

B·T·布魯克斯等編

石油烴化学

第一卷

第二分冊

石油工业出版社

石油烴化学

第一卷

第二分册

B·T·布魯克斯等編

石油工业出版社

內 容 提 要

在这一分册里共包括十一篇文章。书中詳細論述了烃的物理性質及其結構，合成和淨化高分子的及低分子的烃类的實驗室方法，烃的光譜分析方法，如烃类的紫外光譜分析、紅外吸收光譜分析、联合散射光譜分析和烃的質譜分析等方法。

本書可供石油煉制工业中的研究人員和工程技術人員，用油单位的工程技術人員，以及石油学院和其他学院有关专业系的師生参考。

Benjamin T. Brooks Cecil E. Boord
Stewart S. Kurtz JR. Louis Schmerling
THE CHEMISTRY OF
PETROLEUM HYDROCARBONS
VOLUME I

根据Reinhold Publishing Corporation 1954年紐約版翻譯

統一書号：15087·794

石 油 煙 化 學

第一卷

第二分册

石油工业出版社出版（地址：北京六條石石油工業部內）

北京市書刊出版登記證出字第063號

石油工业出版社印刷厂印刷 新华書店发行

850×1168 $\frac{1}{16}$ 开本 * 印张13 $\frac{1}{2}$ * 314千字 * 印1—1,600册

1960年4月北京第1版第1次印刷

定价(10)2.00元

目 录

第十一章	物理性質与烴的結構·····	1
第十二章	烴类的紫外光譜·····	69
第十三章	分子构造与光譜学数据·····	88
第十四章	紅外吸收光譜及联合散射光譜在分析 上的应用 ·····	114
第十五章	烴的質譜 ·····	142
第十六章	重質石油餾分的組成及分析 ·····	177
第十七章	純烷烴及烯烴的制备 ·····	226
第十八章	低分子量脂环烷烴的實驗室合成法 ·····	268
第十九章	低分子量芳香烴的實驗室合成法 ·····	339
第二十章	高分子烴的合成和純化 ·····	365
第二十一章	費雪-托普許合成法·····	397

第十一章 物理性質与烴的結構

S.S. 摩爾茲

在考虑烴的結構与物理性質間的关系时，常常是先簡單介紹原子間鍵的性質[64,97,35]。現在一般認為形成鍵的电子在原子相聯結的附近的位置可以有很大的不同，換言之，在原子中間和四周有一个“电子云”，鍵电子在任何一个指定時間內所佔的位置可以用或然率来决定[97]。同时由紅外線和其他相类似的数据中已知这些鍵是可以弯曲和伸长的[35]。

另一方面，由石蜡晶体的X-光数据[35,30,22,61,66]和一些簡單烴在气态时的电子繞射的数据[35,65]可以得到当碳原子是以單鍵相联时，其間的距離大約是1.54埃，鍵角常在 $109^{\circ}28'$ 左右。这些鍵长与鍵角並不随着溫度而产生变化。

为了某些原因，鍵原子必須算作电子云的一部分並可以在“分子軌道”中移动。虽然当我们考虑飽和烴分子的大小时，这些鍵电子形成的鍵的长度和其間的角度常是非常接近[35]。不飽和烴类分子的鍵长与鍵角的变动很小，但仍是明显的。对于复杂芳香烴分子的鍵长的估計方法已有了很大的进展[120]。在討論烴的宏观物理性質时，用旧式的四角形碳原子的图形作为初步的假定仍是适用的，其中每一个單鍵节有着固定的方向和长度，單鍵可以自由旋轉，双鍵則不能自由旋轉。

分 子 容 积 和 密 度

結晶狀態下的正烷烴 法兰西斯和伯埃伯曾发表了一篇总结正烷烴X光数据的論文[22]，他認為正烷烴結晶成一条鋸齒形的長鏈，在这鏈中相鄰的碳原子之間的距離为1.54埃，沿着鏈軸碳

原子之间的距离为1.27埃。以下的方程式极恰当地表示出由15个碳原子至35个碳原子的正烷烃的碳数目和整个碳链长度的关系〔39〕:

$$\text{链长 (埃)} = 1.27N_1 + 2.0 \quad (1)$$

把伯埃伯、布朗、杜門德的数据〔66〕和米勒〔61〕的数据加以比較, 就可以看出上列方程式的最后一項常数的2实际上决定于試样是由哪种方法制备的, 而且可以波动于2.0至3.5之間。最低值接近于2, 即当正烷烃在玻璃板上結晶, 而且是在这样的結晶之下用X光衍射所測得之值。假如在結晶后X光測定以前曾加以机械扰动, 則〔1〕式的最后常数可达到較高值。我們認為比較小的数值是更恰当一些, 並且对于未經机械扰动的結晶而論, 这方程式也是准确的。

法兰西斯和伯埃伯称作为“A”結晶的正烷烃单元晶格是 4.97×7.45 埃的长方形截面。晶格的中央有一个烷屬鏈, 在每个角上有四个其他的鏈, 这些在角上的鏈的四分之一属于这个晶格。因此, 平均每个鏈的截面为单元品格截面的一半, 即18.5平方埃。

把正烷烃鏈的长度方程式乘以結晶状态的横截面, 就可以得出結晶状态下分子体积的方程式:

$$\text{每分子的体积, 立方埃} = 23.50N_1 + 37.0 \quad (2)$$

$$\text{每克分子的体积, 毫升} = 14.15N_1 + 22.3. \quad (2a)$$

以上的方程式适用于在“A”結晶形态的正烷烃。

用X射线研究結晶組成时, 石蜡样品的温度並沒有精确地記錄, 大致上是在 0° 至 25°C 之間。

表1是由甲烷至壬烷在 -253°C 的分子体积〔31〕, 这些数据一般可以用下面的两个方程式来代表。

$$\text{每分子在 } -253^\circ\text{C} \text{ 的分子体积, 立方埃} = 21.83N_1 + 26.2 \quad (3)$$

$$\text{每克分子在 } -253^\circ\text{C} \text{ 的分子体积, 毫升} = 13.15N_1 + 15.8 \quad (3a)$$

值得注意的是由方程式(2)至方程式(3), 每一个 CH_2 的增量减少7%, 同时“最后的常数”减少约29%。

烷烃的分子体积甲烷至壬烷, 亥尤塞的数据[31, 41]

表 1

化合物名称	-253°C时测定 的分子体积 (毫升/每克分子)	计算值*	差值
甲 烷	30.8	29.0	-18
乙 烷	40.0	42.1	+2.1
正 丙 烷	54.6	55.3	+0.7
正 丁 烷	66.4	68.4	+2.0
正 戊 烷	81.6	81.6	0.0
异戊烷(结晶态)	82.7	81.6	-1.1
异戊烷(过冷状态)	(85.1)	81.6	(-3.5)
正 己 烷	(94.6)	94.7	+0.1
正 庚 烷	(109.9)	107.8	-2.1
正 辛 烷	120.8	121.0	+0.2
正 壬 烷	136.0	134.2	-1.8

* -253°C时分子体积 = $13.15N_1 + 15.8$ 。

用一简单的直线方程式就可以极适当地表示出由甲烷至壬烷的正构烃类在-253°C的分子体积, 及正构 C_{15} 至正构 C_{35} 石蜡从X光数据得出的分子体积。因此, 可以总结为在结晶状态下用一直线方程式就是可以表示出正构烃类分子体积和碳原子数目的关系。

表2总结了所有关于正构烷链截面积的数据, 包括一些含氧有机酸中烷链部分的数据。

值得注意的是, 提出数据中的链间距是4.6至4.9埃时链中心间距是相同时, 六角形的链排列法所得的截面大约要比正方形的排法小3个平方埃。X-光数据及膜小数的数据都较符合, 而且指出当融化时, 正构烷链的截面积由18.5平方埃增加到20至24平方埃左右。

正構的石蜡烴鏈的橫截面積

表 2

計 算 方 法	平方埃	參考文獻
晶態, A形正方單晶格, 平均 2 個鏈		
4.97 × 7.45	18.5	(22)
恰低於融點下的晶態, 六角形, 間隔 4.6 Å (米勒)	18.3	(61) (22)
液態 (華倫)	21.2	(92)
液態 (史迪威) 鏈間隔 4.6 Å		
如假設為六角形間隔	18.3	(82)
如假設為正方形間隔	21.2	
液態 (摩瑞) 鏈間隔 4.6 Å (−70°C, 庚烷)		(60)
如假設為六角形間隔	18.3	
如假設為正方形間隔	21.2	
鏈間隔 4.9 Å (+25°C)		
如假設為六角形間隔	20.8	
如假設為正方形間隔	24.1	
膜分散實驗法, 亞當所用薄膜天平	20.6	(1)
列德 “液體凝聚態”	21至24.0	(71)
華許邦及貝雷		
棕櫚酸鈉——蘭格邁爾法	20.8	(93)
棕櫚酸鈉——表面張力法	22.9	
由增加 CH ₂ 的分子體積並假設每增加一個 CH ₂ 鏈長增加 1.27 Å		(41)
在 −100°C 時正構鏈	19.6	
0°C	21.0	
20°C	21.3	
+100°C	22.4	

正構烷的融化, 烷鏈的橫截面, 密度隨溫度的改變 米勒 (22, 61) 曾觀察到恰在融點溫度之下的正構烷烴形的結晶體, 在這樣晶體內正構烷烴鏈排列成在鏈和鏈之間有 4.6 埃距離的六角形態。史迪威由液體的 X 射綫數據求出在接近於融點的液態烷

鏈之間距離為4.6埃。

在烷鏈融化及進一步增加溫度時，其截面積的增加，可以認為是由于圍繞碳和碳間單鏈的旋動所致的。即使在同一的碳鏈中兩相鄰的碳原子間的真正距離並沒有改變，旋轉運動的自由勢使令這碳鏈佔有較大的空間。另一種說明方式是圍繞碳和碳鏈旋轉的自由勢使碳鏈的一部分產生動搖。當碳鏈由于“搖動”而產生側面移動的增加時，其所佔區域叫做“游離”區域〔60〕。

當每一個碳鏈的有效截面變得大到使晶體聚合的力量不再能把它聚合在一起時，就產生融化現象。

摩瑞、吉布斯、愛而林〔60〕把正構烷烴在液態時分成三個不同的情況。

(1) 恰在融化溫度以上的一種近似結晶形態，這時烷鏈間的距離及排列情形和晶體中的距離差別不大。

(2) 在分子內已有一定程度的“搖動”及“游離”現象的情況。

(3) 恰低於沸點，分子內呈現端點 (End-over-end) 旋轉現象。

我們認為第2種情況是與烴鏈中部分的移動有關，而不是整個分子的搖動。

當分子量增加時，隨溫度而改變的體積變化系數或密度變化系數達到一個最小的極限值，這時我們認為是這個長鏈的部分的傍側移動，而不是整個大分子的移動。

正烷烴和其他碳氫化合物在液態時的密度可以用下列各方式來表示〔42, 46, 27〕：

$$d_{\frac{t}{4}} = d_{\frac{20}{4}} + \alpha (t-20) + \beta (t-20)^2 \quad (4)$$

$$\alpha \times 10^5 = -55.3 - \frac{3516}{\text{分子量} + 12} \quad (\text{當分子量} > 100 \text{時}) \quad (5)$$

$$\beta \times 10^7 = +4.0 - \frac{941.2}{\text{分子量}} \quad (\text{当分子量} > 200 \text{时})$$

(6)

当分子量在70至200間时， α 和 β 的数值可以用利浦金和科尔斯[48]的表1中的数值。

所有的碳氢化合物密度的系数都是分子量倒数的函数的原因，将在后面与分子体积的增量同时加以讨论。

密度系数是计算饱和烃中环烷环[50]的重量百分数的基础，这是一个有趣而又有用的方法。在不同的密度时可以用以下的方程式：

如密度是在0.861以下，环的重量百分数

$$= \frac{A + 190.0d - 217.9}{0.539d - 0.249}, \quad (7)$$

如密度是在0.861以上，环的重量百分数

$$= \frac{A + 102.8d - 142.8}{0.262}, \quad (8)$$

式中 d = 在20°C时，以克/毫升为单位的密度， $A = -10^5 \alpha$ 。

在运用这个方程式时， α 是由分子量推算而得（方程式5）的，而分子量是经沸点和密度，粘度和密度或在二个不同温度时的粘度关系而得到的准确数据[59]。

用这个方法来估计复杂烃混合物中环烷重量百分数的可靠性，是可以与其他方法相比的。一般地，环烷的含量在从零到百分之一百范围内[42]，其准确度可达 $\pm 6\%$ 。

在20°C和1个大气压下正构烷烃的分子体积和密度对于分子量较高的正烷烃（ C_{10} 到 C_{40} ）分子体积可以下式相当正确的表示出来：

分子量体积, 单位为埃/分子 $= 27.19N_1 + 51.1$ (9)

分子体积在 20°C 1 大气压时, 单位为毫升/克分子

$$= 16.38N_1 + 30.8 \quad (9a)$$

对于低分子量的正构烷烃, 上式的不正确性也随之增加, 如: $\text{C}_{10} + 0.3\text{C.C.}$; $\text{C}_8 + 0.8\text{C.C.}$; $\text{C}_6 + 1.6\text{C.C.}$; $\text{C}_4 + 2.5\text{C.C.}$ 。美国石油协会的数据, 对于正构烷烃, 从 C_{10} 到 C_{40} 每一个碳原子烷链的增量是 16.38; 从 C_{25} 到 C_{40} 这种增量是 16.40 毫升。

如果我们以 1.27 埃为每增加一个 CH_2 碳链的长度, 则对于每一个碳链 (CH_2) 的分子体积增量为 27.19 立方埃时, 相当的截面为 21.5 平方埃。如果我们用史迪威的数值, 在液态时 CH_2 的长度为 1.24 埃, 我们可以得到截面值为 21.9 平方埃。这些数据与表 2 中膜分散试验所得的数据相当符合。

如果我们引伸到非常高的分子量的石蜡烃时, 在方程式 (9) 或 (9a) 中 CH_2 增量的总和与常数项比较, 其值高得非常大, 以致常数项可以忽略不计。这样就得到了一个“极限密度”的概念, 也就是 14.026 除以在极限情形下每一个 CH_2 的分子体积增量。斯米顿伯格 [80] 估计出这个极限密度为 0.8513, 相当于在极限情形下每一个 CH_2 的分子体积增量为 16.47。从加氢后的橡胶, 我们得到了一个稍含支链的烃类极限密度为 0.8563, 这样相当于 CH_2 的分子体积增量为 16.38。

如果从实际分子体积中减去链分子体积增量 ($16.38 \times N_1$), 则对于大于 6 碳的正构烷烃分子体积的增量是相当衡定的。

正构烷烃的密度与碳原子数间的关系有很合适的方程式可以代表:

斯米顿伯格和米勒的方程式是:

$$d = 0.8573 - \frac{1.3100}{N_1 + 0.82} \quad (10)$$

相当于 [42]

$$V = 27.72 + 16.476N_1 + \frac{21.87}{N_1 + 0.72} \quad (11)$$

用这个方程式所算得的分子体积与最好的实验数据間可以符合到0.1毫升/克分子。最近何尤金 [34a] 也曾提出了一个很好的方程式:

$$V = 27.20 + 16.50N_1 + 27/N_1 \quad (11a)$$

分子体积和碳原子数間的关系在結晶状态下是直綫关系，而在液体状态下变为非直綫关系，这无疑是因为在液相中鍵振动的复杂性而引起的。烃鏈的端点旋轉可能是在20°C时；小于5个碳的烃类有剩余体积增量的原因，是这些低分子的烃类已是很接近于它們的沸点。

異構的石蜡烃 众所週知，在烃鏈上加入一个甲基对分子体积可以产生显著的影响，同时这种影响与支鏈的位置有关 [7, 34a, 85, 90]。

表3是測得的各种影响，異构烷烃的数据是美国石油协会的 [74]。很明显，在近鏈的端点处如有取代基，則分子体积增加。取代基在中間时体积减少（对正构物而言）。伯尔特 [7, 8] 也曾发表过比較異构烷烃和正构烷烃性質的数据。

如果我們考虑到碳—碳鍵旋轉的趋势，則大致上講这些影响都是合理的。如果有分子阻碍將干扰自由旋轉时，則对正构物而言，分子体积將相对的减少。另一方面，在第二个碳原子上有一个支鏈时，第二个碳原子將与这个支鏈一起旋轉，因而較在鏈的末端的烷基扫过更多的体积。

威尼尔 [98, 99] 拟定了較为簡單的方法以計算各种結構式的相对的内部干扰。他的方法曾为布拉特很仔細地研究过，布拉特並曾用于分子体积的数据中。

按照布拉特的命名以及威尼尔的概念的定义 我們設：P为有分子阻碍現象的对数式相距为三个碳原子的烷基数；W为威尼尔数值，即分子中在每一个鍵的两边的碳原子数的乘积的总和。

威尼尔数值是表示在一个分子中所有碳原子对間的鍵数。

烷基對於烷烴分子體積的影響；

異構物的分子體積減去正構物的分子體積

(美國石油協會44的數據) 毫升/克分子

表 3

烷基的位置	烷基	戊烷 C ₅	己烷 C ₆	庚烷 C ₇	辛烷 C ₈	壬烷 C ₉	癸烷 C ₁₀
2	甲基	+1.22	+1.24	+1.12	+1.07	+1.06	+0.53
3	甲基	—	-0.97	-0.72	-0.76	-0.76	-0.89
3	乙基	—	—	-3.02	-2.52	-2.31	-2.58
4	甲基	—	—	—	—	-0.56	-0.59
4	乙基	—	—	—	—	-3.01	-2.58
5	甲基	—	—	—	—	—	-0.68

2-甲基加以下的取代基：

2	甲基	+6.87	+2.06	+2.16	+1.69	+1.80	+1.49
3	甲基	—	-0.45	-2.39	-2.20	-2.06	-2.00
3	乙基	—	—	—	-3.80	-3.31	-4.19
4	甲基	—	—	+2.41	+0.50	+0.41	+0.97
5	甲基	—	—	—	+2.11	+0.69	(-1.59)
6	甲基	—	—	—	—	+2.20	+0.41
7	甲基	—	—	—	—	—	+1.57
2,3	甲基	—	—	-1.35	-3.07	-2.83	-3.19
2,4	甲基	—	—	—	+2.49	+0.51	+0.60
3,3	甲基	—	—	—	-5.30	-4.91	-4.89
3,4	甲基	—	—	—	—	-5.2	-5.49

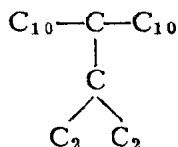
計算正構烷烴和異構烷烴間分子體積的差的布拉特—威尼爾方程式是：

$$\Delta V = 2.256 \Delta p - 10.95 \frac{\Delta w}{N^2} \pm 0.21 \text{ 毫升/分子}, \quad (12)$$

式中 Δp 和 Δw 是威尼爾增量， N 是碳原子數。

表 4 中有各種異構己烷和庚烷的 p 和 w 值，以及對於正構烷烴的 Δp 和 Δw 值。對於正構烷烴的 ΔV 值，有用布拉特方程式計算所得的也有實驗所得的。正如布拉特所說的，實驗數值和計算數

值間的符合程度大約可以达到0.2毫升或更少。但是 布拉特方程式对于美国石油协会第四十二題目組所合成的高分子碳氢化合物的数据並不十分符合[78]。例如PSC化合物53的結構式是



其分子式是 $\text{C}_{26}\text{H}_{54}$ 。布拉特方程式預計这个化合物的分子体积將較其正构的同系物大2.7毫升。

用布拉特-威尼尔方程式[67]对正構和異構烷烴間差别的計算

表 4

化 合 物	分子体积	W	ΔW	p	Δp	異构物減去 正构物 $\frac{\Delta V}{\text{計算}}$ $\frac{\Delta V}{\text{实验}}$		实验值 減去計 算值
正己烷	130.69	35	0	3	0	—	—	—
2-甲基戊烷	131.93	32	-3	3	0	+0.91	+1.24	+0.33
3-甲基戊烷	129.72	31	-4	4	+1	-1.04	-0.97	+0.07
2,2-二甲基丁烷	132.74	28	-7	3	0	+2.13	-2.06	-0.07
2,3-二甲基丁烷	130.24	29	-6	4	+1	-0.43	0.45	-0.02
						Av.		0.12
正庚烷	146.54	56	0	4	0	—	—	—
2-甲基己烷	147.66	52	-4	4	0	+0.89	+1.12	+0.23
3-甲基己烷	145.82	50	-6	5	+1	-0.92	-0.72	+0.20
3-乙基戊烷	143.52	48	-8	6	+2	-2.72	-3.02	-0.07
2,2-二甲基戊烷	148.70	46	-10	4	0	+2.23	+2.16	+0.30
2,3-二甲基戊烷	144.15	46	-10	6	+2	-2.23	-2.39	-0.11
2,4-二甲基戊烷	148.95	48	-8	4	0	+1.78	+2.41	+0.63
3,3-二甲基戊烷	144.53	44	-12	6	+2	-1.83	-2.01	-0.18
2,2,3-三甲基丁烷	145.19	42	-14	6	+2	-1.38	-1.35	-0.03
						Av.		0.22

事实上这个物質所佔的体积是2.9毫升，小于正构的同系物。

对于一般的烴类的分子体积用下面的关系式可以得到相当近

似的数据:

在20°C, 1大气压下的分子体积, 毫升/克分子=16.28N₁+31.2 (13) 这个关系式对 79 个美国石油协会44的碳氢化合物[74]的平均误差为2.3毫升, 平均值的误差为+0.4毫升。对于39个美国协会42的碳氢化合物[78], 这个简单公式的平均误差是1.4毫升, 平均值的误差是-1.2毫升。

环烷烃 碳原子形成环状的饱和烃称为环烷烃。在石油中, 5碳和6碳的环居多。在分子量范围中, 可能有一个分子含有一个以上的环; 这些可能是互不相干的环或是有几个碳原子同时是二个环的组成部分。后面一种可以称作稠环或是络合环结构。

首先考虑非稠环。表5是五碳和六碳环烷的数据, 这些环烷每个分子只有一个环。表5同时列出了由总体积减去支链的体积所得的环的体积。

根据这些数据, 一个C₅环的分子体积是在94毫升到97毫升之间; C₆环的数值是在108和111毫升之间。

表6是环中有三个到十二个碳原子的非稠环环烷的分子体积。在这个表中, 环体积A是对每一个支链碳原子减去16.28毫升后的环体积。这些环体积都画在图1中, 图中科尔斯和利蒲金的方程式。

$$\text{分子体积} = 13.15N_2 + 31.2 \quad (14)$$

是实践。

常数31.2是体积的分子增量, 将在后面讨论。虚线是3到8碳的单环环烷烃的数据, 这些环烷烃没有支链。可注意的是不带支链的环烷环的分子体积比从烷基环烷算得的环体积要低一点, 並可以用下式来表示之:

$$\text{分子体积} = 13.15N_2 + 28.7 \quad (14a)$$

没有支链的环烷的分子体积小和密度较高, 可能是由于环与环之间的叠合较好, 因为在环的一侧去与另一环接近时干扰较少。

表6中环体积B是环烷环的分子体积减去支链的体积 (16.28

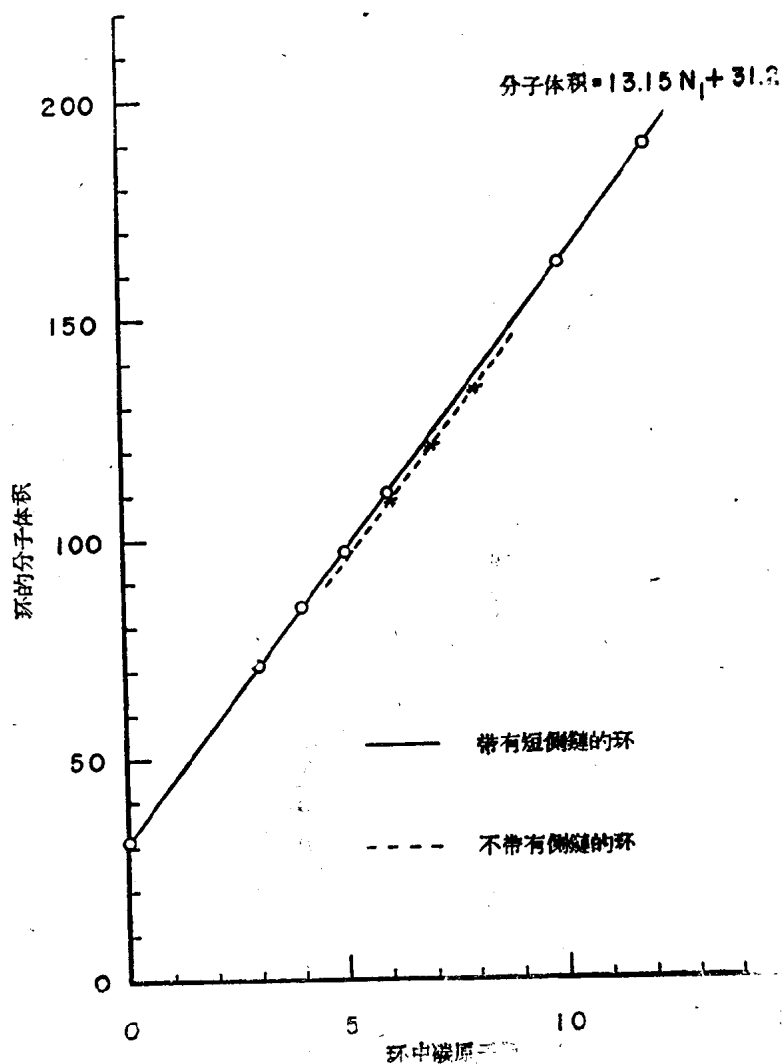


图 1 环分子体积同环中碳原子数的关系

N_1) 再减去体积的分子增量 (31.2毫升)。环体积B除以环中的碳原子数就得到环中 CH_2 的体积增量或碳原子的体积。表6中最后一行数值说明环碳原子的增量是相当衡定的。我们相信, 与指定数值13.15的差数是合理的实验误差。

异构物间有着明显的分子体积的差别。对于二

环烷的分子体积 (美国石油协会44题目的数据) [74]

表 5

分子中碳原子数	总分子体积		环体积A ^a	
	C_5 环 化合物的号数	C_6 环 化合物的号数	C_5 环	C_6 环
5	94.09	1 —	94.99	—
6	112.41	1 108.09	86.13	108.00
7	129.82	6 127.61	97.26	111.33
8	146.10	15 143.94	97.26	111.38
	16.28 ^b	16.33 ^b	95.3 ^c	110.0 ^c

a. 环体积A = 总分子体积 - 支链体积 = 总分子体积 - $16.28N_1$.

b. 8个碳原子和7个碳原子的分子体积的差数

c. 基于 CH_2 的极限值16.42和30碳原子的正构烷基环烷的数据。

烷基环烷烃的环烷环的分子体积

表 6

环中的碳原子数	化合物的数目	环体积A ^a	环体积B ^b	环中 CH_2 的体积B/ N_2	参考文献
3	7	71.2	40.0	13.33	(90)
4	5	84.3	53.1	13.28	(90)
5	23	96.8	65.6	13.12	(74)
6	51	110.1	78.9	13.15	(74)

在同一分子中有

二个单独环时的

碳原子数

10 ^c	3	161.7	130.5	13.05	(90)(78)
12 ^d	8	188.8	157.6	13.13	(90)(78)

a. 环体积A = 分子体积 - 支链体积 = 分子体积 - $16.28N_1$.

b. 环体积B = 分子体积 - 支链体积 - 分子体积增量 = 分子体积 - 16.28

$N_1 - 31.2$.

c. PSC化合物111和15再加二环戊烷乙烷[90]。

d. PSC化合物520, 518, 505, 19, 11, 139, 65再加二环戊烷甲烷[90]。