

# 揭阳职业技术学院

## Jieyang Polytechnic

### 授课教案

系（部）：化学工程系

讲授课程：化工计算

任课教师：陈敏杰

专业班级：分检 242 班

授课学期：2025-2026 学年第二学期

2026 年 3 月

# 《化工计算》课程综述

## 一、本课程的主要内容

随着计算机科学与技术的高速发展及其与传统化学、化工学科的不断交叉、渗透与整合，现代计算机技术正在化学、化工专业的科研、生产、教学中起到日益重要的作用。计算机在化学、化工专业的应用已不仅局限于传统的办公、图形处理等范围。在化学品开发、反应机理研究、设备设计、过程控制、工艺优化、辅助教学等领域，计算化学和计算化学工程的重要作用日益凸显。对于化学、化工专业的学生和科研人员，熟练应用计算机解决学习、科研、工作中面临的各种问题已成为必备的基本技能。

## 二、本课程与其他课程的关系

本课程是一门综合性技能课与其它课程，能同很多门检测课程建立联系，但都比其它课程更注重基础和技能的培养。课程以实际分析检测中的应用例子为对象，在叙述和分析中将实验设计与数据处理、化学化工计算通过学习，使学生应用计算机解决分析化学、仪器分析领域一些常见问题的能力在实践中得到培养和提高，并对化工常用软件有较好的了解和掌握，是化工类专业的专业选修课程。

## 三、本课程的现状

《化工计算》是商检技术专业一门实用性较强的技能课。课程内容与工作岗位对接性强，是新开课，课程教学经验还需要累积。我们在讲授基本理论的同时，尽量穿插一些运用基础理论解决实际问题的例子，在教学方式与方法上，尽量注意采用启发式、研究式教学，特别是重视实训教学，培养学生的动手动脑能力。

## 四、本课程的发展

开设化工计算课程，可以训练学生的运算能力以及将化工专业理论知识运用于工程实际的能力。课程努力方向是采用项目式教学，将教学内容项目化。

## 五、课程思政目标

当前，国家对人才的要求不仅要有较强的专业知识和技能，更要有高尚的职业理想和职业道德。结合《化工计算》课程内容挖掘思政元素，实施课程思政教育教学，如将“爱国主义”、“国家情怀”、“爱岗敬业”、“工匠精神”等思政元素融入到课程教学中，有利于培养学生爱国爱党、爱岗敬业精神，认真严谨的工作作风，追求卓越的“工匠精神”，提升学生的综合素质和职业认同感，增强学生的就业能力。

教案编号	01	
教材名称	实用化学化工计算机软件基础	
授课题目	化工计算课程介绍与导学	
授课学时	2 课时	
课 型	理论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 上机 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( <input type="checkbox"/> )	
教学目的	一、了解本课程的主要内容, 化工计算的基本知识, 基本理论及实验数据处理方法。 二、熟悉计算机基础知识和化工常用软件操作方法。 三、掌握化工相关软件在化工计算中的应用及实验数据处理的操作技能。	
思政目标	通过讲述有关“爱国主义”、“国家情怀”、“爱岗敬业”、“工匠精神”等思政元素的事例, 培养学生爱国爱党、爱岗敬业精神, 认真严谨的工作作风, 追求卓越的“工匠精神”, 提升学生的综合素质和职业认同感, 增强学生的就业能力。	
教学重点	一、掌握化学反应、化学相关计算原理。 二、掌握计算机基础知识, 借助计算机实现化工计算的方法。	
教学难点	一、化学相关计算原理。 二、借助计算机实现化工计算的方法。	
教学方法	讲授 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 讨论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 指导 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( <input type="checkbox"/> )	
电子教案	有 ( <input checked="" type="checkbox"/> )	Microsoft PowerPoint ( <input checked="" type="checkbox"/> ); Author ware ( <input type="checkbox"/> ); 其它 ( <input type="checkbox"/> )
	无 ( <input type="checkbox"/> )	
教学资源	多媒体 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 模型 ( <input type="checkbox"/> ); 音像 ( <input type="checkbox"/> ); 其它 ( 中国慕课网网课 <input type="checkbox"/> )	
思考题	谈谈你对未来化学科学研究看法?	
作业	1. 安装 MathType 软件 2. 编 辑 出 公 式 : $c = \frac{n_{\text{NaCl}}}{V} = \frac{m_{\text{NaCl}}}{M_{\text{NaCl}} V} = \frac{10\text{g}}{58.44\text{g/mol} \times 100 \times 10^{-3}\text{L}} = 1.7\text{mol/L}$	
教学设想	开学第一次课, 主要引导学生做好学习计划, 认识化工计算课程的学习任务及学习方式, 教学速度稍微有点放慢。	

## 教学内容

### 课程介绍与导学

#### 一、课程简介

本课程是专业选修课，2 学分，共 36 学时。

#### 二、课程教学目标

1. 学生了解本课程的主要内容，化工计算的基本知识，基本理论及实验数据处理方法。
2. 学生熟悉计算机基础知识和化工常用软件操作方法。
3. 学生掌握化工相关软件在化工计算中的应用及实验数据处理的操作技能。

#### 三、课程教学设计

##### 1. 理论讲授教学

采用自编讲义，教师组织同学利用学习通线上课件资源自学，线下课堂上教师通过提问、讨论，学习指导以问题式学习或者项目式学习的教学方法实施教学活动。

##### 2. 实训部分在机房完成

同学们使用相关软件完成作业进行实训操作练习，老师鼓励同学们线下主动学习，并将学习经验在学生中互相交流。

#### 四、学习方法及要求

1. 利用自编讲义和学习通线上课程资源进行学习。
2. 复习巩固化学基础知识，正确分析化工计算的任务。
3. 了解并掌握计算机、相关软件的操作能力。
4. 正确收集和处理有关化工基础数据，合理选择计算方法。
5. 培养主动学习、发现问题能力，养成听课与自学相结合的习惯，养成理解

原理和动手操作相结合的习惯。

教案编号	02	
教材名称	实用化学化工计算机软件基础	
授课题目	第一章 单位制基础知识	
授课学时	4 课时	
课 型	理论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 上机 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( <input type="checkbox"/> )	
教学目的	一、了解单位制度的构成及其种类。 二、熟悉常用化工基础数据来源。 三、掌握化工过程中常用单位的换算方法。	
思政目标	培养学生树立国际视野和全球意识。目前世界各国都在推行采用国际统一单位制，这是国际交流与合作的需要。在化工领域，跨国企业的合作、国际标准的制定等都离不开统一的单位体系。通过学习单位换算方法，让学生能够更好地理解和应用国际单位制，与国际接轨，增强在国际舞台上的竞争力。同时，也让学生明白在全球化背景下，加强国际交流与合作的重要性，培养他们的国际视野和全球意识。	
教学重点	一、掌握单位制度的构成及其种类。 二、掌握常用化工基础数据来源。	
教学难点	掌握化工过程中常用单位的换算方法。	
教学方法	讲授 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 讨论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 指导 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( <input type="checkbox"/> )	
电子教案	有 ( <input checked="" type="checkbox"/> )	Microsoft PowerPoint ( <input checked="" type="checkbox"/> ); Author ware ( <input type="checkbox"/> ); 其它 ( <input type="checkbox"/> )
	无 ( <input type="checkbox"/> )	
教学资源	多媒体 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 模型 ( <input type="checkbox"/> ); 音像 ( <input type="checkbox"/> ); 其它 (中国慕课网网课 <input type="checkbox"/> )	
思考题	目前比较常用的单位制有哪几种？	
作 业	1. 安装 MathType 软件 2. 使用 MathType 软件编辑 NaCl <sub>2</sub> 浓度计算过程式。	

# 教学内容

## 第一章 单位制基础知识

**重点：**掌握单位制度的构成及其种类，化工基础数据。

**难点：**掌握化工过程中常用单位的换算方法。

### 1.1 单位制度概述

#### 1.1.1 单位和单位制度的概念

①量纲或称因次：表示物料性质和状态的基本物理量。

如：长度（L），质量（M），时间（t）和温度（T）就是常用的量纲（因次）。

②量纲式或因次式：由量纲（因次）组成的表示物理量特性的式子。

如：体积的量纲式（因次式）为  $L^3$ ，密度的量纲式（因次式）为  $M/L^3$ ，速度的量纲式（因次式）为  $L/t$  等。

单位（Unit）：指度量中所规定的标准量，是量纲（或因次）的具体表示。如 50kg 干冰，50 是数量，kg 是单位。又如：长度单位常用米（m）表示，质量单位常用千克（kg）表示等。

单位制度：人为规定的计量制度。

法定计量单位：由国家以法令形式规定使用或允许使用的计量单位。

我国的法定计量单位，是以国际单位制为基础，保留少数国内外习惯或通用的非国际单位制所构成。

#### 1.1.2 单位制度的构成及其种类

单位制度的构成

◇基本单位：一些彼此独立的物理量及单位。如长度（L），质量（M）等。

◇导出单位：利用物理学规律建立起基本单位和其他物理量单位之间的联系，即用基本单位表示出其他物理量的单位，如：牛顿  $N=1kg \cdot m/s^2$ 。

单位制度的种类

（一）国际单位制：源自公制或米制，旧称“万国公制”，是现时世界上最普遍采用的标准度量衡单位系统，采用十进制进位系统。1960 年第十一届国际计量大会通过，推荐各国采用，其国际简称为 SI 制。[International System of Units]

SI制是在米·千克·秒制(MKS制)即米制的基础上发展起来的。

## (二) 米制

根据选定的基本单位不同,单位制又分为绝对单位制及工程单位制(重力单位制)两种:

☆绝对单位制——以长度、质量及时间为基本单位。

☆工程单位制——以长度、力及时间为基本单位。

### (1) 厘米 克 秒(CGS)制

如力的单位:  $1\text{dyne}=1\text{g}\cdot 1\text{cm}/\text{s}^2=1\text{g}\cdot \text{cm}/\text{s}^2$

### (2) 米 千克 秒(MKS)制

如力的单位:  $1\text{N}=1\text{kg}\cdot 1\text{m}/\text{s}^2=1\text{kg}\cdot \text{m}/\text{s}^2$

### (3) 米制工程制

基本单位: 长度(m)、力(公斤力、kgf)、时间(s)

1公斤力——1千克质量物体于真空中(重力加速度  $9.81\text{米}/\text{秒}^2$ )

所受的重力,即:  $1\text{kgf}=1\text{kg}\cdot 9.81\text{m}/\text{s}^2=9.81\text{kg}\cdot \text{m}/\text{s}^2=9.81\text{N}$

1质量工程单位——一物体在1公斤力的作用下,得到  $1\text{米}/\text{秒}^2$  的加速度,则该物体的质量为1质量工程单位(公斤力·秒<sup>2</sup>/米)

## (三) 英制

英制的绝对单位是英尺·磅·秒制。英制的工程单位制有英国工程制和美国工程制两种。

### (1) 英尺·磅·秒(FPS)制

基本单位:长度(ft),质量(磅,lb),时间(s)

如:力的单位称磅达(Poundle)(Pdl)即:  $1\text{Pdl}=1\text{lb}\cdot 1\text{ft}/\text{s}^2=1\text{lb}\cdot \text{ft}/\text{s}^2$

### (2) 英国工程制 基本单位:长度(ft),力(lbf),时间(s)

1质量工程单位——磅力·秒<sup>2</sup>/英尺,称斯勒(Sl g)

### (3) 美国工程制

基本单位(有4个):长度(ft),磅质(lbm),磅力(lbf),时间(s)

1磅力——1磅质物体在地面所受之重力,重力加速度为  $32.174\text{英尺}/\text{秒}^2$ 。为符合牛顿定律,必须引入力和质量之间的比例常数,以符号  $g_c$  表示。

## 1.2 化工数据基础知识

### 1.2.1 化工数据的分类

基础数据:化工生产中常用的物性数据与热力学数据,是物料衡算与能量衡算、速率计算的基础。(如沸点  $100^{\circ}\text{C}$ )

过程参数:化工生产中影响过程运行与状态的物理量,包括温度、压力、流量、物料浓度等。

结构参数:化工设备的结构参数,如蒸馏塔塔高、塔径等。

无量纲量:又称无因次量,是没有量纲的量,如流体雷诺数  $Re$ 。

### 1.2.2 化工基础数据的分类

基本物性数据:如临界常数(临界压力、临界温度、临界体积)、密度、状态方程参数、压缩系数、蒸气压等。

热力学物性数据:如内能、焓、熵、热容、自由能等。

化学反应和热化学数据:如反应热、生成热、燃烧热、反应速率、活化能、化学平衡常数等。

传递参数:如粘度、扩散系数、热导率等。

### 1.2.3 化工基础数据的来源

《化学工程手册》,《化学工程手册》编辑委员会,化学工业出版社,1996。

《化工工艺设计手册》,国家医药管理局上海医药设计院编,化学工业出版社,1996。

《化工工艺算图手册》,刘光启,马连湘主编,化学工业出版社,2002。

《Handbook of Chemistry and Physics》,David R.Lide 84th,CRC Press,2003-2004。

NIST 化学互联网手册, <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

## 1.3 单位换算方法与示例

### 1.3.1 单纯单位换算

①将不同单位制的换算系数写成比例形式;

②将各比例式连乘或连除运算。

例题:  $25^{\circ}\text{C}$ 时水的粘度为  $1.3077$  厘泊,换算成  $\text{千克}/(\text{米}\cdot\text{时})$  及  $\text{帕}\cdot\text{秒}$ 。(  $1$  厘泊= $0.01$  泊,  $1$  泊= $1$  克/ $(\text{厘米}\cdot\text{秒})$ )

解:

$$\mu = 1.3077 \times 0.01 \frac{\text{g}}{\text{cm} \cdot \text{s}} \left| \frac{1\text{kg}}{1000\text{g}} \right| \left| \frac{100\text{cm}}{1\text{m}} \right| \left| \frac{3600\text{s}}{1\text{h}} \right| = 4.7077 \text{kg}/(\text{m} \cdot \text{h})$$

$$\mu = 1.3077 \times 0.01 \frac{\text{g}}{\text{cm} \cdot \text{s}} \left| \frac{1\text{kg}}{1000\text{g}} \right| \left| \frac{100\text{cm}}{1\text{m}} \right| = 1.3077 \times 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}} \frac{\text{m}^2}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$$

$$= 1.3077 \times 10^{-3} \frac{\text{kg} \cdot \text{m}}{\text{s}^2} \frac{\text{s}}{\text{m}^2} = 1.3077 \times 10^{-3} \text{Pa} \cdot \text{s}$$

