



دانشگاه بام نور
په

اصول محاسبات شیمی صنعتی

(رشته شیمی)

دکتر عبدالرضا مقدسی

«عضو هیأت علمی دانشگاه اراک»

امروزه کتاب‌خوانی و علم‌آموزی، نه تنها یک وظیفه‌ی ملی، که یک واجب دینی است.

مقام معظم رهبری

در عصر حاضر یکی از شاخصه‌های ارزیابی رشد، توسعه و پیشرفت فرهنگی هر کشوری میزان تولید کتاب، مطالعه و کتاب‌خوانی مردم آن مرز و بوم است. ایران اسلامی نیز از دیرباز تاکنون با داشتن تمدنی چندهزارساله و مراکز متعدد علمی، فرهنگی، کتابخانه‌های معتبر، علما و دانشمندان بزرگ با آثار ارزشمند تاریخی، سرآمد دولت‌ها و ملت‌های دیگر بوده و در عرصه‌ی فرهنگ و تمدن جهانی به‌سان خورشیدی تابناک همچنان می‌درخشد و با فرزندان نیک‌نهاد خویش هنرنمایی می‌کند. چه کسی است که در دنیا با دانشمندان فرزانه و نام‌آور ایرانی همچون ابوعلی سینا، ابوریحان بیرونی، فارابی، خوارزمی و ... همچنین شاعران برجسته‌ای نظیر فردوسی، سعدی، مولوی، حافظ و ... آشنا نباشد و در مقابل عظمت آنها سر تعظیم فرود نیاورد. تمامی این افتخارات ارزشمند، برگرفته از میزان عشق و علاقه فراوان ملت ما به فراگیری علم و دانش از طریق خواندن و مطالعه منابع و کتاب‌های گوناگون است. به شکرانه‌ی الهی، تاریخ و گذشته ما، همیشه درخشان و پر بار است. ولی اکنون در این زمینه در چه جایگاهی قرار داریم؟ آمار و ارقام ارائه‌شده از سوی مجامع و سازمان‌های فرهنگی در مورد سرانه‌ی مطالعه‌ی هر ایرانی، برایمان چندان امیدوارکننده نمی‌باشد و رهبر معظم انقلاب اسلامی نیز از این وضعیت بارها اظهار گله و ناخشنودی نموده‌اند.

کتاب، دروازه‌ای به سوی گستره‌ی دانش و معرفت است و کتاب خوب، یکی از بهترین ابزارهای کمال بشری است. همه‌ی دستاوردهای بشر در سراسر عمر جهان، تا آنجا که قابل کتابت بوده است، در میان دست‌نوشته‌هایی است که انسان‌ها پدید آورده و می‌آورند. در این مجموعه‌ی بی‌نظیر، تعالیم الهی، درس‌های پیامبران به بشر، و همچنین علوم مختلفی است که سعادت بشر بدون آگاهی از آنها امکان‌پذیر نیست. کسی که با دنیای زیبا و زندگی‌بخش کتاب ارتباط ندارد بی‌شک از مهم‌ترین دستاورد انسانی و نیز از بیشترین معارف الهی و بشری محروم است. با این دیدگاه، به‌روشنی می‌توان ارزش و مفهوم رمزی عمیق در این حقیقت تاریخی را دریافت که اولین خطاب خداوند متعال به پیامبر گرامی اسلام (ص) این است که «بخوان!» و در اولین

سوره‌ای که بر آن فرستاده‌ی عظیم‌الشان خداوند، فرود آمده، نام «قلم» به تجلیل یاد شده‌است: «اقْرَأْ وَ رَبُّكَ الْأَكْرَمُ. الَّذِي عَلَّمَ بِالْقَلَمِ» در اهمیت عنصر کتاب برای تکامل جامعه‌ی انسانی، همین بس که تمامی ادیان آسمانی و رجال بزرگ تاریخ بشری، از طریق کتاب جاودانه مانده‌اند.

دانشگاه پیام‌نور با گستره‌ی جغرافیایی ایران‌شمول خود با هدف آموزش برای همه، همه‌جا و همه‌وقت، به‌عنوان دانشگاهی کتاب‌محور در نظام آموزش عالی کشورمان، افتخار دارد جایگاه اندیشه‌سازی و خردورزی بخش عظیمی از جوانان جویای علم این مرز و بوم باشد. تلاش فراوانی در ایام طولانی فعالیت این دانشگاه انجام پذیرفته تا با بهره‌گیری از تجربه‌های گرانقدر استادان و صاحب‌نظران برجسته کشورمان، کتاب‌ها و منابع آموزشی درسی شاخص و خودآموز تولید شود. در آینده هم، این مهم با هدف ارتقای سطح علمی، روزآمدی و توجه بیشتر به نیازهای مخاطبان دانشگاه پیام‌نور با جدیت ادامه خواهد داشت. به‌طور قطع استفاده از نظرات استادان، صاحب‌نظران و دانشجویان محترم، ما را در انجام این وظیفه‌ی مهم و خطیر یاری‌رسان خواهد بود. پیشاپیش از تمامی عزیزانی که با نقد، تصحیح و پیشنهادهای خود ما را در انجام این وظیفه‌ی خطیر یاری می‌رسانند، سپاسگزاری می‌نماییم. لازم است از تمامی اندیشمندانی که تاکنون دانشگاه پیام‌نور را منزلگاه اندیشه‌سازی خود دانسته و ما را در تولید کتاب و محتوای آموزشی درسی یاری نموده‌اند، صمیمانه قدردانی گردد. موفقیت و بهروزی تمامی دانشجویان و دانش‌پژوهان عزیز آرزوی همیشگی ما است.

