Федеральное агентство по образованию.

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального

образования.

Самарский государственный технический университет.

**Кафедра**: «Технология органического и нефтехимического синтеза»

## **Курсовой проект**

**«Расчеты и прогнозирование свойств органических соединений»**

Самара

2008 г.

Задание 52А

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.*

***2,3,4-Триметилпентан***

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)* | *5* | *-42,19* | *-210,95* | *127,29* | *636,45* | *25,910* | *129,55* |
| *СН-(3С)* | *3* | *-7,95* | *-23,85* | *-50,52* | *-151,56* | *19,000* | *57* |
| *∑* | *8* |  | *-225,94* |  | *486,98* |  | *187,68* |
| *гош-поправка* | *4* | *3,35* | *13,4* |  |  |  |  |
| *поправка на симм.* | *σнар=2* |  | *σвнутр=81* |  | *-51,432* |  |  |
|  |  | Δ*Ho* | *-221,4* | *So* | *433,458* | *Сpo* | *186,55* |

***2-Изопропил-5-метилфенол***

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

Поправка на симметрию: 



Поправка на орто-взаимодействие заместителей: OH(цис-)-C3 = 6,9 кДж/моль

*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-(Сb)* | *1* | *-42,19* | *-42,19* | *127,29* | *127,29* | *13,56* | *13,56* |
| *СН-(2C,Сb)* | *1* | *-4,1* | *-4,1* | *-50,86* | *-50,86* | *20,43* | *20,43* |
| *СН3-(С)* | *2* | *-42,19* | *-84,38* | *127,29* | *254,58* | *25,91* | *51,82* |
| *ОН-(Сb)* | *1* | *-158,64* | *-158,64* | *121,81* | *121,81* | *18* | *18* |
| *Cb-C* | *2* | *23,06* | *46,12* | *-32,19* | *-64,38* | *11,18* | *22,36* |
| *Cb–(O)* | *1* | *-3,77* | *-3,77* | *-42,7* | *-42,7* | *16,32* | *16,32* |
| *Cb-H* | *3* | *13,81* | *41,43* | *48,26* | *144,78* | *17,16* | *51,48* |
| *∑* | *11* |  | *-205,53* |  | *490,52* |  | *193,97* |
| *Попр. на орто вз-вие* |  |  | *6,9* |  |  |  |  |
| *поправка на симм.* | *σнар=1* |  | *σвнутр=27* |  | *-27,402* |  |  |
|  |  | *ΔHo* | *-198,63* | *So* | *463,118* | *Сpo* | *193,97* |

***1-Метилэтилметаноат***

Из таблицы Бенсона возьмем парциальные вклады для   и , вводим набор поправок. Поправки на гош – взаимодействие отсутствуют.

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)* | *2* | *-42,19* | *-84,38* | *127,29* | *254,58* | *25,910* | *51,82* |
| *(CO)H–(O)* | *1* | *-134,37* | *-134,37* | *146,21* | *146,21* | *17,41* | *29,43* |
| *О-(СО,С)* | *1* | *-180,41* | *-180,41* | *35,12* | *35,12* | *11,64* | *11,64* |
| *CH–(2C,O)* | *1* | *-30,14* | *-30,14* | *-46,04* | *-46,04* | *20,09* | *20,09* |
| *поправка на симм.* | *σнар=1* |  | *σвнутр=9* |  | *-18,27* |  |  |
|  |  | Δ*Ho* | *-429,3* | *So* | *371,602* | *Сpo* | *112,98* |

***1,4-Диаминобутан***

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

Поправка на симметрию отсутствует.

*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* |
| *СН2-(2С)* | *2* | *-20,64* | *-41,28* | *39,43* | *78,86* | *23,02* | *46,04* |
| *CH2–(С,N)* | *2* | *-27,63* | *-55,26* | *41,02* | *82,04* | *21,77* | *43,54* |
| *NH2–(C)* | *2* | *20,09* | *40,18* | *124,36* | *248,72* | *23,94* | *47,88* |
| *∑* | *6* |  | *-56,36* |  | *409,62* |  | *137,46* |
|  |  | *ΔHo* | *-56,34* | *So* | *409,62* | *Сpo* | *137,46* |

*Задание №2*

*Для первого соединения рассчитать  и *

***2,3,4-Триметилпентан***

*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)* | | *5* | | *25,910* | *32,820* | | *39,950* | | *45,170* | | *51,235* | | | *54,5* | |
| *СН-(3С)* | | *3* | | *19* | *25,12* | | *30,01* | | *33,7* | | *37,126* | | | *38,97* | |
| *∑* | | *8* | | *186,550* | *239,460* | | *289,780* | | *326,950* | | *367,549* | | |  | |
| *С* | *8* | | *8,644* | | | *11,929* | | *14,627* | | *16,862* | | *18,820* | *19,874* | |
| *Н2* | *9* | | *28,836* | | | *29,179* | | *29,259* | | *29,321* | | *29,511* | *29,614* | |
| *∑* |  | | *328,676* | | | *358,043* | | *380,347* | | *398,785* | | *416,161* |  | |





















*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)* | *5* | *25,910* | *32,820* | *39,950* | *45,170* | *51,235* | *54,5* |
| *СН-(3С)* | *3* | *19* | *25,12* | *30,01* | *33,7* | *37,126* | *38,97* |
| *∑* | *8* | *186,550* | *239,460* | *289,780* | *326,950* | *367,549* |  |











*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.

***2,3,4-Триметилпентан***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *кол-во* | *ΔT* | *ΔP* | *ΔV* |
| *СН3-* | *5* | *0,1* | *1,135* | *275* |
| *СН-* | *3* | *0,036* | *0,63* | *153* |
| ∑ | 8 | *0,136* | *1,765* | *428* |

*Критическая температура.*

 

*Критическое давление.*

. 

*Критический объем.*

**

*Ацентрический фактор.*

Поскольку для вещества отсутствуют экспериментальные значения критических параметров, используем параметры, полученные методом Лидерсена.

