

## РАСЧЕТ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РЕАКЦИОННОЙ МАССЫ

### Плотность

Плотность *реакционной массы* рассчитывают по правилу аддитивности:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{x_1}{\rho_1} + \frac{x_2}{\rho_2} + \frac{x_3}{\rho_3} + \dots, \quad (1)$$

где  $x$  — массовые доли компонентов в смеси;

$\rho$  — плотность компонента, г/см<sup>3</sup>.

### Вязкость

Вязкость *смеси жидкостей* определяют по формуле:

$$\lg \mu_{\text{см}} = \sum y_i \lg \mu_i, \quad (2)$$

где  $y_i$  — мольные доли компонентов в смеси;

$\mu_i$  — динамические коэффициенты вязкости отдельных компонентов в смеси.

Если вязкость *компонента* неизвестна, ее можно рассчитать по методу Саудерса:

$$\lg(\lg(\mu_{\text{см}} \cdot 10^4)) = \left( \sum A \cdot n + \sum p \right) \frac{\rho}{M} - 2,9, \quad (3)$$

где  $\mu$  — динамический коэффициент вязкости, Па·с;

$\rho$  — плотность жидкости, г/см<sup>3</sup>

$M$  — молярная масса, г/моль;

$A$  — число одноименных атомов в молекуле органического соединения;

$n$  — численное значение атомной константы (Таблица 1);

$p$  — поправка на группу атомов и характер связи между ними (Таблица 2).

Таблица 1

Численные значения атомных констант

Атом	H	O	N	Cl	Br	I	C
$n$	2,7	29,7	37	60	79	110	50,2

Таблица 2

Поправки на группы атомов и характер связи между ними

Группа	$p$
1. Двойная связь	-15,5
2. Пятичленное кольцо	-24
3. Шестичленное кольцо	-21
4. Боковая группа шестиленного кольца	
М.м. < 17	-9
М.м. > 16	-17
5. <i>o</i> - и <i>n</i> -Положения вторых заместителей	3
6. <i>m</i> -Положение вторых заместителей	1
7. R <sub>2</sub> CH-CHR <sub>2</sub>	8
8. R <sub>4</sub> C	13
9. R-CHO	16
10. R-CO-CH <sub>3</sub>	5

Группа	$\rho$
11. -CH=CHCH <sub>2</sub> X X - отрицательная группа	4
12. R <sub>2</sub> CH-X X - отрицательная группа	6
13. OH	24,7
14. COO	-19,6
15. COOH	-7,9
16. NO <sub>2</sub>	-16,4

Вязкость *суспензии* рассчитывают по следующим формулам:

– если объемная концентрация твердой фазы  $\varphi_T < 0,1$ :

$$\mu = \mu_{ж} (1 + 2,5\varphi_T) \quad (4)$$

– если объемная концентрация твердой фазы  $0,1 < \varphi_T \leq 0,3$ :

$$\mu = \frac{0,59\mu_{ж}}{(0,77 - \varphi_T)^2} \quad (5)$$

– если объемная концентрация твердой фазы  $0,3 < \varphi_T \leq 0,5$ :

$$\mu = \mu_{ж} \left[ 1 + \frac{2,5}{2(1 - 1,35\varphi_T)} \right] \quad (6)$$

– если объемная концентрация твердой фазы  $\varphi_T > 0,5$ :

$$\mu = \frac{\mu_{ж}}{1 - \varphi_T^{1/3}} \quad (7)$$

Объемную концентрацию твердой фазы рассчитывают по формуле:

$$\varphi_T = \frac{\sum V_T}{V_{см}}, \quad (8)$$

где  $V_T$  — объем твердых компонентов смеси, л;

$V_{см}$  — суммарный объем смеси, л.

### Теплопроводность

Теплопроводность *смеси жидкостей* рассчитывают по формуле:

$$\lambda = \sum x_i \lambda_i, \quad (9)$$

где  $\lambda_i$  — теплопроводность компонентов смеси, Вт/м·К;

$x_i$  — массовая доля жидкого компонента в смеси жидких компонентов.

Для расчета теплопроводности соединений используют формулу:

$$\lambda_{30} = A c \rho^3 \sqrt{\frac{\rho}{M}}, \quad (10)$$

где  $A$  — коэффициент, зависящий от степени ассоциации жидкости, м<sup>3</sup>·кмоль<sup>-1/3</sup>·с<sup>-1</sup>.

Для ассоциированных жидкостей (вода)  $A = 3,58 \cdot 10^{-8}$ ; для неассоциированных (бензол)  $A = 4,22 \cdot 10^{-8}$ ;

$c$  — удельная теплоемкость, Дж/кг·К;

$\rho$  – плотность, кг/м<sup>3</sup>;  
 $M$  – молярная масса, г/моль.

