



卓越 工程师教育培养计划系列教材


ZHUOYUE GONGCHENGSHI
JIAOYU PEIYANG JIHUA XILIE JIAOCAI

马沛生 夏淑倩 夏清◎编

化工物性数据简明手册

HUAGONGWUXINGSHUJU
JIANMINGSHOUCE



 化学工业出版社

7202-62
20131

马沛生 夏淑倩 夏清 编

化工物性数据简明手册



化学工业出版社

· 北京 ·

化工物性数据是化工计算(设计)的三大基础之一,它与模型及方程同样重要。化学工业所涉及物质极多,每个物质有许多项物性,又需要考虑不同温度、压力下的值,其数据量难以计数。面对大量物性值使用者应能做出正确选择。对不同温度下的值宜选择相应的关联方程,以便于数据的手算或软件使用。

本书选择在化学工业中的重要物质 1038 种,推荐出重要物性 20 余项的物性值或关联系数。全书按物性分类分章提供数据。本书可作为高等学校化工设计和毕业设计工具书,还可供化学化工企业和设计研究院科技人员使用参考。

化学工业出版社

化工物性数据简明手册

图书在版编目(CIP)数据

化工物性数据简明手册 / 马沛生, 夏淑倩, 夏清编. — 北京:
化学工业出版社, 2013.3
卓越工程师教育培养计划系列教材
ISBN 978-7-122-16381-3

I. ①化… II. ①马… ②夏… ③夏… III. ①化工过程-化学
物质-物理性质-数据-手册 IV. ①TQ02-62

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2013) 第 011937 号

责任编辑: 徐雅妮
责任校对: 宋 玮

文字编辑: 孙凤英
装帧设计: 关 飞

出版发行: 化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 装: 大厂聚鑫印刷有限责任公司

787mm×1092mm 1/16 印张 24 字数 619 千字 2013 年 7 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 55.00 元

版权所有 违者必究

前言

化学化工的最大特点是物质众多，每个物质有各自的物理和化学性质（简称物性），要考虑在不同温度、压力下这些物性值是不同的，再考虑绝大多数化工过程中所处理的是混合物，不同的组成又要对应不同的物性。在一个化工过程计算中所涉及物性极多，也常常难于计算，因此在很多场合下，缺乏物性值成为化工计算或设计中的最大难点。

化工设计中核心内容包括：①工艺路线的评价及选择；②物料、能量及设备计算；③用计算机绘制设计图纸；④仪表、土建、环保、安全等内容的选择及计算。其中第二部分的工作量最大。

在物料、能量及设备计算中，一要模型，二要方程，三要数据，三者缺一不可。

如何能恰当地寻找化工数据（物性）就是本书主要目的之一。化工数据量太大，每一项物性至少需要一本手册，甚至要用几本甚至几十本手册（例如汽液平衡）。还应该指出，在大量数据中其可靠性又是有差异的，有的物性值存有很大的争议。因此本书又是入门的书，指引有关人员（包括化工毕业生）正确从大量数据中选择可靠的数据，也要能处理有争议的数据。

也许有人认为，目前大型化工模拟计算软件都附带有物性数据库，因此化工数据问题已得到解决。应该知道，这类数据库所提供的数据未必是最齐备的，更未必是最可靠的，这是因为这些软件的重点在于提供多种多样优良的模拟计算方法，配套的化工数据只是它的附属部分，只是说其中大部分数据可供化工计算或设计使用，而对数据的准确性难以提供保证，常常不区分估算值和实验值，也包括有实验值时滥用估算值。

由此也引出本书的第二个目的或服务对象，本书可供化工设计技术人员在使用软件时能“主动”选择数据，而不是完全依靠模拟软件所附数据库，对关键数据能校核，对存疑数据能判别，也有自己寻找数据的能力。相类似地也可有助于化工企业或科研单位技术人员，使企业人员能找到可靠的化工数据以进行解决生产问题的计算，指导工艺及设备的改

进，使科研人员在把新成果向生产转化时能顺利进行初步计算。对于这些人员，本书同样是一本入门的书。

毕业设计（论文）是工科类学生学习环节中的重要组成部分，是学生几年课程学习的深化，也是对学生创新能力培养的重要环节。

化工类学生的结业工作可以是论文或设计，前者一般对学生有更多的实验技术和创新能力的培养，后者有更多的计算，能更好地复习前几年中核心课程主要内容，也能提高对这些课程的理解及应用能力。

总之，本书是多用途的，适用于支持化工类学生毕业设计，也适用于化工设计人员，也能帮助企业、研究院技术人员进行化工计算。

本书的多用性也体现在既可用于手算，也可供软件计算用，为此在书中提供了大量关联式，不但可以在手算中内插，也可直接植入计算软件。

在化工计算中混合物的化工数据是十分重要和必需的，其数据量十分庞杂，在一本数据手册中不可能给出满意的结果。本书只能提供纯物质的重要数据，即使在纯物质中，也只限于 1038 种物质。对混合物，只在附录中给出一些有关寻找和使用数据的指导性意见。感谢张昉参加数据收集工作。

