



YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Mikrobilgisayarda sent.  
yak. term. özell.

Yüksek Lisans Tezi

Abbas Sel

77

YILDIZ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

64

**MİKROBİLGİSAYARDA SENTETİK YAKITLARIN  
TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİ  
İÇİN BİR PAKET PROGRAMIN GELİŞTİRİLMESİ**

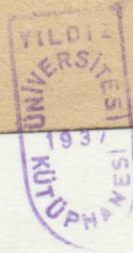
YÜKSEK LİSANS TEZİ

KİMYA MÜH. ABBAS SEL

İSTANBUL — 1989

YILDIZ ÜNİVERSİTESİ  
GENEL KİTAPLIĞI

Kot : ..... R 361  
Alındığı Yer : ~~Fen Bil. Enst.~~ 77  
Tarih : 12.12.1990  
Fatura : .....  
Fiatı : 20.000 TL  
Ayniyat No : 1/28  
Kayıt No : 47400  
UDC : 54 ..... 378.242  
Ek : .....





YILDIZ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MİKROBİLGİSAYARDA SENTETİK YAKITLARIN  
TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİ İÇİN BİR  
PAKET PROGRAMIN GELİŞTİRİLMESİ

77

YÜKSEK LİSANS TEZİ

KİMYA MÜH. ABBAS SEL

İSTANBUL - 1989

## TEŞEKKÜR

Tez çalışması olarak bu konuyu bana veren ve çalışmalarımı yönlendiren tez yöneticim Sayın Prof.Dr.Salih DİNÇER'e teşekkür ederim. Çalışmalarım sırasında samimi yardımlarını esirgemeyen Kimya Müh. Ali PAKALIN'a teşekkür ederim. Ayrıca yetişmemi ve yönlenmemi sağlayan öğretim üye ve elemanlarına teşekkürü bir borç bilirim. Çalışmalarım sırasında yardımlarını esirgemeyen araştırma görevlisi arkadaşlarıma teşekkür ederim.

Tüm öğrenim yaşamımda olduğu gibi tez çalışmalarım sırasında da her tür yardım ve desteği sağlayan aileme teşekkür ederim.

## ÖZET

Bu çalışmada, mikrobilgisayarda sentetik yakıtların termofiziksel özelliklerini hesaplayan ve görüşmeli olarak PASCAL dilinde yazılan bir paket program (SYNTHRMFZ) geliştirilmiştir. Program üç ana başlık altında geliştirilmiştir : fraksiyonların termofiziksel özelliklerinin kestirimi, saf madde veri bankası (SYNBASE) ile saf madde termofiziksel özelliklerinin kestirimi ve bileşimi belirli karışımların termofiziksel özelliklerinin kestirimi.

Sentetik yakıtların, özellikle fraksiyonların, termofiziksel özelliklerini kestiren korelasyonların yaklaşık tamamı incelenmiştir. Korelasyonların seçiminde şu hususlar gözönünde tutulmuştur : korelasyonun geniş bir veri tabanına dayanması, kolayca tanımlanabilen az sayıda değişkene sahip olması, güvenilir ve kolay olması.

Geliştirilen program, fraksiyonun sadece normal kaynama noktasının bilinmesi ile bile fraksiyonların özgül ağırlık, molekül ağırlığı, kritik sıcaklık, kritik basınç, kritik hacim, merkezsizlik faktörü, Watson karakterizasyon faktörü, molar hacim, ideal-gaz ısı sığası, ısı sığası, ısı iletkenlik, buharlaşma ısısı, yüzey gerilimi, yoğunluk, kritik sıkıştırma faktörü, buhar basıncı, dipol momentleri, viskozite, kırılma indisi, çözünürlük parametresi gibi termofiziksel özelliklerini hesaplayabilmektedir. Ayrıca aromatiklik, difüzyon katsayısı, yanma ısısı ve oluşum ısısı da diğer birkaç veri ile hesaplanabilmektedir.