;  * *

**

***2-Изопропил-5-метилфенол***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *к-во* | |  | | --- | |  | | |  | | --- | |  | | |  | | --- | |  | |
| *CН3* | *3* | *0,06* | *0,681* | *165* |
| *=СН (цикл)* | *3* | *0,033* | *0,462* | *111* |
| *=С< (цикл)* | *3* | *0,033* | *0,462* | *108* |
| *СН-* | *1* | *0,012* | *0,21* | *51* |
| *СН2-* | *1* | *0,02* | *0,227* | *55* |
| *ОН-(фенол)* | *1* | *0,031* | *-0,02* | *18* |
| *Сумма* | *12* | *0,189* | *2,022* | *508* |

*Критическая температура.*

 

*Критическое давление.*

 

*Критический объем.*



*Ацентрический фактор.*

Поскольку для вещества отсутствуют экспериментальные значения критических параметров, используем параметры, полученные методом Лидерсена.

   



***1-Метилэтилметаноат***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *кол-во* | *ΔT* | *ΔP* | *ΔV* |
| *СН3* | *2* | *0,04* | *0,454* | *110* |
| *,-СОО-* | *1* | *0,047* | *0,47* | *80* |
| *СН-* | *1* | *0,012* | *0,21* | *51* |
| *Сумма* | *4* | *0,099* | *1,134* | *241* |

*Критическая температура.*

 

*Критическое давление.*

; 

*Критический объем.*



*Ацентрический фактор.*

Поскольку для вещества отсутствуют экспериментальные значения критических параметров, используем параметры, полученные методом Лидерсена.

   



***1,4-Диаминобутан***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *кол-во* | *ΔT* | *ΔP* | *ΔV* |
| *СН2-* | *4* | *0,08* | *0,908* | *220* |
| *NН2-* | *2* | *0,062* | *0,19* | *56* |
| *Сумма* | *6* | *0,142* | *1,098* | *276* |

*Критическая температура.*

 

*Критическое давление.*

 

*Критический объем.*



*Ацентрический фактор.*

Поскольку для вещества отсутствуют экспериментальные значения критических параметров, используем параметры, полученные методом Лидерсена.

   

.

*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.

***2,3,4-Триметилпентан***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *кол-во* | *ΔT* | *ΔP* | *ΔV* |
| *СН3-* | *5* | *0,0705* | *-0,006* | *325* |
| *СН-* | *3* | *0,0492* | *0,006* | *123* |
| ∑ | 8 | *0,1197* | *0* | *448* |

*Критическая температура.*

 

*Критическое давление.*

; 

***2-Изопропил-5-метилфенол***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *к-во* | *ΔT* | *ΔP* |
| *CН3* | *3* | *0,0423* | *-0,0036* |
| *=СН (цикл)* | *3* | *0,0246* | *0,0033* |
| *=С< (цикл)* | *3* | *0,0429* | *0,0024* |
| *СН-* | *1* | *0,0164* | *0,002* |
| *СН2-* | *1* | *0,0189* | *0* |
| *ОН* | *1* | *0,0741* | *0,0112* |

*Критическая температура.*

 

*Критическое давление.*

; 

***1-Метилэтилметаноат***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *кол-во* | *ΔT* | *ΔP* |
| *СН3* | *3* | 0,0423 | -0,0036 |
| *СОО* | *1* | *0,0481* | *0,0005* |
| *СН-* | *1* | *0,0164* | *0,002* |
| Сумма | 5 | 0,1068 | -0,0011 |

*Критическая температура.*

 

*Критическое давление.*

; 

***1,4-Диаминобутан***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *кол-во* | *ΔT* | *ΔP* |
| *СН2-* | *10* | *0,189* | *0* |
| *NН2-* | *4* | *0,0972* | *0,0436* |
| *Сумма* | *14* | *0,2862* | *0,0436* |

*Критическая температура.*

 

*Критическое давление.*

; 

*Задание №4*

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

*Энтальпия*

***2,3,4-Триметилпентан***

*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-Кесслера 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.*

* ; R=8,314Дж/моль\*К*

**

*Находим приведенные температуру и давление:*

**

**

Коэффициент сжимаемости найдем из разложения Питцера:

путем интерполяции находим и.

=0,6790;

=0,1549;



Из уравнения Менделеева-Клайперона ,

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

выразим объем:



*М=114,23 г/моль.* 

Фазовое состояние вещества определяем по таблицам Ли-Кесслера, по приведенным параметрам температуры и давления. Ячейка, соответствующая данным приведенным параметрам находится под линией бинодаля, следовательно данное вещество при 730К и 100 бар – газ.

*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.





***2,3,4-Триметилпентан***

 в промежутке температур от 298 до 450К вычислим по формуле:



В промежутке температур от 450 до 560 К вычислим по формуле:



В промежутке температур от 298 до 560 К вычислим Г по формуле:



Находим масштабирующий параметр:

Полученные результаты сведем в таблицу:

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *T, К* | *Tr* | *Vr(0)* | *Vsc* | *Г* | *Vs* | *ρs ,г/см3* |
| *169.45* | *0.3* | *0.3252* | *382.6102* | *0.2646* | *124.4114* | *0.9182* |
| *197.69* | *0.35* | *0.3331* |  | *0.2585* | *127.4534* | *0.8963* |
| *225.93* | *0.4* | *0.3421* |  | *0.2521* | *130.9062* | *0.8726* |
| *254.17* | *0.45* | *0.3520* |  | *0.2456* | *134.6684* | *0.8483* |
| *282.41* | *0.5* | *0.3625* |  | *0.2387* | *138.7024* | *0.8236* |
| *310.65* | *0.55* | *0.3738* |  | *0.2317* | *143.0345* | *0.7986* |
| *338.89* | *0.6* | *0.3862* |  | *0.2244* | *147.7551* | *0.7731* |
| *367.14* | *0.65* | *0.3999* |  | *0.2168* | *153.0184* | *0.7465* |
| *395.38* | *0.7* | *0.4157* |  | *0.2090* | *159.0426* | *0.7183* |
| *423.62* | *0.75* | *0.4341* |  | *0.2010* | *166.1099* | *0.6877* |
| *451.86* | *0.8* | *0.4563* |  | *0.1927* | *174.5664* | *0.6544* |
| *480.10* | *0.85* | *0.4883* |  | *0.1842* | *186.8126* | *0.6115* |
| *508.34* | *0.9* | *0.5289* |  | *0.1754* | *202.3516* | *0.5645* |
| *525.29* | *0.93* | *0.5627* |  | *0.1701* | *215.2847* | *0.5306* |
| *536.58* | *0.95* | *0.5941* |  | *0.1664* | *227.3000* | *0.5026* |
| *547.88* | *0.97* | *0.6410* |  | *0.1628* | *245.2573* | *0.4658* |
| *553.53* | *0.98* | *0.6771* |  | *0.1609* | *259.0677* | *0.4409* |
| *559.18* | *0.99* | *0.7348* |  | *0.1591* | *281.1498* | *0.4063* |