为压缩篇幅，常见于其他教材或著作中的“单位换算”、“水和水蒸气性质”等材料未列入书中。

由于化工数据量太大，本书只是一个“浓缩本”，考虑难于周全，不当之处望得到同行指正。

编者

2013 年 1 月

主要数据表

- 表 2-1 物质分类表
- 表 2-2 物质名录
- 表 3-1 熔点、沸点、相对密度和偶极矩
- 表 3-2 临界参数和偏心因子
- 表 4-1 烃类液体密度-温度关联式及系数
- 表 4-2 饱和醇液体密度-温度关联式及系数
- 表 4-3 液体密度与温度指数型关联式及系数
- 表 5-1 Antoine 蒸气压方程参数
- 表 6-1 相变热
- 表 6-2 $\Delta_v H_v$ 关联式及系数
- 表 7-1 热化学数据
- 表 8-1 理想气体摩尔热容-温度关联式及系数
- 表 8-2 液体摩尔热容-温度关联式及系数
- 表 8-3 液体摩尔热容-温度多项式及系数
- 表 9-1 气体黏度-温度关联式及系数
- 表 9-2 液体黏度-温度关联式及系数 (一)
- 表 9-3 液体黏度-温度关联式及系数 (二)
- 表 9-4 液体黏度-温度关联式及系数 (三)
- 表 10-1 气体热导率-温度关联式及系数
- 表 10-2 液体热导率-温度关联式及系数 (有机物)
- 表 10-3 液体热导率-温度关联式及系数 (无机物和单质)
- 表 11-1 表面张力-温度关联式与系数及温度点值

的可靠性,但理解测定方法及数据的可靠性还是很重要的。

(2) 化工数据的整理和评价

对常用物质的常见物性,有大批或重复的测定工作,一般测定数据有时是一致的,即相差在测定误差范围以内,有时相差很大,使用者难于选择,数据评价工作相应而生,其任务是排除相对不可靠的数据,提出一个或一批推荐值供使用,这些推荐值有时在数据类期刊中发表,更多地以数据手册形式出现,也出现在化学化工数据库中,最著名也是最知名的数据类期刊是 Journal of Physical and Chemical Properties Data,它始于 1972 年,至今已发表许多高质量的化学化工数据推荐值。

从事数据评价工作的研究人员常常需要具备该项物性的测定者,他们熟悉各种测定方法的优缺点,能严格按该项物性的评价规则对大量实例数据进行评价。

对化工计算或设计工作人员而言,未必有能力独立进行已有数据的正确选择及使用规则,恰当选择及使用相应的手册、数据库或其他数据源。

化学化工数据手册的出版始于 20 世纪 20 年代,当时已有的数据很少,一套 7 本的手册就已基本收集齐至当时的各项化学化工数据,从 20 世纪 40 年代,针对大量化学化工数据的

目 录

第1章 化工数据概论 / 1

1.1 概述 / 1

1.1.1 定义 / 1

1.1.2 化工数据所含的主要内容 / 1

1.2 数据源 / 2

第2章 物质名单及本书使用说明 / 4

第3章 化工基础数据 / 43

第4章 液体密度 / 95

第5章 蒸气压 / 115

第6章 相变热 / 162

第7章 标准生成热(焓)、标准熵、标准生成 Gibbs 自由能、标准摩尔热容 / 205

第8章 比热容 / 258

第9章 黏度 / 299

第10章 热导率 / 327

第11章 表面张力 / 345

附录 / 367

附录一 物质索引 / 367

附录二 个别化合物简要结构式 / 374

附录三 寻求混合物物性数据的几点提示 / 375

参考文献 / 377

第1章

化工数据概论

1.1 概述

1.1.1 定义

化工数据一般包括热力学数据和传递性质数据，这属于化工数据的狭义理解，有时也被称为化工基础数据。若作广义的理解，还要包括微观性质、毒性、爆炸性、可燃性、环保性、反应速率数据。化工数据中的绝大部分是各种纯物质或混合物的物理或化学性质，因此也被称为物化性质或简称物性。

本书所提供的化工数据限于热力学数据和传递性质数据。

1.1.2 化工数据所含的主要内容

(1) 化工数据的测定

不同物性项有不同的测定方法，同一物性项也常常采用不同的测定方法。这些测定方法有的与该物性的定义直接联系，也有的与一些模型及方程有关。不同的测定方法有不同的难度，也有不同的可靠性。

物性测定属化工数据的研究工作，一般计算及设计人员未必能理解测定中的问题及数据的可靠性，但理解测定方法及数据的可靠性还是很重要的。

(2) 化工数据的整理和评价

对常用物质的常见物性，有大量或重复的测定工作，产生大量化工数据，这些数据有时是一致的，即相差在测定误差范围以内，有时相差很大，使用者难于选择。数据评价工作相应而生，其任务是排除相对不可靠的数据，提出一个或一批推荐值供使用，这些数据推荐值有时在数据类期刊中发表，更多地以数据手册形式出现，也出现在化学化工数据库中，最重要也是最知名的数据类期刊是 *Journal of Physical and Chemical Reference Data*，它始于 1972 年，至今已发表许多高质量的化学化工数据推荐成果。

