Федеральное агентство по образованию.

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального

образования.

Самарский государственный технический университет.

Кафедра: «Технология органического и нефтехимического синтеза»

## Курсовой проект по дисциплине:

«Расчеты и прогнозирование свойств органических соединений»

Выполнил:

Руководитель: доцент, к. х. н.

Самара

2008 г.

**Задание 40А**

на курсовую работу по дисциплине "Расчеты и прогнозирование свойств органических соединений"

1) Для четырех соединений, приведенных в таблице, вычислить , , методом Бенсона по атомам с учетом первого окружения.



2) Для первого соединения рассчитать и .



3) Для четырех соединений, приведенных в таблице, рекомендованными методами вычислить критическую (жидкость-пар) температуру, критическое давление, критический объем, ацентрический фактор.

4) Для первого соединения рассчитать , , . Определить фазовое состояние компонента.



5) Для первого соединения рассчитать плотность вещества при температуре 730 К и давлении 100 бар. Определить фазовое состояние компонента.

6) Для четырех соединений, приведенных в таблице, рекомендованными методами вычислить плотность насыщенной жидкости. Привести графические зависимости "плотность-температура" для области сосуществования жидкой и паровой фаз. Выполнить их анализ.

7) Для четырех соединений, приведенных в таблице, рекомендованными методами вычислить давление насыщенного пара. Привести графические Р-Т зависимости для области сосуществования жидкой и паровой фаз. Выполнить их проверку и анализ.

8) Для четырех соединений, приведенных в таблице, рекомендованными методами вычислить и . Привести графические зависимости указанных энтальпий испарения от температуры для области сосуществования жидкой и паровой фаз. Выполнить их анализ.



9) Для первого соединения рассчитать рекомендованными методами вязкость вещества при температуре 730 К и низком давлении.

10) Для первого соединения рассчитать рекомендованными методами вязкость вещества при температуре 730 К и давлении 100 атм.

11) Для первого соединения рассчитать рекомендованными методами теплопроводность вещества при температуре 730 К и низком давлении.

12) Для первого соединения рассчитать рекомендованными методами теплопроводность вещества при температуре 730 К и давлении 100 атм.

**Задание №1**

Для четырех соединений, приведенных в таблице, рассчитать и методом Бенсона с учетом первого окружения.



4-Метил-4-этилгептан

Из таблицы Бенсона возьмем парциальные вклады для и , вводим набор поправок:



Поправки на гош взаимодействие

Вводим 4 поправки «алкил-алкил»

Поправка на симметрию:

,



Таблица 1

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Кол-во вкладов | Вклад | Вклад в энтальпию, кДж/моль | Вклад | Вклад в энтропию Дж/К\*моль | Вклад | Вклад в т/емкость Дж/К\*моль |
| СН3-(С) | 4 | -42.19 | -168.76 | 127.29 | 509.16 | 25.910 | 103.64 |
| С-(4С) | 1 | 2.09 | 2.09 | -146.92 | -146.92 | 18.29 | 18.29 |
| СН2-(2С) | 5 | -20.64 | -103.2 | 39.43 | 197.15 | 23.02 | 115.1 |
| ∑ | 10 |  | -269.87 |  | 559.39 |  | 237.03 |
| гош-попр. | 4 | 3.35 | 13.4 |  |  |  |  |
| поправка на симм. | σнар= | 2 | σвнутр= | 81 | -42,298 |  |  |
| смешение | N= | 0 |  |  | 0 |  |  |
|  |  | ΔHo | -256.47 | ΔSo | 517,092 | ΔСpo | 237.030 |

Для данного вещества рассчитаем энтальпию и энтропию методом Татевского по связям

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Кол-во вкладов | Парц. вклад, кДж/моль | Вклад в энтальпиюкДж/моль | Парц. вклад, Дж/К\*моль | Вклад в энтропию Дж/К\*моль |
| (С1-С2)1 | 3 | -52,581 | -157,74 | 147,74 | 443,22 |
|  |  |  |  |  |  |
| (С1-С4)1 | 1 | -41,286 | -41,286 | 92,46 | 92,46 |
| (С2-С4)1 | 3 | -5,087 | -15,261 | -22,89 | -68,67 |
| (С2-С2)1 | 2 | -20,628 | -41,256 | 39,03 | 78,06 |
| ∑ | 9 |  | -255,546 |  | 545,07 |
| поправка на симм. | σнар= | 2 | σвнутр= | 81 | -42,298 |
|  |  | ΔHo | -255,546 | ΔSo | 502,772 |

орто-Терфенил

Из таблицы Бенсона возьмем парциальные вклады для и , вводим набор поправок.



Поправка на симметрию:



Таблица 3

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Кол-во вкла-дов | Вклад | Вклад в энтальпию, кДж/моль | Вклад | Вклад в энтропию Дж/К\*моль | Вклад | Вклад в т/емкость Дж/К\*моль |
| Cb-Cb | 4 | 20,76 | 83,04 | -36,17 | -144,68 | 13,94 | 55,76 |
| Cb-H | 14 | 13,81 | 193,34 | 48,26 | 675,64 | 17,16 | 240,24 |
| ∑ | 18 |  | 276,38 |  | 530,96 |  | 296 |
| Поправка орто- (полярный/  полярный) |  |  | 10,05 |  |  |  |  |
| поправка на симм. | σнар= | 1 | σвнутр= | 4 | -11,526 |  |  |
|  |  | ΔHo | 286,43 | ΔSo | 519,434 | ΔСpo | 296,0 |

Диизопропиловый эфир

Из таблицы Бенсона возьмем парциальные вклады для и , вводим набор поправок.



Поправки на гош – взаимодействие через кислород простого эфира.

Поправка на внутреннюю симметрию:



Таблица 3

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Кол-во вкла-дов | Вклад | Вклад в энтальпию, кДж/моль | Вклад | Вклад в энтропию Дж/К\*моль | Вклад | Вклад в т/емкость Дж/К\*моль |
| СН3-(С) | 4 | -42,19 | -168,76 | 127,29 | 509,16 | 25,91 | 103,64 |
| O-(2C) | 1 | -97,11 | -97,11 | 36,33 | 36,33 | 14,23 | 14,23 |
| СН-(2С,O) | 2 | -30,14 | -60,28 | -46,04 | -92,08 | 20,09 | 40,18 |
| ∑ | 7 |  | -326,15 |  | 453,41 |  | 158,05 |
| Гош – через  кислород простого эфира | 1 | 2,09 | 2,09 |  |  |  |  |
| поправка на симм. | σнар= | 1 | σвнутр= | 81 | -36,535 |  |  |
|  |  | ΔHo | -324,06 | ΔSo | 416,875 | ΔСpo | 158,05 |

Изобутилацетат

Из таблицы Бенсона возьмем парциальные вклады для и , вводим набор поправок.



Поправки на гош - взаимодействие:

Введем 1 поправку «алкил-алкил».

Поправка на симметрию:



Таблица 4

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Кол-во вкла-дов | Вклад | Вклад в энтальпию, кДж/моль | Вклад | Вклад в энтропию Дж/К\*моль | Вклад | Вклад в т/емкость Дж/К\*моль |
| СН3-(С) | 3 | -42,19 | -126,57 | 127,29 | 381,87 | 25,91 | 77,73 |
| О-(С,С0) | 1 | -180,41 | -180,41 | 35,12 | 35,12 | 11,64 | 11,64 |
| СН-(3С) | 1 | -7,95 | -7,95 | -50,52 | -50,52 | 19,00 | 19,00 |
| СН2-(С,О) | 1 | -33,91 | -33,91 | 41,02 | 41,02 | 20,89 | 20,89 |
| СО-(С,О) | 1 | -146,86 | -146,86 | 20 | 20 | 24,98 | 24,98 |
| ∑ | 7 |  | -495,7 |  | 427,49 |  | 154,24 |
| гош-поправка | 1 | 3,35 | 3,35 |  |  |  |  |
| поправка на симм. | σнар= | 1 | σвнутр= | 27 | -27,402 |  |  |
| попр. на смешение | N= | 0 |  |  | 0,000 |  |  |
|  |  | ΔHo | -492,35 | ΔSo | 400,088 | ΔСpo | 154,240 |

**Задание №2**

Для первого соединения рассчитать и



4-Метил-4-этилгептан

Энтальпия.



