



普通高等教育“十三五”规划教材

Introduction to Green Chemical Technology

绿色化工工艺导论 (第2版)

主 编 朱 宪 张 彰

副主编 郭晓亚 徐 毅 刘 红 鄢 浩等



中国石化出版社

[HTTP://WWW.SINOPEC-PRESS.COM](http://www.sinopec-press.com)

“十三五”规划教材

绿色化工工艺导论

(第2版)

主 编 朱 宪 张 彰
副主编 郭晓亚 徐 毅 刘 红 鄢 浩等

中国石化出版社

内 容 提 要

本书包括了绿色化学清洁生产和绿色工艺技术的最新内容,以及化工模拟、新能源、新材料和高分子加工及农、林、牧、副、渔业绿色工艺方法,并且将这些内容组合、编排,使其中60%成为主要面向大学本科生的学科基础必修课程,40%属于提高、深化和前沿性课程。

本书适合作为硕士生的学位必修课教材,同时对从事化工、材料、纺织、印染、制药、轻化工、精细化工、环保生产的工程技术人员具有参考价值。

图书在版编目(CIP)数据

绿色化工工艺导论 / 朱宪, 张彰主编. —2版. —北京:
中国石化出版社, 2019. 1
普通高等教育“十三五”规划教材
ISBN 978-7-5114-5213-9

I. ①绿… II. ①朱… ②张… III. ①化学工业—无
污染技术—生产工艺—高等学校—教材 IV. ①X78

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 019430 号

未经本社书面授权,本书任何部分不得被复制、抄袭,或者以任何形式或任何方式传播。版权所有,侵权必究。

中国石化出版社出版发行

地址:北京市朝阳区吉市口路9号
邮编:100020 电话:(010)59964500
发行部电话:(010)59964526
<http://www.sinopec-press.com>
E-mail:press@sinopec.com
北京科信印刷有限公司印刷
全国各地新华书店经销

*

787×1092 毫米 16 开本 22.5 印张 522 千字
2019年3月第1版 2019年3月第1次印刷
定价:65.00元

《绿色化工工艺导论(第2版)》

编委会

主 编 朱 宪 张 彰
副主编 郭晓亚 徐 毅 刘 红 鄢 浩
王 勇 陈晋阳 戴 扬

各章编写人员

朱宪	教授、博士、博导	第1、2、8章
张彰	副教授、博士、硕导	第1、7章
徐毅	副教授、博士、硕导	第3章
王勇	教授、博士、博导	第4章
郭晓亚	副教授、博士、硕导	
戴扬	副教授、博士、硕导	
刘红	副教授、博士、硕导	第5章
陈晋阳	教授、博士、硕导	第6章
鄢浩	副教授、博士、硕导	

第2版前言

《化学工艺学》是化工专业本科生必修的一门专业基础课程。上海大学化工系起源于1958年，我们在长期的教学实践过程中，逐年对《化学工艺学》的内容进行补充、修改、精简、完善，并及时融入最新的科研和生产成果，在长期积累的基础上编写了《绿色化工工艺导论》新教材，用作化工专业本科生和研究生的教学用书，并被高等院校专业教材协作组列为普通高等院校“十一五”规划教材，于2009年2月正式出版。

本教材出版后，除上海大学化工系选为本科生和研究生的专业基础课的教材外，还被国内一些院校和科研院所及工程生产单位选作教材和参考用书。该书出版后反映良好，应市场需求又加印三次还供不应求，同时我们根据近十年来教学过程中发现的问题和有关院校反馈的建议及意见，认为有必要对本教材进行修订，以适应本学科发展和教学需要，遂组织编写了《绿色化工工艺导论》第2版。

本教材的第2版章节安排仍沿用第1版，在原有的基础上，对内容、编排作进一步的增补与完善，如在第1章绪论中增加了化学工艺的基本概念，为本教材的后续章节的教学打下基础；在第3章中删除了一些数学基础要求较高的内容以及超出教学大纲要求的内容，使教材更适合本科生的课堂教学。同时又增加了人工智能的基本概念，以适应当前化工生产智能化的趋势；在第4章中考虑到目前汽车工业中大量引入油电混动和纯电驱动技术，增补了“超级电容器”技术及应用的内容。除此之外，每一章都增补了最新报道的相关内容及最新发表的文献资料。这些删减和增补使本教材的内容与时俱进，也更趋合理。