作业

1. 安装 MathType 软件
2. 使用 MathType 软件编辑 NaCl<sub>2</sub>浓度计算过程式。

教案编号	03	
教材名称	实用化学化工计算机软件基础	
授课题目	第二章 数据处理	
授课学时	6 课时	
课 型	理论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 上机 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( <input type="checkbox"/> )	
教学目的	<p>一、了解法定计量单位。</p> <p>二、掌握分析化学中常用法定计量单位。</p> <p>三、掌握化学分析中常用的溶液浓度表示方法。</p>	
思政目标	<p>培养学生养成严谨科学精神。数据处理与分析中使用 Excel 处理化学实验数据时，要求数据录入准确、计算过程精确，任何一个小的失误都可能导致结果偏差，影响对化学现象和规律的判断。引导学生对待科学研究要严谨认真、一丝不苟，让他们明白科学来不得半点虚假和马虎。</p>	
教学重点	<p>一、掌握分析化学中常用法定计量单位。</p> <p>二、掌握化学分析中常用的溶液浓度表示方法。</p>	
教学难点	<p>一、化学分析中常用的溶液浓度表示方法。</p> <p>二、学会用电脑完成溶液配制的相关计算。</p>	
教学方法	讲授 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 讨论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 指导 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( <input type="checkbox"/> )	
电子教案	有 ( <input checked="" type="checkbox"/> )	Microsoft PowerPoint ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( <input type="checkbox"/> )
	无 ( <input type="checkbox"/> )	
教学资源	多媒体 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 (中国慕课网网课)	
思考题	1. 在分析化学计量中使用摩尔时，为什么一定要注明基本单元？	
作 业	<p>1. 分析化学中常用法定计量单位有哪些？</p> <p>2. 溶液浓度表示方法有哪些？</p>	

# 教学内容

## 第二章 数据处理

### 2.1 化验分析常用计量单位

#### 一、法定计量单位

什么是法定计量单位？

法定计量单位：由国家以法令形式规定使用或允许使用的计量单位。

我国的法定计量单位：以国际单位制单位为基础，结合我国的实际情况制定。

国际单位制 SI—International System of Units

表 1-1 SI 基本单位

量的名称	单位名称	符号	量的名称	单位名称	符号
长度	米	m	时间	秒	s
热力学温度	开[尔文]	K	光强度	坎[德拉]	cd
质量	千克(公斤)	kg	电流	安[培]	A
物质的量	摩[尔]	mol			

二、分析化学中常用法定计量单位（详细见《分析化学》课本-张英主编 p9）

1. 物质的量：用符号  $n_B$  表示，单位为摩尔（mol）。

规定：1 mol 是指系统中物质单元 B 的数目与 0.012 kg 碳-12 的原子数目 ( $6.02 \times 10^{23}$ ) 相等。

物质基本单元：可以是原子、分子、离子、电子及其它粒子和这些粒子的特定组合。

例如： $H_2O$  为基本单元，则 0.018kg 水为 1mol 水。

$H_2SO_4$  为基本单元，则 0.098kg  $H_2SO_4$  为 1mol。

$1/2 H_2SO_4$  为基本单元，则 0.098kg  $H_2SO_4$  为 2mol

由此可见：相同质量的同一物质，由于所采用基本单元不同，其物质的量也不同。

表示方法：1 mol H 其质量为 1.008g；

1 mol  $H_2$  其质量为 2.016g；

1 mol  $1/2 Na_2CO_3$  其质量为 53.00g；

1 mol  $1/5 KMnO_4$  其质量为 31.60g。

2. 质量 (m)：单位为千克 (kg)；克 (g)；毫克 (mg)；微克 ( $\mu g$ )。

$1kg = 1000g = 1 \times 10^6 mg = 1 \times 10^9 \mu g$

3. 体积 (V)：单位为米<sup>3</sup> ( $m^3$ )

分析化学中：升 (L)；毫升 (ml)；微升 ( $\mu l$ )。

$1m^3 = 1000 L = 1 \times 10^6 ml = 1 \times 10^9 \mu l$

4. 摩尔质量 ( $M_B$ )：单位为千克/摩 (kg/mol)，常用 g/mol 表示。

$$V_m = \frac{V}{n_B}$$

名称	化学式	式量	基本单元	$M_B$
盐酸	HCl	36.46	HCl	36.46
硫酸	$H_2SO_4$	98.08	$1/2H_2SO_4$	49.04
氢氧化钠	NaOH	40.00	NaOH	40.00
氨水	$NH_3 \cdot H_2O$	35.05	$NH_3 \cdot H_2O$	35.05
碳酸钠	$Na_2CO_3$	105.99	$1/2Na_2CO_3$	53.00
氯化钠	NaCl	58.45	NaCl	58.45

表 1-2 常用物质的摩尔质量

高锰酸钾	$\text{KMnO}_4$	158.04	$1/5\text{KMnO}_4$	31.61
------	-----------------	--------	--------------------	-------

5. 摩尔体积 ( $V_m$ ): 单位为  $\text{m}^3/\text{mol}$ ; 常用  $\text{L}/\text{mol}$ 。

理想气体:  $22.4 \text{ L}/\text{mol}$ 。

$$V_m = \frac{V}{n_B}$$

6. 密度 ( $\rho$ ):  $\text{kg}/\text{m}^3$ ;  $\text{g}/\text{cm}^3$ ;  $\text{g}/\text{ml}$ 。

常用单位为克/厘米<sup>3</sup>( $\text{g}/\text{cm}^3$ )或克/毫升( $\text{g}/\text{mL}$ )。

7. 元素的相对原子质量 ( $A_r$ )

指元素的平均原子质量与  $^{12}\text{C}$  原子质量的  $1/12$  之比。

8. 物质的相对分子质量 ( $M_r$ ), 即以前的分子量。

指物质的分子或特定单元平均质量与  $^{12}\text{C}$  原子质量的  $1/12$  之比

9. 滴定度 ( $T_{B/A}$ 、 $T_A$ )

指  $1\text{mL}$  滴定剂溶液相当于待测物质的质量 (单位为  $\text{g}$ ), 用  $T_{\text{待测物}/\text{滴定剂}}$  表示, 单位为  $\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ 。

$T_{B/A}$  指每毫升滴定剂 (A) 溶液相当于待测物 (B) 的质量。

$T_A$  指每毫升标准溶液含有溶质的质量。

## 2.2 分析化学计算基础

1. 滴定分析计算的依据

滴定: 将试样制备成溶液置于三角瓶中, 再将另一种已知准确浓度的试剂溶液 (标准溶液) 由滴定管滴加到待测组分的溶液中去, 直到所加标准溶液和待测组分恰好完全定量反应为止。

仪器与试剂: 滴定管、三角瓶、标准溶液、被测溶液、指示剂

2. 标准溶液浓度的计算

(1) 标准溶液的配制

直接法: 在分析天平上准确称取一定量已干燥的基准物质, 溶解后定量转移到已校正的容量瓶中, 用蒸馏水稀释至刻度, 充分摇匀。

例如: 重铬酸钾( $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ )标准溶液配制

标定法 (间接法)

标定: 用基准物质或已知准确浓度的溶液来确定标准溶液浓度的操作过程。

(2) 基准物质

基准物质: 直接配制或标定标准溶液的物质。

基准物质应具备下列条件:

纯度高, 一般要求在  $99.9\%$  以上;

组成与化学式相符，包括结晶水；  
性质稳定，在空气中不吸湿，加热干燥时不分解，不与空气中的二氧化碳、  
氧气等作用；  
具有较大的摩尔质量，以减少称量误差。

## 2.3 分析工作中的溶液浓度表示方法

### 一、溶液浓度的定义

什么是浓度？

单位溶液中所含溶质的量叫做该溶液的浓度。

### 二、分析化学中溶液浓度表示方法

#### 1. 物质的量浓度

物质的量浓度 = 物质的量/混合物（或溶液）的体积

$$c_B = n_B/V$$

式中：

$c_B$ —物质 B 的物质的量浓度， mol/L；

$n_B$ —物质 B 的物质的量， mol；

V—混合物（溶液）的体积， L

B—基本单元

#### 2. 质量分数

B 的质量分数 = B 的质量/混合物（或溶液）的质量

$$w_{(B)} = \frac{m_B}{m_{\text{溶液}}} \times 100\%$$

$\omega_B$  表示，量纲为 1。

$\omega_{(\text{HCl})}=0.38$  或  $\omega_{(\text{HCl})}=38\%$

质量分数表示： mg/g、 $\mu\text{g/g}$ 、 ng/g

#### 3. 质量浓度

B 的质量浓度 = B 的质量/混合物（溶液）的体积

$\rho_B$  表示，单位为 g/L 或 mg/L、 $\mu\text{g/L}$ 、 ng/L。

$$\rho_B = m_B/V$$

式中：

$\rho_B$ —物质 B 的质量浓度， g/L；

$m_B$ —物质 B 的质量， g；

V—混合物（溶液）的体积， L。

#### 4. 体积分数

B 的体积分数 = 混合前 B 的体积/混合物（溶液）的体积

$$\varphi_{(B)} = \frac{V_B}{V_{\text{溶液}}} \times 100\%$$

$\varphi_B$  表示，量纲为 1。

$\varphi(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) = 0.70$  或  $\varphi(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) = 70\%$

质量分数表示：mg/g、 $\mu\text{g/g}$ 、ng/g。

### 5. 比例浓度

容量比浓度：液体试剂相互混合的表示方法。

(1+5)HCl：1 体积浓盐酸与 5 体积蒸馏水混合。质量比浓度：两种固体试剂相互混合的表示方法。

(1+100)钙指示剂-氯化钠混合试剂—1 单位质量的钙指示剂与 100 个单位的氯化钠相互混合。

### 6. 滴定度(Titer)

滴定度有两种表示方法：

(1)  $T_s$ ：每毫升标准溶液中所含滴定剂（溶质）的克数表示浓度。单位 g/mL。

$$T_s = \frac{\text{溶质的质量}}{\text{溶液的体积}} = \frac{m(\text{g})}{V(\text{ml})}$$

例如： $T_{\text{HCl}} = 0.001012 \text{ g/ml}$  的 HCl 溶液，表示每毫升此溶液含有 0.001012g 纯 HCl。

(2)  $T_{S/X}$  以每毫升标准溶液所相当的被测物的克数表示的浓度。

S：代表滴定剂的化学式。

X：代表被测物的化学式。

$$T_{S/X} = \frac{\text{被测物的质量}}{\text{标准溶液的体积}} = \frac{m(\text{g})}{V(\text{ml})}$$

$T_{\text{HCl}/\text{Na}_2\text{CO}_3} = 0.005316 \text{ g/mL}$  HCl 溶液，表示每毫升此 HCl 溶液相当于 0.005316g  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ 。这种滴定度表示法对分析结果计算十分方便。

### 练习：一般溶液的配制和计算

#### 1、物质的量浓度溶液的配制和计算

欲配制  $C_{(\text{Na}_2\text{CO}_3)} = 0.5 \text{ mol/L}$  溶液 500mL，如何配制？

欲配制  $C_{(\text{H}_3\text{PO}_4)} = 0.5 \text{ mol/L}$  溶液 500mL，如何配制？(浓磷酸密度  $\rho = 1.69$ ， $\omega = 85\%$ ，浓度为 15mol/L)

## 2、质量分数溶液的配制和计算

欲配制  $\omega_{\text{NaCl}}=10\%$  NaCl 溶液 500g，如何配制？

欲配制  $\omega_{\text{H}_2\text{SO}_4}=30\%$   $\text{H}_2\text{SO}_4$  溶液 500mL ( $\rho=1.22$ )，如何配制？(浓  $\text{H}_2\text{SO}_4$

$\rho=1.84$ ， $\omega=96\%$ )

## 3、质量浓度溶液的配制和计算

欲配制 20g/L 亚硫酸钠溶液 100mL，如何配制？

## 4、体积分数溶液的配制和计算

欲配制  $\varphi(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH})=3\%$  溶液 500mL，如何配制？

## 5、比例浓度溶液的配制和计算

欲配制(2+3)乙酸溶液 1L，如何配制？

## 三、滴定分析法计算实例

例 1：测定铝盐中铝含量。称取样品 0.2500g，溶解后加入 EDTA 标准溶液， $c_{\text{(EDTA)}}=0.05000\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ ， $V_{\text{(EDTA)}}=25.00\text{mL}$ 。选择适当条件，用  $c_{\text{(Zn}^{2+})}=0.02000\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$  标准溶液返滴定，用去  $V_{\text{(Zn}^{2+})}=21.50\text{mL}$ ，求铝的含量？

解： $\text{Al}^{3+} + \text{H}_2\text{Y}^{2-} \rightarrow \text{AlY}^- + 2\text{H}^+$

$\text{Zn}^{2+} + \text{H}_2\text{Y}^{2-} \rightarrow \text{ZnY}^{2-} + 2\text{H}^+$

$\text{Al}^{3+} \sim \text{H}_2\text{Y}^{2-} \sim \text{Zn}^{2+}$

$$n_{\text{(EDTA)}} = 0.05000\text{mol}\cdot\text{L}^{-1} \times 25.00 \times 10^{-3}\text{L} \\ = 1.25 \times 10^{-3}\text{mol}$$

$$n_{\text{(Zn}^{2+})} = 0.02000\text{mol}\cdot\text{L}^{-1} \times 21.50 \times 10^{-3}\text{L} \\ = 0.43 \times 10^{-3}\text{mol}$$

$$n_{\text{(EDTA)}} = n_{\text{(Zn}^{2+})} + n_{\text{(Al}^{3+})}$$

$$n_{\text{(Al}^{3+})} = 1.25 \times 10^{-3}\text{mol} - 0.43 \times 10^{-3}\text{mol} \\ = 0.82 \times 10^{-3}\text{mol}$$

$$\text{铝的含量} = \frac{26.98\text{g}\cdot\text{mol}^{-1} \times 0.82 \times 10^{-3}\text{mol}}{0.2500\text{g}} \times 100\%$$

$$\text{铝的含量} = 8.85\%$$

## 2.4 分析结果数据处理

### 一、分析结果的判断

可疑值：在消除了系统误差后，所测得的数据出现显著的特大值或特小值，这样的数据是值得怀疑的。

对可疑值应做如下判断：

1. 分析实验中，已然知道某测定值是操作中的过失所造成的，应立即将此数据弃去。

2. 找不出可疑值出现的原因，不应随意弃去或保留，而应按照下面介绍的方法来取舍。

## 二、分析结果数据的取舍

1. 4d 法：也称“4 乘平均偏差法”。

例 1：我们测得一组数据如下表示：

测得值 30.18 30.56 30.23 30.35 30.32

从这一组数据可知 **30.56** 为可疑值。

**注意：**统计学方法证明，当测定次数非常多（例如大于 20 时，总体标准偏差  $\sigma$  与总体平均偏差  $\delta$  有下列关系  $\delta = 0.7979 \sigma \approx 0.80 \sigma$

