

## 六、计算题：

1、100mol 苯胺在用浓硫酸进行溶剂烘培磺化时，反应物中含 89mol 对氨基苯磺酸，2mol 苯胺，

另外还有一定数量的焦油物等副产物。试求苯胺的转化率、生成对氨基苯磺酸的选择性和理论收率。

解：苯胺的转化率  $X = \frac{100-2}{100} \times 100\% = 98.00\%$ ，

生成对氨基苯磺酸的选择性和理论效率： $S = \frac{89 \times \frac{1}{100-2}}{100-2} \times 100\% = 90.82\%$

$Y = \frac{89 \times \frac{1}{100}}{100} \times 100\% = 89\%$  或  $Y = S \cdot X = 98.00\% \times 90.82\% = 89\%$

2、在苯的一氯化制氯苯时，为了减少二氯苯的生成量，每 100mol 苯用 40mol 氯气，反应产物中含 38mol 氯苯，

1mol 二氯苯，还有 61mol 未反应的苯，经分离后可回收 60mol 苯，

损失 1mol 苯，试求苯的单程转化率、总转化率、生成氯苯的选择性及生成氯苯的总收率。

解：苯的单程转化率  $X_{\text{单}} = \frac{100-61}{100} \times 100\% = 39.00\%$ ，

苯的总转化率  $X_{\text{总}} = \frac{100-61}{100-60} \times 100\% = 97.5\%$

生成氯苯的选择性  $S = \frac{38 \times \frac{1}{100-61}}{100-61} \times 100\% = 97.44\%$ ，

生成氯苯的总收率  $Y_{\text{总}} = 97.50 \times 97.44\% = 95.00\%$

或  $Y_{\text{总}} = \frac{38 \times \frac{1}{100-60}}{100-60} \times 100\% = 95.00\%$

3、在实际生产中，300kg 对硝基甲苯（分子量为 137）用 20% 的发烟硫酸 800kg 在 100~125℃ 进行

一磺化制 2-甲基-5-硝基苯磺酸，试计算其废酸的  $\pi$  值和  $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4) / [\omega(\text{H}_2\text{SO}_4) + \omega(\text{H}_2\text{O})]$ 。

解：对硝基甲苯的量 =  $300 / 137 = 2.19 \text{ kmol}$

$800 \text{ kg} 20\% \text{ 发烟硫酸含 } \text{H}_2\text{SO}_4 = 800$

$\times 104.5\% = 836 \text{ kg}$

一磺化消耗  $\text{H}_2\text{SO}_4 = 2.19 \times 98 = 214.62 \text{ kg}$

$$\pi = \frac{(836 - 214.6) \times \frac{80}{98}}{800 - 214.6 \times \frac{80}{98}} \times 100\% = 81.18$$

即  $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4) / [\omega(\text{H}_2\text{SO}_4) + \omega(\text{H}_2\text{O})] = 99.44\%$

4、欲配置  $1000 \text{ kg}$  质量分数为  $100\%$  的  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ，要用多少千克质量分数为  $98\%$  的硫酸和多少千克质量分数为  $20\%$  的发烟硫酸？

解： $20\%$  发烟硫酸换算成  $\text{H}_2\text{SO}_4$  的百分含量为： $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4) = 100\% + 0.225 \omega(\text{SO}_3) = 100\% + 0.225 \times 0.2 = 104.5\%$

设用  $98\%$  的硫酸  $X \text{ kg}$ ，则发烟硫酸为  $(1000 - X) \text{ kg}$   $98\%$

$$X + 104.5 \times (1000 - X) = 1000 \times 100\%$$

解得  $X = 692.3 \text{ kg}$   $1000 - X = 307.7 \text{ kg}$  即要用  $692.3 \text{ kg} 98\%$  的硫酸和  $307.7 \text{ kg}$  质量分数为  $20\%$  的发烟硫酸。

5、用  $600 \text{ kg}$  质量分数为  $98\%$  的硫酸和  $500 \text{ kg}$  的质量分数为  $20\%$  的发烟硫酸，试计算所配硫酸的质量百分比浓度？（以  $c(\text{H}_2\text{SO}_4)$  表示）

解： $20\%$  发烟硫酸换算成  $\text{H}_2\text{SO}_4$  的百分含量为： $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4) = 100\% + 0.225 \omega(\text{SO}_3) = 100\% + 0.225 \times 0.2 = 104.5\%$

$$\text{所配硫酸的质量分数为 } \omega(\text{H}_2\text{SO}_4) = \frac{600 \times 98\% + 500 \times 104.5\%}{600 + 500} \times 100\% = 100.9\%$$

