

流体热物理性质的计算

童景山 李敬 编著

清华大学出版社

流体热物理性质的计算

童景山 李 敬 编著

王补宣 审校



清华大学出版社

1982

内 容 简 介

本书详细地介绍了流体各种热物理性质的计算方法, 全书的主要内容有流体的临界性质、状态方程、热力学性质(焓、熵、逸度系数等)、汽液平衡、粘度、导热系数等。主要特点是以解析方法为主, 详细介绍了许多通用的及最新的计算方法, 并以例题加以说明, 还对各种方法的适用范围作了推荐, 对其精度给以一定的评述。此外还收集了一些重要的图和表, 以辅助计算。本书可作化工、热能、石油化工、核能及轻工类专业大学生、研究生的辅助教材, 也是同类专业研究院、设计院、工厂科技人员必备工具书。

流 体 热 物 理 性 质 的 计 算

童景山 李 敬 编 著

王补宣 审 校



清 华 大 学 出 版 社 出 版

北 京 海 淀 清 华 园

清 华 大 学 印 刷 厂 印 刷

新华书店北京发行所发行。各地新华书店经售



开本: 787×1092 1/16 印张 25 1/2 字数 620 (千字)

1982 年 6 月第一版 1982 年 7 月第一次印刷

印数: 1~20000

统一书号: 15235•36 定价: 3.10 元

前 言

本书是在编者于 1972 年编写的“物性手册”一书基础上改编的。当时鉴于化工系学生在搞化工设计计算中，迫切需要一本有关物性计算的工具书，我们编了一本十几万字的“手册”，以满足教学的需要。多年来，该手册一直是我校化工专业的重要教材之一。随着学生走向工作岗位，该书在实际工作中得到了更好的使用，很受欢迎，许多技术人员也来信索取。在使用过程中，有关人员还提出了不少宝贵意见，觉得某些章节的内容还不够充实，如流体的热力学函数计算及汽液平衡的计算等。他们希望丰富内容后能重印此书。由于原“手册”已用完，我们在原“手册”的基础上重新编写，内容增加了近二倍以上，但仍保留原“手册”的特点，以详细介绍计算方法为主，并附以一定数量的图表，以辅助计算。

编写本书的几本主要参考书是 Reid, Prausnitz, Sherwood, “The properties of Gases and Liquids”（气体和液体的性质，第二版及第三版）；佑滕一雄，“物性定数推算法”（1958）；Smith, “Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics”（化工热力学导论，1975）等。特别是上列第一本书内容极为丰富，对流体物性的各种计算方法作了全面介绍，概念阐述也比较清晰，深受各国读者的欢迎。此外，在编写过程中，我们又加进了多年来自己科研工作的部分成果，可供读者参考。

在本书的编写过程中得到了化工热力学组的同志和其它同志的支持和帮助，在此一并表示感谢。

由于编者水平有限，难免有不少缺点和错误，敬请广大读者批评指正。

编 者

1981 年 9 月

目 录

第一章 纯物质的临界常数及其它特性参数

1—1 临界态及临界常数的推算法	1
1—2 偏心因子	5
1—3 正常沸点	7
1—4 势能参数	12

第二章 流体的 $P-V-T$ 关系

2—1 理想气体定律	13
2—2 Redlich—Kwong 方程	13
2—3 Peng—Robinson 方程	15
2—4 新的三次型状态方程	16
2—5 Barner—Adler 方程	19
2—6 Martin—Hou 方程	21
2—7 Benedict—Webb—Rubin(BWR)方程	23
2—8 Lee—Erbar—Edmister 状态方程	30
2—9 维里方程	31
2—10 纯气体 $P-V-T$ 性质关系式的讨论	32
2—11 对比态原理及其应用	33
2—12 压缩因子	35
2—13 液体的 $P-V-T$ 性质	44

