

SHIYOU HUAGONG JICHU SHUJU SHOUCI

石油化工基础数据手册

卢焕章等 编著

化学工业出版社

81.7073
172

石 油 化 工 基 础 数 据 手 册

卢焕章等 编著

3K205/11

化 学 工 业 出 版 社

本手册收集整理和验证了387个有机化合物的基础数据。对书中每个化合物，作者均以不同的计算方法通过电子计算机计算了临界参数以及在一定温度和压力范围内的饱和蒸汽压、汽化热、热容、密度、粘度、导热系数、表面张力、压缩因子、偏心因子等16个物理参数。计算了约50万个数据点，从中选取了约10万个数据点汇编成册。

本手册分为两篇。第一篇对纯物质和混合物的各种数据计算方法作了介绍；第二篇的所有数据均是经过计算、并与实验数据或国外发表的数据进行了比较核对、确定其可靠程度后选编的。附录一还刊载了“Properties of Gases and Liquids”第三版附录A中所收集的468个化合物的主要数据。

本手册力求在可能的范围内提供石油化工用基础数据。可供科研、设计、生产、教学等各方面人员使用。

石油化工基础数据手册

卢焕章等 编著

*

化学工业出版社 出版

(北京和平里七区十六号楼)

通县曙光印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

*

开本850×1168¹/₃₂ 印张 35¹/₄ 字数1007千字印数1—6,500

1982年2月北京第1版1982年2月北京第1次印刷

统一书号15063·3275定价4.75元

序 言

由于电子计算机的广泛使用和计算技术的日益发展，基础数据在工程技术上的应用显得更为重要。目前在设计、研究、生产领域中，为确定工艺流程、设备设计所需用的传质、传热、自控等各种参数，如密度、蒸汽压、分子焓、导热系数等数据，已经可以通过计算获得，且具有一定的准确度。由于电子计算机的应用，这些数据可以随设计和生产操作条件（温度、压力、组成等）的变更而改变，从而摆脱了过去简化计算的局限性，使大型、精密装置的设计、生产操作和自动控制的可靠性大为提高，为近代化学工业的大型化、精密化创造必需条件。

多年以来，国际上工业技术先进的国家，都组织了相当规模的人力、物力，对化工基础数据进行工作。工作的主要内容为收集整理大量的实验数据和分析、归纳这些数据，进而提出计算各种物理参数的计算方法。由于这项工作的重要性，目前国际文献对这个方面的论述也日益增多，并已形成专门组织和专门工作规划（如API和它的 Project No. 44等），还出版了一些专门的书籍（如 R. C. Reid, J. M. Prausnitz and T. K. Sherwood: "Properties of gases and Liquids", 1st—3rd Edition）。

编制本手册的目的是为了适应石油化工科研、设计、生产、教学等各方面的需要，在可能范围内提供化工基础数据。这是继续化工部第五设计院1972年编制《有机化工原料物理性质》上、下册的工作。本手册共收集整理和验证了387个化合物的物化数据；对每个化合物均以不同的计算方法用电子计算机计算了临界参数，及其在一定温度、压力范围内的饱和蒸汽压、汽化热、热容、密度、粘度、导热系数、表面张力、压缩因子、偏心因子等16个物理参数，计算出的数据点约50万个，从中选取了约10万个数据点，列于表中。

本手册分为两篇。第一篇介绍各种数据的计算方法。在实际使用的绝大多数情况下，由于均系对混合物的各种物性数据进行计算，故在相应的各章中除介绍纯物质各数据的计算方法外，同时介绍混合物各数据的计算方法以及温度、压力对它们的影响；第二篇则是将 387 个化合物的各种数据列成表格，以供查阅。

第二篇的所有数据均经过计算并与实验数据或与国外发表的数据进行了比较核对，确定其可靠程度后予以发表的。另外，在本手册附录一中，刊载了 R. C. Reid, J. M. Prausnitz, T. K. Sherwood: "Properties of Gases and Liquids" 第三版附录 A 数据库所收集的 468 个化合物的主要数据，其中有 264 个与本手册所列的化合物重复。在重复的化合物中，有少数主要数据因资料来源不同而略有差异。

