

何良知 等 编著

# 石油化工工艺 计算程序



中国石化出版社

# 石油化工工艺计算程序

何良知 等编著

中国石化出版社



(京) 新登字 048 号

## 内 容 提 要

本书汇集了 140 多个石油化工工艺计算中常见的烃类、石油馏分及其他有关物质的物理化学性质计算程序, 可与原烃加工出版社出版的《石油化工工艺计算图表》配合使用。书中对每个程序都详细介绍了所采用的计算方法, 给出了使用范围、准确度和其他有关事项。书末附有全部 FORTRAN 77 源程序。书中所有程序均录入软盘, 也由中国石化出版社发行。

本书着重工艺图表的程序化, 并改进了《石油化工工艺计算图表》中一些计算方法。其中三种蒸馏曲线的换算, 基本上采用了新的关联式, 精度大大提高。对一些复杂的常用图作出了满意的数值处理。焓和其他热性质计算及气液平衡计算的程序化皆具相当高的难度。本书重视实用, 每个程序均提供实际应用的例题, 气液平衡一章中提供的例题更具有突出的实用价值。

本书可供从事炼油、石油化工设计的科技人员使用, 也可供有关生产、科研和教学人员参考。

## 石油化工工艺计算程序

何良知 等编著

\*

中国石化出版社出版

(北京朝阳区太阳宫路甲 1 号 邮政编码: 100029)

地质印刷厂排版印刷

新华书店北京发行所发行

\*

787×1092 毫米 16 开本 24 $\frac{3}{4}$ 印张 633 千字 印 1—5000

1993 年 10 月北京第 1 版 1993 年 10 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-80043-285-8/TQ·147 定价: 16.00 元

# 目 录

前言	(1)
第一章 通用数据	(2)
第二章 烃类特性	(10)
第一节 纯烃及混合物偏心因子	(10)
第二节 石油馏分特性沸点	(12)
第三节 石油馏分分子量	(14)
第四节 重石油馏分分子量	(15)
第五节 石油馏分偏心因子	(17)
第六节 石油馏分族组成	(18)
第七节 石油馏分折光指数	(21)
第八节 石油馏分 Watson 特性因数及碳、氢质量比	(22)
第三章 石油馏分恩氏蒸馏、真沸点蒸馏和平衡闪蒸的关系	(24)
第一节 常压恩氏蒸馏和真沸点蒸馏的关系	(24)
第二节 10mmHg 绝压恩氏蒸馏和真沸点蒸馏的关系	(26)
第三节 常压恩氏蒸馏与平衡闪蒸 50%点温度的关系	(29)
第四节 常压恩氏蒸馏与平衡闪蒸温度的关系	(31)
第五节 10mmHg 绝压下恩氏蒸馏与平衡闪蒸 50%点温度的关系	(33)
第六节 10mmHg 绝压下恩氏蒸馏与平衡闪蒸温度的关系	(35)
第七节 由常压恩氏蒸馏和平衡闪蒸数据求高于常压的平衡闪蒸数据	(37)
第八节 平衡闪蒸馏出物的常压恩氏蒸馏温度	(39)
第九节 平衡闪蒸残留物的常压恩氏蒸馏温度	(42)
第十节 平衡闪蒸馏出物和残留物的相对密度	(44)
第十一节 由常压真沸点蒸馏数据计算平衡闪蒸数据	(47)
第十二节 10mmHg 绝压下真沸点蒸馏与平衡闪蒸 50%点温度的关系	(50)
第十三节 10mmHg 绝压下真沸点蒸馏与平衡闪蒸温度的关系	(51)
第四章 临界性质	(54)
第一节 纯烃临界温度	(54)
第二节 纯烃临界压力	(55)
第三节 纯烃临界体积	(58)
第四节 定组成混合物临界温度	(59)
第五节 定组成混合物临界压力	(62)
第六节 定组成混合物临界体积	(64)
第七节 天然气真临界温度	(66)
第八节 石油馏分真临界温度	(69)
第九节 石油馏分真临界压力	(70)
第十节 石油馏分假临界温度	(72)

第十一节	含烃和石油馏分的混合物的真、假临界温度 .....	(73)
第十二节	石油馏分假临界压力 .....	(76)
第十三节	含烃和石油馏分的混合物的真、假临界压力 .....	(78)
<b>第五章</b>	<b>蒸气压</b> .....	(82)
第一节	纯烃蒸气压 .....	(82)
第二节	纯烃和窄沸程石油馏分的蒸气压 .....	(83)
<b>第六章</b>	<b>密度</b> .....	(86)
第一节	烃和非烃的饱和液体密度 .....	(86)
第二节	温度和压力对纯液体及其混合物密度的影响 .....	(88)
第三节	烃混合物泡点密度 .....	(92)
第四节	石油馏分液体密度 .....	(94)
第五节	低分子量烃掺合到原油中的体积收缩 .....	(97)
第六节	烃和非极性气体及其混合物的密度 .....	(98)
<b>第七章</b>	<b>热性质</b> .....	(102)
第一节	纯理想气体热性质 .....	(102)
第二节	烃及其混合物液体和实际气体焓 .....	(104)
第三节	石油馏分焓 .....	(107)
第四节	纯烃汽化热 .....	(111)
第五节	烃及其混合物真实气体和高于正常沸点温度液体的等压热容 .....	(113)
第六节	纯烃在低于正常沸点温度下的液体等压热容 .....	(116)
第七节	石油馏分气体和液体等压热容 .....	(121)
第八节	烃及其混合物真实气体热容比 .....	(124)
第九节	烃及其混合物液体和真实气体熵 .....	(127)
第十节	纯烃逸度 .....	(130)
<b>第八章</b>	<b>气液平衡 <math>K</math> 值</b> .....	(132)
<b>第九章</b>	<b>燃烧</b> .....	(144)
第一节	液体石油馏分燃烧热 .....	(144)
第二节	燃料气燃烧热 .....	(147)
第三节	炼厂气的有用燃烧热 .....	(149)
第四节	燃料油的有用燃烧热 .....	(150)
第五节	单位质量燃料燃烧生成的烟气的量 .....	(152)
第六节	烟气中二氧化碳含量 .....	(155)
第七节	低压下烟气组分的焓 .....	(157)
第八节	已知烟气组成时有用燃烧热计算 .....	(158)
<b>第十章</b>	<b>表面张力和界面张力</b> .....	(161)
第一节	由等张比容推算表面张力 .....	(161)
第二节	烃混合物低压下表面张力 .....	(162)
第三节	烃混合物高压下表面张力 .....	(164)
第四节	石油馏分表面张力 .....	(166)
第五节	烃-水界面张力 .....	(167)