第三章 混合物的混合规则

3—1 混合物的状态方程	49
3—2 混合物的对比态法	49
3—3 Redlich—Kwong 状态方程	50
3—4 Barner—Adler 状态方程	52
3—5 Martin—Hou 状态方程	53
3—6 BWR 状态方程	54
3—7 Lee—Erbar—Edmister 状态方程	57
3—8 混合物第二维里系数	57
3—9 液体混合物的混合规则	58

第四章 流体的热力学性质

4—1 热力学性质的计算	59
4—2 偏差函数	62
4—3 偏差函数的计算	65
4—4 气体的热容	94
4—5 混合物临界性质的计算	100
4—6 混合物中组分的气相逸度	106

第五章 蒸汽压及蒸发潜热

5—1 Clapeyron 方程及 Clausius—Clapeyron 积分式	109
5—2 Antoine 蒸汽压方程	111
5—3 Riedel 蒸汽压方程	112
5—4 Frost—Kalkwarf—Thodos 蒸汽压方程	113
5—5 Riedel—Plank—Miller 蒸汽压方程	114
5—6 Thek—stiel 蒸汽压方程	115
5—7 蒸汽压列线图	116
5—8 纯物质的蒸发潜热	118
5—9 由 Clausius—Clapeyron 方程和实验蒸汽压数据计算 ΔH_v	118
5—10 用对比态定律计算 ΔH_v	119
5—11 用蒸汽压方程计算 ΔH_v	120
5—12 正常沸点下的 ΔH_v	121
5—13 蒸发潜热随温度的变化	127
5—14 蒸发潜热计算法的讨论与推荐	128
5—15 混合物之蒸发潜热	129
5—16 熔化热及升华热	130

第六章 汽—液平衡

6—1 汽液平衡的基本问题	135
6—2 纯组份液体的逸度	136
6—3 汽液平衡关系的简化	137
6—4 活度系数, Gibbs—Duhem 方程和超额自由焓	138
6—5 二元汽液平衡的计算	145
6—6 温度对汽液平衡的影响	147
6—7 二元汽液平衡的计算	148
6—8 多组份汽液平衡	153
6—9 活度系数的计算	159
6—10 高压汽液平衡	181

第七章 气体和液体的粘度

7—1 粘度的定义和单位	186
7—2 气体粘度理论及其它传递性质	186
7—3 低压气体粘度的计算	188
7—4 低压气体混合物的粘度	199
7—5 压力对纯气体粘度的影响	207
7—6 压力对气体混合物粘度的影响	213
7—7 纯液体粘度的推算法	217
7—8 常压液体粘度图	233
7—9 高温液体粘度的预计	236
7—10 液体混合物的粘度	237
7—11 不互溶液体混合物的粘度	244
7—12 电介质溶液粘度之计算	244
7—13 悬浮液的粘度计算	245

第八章 导热系数

8—1 定义和单位	246
8—2 单原子气体的导热系数	246
8—3 多原子气体导热系数	247
8—4 温度对低压气体导热系数的影响	256
8—5 压力对气体导热系数的影响	257
8—6 低压气体混合物导热系数	264
8—7 温度和压力对气体混合物导热系数的影响	270
8—8 纯液体导热系数的计算	272
8—9 温度对液体导热系数的影响	277
8—10 压力对液体导热系数的影响	278
8—11 液体混合物的导热系数	280
8—12 Prandtl 数的计算	286

第九章 扩散系数

9—1 基本概念及单位	288
9—2 低压双元气体体系扩散系数的计算	289
9—3 低压双元气体混合物扩散系数的经验关联式	293
9—4 压力对气体扩散的影响	296
9—5 温度对气体扩散的影响	298
9—6 多组元气体混合物的扩散	300
9—7 液体中的扩散	300

