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:

Самара 2008 г.

Задание 19А

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.*

***3,4,4-Триметилгептан***

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

поправки на гош взаимодействие

*R=C6H13*

*R1=C2H5, R2=C3H7*

Вводим 7 поправок «алкил-алкил»

Поправка на симметрию:

,

Поправка на смешение конформеров:

*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)* | *1* | *-7.95* | *-7.95* | *-50.52* | *-50.52* | *19.000* | *19* |
| *С-(4С)* | *1* | *2.09* | *2.09* | *-146.92* | *-146.92* | *18.29* | *18.29* |
| *СН2-(2С)* | *3* | *-20.64* | *-61.92* | *39.43* | *118.29* | *23.02* | *69.06* |
| ∑ | 10 |   | -278.73 |   | 557.3 |   | 235.9 |
| *гош-поправка* | *7* | *3.35* | *23.45* | *для вкладов в энтропию и теплоемкость для данной поправки в справочке не приведены значения* |
| *поправка на симм.* | *σнар=1* |  | *σвнутр=243* |  | *-45.669* |  |  |
| *попр. на смешение* | *N=* | *1* |  |  | *5.76* |  |  |
|  |  | *ΔHo* | *-255.28* | *ΔSo* | *517.391* | *ΔСpo* | *235.9* |

Рассчитаем для этого соединения энтальпию и энтропию образования методом Татевского по связям по первому уровню приближения.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | *Кол-во вкладов* | *Парц. вклад, кДж/моль*  | *Вклад в энтальпию**кДж/моль* | *Парц. вклад, Дж/К\*моль*  | *Вклад в энтропию Дж/К\*моль* |
| *(С1-С2)1* | *2* | *-52,581* | *-105,162* | *147,74* | *295,48* |
| *(С1-С3)1* | 1 | *-45,286* | *-45,286* | *111,08* | *111,08* |
| *(С1-С4)1* | 2 | *-41,286* | *-82,572* | *92,46* | *184,92* |
| *(С2-С3)1* | 2 | *-10,686* | *-21,372* | *0,41* | *0,82* |
| *(С3-С4)1* | 2 | *13,362* | *26,724* | *-63,04* | *-126,08* |
| *∑* | *9* |  | *-227,668* |  | *466,22* |
|   |   | ΔHo | -227,668 | ΔSo | 466,220 |

***Циклогексан***

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

Вводим поправку на циклогексановый цикл.

*Таблица 2*

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | *Кол-во вкладов* | *Вклад*  | *Вклад в энтальпию, кДж/моль* | *Вклад* | *Вклад в энтропию Дж/К\*моль* | *Вклад* | *Вклад в т/емкость Дж/К\*моль* |
| *СН2-(2С)* | *6* | *-20.64* | *-123.84* | *39.43* | *236.58* | *23.02* | *138.12* |
| *поправка на цикл* | *1* |  |  | *78.69* | *78.69* | *-24.28* | *-24.28* |
| *∑* | *6* |  | *-123.84* |  | *315.27* |  | *113.84* |
|  |  | *ΔHo* | *-123.84* | *So* | *315.270* | *Сpo* | *113.840* |

Рассчитаем для этого соединения энтальпию и энтропию образования методом Татевского по связям по первому уровню приближения.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|   | Кол-во вкладов | Парц. вклад, кДж/моль  | Вклад в энтальпиюкДж/моль | Парц. вклад, Дж/К\*моль  | Вклад в энтропию Дж/К\*моль |
| *(С2-С2)1* | *6* | *-20,628* | *-123,768* | *39,03* | *234,18* |
| *∑* | *6* |  | *-123,768* |  | *234,18* |
| *поправка на цикл* |   |   |   |   | 76,89 |
|  |  | *ΔHo* | *-123,768* | *ΔSo* | *311,070* |

***Этилнонаноат***

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

Поправки на гош – взаимодействие:

Вводим 1 поправку «алкил-алкил». 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) | 2 | -42.19 | -84.38 | 127.29 | 254.58 | 25.91 | 51.82 |
| О-(С,С0) | 1 | -180.41 | -180.41 | 35.12 | 35.12 | 11.64 | 11.64 |
| 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 |
| СН2-(2С) | *6* | *-20.64* | *-123.84* | *39.43* | *236.58* | *23.02* | *138.12* |
| *СН2-(С,СО)* | *1* | *-21.77* | *-21.77* | *40.18* | *40.18* | *25.95* | *25.95* |
| *∑* | *12* |  | *-591.17* |  | *627.48* |  | *273.4* |
| *поправка на симм.* | *σнар=1* |  | *σвнутр=9* |  | *-18.268* |  |  |
|  |  | *ΔHo* | *-591.17* | *So* | *609.212* | *Сpo* | *273.400* |

***орто-Толуидин***

Из таблицы Бенсона возьмем парциальные вклады для и , вводим набор поправок. Поправка на симметрию:

Введем поправку на орто-взаимодействие типа «полярный/неполярный»

*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* |
| *NН2-(Сb)* | *1* | *20.09* | *20.09* | *124.36* | *124.36* | *15.03* | *15.03* |
| *Cb-C* | *1* | *23.06* | *23.06* | *-32.19* | *-32.19* | *11.18* | *11.18* |
| *Cb-N* | *1* | *-2.09* | *-2.09* | *40.56* | *40.56* | *18.42* | *18.42* |
| *Cb-H* | *4* | *13.81* | *55.24* | *48.26* | *193.04* | *17.16* | *68.64* |
| *∑* | *8* |  | *54.11* |  | *453.06* |  | *126.83* |
| *орто-поправка* | *1* |  | *1.42* |  |  |  |  |
| *поправка на симм.* | *σнар=1* |  | *σвнутр=3* |  | *-9.134* |  |  |
|  |  | *ΔHo* | *55.53* | *So* | *443.926* | *Сpo* | *126.830* |

Рассчитаем для этого соединения энтальпию и энтропию образования методом Татевского по связям по второму уровню приближения.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|   | Кол-во вкладов | Парц. вклад, кДж/моль  | Вклад в энтальпию кДж/моль |
| (Cb-H)1 | *4* | *13,877* | *55,508* |
| Cb-NH2 | 1 | 18,42 | *18,42* |
| (Cb-C1)1 | 1 | -19,121 | *-19,121* |
| *∑* | *6* |  | *54,807* |
|  |   | ΔHo | 54,807 |

*Задание №2*

*Для первого соединения рассчитать и*

***3,4,4-Триметилгептан***

*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)* | *1* | *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)* | *3* | *23.02* | *29.09* | *34.53* | *39.14* | *43.820* | *46.34* |
| ∑ | 10 | *235.900* | *302.150* | *364.160* | *410.960* | *460.516* |  |
| С | 10 | 28.836 | 29.179 | 29.259 | 29.321 | 29.511 | 29.614 |
| Н2 | 11 | 403.636 | 440.259 | 468.119 | 491.151 | 512.824 |  |
| *∑* |  | 28.836 | 29.179 | 29.259 | 29.321 | 29.511 | 29.614 |

,

*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)* | *1* | *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)* | *3* | *23.02* | *29.09* | *34.53* | *39.14* | *43.820* | *46.34* |
| ∑ | 10 | *235.900* | *302.150* | *364.160* | *410.960* | *460.516* |  |

*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.