本手册所有数据来源及计算方法的选择，可分成以下几类。

(1) 国外已发表的实验数据。这些数据经计算核实后直接采用。多数化合物临界参数属于此类。

(2) 见诸国外资料的有一部分实验数据（包括国外已发表的数据）的化合物，采用合适的计算方法进行内插（外推）的计算；并在一定的温度范围内补充数据。

(3) 对国外尚未见发表过数据的化合物，采取适用于相同类型化合物的计算方法进行计算。其中一部分因缺乏结构常数而不能用结构方法进行计算时，则采用一些简单的计算方法（例如采用临界参数）进行估算，用后者计算的数据，准确度往往较差。

手册中对每个化合物均注明数据来源、采用的计算方法、计算与实验数据的平均误差值。对无实验数据因而无法计算出误差时，则可在本手册第一篇介绍计算方法部分查出所使用方法的可能误差范围。

列表采取的类型，以方便绘成曲线图为原则。一般以温度为横座标，目标参数为纵座标。在曲线的强弯曲处，温度划分较密；在近似直线处，温度划分较疏。

所取的温度范围：液体一般由物质的熔点至临界点附近，气体至 1000°K 。各表中的粘度、导热系数、热容，对气相而言，为常压下对应于某一温度的数据；对液相则为饱和线上的数据。

38743

由于初次工作和限于水平，难免有错误之处，希望广大使用者指正。

本手册由兰州化学工业公司设计院技术室组织，参加编写工作的有：卢焕章、毕兰云、伍章平、史春英等同志，卢焕章同志担任全书审核工作。曾经参加过本手册工作的还有王更新、陈厚强、鲁晓玲、窦明慧等同志。

目 录

第一篇 物化数据的计算方法

第一章 临界参数 1	2-8 推荐13
1-1 引言 1	第三章 汽化热13
1-2 Lydersen法 1	3-1 引言13
1-3 其它方法 1	3-2 常压沸点下汽化热 (ΔH_{vb})的计算13
1-4 临界压缩系数 Z_c 4	3-3 已知一个温度下的 ΔH_v , 求其它温度下的 ΔH_v15
1-5 偏心因子 5	第四章 热容15
1-6 Riedel常数 5	4-1 引言15
1-7 常压沸点和常压凝 固点..... 6	4-2 理想气体的热容—— Rihani-Doraiswamy基 团贡献法.....15
1-8 偶极矩 6	4-3 理想气体混合物的 热容.....19
1-9 Stiel极性因子 7	4-4 真实气体的热容19
1-10 势能参数..... 7	4-5 液体的热容24
第二章 饱和蒸汽压 9	4-6 液体热容预计法(一)25
2-1 Antoine蒸汽压方程式..... 9	4-7 液体热容预计法(二)25
2-2 Lee-Kesler蒸汽压方 程式..... 9	4-8 Tyagi方程.....25
2-3 Riedel蒸汽压方程式10	4-9 $C_{PL}-C_{\sigma L}$ 和 $C_{\sigma L}-$ $C_{sat \cdot l}$ 的近似计算27
2-4 Riedel-Plank-Miller 蒸汽压方程式.....10	4-10 推荐.....28
2-5 Thek-Stiel蒸汽压方 程式.....10	第五章 液体密度28
2-6 Harlacher-Braun蒸汽 压方程式.....11	5-1 常压沸点下的液体
2-7 Gomez-Thodos蒸汽 压方程式.....11	