9—8 无限稀释双元溶液扩散系数的计算	301
9—9 双液系扩散与浓度的关系	305
9—10 温度对液体中扩散的影响	306
9—11 多组分液体混合物中之扩散	307
9—12 电解质溶液中的扩散	308
 第十章 表面张力	
10—1 纯液体表面张力的计算	311
10—2 纯液体表面张力随温度的变化	318
10—3 非水溶液表面张力的计算	319
10—4 水溶液的表面张力	325
10—5 液体混合物表面张力的新方程	328
 单位换算表	 332
附录 A Lennard—Jones势能参数	333
附录 B 468 种化合物的物性数据表	337
附录 C 纯气体和液体的压缩因子	382
附录 D 液体对比密度	394
参考文献	400

第一章 纯物质的临界常数及其它特性参数

在这一章，我们将介绍一些比较普通而又十分有用的纯物质常数，以及在缺乏实验数据时如何来计算它们。

1-1 临界态及临界常数的推算法

“临界态”是纯物质的一种特殊状态，汽相和液相之间不再存在分界面。临界点的参数叫作临界常数，包括临界温度、临界压力、临界体积等。在临界温度以上，不管施加多大的压力，都不能使气体液化。

临界温度、临界压力、临界体积是三个被广泛使用的纯物质常数。到目前为止，几乎没有新的测量数值。在附录 B 中，我们列出许多物质的临界常数，其中大部分是实验测定的。

下面介绍几种临界常数的计算方法

1. Lydersen 法

$$T_c = T_b [0.567 + \sum \Delta_T - (\sum \Delta_T)^2]^{-1} \quad (1-1.1)$$

$$P_c = M(0.34 + \sum \Delta_P)^{-2} \quad (1-1.2)$$

$$V_c = 40 + \sum \Delta_v \quad (1-1.3)$$

使用的单位分别是 K , atm , $cm^3 \cdot gmol^{-1}$ 。式中各个 Δ 量由表 1-1 查取。计算时，由分子中不同原子和基团的值加和求得。这种方法唯一需要的是正常沸点 T_b 和分子量 M 。

表 1-1 计算临界常数用的结构因素 Δ

基 团	Δ_T	Δ_P	Δ_v	基 团	Δ_T	Δ_P	Δ_v
非环状:				$\begin{array}{c} \\ =C H \end{array}$	0.018	0.198	45
$-CH_3$	0.020	0.227	55	$\begin{array}{c} \\ =C - \end{array}$	0.0	0.198	36
$\begin{array}{c} \\ -CH_2 \end{array}$	0.020	0.227	55	$=C=$	0.0	0.198	36
$\begin{array}{c} \\ -CH \end{array}$	0.012	0.210	51	$\equiv C H$	0.005	0.153	(36)
$\begin{array}{c} \\ -C \end{array}$	0.00	0.210	41	$\equiv C -$	0.005	0.153	(36)
$=CH_2$	0.018	0.198	45	环状:			
				$-CH_2-$	0.013	0.184	44.5