第六节	计算烃-水界面张力的另一种方法	(170)
<b>第十一章</b>	<b>粘度</b>	(172)
第一节	运动粘度换算为赛氏通用粘度	(172)
第二节	运动粘度换算为赛氏重油粘度	(173)
第三节	Redwood、Engler 粘度与运动粘度换算	(175)
第四节	纯烃液体粘度	(177)
第五节	液体混合物粘度	(179)
第六节	常压下石油馏分液体粘度	(181)
第七节	液体粘度随温度的变化	(183)
第八节	非定义混合物掺合的液体粘度	(185)
第九节	低分子量烃在高压下的液体粘度	(187)
第十节	高分子量烃及其混合物在高压下的液体粘度	(190)
第十一节	由运动粘度计算粘度指数	(192)
第十二节	含溶解气的纯烃和混合烃在高压下的液体粘度	(194)
第十三节	低压下气体粘度	(196)
第十四节	低压下气体混合物粘度	(198)
第十五节	非定义气体混合物低压下粘度	(200)
第十六节	纯烃气体及其混合物高压下粘度	(201)
第十七节	非烃气体常压下的粘度	(204)
<b>第十二章</b>	<b>导热系数</b>	(208)
第一节	纯液体烃在低压和低于正常沸点温度下的导热系数	(208)
第二节	纯液体烃低压下导热系数的通用算法	(211)
第三节	高于正常沸点任意压力下纯液体烃的导热系数	(213)
第四节	液体烃混合物的导热系数	(215)
第五节	液体石油馏分低压下导热系数	(217)
第六节	液体烃高压下导热系数	(218)
第七节	纯烃气体低压下导热系数	(220)
第八节	纯烃气体低压下导热系数通用算法	(222)
第九节	烃类气体混合物导热系数	(224)
第十节	石油馏分低压蒸气导热系数	(226)
第十一节	纯烃气体高压下导热系数	(227)
<b>第十三章</b>	<b>扩散系数</b>	(230)
第一节	二元非极性液体系统稀溶液的扩散系数	(230)
第二节	二元极性或缔合液体系统稀溶液的扩散系数	(233)
第三节	二元非极性液体系统浓溶液的扩散系数	(235)
第四节	多元液体系统的扩散系数	(236)
第五节	烃-烃二元气体系统低压扩散系数	(238)
第六节	空气-烃二元气体系统低压扩散系数	(239)
第七节	二元气体系统高压扩散系数	(241)
第八节	多元气体系统的扩散系数	(243)

第九节 可溶性气体在液体中的扩散系数.....	(244)
附录一 程序.....	(246)
附录二 有关程序所采用的计算方法的图表在参考文献〔1〕〔2〕〔3〕中的编号对照表.....	(362)
附录三 附图.....	(366)
参考文献.....	(390)

## 前 言

为了提高石油化工工艺计算的效率和准确性,促进电子计算机在石油化工领域的应用,我们编写了《石油化工工艺计算程序》一书。

本书主要参考 API《石油炼制技术数据手册》(Technical Data Book-Petroleum Refining, 1985 年)推荐的计算方法,对北京石油设计院编的《石油化工工艺计算图表》(烃加工出版社, 1985.12)中一些常用图表,进行了转化为计算公式的工作,实现了计算机计算,并对原《石油化工工艺计算图表》中一些方法作了修改和补充。由于原文献中有些图、表采用英制单位及其他非法定计量单位,故少量由此回归的数学模型也用了英制单位等非法定计量单位。这些都在程序中做了相应的处理,实际计算时的输入、输出均采用法定计量单位。

我们采用标准 FORTRAN 77 语言,编制了 140 多个子程序。全部子程序均在 IBM-PC/XT 及 IBM 5550 等微机上通过。在每个子程序的说明中,都详细介绍了所使用的物性计算方法,并提供了如何应用这些子程序的例题,以便读者使用或对程序进行改动、移植。

本书可与《石油化工工艺计算图表》配合使用。附录二中提供了二者的对照表。凡属《石油化工工艺计算图表》中缺少或有所修改的图,本书中均另附图(附录三),以对手算或作对照之用。

参加本书工作的有何良知、刘国芬、刘远德、尹承仁、杨国藩、萧鹏、杨怡华、吴健、邱静薇、刘立、高远、陈新刚、蒲祯德等,高级工程师张伯嗣指导并参加了部分工作。每个子程序都注明了编制人姓名,以示责任自负之意。编制说明的格式统一和书面材料文字上的汇集和校对由何良知负责,各子程序的汇集由刘国芬负责。