где -энтальпия образования вещества при 730К; -энтальпия образования вещества при 298К; -средняя теплоемкость.



;



Для расчета из таблицы Бенсона выпишем парциальные вклады соответственно для 298К, 400К, 500К, 600К, 800К и путем интерполяции найдем для 730К., и для элементов составляющих соединение.



Таблица 5

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | | Кол-во вкладов | | Сpi, 298K, | | Сpi, 400K, | | Сpi, 500K, | | Сpi, 600K, | | Сpi, 730K, | | Сpi, 800K, | |
| СН3-(С) | | 4 | | 25.910 | | 32.820 | | 39.950 | | 45.170 | | 51.235 | | 54.5 | |
| СН-(3С) | | 0 | | 19.000 | | 25.120 | | 30.010 | | 33.700 | | 37.126 | | 38.97 | |
| С-(4С) | | 1 | | 18.29 | | 25.66 | | 30.81 | | 33.99 | | 35.758 | | 36.71 | |
| СН2-(2С) | | 5 | | 23.02 | | 29.09 | | 34.53 | | 39.14 | | 43.820 | | 46.34 | |
| ∑ | | 10 | | 237.030 | | 302.390 | | 363.260 | | 410.370 | | 459.796 | |  | |
| С | | 10 | | 8.644 | | 11.929 | | 14.627 | | 16.862 | | 18.820 | | 19.874 | |
| Н2 | | 11 | | 28.836 | | 29.179 | | 29.259 | | 29.321 | | 29.511 | | 29.614 | |
| ∑ | |  | | 403.636 | | 440.259 | | 468.119 | | 491.151 | | 512.824 | |  | |



Энтропия.



Для расчета из таблицы Бенсона выпишем парциальные вклады соответственно для 298К, 400К, 500К, 600К, 800К и путем интерполяции найдем для 730К.



Таблица 5

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Кол-во вкладов | Сpi, 298K, | Сpi, 400K, | Сpi, 500K, | Сpi, 600K, | Сpi, 730K, | Сpi, 800K, |
| СН3-(С) | 4 | 25.910 | 32.820 | 39.950 | 45.170 | 51.235 | 54.5 |
| СН-(3С) | 0 | 19.000 | 25.120 | 30.010 | 33.700 | 37.126 | 38.97 |
| С-(4С) | 1 | 18.29 | 25.66 | 30.81 | 33.99 | 35.758 | 36.71 |
| СН2-(2С) | 5 | 23.02 | 29.09 | 34.53 | 39.14 | 43.820 | 46.34 |
| ∑ | 10 | 237.030 | 302.390 | 363.260 | 410.370 | 459.796 |  |



**Задание №3**

Для четырех соединений, приведенных в таблице, рекомендованными методами вычислить (жидкость-пар) температуру, критическое давление, критический объем, ацентрический фактор.

Метод Лидерсена.

Критическую температуру находим по формуле:



где -критическая температура; -температура кипения (берем из таблицы данных); -сумма парциальных вкладов в критическую температуру.



Критическое давление находится по формуле:



где -критическое давление; -молярная масса вещества; -сумма парциальных вкладов в критическое давление.



Критический объем находим по формуле:



где -критический объем; -сумма парциальных вкладов в критический объем.



Ацентрический фактор рассчитывается по формуле:

;



где -ацентрический фактор; -критическое давление, выраженное в физических атмосферах; -приведенная нормальная температура кипения вещества;



-нормальная температура кипения вещества в градусах Кельвина;



-критическая температура в градусах Кельвина.



Для расчета, выбираем парциальные вклады для каждого вещества из таблицы составляющих для определения критических свойств по методу Лидерсена.

4-Метил-4-этилгептан

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Группа | кол-во | ΔT | ΔP | ΔV |
| СН3-(С) | 4 | 0.08 | 0.908 | 220 |
| СН2-(2С) | 5 | 0.1 | 1.135 | 275 |
| С-(4С) | 1 | 0 | 0.21 | 41 |
| ∑ | 10 | 0.18 | 2.253 | 536 |

Критическая температура.



Критическое давление.

.



Критический объем.



Ацентрический фактор.

;



орто-Терфенил

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Группа | кол-во | ΔT | ΔP | ΔV |
| -CН=(цикл) | 14 | 0,154 | 2,156 | 518 |
| >C=(цикл) | 4 | 0,044 | 0,616 | 144 |
| Сумма | 18 | 0,198 | 2,772 | 662 |

Критическая температура.



Критическое давление.



Критический объем.



Ацентрический фактор.



.



Диизопропиловый эфир

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Группа | кол-во | ΔT | ΔP | ΔV |
| CН3 | 4 | 0,08 | 0,908 | 220 |
| CH | 2 | 0,024 | 0,42 | 102 |
| -O- (вне кольца) | 1 | 0,021 | 0,16 | 20 |
| Сумма | 7 | 0,125 | 1,488 | 342 |

Критическая температура.



Критическое давление.

;



Критический объем.



Ацентрический фактор.



Изобутилацетат

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Группа | кол-во | ΔT | ΔP | ΔV |
| CН3 | 3 | 0,06 | 0,681 | 165 |
| CH2 | 1 | 0,02 | 0,227 | 55 |
| CH | 1 | 0,012 | 0,21 | 51 |
| -CОО- | 1 | 0,047 | 0,47 | 80 |
| Сумма | 6 | 0,139 | 1,588 | 351 |

Критическая температура.



Критическое давление.



Критический объем.



Ацентрический фактор.



.



Метод Джобака.

Критическую температуру находим по уравнению;



где -критическая температура; -температура кипения (берем из таблицы данных);



-количество структурных фрагментов в молекуле; -парциальный вклад в свойство.



Критическое давление находим по формуле:



где -критическое давление в барах; -общее количество атомов в молекуле; -количество структурных фрагментов; -парциальный вклад в свойство.



Критический объем находим по формуле:



где -критический объем в ; -количество структурных фрагментов; -парциальный вклад в свойство.



Для расчета, выбираем парциальные вклады в различные свойства для каждого вещества из таблицы составляющих для определения критических свойств по методу Джобака.

4-Метил-4-этилгептан

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Группа | кол-во | ΔT | ΔP | ΔV |
| СН3- | 4 | 0.0564 | -0.0048 | 260 |
| -СН2- | 5 | 0.0945 | 0 | 280 |
| >С< | 1 | 0.0067 | 0.0043 | 27 |
| ∑ | 10 | 0.1576 | -0.0005 | 567 |

Критическая температура.



Критическое давление.

;



орто-Терфенил

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Группа | кол-во | ΔT | ΔP | ΔV |
| -CН=(цикл) | 14 | 0,1148 | 0,0154 | ,-CН=(цикл) |
| >C=(цикл) | 4 | 0,0572 | 0,0032 | >C=(цикл) |
| Сумма | 18 | 0,172 | 0,0186 | Сумма |

Критическая температура.



Критическое давление.

