

(京)新登字 039 号

0004/10

本手册为 1982 年卢焕章等编著的《石油化工基础数据手册》的续编。全书分为三部分：第一部分介绍纯物质物性的一些新的、易于使用的、准确的估算方法，分析其优缺点，并提出推荐意见；第二部分以列表形式新提供了 552 种有别于原编 387 种的化合物的 21 项物性数据，包括中英文名称、分子式、结构式、沸点、熔点、临界温度、临界压力、临界体积、临界压缩因子、偏心因子及偶极矩数据，气体性质（热容、粘度、导热系数）液体性质（蒸汽压、蒸发焓、密度、热容、表面张力、粘度、导热系数）等；第三部分为附表，提供了由 552 种化合物的实验值回归的方程及相应的回归系数，且精度都很高，适用于在过程模拟中应用。

本手册可供化学化工、石油化工、精细化工、医药工业、轻工业等行业及相关部门的科研、设计、生产、教学等各方面人员使用，是一本有很大实用价值的工具书。

石油化工基础数据手册

续编

马沛生 等编著

责任编辑：何曙霓

封面设计：季玉芳

*

化学工业出版社出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号)

化学工业出版社印刷厂印刷

厂装订

新华书店北京发行所经销

*

开本 $850 \times 1168^{1/32}$ 印张 $42\frac{1}{2}$ 字数 1224 千字

1993 年 3 月第 1 版 1993 年 3 月北京第 1 次印刷

印数 1-8000 册

ISBN 7-5025-1105-9/TQ·642

定价 39.5 元

(京)工商广临字 257 号

序 言

本手册为 1982 年卢焕章等编著的《石油化工基础数据手册》的续编。原编自 1982 年出版后，因其便于为工程技术计算使用，并且数据丰富，深受广大读者欢迎，前后印刷 3 次，印数达 18010 册。

原编收集整理和验证了 387 个化合物的十几项物性。这些化合物在石油化工生产中都是很重要的。随着石油化工生产中对化学品加工深度的增加和精细化工产品品种的不断扩展与更新，涉及的有机物原料、产品、中间物、副产品种数已远超过 1000 个。因此，许多读者要求能寻找更多的与石油化工有关的物质的物性数据，这是我们编著出版本续编的主要出发点。进入 80 年代以来，数据工作愈来愈受到重视，国外有更多的数据中心进行化学化工数据的系统评选工作，有更多更好的数据手册出版；陆续开发了一批电子数据产品——数据库和估算程序系统；提出了许多更准确的估算方程，因此，从技术上也需要对原编作出补充。

本续编包括 552 个新化合物的 21 项物性，分为三个部分。第一部分主要介绍物性数据的估算方法。在本手册中只包括纯物质的物性，因此只介绍了纯物质的物性估算方法。第二部分占有本手册的最大篇幅，它提供了 552 个化合物的物性数据表。表头部分除了有中、英文名、分子式、结构式、分子量外，还提供了沸点、熔点、临界温度、临界压力、临界比容、临界压缩因子、偏心因子及偶极矩数据。气体性质（热容、粘度、和导热系数）和液体性质（蒸气压、蒸发焓、密度、热容、表面张力、导热系数）均采取列表形式，以表达不同温度下的物性值，所取温度范围大致上与原编相同，即液体一般由略高于熔点的温度至接近临界温度，气体至 1000 K。表中所载气体物性为常压（或稀薄压力）下的数据，液相则为饱和线上的数据。表中所列的数据的估算方法可见第一部分中的推荐意见。本书的第三部分是附表。

43982

本书的特点有以下几方面。

(1) 与原编相比，本续编的化合物的物性实验值少得多，收集有关的实验值的难度也大得多。本书的编者过去曾长期从事化工数据的收集整理工作，也拥有大型的化工数据库。编写本书时，使用了编者单位（天津大学化工系和中国科学院化工冶金研究所计算机化学开放实验室）的数据库，其中主要是烃类实验物性库 CEDEVH¹（微机版本），天津市化工物性数据库 TJCEDB，基于知识的有机物性数据系统 KB-OPDS（微机版本及 VAX 版本）等；除此，还系统收集和评选了这些化合物的最新物性数据。