从事数据评价工作的研究人员常常曾是该项物性的测定者，他们熟悉各种测定方法的优缺点，能严格按该项物性的评价规则对大量实测数据进行评价。

对化工计算或设计工作人员而言，未必有能力独立进行已有数据的评价，只要求他们能正确选择及使用规则，恰当选择及使用相应的手册、数据库或其他数据源。

化学化工数据手册的出版始于 20 世纪 20 年代，当时已有的数据很少，一套 7 本的手册就已基本收集齐至当时的各项化学化工数据。从 20 世纪 40 年代，针对大量化学化工数据的

出现,数据整理工作的深度和广度有了飞跃,其重要表现为开始出版专项数据手册,即单独出版一种或一类化工物性数据,以适应化工数据量的膨胀。编者多为研究该项数据的权威人士,也常常是该项测定的专家。至20世纪80年代,随着计算机的应用,化学或化工数据库应运而生,在这些数据库中数据质量(可靠性)相差很大,有些数据库由研究该项数据的专家掌控,所有数据都给出选择依据和可靠性指标,并定期进行调整。有更多的数据库只提供数据值,不提供数据来源及可靠性,甚至混有估算值,因此部分数据可能不甚可靠,用于重要计算时有风险。

数据的可靠性有几种表达方式,一种是给出可能的误差,另一种是按数据质量(可靠性)分级。两者的结合就是质量码,每一级代表不同的误差。

(3) 化工数据的关联

个别化工数据是定值的,例如纯物质的临界温度、临界压力,而绝大部分化工数据是温度、压力的函数,对混合物,又是组成的函数,因此不可能在所有工业所需要的条件下,全部具有对应的实验值,因而需要把温度、压力、组成作为参数,把有限的实验值,代入理论的或经验的模型方程中,得出关联方程系数。使用关联方程可以良好地在实验数据范围内进行内插。

不同的物性项目选用不同形式的关联方程,同一物性项目也可以选用不同形式的关联方程。一般说,不同关联方程对应各自的关联可靠性,温度、压力变化范围大,适宜选用更复杂一些的方程,除非有特殊的理由,不必追求过分复杂的关联方程,以对应实验的可靠性及避免使工程计算过于复杂。

(4) 化工数据的估算

相对摩尔质量不大的物质,其物性测定较齐全,但若考虑大部分物质又需要在不同温度、压力下的物性值,数据还是很难齐全的,使用关联式外推又可能导致很大的误差。再考虑化工过程中所处理的物系更多的是混合物,而不同条件下混合物的物性基本上是不具备的。综上所述,化工过程中实际处理物系的物性很多情况下是缺乏实验值的,因此估算是必需的。

设计人员在选用估算方法时应认清如下几点。

① 明确选用估算方法是没办法时的办法,在计算时还是要首先寻找和评价实验值,只有在确实不存在实测(实验)值时,才去使用估算方法,以免对计算的可靠性带来更多的问题,甚至“失败”。

② 在选用估算方法时也要进行评价,以选择相对可靠的估算方法。在关键(重要)计算中,应了解因数据“失真”所带入的计算误差。

③ 分清手册、数据库、网上数据的可靠性。有一些手册、数据库中的数据是经严格评价的,但也有许多手册或网上的数据只是转引其他手册或数据库,由于数据未经评价,可能混有估算值,甚至混有大量估算值。总之,当进行重要计算前,应尽可能找到可靠的物性实验值,缺乏实验值时,应该自行选择适宜的估算方法,一些计算机软件中的估算值,未必是可靠的。

1.2 数据源

数据源的引用在很大程度上决定数据手册或数据库的水平。一些手册或数据库不系统进行数据评价,只是整套照搬其他已公开的手册中的物性值,因此混入了大量估算值。作为一

般的化工计算还是可以用这些手册中的数据,但在进行估算方法研究或重要的化工计算时,用不严谨的数据就有一定的风险。以精馏计算为例,当两组分沸点差 20°C 以上时,计算常压精馏对沸点的可靠性要求不是很高,而在分离1-甲基-3-乙苯和1-甲基-4-乙苯时,其沸点相差不足 2°C ,又3-庚醇与4-庚醇的沸点差约为 1°C ,此时沸点值的准确性对精馏计算太重要了。

另一类数据手册或数据库对入选的数据进行严格的评价,它常常是专项性的,即只包括一项或一类物性,甚至用几本至几十本手册表达一项或一类物性,每一组数据都提供了可靠性(或质量码),用这样的数据进行计算更可靠,但其寻找有一定复杂性。

本书是介于这两类手册之间的,它是一本综合性手册,物性项目多,尽可能压缩在一本手册中便于查找,所有数据源可能是经过评价的,也有许多数据并未经严格评价,甚至是混入一些估算值的,此时在书中相应地有信号。

本书引用数据源方式如下。

① 实测的物性数据是化工数据最重要的源泉,一些半理论半经验的方法、方程所得的计算数据难认为可靠。另外,文献实测数据量极大,即使限于单一物性项,也不是一个人所能完成评价工作的,往往是由一个小组或“数据中心”协同完成的。由此可知,直接从原始文献整理文献物性数据不是本书任务。