***2-Изопропил-5-метилфенол***

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *T, К* | *Tr* | *Vr(0)* | *Vsc* | *Г* | *Vs* | *ρs ,г/см3* |
| *211,0432* | *0,3* | *0,3252* | *365,2665* | *0,2646* | *100,5086* | *1,4946* |
| *246,2171* | *0,35* | *0,3331* |  | *0,2585* | *103,3972* | *1,4529* |
| *281,391* | *0,4* | *0,3421* |  | *0,2521* | *106,6587* | *1,4084* |
| *316,5648* | *0,45* | *0,352* |  | *0,2456* | *110,2157* | *1,363* |
| *351,7387* | *0,5* | *0,3625* |  | *0,2387* | *114,0423* | *1,3173* |
| *386,9126* | *0,55* | *0,3738* |  | *0,2317* | *118,1648* | *1,2713* |
| *422,0864* | *0,6* | *0,3862* |  | *0,2244* | *122,6636* | *1,2247* |
| *457,2603* | *0,65* | *0,3999* |  | *0,2168* | *127,674* | *1,1766* |
| *492,4342* | *0,7* | *0,4157* |  | *0,209* | *133,3879* | *1,1262* |
| *527,6081* | *0,75* | *0,4341* |  | *0,201* | *140,0556* | *1,0726* |
| *562,7819* | *0,8* | *0,4563* |  | *0,1927* | *147,9872* | *1,0151* |
| *597,9558* | *0,85* | *0,4883* |  | *0,1842* | *159,2515* | *0,9433* |
| *633,1297* | *0,9* | *0,5289* |  | *0,1754* | *173,4815* | *0,8659* |
| *654,234* | *0,93* | *0,5627* |  | *0,1701* | *185,211* | *0,8111* |
| *668,3035* | *0,95* | *0,5941* |  | *0,1664* | *196,0056* | *0,7664* |
| *682,3731* | *0,97* | *0,641* |  | *0,1628* | *211,9897* | *0,7086* |
| *689,4079* | *0,98* | *0,6771* |  | *0,1609* | *224,1926* | *0,6701* |
| *696,4426* | *0,99* | *0,7348* |  | *0,1591* | *243,5919* | *0,6167* |

***1-Метилэтилметаноат***

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *T, К* | *Tr* | *Vr(0)* | *Vsc* | *Г* | *Vs* | *ρs ,г/см3* |
| *155,9893* | *0,3* | *0,3252* | *276,6765* | *0,2646* | *82,8321* | *1,0637* |
| *181,9875* | *0,35* | *0,3331* | *276,6765* | *0,2585* | *85,0258* | *1,0362* |
| *207,9857* | *0,4* | *0,3421* | *276,6765* | *0,2521* | *87,5090* | *1,0068* |
| *233,9839* | *0,45* | *0,3520* | *276,6765* | *0,2456* | *90,2161* | *0,9766* |
| *259,9821* | *0,5* | *0,3625* | *276,6765* | *0,2387* | *93,1236* | *0,9461* |
| *285,9803* | *0,55* | *0,3738* | *276,6765* | *0,2317* | *96,2511* | *0,9154* |
| *311,9785* | *0,6* | *0,3862* | *276,6765* | *0,2244* | *99,6616* | *0,8841* |
| *337,9767* | *0,65* | *0,3999* | *276,6765* | *0,2168* | *103,4621* | *0,8516* |
| *363,975* | *0,7* | *0,4157* | *276,6765* | *0,2090* | *107,8038* | *0,8173* |
| *389,9732* | *0,75* | *0,4341* | *276,6765* | *0,2010* | *112,8834* | *0,7805* |
| *415,9714* | *0,8* | *0,4563* | *276,6765* | *0,1927* | *118,9433* | *0,7407* |
| *441,9696* | *0,85* | *0,4883* | *276,6765* | *0,1842* | *127,6322* | *0,6903* |
| *467,9678* | *0,9* | *0,5289* | *276,6765* | *0,1754* | *138,6327* | *0,6355* |
| *483,5667* | *0,93* | *0,5627* | *276,6765* | *0,1701* | *147,7439* | *0,5964* |
| *493,966* | *0,95* | *0,5941* | *276,6765* | *0,1664* | *156,1684* | *0,5642* |
| *504,3653* | *0,97* | *0,6410* | *276,6765* | *0,1628* | *168,7011* | *0,5223* |
| *509,5649* | *0,98* | *0,6771* | *276,6765* | *0,1609* | *178,3045* | *0,4941* |
| *514,7646* | *0,99* | *0,7348* | *276,6765* | *0,1591* | *193,6158* | *0,4551* |

***1,4-Диаминобутан***

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *T, К* | *Tr* | *Vr(0)* | *Vsc* | *Г* | *Vs* | *ρs ,г/см3* |
| *189,1016* | *0,3* | *0,3252* | *291,3679* | *0,2646* | *81,3137* | *1,0841* |
| *220,6186* | *0,35* | *0,3331* | *291,3679* | *0,2585* | *83,6189* | *1,0542* |
| *252,1355* | *0,4* | *0,3421* | *291,3679* | *0,2521* | *86,2227* | *1,0224* |
| *283,6524* | *0,45* | *0,3520* | *291,3679* | *0,2456* | *89,0623* | *0,9898* |
| *315,1694* | *0,5* | *0,3625* | *291,3679* | *0,2387* | *92,1162* | *0,9570* |
| *346,6863* | *0,55* | *0,3738* | *291,3679* | *0,2317* | *95,4055* | *0,9240* |
| *378,2032* | *0,6* | *0,3862* | *291,3679* | *0,2244* | *98,9946* | *0,8905* |
| *409,7202* | *0,65* | *0,3999* | *291,3679* | *0,2168* | *102,9922* | *0,8559* |
| *441,2371* | *0,7* | *0,4157* | *291,3679* | *0,2090* | *107,5525* | *0,8196* |
| *472,754* | *0,75* | *0,4341* | *291,3679* | *0,2010* | *112,8761* | *0,7810* |
| *504,271* | *0,8* | *0,4563* | *291,3679* | *0,1927* | *119,2119* | *0,7395* |
| *535,7879* | *0,85* | *0,4883* | *291,3679* | *0,1842* | *128,2239* | *0,6875* |
| *567,3048* | *0,9* | *0,5289* | *291,3679* | *0,1754* | *139,6127* | *0,6314* |
| *586,215* | *0,93* | *0,5627* | *291,3679* | *0,1701* | *149,0076* | *0,5916* |
| *598,8218* | *0,95* | *0,5941* | *291,3679* | *0,1664* | *157,6605* | *0,5591* |
| *611,4286* | *0,97* | *0,6410* | *291,3679* | *0,1628* | *170,4832* | *0,5171* |
| *617,7319* | *0,98* | *0,6771* | *291,3679* | *0,1609* | *180,2785* | *0,4890* |
| *624,0353* | *0,99* | *0,7348* | *291,3679* | *0,1591* | *195,8580* | *0,4501* |

