

THÔNG SỐ NHIỆT ĐỘNG CỦA CÁC HYDROCARBON RIÊNG BIỆT VÀ HỖN HỢP CỦA CHÚNG

Khi tính toán nhiệt động học của quá trình chế biến khí, người ta thường sử dụng các đại lượng nhiệt động sau: áp suất, nhiệt độ, độ chịu nén, thể tích riêng, trọng lượng riêng, entanpi, entropi, nhiệt dung, độ dẫn nhiệt, độ nhớt. Trong chương này sẽ xem xét tính chất nhiệt động của các hydrocarbon riêng biệt và hỗn hợp của chúng, và trình bày một số phương pháp xác định các tính chất đó. Áp suất, thể tích, nhiệt độ và hệ số độ chịu nén thường nằm trong phương trình trạng thái. Nhiều tính chất của các hydrocarbon được xác định trên cơ sở lý thuyết trạng thái tương hợp, vì vậy cần phải biết các thông số tối hạn của các cấu tử và hỗn hợp của chúng.

III.1. NHIỆT ĐỘ SÔI VÀ ÁP SUẤT HƠI BẢO HOÀ

Nhiệt độ sôi của hydrocarbon từ C_1 đến C_{10} đã được xác định bằng thực nghiệm, số liệu đưa ra trong bảng III.1.

Nhiệt độ sôi của các hydrocarbon parafin tinh khiết từ C_1 đến C_{20} ở điều kiện tiêu chuẩn có thể tính chính xác đến ± 1 K theo phương trình:

$$T_s = (193,3 - 0,05n) \cdot (n - 1)^{0,91} - 121n + 232,7 \quad (\text{III.1})$$

trong đó n là số nguyên tử cacbon trong phân tử hydrocarbon.

Áp suất hơi bão hoà của hydrocarbon tinh khiết có thể xác định theo phương trình sau khi biết T_s , T_c , P_c :

$$\lg P_h = [\beta - 0,01500 + 1,397 \cdot (T_h - \delta)^2 + 0,581(T_h - \delta)] \cdot (1 - \frac{1}{T_h}) \quad (\text{III.2})$$

trong đó: $P_h = P_{bh}/P_c$

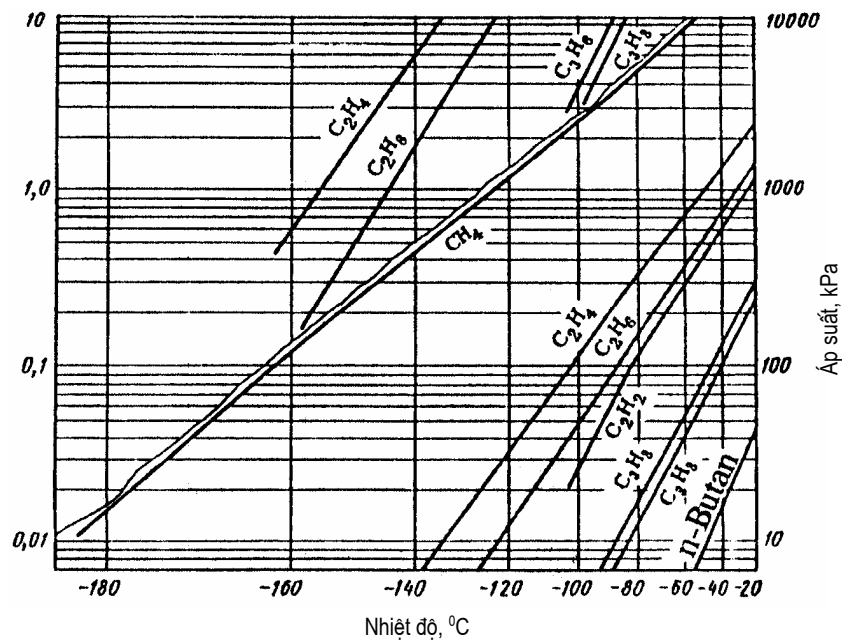
$$\delta = -0,1018 + 0,3806 \cdot \beta - 0,02861 \cdot \beta^2$$

$$\beta = T_h \cdot \lg(0,96784 \cdot P_c) \cdot (1 - T_h)$$

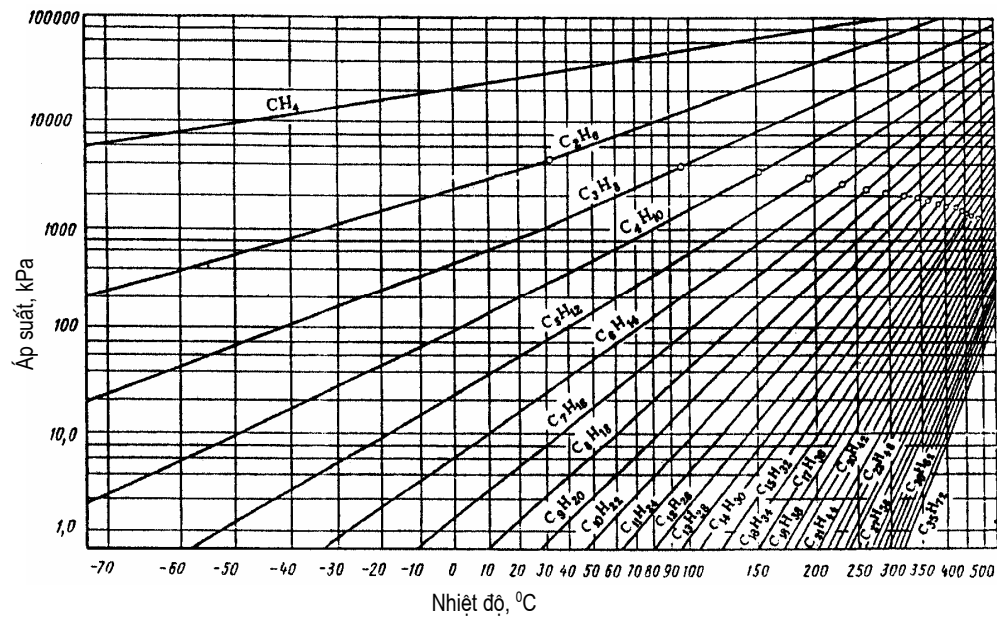
$$T_h = T_s/T_c$$

Áp suất hơi bão hoà của các cấu tử riêng biệt có thể xác định bằng phương pháp đơn giản hơn, đó là phương pháp giản đồ, trong đó người ta sử dụng giản đồ phụ thuộc áp suất hơi bão hoà vào nhiệt độ (hình III.1 và hình III.2).

