

Таблица 2. Значения характеристических частот и коэффициентов полинома

Параметры	Межатомные связи				
	C-Cl C-S	N-N C-C C-N	C-O N-O	C=C C≡N	C=O N=O
Частота $\nu$ , (1/c), Гц	$1,95 \cdot 10^{13}$	$2,97 \cdot 10^{13}$	$3,09 \cdot 10^{13}$	$4,86 \cdot 10^{13}$	$5,1 \cdot 10^{13}$
Коэф-ты					
$A_{\nu i}$	-0,562	-1,090	-1,173	-0,432	-0,324
$B_{\nu i} \cdot 10^3$	6,385	6,0	6,132	1,233	0,724
$D_{\nu i} \cdot 10^6$	-1,495	-3,441	-3,555	0,935	1,308
Частота $\nu$ , (1/c), Гц	$0,99 \cdot 10^{13}$	$1,17 \cdot 10^{13}$	$0,615 \cdot 10^{13}$	$2,57 \cdot 10^{13}$	$1,17 \cdot 10^{13}$
Коэф-ты					
$A_{\nu i}$	1,023	0,730	1,461	1,140	0,730
$B_{\nu i} \cdot 10^3$	2,590	3,414	1,633	7,254	3,414
$D_{\nu i} \cdot 10^6$	-1,874	-2,577	-1,414	-4,936	-2,577
Параметры	C-H N-H	O-H			
Частота $\nu$ , (1/c), Гц	$8,76 \cdot 10^{13}$	$10,26 \cdot 10^{13}$			
Коэф-ты					
$A_{\nu i}$	0,229	0,150			
$B_{\nu i} \cdot 10^3$	-1,224	-0,820			
$D_{\nu i} \cdot 10^6$	1,658	1,055			
Частота $\nu$ , (1/c), Гц	$3,96 \cdot 10^{13}$	$3,45 \cdot 10^{13}$			
Коэф-ты					
$A_{\nu i}$	-0,928	-1,135			
$B_{\nu i} \cdot 10^3$	3,900	5,363			
$D_{\nu i} \cdot 10^6$	-1,342	-2,740			

Таблица 3. Групповые составляющие теплоемкостей по Джонсону и Хуангу.

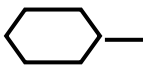
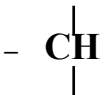

Группа	<i>a</i>	<i>b</i> ·10 <sup>2</sup>	<i>c</i> ·10 <sup>4</sup>	<i>d</i> ·10 <sup>6</sup>
-CH <sub>3</sub>	0,427	2,483	-0,0863	0,00111
-CH <sub>2</sub>	-0,186	2,243	-0,1263	0,00274
=CH <sub>2</sub>	0,662	1,770	-0,0874	0,00167
=CH-	-0,239	1,663	-0,1056	0,00260
	-7,576	11,007	-0,729	0,01801
≡CH	2,017	1,400	-0,1157	0,00352
-CH=	-5,252	3,887	-0,400	0,01521
	-1,942	2,832	-0,2281	0,00661
-CH <sub>2</sub> -(5-членное кольцо)	-2,137	2,473	-0,1195	0,00198
-CH <sub>2</sub> -(6-членное кольцо)	-2,318	2,471	-0,1294	0,00257
	-4,655	3,682	-0,3551	0,00982
>C=	-0,0535	3,682	-0,1019	0,00373

Таблица 4. Интегралы столкновений потенциала Леннарда-Джонса.