*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.

***2,3,4-Триметилпентан***

Корреляция Ли-Кеслера.

Она основана на использовании принципа соответственных состояний.





**

Давление *Pvp*определяем из приведенного давления насыщенных паров *Pvp,r* и критического давления данного вещества. Критическое давление определяем методом Лидерсена, поскольку для данного вещества экспериментальные данные отсутствуют.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *f(0)* | *f(1)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0.53* | *-4.8004* | *-5.8583* | *0.0014* | *0.0359* |
| *323* | *0.57* | *-4.0076* | *-4.6363* | *0.0045* | *0.1148* |
| *348* | *0.62* | *-3.3344* | *-3.6614* | *0.0117* | *0.3025* |
| *373* | *0.66* | *-2.7559* | *-2.8772* | *0.0265* | *0.6844* |
| *398* | *0.70* | *-2.2529* | *-2.2418* | *0.0532* | *1.3723* |
| *423* | *0.75* | *-1.8109* | *-1.7232* | *0.0969* | *2.4988* |
| *448* | *0.79* | *-1.4183* | *-1.2962* | *0.1634* | *4.2121* |
| *473* | *0.84* | *-1.0658* | *-0.9406* | *0.2589* | *6.6750* |
| *498* | *0.88* | *-0.7456* | *-0.6397* | *0.3908* | *10.0737* |
| *523* | *0.93* | *-0.4510* | *-0.3791* | *0.5678* | *14.6373* |

*Корреляция Риделя*



    

 

где  - приведенная температура кипения.





  

 

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,53* | *0.0014* | *0.0353* |
| *323* | *0,57* | *0.0044* | *0.1130* |
| *348* | *0,62* | *0.0116* | *0.2980* |
| *373* | *0,66* | *0.0262* | *0.6749* |
| *398* | *0,70* | *0.0526* | *1.3551* |
| *423* | *0,75* | *0.0959* | *2.4714* |
| *448* | *0,79* | *0.1619* | *4.1733* |
| *473* | *0,84* | *0.2570* | *6.6263* |
| *498* | *0,88* | *0.3887* | *10.0201* |
| *523* | *0,93* | *0.5659* | *14.5888* |

*Метод Амброуза-Уолтона*



**

**

**

где 

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *τ* | *f(0)* | *f(1)* | *f(2)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0.53* | *0.47* | *-4.7749* | *-5.7272* | *-0.1898* | *0.0015* | *0.0376* |
| *323* | *0.57* | *0.43* | *-3.9915* | *-4.5453* | *-0.1154* | *0.0046* | *0.1186* |
| *348* | *0.62* | *0.38* | *-3.3261* | *-3.6088* | *-0.0599* | *0.0120* | *0.3082* |
| *373* | *0.66* | *0.34* | *-2.7529* | *-2.8564* | *-0.0215* | *0.0267* | *0.6893* |
| *398* | *0.70* | *0.30* | *-2.2531* | *-2.2438* | *0.0018* | *0.0532* | *1.3713* |
| *423* | *0.75* | *0.25* | *-1.8124* | *-1.7386* | *0.0128* | *0.0964* | *2.4864* |
| *448* | *0.79* | *0.21* | *-1.4197* | *-1.3167* | *0.0144* | *0.1624* | *4.1858* |
| *473* | *0.84* | *0.16* | *-1.0663* | *-0.9598* | *0.0094* | *0.2575* | *6.6387* |
| *498* | *0.88* | *0.12* | *-0.7453* | *-0.6537* | *0.0013* | *0.3893* | *10.0350* |
| *523* | *0.93* | *0.07* | *-0.4506* | *-0.3870* | *-0.0061* | *0.5663* | *14.5996* |

***2-Изопропил-5-метилфенол***

*Корреляция Ли-Кеслера*

Она основана на использовании принципа соответственных состояний.





**

Давление *Pvp*определяем из приведенного давления насыщенных паров *Pvp,r* и критического давления данного вещества. Критическое давление определяем методом Лидерсена, поскольку для данного вещества экспериментальные данные отсутствуют.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *f(0)* | *f(1)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,42* | *-7,2860* | *-10,0247* | *0,0000* | *0,0001* |
| *323* | *0,46* | *-6,2699* | *-8,2282* | *0,0000* | *0,0006* |
| *348* | *0,49* | *-5,4061* | *-6,7626* | *0,0001* | *0,0033* |
| *373* | *0,53* | *-4,6634* | *-5,5563* | *0,0004* | *0,0139* |
| *398* | *0,57* | *-4,0188* | *-4,5563* | *0,0013* | *0,0474* |
| *423* | *0,60* | *-3,4544* | *-3,7228* | *0,0036* | *0,1353* |
| *448* | *0,64* | *-2,9566* | *-3,0250* | *0,0090* | *0,3339* |
| *473* | *0,67* | *-2,5146* | *-2,4391* | *0,0196* | *0,7303* |
| *498* | *0,71* | *-2,1198* | *-1,9462* | *0,0387* | *1,4434* |
| *523* | *0,74* | *-1,7652* | *-1,5313* | *0,0703* | *2,6187* |
| *548* | *0,78* | *-1,4453* | *-1,1823* | *0,1186* | *4,4171* |

*Корреляция Риделя*



    

 

где  - приведенная температура кипения.