;



Диизопропиловый эфир

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Группа | кол-во | ΔT | ΔP |
| CН3 | 4 | 0,0564 | -0,0048 |
| CH2 | 2 | 0,0328 | 0,004 |
| O (2) | 1 | 0,0168 | 0,0015 |
| Сумма | 7 | 0,106 | 0,0007 |

Критическая температура.



Критическое давление.

;



Изобутилацетат

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Группа | кол-во | ΔT | ΔP | ΔV |
| CН3 | 3 | 0,0423 | -0,0036 | 195 |
| CH2 | 1 | 0,0168 | 0 | 56 |
| CH | 1 | 0,0164 | 0,002 | 41 |
| ,-CОО- | 1 | 0,0481 | 0,0005 | 82 |
| Сумма | 6 | 0,1236 | -0,0011 | 374 |

Критическая температура.



Критическое давление.

;



**Задание №4**

Для первого соединения рассчитать , и . Определить фазовое состояние компонента.



Энтальпия

4-Метил-4-этилгептан

Для расчета , и воспользуемся таблицами Ли-Кеслера и разложением Питцера.



где - энтальпия образования вещества в стандартном состоянии; -энтальпия образования вещества в заданных условиях; и -изотермические изменения энтальпии.



Находим приведенные температуру и давление:



по этим значениям с помощью таблицы Ли-Кеслера и разложения Питцера интерполяцией находим изотермическое изменение энтальпии.



Из правой части выражаем:



Энтропия



где энтропия вещества в стандартном состоянии; - энтропия вещества в заданных условиях; - ацентрический фактор.



; R=8,314Дж/моль\*К



Находим приведенные температуру и давление:



по этим значениям с помощью таблицы Ли-Кесслера и разложения Питцера интерполяцией находим изотермическое изменение энтропии.



Из правой части выражаем:



Теплоемкость.



где - теплоемкость соединения при стандартных условиях; - теплоемкость соединения при заданных условиях; - ацентрический фактор.



; R=8,314Дж/моль\*К



Находим приведенные температуру и давление:



по этим значениям с помощью таблицы Ли-Кесслера и разложения Питцера интерполяцией находим изотермическое изменение теплоемкости.



Дж/моль\*К



Из правой части выражаем:



**Задание №5**

Для первого соединения рассчитать плотность вещества при температуре 730 К и давлении 100 бар. Определить фазовое состояние компонента.

Для определения плотности вещества воспользуемся методом прогнозирования плотности индивидуальных веществ с использованием коэффициента сжимаемости.



где -плотность вещества; М- молярная масса; V-объем.



Для данного вещества найдем коэффициент сжимаемости с использованием таблицы Ли-Кесслера по приведенным температуре и давлении.

Коэффициент сжимаемости находится по разложению Питцера:



где Z-коэффициент сжимаемости; -ацентрический фактор.



Приведенную температуру найдем по формуле



где -приведенная температура в К ; Т-температура вещества в К; -критическая температура в К.



Приведенное давление найдем по формуле ; где - приведенное; Р и давление и критическое давление в атм. соответственно.



Критические температуру и давление а так же ацентрический фактор возьмем экспериментальные.

; R=8,314Дж/моль\*К



Находим приведенные температуру и давление:



Коэффициент сжимаемости найдем из разложения Питцера:

путем интерполяции находим и.



=0,6790;



=0,0069;



Из уравнения Менделеева-Клайперона ,



где P-давление; V-объем; Z- коэффициент сжимаемости; R-универсальная газовая постоянная (R=82.04); T-температура;

выразим объем:



М=142,29 г/моль.



**Задание №6**

Для четырех соединений, приведенных в таблице, рекомендованными методами вычислить плотность насыщенной жидкости. Привести графические зависимости «плотность-температура» для области существования жидкой и паровой фаз. Выполнить анализ.

Для вычисления плотности насыщенной жидкости воспользуемся методом Ганна-Ямады.



где -плотность насыщенной жидкости; М -молярная масса вещества; -молярный объем насыщенной жидкости.



где - масштабирующий параметр; - ацентрический фактор; и Г – функции приведенной температуры.



4-Метил-4-этилгептан

в промежутке температур от 298 до 475 К вычислим по формуле:



В промежутке температур от 475 до 588 К вычислим по формуле:



В промежутке температур от 298 до 480 К вычислим Г по формуле:



Находим масштабирующий параметр:

Полученные результаты сведем в таблицу:

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| T, К | Tr | Vr(0) | Vsc | Г | Vs | ρs ,г/см3 |
| 182,17884 | 0,3 | 0,3252 | 315,9798 | 0,2646 | 91,3058 | 1,5584 |
| 212,54198 | 0,35 | 0,3331 | 315,9798 | 0,2585 | 105,2578 | 1,3518 |
| 242,90512 | 0,4 | 0,3421 | 315,9798 | 0,2521 | 108,1093 | 1,3161 |
| 273,26826 | 0,45 | 0,3520 | 315,9798 | 0,2456 | 111,2163 | 1,2794 |
| 303,6314 | 0,5 | 0,3625 | 315,9798 | 0,2387 | 114,5478 | 1,2422 |
| 333,99454 | 0,55 | 0,3738 | 315,9798 | 0,2317 | 118,1255 | 1,2045 |
| 364,35768 | 0,6 | 0,3862 | 315,9798 | 0,2244 | 122,0240 | 1,1661 |
| 394,72082 | 0,65 | 0,3999 | 315,9798 | 0,2168 | 126,3707 | 1,1259 |
| 425,08396 | 0,7 | 0,4157 | 315,9798 | 0,2090 | 131,3458 | 1,0833 |
| 455,4471 | 0,75 | 0,4341 | 315,9798 | 0,2010 | 137,1824 | 1,0372 |
| 485,81024 | 0,8 | 0,4563 | 315,9798 | 0,1927 | 144,1662 | 0,9870 |
| 516,17338 | 0,85 | 0,4883 | 315,9798 | 0,1842 | 154,2798 | 0,9223 |
| 546,53652 | 0,9 | 0,5289 | 315,9798 | 0,1754 | 167,1127 | 0,8514 |
| 564,75441 | 0,93 | 0,5627 | 315,9798 | 0,1701 | 177,7935 | 0,8003 |
| 576,89966 | 0,95 | 0,5941 | 315,9798 | 0,1664 | 187,7164 | 0,7580 |
| 589,04492 | 0,97 | 0,6410 | 315,9798 | 0,1628 | 202,5465 | 0,7025 |
| 595,11755 | 0,98 | 0,6771 | 315,9798 | 0,1609 | 213,9519 | 0,6650 |
| 601,19018 | 0,99 | 0,7348 | 315,9798 | 0,1591 | 232,1885 | 0,6128 |