دانشگاه پیام‌نور

فهرست مطالب

پیشگفتار ویرایش اول.....	یازده
پیشگفتار ویرایش دوم.....	پانزده
فصل اول. اصول اولیه محاسبات شیمی صنعتی.....	۱
هدف کلی.....	۱
هدف‌های یادگیری.....	۱
مقدمه.....	۱
۱-۱-۱-۱ آحاد و ابعاد.....	۲
۲-۱-۲ تبدیل آحاد.....	۴
۳-۱-۳ انواع سیستم آحاد.....	۶
۴-۱-۴ نیرو و وزن.....	۱۱
۱-۴-۱ مقدار C در سیستم متریک یا CGS.....	۱۲
۲-۴-۱ مقدار C در سیستم SI.....	۱۲
۳-۴-۱ مقدار C در سیستم انگلیسی مطلق (FPS).....	۱۲
۴-۴-۱ مقدار C در سیستم انگلیسی ثقلی.....	۱۳
۵-۴-۱ مقدار C در سیستم مهندسی آمریکایی.....	۱۳
۵-۱-۵ مول.....	۱۷
۶-۱-۶ جرم ویژه و حجم ویژه.....	۱۹
۷-۱-۷ چگالی یا گرانش ویژه.....	۲۱
۸-۱-۸ جزء مولی، وزنی و حجمی.....	۲۴
۹-۱-۹ تجزیه.....	۲۵
۱-۹-۱ تجزیه خشک یا ارسات.....	۲۵

۲۵	۱-۹-۲ تجزیه مرطوب یا کامل
۲۶	۱-۱۰ غلظت
۳۰	۱-۱۱ انتخاب مبنای
۳۲	۱-۱۲ دما
۳۸	۱-۱۳ فشار
۴۹	خلاصه فصل اول
۴۹	خودآزمایی چهارگزینه‌ای فصل اول
۵۱	خودآزمایی تشریحی فصل اول

