

TITLE PAGE

37. Aus: Beziehungen zwischen den physikalischen Eigenschaften der Kohlenwasserstoffe.  
Relations between the physical properties of hydrocarbons.

Frame Nos. 344 - 350

37 Aus: Beziehungen zwischen den physikalischen  
Eigenschaften der Kohlenwasserstoffe.

Francis, Ind. Eng. Chem., ind. Ed 33, 554

Die Oktanzahl eines Kohlenwasserstoffs hängt in folgender Weise von seiner Dichte und seinem Siedepunkt ab:

$$\text{Die Funktion } 1000 d_4^{20} - 2 t$$

(d = Dichte; t = Siedetemperatur)

gibt gegen die Oktanzahl aufgetragen für isomere Paraffine gerade Linien. Oberhalb OZ 100 ist jedoch keine gute Übereinstimmung mehr zu erzielen. Eine Methode, die Oktanzahl über 100 zu extrapolieren wäre, den  $\beta$ -Gehalt an n-Heptan in einem Kohlenwasserstoff, z.B. Triptan, zu bestimmen, den der Kohlenwasserstoff enthalten kann, ohne daß die Oktanzahl unter 100 sinkt. Wenn so z.B. 10% n-Heptan bestimmt sind, kann eine Oktanzahl von 111,1 angenommen werden. Da die geraden Linien der oben erwähnten Beziehung einander parallel sind und die höheren Glieder weiter voneinander entfernt sind, kann man der erwähnten Funktion einen Parameter quadrieren, der von der Anzahl der C-Atome in dem Kohlenwasserstoff abhängig ist. Dieser Parameter beträgt für Butane 142, für Pentane 157, für Hexane 178 und für höhere Paraffine  $22n$  (n = Anzahl der C-Atome). Die Funktion hat dann folgenden Wert:  $1000 d_4^{20} - 2 t + p$ .

(d = Dichte, t = Siedetemperatur, p = Parameter).

Trägt man die so erhaltenen Werte gegen die Oktanzahl auf, so erhält man für Kohlenwasserstoffe mit steigender C-Anzahl eine nahezu gleichmäßig ansteigende Linie. Die Übereinstimmung zwischen den nach dieser Kurve resultierten Oktanzahlen und den gemessenen Werten ist so gut, daß der Verfasser eine ganze Reihe weiterer Oktanzahlen bestimmt hat, die in sei offener Tabelle aufgeführt sind. Entsprechend lassen sich auf Grund dieser Beziehung durch Einsetzen gemessener Oktanzahlen Fehler in Dichte- oder Siedepunktbestimmungen aufdecken.

Auch die Oktanzahl von Gemischen innerhalb naher Siedegrenzen läßt sich nach dieser Methode errechnen, indem man den Siedepunkt der Hauptmenge einsetzt, auch wenn das Mischverhältnis nicht einheitlich ist. Der Parameter wird nach dem Hauptmolekulargewicht analog obiger Angaben gefunden.

Qualitativ gesprochen ist die Oktanzahl um so höher, je größer die Dichte und je niedriger der Siedepunkt des Kohlenwasserstoffes ist.

Bei Verwendung des Refraktionsindex<sup>1</sup> an Stelle der Dichte wurden ähnliche Beziehungen gefunden, wenn man die Differenz  $1000 n - t$  ( $n$  = Refraktionsindex,  $t$  = Siedetemperatur), gegen die Oktanzahl aufträgt. Diese Beziehung gibt jedoch keine so guten Übereinstimmungen.

Schließlich läßt sich der Anilinpunkt in Beziehung zur Oktanzahl bringen:

Trägt man die Summe von Siedepunkt und Anilinpunkt gegen die Oktanzahl auf, so erhält man eine fast gerade Linie für je eine Isomerengruppe. Diese Methode gibt etwas bessere Resultate, als die oben beschriebene Dichte-Methode. Jedoch macht die Steilheit der Kurve und die wenig genaue Übereinstimmung der Anilinpunkte diese Methode zur Oktanzahlberechnung wenig geeignet und befriedigend. Durch Subtraktion von  $25 n$  ( $n$  = Anzahl der C-Atome) kann man analog oben beschriebener Dichte-Methode eine Gerade zur Berechnung unbekannter Oktanzahlen erhalten.