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *А* | *В* | *С* | *D* | *θ* | *αc* | *ψ* |
| *14,4917* | *14,9057* | *-8,6911* | *0,41405* | *-0,414* | *8,698911* | *1,060095* |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,42* | *0,0000* | *0,0001* |
| *323* | *0,46* | *0,0000* | *0,0005* |
| *348* | *0,49* | *0,0001* | *0,0027* |
| *373* | *0,53* | *0,0003* | *0,0113* |
| *398* | *0,57* | *0,0010* | *0,0379* |
| *423* | *0,60* | *0,0029* | *0,1065* |
| *448* | *0,64* | *0,0070* | *0,2600* |
| *473* | *0,67* | *0,0152* | *0,5649* |
| *498* | *0,71* | *0,0299* | *1,1140* |
| *523* | *0,74* | *0,0544* | *2,0270* |
| *548* | *0,78* | *0,0926* | *3,4487* |

*Корреляция Амброуза-Уолтона.*



**

**

**

где 

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *τ* | *f(0)* | *f(1)* | *f(2)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,42* | *0,58* | *-7,3100* | *-10,0411* | *-0,4400* | *0,0000* | *0,0001* |
| *323* | *0,46* | *0,54* | *-6,3052* | *-8,2518* | *-0,3432* | *0,0000* | *0,0005* |
| *348* | *0,49* | *0,51* | *-5,4543* | *-6,8153* | *-0,2578* | *0,0001* | *0,0028* |
| *373* | *0,53* | *0,47* | *-4,7246* | *-5,6488* | *-0,1848* | *0,0003* | *0,0117* |
| *398* | *0,57* | *0,43* | *-4,0918* | *-4,6919* | *-0,1245* | *0,0010* | *0,0391* |
| *423* | *0,60* | *0,40* | *-3,5376* | *-3,8993* | *-0,0765* | *0,0029* | *0,1095* |
| *448* | *0,64* | *0,36* | *-3,0476* | *-3,2368* | *-0,0399* | *0,0071* | *0,2659* |
| *473* | *0,67* | *0,33* | *-2,6109* | *-2,6782* | *-0,0138* | *0,0154* | *0,5745* |
| *498* | *0,71* | *0,29* | *-2,2187* | *-2,2032* | *0,0030* | *0,0303* | *1,1271* |
| *523* | *0,74* | *0,26* | *-1,8639* | *-1,7960* | *0,0121* | *0,0548* | *2,0425* |
| *548* | *0,78* | *0,22* | *-1,5408* | *-1,4440* | *0,0147* | *0,0930* | *3,4651* |

***1-Метилэтилметаноат***

*Корреляция Ли-Кесслера.*

Она основана на использовании принципа соответственных состояний.





**

Давление *Pvp*определяем из приведенного давления насыщенных паров *Pvp,r* и критического давления данного вещества. Критическое давление определяем методом Лидерсена, поскольку для данного вещества экспериментальные данные отсутствуют.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *f(0)* | *f(1)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0.57* | *-3.9869* | *-4.6056* | *0.0047* | *0.1918* |
| *323* | *0.62* | *-3.2637* | *-3.5627* | *0.0131* | *0.5403* |
| *348* | *0.67* | *-2.6492* | *-2.7387* | *0.0311* | *1.2786* |
| *373* | *0.72* | *-2.1203* | *-2.0821* | *0.0643* | *2.6420* |
| *398* | *0.77* | *-1.6590* | *-1.5542* | *0.1195* | *4.9084* |
| *423* | *0.81* | *-1.2518* | *-1.1249* | *0.2041* | *8.3883* |
| *448* | *0.86* | *-0.8874* | *-0.7705* | *0.3268* | *13.4295* |
| *473* | *0.91* | *-0.5567* | *-0.4710* | *0.4976* | *20.4479* |
| *498* | *0.96* | *-0.2519* | *-0.2098* | *0.7300* | *29.9938* |

*Корреляция Риделя*



    

 

где  приведенная температура кипения.

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *А* | *В* | *С* | *D* | *Θ* | *Αc* | *ψ* |
| *10,491673* | *10,79144* | *-5,2549* | *0,29976* | *-0,2998* | *7,335113* | *2,087338* |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,57* | *0,0045* | *0,1828* |
| *323* | *0,62* | *0,0128* | *0,5176* |
| *348* | *0,67* | *0,0303* | *1,2304* |
| *373* | *0,72* | *0,0630* | *2,5533* |
| *398* | *0,77* | *0,1174* | *4,7628* |
| *423* | *0,81* | *0,2015* | *8,1707* |
| *448* | *0,86* | *0,3237* | *13,1286* |
| *473* | *0,91* | *0,4946* | *20,0588* |
| *498* | *0,96* | *0,7279* | *29,5195* |

Корреляция Амброуза-Уолтона.



**

**

**где 

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *τ* | *f(0)* | *f(1)* | *f(2)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,57* | *0,43* | *-3,9712* | *-4,5157* | *-0,1136* | *0,0048* | *0,1955* |
| *323* | *0,62* | *0,38* | *-3,2561* | *-3,5142* | *-0,0546* | *0,0134* | *0,5425* |
| *348* | *0,67* | *0,33* | *-2,6471* | *-2,7233* | *-0,0157* | *0,0313* | *1,2686* |
| *373* | *0,72* | *0,28* | *-2,1210* | *-2,0889* | *0,0061* | *0,0642* | *2,6015* |
| *398* | *0,77* | *0,23* | *-1,6606* | *-1,5724* | *0,0144* | *0,1188* | *4,8165* |
| *423* | *0,81* | *0,19* | *-1,2528* | *-1,1455* | *0,0127* | *0,2029* | *8,2290* |
| *448* | *0,86* | *0,14* | *-0,8874* | *-0,7871* | *0,0052* | *0,3253* | *13,1937* |
| *473* | *0,91* | *0,09* | *-0,5563* | *-0,4812* | *-0,0037* | *0,4962* | *20,1219* |
| *498* | *0,96* | *0,04* | *-0,2520* | *-0,2140* | *-0,0083* | *0,7284* | *29,5383* |

***1,4-Диаминобутан***

*Корреляция Ли-Кеслера.*

Она основана на использовании принципа соответственных состояний.





