

Antändning av polära vätskor uppblandade med vatten

Marcus Nilsson

Department of Fire Safety Engineering
Lund University, Sweden

Brandteknik
Lunds tekniska högskola
Lunds universitet

Report 5167, Lund 2005

Antändning av polära vätskor uppblandade med vatten

Marcus Nilsson

Lund 2005

Antändning av polära vätskor uppblandade med vatten

Ignition of polar fluids mixed with water

Marcus Nilsson

Rapport/Report 5167

ISSN: 1402-3504

ISRN: LUTVDG/TVBB--5167--SE

Antal sidor/Number of pages: 82

Illustrations: Marcus Nilsson

Sökord

Antändning, flampunkt, alkohol - och vattenblandningar, ångtryck, diffusion, flamspridning.

Keywords

Combustion, flash point, alcohol-and water mixtures, vapour pressure, diffusion, flame spread.

Abstract

The purpose with this report is to calculate the flash point for alcohols that are mixed with water. This report describes how the flash point can be calculated. During the work with the report some experimental work has been done to verify the theoretical values. Some deviation between the theoretical and experimental values was established. The phenomenon flamespread over a fluid surface has also been studied. Some of the quantities regarding combustion like vapour pressure, diffusion and so on have been studied.

Språk/Language: Svenska/Swedish

© Copyright: Brandteknik, Lunds tekniska högskola, Lunds universitet & Marcus Nilsson, Lund 2005.

Brandteknik
Lunds tekniska högskola
Lunds universitet
Box 118
221 00 Lund

brand@brand.lth.se
<http://www.brand.lth.se>

Telefon: 046 - 222 73 60
Telefax: 046 - 222 46 12

Department of Fire Safety Engineering
Lund University
P.O. Box 118
SE-221 00 Lund
Sweden

brand@brand.lth.se
<http://www.brand.lth.se/english>

Telephone: +46 46 222 73 60
Fax: +46 46 222 46 12

Förord

Examensarbetet har utförts i samarbete med Avdelningen för Brandteknik vid Lunds Tekniska Högskola. Arbetet omfattar 20 poäng.

Jag vill tacka alla personer som på ett eller annat sätt hjälpt mig under arbetets gång.

Speciellt vill jag tacka professor Göran Holmstedt som varit min handledare under arbetets gång. Göran har med sin idériedom och kunskap gjort att arbetet hela tiden känts stimulerande och roligt.

Ett stort tack till forskningsingenjör Sven-Ingvar Granemark som bl.a. varit behjälplig vid de experimentella försöken. Även lundadelikatessen "Knake" har avnjutits många gånger i detta sällskap.

Universitetsadjunkt Berit Andersson för hennes synpunkter och idéer under arbetets gång.

Doktorand Daniel Nilsson för en ovärderlig hjälp med bl.a. bildhantering och filmredigering från de experimentella försöken.

Tack till personalen vid Avdelningen för Brandteknik, LTH, för all hjälp under arbetets gång.

Tack till familjen och vänner som på olika sätt fanns med i bakgrunden under arbetets gång.

Lund 2005

Marcus Nilsson

Sammanfattning

Syftet med examensarbetet har varit att undersöka hur flampunkten varierar för polära vätskor som är uppblandade med vatten. Detta har praktisk tillämpning vid t.ex. dragskåpsförsök, lagring av vätskor och direkta utsläpp som leder till en insats av räddningstjänsten. I examensarbetet har även fenomenet ytflamspridning studerats. Arbetet har genomförts i form av litteratur- och informationssökning. Experimentella försök har också genomförts.

I dagens samhälle med mycket industriprocesser används mycket olika brännbara vätskor. Några av dessa är metanol, etanol och acetonitril. Praktisk användning för etanol är t.ex. spolarvätska och drivmedel för bilar. Ur säkerhetssynpunkt är det mycket viktigt att förebygga olyckor och skador på miljön som kan inträffa vid ett utsläpp.

Flampunkten för vätskorna metanol, etanol och acetonitril i vattenblandningar har beräknats. Resultaten från de experimentella försöken stämmer väl överens med vissa av de teoretiska beräkningarna. De teoretiskt framräknade flampunkterna har beräknats på olika sätt. De olika beräkningsmetoderna redovisas i rapporten. En fysikalisk formel för beräkning av flampunkten har introducerats. Formeln är ett bra hjälpmedel då flampunkten för en viss alkohol-och vattenblandning behöver beräknas snabbt t.ex. vid en operativ insats av räddningstjänsten.

Vid de experimentella försöken har en s.k. gnistkammare använts. Gnistkammaren är en cylindrisk behållare med ett tillhörande tryckavlastande lock. I locket har två elektroder för gnistbildning monterats. Vid bestämning av en vätskas flampunkt används två olika metoder. Dessa benämns open cup test respektive closed cup test. I detta arbete har endast flampunkt vid closed cup test undersökts. Vid undersökning av ytflamspridning tillämpas open cup test. Flampunkten är något högre för open cup test än för closed cup test.

Flamhastigheten över vätskeytan påverkas av vatteninblandningen i vätskan. Vattnet utgör en s.k. termisk ballast. Skillnaden mellan flamhastigheten över vätskeytan för ren etanol och en blandning med 50-50-vikts-% etanol och vatten är en faktor 4. Vattnet sänker alltså flamhastigheten.

En användbar formel för att beräkna olika vätskors flampunkt vid vatteninblandning har framtagits av Liaw et.al. Formeln har studerats mer ingående och resultatet har visat att med beräkning med volymprocent istället för molprocent i vätskefas, ger detta ett betydligt mer rättvisande värde på flampunkten vilket framgår då dessa värden jämförts med bl.a. experimentella värden.

I appendix på detta examensarbete finns de sk. Antoine-koefficienterna för c:a 700 olika vätskor. Med hjälp av dessa koefficienter kan man på ett ganska enkelt sätt beräkna flampunkten för en brännbar vätska med vatteninblandning. I tabellen anges också inom vilka temperaturintervall som beräkningarna kan utföras för de olika vätskorna.

En förhoppning är att examensarbetet skall kunna användas som en handledning och vägledning för aktörer inom risk- och säkerhetsområdet.

Summary

The aim of this thesis has been to examine how the flash point changes for different mixtures of polar fluids and water. This has a practical application for example with tests in draught cabinets, fluids that are stored and actual discharges that has to be taken care of by the fire department. In this thesis, the phenomenon flame spread over liquids, has also been studied. The research has been made by literature and information studies. Experiments have been carried out.

In today's society with a lot of industrial processes different flammable liquids are used. Some of those are methanol, ethanol and acetonitrile. Practical use for ethanol is for example washer fluid and fuel for cars. From a safety point of view it is very important to prevent accidents and damages in the environment caused by a discharge.

The flash point for the liquids methanol, ethanol and acetonitrile in water mixtures have been calculated. The results from the experimental tests agree with some of the theoretical calculations. The theoretical calculated flash points have been calculated in different ways. The different calculations are showed in the report. A physical formula for calculations of the flash point has been introduced. The formula is a good aid when the flash point for a certain alcohol and water mixture needs to be calculated for example when a rescue by the fire department is required.

During the experimental tests a so called flash chamber has been used. The flash chamber is a cylindrical vessel with a lid that relieves the pressure. There are two electrodes for making electric discharge assembled in the lid. When the flash point is going to be determined two different methods are used. These are called open-cup and closed-cup tests. In this thesis only closed-cup tests have been used for measuring flash points. When investigating flame spread over liquids the open-cup test is used. The flash point is slightly higher for the open-cup test than for the closed-cup test.

The flame speed over the liquid surface is affected by water in the mixture. The water constitute as so called thermic ballast. The difference in flame speed over the liquid surface for pure ethanol and a mixture with 50-50 weight-% ethanol and water is a factor 4. Water therefore lower the flame speed.

A useful formula to derive different fluids flashpoint in mixture with water has been obtained by Liaw et.al. The formula has been studied and the results have shown that calculations with volume percent instead of molar percent in the fluid mixture gives a more accurate value of the flashpoints when the values has been compared with the experimental results.

In the appendix of this thesis the so called Antoine-coefficients for about 700 different fluids is reported. With the help of those coefficients it is possible to calculate the flashpoint for the fluid with water mixture. In the table there are also facts about what temperature interval the calculations can be made for the different fluids.

Hopefully this thesis can be used as an instruction and a guideline for actors in the risk and-safety area.

Innehållsförteckning

NOMENKLATUR	IX
INDEX.....	XI
1. INLEDNING	1
1.1. BAKGRUND	1
1.2. SYFTE OCH MÅL	1
1.3. OMFATTNING OCH BEGRÄNSNINGAR.....	1
1.4. METOD.....	1
1.5. RAPPORTENS STRUKTUR	2
2. ÅNGTRYCK OCH FÖRÅNGNING.....	3
2.1. TEORI FÖR ÅNGTRYCK	3
2.1.1. <i>Rena vätskor (alkoholer)</i>	4
2.1.2. <i>Ångtryck för vätskeblandning</i>	7
2.1.2.1. Grundläggande teori.....	7
2.1.2.2. Aktivitetskoefficienter.....	10
2.2. FÖRÅNGNING	11
2.2.1. <i>Diffusion</i>	11
2.2.2. <i>Stefan´s massflödesproblem</i>	12
3. ANTÄNDNING AV EN BRÄNNBAR ÅNG-LUFTBLANDNING	15
3.1. INLEDNING	15
3.2. TERMISK SLÄCKTEORI.....	17
3.3. ALTERNATIV BERÄKNING AV FLAMPUNKT MED AKTIVITETSKOEFFICIENTER	20
4. HÄNDELSEFÖRLOPPET EFTER ANTÄNDNING.....	23
4.1. TEORI – FLAMSPRIDNING	23
4.2. FLAMUTBREDNING	24
4.3. YTSPÄNNING	24
5. EXPERIMENTELLA FÖRSÖK PÅ FLAMPUNKTSBESTÄMNING (FLASHPOINT)	25
5.1. FÖRSÖKSUPPSTÄLLNING	25
5.1.1. <i>Gnistenergi</i>	27
5.1.2. <i>Avdunstning av etanol från en öppen behållare</i>	28
5.1.3. <i>Avdunstning av etanol från en sluten behållare</i>	28
5.2. MÄTUTRUSTNING.....	28
5.3. FLAMPUNKTSMÄTNING - PROCEDUR.....	28
5.4. MÄTRESULTAT.....	29
5.4.1. <i>Metanol</i>	29
5.4.2. <i>Etanol</i>	30
5.4.3. <i>Acetonitril</i>	30
5.5. KOMMENTARER	31
5.6. FELKÄLLOR.....	31
6. JÄMFÖRELSE MELLAN EXPERIMENTELLT UPPMÄTTA OCH TEORETISKT BERÄKNADE BRÄNNBARHETSGRÄNSER.....	33
7. EXPERIMENTELLA FÖRSÖK PÅ FLAMSPRIDNING ÖVER VÄTSKEYTOR.....	35
7.1. EXPERIMENTELLA FÖRSÖK.....	35
7.1.1. <i>Försöksserie med etanol</i>	35
7.1.2. <i>Kommentarer</i>	37
7.2. RESULTAT	37
7.3. TIDIGARE FÖRSÖK OCH ERFARENHETER	38
8. SLUTSATSER OCH DISKUSSION	39
REFERENSER.....	41

APPENDIX A	43
A1. METANOL, ANTÄNDNINGSBERÄKNINGAR.....	44
A2. ETANOL, ANTÄNDNINGSBERÄKNINGAR.....	47
A3. ACETONITRIL, ANTÄNDNINGSBERÄKNINGAR	50
APPENDIX B	53
APPENDIX C	55
APPENDIX D	79
APPENDIX E	81

Nomenklatur

A	Frekvensfaktor, $\text{mol}^{1-a-b} / \text{s}$
a	Area, m^2
a	Aktivitet
B	Antoine koefficient för vätskan
C	Antoine koefficient för vätskan
c_p	Specifikt värme för gas vid konstant temperatur, $\text{kJ/kg} \cdot \text{K}$
D	Diffusionskoefficient, m^2 / s
d	Diameter, m
E	Konstant för respektive vätska för förångning
F	Konstant för respektive vätska för förångning
G	Gibbs fria energi, J/mol
H	Entalpi, J/mol
ΔH_c	Bränslets förbränningsvärme, J/kg
k	Termisk konduktivitet, $\text{J/m} \cdot \text{K}$
k	Reaktionskonstant, $\text{mol}^{1-a-b} / \text{s}$
M	Molmassa, kg/kmol
m	Massa, kg
$\dot{m}$	Massflöde, kg/s
n	Antal mol, mol
P	Tryck, mmHg el. kPa
p^0	Ångtrycket för vätskan, mmHg el. kPa
Q	Värmefflöde, W
q	Värmefflöde, W
R	Allmänna gaskonstanten, $8,31451 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$

r	Radie, m
S	Entropi, J/mol*K
T	Temperatur, K eller C
t	Tid, s
V	Volym, m³
X	Molfraktion i vätskefas
Y	Molfraktion i gasfas (ångfas)
z	Höjd, m
γ	Aktivitetskoefficient
μ	Viskositet, Pa*s
ρ	Densitet, kg/m³
σ	Ytspänning, N/m

Index

ace	Acetonitril
air	Luft
atm	Atmosfär(tryck)
e	Släckmedel (extinguishing agent)
et	Etanol
fp	Flampunkt (Flashpoint)
i	Ämnet i
met	Metanol
o	Startvärde
p	Produkter, vid förbränning
tot	Total (tryck)
v	Vätskefas
va	Vatten
å	Ångfas
1,2	Jämförelsevärde
1	Vatten
2	Brännbar vätska
Δ	Ändring

1. Inledning

I detta examensarbete, 20 poäng, som utförs dels på brandingenjörsutbildningen och dels på civilingenjörsutbildningen i väg - och vattenbyggnad har olika polära vätskors egenskaper vid förbränning studerats. Hur flamspridning sker på en vätskeyta har också studerats. Examensarbetet består av två delar, en teoridel och en experimentell del. I teoridelen har beskrivits och diskuterats den fakta som hittills finns på området vad gäller t.ex. teorier, ekvationer, "eviga sanningar" osv. I den experimentella delen har många försök genomförts under olika förhållanden. De olika fenomen som påvisats visuellt vid försöken som t.ex. ytflamspridning har studerats. Resultaten som erhållits från teorin och resultaten från de experimentella försöken har sedan jämförts och kommenterats.

1.1. Bakgrund

Bakgrunden till examensarbetet ligger i vikten av att kunna bestämma flampunkt för olika polära vätskor som blandas ut med vatten. Då polära vätskor används mycket i industrin, laboratorier och restauranger (flambering) för olika ändamål är det viktigt att undersöka hur de påverkas av olika faktorer och framförallt då ur brandsynpunkt. Vilka faror som finns etc. I dagens samhälle med bl.a. farligt gods transporter som tyvärr ibland är inblandade i t.ex. trafikolyckor med läckage som följd. Ur räddningstjänstens synvinkel är det då viktigt med fakta om de olika brännbara vätskorna, hur läckage och spill skall hanteras. Ett ganska klassiskt exempel är antändning av bilens spolarvätska i samband med en trafikolycka. Spolarvätskan är uppblandad med vatten i olika koncentrationer beroende på bl.a. årstiden. En annan aspekt är miljöpåverkan. Vad händer t.ex. när alkoholerna når vattendrag och dagvattensystem?

1.2. Syfte och mål

Syftet med examensarbetet är att undersöka om de teorier som finns för beräkning av flampunkten för en polär vätska som är uppblandad med vatten stämmer överens med de resultat som erhållits vid de experimentella försöken. Vidare skall de polära vätskornas egenskaper vid förbränning undersökas, och vad vatten i blandning med vätskorna innebär rent fysikaliskt och kemiskt. Tidigare experiment och beräkningar som gjorts kommer att kommenteras och jämföras med de resultat som erhållits i detta arbete. Resultatet kommer sedan att påvisa om det finns bra metoder för att beräkna flampunkten och hur bra de stämmer överens med de experimentella försöken.

1.3. Omfattning och begränsningar

I arbetet har tre olika brännbara vätskor studerats; **etanol**, **metanol** och **acetonitril**. Den grundläggande teorin som behandlar bl.a. ångtryck, förångning och därtill hörande samband med flampunkt redovisas. Vätskorna har också undersökts experimentellt och även i blandningar med vatten. Även fenomenet ytflamspridning har undersökts och kommenterats. De fysikaliska och kemiska egenskaperna har undersökts och kommenterats.

1.4. Metod

Metoden som använts för att detta examensarbete är bl.a. litteraturstudier om teorier och experimentella resultat. Även sökning på internet i olika databaser, samtal med fackpersoner, samt experimentella försök ligger till grund för detta arbete.

1.5. Rapportens struktur

Rapporten inleds med ett teoretiskt avsnitt där teorier, formler, ekvationer mm om ångtryck och förångning beskrivs. Därpå följer avsnitten om antändning och händelseförloppet efter antändning. De experimentella försöken med försöksuppställning, tillvägagångssätt, resultat mm följer därpå. Vidare följer ett avsnitt om ytflamspridning där specifika fenomen beskrivs. Avslutningsvis görs en slutdiskussion där de teoretiska och experimentella resultaten jämförs.

2. Ångtryck och förångning

2.1. Teori för ångtryck

För att en brännbar vätska skall kunna antändas, vid normala förhållanden, måste den avge brännbara ångor. Dessa ångor uppstår till följd av vätskans fysiska egenskaper. En viktig egenskap i sammanhanget är en vätskas **ångtryck**. Ångtrycket är temperaturberoende dvs. ju högre temperatur desto högre ångtryck. Förhållandet är dock inte linjärt.

Ångtrycket för olika vätskor varierar. Vätskor med högt ångtryck brukar oftast vara lättflyktiga. De avdunstar förhållandevis enkelt från öppen vätskeyta. En vätskas ångtryck beror mycket på storleken av de intermolekylära krafterna i vätskan. Vätskor med höga intermolekylära krafter har oftast relativt låga ångtryck eftersom molekylerna behöver stora energier för att kunna ”lämna” vätskeytan och avdunsta. I allmänhet kan man uttrycka det som så att vätskor med stor molmassa har relativt låga ångtryck beroende på bl.a. de stora dispersionskrafterna. Ju fler elektroner som ett ämne har desto större blir polarisationen och därigenom blir dispersionskrafterna större.

Molekylerna i vätskan lämnar vätskeytan och bildar gas (ånga). Detta fenomen benämns ofta **avdunstning (förångning)**. Avdunstning är en endotermisk process, eftersom energi behövs för att övervinna de i vätskan förhållandevis starka intermolekylära krafterna. Den energi som krävs för att 1 mol av en vätska vid 1 atm tryck skall kunna avdunsta kallas ångbildningsvärme (ångbildningsentalpi).

I alla typer av vätskor fortgår hela tiden en rörelse av molekyler. Några av dessa molekyler lämnar vätskeytan i form av ånga (gasfas). I dagligt tal benämns detta avdunstning. I de experimentella försök som gjorts har vätskan (alkohol och vatten) varit lagrade i en sluten behållare. Då molekylerna fortsätter att lämna vätskeytan, men inte behållaren erhålls efter en viss tid ett sk. jämviktstillstånd, dvs. antalet molekyler som lämnar vätskeytan är lika stort som antalet molekyler som återvänder till vätskeytan.

När detta jämviktsläge inträtt bildas ett visst tryck i det ”tomma” utrymmet ovanför vätskan. Detta tryck benämns som tidigare nämnts vätskans **ångtryck**. Det framgår även av den kinetiska gasteorin att antalet ”fria” molekyler och därigenom trycket i behållaren ökar med ökande temperatur.

För att jämföra tyngden av olika vätskors ånga kan den sk. **relativa ångdensiteten** användas, dvs. en jämförelse görs med luftens molmassa (29 g/mol) eller med luftens densitet (1,20 kg/m³):

$$\text{Ångdensitet} = M_a / M_{\text{air}} \quad [1]$$

$$\text{Ångdensitet} = \rho_a / \rho_{\text{air}} \quad [2]$$

M_a = aktuell vätskas molmassa (g/mol)

M_{air} = luftens molmassa (g/mol)

ρ_a = aktuell vätskas ångdensitet (kg/m³)

ρ_{air} = luftens densitet (kg/m³)

Av ovanstående formel kan det lätt avgöras om ångan vid avdunstning för en viss vätska är lättare eller tyngre än den omgivande luften.

Är relativa ångdensiteten $> 1 \Rightarrow$ tyngre än luft

Är relativa ångdensiteten $< 1 \Rightarrow$ lättare än luft

2.1.1. Rena vätskor (alkoholer)

I detta arbete har som tidigare nämnts vätskorna metanol, etanol och acetonitril undersökts. Ångtrycket för de olika vätskorna bestäms med ekvation [3] vilken kan härledas ur fundamentala samband. Se ekvation [12]. [Drysdales, 1987]

$$\log_{10} p^0 = (-0,2185 * E / T) + F \quad [3]$$

där de olika parametrarna betyder följande:

p^0 = ångtrycket för vätskan i mmHg

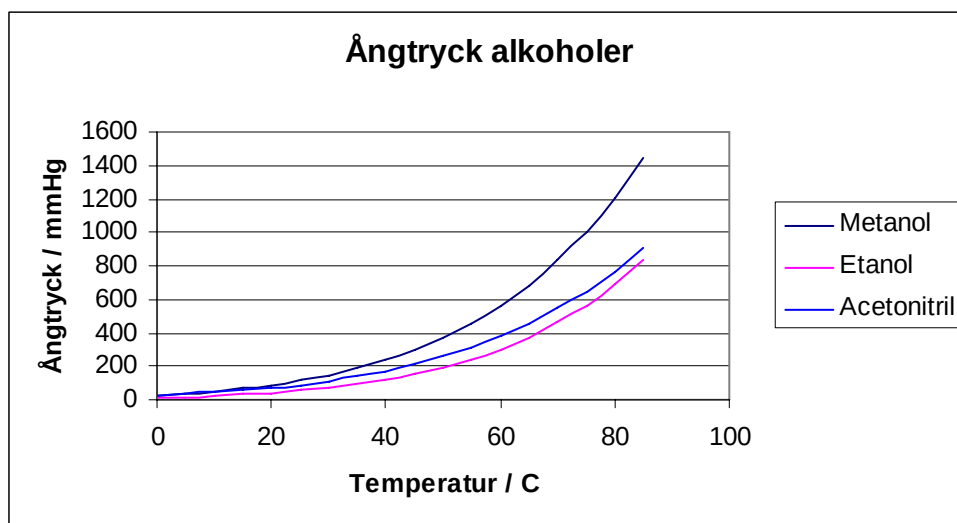
E = konstant för respektive alkohol

F = konstant för respektive alkohol

T = temperaturen i Kelvin

Alkohol	E	F
Metanol	8978,8	8,6398
Etanol	9673,9	8,8274
Acetonitril	8214,4	7,9706

Ångtrycken för de olika vätskorna visas i nedanstående figur 1.

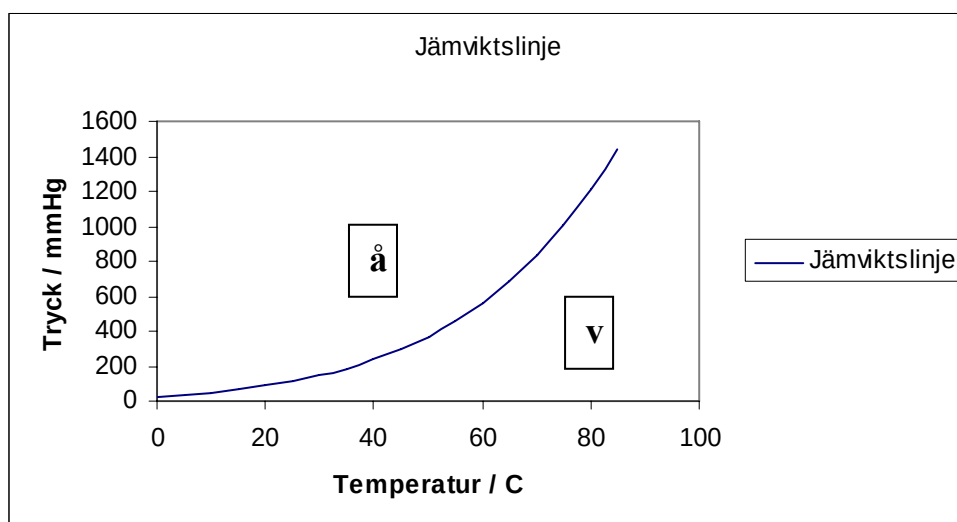


Figur 1 Ångtryckskurvor för alkoholer enligt formel [3]

Av utseendet på ångtryckskurvorna framgår att ångtrycket ökar exponentiellt med temperaturen. När ångtrycket blir 760 mmHg (100 kPa) för respektive alkohol har kokpunkten uppnåtts. Ångtrycket är alltså beroende av temperaturen dvs. $p = p(T)$.

Funktionens, $p = p(T)$, utseende skall alltså bestämmas. Vi skall alltså titta närmare på övergången från vätska till gas (ånga). Detta fenomen bestäms av principerna kring de termodynamiska lagarna och jämvikt för systemet.

Med hjälp av termodynamiken kan ekvationer ställas upp för att beskriva systemet, där trycket(p) är en funktion av temperaturen(T) dvs. $p = p(T)$ enligt ovan. Diagrammet nedan, figur 2, visar de två faserna, vätska(v) och ånga($å$), skilda från varandra med en faslinje. Faserna v och $å$ är alltså i jämvikt med varandra i alla punkter längs linjen.



Figur 2 Jämviktsdiagram

Längs jämviktslinjen är det jämvikt mellan de två faserna. Detta innebär att ändringen i Gibbs fria energi vid fasövergången är lika med noll, dvs.

$$\Delta G = 0. \quad [4]$$

Gibbs fria energi är ett bra verktyg för att undersöka spontaniteten på en reaktion och speciellt temperaturens beroende på spontaniteten på reaktionen.

En annan faktor att ta hänsyn till i sammanhanget är entropin(S). Det karaktäristiska för en spontan process, reaktion, är en ökning av entropin.[Zumdahl, 1995]. I kvalitativa termer kan man se entropin som ett mått på sannolikhet eller oordning.

För att kunna förutse om en given reaktion vid konstant tryck och temperatur är spontan måste hänsyn tas till ändringen i fri energi.[Zumdahl,1995]:

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S \quad [5] \quad (\text{Gibbs fria energi})$$

ΔG = Gibbs fria energi (J/mol)

ΔH = Entalpi (J/mol)

T = Temperatur (K)

$\Delta S = \text{Entropi (J/mol}\cdot\text{K)}$

Detta ger med hänsyn till att $G = 0$

$$\Delta S = \Delta H / T \quad [6]$$

vid fasövergången.

Med hjälp av ovanstående uttryck och villkor kan en formel ställas upp för att påvisa trycket som en funktion av temperaturen, nämligen **Clapeyron's** ekvation [Salzman, 2004]

$$(\partial p / \partial T)_{\Delta G} = \Delta S / \Delta V \quad [7]$$

Clapeyron's ekvation är termodynamiskt exakt och innehåller inga approximationer. Med hjälp av ekvation [6] kan [7] uttryckas

$$(\partial p / \partial T)_{\Delta G} = \Delta H / T \cdot \Delta V \quad [8]$$

Ekvation [8] är mycket användbar då vi vill integrera dp för att finna p som en funktion av T . Ekvationerna [7] och [8] är exakta och kan användas för alla typer av fasövergångar dvs. fast $\rightarrow$ vätska, fast $\rightarrow$ gas, vätska $\rightarrow$ gas osv.

För fasövergångarna fast $\rightarrow$ gas och vätska $\rightarrow$ gas kan två approximationer göras som i sin tur leder till ett mycket användbart uttryck som kallas **Clausius-Clapeyron's** ekvation. [Salzman, 2004]

Den första approximationen är att volymen på gasen i förhållande till vätskan är mycket större dvs.

$V_g \gg V_v$ vilket ger

$$V = V_g - V_v \approx V_g \quad [9]$$

Den andra approximationen innebär att V_g ersätts med uttrycket för en ideal gas dvs.

$$V_g = n \cdot R \cdot T / p \quad [10]$$

Med hjälp av [7] och [8] uttrycks [6] enligt

$$(\partial p / \partial T)_{\Delta G} = \Delta H / T \cdot (n \cdot R \cdot T / p) = \Delta H \cdot p / R \cdot T^2 \quad [11]$$

Ovanstående formel uttrycks per mol.

Formel [9] kan integreras och blir således

$$\ln(P_1 / P_2) = ((\Delta H) / R) \cdot (1/T_2 - 1/T_1) \quad [12]$$

Formeln lämpar sig mycket väl för att räkna ut ångtrycket (p) vid olika temperaturer (T) längs fasövergången. För vilken punkt som helst (p, T) kan trycket beräknas då p_1 är känd enligt

$$p = p_1 * e^{-((\Delta H) / R) * (1/T - 1/T_1)} \quad [13]$$

Slutsats: Ångtryck är ett jämviktsfenomen.

2.1.2. Ångtryck för vätskeblandning

I samband med att alkoholer blandas ut med vatten kommer ångtrycket att ändras. Detta kommer att belysas nedan.