中国石油化工总公司工程建设部曹厚言、中国石油化工总公司经济信息中心刘正庚、北京设计院计算机室傅子智等对本书的出版给予了大力支持,在此一并表示深切的谢意。

全部程序和例题,均备有供微机用的软盘,由中国石化出版社发行,以方便用户。

书中不当之处,敬请读者批评指正。



# 第一章 通用数据

表 1-1 通

序号	物质中文名	分子式	理想气体焓、熵、热容方程系数						
			A	B	$C \times 10^3$	$D \times 10^6$	$E \times 10^9$	$F \times 10^{13}$	G
1	氧	O <sub>2</sub>	-2.283574	0.952440	-0.281140	0.655223	-0.452316	1.087744	2.080310
2	氢	H <sub>2</sub>	28.671997	13.396156	2.960131	-3.980744	2.661667	-6.099863	11.801371
3	水	H <sub>2</sub> O	-5.729915	1.915007	-0.395741	0.876232	-0.495086	1.038613	0.702815
4	硫化氢	H <sub>2</sub> S	-1.437049	0.998865	-0.184315	0.557087	-0.317734	0.636644	1.394812
5	氮	N <sub>2</sub>	-2.172507	1.068490	-0.134096	0.215569	-0.078632	0.069850	1.805409
6	氨	NH <sub>3</sub>	-2.202606	2.010317	-0.650061	2.373264	-1.597595	3.761739	0.990447
7	一氧化碳	CO	-2.269176	1.074015	-0.172664	0.302237	-0.137533	0.200365	2.018445
8	二氧化碳	CO <sub>2</sub>	11.113744	0.479107	0.762159	0.359392	0.084744	-0.057752	2.719180
9	二氧化硫	SO <sub>2</sub>	3.243188	0.461650	0.248915	0.120900	-0.188780	0.568232	2.086924
10	甲烷	CH <sub>4</sub>	-16.228549	2.393594	-2.218007	5.740220	-3.727905	8.549685	-0.339779
11	乙烷	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	-0.049334	1.108992	-0.188512	3.965580	-3.140209	8.008187	1.995889
12	丙烷	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	-1.717565	0.722648	0.708716	2.923895	-2.615071	7.000545	2.289659
13	正丁烷	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	17.283134	0.412696	2.028601	0.702953	-1.025871	2.883394	2.714861
14	2-甲基丙烷	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	26.744208	0.195448	2.523143	0.195651	-0.772615	2.386087	3.466595
15	正戊烷	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	63.201677	-0.011701	3.316498	-1.170510	0.199648	-0.086652	4.075275
16	2-甲基丁烷	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	64.252075	-0.131900	3.541156	-1.333225	0.251463	-0.129589	4.572976
17	2,2-二甲基丙烷	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	27.380416	0.018305	3.063221	-0.375030	0.530964	2.059134	3.388342
18	正己烷	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	17.191071	0.959226	-0.614725	6.142101	-6.160952	20.868190	-0.207040
19	2-甲基戊烷	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	33.798408	0.173685	2.348998	0.844100	-1.559115	5.534684	2.968423
20	3-甲基戊烷	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	17.964768	0.397799	1.209870	3.254556	-3.942661	14.384148	2.149541
21	2,2-二甲基丁烷	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	92.706801	-0.500323	4.525783	-2.415290	0.713199	-0.591097	5.617113
22	2,3-二甲基丁烷	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	31.840900	0.101764	2.297040	1.223931	-2.029797	7.444600	2.197711
23	正庚烷	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	-0.153725	0.754499	0.261728	4.366358	-4.484510	14.842099	0.380048
24	2-甲基己烷	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	17.893709	0.404849	1.334653	2.877698	-3.511818	12.540055	1.823456
25	3-甲基己烷	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	36.807299	0.167431	2.262250	1.067097	1.781538	6.169491	2.864993
26	3-乙基戊烷	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	12.447900	0.399455	1.734010	1.575838	-2.024952	6.748740	0.651404
27	2,4-二甲基戊烷	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	11.508769	0.093303	2.598254	0.630349	-1.428307	4.569218	2.847131
28	2,2-二甲基戊烷	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	28.9334	0.098127	2.46968	1.034122	-1.982623	7.649410	1.810639
29	2,3-二甲基戊烷	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	77.278500	-0.372769	4.087930	-1.946003	0.630910	-1.222820	4.060382
30	3,3-二甲基戊烷	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	42.896600	-0.072097	3.243110	-0.708186	-0.177218	0.765940	2.549393
31	2,2,3-三甲基丁烷	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	22.131700	0.093047	2.516640	0.560850	-1.222753	4.187170	1.759973
32	正辛烷	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	2.604725	0.724670	0.367845	4.142833	-4.240199	13.734055	0.327588
33	2,2-二甲基己烷	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	21.451302	0.226073	2.074483	1.456277	-2.169048	7.742088	2.139163
34	3,4-二甲基己烷	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	59.275800	-0.129479	2.898920	0.616667	-1.918754	8.176120	2.940378
35	2-甲基庚烷	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	27.405630	0.305110	1.826883	1.744174	-2.311344	7.752627	2.038844
36	2,2,4-三甲基戊烷	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	26.118096	0.039675	2.742294	0.328610	-1.206014	4.586420	2.846608
37	2,2,3,3-四甲基丁烷	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	36.904700	-0.133390	3.448810	-1.106669	0.162350	-0.051810	2.596269
38	正壬烷	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	4.000278	0.707805	0.438048	3.959342	-4.043158	12.876028	0.257265
39	2-甲基辛烷	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	44.161700	0.156815	2.31454	1.086396	-2.005954	7.656340	1.531318
40	2,2-二甲基庚烷	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	34.540400	0.116325	2.504780	0.682730	-1.497388	5.403190	1.477525

用数据

分子量 WM	沸点, $T_b$ K	偏心因子 $\omega$	临界温度 $T_c$ K	临界压力, $P_c$ kPa $\times 10^{-3}$	临界体积, $V_c$ dm <sup>3</sup> /kmol $\times 10^{-3}$	临界压缩 因子, $Z_c$	Rackett 常数, $Z_{RA}$	等张比容, $P$	压缩因子 $Z$ (15.5 $^{\circ}$ C, 101.3kPa)	总燃烧热 (15.5 $^{\circ}$ C 101.3kPa) J/m <sup>3</sup> /37258.9
32.00	90.25	0.019	154.75	5.081	2.38	0.301		54.0		
2.016	20.40	0.000	34.25	1.298	32.26 <sup>1</sup>	0.305		35.2		
18.02	373.15	0.348	647.35	22.120	3.71	0.235		52.7		
34.08	212.85	0.100	373.55	9.0046	12.87	0.283				
28.02	77.35	0.045	126.25	3.399	3.22	0.292		60.4		
17.03	239.75	0.255	405.55	11.280	4.25	0.243		(55.0)		
28.01	81.15	0.093	132.95	3.4991	3.32	0.295		61.6		
44.01	194.65	0.231	304.25	7.38153	2.14	0.274		77.5		
64.06	263.15	0.246	430.65	-7.895	1.91	0.270		101.5		
16.043	111.655	0.0115	190.58	4.604	0.099	0.288	0.2876	72.6	0.9981	1011.5
30.070	184.55	0.0908	305.42	4.880	0.148	0.284	0.2789	110.5	0.9916	1783.5
44.097	231.105	0.1454	369.82	4.249	0.203	0.280	0.2763	150.8	0.9820	2563.1
58.124	272.65	0.1928	425.18	3.797	0.255	0.274	0.2728	190.3	0.9667	3373.7
58.124	261.43	0.1756	408.14	3.648	0.263	0.282	0.2750	(188.8)	0.9696	3354.1
72.151	309.214	0.2510	469.65	3.369	0.304	0.262	0.2685	231.0		
72.151	300.993	0.2273	460.43	3.381	0.306	0.270	0.2716	230.0		
72.151	282.649	0.1970	433.78	3.199	0.303	0.269		(225.9)	0.9510	4188.9
86.178	341.882	0.2957	507.45	3.012	0.370	0.264	0.2635	270.8		
86.178	333.411	0.2791	497.5	3.010	0.367	0.267		270.7		
86.178	336.422	0.2750	504.45	3.124	0.367	0.273		267.9		
86.178	322.881	0.2310	488.78	3.080	0.359	0.272		266.4		
86.178	331.128	0.2473	499.98	3.127	0.358	0.269	0.2694	266.2		
100.205	371.58	0.3506	540.25	2.736	0.432	0.263	0.2611	311.36		
100.205	363.199	0.3298	530.37	2.734	0.421	0.261	0.2629	309.2		
100.205	364.997	0.3240	535.25	2.814	0.404	0.256	0.2609	306.6		
100.205	366.623	0.3101	540.64	2.891	0.416	0.268	0.2665	305.4		
100.205	353.644	0.3059	519.79	2.737	0.418	0.265	0.2654	307.5		
100.205	352.341	0.2886	520.50	2.773	0.416	0.267	0.2673	306.5		
100.205	362.931	0.2986	537.35	2.908	0.393	0.256	0.2596	303.5		
100.205	359.21	0.2697	536.4	2.946	0.414	0.274	0.2735	302.7		
100.205	354.026	0.2510	531.17	2.954	0.398	0.266	0.2697	302.5		
114.232	398.825	0.3978	568.83	2.487	0.492	0.259	0.2567	351.0		
114.232	379.992	0.3376	549.87	2.529	0.478	0.264	0.2640	346.0		
114.232	390.881	0.3384	568.85	2.692	0.466	0.266	0.2633	342.7		
114.232	390.803	0.3776	559.64	2.484	0.488	0.261	0.2581	348.8		
114.232	372.388	0.3033	543.96	2.568	0.468	0.266	0.2672	343.8		
114.232	379.62	0.2467	567.95	2.867	0.461	0.280	0.2746	(340.8)		
128.259	423.968	0.4437	594.64	2.290	0.548	0.254	0.2547	391.1		
128.259	416.43		586.75	2.290	0.541			(388.8)		
128.259	405.85		577.75	2.320	0.526			(385.9)		