فصل دوم. مبانی موازنه مواد..... ۵۵

هدف کلی..... ۵۵

هدف‌های یادگیری..... ۵۵

مقدمه..... ۵۵

۱-۲ اهمیت موازنه مواد..... ۵۶

۲-۲ الگوریتم بررسی حل مسائل موازنه مواد در واحدهای بدون واکنش..... ۶۵

۳-۲ موازنه مواد همراه واکنش شیمیایی..... ۸۲

۳-۲-۱ معادلات شیمیایی و استوکیومتری..... ۸۳

۳-۲-۱-۱ تعاریف مربوط به واکنش‌های شیمیایی..... ۸۷

۳-۲-۲ موازنه مواد پیرامون فرایندهای احتراق..... ۹۴

۴-۲ موازنه مواد پیرامون فرایندهای چند واحدی..... ۱۰۳

۵-۲ موازنه مواد همراه با جریان برگشتی و فرعی..... ۱۰۸

۵-۲-۱ جریان برگشتی..... ۱۰۸

۵-۲-۱-۱ بازیابی مواد شرکت‌کننده در واکنش..... ۱۰۸

۵-۲-۱-۲ رقیق کردن یک جریان..... ۱۰۸

۵-۲-۱-۳ کنترل بعضی از پارامترهای فرایند..... ۱۰۹

۵-۲-۲ جریان فرعی..... ۱۱۹

۵-۲-۱-۲ جریان کنارگذر..... ۱۱۹

۵-۲-۲-۲ جریان زدایش..... ۱۲۳

خلاصه فصل دوم..... ۱۲۷

خودآزمایی چهارگزینه‌ای فصل دوم..... ۱۲۷

خودآزمایی تشریحی فصل دوم..... ۱۲۹

فصل سوم. سیستم‌های تک فازی..... ۱۴۳

هدف کلی..... ۱۴۳

هدف‌های یادگیری..... ۱۴۳

مقدمه..... ۱۴۳

۱۴۴	۱-۳ روش‌های تعیین خواص فیزیکی مواد
۱۴۴	۲-۳ قوانین و روابط گازهای ایدئال
۱۴۵	۱-۲-۳ قانون بویل
۱۴۶	۳-۲-۳ قانون آمونتون
۱۴۷	۴-۲-۳ قانون آووگادرو
۱۴۷	۵-۲-۳ قانون کلی گازهای ایدئال
۱۵۰	۶-۲-۳ محاسبه حجم، جرم ویژه و چگالی گازهای ایدئال
۱۵۴	۷-۲-۳ مخلوط گازهای ایدئال
۱۵۴	۱-۷-۲-۳ قانون دالتون در مورد فشارهای جزئی (۱۸۰۱ م.)
۱۵۵	۲-۷-۲-۳ قانون آماگات در مورد حجم‌های جزئی
۱۶۰	۳-۳ روابط گازهای حقیقی
۱۶۱	۱-۳-۳ معادلات حالت
۱۶۱	۱-۱-۳-۳ معادله واندروالس
۱۶۶	۲-۱-۳-۳ معادله حالت سوو-ردلیش-ونگ (SRK)
۱۷۰	۳-۱-۳-۳ معادله حالت ویریال
۱۷۰	۲-۳-۳ ضریب تراکم‌پذیری Z
۱۷۱	۱-۲-۳-۳ تخمین ضریب تراکم‌پذیری Z
۱۷۱	۲-۲-۳-۳ نقطه بحرانی
۱۷۳	۳-۲-۳-۳ قانون حالت‌های متناظر
۱۷۶	۳-۳-۳ مخلوط گازهای حقیقی
۱۷۷	۱-۳-۳-۳ روش کی
۱۷۸	۲-۳-۳-۳ روش محاسبه ضریب تراکم‌پذیری متوسط مخلوط گاز (Z_m)
۱۸۳	۳-۳-۳-۳ روش استفاده از معادلات حالت
۱۸۳	۴-۳-۳-۳ روش استفاده از متوسط ثابت‌ها در معادلات حالت
۱۸۶	۴-۳ موازنه مواد گازهای ایدئال
۱۹۱	خلاصه فصل سوم
۱۹۱	خودآزمایی چهارگزینه‌ای فصل سوم
۱۹۳	خودآزمایی تشریحی فصل سوم
۱۹۷	فصل چهارم. سیستم‌های چند فاز
۱۹۷	هدف کلی
۱۹۷	هدف‌های یادگیری
۱۹۸	مقدمه
۱۹۸	۱-۴ نمودار فاز فشار-بخار (P-T)
۲۰۳	۲-۴ تخمین فشار بخار
۲۰۳	۱-۲-۴ معادلات تجربی جهت تخمین فشار بخار

۲۰۴	۱-۲-۴ معادله کلازیوس - کلاپیرون
۲۰۶	۲-۱-۴ معادله آنتوان
۲۰۷	۲-۲-۴ استفاده از جدول ها
۲۰۸	۳-۲-۴ استفاده از نمودار کاکس جهت تخمین فشار بخار
۲۰۹	۳-۴ سیستم های گاز- مایع با یک جزء میعان پذیر
۲۱۰	۱-۳-۴ اشباع
۲۱۲	۲-۳-۴ اشباع جزئی
۲۱۲	۱-۲-۳-۴ اشباع نسبی (رطوبت نسبی)
۲۱۳	۲-۲-۳-۴ اشباع مولی
۲۱۳	۳-۲-۳-۴ اشباع مطلق (رطوبت مطلق)
۲۱۶	۴-۴ فرایند تبخیر
۲۱۷	۵-۴ موازنه مواد شامل میعان و تبخیر
۲۲۲	۶-۴ تعادل بخار- مایع در سیستم های دوتایی
۲۲۵	۷-۴ قانون فازها
۲۲۶	خلاصه فصل چهارم
۲۲۷	خودآزمایی چهارگزینه ای فصل چهارم
۲۲۹	خودآزمایی تشریحی فصل چهارم
۲۳۳	فصل پنجم. مبانی موازنه انرژی
۲۳۳	هدف کلی
۲۳۳	هدف های یادگیری
۲۳۳	مقدمه
۲۳۵	۱-۵ تعاریف و مفاهیم پیرامون انرژی
۲۳۵	۱-۱-۵ انواع انرژی
۲۳۶	۱-۱-۵ گرما یا حرارت
۲۴۰	۳-۱-۵ انرژی جنبشی
۲۴۱	۴-۱-۵ انرژی پتانسیل
۲۴۴	۶-۱-۵ آنتالپی
۲۴۵	۲-۱-۵ توابع حالت یا نقطه ای
۲۴۶	۲-۵ واحدهای انرژی
۲۴۸	۱-۳-۵ محاسبه تغییرات آنتالپی بدون تغییر فاز
۲۴۸	۲-۳-۵ محاسبه تغییرات آنتالپی با استفاده از ظرفیت حرارتی
۲۵۴	۳-۳-۵ محاسبه تغییرات آنتالپی با استفاده از جداول
۲۵۷	۴-۳-۵ محاسبه تغییرات آنتالپی با استفاده از نمودار
۲۵۹	۵-۳-۵ محاسبه تغییرات آنتالپی با استفاده از بانک های اطلاعاتی رایانه ای
۲۶۳	۴-۵ موازنه عمومی انرژی