орто-Терфенил

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| T, К | Tr | Vr(0) | Vsc | Г | Vs | ρs ,г/см3 |
| 252,2196 | 0,3 | 0,3252 | 506,8885 | 0,2646 | 140,1488 | 0,9289 |
| 294,2562 | 0,35 | 0,3331 | 506,8885 | 0,2585 | 144,1580 | 0,9031 |
| 336,2928 | 0,4 | 0,3421 | 506,8885 | 0,2521 | 148,6853 | 0,8756 |
| 378,3294 | 0,45 | 0,3520 | 506,8885 | 0,2456 | 153,6228 | 0,8475 |
| 420,366 | 0,5 | 0,3625 | 506,8885 | 0,2387 | 158,9338 | 0,8191 |
| 462,4026 | 0,55 | 0,3738 | 506,8885 | 0,2317 | 164,6553 | 0,7907 |
| 504,4392 | 0,6 | 0,3862 | 506,8885 | 0,2244 | 170,8986 | 0,7618 |
| 546,4758 | 0,65 | 0,3999 | 506,8885 | 0,2168 | 177,8522 | 0,7320 |
| 588,5124 | 0,7 | 0,4157 | 506,8885 | 0,2090 | 185,7829 | 0,7008 |
| 630,549 | 0,75 | 0,4341 | 506,8885 | 0,2010 | 195,0387 | 0,6675 |
| 672,5856 | 0,8 | 0,4563 | 506,8885 | 0,1927 | 206,0507 | 0,6318 |
| 714,6222 | 0,85 | 0,4883 | 506,8885 | 0,1842 | 221,6982 | 0,5872 |
| 756,6588 | 0,9 | 0,5289 | 506,8885 | 0,1754 | 241,4676 | 0,5392 |
| 781,88076 | 0,93 | 0,5627 | 506,8885 | 0,1701 | 257,7676 | 0,5051 |
| 798,6954 | 0,95 | 0,5941 | 506,8885 | 0,1664 | 272,7723 | 0,4773 |
| 815,51004 | 0,97 | 0,6410 | 506,8885 | 0,1628 | 294,9965 | 0,4413 |
| 823,91736 | 0,98 | 0,6771 | 506,8885 | 0,1609 | 311,9667 | 0,4173 |

Диизопропиловый эфир

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| T, К | Tr | Vr(0) | Vsc | Г | Vs | ρs ,г/см3 |
| 151,46923 | 0,3 | 0,3252 | 352,7018 | 0,2646 | 104,7597 | 0,9754 |
| 176,7141 | 0,35 | 0,3331 | 352,7018 | 0,2585 | 107,5555 | 0,9500 |
| 201,95897 | 0,4 | 0,3421 | 352,7018 | 0,2521 | 110,7195 | 0,9229 |
| 227,20384 | 0,45 | 0,3520 | 352,7018 | 0,2456 | 114,1688 | 0,8950 |
| 252,44872 | 0,5 | 0,3625 | 352,7018 | 0,2387 | 117,8740 | 0,8668 |
| 277,69359 | 0,55 | 0,3738 | 352,7018 | 0,2317 | 121,8604 | 0,8385 |
| 302,93846 | 0,6 | 0,3862 | 352,7018 | 0,2244 | 126,2077 | 0,8096 |
| 328,18333 | 0,65 | 0,3999 | 352,7018 | 0,2168 | 131,0518 | 0,7797 |
| 353,4282 | 0,7 | 0,4157 | 352,7018 | 0,2090 | 136,5848 | 0,7481 |
| 378,67307 | 0,75 | 0,4341 | 352,7018 | 0,2010 | 143,0566 | 0,7142 |
| 403,91794 | 0,8 | 0,4563 | 352,7018 | 0,1927 | 150,7751 | 0,6777 |
| 429,16282 | 0,85 | 0,4883 | 352,7018 | 0,1842 | 161,8321 | 0,6314 |
| 454,40769 | 0,9 | 0,5289 | 352,7018 | 0,1754 | 175,8278 | 0,5811 |
| 469,55461 | 0,93 | 0,5627 | 352,7018 | 0,1701 | 187,4144 | 0,5452 |
| 479,65256 | 0,95 | 0,5941 | 352,7018 | 0,1664 | 198,1230 | 0,5157 |
| 489,75051 | 0,97 | 0,6410 | 352,7018 | 0,1628 | 214,0466 | 0,4774 |
| 494,79948 | 0,98 | 0,6771 | 352,7018 | 0,1609 | 226,2439 | 0,4516 |
| 499,84846 | 0,99 | 0,7348 | 352,7018 | 0,1591 | 245,6858 | 0,4159 |

Изобутилацетат

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| T, К | Tr | Vr(0) | Vsc | Г | Vs | ρs ,г/см3 |
| 174,411 | 0,3 | 0,3252 | 323,4672 | 0,2646 | 92,6821 | 1,0918 |
| 203,4795 | 0,35 | 0,3331 | 323,4672 | 0,2585 | 95,2433 | 1,0625 |
| 232,548 | 0,4 | 0,3421 | 323,4672 | 0,2521 | 98,1385 | 1,0311 |
| 261,6165 | 0,45 | 0,3520 | 323,4672 | 0,2456 | 101,2955 | 0,9990 |
| 290,685 | 0,5 | 0,3625 | 323,4672 | 0,2387 | 104,6891 | 0,9666 |
| 319,7535 | 0,55 | 0,3738 | 323,4672 | 0,2317 | 108,3425 | 0,9340 |
| 348,822 | 0,6 | 0,3862 | 323,4672 | 0,2244 | 112,3281 | 0,9009 |
| 377,8905 | 0,65 | 0,3999 | 323,4672 | 0,2168 | 116,7680 | 0,8666 |
| 406,959 | 0,7 | 0,4157 | 323,4672 | 0,2090 | 121,8355 | 0,8306 |
| 436,0275 | 0,75 | 0,4341 | 323,4672 | 0,2010 | 127,7561 | 0,7921 |
| 465,096 | 0,8 | 0,4563 | 323,4672 | 0,1927 | 134,8086 | 0,7506 |
| 494,1645 | 0,85 | 0,4883 | 323,4672 | 0,1842 | 144,8697 | 0,6985 |
| 523,233 | 0,9 | 0,5289 | 323,4672 | 0,1754 | 157,5930 | 0,6421 |
| 540,6741 | 0,93 | 0,5627 | 323,4672 | 0,1701 | 168,1044 | 0,6020 |
| 552,3015 | 0,95 | 0,5941 | 323,4672 | 0,1664 | 177,7998 | 0,5691 |
| 563,9289 | 0,97 | 0,6410 | 323,4672 | 0,1628 | 192,1881 | 0,5265 |
| 569,7426 | 0,98 | 0,6771 | 323,4672 | 0,1609 | 203,1920 | 0,4980 |
| 575,5563 | 0,99 | 0,7348 | 323,4672 | 0,1591 | 220,7098 | 0,4585 |

**Задание №7**

Для четырех соединений, приведенных в таблице, рекомендованными методами вычислить давление насыщенного пара. Привести графические P-T зависимости для области существования жидкой и паровой фаз. Выполнить анализ.

Для вычисления давления насыщенного пара воспользуемся корреляциями

Ли-Кесслера, Риделя и Амброуза-Уолтона.

4-Метил-4-этилгептан

Корреляция Ли-Кеслера.

Она основана на использовании принципа соответственных состояний.



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | f(0) | f(1) | Pvp,r | Pvp, bar |
| 298 | 0,49 | -5,4958 | -6,9119 | 0,0002 | 0,0047 |
| 323 | 0,53 | -4,6311 | -5,5050 | 0,0010 | 0,0203 |
| 348 | 0,57 | -3,8968 | -4,3726 | 0,0032 | 0,0682 |
| 373 | 0,61 | -3,2662 | -3,4545 | 0,0089 | 0,1887 |
| 398 | 0,66 | -2,7193 | -2,7063 | 0,0211 | 0,4466 |
| 423 | 0,70 | -2,2411 | -2,0944 | 0,0440 | 0,9321 |
| 448 | 0,74 | -1,8197 | -1,5933 | 0,0829 | 1,7542 |
| 473 | 0,78 | -1,4460 | -1,1830 | 0,1432 | 3,0296 |
| 498 | 0,82 | -1,1124 | -0,8479 | 0,2301 | 4,8694 |
| 523 | 0,86 | -0,8132 | -0,5754 | 0,3481 | 7,3657 |

Корреляция Риделя



где приведенная температура кипения.



|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | Pvp,r | Pvp, bar |
| 298 | 0,49 | 0,0002 | 0,0040 |
| 323 | 0,53 | 0,0008 | 0,0169 |
| 348 | 0,57 | 0,0026 | 0,0559 |
| 373 | 0,61 | 0,0072 | 0,1529 |
| 398 | 0,66 | 0,0170 | 0,3596 |
| 423 | 0,70 | 0,0354 | 0,7489 |
| 448 | 0,74 | 0,0668 | 1,4132 |
| 473 | 0,78 | 0,1163 | 2,4620 |
| 498 | 0,82 | 0,1900 | 4,0200 |
| 523 | 0,86 | 0,2944 | 6,2295 |

Метод Амброуза-Уолтона.