限于编者水平，错误和不妥之处在所难免，敬请读者予以指正。

编者

目 录

第1章 绪论	(1)
1.1 引言	(1)
1.2 化学工艺基本概念	(3)
1.2.1 化工生产过程和工艺流程	(3)
1.2.2 化学反应与生产过程的效率指标	(5)
1.2.3 反应过程物料与热量衡算	(8)
习题	(11)
参考文献	(11)
第2章 绿色化学与清洁生产	(13)
2.1 环境保护与可持续发展	(13)
2.2 绿色化学概念	(14)
2.3 典型绿色化学反应	(15)
2.4 清洁生产概念	(16)
2.5 化工清洁生产实施	(17)
2.5.1 基本概念	(17)
2.5.2 程序	(17)
2.6 化工清洁生产实例	(27)
2.6.1 清洁生产审核实例	(27)
2.6.2 清洁生产技术实例	(35)
2.7 生态工业园区	(38)
思考题	(39)
参考文献	(40)
第3章 化工模拟与人工智能	(41)
3.1 基本概念	(41)
3.1.1 化工模拟	(41)
3.1.2 人工智能	(42)
3.2 分子模拟	(43)
3.2.1 蒙特卡罗 Monte Carlo(MC)模拟方法	(44)
3.2.2 分子动力学 Molecular Dynamics(MD)模拟方法	(47)
3.2.3 耗散粒子动力学 Dissipative Particle Dynamics(DPD)模拟方法	(52)
3.2.4 周期性边界条件和最小映像约定	(57)

3.2.5	网格列表法	(58)
3.3	单元模拟	(59)
3.3.1	前处理	(60)
3.3.2	确定计算域	(60)
3.3.3	生成网络	(60)
3.3.4	设定初始条件和边界条件	(60)
3.3.5	选择求解模型	(60)
3.3.6	设定求解参数及求解	(61)
3.3.7	后处理	(61)
3.4	流程模拟	(61)
3.4.1	序贯模块法	(62)
3.4.2	联立方程法	(64)
3.5	主要发展动向	(66)
3.6	未来发展趋势	(69)
	思考题	(69)
	参考文献	(70)
第4章	绿色能源技术与工艺	(72)
4.1	概述	(72)
4.1.1	能源及其分类	(72)
4.1.2	绿色能源	(73)
4.2	生物质能源基础	(75)
4.2.1	生物质的定义、特性和分析	(75)
4.2.2	生物质能源的特性、表征及转换	(78)
4.2.3	生物质固体燃料	(81)
4.2.4	生物质液体燃料	(84)
4.2.5	生物质气化	(90)
4.2.6	生物质化工	(93)
4.2.7	其他生物质能技术	(94)
4.3	锂离子电池基础	(95)
4.3.1	锂离子电池的发展历史	(95)
4.3.2	锂离子电池的特点和分类	(96)
4.3.3	锂离子电池的工作原理	(97)
4.3.4	锂离子电池主要评价指标	(98)
4.3.5	锂离子电池的发展方向	(99)
4.3.6	锂离子电池的组成和电极材料	(100)
4.4	燃料电池基础	(108)
4.4.1	燃料电池的发展历史和应用现状	(108)
4.4.2	燃料电池的特点和分类	(109)

