

1. 简述均相反应及其动力学研究内容？

答：参与反应的各物质均处于同一个相内进行的化学反应称为均相反应。均相反应动力学是研究各种因素如温度、催化剂、反应物组成和压力等对反应速率、反应产物分布的影响，并确定表达这些影响因素与反应速率之间定量关系的速率方程。

2. 简述链锁反应所具有的基本特征？

答：1) 链反应具有三个阶段：链的引发、链的传播和链的终止；

2) 链的引发和传播均需要通过游离原子或游离基；

3) 游离原子和游离基均具有较高活性，容易受器壁或其它惰性物的作用而重新生成稳定的分子，从而使链反应终止。

3. 简述理想反应器的种类？

答：通常所指的理想反应器有两类：理想混合（完全混合）反应器和平推流（活塞流或挤出流）反应器。所谓完全混合反应器是指器内的反应流体瞬间达到完全混合，器内物料与反应器出口物料具有相同的温度和浓度。所谓平推流反应器是指器内反应物料以相同的流速和一致的方向进行移动，不存在不同停留时间的物料的混合，所有的物料在器内具有相同的停留时间。

4. 简述分批式操作的完全混合反应器？

答：反应物料一次性投入反应器内，在反应过程中，不再向器内投料，也不出料，待达到反应要求的转化率后，一次性出料，每批操作所需生产时间为反应时间与非生产性时间之和，非生产性时间包括加料、排料和物料加热、冷却等用于非反应的一切辅助时间。

5. 简述等温恒容平推流反应器空时、反应时间、停留时间三者关系？

答：空时是反应器的有效容积与进料流体的容积流速之比。反应时间是反应物料进入反应器后从实际发生反应的時刻起到反应达某一程度所需的反应时间。停留时间是指反应物进入反应器的時刻算起到离开反应器内共停留了多少时间。由于平推流反应器内物料不发生返混，具有相同的停留时间且等于反应时间，恒容时的空时等于体积流速之比，所以三者相等。

6. 对于可逆放热反应如何选择操作温度？

答：1) 对于放热反应，要使反应速率尽可能保持最大，必须随转化率提高，按最优温度曲线相应降低温度；2) 这是由于可逆放热反应，由于逆反应速率也随反应温度的提高而提高，净反应速率出现一极大值；3) 而温度的进一步提高将导致正逆反应速率相等而达到化学平衡。

7. 对于反应， $r_R = k_1 C_A^2$ ， E_1 ； $r_S = k_2 C_A$ ， E_2 ，当 $E_1 > E_2$ 时如何选择操作温度可以提高产物的收率？

$$S_R = \frac{r_R}{r_S} = \frac{k_{10} e^{-E_1/RT}}{k_{20} e^{-E_2/RT}} C_A = \frac{k_{10}}{k_{20}} e^{\frac{E_2 - E_1}{RT}} C_A$$

答：对于平行反应，所以，当 $E_1 > E_2$ 时应尽可能提高反应温度，方可提高R的选择性，提高R的收率。

8. 停留时间分布密度函数 $E(t)$ 的含义？

答：在定常态下的连续稳定流动系统中，相对于某瞬间 $t=0$ 流入反应器内的流体，在反应器出口流体的质点中，在

器内停留了 t 到 $t+dt$ 之间的流体的质点所占的分率为 $E(t)dt$ (②分)。 $\int_0^\infty E(t)dt = 1.0$ 。

9. 停留时间分布函数 $F(t)$ 的含义？

答：在定常态下的连续稳定流动系统中，相对于某瞬间 $t=0$ 流入反应器内的流体

，在出口流体中停留时间小于 t 的物料所占的分率为 $F(t)$ 。 $F(t) = \int_0^t E(t)dt$ 。

10. 简述描述停留时间分布函数的特征值？

答：用两个最重要的特征值来描述——平均停留时间 \bar{t} 和方差 σ_t^2 。

1) \bar{t} 定义式为： $\bar{t} = \int_0^\infty tE(t)dt$ ，平均停留时间 \bar{t} 是 $E(t)$ 曲线的分布中心，是 $E(t)$ 曲线对于坐标原点的一次矩，又称 $E(t)$ 的数学期望。

2) σ_t^2 是表示停留时间分布的分散程度的量，在数学上它是指对于平均停留时间的二次矩

$$\sigma_t^2 = \int_0^\infty t^2 E(t)dt - \bar{t}^2$$

11. 简述寻求停留时间分布的实验方法及其分类？

答：通过物理示踪法来测反应器物料的停留时间的分布曲线。所谓物理示踪是指采用一种易检测的无化学反应活性的物质按一定的输入方式加入稳定的流动系统，通过观测该示踪物质在系统出口的浓度随时间的变化来确定系统物料的停留时间分布。根据示踪剂输入方式的不同大致分为四种：脉冲法、阶跃法、周期示踪法和随机输入法。