(2) 由于本续编中所包括的化合物的物性实验值少，选择适宜的估算方法显得更重要。原编的估算方法主要选自 Reid 等所著“Properties of Gases and Liquids”第 3 版，1977。进入 80 年代后，Reid 等又出版了第 4 版（1987）；此外，也有其他几本有关物性估算方法的专著出版，其中有 Lyman 等所著“Handbook of Chemical Property Estimation Methods”，1982；Danner 和 Daubert 所著“Data Prediction Manual”，1985。这样，80 年代前只有一本基本有机物性估算方法专著的情况已经变化了。本书除了在这些专著中选择估算方法外，还系统地检索了文献中（至 1991 年）新的估算方法。

一些新的、易于使用的、准确的估算方法都在第一部分中作了介绍，按特点进行分类，并分析其优缺点，提出推荐意见。初步选定估算方法后，还用标准物质（包括本续编以内及以外的物质）的可靠物性数据进行考核，通过这样的考核，选定不同类化合物的适宜估算方法。在考核中，编者也充分利用了 KB-OPDS 系统的多物性模型选择和估算以及通用基团计算机处理程序。由于计算机大量介入，使工作量大的估算方法的研究工作在短时间内得以完成。本书的作者们曾长期从事物性估算方法的研究，已有许多论文发表，这些研究工作的成果对本书的编写起着重要的作用。

(3) 在本书的第一部分中，也介绍了各种物性的数据源，温度和压力对物性的影响及回归方程的选择。这些知识对读者也是很重要的。综合这些内容，本书的第一部分是第二部分的数据表的依据，也是有

关纯有机化合物物性的综合手册或指南。

(4) 本书的附表不是简单地转引其他一本或几本数据手册，而是提供了由这 552 个化合物的实验值回归的方程及相应的回归系数，读者可从此查到 1600 多个方程系数。这样的回归方程精度都很高，适用于在过程模拟中的应用。本续编所引用的回归方程系数，其大部分是本书编者所回归的。

(5) 计算机辅助编辑出版是本工作的又一特色。为使广大工程技术人员及科技工作者能尽早利用物性数据研究方面的最新成果，除了利用数据库程序系统和计算机加工数据表外，中科院化冶所利用 CCT 激光照排系统，承担了用计算机进行辅助编辑和排版工作，直到产生激光照排软片。这样，从开始排版至可以付诸印刷大约用了半年多时间，防止了数据排版过程中可能产生的错误，大大提高了出版手册的效率。

(6) 本续编所介绍的数据和估算方法均注明了文献出处，本书所提供的文献总数超过 400。

(7) 本续编基本采用 SI 单位。在少数估算方法中，为保持早期文献中公式及相应的数据表的原貌，一些计算中公式的单位未加更换。读者可按附表进行单位换算。

本书由天津大学马沛生主编，天津大学马沛生、史春英、刘文玉负责液体性质计算，中科院计算机化学开放实验室李晓霞、董茜、许志宏负责气体性质的计算及气体热容、粘度和导热系数的计算方法的编写。本书在编写过程中始终得到卢焕章同志的关怀和指导。李晓霞还负责全书的计算机排版。此外兰州石化设计院侯慈源曾参加部分液体性质的计算。参加计算工作的还有天津大学钟晓明、姜影、王淑芳、赵美玉、刘燕、杨西萍。中科院计算机化学开放实验室的周伯军、彭梅杉也参加了排版工作；郭力、周伯军在排版技术方面给予了帮助。

目 录

第一篇 物性数据与估算方法

第一章 基础物性	2
第一节 熔点和沸点	2
第二节 临界参数	4
第三节 偏心因子	14
第四节 偶极矩	16
第五节 Lennard-Jones 势能参数	16
第二章 蒸气压	18
第一节 蒸气压温度关联式	18
第二节 蒸气压的估算	21
第三章 蒸发焓	26
第一节 蒸发焓随温度的改变	27
第二节 沸点下的蒸发焓	29
第三节 估算不同温度下的蒸发焓	37
第四章 气体热容	40
第一节 数据与温度关联式	41
第二节 理想气体热容的估算	42
第三节 真实气体热容	50
第五章 液体热容	60
第一节 数据与温度关联式	61
第二节 液体热容的估算	62
第三节 定容热容	68
第六章 液体密度	68
第一节 数据与温度关联式	68
第二节 沸点下液体密度的估算	69