② 权威性的数据评价成果一般都在手册性专著或手册性期刊上发表,有的也建立了数据库。本书主要选用经严格评选的手册(或期刊)中的数据,当缺乏可靠评价值时,也不得不列出一些来源不明的数据,此时也加入说明,表明这些数据可靠性差。

③ 绝大部分物性值是温度、压力、组成的函数,由于化工生产中工艺条件变化范围很大,因此化工设计中很需要不同条件下的物性。

④ 在化工生产中温度范围很大,可以低于 -200°C ,也可以超过 1000°C ,但涉及这种极端温度范围的场合不多见,最重要的还是 $-20\sim 300^{\circ}\text{C}$ 范围内的数据,而实测的物性值也主要集中在这一段区间内,更是集中在室温上下。

在实验中所提供的物性值常常是不同温度下的离散值,这样的数据不便于内插使用,因此需要把这类数据关联成温度的函数,不但可经简单计算求得所需温度下的值,更便于进行过程模拟计算。

对于不同温度下的物性值,本书所提供的是关联式及其系数值。

⑤ 某些物性在大部分压力范围内与压力关系不大,在相应的工程计算中可以忽略压力的影响,而压力对物性影响实测值也不多。另外对需要计算压力影响的物性,已有一系列的计算方法可用,虽然计算结果都是近似的。本书也与其他手册一样,不直接提供不同压力下物性值,只是提供计算中所必需的值,其中主要是临界参数。

⑥ 在化工中所处理的物系以混合物为多,因而需要混合物的物性。有些混合物物性具有简单的加和性,此时可按组成由同样条件下纯物质物性加和即可;另一些物性与组成线性加和相差甚远,相平衡数据就是这样。

限于篇幅,混合物物性不属于本书范围,只在附录中简单提及。

第2章

物质名单及本书使用说明

本书使用说明如下。

(1) 物质按六大类、20 小类排列 (表 2-1)。读者还可从附录一中按 C、H、O、N、S... 数排列找到所需要的物质。

表 2-1 物质分类表

一、C—H 化合物

- (1) 烷烃
- (2) 烯烃
- (3) 炔烃、二烯烃及其他不饱和烃
- (4) 环烷烃及环烯烃
- (5) 芳烃

二、C—H—卤化合物

- (6) C—H—F 化合物
- (7) C—H—Cl、C—H—Br 化合物
- (8) 混合卤化物

三、C—H—O 化合物

- (9) 醇
- (10) 酚、含卤醇及酚
- (11) 醚
- (12) 醛、酮及含卤醛或酮
- (13) 酸、酐及含卤酸
- (14) 酯
- (15) 含氧多基团化合物

四、C—H—N 和 C—H—O—N 化合物

- (16) 胺
- (17) 腈及其他 C—H—N 化合物
- (18) C—H—O—N 化合物

五、C—H—S 和 C—H—O—S 化合物

- (19) 硫醇、硫醚及其他含硫化物

六、无机化合物、单质和金属有机化合物

- (20) 单质, 无机化合物, Si、Al 有机物

(2) 表 2-2 是本书涉及的物质名单, 共 1038 个, 其中绝大多数为有机化合物, 共 988 个, 单质、无机化合物和金属有机化合物 50 个。这些物质是按其在化学工业中重要性入选的。

表 2-2 物质名录

物质编号	物质名称	英文名	化学式	CAS号
一、C—H 化合物				
(1) 烷烃				
1	甲烷	methane	CH ₄	74-82-8
2	乙烷	ethane	C ₂ H ₆	74-84-0
3	丙烷	propane	C ₃ H ₈	74-98-6
4	丁烷	butane	C ₄ H ₁₀	106-97-8
5	2-甲基丙烷, 异丁烷	2-methylpropane, isobutane	C ₄ H ₁₀	75-28-5
6	戊烷	pentane	C ₅ H ₁₂	109-66-0
7	2-甲基丁烷	2-methylbutane	C ₅ H ₁₂	78-78-4
8	2,2-二甲基丙烷	2,2-dimethylpropane	C ₅ H ₁₂	463-82-1
9	己烷	hexane	C ₆ H ₁₄	110-54-3
10	2-甲基戊烷	2-methylpentane	C ₆ H ₁₄	107-83-5
11	3-甲基戊烷	3-methylpentane	C ₆ H ₁₄	96-14-0
12	2,2-二甲基丁烷	2,2-dimethylbutane	C ₆ H ₁₄	75-83-2
13	2,3-二甲基丁烷	2,3-dimethylbutane	C ₆ H ₁₄	79-29-8
14	庚烷	heptane	C ₇ H ₁₆	142-82-5
15	2-甲基己烷	2-methylhexane	C ₇ H ₁₆	591-76-4
16	3-甲基己烷	3-methylhexane	C ₇ H ₁₆	589-34-4
17	3-乙基戊烷	3-ethylpentane	C ₇ H ₁₆	617-78-7
18	2,2-二甲基戊烷	2,2-dimethylpentane	C ₇ H ₁₆	590-35-2
19	2,3-二甲基戊烷	2,3-dimethylpentane	C ₇ H ₁₆	565-59-3
20	2,4-二甲基戊烷	2,4-dimethylpentane	C ₇ H ₁₆	108-08-7
21	3,3-二甲基戊烷	3,3-dimethylpentane	C ₇ H ₁₆	562-49-2
22	2,2,3-三甲基丁烷	2,2,3-trimethylbutane	C ₇ H ₁₆	464-06-2
23	辛烷	octane	C ₈ H ₁₈	111-65-9
24	2-甲基庚烷	2-methylheptane	C ₈ H ₁₈	592-27-8
25	3-甲基庚烷	3-methylheptane	C ₈ H ₁₈	598-81-1
26	4-甲基庚烷	4-methylheptane	C ₈ H ₁₈	589-53-7
27	3-乙基己烷	3-ethylhexane	C ₈ H ₁₈	619-99-8
28	2,2-二甲基己烷	2,2-dimethylhexane	C ₈ H ₁₈	590-73-8
29	2,3-二甲基己烷	2,3-dimethylhexane	C ₈ H ₁₈	584-94-1
30	2,4-二甲基己烷	2,4-dimethylhexane	C ₈ H ₁₈	589-43-5
31	2,5-二甲基己烷	2,5-dimethylhexane	C ₈ H ₁₈	592-13-2
32	3,3-二甲基己烷	3,3-dimethylhexane	C ₈ H ₁₈	563-16-6