Bảng III.1. (1 trang) ngang



Hình III.1. Áp suất hơi bão hoà của các hydrocacbon nhẹ ở nhiệt độ thấp



Hình III.2. Áp suất hơi bão hoà của các hydrocacbon no mạch thẳng

III.2 CÁC ĐẠI LƯỢNG TỐI HẠN

Các đại lượng tối hạn: T_c , P_c , V_c của các hydrocacbon riêng biệt nhận được bằng thực nghiệm xem ở bảng III.2.

Với các hydrocacbon từ C_1 đến C_{15} có thể xác định nhiệt độ tối hạn (chính xác tới ± 1 K) theo phương trình:

$$T_c = \frac{391,7(n-1)}{2,645 + (n-1)^{0,785}} + 190,7 \quad (\text{III.3})$$

trong đó n là số nguyên tử cacbon của cấu tử.

Áp suất tối hạn của hydrocacbon từ C_1 đến C_{20} (trừ C_{18}) có thể xác định chính xác tới $\pm 0,05$ MPa theo phương trình:

$$P_c = \frac{49,51}{7,977 + n^{1,2}} \quad (\text{III.4})$$

trong đó n là số nguyên tử cacbon của cấu tử.

Để xác định thể tích tối hạn của các hydrocacbon từ C_3 đến C_{16} (chính xác đến $4 \text{ cm}^3/\text{mol}$) có thể áp dụng phương trình:

$$V_c = 58,0 n + 22 \quad (\text{III.5})$$

Khi không thể tìm được các đại lượng tối hạn của hỗn hợp trong các bảng số liệu, chúng ta có thể tính toán bằng nhiều cách khi đã biết các đại lượng thực của các cấu tử. Cũng tương tự như vậy, các thông số a , b , c , ... trong các phương trình trạng thái cũng được xác định bằng cách đặc biệt đối với hỗn hợp. Các đẳng thức có mặt các thông số của hỗn hợp được gọi là các định luật kết hợp hoặc định luật hỗn hợp. Khi tính toán không quan tâm đến dạng chính xác của nó mà dựa trên cơ sở giả thiết rằng các tính chất của hỗn hợp là trung bình cộng tính chất của các cấu tử riêng biệt tạo thành hỗn hợp.

Định luật được áp dụng với các phương trình trạng thái Van der Waals, Redlich - Kwong, Peng - Robinson để xác định thông số a và b như sau:

$$a_m = \sum_i \sum_j x_i x_j (a_i a_j)^{1/2} (1 - k_{ij})$$

$$b_m = \sum_i x_i b_i$$

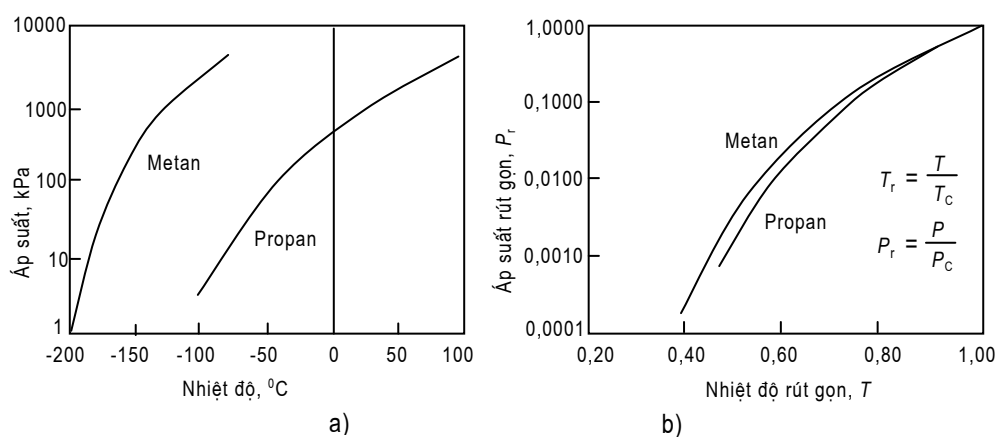
trong đó: a_m , b_m là thông số a , b của hỗn hợp;
 a_i , a_j là thông số a , b của cấu tử i và j ;

x_i , x_j là phần mol của cấu tử i và j trong hỗn hợp;
 k_{ij} là thông số tương tác bậc hai.

Như vậy các thông số a_m và b_m của hỗn hợp được xác định trên cơ sở các thông số a và b của các cấu tử tinh khiết. Với các phương trình trạng thái nói trên, định luật hỗn hợp là tổng của các cặp bậc 2. Ví dụ hỗn hợp bốn cấu tử sẽ gồm có 6 cặp bậc 2...

Thông số tương tác bậc hai k_{ij} không phải là thông số lý thuyết mà là thông số thực nghiệm được sử dụng để hiệu chỉnh trong các phương trình trạng thái.

Các giá trị tới hạn tìm được từ các định luật hỗn hợp không phải là các giá trị thực, mà là các giá trị giả tới hạn, thường được ký hiệu là T'_c và P'_c . Như vậy giá trị giả tới hạn không phải là một điểm trên đường cong cân bằng pha, nó chỉ là thông số tương quan sử dụng khái niệm trạng thái tương hợp. Trạng thái tương hợp là trạng thái có cùng các thông số rút gọn (hình III.3).