Geliştirilen programda, saf sentetik yakıtların molekül ağırlığı,

kritik yoğunluk, kritik hacim, kritik basınç, kritik sıcaklık, yoğunluk, kaynama noktası, donma noktası, merkezsizlik faktörü, kırılma indisi, yüzey gerilimi, dielektrik sabiti, dipol momentini, kritik sıkıştırma faktörü, ideal-gaz ısı sığası sabitleri, viskozite sabitleri, standart oluşum entalpisi, standart oluşum Gibbs enerjisi, buharlaşma ısısı ve çözünürlük parametresi gibi termofiziksel özelliklerini içeren bir veri bankası oluşturulmuştur.

Program, saf maddelerin bilinen özellikleri olan molekül yapıyı ve molekül ağırlığını kullanarak saf sentetik yakıtların kritik basınç, kritik hacim, normal kaynama noktası, kritik sıcaklık, kritik sıkıştırma faktörü, merkezsizlik faktörü, buharlaşma entropisi, molar hacim, buhar basıncı, buharlaşma ısısı, yoğunluk, yüzey gerilimi, ısı sığası, ideal-gaz ısı sığası, viskozite, ısı iletkenlik, yüzey gerilimi, entropi, çözünürlük parametresi, entalpi farkı, entropi farkı gibi termofiziksel özelliklerini hesaplayabilmektedir.

Ayrıca, geliştirilen program saf madde verilerinin ve karışımdaki bileşenlerin mol fraksiyonlarının bilinmesi ile karışımların molar hacim, kritik sıcaklık, kritik hacim, kritik basınç, kritik sıkıştırma faktörü, merkezsizlik faktörü, viskozite, ısı iletkenlik, yüzey gerilimi, ısı sığası, difüzyon katsayısı gibi termofiziksel özelliklerini hesaplayabilmektedir.

## ABSTRACT

In this work, a package computer program (SYNTHRMFZ) written in Pascal language, was developed to predict thermophysical properties of synfuels on microcomputer. Program was developed under three basic titles : the prediction of the thermophysical properties of fractions, the prediction of the thermophysical properties and the data bank (SYNBASE) of pure compounds, and the prediction of the thermophysical properties of defined mixtures.

Nearly all the correlations that predict thermophysical properties of synfuels, especially their fractions, were investigated. In selection of the correlations, attention was focused on the following properties : derivation from a wide variety of data, availability of few and easily defined variables, dependability and simplicity.

Using the program developed, thermophysical properties of fractions such as specific gravity, molecular weight, critical temperature, critical pressure, critical volume, acentric factor, Watson characterization factor, molar volume, ideal-gas heat capacity, heat capacity, thermal conductivity, heat of vaporization, surface tension, density, critical compressibility factor, vapor pressure, dipole moment, viscosity, refractive index, solubility parameter can be calculated, if boiling point of fraction alone is known.

A data bank consisting of thermophysical properties of pure

synfuels such as molecular weight, critical density, critical volume, critical pressure, critical temperature, density, boiling point, freezing point, acentric factor, refractive index, surface tension, dielectric constant, dipole moment, critical compressibility factor, ideal-gas heat capacity constants, viscosity constants, standart enthalpy of formation, standart Gibbs energy of formation, heat of vaporization, and solubility parameter was included in the developed program.

In the program, the known properties of pure compounds such as the molecular structure and molecular weight are used in predicting the following thermophysical properties of pure synfuels : critical pressure, critical volume, normal boiling point, critical temperature, critical compressibility factor, acentric factor, entropy of vaporization, molar volume, vapor pressure, heat of vaporization, density, surface tension, heat capacity, ideal-gas heat capacity, viscosity, thermal conductivity.

In addition, given the data for pure compounds and mole fractions in the mixture, the thermophysical properties of mixtures such as molar volume, critical temperature, critical volume, critical pressure, critical compressibility factor, acentric factor, viscosity, thermal conductivity, surface tension, heat capacity, diffusion coefficient can be calculated.