密度·····	28	0.80) 的计算方法·····	47
5-2 液体密度的计算·····	29	6-16 推荐·····	51
5-3 对比态法·····	30	6-17 高温($T_r > 0.76$) 下	
5-4 液体压缩系数·····	37	的饱和液体粘度·····	57
第六章 粘度 ·····	37	6-18 低温($T_r < 0.75$) 液	
6-1 引言·····	37	体混合物粘度的计算方法·····	57
6-2 低压气体粘度计算方法		第七章 导热系数 ·····	59
(一)——气体动力学理论		7-1 气体导热系数计算方	
方程·····	37	法(一)——Eucken 方	
6-3 低压气体粘度计算方法		程式·····	59
(二)——对比态法·····	40	7-2 气体导热系数计算方	
6-4 低压气体粘度计算方法		法(二)——改进的	
(三)——Reichenbey法·····	41	Eucken方程式·····	59
6-5 低压气体粘度的计算		7-3 计算方法(三)——	
方法推荐·····	41	Roy-Thodos法·····	59
6-6 低压气体混合物的		7-4 推荐·····	65
粘度·····	41	7-5 温度对低压气体导热	
6-7 求 ϕ_{ij} 方法(一)——		系数的影响·····	66
Wilke方程式·····	43	7-6 压力对气体导热系数的	
6-8 求 ϕ_{ij} 方法(二)——		影响·····	66
Herning-Zipperer方程式·····	43	7-7 低压气体混合物的导	
6-9 求 ϕ_{ij} 方法(三)——		热系数·····	67
Brokaw方程式·····	43	7-8 Wassiljewa混合规则	
6-10 对于计算低压气体混		的性质·····	68
合物粘度方法的推荐·····	44	7-9 计算气体混合物导热	
6-11 压力对气体粘度的		系数的Brokaw经验方程·····	69
影响·····	44	7-10 对于气体混合物导热	
6-12 压力对气体混合物粘		系数的推荐·····	69
度的影响·····	46	7-11 温度对气体混合物导	
6-13 液体粘度·····	46	热系数的影响·····	70
6-14 温度对液体粘度的		7-12 压力对气体混合物导	
影响·····	47	热系数的影响·····	70
6-15 液体粘度 ($T_r <$		7-13 液体导热系数·····	70

7-14 Robbins-Kingrea方 程式.....	71	9-2 P-V-T关系的热力学 判断.....	95
7-15 Sato 沸点方程式	71	9-3 Van der Waals状态 方程式.....	95
7-16 近似的分子量关联 方程	73	9-4 Redlich-Kwong状态 方程式.....	96
7-17 液体导热系数计算方 法的推荐.....	73	9-5 Lee-Kesler状态方程 式(通用B.W.R.方程式).....	97
7-18 温度对液体导热系数 的影响.....	75	9-6 维里状态方程式	102
7-19 压力对液体导热系数 的影响.....	75	9-7 推荐	103
7-20 混合液体的导热系数.....	77	第十章 混合物参数的混合	
7-21 稀电解质溶液导热系 数计算.....	78	规则	104
第八章 表面张力	80	10-1 引言.....	104
8-1 对比态法(一)	80	10-2 对各种对比态计算方 法的参数混合规则.....	104
8-2 对比态法(二)	80	10-3 各状态方程式各参数 的混合规则.....	107
8-3 结构法(一) —— Macleod-Sugden法	81	10-4 液体混合物的混合规 则.....	110
8-4 结构法(二)	81	第十一章 热力学性质	110
8-5 温度外推法(一)	82	11-1 引言.....	110
8-6 温度外推法(二)	90	11-2 计算热力学量的一些 基本原则.....	111
8-7 推荐	90	11-3 差函数.....	112
8-8 非水溶液的表面张力 计算法(一) ——Mac- leod-Sugden法	90	11-4 Lee-Kesler法求差 函数.....	115
8-9 非水溶液的表面张力 计算法(二)——对比态法.....	91	11-5 Yen-Alexander法求 差函数.....	129
8-10 水溶液的表面张力 的计算.....	92	11-6 焓、熵的差函数与逸 度系数之间的相互关系.....	132
第九章 纯气体和液体的P- V-T关系	94	11-7 液体焓差函数的计算...	132
9-1 引言	94	11-8 气体混合物和液体混 合物的混合规则.....	133

11-9 热力学偏导数.....	133
参考文献.....	135

附表.....	136
---------	-----

第二篇 物 化 数 据

第十二章 链烷烃..... 138

12-1 甲烷.....	140
12-2 乙烷.....	142
12-3 丙烷.....	144
12-4 正丁烷.....	146
12-5 异丁烷.....	148
12-6 正戊烷.....	150
12-7 异戊烷.....	152
12-8 新戊烷.....	154
12-9 正己烷.....	156
12-10 异己烷.....	158
12-11 2,2-二甲基丁烷.....	160
12-12 3-甲基戊烷.....	162
12-13 正庚烷.....	164
12-14 2-甲基己烷.....	166
12-15 正辛烷.....	168
12-16 2-甲基庚烷.....	170
12-17 2,2,4-三甲基戊烷.....	172
12-18 壬烷.....	174
12-19 癸烷.....	176