***3,4,4-Триметилгептан***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *кол-во* | *ΔT* | *ΔP* | *ΔV* |
| *СН3-(С)* | *5* | *0.1* | *1.135* | *275* |
| *СН2-(2С)* | *3* | *0.06* | *0.681* | *165* |
| *СН-(3С)* | *1* | *0.012* | *0.21* | *51* |
| *С-(4С)* | *1* | *0* | *0.21* | *41* |
| ∑ | 10 | *0.172* | *2.236* | *532* |

*Критическая температура.*

*Критическое давление.*

.

*Критический объем.*

*Ацентрический фактор.*

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

;

***Циклогексан***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *к-во* |

|  |
| --- |
|  |

 |

|  |
| --- |
|  |

 |

|  |
| --- |
|  |

 |
| *(CH2)цикл* | *6* | *0.078* | *1.104* | *267* |
| *Сумма* | *6* | *0.078* | *1.104* | *267* |

*Критическая температура.*

*Критическое давление.*

*Критический объем.*

*Ацентрический фактор.*

***Этилнонаноат***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *кол-во* | *ΔT* | *ΔP* | *ΔV* |
| *CН3* | *2* | *0.04* | *0.454* | *110* |
| *CH2* | *8* | *0.16* | *1.816* | *440* |
| *-CОО-* | *1* | *0.047* | *0.47* | *80* |
| *Сумма* | *11* | *0.247* | *2.74* | *630* |

*Критическая температура.*

*Критическое давление.*

;

*Критический объем.*

*Ацентрический фактор.*

***орто-Толуидин***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *кол-во* | *ΔT* | *ΔP* | *ΔV* |
| *СН3-* | *1* | *0.02* | *0.227* | *55* |
| *-CH= (цикл.)* | *4* | *0.044* | *0.616* | *148* |
| *>C= (цикл.)* | *2* | *0.022* | *0.308* | *72* |
| *NH2 -* | *1* | *0.031* | *0.095* | *28* |
| *Сумма* | *8* | *0.117* | *1.246* | *303* |

*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.

***3,4,4-Триметилгептан***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *кол-во* | *ΔT* | *ΔP* | *ΔV* |
| *СН3-* | *5* | *0.0705* | *-0.006* | *325* |
| *,-СН2-* | *3* | *0.0567* | *0* | *168* |
| *>СН-* | *1* | *0.0164* | *0.002* | *41* |
| *>С<* | *1* | *0.0067* | *0.0043* | *27* |
| ∑ | 10 | *0.1503* | *0.0003* | *561* |

*Критическая температура.*

*Критическое давление.*

;

***Циклогексан***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *к-во* | *ΔT* | *ΔP* | *ΔV* |
| *(CH2)цикл* | *6* | 0.06 | 0.015 | 288 |
| *Сумма* | 6 | 0.06 | 0.015 | 288 |

*Критическая температура.*

*Критическое давление.*

;

***Этилнонаноат***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *кол-во* | *ΔT* | *ΔP* |
| *CН3* | *2* | *0.0282* | *-0.0024* |
| *CH2* | *8* | *0.1512* | *0* |
| *-CОО-* | *1* | *0.0481* | *0.0005* |
| *Сумма* | *11* | *0.2275* | *-0.0019* |

*Критическая температура.*

*Критическое давление.*

;

***орто-Толуидин***

Выпишем парциальные вклады для температуры, давления и объема:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Группа* | *кол-во* | *ΔT* | *ΔP* |
| *СН3-* | *3* | *0.0423* | *-0.0036* |
| *(=CH)(ds)* | *3* | *0.0246* | *0.0033* |
| *(=C)(ds)* | *2* | *0.0286* | *0.0016* |
| *NH2* | *1* | *0.0243* | *0.0109* |
| *Сумма* | *9* | *0.1198* | *0.0122* |

*Критическая температура.*

*Критическое давление.*

;

*Задание №4*

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

*Энтальпия*

***3,4,4-Триметилгептан***

*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.*

*Критические параметры вещества определяем методом Лидерсена.*

 *; 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.*

*Теплоемкость.*

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

*Критические параметры вещества определяем методом Лидерсена.*

 *; 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.*

*Критические параметры вещества определяем методом Лидерсена.*

 *; R=8,314Дж/моль\*К*

*Находим приведенные температуру и давление:*

Коэффициент сжимаемости найдем из разложения Питцера:

путем интерполяции находим и.

=0,8190;

=0,2356;

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.*

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.

***3,4,4-Триметилгептан***

 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* |
| *145,1546* | *0,3* | *0,3252* | *254,7858* | *0,2646* | 82.8474 | *1,9149* |
| *169,347* | *0,35* | *0,3331* |  | *0,2585* | *84,87309* | *1,6765* |
| *193,5395* | *0,4* | *0,3421* |  | *0,2521* | *87,1724* | *1,6322* |
| *217,7319* | *0,45* | *0,3520* |  | *0,2456* | *89,67771* | *1,5866* |
| *241,9243* | *0,5* | *0,3625* |  | *0,2387* | *92,364* | *1,5405* |
| *266,1168* | *0,55* | *0,3738* |  | *0,2317* | *95,24881* | *1,4938* |
| *290,3092* | *0,6* | *0,3862* |  | *0,2244* | *98,39231* | *1,4461* |
| *314,5016* | *0,65* | *0,3999* |  | *0,2168* | *101,8972* | *1,3964* |
| *338,6941* | *0,7* | *0,4157* |  | *0,2090* | *105,9088* | *1,3435* |
| *362,8865* | *0,75* | *0,4341* |  | *0,2010* | *110,6151* | *1,2863* |
| *387,0789* | *0,8* | *0,4563* |  | *0,1927* | *116,2464* | *1,2240* |
| *411,2714* | *0,85* | *0,4883* |  | *0,1842* | *124,4013* | *1,1438* |
| *435,4638* | *0,9* | *0,5289* |  | *0,1754* | *134,749* | *1,0559* |
| *449,9793* | *0,93* | *0,5627* |  | *0,1701* | *143,3613* | *0,9925* |
| *459,6563* | *0,95* | *0,5941* |  | *0,1664* | *151,3625* | *0,9400* |
| *469,3332* | *0,97* | *0,6410* |  | *0,1628* | *163,3205* | *0,8712* |
| *474,1717* | *0,98* | *0,6771* |  | *0,1609* | *172,5171* | *0,8248* |
| *479,0102* | *0,99* | *0,7348* |  | *0,1591* | *187,2219* | *0,7600* |