Hình III.3. Áp suất hơi và áp suất rút gọn của metan và propan

Các thông số giả tới hạn có thể được xác định theo định luật Kay:

$$P'_c = \sum_i P_{c_i} \cdot c_i \quad \text{và} \quad T'_c = \sum_i T_{c_i} \cdot c_i$$

trong đó c_i là phần mol của cấu tử trong hỗn hợp; P_{c_i} và T_{c_i} là các giá trị tới hạn của cấu tử.

Các giá trị tới hạn của các hydrocacbon xem ở bảng III.2.

Chia giá trị áp suất và nhiệt độ thực cho các giá trị giả tới hạn, ta có giá trị các đại lượng giả rút gọn của hỗn hợp:

$$T_r' = \frac{T}{T_c'} ; \quad P_r = \frac{P}{P_c'} \quad (\text{III.6})$$

Định luật Kay cũng có thể áp dụng để tính khối lượng phân tử hiệu dụng của hỗn hợp.

Ví dụ III.1

Tính hệ số chịu nén z của khí có thành phần và các thông số tới hạn cho trong bảng III.2 ở áp suất $P = 13,94$ MPa (2021 psi) và $T = 331$ K (595°R).

Áp dụng định luật Kay xác định được các đại lượng giả tới hạn của hỗn hợp khí. Kết quả tính theo hệ đơn vị quốc tế và đơn vị Anh đưa ra ở bảng III.2.

Bảng III.2. Thành phần và các thông số tới hạn của hỗn hợp khí

Cấu tử	y_i	Hệ Anh				Hệ mét				ΣMW	
		P_c	P_c'	T_c	T_c'	P_c	P_c'	T_c	T_c'	MW	MW''
N ₂	0,0046	493	2,3	227	1,0	3,40	0,02	126	0,6	28,016	0,13
CO ₂	0,0030	1071	3,2	548	1,6	7,38	0,02	304	0,9	44,010	0,13
H ₂ S	0,1438	1300	186,9	672	96,6	8,96	1,29	373	53,6	34,076	4,90
C ₁	0,8414	666	560,4	343	288,6	4,60	3,87	191	160,7	16,043	13,50
C ₂	0,0059	707	4,2	550	3,2	4,88	0,023	305	1,8	30,070	0,18
C ₃	0,0008	617	0,5	666	0,5	4,25	-	370	0,3	44,097	0,04
izo-C ₄	0,0003	528	0,2	734	0,2	3,65	-	408	0,1	58,124	0,02
n-C ₄	0,0002	551	0,1	765	0,2	3,80	-	425	0,1	58,124	0,01
	1,0000		758		392		5,23		218	MW = 18,900	

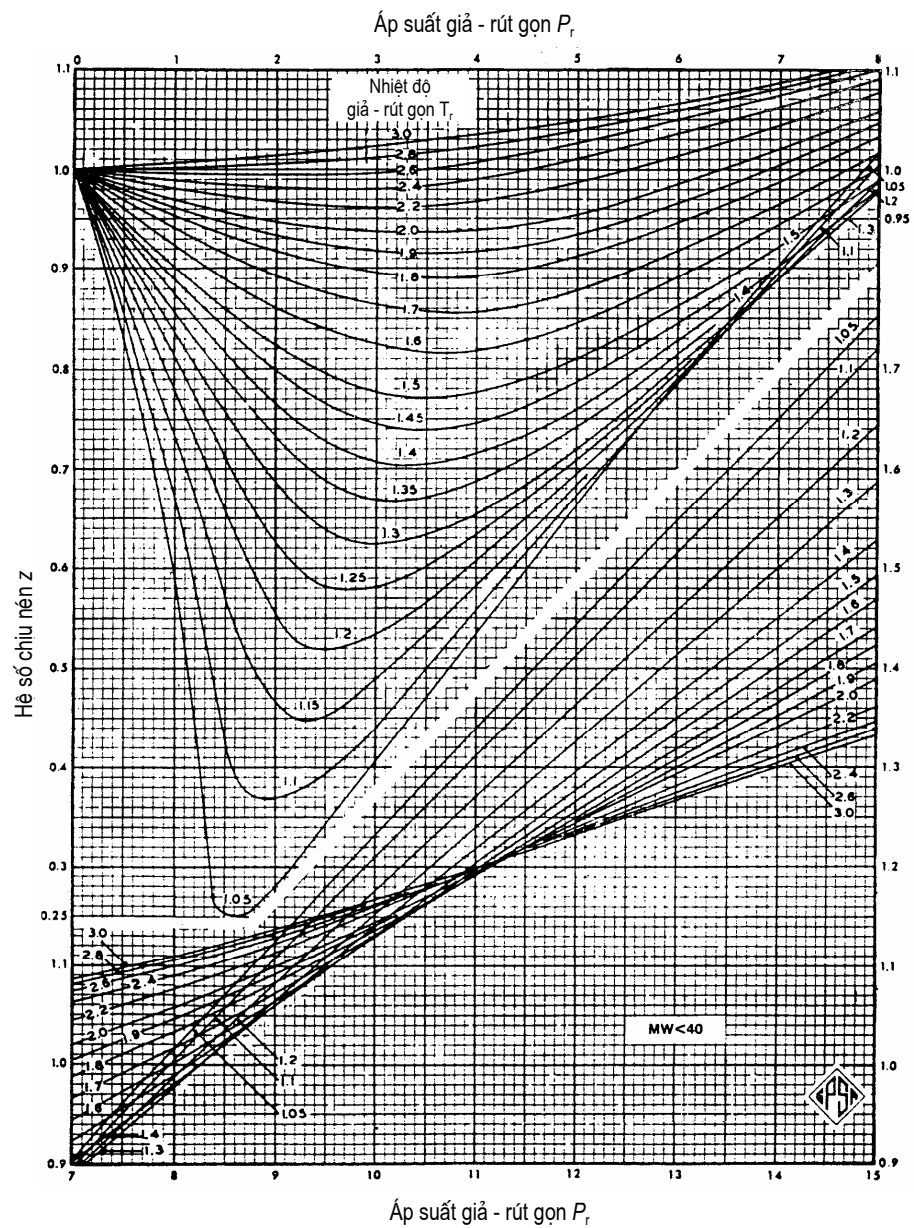
Tính toán các đại lượng giả rút gọn của hỗn hợp theo các hệ đơn vị quốc tế (hệ mét) và hệ đơn vị Anh:

$$\text{Hệ mét:} \quad P_r' = \frac{13,94}{5,23} = 2,67 \quad T_r' = \frac{331}{218} = 1,52$$

$$\text{Hệ Anh:} \quad P_r' = \frac{2021}{758} = 2,67 \quad T_r' = \frac{595}{392} = 1,52$$

Từ giản đồ hệ số chịu nén Katz (hình III.5) có $z = 0,8$.