12. 简述脉冲示踪法测停留时间分布的实验方法及其对应曲线？

答：脉冲示踪法是在定常态操作的连续流动系统的入口处在 $t=0$ 的瞬间输入一定量 M 克的示踪剂 A，并同时在出口

$$E(t) = \frac{C_A}{C_0}$$

处记录出口物料中示踪剂的浓度随时间的变化。对应的曲线为 $E(t)$ 曲线，

13. 简述阶跃示踪法测停留时间分布的实验方法及其对应曲线？

答：阶跃示踪法对于定常态的连续流动系统，在某瞬间 $t=0$ 将流入系统的流体切换为含有示踪剂 A 且浓度为 C_{A0} 的流体，同时保持系统内流动模式不变，并在切换的同时，在出口处测出出口流体中示踪剂 A 的浓度随时间的变化。

$$F(t) = \frac{C_A}{C_{A0}}$$

对应的曲线为 $F(t)$ ，

14. 简述建立非理想流动的流动模型的步骤？

答：1) 通过冷态模型实验测定实验装置的停留时间分布；2) 根据所得的有关 $E(t)$ 或 $F(t)$ 的结果通过合理的简化提出可能的流动模型，并根据停留时间分布的实验数据来确定所提出的模型中所引入的模型参数；3) 结合反应动力学数据通过模拟计算来预测反应结果；4) 通过一定规模的热模实验来验证模型的准确性。

15. 简述非理想流动轴向扩散模型的特点？

- 答：1) 在管内径向截面上流体具有均一的流速；
2) 在流动方向上流体存在扩散过程，该过程类似于分子扩散，符合 Fick 定律；
3) 轴向混合系数 E_z 在管内为定值；
4) 径向不存在扩散；
5) 管内不存在死区或短路流。

16. 简述非理想流动轴向扩散模型的定义？

答：为了模拟返混所导致流体偏离平推流效果，可借助这种返混与扩散过程的相似性，在平推流的基础上叠加上轴向返混扩散来加以修正，并人为的假定该轴向返混过程可以用费克 (Fick) 定律加以定量描述。所以，该模型称为“轴向分散模型” (或轴向扩散模型)。

17. 简述非理想流动多级混合模型的特点？

答：把实际的工业反应器模拟成由 n 个容积相等串联的全混流区所组成，来等效的描述返混和停留时间分布对反应

$$\bar{t} = \frac{V}{v_0}, \quad t_i = \frac{\bar{t}}{N}$$

过程内的影响。设反应器容积为 V ，物料流入速率为 v_0 ，则

18. 举例说明微观流体和宏观流体的区别？

答：若流体是分子尺度作为独立运动单元来进行混合，这种流体称为微观流体；若流体是以若干分子所组成的流体微团作为单独的运动单元来进行微团之间的混合，且在混合时微团之间并不发生物质的交换，微团内部具有均匀的组成和相同的停留时间，这种流体称为宏观流体。如在气—液鼓泡搅拌装置中，气体以气泡方式通过装置，此时气体是宏观流体，而液体为微观流体。

19. 简述 Langmuir 等温吸附方程的基本特点？

- 答：1) 均匀表面 (或理想表面)：即催化剂表面各处的吸附能力是均一的，吸附热与表面已被吸附的程度如何无关；
2) 单分子层吸附；
3) 被吸附的分子间互不影响，也不影响别的分子；
4) 吸附的机理均相同，吸附形成的络合物均相同。

20. 简述 BET 方程测定固体催化剂比表面积的原理？

答：测定比表面积的方法是建立在 BET 方程基础之上 $\frac{P}{V(P_0 - P)} = \frac{1}{V_m C} + \frac{(C-1)P}{V_m C P_0}$ ，利用低温下测定气体在

固体上的吸附量和平衡分压值，将 $\frac{P}{V(P_0 - P)}$ 对 $\frac{P}{P_0}$ 作图，应为一一直线，斜率为 $\frac{(C-1)}{V_m C}$ ，截距为 $\frac{1}{V_m C}$ ，因此

可求出 V_m 及 C ，则可利用比表面积公式进行求得。

21. 气—固相催化反应的动力学步骤？

- 答：1) 反应物从气流主体向催化剂的外表面和内孔扩散
2) 反应物在催化剂表面上吸附
3) 吸附的反应物转化成反应的生成物
4) 反应生成物从催化剂表面上脱附下来
5) 脱附下来的生成物向催化剂外表面、气流主体中扩散。