۲۶۴	۱-۴-۵ موازنه انرژی بدون واکنش شیمیایی
۲۶۴	۱-۴-۵ موازنه انرژی پیرامون سیستم‌های بسته
۲۶۸	۲-۴-۵ موازنه انرژی پیرامون سیستم‌های باز
۲۶۹	۳-۴-۵ تجمع انرژی در داخل سیستم
۲۷۳	۱-۴-۵ گرمای واکنش
۲۷۵	۲-۴-۵ روش‌های تعیین گرمای واکنش
۲۸۰	۳-۴-۵ گرمای استاندارد احتراق
۲۸۲	۵-۵ سوخت‌ها و ارزش حرارتی آن‌ها
۲۸۴	خودآزمایی چهارگزینه‌ای فصل پنجم
۲۸۶	خودآزمایی تشریحی فصل پنجم
۲۹۳	پیوست‌ها
۳۱۳	پاسخنامه خودآزمایی‌های چهارگزینه‌ای
۳۱۵	منابع

پیشگفتار ویرایش اول

امروزه به لحاظ مسائل و مشکلات اقتصادی و حفظ محیط زیست و منابع طبیعی، بیش از هر زمان دیگر به موضوع مصرف بهینه مواد و انرژی توجه شده است؛ بنابراین طراحی، ساخت و کنترل فرایندهای مهندسی باید به دقت انجام شود و بهترین فناوری و شرایط عملیاتی به کار گرفته شود. در تصمیم گیری، روش ها و متدهای گوناگونی وجود دارد. برای انتخاب یک مسیر مناسب و مورد قبول، لازم است برخی از اصول اساسی و بنیادی در خصوص مسائل مربوط به فرایندهای مهندسی را فراگرفت.

می دانید که طراحی، شبیه سازی، بررسی و ارزیابی اقتصادی و نیز کنترل فرایندهای صنایع شیمیایی بر اصول و قوانین موازنه مواد و انرژی استوار است. در حال حاضر می توان از نرم افزارهای معروف در مهندسی شیمی مانند:

SSI/100, PRO II, DESIGN II, PROCESS, HYSYS, PIPE PHASE, EXTHRAN, ASPEN⁺....

نام برد، که اکثر معادلات و روابط موجود در آنها براساس موازنه مواد و انرژی استوار است.

از این رو کتاب حاضر به بررسی اصول و مبانی محاسبات در مهندسی شیمی به خصوص نحوه برقرارسازی موازنه جرم و انرژی پرداخته و کاربرد آنها را در موارد بسیار گوناگونی نشان می دهد.

این کتاب حاصل چندین سال مطالعه و در کنار آن تدریس است که برای تهیه و تدوین آن از همه این تجربیات استفاده شده است. منابع مهمی که در ترکیب آن به کار آمده است، عبارت اند از:

1- Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering. David M. Himmelblau.

که این کتاب توسط استاد محترم جناب آقای دکتر مرتضی سهرابی تحت عنوان «اصول بنیانی و مبانی محاسبات در مهندسی شیمی» ترجمه شده است.

2- Elementary Principles of Chemical Process. Richard M. Felder Ronald W. Rousseau.

که ترجمه آن تحت عنوان «اصول مقدماتی فرایندهای شیمیایی» توسط آقایان عبدالعلی فقیه اردوباری، محمدباقر پورسعید و داریوش باستانی انجام شده است.

3- Chemical Process Analysis: Mass and Energy Balances. William L. Luyben, Leonard A. Wenzed.

4- Chemical Engineering, Coulson & Richardson's Chemical Engineering. R.K. Sinnoff, Vol. 6, 2nd Ed.

و تعدادی کتب دیگر که در فهرست منابع آمده است.

قابل ذکر است که مطالب این کتاب با عنوان درس «اصول محاسبات شیمی صنعتی» برای دانشجویان رشته شیمی کاربردی در ۳ واحد و برای دانشجویان رشته مهندسی شیمی تحت عنوان «مبانی و اصول محاسبات در مهندسی شیمی» در ۴ واحد درسی ارائه می شود.

از آنجایی که این کتاب به درخواست دانشگاه پیام نور جهت استفاده دانشجویان رشته شیمی کاربردی است، سعی شده است که مطالب حتی الامکان آسان و روان و به صورت خودآموز باشد.

این کتاب شامل پنج فصل به شرح ذیل است:

فصل اول تعاریف و مفاهیم آحاد، ضرایب تبدیل و...؛ و نحوه بررسی واکنش ها را مورد بررسی قرار می دهد.

فصل دوم قوانین و مسائل مربوط به موازنه جرم و نیز روش به دست آوردن معادلات و نحوه حل آنها پرداخته است.

فصل سوم سیستم های تک فاز را مورد بحث و بررسی قرار داده و قوانین گازهای ایدئال و حقیقی را بیان می کند.

فصل چهارم سیستم های چند فاز را مورد تجزیه و تحلیل قرار داده و خواص فیزیکی و قوانین مربوط به رفتار سیستم های دوفازی نظیر فشار- بخار و تبخیر و میعان و... را شرح می دهد.

فصل پنجم اصول و قوانین و نحوه فرمول‌بندی موازنه انرژی موردبحث و

بررسی قرار می‌گیرد.

ضمناً در تمام فصول برای روشن‌شدن مباحث تئوری، سعی شده از مثال‌های بسیار ساده و قابل فهمی استفاده شود.