4.4.3 质子交换膜燃料电池	(110)
4.4.4 碱性燃料电池和磷酸型燃料电池	(113)
4.4.5 固体氧化物燃料电池和熔融碳酸盐燃料电池	(115)
4.5 其他绿色能源技术	(116)
4.5.1 超级电容器	(116)
4.5.2 全钒液流电池	(118)
思考题	(119)
参考文献	(119)
第5章 绿色催化技术与工艺	(121)
5.1 环境友好的固体酸	(121)
5.1.1 固体酸的定义、分类及测定	(121)
5.1.2 沸石分子筛	(122)
5.1.3 杂多酸化合物	(130)
5.1.4 固体超强酸	(136)
5.1.5 应用固体酸取代液体酸的典型石油化工过程	(141)
5.2 环境友好的固体碱	(145)
5.2.1 固体碱的定义、分类及测定	(145)
5.2.2 固体碱在催化反应中的应用	(150)
5.3 新型分子筛	(157)
5.3.1 TS-1 分子筛	(157)
5.3.2 介孔分子筛	(166)
5.4 生物酶催化剂	(172)
5.4.1 酶的化学本质	(172)
5.4.2 酶催化剂的特性与分类	(173)
5.4.3 酶的固相化	(175)
5.4.4 影响酶催化反应的因素	(176)
思考题	(177)
参考文献	(177)
第6章 超临界流体技术与工艺	(179)
6.1 超临界流体热力学相图和特性	(179)
6.1.1 纯组分相图	(179)
6.1.2 二元物系相图	(180)
6.1.3 超临界流体的特性	(182)
6.2 超临界水技术的应用	(183)
6.2.1 超临界水在化学反应中的应用	(184)
6.2.2 超临界水氧化(SCWO)处理有机污染物	(190)
6.2.3 超临界水中聚合物的降解	(195)
6.2.4 超临界水中纳米材料的制备	(202)

6.2.5	超临界水的原位研究技术	(203)
6.3	超临界二氧化碳技术应用	(205)
6.3.1	超临界二氧化碳的反应特性	(205)
6.3.2	超临界 CO ₂ 萃取分离技术	(207)
6.3.3	超临界 CO ₂ 中的化学反应	(209)
6.3.4	超临界 CO ₂ 染色技术	(214)
6.3.5	CO ₂ 膨胀液体体系的应用	(215)
6.3.6	超临界 CO ₂ 在二维纳米材料宏量制备中的应用	(219)
	思考题	(219)
	参考文献	(219)
第7章	电化学合成技术与工艺	(221)
7.1	电化学概论	(221)
7.1.1	电化学发展史	(221)
7.1.2	电化学合成特点	(222)
7.2	电化学理论基础	(223)
7.2.1	电解质溶液及电化学性质	(223)
7.2.2	电化学反应热力学	(225)
7.2.3	极化过程与反应动力学	(226)
7.2.4	电极过程研究技术 ^[4]	(232)
7.2.5	电解过程的性能指标	(237)
7.3	电化学合成方法	(239)
7.3.1	电解媒介	(239)
7.3.2	直接电解合成法	(241)
7.3.3	间接电解合成法	(245)
7.3.4	其他电化学合成法	(251)
7.4	电化学工程与工业应用	(260)
7.4.1	电化学工程基础	(260)
7.4.2	电化学反应器	(261)
7.4.3	工业(有机)电化学合成	(264)
7.4.4	展望	(266)
	习题	(266)
	参考文献	(267)
第8章	绿色化工工艺实例	(269)
8.1	绿色无机化工工艺	(269)
8.1.1	先驱物法	(271)
8.1.2	水热法	(272)
8.1.3	溶胶-凝胶法	(273)
8.1.4	低热固相反应	(273)

8.1.5 流变相反应	(274)
8.2 绿色有机化工工艺	(274)
8.2.1 氧化法	(275)
8.2.2 还原法	(276)
8.2.3 间接电氧化法	(277)
8.2.4 三氧化二锰法	(280)
8.2.5 超(近)临界流体法(SCF)	(281)
8.3 绿色制药工艺	(287)
8.3.1 薯蓣皂苷元	(287)
8.3.2 低核苷酸药物	(292)
8.4 绿色精细化工工艺	(294)
8.4.1 磺化清洁工艺的选择	(294)
8.4.2 硝化清洁工艺的选择	(297)
8.4.3 卤化清洁工艺的选择	(302)
8.5 绿色能源化工工艺	(309)
8.5.1 洁净煤技术	(310)
8.5.2 生物质能	(314)
8.6 农、林、牧、副、渔绿色加工工艺	(328)
8.6.1 生态农业	(328)
8.6.2 植物废弃物的绿色加工工艺	(329)
8.6.3 动物废弃物的绿色加工工艺	(336)
思考题	(344)
参考文献	(344)