***Циклогексан***

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *T, К* | *Tr*  | *Vr(0)*  | *Vsc* | *Г*  | *Vs*  | *ρs ,г/см3* |
| *166,1627* | *0,3* | *0,3252* | *591,4223* | *0,2646* | *181,6158* | *0,4634* |
| *193,8565* | *0,35* | *0,3331* |  | *0,2585* | *186,3089* | *0,4517* |
| *221,5503* | *0,4* | *0,3421* |  | *0,2521* | *191,6258* | *0,4392* |
| *249,244* | *0,45* | *0,3520* |  | *0,2456* | *197,421* | *0,4263* |
| *276,9378* | *0,5* | *0,3625* |  | *0,2387* | *203,6421* | *0,4133* |
| *304,6316* | *0,55* | *0,3738* |  | *0,2317* | *210,3308* | *0,4001* |
| *332,3254* | *0,6* | *0,3862* |  | *0,2244* | *217,6231* | *0,3867* |
| *360,0192* | *0,65* | *0,3999* |  | *0,2168* | *225,7505* | *0,3728* |
| *387,7129* | *0,7* | *0,4157* |  | *0,2090* | *235,0407* | *0,3581* |
| *415,4067* | *0,75* | *0,4341* |  | *0,2010* | *245,9186* | *0,3422* |
| *443,1005* | *0,8* | *0,4563* |  | *0,1927* | *258,9074* | *0,3251* |
| *470,7943* | *0,85* | *0,4883* |  | *0,1842* | *277,5871* | *0,3032* |
| *498,4881* | *0,9* | *0,5289* |  | *0,1754* | *301,2526* | *0,2794* |
| *515,1043* | *0,93* | *0,5627* |  | *0,1701* | *320,8825* | *0,2623* |
| *526,1818* | *0,95* | *0,5941* |  | *0,1664* | *339,0594* | *0,2482* |
| *537,2594* | *0,97* | *0,6410* |  | *0,1628* | *366,1384* | *0,2299* |
| *542,7981* | *0,98* | *0,6771* |  | *0,1609* | *386,9111* | *0,2175* |
| *548,3369* | *0,99* | *0,7348* |  | *0,1591* | *420,0599* | *0,2004* |

***Этилнонаноат***

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *T, К* | *Tr*  | *Vr(0)*  | *Vsc* | *Г*  | *Vs*  | *ρs ,г/см3* |
| *202,2* | *0,3* | *0,3252* | *632,1063* | *0,2646* | *171,6056* | *1,0856* |
| *235,9* | *0,35* | *0,3331* |  | *0,2585* | *176,6025* | *1,0549* |
| *269,6* | *0,4* | *0,3421* |  | *0,2521* | *182,2422* | *1,0222* |
| *303,3* | *0,45* | *0,3520* |  | *0,2456* | *188,3933* | *0,9889* |
| *337* | *0,5* | *0,3625* |  | *0,2387* | *195,0121* | *0,9553* |
| *370,7* | *0,55* | *0,3738* |  | *0,2317* | *202,1446* | *0,9216* |
| *404,4* | *0,6* | *0,3862* |  | *0,2244* | *209,929* | *0,8874* |
| *438,1* | *0,65* | *0,3999* |  | *0,2168* | *218,5978* | *0,8522* |
| *471,8* | *0,7* | *0,4157* |  | *0,2090* | *228,4812* | *0,8154* |
| *505,5* | *0,75* | *0,4341* |  | *0,2010* | *240,0097* | *0,7762* |
| *539,2* | *0,8* | *0,4563* |  | *0,1927* | *253,7176* | *0,7343* |
| *572,9* | *0,85* | *0,4883* |  | *0,1842* | *273,1566* | *0,6820* |
| *606,6* | *0,9* | *0,5289* |  | *0,1754* | *297,7048* | *0,6258* |
| *626,82* | *0,93* | *0,5627* |  | *0,1701* | *317,9245* | *0,5860* |
| *640,3* | *0,95* | *0,5941* |  | *0,1664* | *336,5187* | *0,5536* |
| *653,78* | *0,97* | *0,6410* |  | *0,1628* | *364,0321* | *0,5118* |
| *660,52* | *0,98* | *0,6771* |  | *0,1609* | *385,0244* | *0,4839* |
| *667,26* | *0,99* | *0,7348* |  | *0,1591* | *418,3813* | *0,4453* |

***орто-Толуидин***

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *T, К* | *Tr*  | *Vr(0)*  | *Vsc* | *Г*  | *Vs*  | *ρs ,г/см3* |
| *208,2* | *0,3* | *0,3252* | *373,4859* | *0,2646* | *107,2399* | *0,9992* |
| *242,9* | *0,35* | *0,3331* |  | *0,2585* | *110,1973* | *0,9724* |
| *277,6* | *0,4* | *0,3421* |  | *0,2521* | *113,5407* | *0,9438* |
| *312,3* | *0,45* | *0,3520* |  | *0,2456* | *117,1863* | *0,9144* |
| *347* | *0,5* | *0,3625* |  | *0,2387* | *121,1049* | *0,8848* |
| *381,7* | *0,55* | *0,3738* |  | *0,2317* | *125,3235* | *0,8550* |
| *416,4* | *0,6* | *0,3862* |  | *0,2244* | *129,9254* | *0,8248* |
| *451,1* | *0,65* | *0,3999* |  | *0,2168* | *135,052* | *0,7934* |
| *485,8* | *0,7* | *0,4157* |  | *0,2090* | *140,9036* | *0,7605* |
| *520,5* | *0,75* | *0,4341* |  | *0,2010* | *147,7407* | *0,7253* |
| *555,2* | *0,8* | *0,4563* |  | *0,1927* | *155,8855* | *0,6874* |
| *589,9* | *0,85* | *0,4883* |  | *0,1842* | *167,5077* | *0,6397* |
| *624,6* | *0,9* | *0,5289* |  | *0,1754* | *182,2059* | *0,5881* |
| *645,42* | *0,93* | *0,5627* |  | *0,1701* | *194,3504* | *0,5514* |
| *659,3* | *0,95* | *0,5941* |  | *0,1664* | *205,5534* | *0,5213* |
| *673,18* | *0,97* | *0,6410* |  | *0,1628* | *222,1809* | *0,4823* |
| *680,12* | *0,98* | *0,6771* |  | *0,1609* | *234,8985* | *0,4562* |
| *687,06* | *0,99* | *0,7348* |  | *0,1591* | *255,146* | *0,4200* |

*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.