где



|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | τ | f(0) | f(1) | f(2) | Pvp,r | Pvp, bar |
| 298 | 0,49 | 0,51 | -5,5425 | -6,9606 | -0,2667 | 0,0002 | 0,0042 |
| 323 | 0,53 | 0,47 | -4,6928 | -5,5995 | -0,1817 | 0,0008 | 0,0178 |
| 348 | 0,57 | 0,43 | -3,9720 | -4,5169 | -0,1136 | 0,0028 | 0,0584 |
| 373 | 0,61 | 0,39 | -3,3525 | -3,6447 | -0,0619 | 0,0075 | 0,1580 |
| 398 | 0,66 | 0,34 | -2,8135 | -2,9335 | -0,0251 | 0,0174 | 0,3678 |
| 423 | 0,70 | 0,30 | -2,3396 | -2,3468 | -0,0014 | 0,0359 | 0,7594 |
| 448 | 0,74 | 0,26 | -1,9187 | -1,8574 | 0,0111 | 0,0673 | 1,4245 |
| 473 | 0,78 | 0,22 | -1,5416 | -1,4448 | 0,0147 | 0,1168 | 2,4726 |
| 498 | 0,82 | 0,18 | -1,2007 | -1,0930 | 0,0119 | 0,1904 | 4,0297 |
| 523 | 0,86 | 0,14 | -0,8900 | -0,7896 | 0,0052 | 0,2948 | 6,2393 |

орто-Терфенил

Корреляция Ли-Кеслера

Корреляция Ли-Кеслера.

Она основана на использовании принципа соответственных состояний.



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | f(0) | f(1) | Pvp,r | Pvp, bar |
| 298 | 0.50 | -5.2241 | -6.4620 | 0.0003 | 0.0097 |
| 323 | 0.55 | -4.3825 | -5.1146 | 0.0013 | 0.0410 |
| 348 | 0.59 | -3.6680 | -4.0332 | 0.0042 | 0.1358 |
| 373 | 0.63 | -3.0545 | -3.1592 | 0.0115 | 0.3706 |
| 398 | 0.67 | -2.5226 | -2.4494 | 0.0268 | 0.8665 |
| 423 | 0.71 | -2.0575 | -1.8714 | 0.0553 | 1.7865 |
| 448 | 0.76 | -1.6478 | -1.4003 | 0.1029 | 3.3223 |
| 473 | 0.80 | -1.2845 | -1.0169 | 0.1757 | 5.6717 |
| 498 | 0.84 | -0.9603 | -0.7058 | 0.2792 | 9.0138 |
| 523 | 0.88 | -0.6696 | -0.4551 | 0.4177 | 13.4859 |
| 548 | 0.92 | -0.4075 | -0.2549 | 0.5936 | 19.1676 |
| 573 | 0.97 | -0.1702 | -0.0975 | 0.8075 | 26.0730 |

Корреляция Риделя.



где приведенная температура кипения.



|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| А | В | С | D | θ | αc | ψ |
| 12.5614 | 12.9203 | -7.0329 | 0.3589 | -0.3589 | 8.0408 | 1.3202 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | Pvp,r | Pvp, bar |
| 298 | 0.50 | 0.0003 | 0.0081 |
| 323 | 0.55 | 0.0010 | 0.0337 |
| 348 | 0.59 | 0.0034 | 0.1102 |
| 373 | 0.63 | 0.0092 | 0.2978 |
| 398 | 0.67 | 0.0214 | 0.6924 |
| 423 | 0.71 | 0.0442 | 1.4266 |
| 448 | 0.76 | 0.0826 | 2.6671 |
| 473 | 0.80 | 0.1428 | 4.6095 |
| 498 | 0.84 | 0.2316 | 7.4786 |
| 523 | 0.88 | 0.3573 | 11.5377 |
| 548 | 0.92 | 0.5300 | 17.1141 |
| 573 | 0.97 | 0.7633 | 24.6459 |

Корреляция Амброуза-Уолтона.



где



|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | τ | f(0) | f(1) | f(2) | Pvp,r | Pvp, bar |
| 298 | 0.50 | 0.50 | -5.2753 | -6.5233 | -0.2398 | 0.0003 | 0.0085 |
| 323 | 0.55 | 0.45 | -4.4488 | -5.2252 | -0.1580 | 0.0011 | 0.0354 |
| 348 | 0.59 | 0.41 | -3.7474 | -4.1942 | -0.0939 | 0.0035 | 0.1145 |
| 373 | 0.63 | 0.37 | -3.1441 | -3.3643 | -0.0466 | 0.0095 | 0.3063 |
| 398 | 0.67 | 0.33 | -2.6189 | -2.6881 | -0.0143 | 0.0218 | 0.7053 |
| 423 | 0.71 | 0.29 | -2.1567 | -2.1304 | 0.0051 | 0.0447 | 1.4425 |
| 448 | 0.76 | 0.24 | -1.7458 | -1.6652 | 0.0137 | 0.0831 | 2.6832 |
| 473 | 0.80 | 0.20 | -1.3771 | -1.2726 | 0.0141 | 0.1432 | 4.6243 |
| 498 | 0.84 | 0.16 | -1.0434 | -0.9374 | 0.0089 | 0.2321 | 7.4925 |
| 523 | 0.88 | 0.12 | -0.7387 | -0.6476 | 0.0012 | 0.3577 | 11.5502 |
| 548 | 0.92 | 0.08 | -0.4577 | -0.3933 | -0.0060 | 0.5300 | 17.1138 |
| 573 | 0.97 | 0.03 | -0.1958 | -0.1658 | -0.0080 | 0.7622 | 24.6097 |

Диизопропиловый эфир

Корреляция Ли-Кесслера.

Корреляция Ли-Кесслера.

Она основана на использовании принципа соответственных состояний.



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | f(0) | f(1) | Pvp,r | Pvp, bar |
| 298 | 0,60 | -3,5340 | -3,8378 | 0,0083 | 0,2362 |
| 323 | 0,65 | -2,8377 | -2,8640 | 0,0229 | 0,6517 |
| 348 | 0,70 | -2,2473 | -2,1021 | 0,0531 | 1,5090 |
| 373 | 0,75 | -1,7411 | -1,5042 | 0,1072 | 3,0439 |
| 398 | 0,80 | -1,3029 | -1,0355 | 0,1937 | 5,4997 |
| 423 | 0,85 | -0,9203 | -0,6697 | 0,3200 | 9,0883 |
| 448 | 0,90 | -0,5837 | -0,3867 | 0,4915 | 13,9596 |

Корреляция Риделя



где приведенная температура кипения.



|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| А | В | С | D | θ | αc | ψ |
| 10,7151 | 11,0212 | -5,4468 | 0,3061 | -0,3061 | 7,4113 | 1,7068 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | Pvp,r | Pvp, bar |
| 298 | 0,60 | 0,0071 | 0,2023 |
| 323 | 0,65 | 0,0194 | 0,5505 |
| 348 | 0,70 | 0,0445 | 1,2651 |
| 373 | 0,75 | 0,0898 | 2,5512 |
| 398 | 0,80 | 0,1636 | 4,6474 |
| 423 | 0,85 | 0,2755 | 7,8237 |
| 448 | 0,90 | 0,4366 | 12,3981 |

Корреляция Амброуза-Уолтона.