22. 解释努森扩散和分子扩散分别在何种情况下占优势？

答：多孔物质催化剂的粒内扩散较为复杂。当微孔孔径较大时，分子扩散阻力是由于分子间的碰撞所致，这种扩散为分子扩散。当微孔孔径小于分子的自由程 $0.1\mu\text{m}$ 时，分子与孔壁的碰撞机会超过了分子间的相互碰撞，而成为扩

散阻力的主要因素，这种扩散为努森扩散。

23. 简述非催化气固反应缩核模型的特点？

答：非催化气固反应缩核模型是反应从粒子外表面逐渐向内核部分推进，但粒子体积不变，如硫化矿的焙烧，氧化铁的还原等。

24. 简述非催化气固反应缩粒模型的特点？

答：非催化气固反应缩粒模型是固体粒子的粒径随反应的进行而不断缩小，如煤炭的燃烧造气，从焦炭与硫磺蒸汽制造二硫化碳。

25. 简述气—液反应的宏观过程： $A(g) + bB(l) \rightarrow \text{产物}(l)$ ？

答：1) 反应物气相组分从气相主体传递到气液相界面，在界面上假定达到气液相平衡；

2) 反应物气相组分 A 从气液相界面扩散入液相，并在液相内反应；

3) 液相内的反应产物向浓度下降方向扩散，气相产物则向界面扩散；

4) 气相产物向气相主体扩散。

26. 简述固定床反应器的优缺点？

答：凡是流体通过不动的固体物料所形成的床层而进行反应的装置都称作固定床反应器。

1) 催化剂在床层内不易磨损；

2) 床层内流体的流动接近于平推流，与返混式反应器相比，用较少的催化剂和较小的反应器容积来获得较大的生产能力；

3) 固定床中的传热较差；

4) 催化剂的更换必须停产进行。

27. 简述气固相催化反应固定床反应器拟均相模型的特点？

答：凡是流体通过不动的固体物料所形成的床层而进行反应的装置都称作固定床反应器。拟均相模型忽略了床层中粒子与流体间温度与浓度的差别。

28. 简述气固相催化反应固定床反应器非均相模型的特点？

答：凡是流体通过不动的固体物料所形成的床层而进行反应的装置都称作固定床反应器。非均相模型考虑了粒子与流体间温度与浓度的差别。

29. 简述气固相催化反应固定床反应器拟均相一维模型的特点？

答：凡是流体通过不动的固体物料所形成的床层而进行反应的装置都称作固定床反应器。拟均相一维模型是忽略床层中粒子与流体的温度与浓度差别，考虑在流体流动的方向（轴向）上有温度和浓度的变化，而在与流向垂直的截面上（径向）则是等温和等浓度的。

30. 简述气—固相催化反应固定床反应器拟均相二维模型的特点？

答：凡是流体通过不动的固体物料所形成的床层而进行反应的装置为固定床反应器，拟均相二维模型是忽略床层中粒子与流体间温度与浓度的差别，同时考虑流体在轴向和径向上的温度梯度和浓度梯度。

31. 简述表征颗粒特征的基本参数粒径的表示方法？

答：固定床中粒径的表示方法常用的有三种。颗粒的体积相当直径定义为具有相同体积 V_p 的球粒子直径，表达式 $d_v = (6V_p / \pi)^{1/3}$ ；颗粒的面积相当直径是以外表面 a_p 相同的球形粒子的直径，表达式 $d_a = \sqrt{a_p / \pi}$ ；颗粒的比表面相当直径是以相同的比表面 S_v 的球形粒子直径来表示，表达式 $d_s = 6 / S_v$ 。

32. 简述聚式流化床的形成？

答：对于气—固系统的流化床反应器的粗颗粒系统，流速超过起始流化速度后，就出现气泡，流速愈高，气泡的聚并及造成的扰动亦愈剧烈，使床层波动频繁，这种流化床称为聚式流化床。

33. 简述鼓泡床的形成？

答：对于气—固系统的流化床反应器，只有细颗粒床，才有明显的膨胀，待流速达到起始鼓泡速度后才出现气泡；而对粗颗粒系统，则一旦流速超过起始流化速度后，就出现气泡，这些通称为鼓泡床。