	SAYFA
1.1. KÖMÜR SIVILARI	21
1.2. DOĞRUDAN KÖMÜR SIVILARI	21
İÇİNDEKİLER	23
1.4. FRAKSİYON SIVILARI	23
1.5. MODEL SIVILARI	23
	SAYFA
TEŞEKKÜR	I
ÖZET	II
ABSTRACT	IV
İÇİNDEKİLER	VI
ÇİZELGE LİSTESİ	X
KULLANILAN SİMGELER	XI
1. GİRİŞ	1
1.1. KÖMÜR SIVILARININ HAM PETROLLE KARŞILAŞTIRILMASI	3
1.2. DOĞRUDAN KÖMÜR SIVILARININ KARŞILAŞTIRILMASI	6
1.3. KÖMÜR SIVILARI İÇİN MODEL BİLEŞİKLER	7
2. KÖMÜR SIVILARININ VE MODEL BİLEŞİKLERİN KARAKTERİZASYONU	10
2.1. FRAKSİYONLARIN KARAKTERİZASYONU	10
2.1.1. Damıtma Eğrisi : Kaynama Noktası Dağılımı	12
2.1.2. Üzgül Ağırlık	13
2.1.3. Molekül Ağırlığının Kestirimi	14
2.2. MODEL BİLEŞİKLER	16
2.2.1. Kritik Özellikler ve Merkezsizlik Faktörü	17
3. FRAKSİYONLARIN TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİNDE	
KULLANILAN KORELASYONLAR	19

	SAYFA
3.1. BUHAR BASINCI	21
3.2. İDEAL-GAZ ISI SIĞASI	21
3.3. ISI SIĞASI	23
3.4. BUHARLAŞMA ISISI	23
3.5. YANMA ISISI	24
3.6. OLUŞUM ISISI	24
3.7. YOĞUNLUK	25
3.8. YÜZEY GERİLİMİ	26
3.9. VİSKOZİTE	27
3.10. ISIL İLETKENLİK	29
3.11. DİFÜZYON KATSAYISI	30
3.12. MOLAR HACİM	32
3.13. DİPOL MOMENTİ	32
3.14. KIRILMA İNDİSİ VE AROMATİKLİK	33
3.15. ÇÖZÜNÜRLÜK PARAMETRESİ	35
<b>4. SAF SENTETİK YAKITLARIN TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN</b>	
<b>KESTİRİMİNDE KULLANILAN KORELASYONLAR</b>	36
4.1. KRİTİK ÖZELLİKLER	36
4.2. MERKEZSİZLİK FAKTÖRÜ	38
4.3. KAYNAMA NOKTASI	39
4.4. MOLAR HACİM	40
4.5. YOĞUNLUK	40
4.6. ISI SIĞASI	40
4.7. BUHAR BASINCI	42
4.8. BUHARLAŞMA ISISI	43

	SAYFA
4.9. BUHARLAŞMA ENTROPİSİ	43
4.10. İDEAL-GAZ ISI SİĞASI	44
4.11. VİSKOZİTE	44
4.11.1. Düşük Sıcaklıklarda Viskozite Hesaplanması	45
4.11.2. Yüksek Sıcaklıklarda Viskozite Hesaplanması	45
4.12. ISIL İLETKENLİK	46
4.13. YÜZEY GERİLİMİ	47
4.13.1. Hidrojen Bağlı Sıvıların Yüzey Gerilimi	47
4.13.2. Hidrojen Bağlı Olmayan Sıvıların Yüzey Gerilimi	47
4.14. ENTROPİ	48
4.15. ÇÖZÜNÜRLÜK PARAMETRESİ	49
4.16. ENTALPİ VE ENTROPİ FARKI	50
<b>5. BİLEŞİMİ BELİRLİ SENTETİK YAKIT KARIŞIMLARININ TERMO-</b>	
<b>FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİNDE KULLANILAN KORELASYONLAR</b>	<b>53</b>
5.1. MOLAR HACİM	55
5.2. KRİTİK SICAKLIK	56
5.3. KRİTİK HACİM VE YOĞUNLUK	56
5.4. KRİTİK BASINÇ	56
5.5. KRİTİK SIKIŞTIRMA FAKTÖRÜ	56
5.6. MERKEZSİZLİK FAKTÖRÜ	56
5.7. VİSKOZİTE	56
5.8. ISIL İLETKENLİK	57
5.9. YÜZEY GERİLİMİ	58
5.10. ISI SİĞASI	59
5.11. DİFÜZYON KATSAYISI	59