Tabelle 1

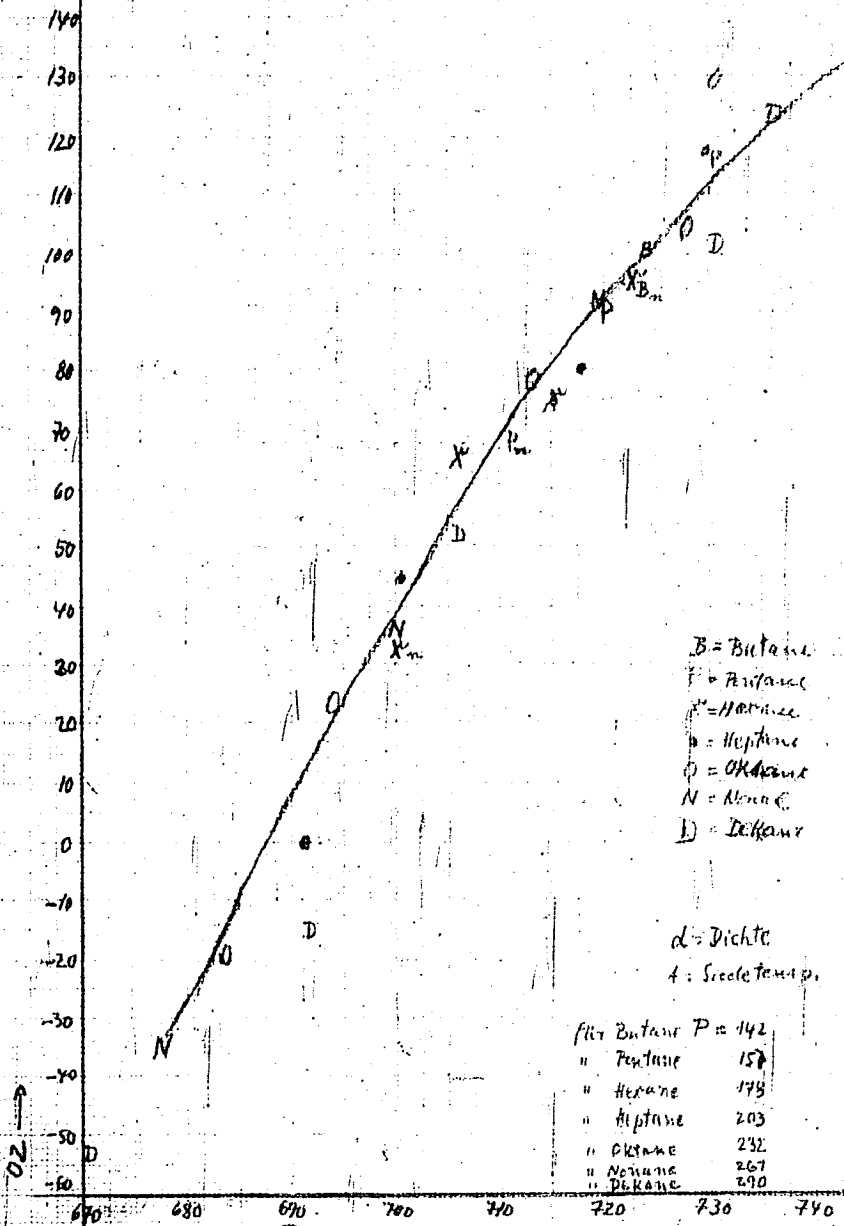
Eigenschaften von Paraffin-Kohlenwasserstoffen<sup>1)</sup>