**

Давление *Pvp*определяем из приведенного давления насыщенных паров *Pvp,r* и критического давления данного вещества. Критическое давление определяем методом Лидерсена, поскольку для данного вещества экспериментальные данные отсутствуют.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *f(0)* | *f(1)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0.47* | *-6.0010* | *-7.8332* | *0.0000* | *0.0016* |
| *323* | *0.51* | *-5.1056* | *-6.3472* | *0.0002* | *0.0087* |
| *348* | *0.55* | *-4.3452* | *-5.1477* | *0.0008* | *0.0355* |
| *373* | *0.59* | *-3.6920* | *-4.1715* | *0.0027* | *0.1152* |
| *398* | *0.63* | *-3.1250* | *-3.3714* | *0.0072* | *0.3118* |
| *423* | *0.67* | *-2.6281* | *-2.7115* | *0.0169* | *0.7298* |
| *448* | *0.71* | *-2.1888* | *-2.1642* | *0.0351* | *1.5182* |
| *473* | *0.75* | *-1.7970* | *-1.7075* | *0.0664* | *2.8691* |
| *498* | *0.79* | *-1.4446* | *-1.3237* | *0.1161* | *5.0129* |
| *523* | *0.83* | *-1.1248* | *-0.9983* | *0.1902* | *8.2169* |
| *548* | *0.87* | *-0.8319* | *-0.7188* | *0.2961* | *12.7918* |
| *573* | *0.91* | *-0.5609* | *-0.4748* | *0.4425* | *19.1145* |
| *598* | *0.95* | *-0.3077* | *-0.2568* | *0.6406* | *27.6730* |

*Корреляция Риделя*



    

 

где приведенная температура кипения.

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *А* | *В* | *С* | *D* | *θ* | *αc* | *ψ* |
| *13,9173* | *14,3149* | *-8,1977* | *0,3976* | *-0,3976* | *8,5031* | *1,4997* |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,47* | *0,0000* | *0,0016* |
| *323* | *0,51* | *0,0002* | *0,0084* |
| *348* | *0,55* | *0,0008* | *0,0341* |
| *373* | *0,59* | *0,0026* | *0,1105* |
| *398* | *0,63* | *0,0070* | *0,2991* |
| *423* | *0,67* | *0,0164* | *0,7009* |
| *448* | *0,71* | *0,0343* | *1,4610* |
| *473* | *0,75* | *0,0649* | *2,7684* |
| *498* | *0,79* | *0,1138* | *4,8522* |
| *523* | *0,83* | *0,1872* | *7,9808* |
| *548* | *0,87* | *0,2925* | *12,4695* |
| *573* | *0,91* | *0,4387* | *18,7029* |
| *598* | *0,95* | *0,6376* | *27,1794* |

*Корреляция Амброуза-Уолтона.*



**

**

**

где 

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *τ* | *f(0)* | *f(1)* | *f(2)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,47* | *0,53* | *-5,9630* | *-7,6649* | *-0,3091* | *0,0000* | *0,0017* |
| *323* | *0,51* | *0,49* | *-5,0766* | *-6,2035* | *-0,2198* | *0,0002* | *0,0090* |
| *348* | *0,55* | *0,45* | *-4,3251* | *-5,0386* | *-0,1462* | *0,0009* | *0,0364* |
| *373* | *0,59* | *0,41* | *-3,6797* | *-4,0984* | *-0,0882* | *0,0027* | *0,1167* |
| *398* | *0,63* | *0,37* | *-3,1188* | *-3,3308* | *-0,0448* | *0,0073* | *0,3124* |
| *423* | *0,67* | *0,33* | *-2,6262* | *-2,6971* | *-0,0146* | *0,0170* | *0,7242* |
| *448* | *0,71* | *0,29* | *-2,1893* | *-2,1686* | *0,0040* | *0,0351* | *1,4957* |
| *473* | *0,75* | *0,25* | *-1,7985* | *-1,7232* | *0,0130* | *0,0660* | *2,8141* |
| *498* | *0,79* | *0,21* | *-1,4460* | *-1,3441* | *0,0145* | *0,1151* | *4,9073* |
| *523* | *0,83* | *0,17* | *-1,1254* | *-1,0180* | *0,0106* | *0,1887* | *8,0432* |
| *548* | *0,87* | *0,13* | *-0,8317* | *-0,7345* | *0,0037* | *0,2940* | *12,5336* |
| *573* | *0,91* | *0,09* | *-0,5605* | *-0,4850* | *-0,0036* | *0,4398* | *18,7509* |
| *598* | *0,95* | *0,05* | *-0,3077* | *-0,2620* | *-0,0081* | *0,6374* | *27,1739* |

*Задание №8*

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

***2,3,4-Триметилпентан***

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* | *0,53* | *0.9953* | *8.0406* | *37758.14* | *37578.95* |
| *323* | *0,57* | *0.9880* | *7.8182* | *36713.87* | *36274.23* |
| *348* | *0,62* | *0.9746* | *7.6050* | *35712.78* | *34805.55* |
| *373* | *0,66* | *0.9528* | *7.4052* | *34774.31* | *33132.94* |
| *398* | *0,70* | *0.9208* | *7.2242* | *33924.31* | *31237.23* |
| *423* | *0,75* | *0.8771* | *7.0692* | *33196.57* | *29115.40* |
| *448* | *0,79* | *0.8201* | *6.9495* | *32634.49* | *26763.76* |
| *473* | *0,84* | *0.7477* | *6.8768* | *32293.05* | *24146.95* |
| *498* | *0,88* | *0.6557* | *6.8657* | *32240.90* | *21139.26* |
| *523* | *0,93* | *0.5337* | *6.9343* | *32562.85* | *17378.66* |

*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* | *0,9953* | *8,0355* | *37734,44* | *37558,03* |
| *323* | *0,57* | *0,9882* | *7,8187* | *36716,17* | *36283,23* |
| *348* | *0,62* | *0,9750* | *7,6110* | *35740,81* | *34846,47* |
| *373* | *0,66* | *0,9535* | *7,4165* | *34827,63* | *33207,10* |
| *398* | *0,70* | *0,9218* | *7,2408* | *34002,34* | *31344,35* |
| *423* | *0,75* | *0,8785* | *7,0909* | *33298,49* | *29252,83* |
| *448* | *0,79* | *0,8219* | *6,9761* | *32759,20* | *26926,12* |
| *473* | *0,84* | *0,7499* | *6,9079* | *32439,07* | *24325,78* |
| *498* | *0,88* | *0,9953* | *8,0355* | *37734,44* | *37558,03* |
| *523* | *0,93* | *0,9882* | *7,8187* | *36716,17* | *36283,23* |