***3,4,4-Триметилгептан***

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* | *0.62* | *-3.2426* | *-3.4212* | *0.0103* | *0.2209* |
| *323* | *0.67* | *-2.5715* | *-2.5126* | *0.0287* | *0.6157* |
| *348* | *0.72* | *-2.0027* | *-1.8062* | *0.0668* | *1.4317* |
| *373* | *0.77* | *-1.5153* | *-1.2564* | *0.1347* | *2.8880* |
| *398* | *0.82* | *-1.0934* | *-0.8297* | *0.2425* | *5.2005* |
| *423* | *0.87* | *-0.7251* | *-0.5007* | *0.3984* | *8.5437* |
| *448* | *0.93* | *-0.4012* | *-0.2505* | *0.6073* | *13.0216* |
| *473* | *0.98* | *-0.1144* | *-0.0640* | *0.8699* | *18.6535* |

*Корреляция Риделя*





Где приведенная температура кипения.







|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,62* | *0,0084* | *0,1802* |
| *323* | *0,67* | *0,0233* | *0,4989* |
| *348* | *0,72* | *0,0541* | *1,1605* |
| *373* | *0,77* | *0,1101* | *2,3605* |
| *398* | *0,82* | *0,2019* | *4,3301* |
| *423* | *0,87* | *0,3423* | *7,3405* |
| *448* | *0,93* | *0,5471* | *11,7318* |
| *473* | *0,98* | *0,8385* | *17,9804* |

*Метод Амброуза-Уолтона.*

где



|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *τ* | *f(0)* | *f(1)* | *f(2)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,62* | *0,38* | *-3,3292* | *-3,6131* | *-0,0601* | *0,0087* | *0,1862* |
| *323* | *0,67* | *0,33* | *-2,6673* | *-2,7485* | *-0,0168* | *0,0237* | *0,5090* |
| *348* | *0,72* | *0,28* | *-2,1019* | *-2,0668* | *0,0067* | *0,0547* | *1,1726* |
| *373* | *0,77* | *0,23* | *-1,6118* | *-1,5198* | *0,0146* | *0,1106* | *2,3717* |
| *398* | *0,82* | *0,18* | *-1,1810* | *-1,0733* | *0,0116* | *0,2024* | *4,3402* |
| *423* | *0,87* | *0,13* | *-0,7973* | *-0,7022* | *0,0028* | *0,3428* | *7,3512* |
| *448* | *0,93* | *0,07* | *-0,4509* | *-0,3873* | *-0,0061* | *0,5473* | *11,7360* |
| *473* | *0,98* | *0,02* | *-0,1327* | *-0,1120* | *-0,0069* | *0,8375* | *17,9576* |

***Циклогексан***

*Корреляция Ли-Кеслера*

Корреляция Ли-Кеслера.

Она основана на использовании принципа соответственных состояний.

Давление *Pvp*определяем из приведенного давления насыщенных паров *Pvp,r* и экспериментального критического давления данного вещества, *bar*.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *f(0)* | *f(1)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0.54* | *-4.5073* | *-5.3098* | *0.0036* | *0.1448* |
| *323* | *0.58* | *-3.7270* | *-4.1202* | *0.0100* | *0.4072* |
| *348* | *0.63* | *-3.0649* | *-3.1736* | *0.0237* | *0.9659* |
| *373* | *0.67* | *-2.4968* | *-2.4162* | *0.0492* | *2.0033* |
| *398* | *0.72* | *-2.0045* | *-1.8083* | *0.0917* | *3.7306* |
| *423* | *0.76* | *-1.5743* | *-1.3199* | *0.1564* | *6.3651* |
| *448* | *0.81* | *-1.1954* | *-0.9283* | *0.2483* | *10.1053* |
| *473* | *0.85* | *-0.8597* | *-0.6158* | *0.3713* | *15.1107* |
| *498* | *0.90* | *-0.5602* | *-0.3684* | *0.5280* | *21.4882* |
| *523* | *0.94* | *-0.2918* | *-0.1752* | *0.7195* | *29.2856* |
| *548* | *0.99* | *-0.0500* | *-0.0272* | *0.9457* | *38.4919* |

*Корреляция Риделя.*





где приведенная температура кипения.



|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *А* | *В* | *С* | *D* | *θ* | *αc* | *ψ* |
| *9,03058* | *9,28859* | *-3,9997* | *0,25802* | *-0,258* | *6,83696* | *2,462155* |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,54* | *0.0032* | *0.1310* |
| *323* | *0,58* | *0.0089* | *0.3621* |
| *348* | *0,63* | *0.0208* | *0.8481* |
| *373* | *0,67* | *0.0428* | *1.7439* |
| *398* | *0,72* | *0.0795* | *3.2347* |
| *423* | *0,76* | *0.1358* | *5.5260* |
| *448* | *0,81* | *0.2172* | *8.8392* |
| *473* | *0,85* | *0.3296* | *13.4166* |
| *498* | *0,90* | *0.4801* | *19.5413* |
| *523* | *0,94* | *0.6775* | *27.5738* |
| *548* | *0,99* | *0.9340* | *38.0135* |