第1章 绪 论

1.1 引言

自18世纪以来,工业革命使社会生产力迅速向前发展,但水平仅处于物质文明的初级阶段。西方世界开拓的传统工业化发展道路,其原则为“人类统治自然,人类征服自然”,采取的手段为向大自然贪婪地索取、恣意地掠夺,其后果是人与自然的对抗,并不断受到自然界的严厉报复,引发出一系列全球性问题——人口膨胀、资源枯竭、环境恶化、气候异常、生态破坏……颇具讽刺意味的是,掌握先进科学、技术、文化的人类,恰恰是自然生态环境的最大破坏者,同时也是最大的受害者。非但如此,传统工业的发展并没有解决人类社会的共同富裕问题,反而使两极分化更趋激化,贫富差异日趋悬殊,社会矛盾日益激化。因此,世界各国政府都已清醒地认识到,环境问题是人类共同的问题,是全球性问题。不管是发达国家或是发展中国家,都必需彻底改变发展战略,与自然和谐共处,协调发展,走可持续发展道路,共同面对全球性的环境问题,才有可能减缓或防止全球性的环境恶化,拯救我们共同的地球。

1970年,科学家组织发起了第一个世界地球日,向全世界提出警告,人类工业活动正在破坏地球的自然生态系统的稳定性,呼吁人们保护地球。1972年,罗马俱乐部发表第一个研究报告《增长的极限》,对高增长、高消费提出警告,用系统动力学方法全面阐述了人口问题、粮食问题、自然资源问题和环境污染问题(生态平衡问题)等一系列全球性问题及相互关系,产生了广泛而深远的影响。1972年6月,联合国在斯德哥尔摩召开了人类环境会议,宣读了《只有一个地球》的庄严宣言,向全世界呼吁,控制人口增长,节约能源和资源,改变盲目破坏生态环境的行为,绿化环境等,并第一次提出“贫穷是一切污染中最坏的污染”。1981年,莱斯特·布朗出版了《建设一个可持续发展的社会》,书中引用了联合国环境方案中一句话:“我们不只是继承了父辈的地球,而且还借用了子孙的地球”,因此要求人类自觉地改变价值观念,从传统工业模式转换到可持续发展的模式。1990年,美国国会通过了《污染防治条例》,指出最佳的环境保护方法是在污染源头防止污染产生,1992年6月,联合国又在里约热内卢召开了世界环境与发展大会,各国政府要员几乎全部参加,期望在全球范围内采取统一行动,解决环境问题。大会通过了《里约热内卢环境与发展宣言》《21世纪议程》和《关于森林问题的原则声明》等重要文件,并签署了联合国《气候变化框架公约》、联合国《生物多样性公约》,为世界各国制定和实施可持续发展战略提供了范式。同年,世界各国3500位科学家又签署了《全球科学家对人类的警告》,它指出,世界上大部分重要生态系统已处于崩溃状态,全球现有人口已3倍于地球的长期承受能