计算方法：

(a) 将可疑值除外，求其余数据的平均值  $\bar{x}_{n-1}$  和平均偏差  $\bar{d}_{n-1}$

$4\delta \approx 3\sigma$ ，偏差超过  $4\delta$  的测量值可以舍弃。

(b) 求可疑值  $x$  与平均值  $\bar{x}_{n-1}$  之间的差的绝对值  $|x - \bar{x}_{n-1}|$

(c) 判断  $|x - \bar{x}_{n-1}| > 4\bar{d}_{n-1}$  舍弃。

解：

① 求可疑值以外其余数据的平均值：

$$\bar{x}_{n-1} = \frac{30.18 + 30.23 + 30.35 + 30.3}{4} = 30.27$$

② 求可疑值以外其余数据的平均偏差：

$$\bar{d}_{n-1} = \frac{|d1| + |d2| + |d3| + |d4|}{n} = \frac{0.09 + 0.04 + 0.08 + 0.05}{4} = 0.065$$

③ 求可疑值和平均值之间的差值：

$$|x - \bar{x}_{n-1}| = 30.56 - 30.27 = 0.29$$

④ 将平均偏差  $\bar{d}_{n-1}$  乘 4，再和求出的差值比较，若差值  $\geq 4\bar{d}_{n-1}$  则弃去，若小于  $4\bar{d}_{n-1}$

则保留。

$$4\bar{d}_{n-1} = 4 \times 0.065 = 0.26 < 0.29 \quad \text{所以 } 30.56 \text{ 值该弃去。}$$

**4d 法适用于测定 4 到 6 个数据的测量实验中。**

## 2. Q 检验法

Q 检验法的步骤如下：

① 将测定数据按大小顺序排列，即  $x_1、x_2、\dots、x_n$

② 计算可疑值与最邻近数据之差，除以最大值与最小值之差，所得商称为 Q 值。

可疑值出现在首项：

$$Q \text{ 计算} = \frac{x_2 - x_1}{x_n - x_1} \quad (\text{检验 } x_1)$$

可疑值出现在末项:

$$Q \text{ 计算} = \frac{x_n - x_{n-1}}{x_n - x_1} \quad (\text{检验 } x_n)$$

查《分析化学》课本-张英主编 p36 表 3.4: Q 计算  $\geq$  表中查到的 Q 值, 则弃去; 若 Q 计算  $<$  表中查到的 Q 值, 则保留。

**注意:** Q 检验法适用于测定次数为 3~10 次的检验。同时要注意置信度的要求, 查到对应的置信度表 90%、或 95%、或 99%。

例如: 标定 NaOH 标准溶液时测得 4 个数据为 (0.1014, 0.1016, 0.1019, 0.1012), 试用 Q 检验法确定 0.1019 数据是否应舍去? 置信度 90%。

解: 排列 0.1012, 0.1014, 0.1016, 0.1019

$$\text{计算: } Q \text{ 计算} = \frac{0.1019 - 0.1016}{0.1019 - 0.1012} = \frac{0.0003}{0.0007} = 0.43$$

查 Q 值表: 4 次测定的 Q 值=0.76,  $0.43 < 0.76$ , 故数据 0.1019 不能弃去。

#### 注意: 4d 法和 Q 检验法的比较

相同处: 从误差出现的机率考虑。

不同处: 4d 法将可疑数据排除在外, 方法简单只适合处理一些要求不高的实验数据。Q 检验法准确性相对较高, 方法也是简单易行。

### 三、平均值精密度的表示方法:

单样本测定时一组测定值分散程度用标准偏差表示。

多样本测定就会得到  $x_1$ 、 $x_2$ ……, 他们的分散程度用平均值的标准偏差。

平均值精密度: 为说明平均值之间的精密度, 用平均值的标准差 ( $s_{\bar{x}}$ ) 表示。

复习前面学过的:

$$\text{平均偏差 } \bar{d} = \frac{|d_1| + |d_2| + \cdots + |d_n|}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |d_i|$$

$$\text{标准偏差 } s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}$$

$\bar{d}$  和  $S$  计算出以后, 只不过解决了个别测定和它们平均值之间的偏差, 那

么平均值不是真实值，平均值与真实值之间的误差是怎样处理的呢？

平均值的标准偏差 ( $s_{\bar{x}}$ ) 表示：n 个容量相同的样本的平均值的偏差。

数理统计方法已证明：

$$\sigma_{\bar{x}} = \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \quad (n \rightarrow \infty)$$

$$s_{\bar{x}} = \frac{s}{\sqrt{n}}$$

注：  $s_{\bar{x}}$ ：平均值的标准偏差；

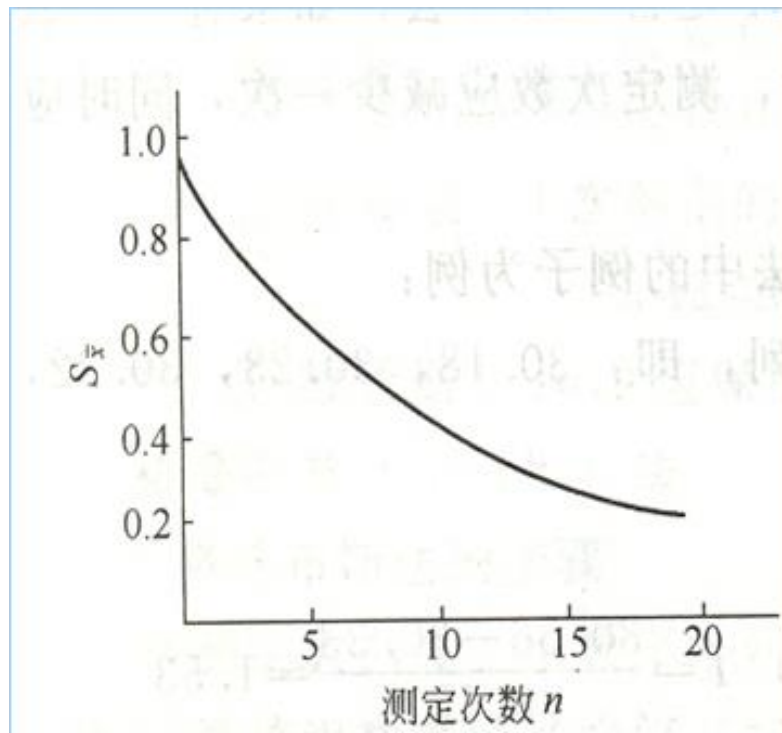
S 为：标准偏差， n 为测定次数；

$s_{\bar{x}}$  代表平均值 ( $\bar{x}$ ) 与真实值之间的接近程度。即 **真实值 =  $\bar{x} \pm S_{\bar{x}}$**

讨论：

- 增加测定次数可以提高测量的精密度，使所得的平均值更接近真实值。
- 当  $n > 10$  时，  $s_{\bar{x}}$  ↓ 慢。
- 当  $n > 5$  时，  $s_{\bar{x}}$  几乎没有什么变化，实际分析中测定次数大都在 5 次左右。

右。



例题：进行污水中铁含量测定，结果如下：

67.48, 67.47, 67.47, 67.43, 67.40 mg/L

求：平均偏差，标准偏差和平均值的标准偏差。

序号	测得数据 (Fe, mg/L)	$ d_i  =  x - \bar{x} $	$d^2 = (x - \bar{x})^2$
1	67.48	0.03	0.0009
2	67.47	0.02	0.0004
3	67.47	0.02	0.0004
4	67.43	0.02	0.0004
5	67.40	0.05	0.0025
	$\bar{x}=67.45$	$\sum  d  = 0.14$	$\sum d^2 = 0.0046$

解：测得数据平均值  $\bar{x}=67.45$

$$\text{平均偏差 } \bar{d} = \frac{\sum |d|}{5} = \frac{0.14}{5} = 0.028$$

$$\text{标准偏差 } S = \frac{\sum d^2}{n-1} = \frac{0.0046}{5-1} = 0.034$$

$$\text{平均值的标准偏差 } S_{\bar{x}} = \frac{S}{\sqrt{n}} = \frac{0.034}{\sqrt{5}} = \frac{0.034}{2.236} = 0.015$$

**注意：**

某数的乘幂公式 POWER(number,power), 如 2 的立方为公式为 POWER(2,3)。

#### 四、平均值的置信区间

偶然误差在分析操作中是无法避免的。例如一个很有经验的人，进行很仔细的操作，对同一试样进行多次分析，得到的分析结果仍不能完全一致，进行多次测定的结果绘成曲线后会发现一些规律：

正误差和负误差出现的几率相等。

小误差出现的次数多，大误差出现次数少。

置信度 P：是指测量结果的准确性有的可靠程度，又称置信水平。它是由分析工作者根据对测定的准确的要求来确定的。

置信系数 t：查表 P30 页 表 3.2

例：P = 95% ， n = 5，则自由度 f = n - 1 = 5 - 1 = 4，t = 2.78

**平均值的置信区间：**在一定置信度下，以平均值为中心包括真实值的可能范围称为平均值的置信区间，又称为可靠性区间界限。

平均值的置信区间 =  $\bar{x} \pm t \frac{S}{\sqrt{n}} = \bar{x} \pm t S_{\bar{x}}$  (公式见《分析化学》张英主编，p31 页)

式中， $\bar{x}$ ：平均值；t：置信系数；S：标准偏差； $S_{\bar{x}}$ ：平均值的标准偏差

n: 测定次数。

例题: 测定水中镁杂质含量 (P=95%), 结果如下所示:

测定结果 (mg/L)	$ d  =  x - \bar{x} $	$d^2 = (x - \bar{x})^2$
60.04	0.01	0.0001
60.11	0.06	0.0036
60.07	0.02	0.0004
60.03	0.02	0.0004
60.00	0.05	0.0025

解:

根据上表计算得出:

序号	测得数据 (Mg, mg/L)	$ d_i  =  x - \bar{x} $	$d^2 = (x - \bar{x})^2$
1	60.04	0.01	0.0001
2	60.11	0.06	0.0036
3	60.07	0.02	0.0004
4	60.03	0.02	0.0004
5	60.00	0.05	0.0025
	$\bar{x} = 60.05$	$\sum  d  = 0.16$	$\sum d^2 = 0.0070$

上题  $\bar{x} = 60.05$ ;

n=5;

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{0.0070}{5-1}} = 0.04$$

P=95%, n=5, 则自由度 f=n-1=4, 则 t=2.78

平均值的置信区间 =  $\bar{x} \pm t \frac{s}{\sqrt{n}}$

$$= 60.05 \pm 2.78 \times \frac{0.04}{\sqrt{5}}$$

$$= 60.05 \pm 0.05$$

所以，真实值落在 60.00 ~ 60.10 范围内。

此例说明通过 5 次测定，有 95%的可靠性认为镁杂质的含量是在 60.00mg/L 至 60.10mg/L 之间。

教案编号	04	
教材名称	实用化学化工计算机软件基础	
授课题目	第三章 office 软件在化学化工中的应用	
授课学时	6 课时	
课 型	理论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 上机 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( )	
教学目的	一、利用 Word 软件对化学化工文档编辑、公式编辑、图表处理 二、应用 Excel 软件处理化工计算数据 三、应用 PowerPoint 软件制作化学化工专业知识演示文稿	
思政目标	培养学生尊重事实、尊重他人的研究成果的文献引用习惯。利用 Word 撰写化学化工专业文献时,对引用的文献、实验数据的来源都要准确标注,不能随意篡改或编造内容。让学生养成尊重科学事实、尊重他人研究成果的习惯,树立正确的科研价值观。	
教学重点	一、Word 软件对化学化工文档编辑、公式编辑、图表处理 二、应用 Excel 软件处理化工计算数据 三、应用 PowerPoint 软件制作化学化工专业知识演示文稿	
教学难点	一、Word 软件对化学化工文档编辑、公式编辑、图表处理 二、应用 Excel 软件处理化工计算数据	
教学方法	讲授 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 讨论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 指导 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( )	
电子教案	有 ( <input checked="" type="checkbox"/> )	Microsoft PowerPoint ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( )
	无 ( )	
教学资源	多媒体 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 (中国慕课网网课)	
思考题	如果通过图表向导生成的图形不满意,比如图表类型不合意、图表尺寸比例不合适等,请谈谈你将如何处理?	
作 业	1. 如何提高公式的编辑速度和准确度?	

## 教学内容

### 第三章 office软件在化学化工中的应用

#### 3.1 Word 在化学化工专业文献中的应用

##### 3.1.1 Word2003 窗口的组成



##### 3.1.2 Word2003 编辑排版中的基本操作

- 1.显示→隐藏编辑标志
- 2.空格、居中与对齐
- 3.段落、分页和分节
- 4.表格内容的对齐
- 5.上标字符和下标字符
- 6.特殊符号
- 7.项目符号和编号
- 8.Word2003 常用的排版快捷键

##### 3.1.3 绘制与插入图片

- (1) 绘制图片
- (2) 插入图片
- (3) 编辑与处理图片

##### 3.1.4 公式编辑器

启动和退出公式编辑器  
在工具栏上增加公式编辑器按钮  
公式模板简介  
字符样式和空格  
公式编辑器常用快捷键

##### 3.1.5 Word2003 的排版样式

Word2003 提供有以下 4 种不同类型的样式。

段落样式：控制段落外观的所有方面，如文本对齐、缩进、行间距、制表符等。

字符样式：控制段落内选定文字的外观，如文字的字体、字号、加粗等格式。

表格样式：为表格的边框、阴影、对齐方式和字体等提供一致的外观。

列表样式：可以为列表应用相似的对齐方式、创建编号或项目符号、字符及字体等。

### 3.1.6 创建文档目录

目录的作用是列出文档中的各级标题以及每个标题所在的页码。编制完目录后用户只需要单击目录中的任一标题，就可以跳转到该标题所对应的页码。

插入目录的前提条件是已经在正文中对标题完成了样式设置，这样 Word2003 就能自动地识别各级标题，然后根据标题的级别和对应的页码创建出目录。

## 3.2 Excel 在试验数据处理中的应用

### 3.2.1 Excel 的工作窗口

### 3.2.2 工作簿与工作表的基本操作

工作簿的基本操作

工作表数据的输入

公式与函数

数据的复制

### 3.2.3 Excel 图表功能在试验数据处理中的应用

图表的生成（图表向导）

图表的编辑和修改

## 3.3 PowerPoint 在化学化工中的应用

### 3.1 Powerpoint2003 的界面组成

### 3.2 Powerpoint 的视图方式

普通视图

幻灯片视图

幻灯片浏览视图

幻灯片放映视图

### 3.3 创建演示文稿

创建空白演示文稿

使用“设计模板”创建演示文稿

利用“内容提示向导”创建演示文稿

### 3.4 编辑修饰演示文稿

占位符的设置

幻灯片背景的设置

文本的编辑（同 word）

幻灯片中插入对象

### 3.5 放映演示文稿

幻灯片间的切换效果 在浏览视图下点击“幻灯片放映→幻灯片切换”