Hình III.4. (hình cũ 10. a,b) ngang



Hình III.5. Biểu đồ Katz xác định hệ số chịu nén ở các giá trị áp suất cao

Từ phương trình trạng thái:

$$PV = zRT \quad \text{và} \quad \rho = \frac{MW}{V}$$

ta nhận được công thức tính tỷ trọng thực của khí ở nhiệt độ T và áp suất P :

$$\rho = \frac{(MW).(P)}{zRT}$$

trong đó MW là khối lượng phân tử.

Thay vào công thức trên ta có tỷ trọng thực của khí:

$$\rho = \frac{13,94 \times 18,90}{0,8 \times 0,00831 \times 331} = 120 \text{ kg/m}^3.$$

Ví dụ III.2

Áp dụng các phương pháp tính hệ số chịu nén z của khí có chứa H_2S và CO_2 .

Có hai phương pháp phổ biến là phương pháp Robinson và phương pháp Wichert. Chúng ta sử dụng phương pháp Wichert. Trong phương pháp này, tác giả đã sử dụng các thông số giả tới hạn P_c' và T_c' được xác định bằng định luật Kay và giản đồ Katz. Ngoài ra tác giả còn sử dụng hệ số ϵ được xác định từ giản đồ trên hình III.6. Hệ số ϵ được sử dụng để hiệu chỉnh các thông số giả tới hạn xác định từ định luật Kay đối với khí chua. Giá trị các thông số giả tới hạn sau khi hiệu chỉnh được sử dụng để xác định áp suất rút gọn P_r' và nhiệt độ rút gọn T_r' theo giản đồ Katz.

Hệ mét: $T_c'' = T_c' - 0,556 \epsilon$

$$P_c'' = \frac{P_c' \cdot T_c''}{T_c' + B(1 - B) \times \epsilon \times 0,556}$$

Hệ Anh: $T_c'' = T_c' - \epsilon$

$$P_c'' = \frac{P_c' \cdot T_c''}{T_c' + B(1 - B) \cdot \epsilon}$$

trong đó: P_c'' và T_c'' là thông số giả tới hạn đã được hiệu chỉnh, từ đó tính được $P_r'' = P/P_c''$ và $T_r'' = T/T_c''$, và sẽ được dùng trong giản đồ Katz để xác định z .

P_c' và T_c' là các thông số giả tới hạn được xác định từ định luật Kay;

ε xác định từ giản đồ trên hình III.6;

B là phần mol H_2S trong khí.

Có thể xác định ε theo giản đồ trên hình III.6 hoặc theo biểu thức:

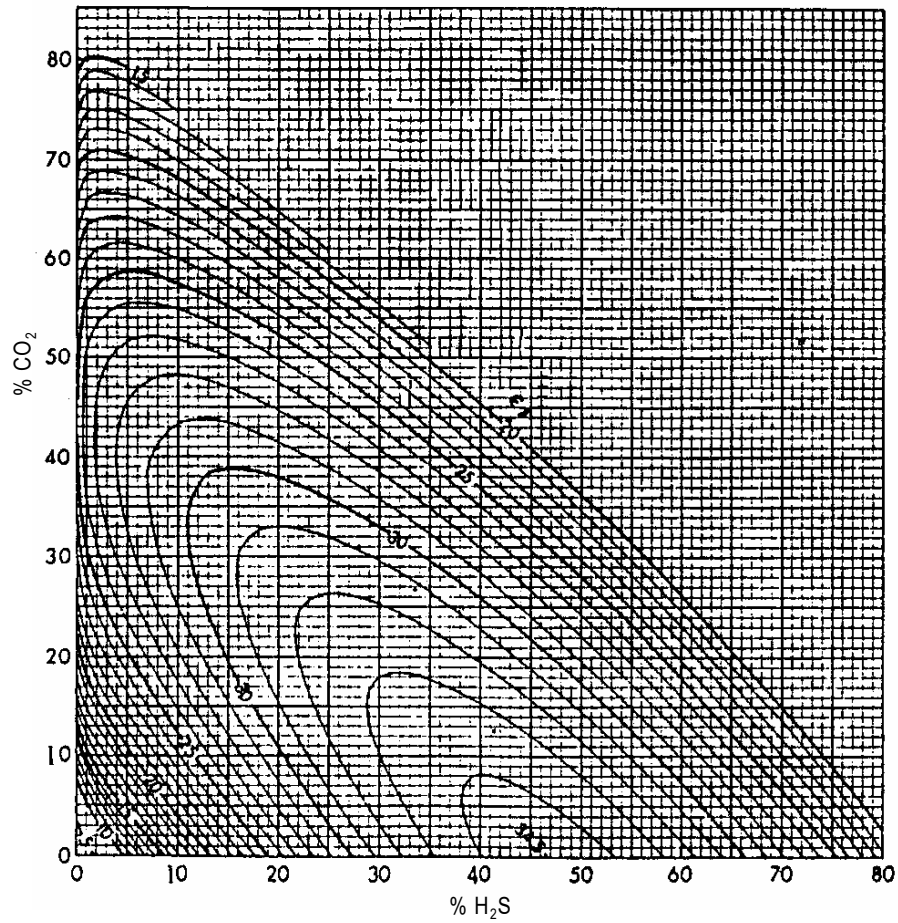
$$\varepsilon = 120 \cdot (A^{0,9} - A^{1,6}) + 15 \cdot (B^{0,5} - B^4) \quad (III.7)$$

trong đó: ε tính theo $^{\circ}R$ bằng $1,8 \times K$;

A là phần mol H_2S và CO_2 trong khí;

B là phần mol H_2S trong khí.