علی‌رغم اینکه در تهیه و تدوین این کتاب زحمات و دقت بسیاری شده‌است، بااین‌وجود ممکن است نواقص و یا کم و کاستی در آن به چشم بخورد، لذا از شما خواننده محترم، ضمن پوزش، تقاضا می‌شود، نظرات و پیشنهادهای خود را برای مؤلف کتاب ارسال نمایید تا در چاپ بعدی مدنظر قرار گیرد.

لازم می‌داند از جناب آقای دکتر پایه قدر عضو محترم هیئت علمی دانشگاه پیام نور که در تهیه و تدوین کتاب این‌جانب را تشویق و راهنمایی کردند و نیز ویراستاری خوب این اثر را به عهده داشتند، تشکر و قدردانی کند. از آقایان مهندس محسن حسینی و مهندس پیمان عمرانی که در قالب‌بندی کتاب و تصحیح متن و نیز از مهندس سجاد نادری که در طرح روی جلد کمک بسیار خوبی کرده‌اند و از همسر مهربان رحیمی که در تهیه این اثر مرا تشویق و همراهی کرده‌اند، تشکر و قدردانی می‌شود. همچنین لازم است که از رئیس محترم دانشکده جناب آقای دکتر پرویز پرورش و مدیر محترم گروه آموزشی شیمی جناب آقای دکتر عبدالمحمد عطاران و آقای دکتر اکبری و مدیر محترم انتشارات و سرکار خانم خضرای کارشناس محترم گروه شیمی و دیگر عزیزانی که در چاپ و انتشار این کتاب زحمات فراوانی کرده‌اند سپاسگزاری شود.

والسلام

عبدالرضا مقدسی

گروه مهندسی شیمی

دانشکده فنی و مهندسی

دانشگاه اراک

سال ۱۳۸۵

پیشگفتار ویرایش دوم

وظیفه خود می‌دانم که از ابراز رضایت اساتید محترم و دانشجویان گرامی که باکم و کیف کتاب آشنا هستند، نیز تشکر کنم. برای تهیه و تدوین این کتاب سعی وافر شده تا مطالب، با زبانی بسیار ساده، روان و قابل درک و فهم بیان شود. در ویرایش جدید کتاب، از همان سبک ویرایش قبلی پیروی شد، ضمن اینکه نظرات و پیشنهادهای مفید و لازم مدیرکل محترم دفتر تدوین و تولید کتب و محتوای آموزشی دانشگاه پیام نور، همکاران محترم و نیز تجربیات چندین ساله این حقیر باعث شد، تا موارد زیر در ویرایش جدید گنجانده شود:

(الف) اضافه کردن هدف کلی و اهداف فراگیری در ابتدای هر فصل،

(ب) اضافه کردن خلاصه درس و خودآزمایی چهارگزینه‌ای در پایان هر فصل،

(ج) افزایش تعداد مثال‌ها در هر فصل،

(د) اضافه کردن تعدادی تمرین مناسب، جهت فعالیت بیشتر دانشجویان،

(ه) گنجانیدن جدول‌های موردنیاز در متن بعضی فصل‌ها از جمله جدول بخارآب

در سیستم SI،

(و) ویرایش و اصلاح برخی جملات و غلط‌های املایی.

علی‌رغم اینکه در ویرایش جدید، دقت و سعی بسیاری شده، چنانچه اشکالاتی در آن به چشم می‌خورد، از شما خواننده محترم، تقاضا می‌شود، نظرات و پیشنهادهای خود را برای مؤلف کتاب ارسال نمایید¹ تا در چاپ بعدی لحاظ شود.

1. a-moghadassi@araku.ac.ir, a.moghadassi@gmail.com

تشکر و قدردانی

- از جناب آقای دکتر پایه قدر هیئت علمی محترم دانشگاه پیام نور که الحق زحمات فراوانی در ویرایش قبل و جدید، که در بالا بردن کیفیت کتاب تأثیر به سزایی داشت، و نیز پیگیری جدی ایشان در جهت تهیه ویرایش جدید، تشکر و قدردانی شود.
- از داور محترم که جهت اصلاح، کتاب را با دقت و ظرافت مطالعه و بررسی کردند، تشکر می شود.
- از اساتید و همکاران محترم که با نظرات و پیشنهادهای خود در بالا بردن سطح کیفی و کمی کتاب کمک و راهنمایی کرده اند، تشکر به عمل می آید.
- از همسر، مهری رحیمی و دخترم سارا، که علی رغم مشغله و گرفتاری های زیاد، در مراحل تهیه این اثر مرا تشویق، همراهی و در ویرایش ادبی کمک کرده اند، تشکر و قدردانی می شود.
- از رئیس محترم دانشکده علوم پایه جناب آقای دکتر علی عبادیان، مدیر محترم گروه آموزشی شیمی جناب آقای دکتر عبدالمحمد عطاران، مدیر محترم سابق تدوین سرکار خانم دکتر خدیجه دیده بان، مدیرکل محترم دفتر تدوین جناب آقای دکتر مهران فرج الهی، مسئول محترم دفتر تدوین سرکار خانم فاطمه بنی جمالی، کارشناسان محترم گروه شیمی سرکار خانم اکرم خواجه پورخوئی و دیگر عزیزانی که در چاپ و انتشار این کتاب زحمات فراوانی کرده اند، سپاسگزاری می شود.