6、设  $1 \text{ kmol}$  萘在一硝化时用质量分数为  $98\%$  硝酸和  $98\%$  硫酸，要求混酸的脱水值为  $1.35$ ，硝酸比  $\phi$  为  $1.05$ ，试计算要用  $98\%$  硝酸和  $98\%$  硫酸各多少千克？（在硝化锅中预先加有适量上一批的废酸，

计算中可不考虑，即假设本批生成的废酸的组成与上批循环非酸的组成相同)。

$$\begin{aligned} \text{解： } 100\% \text{ 的硝酸用量} &= 1.05 \text{ kmol} = 1.05 \times 63 = 66.15 \text{ kg} & 98\% \text{ 的硝酸用量} \\ &= 66.15 / 0.98 = 67.5 \text{ kg} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{所用硝酸中含水量} &= 67.50 - 66.15 = 1.35 \text{ kg} & \text{理论消耗 } \text{HNO}_3 &= \\ 1.00 \text{ kmol} &= 63.00 \text{ kg} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{剩余 } \text{HNO}_3 &= 66.15 - 63.00 = 3.15 \text{ kg} & \text{反应生成水} &= \\ 1.00 \text{ kmol} &= 18.00 \text{ kg} \end{aligned}$$

设所用 98% 的硫酸的质量为  $x$  kg；所用 98% 硫酸中含水为  $0.02x$  kg，则 D. V. S. =

$$\frac{0.98x}{1.35 + 18 + 0.02x} = 1.35$$

$$\text{解得 } x = 27.41 \text{ kg} \quad \text{即所用 98\% 硫酸的质量为 } 27.41 \text{ kg}$$

7、设 1 kmol 萘在一硝化时用质量分数为 98% 硝酸和 98% 硫酸，要求混酸的脱水值为 1.2，硝酸比  $\phi$  为 1.05，试计算要用 98% 硝酸和 98% 硫酸各多少千克？（在硝化锅中预先加有适量上一批的废酸，

计算中可不考虑，即假设本批生成的废酸的组成与上批循环废酸的组成相同）

$$\begin{aligned} \text{解： } 100\% \text{ 的硝酸用量} &= 1.05 \text{ kmol} = 1.05 \times 63 = 66.15 \text{ kg} & 98\% \text{ 的硝酸用量} &= 66.15 / \\ &0.98 = 67.5 \text{ kg} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{所用硝酸中含水量} &= 67.50 - 66.15 = 1.35 \text{ kg} & \text{理论消耗 } \text{HNO}_3 &= 1.00 \text{ kmol} = \\ 63.00 \text{ kg} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{剩余 } \text{HNO}_3 &= 66.15 - 63.00 = 3.15 \text{ kg} & \text{反应生成水} &= 1.00 \text{ kmol} = \\ 18.00 \text{ kg} \end{aligned}$$

设所用 98% 的硫酸的质量为  $x$  kg；所用 98% 硫酸中含水为  $0.02x$  kg，则 D. V. S. =

$$\frac{0.98x}{1.35+18+0.02x}=1.2,$$

解得  $x=26.51\text{kg}$  即所用 98% 硫酸的质量为 26.51kg

8、设 1kmol 萘在一硝化时用质量分数为 98% 硝酸和 98% 硫酸, 要求混酸的脱水值为 1.35, 硝酸比  $\phi$  为 1.05, 试计算要用 98% 硫酸多少千克? (在硝化锅中预先加有适量上一批的废酸, 计算中可不考虑,

即假设本批生成的废酸的组成与上批循环非酸的组成相同)

解: 100% 的硝酸用量 =  $1.05\text{kmol} = 1.05 \times 63 = 66.15\text{kg}$  98% 的硝酸用量 =

$$66.15/0.98=67.5\text{kg}$$

所用硝酸中含水量 =  $67.50 - 66.15 = 1.35\text{kg}$

理论消耗  $\text{HNO}_3 =$

$$1.00\text{kmol} = 63.00\text{kg}$$

剩余  $\text{HNO}_3 = 66.15 - 63.00 = 3.15\text{kg}$

反应生成水 =

$$1.00\text{kmol} = 18.00\text{kg}$$

设所用 98% 的硫酸的质量为  $x\text{kg}$ ; 所用 98% 硫酸中含水为  $0.02x\text{kg}$ ,

$$\text{则 D. V. S.} = \frac{0.98x}{1.35+18+0.02x} = 1.35$$

解得  $x=27.41\text{kg}$  即所用 98% 硫酸的质量为 27.41kg

9、设 1kmol 萘在一硝化时用质量分数为 98% 硝酸和 98% 硫酸, 要求混酸的脱水值为 1.35, 硝酸比  $\phi$  为 1.05, 试计算所配混酸的质量组成。(在硝化锅中预先加有适量上一批的废酸, 计算中可不考虑, 即假设本批生成的废酸的组成与上批循环非酸的组成相同)