接上表

基 团	Δ_T	Δ_P	Δ_v	基 团	Δ_T	Δ_P	Δ_v
$\begin{array}{c} \\ -C-H \\ \end{array}$	0.012	0.192	46	$-COOH$ (酸)	0.085	(0.4)	80
$\begin{array}{c} \\ -C- \\ \end{array}$	(-0.007)	(0.154)	(31)	$-COO-$ (酯)	0.047	0.47	80
$\begin{array}{c} \\ =C-H \\ \end{array}$	0.011	0.154	37	$=O$ (除上述化合物之外)	(0.02)	(0.12)	(11)
$\begin{array}{c} \\ =C- \\ \end{array}$	0.011	0.154	36	氮:			
$=C=$	0.011	0.154	36	$-NH^2$	0.031	0.095	28
卤素:				$\begin{array}{c} \\ -N-H \text{ (非环状)} \end{array}$	0.031	0.135	(37)
$-F$	0.018	0.224	18	$\begin{array}{c} \\ -N-H \text{ (环状)} \end{array}$	(0.024)	(0.09)	(27)
$-Cl$	0.017	0.320	49	$\begin{array}{c} \\ -N- \text{ (非环状)} \end{array}$	0.014	0.17	(42)
$-Br$	0.010	(0.50)	(70)	$\begin{array}{c} \\ -N- \text{ (环状)} \end{array}$	(0.007)	(0.13)	(32)
$-I$	0.012	(0.83)	(95)	$-C \equiv N$	(0.060)	(0.36)	(80)
氧:				$-NO_2$	(0.055)	(0.42)	(78)
$-OH$ (醇)	0.082	0.06	(18)	硫:			
$-OH$ (酚)	0.031	(-0.02)	(3)	$-SH$	0.015	0.27	55
$-O-$ (非环状)	0.021	0.16	20	$-S-$ (非环状)	0.015	0.27	55
$-O-$ (环状)	(0.014)	(0.012)	(8)	$-S-$ (环状)	(0.008)	(0.24)	(45)
$\begin{array}{c} \\ -C=O \text{ (非环状)} \end{array}$	0.040	0.29	60	$=S$	(0.003)	(0.24)	(47)
$\begin{array}{c} \\ -C=O \text{ (环状)} \end{array}$	(0.033)	(0.2)	(50)	其他:			
$\begin{array}{c} \\ HC=O \text{ (醛)} \end{array}$	0.048	0.33	73	$\begin{array}{c} \\ -Si- \\ \end{array}$	0.03	(0.54)	
				$-B-$	(0.03)		

注: 对于氢, 无结构因素。所示的自由键都和氢以外的原子相连。括号中的值是基
于少量可靠实验数据得到的。由蒸汽压测量和有关的计算方法发现, 对两个缩合的饱和
环 $\begin{array}{c} | \\ C-H \\ / \backslash \end{array}$, 环的增量可以普遍地取为 $\Delta_T = 0.064$

表 1—2 是 Lydersen 方程的误差。

可见, Lydersen 方程在计算临界温度时很精确。然而, 使用 Nokay 方程时, 平均误差会更小。

2. Nokay 方程

$$\lg T_c = A + B \lg SG + C \lg T_b \quad (1-1.4)$$

式中 T_c ——临界温度, K;

T_b ——正常沸点, K;

SG ——液体碳氢化合物在 60°F 时对于同温度下水的比重。

常数 A 、 B 、 C 已由 Spencer 和 Daubert 使用实验数据进行了确定, 列于表 1—3 中。

表 1—2 Lydersen 方程的计算误差

性质	方程	典型误差
T_c	(1—1.1)	对于高分子量 ($M > 100$) 的非极性物质, 通常误差小于 2%~5%, 对于多功能极性基团分子, 例如乙二醇等, 误差不确定。
P_c	(1—1.2)	是 T_c 误差的二倍。
V_c	(1—1.3)	类似于 P_c , 或许更大些。

表 1—3 Nokay 方程中的常数 A 、 B 、 C

化合物的族	A	B	C
烷烃	1.359397	0.436843	0.562244
环烷烃	0.658122	-0.071646	0.811961
烯烃	1.095340	0.277495	0.655628
炔烃	0.746733	0.303809	0.799872
二烯烃	0.147578	-0.396178	0.994809
芳香烃	1.057019	0.227320	0.669286

然而, 目前还没有一种方法能将 Nokay 关联式用于含有多族特征的碳氢化合物, 例如含有侧烯烃键的芳香烃。

例 1—1 计算 1—乙氧基丙烷 $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$ 的临界温度、压力、体积。实验值分别是 500.6K , 32.1 atm , $339\text{ cm}^3\cdot\text{gmol}^{-1}$ 。