Paraffin-Kohlenwasserstoffe	Sdp. °C.	Schmp. °C.	$d_4^{20}$	$n_D^{20}$	Anilin-punkt	Öl-lanzol-Verfärbung <sup>2)</sup>	Zusatz
Methan	-161,53	-182,6	0,424 (-162°)	-	-	125	-
Ethan	-88,5	-183,2	0,471	-	-	125	-
Propan	-42,17	-187,1	0,5042	1,3997	-	125	-
n-Butan	-0,50	-138,9	0,5789	1,3524	84,1	94	(99)
2-Methylpropan (Isobutan)	-11,72	-159,42	0,5593	1,3243	109	100	(99)
n-Pentan	36,08	-129,7	0,6262	1,3577	71,5	63	(64)
2-Methylpentan (Isopentan)	27,95	-160,0	0,6197	1,3539	78,4	86	(90)
2,2-Dimethylpropan (Neopentan)	0,45	-16,62	0,593	1,339	(102)	115	(112)
n-Hexan	68,74	-95,3	0,6594	1,3750	69,1	32	(72)
2-Methylhexan	60,27	-151,7	0,6532	1,3715	74,3	65	(64)
3-Methylhexan	61,22	-112	0,6548	1,3755	82,3	75	(77)
2,2-Dimethylhexan (Hexadecan)	42,73	-36,2	0,6490	1,3689	91,0	94,6	(105)
2,5-Dimethylhexan (4-Isoprenyl)	58,00	-125,0	0,6616	1,3750	72,0	95	(96)
n-Heptan	98,424	-90,40	0,6952	1,3974	70,0	0	(70)
2-Methylheptan	90,15	-110,2	0,6787	1,3856	73,2	45	(70)
3-Methylheptan	91,2	-118,5	0,6869	1,3882	70,0	65	(70)
2,2-Dimethylheptan	73,47	-118,09	0,6902	1,3954	70,0	80	(75)
2,5-Dimethylheptan	73,51	-124,0	0,6739	1,3924	70,0	90	(75)
2,6-Dimethylheptan	83,8	-118,99	0,6950	1,3920	68,1	82	(85)
2,3-Dimethylheptan	90,76	-115,1	0,6730	1,3820	72,0	80	(77)
2,4-Dimethylheptan	92,0	-115,0	0,6939	1,3910	69,7	98	(97)
2,4,5-Trimethylheptan (Heptan)	74,4	-23,06	0,6960	1,3891	72,0	111	(112)
n-Octan	125,63	-56,84	0,7022	1,3976	72,0	-19	(119)
2-Methyloctan	117,63	-109,50	0,6976	1,3954	74,0	33	(114)
3-Methyloctan	118,05	-120,80	0,7057	1,3925	73,2	48	(119)
2,2-Dimethyloctan	117,5	-121,08	0,7042	1,3900	71,0	30	(114)
2,5-Dimethyloctan	114,7	-116,6	0,7125	1,3921	63,7	52,5	(104)
2,6-Dimethyloctan	105,2	-116,6	0,6947	1,3930	(70)	-	(75)
2,7-Dimethyloctan	115,7	-116,6	0,7125	1,4017	70,0	70,5	(70)
2,8-Dimethyloctan	102,5	-116,6	0,7002	1,3952	76,0	69,5	(75)
2,9-Dimethyloctan	102,25	-90,1	0,6940	1,3923	72,0	50,5	(75)
2,9,9-Trimethyloctan	112,0	-	0,7107	1,4002	(72)	-	(75)