34. 简述描述流化床的特征流速的定义？

答：特征流速为起始流化速度和带出速度。

1) 当流速达到某一限值，床层刚刚能被托动时，床内粒子就开始流化起来了，这时的流体空线速称为起始流化速度。

2) 当流速增大到某一定值时，流体对粒子的曳力与粒子的重力相等，则粒子会被气流带出，这一速度称为带出速度或终端速度。

35. 简述流化床反应器中节涌床的特点？

答：对于气—固系统，床径很小，而床高与床径比较大时，气泡在上升过程中可能聚并增大甚至达到占据整个床层截面的地步，将固体粒子一节节的往上柱塞式的推动，直到某一位置而崩落为止，这种情况为节涌，此时的流化床为节涌床。

36. 简述流化床反应器的优点？

答：1) 传热效能高，而且床内温度易维持均匀；

2) 大量固体粒子可方便的往来输送，对于催化剂迅速失活而需随时再生的过程来说，能够实现大规模的连续生产。

3) 由于粒子细，可以消除内扩散阻力，能充分发挥催化剂的效能。

37. 简述流化床反应器的缺点？

答：1) 气流状况不均，不少气体以气泡状态经过床层，气—固两相接触不够有效；

2) 粒子运动基本上是全混式，因此停留时间不一。在以粒子为加工对象时，影响产品质量的均一性，) 且粒子的全混造成了气体的部分返混，影响反应速率和造成副反应的增加；

3) 粒子的磨损和带出造成催化剂的损失，并要设置旋风分离器等粒子回收系统。

38. 简述流化床反应器中操作气速 U_0 是如何选取的？

答：实用的操作气速 U_0 是根据具体情况选取的。一般 U_0/U_{mf} 之值（称作流化数）在 1.5~10 范围的，另外也有按 $U_0/u_t = 0.1 \sim 0.4$ 左右来选取。通常所用的气速为 0.15~0.5m/s 左右，对于热效应不大，反应速度慢，催化剂粒度细，筛分宽，床内无内部构件和要求催化剂的带出量少的情况，宜选用较低气速，反之，则用较高气速。

39. 简述气泡的结构及其行为？

答：气泡的顶是呈球形的，尾部略为内凹，在尾部区域，由于压力比近傍稍低，颗粒被卷了进来，形成局部涡流，这一区域称为尾涡。在气泡的上升的途中，不断有一部分颗粒离开这一区域，另一部分颗粒补充进来，这样就把床层下部的颗粒夹带上去而促进了全床颗粒的循环与混合。部分气体可穿过气泡进行物质交换，在泡外形成一环流，称为气泡云。尾涡与气泡云随气泡上升，其中所含粒子浓度与乳相中几乎相同，二者浑然一体，形成气泡晕。

40. 简述流化床反应器的开发和放大时考虑的问题？

答：主要是通过以下三个方面来考虑：

1) 催化剂的性能。催化剂必须具有良好的活性、选择性和稳定性；催化剂的粒度和粒度分布能维持良好的流化质量。

2) 操作条件要注意放大效应的影响；

3) 床层结构上通过分布板和内部构件两方面来考虑，增加气液的接触面积和有效的传热，维持一定的压降。

41. 简述双膜理论？

答：该模型设想在气—液两相流的相界面处存在着呈滞流状态的气膜和液膜，而把气液两相阻力集中在这两个流体膜内，而假定气相主体和液相主体内组成均一，不存在传质阻力。组分是通过在气膜和液膜内的稳定的分子扩散过程来进行传质的，通过气膜传递到相界面的溶质组分瞬间的溶于液体且达到平衡。因此，把复杂的相间传质过程模拟成串联的稳定的双膜分子扩散过程的叠加，相间传质总阻力等于传质阻力的加和。

42. 简述气—液相反应器的设计所包含的内容？

答：首先是根据气—液反应系统的动力学特征来选择正确的反应器型式，然后结合反应器特性来确定能满足给定生产任务的反应器几何尺寸。

43. 简述气—液相反应器型式的选择应考虑的因素？

答：1) 气、液的接触方式，即气体和液体在器内的流动模式；

2) 相间传质系数 k_{GA} 、 k_{LA} ；

3) 气、液流动速率；

4) 气—液反应控制区的考虑。

44. 以纯液体在悬浮催化剂上的加氢反应为例来说明气—液—固反应的过程？

答：1) 气相中的反应组分（如氢气）通过气膜向气液界面的扩散传质；

- 2) 氢在气液界面上溶解，假定达到平衡，然后通过液膜向液相主体内进行扩散；
- 3) 氢在液相主体内具有均一的浓度，它将进一步通过固体表面上的液膜从液相主体向固体粒子表面扩散；
- 4) 气相反应组分和液相反应组分在固体表面上发生反应；
- 5) 整个反应过程就是按上述步骤依次的进行。