والسلام

عبدالرضا مقدسی

گروه مهندسی شیمی

دانشکده فنی و مهندسی

دانشگاه اراک

سال ۱۳۹۸

فصل اول

اصول اولیه محاسبات شیمی صنعتی

هدف کلی

در این فصل، دانشجو باید با اصول اولیه محاسبات شیمی صنعتی به منظور کمک به برقراری موازنه مواد و انرژی پیرامون فرایندهای صنایع شیمیایی آشنا شود.

هدف‌های یادگیری

- دانشجویان عزیز، باید بعد از مطالعه این فصل بتوانند:
۱. آحاد و ابعاد را درک کنند، چهار عمل اصلی در مورد آن‌ها را به درستی انجام دهند.
 ۲. ضرایب تبدیل آحاد را به درستی تعیین کنند.
 ۳. مفهوم و تعریف مول و جزء مولی، جرم و جرم ویژه، وزن، حجم و حجم ویژه، چگالی و غلظت را به طور صحیح شرح دهند.
 ۴. انواع سیستم آحاد را شرح دهند.
 ۵. مبنا را به طور صحیح و مناسب انتخاب کنند.
 ۶. مفهوم دما و فشار و آحاد آن‌ها را به درستی شرح دهند.

مقدمه

این فصل با پاره‌ای از اطلاعات و معلومات و تعاریفی که قبلاً در درس‌های پایه شیمی و فیزیک به صورت پراکنده با خیلی از مفاهیم علمی آن‌ها برخورد داشته‌اید، آغاز می‌شود. ضروری است این مفاهیم اساسی و مهم بار دیگر با روشی دقیق‌تر و روشن‌تر

با زبان ساده و منسجم بیان شود. همچنین برای افزایش توان در تجزیه و تحلیل و حل مسائل فرایندهای مهندسی باید به تمرین‌های بیشتری پرداخت، زیرا که در فصل‌های بعدی، این مفاهیم به‌طور پیوسته وجود دارند و در حل مسائل به‌کار گرفته می‌شوند. هرچند هنگام خواندن مطالب درس فهم و درک اصولی که در این فصل‌ها بیان شده‌اند، شاید ساده و آسان به‌نظر آید ولیکن نحوه به‌کارگیری آن‌ها در حل مسائل گوناگون کاربردی مشکل است؛ بنابراین لازم است که مطالب را با اندیشه بیشتر فراگرفت و تمرین‌های بیشتری حل کرد (دیوید هیمبل بلاو، ۱۹۶۲: ۲) و (دیوید هیمبل بلاو، ۱۹۶۷: ۲).

۱-۱ آحاد و ابعاد

برای حل مسائل و معادلات مربوط به موازنه جرم و انرژی یک فرایند، کمیت‌های فیزیکی گوناگونی وجود دارند، که باید اندازه‌گیری و مشخص شوند. مبنای اندازه‌گیری و بیان این کمیت‌ها بُعد نامیده می‌شوند، مانند طول [L]، زمان [T]، جرم [M]، دما [Θ] و غیره. برای بیان اندازه این ابعاد از مقیاس‌هایی که آحاد نامیده می‌شوند، مانند متر برای طول، ساعت برای زمان، کیلوگرم برای جرم، سانتی‌گراد برای دما و غیره، استفاده می‌شود (دیوید هیمبل بلاو، ۱۹۶۷: ۷) و (دیوید هیمبل بلاو، ۱۹۹۶: ۷).

بنابراین هر کمیت اندازه‌گیری شده دارای مقدار عددی و واحد است. در اکثر محاسبات مهندسی، نوشتن مقدار و واحد مربوط به آن در یک معادله مفید و ضروری است و این عمل مانع از هرگونه اشتباه، در هر مرحله از محاسبات می‌شود.

همچنین هنگام جمع و تفریق، ضرب و یا تقسیم واحدها می‌توان همانند متغیرهای جبری، چهار عمل اصلی را در مورد آن‌ها به‌کار برد. مقادیر عددی دو کمیت تنها در صورتی قابل جمع و یا تفریق‌اند که دارای واحدهای یکسانی باشند یا به واحدهای یکسانی تبدیل شوند. به‌طورکلی استفاده از آحاد، در کنار محاسبات عددی و نیز یکسان‌بودن آحاد در یک معادله، خطا در محاسبات را کاهش می‌دهد. مثلاً در روابط زیر که واحدها یکسان هستند، عملیات جبری درست است.

$$3\text{cm} + 5\text{cm} = 8\text{cm}, \quad 7\text{kg} - 2\text{kg} = 5\text{kg}, \quad 5\text{N} + 4\text{N} = 9\text{N}$$

$$6\text{s} + 11\text{s} = 17\text{s}, \quad 6\text{ft} + 11\text{ft} = 17\text{ft}, \quad 4\text{atm} + 3\text{atm} = 7\text{atm}$$

و اما در روابط زیر که واحدها یکسان نیستند نمی‌توان عملیات جبری را به‌کار برد.