设置动画效果 “格式→幻灯片设计→动画方案”

设置放映方式 “幻灯片放映→设置放映方式”

教案编号	05	
教材名称	实用化学化工计算机软件基础	
授课题目	第四章 Origin 软件在化学化工实验数据处理中的应用	
授课学时	4 课时	
课 型	理论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 上机 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( <input type="checkbox"/> )	
教学目的	1. 了解 Origin 软件主要界面 2. 掌握使用 Origin 软件进行实验数据录入、统计、分析操作 3. 掌握使用 Origin 软件进行实验数据处理、作图操作	
思政目标	培养学生养成勇于探索, 刻苦专研的科学精神。在使用 Origin 软件进行复杂的数据拟合、绘图等操作时, 学生可能会遇到各种问题和挑战。通过不断尝试新的方法、查阅资料、探索软件的功能, 他们能够克服困难, 这种过程能培养学生勇于探索未知、敢于尝试的科学精神。	
教学重点	1. 使用 Origin 软件进行实验数据录入、统计、分析操作 2. 使用 Origin 软件进行实验数据处理、作图操作	
教学难点	使用 Origin 软件进行实验数据处理、作图操作	
教学方法	讲授 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 讨论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 指导 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( <input type="checkbox"/> )	
电子教案	有 ( <input checked="" type="checkbox"/> )	Microsoft PowerPoint ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( <input type="checkbox"/> )
	无 ( <input type="checkbox"/> )	
教学资源	多媒体 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( 中国慕课网网课 )	
思考题	谈谈 ORIGIN 软件能帮助我们解决化学中哪些方面的问题	
作 业	课堂练习题使用 Origin 软件进行实验数据录入, 绘制线性回归制图。	

## 教学内容

### 第四章 Origin 软件在化学化工实验数据处理中的应用

#### 4.1 Origin 简介

##### 4.1 Origin 简介

一、Origin 简介主要功能：

- 1.将实验数据自动画成在二维坐标中的图形，有利于对实验趋势的判断；
- 2.在同一幅图中可以画上多条实验曲线，有利对不同的实验数据进行比较研究；
- 3.不同的实验曲线可以选择不同的线型，并且可将实验点用不同的符号表示；
- 4.可对坐标轴名称进行命名，并可进行字体大小及型号的选择；
- 5.可将实验数据进行各种不同的回归计算，自动打印出回归方程及各种偏差；
- 6.可将生成的图形以多种形式保存，以便在其他文件中应用；
- 7.可使用多个坐标轴，并可对坐标轴位置、大小进行自由选择。
- 8.可将各种模拟程序计算得到的数据以一定格式保存后（如 VB、VC、Matlab、LabVIEW、Aspen Plus）直接导入 Origin，绘制曲线；
- 9.几乎可以绘制所有在化学化工各种教科书中出现的数据图表。

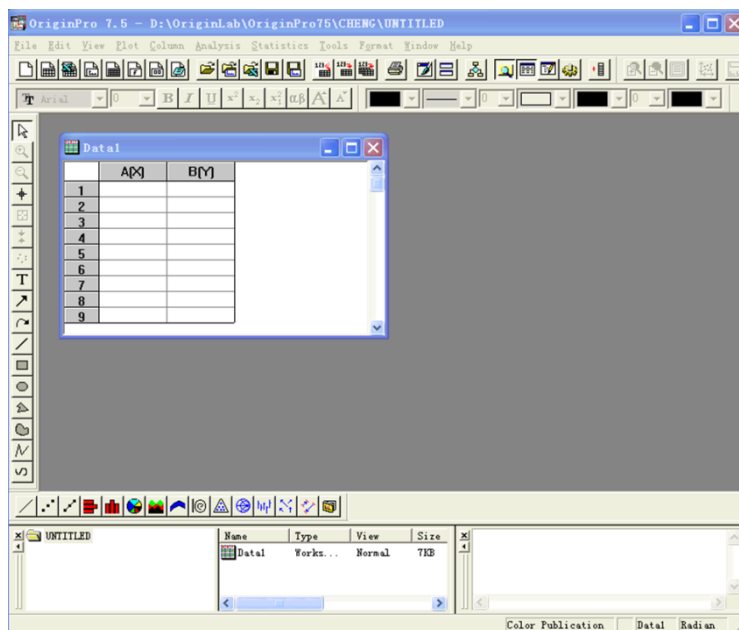
##### Origin 的安装

不同版本的 Origin 软件只要双击安装文件（对于免安装的绿色软件，只要解压软件包即可），在安装向导的帮助下，按照提示即可方便地将 Origin 软件安装。安装好 Origin 后，将其快捷方式发送到桌面，见下图。



origin7.5 安装程序图标

## 二、origin7.5 主界面



菜单栏

工具栏

绘图栏

项目管理器

状态栏

### 4.2 工作表窗口

工作表的主要功能是存放和组织 Origin 中的数据，并利用这些数据进行统计、分析和作图。工作表窗口最上边一行为标题栏，A、B 和 C 等是数列的名称，X 和 Y 是数列的属性，其中 X 表示该列为自变量，Y 表示该列为因变量。可以双击数列的标题栏，打开“Worksheet Column Format”对话框改变这些设置。工作表中的数据可直接输入，也可以从外部文件导入，而后通过选取工作表中的列完成作图。

#### 4.2.1 数据输入与删除

通过键盘输入

默认情况下，Origin 7.5 在启动时会创建一个含有两列单元格的空白工作表并自动将两列指定为 A (X) 和 B (Y)，即二维绘图用的数据表。数据输入完毕后，可以进行工作表显示或属性调整，在 A (X) 列上双击打开“列格式设置”窗口。通过“Column Name”可以更改列名称，点击“Format”选项的下拉列表可以选择该列数据的格式，在“Column Label”中输入内容，在该列上方就会出现所输入的标识。点击“Prev”或“Next”按钮可以对该列的前一列或后一列进行格式设置，设置完毕后点击“OK”按钮即可。

其它输入方法

从其它软件的数据文件中输入数据 (ASCII)

通过剪切板交换数据

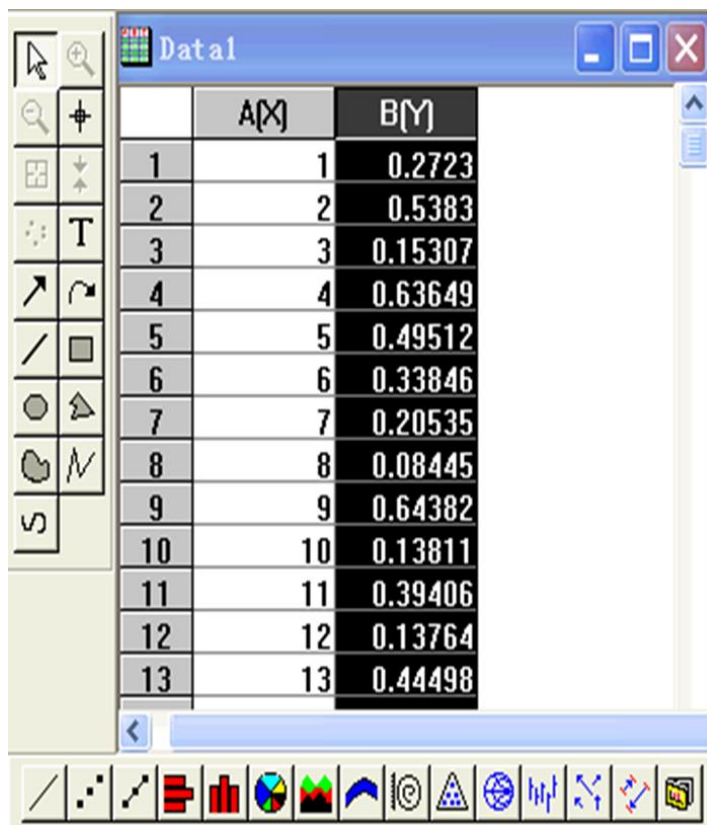
在列中输入相应行号或随机数  
用函数或数学计算式实现对列输入数据  
有规律 X 递增数据输入  
在列中插入一个单元格数据  
数据删除  
Edit→Clear 删除整个工作表中的数据  
Edit→Delete 删除选中的单元格及其数据

### 4.3 Origin 绘图

Origin 的绘图功能非常灵活，功能十分强大，能绘出数十种精美的、满足绝大部分科技文献和论文的绘图要求的数据曲线图，它是 Origin 重要核心和特点之一。

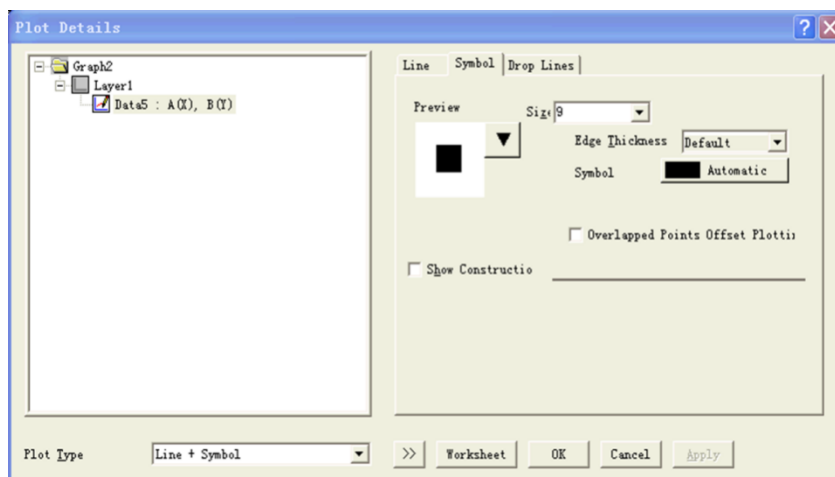
#### 4.3.1 简单 X-Y 图形的绘制

首先要将数据按照 X、Y 坐标存为两列，然后按住鼠标左键拖动选定这两列数据，选择“Plot→Line/Scatter/Line+Symbol”命令，或者采用如图所示的最下面一排工具栏按钮的前三项，就可以绘制出如图三种不同效果的简单图形。



#### 4.3.2 图形的定制与标注

双击数据曲线，打开“Plot Details”对话框，如图所示。通过这个对话框可以对曲线进行定制，可定制部分包括除坐标轴及说明以外所有内容。



### 4.3.3 坐标轴的定制

双击数据曲线图的任一坐标轴，可以打开坐标轴属性对话框，如图所示。利用这个对话框，可以对坐标轴的属性进行定制，方法和操作与利用“Plot Details”对话框定制数据曲线属性类似。




### 4.3.4 图形中数据的处理


#### 简单算术运算


激活绘图窗口，选择“Analysis→Simple Math”命令

#### 减去参考直线

激活绘图窗口，选择“Analysis→Subtrart→Straight Line”命令，光标自动变为，然后在窗口上双击左键定起始点，然后再在终止点双击，由于两点确定一条直线，Origin 会自动将曲线减去由这两点确定的参考直线而获得一条新的曲线并在原绘图窗口中显示。

#### 垂直/水平移动


以垂直移动为例，激活绘图窗口后选择“Analysis→Translate→Vertical”，这时光标自动变为。移动光标，双击曲线上的任一数据点，将其设为起点。

这时光标形状变为，双击屏幕上任意点将其设为终点。这时 Origin 将自动计算起点和终点纵坐标的差值，工作表内该数列的值也自动更新为该数列原来的值加上该差值，同时将曲线移动到新位置。水平移动选择“Analysis→Translate→Horizontal”，其余操作与垂直移动类似。

#### 微分/积分

激活绘图窗口后选择“Analysis→Calculus→Differentiate”或“Integrate”进行微分或积分操作。

#### 4.3.5 保存项目文件和模板

现在，我们的 Origin 项目包括数据、工作表、图形和文件夹组织结构等。当你保存项目后，这些窗口以及它们所包含的数据都存储在这个项目文件中。保存项目的步骤如下：选择“File→Save Project”命令或者在上部工具栏中直接点击，就会打开文件保存对话框，在“文件名”文本框中键入“Sample”，单击“保存”按钮，这样当前的项目就保存在“Sample.OPJ”中了。

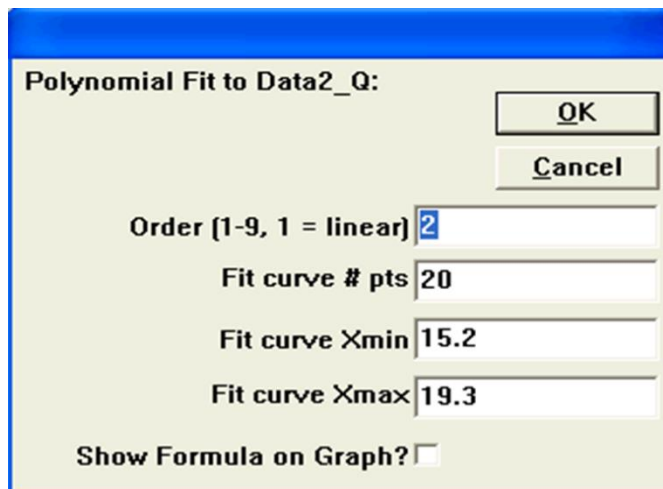
### 4.4 数据拟合

#### 4.4.1 线性回归

欲对被激活的数据进行直线拟合，在绘图（Graph）窗口选择“Analysis→Fit Linear”命令，对 X（自变量）和 Y（因变量）的线性回归方程是  $Y(i)=A+B*X(i)$ ，参数 A（截距）和 B（斜率）由最小二乘法计算。拟合后，Origin 产生一个新的（隐藏的）包含拟合数据的工作表格，并将拟合出的数据在绘图窗口绘出，同时将拟合得到的参数的数值显示在结果记录（Results Log）窗口中。

#### 4.4.2 多项式回归

对被激活的数据组用  $Y=A+B_1*X+B_2*X^2+B_3*X^3+...+B_k*X^k$  进行拟合，在绘图（Graph）窗口选用“Analysis→Fit Polynomial”命令，Origin 会打开一个“Polynomial Fit to”对话框，如图所示。



设置级数

拟合曲线的点数

拟合曲线的最小值

拟合曲线的最大值

#### 4.4.3 非线性回归

从菜单命令拟合

在绘图窗口，“Analysis”菜单中选择相应的命令可以完成非线性拟合，拟合参数和统计结果显示在结果记录（Results Log）窗口。此类拟合包括：

“Fit Exponential Decay→First Order”：指数衰减拟合，拟合模型函数为  $y=y_0+A_1\exp(-x/t_1)$ ；

“Fit Exponential Decay→Second Order”：指数衰减拟合，拟合模型函数为

$y=y_0+A_1\exp(-x/t_1)+A_2\exp(-x/t_2)$ ;