第十三章 环烷烃..... 178

13-1 环丙烷.....	180
13-2 环丁烷.....	182
13-3 环戊烷.....	184
13-4 环己烷.....	186
13-5 甲基环戊烷.....	188
13-6 甲基环己烷.....	190
13-7 乙基环戊烷.....	192
13-8 乙基环己烷.....	194

13-9 正丙基环戊烷.....	196
13-10 正丙基环己烷.....	198

第十四章 单烯烃..... 200

14-1 乙烯.....	202
14-2 丙烯.....	204
14-3 1-丁烯.....	206
14-4 顺式-2-丁烯.....	208
14-5 反式-2-丁烯.....	210
14-6 异丁烯.....	212
14-7 1-戊烯.....	214
14-8 顺式-2-戊烯.....	216
14-9 反式-2-戊烯.....	218
14-10 2-甲基-1-丁烯.....	220
14-11 2-甲基-2-丁烯.....	222
14-12 3-甲基-1-丁烯.....	224
14-13 1-己烯.....	226
14-14 2-甲基-1-戊烯.....	228
14-15 2-甲基-2-戊烯.....	230
14-16 4-甲基-1-戊烯.....	232
14-17 2,3-二甲基-1-丁烯.....	234
14-18 2,3-二甲基-2-丁烯.....	236
14-19 4-甲基-顺式-2-戊烯.....	238
14-20 4-甲基-反式-2-戊烯.....	240
14-21 1-庚烯.....	242
14-22 1-辛烯.....	244

第十五章 二烯烃..... 246

15-1 丙二烯.....	248
---------------	-----

15-2	1,2-丁二烯	250	18-6	间二甲苯	316	
15-3	1,3-丁二烯	252	18-7	对二甲苯	318	
15-4	1,2-戊二烯	254	18-8	α -甲基苯乙烯	320	
15-5	1,4-戊二烯	256	18-9	正丙苯	322	
15-6	2,3-戊二烯	258	18-10	异丙苯	324	
15-7	2-甲基-1,3-丁二烯	260	18-11	1,2,3-三甲苯	326	
15-8	3-甲基-1,2-丁二烯	262	18-12	1,2,4-三甲苯	328	
15-9	1-反式-3-戊二烯	264	18-13	1,3,5-三甲基苯	330	
15-10	1-顺式-3-戊二烯	266	18-14	正丁苯	332	
第十六章 环烯烃			268	18-15	异丁苯	334
16-1	1,3-环戊二烯	270	18-16	仲丁苯	336	
16-2	环戊烯	272	18-17	特丁苯	338	
16-3	环己烯	274	18-18	联苯	340	
16-4	1,5-环辛二烯	276	18-19	二苯甲烷	342	
16-5	双环戊二烯	278	第十九章 氟代烃			
第十七章 炔烃			280	19-1	氟利昂-14	346
17-1	乙炔	282	19-2	氟利昂-23	348	
17-2	丙炔	284	19-3	氟甲烷	350	
17-3	乙烯基乙炔	286	19-4	四氟乙烯	352	
17-4	1-丁炔	288	19-5	氟利昂-116	354	
17-5	2-丁炔	290	19-6	偏二氟乙烯	356	
17-6	2-甲基-1-丁炔-3-炔	292	19-7	氟乙炔	358	
17-7	1-戊炔	294	第二十章 卤代烃			
17-8	2-戊炔	296	20-1	四氯化碳	362	
17-9	3-甲基-1-丁炔	298	20-2	氟利昂-11	364	
17-10	二乙烯基乙炔	300	20-3	氟利昂-12	366	
17-11	3,3-二甲基-1-丁炔	302	20-4	氟利昂-13	368	
第十八章 芳烃			304	20-5	三氯甲烷	370
18-1	苯	306	20-6	氟利昂-21	372	
18-2	甲苯	308	20-7	氟利昂-22	374	
18-3	苯乙烯	310	20-8	二氯甲烷	376	
18-4	乙苯	312	20-9	一氯甲烷	378	
18-5	邻二甲苯	314	20-10	六氯乙烷	380	