解:

$$\begin{aligned}
 T_b &= 335\text{K} & M &= 88.5 \\
 \Sigma \Delta_T &= 2(\text{CH}_3-) + 3(-\text{CH}_2-) + (-\text{O}-) \\
 &= (2)(0.020) + (3)(0.020) + 0.021 = 0.121 \\
 \Sigma \Delta_P &= (2)(0.227) + (3)(0.227) + 0.16 = 1.295 \\
 \Sigma \Delta_v &= (2)(55) + 3(55) + 20 = 295
 \end{aligned}$$

代入式(1—1.1)~(1—1.3)得

$$T_c = \frac{335}{0.567 + 0.121 - 0.121^2} = 497.8\text{K}$$

$$\text{误差} = \frac{497.8 - 500.6}{500.6} \times 100 = -0.6\%$$

$$P_c = \frac{88.5}{(0.34 + 1.295)^2} = 33.0 \text{ atm}$$

$$\text{误差} = \frac{33.0 - 32.1}{32.1} \times 100 = 2.8\%$$

$$V_c = 40 + 295 = 335 \text{ cm}^3 \cdot \text{gmol}^{-1}$$

$$\text{误差} = \frac{335 - 339}{339} \times 100 = -1.2\%$$

3. Riedel 法

对于碳氢化合物, 临界体积可用 Riedel 因子来计算

$$V_c = \frac{RT_c}{P_c} \left[3.72 + 0.26(\alpha_c - 7.0) \right]^{-1} \quad (1-1.5)$$

式中方括号内的数群为临界压缩因子的倒数; α_c 是 Riedel 因子, 它是物质的一个特性参数。使用实验的 T_c 和 P_c 值由式(1-1.5)计算 V_c 。所得的误差比用计算法计算 T_c 和 P_c 、再由式(1-1.5)计算 V_c 的误差为小。Riedel 因子可查表或由下式计算

$$\alpha_c = 0.9076 \left[1.0 + \frac{(T_b/T_c) \ln P_c}{1 - (T_b/T_c)} \right] \quad (1-1.6)$$

4. Vetter 法

这也是一个基团贡献法, 其关联式为

$$V_c = 33.04 + \left[\sum_i (\Delta V_i M_i) \right]^{1.029} \quad (1-1.7)$$

其中, M_i 是基团的分子量, ΔV_i 是结构参数, 列于表 1-4 中。在大部分情况下, 使用式(1-1.7)和表 1-4 计算临界体积比用任何其它方法都精确。

例 1-2 使用 Vetter 法计算异丁醇的临界体积。

解: 由表 1-4 得

基 团	ΔV_i	M_i	$\Delta V_i M_i$
$-\text{CH}_3$	3.360	15.03	50.50
$-\text{CH}_3$	3.360	15.03	50.50
$\begin{array}{c} \\ -\text{CH} \\ \end{array}$	3.360	13.02	43.75
$-\text{CH}_2-$	3.360	14.03	47.14
$-\text{OH}$	0.704	17.01	11.98
			$\Sigma = 203.87$