“Fit Exponential Decay→Third Order”：指数衰减拟合，拟合模型函数为  $y=y_0+A_1\exp(-x/t_1)+A_2\exp(-x/t_2)+A_3\exp(-x/t_3)$ ;

“Fit Exponential Growth”：指数增长拟合，拟合模型函数为  $y=y_0+A_1\exp(x/t_1)$ ;

“Fit Sigmoidal”：S 拟合，拟合模型函数为  $(A_1-A_2)/\{1+\exp((x-x_0)/dx)\}+A_2$ ;

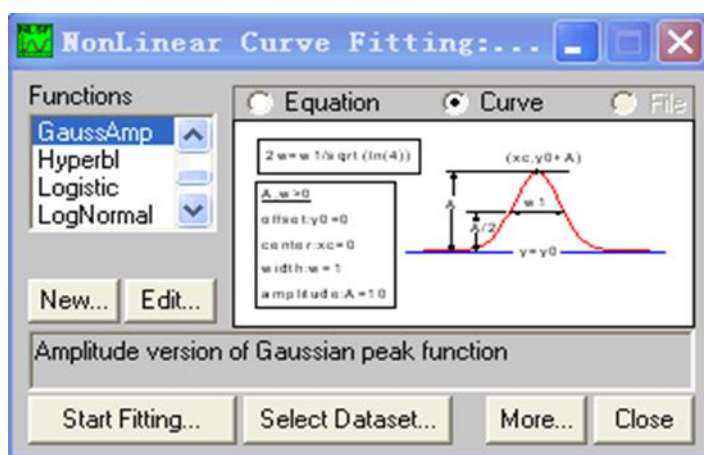
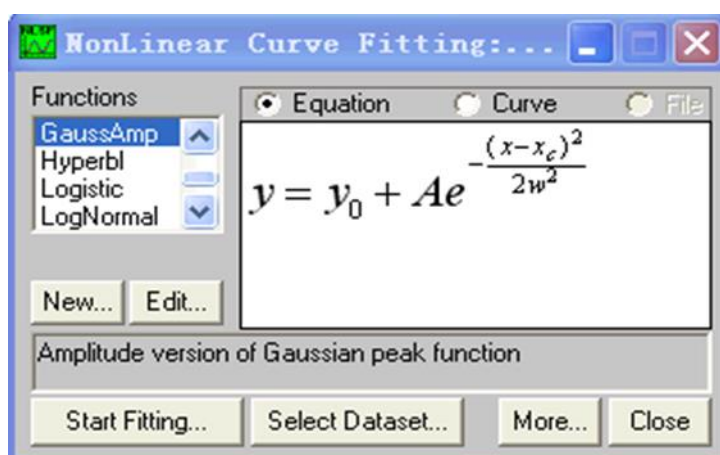
“Fit Gaussian”：Gaussian 拟合，拟合模型函数为  $(A/w*\sqrt{\pi/2})*\exp(-2*(x-x_0)^2/w^2)+y_0$ ;

“Fit Lorentzian”：Lorentzian 拟合，拟合模型函数为  $(2*A*w/\pi)/(w^2+4*(x-x_0)^2)$ ;

“Fit Multi-peaks→Gaussian”或“Fit Multi-peaks→Lorentzian”：多峰值拟合，每一段采用 Gaussian 或 Lorentzian 方法。

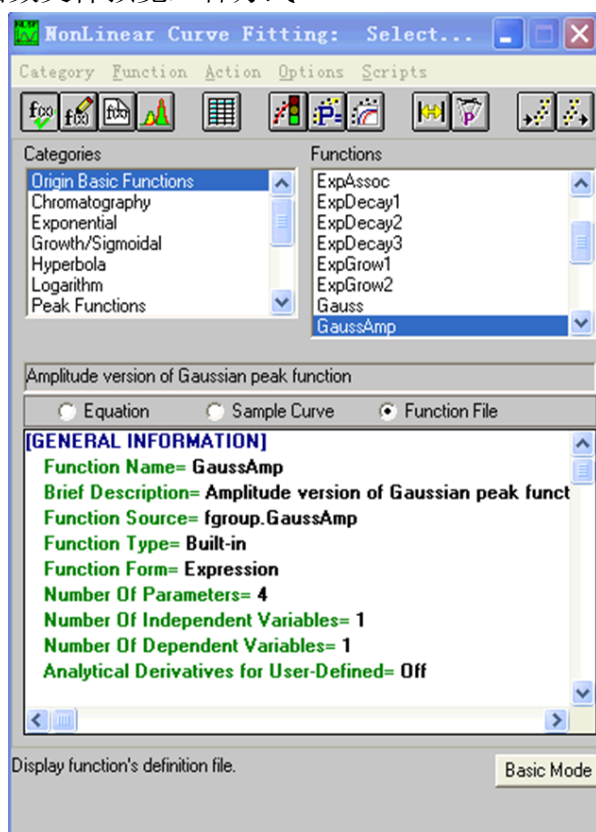
非线性最小二乘拟合

在缺省条件下，在工作表 (Worksheet) 或绘图 (Graph) 窗口中，选择“Analysis → Non-linear Curve Fit → Advanced Fitting Tool”命令就可以打开非线性最小二乘拟合的初级模式界面。选择“Equation”命令按钮时，预览框显示拟合使用的方程式，选择“Curve”命令按钮时，预览框显示该方程式的曲线，如图所示。



高级条件提供了比初级模式多得多的拟合函数，为了便于查找，Origin 将这些函数进行了分类。单击初级模式界面中的“More”命令按钮就可以切换到高级模式界面，如右图所示，窗口顶部为菜单和工具栏，下面左为类别 (Categories)

列表框，右为函数（Functions）列表框，窗口底部为预览框，共有方程式、曲线和函数文件预览三种方式。



教案编号	06	
教材名称	实用化学化工计算机软件基础	
授课题目	第五章 化学软件 ChemOffice	
授课学时	4 课时	
课 型	理论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 上机 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( )	
教学目的	一、了解化学软件 ChemOffice 二、掌握使用化学结构绘图软件 CHEMDRAW 绘制化学结构式操作 三、掌握使用分子模型及仿真软件 CHEM3D 绘制 3D 图形操作 四、掌握使用化学信息搜索引擎 CHEMFINDER 搜索化学信息	
思政目标	培养学生严谨负责的职业道德。强调化学结构绘图的准确性对于科研和生产的重要性。一个错误的结构绘图可能会导致后续实验的失败或产品质量问题。在教学中，要求学生严格按照规范和标准进行绘图，培养他们严谨、负责的职业道德。	
教学重点	一、使用化学结构绘图软件 CHEMDRAW 绘制化学结构式操作 二、使用分子模型及仿真软件 CHEM3D 绘制 3D 图形操作 三、使用化学信息搜索引擎 CHEMFINDER 搜索化学信息	
教学难点	使用化学结构绘图软件 CHEMDRAW 绘制化学结构式操作 使用 CHEM3D 绘制 3D 图形操作、实现化学结构式 2D 与 3D 转换	
教学方法	讲授 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 讨论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 指导 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( )	
电子教案	有 ( <input checked="" type="checkbox"/> )	Microsoft PowerPoint ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( )
	无 ( )	
教学资源	多媒体 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 (中国慕课网网课)	
思考题	1. 在你以后的学习工作中，你将会用 ChemDraw 完成什么工作？	
作 业	1. 绘制胡萝卜素结构。	

## 教学内容

### 第五章 化学软件ChemOffice

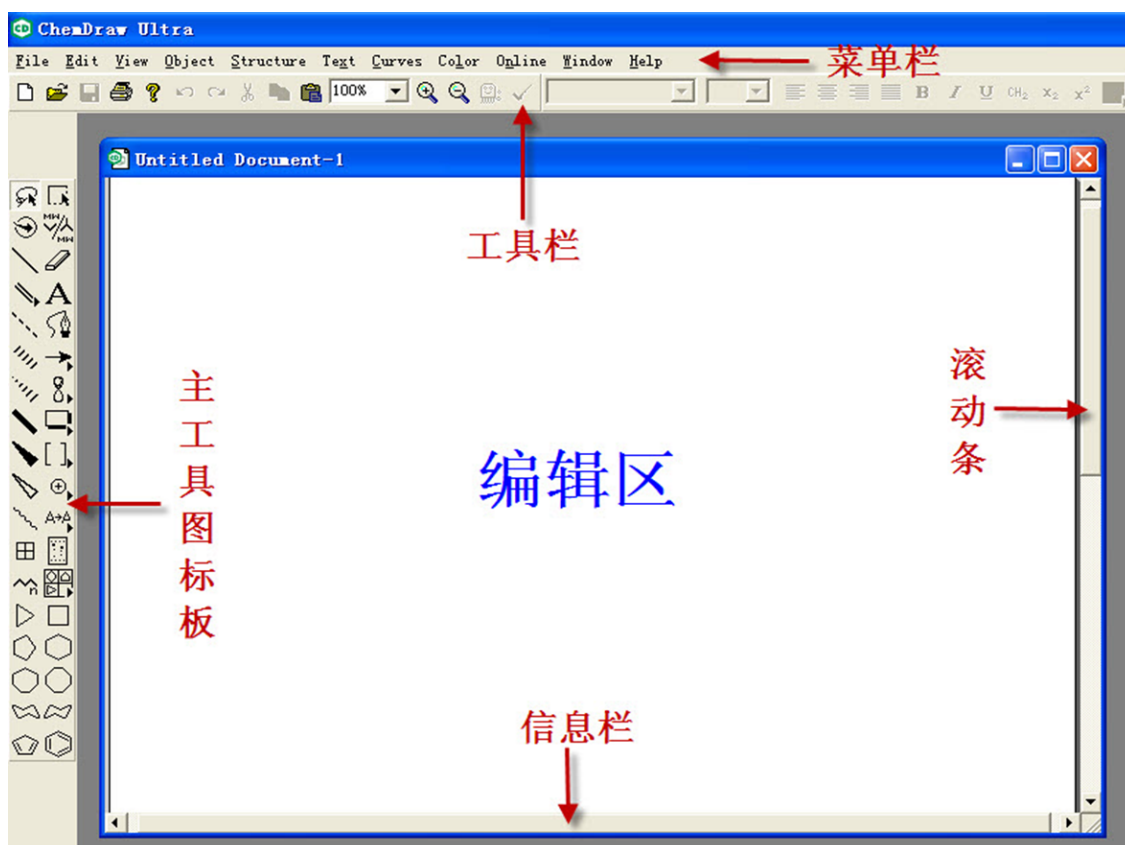
#### 5.1 概述

ChemOffice 软件是由剑桥化学软件公司开发的集成化学软件桌面系统，集成了 Chem3D、ChemDraw、ChemFinder 和 ChemInfo，以及 Chem TableEditor 等软件，具有强大的高端开发功能。下面以 ChemOffice（8.0 版为例）

#### 5.2 化学结构绘图软件 CHEMDRAW

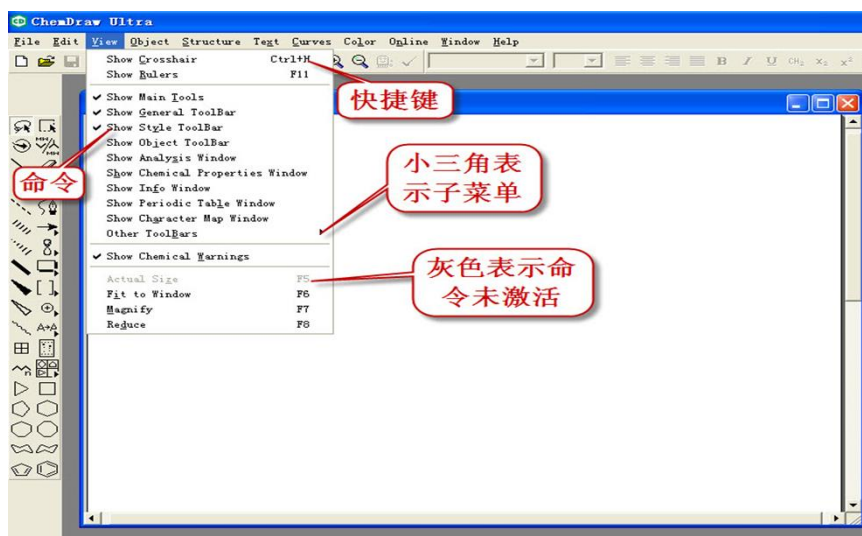
ChemDraw 软件功能十分强大，可以编辑、绘制与化学有关的一切图形，如建立和编辑各类分子式、方程式、结构式、立体图形、对称图形、轨道等，并能对图形进行编辑、翻转、旋转、缩放、存储、复制、粘贴等多种操作。用它绘制的图形可以直接复制粘贴到 Word 软件中使用。最新版本的软件还可以生成分子模型、建立和管理化学信息库、增加了光谱化学工具等功能。

##### 5.2.1 主界面



##### (1) 菜单栏

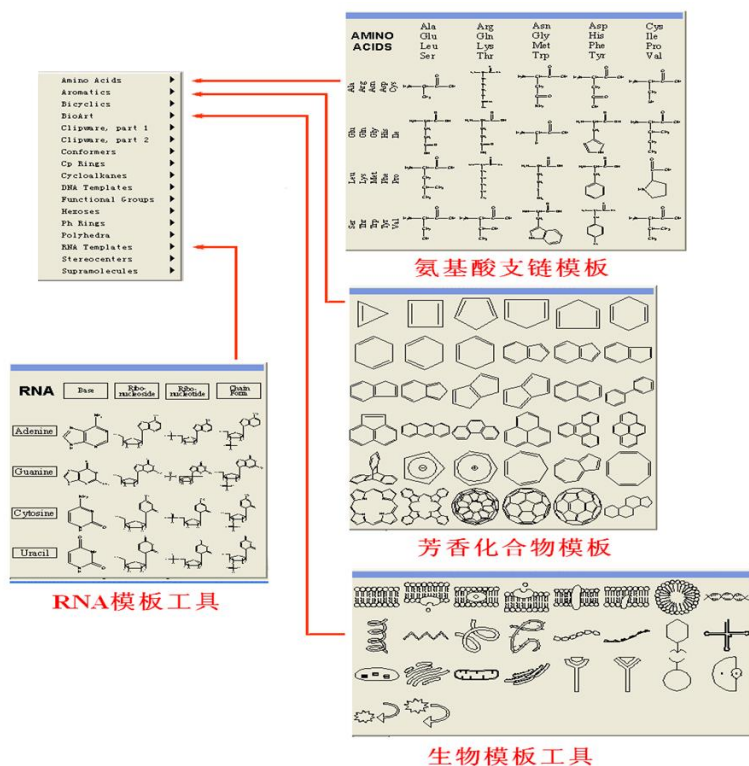
菜单栏共有 11 个下拉菜单，每一个下拉菜单中都包括相应的命令。其中如果相应的命令前有  $\surd$ ，则该条命令已经被执行；若命令后有  $\blacktriangle$  表示该指示条有子菜单；指示条灰色表示该命令未激活。