力,臭氧层已形成2个巨大的空洞,整个地球温度上升,气候变暖,导致自然灾害大增,世界已进入一个危机四伏的新时期。1993年,我国政府制定了《中国21世纪议程——中国21世纪人口、环境与发展白皮书》,规定了我国经济持续发展的总体目标和实施清洁生产战略步骤。2007年12月12日,联合国气候变化大会高级别会议在印度尼西亚巴厘岛开幕,与会的联合国秘书长潘基文等在开幕式上呼吁,国际社会共同制订启动新一轮气候变化谈判的路线图,并希望在2009年达成最终协议。大会决议草案要求发达国家在2020年前,将温室气体减排25%~40%,并要求所有国家遵循“共同但有区别的责任”原则,有效参与应对气候变化带来的挑战。联合国秘书长潘基文在开幕式上说,气候变化是“显而易见并且是全球性的”,所有国家,要将应对气候变化问题置于“高度优先”的地位,而任何推延都可能使我们超过“引爆点”,这意味着生态、经济等代价将急剧增加。与全球变暖作斗争是“对我们这一代人的道德挑战”,让“气候危机变成气候协议”,发达国家应带头减排温室气体,发展中国家也需得到鼓励以控制排放,从而“迎来一个绿色经济的新时代、一个建立在清洁技术和低排放技术基础上的真正可持续发展的时代”,“这不是一场战斗的结束,而是一场战斗的开始。”然而,人们也可以在本次气候变化会议上看到,发达国家和发展中国家围绕温室气体减排、技术转让等问题的争议仍然不少,但不论在目前和今后还会对气候变化有怎样的争议,有一点必须明确,气候变化与环境恶化都属于发展中的问题,必须通过持续的经济发展和不间断的技术进步来解决。而在解决这一问题的过程中,发达国家和发展中国家都必须根据《联合国气候变化框架公约》,承担起“共同但有区别的责任”。在温室气体减排问题上,中国的立场非常明确,强调长期坚持《联合国气候变化框架公约》及《京都议定书》所确立的目标、原则、承诺和合作模式,并要求发达国家向发展中国家提供资金和技术支持,帮助发展中国家提高应对气候变化的能力。中国政府已于2007年6月4日发布了《中国应对气候变化国家方案》,提出了一系列应对气候变化的相关政策和措施,通过提高能源利用效率和调整能源结构,减少二氧化碳排放,从而确保经济持续而健康地增长。这一兼顾科学与发展的态度,得到了广大发展中国家的认同和支持。2008年,是联合国大会确定的国际环境卫生年,也是《京都议定书》承诺期的开启年。不管是“路线图”,还是《欧洲原子能共同体条约》,大都显现出全球气候变化的背景。其实,环境仅是我们人类赖以生存的自然空间,但各国面临的挑战可谓林林总总,无论内政还是外交,各种问题的解决都需要一个和平、和谐的氛围,这是一种更高、更广、更深层次的环境。

近年来,要求实施清洁生产呼声最高的是化学工业,据美国Toxics Release Inventory(有毒化学品目录)在1994年发表的统计结果,世界上排放废弃物最多的十类工业中,化学工业名列榜首,而且化学工业每年排放的废弃物是其余九个工业行业的总和。化学工业是基础工业,已渗透到各行各业,特别是高新技术的发展,依赖于化学工业的发展,但是化学工业也给人类赖以生存的生态环境带来了严重的破坏。

为了彻底改变化学工业对环境造成的污染,必需彻底改变“先生产,后治理”的传统观念,代之以可持续发展的新理念。为此,在1996年,美国设立“总统绿色化学挑战奖”,以表彰在绿色化学与技术研究领域取得卓越成就的美国环境科学家。1998年,美国成立绿色化学研究所,专门从事化学工业绿色化的研究。1992~2001年,有关绿色化学与技术的

国际会议召开了近20次。2002年以来,化学、化工、材料、能源、环境等领域的国际国内学术会议,都专门开设了绿色化学与技术主题。1998年,我国主持召开了第一届“国际绿色化学高级研讨会”,以后每年举行1次,目前已举办了10次。

化学工业是目前城市生态环境最大的破坏因素,必须实施绿色化学工艺才能彻底改变传统化学工业对环境的污染,形成清洁生产。而要形成化学工业的清洁生产,其关键在于研究和开发“绿色化学工艺”,“绿色化学工艺”的基础是绿色技术,核心则是构筑能量和物质的闭路循环。可以这么说,如果把化学工艺的绿色化看成是一门科学或技术的话,那么不如把它看作是一门高超的科学艺术更为确切。因为,只有深刻理解和熟练掌握了有关化学化工各领域的基础知识和先进技术,并做到融会贯通和灵活运用,才有可能创造出“绿色化学工艺”这门艺术。

本书参照目前高校中本科生使用的《化学工艺学导论》的编排,进一步强调化学工艺的“绿色化”,在完成《化学工艺学导论》教学大纲要求的基础上,介绍“绿色化学工艺”主要研究领域的最新研究进展及比较成功的一些实例,可供大学本科生及研究生作教材使用,使读者在阅读本书后,能够掌握化学工艺学的基础理论知识和基本技能,并对“绿色化学工艺”形成初步概念,对今后的实际工作有所启迪和帮助。

1.2 化学工艺基本概念

1.2.1 化工生产过程和工艺流程

化学工业,即生产、制造各类化学品(或化合物)的产业部门的总称。任何一个化工产品的加工过程(Chemical Process)通常可概括为三个主要步骤:①原料处理,目的是为了原料符合进行化学反应所要求的状态和规格。常用的有混合、乳化或(固体原料)粉碎等多种不同的预处理手段。②化学反应,它是化工生产过程的核心步骤。经预处理的原料,在一定的(温度、压力等)条件下进行化学反应,获得目标产物,并达到所要求的反应转化率和产物收率。③产品精制。将化学反应后得到的混合物进行分离,去除副产物或杂质,以获得符合组成、规格的产品。