2.1.2.1. Grundläggande teori

Vid följande beräkningar av ångtrycket används formeln [14] som är en approximation där ångtrycket viktas med molfraktionen i vätskefasen:

$$P_i = X_i * P_a(T)_i \quad [14]$$

$$P_a = \sum P_i \quad [15]$$

där de ingående parametrarna betyder följande:

P_i = partialtrycket

X_i = molfraktion i vätskan (av komponent i)

$P_a(T)_i$ = ångtrycket som funktion av temperaturen för de enskilda komponenterna

Ekvation [14] benämns Raoult's lag. Denna formel ger godtagbara resultat för ideala blandningar, dit alkoholer räknas. Resultaten gäller vid låga tryck. [Drysdale, 1987]

För att påvisa ändringen i ångtryck vid vatteninblandning belyses detta med ett exempel. I exemplet antas att massan metanol respektive massan vatten är 500 g vardera.

Vätska	Massa(m)	Molmassa(M)
Metanol	500 g	32 g/mol
Vatten	500 g	18 g/mol

För att beräkna mängden mol i vätskeblandningen används följande formel

$$n = m/M \quad [16]$$

$$n_{\text{met}} = m/M \Rightarrow n_{\text{met}} = 500/32 = 15,625 \text{ mol}$$

$$n_{\text{va}} = m/M \Rightarrow n_{\text{va}} = 500/18 = 27,78 \text{ mol}$$

För beräkning av molfraktion vatten(1) och alkohol(2) i vätskan tillämpas formeln [Drysdale, 1987]

$$X_1 = n_1 / (n_1 + n_2) \quad \text{resp.} \quad X_2 = n_2 / (n_1 + n_2) \quad [17]$$

Andel mol (X) i vätskan:

Metanol: $X_2 = 15,625 / (15,625 + 27,78) = 0,36 = 36 \text{ mol\%}$

Vatten: $X_1 = 100 - 36 = 64 \text{ mol\%}$

För att beräkna ångtrycket tillämpar vi formel [3] och tabellvärdena enligt nedan

$$\log_{10} p^0 = (-0,2185 * E / T) + F \quad [3]$$

Vätska	E	F
Metanol	8978,8	8,6398
Etanol	9673,9	8,8274
Acetonitril	8214,4	7,9706
Vatten	10520,5	9,0894

Vid temperaturen $T = 29^\circ\text{C}$ är ångtrycket för metanol $P_a = 139,2 \text{ mmHg}$ enligt beräkning med [3].

För vatten vid samma temperatur är ångtrycket $P_a = 30,0 \text{ mmHg}$

Partialtrycket i blandningen för metanol blir då:

$$P_p = P_a * X_2 = 139,2 * 0,36 = 50,11 \text{ mmHg},$$

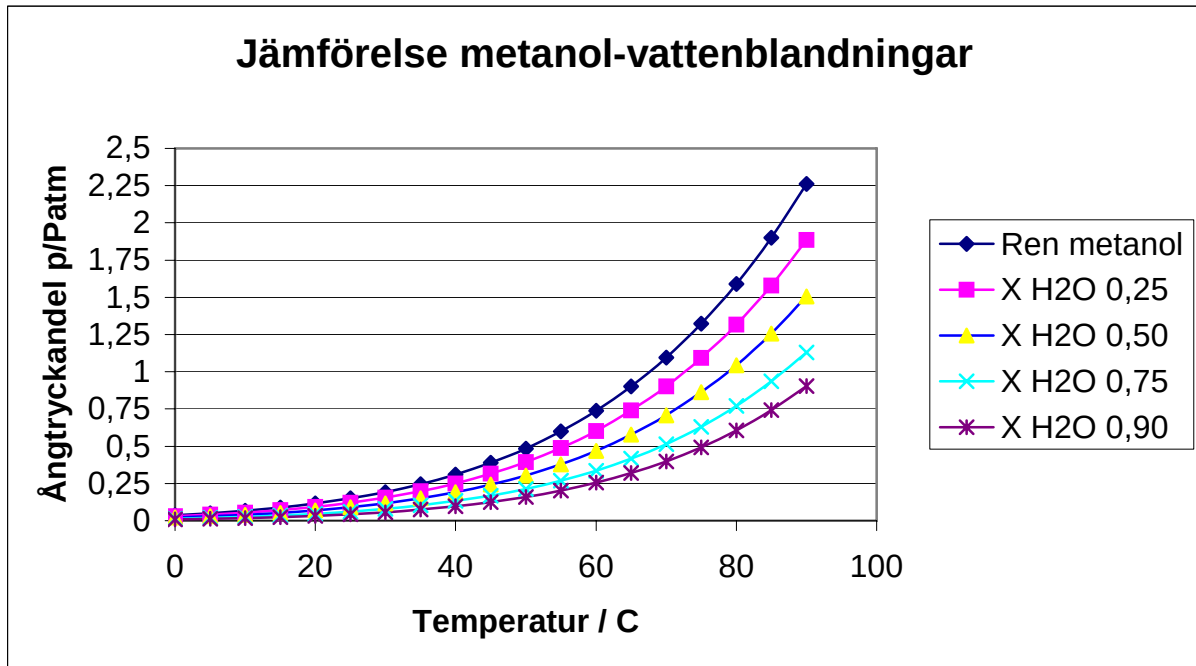
Det totala ångtrycket ovanför vätskeytan beräknas med nedanstående formel:

$$P_{\text{tot}} = P_{\text{met}} * X_{\text{met}} + P_{\text{va}} * X_{\text{va}} \quad [18]$$

dvs. det totala ångtrycket blir:

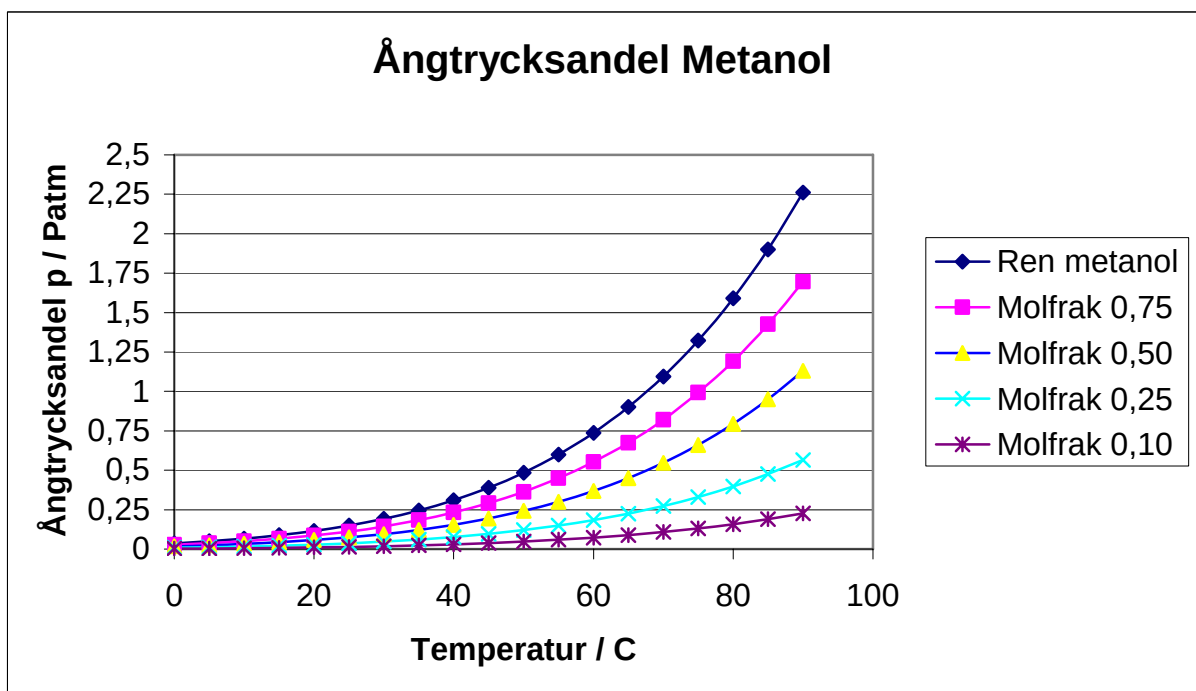
$$P_{\text{tot}} = 139,2 * 0,36 + 30,0 * 0,64 = 69,3 \text{ mmHg}$$

Ångtrycket varierar alltså med mängden alkohol och vatten i blandningen. Detta åskådliggörs i figur 3 där en metanol- och vattenblandning har åskådliggjorts med vattenfraktionerna 0,25 , 0,50 , 0,75 och 0,90.

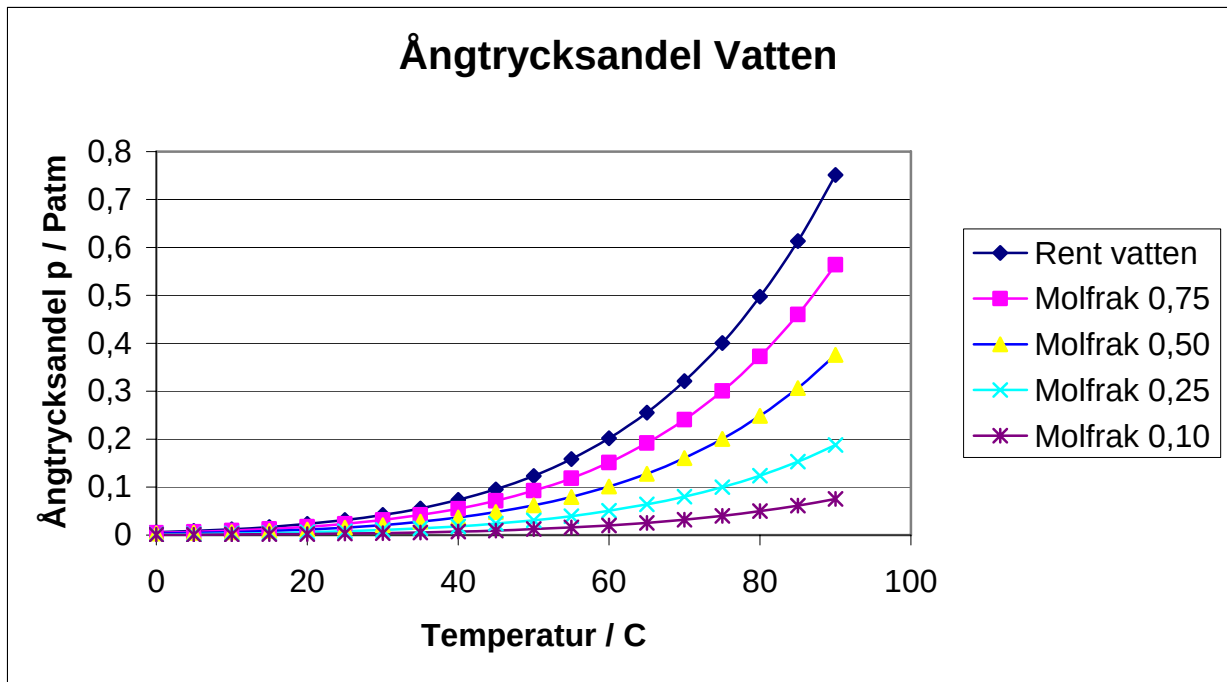


Figur 3 Totalångtryck metanol-vattenblandningar enligt formel [18]

Diagram för ångtryck enbart för rena vätskor, metanol och vatten, med hänsyn till molfraktionen visas nedan i figurerna 4 och 5.



Figur 4 Ångtryck för metanol med hänsyn till molfraktion enligt formel [18]



Figur 5 Ångtryck för vatten med hänsyn till molfraktion enligt formel [18]

2.1.2.2. Aktivitetskoefficienter

Aktivitetskoefficienter(γ) används för att korrigera icke ideala värden till dess ideala värden. Ett användbart område är att korrigera ångtryck i vätskor. Som exempel kan användas en alkohol med ångtrycket(P_2), atmosfärstrycket(P), molfraktionen i vätskan(x_2), molfraktionen i ångfas(y_2) samt aktivitetskoefficienten(γ_2) som förhåller sig till varandra enligt följande formel:

$$y_2 = x_2 * \gamma_2 * P_2 / P \quad [19]$$

Observera att ovanstående formel [19] endast är tillämplig på alkohol -och vattenblandningar.

Uttrycket **aktivitet(a)** förekommer också och uttrycks som:

$$a = \gamma_2 * P_2 / P \text{ för den aktuella alkoholen.} \quad [20]$$

Inom brandområdet jämföres y_2 med den sk. undre brännbarhetsgränsen(UB) dvs. $y_2 = UB$. Aktivitetskoefficienter antar värden större än eller lika med 1. Att beräkna värden på aktivitetskoefficienter är en ganska komplex process. Olika typer av ekvationer tillämpas. De tre vanligaste benämns; **Wilson's** ekvation, **NRTL's** ekvation och **UNIQUAC's** ekvation. [Liaw et.al, 2003]. Dessa tre ekvationers sammansättning redovisas i appendix D.

Enligt Liaw et. al. fungerar de tre olika ekvationerna mer eller mindre bra på olika blandningsförhållanden. NRTL's och UNIQUAC's ekvationer är tillämpliga både på vätska-ånga jämvikt och på vätska-vätska jämvikt vilket inte är fallet för Wilson's ekvation. Problemet kan tyckas vara den stora skillnaden på värdet på olika koefficienter beroende på vilken litteratur som värdena hämtas ur.

Vissa värden kan skilja uppemot en faktor tre (3) och andra värden kan vara både positiva och negativa för samma blandning beroende på vilken litteratur de hämtas ur.

2.2. Förångning

Massflöde eller egentligen ett flöde av massa kan uppstå p.g.a. olika fenomen. I detta sammanhang skall vi fokusera på diffusion (massdiffusion). Andra fenomen som påverkar förångningsförloppet är värmetransport och konvektion. Här tittar vi på temperatur- respektive koncentrationsgradienter (ändringar under tid).

2.2.1. Diffusion

I samband med diffusion brukar man prata om **Fick's lag**. Denna beskriver massflödet av mediet per areaenhet i förhållande till koncentrationsgradienten enligt formeln:

$$(m_A / a) = -D (\partial C_A) / (\partial x) \quad [21]$$

D = diffusionskoefficient (m^2 / s)

m_A = massflödet per tidsenhet (kg / s)

C_A = masskoncentration av substans A per volymenhet (kg / m^3)

Jämför även likheten med **Fourier's lag** för värmeledning:

$$(q / a)_x = -k (\partial T / \partial x)$$

Fouriers lag beskriver energiflödet (beroende på temperaturskillnad) genom t.ex. en yttervägg i ett hus. Ficks lag beskriver massflödet (till följd av koncentrationsskillnad) då t.ex. en gas diffunderar.

Den grundläggande ekvationen för instationärt massflöde genom diffusion är följande:

$$\partial p / \partial t = D(\partial^2 p / \partial x^2) \quad (\text{jfr. ovan}) \quad [22]$$

där de olika parametrarna betyder följande:

p = ångtrycket från vätskan vid tiden t efter start, och höjden x ovanför vätskeytan

t = tiden efter start av försöket

D = diffusionskoefficient (specifik för varje vätska)

x = höjden ovanför vätskeytan

Denna ekvation kan lösas genom användning av Laplace transformering.

Ekvationens lösning för vårt fall blir enligt ekvation [23] nedan.

Randvillkoren för att använda ekvation [23] är: [Burgoyne, 1967]

$$x = \infty, \partial p / \partial x = 0$$

För att beräkna gradienten ovanför vätskeytan kan följande ekvation användas:

$$P / P_e = \frac{1}{2} [\exp(-(F/D)^{1/2} * x) \operatorname{erfc}(x / (x / 2*(D*t)^{1/2}) - (F*t)^{1/2}) + \exp((F/D)^{1/2} * x) \operatorname{erfc}(x / (x / 2*(D*t)^{1/2}) + (F*t)^{1/2})] \quad [23]$$

I sammanhang där koncentrationsskillnader är aktuella, strävar systemet efter att utjämna dessa skillnader. Härav blir det ett massflöde från området med högre koncentration till området med lägre koncentration tills en jämvikt uppnås.

En högre koncentration innebär alltså ett större antal molekyler per volymenhet. Det faktum att molekylerna kolliderar med varandra påverkar starkt diffusionsprocessen. I gaser påverkas klart diffusionen av molekylernas hastighet. Härav borde vi förvänta oss att diffusionskoefficienten är temperaturberoende då temperaturen (egentligen) är ett mått på molekylernas medelhastighet.

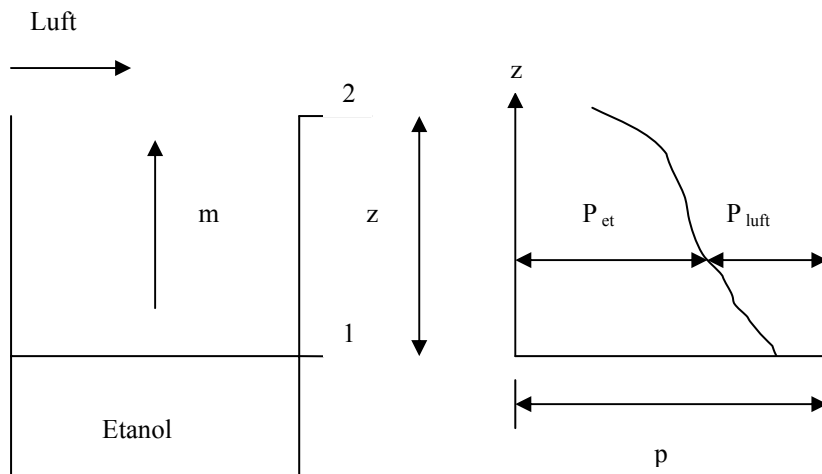
Då temperaturen varierar, varierar givetvis också vätskans ångtryck. Vid beräkning av flampunkten skall alltså alkoholens partialångtryck i vätskeblandningen vara lika stor som P_a för att antändning skall kunna inträffa. Vid olika blandningsförhållanden varierar flampunkten, från den lägsta vid ren alkohol till högre temperaturer då andelen vatten i vätskeblandningen ökar.

I de experimentella försöken kommer flampunktsbestämning endast att ske med hjälp av sk. **closed cup** metoden. Med closed cup menas att alkoholen utsätts för gnistenergi i en sluten behållare. Motsvarigheten till closed cup är **open cup**, som är en öppen behållare. Med hjälp av open cup kommer flamutbredning på vätskeytan att studeras.

2.2.2. Stefan's massflödesproblem

I samband med avdunstning från en vätskeyta brukar man prata om **Stefan's massflödesproblem** eller **Stefan's lag**. Vid avdunstning skall hänsyn tas till den naturliga konvektion (luftströmning) som finns i omgivningen. Det byggs upp en koncentrationsgradient med högst koncentration närmast vätskeytan. Vid behållarens kant blir det ett sk. randfenomen. Då alkoholångorna är tyngre än luft så "rinner" de ner längs behållarens utsida och blandas med luften. Se figur 6. En mer detaljerad förklaring till figur 6 ges i kapitel 5.1.2. samt i **appendix E** där även ett beräkningsexempel visar hur stort massflödet är vid avdunstning från en vätskeyta. **Stefan's lag** uttrycks enligt formel [24] nedan. [Holman, 1976]

$$m = (D * P * M_a / R * T(z_2 - z_1)) \ln(P_{a2} / P_{a1}) \quad [24]$$

**Figur 6** Avdunstning från en vätskeyta

3. Antändning av en brännbar ång-luftblandning

I detta kapitel kommer teorin bakom beräkning av flampunkt att belysas. Här kommer även begreppen undre brännbarhetsgräns (UB) och övre brännbarhetsgräns (ÖB) att ”kopplas samman” med ångtryck och flampunkt.

3.1. Inledning

Brandfarliga gaser är de gaser som vid 21°C kan bilda en antändbar gasblandning med luft. Brandfarliga vätskor är de vätskor vars flampunkt är 100°C eller lägre. [SÄIFS 1998:6]

För brandfarliga vätskor används en **klassindelning** enligt nedan. [SÄIFS 1998:6]

Klass	Flampunkt	
1	< 21°C	
2a	21-30°C	
2b	30-55°C	
3	55-100°C	

Vätska	Flampunkt	AIT
Metanol	12°C	385°C
Etanol	13°C	363°C
Acetonitril	2°C	525°C

Som framgår av tabellen ovan så tillhör samtliga vätskor klass 1 då deras flampunkt är under 21°C.

I tabellen nedan redovisas den undre brännbarhetsgränsen (UB) respektive den övre brännbarhetsgränsen (ÖB) för de aktuella vätskorna:

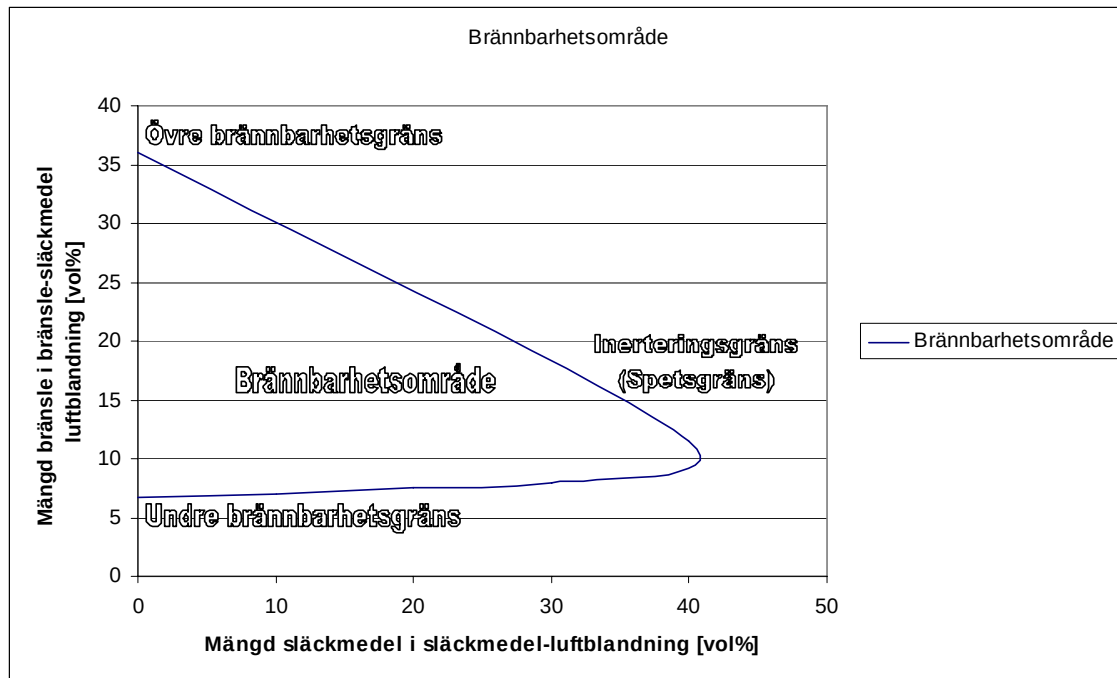
Vätska	UB	ÖB
Metanol	6,7 vol %	36 vol %
Etanol	3,3 vol %	19 vol %
Acetonitril	3,0 vol %	16 vol %

Nedan ges en förklaring till olika begrepp som kommer att användas i fortsättningen:

Brännbarhetsgränser: I dagligt tal pratar man om de **undre(UB)** och **övre(ÖB)** brännbarhetsgränserna. Området däremellan kallas **brännbarhetsområdet** och är karaktäristiskt för varje ämne. Se figur 7. Undre och övre brännbarhetsgränserna utgör ett brännbart område. Oftast anges UB och ÖB i volymsförhållande. De kan då smidigt jämföras med ångtrycket vid den aktuella temperaturen. Små förändringar av ångtrycket på vatten medför endast en liten inverkan på UB.

För varje blandning av bränsle, luft och släckmedel finns en lägsta släckmedelskoncentration där blandningen är obrännbar oavsett förhållandet mellan luft och bränsle. Denna koncentration kallas för **inertiseringsgränsen** eller **spetsgränsen**. Vid en koncentration av släckmedel över inertiseringsgränsen kan gasblandningen inte brinna, oberoende av koncentrationen bränsle och luft. [Särdqvist, 2002]

I de tabellsamlingar som finns över dessa värden kan det ses vissa fluktuationer på värdena. Detta får man ha i åtanke då t.ex. beräkningar skall göras. Dessa värden är oftast uppmätta vid normalt tryck och temperatur. Vid hög omgivningstemperatur sänks den undre brännbarhetsgränsen och vid hög syrekonzentration ökar den övre brännbarhetsgränsen.



Figur 7 Brännbarhetsgränsen för blandningar av bränsle, luft och släckmedel

Flampunkt (Flashpoint): Flash point för en specifik brännbar vätska definieras som den temperatur(T) vid vilken vätskans ångtryck är så högt att koncentrationen av ångan i luften motsvarar den undre brännbarhetsgränsen(UB). Vid denna temperatur avger vätskan (vätskorna) brännbara ångor som kan antändas.

Den undre brännbarhetsgränsen(UB) för den brännbara vätskan anges oftast i volymprocent. För att kunna se denna flamma är det nästan nödvändigt att filma antändningsförloppet med filmkamera och sedan köra det i "slow motion" för att kunna se flammen vid flashpoint. Denna flamma kan dock inte fortsätta att brinna då antändningskällan tas bort. I de experimentella försök som gjorts i detta arbete användes en gnista som antändningskälla. Det blir då en slags intermittent (sporadisk) antändningskälla. Flashpoint är karaktäristisk för varje brännbar vätska eller blandning av vätskor.

Firepoint: Är den temperatur vid vilken en brännbar vätska fortsätter att brinna då antändningskällan tas bort. Koncentrationen av brännbara ångor är då så hög att det fortsätter att brinna. Firepoint för en brännbar vätska är några grader högre än flampunkten för densamma.

Kommentar: Det är viktigt att förstå skillnaden mellan flampunkt(flashpoint) och firepoint. Risken för antändning börjar redan vid flashpoint men ökar då temperaturen stiger mot firepoint.

MIE: Den minsta energi som krävs för att de brännbara ångorna skall antändas kallas Minimum Ignition Energy (MIE). MIE varierar för olika ämnen. MIE minskar kring stökiometrisk blandning och ökar då blandningen närmar sig brännbarhetsgränserna. [Lewis et.al, 1961]

AIT: Autogenous Ignition Temperature är den temperatur vid vilken en brännbar vätska spontant självantänder utan antändningskälla närvarande. Denna temperatur varierar med vilken typ av brännbar vätska som är aktuell i sammanhanget.

3.2. Termisk släckteori

Fortfarande pågår forskning för att ta fram en bra modell som kan förutse om en brand kan släckas av ett visst släckmedel och vilken mängd som behövs. Släckteori är ett komplext område och en hel del förenklingar får göras för att lösa vissa problem. Då släckteori studeras är det ofta släckning genom kylning (bortförsel av värme) som studeras. Även lämpning och kvävning (bortförsel av bränsle och syre) studeras. [Andersson, 2002]

Förbränningshastigheten av bränslet A i reaktionen



$$\text{ges av uttrycket: } -dA / dt = [A]^a * [B]^b * k \quad [26]$$

där [] anger koncentrationen, konstanten k bestäms av Arrhenius uttrycket:

$$k = A * e^{-E_a / R * T} \quad [27]$$

där E_a är aktiveringsenergin, R är universella gaskonstanten, T är temperaturen och A är frekvensfaktorn.

Slutsatsen som kan dras av ovanstående samband är att temperaturberoendet är exponentiellt och för att effektivt sänka reaktionshastigheten tillförs en termisk ballast.

Brännbarhets-och inerteringsgränser kan anses representera kritiska tillstånd utanför vilka den reaktiva bränsle-luftblandningen kommer att upphöra att reagera. Existensen av dessa gränser är intimt förknippade med kinetiken för gasfasreaktionerna. Man kan uppnå dessa gränser på flera olika sätt, genom att lägga till:[Ewing et. al, 1994]

- luft
- bränsle
- inert släckmedel
- kemiskt aktivt släckmedel

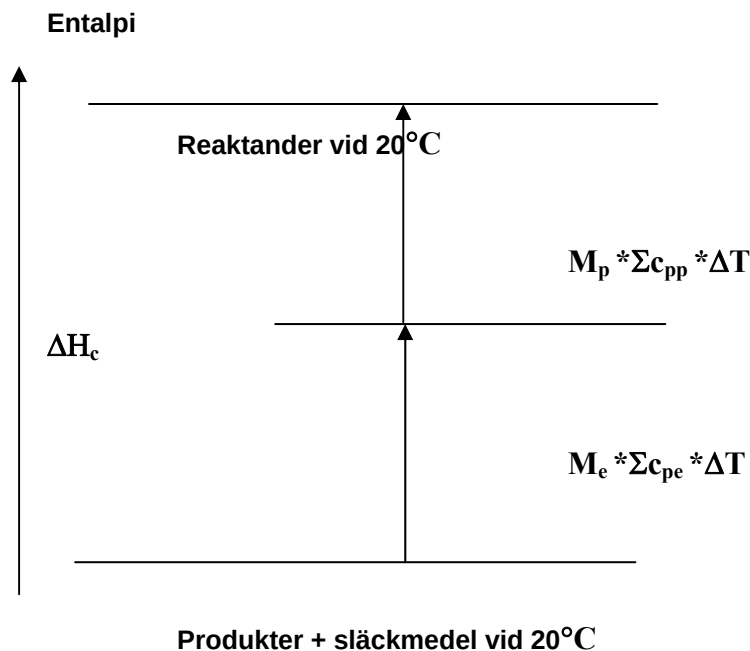
eller genom att:

- ta bort värme från flammorna (strålning, konvektion till ytor etc.)

För att kunna beräkna om en viss bränsle-luftblandning kan antändas brukar man använda sig av den sk. adiabatiska flamtemperaturen. Dessa beräknas med hjälp av termodynamiska data för den aktuella reaktionen t.ex. etanol och vatten.

Zabetakis visade tidigt att den adiabatiska flamtemperaturen vid släckgränsen för kolvätebränslen, c:a 1500-1600 K, var oberoende av både bränslet och det inerta släckmedlet. [Zabetakis, 1965]

Nedan i figur 8 redovisas entalpin i ett diagram med hänsyn till vattnet som släckmedel (termisk ballast).



Figur 8 Entalpidiagram

Utan förluster (adiabatiskt) går all utvecklad energi, ΔH_c , åt till att värma upp förbränningsprodukterna (index p) och släckmedlet (index e): [Ewing et. al, 1994]

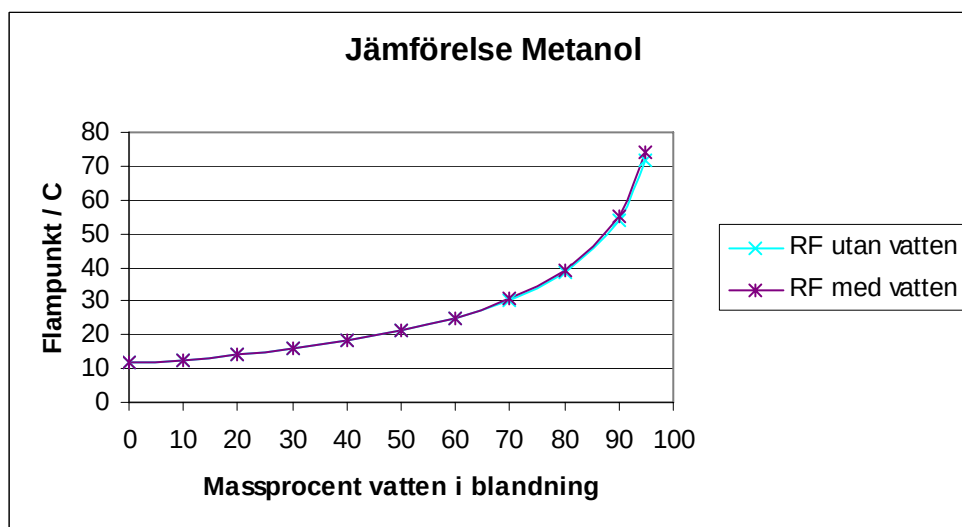
Formeln för detta uttryck ser ut enligt följande:

$$\Delta H_c = M_p * \Sigma c_{pp} * \Delta T + M_e * \Sigma c_{pe} * \Delta T \quad [28]$$

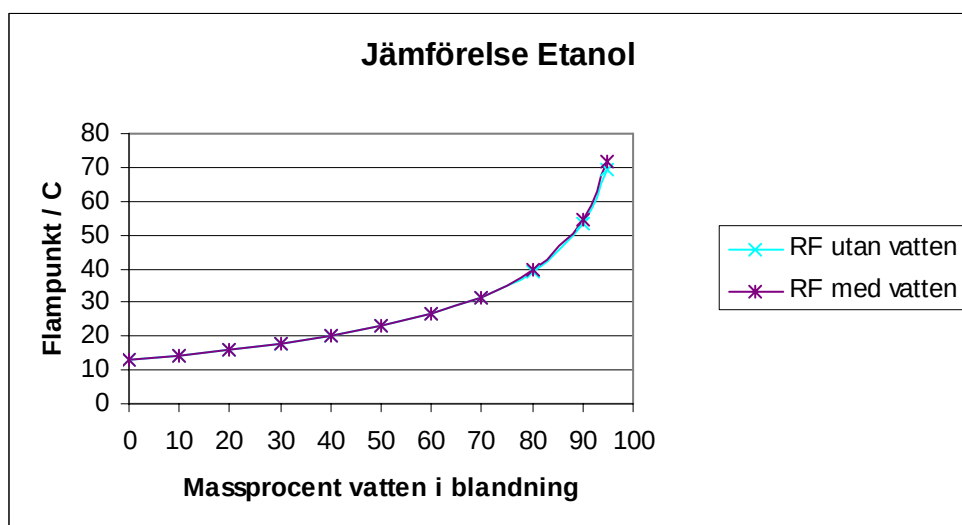
där $\Delta T = 1550 - T_o$ (T_o är omgivningstemperaturen, vanligen 20°C)

Beräkningsexempel som visar om antändningsbara vätskeblandningar erhålls för de tre olika studerade vätskorna redovisas detaljerat i **appendix A**. Resultatet av dessa beräkningar åskådliggörs i nedanstående figurer 9-11.

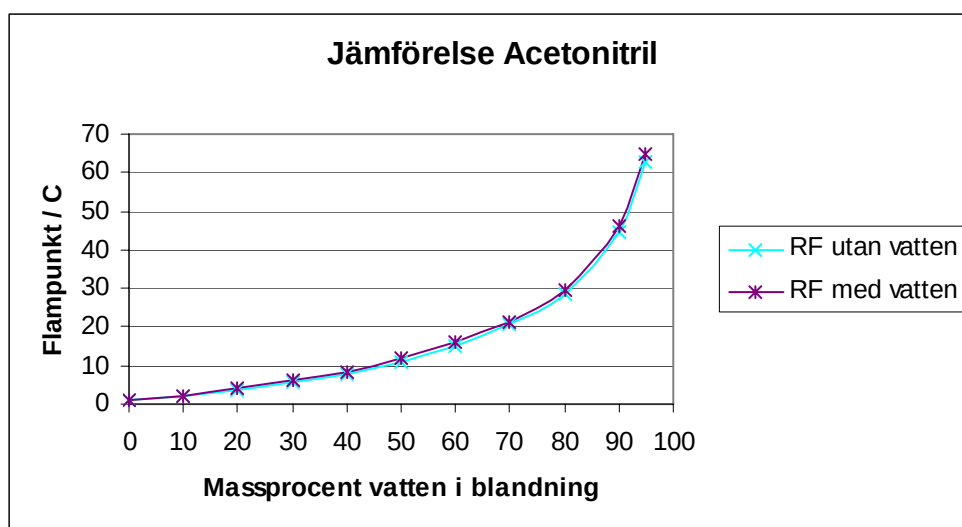
I beräkningarna enligt formel [28] har hänsyn tagits dels till vattnets medverkan som termisk ballast (RF med vatten) och dels när vattnet inte medverkar (RF utan vatten). Som framgår av figurerna 9-11 är skillnaderna mycket små.



Figur 9 Flampunkt enligt beräkning med formel [28]



Figur 10 Flampunkt enligt beräkning med formel [28]



Figur 11 Flampunkt enligt beräkning med formel [28]

3.3. Alternativ beräkning av flampunkt med aktivitetskoefficienter

En ganska så ny metod, formel, har tagits fram för att matematiskt beräkna flampunkten för alkohol- och vattenblandningar [Liaw et.al, 2003]. De matematiska beräkningarna har i sin tur jämförts med experimentella värden. I dessa beräkningar tas också hänsyn till de olika vätskornas sk. aktivitetskoefficienter. Denna metod har kommit till användning inom bl.a. processindustrin för att på ett säkert sätt kunna beräkna och därmed garantera säkerheten i processen mot antändning. Detta i sin förlängning ger även ett bra mått på hur effektivt det är att späda ut en alkohol med vatten vid t.ex. ett utsläpp för att förhindra en antändning och därmed minimera risken. Formeln ser ut enligt följande:

$$T = (B_2 / (B_2 / (T_{2, fp} + C_2))) + \log x_2 - C_2 \quad [29]$$

där de olika variablerna har följande betydelse

T = sökt flampunkt (K) för aktuell blandning

B₂ = Antoine koefficient för alkoholen (värdet hämtas i tabell nedan)

C₂ = Antoine koefficient för alkoholen (värdet hämtas i tabell nedan)

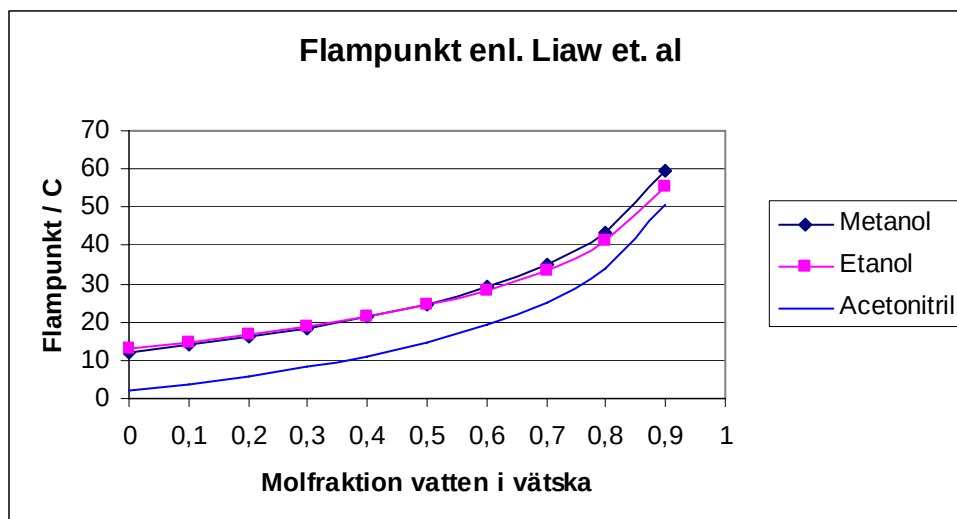
T_{2, fp} = flampunkt (K) för ren alkohol

x₂ = molfraktion av alkohol i vätskefas

Vätska	B ₂	C ₂	
Metanol	1581,993	-33,289	[Liaw et. al, 2003]
Etanol	1595,811	-46,702	[Liaw et. al, 2003]
Acetonitril	1279,2	-48,99	[www.glue.umd.edu]

Resultatet av beräkningen av flampunkten för olika blandningsförhållande visas i figur 12.

Antoine-koefficienter för 700 olika vätskor finns i **appendix C**. Observera att C-värdet i tabellen skall minskas med 273 då beräkning av flampunkten skall utföras.

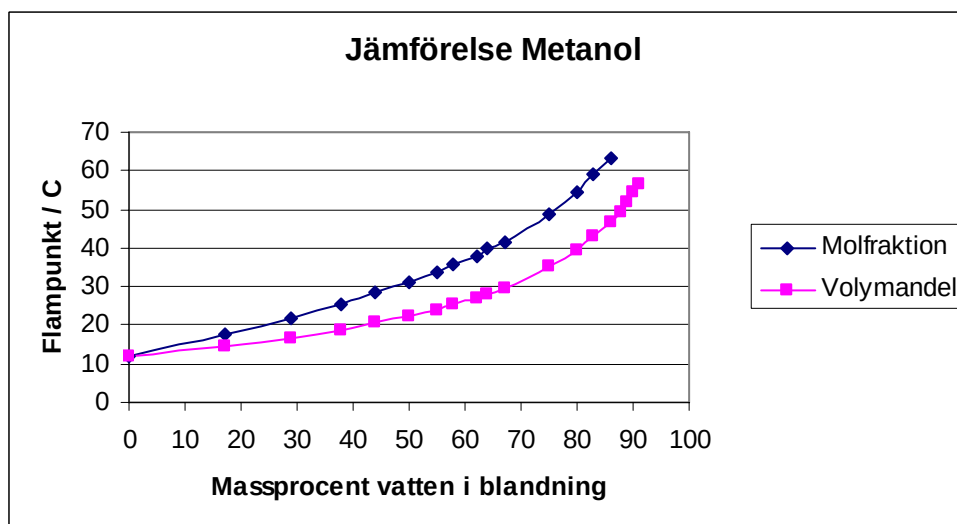


Figur 12 Flampunkt enligt beräkning med formel [29]

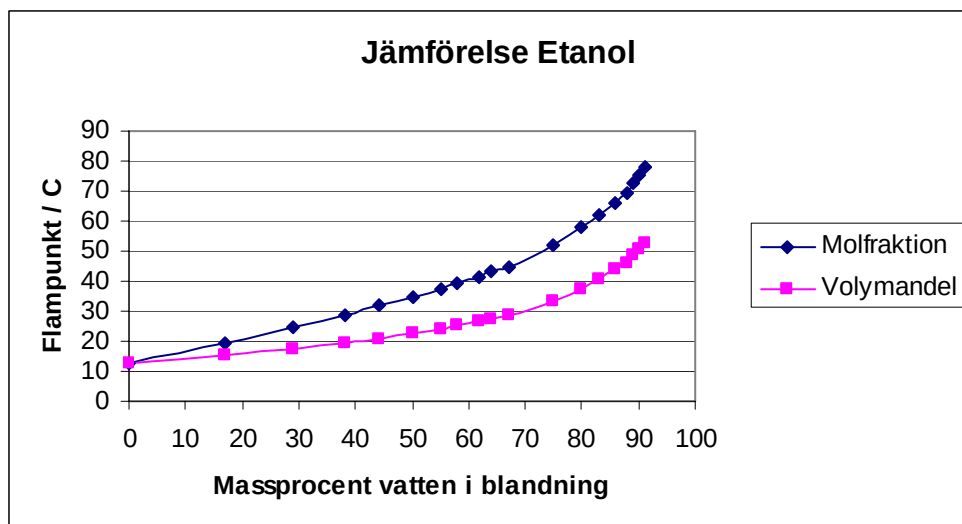
Då formel [29] tillämpas enligt författarna har det visat sig att värdena på flampunkt för olika blandningar inte stämmer riktigt överens med de experimentella värdena. Formeln bygger till mångt och mycket på Crowl och Louvar's metod. Denna metod bygger på Raoult's lag som nämnts tidigare. Raoult's lag bygger på sk. ideala lösningar. Blandningar av alkoholer och vatten får benämnas som icke ideala lösningar med tanke på resultaten. Vid mycket liten inblandning av vatten(spädning) så fungerar Raoult's lag. Se även [Vázquez, 2005].

Formeln har granskats och där får användningen av molfraktion av alkohol i vätskefas(x_2) ifrågasättas. Vid insättning av volymförhållandet i vätskefas(x_2) i formeln så stämmer dessa värden mycket bra överens med både de experimentella värdena i kapitel 5.4., och de värden som framräknats med hjälp av reaktionsformler och adiabatisk flamtemperatur i kapitel 3.2.

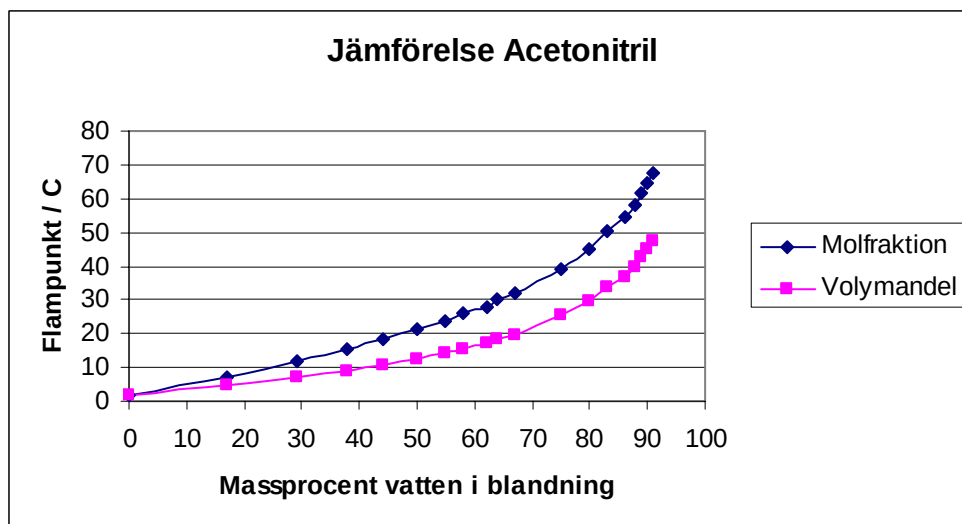
Nedan visas diagram för metanol, etanol och acetonitril (figurerna 13-15) där flampunkten jämförs mellan användning av molfraktion i formeln och volymförhållandet i formeln.



Figur 13 Flampunkt för metanol enligt beräkning med formel [29]



Figur 14 Flampunkt för etanol enligt beräkning med formel [29]



Figur 15 Flampunkt för acetonitril enligt beräkning med formel [29]

4. Händelseförloppet efter antändning

Antändning av de brännbara ångorna sker då blandningsförhållandet medger det. Efter antändning sker en utbredning av flamfronten. Den laminära flamhastigheten, S_u , beror på blandningsförhållandet i de brännbara ångorna. S_u är som lägst vid UB och ÖB. Den högsta hastigheten uppnås mycket nära det ideala blandningsförhållandet.

Vid flampunkten för vätskan sker endast en lokal antändning, flash, som inte kan fortsätta att brinna. Detta p.g.a. att inget nytt brännbart material hinner förångas under den korta tid som förbränningsvågen passerar över vätskeytan. Sker antändning däremot vid temperaturer över flampunkten blir det en flamspridning över vätskeytan.

Antändning av de brännbara ångorna ovanför vätskeytan ger en transient förblandad flamma som vid förbränning kommer att förbruka all brännbar ång-luftblandning som finns inom brännbarhetsgränserna. En diffusionsflamma kommer sedan att kvarstanna endast om mängden brännbar ång-luftblandning räcker för förbränningsprocessen. Om mängden brännbar ång-luftblandning är för liten dvs. om temperaturen är under flampunkten kommer flaman att slockna p.g.a. värmeförlusten till vätskeytan.

Då antändningen sker mitt i gnistkammaren så är det inga problem i början för flaman att brinna. Reaktionszonen är då inte i kontakt gnistkammarens sidor. Efterhand som flamfronten förflyttar sig, expanderar reaktionszonen och kommer snabbt att nå sidorna. Detta resulterar i en expansion av reaktionszonen uppåt i gnistkammaren längs sidorna.

Om temperaturen är samma som flampunkten eller över kommer flaman att stabiliseras och den fortsatta värmeförlusten till vätskeytan bidrar till att värma vätskeytan och därmed öka förångningen av brännbara ångor.[Drysdale, 1987]

4.1. Teori – Flamspridning

I samband med fenomen som flamspridning på en bränsleyta är det några olika faktorer som spelar in. Dessa är bl.a. temperatur, flampunkt, undre brännbarhetsgränsen, ytspänning osv.

För att flaman skall kunna spridas på bränsleytan måste bränslets temperatur vara så hög att den brännbara blandningen existerar på ett avstånd ovanför bränsleytan som är större än quenching avståndet för den aktuella bränsle-luft blandningen. Ett resultat av detta är att elektroderna ej får placeras för nära bränsleytan. Då dessa quenching avstånd är mycket små placeras elektroderna praktiskt ovanför detta avståndet.

Avdunstade ånga omedelbart ovanför den brännbara vätskeytan kan endast antändas om temperaturen på vätskan överstiger den sk. closed flash point. Av detta följer att temperaturer på vätskan som överstiger closed flash point ger en omedelbar antändning.

Enligt [Glassman et. al, 1980/81] kan flamspridningen på en vätskeyta delas in i tre olika steg:

1. En induktionsfas i vilken vätskan brinner vid antändningspunkten, vid gnistan.
2. En transitionsfas där flaman sprider sig från antändningspunkten, men är fortfarande påverkad av fenomenen från induktionsfasen.
3. Propagationsfas där flaman sprider sig över hela ytan helt oberoende av fenomenen i induktionsfasen.

4.2. Flamutbredning

I ovan beskrivna sammanhang kommer även den sk. expansionsfaktorn att påverka flamutbredningshastigheten. Expansionsfaktorn beror på temperaturskillnaden, ΔT , mellan vätskan och flammen.

I det ena fallet med antändning nära den adiabatiska flamtemperaturen, T_{ad} , vilken ligger runt 1550 K är temperaturförhållandet $1550/293 = 5,29$ dvs. en faktor 5.

I det andra fallet med antändning nära idealisk blandning är $T_{ad} \approx 2100$ K vilket ger temperaturförhållandet $2100/293 = 7,16$ dvs. en faktor 7.

4.3. Ytspänning

Då en flamma antänds över vätskeytan ökar vätsketemperaturen lokalt under flammen. Framför flammen i det icke brinnande området är fortfarande vätskeytan kall. Eftersom ytspänningen, σ , för en vätska är omvänt proportionell med temperaturen byggs en gradient upp som ger en rörelse av ytan från den varmare delen (låg ytspänning) till den kallare delen. [Glassman et. al, 1980/81]

$$\sigma \sim 1/T \quad [30]$$

$$u \sim \sigma^* h / \mu \quad [31]$$

där u är hastigheten vid ytan, h är höjden på det brännbara skiktet, T är temperaturen och μ är viskositeten.

5. Experimentella försök på flampunktsbestämning (flashpoint)

I detta kapitel redovisas de experimentella försöken på vätskorna. Information om försöksuppställning, mätningsteknik osv. redovisas.

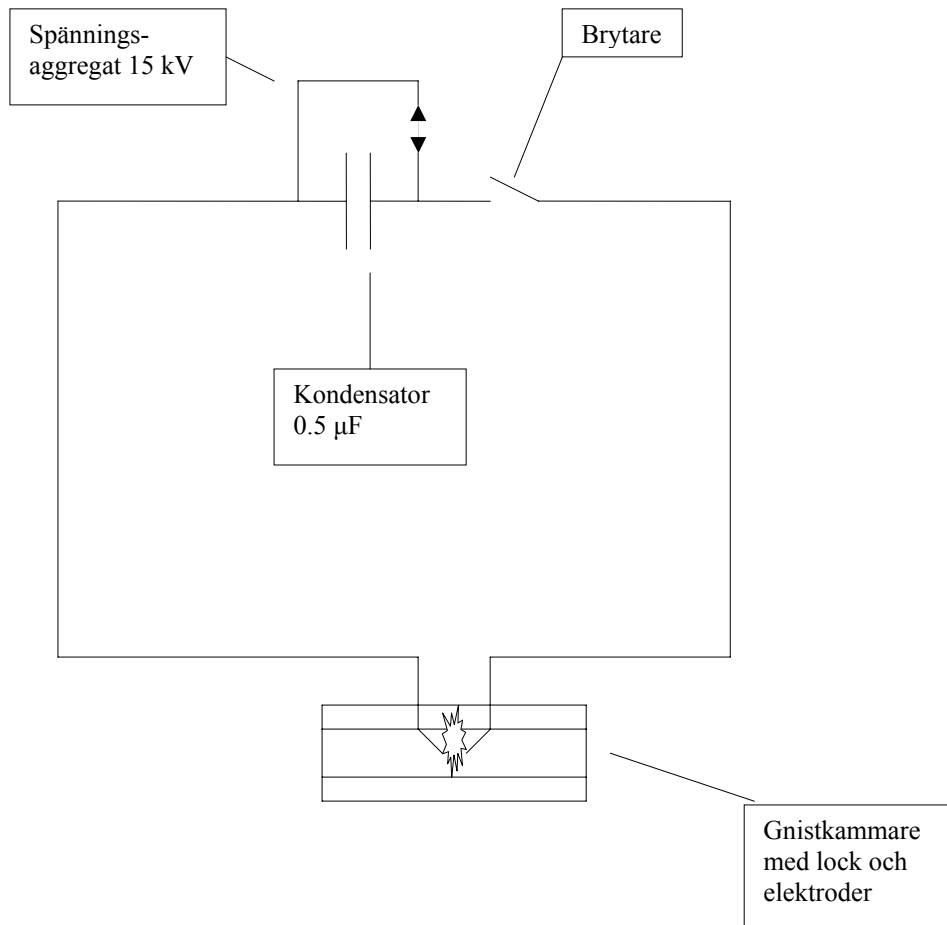
5.1. Försöksuppställning

För att genomföra experimentella antändningsförsök på alkohol- och vattenblandningar tillverkades en speciell provutrustning, en s.k. gnistkammare. Gnistkammarens mått är enligt följande: diameter 20 cm och dess höjd 10 cm. I locket på gnistkammaren monterades två elektroder för gnistbildning, som kan justeras i höjd – och sidled. Locket är även tryckavlastande. Själva gnistkammaren utgörs av ett speciellt glasmaterial.

På bild 1 och figur 16 nedan visas försöksutrustningen med bl.a. kondensator, spänningsaggregat, gnistkammare, kamera, termometer osv. För att göra de experimentella försöken har en hel del förberedelser gjorts. En försöksutrustning har tillverkats för ändamålet. En laborationsinstruktion, handledning, författades för denna provutrustning. Det som har studerats mest är sk. closed cup flashpoint.



Bild 1 Försöksanordning



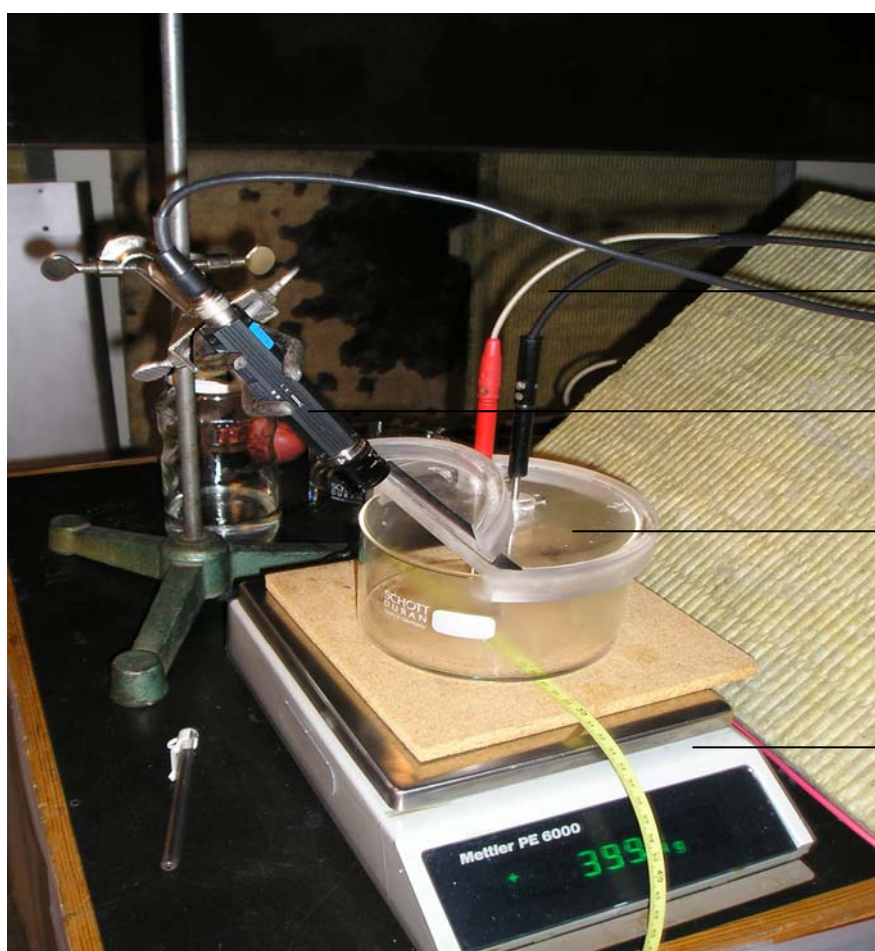
Figur 16 Schematisk bild över försöksanordningen

5.1.1. Gnistenergi

Med hjälp av ”gnistkammaren”, bild 2, skall flampunkten för vätskan bestämmas. Detta görs genom att alstra gnistor mellan elektroderna i gnistkammaren. För att kunna alstra dessa gnistor är elektroderna anslutna till ett spänningsaggregat, som i sin tur är sammankopplat med två kondensatorer, se figur 16. Kondensatorerna används för att kunna erhålla stora momentana gnistenergier (spänningar) i storleksordningen 10 J. Se **appendix B**.

Elektroden i gnistkammaren kan ändras i sitt läge, några cm, både i sidled (x-led) och höjdlid (y-led). Detta innebär att större gnistor kan alstras samt att avståndet från vätskeytan kan varieras. Detta bl.a. för att undersöka hur ”långt upp” från vätskeytan som de brännbara alkoholångorna kan antändas.

Se **appendix B** för framräkning av gnistenergier vid olika val av spänning på spänningsaggregatet. Den största energi som alstrats till gnistor är i storleksordningen 10 J, som i dessa sammanhang ligger långt över den minimala antändningsenergi som behövs. Antändningsenergin vid stökiometrisk blandning är i storleksordningen 1 mJ. Vid dessa försök används energier som är 10000 gånger större. Brännbarhetsgränsen påverkas av storleken på gnistgapet och gnistenergin. [Lewis et. al, 1961]



2 kablar från
gnistinduktor
för anslutning
till elektroder i
locket

Videokamera

Gnistkammare
med tryck-
avlastande lock

Elektrisk våg

Bild 2 Gnistkammaren

5.1.2. Avdunstning av etanol från en öppen behållare

För att få en någorlunda fingervisning om hur stor avdunstningen av etanol är från en öppen behållare gjordes ett experimentellt försök. Behållaren med etanol placerades på en våg varefter massan lästes av med jämna mellanrum. De olika beräkningsstegen redovisas i **appendix E**. Efter ett antal avläsningar och teoretisk beräkning med hjälp av formel [24] konstaterades att svaren var mycket snarlika dvs. avdunstningen uppmättes och beräknades till vardera 0,028 g/min. Formel [24] ger alltså ett bra värde på avdunstningen (massflödet).

5.1.3. Avdunstning av etanol från en sluten behållare

Här genomfördes samma försök som i 5.1.2. fast med ett lock på behållaren. De olika beräkningsstegen samt tillhörande diskussion redovisas i **appendix E**.

5.2. Mätutrustning

En våg används för att kunna mäta mängden, dvs. massan vatten och alkohol. Två termometrar används för att mäta vätske- och lufttemperatur. Även relativ fuktighet mäts.

Gnistorna alstras genom att två kondensatorer laddas upp och som i sin tur är sammankopplade med ett spänningsaggregat, se figur 16. Gnistornas spänning och energi kan varieras med hjälp av ett vred på gnistinduktorn. Se bild 1. Storleken på spänning och energi som alstras genom att vrida på vredet framgår av **appendix B**.

Vid de experimentella försöken används följande mätutrustning:

En cirkulär glasbehållare med lock (tryckavlastande), elektroder centriskt monterade i locket, våg, pipett, spänningsaggregat och videokamera. Se bild 2.

Videokameran används för att kontrollera försöket i efterhand, för att vara helt säker på att antändning dvs. flash, verkligen har inträffat. Videobandet kan spelas upp i slowmotion med 25 bilder per sekund dvs. 1/25 sekund mellan bilderna. Förutsättningen för att det skall bli bra kvalitet på bilderna är att det är mörkt i laboratoriet.

5.3. Flampunktsmätning - Procedur

Vätskeblandningen i glasbehållaren observeras visuellt och ibland även som nämnts ovan med hjälp av kamera för att med säkerhet konstatera om en antändning inträffat på vätskeytan. Med hjälp av kameran kan förbränningsförloppet och flamspridningen studeras i slow motion.

Vid de experimentella försöken på de olika brännbara vätskorna mäts vätsketemperaturen precis innan försöket med två elektriska termometrar. Även lufttemperatur och relativ fuktighet mäts. Som tidigare nämnts så används två elektroder i vätskebehållaren. De är anslutna till en elektrisk utrustning som alstrar gnistor mellan elektroderna.

Då lockets sluts över vätskan börjar en koncentrationsgradient direkt att ”byggas upp” ovanför vätskeytan. Efter ”lång tid” så är koncentrationen konstant i hela utrymmet(volymen) ovanför vätskeytan dvs. det har ingen betydelse var någonstans som elektroderna placeras i x,y,z-led. Är blandningsförhållandet tillräckligt brännbart så blir det en antändning, flash.

Vid försöken har ett elektrodavstånd, d , på 1,0 mm använts vid samtliga antändningsförsök. Avståndet från elektroderna till vätskeytan har vid alla försök varit 1,0 cm.

Vid closed-cup försöken har tiden efter att locket lagts på gnistkammaren varit 5 minuter till antändning. Under denna tid har en koncentrationsgradient byggts upp i gnistkammaren.

Som nämndes i 5.2. så används en videokamera för kontroll av antändningsförloppet.

5.4. Mätresultat

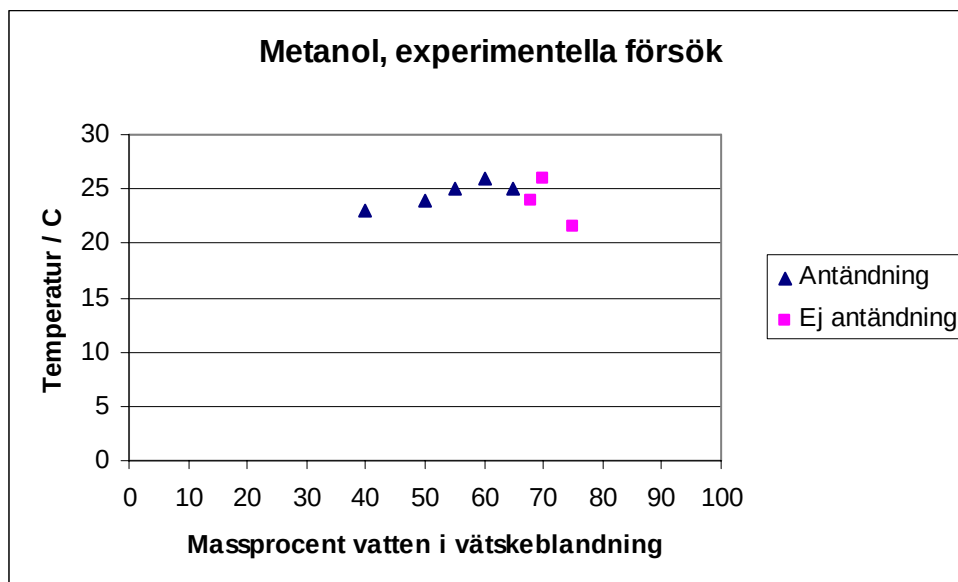
Då de experimentella försöken genomförts antecknas resultatet dvs. om antändning inträffat eller ej. De olika blandningsförhållandena, alkohol och vatten, plottas ut i respektive diagram. Punkterna visar hur flampunkten varierar med blandningsförhållandet alkohol och vatten. När dessa resultat jämförs med data hämtat från andra källor kan det konstateras att värdena stämmer ganska bra överens. I detta skall också läggas hänsyn till aktivitetskoefficientens inverkan på resultatet.

Vid kontroll av videofilmen efter försöket kan det konstateras att flamutbredningen på ytan sker radiellt utåt från centrum av behållaren. Flamfronten rör sig snabbt mot glasbehållarens kant under bråkdelen av en sekund.

Nedan i figurerna 17-19 redovisas de mätresultat som erhållits vid de experimentella försöken:

5.4.1. Metanol

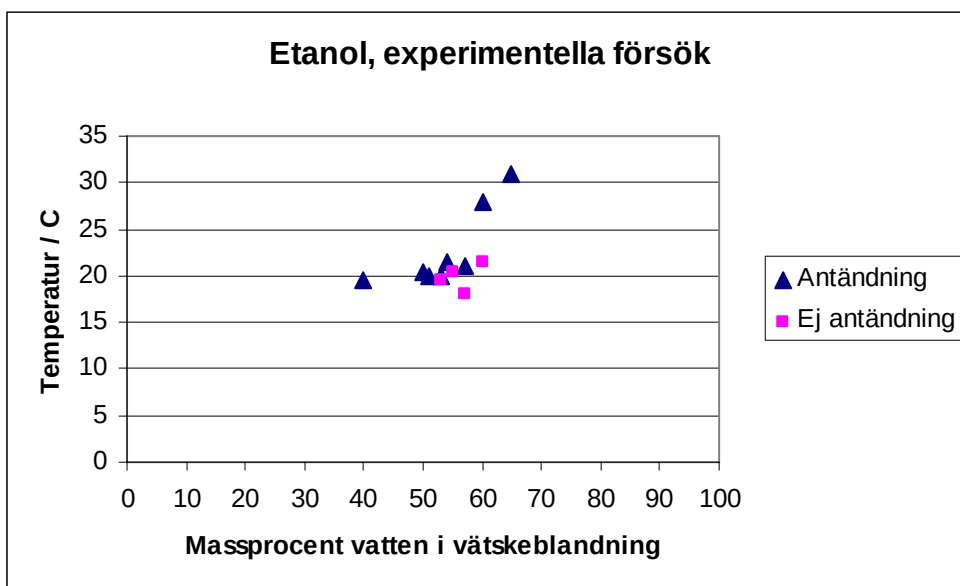
För metanol har följande mätvärden på flampunkt vid olika blandningsförhållanden uppmätts:



Figur 17 Diagram över flampunkt för metanol - och vattenblandningar

5.4.2. Etanol

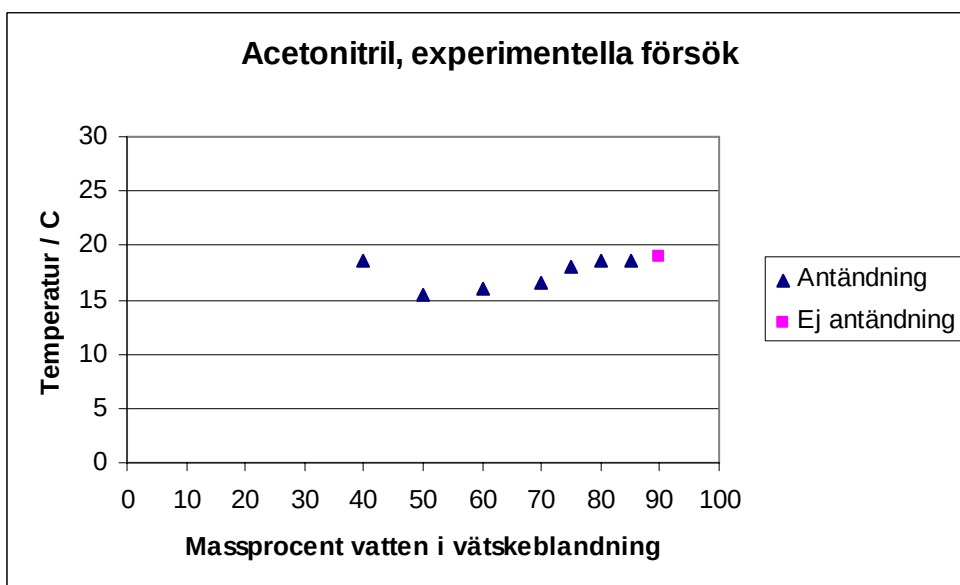
För etanol har följande mätvärden på flampunkt vid olika blandningsförhållanden uppmätts:



Figur 18 Diagram över flampunkt för etanol - och vattenblandningar

5.4.3. Acetonitril

För acetonitril har följande mätvärden på flampunkt vid olika blandningsförhållanden uppmätts:



Figur 19 Diagram över flampunkt för acetonitril - och vattenblandningar

5.5. Kommentarer

Vid försöken har rumstemperaturen varit någorlunda konstant. Någon typ av kyl- eller upphettningssanordning har inte använts vid försöken. Det är alltså svårt rent praktiskt att genomföra försöken med varierande temperatur i luften. Härav är det svårt att göra antändningsförsöken vid t.ex. flampunkten för ren alkohol. Istället har blandningsförhållandena varierats ganska mycket för att hitta flampunkten vid olika blandningar i det övre temperaturområdet dvs. då vatteninnehållet i blandningen varit hög. Vid försöken har det ibland varit svårt att se om en antändning inträffat. Här har kameran varit till stor hjälp för att konstatera om så är fallet.

Vid försöken med alkohol - och vattenblandningarna konstaterades att temperaturen på den blandade vätskan snabbt stiger. Har alkoholen rumstemperatur, c:a 21°C, och vattnet runt 5-6°C stiger temperaturen snabbt på den blandade vätskan till över 21°C. Det är alltså mycket energi som går åt att höja temperaturen på vattnet. Givetvis tas hänsyn till blandningsförhållandet, mängden vatten och mängden alkohol, men med t.ex. 70-30 viktsprocent med mest vatten, stiger temperaturen fort fast vattnet är kallt.

5.6. Felkällor

Vid de experimentella försöken har temperaturområdet varit begränsat till omgivningstemperaturen. Av den anledningen så finns det inte några mätvärden under 15°C och över 25°C. En annan felkälla kan vara gnistkammarens "täthet" dvs. om den släpper ut ångor som avdunstar. Hur tätt är locket? Detta påverkar i sin tur jämviktsförhållandet, gradienten, som byggs upp i gnistkammaren.

Framförallt då acetonitril användes var gnistkammaren placerad under fläkthuv och fläkten gick med full effekt. Detta pga. att acetonitril är hälsovådligt. Fläkteffekten kan märkbart ha påverkat gradientuppbyggnaden vid blandning av acetonitril med vatten i gnistkammaren då locket är öppet.

Vid kontroll om antändning inträffat eller ej användes som tidigare nämnts en videokamera. Videokameran visar en bild var 1/25 sekund. Antändningsförloppen är ibland så snabba att det även kan vara svårt att med hjälp av videokameran se om det "flashat" eller ej. Det är därför av stor vikt att ha en mörk omgivning vid de experimentella försöken.

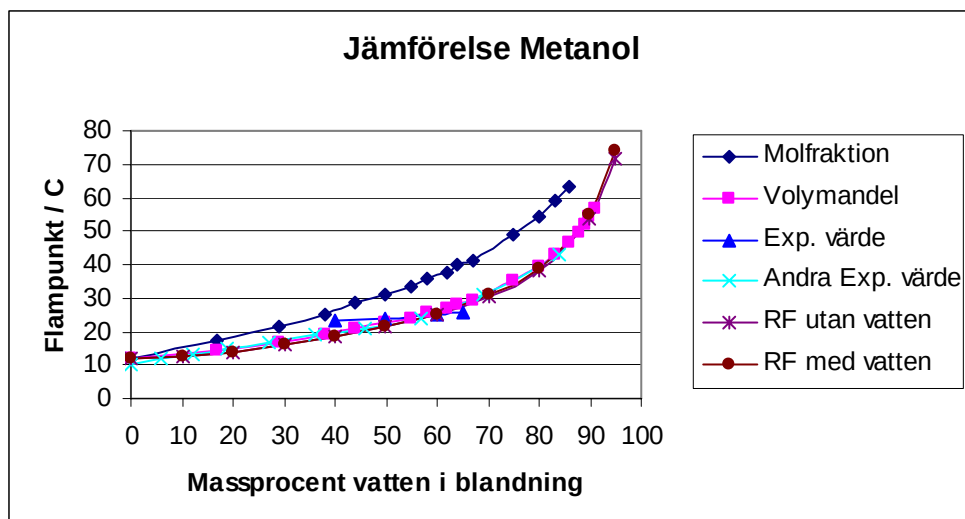
6. Jämförelse mellan experimentellt uppmätta och teoretiskt beräknade brännbarhetsgränser

Resultaten på de experimentella försöken (**Exp. värde**) har jämförts med de teoretiskt framräknade (**Molfraktion, Volymandel, RF utan vatten samt RF med vatten**). Värden från andra experimentella försök redovisas med (**Andra Exp. värde**). Se figurerna 20-22 nedan. ”**Andra Exp. värde**” är hämtade ur [Liaw et. al, 2003]. För acetonitril har inte några andra experimentella värden kunnat uppbringas och därav redovisas inte några sådana värden i figur 22.

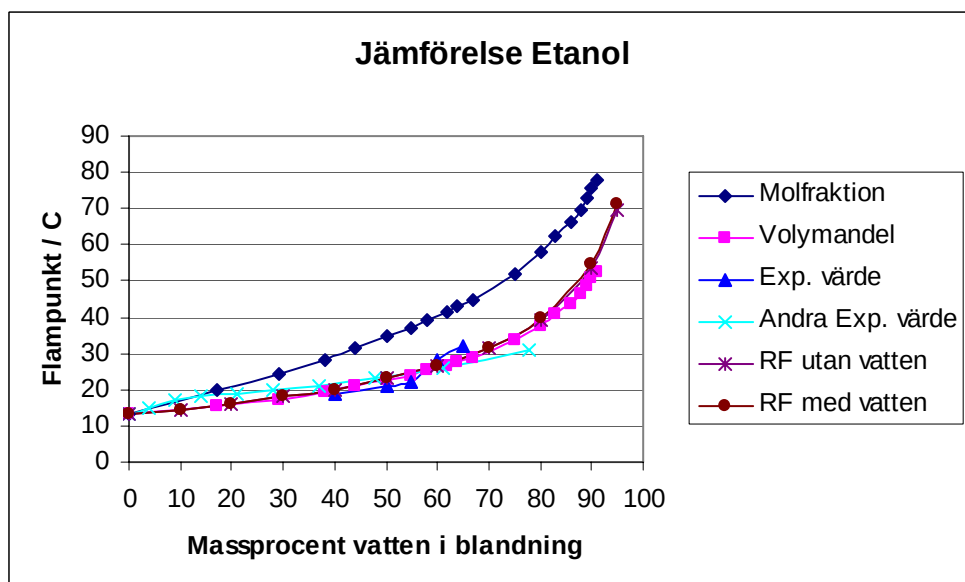
Då värdena jämförs konstateras att det finns en ganska så bra överensstämmelse, förutom vid beräkning med molfraktion. Användningen av volymsförhållandet i vätskan istället för molfraktionen i vätskan visar sig stämma bättre överens med de andra framräknade och experimentella värdena. Som jag ser det så är det viktigt att på ett enkelt och smidigt sätt kunna räkna fram flampunkten för en viss blandning av en brännbar vätska och vatten. Att kunna använda sig av EN formel och några ämneskonstanter är att föredra.

Som det har konstaterats i de olika rapporter som tagits fram de sista åren så har det hänt mycket på detta område. Ibland krävs det att utsläpp, olyckor osv. inträffar, med en allvarlig skada på miljön, för att nya metoder för beräkning osv. skall tas fram. Alkohol har ju ett stort användningsområde; det används både i industrin, hushåll, fordon osv. Därför är det viktigt att på ett bra sätt kunna beräkna om det finns risk för antändning vid olika blandningsförhållanden och temperaturer då så många är beroende av det på många olika användningsområden.

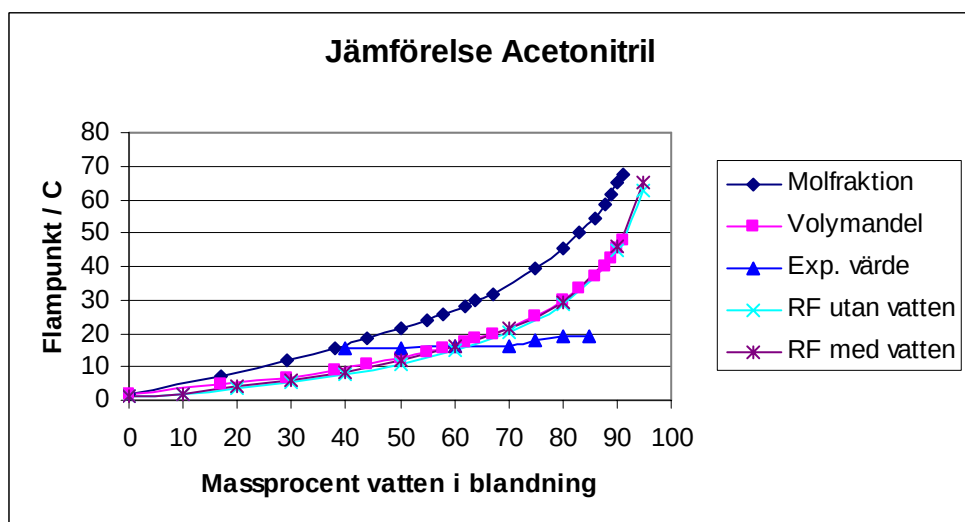
Ett klassiskt exempel under vinterhalvåret är att det används en större koncentration av alkohol i spolarvätskan i våra fordon för att förhindra frysning. Det innebär att den blandade spolarvätskan har en lägre flampunkt och är därmed mer brandfarlig. I ett flertal trafikolyckor med uppkommen brand har det spekulerats i om inte spolarvätskan har blivit den ”brännbara vätskan” som antänts. I många bilmodeller är behållaren för spolarvätskan placerad bakom strålkastaren och är därmed ganska utsatt vid frontalkrockar. Strömledningar finns ju också i närheten.



Figur 20 Jämförelse av flampunkt för metanol



Figur 21 Jämförelse av flampunkt för etanol



Figur 22 Jämförelse av flampunkt för acetonitril

7. Experimentella försök på flamspridning över vätskeytor

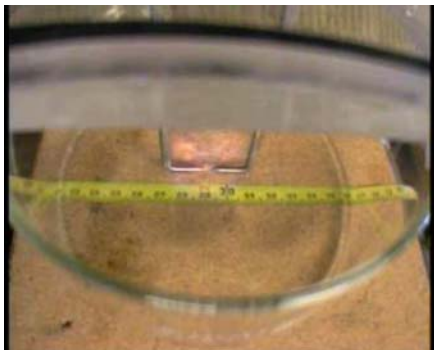
I samband med antändningsförsöken har flamspridningen över vätskeytan också studerats. I detta kapitel kommer detta fenomen att belysas. Flamspridningen har filmats med hjälp av filmkamera då de sker snabbt och för att därefter kunna studera fenomenet i slow motion.

7.1. Experimentella försök

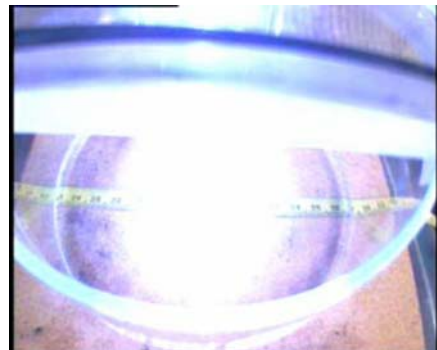
Under de experimentella försöken studerades flamspridningshastigheten över bränsleytan på etanol vid sk. **open cup**. Värdena jämfördes dels med ren alkohol och dels med vatteninblandning. Dessa försök påvisar att endast en liten mängd vatteninblandning minskar flamspridningshastigheten över vätskeytan. En slutsats av detta är att risken för antändning och därmed flamspridning minskas då alkoholen blandas ut med vatten. Hänsyn måste tas till omgivande temperatur.

7.1.1. Försöksserie med etanol

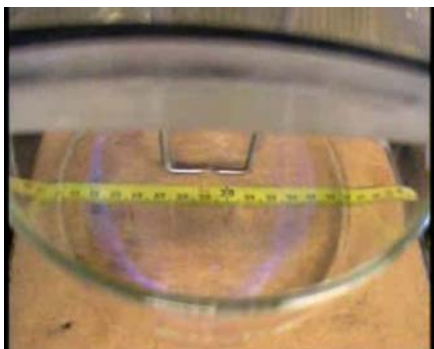
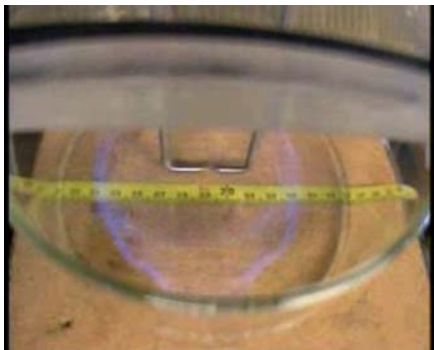
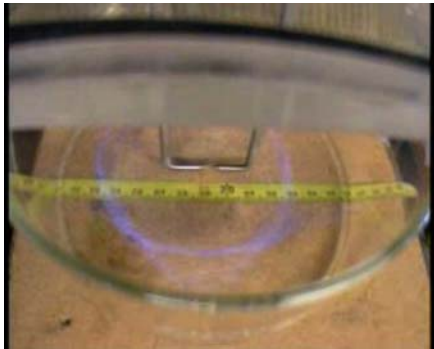
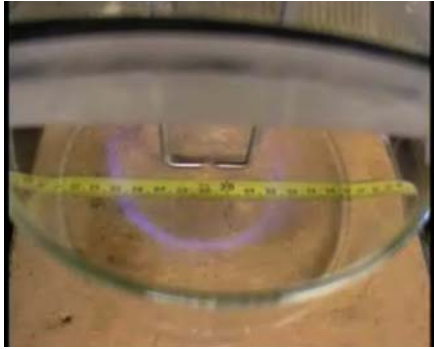
De experimentella försöken redovisas nedan i form av två bildserier. Vid försöken används samma utrustning som tidigare. Skillnaden i försökssupställningen är att lockets tryckavlastande del är öppen under hela försöket, dvs. sk. open cup test. Se bild 2. Observera även måttbandet i botten. Måttbandet och filmkameran används för att kunna uppskatta flamspridningshastigheten vid försöket. Bildserien till vänster, bildserie 1, är en blandning av 50-50 vikts-% etanol och vatten. Bildserien till höger, bildserie 2, utgörs av ren etanol. Försöken gav följande resultat på flamspridningshastigheten:



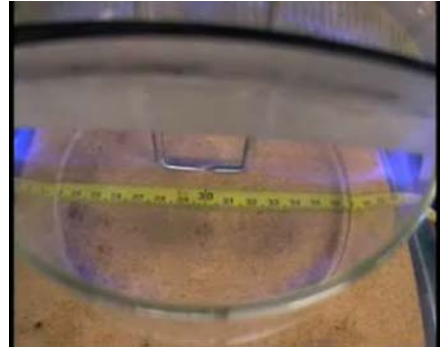
Bildserie 1 Open cup Gniskammaren



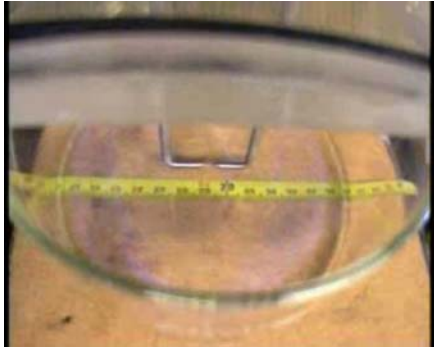
Bildserie 2 Open cup Gniskammaren



Bildserie 1 Open cup Gnistkammaren



Bildserie 2 Open cup Gnistkammaren



Bildserie 1 Open cup Gnistkammaren



Bildserie 2 Open cup Gnistkammaren

7.1.2. Kommentarer

Ovanstående bildserier visar flamspridningen över vätskeytan. Den blå-lila "ringen" syns tydligt i etanol-vatten blandningen. I försöket med ren etanol är förbränningen så snabb att den blå-lila "ringen" knappt hinner registreras av filmkameran. Tiden mellan de olika bildsekvenserna som är tagen med filmkameran är 0,04 (1/25) sekund.

7.2. Resultat

Vid försök som gjordes vid temperaturen 20°C har jämförelser gjorts av flamhastigheten för en blandning med ren etanol och en blandning med 50-50 vikts -% etanol och vatten.

Av bildserien framgår ganska tydligt att försöket med ren etanol ger en betydligt snabbare flamhastighet c:a en faktor 4. Detta konstateras om bildsekvenserna jämförs, dvs. 2 bilder för ren etanol mot 6 bilder för 50-50 blandningen.

Med hjälp av måttbandet kan flamhastigheten uppskattas approximativt.

Tabellen nedan visar flamhastigheten

Blandningsförhållande	Hastighet
Ren etanol	175 cm/s
50-50 vikts -%	45 cm/s

Hastigheten för ren etanol är 4-5 gånger större än den normala stökiometriska laminära flamhastigheten. Detta stämmer bra överens med resultat från andra försök [Roberts, 1966] Roberts konstaterade att flamhastigheten kunde vara upptill 5 gånger större än den laminära flamhastigheten för de förblandade kolväteföreningarna i ång-luft blandningar. Detta gäller speciellt för vätskor med låg flampunkt.

Försöket visar också tydligt att vatten i blandningen minskar flamhastigheten. I det aktuella fallet innebär en blandning med 50-50 vikts-% en minskning av hastigheten med 3-4 gånger. Vattnet verkar alltså som en sk. termisk ballast, som nämnts tidigare, vid förbränningen.

Slutsats: Flamhastigheten minskar då vatten finns i blandningen. Detta är ganska så logiskt då vatten utgör en sk. termisk ballast i vätskeblandningen.

7.3. Tidigare försök och erfarenheter

Tidigare försök [Glassman et.al, 1980/81] har påvisat att den högsta flamspridningshastigheten på bränsleytan uppstår då vätsketemperaturen ger ett ångtryck som är lika med partialtrycket på ångan i den stökiometriska blandningen med luft. Försöken har också påvisat att en liten inblandning av vatten i alkoholen minskar flamspridningshastigheten över bränsleytan märkbart.

8. Slutsatser och diskussion

De olika kapitlen har från början behandlat de grundläggande principerna och efterhand har de olika sambanden mellan bl.a. ångtryck, flampunkt, undre brännbarhetsgräns osv. redovisats.

Grunden till examensarbetet var som nämnades i inledningen att undersöka antändning av alkoholer (vätskor) uppblandade med vatten. Under arbetets gång har många nya upptäckter gjorts, samtidigt som "gamla eviga sanningar" hänger med. Kombinationen med en teoretisk del och en experimentell del ger nya insikter i ämnesområdet.

Det mest intressanta med rapporten är det "enkla" beräkningsförfarandet av flampunkten för en vätskeblandning som görs med Liaw's et.al formel. Denna formel är ganska enkel att använda. Användningen av volymförhållandet i vätskan istället för molfraktionen i vätskan vid beräkning av flampunkten var en total överraskning som upptäcktes av en ren tillfällighet. Det har således konstaterats att det inte fungerar att beräkna flampunkten med molfraktionen. Beräkning med volymförhållandet stämmer däremot väl överens med de experimentella värdena. Termisk släckteori ger samma resultat som volymförhållandet för dessa vätskor vid låg vattenånghalt.

Som påtalats tidigare i rapporten har de teoretiskt framräknade värdena stämt bra överens med de experimentella värdena. Även vid jämförelse med värden från andra källor så är överensstämmelsen bra. Det är alltså av största vikt att använda ett enkelt och säkert sätt att beräkna flampunkten för alkohol - och vattenblandningar.

Vid praktiska tillämpningar som

- Lagring av spolarvätska
- Dragskåpsförsök
- Användning inom bl.a. läkemedelsindustrin
- Förebyggande syfte
- Räddningsinsatser
- Flampering

är det användbart för att förutse/beräkna flampunkten.

Vatten har som tidigare nämnts en inverkan som termisk ballast i blandningen. Vid försöken med ytflamsspridning kunde det konstateras att flamhastigheten varierade ganska mycket med vatten i blandningen. Vid ren etanol var flamhastigheten c:a 175 cm/s. Vid blandning med 50-50 vikts-% etanol och vatten minskade hastigheten till c:a 45 cm/s. Det skiljer alltså nästan en faktor 4 på flamhastigheten.

Vid omedelbar antändning har alltså flampunkten uppnåtts. Om antändningen är fördröjd innebär det att diffusionen har en större inverkan på antändningsförloppet.

I ovanstående försök får man dock ta hänsyn till de felkällor som uppkommer i samband med experimentella försök. I just dessa försök har försöksutrusningen, gnistkammaren, ganska så liten diameter. Det blir svårt att uppskatta flamhastigheten då hänsyn måste tas till expansionen i höjddled av reaktionszonen.

För vätskorna metanol, etanol och acetonitril ligger kokpunkten under 82°C vilket innebär att det förångade vattnet inte nämnvärt påverkar brännbarhetsgränserna.

Vid beräkning med Liaw's formel för vätskorna ovan försummas vattenångans släckeffekt, dvs. vattenångans förmåga att ta upp värme, sk. c_p verkan.

Inom detta belysta område, antändning av polära vätskor uppblandade med vatten, finns det säkert mer att undersöka. Det är ett stort ämnesområde som berör många teorier. Att vidare undersöka detta ämnesområde är kanske ett framtida examensarbete.

Referenser

Andersson, P., "Evaluation and Mitigation of Industrial Fire Hazards", 1997.

Burgoyne, J. H., Roberts, A. F., and Alexander, J. L., "The significance of open flash points", J. Institute of Petroleum, 53, sid. 338-341, 1967.

Drysdale, D., "An Introduction to Fire Dynamics", 1987.

Ewing, C.T. & Beyler, C. & Carhart, H.T., "Extinguishment of Class B Flames by Thermal Mechanisms; Principles Underlying a Comprehensive Theory; Prediction of Flame Extinguishing Effectiveness", J. of Fire Protection Engineering, 6 (1), sid. 23-54, 1994.

Glassman, I., Dryer, F., "Flame spreading across liquid fuels", Fire Safety Journal, 3, sid. 123-138, 1980/81.

Lewis, B., and von Elbe, G., "Combustion, Flames and Explosions of Gases", 1961.

Liaw, H-J., and Chiu, Y-Y., "The prediction of the flash point for binary aqueous-organic solutions", Journal of Hazardous Materials, A101, sid. 83-106, 2003.

Roberts, A.F., Ph.D. Thesis, Imperial College, London, England, 1966

Salzman, W.R., "Clapeyron and Clausius-Clapeyron Equations", 2004.

Sprängämnesinspektionen, 1998, SÄIFS 1998:6.

Särdqvist, S., "Vatten och andra släckmedel", 2002.

Vázquez, M., "Binary mixture flammability characteristics for hazard assessment", 2005.

Zabetakis, M.G., "Flammability characteristics of combustible gases and vapors", Bureau of mines, Bulletin 627, USA, 1965.

Zumdahl, S., "Chemical principles", 1995.

www.glue.umd.edu/~nsw/ench250/antoine.dat (Antoine Coefficients)

Appendix A

De teoretiska beräkningarna för de olika vätskorna metanol (A1), etanol (A2) och acetonitril (A3) redovisas nedan. För varje vätska görs tre olika beräkningar:

- Fullständig förbränning av vätskan utan vatteninblandning
- 50-vikts% blandning, där ingen hänsyn tas till vattnets inverkan i ångfas
- 50-vikts% blandning, där hänsyn tas till vattnets inverkan i ångfas

Observera att det är blandning i viktsprocent mellan vätskan och vatten.

A1. Metanol, antändningsberäkningar

UB = 6,7 vol % (undre brännbarhetsgränsen)

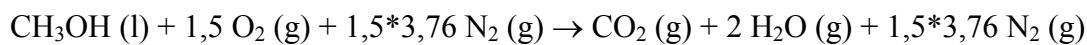
ÖB = 36 vol % (övre brännbarhetsgränsen)

$P_{\text{atm}} = 760 \text{ mmHg}$ (normalt atmosfärstryck)

$P_a = 760 * 0,067 = 50,92 \text{ mmHg}$ (vid UB)

Beräkning utan vatteninblandning

Reaktionsformel för fullständig förbränning av metanol:



Ur nedanstående formel beräknas adiabatiska flamtemperaturen för aktuell blandning:
[Drysdale, 1987]

$$\Delta H_c = (\sum n * c_p) * \Delta T \quad [32]$$

$$\Delta H_c = 635 * 10^3 \text{ J / mol}$$

$$(\sum n * c_p) = (54,3 + 2 * 41,2 + 1,5 * 3,76 * 32,7) = 321,128 \text{ J / K}$$

$$\Delta T = \Delta H_c / (\sum n * c_p) = 635 * 10^3 / 321,128 = 1977 \text{ K}$$

Omgivningstemperatur = 20°C = 293 K vilket ger

$$T = (1977 + 293) \text{ K} = 2250 \text{ K} \Rightarrow \text{antändning (} T > 1550 \text{ K)}$$

Vid sådana beräkningar brukar man räkna med en adiabatisk flamtemperatur på c:a 1550 K.

Beräkning vid T = 25°C, 50-vikts% (ingen hänsyn till vattnets inverkan i ångfas)

$$m_1 = 50 \text{ g} \quad M_1 = 18 \text{ g/mol} \quad n_1 = m_1 / M_1 = 50 / 18 \text{ mol} = 2,78 \text{ mol}$$

$$m_2 = 50 \text{ g} \quad M_2 = 32 \text{ g/mol} \quad n_2 = m_2 / M_2 = 50 / 32 \text{ mol} = 1,56 \text{ mol}$$

$$n_{\text{tot}} = 1,56 + 2,78 = 4,34 \text{ mol}$$

$$\text{Molfraktion: } n_1 / n_{\text{tot}} = 2,78 / 4,34 = 0,64$$

$$\text{Molfraktion: } n_2 / n_{\text{tot}} = 1,56 / 4,34 = 0,36$$

Ångtryck för respektive vätska vid 25°C:

$$P_1 = 3,13 * 0,64 = 2,00 \text{ kPa}$$

$$P_2 = 14,98 * 0,36 = 5,39 \text{ kPa}$$

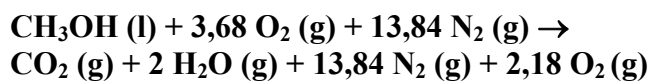
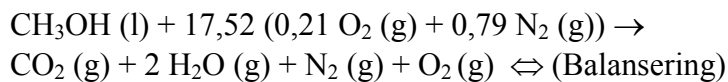
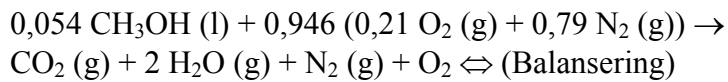
$$P_1 / P_{\text{atm}} = 2,00 / 100 = 0,020$$

$$P_2 / P_{\text{atm}} = 5,39 / 100 = 0,054$$

När hänsyn ej skall tas till vattnet (termisk ballast) i ångan blir molfraktionen i ångfasen:

$$Y_2 = 0,054 \quad Y_{\text{air}} = 1 - 0,054 = 0,946$$

Reaktionsformeln får följande uppställning



Ur nedanstående formel beräknas adiabatiska flamtemperaturen för aktuell blandning:

$$\Delta H_c = (\sum n \cdot c_p) \cdot \Delta T$$

$$\Delta H_c = 635 \cdot 10^3 \text{ J / mol}$$

$$(\sum n \cdot c_p) = (54,3 + 2 \cdot 41,2 + 13,84 \cdot 32,7 + 2,18 \cdot 34,9) = 665,35 \text{ J / K}$$

$$\Delta T = \Delta H_c / (\sum n \cdot c_p) = 635 \cdot 10^3 / 665,35 = 954 \text{ K}$$

$$T = (954 + 293) \text{ K} = 1247 \text{ K} \Rightarrow \text{ej antändning (T > 1550 K)}$$

Enligt beräkningen blir det ingen antändning.

Beräkning vid T = 25°C, 50-vikts% (hänsyn till vattnets inverkan i ångfas)

$$m_1 = 50 \text{ g} \quad M_1 = 18 \text{ g/mol} \quad n_1 = m_1 / M_1 = 50 / 18 \text{ mol} = 2,78 \text{ mol}$$

$$m_2 = 50 \text{ g} \quad M_2 = 32 \text{ g/mol} \quad n_2 = m_2 / M_2 = 50 / 32 \text{ mol} = 1,56 \text{ mol}$$

$$n_{\text{tot}} = 1,56 + 2,78 = 4,34 \text{ mol}$$

$$\text{Molfraktion: } n_1 / n_{\text{tot}} = 2,78 / 4,34 = 0,64$$

$$\text{Molfraktion: } n_2 / n_{\text{tot}} = 1,56 / 4,34 = 0,36$$

Ångtryck för respektive vätska vid 25°C:

$$P_1 = 3,13 \cdot 0,64 = 2,00 \text{ kPa}$$

$$P_2 = 14,98 \cdot 0,36 = 5,39 \text{ kPa}$$

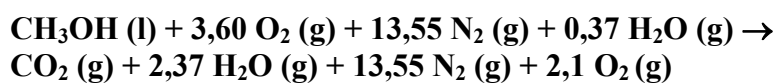
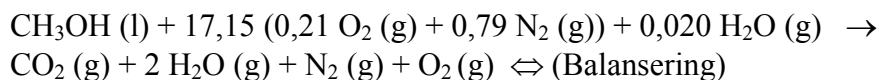
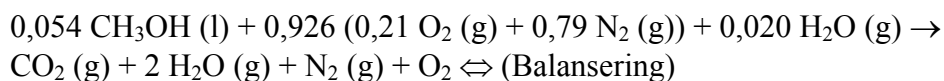
$$P_1 / P_{\text{atm}} = 2,00 / 100 = 0,020$$

$$P_2 / P_{\text{atm}} = 5,39 / 100 = 0,054$$

Då hänsyn skall tas till vattnet (termisk ballast) i ångan blir molfraktionen i ångfasen:

$$Y_2 = 0,054 \quad Y_2 = 0,020 \quad Y_{\text{air}} = 1 - (0,054 + 0,020) = 0,926$$

Reaktionsformeln får följande uppställning



Ur nedanstående formel beräknas adiabatiska flamtemperaturen för aktuell blandning:

$$\Delta H_c = (\sum n \cdot c_p) \cdot \Delta T$$

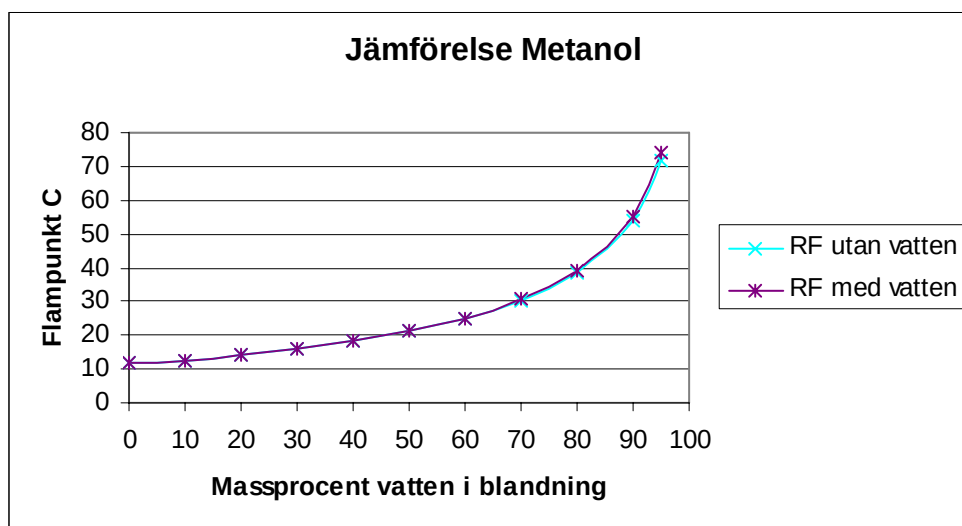
$$\Delta H_c = 635 \cdot 10^3 \text{ J / mol}$$

$$(\sum n \cdot c_p) = (54,3 + 2,37 \cdot 41,2 + 13,55 \cdot 32,7 + 2,1 \cdot 34,9) = 668,32 \text{ J / K}$$

$$\Delta T = \Delta H_c / (\sum n \cdot c_p) = 635 \cdot 10^3 / 668,32 = 950 \text{ K}$$

$$T = (950 + 293) \text{ K} = 1243 \text{ K} \Rightarrow \text{ej antändning (} T > 1550 \text{ K)}$$

Jämförelse mellan de två olika beräkningarna, utan eller med vatten i reaktionen, redovisas nedan i figur 9.



Figur 9 Jämförelse för Metanol utan och med vatten i reaktionsformeln

A2. Etanol, antändningsberäkningar

UB = 3,3 vol % (undre brännbarhetsgränsen)

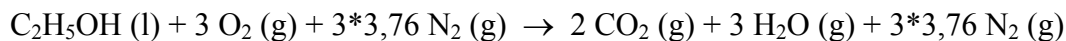
ÖB = 19 vol % (övre brännbarhetsgränsen)

$P_{\text{atm}} = 760 \text{ mmHg}$ (normalt atmosfärstryck)

$P_a = 760 * 0,033 = 25,08 \text{ mmHg}$ (vid UB)

Beräkning utan vatteninblandning

Reaktionsformel för fullständig förbränning av etanol i vattenblandning:



Ur nedanstående formel beräknas adiabatiska flamtemperaturen för aktuell blandning:

$$\Delta H_c = (\sum n * c_p) * \Delta T$$

$$\Delta H_c = 1232 * 10^3 \text{ J / mol}$$

$$(\sum n * c_p) = (2*54,3 + 3*41,2 + 11,28*32,7) = 601,06 \text{ J / K}$$

$$\Delta T = \Delta H_c / (\sum n * c_p) = 1232 * 10^3 / 601,06 = 2050 \text{ K}$$

Omgivningstemperatur = 20°C = 293 K vilket ger

$T = (2050 + 293) \text{ K} = 2343 \text{ K} \Rightarrow$ antändning ($T > 1550 \text{ K}$)

Beräkning vid T = 25°C, 50-vikts% (ingen hänsyn till vattnets inverkan i ångfas)

$$m_1 = 50 \text{ g} \quad M_1 = 18 \text{ g/mol} \quad n_1 = m_1 / M_1 = 50 / 18 \text{ mol} = 2,78 \text{ mol}$$

$$m_2 = 50 \text{ g} \quad M_2 = 46 \text{ g/mol} \quad n_2 = m_2 / M_2 = 50 / 46 \text{ mol} = 1,09 \text{ mol}$$

$$n_{\text{tot}} = 1,09 + 2,78 = 3,87 \text{ mol}$$

$$\text{Molfraktion: } n_1 / n_{\text{tot}} = 2,78 / 3,87 = 0,72$$

$$\text{Molfraktion: } n_2 / n_{\text{tot}} = 1,09 / 3,87 = 0,28$$

Ångtryck för respektive vätska vid 25°C:

$$P_1 = 3,13 * 0,72 = 2,25 \text{ kPa}$$

$$P_2 = 7,14 * 0,28 = 2,00 \text{ kPa}$$

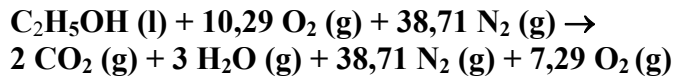
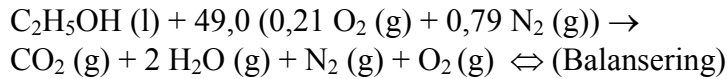
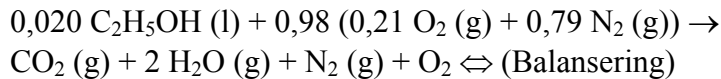
$$P_1 / P_{\text{atm}} = 2,25 / 100 = 0,025$$

$$P_2 / P_{\text{atm}} = 2,00 / 100 = 0,020$$

När hänsyn ej skall tas till vattnet (termisk ballast) i ångan blir molfractionen i ångfasen:

$$Y_2 = 0,020 \quad Y_{\text{air}} = 1 - 0,020 = 0,98$$

Reaktionsformeln får följande uppställning



Ur nedanstående formel beräknas adiabatiska flamtemperaturen för aktuell blandning:

$$\Delta H_c = (\sum n \cdot c_p) \cdot \Delta T$$

$$\Delta H_c = 1232 \cdot 10^3 \text{ J / mol}$$

$$(\sum n \cdot c_p) = (2 \cdot 54,3 + 3 \cdot 41,2 + 38,71 \cdot 32,7 + 7,29 \cdot 34,9) = 1752,44 \text{ J / K}$$

$$\Delta T = \Delta H_c / (\sum n \cdot c_p) = 1232 \cdot 10^3 / 1752,44 = 703 \text{ K}$$

$$T = (703 + 293) \text{ K} = 996 \text{ K} \Rightarrow \text{ej antändning (T > 1550 K)}$$

Enligt beräkningen blir det inte antändning.

Beräkning vid T = 25°C, 50-vikts% (hänsyn till vattnets inverkan i ångfas)

$$m_1 = 50 \text{ g} \quad M_1 = 18 \text{ g/mol} \quad n_1 = m_1 / M_1 = 50 / 18 \text{ mol} = 2,78 \text{ mol}$$

$$m_2 = 50 \text{ g} \quad M_2 = 46 \text{ g/mol} \quad n_2 = m_2 / M_2 = 50 / 46 \text{ mol} = 1,09 \text{ mol}$$

$$n_{\text{tot}} = 1,09 + 2,78 = 3,87 \text{ mol}$$

$$\text{Molfraktion: } n_1 / n_{\text{tot}} = 2,78 / 3,87 = 0,72$$

$$\text{Molfraktion: } n_2 / n_{\text{tot}} = 1,09 / 3,87 = 0,28$$

Ångtryck för respektive vätska vid 25°C:

$$P_1 = 3,13 \cdot 0,72 = 2,25 \text{ kPa}$$

$$P_2 = 7,14 \cdot 0,28 = 2,00 \text{ kPa}$$

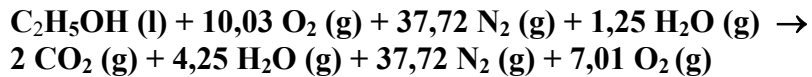
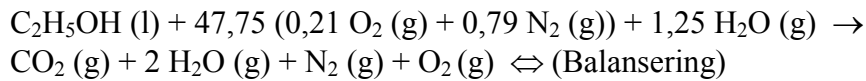
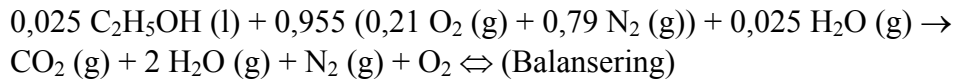
$$P_1 / P_{\text{atm}} = 2,25 / 100 = 0,025$$

$$P_2 / P_{\text{atm}} = 2,00 / 100 = 0,020$$

När hänsyn skall tas till vattnet (termisk ballast) i ångan blir molfractionen i ångfasen:

$$Y_1 = 0,025 \quad Y_2 = 0,020 \quad Y_{\text{air}} = 1 - 0,045 = 0,955$$

Reaktionsformeln får följande uppställning



Ur nedanstående formel beräknas adiabatiska flamtemperaturen för aktuell blandning:

$$\Delta H_c = (\sum n \cdot c_p) \cdot \Delta T$$

$$\Delta H_c = 1232 \cdot 10^3 \text{ J / mol}$$

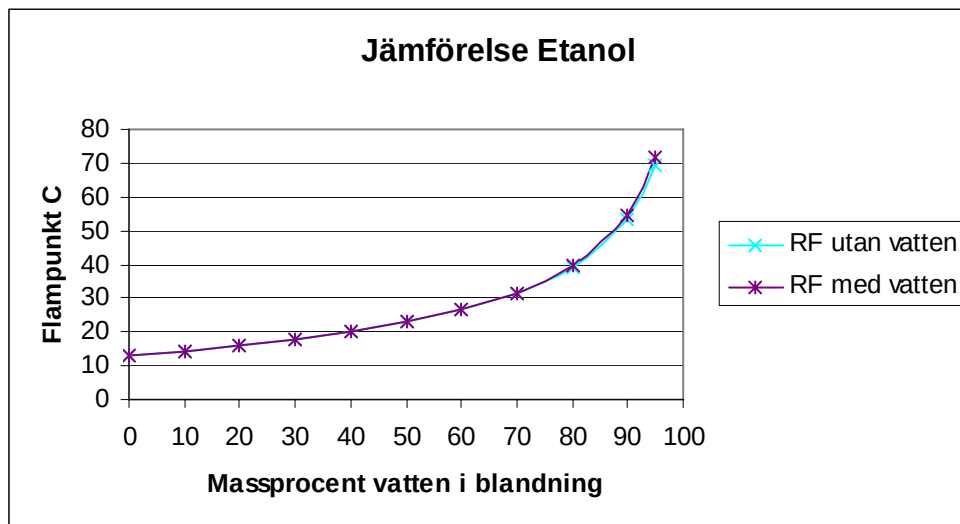
$$(\sum n \cdot c_p) = (2 \cdot 54,3 + 4,25 \cdot 41,2 + 37,72 \cdot 32,7 + 7,01 \cdot 34,9) = 1761,8 \text{ J / K}$$

$$\Delta T = \Delta H_c / (\sum n \cdot c_p) = 1232 \cdot 10^3 / 1761,8 = 699 \text{ K}$$

$$T = (699 + 293) \text{ K} = 992 \text{ K} \Rightarrow \text{ej antändning (} T > 1550 \text{ K)}$$

Enligt beräkningen blir det inte antändning.

Jämförelse mellan de två olika beräkningarna, utan eller med vatten i reaktionen, redovisas nedan i figur 10.



Figur 10 Jämförelse för Etanol utan och med vatten i reaktionsformeln

A3. Acetonitril, antändningsberäkningar

UB = 3,0 vol % (undre brännbarhetsgränsen)

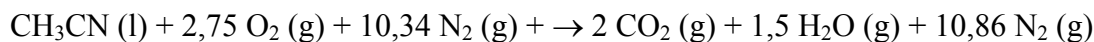
ÖB = 16 vol % (övre brännbarhetsgränsen)

$P_{\text{atm}} = 760 \text{ mmHg}$ (normalt atmosfärstryck)

$P_a = 760 * 0,03 = 22,8 \text{ mmHg}$ (vid UB)

Beräkning utan vatteninblandning

Reaktionsformel för fullständig förbränning av acetonitril i vattenblandning:



Ur nedanstående formel beräknas adiabatiska flamtemperaturen för aktuell blandning:

$$\Delta H_c = (\sum n * c_p) * \Delta T$$

$$\Delta H_c = 1247 * 10^3 \text{ J / mol}$$

$$(\sum n * c_p) = (2 * 54,3 + 2,5 * 41,2 + 10,86 * 32,7)$$

$$\Delta T = \Delta H_c / (\sum n * c_p) = 1247 * 10^3 / 927,407 = 1345 \text{ K}$$

Omgivningstemperatur = 20°C = 293 K vilket ger

$$T = (1328 + 293) \text{ K} = 1621 \text{ K} \Rightarrow \text{antändning (T > 1550 K)}$$

Beräkning vid T = 25°C, 50-vikts% (ingen hänsyn till vattnets inverkan i ångfas)

$$m_1 = 50 \text{ g} \quad M_1 = 18 \text{ g/mol} \quad n_1 = m_1 / M_1 = 50 / 18 \text{ mol} = 2,78 \text{ mol}$$

$$m_2 = 50 \text{ g} \quad M_2 = 41 \text{ g/mol} \quad n_2 = m_2 / M_2 = 50 / 41 \text{ mol} = 1,22 \text{ mol}$$

$$n_{\text{tot}} = 1,22 + 2,78 = 4,0 \text{ mol}$$

$$\text{Molfraktion: } n_1 / n_{\text{tot}} = 2,78 / 4,0 = 0,695$$

$$\text{Molfraktion: } n_2 / n_{\text{tot}} = 1,22 / 4,0 = 0,305$$

Ångtryck för respektive vätska vid 25°C:

$$P_1 = 3,13 * 0,695 = 2,18 \text{ kPa}$$

$$P_2 = 11,66 * 0,305 = 3,55 \text{ kPa}$$

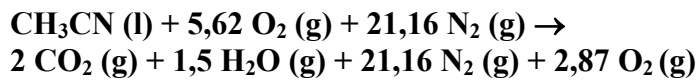
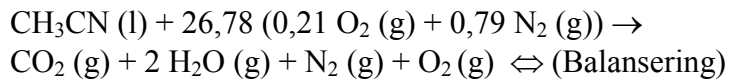
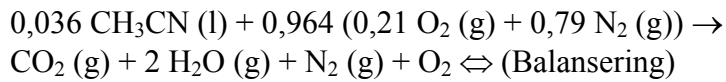
$$P_1 / P_{\text{atm}} = 2,18 / 100 = 0,022$$

$$P_2 / P_{\text{atm}} = 3,55 / 100 = 0,036$$

När hänsyn ej skall tas till vattnet (termisk ballast) i ångan blir molfraktionen i ångfasen:

$$Y_2 = 0,036 \quad Y_{\text{air}} = 1 - 0,036 = 0,964$$

Reaktionsformeln får följande uppställning



Ur nedanstående formel beräknas adiabatiska flamtemperaturen för aktuell blandning:

$$\Delta H_c = (\sum n \cdot c_p) \cdot \Delta T$$

$$\Delta H_c = 1232 \cdot 10^3 \text{ J / mol}$$

$$(\sum n \cdot c_p) = (2 \cdot 54,3 + 1,5 \cdot 41,2 + 15,73 \cdot 32,7 + 1,3 \cdot 34,9) = 730,14 \text{ J / K}$$

$$\Delta T = \Delta H_c / (\sum n \cdot c_p) = 1247 \cdot 10^3 / 730,14 = 1708 \text{ K}$$

$$T = (1708 + 293) \text{ K} = 2001 \text{ K} \Rightarrow \text{antändning (T > 1550 K)}$$

Enligt beräkningen blir det antändning.

Beräkning vid T = 25°C, 50-vikts% (hänsyn till vattnets inverkan i ångfas)

$$m_1 = 50 \text{ g} \quad M_1 = 18 \text{ g/mol} \quad n_1 = m_1 / M_1 = 50 / 18 \text{ mol} = 2,78 \text{ mol}$$

$$m_2 = 50 \text{ g} \quad M_2 = 41 \text{ g/mol} \quad n_2 = m_2 / M_2 = 50 / 41 \text{ mol} = 1,22 \text{ mol}$$

$$n_{\text{tot}} = 1,22 + 2,78 = 4,0 \text{ mol}$$

$$\text{Molfraktion: } n_1 / n_{\text{tot}} = 2,78 / 4,0 = 0,695$$

$$\text{Molfraktion: } n_2 / n_{\text{tot}} = 1,22 / 4,0 = 0,305$$

Ångtryck för respektive vätska vid 25°C:

$$P_1 = 3,13 \cdot 0,695 = 2,18 \text{ kPa}$$

$$P_2 = 11,66 \cdot 0,305 = 3,55 \text{ kPa}$$

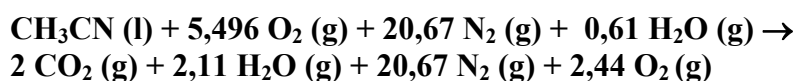
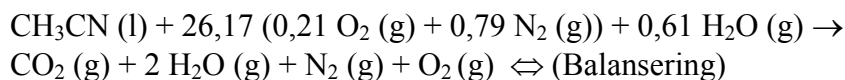
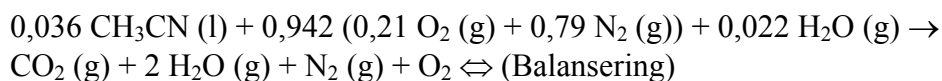
$$P_1 / P_{\text{atm}} = 2,18 / 100 = 0,022$$

$$P_2 / P_{\text{atm}} = 3,55 / 100 = 0,036$$

När hänsyn skall tas till vattnet (termisk ballast) i ångan blir molfraktionen i ångfasen:

$$Y_1 = 0,022 \quad Y_2 = 0,036 \quad Y_{\text{air}} = 1 - 0,058 = 0,942$$

Reaktionsformeln får följande uppställning:



Ur nedanstående formel beräknas adiabatiska flamtemperaturen för aktuell blandning:

$$\Delta H_c = (\sum n \cdot c_p) \cdot \Delta T$$

$$\Delta H_c = 1232 \cdot 10^3 \text{ J / mol}$$

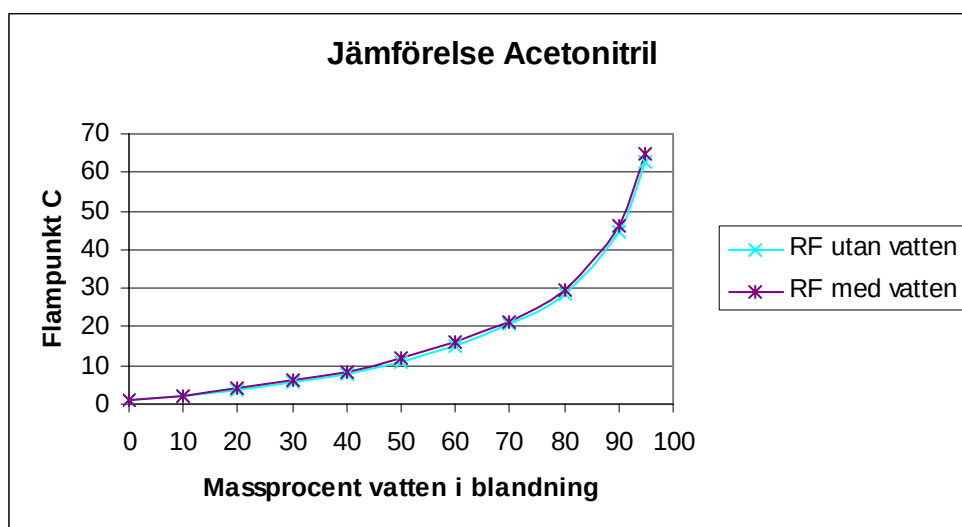
$$(\sum n \cdot c_p) = (2 \cdot 54,3 + 2,11 \cdot 41,2 + 20,67 \cdot 32,7 + 2,44 \cdot 34,9) = 956,60 \text{ J / K}$$

$$\Delta T = \Delta H_c / (\sum n \cdot c_p) = 1247 \cdot 10^3 / 956,60 = 1304 \text{ K}$$

$$T = (1304 + 293) \text{ K} = 1597 \text{ K} \Rightarrow \text{antändning (T > 1550 K)}$$

Enligt beräkningen blir det antändning. Värdet ligger mycket nära den adiabatiska flamtemperaturen.

Jämförelse mellan de två olika beräkningarna, utan eller med vatten i reaktionen, redovisas nedan i figur 11.



Figur 11 Jämförelse för Acetonitril utan och med vatten i reaktionsformeln

Appendix B

Spänningsaggregat

Förklaring:
Se nedan

Väljare	Spänning / Volt U	Energi / Joule E
1	9	2,10E-05
2	344	0,0305
3	1635	0,69
4	2572	1,7
5	3788	3,7
6	4775	5,9
7	6090	9,6
8	7380	14
9	8760	19,8

$$E=0.5 \cdot C \cdot U \cdot U$$

$$C=5.2 \cdot E-07 \text{ Farad}$$

Vid de experimentella försöken användes ett spänningsaggregat. På spänningsaggregatet finns en väljare som är graderad från 1-9. Varje gradering motsvarar således en spänning (U) som anges i enheten volt. För att kunna beräkna den gnistenergi (E), i enheten joule, som alstrats vid försöken har formeln $E=0.5 \cdot C \cdot U \cdot U$ använts. C anger kondensatorns kapacitans.

Appendix C

[www.glue.umd.edu/~nsw/ench250/antoine.dat]

Antoine Coefficients

$\log(P) = A - B/(T+C)$ where P is in mmHg and T is in Celsius

ID	formula	compound name	A	B	C	Tmin	Tmax
1	CCL4	carbon-tetrachloride	6.89410	1219.580	227.170	-20	101
Y2	0						
2	CCL3F	trichlorofluoromethane	6.88430	1043.010	236.860	-33	27
Y2	0						
3	CCL2F2	dichlorodifluoromethane	6.68619	782.072	235.377	-119	-30
Y6	0						
4	CCLF3	chlorotrifluoromethane	6.35109	522.061	231.677	-150	-81
Y6	0						
5	CF4	carbon-tetrafluoride	6.97230	540.500	260.100	-180	-125
Y1	0						
6	CO	carbon-monoxide	6.24020	230.270	260.010	-210	-165
Y2	0						
7	CO2	carbon-dioxide	9.81060	1347.790	273.000	-119	-69
Y2	0						
8	COS	carbonyl-sulfide	6.90723	804.480	250.000	-111	-49
Y5	0						
9	CS2	carbon-disulfide	6.94190	1168.620	241.540	-45	69
Y2	0						
10	CHCL3	chloroform	6.93710	1171.200	227.000	-13	97
Y2	0						
11	CHCL2F	dichlorofluoromethane	6.97575	996.267	234.172	-91	9
Y6	0						
12	CHCLF2	chlorodifluoromethane	6.75770	740.390	231.860	-48	-33
Y2	0						
13	CHF3	trifluoromethane	7.08860	705.330	249.780	-128	-82
Y4	0						
14	CHI3	triiodomethane	6.59598	1567.8	204.	137	254
N	19						
15	CHNS	isothiocyanic-acid	0.00000	0.000	0.000	0	0
0							
16	CH2CL2	dichloromethane	7.08030	1138.910	231.460	-44	59
Y2	0						
17	CH2CLF	chlorofluoromethane	6.20452	740.39	231.86	-55	12
N	12						
18	CH2F2	difluoromethane	7.13890	821.700	244.700	-82	-32
Y4	0						
19	CH2I2	diiodomethane	6.94246	1567.800	204.000	83	232
Y10	0						
20	CH2O	formaldehyde	7.15610	957.240	243.010	-88	-2
Y2	0						
21	CH2O2	formic-acid	7.37790	1563.280	247.070	-2	136
Y1	0						
22	CH3BR	bromomethane	6.95970	986.590	238.330	-58	53
Y2	0						
23	CH3CL	chloromethane	6.99440	902.450	243.610	-93	-7
Y2	0						
24	CH3F	fluoromethane	7.09760	740.220	253.890	-132	-64
Y2	0						
25	CH3I	iodomethane	6.98800	1146.340	236.660	-13	52
Y2	0						
26	CH3NO2	nitromethane	7.04400	1291.000	209.010	5	136
Y2	0						

27	CH3NO2	methyl-nitrite	0.00000	0.000	0.000	0	0
0							
28	CH3NO3	methyl-nitrate	0.00000	0.000	0.000	0	0
0							
29	CH4	methane	6.69561	405.420	267.777	-181	-152
Y3	0						
30	CH4O	methanol	8.07240	1574.990	238.870	-16	91
Y2	0						
31	CH4S	methanethiol	7.03163	1015.547	238.706	-70	25
Y3	0						
32	CH5N	methylamine	7.49690	1079.150	240.240	-61	38
Y2	0						
33	C2CL4	tetrachloroethene	7.02000	1415.490	221.010	34	187
Y2	0						
34	C2CL6	hexachloroethane	7.08633	1626.945	197.048	33	186
Y6	0						
35	C2CL3F3	112trichlorotrifluoroethane	6.88030	1099.900	227.500	-25	83
Y4	0						
36	C2CL2F4	12dichlorotetrafluoroethane	6.87084	942.336	232.632	-95	4
Y6	0						
37	C2CLF5	chloropentafluoroethane	6.83330	802.970	242.280	-98	-43
Y2	0						
38	C2F4	tetrafluoroethene	6.89660	683.840	245.940	-133	-63
Y2	0						
39	C2F6	hexafluoroethane	6.79330	657.060	246.220	-103	-73
Y2	0						
40	C2N2	cyanogen	6.43629	576.579	182.308	-77	-4
Y7	0						
41	C2HCL3	trichloroethene	7.02810	1315.100	230.010	-13	127
Y2	0						
42	C2HCL5	pentachloroethane	6.74000	1378.000	197.000	25	162
Y4	0						
43	C2HF3	trifluoroethene	5.68715	491.359	227.23	-93	-31
N	49						
44	C2H2	acetylene(ethyne)	9.14020	1232.600	280.900	-129	-83
Y3	0						
45	C2H2CL2	1,1-dichloroethene	6.97220	1099.400	237.200	-28	32
Y4	0						
46	C2H2CL2	cis-1,2-dichloroethene	7.02230	1205.400	230.600	0	84
Y4	0						
47	C2H2CL2	trans-1,2-dichloroethene	6.96510	1141.900	231.900	-38	85
Y4	0						
48	C2H2CL4	1,1,2,2-tetrachloroethane	6.63170	1228.100	179.900	25	130
Y4	0						
49	C2H2F2	1,1-difluoroethene	6.34918	491.359	227.239	-140	-86
Y7	0						
50	C2H2F2	cis-1,2-difluoroethene	5.31401	491.359	227.23	-78	2.6
N	49						
51	C2H2F2	trans-1,2-difluoroethene	5.31401	491.359	227.23	-78	2.6
N	49						
52	C2H2O	ketene	6.95730	803.100	238.010	-103	-18
Y2	0						
53	C2H3BR	bromoethylene	7.24379	1219.308	264.021	-88	16
Y6	0						
54	C2H3CL	chloroethene	6.49710	783.400	230.010	-88	17
Y2	0						
55	C2H3CL3	1,1,2-trichloroethane	6.96530	1351.000	217.000	29	155
Y2	0						
56	C2H3CLO	acetyl-chloride	6.84070	1062.860	217.630	-36	82
Y2	0						

57	C2H3F	fluoroethene	6.33949	593.551	243.111	-149	-72
Y6	0						
58	C2H3F3	1,1,1-trifluoroethane	6.90380	788.210	243.240	-3	27
Y2	0						
59	C2H3N	acetonitrile	7.07350	1279.200	224.010	-13	117
Y2	0						
60	C2H4	ethylene	6.74756	585.000	255.000	-153	-91
Y3	0						
61	C2H4BR2	1,2-dibromoethane	6.72148	1280.820	201.750	52	131
Y4	0						
62	C2H4CL2	1,1-dichloroethane	6.98530	1171.420	228.130	-31	79
Y2	0						
63	C2H4CL2	1,2-dichloroethane	7.02530	1271.250	222.940	-33	100
Y2	0						
64	C2H4F2	1,1-difluoroethane	7.03000	910.000	244.000	-35	0
Y2	0						
65	C2H4I2	1,2-diiodoethane	6.98834	1647.100	201.000	98	253
Y10	0						
66	C2H4O	ethylene-oxide	7.27010	1115.100	244.150	-73	37
Y2	0						
67	C2H4O	acetaldehyde	7.05650	1070.600	236.010	-63	47
Y2	0						
68	C2H4O2	acetic-acid	7.29960	1479.020	216.820	17	157
Y2	0						
69	C2H4O2	methyl-formate	7.17040	1125.200	230.560	-48	51
Y2	0						
70	C2H4OS	thioacetic-acid	7.74889	1479.02	216.82	40	106
N	68						
71	C2H4S	thiacyclopropane	7.03725	1194.370	232.420	-35	77
Y3	0						
72	C2H5BR	bromoethane	6.92000	1090.810	231.720	-47	60
Y2	0						
73	C2H5CL	chloroethane	6.94000	1012.780	236.680	-73	37
Y2	0						
74	C2H5F	fluoroethane	6.97850	854.210	246.160	-103	-21
Y2	0						
75	C2H5I	iodoethane	6.95900	1232.000	229.000	30	60
Y4	0						
76	C2H5N	ethylenimine	7.13230	1133.700	210.010	-25	86
Y2	0						
77	C2H5NO2	nitroethane	7.58777	1671.266	241.187	-21	114
Y6	0						
78	C2H5NO3	ethyl-nitrate	7.16370	1338.800	224.900	0	60
Y4	0						
79	C2H6	ethane	6.83452	663.700	256.470	-143	-75
Y3	0						
80	C2H6O	methyl-ether	7.31640	1025.560	256.060	-94	-8
Y2	0						
81	C2H6O	ethyl-alcohol	8.21330	1652.050	231.480	-3	96
Y2	0						
82	C2H6O2	ethylene-glycol	8.79450	2615.400	244.910	91	221
Y1	0						
83	C2H6S	methyl-sulfide	6.94879	1090.755	230.799	-47	58
Y3	0						
84	C2H6S	ethanethiol	6.95206	1084.531	231.385	-49	56
Y3	0						
85	C2H6S2	methyl-disulfide	6.97792	1346.342	218.863	6	135
Y3	0						
86	C2H7N	ethylamine	7.38620	1137.300	235.860	-58	43
Y2	0						

87	C2H7N	dimethylamine	7.06390	1024.400	238.010	-55	37
Y2	0						
88	C3H3N	acrylonitrile	6.91630	1208.300	222.010	-18	112
Y1	0						
89	C3H4	allene(propadiene)	5.71370	458.060	196.070	-99	-16
Y3	0						
90	C3H4	propyne(methylacetylene)	6.78485	803.730	229.080	-90	-6
Y3	0						
91	C3H4O2	acrylic-acid	7.19260	1441.500	193.010	42	177
Y1	0						
92	C3H5BR	3-bromo-1-propene	7.05187	1259.83	232.04	17	93
N	109						
93	C3H5CL	3-chloro-1-propene	6.93880	1099.600	226.010	-43	77
Y2	0						
94	C3H5CL3	1,2,3-trichloropropane	7.00280	1484.100	204.010	42	197
Y1	0						
95	C3H5I	3-iodo-1-propene	6.96930	1316.500	220.000	20	142
Y10	0						
96	C3H5N	propionitrile	6.93010	1277.200	218.010	-3	132
Y2	0						
97	C3H6	propene	6.81960	785.000	247.000	-112	-32
Y3	0						
98	C3H6	cyclopropane	6.88790	856.010	246.510	-93	-28
Y2	0						
99	C3H6BR2	1,2-dibromopropane	6.89105	1419.600	212.000	50	250
Y4	0						
100	C3H6CL2	1,2-dichloropropane	6.96540	1296.400	221.000	15	135
Y2	0						
101	C3H6CL2	1,3-dichloropropane	6.97186	1376.200	216.000	34	162
Y10	0						
102	C3H6CL2	2,2-dichloropropane	6.94820	1201.100	226.000	-6	105
Y10	0						
103	C3H6I2	1,2-diiodopropane	6.0765	1507.41	244.7	125	275
N	115						
104	C3H6O	propylene-oxide	6.65460	915.310	208.290	-48	67
Y2	0						
105	C3H6O	allyl-alcohol	7.34240	1271.700	188.010	13	127
Y1	0						
106	C3H6O	propionaldehyde	7.04930	1154.800	229.010	-38	77
Y2	0						
107	C3H6O	acetone	7.23160	1277.030	237.230	-32	77
Y2	0						
108	C3H6S	thiacyclobutane	7.01667	1321.331	224.513	-5	120
Y3	0						
109	C3H7BR	1-bromopropane	7.03766	1259.836	232.042	-53	71
Y6	0						
110	C3H7BR	2-bromopropane	7.00463	1223.475	236.508	-62	60
Y6	0						
111	C3H7CL	1-chloropropane	6.93110	1121.120	230.210	-43	77
Y2	0						
112	C3H7CL	2-chloropropane	6.96540	1081.600	230.010	-48	67
Y1	0						
113	C3H7F	1-fluoropropane	6.95330	965.180	239.500	-70	30
Y10	0						
114	C3H7F	2-fluoropropane	7.07451	965.18	239.5	-49	8
N	113						
115	C3H7I	1-iodopropane	7.22121	1507.410	244.701	-36	103
Y6	0						
116	C3H7I	2-iodopropane	7.01670	1340.448	234.365	-43	90
Y6	0						

117	C3H7NO2	1-nitropropane	7.11460	1467.450	215.230	59	131
Y4	0						
118	C3H7NO2	2-nitropropane	7.48654	1664.036	240.995	-19	120
Y6	0						
119	C3H7NO3	propyl-nitrate	7.73719	1721.723	245.490	0	70
Y6	0						
120	C3H7NO3	isopropyl-nitrate	6.42006	1018.568	183.528	0	70
Y6	0						
121	C3H8	propane	6.80398	803.810	246.990	-108	-25
Y3	0						
122	C3H8O	ethyl-methyl-ether	5.88190	504.490	160.760	-68	37
Y2	0						
123	C3H8O	propyl-alcohol	7.61920	1375.140	193.010	12	127
Y2	0						
124	C3H8O	isopropyl-alcohol	8.11820	1580.920	219.620	0	101
Y2	0						
125	C3H8S	ethyl-methyl-sulfide	6.93849	1182.562	224.784	-26	90
Y3	0						
126	C3H8S	1-propanethiol	6.92846	1183.307	224.624	-25	91
Y3	0						
127	C3H8S	2-propanethiol	6.87734	1113.895	226.157	-37	75
Y3	0						
128	C3H9N	propylamine	6.94680	1108.200	224.010	-38	77
Y2	0						
129	C3H9N	trimethylamine	6.97040	968.700	234.010	-58	32
Y2	0						
130	C4F8	octafluorocyclobutane	6.81530	862.490	225.150	-32	1
Y1	0						
131	C4H2	butadiyne(biacetylene)	5.51917	460.684	164.594	-78	0
Y6	0						
132	C4H4	1buten3yne(vinylacetylene)	6.95300	957.000	230.010	-73	32
Y1	0						
133	C4H4O	furan	6.97530	1060.850	227.750	-35	90
Y1	0						
134	C4H4S	thiophene	6.95926	1246.020	221.350	-12	108
Y3	0						
135	C4H6	1,2-butadiene	6.99383	1041.117	242.274	-26	30
Y3	0						
136	C4H6	1,3-butadiene	6.84999	930.546	238.854	-58	14
Y3	0						
137	C4H6	1-butyne(ethylacetylene)	6.98198	988.750	233.010	-68	27
Y3	0						
138	C4H6	2-butyne(dimethylacetylene)	7.07338	1101.710	235.810	-30	47
Y3	0						
139	C4H6	cyclobutene	6.95769	1009.320	244.986	-77	2
Y6	0						
140	C4H6O3	acetic-anhydride	7.12160	1427.770	198.050	35	164
Y2	0						
141	C4H7N	butyronitrile	7.03960	1390.700	217.000	34	160
Y2	0						
142	C4H7N	isobutyronitrile	7.21591	1390.7	217	49	127
N	141						
143	C4H8	1-butene	6.84290	926.100	240.000	-81	13
Y3	0						
144	C4H8	2-butene, cis	6.86926	960.100	237.000	-73	23
Y3	0						
145	C4H8	2-butene, trans	6.86952	960.800	240.000	-76	20
Y3	0						
146	C4H8	2-methylpropene	6.84134	923.200	240.000	-82	12
Y3	0						

147	C4H8	cyclobutane	6.91630	1024.540	241.380	-73	17
Y2	0						
148	C4H8BR2	1,2-dibromobutane	7.25696	1759.076	235.009	8	166
Y6	0						
149	C4H8BR2	2,3-dibromobutane	7.20023	1691.481	230.223	5	161
Y6	0						
150	C4H8I2	1,2-diiodobutane	6.2433	1507.41	244.7	110	246
N	115						
151	C4H8O	butyraldehyde	7.02120	1233.000	223.010	-18	107
Y2	0						
152	C4H8O	2-butanone	7.20870	1368.210	236.510	-16	103
Y2	0						
153	C4H8O2	p-dioxane	7.00630	1288.500	211.010	2	137
Y2	0						
154	C4H8O2	ethyl-acetate	7.01460	1211.900	216.010	-13	112
Y2	0						
155	C4H8S	thiacyclopentane	6.99540	1401.939	219.607	14	147
Y3	0						
156	C4H9BR	1-bromobutane	6.92254	1298.608	219.700	19	141
Y10	0						
157	C4H9BR	2-bromobutane	6.82724	1229.080	220.000	10	146
Y9	0						
158	C4H9BR	2-bromo-2-methylpropane	6.66850	1129.700	225.000	-7	110
Y10	0						
159	C4H9CL	1-chlorobutane	6.93790	1227.430	224.110	-18	112
Y2	0						
160	C4H9CL	2-chlorobutane	6.94470	1195.800	226.010	-23	102
Y1	0						
161	C4H9CL	1-chloro-2-methylpropane	6.95304	1205.079	227.046	-54	69
Y6	0						
162	C4H9CL	2-chloro-2-methylpropane	6.86710	1114.900	229.010	-38	87
Y1	0						
163	C4H9I	2-iodo-2-methylpropane	7.2539	1507.41	244.7	42	124
N	115						
164	C4H9N	pyrrolidine	6.92460	1179.990	205.260	27	127
Y2	0						
165	C4H9NO2	1-nitrobutane	6.86715	1467.45	215.23	86	182
N	117						
166	C4H9NO2	2-nitrobutane	7.25197	1664.03	240.99	75	167
N	118						
167	C4H10	butane	6.80896	935.860	238.730	-78	19
Y3	0						
168	C4H10	2-methylpropane(isobutane)	6.91048	946.350	246.680	-87	7
Y3	0						
169	C4H10O	ethyl-ether	6.92032	1064.070	228.800	-61	20
Y4	0						
170	C4H10O	methyl-propyl-ether	6.11860	708.690	179.900	0	39
Y4	0						
171	C4H10O	methyl-isopropyl-ether	6.24495	708.69	179.9	-12	51
N	170						
172	C4H10O	butyl-alcohol	7.47680	1362.390	178.730	15	131
Y2	0						
173	C4H10O	sec-butyl-alcohol	7.47430	1314.190	186.510	25	120
Y2	0						
174	C4H10O	tert-butyl-alcohol	7.31990	1154.480	177.660	20	103
Y2	0						
175	C4H10S	ethylsulfide	6.92836	1257.833	218.662	-6	117
Y3	0						
176	C4H10S	isopropyl-methyl-sulfide	6.90196	1232.170	221.670	-13	109
Y3	0						

177	C4H10S	methyl-propyl-sulfide	6.95545	1284.320	219.660	-4	120
Y3	0						
178	C4H10S	1-butanethiol	6.92754	1281.018	218.100	-2	123
Y3	0						
179	C4H10S	2-butanethiol	6.88698	1229.904	222.021	-13	109
Y3	0						
180	C4H10S	2-methyl-1-propanethiol	6.88746	1237.282	220.313	-10	113
Y3	0						
181	C4H10S	2-methyl-2-propanethiol	6.78781	1115.565	221.314	1	87
Y3	0						
182	C4H10S2	ethyl-disulfide	6.97507	1485.970	208.958	40	182
Y3	0						
183	C4H11N	butylamine	7.21300	1308.400	224.200	-14	100
Y2	0						
184	C4H11N	sec-butylamine	7.15069	1238.300	227.000	-9	98
Y10	0						
185	C4H11N	tert-butylamine	6.78309	993.262	210.493	19	75
Y6	0						
186	C4H11N	diethylamine	6.97240	1127.000	220.010	-31	77
Y2	0						
187	C5H5N	pyridine	6.98820	1344.200	212.010	12	152
Y2	0						
188	C5H6S	2-methylthiophene	6.93897	1326.480	214.310	9	138
Y3	0						
189	C5H6S	3-methylthiophene	6.98611	1363.840	216.780	11	141
Y3	0						
190	C5H8	1,2-pentadiene	6.91820	1104.991	228.851	-20	66
Y3	0						
191	C5H8	1,3-pentadiene, cis	6.91089	1101.923	229.367	-17	65
Y3	0						
192	C5H8	1,3-pentadiene, trans	6.91317	1103.840	231.724	-16	63
Y3	0						
193	C5H8	1,4-pentadiene	6.83543	1017.995	231.461	-33	46
Y3	0						
194	C5H8	2,3-pentadiene	6.96216	1126.837	227.841	-13	69
Y3	0						
195	C5H8	3-methyl-1,2-butadiene	6.94350	1103.901	230.890	-20	62
Y3	0						
196	C5H8	2-methyl-1,3-butadiene	6.88564	1071.578	233.513	-18	55
Y3	0						
197	C5H8	1-pentyne	6.96730	1092.520	227.190	-43	62
Y1	0						
198	C5H8	2-pentyne	7.04614	1189.870	229.600	-33	78
Y4	0						
199	C5H8	3-methyl-1-butyne	6.88480	1014.810	227.110	-55	47
Y4	0						
200	C5H8	cyclopentene	6.92070	1121.810	233.460	-29	105
Y1	0						
201	C5H8	spiropentane	6.91700	1090.080	231.100	3	71
Y4	0						
202	C5H10	1-pentene	6.84650	1044.895	233.516	-55	51
Y3	0						
203	C5H10	2-pentene, cis	6.87274	1067.951	230.585	-49	58
Y3	0						
204	C5H10	2-pentene, trans	6.90575	1083.987	232.965	-49	58
Y3	0						
205	C5H10	2-methyl-1-butene	6.87314	1053.780	232.788	-53	52
Y3	0						
206	C5H10	3-methyl-1-butene	6.82618	1013.474	236.816	-63	41
Y3	0						

207	C5H10 Y3 0	2-methyl-2-butene	6.91562	1095.088	232.842	-48	60
208	C5H10 Y3 0	cyclopentane	6.88676	1124.162	231.361	-40	72
209	C5H10BR2 Y10 0	2,3-dibromo-2-methylbutane	7.36735	1695.900	207.000	81	218
210	C5H10O Y1 0	valeraldehyde	7.01920	1316.000	215.010	4	139
211	C5H10O Y1 0	2-pentanone	6.95000	1274.600	210.910	2	137
212	C5H10S Y3 0	thiacyclohexane	6.90518	1422.470	211.720	29	170
213	C5H10S Y4 0	cyclopentanethiol	6.91497	1388.630	212.050	81	173
214	C5H11BR Y10 0	1-bromopentane	6.95580	1401.634	214.380	41	173
215	C5H11CL Y10 0	1-chloropentane	6.96617	1332.890	218.500	24	148
216	C5H11CL N 217	1-chloro-3-methylbutane	6.79527	1258.5	223	39	124
217	C5H11CL Y10 0	2-chloro-2-methylbutane	6.95902	1258.500	223.000	7	123
218	C5H12 Y3 0	pentane	6.87632	1075.780	233.205	-50	58
219	C5H12 Y3 0	2-methylbutane(isopentane)	6.83315	1040.730	235.445	-57	49
220	C5H12 Y3 0	2,2-dimethylpropane	6.60427	883.420	227.782	-13	29
221	C5H12O N 170	methyl-tert-butyl-ether	5.896	708.69	179.9	2	80
222	C5H12O Y2 0	pentyl-alcohol	7.17760	1314.560	168.160	37	138
223	C5H12O Y1 0	tert-pentyl-alcohol	7.87530	1604.700	208.160	55	133
224	C5H12S Y3 0	butyl-methyl-sulfide	6.94583	1363.808	212.074	17	150
225	C5H12S Y3 0	ethyl-propyl-sulfide	6.93380	1341.570	212.510	14	145
226	C5H12S Y3 0	2-methyl-2-butanethiol	6.82837	1254.885	218.759	-3	125
227	C5H12S Y3 0	1-pentanethiol	6.93311	1369.479	211.314	20	153
228	C6CL6 Y6 0	hexachlorobenzene	9.78602	4597.570	355.961	114	309
229	C6F6 Y2 0	hexafluorobenzene	7.03300	1227.980	215.500	-3	117
230	C6H4CL2 Y2 0	o-dichlorobenzene	7.07030	1649.550	213.320	58	210
231	C6H4CL2 Y2 0	m-dichlorobenzene	7.30370	1782.400	230.010	53	202
232	C6H4CL2 Y2 0	p-dichlorobenzene	6.99800	1575.110	208.520	54	204
233	C6H4F2 N 234	m-difluorobenzene	7.06582	1310.27	222.58	36	114
234	C6H4F2 Y6 0	o-difluorobenzene	7.02031	1310.271	222.587	31	130
235	C6H4F2 N 234	p-difluorobenzene	7.08812	1310.27	222.58	34	112
236	C6H5BR Y2 0	bromobenzene	6.86060	1438.820	205.450	47	177

237	C6H5CL	chlorobenzene	6.97810	1431.050	217.560	47	147
Y2	0						
238	C6H5F	fluorobenzene	7.18700	1381.830	235.570	-23	97
Y2	0						
239	C6H5I	iodobenzene	7.01190	1640.130	208.780	17	197
Y2	0						
240	C6H6	benzene	6.90565	1211.033	220.790	-16	104
Y3	0						
241	C6H6O	phenol	7.13450	1516.070	174.570	72	208
Y2	0						
242	C6H6S	benzenethiol	6.99019	1529.454	203.048	52	198
Y3	0						
243	C6H7N	2-picoline	7.03240	1415.730	211.580	79	169
Y1	0						
244	C6H7N	3-picoline	7.05020	1481.770	211.210	74	185
Y1	0						
245	C6H7N	aniline	7.24180	1675.300	200.010	67	227
Y2	0						
246	C6H10	1-hexyne	6.91212	1194.600	225.000	-8	118
Y9	0						
247	C6H10	cyclohexene	6.87240	1221.900	223.180	27	87
Y1	0						
248	C6H10	1-methylcyclopentene	6.86884	1199.600	225.000	-5	130
Y8	0						
249	C6H10	3-methylcyclopentene	6.87259	1165.600	227.000	-10	119
Y8	0						
250	C6H10	4-methylcyclopentene	6.87015	1197.600	225.000	-2	130
Y8	0						
251	C6H10O	cyclohexanone	6.97851	1495.580	209.559	90	166
Y6	0						
252	C6H12	1-hexene	6.86572	1152.971	225.849	-29	87
Y3	0						
253	C6H12	2-hexene, cis	7.03805	1258.571	233.851	-25	92
Y3	0						
254	C6H12	2-hexene, trans	6.89342	1173.343	224.530	-25	91
Y3	0						
255	C6H12	3-hexene, cis	6.87854	1164.134	224.749	-27	90
Y3	0						
256	C6H12	3-hexene, trans	6.91780	1180.707	225.384	-26	90
Y3	0						
257	C6H12	2-methyl-1-pentene	6.85030	1138.516	224.704	-30	85
Y3	0						
258	C6H12	3-methyl-1-pentene	6.75523	1086.316	226.204	-37	77
Y3	0						
259	C6H12	4-methyl-1-pentene	6.83529	1121.302	229.687	-38	77
Y3	0						
260	C6H12	2-methyl-2-pentene	6.92367	1183.837	225.514	-26	90
Y3	0						
261	C6H12	3-methyl-2-pentene, cis	6.91073	1186.402	226.696	-26	91
Y3	0						
262	C6H12	3-methyl-2-pentene, trans	6.92634	1194.527	224.833	-23	94
Y3	0						
263	C6H12	4-methyl-2-pentene, cis	6.84129	1120.707	226.586	-35	79
Y3	0						
264	C6H12	4-methyl-2-pentene, trans	6.88030	1142.874	227.143	-33	81
Y3	0						
265	C6H12	2-ethyl-1-butene	6.99712	1218.352	231.300	-28	88
Y3	0						
266	C6H12	2,3-dimethyl-1-butene	6.86236	1134.675	229.367	-36	78
Y3	0						

267	C6H12 Y3 0	3,3-dimethyl-1-butene	6.67751	1010.516	224.909	-47	64
268	C6H12 Y3 0	2,3-dimethyl-2-butene	6.95058	1215.428	225.443	-21	97
269	C6H12 Y3 0	cyclohexane	6.84130	1201.531	222.647	6	105
270	C6H12 Y3 0	methylcyclopentane	6.86283	1186.059	226.042	-24	96
271	C6H12O Y4 0	cyclohexanol	6.25530	912.870	109.130	94	161
272	C6H12O N 210	hexanal	6.71442	1316.	215.01	64	156
273	C6H12S N 212	thiacycloheptane	6.90523	1422.47	211.72	78	169
274	C6H14 Y3 0	hexane	6.87024	1168.720	224.210	-25	92
275	C6H14 Y3 0	2-methylpentane	6.83910	1135.410	226.572	-32	83
276	C6H14 Y3 0	3-methylpentane	6.81887	1152.368	227.129	-29	89
277	C6H14 Y3 0	2,2-dimethylbutane	6.75483	1081.176	229.343	-41	73
278	C6H14 Y3 0	2,3-dimethylbutane	6.80983	1127.187	228.900	-35	81
279	C6H14O Y4 0	propyl-ether	6.94760	1256.500	219.000	26	89
280	C6H14O Y2 0	isopropyl-ether	7.09710	1257.600	230.010	-24	91
281	C6H14O Y1 0	hexyl-alcohol	7.86040	1761.260	196.670	35	157
282	C6H14S Y3 0	butyl-ethyl-sulfide	6.94102	1421.320	205.810	33	172
283	C6H14S Y3 0	isopropyl-sulfide	6.87118	1327.120	212.550	13	147
284	C6H14S N 285	methyl-pentyl-sulfide	7.11609	1413.44	205.73	70	153
285	C6H14S Y3 0	propyl-sulfide	6.93577	1413.440	205.730	32	170
286	C6H14S Y3 0	1-hexanethiol	6.94664	1454.004	204.954	40	181
287	C6H14S2 Y3 0	propyl-disulfide	6.97529	1603.793	195.848	73	226
288	C6H15N Y2 0	triethylamine	6.89890	1251.800	222.010	-13	127
289	C7H5F3 Y4 0	a,a,a-trifluorotoluene	6.97045	1306.350	217.380	55	139
290	C7H5N Y6 0	benzonitrile	7.72911	2110.572	244.819	28	191
291	C7H6O2 Y1 0	benzoic-acid	7.45400	1820.000	147.960	132	287
292	C7H7F Y4 0	p-fluorotoluene	6.99426	1374.055	217.400	68	155
293	C7H8 Y3 0	toluene	6.95464	1344.800	219.482	6	136
294	C7H8 Y4 0	1,3,5-cycloheptatriene	6.97433	1376.840	220.750	0	65
295	C7H8O Y2 0	m-cresol	7.50800	1856.360	199.070	97	207
296	C7H8O Y2 0	o-cresol	6.91170	1435.500	165.160	97	207

297	C7H8O	p-cresol	7.03510	1511.080	161.860	97	207
Y2	0						
298	C7H12	1-heptyne	6.68593	1216.600	220.000	14	142
Y9	0						
299	C7H14	1-heptene	6.90069	1257.505	219.179	-6	118
Y3	0						
300	C7H14	cycloheptane	6.85390	1331.570	216.360	57	162
Y1	0						
301	C7H14	ethylcyclopentane	6.88709	1298.599	220.675	-3	129
Y3	0						
302	C7H14	1,1-dimethylcyclopentane	6.81724	1219.474	221.946	-12	113
Y3	0						
303	C7H14	c-1,2-dimethylcyclopentane	6.85008	1269.140	220.209	-3	125
Y3	0						
304	C7H14	t-1,2-dimethylcyclopentane	6.84422	1242.748	221.686	-9	117
Y3	0						
305	C7H14	c-1,3-dimethylcyclopentane	6.83715	1237.456	222.005	-10	116
Y3	0						
306	C7H14	t-1,3-dimethylcyclopentane	6.83817	1240.023	221.621	-9	117
Y3	0						
307	C7H14	methylcyclohexane	6.82300	1270.763	221.416	-3	127
Y3	0						
308	C7H14O	heptanal	5.47587	686.453	111.817	12	155
Y6	0						
309	C7H16	heptane	6.89385	1264.370	216.636	-2	123
Y3	0						
310	C7H16	2-methylhexane	6.87318	1236.026	219.545	-9	115
Y3	0						
311	C7H16	3-methylhexane	6.86764	1240.196	219.223	-8	117
Y3	0						
312	C7H16	3-ethylpentane	6.87564	1251.827	219.887	-7	118
Y3	0						
313	C7H16	2,2-dimethylpentane	6.81480	1190.033	223.303	-19	104
Y3	0						
314	C7H16	2,3-dimethylpentane	6.85382	1238.017	221.823	-10	115
Y3	0						
315	C7H16	2,4-dimethylpentane	6.82621	1192.041	221.634	-17	105
Y3	0						
316	C7H16	3,3-dimethylpentane	6.82667	1228.663	225.316	-14	111
Y3	0						
317	C7H16	2,2,3-trimethylbutane	6.79230	1200.563	226.050	-19	106
Y3	0						
318	C7H16O	isopropyl-tert-butyl-ether	6.62913	1257.6	230.01	41	134
N	280						
319	C7H16O	heptyl-alcohol	6.64760	1140.640	126.560	60	176
Y1	0						
320	C7H16S	butyl-propyl-sulfide	6.65279	1421.32	205.81	99	203
N	282						
321	C7H16S	ethyl-pentyl-sulfide	6.65279	1421.32	205.81	99	203
N	282						
322	C7H16S	hexyl-methyl-sulfide	6.65279	1421.32	205.81	99	203
N	282						
323	C7H16S	1-heptanethiol	6.95249	1525.311	197.696	59	206
Y3	0						
324	C8H6	ethynylbenzene	6.957	1445.58	209.44	82	172
N	325						
325	C8H8	styrene	6.95710	1445.580	209.440	32	187
Y2	0						
326	C8H8	1,3,5,7-cyclooctatetraene	7.00669	1472.110	215.840	0	75
Y4	0						

327	C8H10 Y3 0	ethylbenzene	6.95719	1424.255	213.206	26	163
328	C8H10 Y3 0	m-xylene	7.00908	1462.266	215.105	28	166
329	C8H10 Y3 0	o-xylene	6.99891	1474.679	213.686	32	172
330	C8H10 Y3 0	p-xylene	6.99052	1453.430	215.307	27	166
331	C8H14 Y9 0	1-octyne	7.02447	1413.800	215.000	25	170
332	C8H16 Y3 0	1-octene	6.93263	1353.486	212.764	15	148
333	C8H16 Y1 0	cyclooctane	6.86190	1437.780	209.980	94	197
334	C8H16 Y3 0	propylcyclopentane	6.90392	1384.386	213.159	21	158
335	C8H16 Y3 0	ethylcyclohexane	6.86728	1382.466	214.995	21	160
336	C8H16 Y3 0	1,1-dimethylcyclohexane	6.79821	1321.705	217.845	10	147
337	C8H16 Y3 0	c-1,2-dimethylcyclohexane	6.83746	1367.311	215.835	18	158
338	C8H16 Y3 0	t-1,2-dimethylcyclohexane	6.83308	1353.881	219.132	13	151
339	C8H16 Y3 0	c-1,3-dimethylcyclohexane	6.83883	1338.473	218.072	11	147
340	C8H16 Y3 0	t-1,3-dimethylcyclohexane	6.83455	1343.687	215.394	15	152
341	C8H16 Y3 0	c-1,4-dimethylcyclohexane	6.83287	1345.613	216.154	15	152
342	C8H16 Y3 0	t-1,4-dimethylcyclohexane	6.81773	1330.437	218.581	10	147
343	C8H16O Y6 0	octanal	12.51168	3977.531	244.532	73	169
344	C8H18 Y3 0	octane	6.90940	1349.820	209.385	19	152
345	C8H18 Y3 0	2-methylheptane	6.91735	1337.468	213.693	12	144
346	C8H18 Y3 0	3-methylheptane	6.89944	1331.530	212.414	13	145
347	C8H18 Y3 0	4-methylheptane	6.90065	1327.661	212.568	12	144
348	C8H18 Y3 0	3-ethylhexane	6.89098	1327.884	212.595	13	145
349	C8H18 Y3 0	2,2-dimethylhexane	6.83715	1273.594	215.072	3	133
350	C8H18 Y3 0	2,3-dimethylhexane	6.87004	1315.503	214.157	10	142
351	C8H18 Y3 0	2,4-dimethylhexane	6.85305	1287.876	214.790	5	135
352	C8H18 Y3 0	2,5-dimethylhexane	6.85984	1287.274	214.412	5	135
353	C8H18 Y3 0	3,3-dimethylhexane	6.85121	1307.882	217.439	6	138
354	C8H18 Y3 0	3,4-dimethylhexane	6.87986	1330.035	214.863	11	144
355	C8H18 Y3 0	3-ethyl-2-methylpentane	6.86358	1318.120	215.306	9	142
356	C8H18 Y3 0	3-ethyl-3-methylpentane	6.86731	1347.209	219.684	10	145

357	C8H18 Y3 0	2,2,3-trimethylpentane	6.82546	1294.875	218.420	4	136
358	C8H18 Y3 0	2,2,4-trimethylpentane	6.81189	1257.840	220.735	-4	125
359	C8H18 Y3 0	2,3,3-trimethylpentane	6.84353	1328.046	220.375	7	142
360	C8H18 Y3 0	2,3,4-trimethylpentane	6.85396	1315.084	217.526	7	140
361	C8H18 Y3 0	2,2,3,3-tetramethylbutane	6.87665	1329.930	226.360	103	133
362	C8H18O Y2 0	butyl-ether	6.98250	1431.500	207.010	32	182
363	C8H18O N 364	sec-butyl-ether	6.79153	1348.53	223.79	57	149
364	C8H18O Y5 0	tert-butyl-ether	6.93294	1348.533	223.790	4	109
365	C8H18O Y2 0	octyl-alcohol	6.83700	1310.620	136.060	70	195
366	C8H18S N 282	butyl-sulfide	6.54589	1421.32	205.81	106	215
367	C8H18S N 282	ethyl-hexyl-sulfide	6.42693	1421.32	205.81	115	231
368	C8H18S N 282	heptyl-methyl-sulfide	6.42693	1421.32	205.81	115	231
369	C8H18S N 282	pentyl-propyl-sulfide	6.42693	1421.32	205.81	115	231
370	C8H18S Y3 0	1-octanethiol	6.96909	1593.000	190.610	76	229
371	C8H18S2 Y3 0	butyl-disulfide	6.96380	1684.100	181.300	101	263
372	C9H10 Y1 0	alpha-methylstyrene	7.09240	1582.700	206.010	75	220
373	C9H10 Y6 0	propenylbenzene, cis	7.44961	1909.083	238.874	18	179
374	C9H10 N 373	propenylbenzene, trans	7.54993	1909.08	238.87	105	197
375	C9H10 Y4 0	m-methylstyrene	6.87928	1471.440	200.000	72	250
376	C9H10 Y4 0	o-methylstyrene	6.88461	1485.410	200.000	75	255
377	C9H10 Y4 0	p-methylstyrene	7.01120	1535.100	200.700	68	170
378	C9H12 Y3 0	propylbenzene	6.95142	1491.297	207.140	43	188
379	C9H12 Y3 0	cumene	6.93666	1460.793	207.777	38	181
380	C9H12 Y3 0	m-ethyltoluene	7.01582	1529.184	208.509	46	190
381	C9H12 Y3 0	o-ethyltoluene	7.00314	1535.374	207.300	48	194
382	C9H12 Y3 0	p-ethyltoluene	6.99802	1527.113	208.921	46	191
383	C9H12 Y3 0	1,2,3-trimethylbenzene	7.04082	1593.958	207.078	57	205
384	C9H12 Y3 0	1,2,4-trimethylbenzene	7.04383	1573.267	208.564	52	198
385	C9H12 Y3 0	mesitylene	7.07436	1569.622	209.578	49	193
386	C9H16 Y9 0	1-nonyne	6.77410	1404.700	210.000	50	223

387	C9H18	1-nonene	6.95387	1435.359	205.535	36	174
Y3	0						
388	C9H18	butylcyclopentane	6.89935	1457.080	205.990	41	185
Y3	0						
389	C9H18	propylcyclohexane	6.88646	1460.800	207.939	40	186
Y3	0						
390	C9H18	c-c-135trimethylcyclohexane	7.09743	1460.8	207.93	78	164
N	389						
391	C9H18	c-t-135trimethylcyclohexane	7.07274	1460.8	207.93	80	166
N	389						
392	C9H18O	nonanal	7.81505	2036.854	227.486	33	185
Y6	0						
393	C9H20	nonane	6.93440	1429.460	201.820	39	179
Y3	0						
394	C9H20	2-methyloctane	6.91191	1398.420	203.650	33	171
Y3	0						
395	C9H20	3-methyloctane	6.90920	1405.800	204.760	33	172
Y3	0						
396	C9H20	4-methyloctane	6.90318	1399.120	205.410	32	170
Y3	0						
397	C9H20	3-ethylheptane	6.90489	1406.500	206.500	32	171
Y3	0						
398	C9H20	4-ethylheptane	6.89898	1399.800	207.200	30	169
Y3	0						
399	C9H20	2,2-dimethylheptane	6.88174	1363.910	208.210	24	160
Y3	0						
400	C9H20	2,3-dimethylheptane	6.87635	1389.500	207.300	29	168
Y3	0						
401	C9H20	2,4-dimethylheptane	6.90252	1368.720	207.440	24	160
Y3	0						
402	C9H20	2,5-dimethylheptane	6.89317	1375.400	206.800	27	163
Y3	0						
403	C9H20	2,6-dimethylheptane	6.89385	1368.000	205.680	26	162
Y3	0						
404	C9H20	3,3-dimethylheptane	6.87553	1385.360	209.790	26	165
Y3	0						
405	C9H20	3,4-dimethylheptane	6.88359	1396.900	208.400	29	168
Y3	0						
406	C9H20	3,5-dimethylheptane	6.90164	1382.800	207.900	26	163
Y3	0						
407	C9H20	4,4-dimethylheptane	6.86968	1378.700	210.400	24	163
Y3	0						
408	C9H20	3-ethyl-2-methylhexane	6.88690	1390.200	209.000	27	166
Y3	0						
409	C9H20	4-ethyl-2-methylhexane	6.90030	1376.100	208.600	25	161
Y3	0						
410	C9H20	3-ethyl-3-methylhexane	6.87787	1406.800	211.400	28	169
Y3	0						
411	C9H20	3-ethyl-4-methylhexane	6.89430	1404.300	209.500	29	168
Y3	0						
412	C9H20	2,2,3-trimethylhexane	6.86574	1375.720	211.630	23	161
Y3	0						
413	C9H20	2,2,4-trimethylhexane	6.84922	1340.900	211.350	18	154
Y3	0						
414	C9H20	2,2,5-trimethylhexane	6.83531	1324.049	210.737	16	151
Y3	0						
415	C9H20	2,3,3-trimethylhexane	6.85417	1389.790	212.100	25	166
Y3	0						
416	C9H20	2,3,4-trimethylhexane	6.85274	1387.220	210.220	27	167
Y3	0						

417	C9H20 Y3 0	2,3,5-trimethylhexane	6.87078	1359.090	209.290	22	159
418	C9H20 Y3 0	2,4,4-trimethylhexane	6.85163	1368.723	214.047	20	158
419	C9H20 Y3 0	3,3,4-trimethylhexane	6.85761	1403.880	212.560	27	169
420	C9H20 Y3 0	3,3-diethylpentane	6.89262	1451.245	215.575	31	175
421	C9H20 Y3 0	3-ethyl-2,2-dimethylpentane	6.87166	1383.130	212.750	23	162
422	C9H20 Y3 0	3-ethyl-2,3-dimethylpentane	6.84463	1418.000	213.000	30	174
423	C9H20 Y3 0	3-ethyl-2,4-dimethylpentane	6.85293	1380.540	210.870	25	165
424	C9H20 Y3 0	2,2,3,3-tetramethylpentane	6.82876	1397.483	213.703	26	169
425	C9H20 Y3 0	2,2,3,4-tetramethylpentane	6.83173	1374.042	214.762	21	161
426	C9H20 Y3 0	2,2,4,4-tetramethylpentane	6.79710	1325.183	216.093	13	150
427	C9H20 Y3 0	2,3,3,4-tetramethylpentane	6.85961	1417.473	214.705	27	170
428	C9H200 Y1 0	nonyl-alcohol	6.67570	1276.630	123.060	90	214
429	C9H20S N 282	butyl-pentyl-sulfide	6.23448	1421.32	205.81	129	258
430	C9H20S N 282	ethyl-heptyl-sulfide	6.23448	1421.32	205.81	129	258
431	C9H20S N 282	hexyl-propyl-sulfide	6.23448	1421.32	205.81	129	258
432	C9H20S N 282	methyl-octyl-sulfide	6.23448	1421.32	205.81	129	258
433	C9H20S Y3 0	1-nonanethiol	6.98390	1655.600	183.700	93	251
434	C10H8 Y3 0	naphthalene	7.01065	1733.710	201.859	87	250
435	C10H8 N 434	azulene	6.7868	1733.71	201.85	160	278
436	C10H14 Y3 0	butylbenzene	6.98317	1577.965	201.378	62	213
437	C10H14 Y3 0	m-diethylbenzene	7.00360	1575.310	200.960	61	211
438	C10H14 Y3 0	o-diethylbenzene	6.98780	1576.940	200.510	63	213
439	C10H14 Y3 0	p-diethylbenzene	6.99820	1588.310	201.970	63	214
440	C10H14 Y3 0	1,2,3,4-tetramethylbenzene	7.05940	1690.540	199.480	80	236
441	C10H14 Y3 0	1,2,3,5-tetramethylbenzene	7.07790	1675.430	201.140	75	228
442	C10H14 Y3 0	1,2,4,5-tetramethylbenzene	7.08000	1672.430	201.430	74	227
443	C10H18 Y9 0	1-decyne	7.10870	1606.600	206.000	78	246
444	C10H18 Y3 0	decahydronaphthalene, cis	6.87529	1594.460	203.392	68	228
445	C10H18 Y3 0	decahydronaphthalene, trans	6.85681	1564.683	206.259	61	219
446	C10H20 Y3 0	1-decene	6.96034	1501.872	197.578	54	199

447	C10H20 Y3 0	1-cyclopentylpentane	6.94140	1540.600	198.800	60	210
448	C10H20 Y3 0	butylcyclohexane	6.91030	1538.518	200.833	59	211
449	C10H200 Y6 0	decanal	8.20794	2378.316	237.905	52	209
450	C10H22 Y3 0	decane	6.96375	1508.750	195.374	58	203
451	C10H22 Y3 0	2-methylnonane	6.93372	1472.730	196.380	52	196
452	C10H22 Y3 0	3-methylnonane	6.92975	1479.100	197.500	52	197
453	C10H22 Y3 0	4-methylnonane	6.92234	1471.000	198.300	50	194
454	C10H22 Y3 0	5-methylnonane	6.91878	1468.400	198.500	50	194
455	C10H22 Y3 0	3-ethyloctane	6.91845	1477.400	199.400	50	195
456	C10H22 Y3 0	4-ethyloctane	6.90922	1466.680	200.440	48	192
457	C10H22 Y3 0	2,2-dimethyloctane	6.90617	1439.600	200.700	43	185
458	C10H22 Y3 0	2,3-dimethyloctane	6.89449	1462.220	200.000	48	193
459	C10H22 Y3 0	2,4-dimethyloctane	6.92146	1439.800	200.400	43	184
460	C10H22 Y3 0	2,5-dimethyloctane	6.90263	1442.500	200.200	44	187
461	C10H22 Y3 0	2,6-dimethyloctane	6.93331	1450.530	199.400	45	187
462	C10H22 Y3 0	2,7-dimethyloctane	6.91326	1444.190	198.270	46	188
463	C10H22 Y3 0	3,3-dimethyloctane	6.88895	1457.600	202.500	45	190
464	C10H22 Y3 0	3,4-dimethyloctane	6.89926	1465.900	201.400	47	192
465	C10H22 Y3 0	3,5-dimethyloctane	6.89758	1448.800	201.300	44	188
466	C10H22 Y3 0	3,6-dimethyloctane	6.91284	1456.900	200.500	46	189
467	C10H22 Y3 0	4,4-dimethyloctane	6.88891	1446.900	203.500	42	186
468	C10H22 Y3 0	4,5-dimethyloctane	6.89288	1460.520	201.900	46	191
469	C10H22 Y3 0	4-propylheptane	6.94710	1458.700	201.200	44	186
470	C10H22 Y3 0	4-isopropylheptane	6.88757	1449.800	202.900	43	188
471	C10H22 Y3 0	3-ethyl-2-methylheptane	6.89294	1457.900	202.200	45	190
472	C10H22 Y3 0	4-ethyl-2-methylheptane	6.89200	1438.200	202.300	42	185
473	C10H22 Y3 0	5-ethyl-2-methylheptane	6.89424	1448.800	201.300	44	188
474	C10H22 Y3 0	3-ethyl-3-methylheptane	6.88063	1472.900	204.500	46	193
475	C10H22 Y3 0	4-ethyl-3-methylheptane	6.88689	1464.200	203.300	45	191
476	C10H22 Y3 0	3-ethyl-5-methylheptane	6.91593	1455.200	202.400	44	187

477	C10H22	3-ethyl-4-methylheptane	6.88827	1466.800	203.000	46	192
Y3	0						
478	C10H22	4-ethyl-4-methylheptane	6.88302	1464.900	205.200	44	190
Y3	0						
479	C10H22	2,2,3-trimethylheptane	6.87507	1446.100	204.400	42	187
Y3	0						
480	C10H22	2,2,4-trimethylheptane	6.87525	1409.400	204.500	35	177
Y3	0						
481	C10H22	2,2,5-trimethylheptane	6.87855	1417.400	203.800	37	179
Y3	0						
482	C10H22	2,2,6-trimethylheptane	6.89454	1411.090	202.630	37	177
Y3	0						
483	C10H22	2,3,3-trimethylheptane	6.87202	1457.800	205.000	43	189
Y3	0						
484	C10H22	2,3,4-trimethylheptane	6.87417	1451.700	203.600	44	189
Y3	0						
485	C10H22	2,3,5-trimethylheptane	6.83990	1440.000	203.000	44	190
Y3	0						
486	C10H22	2,3,6-trimethylheptane	6.88668	1433.700	201.900	42	184
Y3	0						
487	C10H22	2,4,4-trimethylheptane	6.86062	1418.400	205.400	37	180
Y3	0						
488	C10H22	2,4,5-trimethylheptane	6.87583	1437.300	203.300	41	185
Y3	0						
489	C10H22	2,4,6-trimethylheptane	6.91395	1411.300	202.300	36	175
Y3	0						
490	C10H22	2,5,5-trimethylheptane	6.88204	1429.090	204.360	39	181
Y3	0						
491	C10H22	3,3,4-trimethylheptane	6.86861	1466.800	205.900	44	191
Y3	0						
492	C10H22	3,3,5-trimethylheptane	6.85524	1435.430	205.490	40	185
Y3	0						
493	C10H22	3,4,4-trimethylheptane	6.86721	1464.100	206.200	43	190
Y3	0						
494	C10H22	3,4,5-trimethylheptane	6.87113	1463.400	204.200	45	192
Y3	0						
495	C10H22	3-isopropyl-2-methylhexane	6.76103	1441.000	204.700	45	197
Y3	0						
496	C10H22	3,3-diethylhexane	6.88355	1490.900	206.200	47	196
Y3	0						
497	C10H22	3,4-diethylhexane	6.88347	1473.200	204.200	46	193
Y3	0						
498	C10H22	3-ethyl-2,2-dimethylhexane	6.86594	1444.400	206.400	40	185
Y3	0						
499	C10H22	4-ethyl-2,2-dimethylhexane	6.89526	1416.000	206.000	34	175
Y3	0						
500	C10H22	3-ethyl-2,3-dimethylhexane	6.86128	1475.800	206.800	45	194
Y3	0						
501	C10H22	4-ethyl-2,3-dimethylhexane	6.86823	1458.000	204.700	44	190
Y3	0						
502	C10H22	3-ethyl-2,4-dimethylhexane	6.86682	1455.300	205.000	43	189
Y3	0						
503	C10H22	4-ethyl-2,4-dimethylhexane	6.86721	1464.100	206.200	43	190
Y3	0						
504	C10H22	3-ethyl-2,5-dimethylhexane	6.87155	1429.300	204.100	39	183
Y3	0						
505	C10H22	4-ethyl-3,3-dimethylhexane	6.86288	1473.100	207.000	44	193
Y3	0						
506	C10H22	3-ethyl-3,4-dimethylhexane	6.86148	1470.400	207.300	44	192
Y3	0						

507	C10H22 Y3 0	2,2,3,3-tetramethylhexane	6.84438	1464.030	209.060	41	190
508	C10H22 Y3 0	2,2,3,4-tetramethylhexane	6.82410	1443.600	207.300	41	188
509	C10H22 Y3 0	2,2,3,5-tetramethylhexane	6.87685	1417.600	206.300	35	177
510	C10H22 Y3 0	2,2,4,4-tetramethylhexane	6.73151	1396.000	208.700	35	184
511	C10H22 Y3 0	2,2,4,5-tetramethylhexane	6.83561	1400.550	206.260	34	176
512	C10H22 Y3 0	2,2,5,5-tetramethylhexane	6.88124	1377.980	207.000	27	165
513	C10H22 Y3 0	2,3,3,4-tetramethylhexane	6.84243	1474.940	207.720	45	195
514	C10H22 Y3 0	2,3,3,5-tetramethylhexane	6.85043	1429.200	206.900	37	182
515	C10H22 Y3 0	2,3,4,4-tetramethylhexane	6.82940	1457.900	207.600	42	191
516	C10H22 Y3 0	2,3,4,5-tetramethylhexane	6.87156	1442.800	205.300	40	185
517	C10H22 Y3 0	3,3,4,4-tetramethylhexane	6.81164	1492.700	209.700	47	201
518	C10H22 Y3 0	24dimethyl3isopropylpentane	6.82154	1432.150	206.380	40	186
519	C10H22 Y3 0	33-diethyl-2-methylpentane	6.85984	1501.800	207.700	49	200
520	C10H22 Y3 0	3ethyl-223trimethylpentane	6.80710	1490.100	210.000	47	200
521	C10H22 Y3 0	3ethyl-224trimethylpentane	6.83149	1435.600	208.100	38	185
522	C10H22 Y3 0	3ethyl-234trimethylpentane	6.81616	1486.620	208.320	47	200
523	C10H22 Y3 0	22334-pentamethylpentane	6.79659	1474.890	210.600	44	197
524	C10H22 Y3 0	22344-pentamethylpentane	6.73273	1423.830	210.350	38	190
525	C10H220 Y2 0	decyl-alcohol	6.92240	1472.010	134.160	103	230
526	C10H22S N 282	butyl-hexyl-sulfide	6.06898	1421.32	205.81	143	285
527	C10H22S N 282	ethyl-octyl-sulfide	6.06898	1421.32	205.81	143	285
528	C10H22S N 282	heptyl-propyl-sulfide	6.06898	1421.32	205.81	143	285
529	C10H22S N 282	methyl-nonyl-sulfide	6.06898	1421.32	205.81	143	285
530	C10H22S N 282	pentyl-sulfide	6.06898	1421.32	205.81	143	285
531	C10H22S Y3 0	1-decanethiol	6.99810	1713.600	177.000	109	271
532	C10H22S2 Y3 0	pentyl-disulfide	6.95810	1756.000	166.800	128	298
533	C11H10 Y3 0	1-methylnaphthalene	7.03592	1826.948	195.002	108	278
534	C11H10 Y3 0	2-methylnaphthalene	7.06850	1840.268	198.395	105	274
535	C11H16 Y3 0	pentylbenzene	6.97833	1639.910	194.760	80	237
536	C11H16 Y1 0	pentamethylbenzene	7.13760	1833.800	198.960	125	270

537	C11H20 Y9 0	1-undecyne	7.13064	1687.200	202.000	80	267
538	C11H22 Y3 0	1-undecene	6.96662	1562.469	189.743	72	222
539	C11H22 Y3 0	1-cyclopentylhexane	6.95480	1608.000	191.600	78	234
540	C11H22 Y3 0	pentylcyclohexane	6.94667	1619.110	194.510	78	235
541	C11H24 Y3 0	undecane	6.97220	1569.570	187.700	75	226
542	C11H24O Y11 0	undecyl-alcohol	6.52710	1250.000	100.000	120	243
543	C11H24S N 282	butyl-heptyl-sulfide	5.9321	1421.32	205.81	155	309
544	C11H24S N 282	decyl-methyl-sulfide	5.9321	1421.32	205.81	155	309
545	C11H24S N 282	ethyl-nonyl-sulfide	5.9321	1421.32	205.81	155	309
546	C11H24S N 282	octyl-propyl-sulfide	5.9321	1421.32	205.81	155	309
547	C11H24S Y3 0	1-undecanethiol	7.01220	1767.400	170.400	124	290
548	C12H10 Y2 0	biphenyl	7.24540	1998.720	202.740	70	272
549	C12H12 Y3 0	1-ethylnaphthalene	7.03159	1841.320	185.280	120	292
550	C12H12 Y3 0	2-ethylnaphthalene	7.07566	1880.730	191.410	118	291
551	C12H12 Y3 0	1,2-dimethylnaphthalene	7.00605	1805.310	171.370	129	269
552	C12H12 Y4 0	1,3-dimethylnaphthalene	7.26980	2076.000	210.000	148	310
553	C12H12 Y4 0	1,4-dimethylnaphthalene	7.26980	2076.000	210.000	148	310
554	C12H12 Y8 0	1,5-dimethylnaphthalene	7.04930	1855.000	180.000	150	313
555	C12H12 Y4 0	1,6-dimethylnaphthalene	7.26980	2076.000	210.000	148	310
556	C12H12 Y4 0	1,7-dimethylnaphthalene	7.05640	1879.000	180.000	150	320
557	C12H12 Y4 0	2,3-dimethylnaphthalene	7.05270	1869.000	180.000	155	315
558	C12H12 Y8 0	2,6-dimethylnaphthalene	7.04600	1841.000	180.000	150	310
559	C12H12 Y4 0	2,7-dimethylnaphthalene	7.04780	1846.000	180.000	150	310
560	C12H18 Y3 0	hexylbenzene	6.98530	1700.500	188.200	96	258
561	C12H18 N 562	1,2,3-triethylbenzene	7.58877	2133.55	235.68	146	247
562	C12H18 Y6 0	1,2,4-triethylbenzene	7.57869	2133.558	235.681	46	218
563	C12H18 N 562	1,3,5-triethylbenzene	7.6044	2133.55	235.68	145	246
564	C12H18 N 562	hexamethylbenzene	7.15544	2133.55	235.68	178	300
565	C12H22 Y9 0	1-dodecyne	7.16929	1771.100	198.000	113	288
566	C12H24 Y3 0	1-dodecene	6.97522	1619.862	182.271	89	244

567	C12H24 Y3 0	1-cyclopentylheptane	6.97430	1672.200	184.400	95	256
568	C12H24 Y3 0	1-cyclohexylhexane	6.95550	1681.000	187.800	94	257
569	C12H26 Y3 0	dodecane	6.99795	1639.270	181.835	91	247
570	C12H26O Y4 0	dodecyl-alcohol	7.53986	2003.290	168.130	138	214
571	C12H26S Y1 0	butyl-octyl-sulfide	6.62900	1408.000	116.060	134	307
572	C12H26S N 282	decyl-ethyl-sulfide	5.81251	1421.32	205.81	166	333
573	C12H26S N 282	hexyl-sulfide	5.81251	1421.32	205.81	166	333
574	C12H26S N 282	methyl-undecyl-sulfide	5.81251	1421.32	205.81	166	333
575	C12H26S N 282	nonyl-propyl-sulfide	5.81251	1421.32	205.81	166	333
576	C12H26S Y3 0	1-dodecanethiol	7.02440	1817.800	164.100	138	308
577	C12H26S2 Y3 0	hexyl-disulfide	6.96320	1824.900	153.500	153	328
578	C13H14 Y8 0	1-propylnaphthalene	7.05940	1890.800	180.000	155	335
579	C13H14 Y8 0	2-propylnaphthalene	7.06050	1895.500	180.000	160	335
580	C13H14 N 579	2ethyl-3-methylnaphthalene	7.02851	1895.5	180.	196	312
581	C13H14 N 579	2ethyl-6-methylnaphthalene	7.09303	1895.5	180.	192	303
582	C13H14 N 579	2ethyl-7-methylnaphthalene	7.09303	1895.5	180.	192	303
583	C13H20 Y3 0	1-phenylheptane	7.00060	1761.200	181.500	112	279
584	C13H24 Y9 0	1-tridecyne	7.15674	1834.400	195.000	120	308
585	C13H26 Y3 0	1-tridecene	6.98563	1674.741	175.214	105	264
586	C13H26 Y3 0	1-cyclopentyl-octane	6.98960	1729.800	177.300	112	276
587	C13H26 Y3 0	1-cyclohexylheptane	6.97430	1743.000	180.900	111	278
588	C13H28 Y3 0	tridecane	7.00756	1690.670	174.220	107	267
589	C13H28O N 570	1-tridecanol	7.41181	2003.29	168.13	202	304
590	C13H28S N 282	butyl-nonyl-sulfide	5.70756	1421.32	205.81	177	355
591	C13H28S N 282	decyl-propyl-sulfide	5.70756	1421.32	205.81	177	355
592	C13H28S N 282	dodecyl-methyl-sulfide	5.70756	1421.32	205.81	177	355
593	C13H28S N 282	ethyl-undecyl-sulfide	5.70756	1421.32	205.81	177	355
594	C13H28S Y3 0	1-tridecanethiol	7.03700	1864.900	157.900	151	325
595	C14H16 Y3 0	1-butylnaphthalene	4.96310	656.800	26.000	139	292
596	C14H16 Y3 0	2-butylnaphthalene	6.61170	1591.400	138.500	145	291

597	C14H22 Y3 0	1-phenyloctane	7.00860	1812.200	174.600	127	298
598	C14H22 Y6 0	1,2,3,4-tetraethylbenzene	7.65632	2312.864	236.261	66	248
599	C14H22 N 598	1,2,3,5-tetraethylbenzene	7.63235	2312.86	236.26	174	282
600	C14H22 N 598	1,2,4,5-tetraethylbenzene	7.63723	2312.86	236.26	174	282
601	C14H26 Y9 0	1-tetradecyne	7.23227	1927.700	191.000	145	326
602	C14H28 Y3 0	1-tetradecene	7.02005	1745.001	170.475	119	283
603	C14H28 Y3 0	1-cyclopentylnonane	6.99600	1779.000	170.200	126	296
604	C14H28 Y3 0	1-cyclohexyloctane	6.98970	1799.300	174.300	126	298
605	C14H30 Y3 0	tetradecane	7.01300	1740.880	167.720	122	286
606	C14H300 Y4 0	1-tetradecanol	6.67410	1204.500	54.000	130	264
607	C14H30S N 282	butyl-decyl-sulfide	5.61512	1421.32	205.81	187	376
608	C14H30S N 282	dodecyl-ethyl-sulfide	5.61512	1421.32	205.81	187	376
609	C14H30S N 282	heptyl-sulfide	5.61512	1421.32	205.81	187	376
610	C14H30S N 282	methyl-tridecyl-sulfide	5.61512	1421.32	205.81	187	376
611	C14H30S N 282	propyl-undecyl-sulfide	5.61512	1421.32	205.81	187	376
612	C14H30S Y3 0	1-tetradecanethiol	7.04850	1909.200	151.900	164	341
613	C14H30S2 Y3 0	heptyl-disulfide	6.96020	1878.600	139.800	175	357
614	C15H18 Y8 0	1-pentyl-naphthalene	7.07430	2000.000	170.000	185	360
615	C15H18 Y8 0	2-pentyl-naphthalene	7.06000	2005.900	170.000	190	370
616	C15H24 Y3 0	1-phenyl-nonane	7.02450	1862.600	167.500	142	316
617	C15H28 Y9 0	1-pentadecyne	7.20553	1972.070	188.000	140	349
618	C15H30 Y3 0	1-pentadecene	7.01555	1781.974	162.582	134	302
619	C15H30 Y3 0	1-cyclopentyldecane	7.00349	1825.748	163.479	141	314
620	C15H30 Y3 0	1-cyclohexyl-nonane	7.00060	1850.200	167.600	141	316
621	C15H32 Y3 0	pentadecane	7.02359	1789.950	161.380	136	304
622	C15H320 N 606	1-pentadecanol	6.23737	1204.5	54.	230	339
623	C15H32S N 282	butyl-undecyl-sulfide	5.53347	1421.32	205.81	196	397
624	C15H32S N 282	dodecyl-propyl-sulfide	5.53347	1421.32	205.81	196	397
625	C15H32S N 282	ethyl-tridecyl-sulfide	5.53347	1421.32	205.81	196	397
626	C15H32S N 282	methyl-tetradecyl-sulfide	5.53347	1421.32	205.81	196	397

627	C15H32S	1-pentadecanethiol	7.06120	1951.000	146.000	176	356
Y3	0						
628	C16H26	1-phenyldecane	7.03642	1904.132	160.318	155	333
Y3	0						
629	C16H26	pentaethylbenzene	8.29495	2972.770	272.052	86	277
Y6	0						
630	C16H30	1-hexadecyne	7.47511	2154.700	185.000	172	367
Y9	0						
631	C16H32	1-hexadecene	7.04437	1843.581	157.917	147	319
Y3	0						
632	C16H32	1-cyclopentylundecane	7.02000	1869.200	156.000	154	330
Y3	0						
633	C16H32	1-cyclohexyldecane	7.01852	1899.242	161.348	154	333
Y3	0						
634	C16H34	hexadecane	7.02867	1830.510	154.450	149	321
Y3	0						
635	C16H34O	1-hexadecanol	6.15860	1380.000	91.000	145	190
Y4	0						
636	C16H34S	butyl-dodecyl-sulfide	5.46123	1421.32	205.81	204	416
N	282						
637	C16H34S	ethyl-tetradecyl-sulfide	5.46123	1421.32	205.81	204	416
N	282						
638	C16H34S	methyl-pentadecyl-sulfide	5.46123	1421.32	205.81	204	416
N	282						
639	C16H34S	octyl-sulfide	5.46123	1421.32	205.81	204	416
N	282						
640	C16H34S	propyl-tridecyl-sulfide	5.46123	1421.32	205.81	204	416
N	282						
641	C16H34S	1-hexadecanethiol	7.07500	1990.000	140.000	188	370
Y3	0						
642	C16H34S2	octyl-disulfide	6.95790	1935.600	129.000	196	383
Y3	0						
643	C17H28	1-phenylundecane	7.05090	1944.100	153.000	168	349
Y3	0						
644	C17H32	1-heptadecyne	7.48829	2216.200	182.000	184	384
Y9	0						
645	C17H34	1-heptadecene	7.03925	1877.910	151.530	159	335
Y3	0						
646	C17H34	1-cyclopentylundecane	7.03190	1909.100	149.000	168	346
Y3	0						
647	C17H34	1-cyclohexylundecane	7.02900	1939.700	154.500	167	349
Y3	0						
648	C17H36	heptadecane	7.01430	1865.100	149.200	161	337
Y3	0						
649	C17H36O	1-heptadecanol	6.78200	1595.000	85.060	191	383
Y1	0						
650	C17H36S	butyl-tridecyl-sulfide	5.39727	1421.32	205.81	212	434
N	282						
651	C17H36S	ethyl-pentadecyl-sulfide	5.39727	1421.32	205.81	212	434
N	282						
652	C17H36S	hexadecyl-methyl-sulfide	5.39727	1421.32	205.81	212	434
N	282						
653	C17H36S	propyl-tetradecyl-sulfide	5.39727	1421.32	205.81	212	434
N	282						
654	C17H36S	1-heptadecanethiol	7.08100	2027.000	135.000	198	384
Y3	0						
655	C18H30	1-phenyldodecane	7.06930	1981.600	145.500	181	363
Y3	0						
656	C18H30	hexaethylbenzene	7.50288	2360.733	212.652	134	298
Y6	0						

657	C18H34 Y9 0	1-octadecyne	7.50787	2281.100	180.000	196	400
658	C18H36 Y3 0	1-octadecene	7.04518	1917.900	145.900	171	350
659	C18H36 Y3 0	1-cycopentyltridecane	7.04730	1947.000	141.900	180	361
660	C18H36 Y3 0	1-cyclohexyldodecane	7.03620	1976.700	148.000	179	364
661	C18H38 Y3 0	octadecane	7.00220	1894.300	143.300	172	352
662	C18H38O Y1 0	1-octadecanol	6.81400	1632.000	80.060	201	385
663	C18H38S N 282	butyl-tetradecyl-sulfide	5.3364	1421.32	205.81	220	452
664	C18H38S N 282	ethyl-hexadecyl-sulfide	5.3364	1421.32	205.81	220	452
665	C18H38S N 282	heptadecyl-methyl-sulfide	5.3364	1421.32	205.81	220	452
666	C18H38S N 282	nonyl-sulfide	5.3364	1421.32	205.81	220	452
667	C18H38S N 282	pentadecyl-propyl-sulfide	5.3364	1421.32	205.81	220	452
668	C18H38S Y3 0	1-octadecanethiol	7.09600	2061.000	129.000	209	397
669	C18H38S2 Y3 0	nonyl-disulfide	6.96050	1981.500	117.000	215	407
670	C19H32 Y3 0	1-phenyltridecane	7.08430	2013.900	137.900	193	377
671	C19H36 Y9 0	1-nonadecyne	7.51711	2336.700	177.000	208	416
672	C19H38 Y3 0	1-nonadecene	7.05710	1961.600	141.200	183	364
673	C19H38 Y3 0	1-cyclopentyltetradecane	7.06300	1982.000	135.000	192	375
674	C19H38 Y3 0	1-cyclohexyltridecane	7.04690	2012.200	141.500	191	378
675	C19H40 Y3 0	nonadecane	7.01530	1932.800	137.600	184	366
676	C19H40O N 662	1-nonadecanol	6.60769	1632	80.06	274	395
677	C19H40S N 282	butyl-pentadecyl-sulfide	5.28246	1421.32	205.81	227	468
678	C19H40S N 282	ethyl-heptadecyl-sulfide	5.28246	1421.32	205.81	227	468
679	C19H40S N 282	hexadecyl-propyl-sulfide	5.28246	1421.32	205.81	227	468
680	C19H40S N 282	methyl-octadecyl-sulfide	5.28246	1421.32	205.81	227	468
681	C19H40S Y3 0	1-nonadecanethiol	7.10500	2094.000	124.000	219	409
682	C20H34 Y3 0	1-phenyltetradecane	7.10100	2042.000	130.000	205	390
683	C20H38 Y9 0	1-eicosyne	7.52336	2386.300	174.000	219	431
684	C20H40 Y3 0	1-eicosene	7.05770	1995.300	136.000	193	378
685	C20H40 Y3 0	1-cyclopentylpentadecane	7.08300	2016.000	128.000	203	388
686	C20H40 Y3 0	1-cyclohexyltetradecane	7.06100	2046.000	135.000	203	392

687	C20H42	eicosane	7.15220	2032.700	132.100	198	379
Y3	0						
688	C20H42O	1-eicosanol	6.87200	1699.000	70.060	219	406
Y1	0						
689	C20H42S	butyl-hexadecyl-sulfide	5.23473	1421.32	205.81	233	484
N	282						
690	C20H42S	decyl-sulfide	5.23473	1421.32	205.81	233	484
N	282						
691	C20H42S	ethyl-octadecyl-sulfide	5.23473	1421.32	205.81	233	484
N	282						
692	C20H42S	heptadecyl-propyl-sulfide	5.23473	1421.32	205.81	233	484
N	282						
693	C20H42S	methyl-nonadecyl-sulfide	5.23473	1421.32	205.81	233	484
N	282						
694	C20H42S	1-eicosanethiol	7.11400	2125.000	119.000	229	421
Y3	0						
695	C20H42S2	decyl-disulfide	6.97200	2019.000	103.100	235	429
Y3	0						
696	C21H36	1-phenylpentadecane	7.11400	2067.000	122.000	216	403
Y3	0						
697	C21H42	1-cyclopentylhexadecane	7.10300	2048.000	121.000	215	401
Y3	0						
698	C21H42	1-cyclohexylpentadecane	7.07200	2078.000	129.000	213	404
Y3	0						
699	C22H38	1-phenylhexadecane	7.14000	2095.000	114.000	227	415
Y3	0						
700	C22H44	1-cyclohexylhexadecane	7.07400	2099.000	122.000	224	416
Y3	0						

Appendix D

Nedan redovisas uttrycken för beräkning av aktivitetskoefficienter enligt Wilson, NRTL och UNIQUAC.

Wilson equation: [Liaw et.al, 2003]

$$\ln \gamma_1 = -\ln(x_1 + \Lambda_{12} x_2) + x_2 (\Lambda_{12} / (x_1 + \Lambda_{12} x_2) - \Lambda_{21} / (\Lambda_{21} x_1 + x_2))$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(x_2 + \Lambda_{21} x_1) - x_1 (\Lambda_{12} / (x_1 + \Lambda_{12} x_2) - \Lambda_{21} / (\Lambda_{21} x_1 + x_2))$$

$$\text{where } \Lambda_{ij} = v_j^1 / v_i^1 \exp(-(\lambda_{ij} - \lambda_{ii}) / RT)$$

$$(\partial \gamma_2 / \partial x_1)_T = \gamma_2 \{-(1 - \Lambda_{21}) / (x_2 - \Lambda_{21} x_1) - (\Lambda_{12} / (x_1 + \Lambda_{12} x_2) - \Lambda_{21} / (\Lambda_{21} x_1 + x_2)) + x_1 [(-\Lambda_{12} / (x_1 + \Lambda_{12} x_2))^2 (1 - \Lambda_{12}) + (\Lambda_{21} / (\Lambda_{21} x_1 + x_2))^2 (\Lambda_{21} - 1)]\}$$

$$(\partial \gamma_2 / \partial T)_{x_1} = \gamma_2 \{(-x_1 / (x_2 + \Lambda_{12} x_1)) (d \Lambda_{21} / dT) - x_1 [(1 / (x_1 + \Lambda_{12} x_2)) (d \Lambda_{12} / dT) - (\Lambda_{12} / (x_1 + \Lambda_{12} x_2))^2 x_2 (d \Lambda_{12} / dT) - (1 / (x_2 + \Lambda_{21} x_1)) (d \Lambda_{21} / dT) + (\Lambda_{21} / (x_2 + \Lambda_{12} x_1))^2 x_1 (d \Lambda_{12} / dT)]\}$$

NRTL equation: [Liaw et.al, 2003]

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 [\tau_{21} (G_{21} / x_1 + x_2 G_{21})^2 + (\tau_{12} G_{12}) / (x_2 + x_1 G_{12})^2]$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 [\tau_{12} (G_{12} / x_2 + x_1 G_{12})^2 + (\tau_{21} G_{21}) / (x_1 + x_2 G_{21})^2]$$

$$\text{where } \tau_{12} = (g_{12} - g_{22}) / RT, \tau_{21} = (g_{21} - g_{11}) / RT, \ln G_{12} = -\alpha_{12} \tau_{12}, \ln G_{21} = -\alpha_{12} \tau_{21}$$

$$(\partial \gamma_2 / \partial x_1)_T = \gamma_2 \{2x_1 [\tau_{12} ((G_{12}) / (x_2 + G_{12} x_1))^2 + (\tau_{21} G_{12}) / (x_1 + x_2 G_{21})^2] + x_1^2 [2\tau_{12} (G_{12}^2 / (x_2 + x_1 G_{12})^3) (1 - G_{12}) - 2\tau_{21} (G_{21}^2 / (x_1 + x_2 G_{21})^3) (1 - G_{21})]\}$$

$$(\partial \gamma_2 / \partial T)_{x_1} = x_1^2 \gamma_2 [((G_{12}) / (x_2 + G_{12} x_1))^2 (d \tau_{12} / dT) + 2 \tau_{12} ((G_{12}) / (x_2 + x_1 G_{12})) (1 / (x_2 + x_1 G_{12})) (d G_{12} / dT) - (G_{12}) / (x_2 + x_1 G_{12})^2 x_1 (d G_{12} / dT) + (1 / (x_1 + x_2 G_{21})^2) (G_{21} (d \tau_{21} / dT) + \tau_{21} (d G_{21} / dT)) - ((2\tau_{21} G_{21}) / (x_1 + x_2 G_{21})^3 x^2) (d G_{21} / dT)]$$

UNIQUAC equation: [Liaw et.al, 2003]

$$\ln \gamma_i = \ln (\Phi_i / x_i) + ((z / 2) q_i \ln (\theta_i / \Phi_i) + \Phi_j (l_i - (r_i / r_j) l_j) - q_i \ln (\theta_i + \theta_j \tau_{ji}) + \theta_j q_i (\tau_{ji} / (\theta_i + \theta_j \tau_{ji}) - \tau_{ji} / (\theta_i + \theta_j \tau_{ji})))$$

where $i = 1$ and $j = 2$, or $i = 2$ and $j = 1$, $\ln \gamma_{ij} = - ((u_{ij} - u_{ii}) / RT)$, $\Phi_i = x_i r_i / (x_i r_i + x_j r_j)$, $\theta_i = x_i q_i / (x_i q_i + x_j q_j)$,

$$l_i = (z / 2)(r_i - q_i) - (r_i - 1), z = 0$$

$$(\partial \gamma_2 / \partial x_1)_T = \gamma_2 \{ (1 / \Phi_2) (d\Phi_2 / dx_1) + 1 / x_2 + (z / 2) q_2 ((1 / \theta_2) (d\theta_2 / dx_1) - (1 / \Phi_2) (d\Phi_2 / dx_1)) + (l_2 - (r_2 / r_1) l_1)$$

$$(d\Phi_1 / dx_1) - (q_2 / \theta_2 + \theta_1 \tau_{12}) (d\Phi_2 / dx_1 + \tau_{12} (d\theta_1 / dx_1) + q_2 (d\theta_1 / dx_1)) ((\tau_{12} / (\theta + \theta_1 \tau_{12})) - (\tau_{21} / (\theta_1 + \theta_2 \tau_{21}))) +$$

$$\theta_1 q_2 [\tau_{21} / (\theta_1 + \theta_2 \tau_{21})]^2 ((d\theta_1 / dx_1 + \tau_{21} (d\theta_2 / dx_1)) - \tau_{12} / (\theta_2 + \theta_1 \tau_{12})^2 ((d\theta_2 / dx_1 + \tau_{12} (d\theta_1 / dx_1))) \}$$

$$(\partial \gamma_2 / \partial T)_{x_1} = \gamma_2 \{ -(q_2 \theta_1 / (\theta_2 + \theta_1 \tau_{12})) (d\tau_{12} / dT) + \theta_1 q_2 [\theta_2 / (\theta_2 + \theta_1 \tau_{12})]^2 (d\tau_{12} / dT) - (\theta_1 / (\theta_1 + \theta_2 \tau_{21}))^2 (d\tau_{12} / dT) \}$$

where $(d\Phi_1 / dx_1) = (r_1 r_2 / (x_1 r_1 + x_2 r_2))^2$, $(d\Phi_2 / dx_1) = (r_1 r_2 / (x_1 r_1 + x_2 r_2))^2$, $(d\theta_1 / dx_1) = (q_1 q_2 / (x_1 q_1 + x_2 q_2))^2$,

$$(d\theta_2 / dx_1) = (q_1 q_2 / (x_1 q_1 + x_2 q_2))^2, (d\tau_{12} / dT) = \tau_{12} (u_{12} - u_{22}) / RT^2, (d\tau_{21} / dT) = \tau_{12} (u_{21} - u_{11}) / RT^2$$

Appendix E

Avdunstning av etanol från en öppen behållare

$V = 1,0 \text{ dm}^3$ (försöksbägarens volym)

$T = 23 \text{ }^\circ\text{C} = 296 \text{ K}$

$P_a = 48,57 \text{ mmHg} = 6474 \text{ Pa}$

$M = 46 \text{ g/mol}$

$R = 8,3145 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$

$PV = nRT \Leftrightarrow m = PVM / RT = 6474 \cdot 1,0 \cdot 10^{-3} \cdot 46 / 8,3145 \cdot 296 = 0,12 \text{ g}$

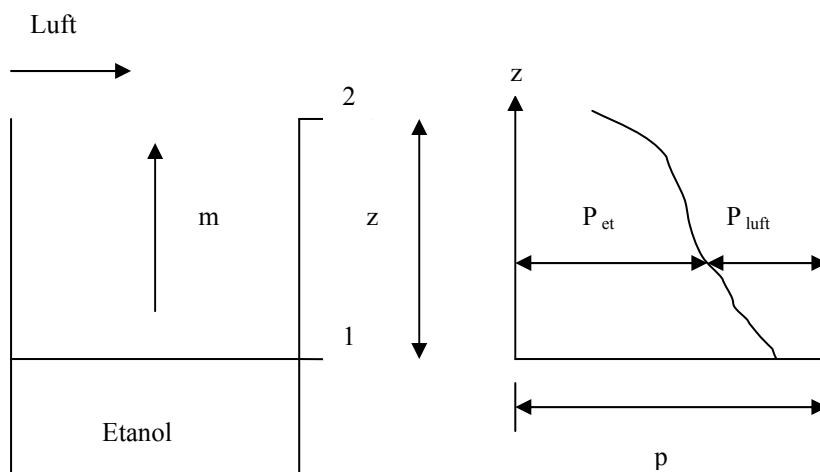
$n = m / M$

Från de experimentella försöken kan avdunstningshastigheten mätas till c:a $0,028 \text{ g/min}$ (utan lock).

Tid för att fylla upp försöksbägaren med en konstant koncentration (teoretiskt):

$t = 0,12 \text{ g} / (0,028 \text{ g} / \text{min}) = 4,3 \text{ min} \approx 4 \text{ minuter}$

Som tidigare nämnts i kapitel 2.2.2. skall hänsyn tas till den naturliga konvektion (luftströmning) som finns i omgivningen. Det byggs upp en koncentrationsgradient med högst koncentration närmast vätskeytan. Vid behållarens kant blir det ett sk. randfenomen. Då alkoholångorna är tyngre än luft så "rinner" de ner längs behållarens utsida och blandas med luften. För att lättare förstå beräkningsexemplet nedan visas samma figur som i kapitel 2.2.2. dvs. figur 6.



Figur 6 Avdunstning från vätskeyta

Avdunstningsscenariot som har beskrivits ovan brukar som tidigare diskuterats benämnas **Stefan's massflödes problem** eller kortare **Stefan's lag**. Den uttrycks med följande formel: [Holman, 1976]

$$m = (D \cdot P \cdot M \cdot a / R \cdot T (z_2 - z_1)) \ln (P_{a2} / P_{a1}) \quad [24]$$

som uttrycker massflödet som avdunstar från vätskeytan till fria luften.

De olika storheterna är

m = Massflöde per tidsenhet från vätskeytan (kg/s)

D = Diffusionskoefficient (m^2 / s)

P = Atmosfärstryck (Pa)

M = Molmassan för vätskan (kg/kmol)

a = Behållarens area (m^2), där $a = \pi \cdot r^2$

R = Allmänna gaskonstanten, 8314

T = Temperatur (K)

$z_{1,2}$ = Höjdskillnad mellan vätskeytan och behållarens kant (m)

$P_{a1} = P - p_a$ (Pa)

$P_{a2} = P$ (Pa)

För att jämföra med ovan experimentellt uppmätt värde på avdunstningen (0,028 g/min) genomförs beräkningen med hjälp av Stefan's formel [24]:

$$m = ((0,119 \cdot 10^{-4} \cdot 1,013 \cdot 10^5 \cdot 46 \cdot \pi \cdot (10 \cdot 10^{-2})^2) / (8314 \cdot 296 \cdot 0,10)) \ln (1,013 / 0,9491)$$

$$m = 4,6124 \cdot 10^{-7} \text{ kg/s} = 4,6124 \cdot 10^{-4} \text{ g/s} = 0,02767 \text{ g/min} \approx 0,028 \text{ g/min} (0,028 \text{ g/min})$$

Detta värde stämmer mycket bra överens med det experimentellt uppmätta!

Avdunstning av etanol från en sluten behållare

Här genomfördes samma försök som tidigare fast med ett lock på behållaren.

Samma massa som innan dvs. 0,12 g.

Avdunstningshastighet från experimentella mätningar: 0,0012 g/min (med lock). Givetvis blir detta en felkälla då locket inte sluter helt tätt, men en bra approximation.

$$t = 0,12 \text{ g} / (0,0012 \text{ g/min}) = 100 \text{ minuter}$$

Det tar alltså mycket längre tid att fylla ut volymen ($1,0 \text{ dm}^3$) då behållaren är sluten. Är detta rätt sätt att se på experimentet? Eftersom det finns ett lock på kan inte alkoholångorna avdunsta lika lätt till omgivningen utan kondenserar på insidan av behållaren. Det vill säga det blir inte något större massflöde till omgivningen.

Till sist råder s.k. kemisk jämvikt i behållaren (teoretiskt). Här blir det en mycket mer påtaglig koncentrationsgradient som byggs upp över ett längre tidsintervall och när tiden går mot oändligheten är gradienten konstant i behållaren dvs. går mot noll.