где



|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | τ | f(0) | f(1) | f(2) | Pvp,r | Pvp, bar |
| 298 | 0,60 | 0,40 | -3,6158 | -4,0085 | -0,0829 | 0,0072 | 0,2040 |
| 323 | 0,65 | 0,35 | -2,9303 | -3,0837 | -0,0322 | 0,0194 | 0,5509 |
| 348 | 0,70 | 0,30 | -2,3457 | -2,3542 | -0,0017 | 0,0443 | 1,2591 |
| 373 | 0,75 | 0,25 | -1,8398 | -1,7690 | 0,0124 | 0,0892 | 2,5326 |
| 398 | 0,80 | 0,20 | -1,3960 | -1,2921 | 0,0142 | 0,1625 | 4,6147 |
| 423 | 0,85 | 0,15 | -1,0018 | -0,8969 | 0,0080 | 0,2741 | 7,7833 |
| 448 | 0,90 | 0,10 | -0,6474 | -0,5637 | -0,0013 | 0,4352 | 12,3595 |

Изобутилацетат

Корреляция Ли-Кеслера.

Корреляция Ли-Кеслера.

Она основана на использовании принципа соответственных состояний.



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | f(0) | f(1) | Pvp,r | Pvp, bar |
| 298 | 0,53 | -4,6446 | -5,5264 | 0,0008 | 0,0251 |
| 323 | 0,58 | -3,8526 | -4,3065 | 0,0031 | 0,0957 |
| 348 | 0,62 | -3,1804 | -3,3340 | 0,0093 | 0,2900 |
| 373 | 0,66 | -2,6036 | -2,5543 | 0,0235 | 0,7329 |
| 398 | 0,71 | -2,1037 | -1,9268 | 0,0514 | 1,6016 |
| 423 | 0,75 | -1,6667 | -1,4212 | 0,0998 | 3,1111 |
| 448 | 0,80 | -1,2820 | -1,0143 | 0,1760 | 5,4874 |
| 473 | 0,84 | -0,9409 | -0,6882 | 0,2865 | 8,9352 |
| 498 | 0,89 | -0,6368 | -0,4286 | 0,4364 | 13,6092 |
| 523 | 0,93 | -0,3640 | -0,2243 | 0,6283 | 19,5936 |

Корреляция Риделя



где приведенная температура кипения.



|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| А | В | С | D | θ | αc | ψ |
| 12,5892 | 12,9488 | -7,0567 | 0,3597 | -0,3597 | 8,0502 | 1,4097 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | Pvp,r | Pvp, bar |
| 298 | 0,53 | 0,0007 | 0,0207 |
| 323 | 0,58 | 0,0025 | 0,0779 |
| 348 | 0,62 | 0,0075 | 0,2334 |
| 373 | 0,66 | 0,0188 | 0,5857 |
| 398 | 0,71 | 0,0410 | 1,2781 |
| 423 | 0,75 | 0,0800 | 2,4953 |
| 448 | 0,80 | 0,1429 | 4,4581 |
| 473 | 0,84 | 0,2380 | 7,4223 |
| 498 | 0,89 | 0,3749 | 11,6909 |
| 523 | 0,93 | 0,5658 | 17,6469 |

Корреляция Амброуза-Уолтона.



где



|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | τ | f(0) | f(1) | f(2) | Pvp,r | Pvp, bar |
| 298 | 0,53 | 0,47 | -4,7061 | -5,6201 | -0,1830 | 0,0007 | 0,0218 |
| 323 | 0,58 | 0,42 | -3,9286 | -4,4540 | -0,1098 | 0,0026 | 0,0812 |
| 348 | 0,62 | 0,38 | -3,2681 | -3,5304 | -0,0555 | 0,0077 | 0,2406 |
| 373 | 0,66 | 0,34 | -2,6990 | -2,7884 | -0,0185 | 0,0192 | 0,5975 |
| 398 | 0,71 | 0,29 | -2,2027 | -2,1843 | 0,0036 | 0,0415 | 1,2931 |
| 423 | 0,75 | 0,25 | -1,7648 | -1,6861 | 0,0135 | 0,0805 | 2,5108 |
| 448 | 0,80 | 0,20 | -1,3746 | -1,2699 | 0,0140 | 0,1434 | 4,4723 |
| 473 | 0,84 | 0,16 | -1,0232 | -0,9177 | 0,0085 | 0,2384 | 7,4357 |
| 498 | 0,89 | 0,11 | -0,7039 | -0,6154 | 0,0002 | 0,3752 | 11,7022 |
| 523 | 0,93 | 0,07 | -0,4104 | -0,3516 | -0,0069 | 0,5657 | 17,6419 |

**Задание №8**

Для четырех соединений, приведенных в таблице, рекомендованными методами вычислить и



4-Метил-4-этилгептан

Уравнение Ли-Кесслера.

;



для стандартных условий



приведенную температуру найдем как , в интервале от 298К до .



приведенное давление возьмем из задания №7 ацентрический фактор возьмем из задания №3.



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | ΔvZ | Ψ | ΔvH0T | ΔvHT |
| 298 | 0,49 | 0,9991 | 9,2982 | 46944,54 | 46900,06 |
| 323 | 0,53 | 0,9968 | 9,0227 | 45553,79 | 45408,12 |
| 348 | 0,57 | 0,9914 | 8,7537 | 44195,75 | 43815,44 |
| 373 | 0,61 | 0,9806 | 8,4941 | 42885,12 | 42052,03 |
| 398 | 0,66 | 0,9618 | 8,2478 | 41641,49 | 40050,16 |
| 423 | 0,70 | 0,9326 | 8,0198 | 40490,44 | 37759,91 |
| 448 | 0,74 | 0,8908 | 7,8167 | 39464,86 | 35155,98 |
| 473 | 0,78 | 0,8349 | 7,6467 | 38606,36 | 32232,36 |
| 498 | 0,82 | 0,7634 | 7,5200 | 37966,95 | 28984,18 |
| 523 | 0,86 | 0,6746 | 7,4495 | 37610,84 | 25373,93 |

Корреляция Риделя.

;



для стандартных условий ,



R=8.314, -возьмем из задания №3, -Возьмем из задания №7, , в интервале от 298К до .



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | ΔvZ | Ψ | ΔvH0T | ΔvHT |
| 298 | 0,49 | 0,9992 | 9,2533 | 46717,76 | 46680,34 |
| 323 | 0,53 | 0,9973 | 8,9880 | 45378,40 | 45257,92 |
| 348 | 0,57 | 0,9930 | 8,7291 | 44071,31 | 43761,00 |
| 373 | 0,61 | 0,9843 | 8,4795 | 42811,00 | 42138,26 |
| 398 | 0,66 | 0,9693 | 8,2429 | 41616,80 | 40341,19 |
| 423 | 0,70 | 0,9462 | 8,0245 | 40513,97 | 38334,36 |
| 448 | 0,74 | 0,9131 | 7,8306 | 39534,93 | 36097,76 |
| 473 | 0,78 | 0,8682 | 7,6693 | 38720,76 | 33618,07 |
| 498 | 0,82 | 0,8097 | 7,5509 | 38122,77 | 30866,91 |
| 523 | 0,86 | 0,7343 | 7,4878 | 37804,33 | 27759,68 |

Корреляция Амброуза-Уолтона.