图1-1描述了聚氯乙烯(PVC)产品的生产加工的全过程。整个过程中加成、裂解、氧氯化与聚合工序为(单元)化学反应过程;而原料提纯、反应物精制、分离以及脱水干燥等均为物理过程,也就是俗称的各种“单元操作”,它是化学加工过程中必不可少的组成部分。任何一个化工产品的生产(加工)过程,就是交替使用三个步骤,且以化学反应为中心,将反应单元与分离单元进行有机地组织与衔接,以达到所需的目标与要求。

从原料开始,按加工顺序将每个单元步骤有机地“协调”衔接,就构成了(化工)生产工艺流程,当用图例、符号等形式来表示,即为“生产工艺流程图”(process flow diagram/sheet),如图1-1所示。它清晰地反映出整个过程主要物料的流向、经历的单元步骤和顺序及能量传递等情况,这对了解生产全过程十分有效。另外,流程图的描述可以是部分或全部阶段的工作,同样应清晰地表明工艺流程中各部分原件的结构及工艺的运行过程。图1-2是合成氨生产过程中的部分工艺流程,即吸收法脱硫(单元)工艺流程。

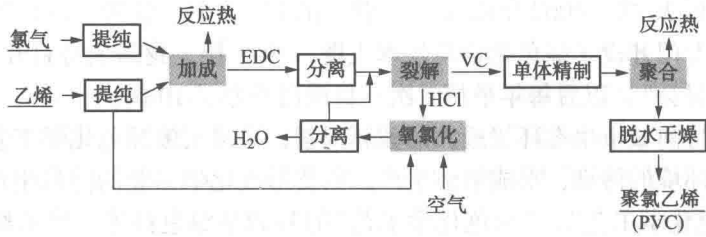


图 1-1 平衡法生产聚氯乙烯(PVC)的工艺流程示意图

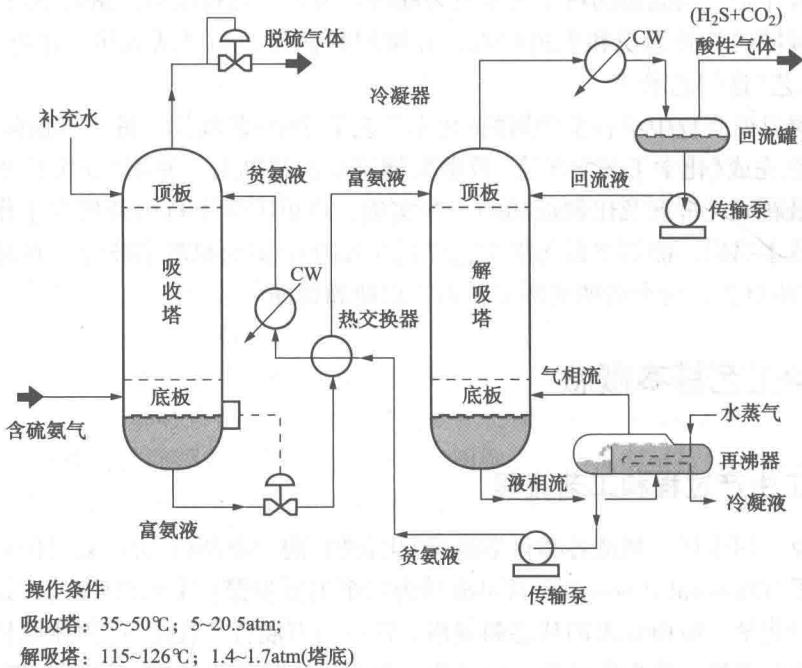


图 1-2 氨混合气的吸收脱硫工艺流程图

所谓“化学工艺”，即化工生产技术。是指将原料(主要经过化学反应)转变为产品的方法和过程，包括实现这一转变的全部措施。它主要涉及：①原料的选择和预处理；②生产方法的选择及方法原理；③设备的作用、结构和操作；④操作条件的影响和选定；⑤流程组织、生产控制以及能量的回收和利用；⑥不同工艺路线与流程的技术经济评价等多方面的内容。化学反应种类很多，加之原料的选择、处理方法的不同，故即使同一个化工品的生产/制造也可以有不同的合成路线或加工方法。以聚氯乙烯生产为例，单体原料—氯乙烯(VC)，可以采用电石水解、氯化氢加成方法制得氯乙烯(VC)的传统生产工艺；也可以乙烯为原料，采用平衡法制备氯乙烯(VC)的新工艺路线；进一步地，单体氯乙烯(VC)的聚合工艺也有多种方法可作选择，如悬浮法、本体法、乳液法等不同的技术处理手段。因此，化学工艺所涉及的内容十分广泛，且呈多样化特点。

简而言之，化学工艺学就是研究由(化工)原料加工成为产品这一生产过程中的一门应用性学科，其内容包括生产原理、方法、流程和设备。它与化学工程学不同(研究过程的共性)，化学工艺学是以研究过程为目的，解决整个(生产)过程的组织、优化；换句话

3. 产率(收率, Yield)

与转化率相对应, 产率/收率(以 Y 表示)是从产物的角度出发, 考察反应(过程)效率:

$$Y\% = \frac{\text{转化为目标产物所需的反应物量}}{\text{反应原料}(i)\text{起始用量}} \times 100\% \quad (1-3)$$

式(1-3)表示原料经化学转化后, 有多少转化为目标产物的量。显然, Y 值越大, 原料的产出率(转化为产物的量)越高。

另外, 产率/收率也有另一种表达方式, 即:

$$Y\% = \frac{(\text{实际})\text{目标产物量}}{(\text{理论})\text{目标产物量}} \times 100\% \quad (1-3a)$$

它反映了转化过程中, 实际获得的目标产物量与理论产物量(假定转化率 100%, 生成的目标产物量)之间的“偏离度”。 Y 越大, 表明实际反应(过程)与理论反应越接近, 实际的(目标)产物量, 越接近于理论产物量。

综合比较(1-1)、(1-2)、(1-3)式知: 产物收率=转化率 \times 选择性, 即 $Y=X \cdot S$ 。

【例 1-1】 已知一(连续)反应器物料的进、出情况如下: 反应物 A 的起始量为 100mol, 经反应后, 测得离开反应器的物流中: 反应物 A(10mol), 目标产物 B(70mol)与副产物 C(40mol), 试计算反应过程的转化率、产物 B、C 的收率与选择性。假定过程的转化, 按平行反应模式进行: 即 $A \Rightarrow B(TM)$; $A \Rightarrow 2C$ (副产物)

解: 根据定义有:

$$X_A = \frac{\text{反应原料 A 转化量}}{\text{反应原料 A 起始量}} = \frac{100-10}{100} \times 100\% = 90\%$$

$$S_B = \frac{\text{目标产物量}(B)}{\text{反应原料 A 转化量}} \cdot C = \frac{70}{100-10} \times \left(\frac{1}{1}\right) \times 100\% = 77.8\%$$

$$Y_B\% = \frac{\text{生成目标产物的量}(P_{TM})}{\text{反应原料 A 起始量}} = \frac{70}{100} \times 100\% = 70\%$$

$$S_C = \frac{\text{副产物量}(C)}{\text{反应原料 A 转化量}} \cdot C = \frac{40}{100-10} \times \left(\frac{1}{2}\right) \times 100\% = 22.2\%$$

$$Y_C\% = \frac{\text{生成目标产物的量}(P_{TM})}{\text{反应原料 A 起始量}} = \frac{40}{100} \times \left(\frac{1}{2}\right) \times 100\% = 20\%$$

显然: $Y_B = X_A \times S_B = 90\% \times 77.8\% = 70.02\%$; 同理: $Y_C = X_A \times S_C = 19.98\%$

当选择性 $S=1$, 意味着无副反应发生, 此时, $Y=X$ (即反应转化率=产物收率)。但对于多数的实际反应体系, 一般 $S < 1$ 。需要提醒的: 在许多情况下, 能促使转化率(X)提高的反应条件, 则往往会使产物的选择性(S)下降; 反之亦然。因此, 反应转化率与选择性的提高是一个系统的优化问题, 需要两者兼顾。

