

“十五”国家重点图书

# 石油化工 设计手册

○王松汉 主编

第1卷 石油化工基础数据



化学工业出版社

“十五”国家重点图书

# 石油化工设计手册

王松汉 主编

第 1 卷

石油化工基础数据

化学工业出版社  
·北京·

# 石油化工 设计手册

• 王松汉 主编

第1卷

石油化工基础数据



化学工业出版社

(京)新登字 039 号

**图书在版编目 (CIP) 数据**

石油化工设计手册·第1卷, 石油化工基础数据 /  
王松汉主编·北京: 化学工业出版社, 2001. 9  
ISBN 7-5025-2144-5

I . 石… II . 王… III . 石油化工 - 数据 - 技术手  
册 IV . TE65-62

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2001) 第 037844 号

---

**石油化工设计手册**

王松汉 主编

第 1 卷

石油化工基础数据

责任编辑: 谢丰毅 孙绥中

责任校对: 顾淑云

封面设计: 于 兵

\*

化学工业出版社出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

发行电话: (010) 64918013

<http://www.cip.com.cn>

\*

新华书店北京发行所经销

北京市燕山印刷厂印刷

三河市东柳装订厂装订

开本 787×1092 毫米 1/16 印张 64 $\frac{3}{4}$  字数 1632 千字

2002 年 1 月第 1 版 2002 年 1 月北京第 1 次印刷

印 数: 1—4000

ISBN 7-5025-2144-5/TQ · 1055

定 价: 115.00 元

---

**版权所有 违者必究**

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

京工商广临字 2001—19 号

# 《石油化工设计手册》编辑委员会

**主任** 袁晴棠 中国石油化工集团公司总工程师、中国工程院院士  
**副主任** 张旭之 中国石油化工集团公司发展战略研究小组组长、教授级高级工程师  
王松汉 中国石化工程建设公司、教授级高级工程师  
**委员** (以姓氏笔画为序)  
于浩翰 中国石化工程建设公司副总工程师、高级工程师  
王静康 天津大学教授、中国工程院院士  
吕德伟 浙江大学教授  
时铭显 石油大学教授、中国工程院院士  
施力田 北京化工大学教授  
费维扬 清华大学教授  
麻德贤 北京化工大学教授  
谢丰毅 化学工业出版社原副总编辑、编审

## 第1卷编写人员

|           |               |
|-----------|---------------|
| 武向红 (第1章) | 罗北辰 (第2、3、4章) |
| 赵传钧 (第5章) | 刘昆元 (第5章)     |
| 童景山 (第6章) | 张玉梅 (第7章)     |
| 楚纪正 (第7章) | 赵世春 (第8章)     |

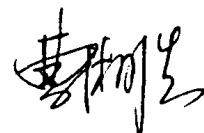
# 序

《石油化工设计手册》就要正式出版了。《手册》全面收集了石油化工设计工作中所需要的具体技术资料、图表、数据、计算公式和方法，详细介绍了工程设计的步骤和工程设计中应该考虑的问题，列有大量参考文献名录，注出图表、数据、公式等的出处，读者希望对有关问题深入了解时，可以很方便地去查阅相关的文献资料。手册选用的材料准确，有科学根据，图表、数据、公式等均经过严格的核实，手册收集的资料一般都经过实践检验，对那些正在科研阶段或虽已经过鉴定，但未工业化的科研成果和资料均未编入，有些方向性的新技术编入时，也都注明其成熟程度。手册充分体现了实用性、可靠性、权威性、先进性相结合，尤其突出实用性，是一套非常适合从事石油化工和化工设计、施工、生产、科研工作的广大技术人员查阅使用的工具书，也可作为大中专院校的师生查阅使用。

为编纂这套《手册》，国内 100 多位有很高学术理论水平和丰富经验的专家学者做出了极大努力，他们克服各种困难，查阅大量资料，伏案整理写作，反复修改文稿，经过五个寒冬酷暑春去秋来，终成这套《手册》。可以说《手册》是他们五年心血的结晶，《手册》是他们学识和智慧的硕果。当你阅读《手册》时请一定记住他们的名字，这是对他们最好的感谢。在《手册》出版之际，我也要向为《手册》提供资料和其它方便条件的单位和同志们表示衷心的感谢。

我相信，这套《手册》一定会成为石油化工、化工行业广大工程技术人员十分喜爱的工具书。

中国石油化工股份有限公司副总裁  
中国工程院院士



2001 年 8 月

# 前 言

石油化学工业是能源和原材料工业的重要组成部分，在国民经济中具有举足轻重的地位和作用。2000年我国原油加工能力2.737亿吨/年，加工原油2.106亿吨，居世界第三位；乙烯生产能力446.32万吨/年，产量470.00万吨，列世界第七位。我国的石化工业已形成完整的工业体系，具有比较雄厚的实力。在石化工业发展的过程中，石化战线的设计工作者进行了大量的设计实践，积累了丰富的经验，提高了设计技术水平，亟需进行归纳整理，使其系统化、逻辑化、规范化，提供给广大设计工作者及有关工程技术人员应用。为此，化学工业出版社组织有关专家编写了《石油化工设计手册》。

这套手册已列为“十五”国家重点图书。手册共分四卷，约900余万字。自1997年开始组织，先后有100余人参加编写，这些作者都是具有扎实的理论功底和丰富实践经验的专家、教授。他们在编写工作的前期，仔细研究了国内外石油化工设计工作的现状，明确了指导思想，制定了编写大纲，此后多次征求有关方面的意见，并反复进行补充修改。在编写过程中，始终坚持理论联系实际、实事求是、突出实用等原则，对标准、规范、图表、公式和数据资料进行精心筛选，慎重取材。形成文稿后，又对稿件进行多次审查，重点章节经反复讨论、推敲，最后交执笔专家修定。各位专家一丝不苟、认真负责和谦虚谨慎、艰辛耕耘的精神令人钦佩。相信这套手册的出版不仅为石化广大工程技术人员提供一套重要的工具书，而且会对我国石化工业的发展有所裨益。