第三节	饱和液体密度的估算	70
第四节	过冷液体密度的计算或估算	79
第七章	气体粘度	87
第一节	数据与温度关联式	87
第二节	用势能函数模型估算气体粘度	88
第三节	气体粘度的其它估算方法	93
第四节	加压下气体粘度的计算	97
第八章	液体粘度	102
第一节	数据与温度关联式	102
第二节	液体粘度的估算	104
第三节	高压下液体粘度的估算	116
第九章	气体导热系数	117
第一节	数据与温度关联式	117
第二节	低压气体导热系数的估算	118
第三节	压力对气体导热系数的影响	123
第十章	液体导热系数	129
第一节	数据与温度关联式	129
第二节	估算方法	131
第三节	压力对液体导热系数的影响	136
第十一章	表面张力	137
第一节	数据与温度关联式	138
第二节	估算方法	139
第三节	外压对表面张力的影响	143
参考文献	144

第二篇 物性数据

物性数据表的说明	155
常用单位换算表	156

烷烃	158
1 2,3-二甲基丁烷	158
2 3-甲基己烷	160
3 3-乙基戊烷	162
4 2,2-二甲基戊烷	164
5 2,3-二甲基戊烷	166
6 2,4-二甲基戊烷	168
7 3,3-二甲基戊烷	170
8 2,2,3-三甲基丁烷	172
9 3-甲基庚烷	174
10 4-甲基庚烷	176
11 3-乙基己烷	178
12 2,2-二甲基己烷	180
13 2,3-二甲基己烷	182
14 2,4-二甲基己烷	184
15 2,5-二甲基己烷	186
16 3,3-二甲基己烷	188
17 3,4-二甲基己烷	190
18 2-甲基-3-乙基戊烷	192
19 3-甲基-3-乙基戊烷	194
20 2,2,3-三甲基戊烷	196
21 2,3,3-三甲基戊烷	198
22 2,3,4-三甲基戊烷	200
23 2,2,3,3-四甲基丁烷	202
24 2,2,3-三甲基己烷	204
25 2,2,4-三甲基己烷	206
26 2,2,5-三甲基己烷	208
27 3,3-二乙基戊烷	210
28 2,2,3,3-四甲基戊烷	212
29 2,2,3,4-四甲基戊烷	214

30	2,2,4,4- 四甲基戊烷	216
31	2,3,3,4- 四甲基戊烷	218
32	3,3,5- 三甲基庚烷	220
33	2,2,3,3- 四甲基己烷	222
34	2,2,5,5- 四甲基己烷	224
35	正十一烷	226
36	正十二烷	228
37	正十三烷	230
38	正十四烷	232
39	正十五烷	234
40	正十六烷	236
41	正十七烷	238
42	正十八烷	240
	烯烃和炔烃	242
43	顺-2- 己烯	242
44	反-2- 己烯	244
45	顺-3- 己烯	246
46	反-3- 己烯	248
47	3- 甲基-1- 戊烯	250
48	3- 甲基- 顺-2- 戊烯	252
49	3- 甲基- 反-2- 戊烯	254
50	2- 乙基-1- 丁烯	256
51	3,3- 二甲基-1- 丁烯	258
52	2,3,3- 三甲基-1- 丁烯	260
53	1- 壬烯	262
54	1- 癸烯	264
55	1- 十一烯	266
56	1- 十二烯	268
57	1,5- 己二烯	270
58	4- 甲基-1,3- 戊二烯	272

59	2,3-二甲基-1,3-丁二烯	274
60	1-己炔	276
61	2-己炔	278
62	3-己炔	280
63	1-庚炔	282
64	1-辛炔	284
65	1-壬炔	286
66	1-癸炔	288
67	丁二炔	290
环烷烃和环烯烃		292
68	甲基环丙烷	292
69	乙基环丙烷	294
70	1,1-二甲基环丙烷	296
71	1,顺-2-二甲基环丙烷	298
72	1,反-2-二甲基环丙烷	300
73	甲基环丁烷	302
74	乙基环丁烷	304
75	1,1-二甲基环戊烷	306
76	1,顺-2-二甲基环戊烷	308
77	1,反-2-二甲基环戊烷	310
78	1,顺-3-二甲基环戊烷	312
79	1,反-3-二甲基环戊烷	314
80	异丙基环戊烷	316
81	1-甲基-1-乙基环戊烷	318
82	1-甲基-顺-2-乙基环戊烷	320
83	1-甲基-反-2-乙基环戊烷	322
84	1-甲基-顺-3-乙基环戊烷	324
85	1-甲基-反-3-乙基环戊烷	326
86	1,1,2-三甲基环戊烷	328
87	1,1,3-三甲基环戊烷	330