Với các số liệu thành phần khí như ở ví dụ III.1, từ giản đồ trên hình III.6 hoặc từ biểu thức (III.7) có $\varepsilon = 21$.



Hình III.6. Giản đồ xác định hệ số hiệu chỉnh ε

Tính toán theo các hệ đơn vị quốc tế (hệ mét) hoặc hệ đơn vị Anh:

Hệ mét: $T_c'' = 218 - 0,556 \times 21 = 206,3 \text{ K}$

$$P_c'' = \frac{5,23 \times 206,3}{218 + 0,1438 \times 0,8562 \times 21 \times 0,056} = 4,92 \text{ MPa}$$

Hệ Anh: $T_c'' = 392 - 21 = 371 \text{ }^\circ\text{R}$

$$P_c'' = \frac{758 \times 371}{392 + 0,1438 \times 0,8562 \times 21} = 713 \text{ psi}$$

từ đó: $P_r'' = 2,8$ và $T_r'' = 331/206,3 = 1,6$, do đó $z = 0,83$.

$$\rho = \frac{13,94 \times 18,90}{0,83 \times 0,00831 \times 331} = 115 \text{ kg/m}^3.$$

Ví dụ III.3

Đôi khi cần phải tính toán tỷ trọng của hỗn hợp khí khi có sẵn rất ít thông tin. Người ta sử dụng giản đồ trên hình III.7 biểu diễn các tính chất giả tới hạn của khí tự nhiên để tính toán gần đúng.

Với số liệu tương tự như ví dụ III.1, nhưng khối lượng phân tử của hỗn hợp $MW = 18,90$ (các thông số khác không biết).

Tỷ trọng tương đối của hỗn hợp khí đó (so với không khí, $\gamma_{\text{không khí}} = 1$):

$$\gamma_k = \frac{18,90}{28,97} = 0,65$$

Từ giản đồ ta có: $T_c' = 208 \text{ K}$ ($375 \text{ }^\circ\text{R}$)

$$P_c' = 4,62 \text{ MPa} \text{ (670 psi)}$$

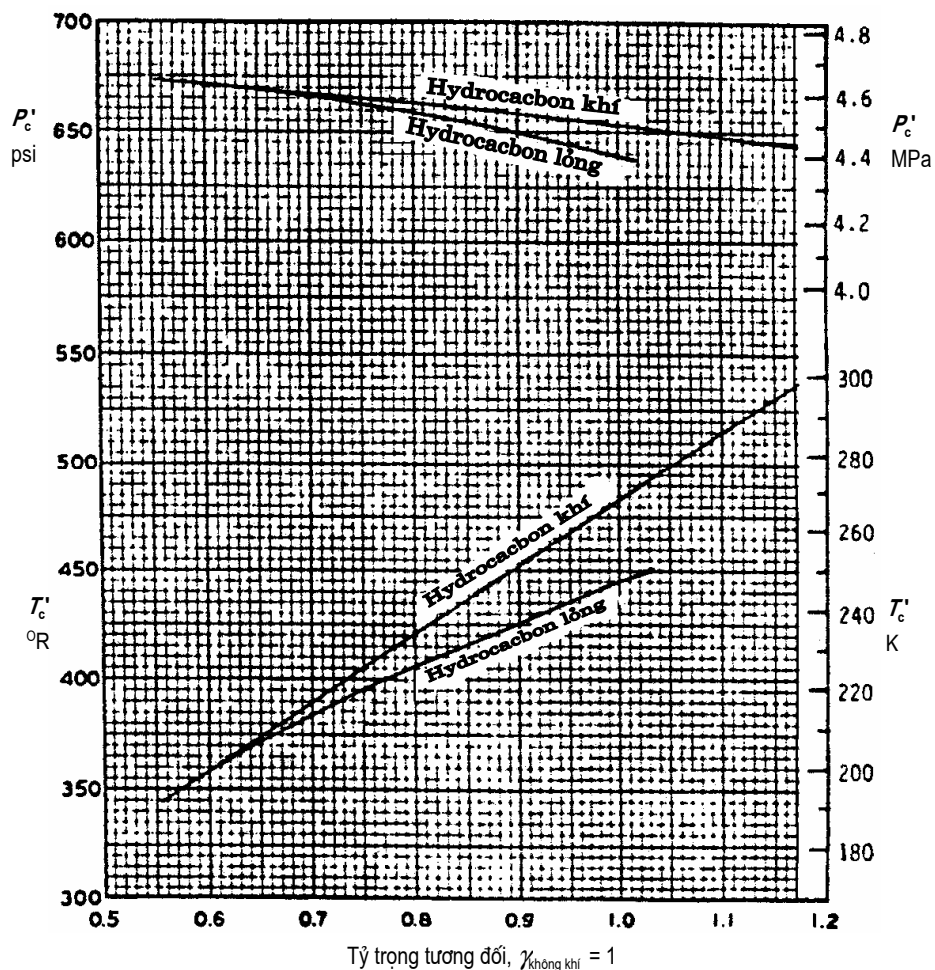
Từ đó tính các đại lượng rút gọn của hỗn hợp:

Hệ mét: $P_r' = \frac{P}{P_c'} = \frac{13,95}{4,62} = 3,02$

$$T_r' = \frac{T}{T_c'} = \frac{331}{208} = 1,59$$

Hệ Anh: $P_r' = \frac{P}{P_c'} = \frac{2021}{670} = 3,02$

$$T_r' = \frac{T}{T_c'} = \frac{595}{375} = 1,59$$



Hình III.7. Giảm đồ các tính chất giả tới hạn của khí tự nhiên

Từ giảm đồ trên hình III.4 và III.5 xác định được $z = 0,825$ và:

$$\rho = \frac{13,94 \times 18,90}{0,825 \times 0,00831 \times 331} = 116 \text{ kg/m}^3$$