由于在国内第一次出版石油化工专业的设计手册，经验不足，书中错误、疏漏和不妥之处，敬请专家和读者不吝指正。

中国石油化工集团总工程师、中国工程院院士

袁晴棠

中国石油化工集团公司发展战略

研究小组组长，教授级高级工程师

张旭之

2001年10月

## 第1卷编写说明

编写本卷的目的在于为石油化工工艺设计提供有关加工物料及产品的物性数据。当代石油化工工艺无论在研究、设计或是生产方面，都离不开工艺系统模拟软件的辅助运用。而这种模拟系统软件运用的成功与否，除了取决于建立正确的模型之外，在很大程度上还取决于使用的物性数据是否正确。因而，本卷遴选的各种物性数据及其相应估算式，都力求做到先进、实用、准确、可靠。

石油化工工艺加工的物料和产品是多种多样的，要想把那么多物质的物性数据无一遗漏的在有限的篇幅中都提供出来，那是不切实际的。为此，本篇仅遴选了一般石油化工工艺中所涉及的物性数据，其遴选准则之一是该工艺产品属大宗生产，二是要有一定的代表性。

本卷提供的数据以面向石油化工工艺设计为主，不完全同于专门化学手册或化学工程手册里的数据。其区别在于石油化工工艺加工的物料和产品，不完全都是纯物质而有些是混合物。如本卷中就专辟了一章“石油馏分物性数据”。

本卷内容以提供数据为主。但有些工艺加工物料和产品的物性数据，并不都是能在有关手册、文献中查到的，而是必须要通过估算式去计算得到的。因而书中对各种估算式也都给予了相应的关注。但对它们都不进行推导，有些说明也仅限于提示出它们的使用范围和条件。

考虑到在工艺研究、设计、生产上的实际需要，对某些重要物性数据提供了相应的图表。它们为使用者提供了一定的方便。

对于数据计量单位一律取用国际单位制。但传统积累下来的大量物性数据，并非都是统一于国际单位制，对那些非国际单位制计量的数据采用通常的办法，运用相应的系数予以转换。但也有个别的少量物性数据，由于这种转换结果的不理想，还不能不遗憾的保留着其原始的计量状态。为此，本卷最后提供了各种单位的换算表以供使用。

对书中提供的数据和估算式都附上了参考文献。对某些专门工艺中涉及的物料还附上了可供参考的专著。

# 《石油化工设计手册》卷目

|                 |  |
|-----------------|--|
| 第1卷<br>石油化工基础数据 | 1.物质特性数据及其估算方法<br>2.物质的热力学性质及其估算方法<br>3.物质的热化学数据及其估算方法<br>4.空气、水及其它82种常见物质的热物理、热化学性质<br>5.相平衡数据与化学平衡<br>6.传递性质数据与计算<br>7.石油馏分物性数据<br>8.石油化工物性数据库                                     |
| 第2卷<br>标准规范     | 1.安全与卫生<br>2.环境保护<br>3.消防<br>4.节能<br>5.其它标准<br>6.国外环境标准选编  |
| 第3卷<br>化工单元过程   | 1.流体输送机械<br>2.非均相分离<br>3.液体搅拌与混合<br>4.冷冻与深度冷冻<br>5.换热器<br>6.工业炉<br>7.蒸发<br>8.结晶<br>9.蒸馏<br>10.吸收与解吸<br>11.液液萃取<br>12.吸附与变压吸附<br>13.气液传质设备<br>14.膜分离<br>15.干燥<br>16.化学反应器<br>17.容器与贮罐 |
| 第4卷<br>工艺和系统设计  | 1.概况<br>2.设计基础<br>3.工艺设计及计算<br>4.基础工程设计<br>5.系统设计和计算<br>6.自动控制<br>7.安全工程<br>8.计算机辅助设计  |

# 目 录

## 第1章 物质特性数据及其估算方法

|                       |    |                       |    |
|-----------------------|----|-----------------------|----|
| 1.1 物质特性数据 .....      | 1  | 1.2.3 临界温度的估算方法 ..... | 49 |
| 1.1.1 无机物的特性数据 .....  | 1  | 1.2.4 临界压力的估算方法 ..... | 52 |
| 1.1.2 有机物的特性数据 .....  | 1  | 1.2.5 临界体积估算方法 .....  | 53 |
| 1.2 物质特性数据的估算方法 ..... | 1  | 1.2.6 偏心因子估算方法 .....  | 54 |
| 1.2.1 沸点估算方法 .....    | 1  | 1.2.7 偶极矩估算方法 .....   | 55 |
| 1.2.2 熔点估算方法 .....    | 48 | 参考文献 .....            | 55 |