*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* | *0,9950* | *7,9532* | *37347,82* | *37161,89* |
| *323* | *0,57* | *0,43* | *0,9876* | *7,7074* | *36193,59* | *35745,55* |
| *348* | *0,62* | *0,38* | *0,9741* | *7,4924* | *35183,80* | *34272,84* |
| *373* | *0,66* | *0,34* | *0,9524* | *7,3086* | *34320,59* | *32688,59* |
| *398* | *0,70* | *0,30* | *0,9208* | *7,1562* | *33605,15* | *30945,29* |
| *423* | *0,75* | *0,25* | *0,8777* | *7,0358* | *33039,95* | *28999,67* |
| *448* | *0,79* | *0,21* | *0,8213* | *6,9490* | *32631,95* | *26802,17* |
| *473* | *0,84* | *0,16* | *0,7493* | *6,8991* | *32397,63* | *24277,03* |
| *498* | *0,88* | *0,12* | *0,6573* | *6,8938* | *32372,85* | *21279,77* |
| *523* | *0,93* | *0,07* | *0,5354* | *6,9504* | *32638,75* | *17475,47* |

***2-Изопропил-5-метилфенол***

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* | Δ*vZ* | *Ψ* | *ΔvH0T* | *ΔvHT* |
| *298* | *0,42* | *1,0000* | *11,3574* | *66425,87* | *66424,98* |
| *323* | *0,46* | *0,9999* | *11,0380* | *64558,12* | *64552,83* |
| *348* | *0,49* | *0,9996* | *10,7214* | *62706,58* | *62683,74* |
| *373* | *0,53* | *0,9987* | *10,4089* | *60878,55* | *60802,23* |
| *398* | *0,57* | *0,9965* | *10,1020* | *59083,73* | *58875,79* |
| *423* | *0,60* | *0,9916* | *9,8030* | *57334,81* | *56853,90* |
| *448* | *0,64* | *0,9825* | *9,5146* | *55648,10* | *54674,01* |
| *473* | *0,67* | *0,9672* | *9,2404* | *54044,21* | *52272,64* |
| *498* | *0,71* | *0,9438* | *8,9847* | *52548,93* | *49596,79* |
| *523* | *0,74* | *0,9105* | *8,7531* | *51194,11* | *46610,63* |
| *548* | *0,78* | *0,8656* | *8,5521* | *50018,63* | *43294,20* |

*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* | *0,42* | *1,0000* | *11,2302* | *65682,07* | *65681,29* |
| *323* | *0,46* | *0,9999* | *10,9259* | *63902,56* | *63898,06* |
| *348* | *0,49* | *0,9997* | *10,6244* | *62138,93* | *62120,04* |
| *373* | *0,53* | *0,9990* | *10,3268* | *60398,34* | *60336,64* |
| *398* | *0,57* | *0,9972* | *10,0347* | *58690,29* | *58525,23* |
| *423* | *0,60* | *0,9934* | *9,7504* | *57027,20* | *56650,93* |
| *448* | *0,64* | *0,9864* | *9,4765* | *55425,05* | *54671,05* |
| *473* | *0,67* | *0,9747* | *9,2164* | *53904,05* | *52542,56* |
| *498* | *0,71* | *0,9569* | *8,9745* | *52489,45* | *50228,83* |
| *523* | *0,74* | *0,9315* | *8,7562* | *51212,45* | *47701,91* |
| *548* | *0,78* | *0,8968* | *8,5679* | *50111,16* | *44937,81* |

*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* | *0,42* | *0,58* | *1,0000* | *11,5756* | *67702,60* | *67701,85* |
| *323* | *0,46* | *0,54* | *0,9999* | *11,1554* | *65244,57* | *65240,04* |
| *348* | *0,49* | *0,51* | *0,9997* | *10,7563* | *62910,70* | *62891,29* |
| *373* | *0,53* | *0,47* | *0,9990* | *10,3810* | *60715,48* | *60651,74* |
| *398* | *0,57* | *0,43* | *0,9971* | *10,0312* | *58669,46* | *58499,42* |
| *423* | *0,60* | *0,40* | *0,9932* | *9,7082* | *56780,21* | *56395,08* |
| *448* | *0,64* | *0,36* | *0,9861* | *9,4129* | *55053,25* | *54287,15* |
| *473* | *0,67* | *0,33* | *0,9743* | *9,1462* | *53493,23* | *52118,83* |
| *498* | *0,71* | *0,29* | *0,9564* | *8,9088* | *52105,13* | *49833,97* |
| *523* | *0,74* | *0,26* | *0,9309* | *8,7021* | *50895,93* | *47379,29* |
| *548* | *0,78* | *0,22* | *0,8962* | *8,5278* | *49876,71* | *44701,59* |

***1-Метилэтилметаноат***

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* | *0,57* | *0.9875* | *7.7819* | *33641.14* | *33221.48* |
| *323* | *0,62* | *0.9722* | *7.5535* | *32653.82* | *31745.57* |
| *348* | *0,67* | *0.9467* | *7.3415* | *31737.07* | *30044.85* |
| *373* | *0,72* | *0.9087* | *7.1531* | *30922.64* | *28100.90* |
| *398* | *0,77* | *0.8565* | *6.9981* | *30252.77* | *25912.25* |
| *423* | *0,81* | *0.7879* | *6.8894* | *29782.68* | *23466.52* |
| *448* | *0,86* | *0.6993* | *6.8433* | *29583.32* | *20687.41* |
| *473* | *0,91* | *0.5822* | *6.8805* | *29744.48* | *17316.34* |
| *498* | *0,96* | *0.4113* | *7.0272* | *30378.37* | *12493.41* |