续表

物质编号	物质名称	英文名	化学式	CAS号
(1) 烷烃				
33	3,4-二甲基己烷	3,4-dimethylhexane	C ₈ H ₁₈	583-48-2
34	2-甲基-3-乙基戊烷	2-methyl-3-ethylpentane	C ₈ H ₁₈	609-26-7
35	3-甲基-3-乙基戊烷	3-methyl-3-ethylpentane	C ₈ H ₁₈	1067-08-9
36	2,2,3-三甲基戊烷	2,2,3-trimethylpentane	C ₈ H ₁₈	564-02-3
37	2,2,4-三甲基戊烷	2,2,4-trimethylpentane	C ₈ H ₁₈	540-84-1
38	2,3,3-三甲基戊烷	2,3,3-trimethylpentane	C ₈ H ₁₈	560-21-4
39	2,3,4-三甲基戊烷	2,3,4-trimethylpentane	C ₈ H ₁₈	565-75-3
40	2,2,3,3-四甲基丁烷	2,2,3,3-tetramethylbutane	C ₈ H ₁₈	594-82-1
41	壬烷	nonane	C ₉ H ₂₀	111-84-2
42	2-甲基辛烷	2-methyloctane	C ₉ H ₂₀	3221-61-2
43	2,2-二甲基庚烷	2,2-dimethylheptane	C ₉ H ₂₀	1071-26-7
44	2,2,3,3-四甲基戊烷	2,2,3,3-tetramethylpentane	C ₉ H ₂₀	7154-79-2
45	2,2,3,4-四甲基戊烷	2,2,3,4-tetramethylpentane	C ₉ H ₂₀	1186-53-4
46	2,2,4,4-四甲基戊烷	2,2,4,4-tetramethylpentane	C ₉ H ₂₀	1070-87-7
47	2,3,3,4-四甲基戊烷	2,3,3,4-tetramethylpentane	C ₉ H ₂₀	16747-25-4
48	癸烷	decane	C ₁₀ H ₂₂	124-18-5
49	2-甲基壬烷	2-methylnonane	C ₁₀ H ₂₂	871-83-0
50	3,3,5-三甲基庚烷	3,3,5-trimethylheptane	C ₁₀ H ₂₂	7154-80-5
51	2,2,3,3-四甲基己烷	2,2,3,3-tetramethylhexane	C ₁₀ H ₂₂	13475-81-5
52	2,2,5,5-四甲基己烷	2,2,5,5-tetramethylhexane	C ₁₀ H ₂₂	1071-81-4
53	十一烷	undecane	C ₁₁ H ₂₄	1120-21-4
54	2-甲基癸烷	2-methyldecane	C ₁₁ H ₂₄	6975-98-0
55	十二烷	dodecane	C ₁₂ H ₂₆	112-40-3
56	十三烷	tridecane	C ₁₃ H ₂₈	629-50-5
57	十四烷	tetradecane	C ₁₄ H ₃₀	629-59-4
58	十五烷	pentadecane	C ₁₅ H ₃₂	629-62-9
59	十六烷	hexadecane	C ₁₆ H ₃₄	544-76-3
60	十七烷	heptadecane	C ₁₇ H ₃₆	629-78-7
61	十八烷	octadecane	C ₁₈ H ₃₈	593-45-3
62	十九烷	nonadecane	C ₁₉ H ₄₀	629-92-5
63	二十烷	eicosane	C ₂₀ H ₄₂	112-95-8