序号	物质中文名	分子式	理想气体焓、熵、热容方程系数						
			A	B	$C \times 10^3$	$D \times 10^6$	$E \times 10^9$	$F \times 10^{13}$	G
41	3,3-二甲基庚烷	$C_9H_{20}$	39.285000	0.026494	2.75871	0.493042	-1.559908	6.336080	1.917865
42	正癸烷	$C_{10}H_{22}$	-6.962020	0.851375	-0.263041	5.521816	-5.631733	18.885443	-0.412446
43	2-甲基壬烷	$C_{10}H_{22}$	58.129000	0.000676	3.029040	-0.427031	-0.533360	2.276970	2.042269
44	4-正丙基庚烷	$C_{10}H_{22}$	16.182500	0.384008	1.604660	2.238607	-2.913381	10.341470	0.326087
45	2,2,3,4,4-五甲基戊烷	$C_{10}H_{22}$	35.173300	-0.125736	3.217750	-0.301623	-0.860141	4.164090	2.060791
46	正十一烷	$C_{11}H_{24}$	65.290564	-0.099827	3.472495	-1.354336	0.264721	-0.145574	3.407959
47	2-甲基癸烷	$C_{11}H_{24}$	24.965400	0.388383	1.432340	2.589736	-3.192595	11.086380	0.381903
48	正十二烷	$C_{12}H_{26}$	60.967391	-0.077548	3.420649	-1.308559	0.247576	-0.130380	3.227042
49	2-甲基十一烷	$C_{12}H_{26}$	38.219400	0.248209	2.014710	1.470406	-2.194326	7.708950	0.876074
50	正十三烷	$C_{13}H_{28}$	62.748642	-0.096018	3.463033	-1.353243	0.264564	-0.145439	3.245905
51	2-甲基十二烷	$C_{13}H_{28}$	52.615000	0.096866	2.629360	0.314871	-1.183230	4.348170	1.430092
52	正十四烷	$C_{14}H_{30}$	61.655096	-0.092312	3.452192	-1.345181	0.261574	-0.143007	3.172971
53	2-甲基十三烷	$C_{14}H_{30}$	38.097800	0.268305	1.925270	1.640378	-2.348314	8.192750	0.680866
54	正十五烷	$C_{15}H_{32}$	62.217244	-0.100961	3.472075	-1.366935	0.269684	-0.150082	3.163060
55	2-甲基十四烷	$C_{15}H_{32}$	52.662800	0.106806	2.606920	0.312350	-1.145287	4.069790	1.285882
56	正十六烷	$C_{16}H_{34}$	60.927011	-0.095563	3.459313	-1.356807	0.265935	-0.146753	3.095128
57	2-甲基十五烷	$C_{16}H_{34}$	47.322000	0.175075	2.316890	0.876548	-1.659563	5.828120	0.970427
58	正十七烷	$C_{17}H_{36}$	60.853132	-0.098655	3.465969	-1.365537	0.269340	-0.149768	3.071276
59	2-甲基十六烷	$C_{17}H_{36}$	27.072900	0.410089	1.345400	2.719846	-3.289802	11.250080	-0.017682
60	正十八烷	$C_{18}H_{38}$	60.419501	-0.098876	3.466295	-1.367430	0.270024	-0.150334	3.038272
61	2-甲基十七烷	$C_{18}H_{38}$	47.708900	0.181296	2.288930	0.927009	-1.704228	5.953570	0.878138
62	正十九烷	$C_{19}H_{40}$	59.195816	-0.092752	3.451465	-1.354690	0.265281	-0.146249	2.979932
63	2-甲基十八烷	$C_{19}H_{40}$	57.941100	0.067344	2.768560	-0.002294	-0.868801	3.119720	1.309309
64	正二十烷	$C_{20}H_{42}$	59.163624	-0.095147	3.456592	-1.360776	0.267410	-0.147933	2.963523
65	2-甲基十九烷	$C_{20}H_{42}$	47.272000	0.194852	2.230380	1.037996	-1.804238	6.274210	0.769583
66	环戊烷	$C_5H_{10}$	134.396280	-0.730818	3.676931	-1.071943	-0.063241	0.823378	7.295290
67	甲基环戊烷	$C_6H_{12}$	127.244412	-0.684541	4.005691	-1.681762	0.357838	0.218737	6.766396
68	乙基环戊烷	$C_7H_{14}$	125.043713	-0.638296	3.978395	-1.671386	0.358387	-0.219660	6.343736
69	1,1-二甲基环戊烷	$C_7H_{14}$	120.296208	-0.699452	4.169317	-1.816306	0.398256	-0.250990	6.390059
70	顺-1,2-二甲基环戊烷	$C_7H_{14}$	124.645502	-0.716076	4.220985	-1.880452	0.425668	-0.279772	6.533203
71	反-1,2-二甲基环戊烷	$C_7H_{14}$	123.382972	-0.696858	4.176671	-1.844267	0.413164	-0.268280	6.454726
72	顺-1,3-二甲基环戊烷	$C_7H_{14}$	123.382972	-0.696858	4.176671	-1.844267	0.413164	-0.268280	6.454726
73	反-1,3-二甲基环戊烷	$C_7H_{14}$	123.382972	-0.696858	4.176671	-1.844267	0.413164	-0.268280	6.454726
74	正丙基环戊烷	$C_8H_{16}$	114.937801	-0.563394	3.895757	-1.618298	0.341415	-0.205583	5.827732
75	正丁基环戊烷	$C_9H_{18}$	107.598643	-0.508295	3.839478	-1.586222	0.332249	-0.198557	5.437603
76	正戊基环戊烷	$C_{10}H_{20}$	102.763331	-0.472323	3.813893	-1.578912	0.331513	-0.198443	5.162263
77	正己基环戊烷	$C_{11}H_{22}$	98.332790	-0.437474	3.777628	-1.556640	0.324534	-0.192901	4.913858
78	正庚基环戊烷	$C_{12}H_{24}$	94.533455	-0.409516	3.751674	-1.543014	0.320715	-0.189683	4.710459
79	正辛基环戊烷	$C_{13}H_{26}$	90.859654	-0.382964	3.724312	-1.527744	0.316575	-0.186933	4.524651
80	正壬基环戊烷	$C_{14}H_{28}$	93.295488	-0.403330	3.823710	-1.677679	0.414621	-0.424045	4.554397
81	正癸基环戊烷	$C_{15}H_{30}$	86.584350	-0.349611	3.697937	-1.516844	0.313974	-0.185019	4.270983
82	正十一烷基环戊烷	$C_{16}H_{32}$	84.346040	-0.332701	3.680168	-1.506419	0.310955	-0.182625	4.147913
83	正十二烷基环戊烷	$C_{17}H_{34}$	82.316163	-0.317828	3.664572	-1.496854	0.307942	-0.180134	4.047492
84	正十三烷基环戊烷	$C_{18}H_{36}$	80.694360	-0.305941	3.654149	-1.492292	0.307039	-0.179763	3.960502
85	正十四烷基环戊烷	$C_{19}H_{38}$	78.005829	-0.286188	3.623224	-1.467306	0.298303	-0.172239	3.842255
86	正十五烷基环戊烷	$C_{20}H_{40}$	78.006736	-0.285887	3.636573	-1.484165	0.305019	-0.178235	3.813384