解: 100% 的硝酸用量 =  $1.05\text{kmol} = 1.05 \times 63 = 66.15\text{kg}$  98% 的硝酸用量 =

$$66.15/0.98=67.5\text{kg}$$

所用硝酸中含水量 =  $67.50 - 66.15 = 1.35\text{kg}$

理论消耗  $\text{HNO}_3 = 1.00\text{kmol} =$

$$63.00\text{kg}$$

剩余  $\text{HNO}_3 = 66.15 - 63.00 = 3.15\text{kg}$

反应生成水 =  $1.00\text{kmol} =$

18.00kg

设所用 98% 的硫酸的质量为  $x$ kg；所用 98% 硫酸中含水为  $0.02x$ kg，

$$\text{则 } D.V.S. = \frac{0.98x}{1.35 + 18 + 0.02x} = 1.35$$

解得  $x = 27.41$ kg；所用 98% 硫酸的质量为 27.41kg；混酸中含  $H_2SO_4 = 27.41 \times 0.98 = 26.86$ kg；

所用 98% 硫酸中含水  $= 27.41 - 26.86 = 0.55$ kg；故混酸中含水  $= 1.35 + 0.55 = 1.90$ kg

混酸质量  $= 67.5 + 27.41 = 94.91$ kg；混酸组成（质量分数）： $H_2SO_4$  28.30%； $HNO_3$  69.70%； $H_2O$  2.0%

10、60℃时甲醇的饱和蒸汽压是 83.4kPa，乙醇的饱和蒸汽压是 47.0kPa，二者可形成理想液态混合物，

若混合物的组成质量百分比各 50%，求 60℃时此混合物的平衡蒸气组成，以摩尔分数表示。

解：由题意可设甲醇为 A 物质，乙醇为 B 物质， $M_A = 32$ ， $M_B = 46$

$$p_A^* = 83.4 \text{ kPa} \quad p_B^* = 47.0 \text{ kPa}$$

$$X_A = \frac{\frac{50}{32}}{\frac{50}{32} + \frac{50}{46}} = 0.5898 \quad X_B = 1 - X_A = 1 - 0.5898 = 0.4102$$

根据 Raoult 定律，易得  $p_A = 83.4 \times 0.5898 = 49.19 \text{ kPa}$ ；

$$p_B = 47.0 \times 0.4102 = 19.28 \text{ kPa}$$

$$p = p_A + p_B = 49.19 + 19.28 = 68.47 \text{ kPa}；$$

$$y_A = \frac{p_A}{p} = \frac{49.19}{68.47} = 0.718； \quad y_B = 1 - y_A = 1 - 0.718 = 0.282$$

11、苯在并流沸腾一氯化时，氯化液的质量分数组成是苯 72%，氯苯 28%，沸腾温度 80℃，在 80℃时苯、氯苯的蒸汽压分别为 101.3kPa、19.3kPa，按 Raoult 定律计算此混合物的

平衡蒸气组成之比。(苯/氯苯)

解：由题意可设苯为 A 物质，氯苯为 B 物质， $M_A=78$ ， $M_B=112.5$

$$p_A^* = 101.3 \text{ kPa} \quad p_B^* = 19.3 \text{ kPa}$$

$$X_A = \frac{\frac{72}{78}}{\frac{72}{78} + \frac{28}{112.5}} = 0.788$$

$$X_B = 1 - X_A = 1 - 0.788 = 0.212$$

根据 Raoult 定律，易得  $p_A = 101.3 \times 0.788 = 79.82 \text{ kPa}$  ；

$$p_B = 19.3 \times 0.212 = 4.09 \text{ kPa}$$

$$p = p_A + p_B = 79.82 + 4.09 = 83.91 \text{ kPa} ;$$

$$y_A = \frac{p_A}{p} = \frac{79.82}{83.9} = 0.951$$

$$y_B = 1 - y_A = 1 - 0.951 = 0.049 ;$$

$$y_A / y_B = 0.951 / 0.049 = 19.5 \quad \text{或} \quad y_A / y_B = p_A / p_B = 79.82 / 4.09 = 19.5$$