续表

物质编号	物质名称	英文名	化学式	CAS号
(2) 烯烃				
64	乙烯	ethylene, ethene	C ₂ H ₄	74-85-1
65	丙烯	propylene, propene	C ₃ H ₆	115-07-1
66	1-丁烯	1-butene, 1-butylene	C ₄ H ₈	106-98-9
67	顺-2-丁烯	(Z)-2-butene	C ₄ H ₈	590-18-1
68	反-2-丁烯	(E)-2-butene	C ₄ H ₈	624-64-6
69	异丁烯, 2-甲基丙烯	isobutene, isobutylene, 2-methylpropene	C ₄ H ₈	115-11-7
70	1-戊烯	1-pentene	C ₅ H ₁₀	109-67-1
71	顺-2-戊烯	(Z)-2-pentene	C ₅ H ₁₀	627-20-3
72	反-2-戊烯	(E)-2-pentene	C ₅ H ₁₀	646-04-8
73	2-甲基-1-丁烯	2-methyl-1-butene	C ₅ H ₁₀	563-46-2
74	3-甲基-1-丁烯	3-methyl-1-butene	C ₅ H ₁₀	563-45-1
75	2-甲基-2-丁烯	2-methyl-2-butene	C ₅ H ₁₀	513-35-9
76	1-己烯	1-hexene	C ₆ H ₁₂	592-41-6
77	顺-2-己烯	(Z)-2-hexene	C ₆ H ₁₂	7688-21-3
78	反-2-己烯	(E)-2-hexene	C ₆ H ₁₂	4050-45-7
79	顺-3-己烯	(Z)-3-hexene	C ₆ H ₁₂	7642-09-3
80	反-3-己烯	(E)-3-hexene	C ₆ H ₁₂	13269-52-8
81	2-甲基-1-戊烯	2-methyl-1-pentene	C ₆ H ₁₂	763-29-1
82	3-甲基-1-戊烯	3-methyl-1-pentene	C ₆ H ₁₂	760-20-3
83	4-甲基-1-戊烯	4-methyl-1-pentene	C ₆ H ₁₂	691-37-2
84	2-甲基-2-戊烯	2-methyl-2-pentene	C ₆ H ₁₂	625-27-4
85	3-甲基-顺-2-戊烯	3-methyl-(Z)-2-pentene	C ₆ H ₁₂	922-62-3
86	3-甲基-反-2-戊烯	3-methyl-(E)-2-pentene	C ₆ H ₁₂	616-12-6
87	4-甲基-顺-2-戊烯	4-methyl-(Z)-2-pentene	C ₆ H ₁₂	691-38-3
88	4-甲基-反-2-戊烯	4-methyl-(E)-2-pentene	C ₆ H ₁₂	674-76-0
89	2-乙基-1-丁烯	2-ethyl-1-butene	C ₆ H ₁₂	760-21-4
90	2,3-二甲基-1-丁烯	2,3-dimethyl-1-butene	C ₆ H ₁₂	563-78-0
91	3,3-二甲基-1-丁烯	3,3-dimethyl-1-butene	C ₆ H ₁₂	558-37-2
92	2,3-二甲基-2-丁烯	2,3-dimethyl-2-butene	C ₆ H ₁₂	563-79-1
93	1-庚烯	1-heptene	C ₇ H ₁₄	592-76-7
94	顺-2-庚烯	(Z)-2-heptene	C ₇ H ₁₄	6443-92-1
95	反-2-庚烯	(E)-2-heptene	C ₇ H ₁₄	14686-13-6
96	顺-3-庚烯	(Z)-3-heptene	C ₇ H ₁₄	7642-10-6