*Корреляция Амброуза-Уолтона.*

где



|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *τ* | *f(0)* | *f(1)* | *f(2)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0.54* | *0.46* | *-4.5713* | *-5.4122* | *-0.1698* | *0.0032* | *0.1319* |
| *323* | *0.58* | *0.42* | *-3.8054* | *-4.2768* | *-0.0989* | *0.0089* | *0.3625* |
| *348* | *0.63* | *0.37* | *-3.1544* | *-3.3780* | *-0.0473* | *0.0207* | *0.8438* |
| *373* | *0.67* | *0.33* | *-2.5933* | *-2.6563* | *-0.0129* | *0.0424* | *1.7272* |
| *398* | *0.72* | *0.28* | *-2.1037* | *-2.0688* | *0.0066* | *0.0785* | *3.1969* |
| *423* | *0.76* | *0.24* | *-1.6715* | *-1.5842* | *0.0143* | *0.1342* | *5.4627* |
| *448* | *0.81* | *0.19* | *-1.2860* | *-1.1791* | *0.0131* | *0.2151* | *8.7556* |
| *473* | *0.85* | *0.15* | *-0.9386* | *-0.8360* | *0.0065* | *0.3275* | *13.3283* |
| *498* | *0.90* | *0.10* | *-0.6223* | *-0.5409* | *-0.0020* | *0.4782* | *19.4646* |
| *523* | *0.94* | *0.06* | *-0.3312* | *-0.2824* | *-0.0079* | *0.6759* | *27.5095* |
| *548* | *0.99* | *0.01* | *-0.0587* | *-0.0495* | *-0.0041* | *0.9329* | *37.9709* |

***Этилнонаноат***

*Корреляция Ли-Кесслера.*

Корреляция Ли-Кесслера.

Она основана на использовании принципа соответственных состояний.

Давление *Pvp*определяем из приведенного давления насыщенных паров *Pvp,r* и экспериментального критического давления данного вещества, *bar*.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *f(0)* | *f(1)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0.44* | *-6.7350* | *-9.0416* | *0.0000* | *0.0001* |
| *323* | *0.48* | *-5.7653* | *-7.3645* | *0.0000* | *0.0007* |
| *348* | *0.52* | *-4.9412* | *-6.0010* | *0.0002* | *0.0037* |
| *373* | *0.55* | *-4.2329* | *-4.8831* | *0.0007* | *0.0148* |
| *398* | *0.59* | *-3.6182* | *-3.9603* | *0.0024* | *0.0480* |
| *423* | *0.63* | *-3.0803* | *-3.1948* | *0.0066* | *0.1312* |
| *448* | *0.66* | *-2.6059* | *-2.5573* | *0.0155* | *0.3108* |
| *473* | *0.70* | *-2.1848* | *-2.0253* | *0.0327* | *0.6550* |
| *498* | *0.74* | *-1.8088* | *-1.5808* | *0.0625* | *1.2506* |
| *523* | *0.78* | *-1.4712* | *-1.2097* | *0.1099* | *2.1977* |
| *548* | *0.81* | *-1.1667* | *-0.9003* | *0.1799* | *3.5983* |
| *573* | *0.85* | *-0.8908* | *-0.6433* | *0.2773* | *5.5456* |
| *598* | *0.89* | *-0.6397* | *-0.4310* | *0.4056* | *8.1123* |
| *623* | *0.92* | *-0.4105* | *-0.2571* | *0.5672* | *11.3430* |
| *648* | *0.96* | *-0.2004* | *-0.1162* | *0.7624* | *15.2486* |

*Корреляция Риделя*





где приведенная температура кипения.



|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *А* | *В* | *С* | *D* | *θ* | *αc* | *ψ* |
| *15,0009* | *15,4295* | *-9,1285* | *0,4286* | *-0,4286* | *8,87251* | *0,816197* |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,44* | *0.0000* | *0.0001* |
| *323* | *0,48* | *0.0000* | *0.0006* |
| *348* | *0,52* | *0.0001* | *0.0029* |
| *373* | *0,55* | *0.0006* | *0.0114* |
| *398* | *0,59* | *0.0018* | *0.0367* |
| *423* | *0,63* | *0.0050* | *0.0993* |
| *448* | *0,66* | *0.0117* | *0.2343* |
| *473* | *0,70* | *0.0247* | *0.4938* |
| *498* | *0,74* | *0.0474* | *0.9479* |
| *523* | *0,78* | *0.0842* | *1.6843* |
| *548* | *0,81* | *0.1404* | *2.8081* |
| *573* | *0,85* | *0.2221* | *4.4426* |
| *598* | *0,89* | *0.3368* | *6.7356* |
| *623* | *0,92* | *0.4936* | *9.8713* |
| *648* | *0,96* | *0.7046* | *14.0926* |

Корреляция Амброуза-Уолтона.

где



|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *τ* | *f(0)* | *f(1)* | *f(2)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0.44* | *0.56* | *-6.7645* | *-9.0581* | *-0.3883* | *0.0000* | *0.0001* |
| *323* | *0.48* | *0.52* | *-5.8078* | *-7.4026* | *-0.2935* | *0.0000* | *0.0006* |
| *348* | *0.52* | *0.48* | *-4.9973* | *-6.0773* | *-0.2119* | *0.0002* | *0.0031* |
| *373* | *0.55* | *0.45* | *-4.3019* | *-5.0038* | *-0.1440* | *0.0006* | *0.0122* |
| *398* | *0.59* | *0.41* | *-3.6985* | *-4.1249* | *-0.0898* | *0.0019* | *0.0388* |
| *423* | *0.63* | *0.37* | *-3.1695* | *-3.3981* | *-0.0484* | *0.0052* | *0.1041* |
| *448* | *0.66* | *0.34* | *-2.7013* | *-2.7913* | *-0.0187* | *0.0122* | *0.2433* |
| *473* | *0.70* | *0.30* | *-2.2836* | *-2.2799* | *0.0007* | *0.0254* | *0.5082* |
| *498* | *0.74* | *0.26* | *-1.9077* | *-1.8451* | *0.0113* | *0.0484* | *0.9684* |
| *523* | *0.78* | *0.22* | *-1.5672* | *-1.4721* | *0.0147* | *0.0855* | *1.7109* |
| *548* | *0.81* | *0.19* | *-1.2565* | *-1.1492* | *0.0128* | *0.1420* | *2.8398* |
| *573* | *0.85* | *0.15* | *-0.9710* | *-0.8672* | *0.0073* | *0.2239* | *4.4772* |
| *598* | *0.89* | *0.11* | *-0.7070* | *-0.6183* | *0.0003* | *0.3383* | *6.7669* |
| *623* | *0.92* | *0.08* | *-0.4610* | *-0.3962* | *-0.0059* | *0.4943* | *9.8860* |
| *648* | *0.96* | *0.04* | *-0.2297* | *-0.1948* | *-0.0083* | *0.7036* | *14.0725* |

***орто-Толуидин***

*Корреляция Ли-Кеслера.*

Корреляция Ли-Кеслера.

Она основана на использовании принципа соответственных состояний.