续表

分子量 WM	沸点, $T_b$ K	偏心因子 $\omega$	临界温度 $T_c$ K	临界压力, $P_c$ $\text{kPa} \times 10^{-3}$	临界体积, $V_c$ $\text{dm}^3/\text{kmol}$ $\times 10^{-3}$	临界压缩 因子, $Z_c$	Rackett 常数, $Z_{RA}$	等张比容, $P$	压缩因子 $Z$ (15.5°C, 101.3kPa)	总燃烧热 (15.5°C 101.3kPa) $\text{J}/\text{m}^3/37258.9$
128.259	410.17	0.3379	588.55	2.430	0.506	0.250		376.5		
142.286	447.304	0.4902	617.65	2.100	0.603	0.246	0.2503	431.1		
142.286	440.18		610.35	2.100	0.596			(428.8)		
142.286	430.65		601.15	2.180	0.545			(431.0)		
142.286	432.46		627.35	2.400	0.521			(420.8)		
156.30	429.45	0.5349	638.73	1.965	4.220	0.242		470.9		
								(468.8)		
170.33	489.43	0.5622	658.25	1.820	4.180	0.237	0.2466	510.8		
								(508.8)		
184.35	508.58	0.6231	675.75	1.724	4.200	0.237		550.4		
								(548.8)		
198.38	526.67	0.6797	691.85	1.620	4.200	0.234		591.5		
								(588.8)		
212.41	485.56	0.7060	706.75	1.517	4.200	0.229		631.8		
								(628.8)		
226.43	559.94	0.7418	720.55	1.420	4.200	0.225		671.8		
								(668.8)		
240.46	575.30	0.7699	733.35	1.317	4.200	0.217		(715.5)		
								(712.7)		
254.48	589.86	0.7895	745.25	1.213	3.900	0.196		(755.8)		
								(753.0)		
268.51	603.75	0.8271	756.15	1.117	4.200	0.200		(796.1)		
								(793.3)		
282.54	616.95	0.9065	767.15	1.117	4.2	0.198		(836.4)		
								(833.6)		
70.135	322.402	0.1923	511.75	4.508	0.260	0.274	0.2687	205.0		
84.162	344.954	0.2395	532.79	3.784	0.319	0.273		242.8		
98.189	376.617	0.2826	569.52	3.397	0.375	0.269		283.3		
98.189	360.632	0.2727	547.15	3.550	0.360	0.274		281.2		
98.189	372.682	0.2692	565.15	3.450	0.37	0.270		(283.0)		
98.189	365.016	0.2692	553.15	3.450	0.36	0.271		(283.0)		
98.189	363.92	0.2975	551.15	3.450	0.36	0.280		(283.0)		
98.189	364.872	0.2584	553.15	3.450	0.36	0.271		(283.0)		
112.216	404.111	(0.3350)	603.15	2.999	0.425	0.254		323.2		
126.243	429.77		631.15	2.726	0.482			362.9		
								(403.0)		
140.270	453.65	(0.4277)						(443.0)		
154.29	476.05	(0.4764)	660.15	2.140				(483.0)		
168.31	497.05	(0.5146)	678.95	1.950				(523.0)		
182.34	516.65	(0.5639)	694.45	1.790				(563.0)		
196.36	535.15	(0.6101)	710.55	1.650				(603.0)		
210.39	552.53	(0.6538)	723.75	1.520				(643.0)		
224.42	568.95	(0.6740)	738.35	1.410				(683.0)		
238.44	584.35	(0.7193)	749.85	1.300				(723.0)		
252.47	599.05	(0.7546)	761.35	1.210				(763.0)		
266.49	613.15	(0.7893)	772.35	1.130				(803.0)		
280.52	626.15	(0.8333)	780.35	1.030						