12、60℃时甲醇和乙醇可形成理想液态混合物，甲醇、乙醇的饱和蒸汽压分别为 83.4kPa、47.0kPa，

若混合物的组成质量百分比各 50%，求 60℃时此混合物的平衡蒸气组成之比。(平衡蒸气组成以摩尔分数表示)

解：由题意可设甲醇为 A 物质，乙醇为 B 物质， $M_A=32$ ， $M_B=46$   $p_A^* = 83.4 \text{ kPa}$

$$p_B^* = 47.0 \text{ kPa}$$

$$X_A = \frac{\frac{50}{32}}{\frac{50}{32} + \frac{50}{46}} = 0.5898$$

$$X_B = 1 - X_A = 1 - 0.5898 = 0.4102$$

根据 Raoult 定律，易得  $p_A = 83.4 \times 0.5898 = 49.19 \text{ kPa}$  ；

$$p_B = 47.0 \times 0.4102 = 19.28 \text{ kPa}$$

$$p = p_A + p_B = 49.19 + 19.28 = 68.47 \text{ kPa} ;$$

$$y_A = \frac{p_A}{p} = \frac{49.49}{68.47} = 0.718 \quad y_B = 1 - y_A = 1 - 0.718 = 0.282$$

$$y_A / y_B = 0.718 / 0.282 = 2.546 \quad \text{或} \quad y_B / y_A = 0.282 / 0.718 = 0.393$$

13、在 80℃ 时苯、氯苯的蒸汽压分别为 101.3kPa、19.3kPa，苯在并流沸腾一氯化时，氯化液的质量分数组成是苯 80%，氯苯 20%（沸腾温度 80℃），按 Raoult 定律计算此混合物的平衡蒸气组成。

解：由题意可设苯为 A 物质，氯苯为 B 物质， $M_A = 78$ ， $M_B = 112.5$

$$p_A^* = 101.3 \text{ kPa} \quad p_B^* = 19.3 \text{ kPa}$$

$$X_A = \frac{\frac{80}{78}}{\frac{80}{78} + \frac{20}{112.5}} = 0.852$$

$$X_B = 1 - X_A = 1 - 0.852 = 0.148$$

根据 Raoult 定律，易得  $p_A = 101.3 \times 0.852 = 86.31 \text{ kPa}$ ；

$$p_B = 19.3 \times 0.148 = 2.86 \text{ kPa}$$

$$p = p_A + p_B = 86.31 + 2.86 = 89.17 \text{ kPa}；$$

$$y_A = \frac{p_A}{p} = \frac{86.31}{89.17} = 0.968$$

$$y_B = 1 - y_A = 1 - 0.968 = 0.032$$

14、用浓硫酸对苯胺进行溶剂烘培磺化时，设苯胺的量为 1000mol，反应物中含 910mol 对氨基苯磺酸，

25mol 苯胺，另外还有一定数量的焦油物等副产物。试求苯胺的转化率、生成对氨基苯磺酸的选择性和理论收率。

解：苯胺的转化率  $X = \frac{1000 - 25}{1000} \times 100\% = 97.50\%$ ；

生成对氨基苯磺酸的选择性和理论效率： $S = \frac{910 \times \frac{1}{1}}{1000 - 25} \times 100\% = 93.33\%$

$$Y = \frac{910 \times \frac{1}{1000}}{1000} \times 100\% = 91\% \quad \text{或} \quad Y = S \cdot X = 97.50\% \times 93.33\% = 91\%$$

15、在苯的一氯化制氯苯时，为了减少二氯苯的生成量，每 100mol 苯用 40mol 氯气，反应产物中含 38mol 氯苯，

1mol 二氯苯，还有 61mol 未反应的苯，经分离后可回收 60mol 苯，损失 1mol 苯，试求苯的单程转化率、总转化率及生成氯苯的选择性。

解：苯的单程转化率  $X_{\text{单}} = \frac{100 - 61}{100} \times 100\% = 39.00\%$ ；

苯的总转化率  $X_{\text{总}} = \frac{100 - 61}{100 - 60} \times 100\% = 97.5\%$

生成氯苯的选择性  $S = \frac{38 \times \frac{1}{1000}}{100 - 61} \times 100\% = 97.44\%$

16、200mol 苯胺在用浓硫酸进行溶剂烘培磺化时，反应物中含 178mol 对氨基苯磺酸，2mol 苯胺，

另外还有一定数量的焦油物等副产物。试求苯胺的转化率、生成对氨基苯磺酸的选择性和理论收率。

解：苯胺的转化率  $X = \frac{200 - 2}{200} \times 100\% = 99.00\%$ ；

生成对氨基苯磺酸的选择性和理论效率： $S = \frac{178 \times \frac{1}{1000}}{200 - 2} \times 100\% = 89.90\%$