因此

$$V_c = 33.04 + (203.87)^{1.029} = 270.9 \text{ cm}^3 \cdot \text{gmol}^{-1}$$

实验值是 $273 \text{ cm}^3 \cdot \text{gmol}^{-1}$ 。

表 1—4 Veter 基团贡献法中的结构因素

基 团	ΔV_i	基 团	ΔV_i
非环状			
直链中 $\text{CH}_3, \text{CH}_2, \text{CH}, \text{C}$	3.360	$\begin{array}{c} \\ -\text{C}=\text{O} \end{array}$ (非环)	1.765
侧链中		$\begin{array}{c} \\ -\text{C}=\text{O} \end{array}$ (环)	1.500
$\text{CH}_3, \text{CH}_2, \text{CH}, \text{C}$	2.888	$\begin{array}{c} \\ \text{HC}=\text{O} \end{array}$ (醛)	2.333
$=\text{CH}_2, \begin{array}{c} \\ =\text{C}-\text{H} \end{array}, \begin{array}{c} \\ =\text{C}- \end{array}$	2.940	$-\text{COOH}$	1.652
$=\text{C}=\text{C}=\text{C}$	2.908	$-\text{COO}-$	1.607
$\equiv\text{C}-\text{H}, \equiv\text{C}-$	2.648	$-\text{NH}_2$	2.184
环状			
$\text{CH}_2, \text{CH}, \text{C}$	2.813	$\begin{array}{c} \\ -\text{N}-\text{H} \end{array}$ (非环)	2.333
$=\text{C}-\text{H}, \begin{array}{c} \\ =\text{C}- \end{array}$	2.538	$\begin{array}{c} \\ -\text{N}-\text{H} \end{array}$ (环)	1.736
F	0.770	$\begin{array}{c} \\ -\text{N}- \end{array}$ (非环)	1.793
Cl	1.237	$\begin{array}{c} \\ -\text{N}- \end{array}$ (环)	1.883
Br	0.899	$-\text{CN}$	2.784
I	0.702	$-\text{NO}_2$	1.559
$-\text{OH}$ (醇)	0.704	$-\text{SH}$	1.537
$-\text{OH}$ (酚)	1.553	$-\text{S}-$ (非环)	0.591
$-\text{O}-$ (非环)	1.075	$-\text{S}-$ (环)	0.911
$-\text{O}-$ (环)	0.790		
$-\text{O}-$ (环氧)	-0.252		

5. 临界压缩因子

$$Z_c = \frac{P_c V_c}{RT_c} \quad (1-1.8)$$

无论使用实验的或计算的 P_c 、 V_c 、 T_c 值，此式计算临界压缩因子精度都较好，物质的临界压缩因子值列于附录 B 中。

1-2 偏 心 因 子

偏心因子的定义为

$$\omega = -\lg P_r(T_r = 0.7) - 1.000 \quad (1-2.1)$$

式中 P_r 指 $T_r = 0.7$ 时物质的对比饱和蒸汽压。

ω 表示分子的偏心程度或非球形程度。因此, 对于单原子气体, $\omega = 0$, 对于甲烷, 它仍然非常小。然而, 对于高分子量碳氢化合物, ω 增加, 且常随着极性的增加而增大。目前, 偏心因子广泛用作物质分子的几何形状和物质极性的度量。使用偏心因子的关联式只限制应用于正常流体, 对于 H_2 、 He 、 Ne 等及强极性或非氢键类流体, 不使用偏心因子的关联式。

附录 B 中列出了许多物质的偏心因子值, 在许多情况下, 这些数据是从最好的 T_c 和 P_c 数据 (实验值、或者计算值) 及 $T_r = 0.7$ 时的蒸汽压数据得到的。

如果在附录中查不到 ω 值, 可以使用下述算法来预计物质的偏心因子:

1. Edmister 方程

$$\omega = \frac{3}{7} \frac{\theta}{1-\theta} \lg P_c - 1 \quad (1-2.2)$$

式中 P_c —临界压力, atm; $\theta \equiv T_b/T_c$, T_b 是正常沸点。

2. Lee—Kesler 方程

该方程是使用 Lee—Kesler 蒸汽压方程及偏心因子的定义式得到的。方程如下

$$\omega = \frac{-\ln P_c - 5.92714 + 6.09648\theta^{-1} + 1.28862\ln\theta - 0.169347\theta^8}{15.2518 - 15.6875\theta^{-1} - 13.4721\ln\theta + 0.43577\theta^8} \quad (1-2.3)$$

其中, P_c 的单位及 θ 的定义同式 (1-2.2)。

例 1—3 计算正辛烷的偏心因子。附录中以实验的蒸汽压数据计算的 ω 值是 0.394。

解: 由附录 B 查得

$$T_b = 398.8K \quad T_c = 568.8K \quad P_c = 24.5 \text{ atm}$$

因此

$$\theta = T_b/T_c = 398.8/568.8 = 0.701$$

由式 (1-2.2)

$$\omega = \frac{3}{7} \frac{0.701}{1-0.701} \lg 24.5 - 1 = 0.396$$

由式 (1-2.3)