;



для стандартных условий ;



приведенную температуру найдем как , в интервале от 298К до .



приведенное давление возьмем из задания №7 ; ацентрический фактор возьмем из задания №3.



|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | τ | ΔvZ | Ψ | ΔvH0T | ΔvHT |
| 298 | 0,49 | 0,51 | 0,9992 | 9,2773 | 46839,05 | 46799,47 |
| 323 | 0,53 | 0,47 | 0,9972 | 8,9477 | 45174,80 | 45048,45 |
| 348 | 0,57 | 0,43 | 0,9926 | 8,6480 | 43661,70 | 43340,51 |
| 373 | 0,61 | 0,39 | 0,9838 | 8,3794 | 42305,85 | 41618,64 |
| 398 | 0,66 | 0,34 | 0,9686 | 8,1427 | 41110,73 | 39821,48 |
| 423 | 0,70 | 0,30 | 0,9454 | 7,9383 | 40078,95 | 37891,46 |
| 448 | 0,74 | 0,26 | 0,9123 | 7,7671 | 39214,21 | 35776,39 |
| 473 | 0,78 | 0,22 | 0,8676 | 7,6304 | 38524,08 | 33423,89 |
| 498 | 0,82 | 0,18 | 0,8092 | 7,5313 | 38024,00 | 30767,28 |
| 523 | 0,86 | 0,14 | 0,7338 | 7,4759 | 37744,37 | 27696,96 |

орто-Терфенил

Уравнение Ли-Кеслера.

;



для стандартных условий



приведенную температуру найдем как , в интервале от 298К до .



приведенное давление возьмем из задания №7 ацентрический фактор возьмем из задания №3.



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | ΔvZ | Ψ | ΔvH0T | ΔvHT |
| 298 | 0.50 | 0.9988 | 9.4515 | 46561.42 | 46506.60 |
| 323 | 0.55 | 0.9961 | 9.1565 | 45107.75 | 44930.74 |
| 348 | 0.59 | 0.9896 | 8.8693 | 43693.21 | 43237.40 |
| 373 | 0.63 | 0.9767 | 8.5937 | 42335.40 | 41349.85 |
| 398 | 0.67 | 0.9547 | 8.3343 | 41057.75 | 39197.60 |
| 423 | 0.71 | 0.9208 | 8.0975 | 39890.88 | 36732.41 |
| 448 | 0.76 | 0.8729 | 7.8911 | 38874.12 | 33932.74 |
| 473 | 0.80 | 0.8091 | 7.7253 | 38057.26 | 30792.93 |
| 498 | 0.84 | 0.7278 | 7.6127 | 37502.54 | 27296.21 |
| 523 | 0.88 | 0.6266 | 7.5689 | 37286.78 | 23363.26 |
| 548 | 0.92 | 0.4995 | 7.6129 | 37503.88 | 18735.06 |
| 573 | 0.97 | 0.3272 | 7.7680 | 38267.49 | 12521.10 |

Корреляция Риделя.

;



для стандартных условий ,



R=8.314, -возьмем из задания №3., -Возьмем из задания №7., , в интервале от 298К до .



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | ΔvZ | Ψ | ΔvH0T | ΔvHT |
| 298 | 0.50 | 0.9990 | 9.4008 | 46311.49 | 46265.74 |
| 323 | 0.55 | 0.9968 | 9.1174 | 44915.10 | 44770.00 |
| 348 | 0.59 | 0.9915 | 8.8417 | 43557.26 | 43188.77 |
| 373 | 0.63 | 0.9813 | 8.5774 | 42255.33 | 41466.73 |
| 398 | 0.67 | 0.9640 | 8.3292 | 41032.38 | 39554.02 |
| 423 | 0.71 | 0.9373 | 8.1031 | 39918.59 | 37416.14 |
| 448 | 0.76 | 0.8994 | 7.9070 | 38952.72 | 35033.23 |
| 473 | 0.80 | 0.8481 | 7.7510 | 38183.82 | 32385.38 |
| 498 | 0.84 | 0.7809 | 7.6473 | 37673.21 | 29420.18 |
| 523 | 0.88 | 0.6931 | 7.6115 | 37496.60 | 25987.88 |
| 548 | 0.92 | 0.5744 | 7.6622 | 37746.51 | 21682.11 |
| 573 | 0.97 | 0.3949 | 7.8222 | 38534.92 | 15216.95 |

Корреляция Амброуза-Уолтона.

;



для стандартных условий ;



приведенную температуру найдем как , в интервале от 298К до .



приведенное давление возьмем из задания №7 ; ацентрический фактор возьмем из задания №3.



|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | τ | ΔvZ | Ψ | ΔvH0T | ΔvHT |
| 298 | 0.50 | 0.50 | 0.9990 | 9.4197 | 46404.69 | 46356.55 |
| 323 | 0.55 | 0.45 | 0.9966 | 9.0737 | 44699.82 | 44548.48 |
| 348 | 0.59 | 0.41 | 0.9912 | 8.7604 | 43156.64 | 42777.19 |
| 373 | 0.63 | 0.37 | 0.9808 | 8.4812 | 41781.02 | 40978.86 |
| 398 | 0.67 | 0.33 | 0.9633 | 8.2367 | 40576.57 | 39086.81 |
| 423 | 0.71 | 0.29 | 0.9366 | 8.0276 | 39546.73 | 37039.19 |
| 448 | 0.76 | 0.24 | 0.8987 | 7.8552 | 38697.38 | 34778.80 |
| 473 | 0.80 | 0.20 | 0.8476 | 7.7219 | 38040.38 | 32243.60 |
| 498 | 0.84 | 0.16 | 0.7805 | 7.6324 | 37599.50 | 29345.12 |
| 523 | 0.88 | 0.12 | 0.6927 | 7.5963 | 37421.70 | 25920.83 |
| 548 | 0.92 | 0.08 | 0.5744 | 7.6337 | 37606.26 | 21601.84 |
| 573 | 0.97 | 0.03 | 0.3965 | 7.7993 | 38422.07 | 15232.55 |

Диизопропиловый эфир

Уравнение Ли-Кесслера.

; для стандартных условий



приведенную температуру найдем как , в интервале от 298К до .



приведенное давление возьмем из задания №7 ацентрический фактор возьмем из задания №3.



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | ΔvZ | Ψ | ΔvH0T | ΔvHT |
| 298 | 0,60 | 0,9802 | 7,8837 | 32772,72 | 32122,59 |
| 323 | 0,65 | 0,9565 | 7,6368 | 31746,26 | 30365,17 |
| 348 | 0,70 | 0,9178 | 7,4122 | 30812,62 | 28280,70 |
| 373 | 0,75 | 0,8613 | 7,2200 | 30013,54 | 25850,58 |
| 398 | 0,80 | 0,7849 | 7,0735 | 29404,60 | 23079,27 |
| 423 | 0,85 | 0,6867 | 6,9902 | 29058,44 | 19953,05 |
| 448 | 0,90 | 0,5627 | 6,9926 | 29068,33 | 16357,76 |

Корреляция Риделя.

;



для стандартных условий ,



R=8.314, -возьмем из задания №3., -Возьмем из задания №7., , в интервале от 298К до .