4. 绿色化学反应效率

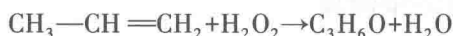
随着“绿色化”概念的不断提升, 绿色化学反应的目标也十分明确, 就是要从源头消除副反应, 避免副产物(或废物)的生成。目前, 有两个技术指标, 即“原子经济性”与“环境因子”常用来衡量化学反应或生产加工过程的绿色化程度。

(1)原子经济性(Atom Economy) 由 Barry M. Trost(美国斯坦福大学的教授)于1995年首次提出,是绿色化学中的一个重要概念。其基本表达式:

$$\text{原子经济性(A. E)} = \frac{\text{目标产物的原子总质量}}{\text{反应物的原子总质量}} \times 100\% \quad (1-4)$$

它清晰地描述了化学反应过程中,“原子的有效利用率”。当 A. E = 100%, 即意味着原料中的所有原子均被利用,并转化为目标产物(分子)。

需要注意,原子经济性(A. E)与产物收率(Y)是两个不同的(定义)概念。“原子经济性”是强调反应前后原子的有效利用率;而(产物)收率则反映实际产物量与理论产物量的“差距”。换句话说,当产物收率为100%时,并不意味着 A. E = 100%。如下述氧化反应:



假定丙烯氧化(反应)合成环氧丙烷的(产物)收率为100%,即丙烯按理论值,全部转化为目标产物——环氧丙烷。而根据 A. E 定义式,上述丙烯氧化反应的“原子经济性”为:

$$\text{A. E} = \frac{\text{目标产物的原子总质量}}{\text{反应物的原子总质量}} = \frac{12 \times 3 + 6 \times 1 + 16}{12 \times 3 + 6 \times 1 + 2 \times 1 + 2 \times 16} = \frac{58}{76} = 76.3\%$$

这里水是反应“废物”(非目标产物),说明过程中一定有原子的“损耗”,故 A. E < 1。

(2)环境因子 绿色化学领域内“环境因子”,是衡量生产过程对环境影响程度的一个参量,最早由 Roger A. Sheldon(荷兰代尔夫特理工大学教授)提出,定义表达式:

$$(\text{绿色化学})\text{环境因子} = \frac{\text{废物质量}}{\text{目标产物质量}} \times 100\% \quad (1-5)$$

其物理含义:化学转化过程中,形成的废物量与目标产物量的百分比。“环境因子”值越小,表明过程产生的“废物”量越少,对环境的影响就越小。

比较二个参数可知,“原子经济性(A. E)”值越大,即化学转化过程中原子的利用率越高;副产物就越少,相应的“环境因子”就越小。当 A. E = 1,则对应“环境因子”为零,真正的“绿色反应”,转化过程中无废物产生。

5. 化工生产(效率)指标

①生产能力(Production Capacity)——有时也称“产能”。系指某一单元,在计划期内所能生产的最大产品数量(或能够处理的最大原材料数量),这里的单元可以是单一设备、(一套)装置、(一个)生产车间/或工厂,它的物理单位:kt/a、t/d、kg/h等。

显然,生产能力是反映企业拥有加工能力的一个技术参数。它反映了企业的生产规模(如生成量/年)与能够生产的可能性。企业规模越大,生产技术性越高,生产的能力就越大。但需指出:生产能力须顺应市场的需求:当需求旺盛时,应考虑如何增加生产能力,以满足需求的增长;当需求不足时,需要考虑如何缩小规模,避免产能过剩,尽可能减少损失。

②生产强度(Production Strength)——系指单位尺寸(或几何特征量)下的生产能力,故其物理单位:千吨/(年·厂)、吨/(天·套)(装置)、kg/(h·m³)(或m²)等,在描述化工生产的具体装置、设备的生产能力方面更为有效。例如有A、B两企业,生产同一化工产品,A使用5套生产装置,生产能力100t/a;B使用2套生产装置,产能60t/a。显然,生产能力是A高于B,但生产强度则是B[30t/(a·套)]大于A[20t/(a·套)],它表明B