*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* | *0,57* | *0,9880* | *7,8163* | *33789,72* | *33382,67* |
| *323* | *0,62* | *0,9730* | *7,5913* | *32817,11* | *31931,53* |
| *348* | *0,67* | *0,9480* | *7,3826* | *31915,03* | *30256,96* |
| *373* | *0,72* | *0,9107* | *7,1976* | *31115,20* | *28337,76* |
| *398* | *0,77* | *0,8591* | *7,0460* | *30459,84* | *26169,07* |
| *423* | *0,81* | *0,7911* | *6,9406* | *30004,15* | *23734,94* |
| *448* | *0,86* | *0,7027* | *6,8978* | *29819,01* | *20954,92* |
| *473* | *0,91* | *0,5856* | *6,9383* | *29994,17* | *17564,14* |
| *498* | *0,96* | *0,4141* | *7,0881* | *30641,78* | *12687,25* |

*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* | *0,57* | *0,43* | *0,9871* | *7,6708* | *33160,93* | *32733,50* |
| *323* | *0,62* | *0,38* | *0,9717* | *7,4422* | *32172,37* | *31261,74* |
| *348* | *0,67* | *0,33* | *0,9464* | *7,2501* | *31342,23* | *29661,90* |
| *373* | *0,72* | *0,28* | *0,9090* | *7,0951* | *30671,94* | *27879,76* |
| *398* | *0,77* | *0,23* | *0,8574* | *6,9779* | *30165,34* | *25864,15* |
| *423* | *0,81* | *0,19* | *0,7894* | *6,9011* | *29833,55* | *23549,59* |
| *448* | *0,86* | *0,14* | *0,7009* | *6,8711* | *29703,66* | *20820,75* |
| *473* | *0,91* | *0,09* | *0,5838* | *6,9025* | *29839,19* | *17420,57* |
| *498* | *0,96* | *0,04* | *0,4134* | *7,0358* | *30415,79* | *12574,31* |

***1,4-Диаминобутан***



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* | *0,47* | *0.9998* | *10.4921* | *54985.46* | *54975.76* |
| *323* | *0,51* | *0.9992* | *10.1644* | *53268.14* | *53228.08* |
| *348* | *0,55* | *0.9976* | *9.8424* | *51580.68* | *51454.44* |
| *373* | *0,59* | *0.9935* | *9.5287* | *49936.51* | *49614.10* |
| *398* | *0,63* | *0.9856* | *9.2266* | *48353.51* | *47655.19* |
| *423* | *0,67* | *0.9716* | *8.9407* | *46855.04* | *45526.48* |
| *448* | *0,71* | *0.9498* | *8.6766* | *45471.12* | *43188.03* |
| *473* | *0,75* | *0.9180* | *8.4417* | *44239.75* | *40614.05* |
| *498* | *0,79* | *0.8745* | *8.2449* | *43208.40* | *37783.67* |
| *523* | *0,83* | *0.8167* | *8.0974* | *42435.70* | *34656.46* |
| *548* | *0,87* | *0.7412* | *8.0130* | *41993.32* | *31123.68* |
| *573* | *0,91* | *0.6410* | *8.0082* | *41967.96* | *26902.36* |
| *598* | *0,95* | *0.4997* | *8.1028* | *42463.68* | *21219.02* |

*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* | *0,47* | *0,9998* | *10,4520* | *54774,98* | *54765,50* |
| *323* | *0,51* | *0,9993* | *10,1364* | *53121,09* | *53082,11* |
| *348* | *0,55* | *0,9976* | *9,8264* | *51496,67* | *51374,06* |
| *373* | *0,59* | *0,9937* | *9,5246* | *49914,99* | *49601,87* |
| *398* | *0,63* | *0,9860* | *9,2343* | *48393,69* | *47714,59* |
| *423* | *0,67* | *0,9724* | *8,9599* | *46955,83* | *45660,75* |
| *448* | *0,71* | *0,9511* | *8,7072* | *45631,04* | *43398,44* |
| *473* | *0,75* | *0,9200* | *8,4831* | *44456,84* | *40898,11* |
| *498* | *0,79* | *0,8770* | *8,2967* | *43480,09* | *38133,66* |
| *523* | *0,83* | *0,8199* | *8,1591* | *42758,67* | *35058,27* |
| *548* | *0,87* | *0,7449* | *8,0836* | *42363,30* | *31555,67* |
| *573* | *0,91* | *0,6449* | *8,0867* | *42379,60* | *27332,66* |
| *598* | *0,95* | *0,5033* | *8,1880* | *42910,27* | *21597,07* |

*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* | *0,47* | *0,53* | *0,9998* | *10,552* | *55299,19* | *55289,05* |
| *323* | *0,51* | *0,49* | *0,9992* | *10,1475* | *53179,53* | *53137,79* |
| *348* | *0,55* | *0,45* | *0,9975* | *9,7729* | *51216,13* | *51086,1* |
| *373* | *0,59* | *0,41* | *0,9934* | *9,4299* | *49418,83* | *49091,27* |
| *398* | *0,63* | *0,37* | *0,9853* | *9,1199* | *47794,21* | *47093,38* |
| *423* | *0,67* | *0,33* | *0,9715* | *8,8438* | *46347,12* | *45025,66* |
| *448* | *0,71* | *0,29* | *0,9499* | *8,6025* | *45082,52* | *42822,98* |
| *473* | *0,75* | *0,25* | *0,9186* | *8,3974* | *44007,78* | *40424,33* |
| *498* | *0,79* | *0,21* | *0,8755* | *8,231* | *43135,84* | *37767,21* |
| *523* | *0,83* | *0,17* | *0,8183* | *8,1078* | *42490,04* | *34771,52* |
| *548* | *0,87* | *0,13* | *0,7433* | *8,0359* | *42112,97* | *31304,44* |
| *573* | *0,91* | *0,09* | *0,6438* | *8,0308* | *42086,27* | *27094,47* |
| *598* | *0,95* | *0,05* | *0,5035* | *8,1273* | *42592,24* | *21443,41* |

*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.



***2,3,4-Триметилпентан***

;

;







*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 вешества при температуре 730К. и давлении 100атм.

***2,3,4-Триметилпентан***

*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=114,23 г/моль молярная масса вещества; - изобарная теплоемкость; R=1,987.*

**

*;*

**

*Модифицированная корреляция Эйкена.*

**

*где  взято из задания №9; М=114,23 г/моль молярная масса вещества; - изобарная теплоемкость; R=1,987.*

**

*;*

**

*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.*

***2,3,4-Триметилпентан***

*, выбираем уравнение:*

**

 **

*Где*  - критическая температура давление объем и молярная масса соответственно.

, *, .*