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | ΔvZ | Ψ | ΔvH0T | ΔvHT |
| 298 | 0,60 | 0,9830 | 7,8240 | 32524,29 | 31972,43 |
| 323 | 0,65 | 0,9634 | 7,5888 | 31546,69 | 30391,46 |
| 348 | 0,70 | 0,9316 | 7,3756 | 30660,20 | 28563,05 |
| 373 | 0,75 | 0,8852 | 7,1941 | 29905,78 | 26473,38 |
| 398 | 0,80 | 0,8219 | 7,0575 | 29337,99 | 24113,35 |
| 423 | 0,85 | 0,7383 | 6,9829 | 29028,11 | 21430,30 |
| 448 | 0,90 | 0,6270 | 6,9925 | 29067,70 | 18224,91 |

Корреляция Амброуза-Уолтона.

;



для стандартных условий ;



приведенную температуру найдем как , в интервале от 298К до .



приведенное давление возьмем из задания №7 ; ацентрический фактор возьмем из задания №3.



|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | τ | ΔvZ | Ψ | ΔvH0T | ΔvHT |
| 298 | 0,60 | 0,40 | 0,9829 | 7,7687 | 32294,45 | 31741,87 |
| 323 | 0,65 | 0,35 | 0,9634 | 7,5315 | 31308,54 | 30161,12 |
| 348 | 0,70 | 0,30 | 0,9319 | 7,3360 | 30495,58 | 28419,99 |
| 373 | 0,75 | 0,25 | 0,8861 | 7,1827 | 29858,53 | 26458,10 |
| 398 | 0,80 | 0,20 | 0,8233 | 7,0739 | 29406,15 | 24210,25 |
| 423 | 0,85 | 0,15 | 0,7399 | 7,0149 | 29161,14 | 21574,88 |
| 448 | 0,90 | 0,10 | 0,6285 | 7,0190 | 29177,85 | 18337,90 |

Изобутилацетат

Уравнение Ли-Кеслера.

;



для стандартных условий



приведенную температуру найдем как , в интервале от 298К до .



приведенное давление возьмем из задания №7 ацентрический фактор возьмем из задания №3.



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | ΔvZ | Ψ | ΔvH0T | ΔvHT |
| 298 | 0,53 | 0,9973 | 9,2696 | 43234,85 | 43118,82 |
| 323 | 0,58 | 0,9919 | 8,9623 | 41801,77 | 41464,42 |
| 348 | 0,62 | 0,9803 | 8,6668 | 40423,14 | 39627,88 |
| 373 | 0,66 | 0,9592 | 8,3881 | 39123,45 | 37526,82 |
| 398 | 0,71 | 0,9253 | 8,1334 | 37935,32 | 35101,54 |
| 423 | 0,75 | 0,8760 | 7,9117 | 36901,34 | 32323,80 |
| 448 | 0,80 | 0,8090 | 7,7348 | 36076,25 | 29186,11 |
| 473 | 0,84 | 0,7225 | 7,6175 | 35529,35 | 25669,54 |
| 498 | 0,89 | 0,6133 | 7,5785 | 35347,21 | 21679,61 |
| 523 | 0,93 | 0,4739 | 7,6406 | 35636,77 | 16888,89 |

Корреляция Риделя.

;



для стандартных условий ,



R=8.314, - возьмем из задания №3, -Возьмем из задания №7, , в интервале от 298К до .



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | ΔvZ | Ψ | ΔvH0T | ΔvHT |
| 298 | 0,53 | 0,9978 | 9,2261 | 43031,94 | 42936,34 |
| 323 | 0,58 | 0,9934 | 8,9311 | 41656,20 | 41382,64 |
| 348 | 0,62 | 0,9842 | 8,6477 | 40334,10 | 39696,81 |
| 373 | 0,66 | 0,9675 | 8,3809 | 39089,79 | 37820,37 |
| 398 | 0,71 | 0,9409 | 8,1377 | 37955,38 | 35710,96 |
| 423 | 0,75 | 0,9019 | 7,9270 | 36972,85 | 33344,34 |
| 448 | 0,80 | 0,8481 | 7,7605 | 36196,13 | 30698,57 |
| 473 | 0,84 | 0,7765 | 7,6527 | 35693,50 | 27715,32 |
| 498 | 0,89 | 0,6813 | 7,6220 | 35550,26 | 24218,79 |
| 523 | 0,93 | 0,5492 | 7,6909 | 35871,75 | 19701,25 |

Корреляция Амброуза-Уолтона.

;



для стандартных условий ;



приведенную температуру найдем как , в интервале от 298К до .



приведенное давление возьмем из задания №7 ; ацентрический фактор возьмем из задания №3.



|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Т | Тr | τ | ΔvZ | Ψ | ΔvH0T | ΔvHT |
| 298 | 0,53 | 0,47 | 0,9977 | 9,2012 | 42915,99 | 42815,92 |
| 323 | 0,58 | 0,42 | 0,9932 | 8,8584 | 41317,15 | 41034,46 |
| 348 | 0,62 | 0,38 | 0,9837 | 8,5534 | 39894,25 | 39244,39 |
| 373 | 0,66 | 0,34 | 0,9669 | 8,2870 | 38651,81 | 37370,96 |
| 398 | 0,71 | 0,29 | 0,9401 | 8,0601 | 37593,59 | 35343,61 |
| 423 | 0,75 | 0,25 | 0,9012 | 7,8740 | 36725,68 | 33097,80 |
| 448 | 0,80 | 0,20 | 0,8476 | 7,7315 | 36060,82 | 30564,80 |
| 473 | 0,84 | 0,16 | 0,7760 | 7,6381 | 35625,40 | 27646,02 |
| 498 | 0,89 | 0,11 | 0,6809 | 7,6056 | 35473,80 | 24153,21 |
| 523 | 0,93 | 0,07 | 0,5494 | 7,6600 | 35727,56 | 19628,53 |

**Задание №9**

Для первого вещества рекомендованными методами рассчитать вязкость вещества при Т=730К и низком давлении.

Теоретический расчет:



где -вязкость при низком давлении; М- молярная масса; Т- температура; -интеграл столкновений; диаметр.



где характеристическая температура где - постоянная Больцмана; - энергетический параметр; A=1.16145; B=0.14874; C=0.52487; D=077320; E=2.16178; F=2.43787.



где - ацентрический фактор; и -возьмем из предыдущих заданий.



4-Метил-4-этилгептан



;



;



Метод Голубева.

Т.к. приведенная температура то используем формулу:



где где - молярная масса, критическое давление и критическая температура соответственно.



мкП.



Метод Тодоса.



где -критическая температура, критическое давление, молярная масса соответственно.



**Задание №10.**

Для первого соединения рассчитать рекомендованными методами вязкость вещества при температуре 730К. и давлении 100атм.

4-Метил-4-этилгептан

Расчет, основанный на понятии остаточной вязкости.



где - вязкость плотного газа мкП; - вязкость при низком давлении мкП; - приведенная плотность газа;



**Задание №11**

Для первого вещества рекомендованными методами рассчитать теплопроводность вещества при температуре 730К и низком давлении.

Теплопроводность индивидуальных газов при низких давлениях рассчитывается по:

Корреляции Эйкена;

Модифицированной корреляции Эйкена и по корреляции Мисика-Тодоса.

Корреляция Эйкена.



где взято из задания №9; М=142,29г/моль молярная масса вещества; - изобарная теплоемкость; R=1,987.



;



Модифицированная корреляция Эйкена.



где взято из задания №9; М=142,29/моль молярная масса вещества; - изобарная теплоемкость.



Корреляция Мисика-Тодоса.



где - критическая температура давление и молярная масса соответственно; теплоемкость вещества при стандартных условиях; - приведенная температура.



**Задание №12**

Для первого соединения рассчитать рекомендованными методами теплопроводность вещества при температуре 730К и давлении 100 атм.

4-Метил-4-этилгептан



, выбираем уравнение:



Где - критическая температура давление объем и молярная масса соответственно.



, .