$T^*$	$\Omega^{(1.1)}$	$\Omega^{(2.2)}$	$T^*$	$\Omega^{(1.1)}$	$\Omega^{(2.2)}$	$T^*$	$\Omega^{(1.1)}$	$\Omega^{(2.2)}$
0,30	2,662	2,785	1,65	1,153	1,264	4,0	0,8836	0,9700
0,35	2,476	2,628	1,70	1,140	1,249	4,1	0,8788	0,9640
0,40	2,318	2,492	1,75	1,128	1,234	4,2	0,8740	0,8600
0,45	2,184	2,368	1,80	1,116	1,221	4,3	0,8694	0,9553
0,50	2,066	2,257	1,85	1,105	1,205	4,4	0,8652	0,9507
0,55	1,966	2,156	1,90	1,094	1,297	4,5	0,8610	0,9464
0,60	1,877	2,065	1,95	1,084	1,186	4,6	0,8568	0,9422
0,65	1,798	1,982	2,00	1,075	1,175	4,7	0,8530	0,9382
0,70	1,720	1,908	2,10	1,057	1,156	4,8	0,8492	0,9343
0,75	1,667	1,841	2,20	1,041	1,138	4,9	0,8456	0,9305
0,80	1,612	1,780	2,30	1,026	1,122	5,0	0,8422	0,9360
0,85	1,562	1,725	2,40	1,012	1,107	6,0	0,8124	0,8963
0,90	1,517	1,625	2,50	0,9996	1,083	7,0	0,7896	0,8727
0,95	1,475	1,629	2,60	0,9878	1,081	8,0	0,7712	0,8538
1,00	1,439	1,587	2,70	0,9770	1,069	9,0	0,7556	0,8379
1,05	1,406	1,549	2,80	0,9672	1,058	10,0	0,7424	0,8242
1,10	1,375	1,514	2,90	0,9576	1,048	20,0	0,6640	0,7432
1,15	1,346	1,482	3,00	0,9490	1,039	30,0	0,6232	0,7005
1,20	1,320	1,452	3,10	0,9406	1,030	40,0	0,5960	0,6718
1,25	1,296	1,424	3,20	0,9328	1,022	50,0	0,5756	0,6504
1,30	1,273	1,399	3,30	0,9256	1,014	60,0	0,5596	0,6335
1,35	1,253	1,375	3,40	0,9186	1,007	70,0	0,5464	0,6194
1,40	1,233	1,353	3,50	0,9120	0,9999	80,0	0,5352	0,6075
1,45	1,215	1,333	3,60	0,9058	0,9932	90,0	0,5256	0,5973
1,50	1,198	1,314	3,70	0,8998	0,9870	100,0	0,5130	0,5882
1,55	1,182	1,296	3,80	0,8942	0,9811	200,0	0,4644	0,5320
1,60	1,167	1,279	3,90	0,8888	0,9755	300,0	0,4360	0,5016

Таблица 5. Постоянные сил взаимодействия для потенциала Леннарда-Джонса

Газ	Формула	$\sigma$ , Å	$\epsilon/k$ , К
Аргон	Ar	3,54	93
Гелий	He	2,55	10
Криптон	Kr	3,66	179
Неон	Ne	2,82	33
Ксенон	Xe	4,05	231
Ацетилен	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	4,03	232
Этилен	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	4,16	225
Этан	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	4,44	216
Метилацетилен	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	4,76	252
Пропилен	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	4,68	299
Пропан	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	5,12	237
н-Бутан	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	4,69	531
Изобутан	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	5,28	330
н-Пентан	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	5,78	341
Бензол	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	5,35	412
Циклогексан	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	6,18	297
н-Гексан	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	5,95	399
Этанол	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	4,53	363
Ацетон	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	4,60	560
Метилацетат	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	4,94	470
Диэтиловый эфир	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	5,68	314
н-Бутанол	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH	5,49	363
Метанол	CH <sub>3</sub> OH	3,69	417
Пропанол-1	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	4,71	495
Пропанол-2	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	4,64	518

Таблица 6. Свойства некоторых жидкостей.

Жидкость	Температура кипения, $T_{\text{кип}}$ , К	Плотность, $\rho$ , г/см <sup>3</sup>	Теплоемкость $c_p$ , кал/(г·К)
Анилин	457	1,02	0,478
Ацетон	329	0,79	0,510
Бензол	353	0,88	0,420
Бромбензол	429	1,50	0,231
Бромистый этил	311	1,45	0,280
н-Бутанол	390	0,81	0,520
Вода	373	1,00	1,000
Гексан	342	0,66	0,525
Гептан	371	0,69	0,480
Глицерин	563	1,27	0,540
Метиловый спирт (метанол)	338	0,79	0,570
Нитробензол	464	1,30	0,340
Октан	399	0,72	0,520
Пиридин	388	0,98	0,431
н-Пропанол	370	0,80	0,526
Сероуглерод	319	1,29	0,240
Трихлорметан (хлороформ)	334	1,48	0,232
Толуол	384	0,87	0,386
Уксусная кислота	391	1,05	0,450
Хлорбензол	405	1,11	0,310
Циклогексан	356	0,81	0,440
Четыреххлористый углерод	350	1,59	0,196
Этанол	351	0,79	0,540
Этилацетат	350	0,90	0,459

Таблица 7. Теплопроводность некоторых жидкостей.

Жидкость	Температура кипения, $T_{\text{кип}}$ , К	Теплопроводность, $\lambda$ , Вт/(м·К)
Вода	313	0,628
Метиловый спирт	313	0,205
Изопропиловый спирт	313	0,137
Триэтиленгликоль	313	0,197
н-Бутанол	313	0,150
Фермамид	313	0,352
Ацетон	313	0,154
Бензол	293	0,146
Ацетон	293	0,171
Толуол	293	0,136
Кумол	293	0,125
Бромбензол	293	0,112
Хлорбензол	293	0,129
Этилбензол	293	0,132