序号	物质中文名	分子式	理想气体焓、熵、热容方程系数						
			A	B	$C \times 10^3$	$D \times 10^6$	$E \times 10^9$	$F \times 10^{13}$	G
87	环己烷	$C_6H_{12}$	108.312586	-0.627383	3.446132	-0.525507	-0.437375	1.667307	6.150081
88	甲基环己烷	$C_7H_{14}$	107.598271	-0.705014	4.103364	-1.528647	0.183407	0.266355	6.267710
89	乙基环己烷	$C_8H_{16}$	60.932524	-0.355703	3.224107	-0.384025	-0.541312	2.002343	4.583946
90	1,1-二甲基环己烷	$C_8H_{16}$	51.258341	-0.263581	2.744777	0.382273	-1.030123	3.125176	4.103411
91	顺-1,2-二甲基环己烷	$C_8H_{16}$	76.381304	-0.453125	3.360049	-0.454967	-0.535861	2.050777	4.997174
92	反-1,2-二甲基环己烷	$C_8H_{16}$	102.145383	-0.692812	4.230263	-1.763792	0.355849	-0.201498	5.959775
93	顺-1,3-二甲基环己烷	$C_8H_{16}$	78.329981	-0.482670	3.542301	-0.800294	-0.260662	1.289534	5.056258
94	反-1,3-二甲基环己烷	$C_8H_{16}$	73.130929	-0.490489	3.766597	-1.367826	0.219808	-0.080640	5.076968
95	顺-1,4-二甲基环己烷	$C_8H_{16}$	73.130929	-0.490489	3.766596	-1.367826	0.219808	-0.080640	5.025081
96	反-1,4-二甲基环己烷	$C_8H_{16}$	53.309088	-0.270362	2.899901	0.128740	-0.875902	2.779736	4.076719
97	正丙基环己烷	$C_9H_{18}$	98.329952	-0.709997	4.422201	-2.048251	0.482980	-0.325923	5.997022
98	正丁基环己烷	$C_{10}H_{20}$	81.981219	-0.550262	4.038309	-1.600415	0.226024	0.246249	5.209301
99	正戊基环己烷	$C_{11}H_{22}$	92.197244	-0.612426	4.273074	-1.947562	0.451147	-0.299312	5.418063
100	正己基环己烷	$C_{12}H_{24}$	78.849307	-0.500344	4.047143	-1.752484	0.381814	-0.238863	4.853130
101	正庚基环己烷	$C_{13}H_{26}$	85.574982	-0.525597	4.126671	-1.843750	0.419394	-0.275424	4.930313
102	正辛基环己烷	$C_{14}H_{28}$	77.631506	-0.458687	4.001504	-1.741811	0.384674	-0.245455	4.583284
103	正壬基环己烷	$C_{15}H_{30}$	73.949960	-0.420752	3.925086	-1.668519	0.354578	-0.214952	4.379771
104	正癸基环己烷	$C_{16}H_{32}$	82.101473	-0.464863	4.046102	-1.798489	0.406681	-0.263858	4.554709
105	正十一烷基环己烷	$C_{17}H_{34}$	75.155665	-0.406796	3.926615	-1.692933	0.368439	-0.229410	4.264078
106	正十二烷基环己烷	$C_{18}H_{36}$	71.455860	-0.372696	3.861036	-1.639167	0.350268	-0.215659	4.086446
107	正十三烷基环己烷	$C_{19}H_{38}$	71.865306	-0.370036	3.873361	-1.663863	0.362480	-0.227897	4.052226
108	正十四烷基环己烷	$C_{20}H_{40}$	69.044565	-0.342482	3.816913	-1.612572	0.343290	-0.209872	3.909369
109	乙烯	$C_2H_4$	60.093536	0.606930	1.288788	1.033636	-1.099537	2.929326	4.489853
110	丙烯	$C_3H_6$	66.369991	0.128994	2.646910	-0.671019	-0.055225	0.494690	5.117553
111	正丁烯	$C_4H_8$	76.155333	-0.077537	3.213039	-1.275922	0.261813	-0.153755	5.138521
112	顺-2-丁烯	$C_4H_8$	101.751917	-0.179174	3.040359	-0.928242	0.032840	0.386271	5.696056
113	反-2-丁烯	$C_4H_8$	40.122265	0.155046	2.676286	-0.760249	0.038694	0.195440	3.908880
114	2-甲基丙烯	$C_4H_8$	34.814312	0.138200	2.850686	-0.994755	0.170328	-0.076840	3.876160
115	正戊烷	$C_5H_{12}$	70.141856	-0.028781	3.173157	-1.232137	0.245103	-0.138847	4.363568
116	顺-2-戊烯	$C_5H_{10}$							
117	反-2-戊烯	$C_5H_{10}$							
118	2-甲基-1-丁烯	$C_5H_{10}$							
119	正己烯	$C_6H_{12}$	63.931831	-0.017846	3.162701	-1.196596	0.225939	-0.118897	3.941543
120	2,3-二甲基-2-丁烯	$C_6H_{12}$	31.642881	0.155879	2.322428	0.142706	-0.761540	2.665474	3.046948
121	正庚烯	$C_7H_{14}$	62.912043	-0.032685	3.209958	-1.227594	0.234311	-0.125134	3.746044
122	正辛烯	$C_8H_{16}$	63.519780	-0.053959	3.271718	-1.278184	0.251637	-0.140005	3.644528
123	正壬烯	$C_9H_{18}$	63.094564	-0.064428	3.306769	-1.305337	0.260339	-0.146586	3.540638
124	正癸烯	$C_{10}H_{20}$	60.316832	-0.055226	3.292792	-1.286107	0.251849	-0.138976	3.374782
125	正十一烯	$C_{11}H_{22}$	61.193664	-0.069808	3.332598	-1.319450	0.263639	-0.149371	3.340537
126	正十二烯	$C_{12}H_{24}$	57.952964	-0.054776	3.303953	-1.288831	0.251440	-0.138422	3.186648
127	正十三烯	$C_{13}H_{26}$	58.669210	-0.064476	3.326188	-1.302515	0.254626	-0.140188	3.161340
128	正十四烯	$C_{14}H_{28}$	59.747543	-0.076207	3.355165	-1.325859	0.262108	-0.145508	3.154964
129	正十五烯	$C_{15}H_{30}$	57.780236	-0.066731	3.335164	-1.302003	0.251769	-0.135744	3.058505
130	正十六烯	$C_{16}H_{32}$	59.389339	-0.084092	3.384826	-1.354812	0.273895	-0.157003	3.089307
131	正十七烯	$C_{17}H_{34}$	58.369807	-0.080432	3.378732	-1.347133	0.270658	-0.154164	3.031603
132	正十八烯	$C_{18}H_{36}$	60.957877	-0.101234	3.427515	-1.389450	0.284909	-0.165282	3.091104

续表

分子量 WM	沸点, $T_b$ K	偏心因子 $\omega$	临界温度 $T_c$ K	临界压力, $P_c$ kPa $\times 10^{-3}$	临界体积, $V_c$ dm <sup>3</sup> /kmol $\times 10^{-3}$	临界压缩 因子, $Z_c$	Rackett 常数, $Z_{RA}$	等张比容, $P$	压缩因子 $Z$ (15.5°C, 101.3kPa)	总燃烧热 (15.5°C 101.3kPa) J/m <sup>3</sup> /37258.9
84.162	353.869	0.2144	553.55	4.070	0.308	0.273	0.2729	242.1		
98.189	374.084	0.2333	572.19	3.471	0.368	0.268	0.2699	280.0		
112.216	404.945	0.2426	609.15	3.040	0.450	0.268		320.7		
112.216	392.700	0.2376	591.15	2.940	0.450	0.271		318.4		
112.216	402.889	0.2363	606.15	2.940	0.460	0.272		317.3		
112.216	396.578	0.2416	596.15	2.940	0.460	0.277		320.3		
112.216	393.245	0.2414	591.15	2.940	0.450	0.271		321.3		
112.216	397.609	0.2356	598.15	2.940	0.460	0.276		318.8		
112.216	397.480	0.2348	598.15	2.940	0.460	0.276		319.0		
112.216	392.508	0.2429	590.15	2.940	0.450	0.271		322.4		
126.243	429.897	(0.2577)	639.15	2.807	0.477	0.252		360.4		
140.270	454.131	(0.3618)	667.15	3.151	0.534	(0.304)		400.3		
154.29	476.82		667.15	2.210	3.900			(440.8)		
168.31	497.85		685.15	2.040	3.930			(480.8)		
182.34	518.05		703.15	1.850	3.960			(520.8)		
196.36	536.75		722.15	1.700	3.980			(560.8)		
210.39	554.65		736.15	1.550	4.000			(600.8)		
224.42	570.74	(0.5825)	750.15	1.36	4.180	(0.204)		(640.8)		
238.44	586.35		764.15	1.27	4.19			(680.8)		
252.47	601.05		776.15	1.17	4.20			(720.8)		
266.49	615.05		789.15	1.08	4.20			(760.8)		
280.52	628.15		798.15	1.00	4.21			(800.8)		
28.054	169.470	0.0856	282.36	5.032	0.129	0.277	0.2810	99.5	0.9958	1609.4
42.081	225.43	0.1477	364.75	4.610	0.181	0.275	0.2785	139.9	0.9844	2370.3
56.108	266.90	0.1874	419.55	4.020	0.240	0.276	0.2736	179.1	0.9704	3174.1
56.108	276.868	0.2044	435.58	4.200	0.234	0.272	0.2705	177.7	0.9661	3180.2
56.108	274.03	0.2138	428.63	4.100	0.238	0.274	0.2721	177.7	0.9662	3174.8
56.108	266.254	0.1898	417.90	4.000	0.239	0.275	0.2727	176.9	0.9689	3159.4
70.135	303.109	0.2450	464.78	3.550	0.305	0.280	0.2944	219.4		
70.135	310.082	0.2403	476.15	3.650	0.300	0.279		218.2		
70.135	309.493	0.2372	475.15	3.650	0.30	0.279		218.2		
70.135	304.304	0.2321	465.15	3.450	0.310	0.277		(216.9)		
84.162	336.625	0.2848	504.03	3.140	0.368	0.278		259.0		
84.162	346.347	(0.2389)	524.15	(3.364)	(0.351)	(0.271)		250.1		
98.189	366.791	0.3580	533.29	2.840	0.44	0.281		299.1		
112.216	394.438	0.3858	566.65	2.600	0.51	0.284		338.8		
126.243	420.037	0.4299	592.15	2.300	0.58	0.278		379.1		
140.270	443.749	0.4912	615.15	2.200	0.65	0.280		(419.1)		
154.29	465.82	0.5180	637.15	1.993				(459.1)		
168.31	486.51	(0.5575)	657.15	1.855				(499.1)		
182.34	505.93	(0.5981)	674.15	1.703				(539.1)		
196.36	524.25	(0.6441)	689.15	1.565				(579.1)		
210.39	541.54	(0.6822)	704.15	1.455				(619.1)		
224.42	558.02	(0.7213)	717.15	1.338				(659.1)		
238.44	573.48		728.15	1.234				(699.1)		
252.47	587.97	(0.8066)	739.15	1.145				(739.1)		