$Y = \frac{178 \times \frac{1}{1000}}{200} \times 100\% = 89\% \quad \text{或} \quad Y = S \cdot X = 99.00\% \times 89.9\% = 89\%$

17、在苯的一氯化制氯苯时，如果每 200mol 苯用 80mol 氯气，反应产物中含 76mol 氯苯，2mol 二氯苯，

还有 122mol 未反应的苯，经分离后可回收 120mol 苯，损失 2mol 苯，试求苯的单程转化率、

总转化率、生成氯苯的选择性及生成氯苯的总收率。

解：苯的单程转化率  $X_{\text{单}} = \frac{200 - 122}{200} \times 100\% = 39.00\%$ ；



$$\text{苯的总转化率 } X_{\text{总}} = \frac{200-122}{200-120} \times 100\% = 97.5\%$$

$$\text{生成氯苯的选择性 } S = \frac{76 \times \frac{1}{1}}{200-122} \times 100\% = 97.44\% ;$$

$$\text{生成氯苯的总收率 } Y_{\text{总}} = 97.50 \times 97.44\% = 95.00\%$$

$$\text{或 } Y_{\text{总}} = \frac{38 \times \frac{1}{1}}{100-60} \times 100\% = 95.00\%$$

18、在实际生产中,600kg 对硝基甲苯(分子量为 137)用 20%的发烟硫酸 1600kg 在 100~125℃进行

一磺化制 2-甲基-5-硝基苯磺酸,试计算其废酸的  $\pi$  值和  $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4) / [\omega(\text{H}_2\text{SO}_4) + \omega(\text{H}_2\text{O})]$ 。

解: 对硝基甲苯的量 =  $600 / 137 = 4.38\text{kmol}$       1600kg20%发烟硫酸含  $\text{H}_2\text{SO}_4 = 1600 \times 104.5\% = 1672\text{kg}$

$$\text{一磺化消耗 } \text{H}_2\text{SO}_4 = 4.38 \times 98 = 429.24\text{kg} \quad \pi = \frac{(1672 - 429.2) \times \frac{80}{98}}{1600 - 429.2 \times \frac{80}{98}} \times 100\% = 81.18$$

$$\text{即 } \omega(\text{H}_2\text{SO}_4) / [\omega(\text{H}_2\text{SO}_4) + \omega(\text{H}_2\text{O})] = 99.44\%$$

19、欲配置 2000kg 质量分数为 100%的  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , 要用多少千克质量分数为 98%的硫酸和多少千克质量分数为 20%的发烟硫酸?

解: 20%发烟硫酸换算成  $\text{H}_2\text{SO}_4$  的百分含量为:  $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4) = 100\% + 0.225 \omega(\text{SO}_3)$   
 $= 100\% + 0.225 \times 0.2 = 104.5\%$

设用 98%的硫酸 Xkg, 则发烟硫酸为  $(2000 - X)\text{kg}$        $98\%X + 104.5\% \times (2000 - X) = 2000 \times 100\%$

解得  $X = 1384.6\text{kg}$        $2000 - X = 615.4\text{kg}$  即要用 1384.6kg98%的硫酸和 615.4kg 质量分数为 20%的发烟硫酸。

20、用 1200kg 质量分数为 98%的硫酸和 800kg 的质量分数为 20%的发烟硫酸,

---

试计算所配硫酸的质量百分比浓度？（以 $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4)$ 表示）

解：20%发烟硫酸换算成 $\text{H}_2\text{SO}_4$ 的百分含量为： $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4)' = 100\% + 0.225 \omega(\text{SO}_3)$   
 $= 100\% + 0.225 \times 0.2 = 104.5\%$

所配硫酸的质量分数为  $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4) = \frac{1200 \times 98\% + 800 \times 104.5\%}{1200 + 800} \times 100\% = 100.6\%$