(2) 主工具图标板



## 5.2.2 模板



### 5.2.3 绘制与编辑典型化学物质结构式

#### (1) 键工具：

主工具图标板上提供了九个键操作的命令，其中双键命令板中的子菜单中还包 括 12 个键命令。利用键工具进行结构绘制操作的基本操作：首先在命令面板中选取键命令，绘制的基本操作是“点位”、“拖动”和“点击”。

(2) 环工具：主工具面板中提供了 10 种环工具命令，其中在模板命令中还有芳香化合物模板和双环模板可以绘制环状化合物。

#### 环的绘制

面板中选取相应的环命令后，直接在绘制区点击可产生相应的环。点住鼠标左键不放，拖动鼠标可以对环的大小，放置的角度进行自由改变。

环己烷的椅式构型直接点击为水平放置，按 **Shift** 键点击可由水平变为垂直。

在面板中任选一环命令，按 **Ctrl** 键点击，可以在环中产生不定域共轭圈。

#### 环的连接

选择键命令或环命令，直接在环的任何一个节点处点击或拖动可以实现键的连接或环与环的点连接。

选择环的一个节点，按住鼠标左键，从一个节点拖至另一个节点，可以实现环与环的双点连接。

元素符号的输入与目标参数的设置与键操作类似，同样在“Structure”菜单中可以对选择的键的属性进行设定。

#### (3) 链工具

##### ① 链的绘制

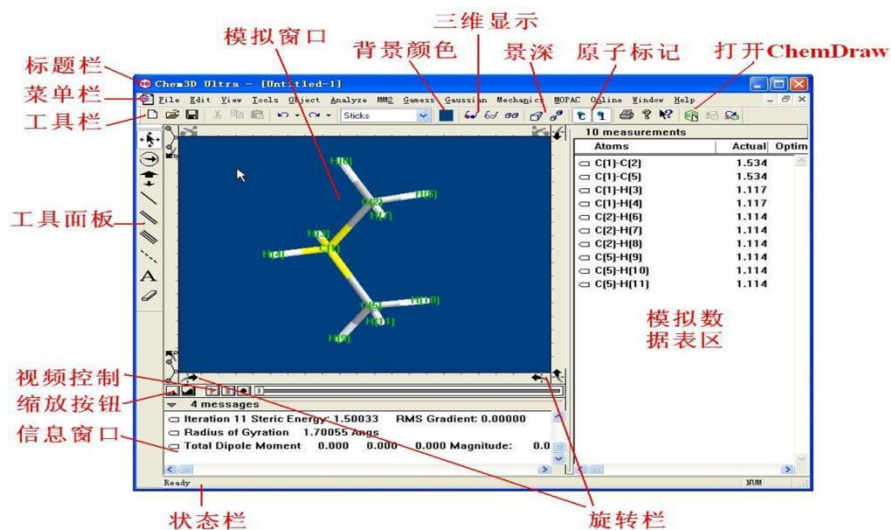
选取长链工具，在需要进行的连接原子或环上点击或拖动可产生链；同时弹出链长对话框，可以选择增长链的长度。

### 5.3 分子模型及仿真软件 CHEM3D

分子模式及仿真软件 Chem3D 为化学化工工作者提供分子模拟工具。其中包括便捷分子结构建立、分析及计算工具，并拥有友好的交互界面。

Chem3D 提供的计算工具包括分子结构的优化、分子动力学以及分子单点能的计算等。

#### 5.3.1 主界面（本讲义示例采用 ChemOffice8.0 版）



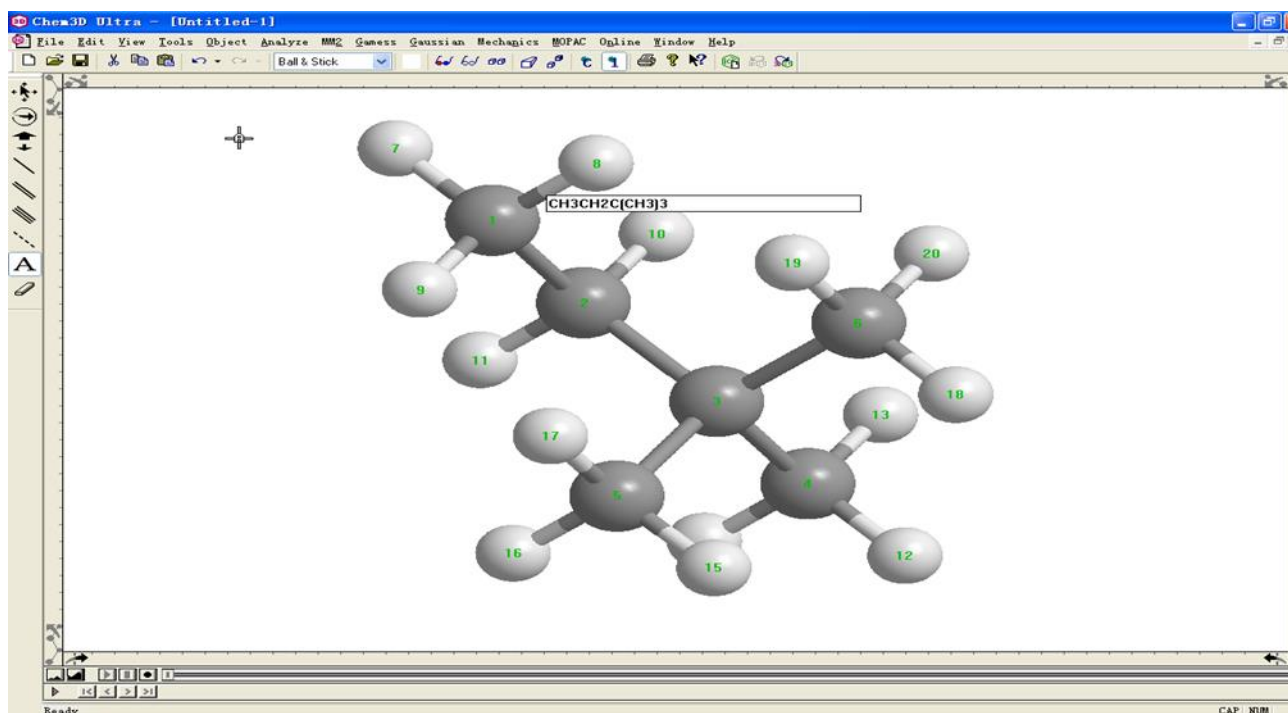
#### 5.3.2 3D 模型绘制与编辑

##### (1) 利用键工具建立模型

利用垂直工具栏中的键工具，通过拖拉即可以建立立体分子模型。用单键工具每拖拉出一条直线，松开鼠标即成一个乙烷立体模型。将鼠标放在其中一个原子上，每拖拉一条直线即成一键。原子默认为 C 原子。

##### (2) 利用文本工具建立模型

利用垂直工具栏中的“A”按钮，将鼠标移至模型窗口，单击鼠标出现文本框，在输入框中输入分子式，按回车键，Chem3D 自动将输入分子式变成相应的 3D 模型，如下图。



若化合物带有支链，可以将支链用括号括起来。

### (3) 利用子结构建立 3D 模型

Chem3D 提供了子结构库，用户可以选择其中的子结构，然后拼装起来，形成复杂的结构。在“View”下拉菜单中选择“Substructures.TBL”命令，弹出“Table-Editor-Substructures”窗口，从窗口中可以选择所需要的子结构。

选中所需子结构的“Model”，单击工具栏中“复制”按钮复制子结构。回到 3D 模型窗口中，将子结构粘贴至窗口，利用工具栏中的键工具将相应的结构连接起来。如下页图所示：

Table Editor - [Substructures]

File Edit View Sort Layout Setup Window Help

256 compounds

Name	Model	Color
?Asn		
Asp		
?Asp		
Azido		
trans-4,4'-Azobenzene		
Benzamido		
1,2-Benzo-1-cyclohepten-4-yl		
Benzoyl		
Benzyl		
Bicyclo[2.2.1]hept-5-en-2-yl		
2-Bicyclo[2.2.1]heptyl		
2-Bicyclo[2.2.2]octyl		
2-Bicyclo[3.1.1]heptyl		
3-cis-Bicyclo[3.2.0]heptyl		
6-Bicyclo[3.2.1]octyl		
3-Bicyclo[3.2.2]nonyl		
3-cis-Bicyclo[3.3.0]octyl		
3-Bicyclo[3.3.1]nonyl		
3-cis-Bicyclo[4.1.0]heptyl		
3-Bicyclo[4.1.1]octyl		
7-cis-Bicyclo[4.2.0]octyl		
7-Bicyclo[4.2.1]nonyl		

Ready

### (4) 使用模板建立 3D 模型

利用程序提供的模板库建立 3D 模型。

在“File”下拉菜单中选择“Template”子菜单中含有一些常用复杂结构的模板。可以直接在模板上做一些修改。

例如执行“Template”子菜单中“Buckminsterfullere.C3T”命令，出现富勒烯的 3D 模型，如下图。

#### (5) 改变元素序号与替换元素

改变元素序号:

首先选中模型。执行“Edit”菜单中的“Select All”命令或 ctrl + A 快捷键；然后整理结构，执行“Tools”菜单中的“Clean Up Structure”菜单命令。使用垂直工具栏中的工具，双击需要改变序号的原子，弹出输入框，输入原子序号，按回车键完成原子序号的更改。

改变元素:

双击需要改变元素符号的原子，弹出输入框，输入元素符号，按回车键完成原子序号的更改。若原子的三维结构中显示孤对电子，执行关闭“Tools”菜单中的“Show H's and Lp's”命令，可不显示氢原子和孤对电子。

### 5.3.3 ChemDraw 结构式与 3D 模型的转换

#### (1) ChemDraw 结构式转换为 3D 模型

在 ChemDraw 中绘制出分子结构式后，选中结构，将结构复制到 Chem3D 中，平面结构式直接自动转化为 3D 模型。

#### (2) 直接打开 ChemDraw 文件

在 Chem3D 中直接打开相应的 ChemDraw 文件，也可以将 ChemDraw 文件中的结构转换为 3D 模型。

#### (3) 3D 模型转换为平面结构式

选中 3D 模型后，执行“Edit”中“Copy As”子菜单中的“ChemDraw”命令复制模型，然后粘贴到 ChemDraw 窗口中直接转换为平面结构。

### 5.3.4 Chem3D 的计算功能

#### (1) 整理结构和简单优化

①选中模型：执行“Edit”菜单中的“Select All”命令或使用“Ctrl+A”快捷键。

②整理结构：执行“Tools”菜单中的“Clean Up Structure”菜单命令。

③结构优化：执行“MM2”菜单中的“Minimize”菜单中命令，弹出“Minimize Energy”对话框，单击“Run”开始进行优化，每迭代一次模型就会发生改变，最终给出最低能量状态。下图示例中选择了“Display Every Iteration”，迭代计算过程中，Chem3D 窗口最下方的状态栏会显示迭代过程中各种参数的变化。

④3D 模型信息的显示：将鼠标移动至 3D 模型的原子上，会弹出一个窗口，显示原子的相关信息；鼠标移动到键上，会显示键的相关信息。按住“Shift”键不动，用鼠标顺序选中连续的 3 个原子，即可显示 3 个原子形成的键角。

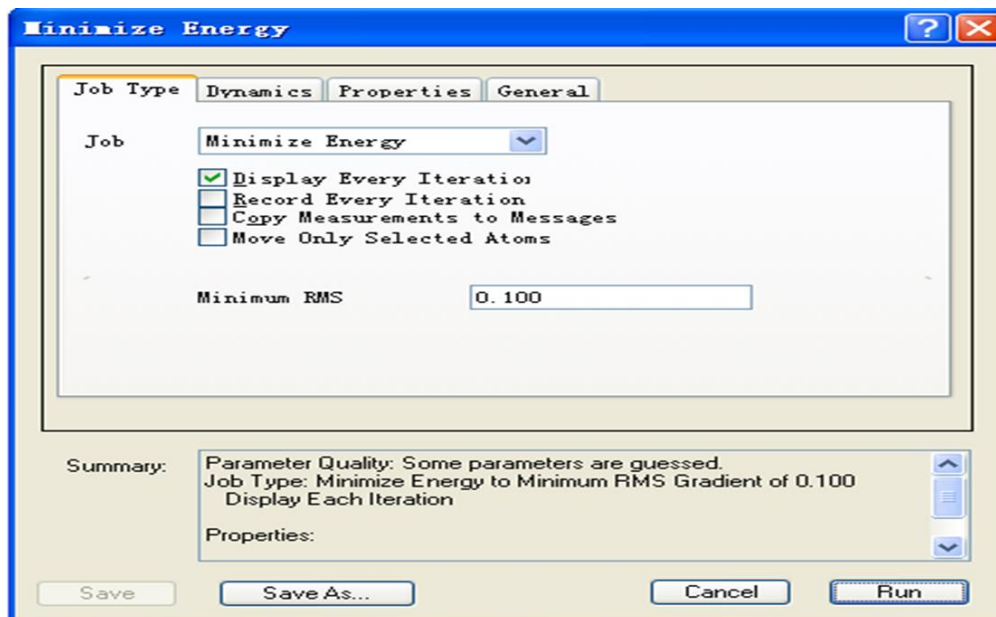
更详细的显示：执行“Analyze”中“Show Measurements”子菜单中的命令，会在界面右侧数据表区显示相关信息。

选中模型后执行“Object”中“Show Element Symbols”中的命令，显示全

部元素的符号和序号。

### 5.3.4 Chem3D 的计算功能

#### (1) 整理结构和简单优化



#### (2) 分子体积的计算

Chem3D 提供了许多的数据表库,可以直接调用查找与原子结构相关的数据,如可以在“View”菜单中的“Atom Types. TBL”菜单命令中调出原子信息表,如“CDW”栏为原子的范德瓦耳斯半径。