Những phương pháp khác xác định hệ số z

Còn có một số phương pháp khác để xác định hệ số chịu nén z . Nói chung phương pháp xác định z từ các phương trình trạng thái được ứng dụng khá rộng rãi khi không cần phải tính toán thật chính xác. Các đẳng thức thực nghiệm đã được phát triển để tính hệ số chịu nén z với các hỗn hợp khí đặc biệt hoặc hỗn hợp khí trong phạm vi hẹp, cho kết quả khá chính xác nhưng

không tổng quát. Ví dụ biểu đồ Katz áp dụng tốt khi tính toán với khí ngọt (như khi tính toán thiết kế đường ống dẫn khí ngọt chẳng hạn), nhưng lại kém phù hợp với khí có chứa lượng nhỏ H_2S , CO_2 và N_2 . Bảng III.3 dưới đây đưa ra các số liệu so sánh kết quả tính hệ số z với hỗn hợp khí có thành phần như trong các ví dụ trên khi có thêm các hệ số hiệu chỉnh.

Bảng III.3. So sánh các kết quả tính z

Các phương pháp tính	z
Katz	0,80
Katz với hệ số ε	0,83
Đồ thị $\gamma - P_c', T_c'$	0,825
Phương trình trạng thái SBV	0,83
Phương trình trạng thái SRK	0,85
Phương trình trạng thái PR	0,81

Với khí tự nhiên và khí đồng hành có thể xác định hệ số chịu nén theo phương trình:

$$z = 0,990 + (P_r - 0,0681) / (-26,481 T_r^2 + 49,11 T_r - 25,17) \quad (III.8)$$

với độ chính xác $\pm 0,5\%$ trong khoảng giá trị $P_r = 0,35 \dots 1,5$; $T_r = 1,2 \dots 1,8$.

Còn nói chung thực tế thường tính toán theo các giản đồ phụ thuộc của z vào các đại lượng rút gọn đã nêu trên.

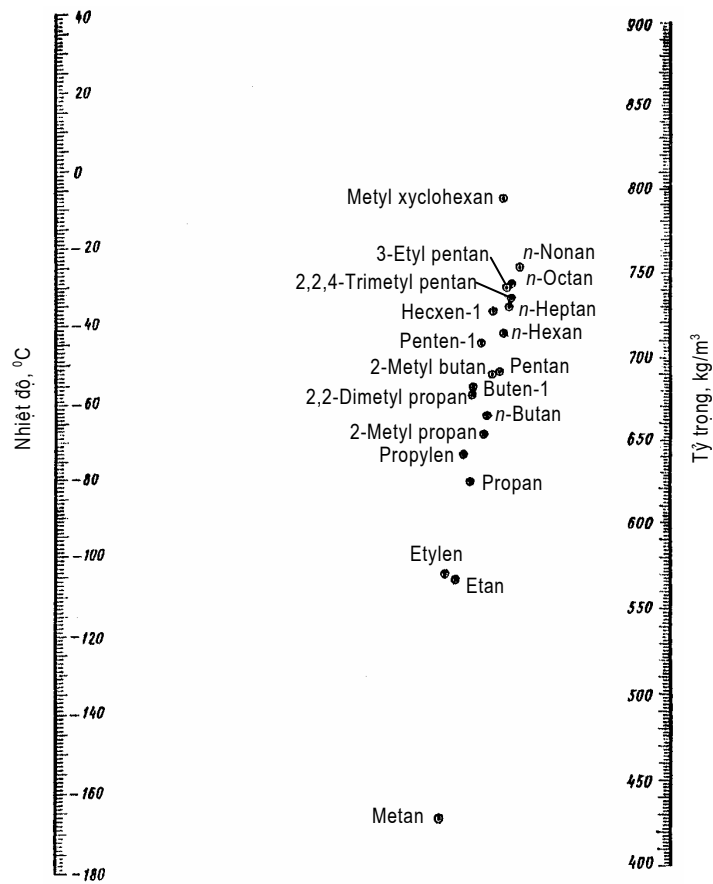
Tỷ trọng của các hydrocacbon từ C_1 đến C_{10} ở áp suất khí quyển được đưa ra trên các giản đồ tương ứng trong khoảng nhiệt độ thấp (hình III.8) và trong khoảng nhiệt độ cao (hình III.9). Giá trị tọa độ tương ứng với các hydrocacbon trên hình III.9 được cho trong bảng III.4.

Tỷ trọng của khí nén được tính theo phương trình:

$$d = \frac{\sum_i x_i M_i}{\sum_i (x_i v_i) + v_m} \quad (III.9)$$

trong đó: v_i là thể tích mol của cấu tử i , $m^3/kg.mol$;

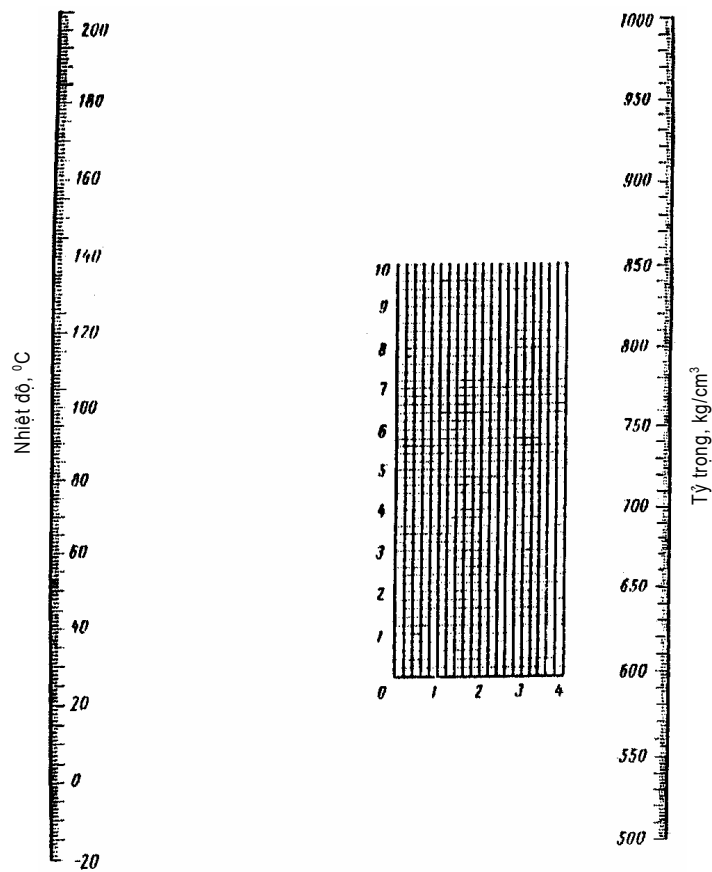
v_m là thể tích âm của hỗn hợp, tức là đại lượng cho biết tổng thể tích của các cấu tử riêng biệt lớn hơn thể tích hỗn hợp của chúng, $m^3/kg.mol$.



Hình III.8. Giản đồ xác định tỷ trọng hydrocacbon lỏng ở áp suất khí quyển trong vùng nhiệt độ thấp

Bảng III.4. Giá trị tọa độ và khoảng nhiệt độ để tính tỷ trọng của các hydrocacbon lỏng ở áp suất khí quyển

Hydrocacbon	Các tọa độ (hình III.8)		Khoảng nhiệt độ, °C	
	x	y	Hình III.8	Hình III.9
<i>n</i> -Pentan	2,19	0,61	−90 ... 0	−10 ... 30
<i>izo</i> -Pentan	2,07	0,43	−50 ... 10	−10 ... 20
<i>n</i> -Hexan	2,33	1,53	−90 ... 0	−10 ... 60
<i>n</i> -Heptan	2,45	2,27	−90 ... 0	−10 ... 90
<i>n</i> -Octan	2,65	2,89	−50 ... 0	−10 ... 120
<i>n</i> -Nonan	2,74	3,36	−50 ... 0	−10 ... 120
<i>n</i> -Decan	2,80	3,73	—	−10 ... 140



Hình III.9. Giản đồ xác định tỷ trọng hydrocacbon lỏng ở áp suất khí quyển trong vùng nhiệt độ trung bình và cao

Ngoài ra người ta còn có thể xác định các thông số tới hạn và giả tới hạn của hỗn hợp theo các giản đồ khi biết giá trị nhiệt độ sôi trung bình của hỗn hợp:

- Từ nhiệt độ sôi trung bình mol xác định nhiệt độ giả tới hạn.
- Từ nhiệt độ sôi trung bình khối lượng xác định nhiệt độ tới hạn của hỗn hợp.

Trên hình III.10 và III.11 là giản đồ để xác định nhiệt độ giả tới hạn (hoặc tới hạn) sau khi xác định được nhiệt độ sôi trung bình mol (hoặc nhiệt độ sôi trung bình khối lượng) và tỷ trọng trung bình của hỗn hợp.

Hình III.11 (h cũ I.16.) 1 trang (dọc)

Các bước tính toán như sau:

1) Xác định nhiệt độ sôi trung bình mol, với x_i phân mol cấu tử i trong hỗn hợp:

$$T_{s_{mol}} = \sum_{i=1}^N T_{s_i} x_i$$

2) Tính nhiệt độ sôi trung bình khối lượng, với x_i' phân khối lượng cấu tử i trong hỗn hợp:

$$T_{s_{klg}} = \sum_{i=1}^N T_{s_i} x_i'$$

3) Xác định tỷ trọng trung bình của hỗn hợp hydrocacbon:

$$\rho_4^{20} = \sum \rho_{4_i}^{20} \cdot x_i$$

• với n -alcan:
$$\rho_{4_i}^{20} = 0,8513 - \frac{1,31}{n + 0,82}$$

• với n -alken:
$$\rho_{4_i}^{20} = 0,8513 - \frac{1,1465}{n + 0,44}$$

trong đó n là số nguyên tử cacbon trong phân tử hydrocacbon.

Sau khi xác định được tỷ trọng trung bình của hỗn hợp hydrocacbon, nếu $\rho_4^{20} \leq 0,6$ thì nhiệt độ giả tới hạn được xác định theo giản đồ trên hình III.10, nếu $\rho_4^{20} \geq 0,6$ thì nhiệt độ giả tới hạn được xác định theo giản đồ trên hình III.11.

III.3. THÔNG SỐ ACENTRIC ω

Để xác định tính chất của các chất có sử dụng thông số hiệu chỉnh trên cơ sở lý thuyết trạng thái tương hợp, người ta đã đưa ra thông số acentric ω hiệu chỉnh sự sai lệch do hình dạng phân tử không phải là dạng hình cầu:

$$\omega = -\lg P_r - 1 \quad (\text{III.10})$$

trong đó P_r là áp suất rút gọn ở $T_r = 0,7 T_c$ tức là $P_r = P^*/P_c$ với P^* là áp suất hơi ở $T = 0,7 T_c$.

Giá trị ω đối với các cấu tử riêng biệt xem ở bảng II.3 còn ω hỗn hợp được tính theo định luật hỗn hợp:

$$\omega = \sum_i \omega_i \cdot c_i \quad (\text{III.11})$$

Ngoài ra nó còn được xác định từ các giản đồ có trong các sổ tay.

III.4. CÁC TÍNH CHẤT CỦA HYDROCARBON Ở TRẠNG THÁI LỎNG

Đặc tính cơ bản của trạng thái lỏng khi so sánh với trạng thái khí là không chịu nén. Tuy nhiên tính toán các tính chất của hỗn hợp lỏng bao gồm hai yếu tố: tồn tại các cấu tử nhẹ có áp suất hơi cao là metan và etan, và có sự giảm thể tích khi hoà tan hai hydrocarbon lỏng.

