

## 使用 **Chemistry** 表观组分法生成的挥发组分

### 编者按

1) 这篇[中文技术支持文章](#)将会告诉我们模拟生成挥发组分的电解质反应时，应如何处理以避免计算结果错误。

2) 您也可以从 AspenTech 技术支持网站[链接](#)中找到对应的中/英文版技术支持文章。

3) 欢迎您点击下方 AspenTech 培训中心链接，查看 AspenTech 中文公开课程安排：

[北京公开课程安排](#)

[上海公开课程安排](#)

[中国其他地区 / 网络虚拟课程安排](#)

4) 在您使用我们的软件，或者查看我们的技术支持文章时，遇到任何问题，欢迎联系 AspenTech 技术支持：

邮箱：[esupport@aspentech.com](mailto:esupport@aspentech.com)

网址：[esupport.aspentech.com](http://esupport.aspentech.com)

电话：(86) 10 53875867

5) 言归正传，请您欣赏我们的中文技术支持文章：

## 使用 **Chemistry** 表观组分法生成的挥发组分

### 问题描述

能否使用含挥发组分的电解质化学反应？在 **Chemistry** 的反应中本该生成  $\text{CO}_2$ ，但是在气相中却没有该组分。

### 解决方案

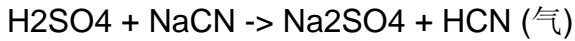
在 **Chemistry** 的反应中，如果任一组分的蒸汽压较大，或有挥发组分生成，那么只能使用真实组分法（true component approach）。一些电解质反应会生成  $\text{CO}_2$ ， $\text{H}_2\text{S}$ ， $\text{HCN}$  等挥发组分，都应如此处理。

根本的原因是当使用表观组分法时 **Aspen Plus** 会忽略真实反应产物（指解离反应式右侧组分，平衡反应两侧的组分）的蒸汽压。即使是连续反应（同一组分会出现在某些反应的右



侧，也会出现在其它反应的左侧），表观组分法也不能使用。这样的设计是有意为之的，因为 Chemistry 的反应就是希望用在反应产物都是液相的情况。

比如，如果定义了下面的反应：



如果所有的表观组分（此例子中指  $\text{H}_2\text{SO}_4$  和  $\text{NaCN}$ ）都是不挥发的，那么就没有办法表征挥发性物质。因此在使用表观组分法时，挥发性物质（ $\text{HCN}$ ）就不能生成。因此，气相中也不会出现  $\text{HCN}$ 。

在 V7.1 及更高版本中，可以在 phase equilibrium results 中增加一个检查项。在 Setup | Simulation Options | Check Results 表中通过设定 Warning, Error 或 Information 来激活此功能。

## 关键词

电解质反应平衡 CO2 H2S