Значения теплопроводности жидкостей при температуре  $t$ , °С, могут быть рассчитаны по линейному соотношению:

$$\lambda_t = \lambda_{30} [1 - \chi(t - 30)], \quad (11)$$

где  $\chi$  – температурный коэффициент (Таблица 3).

Таблица 3

Значения температурных коэффициентов

Наименование вещества	$\chi$
Анилин	0,0014
Ацетон	0,0022
Бензол	0,0018
Гексан	0,002
Метанол	0,0012
Нитробензол	0,001
Пропанол	0,0014
Уксусная кислота	0,0012
Хлорбензол	0,0015
Хлороформ	0,0018
Этанол	0,0014
Этилацетат	0,0021

### Теплоемкость

Теплоемкость смеси рассчитывают по формуле:

$$c = \sum x_i c_i, \quad (12)$$

где  $c_i$  — теплоемкость компонентов смеси, кДж/кг·К;  
 $x_i$  — массовая доля компонента в смеси.

Для расчета теплоемкости соединений, находящихся в жидком состоянии, используют метод Миссенара:

$$c = \frac{\sum n_i \xi_i}{M}, \quad (13)$$

где  $\xi_i$  – групповой инкремент  $i$ -й группы, Дж/моль·К (Таблица 4);  
 $n_i$  – количество одноименной групп.

Таблица 4

Значения групповых инкрементов для расчета теплоемкости по методу Миссенара

Группа	Температура, °С					
	-25	0	25	50	75	100
-H	12,56	13,4	14,65	15,5	16,75	18,85
-CH <sub>3</sub>	38,52	39,99	41,66	43,54	45,95	48,6
-CH <sub>2</sub> -	27,22	27,63	28,26	29,1	29,94	30,98
-CH	20,94	23,86	24,91	25,75	26,59	27,62
C	8,37	8,37	8,37	8,37	8,37	8,37
тройная связь	46,06	46,06	46,06	46,06	46,06	46,06

Группа	Температура, °С					
	-25	0	25	50	75	100
-O-	28,89	29,31	29,73	30,15	30,57	30,98
-CO- (кетон)	41,87	42,71	43,54	44,38	45,22	46,06
-OH	27,22	33,5	43,96	52,34	61,76	71,18
-COO-	56,52	57,78	59,04	61,13	63,22	64,9
-COOH	71,18	74,11	78,72	83,74	90,02	94,21
-NH <sub>2</sub>	58,62	58,62	62,81	66,99	66,99	66,99
-NH-	51,08	51,08	51,08	51,08	51,08	51,08
-N=	8,37	8,37	8,37	8,37	8,37	8,37
-CN	56,11	56,52	56,94	56,94	56,94	56,94
-NO <sub>2</sub>	64,48	64,9	65,74	66,99	68,25	68,25
-NH-NH-	79,55	79,55	79,55	79,55	79,55	79,55
-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> (фенил)	108,86	113,05	117,24	123,52	129,8	136,08
-C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> (нафтил)	180,04	184,23	188,42	196,79	205,16	213,54
-F	24,28	24,28	25,12	25,96	27,01	28,26
-Cl	28,89	29,31	29,73	30,15	30,77	31,4
-Br	35,17	35,59	36,01	36,43	37,26	38,1
-I	39,36	39,78	40,4	41,03	41,03	41,03
-S-	37,26	37,68	38,52	39,36	39,36	39,36

Для расчета мольной теплоемкости соединений, находящихся в *твердом состоянии*, используют метод Коппа:

$$c = \frac{\sum n_i c_a}{M}, \quad (14)$$

где  $c_a$  – атомные теплоемкости элементов, Дж/моль·К (Таблица 5);  
 $n_i$  – число одноименных атомов.

Таблица 5

Значения атомных теплоемкостей элементов для расчета теплоемкости по методу Коппа

Элементы	$c_a$ , Дж/моль·ат·К
Углерод С	7,53
Водород Н	9,62
Кислород О	16,74
Сера S	22,59
Фосфор Р	23,01
Фтор F	20,95
Кремний Si	20,08
Азот N	11,3
Бор В	11,72
Остальные элементы	26,36

Для того, чтобы избежать ошибок, связанных с занижением тепловых затрат из-за неточности расчета, величину теплоемкости, рассчитанную по формуле Коппа, для более высоких температур, рекомендуется увеличивать на 5–20 % (так как формула Коппа справедлива при температуре 0 °С).