1-Methylhexan	106.5	101	0.7139	1.4041	81.7	89.1	(78)
2-Methylhexan	109.5	105	0.7147	1.4046	(92)		
3-Methylhexan	109.5	105	0.7147	1.4046	70.6	78.0	(78)
2,4-Dimethylhexan	109.5	105	0.7082	1.4052	75.0	83.5	(73)
2,5-Dimethylhexan	109.25	104.1	0.6940	1.3929	78.0	85.7	(55)
3,3-Dimethylhexan	112.0		0.7167	1.4068	(72)		(84)
1,4-Dimethylhexan	117.85	112.9	0.7194	1.4044	68.0	81.7	(77)
2-Methyl-3-ethylpentan	117.7	114.5	0.7131	1.4046	57.2	88.1	(87)
3-Methyl-3-ethylpentan	118.1	113.9	0.7274	1.4079	65.8	90.5	(93)
2,2,3-Trimethylpentan	120.84	117.32	0.7162	1.4029	70.9	105	(107)
2,2,4-Trimethylpentan (Isooctan)	121.23	117.37	0.7419	1.4016	80.1	100	(100)
2,3,5-Trimethylpentan	115.1	112.1	0.7252	1.4072	67.0	99.1	(103)
2,2,4-Trimethylpentan	117.5	112.12	0.7132	1.4044	69.7	97	(97)
2,2,3-Tetraethylbutan			0.7219				
(Hexamethylcyclopentane)						136	(133)
1-Heptan	150.74	145.7	0.7179	1.4056	71.6	84	(86)
2-Heptan	147.2	143.0	0.7124	1.4030	77.5	-34	(94)
3-Heptan	147.2	143.0	0.7210	1.4065	75.8		(124)
4-Heptan	147.2	143.0	0.7192	1.4061	71.6		(120)
2,2-Dimethylhexan	153.7	148.9	0.7360	1.4090	(73)		(132)
2,3-Dimethylhexan	153.8	148.9	0.7407	1.4116	(78)		(138)
2,4-Dimethylhexan	(140)		(0.720)	(1.400)	(73)		(131)
2,5-Dimethylhexan	(138)		0.7105	(1.4033)	(73)		(131)
3-Methylhexan	149.7	145.7	0.7130	1.4033	71.6		(128)
4-Methylhexan	149.7	145.7	0.7130	1.4033	71.6		(128)
1-Octan	180.0	175.0	0.7200	1.4080	74.0		(131)
2-Octan	175.0	170.0	0.7150	1.4030	74.0		(131)
3-Octan	175.0	170.0	0.7200	1.4080	74.0		(131)
4-Octan	175.0	170.0	0.7200	1.4080	74.0		(131)
2,2-Dimethylheptan	185.0	180.0	0.7300	1.4130	74.0		(131)
2,3-Dimethylheptan	185.0	180.0	0.7300	1.4130	74.0		(131)
2,4-Dimethylheptan	185.0	180.0	0.7300	1.4130	74.0		(131)
2,5-Dimethylheptan	185.0	180.0	0.7300	1.4130	74.0		(131)
3,3-Dimethylheptan	185.0	180.0	0.7300	1.4130	74.0		(131)
3,4-Dimethylheptan	185.0	180.0	0.7300	1.4130	74.0		(131)
3,5-Dimethylheptan	185.0	180.0	0.7300	1.4130	74.0		(131)
4,4-Dimethylheptan	185.0	180.0	0.7300	1.4130	74.0		(131)
2,2,3-Trimethylhexan	190.0	185.0	0.7400	1.4230	74.0		(131)
2,2,4-Trimethylhexan	190.0	185.0	0.7400	1.4230	74.0		(131)
2,3,4-Trimethylhexan	190.0	185.0	0.7400	1.4230	74.0		(131)
2,3,5-Trimethylhexan	190.0	185.0	0.7400	1.4230	74.0		(131)
2,2,3,4-Tetramethylpentan	195.0	190.0	0.7500	1.4330	74.0		(131)
2,2,3,5-Tetramethylpentan	195.0	190.0	0.7500	1.4330	74.0		(131)
2,2,4,4-Tetramethylpentan	195.0	190.0	0.7500	1.4330	74.0		(131)
2,2,3,4,5-Pentamethylbutan	200.0	195.0	0.7600	1.4430	74.0		(131)
2,2,3,4,5-Pentamethylbutan	200.0	195.0	0.7600	1.4430	74.0		(131)
2,2,3,4,5-Pentamethylbutan	200.0	195.0	0.7600	1.4430	74.0		(131)
2,2,3,4,5-Pentamethylbutan	200.0	195.0	0.7600	1.4430	74.0		(131)