۳ اصول اولیه محاسبات شیمی صنعتی

$$4 \text{ hr} + 3 \text{ kg}, \quad 4 \text{ atm} + 3 \text{ m/s}^2, \quad 2 \text{ m} + 5 \text{ s}$$

از طرف دیگر مقادیر عددی و واحدهای متناظر با آنها همیشه می‌توانند با ضرب و یا تقسیم با یکدیگر ترکیب شوند، مانند:

$$2 \text{ m} \times 3 \text{ m} = 6 \text{ m}^2, \quad 5 \text{ m} \div 2 \text{ s} = 2/5 \frac{\text{m}}{\text{s}}, \quad 3 \text{ N} \times 4 \text{ m} = 12 \text{ N.m}$$

مثال ۱-۱. آحاد و ابعاد، مقادیر را با یکدیگر جمع یا تفریق کنید:

$$\text{الف)} \quad 2 \text{ ft} + 3 \text{ s} \quad \text{ب)} \quad 2 \text{ hr} + 30 \text{ min}$$

$$\text{ج)} \quad 3 \text{ kg} - 4 \text{ m} \quad \text{د)} \quad 7 \text{ kg} - 200 \text{ g}$$

جواب. الف) عبارت $2 \text{ ft} + 3 \text{ s}$ معنی‌دار نیست زیرا ابعاد دو جمله یکسان نیستند. ۲ فوت دارای بعد طول، درحالی‌که ۳ ثانیه دارای بعد زمان است.

ب) عبارت $2 \text{ hr} + 30 \text{ min}$ دارای ابعاد یکسانی هستند ولی واحدها متفاوت‌اند. پس قبل از اقدام به عمل جمع باید هر دو کمیت برحسب یک واحد بیان شود.

$$2 \text{ hr} + 30 \text{ min} = 2 \text{ hr} + 30 \text{ min} \left(\frac{1 \text{ hr}}{60 \text{ min}} \right) = 2 \text{ hr} + 0/5 \text{ hr} = 2/5 \text{ hr}$$

یا برحسب دقیقه،

$$2 \text{ hr} + 30 \text{ min} = 2 \text{ hr} \left(\frac{60 \text{ min}}{1 \text{ hr}} \right) + 30 \text{ min} = 120 \text{ min} + 30 \text{ min} = 150 \text{ min}$$

ج) در عبارت $3 \text{ kg} - 4 \text{ m}$ ابعاد یکسان نبوده، لذا قابل تفریق نیستند.

د) عبارت $7 \text{ kg} - 200 \text{ g}$ قابل تفریق‌اند.

$$7 \text{ kg} - 200 \text{ g} = 7 \text{ kg} - 200 \text{ g} \left(\frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} \right) = 7 \text{ kg} - 0/200 \text{ kg} = 6/800 \text{ kg}$$

یا برحسب گرم،

$$7 \text{ kg} - 200 \text{ g} = 7 \text{ kg} \left(\frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \right) - 200 \text{ g} = (7000 - 200) \text{ g} = 6800 \text{ g}$$

تمرین ۱-۱. آحاد و ابعاد، آیا می‌توان 3 m را بر 5 s تقسیم کرد؟

مثال ۱-۲. کاربرد ابعاد، آیا دو طرف رابطه $\frac{dx}{dt} = gt$ از نظر ابعاد یکسان است یا خیر؟ در صورتی که x مسافت، t زمان و g شتاب باشند.

جواب.

ابعاد سمت چپ رابطه $[LT^{-1}]$

ابعاد سمت راست رابطه $[LT^{-2}][T] = [LT^{-1}]$

با توجه به محاسبات فوق، معلوم می‌شود که ابعاد دو طرف رابطه بالا یکسان هستند.

مثال ۱-۳. بدون بعد بودن عدد معروف رینولدز $\left(\frac{\rho VD}{\mu}\right)$ در سیالات را نشان دهید؟

جواب.

$$\text{ابعاد عدد رینولدز} = [Re] = \left[\frac{\rho VD}{\mu}\right] = \frac{[\rho][V][D]}{[\mu]} = \frac{[ML^{-3}][LT^{-1}][L]}{[MT^{-1}L^{-1}]} = []$$

بنابر محاسبات فوق عدد رینولدز بدون بعد است.

۱-۲ تبدیل واحدها

کمیت اندازه‌گیری شده می‌تواند برحسب هر واحدی که دارای بعد مناسب باشد، بیان شود. مثلاً یک سرعت خاص می‌تواند برحسب cm/s ، kg/hr ، ft/s ، mile/hr و یا هر نسبت دیگری از واحد طول به زمان بیان کرد. درواقع مقدار عددی سرعت بستگی به واحد انتخاب شده دارد (دیوید هیمل بلاو، ۱۹۹۶: ۷).

نکته. هر کمیت اندازه‌گیری می‌تواند بر کمیت دیگر تقسیم یا ضرب شود. در صورتی آن عمل قابل قبول یا مفید است که دارای مفهوم فیزیکی یا یک نتیجه شناخته‌شده‌ای باشد.