序号	物质中文名	分子式	理想气体焓、熵、热容方程系数						
			A	B	$C \times 10^3$	$D \times 10^6$	$E \times 10^9$	$F \times 10^{13}$	G
133	正十九烯	$C_{19}H_{38}$	53.572362	-0.051297	3.310410	-1.272961	0.240081	-0.125595	2.830809
134	正二十烯	$C_{20}H_{40}$	53.910865	-0.056938	3.327352	-1.289921	0.247069	-0.132615	2.826381
135	环戊烯	$C_5H_8$	83.920312	-0.250908	2.228924	0.451583	-0.948697	2.850605	5.325994
136	丙二烯	$C_3H_4$	58.930117	0.141284	2.799840	-1.441451	0.455293	-0.630719	4.795585
137	1,2-丁二烯	$C_4H_6$	41.071740	0.165629	2.622471	-1.025628	0.205198	-0.116539	4.043648
138	1,3-丁二烯	$C_4H_6$	94.816692	-0.421207	4.259386	-2.880527	1.179493	-2.082612	6.362204
139	1-反-3-戊二烯	$C_5H_8$							
140	1,2-戊二烯	$C_5H_8$							
141	2-甲基-1,3-丁二烯	$C_5H_8$							
142	乙炔	$C_2H_2$	81.982824	0.094773	4.114197	-4.037767	2.133692	-4.415085	6.190109
143	丙炔	$C_3H_4$	35.379460	0.336564	2.441791	-1.193395	0.390470	-0.615749	3.970319
144	丁炔	$C_4H_6$	23.575452	0.223307	2.608336	-1.089696	0.257056	-0.234698	3.688362
145	2-丁炔	$C_4H_6$							
146	苯	$C_6H_6$	84.467062	-0.513560	3.248740	-1.543913	0.365037	-0.248222	5.631041
147	甲苯	$C_7H_8$	74.164254	-0.423499	3.184606	-1.439865	0.326620	-0.212757	5.167448
148	乙苯	$C_8H_{10}$	70.553907	-0.392022	3.308891	-1.527851	0.356058	-0.238744	4.849365
149	1,2-二甲基苯	$C_8H_{10}$	32.516503	-0.062591	2.518936	-0.656669	-0.112362	0.749621	3.271024
150	1,3-二甲基苯	$C_8H_{10}$	59.286530	-0.288481	3.010730	-1.254453	0.258772	-0.151750	4.379096
151	1,4-二甲基苯	$C_8H_{10}$	43.042514	-0.125980	2.487353	-0.534952	-0.200507	0.955170	3.634082
152	正丙基苯	$C_8H_{10}$	75.604397	-0.418290	3.517918	-1.721802	0.431672	-0.305210	4.835570
153	异丙基苯	$C_8H_{10}$	58.761110	-0.354917	3.335217	-1.509732	0.341841	-0.223950	4.458348
154	1-甲基-2-乙基苯	$C_9H_{12}$	46.781652	-0.184871	3.042355	-1.306520	0.283414	-0.176200	3.728696
155	1-甲基-3-乙基苯	$C_9H_{12}$	44.250126	-0.154578	2.743139	-0.764222	-0.108225	0.830056	3.715051
156	1-甲基-4-乙基苯	$C_9H_{12}$	42.974246	-0.125992	2.648471	-0.667365	-0.150253	0.893030	3.553136
157	1,2,3-三甲基苯	$C_9H_{12}$	-4.634067	0.312662	1.400135	0.902775	-1.089106	3.049896	1.550241
158	1,2,4-三甲基苯	$C_9H_{12}$	-8.038028	0.330231	1.390642	0.882534	-1.056736	2.927990	1.500014
159	1,3,5-三甲基苯	$C_9H_{12}$	56.516497	-0.234145	2.950900	-1.179025	0.233437	-0.130219	3.926755
160	正丁基苯	$C_{10}H_{14}$	67.579022	-0.309966	3.299554	-1.461232	0.325949	-0.209979	4.259343
161	正戊基苯	$C_{11}H_{16}$	63.635034	-0.271857	3.273226	-1.415666	0.307497	-0.193170	4.012909
162	正己基苯	$C_{12}H_{18}$	65.399816	-0.275682	3.332449	-1.453946	0.319677	-0.202470	3.965012
163	正庚基苯	$C_{13}H_{20}$	88.134861	-0.456393	3.889187	-2.073447	0.585181	-0.466220	4.705652
164	正辛基苯	$C_{14}H_{22}$	66.116713	-0.268020	3.396105	-1.489776	0.331167	-0.211637	3.827009
165	正壬基苯	$C_{15}H_{24}$	61.502045	-0.229028	3.333698	-1.415810	0.301353	-0.184595	3.608940
166	正癸基苯	$C_{16}H_{26}$	63.505592	-0.239493	3.388126	-1.461541	0.318721	-0.199624	3.620457
167	正十一基苯	$C_{17}H_{28}$	62.630899	-0.230080	3.391940	-1.458553	0.317608	-0.198981	3.545373
168	正十二基苯	$C_{18}H_{30}$	61.376022	-0.215848	3.376144	-1.432925	0.306574	-0.188464	3.454360
169	正十三基苯	$C_{19}H_{32}$	61.714130	-0.215345	3.394118	-1.442931	0.309203	-0.190443	3.427409
170	正十四基苯	$C_{20}H_{34}$	59.811438	-0.198260	3.369311	-1.410840	0.295713	-0.177320	3.327870
171	苯乙烯	$C_8H_8$							
172	2-甲基苯乙烯	$C_9H_{10}$							

