T_b = 412.3\text{K}$, 结构式为:



对 N -甲基-2-吡咯烷酮($\text{C}_5\text{H}_9\text{NO}$), $M_w = 99.1$, $T_b = 475.0\text{K}$, 结构式为: