



要 目 容 内

这本手册的编写参考了国内外许多文献，力求做到数据准确、内容全面、使用方便。全书共分八章，第一章为总论，第二章至第八章分别为烷烃、烯烃、炔烃、芳香烃、含氧有机物、含氮有机物、杂环化合物的物理化学数据。本书可作为高等院校化学、化工、石油、冶金、轻工、医药、环境、材料等专业的教材，也可供从事上述工作的工程技术人员参考。

# 烃类物理化学数据手册

汪文虎 秦延龙 编著

刘馥英 审



烃加工出版社

ISBN 7-80043-106-1/T·06 定价：14.00元

## 内 容 提 要

本手册收集和整理了2577个烃类化合物和16种石油工业中常见非烃类气体的物理化学数据。内中包括热力学性质：密度、常沸点、常冰点、蒸气压、相变热、热性质系数、临界参数；传递性质：气、液相粘度和导热系数；溶液性质：气液相平衡常数、溶解度参数；热化学性质：燃烧热、生成焓、生成吉氏能、化学焓；分子参数：L-J位、偶极矩、电离能、回转半径；光学性质：折光率、折射度、比色散；石油工业常用的物性参数：特性因素、关联指数、苯胺点、辛烷值，以及表面张力等基础数据、经验方程系数、关联公式和推算方法。并附有这些烃类的结构式以及400余种非烃物质的临界性质数据。

本手册可供石油加工、化工行业的工程技术人员查阅，也可供有关教学、科研、生产人员参考和应用。

曹 麟 刘 馥 英 审

曹 麟 刘 馥 英 审

## 烃类物理化学数据手册

汪文虎 秦延龙 编著

刘馥英 审

·  
烃加工出版社出版

北京仰山印刷厂排版

海丰印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

·  
787×1092毫米 16开本 38<sup>1</sup>/<sub>2</sub>印张 982千字 印1—2200

1990年5月北京第1版 1990年5月北京第1次印刷

ISBN 7-80043-106-1/TQ·66 定价：17.90元

## 编 者 的 话

《烃类物理化学数据册》从编写到出版，得到了许多同志的鼓励和支持。

我们听取了刘馥英、武葆琛先生的意见，把本手册的实用性放在首位，俾使对我国石油和化学工业的发展有所助益。

承蒙天津大学马沛生，Oklahoma州立大学Ruth Erbar，大庆石油化工设计院杨震寰等先生为本手册提供了有价值的数据和材料。北京炼油设计院电子室免费让我们使用计算机，并为本手册整理数据予以很多协助。我们还趁此机会对华东化工学院计算机房的优良服务，以及杨东华、马大钧、宋慧萍、王颂赞同志的热情支持表示感谢。

烃加工出版社责任编辑章文珍同志为本手册的出版尽心尽力，还做了不少份外的工作。参加本手册编纂者还有闵魁宏、王仁远、沈本贤、韦利行、舒朝霞、唐苏欣、俞伯伟、薛辰东、孙乃岳、黄族鹏、宋学敏、陆卫东、叶侨燕、沈康、潘稼钢、陆忠义、陈鹤、许明、朱济莹、马乐等。高宗强同志对本手册作了评审，使本手册得以顺利出版。

本手册的初稿征集过好几位同志的意见，有些已采纳。然而，最重要的意见是希望本手册包括烃类混合物系统和石油的性质，却因时间和精力不足，未能做到。

手册中的数据尽管经过反复检查，难免还有差错。读者对数据和方法有修正、补充或改进，望随时向烃加工出版社或我们指出，以便在再版时补正。

1988.11.于上海

英籍版

日六十月一十年八八式一

## 序

《烃类物理化学数据手册》的出版给石油和石油化工工作者提供了一本有价值的工具书。烃类是有机化学的基石，许多物性手册中都列有一些烃类的性质。但多数手册上所列的烃类是代表性的和常见的。近年来有机化工发展迅速，老的这些数据已经不能满足科学研究和工业应用的需要，本书在很大程度上弥补了上述的缺陷。在今天看来，它所收集的烃类化合物的个数和它们的性质项目已相当完备，尤其是碳十以内的烃的数据是在目前所有手册中比较完善的。烃类化合物的总数也是较多的。

本书的另一特点是对缺少文献数据的性质，尽可能用推测的方法予以弥补。为了对读者负责，编者用严肃认真的态度对文献上发表的各种推测方法进行了评估，而不是人云亦云任意选用。所列的推算值都是经过比较挑选出来，并用最优方法求得的。编著者在收集、整理和核算有关资料时应用了计算机技术，便于推广计算机的应用。这是在其他同类工具书中所欠缺的。

本书的文字说明部份介绍并推荐了如何使用表列数据的方法，有助于读者迅速、正确地用比较好的方法算得烃类在各种状态下的性质。使从事实际工作的同志使用方便，受他们的欢迎。

我感到这本手册也有些不足之处，一是各个数据的出处未作交待，使读者对某一数据有疑问时，无从查对；二是文字说明部分与数据部分相比，比较薄弱。编者可能拘泥于篇幅，因此对一些基本概念和计算方法的来龙去脉交待得不够详尽。这就要求读者有一定的基础知识。

编辑这本手册的工作量是巨大的。作者们花了几年时间才完成，又请国内外有关专家的审阅，祝愿参加本书的编者所付出的辛勤劳动将会收获丰硕的果实。

刘馥英

一九八八年十一月十六日

## 编 纂 说 明

烃类是自然界中最常见的有机物，是天然气、石油及其它矿物燃料的主要成分，是近代石油化学工业的基本原料。无论是在基础理论研究、工业设计计算或是生产操作实践中，都要知晓有关物质的物理化学性质数据，石油加工过程的研究、设计和模拟计算则直接依赖于烃类的物性数据。

众所周知，要想使工业装置设计得既先进合理又稳妥可靠，除了有正确的方法外还要有完整和准确的数据。目前工程技术人员在取得和利用物性数据方面还存在着一些困难，这主要表现在：

1. 现有数据手册收集的物质种类和性质项目不够齐全，而在物系中只要有一个化合物的数据找不到，就难以计算；
2. 手册上的数据往往来源不明，可靠性不详；来自不同资料的数据不一致，使用者无所适从；
3. 数据的单位混乱，带来换算的麻烦，还可能导致错误；
4. 用查图法取得的数据精确度有限，有主观误差，不便于电子计算机计算；
5. 资料上介绍了许多种计算方法和物性推算方法，究竟何者准确，适用范围如何，不甚明白；要掌握和评选这些方法颇为费时费力，而工程技术人员承担的任务大多是紧迫的，没有充分的时间仔细推敲。

要完全解决以上问题，似乎是不可能的。但是，无疑可以做得好一些，让使用物性数据的人感到较为满意，这就是编纂本手册的出发点。

近几年来国内已经有不少人认识到性质数据的重要性，陆续出版了一些物性数据手册。然而，现有的国内出版的手册上收集的烃类数据较少；国外出版的手册中，以美国石油学会（API）出版物收集的烃类最多，可惜性质尚不够完全。此外，内中有不少数据以列表值形式出现。篇幅太大，也不便于电子计算机计算。本手册试图弥补两者的缺点，成为一部内容详尽的烃类物性手册。

这本手册尽管对从事理论工作的同志也有些用处，但是主要是为从事实际工作的同志编写的，因此在编纂本手册时考虑到：

1. 收集和整理尽可能完备的数据。
- 搞数据工作的人争论不休的问题之一是，不那么可靠的数据要不要放进手册中去？有一派认为，有数据总比没有数据好；另一派则认为，不可靠的数据比没有更糟。
- 事实上，准确和不准确是相对的，标准是在变动的，数据总是在不断更新的，针对不同的意图应该有不同的要求。对工程技术人员而言，有数据比没有数据好的观点大体上是可以接受的。当然这些数据应该是有根据的，并且它们的误差范围大体上是已知的。如果你想从物性数据来建立或检验某些理论或公式，自然应该斟酌一下数据的取舍。

这里还应该提一下，石油是组成极其复杂的混合物。石油馏分的物理性质基本上（不是完全！）取决于构成它的主要成分——烃类的性质。石油的热力学性质及其它物理性质的关联很多（并非全部！）是用纯烃性质数据建立和验证的，而且实际上有一部分推算方法对烃和石油是通

用的或相近的。本手册中列有许多碳10以上“重质烃”的数据。这些烃的单体化合物除了少数，例如正构烷、萘系物等之外，在工业中很少有机会碰到，但是它们的数据在判定石油馏分的性质时是有用的。此外，人们还可以从中得知烃族性质的一些规律，这些规律对于探讨诸如“哪些烃是润滑油的理想组分”之类的问题有参考价值。

与此相反，石油的化学反应性质，比如抗氧化安定性和热稳定性等等，受微量组分含量的影响变化是敏感的，难怪可以借助加入少量添加剂来改变其性质，然而这些问题已超出本手册讨论的范围。

2. 烃类化合物的数目可以说是无限的，而任何一本书的内容总是有限的。在这样的前提下，我们把注意力集中在较为常见的化合物和较为常用的性质上，因为这些数据在工业上也是最有意义的。

3. 对于所收入的所有数据和有关方法，注意充分收集资料和认真地加以比较鉴别，并且注意到数据之间的内在联系。为了编纂本手册查阅了近500篇资料，编写了数以百计的程序，力求择优录用，少出差错。

4. 本手册只给出基础性质和有关经验公式的系数，而并不给出不同温度、压力、相态下有关性质的列表值。后者尽管便于看出性质随温度、压力变化的具体情况，可是所占篇幅太大，往往还要内插，使用不便。

在电子计算机日益普及的今天，设计和计算工作已经或者正在发生深刻的变化。程序化的方法不仅可以大大提高工效，而且可以显著改进工作质量。事实上，本手册特别适合于编制电子计算机数据库。为了方便读者使用，在手册后面部分推荐了一些经我们检验认为比较好的方法，这些方法和表列数据配合，可以计算各种条件下的热力学性质和迁移性质。

5. 最后，本手册完全采用国际单位制——SI制。

SI制是科学的、先进的、合理的单位制度。1984年我国国务院发布了《关于在我国统一实行法定计量单位的命令》。SI制和工程中现在流行的公制单位大同小异，和英制单位则有很大差异。为了方便读者，手册中给出了有关换算系数。至于本手册中得自参考文献的公式，未予改变单位制度，以免变得面目全非。

要编写这样一本手册，工作量是相当大的，要花费很多的人力和时间。因此本手册的各部分编写水平会有些参差，而且数据和方法的更新和发展相当快，手册中的内容必定有一些并非最新、最准、最好的，这个缺陷也许是大多数出版物都难以避免的。

除此以外，本手册虽然篇幅甚大，内容上仍有局限性：

1. 只收集烃类的性质，而未收集非烃化合物的数据。即使在石油工业中也会遇到许多非烃类化合物，诚然这些化合物的数据也是重要的，可是编者考虑收集至哪个“界限”难以确定，而且我们不打算介入不那么熟悉的领域，以免出不必要的差错，因此除了几种石油工业中常见的气体外，其余非烃化合物皆不予编入。

2. 虽然本手册收集了那么多化合物，但还有一些工业上有可能遇到的烯烃，炔烃未编进去，稠环烃也收得不够全。至于非石油烃亦很少编入。

3. 本手册只收录纯组分数据，不收集诸如溶解度、扩散系数、相平衡常数等二元或多元数据。

理由很简单，对每一种混合性质，二千个化合物就有四百万个二元系数，既没有可能也无必要列出这么多数据。而且对于烃-烃系统用适当的方法从纯组分性质数据来关联多元性质基本上可以满足工程计算的需要，本书将间接介绍一些这类方法。

4. 从性质项目来说,本手册是相当齐全的,不过在表中还存在一些“空格”,比较重要而又缺得较多的有冰点、融化热和液体粘度等数据,这些数据我们既未找到文献资料报道也没有比较可靠的推算方法。其他空缺多的性质有辛烷值、苯胺点、介电常数、偶极矩等,幸好这些数据在工程计算中很少直接用到。凡是缺少的数据,手册中都留有空白,以便读者自己补充。

5. 本手册只列出一小部分参考文献,而且尽可能列“第二手”即综合性的文献资料。这些做法都是为了对大多数读者比较实用,而不感到冗繁。



# 目 录

## 编纂说明

I	表列数据项目说明	( 1 )
II	热力学性质和迁移性的计算	( 14 )
III	物性推算方法	( 27 )
IV	C <sub>10</sub> 以内烃类性质 (表 1)	( 82 )
V	C <sub>11</sub> 、C <sub>12</sub> 异构烷的性质 (表 2)	(258)
VI	C <sub>10</sub> 以上烃类性质 (表 3)	(310)
VII	常见非烃物质的性质 (表 4)	(434)
VIII	分子结构式	(438)
	附录	(578)
	英文名索引	(597)

# I 表列数据项目说明

全部数据用三种表列出：表1为 $C_{10}$ 以内（包括 $C_{10}$ ）烃的性质数据；表2为 $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 异构烷的数据；表3为除表2以外 $C_{10}$ 以上烃的性质数据。表4为石油工业中常见非烃类气体的数据。

表中只有部分数据标明为文献值还是推算值，因为文献值的数据有的来历不明，也有可能不是实验数据而是推算数据。

兹将有关数据项说明如下。

## 一、序号

本手册各表所编的流水号，均为四位数。表1以1打头；表2以2打头；表3以3打头至9打头。

S打头的编号表示美国石油学会有关手册中未收录的化合物。

## 二、编码

这一栏是空着的，留予使用者建立数据库时填写自行选定的编码。




## 三、中文名

采用中国化学会1980年所编《有机化学命名原则》一书所订的命名法则。

## 四、英文名

参照美国石油学会的命名。少数API手册上没有收集的化合物用其他资料上查来的名称。

## 五、结构式

本手册中苯环用表示，而环烷环用、等表示。

顺式和反式用价键的方位来示意。或以实线与虚线来区分。对于立体化学的异构物，如桥式、椅式、R型、S型不加区分，手册中所列为自然混合物的性质数据。少数化合物的异构体，按原始文献加注“低沸点”（LB）或“高沸点”（HB），一般说来异构式中反式的沸点较低而顺式的沸点较高。

## 六、碳氢原子数

令烃类的分子式为 $C_nH_m$ ，则n为碳原子数、m为氢原子数。

## 七、分子量MW

计算值。取碳原子量 = 12.011；氢原子量 = 1.00794。

数据来自《Pure and Applied Chemistry》V.55, Page 1101 (1983)。

## 八、液体密度d

当饱和蒸气压低于101.325kPa时，d为该压力下空气饱和的液体密度；而当蒸气压高于101.325kPa时，d为饱和液体（与自身蒸气相平衡）密度。d的数值已作过空气浮力校正，有关密度计算的质量是真空下的质量。有注脚t的密度数据系由其它温度下的密度换算而来。注脚c表示推算值。

单位换算：手册中所列基本单位是 $[g/cm^3]$ 。换算为 $[kg/m^3]$ 乘以1000；换算为 $[g/ml]$ 乘

以1.000028; 计算摩尔体积浓度 $V[\text{cm}^3/\text{mol}] = MW/d$ ;  $V[\text{m}^3/\text{mol}] = 10^6 MW/d$ ; 换算为重度 $[N/\text{m}^3]$ 乘以9806.65; 换算为液体比容 $[\text{cm}^3/\text{g}] = 1/d$ 。

### 九、液体比重SG

在 $15\frac{5}{9}^\circ\text{C}$ 下, 被压力为101.325kPa湿度为50%的空气饱和的烃, 对同样条件下的水, 其单位

体积的质量之比, 亦即为视密度。两者皆未扣除空气浮力的影响。

比重是无因次的。

### 十、API比重指数 $^\circ\text{API}$

由比重SG求得,

$$^\circ\text{API} = \frac{141.5}{\text{SG}} - 131.5 \quad (1-10-1)$$

### 十一、三相点温度 $T_3$

纯物质气液固三相平衡共存的温度, K。三相点压力等于三相点温度下的液体饱和蒸气压, 本手册未列出数据。需要时读者可自行计算。

数据皆为文献值。

### 十二、常沸点NBP

在101.325kPa下纯组分的沸点。有注脚V的, 表示该数据由减压下的沸点换算而来。有注脚T的, 表示该数据由Forman-Thodos法推算临界温度 $T_c$ , 再由Lydersen法从 $T_c$ 推得的常沸点。

### 十三、沸点的压力系数 $\left(\frac{\partial T_b}{\partial P}\right)_\sigma$

由Antoine方程常数求得, 表示压力对沸点的影响, 只适用于压力与标准大气压甚为接近的场合。基本单位 $[\text{K}/\text{Pa}]$ , 与 $[\text{C}/\text{Pa}]$ 等同。换算为 $[\text{K}/\text{mmHg}]$ 或 $[\text{C}/\text{mmHg}]$ 乘以133.322。

### 十四、Antoine蒸气压方程系数

Antoine蒸气压方程系数配合下式使用。

$$\ln P^s = A - \frac{B}{C + T} \quad (1-14-1)$$

式中,  $P^s$ ——饱和蒸气压, Pa;  $T$ ——绝对温度, K。

由上式计算饱和蒸气压:

$$P^s = \exp(\ln P^s) \quad (1-14-2)$$

计算压力为P下的沸点 $T_b$  [K];

$$T_b = \frac{B}{A - \ln P} - C \quad (1-14-3)$$

### 十五、蒸气压 $P^s$

$P^s$ 为 $25^\circ\text{C}$  (298.15K) 下的数值。基本单位 $[\text{Pa}]$ 。换算为 $[\text{atm}]$ 乘以 $9.869232 \times 10^{-6}$ , 换算为 $[\text{mmHg}]$ 乘以 $7.50062 \times 10^{-3}$ ; 换算为 $[\text{工程大气压}]$ 即 $[\text{kgf}/\text{cm}^2]$ 乘以 $1.019716 \times 10^{-5}$ ; 换算为 $[\text{mmH}_2\text{O}]$ 乘以0.1019716; 换算为 $[\text{bar}]$ 乘以 $10^{-5}$ 。

## 十六、液体膨胀系数 $\beta$

在标准大气压和25℃下，温度升高每1 K，液体的体积膨胀率，即：

$$\beta = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \quad (1-16-1)$$

对于常沸点低于25℃的物质，为饱和液体的膨胀系数，即：

$$\beta = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_\sigma \quad (1-16-2)$$

密度数据为五位有效数字的物质， $\beta$ 值由不同温度下的密度值得求。其他物质的 $\beta$ 由饱和液体比容普遍化关联求得。

换算：用℃温标，数值不变。 $\beta$ 的因次是温度的倒数。

## 十七、液体折光率 $n_D$

表中列出20℃和25℃下被空气饱和的烃对空气的折光率。折光率是用钠黄线——D线( $\lambda = 589.26\text{nm}$ )测定的，无因次。

下角注有c的数据，系由结构贡献法求得的分子折射度和液体密度推算得的结果，注脚t表示由其他温度下的折光率换算而来。

## 十八、折光率的温度系数

在标准大气压力和25℃下，温度升高每K或每℃，折光率的变化， $\left( \frac{\partial n_D}{\partial T} \right)_p$ 对于常沸点

低于25℃的物质为饱和液体的折光率温度系数 $\left( \frac{\partial n_D}{\partial T} \right)_\sigma$ 。

对于 $n_D$ 有五位有效数字的物质，折光率的温度系数用不同温度下的 $n_D$ 来确定。其余物质由分子折射度和液体比容关联求得。

折光率温度系数的因次为温度的倒数，即[1/K]。

## 十九、分子折射度 $R_D$

用修改的Lorentz-Lorenz公式计算：

$$R_D = \frac{MW}{d} \left( \frac{n_D^2 - 1}{n_D^2 + 2} \right) \quad (1-19-1)$$

Lorentz-Lorenz原公式采用波长为 $\infty$ 下的折光率 $n_\infty$ 计算，该数据无法实测，只能外推。本手册取用 $n_D$ 的数据计算。

公式中的 $d$ 和 $n_D$ 是同温度、同相态下的数值。 $R_D$ 随温度的升高而增大，但变化甚小。

表列 $R_D$ 数据，有 $d$ 和 $n_D$ 文献值的，有从 $d$ 和 $n_D$ 计算的，其余用结构贡献法推算。

## 二十、比色散

比色散定义为：

$$(n_F - n_C) / d \quad (1-20-1)$$

式中， $n_F$ ——液体对F线（波长486.13nm）的折光率； $n_C$ ——液体对C线（波长658.38nm）的折光率。

比色散和比容的单位相同。即[ $\text{cm}^3/\text{g}$ ]。

## 二十一、辛烷值

辛烷值包括六项数据，其中马达法三项，研究法三项。马达法辛烷值按ASTM D-2700方法测定。研究法辛烷值按ASTM D-2699方法测定。无铅辛烷值是用纯单体烃测得的辛烷值。加铅辛烷值是在纯单体烃中加入0.793ml/l四乙基铅后测得的辛烷值。

混合辛烷值是用20%纯单体烃和80%辛烷值为60的标准燃料(2, 2, 4-三甲基戊烷: 正庚烷 = 60:40)混合后测定，然后外推出100%纯单体烃的辛烷值。以上百分比皆为体积比。

表中“+”号表示达到辛烷值100，每升纯烃所需添加的四乙基铅毫升数；而括号内的负值表示外推得的小于0的辛烷值。

表列数据选自石油化工科学研究院1980年编译的《单体烃辛烷值》。该材料主要参照“ASTM Special Technical Publication No. 225”整理而得。

## 二十二、苯胺点 $t_a$

纯烃和苯胺按体积比1:1混合，完全互溶的温度，单位[ $^{\circ}\text{C}$ ]。

## 二十三、美国矿物局关联指数BMCI

$$\text{计算公式: } \text{BMCI} = \frac{87522}{\text{NBP} + 460} + 473.7\text{SG} - 456.8 \quad (1-23-1)$$

式(1-23-1)中SG为基准温度下的比重，即 $d_{60}^{60}(^{\circ}\text{F})$ 或 $d_{15.6}^{15.6}(^{\circ}\text{C})$ ；NBP为常沸点，单位是[ $^{\circ}\text{F}$ ]；若改为绝对温度[K]，则：

$$\text{BMCI} = \frac{48623}{\text{NBP}} + 473.7 \text{SG} - 456.8 \quad (1-23-2)$$

对于石油馏分，上式中的NBP用体积平均沸点代替。

## 二十四、特性因数WCF

Watson 特性因数，在石油工业中称为UOP K值，或简称K值。本手册为了避免与其他符号混淆，采用WCF表示，它的定义是：

$$\text{WCF} = \sqrt[3]{\text{NBP}} / \text{SG} \quad (1-24-1)$$

以上公式中常沸点NBP的单位是 $^{\circ}\text{R}$ （绝对华氏，或称“兰氏温度”），若改用绝对温度[K]，则：

$$\text{WCF} = 1.216 \sqrt[3]{\text{NBP}} / \text{SG} \quad (1-24-2)$$

WCF反映烃类的化学族组成：脂肪族烃（链烃）的WCF接近12.6，芳烃的WCF在10左右而环烷烃则介乎两者之间。

从WCF的定义式来看，它是有因次的，实际使用时却不论及其计量单位。

## 二十五、密度比 $d_4^{15}$

密度比为纯烃密度 $d_4^{15}$ 与同沸点正构烷密度 $d_4^{15}$ 之比。正构烷的密度和沸点的关系，由Lee-Kesler提供的经验式计算：

$$d_4^{15} = 1.0475 - 1.511 \times 10^{-4} \text{NBP} + 7.127 \times 10^{-8} \text{NBP}^2 - 116.4 / \text{NBP} \quad (1-25-1)$$

式中，NBP——常沸点，单位为[K]； $d_4^{15}$ ——该常沸点的正构烷密度 $d_4^{15}$ ，对于实际上不存在

的正构烷， $d_{15}^5$ 的含义仅是内插值。

该式原是用来关联比重和沸点的。比重与密度之间不存在简单的换算关系，然而对烃和石油而言 $d_{15}^5$ 和SG的数值甚为接近。

所列数据，对正构烷取1，其余为计算值。

本手册所列的苯胺点，比色散，特性因数和密度比以及矿物局关联指数，都试图用简单易测的物性关联数来反映烃和石油的族组成以及物理化学性质。除此以外，人们还提出过比折射(Specific Refraction)，折射截距(Refractivity Intercept)，相对色散(Relative Dispersion)，粘重常数(Viscosity-gravity Constant)等作为关联数；随着仪器分析的发展，这类方法已经很少采用，并且它们都可以从已列的基本数据计算，故表中不再列出。

### 二十六、临界压力 $P_c$ 。

$P_c$ 为纯物质在临界温度 $T_c$ 下能液化的最低压力。表列数值单位为[kPa]，换算同十五。

### 二十七、临界温度 $T_c$ 。

$T_c$ 为纯物质能液化的最高温度。基本单位：绝对温度[K]。换算为绝对华氏[°R]乘以1.8；换算为摄氏度[°C]减273.15；换算为华氏温标[°F]乘以1.8再减459.67。

### 二十八、临界体积 $V_c$ 。

$V_c$ 为一摩尔纯物质在 $P_c$ 、 $T_c$ 下的体积。基本单位：[dm<sup>3</sup>/mol]。换算为[m<sup>3</sup>/mol]乘以10<sup>-3</sup>；换算为[cm<sup>3</sup>/mol]乘以1000；计算临界比容[dm<sup>3</sup>/g]除以MW。

### 二十九、临界压缩因子 $Z_c$ 。

$$\text{由式 } Z_c = \frac{P_c V_c}{RT_c} \text{ 确定} \quad (1-29-1)$$

式中，R——气体通用常数，采用SI制时：R = 8.31441 [J/mol·K]；

Z<sub>c</sub>——无因次的。

### 三十、偏心因子 $\omega$

偏心因子的定义为： $\omega = -\lg P_r^s \big|_{T_r=0.7} - 1$  (1-30-1)

式中， $P_r^s$ ——对比饱和蒸气压： $P_r^s = P^s/P_c$ ； $\big|_{T_r=0.7}$ ——表示在对比温度 $T_r = T/T_c = 0.7$ 的温度条件下。

在本手册中lg表示10进对数(常用对数)，而ln表示自然对数。

偏心因子是反映物质分子形状和大小的参数。小的球形分子，如惰性气体， $\omega = 0$ ，这类物质称为简单流体。其余物质称为非简单流体，它们的 $\omega > 0$ 。

数据由来：取自API“Technicae Data Book-Petroleum Refining”第3版(以后简称API3rd)所援用的Passut的数据；其余对 $P_r^s \big|_{T_r=0.7} < 202.6\text{kPa}$ 的物质用 $P_c$ 、 $T_c$ 和Antoine蒸气压常数计算； $P_r^s \big|_{T_r=0.7} > 202.6\text{kPa}$ 的物质，用 $P_c$ 、 $T_c$ 和常沸点NBP计算。偏心因子是无因次的。

### 三十一、雷特因子 $\alpha_c$ 。

雷特因子是Riedel提出的一个物性关联参数。它可由物质的常沸点、临界压力和临界温度来确定：

$$\alpha_c = \frac{0.315\Psi_b + \ln P_c}{0.0838\Psi_b - \ln T_{br}} \quad (1-31-1)$$

$$\Psi_b = -35 + 36/T_{br} + 42 \ln T_{br} - T_{br}^0 \quad (1-31-2)$$

$$T_{br} = \text{NBP}/T_r \quad (1-31-3)$$

这里的  $T_{br}$  是对比常沸点,  $P_c$  单位为 [atm]。雷特因子是无因次的。

### 三十二、理想气体状态下的热性质系数

这是一组多项式的系数, 用来表示物质在理想气体状态下的焓、熵、比热等。例如焓:

$$H^0 - H_0^0 = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4 + a_5 T^5 \quad (1-32-1)$$

式中,  $H^0$ ——理想气体状态下的焓;  $H_0^0$ ——基准态的焓, 当表列  $a_0$  有数值时, 基准态取  $-200^\circ\text{F}$  ( $144.26\text{K}$ ) 下的饱和液体;  $T$ ——操作温度 [K];  $a_0$  至  $a_5$ ——表列之系数,  $a_0$  用来计算焓, 请参见本手册第 I 部分第一节介绍。

使用时注意表列的系数  $a_2$  至  $a_5$  已经作了扩展, 将表列数值代入式 (1-32-1) 要把系数分别乘  $10^{-3}$ ,  $10^{-6}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-14}$ 。表2、表3扩展的倍率为  $10^3$ 、 $10^6$ 、 $10^9$ 、 $10^{12}$ 。

数据来源: ①API3rd.a; ②其他较准确的经验方程计算结果回归; ③结构贡献法推算, 如果该物质有  $C_p^0$  数据, 则系数  $a_1$  予以调整, 使之满足  $C_p^0$  计算值的要求。

基本单位是 [kJ/kg] 或 [J/g]。

换算为 [kcal/kg] 或 [cal/g] 乘以 0.239;

计算摩尔焓需要乘以分子量 MW。

### 三十三、理想气体状态下的比热 $C_p^0$

比热的定义式为: 
$$C_p^0 = \left( \frac{TdS}{dT} \right)_p \quad (1-33-1)$$

表列  $C_p^0$  为  $25^\circ\text{C}$  下理想气体状态的恒压比热。

计算同温度下理想气体的恒容比热  $C_v^0$ , 按照  $C_v^0 = C_p^0 - R/MW \quad (1-33-2)$

推算值标以  $T$  ( $T$ - $D$ - $R$ 法) 或  $b$  ( $B$ ENSON法)。表2的  $C_p^0$  全为文献值; 而表3为推算值。

基本单位: [kJ/kg·K]、[J/g·K]、[kJ/kg·°C] 或 [J/g·°C]。对应换算为: [kcal/kg·K] 或 [cal/g·K] 或 [kcal/kg·°C] 或 [cal/g·°C] 乘以 0.239; 计算摩尔热容 (简称热容) 乘以 MW。

### 三十四、绝热指数 $K$

理想气体的绝热指数定义为:  $K = C_p^0/C_v^0 \quad (1-34-1)$

表中列出的是  $25^\circ\text{C}$  下的计算值, 无因次。其他温度下的绝热指数由该物质在理想气体状态下的热性质系数求得。

绝热指数的概念只适用于理想气体。非理想气体有恒压绝热指数与恒容绝热指数之分, 计算步骤相当复杂。

### 三十五、液体比热 $C_p^l$

表列数据为  $25^\circ\text{C}$  下的液体恒压比热。当  $\text{NBP} < 25^\circ\text{C}$  时为饱和压力下的比热; 而  $\text{NBP} > 25^\circ\text{C}$  时, 为  $101.3\text{kPa}$  下的比热。

在对比温度  $T_r < 0.8$  和对比压力  $P_r < 1$  的条件下液体的恒压比热、恒容比热和饱和比热在数值上无甚差别。超出以上范围, 其相互间关系可以通过热力学函数和  $PVT$  性质计算。

液体比热的单位及换算与气相比热相同。

### 三十六、液体比热系数

液体比热多项式系数用于表达式:

$$C_p^L = C_0 + C_1 T + C_2 T^2 + C_3 T^3 \quad (1-36-1)$$

此式用来计算不同温度下的液体比热。式中的T是绝对温度[K]。

表列中少数数据取自Chem. Eng. 83 [23] 127 (1976) 相当准确。其余数据乃是由理想气体状态下热性质系数和Lee-Kesler(简称L-K方程)状态方程推算的, 误差较大。

对于碳10以上的烃(表3)  $C_p^L$ 用Watson-Nelson公式推算。该法对纯烃的精度不详, 对石油馏分用来求焓, 在 $T_r < 0.8$ 的范围内, 通常误差不超过2J/g, 所采用的经验方程只有两项, 即式(1-36-1)之 $C_2 = 0$ ;  $C_3 = 0$ 。

### 三十七、常冰点NFP

在压力101.3kPa大气环境下的冰点。对绝大多数物质而言: 冰点、凝固点和熔点是一致的, 常冰点和三相点温度在数值上差别也不大。

表列数据皆为文献值。注有G或Glass的表示凝固时为玻璃态, 无明显的冰点。

### 三十八、熔化热 $\Delta H_m$

熔化热是压力101.3kPa和液固平衡条件下, 固体熔化为同温度液体所吸引的可逆热。压力对熔化热的影响是微不足道的。

数据来自“Selected Values of Properties of Hydrocarbons and Related Compounds”(简称API 44)和“CRC”物理化学手册, 后者下标为r。

熔化热的单位和换算与“焓”同。

### 三十九、冰点下降系数A

用于方程: 
$$-\ln N_i = A(T_{f,i}^* - T_f) \quad (1-39-1)$$

该方程适用于以组分i为主要成分的溶液,  $N_i$ 为此溶液中i组分的摩尔浓度;  $T_{f,i}^*$ 是纯组分i在101.3kPa下的冰点;  $T_f$ 为溶液(混合物)在101.3kPa下的冰点。 $T_{f,i}^*$ 和 $T_f$ 的单位均为[K], 改用[°C]结果不变。数据来源: API 44。

### 四十、气化热

气化热又称为蒸发热或蒸发焓、气化焓。

表上列出两个数据: 一个是25°C(298.15K)下的气化热 $\Delta H_{25}$ ; 一个是常沸点下的气化热 $\Delta H_b$ 。即一个给定气液平衡的温度条件, 一个给定压力条件。

气化热在数值上等于饱和蒸气的焓减去同温度下饱和液体的焓。基本单位为[kJ/kg]或[J/g]乘分子量MW可得摩尔气化热。

表列数据除来自文献值外, 均由V-K状态方程计算。

### 四十一、燃烧热

燃烧热为1kg燃料在25°C和101.3kPa压力下, 完全燃烧的净热值, [kJ/kg]。

当燃烧生成的水呈液相(25°C, 101.3kPa), 燃烧反应的焓变叫做高热值 $H_c$ ; 而燃烧生成的水呈气相(25°C, 理想气体), 得到的是低热值 $H_L$ 。在实际生产过程中, 一般只能得到低热值。

燃烧热还和燃料的相态有关。注有L者为气体燃料的燃烧热, 而未注者是液体或固体燃料的燃烧热。同一物质气体燃料燃烧热减液体燃料燃烧热等于气化热, 余类推。如果知道物质的分子式或氢含量, 也可以求得其高热值和低热值之间的关系, 令物质分子中有 $n_H$ 个氢原子, 则:

$$H_c = H_L + 22005.7n_H/MW \text{ [kJ/kg]} \quad (1-41-1)$$

燃烧热的数据来自API 3rd. 和推算值(下注c)。

燃烧热的基本单位及换算与“焓”同。换算为液体燃料的体积燃烧热, 将 $H_c$ 或 $H_L$ 乘以 $1000/d^{2.5}$

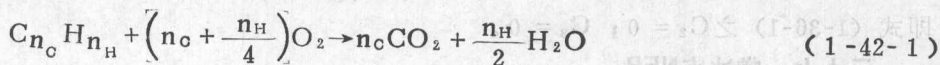


(得[kJ/m<sup>3</sup>]); 换算为气体燃料的体积燃烧热, 乘以气体比容V[m<sup>3</sup>/kg]。

#### 四十二、燃烧时理论空气耗量AM

根据“大气模型”计算。以含0.003摩尔分率CO<sub>2</sub>的干空气为基准, 空气的平均分子量为28.964, 含氧气的摩尔分率为0.2095, 氧的重量分率为0.23145。

令烃类的分子式为C<sub>n<sub>c</sub></sub>H<sub>n<sub>H</sub></sub>, 由化学反应式:



可知每摩尔烃完全燃烧需要 $\left( n_c + \frac{n_H}{4} \right)$ 摩尔氧气, 也就是说需要 $\left( n_c + \frac{n_H}{4} \right) / 0.2095$ 摩尔空气。

换算成重量比, 每kg烃需空气耗量的kg数为:

$$\begin{aligned} AM &= \frac{28.964 \left( n_c + \frac{n_H}{4} \right)}{0.2095 MW} \\ &= 138.253 \left( n_c + \frac{n_H}{4} \right) / MW \end{aligned} \quad (1-42-2)$$

以上公式表明, AM[kg/kg]完全可以由烃的分子式确定, 且与空气的温度、压力无关。式(1-42-2)分母中的MW是烃的分子量。

欲求空气耗量的体积数, 可将上述AM值乘以空气的比容[m<sup>3</sup>/kg]得每kg烃完全燃烧需要的空气体积m<sup>3</sup>数。在25℃和101.325kPa下, 空气的比容为0.844678m<sup>3</sup>/kg。

#### 四十三、可燃极限(下限、上限)

可燃极限或爆炸限, 是指室温和101.325kPa下形成可燃性或可爆性烃-空气气相混合物中烃的体积百分率。当烃的浓度低于下限或高于上限, 则混合物是“安全的”。

数据取自API 3rd.。烃类可燃极限的下限均接近于1。轻质烃的可燃极限较高。

#### 四十四、生成焓ΔH<sub>f</sub><sup>0</sup>

表列数据为298.15K, 101.325kPa下稳定单质——石墨和氢气生成1摩尔烃类的标准生成焓。根据生成物为气相或液相, 数据分成两列, 一般情况下给出稳定相态的数据。

数据来源: ①API 3rd.; ②“The Chemical Thermodynamics of Organic Compounds” (1969); ③用T-D-R法推算; ④用Benson法推算。

基本单位: [kJ/mol]。换算为[kJ/kmol]乘以1000; 换算为[kcal/mol]乘以0.239; 换算为[kcal/mol]乘以239; 计算为单位质量物质的生成焓除以MW得[kJ/g]。

表2、3所列生成焓单位为[J/g]乘以MW得[J/mol]。

#### 四十五、标准熵S<sub>298</sub><sup>0</sup>

由热力学第三定律确定的纯物质在298.15K和101.325kPa下的绝对熵。生成焓ΔS<sub>f</sub><sup>0</sup>和标准熵S<sub>298</sub><sup>0</sup>的关系为:

$$\Delta S_f^0 = S_{\text{化合物}}^0 - \sum S_{\text{元素}}^0 \quad (1-45-1)$$

对于分子式为C<sub>n<sub>c</sub></sub>H<sub>n<sub>H</sub></sub>的烃:

① 本手册用上角标<sup>0</sup>表示标准生成性质。