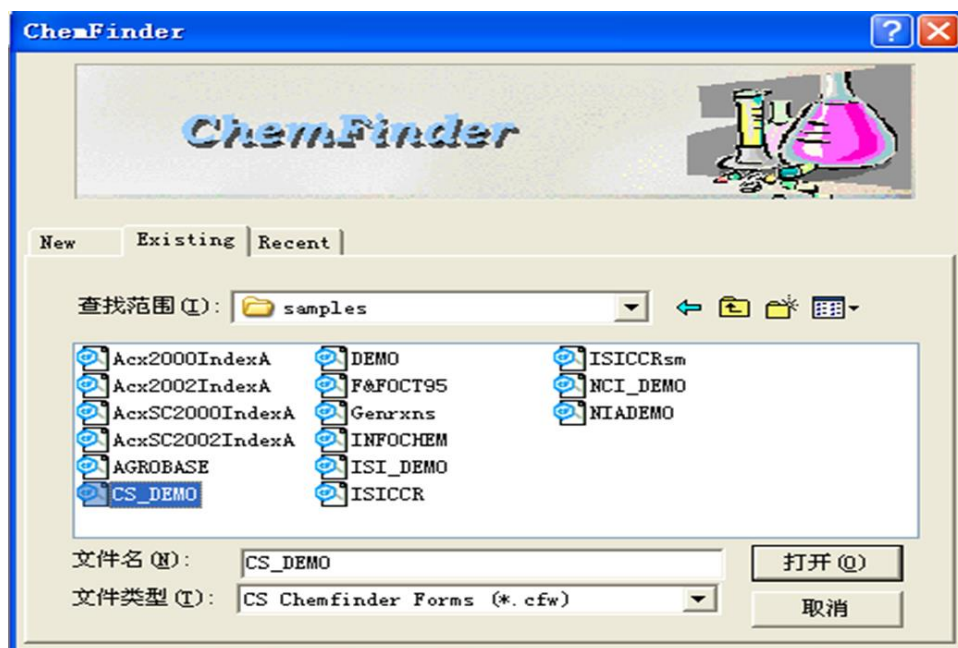
- ② 原子大小的观察
- ② 计算分子体积
- ③ 算内旋转势能
- ④ 算 Huckel 分子轨道

## 5.4 化学信息搜索引擎 CHEMFINDER

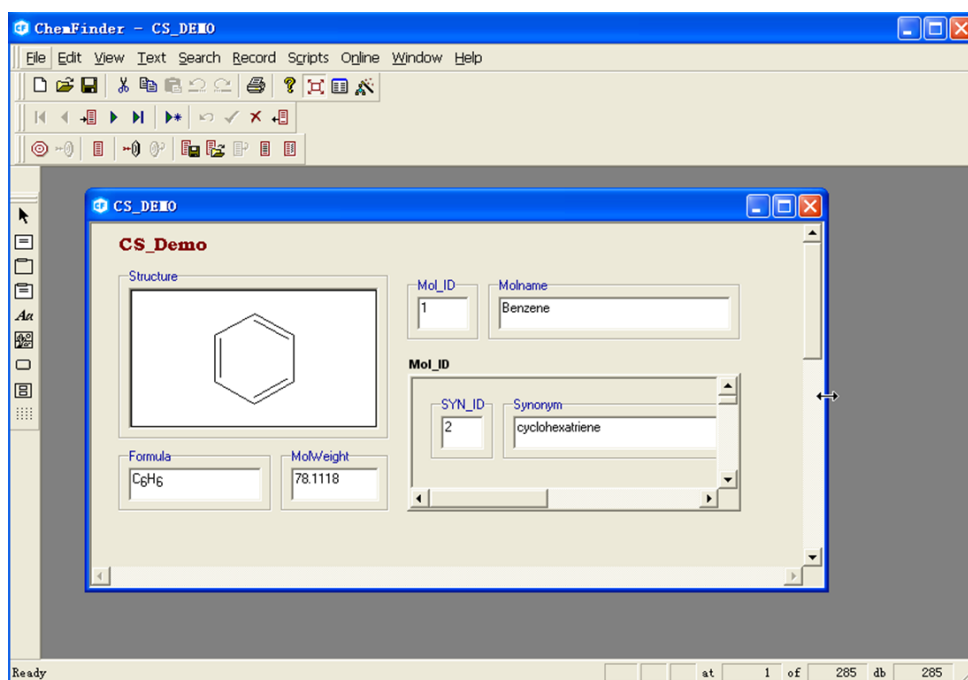
ChemFinder 是一个智能型的快速化学搜寻引擎,所提供的 ChemInfo 是目前世界上最丰富的数据库之一,包含 ChemACX、ChemINDEX、ChemRXN、ChemMSDX 等,并不断有新的数据库加入。该程序可以从本机、网络、服务器中搜索 Word、ChemDraw、ISIS、Excel 等格式的分子结构文件。ChemFinder 自带多个数据库,其数据库文件扩展名为“sfw”,这些数据库默认存放在 C:\Program Files\CambridgeSoft\ChemOffice 2004\ChemFinder\Samples 文件下。(注意本讲义以 ChemOffice 2004 即 8.0 版为例)

### 5.4.1 化学物质检索方法

首先启动 ChemFider,出现“ChemFider”对话框,其中包括 3 个选项卡,单击“Existing”选项卡后,在数据库默认文件夹 c: /Program Files/CambridgeSoft/ChemOffice 2004/ChemFider/Samples 中单击选中“CS\_DEMO.CFW”数据库,单击“打开”按钮,得到窗口如下图。

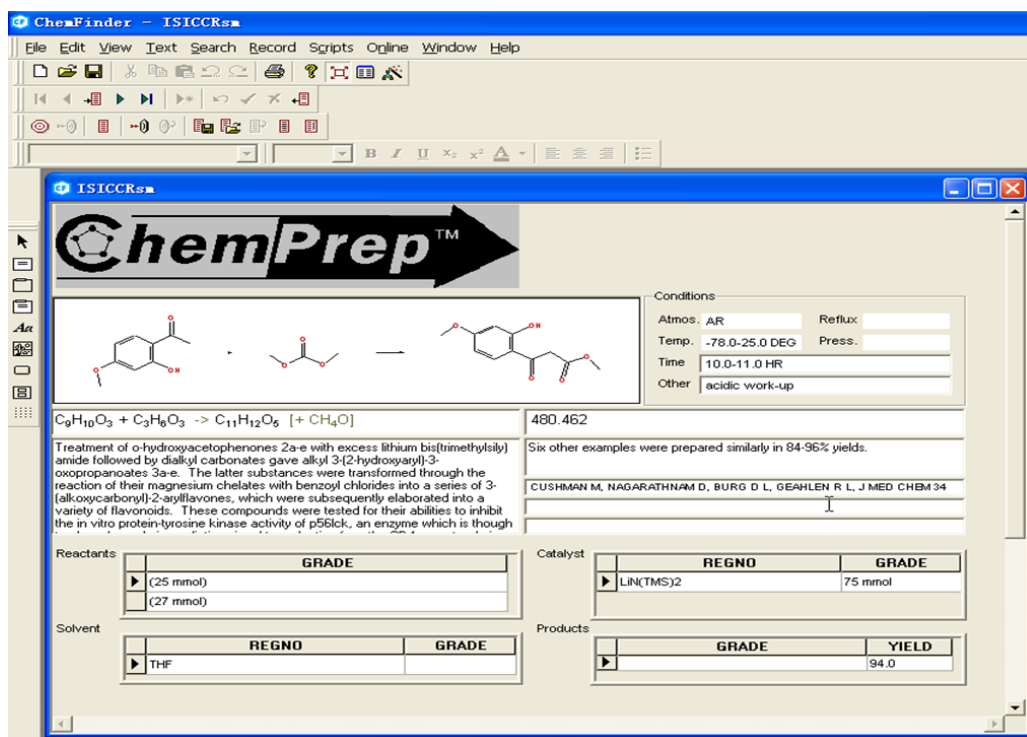


接着，得到结构检索窗口，窗口中间是一个示例结构。在“Structure”输入框中输入一个苯环结构，这是数据库中的一个结构。如下图。其中“Formula”显示其分子式。



#### 5.4.2 化学反应的检索

ChemFider 提供了化学反应数据库“ISCCRsm.CFW”，打开该数据库可以检索化学反应。该数据库文件默认存放在 c:/Program Files/CambridgeSoft/ChemOffice 2004/ChemFider/Samples 文件夹中。利用“Open”菜单命令打开“ISCCRsm.CFW”数据库，显示界面（如下图）



### 5.4.3 查找免费网络资源

在 ChemFider 菜单栏上有一个“Online”菜单，其中提供一些链接可以在线查找有用的化学信息。操作如下图所示。

**ChemFinder - [CS\_DEMO]**

File Edit View Text Search Record Scripts Online Window Help

Find Suppliers on ChemStore.Com  
 Find Information on ChemFinder.Com  
 Find ACX Numbers from Structure  
 Find Structure from ACX Number  
 Find Structure from Name at ChemACX.Com

Browse ChemStore.Com  
 Browse CambridgeSoft.Com  
 Browse CS ChemFinder Documentation  
 Browse CS ChemFinder Technical Support  
 Browse CS ChemFinder Downloads  
 Register Online

Browse ChemOffice SDK

Structure

Formula: C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>      MoWeight: 92.1384

1 Phenyl hydride  
 1 (6)annulene

教案编号	07	
教材名称	实用化学化工计算机软件基础	
授课题目	第六章 化工过程参数介绍	
授课学时	2 课时	
课 型	理论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 上机 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( )	
教学目的	一、掌握评价化工生产效果的常用指标及计算方法 二、掌握工艺技术经济指标及计算方法	
思政目标	培养学生资源高效利用意识, 增强社会责任感。化工生产中原料转化率体现了原料转化程度, 转化率越高, 意味着原料利用越充分。从而引导学生树立资源高效利用的意识, 明白在化工生产乃至日常生活中, 都要珍惜资源, 避免浪费, 以有限的资源创造更多的价值, 增强节约资源的社会责任感。	
教学重点	一、化工生产效果的常用指标及计算方法 二、工艺技术经济指标及计算方法	
教学难点	化工生产效果的常用指标及转化率计算方法 工艺技术经济指标及计算方法	
教学方法	讲授 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 讨论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 指导 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( )	
电子教案	有 ( <input checked="" type="checkbox"/> )	Microsoft PowerPoint ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( )
	无 ( )	
教学资源	多媒体 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( 中国慕课网网课 )	
思 考 题	1. 请你列举评价化工生产效果和工艺技术经济的常用指标及其作用?	
作 业	<p>用磨碎的矾土矿与硫酸反应制得硫酸铝, 反应式如下:  矾土矿中含 <math>\text{Al}_2\text{O}_3</math> 55.4% (质量分数), 硫酸溶液的浓度为 77.7% (质量分数)。以 1080kg 矾土矿和 2510kg 硫酸溶液为原料, 生产出 1798kg 纯的硫酸铝 (分子量 342) 产品。</p> <p>求(1)反应物料中哪一种反应物为过量反应物?  (2)量反应物的过量百分数为多少?  (3)量反应物的转化率是多少?  (4)制反应物的转化率为多少?</p>	

# 教学内容

## 第六章 化工过程参数介绍

### 6.1 评价化工生产效果的常用指标

#### 一、生产能力和生产强度

##### 1.生产能力

(1) 定义：生产能力是指生产装置每年生产的产品量，单位为

(2)分类：设计能力、查定能力和现有能力。

①设计能力 是指在设计任务书和技术文件中所规定的生产能力，根据工厂设计中规定的产品方案和各种数据来确定。通常新建化工企业竣工投产后，要经过一段时间运转，熟悉和掌握生产技术后才能达到规定的设计能力。

②查定能力 一般是指老企业在没有设计能力数据，或虽原有设计能力，但由于企业的产品方案和组织管理、技术条件等发生了重大变化，致使原设计能力已不能正确反映企业实际生产能力可达到的水平，此时重新调整和核定的生产能力。它是根据企业现有条件，并考虑到查定期内可能实现的各种技术组织措施而确定的。

③现有能力 现有能力又称计划能力，指在计划年度内，依据现有的生产技术组织条件及计划年度内能够实现的实际生产效果，按计划期内产品方案计算确定的。

注意：这三种生产能力在实际生产中各有不同的用途，设计能力和查定能力是用作编制企业长远规划的依据，现有能力是编制年度生产计划的重要依据。

##### 2. 生产强度

生产强度指的是单位特征几何量的生产能力，例如单位体积或单位面积的设备在单位时间内生产得到的目的产品数量(或投入的原料量)，单位是  $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{h}^{-1}$ 、 $\text{t}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{d}^{-1}$  或  $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{h}^{-1}$ 、 $\text{t}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{h}^{-1}$  等。

催化化学反应设备的生产强度常用催化剂的空时产率(或称时空收率)来表示，即单位时间内，单位体积(或单位质量)催化剂所能获得的目的产物的数量，可表示为  $\text{kg}/(\text{h}\cdot\text{m}^3 \text{ 催化剂})$ 、 $\text{t}/(\text{d}, \text{m}^3 \text{ 催化剂})$  或  $\text{kg}/(\text{h}\cdot\text{kg} \text{ 催化剂})$ 、 $\text{t}/(\text{d}\cdot\text{kg} \text{ 催化剂})$  等。

#### 二、转化率

##### 1.定义

转化率是反应物料中的某一反应物在一个系统中参加化学反应的量占其通入系统总量的百分数，它表示了化学反应进行的程度。

## 2.表达式

$$\text{转化率} = \frac{\text{参加反应的反应物量}}{\text{通入系统的反应物量}} \times 100\%$$

$$X_A = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}} \times 100\%$$

## 3.分类

根据研究的系统不同，工业生产中转转化率分为有单程转化率和总转化率，单程转化率是以生产过程中的反应器为系统

### (1) 单程转化率

$$\text{单程转化率} = \frac{\text{输入到反应器的反应物量} - \text{从反应器输出的反应物量}}{\text{输入到反应器的反应物量}} \times 100\%$$

### (2) 总转化率

$$\text{总转化率} = \frac{\text{输入到过程的反应物量} - \text{从过程输出的反应物量}}{\text{输入到过程的反应物量}} \times 100\%$$

## 三、限制反应物与过量反应物

### 1.限制反应物

化学反应原料不按化学计量比配料时，其中以最小化学计量数存在的反应物称为限制反应物。

### 2.过量反应物

不按化学计量比配料的原料中，某种反应物的量超过限制反应物完全反应所需的理论量，该反应物称为过量反应物。

### 3.过量百分数

过量反应物超过限制反应物所需理论量的部分占所需理论量的百分数。通常以此来表示过量反应物的过量程度。其计算方法有两种

#### (1) 化学计量数计算：

$$\text{过量}\% = \frac{\text{过量反应物的化学计量数} - \text{限制反应物的化学计量数}}{\text{限制反应物的化学计量数}} \times 100\%$$

#### (2) 用反应物量计算

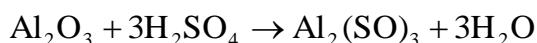
过量百分数由定义式也可表示为：

$$\text{过量}\% = \frac{\text{过量反应物的实际投料量} - \text{过量反应物所需的理论量}}{\text{过量反应物所需的理论量}} \times 100\%$$