Давление *Pvp*определяем из приведенного давления насыщенных паров *Pvp,r* и экспериментального критического давления данного вещества, *bar.*

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *f(0)* | *f(1)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0.43* | *-7.1086* | *-9.7060* | *0.0000* | *0.0005* |
| *323* | *0.47* | *-6.1074* | *-7.9479* | *0.0001* | *0.0027* |
| *348* | *0.50* | *-5.2564* | *-6.5151* | *0.0003* | *0.0117* |
| *373* | *0.54* | *-4.5248* | *-5.3373* | *0.0011* | *0.0406* |
| *398* | *0.57* | *-3.8898* | *-4.3621* | *0.0031* | *0.1166* |
| *423* | *0.61* | *-3.3339* | *-3.5504* | *0.0077* | *0.2887* |
| *448* | *0.65* | *-2.8436* | *-2.8721* | *0.0168* | *0.6317* |
| *473* | *0.68* | *-2.4084* | *-2.3035* | *0.0333* | *1.2479* |
| *498* | *0.72* | *-2.0196* | *-1.8262* | *0.0603* | *2.2622* |
| *523* | *0.75* | *-1.6705* | *-1.4254* | *0.1017* | *3.8132* |
| *548* | *0.79* | *-1.3555* | *-1.0891* | *0.1611* | *6.0415* |
| *573* | *0.83* | *-1.0700* | *-0.8076* | *0.2420* | *9.0762* |
| *598* | *0.86* | *-0.8103* | *-0.5729* | *0.3473* | *13.0234* |

*Корреляция Риделя*





где приведенная температура кипения.



|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *А* | *В* | *С* | *D* | *θ* | *αc* | *ψ* |
| *12,413* | *12,7677* | *-6,9055* | *0,35466* | *-0,3547* | *7,9902* | *1,606207* |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0,43* | *0.0000* | *0.0004* |
| *323* | *0,47* | *0.0001* | *0.0022* |
| *348* | *0,50* | *0.0003* | *0.0095* |
| *373* | *0,54* | *0.0009* | *0.0326* |
| *398* | *0,57* | *0.0025* | *0.0931* |
| *423* | *0,61* | *0.0061* | *0.2292* |
| *448* | *0,65* | *0.0133* | *0.5000* |
| *473* | *0,68* | *0.0263* | *0.9872* |
| *498* | *0,72* | *0.0479* | *1.7946* |
| *523* | *0,75* | *0.0812* | *3.0453* |
| *548* | *0,79* | *0.1301* | *4.8797* |
| *573* | *0,83* | *0.1988* | *7.4549* |
| *598* | *0,86* | *0.2920* | *10.9493* |

*Корреляция Амброуза-Уолтона.*

где



|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Т* | *Тr* | *τ* | *f(0)* | *f(1)* | *f(2)* | *Pvp,r* | *Pvp, bar* |
| *298* | *0.43* | *0.57* | *-7.1342* | *-9.7215* | *-0.4236* | *0.0000* | *0.0004* |
| *323* | *0.47* | *0.53* | *-6.1449* | *-7.9754* | *-0.3273* | *0.0001* | *0.0024* |
| *348* | *0.50* | *0.50* | *-5.3071* | *-6.5748* | *-0.2430* | *0.0003* | *0.0104* |
| *373* | *0.54* | *0.46* | *-4.5885* | *-5.4385* | *-0.1715* | *0.0009* | *0.0353* |
| *398* | *0.57* | *0.43* | *-3.9652* | *-4.5070* | *-0.1130* | *0.0027* | *0.0995* |
| *423* | *0.61* | *0.39* | *-3.4191* | *-3.7358* | *-0.0670* | *0.0064* | *0.2417* |
| *448* | *0.65* | *0.35* | *-2.9362* | *-3.0914* | *-0.0326* | *0.0139* | *0.5207* |
| *473* | *0.68* | *0.32* | *-2.5057* | *-2.5482* | *-0.0087* | *0.0271* | *1.0171* |
| *498* | *0.72* | *0.28* | *-2.1188* | *-2.0863* | *0.0062* | *0.0489* | *1.8331* |
| *523* | *0.75* | *0.25* | *-1.7686* | *-1.6903* | *0.0134* | *0.0824* | *3.0909* |
| *548* | *0.79* | *0.21* | *-1.4496* | *-1.3479* | *0.0145* | *0.1315* | *4.9311* |
| *573* | *0.83* | *0.17* | *-1.1570* | *-1.0493* | *0.0112* | *0.2003* | *7.5116* |
| *598* | *0.86* | *0.14* | *-0.8869* | *-0.7866* | *0.0052* | *0.2936* | *11.0098* |

*Задание №8*

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

***3,4,4-Триметилгептан***

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* | *0,62* | *0.9777* | *8.2506* | *33189.78* | *32449.87* |
| *323* | *0,67* | *0.9505* | *7.9646* | *32039.38* | *30454.05* |
| *348* | *0,72* | *0.9058* | *7.7092* | *31011.88* | *28091.58* |
| *373* | *0,77* | *0.8402* | *7.4981* | *30162.55* | *25343.94* |
| *398* | *0,82* | *0.7512* | *7.3495* | *29564.98* | *22207.95* |
| *423* | *0,87* | *0.6354* | *7.2874* | *29315.34* | *18625.74* |
| *448* | *0,93* | *0.4847* | *7.3426* | *29537.16* | *14317.40* |
| *473* | *0,98* | *0.2623* | *7.5538* | *30386.83* | *7971.58* |

*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* | *0,62* | *0,9819* | *8,2422* | *33155,96* | *32554,32* |
| *323* | *0,67* | *0,9601* | *7,9668* | *32048,27* | *30769,39* |
| *348* | *0,72* | *0,9244* | *7,7217* | *31062,05* | *28713,96* |
| *373* | *0,77* | *0,8716* | *7,5203* | *30251,93* | *26367,94* |
| *398* | *0,82* | *0,7982* | *7,3807* | *29690,65* | *23699,88* |
| *423* | *0,87* | *0,6983* | *7,3267* | *29473,26* | *20581,90* |
| *448* | *0,93* | *0,5574* | *7,3885* | *29721,85* | *16568,02* |
| *473* | *0,98* | *0,3200* | *7,6046* | *30590,99* | *9790,25* |

