

APÊNDICE 4

Parâmetros das equações de estado para líquidos

Tabela AP4.1. Contribuições de grupos (V_{W_j}) e incrementos estruturais (δV_{W_k}) para a estimativa do volume de van der Waals (Bondi, 1964, 1968).....	795
Tabela AP4.2. Contribuições de grupos (M), incrementos estruturais (δm_k) e correções (Δm) para estimativa do parâmetro de forma m (Coniglio et al., 2000)	796
Tabela AP4.3. Contribuições de grupos (C), incrementos estruturais (δC_k) e correções (Δc^{T_b}) para a estimativa da correção do volume c (Coniglio et al., 2000)	797

Tabela AP4.1. Contribuições de grupos (V_{W_j}) e incrementos estruturais (δV_{W_k}) para a estimativa do volume de van der Waals (Bondi, 1964, 1968).

Grupos	V_{W_j} cm ³ /mol	Grupos	V_{W_j} cm ³ /mol	
Hidrocarbonetos				
Alcanos			Acetilenos	
C quaternário	3,33			
CH	6,78	-C≡	8,05	
CH ₂	10,23	≡C-H	11,55	
CH ₃	13,67	=C- (em diacetileno)	7,82	
CH ₄	17,12			
Aromáticos				
n-parafinas	$6,88 + 10,23N_c$	≥C- (na condensação)	4,74	
Olefinas			5,54	
=C=	6,96	≥C-H	8,06	
>C=C<	10,02	Benzeno	48,36	
$\begin{matrix} \\ =\text{CH} \end{matrix}$	8,47	Fenil	45,84	
=CH ₂	11,94	Naftaleno	73,97	
>C=CH ₂	16,95			
$\begin{matrix} \\ >\text{C}=\text{CH} \end{matrix}$	13,49	Naftil	71,45	
Grupos, átomos e moléculas acoplados a carbonos*				
Oxigênio e enxofre		Flúor		
-O- (c.e.)	5,20	-F (pr)	5,72	
-O- (a.e.)	3,7	-F (s,t,)	6,20	
-O- (ph.c.)	3,2	-F (p)	6,00	
-OH ^a	8,04	-F (ph)	5,80	
>C=O	11,70			
-S-	10,8	-Cl (pr)	11,62	
-SH	14,8	-Cl (s,t,p)	12,24	
Nitrogênio e fósforo		Cloro		
NH ₂	10,54	-Cl (v)	11,65	
> NH	8,08	-Cl (ph)	12,0	
Bromo e Iodo				

continua

Ver referências bibliográficas no Capítulo 3.