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{-\ln 24.5 - 5.92714 + (6.09648)(0.701)^{-1} + (1.28862)\ln 0.701 - (0.169347)(0.701)^8}{15.2518 - (15.6875)(0.701)^{-1} - (13.4721)\ln 0.701 + (0.43577)(0.701)^8} \\ &= 0.396 \end{aligned}$$

可见, 计算结果与附录中所列之值非常接近。

通过在临界点 (此处 $Z = Z_c$) 使用 ω , 可由 $P-V-T$ 关系得到临界压缩因子 Z_c 与 ω 的关系

$$Z_c = 0.291 - 0.080\omega \quad (1-2.4)$$

另一个关系是

$$Z_c = \frac{0.293}{1 + 0.375\omega} \quad (1-2.5)$$

这两个关联式一般不适用于强极性分子。

1-3 正 常 沸 点

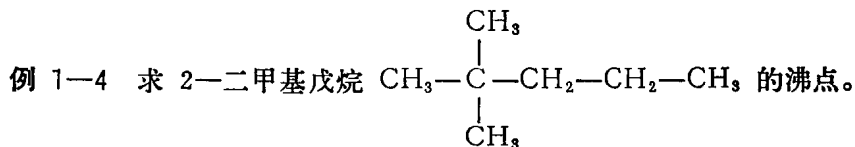
正常沸点指压力为 $1atm$ 时物质的沸点。附录 B 中列出了许多常用物质的正常沸点，下面介绍几种正常沸点的算法。