*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* | *0,62* | *0,38* | *0,9812* | *8,1354* | *32726,26* | *32112,18* |
| *323* | *0,67* | *0,33* | *0,9593* | *7,8663* | *31643,77* | *30355,10* |
| *348* | *0,72* | *0,28* | *0,9236* | *7,6463* | *30758,76* | *28408,55* |
| *373* | *0,77* | *0,23* | *0,8710* | *7,4771* | *30078,28* | *26196,92* |
| *398* | *0,82* | *0,18* | *0,7977* | *7,3633* | *29620,59* | *23628,24* |
| *423* | *0,87* | *0,13* | *0,6978* | *7,3159* | *29429,80* | *20535,82* |
| *448* | *0,93* | *0,07* | *0,5572* | *7,3619* | *29614,99* | *16501,90* |
| *473* | *0,98* | *0,02* | *0,3218* | *7,5954* | *30554,27* | *9832,55* |

***Циклогексан***

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* | *0,54* | *0.9885* | *7.2198* | *33224.13* | *32843.11* |
| *323* | *0,58* | *0.9745* | *7.0476* | *32431.76* | *31604.78* |
| *348* | *0,63* | *0.9511* | *6.8847* | *31681.78* | *30131.21* |
| *373* | *0,67* | *0.9161* | *6.7350* | *30993.26* | *28391.73* |
| *398* | *0,72* | *0.8680* | *6.6043* | *30391.58* | *26380.48* |
| *423* | *0,76* | *0.8060* | *6.4996* | *29909.91* | *24107.04* |
| *448* | *0,81* | *0.7292* | *6.4303* | *29590.87* | *21578.13* |
| *473* | *0,85* | *0.6365* | *6.4080* | *29488.40* | *18768.10* |
| *498* | *0,90* | *0.5245* | *6.4475* | *29669.91* | *15562.17* |
| *523* | *0,94* | *0.3835* | *6.5667* | *30218.64* | *11589.23* |
| *548* | *0,99* | *0.1597* | *6.7878* | *31236.32* | *4987.20* |

*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* | *0,54* | *0.9896* | *7.1555* | *32928.02* | *32586.80* |
| *323* | *0,58* | *0.9774* | *6.9902* | *32167.44* | *31439.15* |
| *348* | *0,63* | *0.9572* | *6.8340* | *31448.58* | *30101.43* |
| *373* | *0,67* | *0.9274* | *6.6909* | *30790.21* | *28553.53* |
| *398* | *0,72* | *0.8867* | *6.5664* | *30217.31* | *26793.58* |
| *423* | *0,76* | *0.8341* | *6.4676* | *29762.52* | *24826.39* |
| *448* | *0,81* | *0.7684* | *6.4035* | *29467.78* | *22642.73* |
| *473* | *0,85* | *0.6869* | *6.3858* | *29386.19* | *20184.18* |
| *498* | *0,90* | *0.5838* | *6.4288* | *29584.07* | *17270.38* |
| *523* | *0,94* | *0.4438* | *6.5503* | *30143.37* | *13376.91* |
| *548* | *0,99* | *0.1939* | *6.7722* | *31164.19* | *6043.21* |

*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* | *0,54* | *0,46* | *0.9896* | *7.1238* | *32782.15* | *32439.93* |
| *323* | *0,58* | *0,42* | *0.9773* | *6.9405* | *31938.89* | *31214.86* |
| *348* | *0,63* | *0,37* | *0.9574* | *6.7847* | *31221.82* | *29891.22* |
| *373* | *0,67* | *0,33* | *0.9281* | *6.6565* | *30631.89* | *28428.80* |
| *398* | *0,72* | *0,28* | *0.8881* | *6.5561* | *30169.69* | *26793.83* |
| *423* | *0,76* | *0,24* | *0.8362* | *6.4839* | *29837.75* | *24951.42* |
| *448* | *0,81* | *0,19* | *0.7709* | *6.4418* | *29643.81* | *22852.54* |
| *473* | *0,85* | *0,15* | *0.6894* | *6.4337* | *29606.52* | *20410.33* |
| *498* | *0,90* | *0,10* | *0.5860* | *6.4688* | *29768.01* | *17443.57* |
| *523* | *0,94* | *0,06* | *0.4459* | *6.5699* | *30233.54* | *13480.50* |
| *548* | *0,99* | *0,01* | *0.1967* | *6.8372* | *31463.59* | *6188.09* |

***Этилнонаноат***

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* | *0,44* | *1.0000* | *11.4648* | *64244.39* | *64242.61* |
| *323* | *0,48* | *0.9998* | *11.1190* | *62306.90* | *62296.92* |
| *348* | *0,52* | *0.9993* | *10.7771* | *60390.98* | *60350.49* |
| *373* | *0,55* | *0.9978* | *10.4408* | *58506.32* | *58378.39* |
| *398* | *0,59* | *0.9941* | *10.1123* | *56665.86* | *56334.35* |
| *423* | *0,63* | *0.9866* | *9.7948* | *54886.46* | *54153.43* |
| *448* | *0,66* | *0.9732* | *9.4920* | *53189.80* | *51763.12* |
| *473* | *0,70* | *0.9514* | *9.2089* | *51603.34* | *49097.81* |
| *498* | *0,74* | *0.9192* | *8.9516* | *50161.38* | *46109.67* |
| *523* | *0,78* | *0.8745* | *8.7276* | *48906.26* | *42770.33* |
| *548* | *0,81* | *0.8156* | *8.5462* | *47889.74* | *39060.56* |
| *573* | *0,85* | *0.7408* | *8.4185* | *47174.48* | *34945.29* |
| *598* | *0,89* | *0.6475* | *8.3581* | *46835.64* | *30325.72* |
| *623* | *0,92* | *0.5309* | *8.3808* | *46962.70* | *24932.39* |
| *648* | *0,96* | *0.3769* | *8.5054* | *47661.40* | *17964.23* |

*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* | *0,44* | *1.0000* | *11.4019* | *63892.07* | *63890.62* |
| *323* | *0,48* | *0.9999* | *11.0697* | *62030.77* | *62022.81* |
| *348* | *0,52* | *0.9995* | *10.7414* | *60190.72* | *60159.05* |
| *373* | *0,55* | *0.9983* | *10.4185* | *58381.48* | *58282.90* |
| *398* | *0,59* | *0.9955* | *10.1034* | *56615.80* | *56363.17* |
| *423* | *0,63* | *0.9899* | *9.7990* | *54910.29* | *54356.06* |
| *448* | *0,66* | *0.9798* | *9.5092* | *53286.33* | *52212.59* |
| *473* | *0,70* | *0.9636* | *9.2388* | *51770.97* | *49887.59* |
| *498* | *0,74* | *0.9394* | *8.9938* | *50398.01* | *47344.84* |
| *523* | *0,78* | *0.9054* | *8.7817* | *49209.18* | *44554.10* |
| *548* | *0,81* | *0.8595* | *8.6115* | *48255.50* | *41476.58* |
| *573* | *0,85* | *0.7991* | *8.4943* | *47598.71* | *38033.97* |
| *598* | *0,89* | *0.7196* | *8.4432* | *47312.87* | *34045.76* |
| *623* | *0,92* | *0.6124* | *8.4742* | *47486.18* | *29080.47* |
| *648* | *0,96* | *0.4551* | *8.6056* | *48222.85* | *21945.69* |