88	1, 顺-2, 顺-3- 三甲基环戊烷	332
89	1, 顺-2, 反-3- 三甲基环戊烷	334
90	1, 反-2, 顺-3- 三甲基环戊烷	336
91	1, 顺-2, 顺-4- 三甲基环戊烷	338
92	1, 顺-2, 反-4- 三甲基环戊烷	340
93	1, 反-2, 顺-4- 三甲基环戊烷	342
94	正丁基环戊烷	344
95	正戊基环戊烷	346
96	正己基环戊烷	348
97	正庚基环戊烷	350
98	正辛基环戊烷	352
99	正壬基环戊烷	354
100	1,1- 二甲基环己烷	356
101	1, 顺-2- 二甲基环己烷	358
102	1, 反-2- 二甲基环己烷	360
103	1, 顺-3- 二甲基环己烷	362
104	1, 反-3- 二甲基环己烷	364
105	1, 顺-4- 二甲基环己烷	366
106	1, 反-4- 二甲基环己烷	368
107	异丙基环己烷	370
108	正丁基环己烷	372
109	异丁基环己烷	374
110	仲丁基环己烷	376
111	叔丁基环己烷	378
112	正戊基环己烷	380
113	正己基环己烷	382
114	正庚基环己烷	384
115	正辛基环己烷	386
116	环庚烷	388
117	环辛烷	390

118	环壬烷	392
119	环癸烷	394
120	顺十氢萘	396
121	反十氢萘	398
122	环丁烯	400
123	1- 甲基环戊烯	402
124	3- 甲基环戊烯	404
125	4- 甲基环戊烯	406
126	1- 乙基环戊烯	408
127	1- 甲基环己烯	410
128	3- 甲基环己烯	412
129	4- 甲基环己烯	414
130	1- 乙基环己烯	416
131	3- 乙基环己烯	418
132	1,3,5,7- 环辛四烯	420
芳烃		422
133	1- 甲基 -2- 乙基苯	422
134	1- 甲基 -3- 乙基苯	424
135	1- 甲基 -4- 乙基苯	426
136	1- 甲基 -2- 丙基苯	428
137	1- 甲基 -3- 丙基苯	430
138	1- 甲基 -4- 丙基苯	432
139	1- 甲基 -2- 异丙基苯	434
140	1- 甲基 -3- 异丙基苯	436
141	1- 甲基 -4- 异丙基苯	438
142	1,2- 二乙苯	440
143	1,3- 二乙苯	442
144	1,4- 二乙苯	444
145	1,2- 二甲基 -3- 乙基苯	446
146	1,2- 二甲基 -4- 乙基苯	448

147	1,3- 二甲基 -2- 乙基苯	450
148	1,3- 二甲基 -4- 乙基苯	452
149	1,3- 二甲基 -5- 乙基苯	454
150	1,4- 二甲基 -2- 乙基苯	456
151	1,2,3,4- 四甲基苯	458
152	1,2,3,5- 四甲基苯	460
153	1,2,4,5- 四甲基苯	462
154	正戊基苯	464
155	五甲苯	466
156	正己苯	468
157	1,2,4- 三乙基苯	470
158	1,3,5- 三乙基苯	472
159	1,2- 二异丙苯	474
160	1,3- 二异丙苯	476
161	1,4- 二异丙苯	478
162	六甲苯	480
163	正庚苯	482
164	正辛苯	484
165	顺 - β - 甲基苯乙烯	486
166	反 - β - 甲基苯乙烯	488
167	2- 甲基苯乙烯	490
168	3- 甲基苯乙烯	492
169	4- 甲基苯乙烯	494
170	苯乙炔	496
171	1,2- 二苯乙烷	498
172	蒈	500
173	2,3- 二氢化蒈	502
174	1- 甲基萘	504
175	2- 甲基萘	506
176	1,8- 二甲基萘	508

177	2,3-二甲基萘	510
178	2,6-二甲基萘	512
179	2,7-二甲基萘	514
180	1-乙基萘	516
卤代烃		518
181	二氟甲烷	518
182	氟乙烷	520
183	1,1-二氟乙烷	522
184	1,2-二氟乙烷	524
185	1,1,1-三氟乙烷	526
186	五氟乙烷	528
187	全氟丙烷	530
188	全氟正丁烷	532
189	全氟环丁烷	534
190	全氟正戊烷	536
191	全氟正己烷	538
192	全氟环己烷	540
193	1,2,3,4-四氟苯	542
194	1,2,3,5-四氟苯	544
195	1,2,4,5-四氟苯	546
196	五氟苯	548
197	六氟苯	550
198	全氟正庚烷	552
199	全氟甲基环己烷	554
200	三氟甲苯	556
201	五氟甲苯	558
202	全氟甲苯	560
203	全氟正辛烷	562
204	1,1,1,2-四氟乙烷	564
205	2-氯丙烷	566