20-11	氟利昂-113	382
20-12	氟利昂-114	384
20-13	五氯乙烷	386
20-14	1,1,2,2-四氯乙烷	388
20-15	1,1,1-三氯乙烷	390
20-16	1,1,2-三氯乙烷	392
20-17	1,1-二氯乙烷	394
20-18	1,2-二氯乙烷	396
20-19	氯乙烷	398
20-20	1,2-二氯丙烷	400
20-21	1-氯丙烷	402
20-22	1,4-二氯丁烷	404

第二十一章 溴代烃

21-1	二氟一氯溴甲烷	408
21-2	三氟溴甲烷	410
21-3	二溴甲烷	412
21-4	溴甲烷	414
21-5	溴乙烯	416
21-6	1,1-二溴乙烷	418
21-7	溴乙烷	420
21-8	2-溴丙烷	422

第二十二章 氯烯烃

22-1	全氯乙烯	426
22-2	三氯乙烯	428
22-3	顺式-1,2-二氯乙烯	430
22-4	反式-1,2-二氯乙烯	432
22-5	偏二氯乙烯	434
22-6	氯乙烯	436
22-7	2-氯-1,3-丁二烯	438

第二十三章 碘代烃

23-1	碘甲烷	442
23-2	碘乙烷	444
23-3	碘丙烷	446

第二十四章 卤代芳烃

24-1	邻二氯化苯	450
24-2	间二氯化苯	452
24-3	对二氯化苯	454
24-4	氟苯	456
24-5	氯苯	458
24-6	溴苯	460
24-7	碘苯	462
24-8	邻氯化甲苯	464
24-9	间氯化甲苯	466
24-10	对氯化甲苯	468
24-11	苄基氯	470

第二十五章 芳香族硝基化

合物

25-1	2,5-二氯硝基苯	474
25-2	邻硝基氯苯	476
25-3	间硝基氯苯	478
25-4	对硝基氯苯	480
25-5	邻二硝基苯	482
25-6	间二硝基苯	484
25-7	对二硝基苯	486
25-8	硝基苯	488

第二十六章 一元醇

26-1	甲醇	492
26-2	乙醇	494
26-3	丙烯醇	496
26-4	1-丙醇	498
26-5	异丙醇	500
26-6	正丁醇	502
26-7	仲丁醇	504
26-8	叔丁醇	506
26-9	异丁醇	508
26-10	1-戊醇	510

26-11 异戊醇	512	29-13 苯乙醚	578
26-12 1-己醇	514	29-14 丁醚	580
26-13 2-乙基-1-丁醇	516	29-15 戊醚	582
26-14 1-庚醇	518	29-16 二苯醚	584
26-15 1-辛醇	520	第三十章 醛类	586
第二十七章 杂醇类	522	30-1 碳酰氯	588
27-1 2-氯乙醇	524	30-2 甲醛	590
27-2 1,3-二氯-2-丙醇	526	30-3 三氯乙醛	592
27-3 2,3-二氯-1-丙醇	528	30-4 乙酰氯	594
27-4 双丙酮醇	530	30-5 乙醛	596
27-5 苯甲醇	532	30-6 丙烯醛	598
第二十八章 多元醇	534	30-7 丙醛	600
28-1 乙二醇	536	30-8 甲缩醛	602
28-2 1,2-丙二醇	538	30-9 反式-丁烯醛	604
28-3 丙三醇	540	30-10 正丁醛	606
28-4 1,4-丁二醇	542	30-11 三聚乙醛	608
28-5 二甘醇	544	30-12 乙缩醛	610
28-6 季戊四醇	546	第三十一章 酮类	612
28-7 二丙二醇	548	31-1 丙酮	614
28-8 三甘醇	550	31-2 甲基乙基酮	616
第二十九章 醚类	552	31-3 <i>N</i> -甲基吡咯烷酮	618
29-1 氯甲醚	554	31-4 二乙基酮	620
29-2 甲醚	556	31-5 甲基异丙基酮	622
29-3 甲基乙烯基醚	558	31-6 甲基丙基酮	624
29-4 甲乙醚	560	31-7 环己酮	626
29-5 乙二醇甲醚	562	31-8 甲基异丁基酮	628
29-6 乙基乙烯基醚	564	31-9 苯基乙基酮	630
29-7 乙醚	566	第三十二章 酸类	632
29-8 乙丙醚	568	32-1 甲酸	634
29-9 二乙二醇甲醚	570	32-2 乙酸	636
29-10 丙醚	572	32-3 丙烯酸	638
29-11 异丙醚	574	32-4 丙酸	640
29-12 苯甲醚	576	32-5 甲基丙烯酸	642

