

本节介绍三种刻划混合物组成的方法。考虑一个均一的混合物体系，记 m_i 、 n_i 分别是组份 i 在体系中的质量和物质的量，由可定义以下三种强度性质：

质量分数 (mass fraction): $w_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m_i}{\sum_j m_j}$

摩尔分数 (mole fraction): $x_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{n_i}{\sum_j n_j}$

浓度 (concentration): $c_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{n_i}{V}$

一般地，完整确定体系的组成需要所有组份的质量或物质的量，记为 $\{m_i\} = \{m_1, m_2, \dots\}$ 和 $\{n_i\} = \{n_1, n_2, \dots\}$ 。

如果采用 $\{w_i\}$ 或 $\{x_i\}$ 来表示组成，虽然利用恒等关系

$$\sum_i x_i = \sum_i w_i = 1$$

似乎可比使用 $\{n_i\}$ 或 $\{m_i\}$ 少用一个变量来确定体系的组成，但计算 x_i 或 w_i 所需要的分母 $\sum_i n_i$ 和 $\sum_i m_i$ 本身就要求所有 $\{n_i\}$ 和 $\{m_i\}$ ，因此独立、完整地确定混合物体系组成的变量个数是一定的。

浓度定义中的 V 是混合物体系的体积。它本身又依赖体系的状态，由该体系的状态方程来主导其变化规律。因此浓度也是依赖体系状态的，不是独立反映体系组成的量，因此在热力学理论叙述中不常采用。但是对于远离临界点的凝聚态，体积随温度、压强的变化一般不大，所以在实验上使用广泛。

若记组份 i 的摩尔质量 (molar mass)* 为

$$M_{w,i} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{n_i}{m_i}$$

则易知 x_i 与 w_i 之间有如下关系

$$w_i = x_i \overline{M_w}$$

其中

$$\overline{M_w} \equiv \frac{\sum_j n_j M_{w,j}}{\sum_j n_j} = \frac{\sum_j m_j}{\sum_j n_j}$$

是混合物的平均摩尔质量。

在上述讨论中，我们并不明确体系所含组份种类的个数。这是考虑到开放体系不仅各组份的量可能会变化，就连组份种类数量也可能会变化。

*即平时说的“分子量”，但我们考虑的组份的微观最小单元未必是分子。