续表

物质编号	物质名称	英文名	化学式	CAS号
(2) 烯烃				
97	反-3-庚烯	(E)-3-heptene	C ₇ H ₁₄	14686-14-7
98	5-甲基-1-己烯	5-methyl-1-hexene	C ₇ H ₁₄	3524-73-0
99	3-甲基-顺-3-己烯	3-methyl-(Z)-3-hexene	C ₇ H ₁₄	4914-89-0
100	3-甲基-反-3-己烯	3-methyl-(E)-3-hexene	C ₇ H ₁₄	3899-36-3
101	2,4-二甲基-1-戊烯	2,4-dimethyl-1-pentene	C ₇ H ₁₄	2213-32-3
102	4,4-二甲基-1-戊烯	4,4-dimethyl-1-pentene	C ₇ H ₁₄	762-62-9
103	4,4-二甲基-顺-2-戊烯	4,4-dimethyl-(Z)-2-pentene	C ₇ H ₁₄	762-63-0
104	4,4-二甲基-反-2-戊烯	4,4-dimethyl-(E)-2-pentene	C ₇ H ₁₄	690-08-4
105	3-甲基-2-乙基-1-丁烯	3-methyl-2-ethyl-1-butene	C ₇ H ₁₄	7357-93-9
106	2,3,3-三甲基-1-丁烯	2,3,3-trimethyl-1-butene	C ₇ H ₁₄	594-56-9
107	1-辛烯	1-octene	C ₈ H ₁₆	111-66-0
108	顺-2-辛烯	(Z)-2-octene	C ₈ H ₁₆	7642-04-8
109	反-2-辛烯	(E)-2-octene	C ₈ H ₁₆	13389-42-9
110	2,2-二甲基-顺-3-己烯	2,2-dimethyl-(Z)-3-hexene	C ₈ H ₁₆	690-92-6
111	2,2-二甲基-反-3-己烯	2,2-dimethyl-(E)-3-hexene	C ₈ H ₁₆	690-93-7
112	2,5-二甲基-顺-3-己烯	2,5-dimethyl-(Z)-3-hexene	C ₈ H ₁₆	10557-44-5
113	2,5-二甲基-反-3-己烯	2,5-dimethyl-(E)-3-hexene	C ₈ H ₁₆	692-70-6
114	2-甲基-3-乙基-1-戊烯	2-methyl-3-ethyl-1-pentene	C ₈ H ₁₆	19780-66-6
115	2,4,4-三甲基-1-戊烯	2,4,4-trimethyl-1-pentene	C ₈ H ₁₆	107-39-1
116	2,4,4-三甲基-2-戊烯	2,4,4-trimethyl-2-pentene	C ₈ H ₁₆	107-40-4
117	1-壬烯	1-nonene	C ₉ H ₁₈	124-11-8
118	1-癸烯	1-decene	C ₁₀ H ₂₀	872-05-9
119	1-十一烯	1-undecene	C ₁₁ H ₂₂	821-95-4
120	1-十二烯	1-dodecene	C ₁₂ H ₂₄	112-41-4
121	1-十三烯	1-tridecene	C ₁₃ H ₂₆	2437-56-1
122	1-十四烯	1-tetradecene	C ₁₄ H ₂₈	1120-36-1
123	1-十六烯	1-hexadecene	C ₁₆ H ₃₂	629-73-2
(3) 炔烃、二烯炔及其他不饱和烃				
124	乙炔	ethyne, acetylene	C ₂ H ₂	74-86-2
125	丙炔	propyne, methylacetylene	C ₃ H ₄	74-99-7
126	1-丁炔	1-butyne, ethylacetylene	C ₄ H ₆	107-00-6
127	2-丁炔	2-butyne, dimethylacetylene	C ₄ H ₆	503-17-3
128	1-戊炔	1-pentyne	C ₅ H ₈	627-19-0

续表

物质编号	物质名称	英文名	化学式	CAS号
(3) 炔烃、二烯烃及其他不饱和烃				
129	2-戊炔	2-pentyne	C ₅ H ₈	627-21-4
130	3-甲基-1-丁炔	3-methyl-1-butyne	C ₅ H ₈	598-23-2
131	1-己炔	1-hexyne	C ₆ H ₁₀	693-02-7
132	1-庚炔	1-heptyne	C ₇ H ₁₂	628-71-7
133	1-辛炔	1-octyne	C ₈ H ₁₄	629-05-0
134	1-壬炔	1-nonyne	C ₉ H ₁₆	3452-09-3
135	1-癸炔	1-decyne	C ₁₀ H ₁₈	764-93-2
136	丙二烯	propadiene, allene	C ₃ H ₄	463-49-0
137	1,2-丁二烯	1,2-butadiene	C ₄ H ₆	590-19-2
138	1,3-丁二烯	1,3-butadiene	C ₄ H ₆	106-99-0
139	1,2-戊二烯	1,2-pentadiene, ethyl allene	C ₅ H ₈	591-95-7
140	1-顺-3-戊二烯	1-(Z)-3-pentadiene	C ₅ H ₈	1574-41-0
141	1-反-3-戊二烯	1-(E)-3-pentadiene	C ₅ H ₈	2004-70-8
142	1,4-戊二烯	1,4-pentadiene	C ₅ H ₈	591-93-5
143	2,3-戊二烯	2,3-pentadiene	C ₅ H ₈	591-96-8
144	3-甲基-1,2-丁二烯	3-methyl-1,2-butadiene	C ₅ H ₈	598-25-4
145	2-甲基-1,3-丁二烯, 异戊二烯	2-methyl-1,3-butadiene, isoprene	C ₅ H ₈	78-79-5
146	1,5-己二烯	1,5-hexadiene	C ₆ H ₁₀	592-42-7
147	2,3-二甲基-1, 3-丁二烯	2,3-dimethyl-1,3-butadiene	C ₆ H ₁₀	513-81-5
148	1-丁烯-3-炔, 乙烯基乙炔	1-buten-3-yne, vinylacetylene	C ₄ H ₄	689-97-4
149	丁二炔	butadiyne	C ₄ H ₂	460-12-8
(4) 环烷烃及环烯烃				
150	环丙烷	cyclopropane, trimethylene	C ₃ H ₆	75-19-4
151	环丁烷	cyclobutane	C ₄ H ₈	287-23-0
152	环戊烷	cyclopentane	C ₅ H ₁₀	287-92-3
153	甲基环戊烷	methylcyclopentane	C ₆ H ₁₂	96-37-7
154	乙基环戊烷	ethylcyclopentane	C ₇ H ₁₄	1640-89-7
155	1,1-二甲基环戊烷	1,1-dimethylcyclopentane	C ₇ H ₁₄	1638-26-2
156	1-顺-2-二甲基环戊烷	1-cis-2-dimethylcyclopentane	C ₇ H ₁₄	1192-18-3
157	1-反-2-二甲基环戊烷	1-trans-2-dimethylcyclopentane	C ₇ H ₁₄	822-50-4
158	1-顺-3-二甲基环戊烷	1-cis-3-dimethylcyclopentane	C ₇ H ₁₄	2532-58-3
159	1-反-3-二甲基环戊烷	1-trans-3-dimethylcyclopentane	C ₇ H ₁₄	1759-58-6