1. 分子量法

化合物的沸点与分子量有关。一般来说，同系物中分子量越大，则沸点越高。下式系烃类分子量与沸点的经验关系式，此式适用于碳原子在 4—17 间的化合物。

$$\lg T_b = 1.929(\lg M)^{0.4134} \quad (1-3.1)$$

式中， T_b 为沸点， K ； M 为分子量。上式的误差较大。



解：已知 $M = 100$ ；碳原子为 7

$$\lg T_b = 1.929(\lg M)^{0.4134} = 1.929(\lg 100)^{0.4134} = 2.56$$

$$T_b = 363K$$

$$t_b = 363 - 273 = 90^\circ\text{C}$$

测定值为 80.5°C

$$\text{误差} = \frac{90 - 80.5}{80.5} \times 100 = 11.8\%$$

2. 沸点数(B.P.N)法

Kinney 归纳了许多种脂族化合物，得出了一种结构式推算沸点的方法，首先算出一个沸点数(B.P.N)，然后根据下式求出该物质的沸点(B.P)：

$$B.P, ^\circ\text{C} = 230.14 \times \sqrt[3]{B.P.N} - 543 \quad (1-3.2)$$

各元素的 B.P.N 具有加和性，按此原则计算分子中的 B.P.N，并加以一定的基团校正数，得出总 B.P.N。

B.P.N 的数值见表 1—5

表 1—5 *B.P.N* 的数值

结 构 基 团	<i>B.P.N</i>	结 构 基 团	<i>B.P.N</i>
C 在主链	0.8	二炔键	
H 在主链碳上	1.0	丁二炔	0.0
基团作用于主链或环上		共轭炔键	0.0
甲 基	3.05	烯炔键共轭	0.8
乙 基	5.5	二烯炔键	2.4
丙 基	7.0	环基	
丁 基	9.7	环丙基	2.1
2,2 二甲基	-0.4	环丁基	2.3
二个或三个烃基作用		环戊基	2.5
于相近的碳原子上 (六		环己基	2.7
碳或更少的饱和主链上		环庚基	3.4
碳烯键)	0.5	环辛基	3.9
CH ₂ :CH ₂	1.2	环壬基	4.4
RCH:CH ₂	1.5	环癸基	4.9
RCH:CHR	1.9	环十一基	5.4
R ₂ C:CHR	2.3	环十二基	5.9
R ₂ C:CH ₂	2.8	环十三基	6.4
在主链上的不饱和基		环十四基	6.9
CH ₂ :	4.4	环十五基	7.4
C ₂ H ₄ :	7.0	环十六基	7.9
C ₃ H ₆ :	9.0	环十七基	8.4
C ₄ H ₈ :	10.4	卤化物	
CH ₂ :CH—	5.4	RCH ₂ Cl	7.5
炔键:		R ₂ CHCl	6.5
CH≡CH	4.0	R ₃ CCl	6.0
RC≡CH	4.4	醇类:	
RC≡C.CH ₃	5.4	CH ₃ OH	12.8
RC≡C.R	4.8	RCH ₂ OH	10.8
二烯键		R ₂ CHOH	8.8
丙二烯 CH ₂ =C=CH ₂	4.8	R ₃ COH	6.8
共轭双键	0.8	醚类:	
三烯键		CH ₃ —O—CH ₃	3.8
三烯键共轭	2.4	RCH ₂ —O—CH ₃	2.9

续上表

结 构 基 团	B.P.N	结 构 基 团	B.P.N
R_2CHOCH_3	2.9	CH_3COOCH_2R	8.5
R_3COCH_3	2.9	$R_2CHCOOCH_3$	7.6
RCH_2OCH_2R	2.0	RCH_2COOCH_2R	7.6
R_2CHOCH_2R	2.0	$HCOOCHR_2$	7.6
R_3COCH_2R	2.0	$CH_3COOCHR_2$	7.6
$R_2CHOCHR_2$	1.1	$R_3CCOOCR_3$	6.7
R_3COCHR_2	1.1	$R_2CHCOOCH_2R$	6.7
R_3COCR_3	0.2	$RCH_2COOCHR_2$	6.7
醛类:		$HCOOCR_3$	6.7
$HCHO, CH_3CHO$	8	CH_3COOCR_3	6.7
RCH_2CHO	8.2	$R_3CCOOCH_2R$	5.8
R_2CHCHO	7.6	$R_2CHCOOCHR_2$	5.8
R_3CCHO	7.0	$R_3CCOOCHR_2$	4.9
酮类:		$RCH_2CCOOCR_3$	5.8
CH_3COCH_3	8.5	$R_2CHCOOCR_3$	4.9
RCH_2COCH_3	8.0	$R_3CCOOCR_3$	4.0
$R_2CHCOCH_3$	7.0	伯胺类:	
RCH_2COCH_2R	7.5	CH_3NH_2	8.4
R_3CCOCH_3	7.0	RCH_2NH_2	7.3
$R_2CHCOCH_2R$	7.0	R_2CHNH_2	6.2
R_3CCOCH_2R	6.5	R_3CNH_2	5.1
$R_2CHCOCHR_2$	6.5	仲胺类:	
$R_3CCOCHR_2$	6.0	CH_3NHCH_3	6.0
R_3CCOCR_3	5.5	RCH_2NHCH_3	5.0
酸类:		$R_2CHNHCH_3$	4.0
$COOHCH_2COOH$	0.00	RCH_2NHCH_2R	4.0
RCH_2COOH	19.3	R_3CNHCH_3	3.5
$R_2CHCOOH$	18.6	$R_2CHNHCH_2R$	3.5
R_3CCOOH	17.9	R_3CNHCH_2R	3.0
酯类:		$R_2CHNHCHR_2$	3.0
$HCOOCH_3$	9.4	叔胺类:	
CH_3COOCH_3	9.4	$CH_3N(CH_3)_2$	2.5
RCH_2COOCH_3	8.5	$RCH_2N(CH_3)_2$	2.0