## 第2章 物质的热力学性质及其估算方法

|   |     |  |     |
|---|-----|--|-----|
| 2.1 热力学性质数据表 .....  | 57  | (不同组成、不同温度下) .....   | 143 |
| 2.1.1 低压下( $p \rightarrow 0$ 理想气体)气体的热容 .....                         | 57  | 2.1.5.1 几种醇水溶液的比定压热容 .....   | 143 |
| 2.1.1.1 低压下有机化合物(理想气体)气体标准状态下摩尔定压热容 $C_p^{\theta} \sim T$ 多项式系数 ..... | 57  | 2.1.5.2 某些酸、碱、盐水溶液的比定压热容 .....                                       | 144 |
| 2.1.1.2 元素和无机物气体(理想气体)标准状态下 $C_p^{\theta} \sim T$ 关系式中各系数值 .....      | 81  | 2.1.6 几种重要工业气体的热容及热容比 .....  | 146 |
| 2.1.2 凝聚态物质的热容 .....  | 84  | 2.1.6.1 空气 .....   | 146 |
| 2.1.2.1 液体有机化合物的摩尔定压热容 $C_p \sim T$ 关联式中系数值 .....                     | 84  | 2.1.6.2 氮气 .....   | 148 |
| 2.1.2.2 某些固体有机物的比热容 .....   | 108 | 2.1.6.3 大气氮 .....  | 149 |
| 2.1.2.3 某些单质和无机化合物固、液态的 $C_p \sim T$ 关系式中系数值 .....                    | 111 | 2.1.6.4 氧气 .....   | 149 |
| 2.1.2.4 某些选定的金属元素不同温度下( $T = 4 \sim 800K$ )比热容 $c$ .....              | 117 | 2.1.6.5 一氧化碳 .....   | 150 |
| 2.1.3 聚合物的比定压热容 .....   | 117 | 2.1.6.6 二氧化碳 .....   | 151 |
| 2.1.3.1 聚合物的比定压热容温度关联式中系数值 .....                                      | 117 | 2.1.6.7 氢气 .....   | 152 |
| 2.1.3.2 碳链聚合物的比定压热容 .....   | 119 | 2.1.6.8 水蒸气 .....  | 153 |
| 2.1.3.3 杂链聚合物的比定压热容 .....   | 131 | 2.1.7 某些有机、无机和单质气体在 1.01325bar 下热容比 .....                            | 154 |
| 2.1.3.4 主链上带有环状基团的聚合物的比定压热容 .....                                     | 139 | 2.2 热力学性质的计算方法 .....   | 155 |
| 2.1.4 某些常见液体、固体材料及油类的比定压热容 .....                                      | 142 | 2.2.1 热容(量) .....  | 155 |
| 2.1.5 某些有机、无机水溶液比定压热容 .....   | 142 | 2.2.1.1 定义 .....   | 155 |
|   |     | 2.2.1.2 $C_p$ 与 $C_v$ 的关系 .....                                      | 155 |
|   |     | 2.2.1.3 热容与温度的关系 .....   | 156 |
|   |     | 2.2.1.4 等温条件下 $C_p$ 与压力的关系 .....                                     | 157 |
|   |     | 2.2.2 热容估算方法 .....   | 157 |
|   |     | 2.2.2.1 理想气体或低压下( $p \rightarrow 0$ )的实际气体 $C_p^{\theta}$ 的估算法 ..... | 161 |
|   |     | 2.2.2.2 真实气体的热容 .....  | 176 |
|   |     | 2.2.2.3 液体的热容 .....  | 181 |
|   |     | 2.2.2.4 固体热容经验估算法 .....  | 189 |

|         |                  |     |  |     |
|---------|------------------|-----|--|-----|
| 2.2.2.5 | 聚合物定压热容数据关联式及估算法 | 190 | $(f/p = \varphi$ 逸度系数) 与 $p, V, T$ 之间的关系 | 194 |
| 2.2.3   | 热力学函数与实验数据       | 192 | 2.2.5.3 偏离焓、偏离熵以及逸度系数的计算                 | 195 |
| 2.2.4   | 焓、熵的计算           | 192 | 2.2.6 8 种重要工业气体的热力学性质关联计算方程              | 206 |
| 2.2.5   | 热力学偏离函数和剩余性质     | 193 | 参考文献                                     | 209 |
| 2.2.5.1 | 偏离函数和剩余性质的定义     | 193 |  |     |
| 2.2.5.2 | 偏离函数和逸度压力比       |     |  |     |

### 第3章 物质的热化学数据及其估算方法

|         |  |     |  |     |
|---------|--|-----|--|-----|
| 3.1     | 物质的热化学性质数据表                            | 211 | 3.1.4.4 个别物质不同温度下自由能函数、热焓函数、 $C_p^\ominus, S^\ominus$ 数据                                       | 332 |
| 3.1.1   | 纯物质的相变焓(热)——相变化热效应                     | 211 | 3.1.4.5 有机化合物理想气体的 $\Delta_f H^\ominus$ 与 $T$ 的关联式系数值  | 358 |
| 3.1.1.1 | 有机化合物的相变焓及摩尔定压热容                       | 211 | 3.1.4.6 有机化合物理想气体的 $\Delta_f G^\ominus$ 与 $T$ 的关联式系数值  | 383 |
| 3.1.1.2 | 元素和无机化合物的相变焓(热)及不同温度( $T, K$ )下的 $C_p$ | 218 | 3.1.4.7 有机化合物标准燃烧焓(热)  | 421 |
| 3.1.1.3 | 聚合物的熔化(融)热(焓)和熔化(融)熵                   | 229 | 3.2 物质热化学性质的估算方法   | 433 |
| 3.1.2   | 溶液中的热效应,溶解焓(热)、稀释焓(热)及混合焓(热)           | 255 | 3.2.1 纯物质蒸发焓(汽化焓) $\Delta_f H$ 的估算方法   | 433 |
| 3.1.2.1 | 有机物溶于水的积分溶解焓(热)                        | 255 | 3.2.1.1 由蒸气压方程计算 $\Delta_f H$  | 433 |
| 3.1.2.2 | 无机物溶于水的积分溶解焓(热)                        | 257 | 3.2.1.2 从对应状态原理估算 $\Delta_f H$   | 434 |
| 3.1.2.3 | 聚合物溶液的溶解热(焓)及混合热(焓)                    | 260 | 3.2.1.3 正常沸点下蒸发焓 $\Delta_f H_b$ 的估算  | 435 |
| 3.1.3   | 固体表面的吸附热(焓)                            | 266 | 3.2.1.4 利用物质结构或与结构有关的特性参数估算 $\Delta_f H_b$ 的方法   | 437 |
| 3.1.3.1 | 吸附质在活性炭、硅胶上的积分吸附热(焓)                   | 266 | 3.2.1.5 蒸发焓与温度的关系  | 440 |
| 3.1.3.2 | 吸附质在合成沸石上的等量吸附热(焓)                     | 267 | 3.2.2 纯物质熔融焓 $\Delta_m H$ 的估算  | 444 |
| 3.1.3.3 | 水蒸气在不同吸附剂上的吸附热                         | 267 | 3.2.2.1 熔融熵的经验规则   | 444 |
| 3.1.3.4 | $CO_2$ 在不同类型活性炭上的积分吸附热                 | 267 | 3.2.2.2 Bondi 熔融熵基团贡献法   | 444 |
| 3.1.4   | 化学反应的热效应,物质的标准热化学性质数据                  | 267 | 3.2.2.3 聚合物的熔融热(焓)   | 445 |
| 3.1.4.1 | 有机化合物的标准热化学性质                          | 267 | 3.2.3 纯物质升华焓的估算  | 445 |
| 3.1.4.2 | 元素及无机化合物的标准热化学性质数据                     | 308 | 3.2.4 溶解焓(热) $\Delta_{sol} H$ 的估算法   | 447 |
| 3.1.4.3 | 离子和中性物质在水溶液中的标准热化学性质数据                 | 327 | 3.2.5 标准热化学性质 $\Delta_f H^\ominus, \Delta_f G^\ominus, S^\ominus$ 和 $\Delta_f H^\ominus$ 的估算方法 | 447 |
|         |  |     | 3.2.5.1 标准生成 Gibbs 函数 $\Delta_f G^\ominus$ 的推算法  | 448 |
|         |  |     | 3.2.5.2 五种估算理想气体标准热化学性质的基团贡献法  | 449 |
|         |  |     | 3.2.5.3 无机化合物标准热化学性质估算算法   | 473 |
|         |  |     | 3.2.5.4 凝聚态的标准生成焓 $\Delta_f H^\ominus$ 和标准熵 $S^\ominus$ 的估算                                    | 475 |
|         |  |     | 3.2.5.5 聚合物燃烧焓(热)估算方法  | 478 |
|         |  |     | 参考文献   | 480 |