*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* | *0,44* | *0,56* | *1.0000* | *11.6469* | *65265.10* | *65263.59* |
| *323* | *0,48* | *0,52* | *0.9999* | *11.2026* | *62775.22* | *62766.78* |
| *348* | *0,52* | *0,48* | *0.9994* | *10.7833* | *60425.86* | *60392.06* |
| *373* | *0,55* | *0,45* | *0.9982* | *10.3916* | *58230.86* | *58126.22* |
| *398* | *0,59* | *0,41* | *0.9953* | *10.0292* | *56200.20* | *55934.88* |
| *423* | *0,63* | *0,37* | *0.9894* | *9.6975* | *54341.11* | *53765.91* |
| *448* | *0,66* | *0,34* | *0.9791* | *9.3974* | *52659.43* | *51557.10* |
| *473* | *0,70* | *0,30* | *0.9625* | *9.1300* | *51161.07* | *49244.33* |
| *498* | *0,74* | *0,26* | *0.9381* | *8.8967* | *49853.92* | *46766.08* |
| *523* | *0,78* | *0,22* | *0.9038* | *8.6998* | *48750.27* | *44062.01* |
| *548* | *0,81* | *0,19* | *0.8578* | *8.5427* | *47870.43* | *41063.33* |
| *573* | *0,85* | *0,15* | *0.7973* | *8.4318* | *47248.74* | *37671.05* |
| *598* | *0,89* | *0,11* | *0.7180* | *8.3776* | *46945.27* | *33707.95* |
| *623* | *0,92* | *0,08* | *0.6116* | *8.4007* | *47074.55* | *28792.48* |
| *648* | *0,96* | *0,04* | *0.4563* | *8.5493* | *47907.07* | *21861.41* |

***орто-Толуидин***

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* | *0,43* | *0.9999* | *9.8243* | *56685.37* | *56680.93* |
| *323* | *0,47* | *0.9996* | *9.5727* | *55233.81* | *55214.09* |
| *348* | *0,50* | *0.9988* | *9.3237* | *53797.14* | *53730.32* |
| *373* | *0,54* | *0.9965* | *9.0785* | *52382.03* | *52199.21* |
| *398* | *0,57* | *0.9917* | *8.8385* | *50997.40* | *50575.20* |
| *423* | *0,61* | *0.9829* | *8.6058* | *49654.90* | *48803.53* |
| *448* | *0,65* | *0.9682* | *8.3830* | *48369.46* | *46830.40* |
| *473* | *0,68* | *0.9460* | *8.1734* | *47160.03* | *44612.70* |
| *498* | *0,72* | *0.9147* | *7.9811* | *46050.27* | *42123.75* |
| *523* | *0,75* | *0.8732* | *7.8111* | *45069.38* | *39352.75* |
| *548* | *0,79* | *0.8202* | *7.6696* | *44253.07* | *36297.53* |
| *573* | *0,83* | *0.7550* | *7.5642* | *43644.54* | *32950.31* |
| *598* | *0,86* | *0.6761* | *7.5037* | *43295.65* | *29273.91* |

*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* | *0,43* | *0.9999* | *9.8083* | *56592.86* | *56589.17* |
| *323* | *0,47* | *0.9997* | *9.5638* | *55182.60* | *55166.40* |
| *348* | *0,50* | *0.9990* | *9.3220* | *53787.09* | *53732.81* |
| *373* | *0,54* | *0.9972* | *9.0838* | *52412.99* | *52265.82* |
| *398* | *0,57* | *0.9934* | *8.8509* | *51069.12* | *50731.77* |
| *423* | *0,61* | *0.9864* | *8.6253* | *49767.03* | *49090.68* |
| *448* | *0,65* | *0.9749* | *8.4094* | *48521.56* | *47303.74* |
| *473* | *0,68* | *0.9575* | *8.2066* | *47351.50* | *45340.02* |
| *498* | *0,72* | *0.9330* | *8.0210* | *46280.30* | *43179.35* |
| *523* | *0,75* | *0.9001* | *7.8575* | *45336.96* | *40809.64* |
| *548* | *0,79* | *0.8577* | *7.7223* | *44556.89* | *38217.76* |
| *573* | *0,83* | *0.8042* | *7.6228* | *43982.95* | *35372.64* |
| *598* | *0,86* | *0.7373* | *7.5680* | *43666.59* | *32195.54* |

*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* | *0,43* | *0,57* | *0.9999* | *9.9332* | *57313.91* | *57309.90* |
| *323* | *0,47* | *0,53* | *0.9997* | *9.6013* | *55398.51* | *55380.79* |
| *348* | *0,50* | *0,50* | *0.9989* | *9.2896* | *53599.93* | *53540.99* |
| *373* | *0,54* | *0,46* | *0.9970* | *8.9999* | *51928.88* | *51771.26* |
| *398* | *0,57* | *0,43* | *0.9929* | *8.7337* | *50392.60* | *50036.94* |
| *423* | *0,61* | *0,39* | *0.9857* | *8.4916* | *48995.70* | *48293.39* |
| *448* | *0,65* | *0,35* | *0.9739* | *8.2741* | *47741.05* | *46492.63* |
| *473* | *0,68* | *0,32* | *0.9562* | *8.0817* | *46630.75* | *44588.67* |
| *498* | *0,72* | *0,28* | *0.9315* | *7.9147* | *45667.31* | *42539.45* |
| *523* | *0,75* | *0,25* | *0.8986* | *7.7740* | *44855.10* | *40305.05* |
| *548* | *0,79* | *0,21* | *0.8561* | *7.6608* | *44202.31* | *37841.82* |
| *573* | *0,83* | *0,17* | *0.8026* | *7.5779* | *43723.93* | *35091.30* |
| *598* | *0,86* | *0,14* | *0.7356* | *7.5299* | *43446.84* | *31959.08* |

*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.

***3,4,4-Триметилгептан***

;

;

*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.

***3,4,4-Триметилгептан***

*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.***

***3,4,4-Триметилгептан***

*, выбираем уравнение:*

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

,*, .*