注:(1)括号里的临界性质值是估算值;

(2)括号里的  $\omega$  和  $Z_c$  是用临界性质的估算值计算而得到的;

(3)等张比容  $P$  值来自 J. J. Jasep, J. Phys. Chem. Ref. Data, 1. 841(1972), 其中括号内的值是刘国芬根据文献[1]中 10A1.4 的基团贡献法计算而得。

续表

分子量 WM	沸点, $T_b$ K	偏心因子 $\omega$	临界温度 $T_c$ K	临界压力, $P_c$ $\text{kPa} \times 10^{-3}$	临界体积, $V_c$ $\text{dm}^3/\text{kmol}$ $\times 10^{-3}$	临界压缩 因子, $Z_c$	Rackett 常数, $Z_{RA}$	等张比容, $P$	压缩因子 $Z$ (15.5°C, 101.3kPa)	总燃烧热 (15.5°C 101.3kPa) $\text{J}/\text{m}^3/37258.9$
266.49	601.75		750.15	1.076				(779.1)		
280.52	615.55		759.15	0.993				(819.1)		
68.119	317.382							193.0		
40.065	238.65	0.3125	393.15	(5.470)	(0.162)	0.272		(127.2)	0.9828	2242
54.092	284.00	(0.3394)	(444.15)	(4.500)	(0.219)	(0.268)		(165.8)	0.969	3033
54.092	268.739	0.1814	425.15	4.330	0.221	0.270	0.2713	(164.4)	0.965	2985
68.119	315.172	(0.1754)	(496.15)	(3.990)	(0.276)	(0.267)		(204.4)		
68.119	317.996	(0.1725)	(503.15)	(4.070)	(0.276)	(0.269)		(205.8)		
68.119	307.207	(0.1642)	(484.15)	(3.850)	(0.276)	(0.264)		(200.7)		
26.038	189.15	0.1841	308.32	6.139	0.113	0.271	0.2712	88.6	0.9925	1483.7
40.0652	249.94	0.2176	402.39	(5.628)	0.164	0.276	0.2703	122.9	0.9835	2232.8
54.092	281.22		463.65	(4.712)	(0.221)	0.270		(169.6)	0.9650	3049
54.092	300.13		488.15	(5.084)	(0.221)			(169.6)		
78.114	353.244	0.2100	562.16	4.898	0.259	0.271	0.2696	205.7		
92.143	383.779	0.2566	591.79	4.109	0.316	0.264	0.2646	245.7		
106.168	409.35	0.3011	617.17	3.609	0.374	0.264	0.2626	285.1		
106.168	417.579	0.3136	630.35	3.733	0.369	0.263	0.2633	282.5		
106.168	412.268	0.3311	617.05	3.541	0.376	0.259	0.2593	284.3		
106.168	411.51	0.3243	616.25	3.511	0.379	0.260	0.2589	284.6		
120.195	432.391	0.3444	638.38	3.200	0.440	0.265	0.2599	323.7		
120.195	425.563	0.3353	631.15	3.209	0.428	0.262	0.2617	(322.9)		
120.195	438.33	0.2941	651.15	3.040	0.460	0.257		320.1		
120.195	434.48	0.3232	637.15	2.840	0.490	0.261		322.9		
120.195	435.164	0.3221	640.15	2.940	0.470	0.261		323.3		
120.195	449.266	0.3934	664.53	3.454	0.414	0.259		318.0		
120.195	442.53	0.3964	649.13	3.232	0.430	0.258		320.6		
120.195	437.893	0.3980	637.36	3.127	0.433	0.256		322.1		
134.222	456.455	0.3923	660.55	3.887	0.497	0.261		363.0		
148.24	478.55		679.95	2.61	3.71			401.9		
162.26	499.25		697.55	2.38	3.80			441.8		
176.29	519.15		713.55	2.20	3.90			(481.4)		
190.32	537.55		728.15	2.03	3.90			(521.4)		
204.34	555.15		741.15	1.90	3.70			(561.4)		
218.37	571.04		753.15	1.79	4.00			(601.4)		
232.39	586.35		764.15	1.67	4.10			(641.4)		
246.42	519.57		774.15	1.58	4.100			(681.4)		
260.45	614.45		783.15	1.50	4.100			(721.4)		
274.47	627.15		792.15	1.42	4.100			(761.4)		
104.152	418.31		647.55	3.999	0.369			(273.2)		
118.179	442.99		679.15	3.648	0.375			(309.5)		



## 第二章 烃类特性

### 第一节 纯烃及混合物偏心因子<sup>①</sup>

#### 一、功 能

计算纯物质及混合物偏心因子。

#### 二、方 法 说 明

##### (一) 数学模型

$$\omega = -\log P_{r,0.7}^* - 1.00 \quad (2-1)$$

式中:

- $\omega$  —— 偏心因子;
- $P_{r,0.7}^*$  —— 对比温度  $T_r=0.7$  时的对比蒸气压,  $P^*/P_c$ ;
- $P^*$  —— 蒸气压, kPa;
- $P_c$  —— 临界压力, kPa;
- $T_r$  —— 对比温度,  $T/T_c$ ;
- $T$  —— 温度, K;
- $T_c$  —— 临界温度, K。

更通用的方法是:

$$\omega = [\ln P_r^* - (\ln P_r^*)^{(0)}] / (\ln P_r^*)^{(1)} \quad (2-2)$$

$$(\ln P_r^*)^{(0)} = 5.92714 - 6.09648/T_r - 1.28862 \ln T_r + 0.169347 T_r^6 \quad (2-3)$$

$$(\ln P_r^*)^{(1)} = 15.2518 - 15.6875/T_r - 13.4721 \ln T_r + 0.43577 T_r^6 \quad (2-4)$$

式中:

- $P_r^*$  —— 任意对比温度  $T_r$  下的对比蒸气压;
- $(\ln P_r^*)^{(0)}$  —— 关联项, 由式 (2-3) 计算;
- $(\ln P_r^*)^{(1)}$  —— 关联项, 由式 (2-4) 计算。

混合物偏心因子由下式计算:

$$\omega = \sum_{i=1}^n x_i \omega_i \quad (2-5)$$

式中:

- $n$  —— 混合物中组分数;
- $x_i$  —— 组分  $i$  分子分数;
- $\omega_i$  —— 组分  $i$  偏心因子。

##### (二) 说明

<sup>①</sup> 本节由何良知编制。