过量反应物的转化率总是小于限制反应物的转化率，一般没有特别说明的情况下转化率是指限制反应物的转化率，它可以用作衡量反应完全程度的标准。

#### 4. 举例

例：用磨碎的矾土矿与硫酸反应制得硫酸铝，反应式如下：



矾土矿中含  $\text{Al}_2\text{O}_3$  55.4% (质量分数)，硫酸溶液的浓度为 77.7% (质量分数)。以 1080kg 矾土矿和 2510kg 硫酸溶液为原料，生产出 1798kg 纯的硫酸铝 (分子量 342) 产品。

求(1)反应物料中哪一种反应物为过量反应物？

- (2) 量反应物的过量百分数为多少？
- (3) 量反应物的转化率是多少？
- (4) 制反应物的转化率为多少？

解：

- (1) 量反应物的判断  
计算各反应物的化学计量数

$\text{Al}_2\text{O}_3$  的化学计量数：  $1080 \times 0.554 \div 101.96 = 5.87$

$\text{H}_2\text{SO}_4$  的化学计量数：  $\frac{2510 \times 0.777}{3 \times 98} = 6.63$

所以  $\text{H}_2\text{SO}_4$  为过量反应物

- (2) 量反应物  $\text{H}_2\text{SO}_4$  的过量百分数的计算

$\text{H}_2\text{SO}_4$  的化学计量数：  $\frac{6.63 - 5.87}{5.87} \times 100\% = 12.95\%$

- (3) 产 1798  $\div$  342=5.26kmol  $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$  需消耗硫酸的量

$$5.26 \times 3 = 15.78 \text{ kmol}$$

则硫酸的转化率为：

$$\frac{15.78}{2510 \times 0.777 \div 98} \times 100\% = 79.30\%$$

- (4) 制反应物即  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的转化率

$$\frac{5.26}{5.87} \times 100\% = 90\%$$

从本题可看出，限制反应物的转化率为 90%，过量反应物的转化率仅为 79.30%，限制反应物的转化率远比过量反应物的转化率高，它才是真正表达了反应的完全程度。

### 三、产率和选择性

#### 1. 产率

产率指的是化学反应过程中得到目的产品的百分数。常用的产率指标为理论产率。理论产率是以产品的理论产量为基础来计算的产率，即化学反应过程中实际所得目的产品量占理论产量的百分数。一般情况下，实际得到的目的产品数量只会比理论产量小，因此理论产率总是小于 100%。根据计算目的产品理论产量的基准不同，理论产率又有两种不同的表示方法。

#### 2. 选择性

$$S = \frac{\text{目的产品实际产量}}{\text{以参加的某种原料计目的产品理论产量}} \times 100\%$$

#### 3. 单程收率

$$Y = \frac{\text{目的产品实际产量}}{\text{以通入反应器的原料计目的产品理论产量}} \times 100\%$$

选择性和单程收率的关系：选择性 × 单程转化率 = 单程收率

### 四、收率

收率泛指一般的反应过程及非反应过程中得到的目的产品的百分率。

$$\text{收率} = \frac{\text{实际获得的目的产品量}}{\text{通入反应器的原料量}} \times 100\%$$

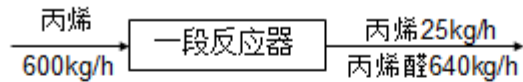
在某些生产过程中，由于采用的原料是复杂的混合物，其中的各种成分都有可能转化为目的产物，而各种物料在反应中转化为目的产物的情况又很难确定（比如石油裂解生产有机原料乙烯过程），此时，无法或很难用产率来表示产品

的得率。为了表明反应效果，就常以收率来计算目的产物的得率。

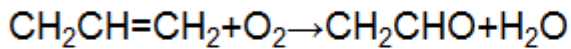
### 五、举例

例题：已知丙烯氧化法生产丙烯醛的一段反应器，原料丙烯投料量为600kg/h，出料中有丙烯醛640 kg/h，另有未反应的丙烯25 kg/h，试计算原料丙烯的转化率、选择性及丙烯醛的收率。

解：反应器物料变化如图所示



丙烯氧化生成丙烯醛的化学反应方程式：



$$\text{丙烯转化率} \quad X = \frac{(600 - 25)}{600} \times 100\% = 95.83$$

$$\text{丙烯的选择性} \quad S = \frac{640/56}{(600 - 25)/42} \times 100\% = 83.48\%$$

$$\text{丙烯醛的收率} \quad Y = \frac{640/56}{600/42} \times 100\% = 80\%$$

## 6.2 工艺技术经济指标

### 消耗定额

工艺技术管理工作的目标除了保证完成目的产品的产量和质量，还要努力降低消耗，因此各化工企业都根据产品设计数据和本企业的条件在工艺技术规程中规定了各种原材料的消耗定额，作为本企业的工艺技术经济指标。如果超过了规定指标，必须查找原因，降低消耗以达到生产强度大、产品质量高、单位产品成本低的目的。

#### 1.定义

指生产单位产品所消耗的各种原料及辅助材料——水、燃料、电力和蒸汽量等。

#### 2.分类

##### (1)原料消耗定额

如果将初始物料（一般不是100%的纯物质）转化为具有一定纯度要求的最终产品，按化学反应方程式的化学计量为基础计算的消耗定额，称为理论消耗定额，用“A理”表示。它是生产单位目的产品时，必须消耗原料量的理论值，因此实际过程的原料消耗量绝不可能低于理论消耗定额。

化工企业的原材料消耗定额数据是根据理论消耗定额,参考同类型生产工厂的消耗定额数据,考虑本企业生产过程的实际情况(工艺允许的物料损失和生产中应该能达到的水平等)估算出来而编入工艺技术规程,作为本企业的控制指标。

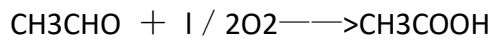
(2)公用工程的消耗定额

公用工程指的是化工厂必不可少的供水、供热、冷冻、供电和供气等条件。

3. 举例

例题:乙醛氧化法生产醋酸,已知原料投料量为纯度 99.4%的乙醛 500kg/h,得到的产物为纯度 98%的醋酸 580kg/h,试计算原料乙醛的理论消耗定额、实际消耗定额以及原料利用率。

解:乙醛氧化法生产醋酸的化学反应方程式为:



$(44 \div 0.994)$	$(60 \div 0.98)$	
$A_{\text{理}}$	$1000$	
$500$	$580$	
$A_{\text{实}}$	$1000$	

原料乙醛的理论消耗定额、实际消耗定额以及原料利用率为:

$$A_{\text{理}} = (1000 \times 44 \div 0.994) / (60 \div 0.98) = 723 (\text{kg 原料乙醛} / \text{t 成品醋酸})$$

$$A_{\text{实}} = (1000 \times 500) / 580 = 862.06 (\text{kg 原料乙醛} / \text{t 成品醋酸})$$

$$\eta = (723 / 862.06) \times 100\% = 83.87\%$$

教案编号	08	
教材名称	实用化学化工计算机软件基础	
授课题目	第七章 流程图绘制介绍	
授课学时	4 课时	
课 型	理论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 上机 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( )	
教学目的	一、了解标准和标准文献的定义 二、掌握流程图绘制软件基本图形 三、掌握流程图绘制软件基本操作	
思政目标	培养学生责任感和团队合作精神。教学过程中将流程图绘制与实际课程作业设计项目相结合, 让学生在学习过程中了解项目的管理流程和团队合作的重要性, 从而培养学生的责任感和团队精神。	
教学重点	一、掌握掌握流程图绘制软件基本图形 二、掌握流程图绘制软件基本操作	
教学难点	一、掌握掌握流程图绘制软件基本图形 二、掌握流程图绘制软件基本操作	
教学方法	讲授 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 讨论 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 指导 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( )	
电子教案	有 ( <input checked="" type="checkbox"/> )	Microsoft PowerPoint ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( )
	无 ( )	
教学资源	多媒体 ( <input checked="" type="checkbox"/> ); 其它 ( 中国慕课网网课 )	
思考题	1. 请谈谈化工流程图的作用。	
作 业	课堂练习题: 请绘制乙醇蒸馏物料流程图 MBD	

# 教学内容

## 第七章 流程图绘制介绍

### 7.1 化工流程图概述

#### 1. 化工工艺流程图的定义

化工工艺流程图是用图示的方法把化工生产的工艺流程和所需的设备、管道、阀门、管件、管道附件及仪表控制点表示出来的一种图样，是设备布置和管道布置设计的依据，也是施工、操作、运行及检修的指南，是化工工艺设计的主要内容。

绘制化工工艺流程图是化工制图的内容之一，因此，国家《机械制图》标准对化工制图的约束，在绘制化工工艺流程图同样有效。但由于化工工艺流程图的特殊性，原化工部对化工工艺流程图制定了一套行业标准。标准对图样幅画、标题栏等作了说明，并规定了设备图形、线型、阀门管件图线、图例等的表达方式，设备、管线、仪表等的标注形式等。

#### 2. 流程图绘制软件介绍

工艺流程图一般绘图软件为 AutoCAD，但企业及设计院一般使用在 AutoCAD 平台上二次开发的软件，如：国产软件——PIDCAD 工艺流程图设计软件、工艺流程设计软件。

其中后者是将常用化工设备以组件形式构建数据库，用户直接调用即可。

绘制出标准的工艺流程图图样（其中包括化工零件图以及化工设备图），第一步需要选定视图，视图的目的就是反映实际物体的结构、大小、安装尺寸，能够非常明了的读懂实际物体大致构造的尺寸。大多数化工机械设备均具有回转体特征，因此在选择主视图时，将回转体主轴所在的平面默认为主视图。

### 7.2 流程图绘制软件基本图形介绍

#### 1. 图样幅画及其他

在化工工艺流程图的绘制过程中，对图样幅画、字体、比例、标题栏等仍采用国家《机械制图》标准，只是对某些特殊的地方进行了一些补充和说明。化工工艺流程图的图样幅画仍采用国家标准对图样幅画的规定，一般化工工艺流程图采用标准中 A1 规格的图样幅画，横幅绘制。对流程简单着可以采用 A2 规格的图样幅画。

表1 图样幅面尺寸

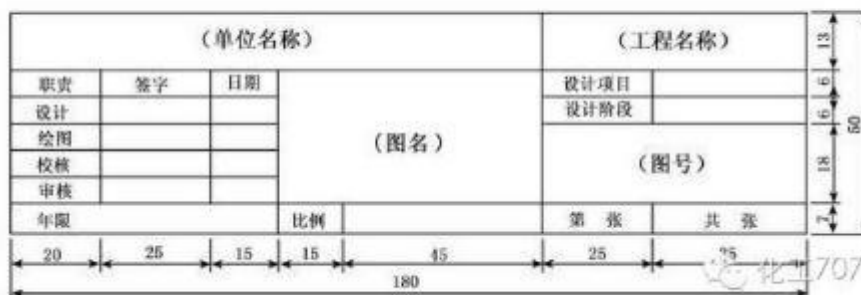
幅面代号	A0	A1	A2	A3	A4	A5
B × L	841 × 1189	594 × 841	420 × 594	297 × 420	210 × 297	148 × 210
a	25					
c	10			5		
e	20		10			

表2 绘图比例

种类	比例				
放大比例	4:1	2.5:1			
	$4 \times 10^n:1$	$2.5 \times 10^n:1$			
缩小比例	1:1.5	1:2.5	1:3	1:4	1:6
	$1:1.5 \times 10^n$	$1:2.5 \times 10^n$	$1:3 \times 10^n$	$1:4 \times 10^n$	$1:6 \times 10^n$

对生产流程过长，在绘制流程图时可以采用标准幅面加长的格式。每次加长为图样宽度的  $1/4$  倍，也可以分段分张的流程图格式。在流程图中，设备（机器）一般只取相对比例。允许实际尺寸过大的设备（机器）比例适当缩小，实际尺寸过小的设备（机器）比例适当放大。要示意出各设备间的相对高低。化工工艺流程图的标题栏与机械制图中的标题栏有所不同，原化工部标准对工艺流程图的标题栏规定如表 3 所示。

表3 标题栏示意图



## 2. 工艺流程图绘制基本图形



2.工艺流程图一般有如下几种：

(1) 全厂总工艺流程图或物料平衡图，在化工厂设计中，为总说明部分提供的全厂流程图样。对综合性化工厂则称全厂物料平衡图。图上各车间(工段)用细实线画成长方框来示意。流程线只画出主要物料，用粗实线表示。流程方向用箭头画在流程线上。图上还注明了车间名称，各车间原料、半成品和成品的名称、平衡数据和来源、去向等。

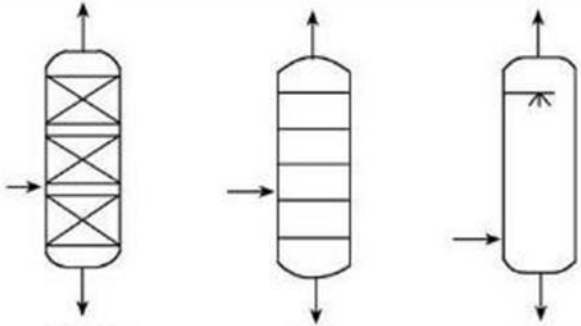
(2) 物料流程图 MBD (material balance diagram)，是在全厂总工艺流程图基础上，分别表达各车间内部工艺物料流程的图样。在流程上标注出各物料的组分、流量以及设备特性数据等。

(3) 工艺管道及仪表流程图 PID (Piping & Instrument Diagram)，是以物料流程图为依据，内容较为详细的一种工艺流程图。在管线和设备上画出配置的某些阀门、管件、自控仪表等的有关符号。

## 7.4 化工流程图绘制设备表示方法和标注

化工设备与机器的图形表示方法原化工部 HG20519.34-92 标准中已作了规定。表 4 摘录了标准中的部分图例。在标准中未规定的设备、机器图形可以根据其实际外形和内部结构特征绘制，只取相对大小，不按照实物比例绘制。化工工艺流程图中各设备、机器的位置应便于管道连接和标注，其相互间物料关系密切者的相对高低位置要与设备实际布置相吻合。对于需隔热的设备和机器要在其相应部位画出一段隔热层图例，必要时标注出其隔热等级；管道有伴热的也要在相应的部位画出一段伴热管，必要时可标注出伴热类型和介质代号。地下或半地下的设备、机器在化工工艺流程图上要表示出一段相关的地面。设备、机器的支承和底座可不表示。

表4 化工工艺流程图上的设备、机械图例

设备类别	分类号	图 例
塔	T	 <p>填料塔      板式塔      喷淋塔</p>

化工707