206	1,1- 二氯丙烷	568
207	1,2- 二氯丙烷	570
208	1,3- 二氯丙烷	572
209	2,2- 二氯丙烷	574
210	1,2,3- 三氯丙烷	576
211	顺-1- 氯 -1- 丙烯	578
212	反-1- 氯 -1- 丙烯	580
213	2- 氯 -1- 丙烯	582
214	3- 氯 -1- 丙烯	584
215	1,2,3- 三氯丙烯	586
216	全氯丙烯	588
217	1- 氯丁烷	590
218	2- 氯丁烷	592
219	1- 氯 -2- 甲基丙烷	594
220	2- 氯 -2- 甲基丙烷	596
221	1,1- 二氯丁烷	598
222	1,2- 二氯丁烷	600
223	1,3- 二氯丁烷	602
224	2,2- 二氯丁烷	604
225	全氯丁二烯	606
226	1- 氯戊烷	608
227	1,2,3- 三氯苯	610
228	1,2,4- 三氯苯	612
229	1,3,5- 三氯苯	614
230	1,2,3,4- 四氯苯	616
231	1,2,3,5- 四氯苯	618
232	1,2,4,5- 四氯苯	620
233	五氯苯	622
234	三溴甲烷	624
235	1,2- 二溴乙烷	626

236	氟五氯乙烷	628
237	1,1- 二氟 -1,2,2,2- 四氯乙烷	630
238	1,2- 二氟 -1,1,2,2- 四氯乙烷	632
239	1,1,1- 三氟 -2,2,2- 三氯乙烷	634
240	1,1,2- 三氟 -1,2,2- 三氯乙烷	636
241	1,1,1,2- 四氟 -2,2- 二氯乙烷	638
242	1,1,2,2- 四氟 -1,2- 二氯乙烷	640
243	1,1- 二氟 -2,2- 二氯乙烯	642
244	1- 氟 -1,1- 二氯乙烷	644
245	1,1- 二氟 -1- 氯乙烷	646
246	三氟一氯乙烯	648
247	1,1- 二氟 -2- 氯乙烯	650
248	1,3,5- 三氟 -2,4,6- 三氯苯	652
249	五氟氯苯	654
250	1,1,2,2- 四氟 -1,2- 二溴乙烷	656
醇和酚		658
251	丙炔醇	658
252	2- 戊醇	660
253	3- 戊醇	662
254	2- 甲基 -1- 丁醇	664
255	3- 甲基 -1- 丁醇	666
256	2- 甲基 -2- 丁醇	668
257	3- 甲基 -2- 丁醇	670
258	2,2- 二甲基丙醇	672
259	环戊醇	674
260	2- 己醇	676
261	3- 己醇	678
262	2- 甲基 -1- 戊醇	680
263	3- 甲基 -1- 戊醇	682
264	4- 甲基 -1- 戊醇	684

265	2-甲基-2-戊醇	686
266	3-甲基-2-戊醇	688
267	4-甲基-2-戊醇	690
268	2-甲基-3-戊醇	692
269	3-甲基-3-戊醇	694
270	2-乙基-1-丁醇	696
271	2,2-二甲基-1-丁醇	698
272	2,3-二甲基-2-丁醇	700
273	3,3-二甲基-2-丁醇	702
274	环己醇	704
275	2-庚醇	706
276	3-庚醇	708
277	4-庚醇	710
278	2-甲基-1-己醇	712
279	3-甲基-1-己醇	714
280	4-甲基-1-己醇	716
281	5-甲基-1-己醇	718
282	2-甲基-2-己醇	720
283	3-甲基-2-己醇	722
284	4-甲基-2-己醇	724
285	5-甲基-2-己醇	726
286	2-甲基-3-己醇	728
287	3-甲基-3-己醇	730
288	4-甲基-3-己醇	732
289	5-甲基-3-己醇	734
290	2-乙基-1-戊醇	736
291	3-乙基-1-戊醇	738
292	2,2-二甲基-1-戊醇	740
293	2,3-二甲基-1-戊醇	742
294	2,4-二甲基-1-戊醇	744