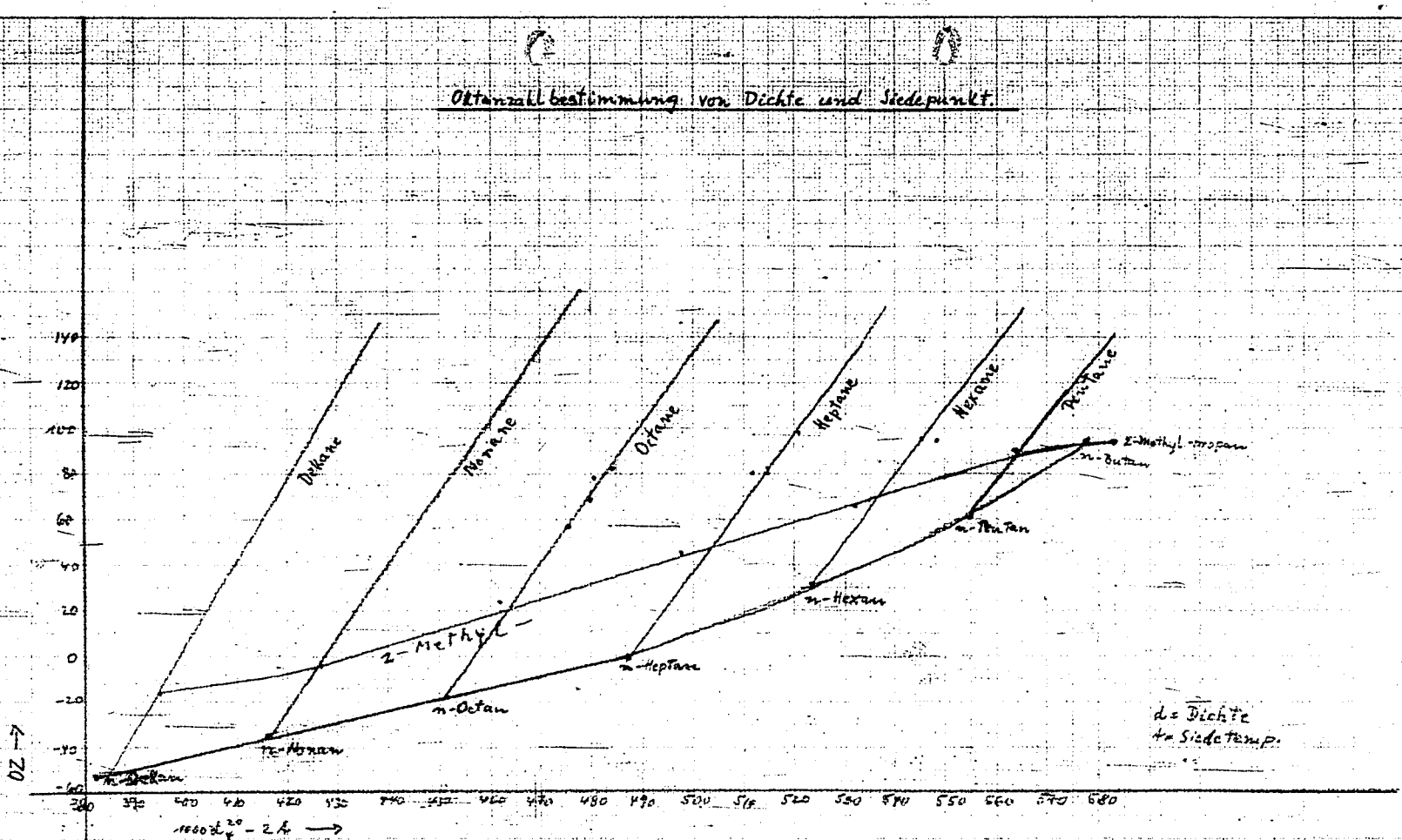
	C.A. No.	S. No.	20 4	20 4	20 4	20 4	20 4
	(166.7) (172.7) (178.7) (184.7)		(0.7325) (0.7300) (0.7275) (0.7250)	(1.4154) (1.4140) (1.4126) (1.4112)	(75) (75) (75) (75)		(81) (81) (81) (81)
	(180.7) (186.7) (192.7) (198.7)		(0.7225) (0.7200) (0.7175) (0.7150)	(1.4108) (1.4094) (1.4080) (1.4066)	(75) (75) (75) (75)		(81) (81) (81) (81)
	(200.7) (206.7) (212.7) (218.7)		(0.7125) (0.7100) (0.7075) (0.7050)	(1.4060) (1.4046) (1.4032) (1.4018)	(75) (75) (75) (75)		(81) (81) (81) (81)