Cả hai yếu tố trên đều có thể hiểu được khi biết rằng trạng thái lỏng được tạo thành từ các phân tử có kích thước và hình dáng khác nhau, có mức năng lượng khác nhau. Kích thước và hình dáng phân tử ảnh hưởng đến tất cả các tính chất của pha lỏng. Nếu như phóng đại các phân tử sẽ nhìn thấy hàng loạt kích thước, hình dạng và khoảng cách giữa chúng. Kích thước phụ thuộc vào khối lượng phân tử của chúng. Với các parafin có kích thước phân tử lớn sẽ có hình dạng như chuỗi xích. Các phân tử nhỏ như metan và etan sẽ khá giống hình cầu.

Năng lượng của phân tử chuyển động liên quan đến áp suất hơi, mà áp suất hơi lại phụ thuộc vào khối lượng phân tử. Các phân tử có khối lượng phân tử nhỏ như metan rất linh động, còn các phân tử có khối lượng phân tử lớn kém linh động hơn.

Các tính chất phụ thuộc vào kích thước hình dạng và năng lượng của phân tử. Tỷ trọng là một trong những yếu tố quan trọng, nó không chỉ cần thiết cho các tính toán chủ yếu mà còn có liên quan đến các thông số khác như độ nhớt, điểm sôi, chỉ số khúc xạ...

Để xác định tỷ trọng của hydrocarbon ở trạng thái lỏng (ví dụ LNG, LPG), người ta đưa ra thông số Watson được định nghĩa như sau:

$$K_w = \frac{A \cdot T_b^{1/3}}{\gamma} \quad (\text{III.12})$$

trong đó: T_b là điểm sôi trung bình; γ là tỷ trọng tương đối; A là hệ số chuyển đổi.

Hệ mét:	$A = 1,22$	$T \text{ (K)}$
Hệ Anh:	$A = 1$	$T \text{ (°R)}$

Thông số Watson phụ thuộc vào thành phần các cấu tử.

– Với dầu thô parafin $K_w = 11,9 \dots 12,2$, vì vậy trong thực tế thường dùng giá trị 11,9 làm tiêu chuẩn cho dầu thô parafin.

– Các parafin nhẹ thường có $K_w > 12$ (ví dụ propan: 14,7; butan: 13,5).

– Các chất thơm có $K_w < 11,5$, như vậy hỗn hợp hydrocacbon có giá trị thông số Watson $K_w < 11,9$ phần lớn là chất thơm.

Hình III.12 là giản đồ mô tả quan hệ giữa các tính chất của hydrocacbon lỏng, được sử dụng khá phổ biến trong tính toán thực tế. Khi biết hai trong số các thông số có thể xác định được các thông số khác.

Ví dụ: Dầu thô 40°API có $K_w = 11,9$ sẽ có:

Khối lượng phân tử: $MW = 209$

Nhiệt độ sôi trung bình: $T_b = 255^\circ\text{C}$ (491°F)

Tỷ trọng tương đối so với nước ở 15°C (60°F): 0,825; $\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 1000 \text{ kg/m}^3$

(Tỷ trọng chất lỏng γ tính bằng (g/cm^3): $1 \text{ kg/m}^3 = 1000 \gamma$).

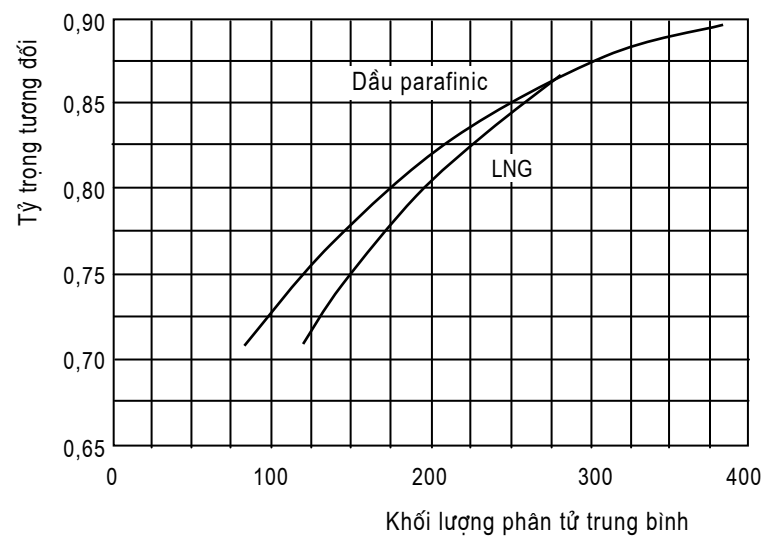
Tỷ trọng dầu thô đôi khi còn được xác định bằng °API, được định nghĩa như sau:

$$\gamma = \frac{141,5}{131,5 + ^\circ\text{API}}$$

$$^\circ\text{API} = \frac{141,5}{\gamma} - 131,5 \quad (\text{g/cm}^3)$$

Giữa tỷ trọng tương đối và khối lượng phân tử trung bình của hỗn hợp các hydrocacbon lỏng không có biểu thức tương quan chính xác. Các số liệu chi tiết để xây dựng quan hệ giữa hai đại lượng trên cũng không có sẵn. Các đường cong trên hình III.13 biểu diễn quan hệ gần đúng giữa tỷ trọng tương đối phụ thuộc vào khối lượng phân tử trung bình của hỗn hợp các hydrocacbon ở trạng thái lỏng.

Đường cong phía trên là của hỗn hợp hydrocacbon lỏng parafinic từ bốn chứa (dầu thô parafinic) có giá trị thông số Watson vào khoảng 12. Đường cong phía dưới là của khí tự nhiên hoá lỏng LNG. Các số liệu trên các đường cong này phù hợp với các giá trị tương ứng trên hình III.12.



Hình III.13. Quan hệ gần đúng giữa tỷ trọng tương đối và khối lượng phân tử của hỗn hợp các hydrocacbon ở trạng thái lỏng