## 第4章 空气、水和其它82种常见物质的热 物理、热化学性质

|                                      |     |  |     |
|--------------------------------------|-----|--|-----|
| 4.1 有机物质 .....                       | 483 | 4.1.5.7 乙二醇 1,2-ethanediol .....                     | 515 |
| 4.1.1 饱和烃类 .....                     | 483 | 4.1.5.8 丙三醇 (甘油) 1,2,3-propanetriol (glycerol) ..... | 515 |
| 4.1.1.1 甲烷 mathane .....             | 483 | 4.1.5.9 二甘醇 diethyleneglycol .....                   | 516 |
| 4.1.1.2 乙烷 ethane .....              | 486 | 4.1.5.10 三甘醇 trietheneglycol .....                   | 517 |
| 4.1.1.3 丙烷 propane .....             | 490 | 4.1.5.11 甲醛 formaldehyde .....                       | 517 |
| 4.1.1.4 正丁烷 <i>n</i> -butane .....   | 493 | 4.1.5.12 乙醛 acetaldehyde .....                       | 517 |
| 4.1.1.5 异丁烷 isobutane .....          | 495 | 4.1.5.13 丙酮 acetone .....                            | 518 |
| 4.1.1.6 正戊烷 <i>n</i> -pentane .....  | 496 | 4.1.5.14 乙醚 ethylether .....                         | 519 |
| 4.1.1.7 异戊烷 isopentane .....         | 496 | 4.1.5.15 甲基叔丁基醚 methyl tertbutyl ether .....         | 520 |
| 4.1.1.8 新戊烷 neopentane .....         | 496 | 4.1.5.16 环氧乙烷 ethylene oxide .....                   | 521 |
| 4.1.1.9 正己烷 <i>n</i> -hexane .....   | 497 | 4.1.5.17 环氧丙烷 propylene oxide .....                  | 521 |
| 4.1.1.10 正庚烷 <i>n</i> -heptane ..... | 497 | 4.1.5.18 乙酸 acetic acid .....                        | 521 |
| 4.1.1.11 正辛烷 <i>n</i> -octane .....  | 498 | 4.1.5.19 乙酸甲酯 methyl acetate .....                   | 522 |
| 4.1.1.12 正壬烷 <i>n</i> -nonane .....  | 499 | 4.1.5.20 乙酸乙酯 ethyl acetate .....                    | 523 |
| 4.1.1.13 正癸烷 <i>n</i> -decane .....  | 500 | 4.1.5.21 丙烯酸 acrylic acid .....                      | 524 |
| 4.1.2 环烷烃 .....                      | 501 | 4.1.5.22 甲基丙烯酸甲酯 methyl methacrylate (MMA) .....     | 524 |
| 4.1.2.1 环戊烷 cyclopentane .....       | 501 | 4.1.5.23 苯酚 phenol .....                             | 525 |
| 4.1.2.2 环己烷 cyclohexane .....        | 501 | 4.1.6 其它有机物质 .....                                   | 525 |
| 4.1.3 不饱和烃 .....                     | 503 | 4.1.6.1 <i>R</i> -12 freon-12 .....                  | 525 |
| 4.1.3.1 乙炔 acetylene .....           | 503 | 4.1.6.2 <i>R</i> -13 freon-13 .....                  | 529 |
| 4.1.3.2 乙烯 ethene .....              | 503 | 4.1.6.3 <i>R</i> -21 freon-21 .....                  | 529 |
| 4.1.3.3 丙烯 propene .....             | 504 | 4.1.6.4 <i>R</i> -22 freon-22 .....                  | 529 |
| 4.1.3.4 1,2-丁二烯 1,2-butadiene .....  | 506 | 4.1.6.5 三氯甲烷 trichloromethane .....                  | 530 |
| 4.1.3.5 1,3-丁二烯 1,3-butadiene .....  | 506 | 4.1.6.6 四氯化碳 carbon tetra chloride .....             | 530 |
| 4.1.4 芳香烃 .....                      | 507 | 4.1.6.7 苯胺 aniline .....                             | 531 |
| 4.1.4.1 苯 benzene .....              | 507 | 4.1.6.8 A 导热姆 (道-热载体)<br>A-dowtherm .....            | 532 |
| 4.1.4.2 乙苯 ethylbenzene .....        | 507 | 4.1.6.9 J-导热姆 .....                                  | 532 |
| 4.1.4.3 丙苯 propyibenzene .....       | 508 | 4.2 元素及无机物 .....                                     | 532 |
| 4.1.4.4 异丙苯 isopropylbenzene .....   | 508 | 4.2.1 单质气体及汞 .....                                   | 532 |
| 4.1.4.5 甲苯 toluene .....             | 509 | 4.2.1.1 氩 argon .....                                | 532 |
| 4.1.4.6 间-二甲苯 <i>m</i> -xylene ..... | 509 | 4.2.1.2 氦 helium .....                               | 534 |
| 4.1.4.7 邻-二甲苯 <i>o</i> -xylene ..... | 509 | 4.2.1.3 氖 neon .....                                 | 536 |
| 4.1.4.8 对-二甲苯 <i>p</i> -xylene ..... | 510 | 4.2.1.4 氮 nitrogen .....                             | 537 |
| 4.1.4.9 苯乙烯 styrene .....            | 511 | 4.2.1.5 氢 hydrogen .....                             | 540 |
| 4.1.5 含氧有机化合物 .....                  | 512 | 4.2.1.6 氧 oxygen .....                               | 545 |
| 4.1.5.1 甲醇 methanol .....            | 512 | 4.2.1.7 臭氧 ozone .....                               | 548 |
| 4.1.5.2 乙醇 ethanol .....             | 513 | 4.2.1.8 氟 fluorine .....                             | 548 |
| 4.1.5.3 正丙醇 <i>n</i> -propanol ..... | 513 |  |     |
| 4.1.5.4 异丙醇 isopropanol .....        | 514 |  |     |
| 4.1.5.5 正丁醇 <i>n</i> -butanol .....  | 514 |  |     |
| 4.1.5.6 叔丁醇 tertbutanol .....        | 514 |  |     |