32-6	正丁酸	644	35-13	氰乙酸乙酯	710
32-7	异丁酸	646	35-14	丙烯酸乙酯	712
32-8	正戊酸	648	35-15	甲基丙烯酸甲酯	714
32-9	异戊酸	650	35-16	乙酸正丙酯	716
32-10	己二酸	652	35-17	乙酸异丙酯	718
32-11	己酸	654	35-18	丙酸乙酯	720
32-12	2-甲基戊酸	656	35-19	丁酸甲酯	722
32-13	ω -氨基己酸	658	35-20	异丁酸甲酯	724
32-14	油酸	660	35-21	甲基丙烯酸乙酯	726
32-15	硬脂酸	662	35-22	草酸二乙酯	728
第三十三章	芳香族羧酸	664	35-23	甲酸正戊酯	730
33-1	苯甲酸	666	35-24	乙酸正丁酯	732
33-2	六氢苯甲酸	668	35-25	乙酸异丁酯	734
33-3	对苯二甲酸	670	35-26	丙酸丙酯	736
33-4	对甲基苯甲酸	672	35-27	丁酸乙酯	738
第三十四章	酸酐	674	35-28	异丁酸乙酯	740
34-1	顺丁烯二酸酐	676	35-29	丙烯酸正丁酯	742
34-2	醋酐	678	35-30	乙酸戊酯	744
34-3	丙酸酐	680	35-31	乙酸异戊酯	746
34-4	邻苯二甲酸酐	682	35-32	丙酸异丁酯	748
第三十五章	酯类	684	35-33	苯甲酸甲酯	750
35-1	甲酸甲酯	686	35-34	对甲基苯甲酸甲酯	752
35-2	甲酸乙酯	688	35-35	对苯二甲酸二甲酯	754
35-3	乙酸甲酯	690	35-36	邻苯二甲酸二丁酯	756
35-4	氨基甲酸乙酯	692	第三十六章	胺类	758
35-5	氰乙酸甲酯	694	36-1	甲胺	760
35-6	乙酸乙烯酯	696	36-2	乙撑亚胺	762
35-7	丙烯酸甲酯	698	36-3	乙胺	764
35-8	草酸二甲酯	700	36-4	二甲胺	766
35-9	甲酸正丙酯	702	36-5	一乙醇胺	768
35-10	乙酸乙酯	704	36-6	乙二胺	770
35-11	丙酸甲酯	706	36-7	正丙胺	772
35-12	羧基乙酸乙酯	708	36-8	异丙胺	774

36-9	三甲胺	776
36-10	正丁胺	778
36-11	异丁胺	780
36-12	二乙胺	782
36-13	二乙醇胺	784
36-14	邻硝基苯胺	785
36-15	间硝基苯胺	788
36-16	对硝基苯胺	790
36-17	苯胺	792
36-18	二丙胺	794
36-19	二异丙胺	796
36-20	三乙胺	798
36-21	三乙醇胺	800
36-22	己二胺	802
36-23	苯甲胺	804
36-24	邻甲苯胺	806
36-25	间甲苯胺	808
36-26	对甲苯胺	810
36-27	<i>N,N</i> -二甲基苯胺	812
36-28	二丁胺	814
36-29	<i>N,N</i> -二乙基苯胺	816
36-30	二苯胺	818
36-31	<i>N,N</i> -二丙基苯胺	820
第三十七章 酰胺类		822
37-1	甲酰胺	824
37-2	乙酰胺	826
37-3	丙烯酰胺	828
37-4	<i>N,N</i> -二甲基甲酰胺	830
37-5	<i>N,N</i> -二甲基乙酰胺	832
37-6	己内酰胺	834
37-7	油酰胺	836
37-8	硬脂酰胺	838
第三十八章 腈类		840