بسیاری از مسائل با استفاده از نسبت‌های بین دو کمیت هم‌ارز قابل حل هستند. به‌عنوان مثال یک متر هم‌ارز یا معادل ۱۰۰ سانتی‌متر است یا به عبارت دیگر:

۵ اصول اولیه محاسبات شیمی صنعتی

$$1 \text{ m} = 100 \text{ cm} \Rightarrow \frac{1 \text{ m}}{100 \text{ cm}} = 1 \quad \text{یا} \quad \frac{100 \text{ cm}}{1 \text{ m}} = 1$$

نسبت‌های فوق به‌عنوان ضرایب تبدیل شناخته می‌شوند و برابر واحد هستند. لذا برای تبدیل واحدها می‌توان آن‌ها را در هر عبارت متناسبی ضرب کرد، بدون آنکه در مقدار کمیت داده‌شده تغییری حاصل شود.

توجه. «برای تبدیل یک کمیت برحسب یک واحد به واحد هم‌ارزش، آن را باید در ضریب تبدیل متناسب ضرب کرد».

$$1 \text{ kg} = 1000 \text{ g} \Rightarrow \begin{cases} \text{الف) } \frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} = 1 \\ \text{ب) } \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} = 1 \end{cases}$$

مثلاً برای تبدیل مقدار ۳۰ کیلوگرم به هم‌ارز آن برحسب گرم به‌صورت زیر عمل می‌شود:

حال از دو رابطه فوق کدام یک به‌عنوان ضریب تبدیل استفاده خواهد شد؟ هرچند، هر دو رابطه برابر واحد است، اما پرواضح است از ضریب تبدیل (ب) باید استفاده کرد تا واحد قدیمی حذف و به واحد جدید تبدیل شود.

$$? \text{ g} = 30 \text{ kg} = 30 \text{ kg} \times (1) = 30 \text{ kg} \left(\frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \right) = 30000 \text{ g}$$

مثال ۱-۴. تبدیل آحاد، جسمى با شتاب $2 \frac{\text{cm}}{\text{s}^2}$ در حال حرکت است. مقدار آن را برحسب کیلومتر بر مجذور ساعت تبدیل کنید.

جواب.

$$? \frac{\text{km}}{\text{hr}^2} = 2 \frac{\text{cm}}{\text{s}^2} = 2 \frac{\text{cm}}{\text{s}^2} \left(\frac{1 \text{ m}}{100 \text{ cm}} \right) \left(\frac{1 \text{ km}}{1000 \text{ m}} \right) \left(\frac{3600 \text{ s}}{1 \text{ hr}} \right)^2 = 259/2 \frac{\text{km}}{\text{hr}^2}$$

مثال ۱-۵. تبدیل آحاد، غلظت خروجی ماده A در یک واکنشگاه برابر با ۴ کیلومول بر مترمکعب است، آن را برحسب مول بر لیتر تبدیل کنید؟

جواب.

$$? \frac{\text{mol}}{\text{lit}} = 4 \frac{\text{k mol}}{\text{m}^3} = 4 \frac{\text{k mol}}{\text{m}^3} \left(\frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ lit}} \right) \left(\frac{1000 \text{ mol}}{1 \text{ k mol}} \right) = 4 \frac{\text{mol}}{\text{lit}}$$

مثال ۱-۶. ضریب نفوذ مولکولی (D) در انتقال جرم درون یک غشا از رابطه تجربی زیر محاسبه می شود. به طوری که؛ ضریب D بر حسب m^2/s و دما (T) بر حسب دمای کلوین است.

$$D = D_0 \exp(a/T)$$

مطلوب است تعیین آحاد ضرایب ثابت a و D_0 در این رابطه؟

جواب. با توجه به اینکه عبارت $\exp(a/T)$ بدون بعد یا بدون واحد است، بنابراین واحد a با واحد T یکی است. در نتیجه با توجه به رابطه واحدهای D_0 با D یکسان است.

$$(a) = (\text{m}^2/\text{s}) = (\text{D}) = (\text{D}_0), \text{ دمای کلوین (K)} = (\text{T}) = (\text{واحد (a)})$$

تمرین ۱-۲. ابعاد ضرایب ثابت a و D_0 را در رابطه فوق تعیین کنید؟

مثال ۱-۷. ضریب هدایت حرارتی فلز مذاب (k) بر حسب $\text{J}/(\text{s.m.K})$ از رابطه تجربی $k = A \exp(B/T)$ محاسبه می شود. ابعاد ضرایب ثابت A و B را تعیین کنید؟

جواب.

$$[B] = [T] = [\Theta]$$

$$[A] = [k] = [\text{J}/(\text{s.m.K})] = [\text{ML}^2\text{T}^{-2}]/([\text{T}][\text{L}][\Theta]) = [\text{MLT}^{-2}\Theta^{-1}]$$

۱-۳ انواع سیستم آحاد

در جدول (۱-۱)، چندین سیستم متداول آحاد نشان داده شده است (دیوید هیمل بلاو، ۱۹۶۲: ۵)، (دیوید هیمل بلاو، ۱۹۶۷: ۷). این سیستم ها عبارت اند از:

الف) سیستم بین المللی^۱