Berechnung von  $\rho_2$  aus Dichte und Siedepunkt.



188851

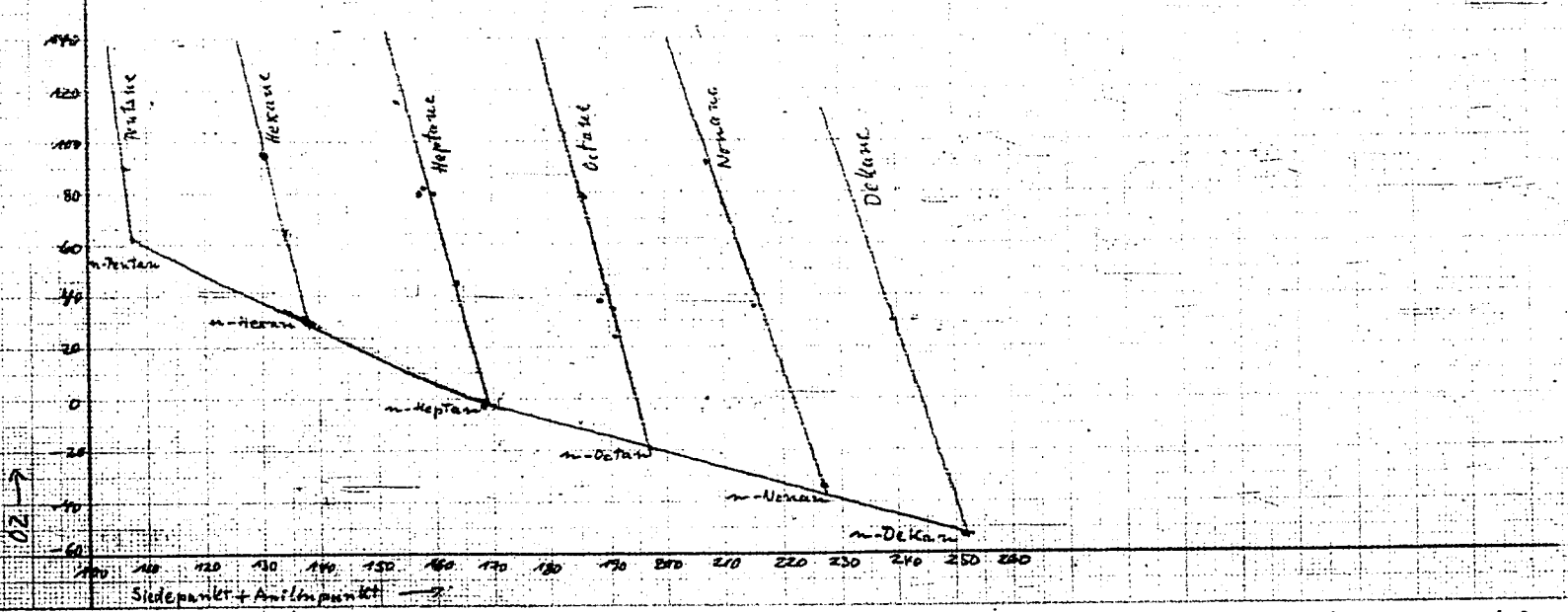
Oktanzahlbestimmung von Dichte und Siedepunkt.



678  
11/18/6



Kohlenzahlbestimmung mit Hilfe von Anilinzpunkt und Siedepunkt.



1908