38-1	氢氰酸	842
38-2	乙二腈	844
38-3	乙腈	846
38-4	丙烯腈	848
38-5	丙腈	850
38-6	丁二腈	852
38-7	甲基丙烯腈	854
38-8	丁腈	856
38-9	异丁腈	858
38-10	己二腈	860
38-11	苯基腈	862
第三十九章 酚类		864
39-1	苯酚	866
39-2	对苯二酚	868
39-3	邻甲酚	870
39-4	间甲酚	872
39-5	对甲酚	874
39-6	2,3-二甲酚	876
39-7	2,4-二甲酚	878
39-8	2,5-二甲酚	880
39-9	2,6-二甲酚	882
39-10	3,4-二甲酚	884
39-11	3,5-二甲酚	886
第四十章 含氮化合物		888
40-1	胍	890
40-2	硝基甲烷	892
40-3	硝基乙烷	894
40-4	吡啶	896
40-5	六氢吡啶	898
第四十一章 环氧化合物		900
41-1	环氧乙烷	902
41-2	3-氯-1,2-环氧丙烷	904
41-3	环氧丙烷	906

41-4	1,2-环氧丁烷·····	908	44-3	糠醛·····	948
41-5	1,4-二氧杂环己烷·····	910	44-4	2-甲基呋喃·····	950
第四十二章	硫化物 ·····	912	44-5	2-甲基四氢呋喃·····	952
42-1	硫化氢·····	914	第四十五章	无机物 ·····	954
42-2	二氧化硫·····	916	45-1	氧·····	956
42-3	硫氧化碳·····	918	45-2	一氧化氮·····	958
42-4	二硫化碳·····	920	45-3	氮·····	960
42-5	甲硫醇·····	922	45-4	一氧化二氮·····	962
42-6	乙硫醇·····	924	45-5	四氧化二氮·····	964
42-7	甲硫醚·····	926	45-6	氟化氢·····	966
42-8	二甲基亚砷·····	928	45-7	氯化氢·····	968
42-9	噻吩·····	930	45-8	溴化氢·····	970
42-10	乙硫醚·····	932	45-9	碘化氢·····	972
42-11	正十二碳硫醇·····	934	45-10	氦·····	974
第四十三章	稠环化合物 ·····	936	45-11	一氧化碳·····	976
43-1	萘·····	938	45-12	二氧化碳·····	978
43-2	1,2,3,4-四氢化萘·····	940	参考文献·····		980
第四十四章	杂环化合物 ·····	942	附录一 ·····		983
44-1	呋喃·····	944	附录二 ·····		1082
44-2	四氢呋喃·····	946	参考文献·····		1113

第一篇

物化数据的计算方法

第一章 临界参数

1-1 引言

本章叙述纯物质的各临界参数（临界温度 T_c 、临界压力 P_c 、临界体积 V_c 、临界压缩系数 Z_c 和临界 Riedel 常数 α_c ），偏心因子 ω ，融点 T_f 和常压沸点 T_b ，偶极矩 μ ，stiel 极性系数 x 和势能参数的计算方法。

1-2 Lydersen法

$$T_c = T_b [0.567 + \Sigma \Delta_T - \Sigma (\Delta_T)^2]^{-1} \quad (1-2.1)$$

$$P_c = M(0.34 + \Sigma \Delta_P)^{-2} \quad (1-2.2)$$

$$V_c = 40 + \Sigma \Delta_V \quad (1-2.3)$$

使用上式时，需有分子量 M 和常压沸点 T_b 的数据。上式中各单位为 $^{\circ}\text{K}$ ，绝对大气压和立方厘米/克分子。

各 Δ 值见表1-1。

1-3 其它方法

改进的 Nokay 法（求 T_c ，只限于烃类使用）：

$$\log T_c = A + B \log SG + C \log T_b \quad (1-3.1)$$

式中 SG 为温度 60°F 下液体烃类对同一温度下水的比重； A 、 B 、 C 为常数，列于表1-2中。

对含有两个族的烃类分子（例如含有烯烃支链的芳香族），上式尚