|                                |      |
|--------------------------------|------|
| 4.2.1.9 氯 chlorine             | 5498 |
| 4.2.1.10 汞 mercury             | 549  |
| 4.2.2 无机化合物气体                  | 552  |
| 4.2.2.1 氨 ammonia              | 552  |
| 4.2.2.2 氢化氢 hydrogen fluoride  | 555  |
| 4.2.2.3 氯化氢 hydrogen chloride  | 556  |
| 4.2.2.4 硫化氢 hydrogen sulfide   | 556  |
| 4.2.2.5 一氧化碳 carbon monoxide   | 556  |
| 4.2.2.6 二氧化碳 carbon dioxide    | 557  |
| 4.2.2.7 二氧化硫 sulfur dioxide    | 558  |
| 4.2.2.8 三氧化硫 sulfur trioxide   | 558  |
| 4.2.2.9 光气 phosgene            | 559  |
| 4.2.2.10 二氧化氮 nitrogen dioxide | 560  |
| 4.2.2.11 一氧化二氮 nitrous oxide   | 561  |
| 4.3 空气、水的热物理和热化学性质             | 561  |
| 4.3.1 空气 air                   | 561  |
| 4.3.2 水 water                  | 570  |
| 参考文献                           | 663  |

## 第5章 相平衡数据与化学平衡

|                                     |     |
|-------------------------------------|-----|
| 5.1 蒸气压数据及估算方法                      | 664 |
| 5.1.1 水的蒸气压数据表                      | 664 |
| 5.1.2 纯物质的蒸气压数据表                    | 664 |
| 5.1.3 溶液的蒸气压数据表                     | 671 |
| 5.1.4 蒸气压的温度关联式                     | 688 |
| 5.1.4.1 Clapeyron 方程                | 688 |
| 5.1.4.2 Antoine 方程                  | 688 |
| 5.1.4.3 Frost-Kalkwarf-Thodos<br>方程 | 693 |
| 5.1.4.4 Wagner 方程                   | 693 |
| 5.1.5 蒸气压估算方程                       | 694 |
| 5.1.5.1 对应状态法                       | 694 |
| 5.1.5.2 参考物质法                       | 695 |
| 5.1.6 蒸气压文献介绍                       | 695 |
| 5.2 气液和液液相平衡数据                      | 696 |
| 5.2.1 状态方程及其参数                      | 696 |
| 5.2.1.1 立方型状态方程                     | 697 |
| 5.2.1.2 非立方型方程                      | 699 |
| 5.2.1.3 混合规则及二元交互作用<br>参数           | 701 |
| 5.2.2 活度系数模型及模型参数                   | 708 |
| 5.2.2.1 活度系数关联模型                    | 708 |
| 5.2.2.2 活度系数估算模型                    | 715 |
| 5.2.3 状态方程和活度系数模型联合方法               | 750 |
| 5.2.3.1 Chao-Seader 模型及其<br>修正式     | 750 |
| 5.2.3.2 UNIWaals 模型                 | 751 |
| 5.2.4 气相和液相平衡数据文献介绍                 | 751 |
| 5.3 气体溶解度                           | 752 |
| 5.3.1 亨利 (Henry) 定律                 | 752 |
| 5.3.2 气体在水中的亨利常数                    | 752 |
| 5.3.3 气体在非水液体中的亨利常数                 | 752 |
| 5.3.4 弱电解质在水中的亨利常数                  | 754 |
| 5.3.5 气体在电解质水溶液中的溶解度                | 754 |
| 5.3.6 气体在非电解质水溶液中的<br>溶解度           | 755 |
| 5.3.7 高压气体的溶解度                      | 755 |
| 5.4 固体溶解度                           | 756 |
| 5.4.1 Van't Hoff 方程                 | 756 |
| 5.4.2 固体溶解度数据                       | 756 |
| 5.5 化学平衡                            | 763 |
| 5.5.1 化学计量学及反应进度                    | 763 |
| 5.5.2 化学反应平衡常数                      | 764 |
| 5.5.2.1 化学反应标准平衡常数                  | 764 |
| 5.5.2.2 单一化学平衡计算                    | 766 |
| 5.5.2.3 复杂体系的化学反应平衡<br>计算           | 769 |
| 参考文献                                | 771 |

## 第6章 传递性质数据与计算

|                      |     |
|----------------------|-----|
| 6.1 粘度               | 774 |
| 6.1.1 粘度的定义和单位       | 774 |
| 6.1.2 气体的粘度数据        | 774 |
| 6.1.3 低压下纯气体粘度的计算    | 781 |
| 6.1.3.1 理论计算法        | 781 |
| 6.1.3.2 Chung 等的计算方法 | 786 |
| 6.1.3.3 对比态法         | 787 |
| 6.1.4 低压下气体混合物粘度的计算  | 790 |
| 6.1.4.1 半理论计算法       | 790 |
| 6.1.4.2 对比态关联式       | 794 |
| 6.1.5 加压下纯气体粘度的计算    | 798 |
| 6.1.5.1 剩余粘度关联法      | 798 |
| 6.1.5.2 对比粘度关联法      | 799 |
| 6.1.5.3 Lucas 方法     | 800 |

|                            |     |                                       |     |
|----------------------------|-----|---------------------------------------|-----|
| 6.1.5.4 Chung 方法           | 802 | 6.2.9 液体导热系数的计算                       | 855 |
| 6.1.5.5 Brule-Starling 方法  | 803 | 6.2.9.1 Latini 等方法                    | 855 |
| 6.1.6 加压下气体混合物的粘度          | 804 | 6.2.9.2 Sato-Riedel 法                 | 856 |
| 6.1.6.1 Lucas 方法           | 804 | 6.2.9.3 Missenard 法                   | 856 |
| 6.1.6.2 Chung 方法           | 804 | 6.2.9.4 Robbins-Kingrea 法             | 856 |
| 6.1.6.3 剩余粘度法              | 804 | 6.2.9.5 Teja-Rice 法                   | 858 |
| 6.1.7 液体粘度数据               | 805 | 6.2.10 压力对液体导热系数的影响                   | 859 |
| 6.1.8 液体粘度的计算              | 810 | 6.2.10.1 导热因子法                        | 859 |
| 6.1.8.1 低温液体粘度的推算          | 810 | 6.2.10.2 Missenard 法                  | 859 |
| 6.1.8.2 高温下液体粘度的推算         | 817 | 6.2.11 液体混合物导热系数的估算                   | 860 |
| 6.1.9 液体混合物粘度的估算           | 817 | 6.2.11.1 Fillippov 方程                 | 860 |
| 6.1.9.1 Lobe 方法            | 818 | 6.2.11.2 Jamieson 关联式                 | 860 |
| 6.1.9.2 Teja-Rice 方法       | 819 | 6.2.11.3 幂律方程                         | 860 |
| 6.1.9.3 Grunberg-Nissan 方法 | 820 | 6.2.11.4 Li 方程                        | 861 |
| 6.1.10 不互溶液体混合物粘度的<br>计算   | 821 | 6.2.11.5 T-L 方程                       | 861 |
| 6.1.11 电解质溶液粘度和熔盐粘<br>度的计算 | 822 | 6.2.12 电解质水溶液的导热系数                    | 862 |
| 6.1.11.1 Jones-Dole 关联式    | 822 | 6.2.13 固体导热系数数据与估算                    | 864 |
| 6.1.11.2 熔盐混合物的粘度          | 823 | 6.3 扩散系数                              | 873 |
| 6.1.12 悬浮液粘度的计算            | 824 | 6.3.1 基本概念与单位                         | 873 |
| 附录 Lennard-Jones 势的势能参数    | 824 | 6.3.2 气相扩散系数数据                        | 873 |
| 6.2 导热系数                   | 825 | 6.3.3 低压下气体扩散系数的计算                    | 873 |
| 6.2.1 导热系数的定义和单位           | 825 | 6.3.3.1 低压双元气体体系扩散系数                  | 873 |
| 6.2.2 气体导热系数的数据            | 826 | 6.3.3.2 低压双元气体混合物扩散系<br>数的经验式         | 876 |
| 6.2.3 低压气体导热系数的计算          | 826 | 6.3.4 高压下气体扩散系数的计算                    | 881 |
| 6.2.3.1 单原子气体导热系数          | 826 | 6.3.4.1 Dawson-Khoury-Kobayashi<br>公式 | 881 |
| 6.2.3.2 多原子气体导热系数          | 827 | 6.3.4.2 Mathur-Thodos 公式              | 881 |
| 6.2.4 温度对低压下气体导热系数<br>的影响  | 831 | 6.3.5 温度对气体扩散的影响                      | 882 |
| 6.2.5 压力对气体导热系数的影响         | 834 | 6.3.6 多组元气体混合物的扩散                     | 883 |
| 6.2.5.1 Stiel-Thodos 法     | 834 | 6.3.7 液体中的扩散                          | 884 |
| 6.2.5.2 Chung 法            | 834 | 6.3.8 无限稀释双元溶液扩散系数的<br>计算             | 884 |
| 6.2.5.3 Ely-Hanley 法       | 835 | 6.3.8.1 Wilke-Chang 推算法               | 884 |
| 6.2.6 低压气体混合物导热系数的计算       | 840 | 6.3.8.2 Scheibel 关联式                  | 885 |
| 6.2.6.1 Wassilijewa 方程     | 840 | 6.3.8.3 Reddy-Doraiswamy 关联式          | 885 |
| 6.2.6.2 经验方程               | 841 | 6.3.8.4 Hayduk-Laudie 关联式             | 886 |
| 6.2.6.3 Sutherland 模型法     | 843 | 6.3.8.5 Tyn-Calus 法                   | 886 |
| 6.2.6.4 Chung 等方法          | 848 | 6.3.8.6 改进的 Tyn-Calus 法               | 887 |
| 6.2.7 高压气体混合物导热系数的计算       | 848 | 6.3.8.7 Hayduk-Minhas 法               | 887 |
| 6.2.7.1 Stiel-Thodos 法     | 848 | 6.3.9 双液系扩散与浓度的关系                     | 889 |
| 6.2.7.2 Chung 等方法          | 850 | 6.3.10 温度和压力对液体中扩散<br>的影响             | 889 |
| 6.2.7.3 Ely-Hanley 法       | 851 | 6.3.11 多组分液体混合物中的扩散                   | 890 |
| 6.2.8 液体导热系数数据             | 853 |                                       |     |

|                         |     |
|-------------------------|-----|
| 6.3.11.1 在混合溶剂中的扩散      | 890 |
| 6.3.11.2 多组分扩散系数        | 891 |
| 6.3.12 电解质溶液中的扩散        | 891 |
| 6.3.13 固体的扩散            | 893 |
| 6.3.13.1 固体扩散系数与扩散的研究方法 | 893 |
| 6.3.13.2 扩散系数与温度的关系     | 893 |
| 6.4 表面张力                | 894 |
| 6.4.1 表面张力的定义和单位        | 894 |
| 6.4.2 液体表面张力数据          | 894 |
| 6.4.3 纯液体表面张力和温度的关系     | 894 |
| 6.4.4 表面张力的估算法          | 896 |
| 6.4.4.1 结构贡献法           | 896 |
| 6.4.4.2 对比态法            | 898 |
| 6.4.4.3 其它估算法           | 899 |
| 6.4.5 溶液的表面张力           | 900 |
| 6.4.5.1 非水溶液的表面张力       | 900 |
| 6.4.5.2 水溶液的表面张力        | 904 |
| 参考文献                    | 907 |

## 第7章 石油馏分物性数据

|                                    |     |
|------------------------------------|-----|
| 7.1 石油馏分的特性数据                      | 909 |
| 7.1.1 平均沸点                         | 909 |
| 7.1.2 特性因数                         | 910 |
| 7.1.3 平均摩尔质量                       | 911 |
| 7.1.4 偏心因子                         | 912 |
| 7.1.5 分子族组成                        | 913 |
| 7.1.6 折射率                          | 915 |
| 7.1.7 闪点                           | 915 |
| 7.1.8 倾点                           | 916 |
| 7.2 蒸馏曲线的换算                        | 916 |
| 7.2.1 常压下恩氏蒸馏与实沸点蒸馏曲线的换算           | 917 |
| 7.2.2 10mmHg 绝压下恩氏蒸馏与实沸点蒸馏曲线的换算    | 919 |
| 7.2.3 模拟蒸馏到恩氏蒸馏曲线的换算               | 920 |
| 7.2.4 各类蒸馏曲线在减压条件下的换算              | 921 |
| 7.2.5 常压下恩氏蒸馏与平衡气化曲线的换算            | 922 |
| 7.2.6 10mmHg 绝压下恩氏蒸馏到平衡气化曲线的换算     | 923 |
| 7.2.7 由常压恩氏蒸馏和平衡气化数据求高于1atm的平衡气化数据 | 925 |
| 7.2.8 10mmHg 绝压下实沸点蒸馏和平衡气化数据的换算    | 926 |
| 7.2.9 平衡气化气液相产物的性质估算               | 929 |
| 7.3 临界点和假临界点                       | 936 |
| 7.3.1 石油馏分的临界点温度                   | 936 |
| 7.3.2 石油馏分的假临界点温度                  | 937 |
| 7.3.3 石油馏分的临界点压力                   | 937 |
| 7.3.4 石油馏分的假临界点压力                  | 937 |
| 7.3.5 明确组分和石油馏分混合物的临界点与假临界点温度      | 937 |
| 7.3.6 明确组分和石油馏分混合物的临界点与假临界点压力      | 940 |
| 7.4 石油馏分的蒸气压                       | 941 |
| 7.4.1 临界性质已知的纯烃及石油窄馏分的蒸气压          | 941 |
| 7.4.2 临界性质未知的纯烃及石油窄馏分的蒸气压          | 942 |
| 7.4.3 原油和产品油的蒸气压                   | 947 |
| 7.5 石油馏分的密度                        | 948 |
| 7.5.1 低压下石油馏分的液体密度                 | 949 |
| 7.5.2 高压下石油馏分的液体密度                 | 949 |
| 7.5.3 烃及其混合物液体密度与温度和压力的关系          | 950 |
| 7.5.4 低分子量烃类与原油混合后的体积收缩            | 951 |
| 7.5.5 烃与非烃气体及其混合物的密度               | 951 |
| 7.6 石油馏分的热力学性质                     | 953 |
| 7.6.1 石油馏分的焓                       | 953 |
| 7.6.2 石油馏分的等压热容和等容热容               | 955 |
| 7.7 石油馏分的气液相平衡                     | 964 |
| 7.7.1 SRK 状态方程                     | 965 |
| 7.7.2 逸度系数                         | 966 |
| 7.7.3 焓差与熵差                        | 966 |
| 7.7.4 交互作用参数                       | 967 |
| 7.7.5 石油馏分的气液相平衡                   | 968 |
| 7.7.6 气液相平衡常数及平衡气化的计算方法            | 969 |
| 7.8 表面张力                           | 971 |
| 7.9 粘度                             | 971 |
| 7.9.1 粘度换算                         | 971 |
| 7.9.2 常压下石油馏分的液体粘度                 | 973 |

|                                |     |                      |     |
|--------------------------------|-----|----------------------|-----|
| 7.9.3 压力对低分子量烃液体粘度的<br>影响      | 974 | 的液体粘度                | 980 |
| 7.9.4 压力对高分子量石油馏分液体<br>粘度的影响   | 977 | 7.10 导热系数            | 980 |
| 7.9.5 石油馏分掺和物的液体粘度             | 978 | 7.10.1 液体石油馏分的导热系数   | 980 |
| 7.9.6 组成不明确的烃类混合物气体<br>在低压下的粘度 | 979 | 7.10.2 石油馏分低压蒸气的导热系数 | 981 |
| 7.9.7 压力对烃类气体粘度的影响             | 979 | 7.11 燃烧热             | 983 |
| 7.9.8 含溶解气的烃和烃类混合              |     | 7.11.1 石油馏分的燃烧热      | 984 |
|                                |     | 7.11.2 燃料气的燃烧热       | 985 |
|                                |     | 7.11.3 有效燃烧热         | 986 |
|                                |     | 参考文献                 | 987 |

## 第8章 石油化工物性数据库

|   |     |  |      |
|---|-----|--|------|
| 8.1 数据库的特点  | 988 | 8.3.2.2 烃类实验物性库                                | 1001 |
| 8.2 数据库在石油化工工艺设计<br>中的应用  | 988 | 8.4 国外建立的石油化工物性数据库                             | 1003 |
| 8.3 国内建立的石油化工物性数据库  | 989 | 8.4.1 PPDS (Physical Property Data<br>Service) | 1003 |
| 8.3.1 ECSS (Engineering Chemistry Simulation<br>System) 工程化学模拟系统数据库<br>及物性推算包 | 989 | 8.4.2 PPDS-2 的用途                               | 1003 |
| 8.3.1.1 基础物性数据简介  | 990 | 8.4.3 纯组分/混合物的物性数据                             | 1004 |
| 8.3.1.2 物性估算系统的功能与计算<br>模型的选择   | 992 | 8.4.4 PRO/I 化工流程模拟系统中的<br>物性数据库                | 1007 |
| 8.3.1.3 基础物性推算  | 993 | 8.4.5 ASPEN PLUS 化工流程模拟<br>系统中的物性数据库           | 1010 |
| 8.3.1.4 传递物性推算  | 995 | 8.5 国外其它化工物性数据库                                | 1011 |
| 8.3.1.5 其它热力学性质的估算  | 996 | 8.6 石化物性数据库的展望                                 | 1013 |
| 8.3.2 天津市化工物性数据库和烃类<br>实验物性库  | 998 | 8.7 从 Internet 上检索化学、化工<br>资源                  | 1013 |
| 8.3.2.1 天津市化工物性数据库  | 998 | 参考文献   | 1014 |

## 附录 常用单位换算

# 第1章 物质特性数据及其估算方法

## 1.1 物质特性数据

### 1.1.1 无机物的特性数据

表1-1中列出97种无机物的特性数据。

熔点(℃)：为正常熔点。数字后面标有“ $t_p$ ”表示三相点，此时在大于一个大气压下气、液、固处于相平衡（也就是正常熔点不存在）。

沸点(℃)：为常压沸点。数字后面标有“ $s_p$ ”表示升华点，此时常压下气、固处于相平衡。

密度：固体和液体的密度是接近室温时的值，单位为“g/cm<sup>3</sup>”。气体的密度是在101.325kPa, 25℃时计算的理想气体密度，单位为“g/L”。

### 1.1.2 有机物的特性数据

表1-2中列出了1322种有机物的特性数据。

熔点(℃)：为正常熔点。数值后标有“dec”时表示在熔点温度时会发生分解（即真正的熔点不可能存在）。

沸点(℃)：为常压沸点。数值后标有“dec”时表示在沸点温度时会发生分解，数值后标有“exp”时表示在沸点温度时会发生爆炸。

密度(g/cm<sup>3</sup>)：右上角的数字为摄氏温度，即密度为在此温度下的液体或固体密度。

折射率：右上角的数字为摄氏温度，表中所列数值为在此温度下的折射率。

临界性质：右上角有“\*”者表示此数值为估算值。

自燃温度：引起化学品自动点燃的最低温度。

闪点：在常压下，液体上充满了可燃蒸气，与空气混合后，能被一个火苗或火星点燃时的温度。数值后的“O. C.”表示此数值为开杯闪点。

爆炸极限：是指化学品蒸气（包括气、雾和粉末）与空气混合的临界比，即每一百个单位体积中的可燃蒸气的体积单位数，遇火花能引起爆炸的比例限度。如果属于气体或蒸气，则用与空气混合的百分比表示，是粉末可用g/m<sup>3</sup>（空气）表示。

表1-2中列出了1322种有机物的特性数据，当表中找不到相关有机物的特性数据时，可采用1.2节物质特性数据的估算法求得。

## 1.2 物质特性数据的估算方法

### 1.2.1 沸点估算方法

正常沸点指的是在常压情况下(1atm)物质的沸点，是物质最基本的物理性质、应用很广泛。这种性质的准确数据大多是从试验测试得来，目前已经比较齐全了。一般情况下，很少采用估算的数值。在必要的条件下，也有几种估算方法可供使用。

(1) Joback 法<sup>[2]</sup>