续表

物质编号	物质名称	英文名	化学式	CAS号
(4) 环烷烃及环烯烃				
160	丙基环戊烷	propylcyclopentane	C ₈ H ₁₆	2040-96-2
161	(1-甲基乙基)环戊烷, 异丙基环戊烷	(1-methylethyl) cyclopentane, isopropylcyclopentane	C ₈ H ₁₆	3875-51-2
162	1-甲基-1-乙基环戊烷	1-methyl-1-ethylcyclopentane	C ₈ H ₁₆	16747-50-5
163	1-甲基-顺-2-乙基环戊烷	1-methyl- <i>cis</i> -2-ethylcyclopentane	C ₈ H ₁₆	930-89-2
164	1-甲基-反-2-乙基环戊烷	1-methyl- <i>trans</i> -2-ethylcyclopentane	C ₈ H ₁₆	930-90-5
165	1-甲基-顺-3-乙基环戊烷	1-methyl- <i>cis</i> -3-ethylcyclopentane	C ₈ H ₁₆	2613-66-3
166	1-甲基-反-3-乙基环戊烷	1-methyl- <i>trans</i> -3-ethylcyclopentane	C ₈ H ₁₆	2613-65-2
167	1, 1, 2-三甲基环戊烷	1, 1, 2-trimethylcyclopentane	C ₈ H ₁₆	4259-00-1
168	1, 1, 3-三甲基环戊烷	1, 1, 3-trimethylcyclopentane	C ₈ H ₁₆	4516-69-2
169	丁基环戊烷	butylcyclopentane	C ₉ H ₁₈	2040-95-1
170	戊基环戊烷	pentylcyclopentane	C ₁₀ H ₂₀	3741-00-2
171	环己烷	cyclohexane	C ₆ H ₁₂	110-82-7
172	甲基环己烷	methylcyclohexane	C ₇ H ₁₄	108-87-2
173	乙基环己烷	ethylcyclohexane	C ₈ H ₁₆	1678-91-7
174	1, 1-二甲基环己烷	1, 1-dimethylcyclohexane	C ₈ H ₁₆	590-66-9
175	1-顺-2-二甲基环己烷	1- <i>cis</i> -2-dimethylcyclohexane	C ₈ H ₁₆	2207-01-4
176	1-反-2-二甲基环己烷	1- <i>trans</i> -2-dimethylcyclohexane	C ₈ H ₁₆	6876-23-9
177	1-顺-3-二甲基环己烷	1- <i>cis</i> -3-dimethylcyclohexane	C ₈ H ₁₆	638-04-0
178	1-反-3-二甲基环己烷	1- <i>trans</i> -3-dimethylcyclohexane	C ₈ H ₁₆	2207-03-6
179	1-顺-4-二甲基环己烷	1- <i>cis</i> -4-dimethylcyclohexane	C ₈ H ₁₆	624-29-3
180	1-反-4-二甲基环己烷	1- <i>trans</i> -4-dimethylcyclohexane	C ₈ H ₁₆	2207-04-7
181	丙基环己烷	propylcyclohexane	C ₉ H ₁₈	1678-92-8
182	(1-甲基乙基)环己烷, 异丙基环己烷	(1-methylethyl) cyclohexane, isopropylcyclohexane	C ₉ H ₁₈	696-29-7
183	1-甲基-1-乙基环己烷	1-methyl-1-ethylcyclohexane	C ₉ H ₁₈	4926-90-3
184	1-甲基-顺-2-乙基环己烷	1-methyl- <i>cis</i> -2-ethylcyclohexane	C ₉ H ₁₈	4923-77-7
185	1-甲基-反-2-乙基环己烷	1-methyl- <i>trans</i> -2-ethylcyclohexane	C ₉ H ₁₈	4923-78-8
186	1-甲基-顺-3-乙基环己烷	1-methyl- <i>cis</i> -3-ethylcyclohexane	C ₉ H ₁₈	19489-10-2
187	1-甲基-反-3-乙基环己烷	1-methyl- <i>trans</i> -3-ethylcyclohexane	C ₉ H ₁₈	4926-76-5
188	1-甲基-顺-4-乙基环己烷	1-methyl- <i>cis</i> -4-ethylcyclohexane	C ₉ H ₁₈	4926-78-7
189	1-甲基-反-4-乙基环己烷	1-methyl- <i>trans</i> -4-ethylcyclohexane	C ₉ H ₁₈	6236-88-0
190	1-顺-3-反-5-三甲基环己烷	1- <i>cis</i> -3- <i>trans</i> -5-trimethylcyclohexane	C ₉ H ₁₈	1795-26-2
191	丁基环己烷	butylcyclohexane	C ₁₀ H ₂₀	1678-93-9