6. GELİŞTİRİLEN BİLGİSAYAR PAKET PROGRAMININ İÇERİĞİ	61
7. SONUÇ ve ÖNERİLER	71
KAYNAKLAR	72
EK-1 GELİŞTİRİLEN BİLGİSAYAR PAKET PROGRAMI (SYNTHRMFZ)	11
EK-2 VERİ BANKASINDA (SYNBASE) YERALAN MADDELERİN LİSTESİ	
ŞEKİL 3.1. Frekansların Bilgisayar Programında Kullanılan Yapılan Temafiziksel Özellikleri ve İlgili Değişkenleri.	20
ŞEKİL 3.2. Enerji Yayımlarının Bilgisayar Programında Kullanılan Yapılan Temafiziksel Özellikleri ve İlgili Değişkenleri	37
ŞEKİL 3.3. Enerji Yayımlarının Bilgisayar Programında Kullanılan Yapılan Temafiziksel Özellikleri ve İlgili Değişkenleri	54
ŞEKİL 3.4. Enerji Yayımlarının Bilgisayar Programında Kullanılan Yapılan Temafiziksel Değişkenleri	65

## ÇİZELGE LİSTESİ

	SAYFA
ÇİZELGE 2.1. Özellik Kestirimi Korelasyonlarında Kullanılan Ortalama Kaynama Noktaları	11
ÇİZELGE 3.1. Fraksiyonların Bilgisayar Programında Kestirimi Yapılan Termofiziksel Özellikleri ve İlgili Denklemleri	20
ÇİZELGE 4.1. Saf Sentetik Yakıtların Bilgisayar Programında Kestirimi Yapılan Termofiziksel Özellikleri ve İlgili Denklemleri	37
ÇİZELGE 5.1. Bileşimi Belirli Sentetik Yakıt Karışımlarının Bilgisayar Programında Kestirimi Yapılan Termofiziksel Özellikleri ve İlgili Denklemleri	54
ÇİZELGE 6.1. Veri Bankasında (SYNBASE) Yer Alan Termofiziksel Özellikler	65

## KULLANILAN SİMGELELER

- $\rho_{API}$  : API gravitesi = 141,5/SG-131,5
- $C_p$  : Sabit basınçta ısı sığası (Denklem 3.2-3.3, J/gK;  
Denklem 4.12-4.20, J/gmolK)
- $D_{AB}$  : A'nın B içindeki difüzyon katsayısı (cm<sup>2</sup>/s)
- $f_a$  : Aromatiklik
- $H$  : Entalpi (Denklem 3.6-3.7-3.25, kJ/g; Denklem 3.5-4.18, kJ/gmol)
- $H-H^*$  : Akışkanın entalpi farkı (J/gmol)
- $H^*$  : İdeal-gaz halindeki akışkanın entalpisi,  $H^*=H^*_T-H^*_0$
- $k_{ij}$  : İkili etkileşim parametresi
- $k_T$  : Isıl iletkenlik (J/s cm K)
- $K_w$  : Watson karakterizasyon faktörü =  $1,2164 T_b^{1/3}(K)/SG$
- LMV : Sıvı molar hacmi (cm<sup>3</sup>/gmol)
- M : Molekül ağırlığı
- n : Kırılma indisi
- P : Basınç (atm)
- [P] : Parakor
- R : Gaz sabiti
- $\bar{R}$  : Dönme çapı (Å)
- SG : Özgül ağırlık (15,5/15,5 °C'da; Denklem 2.8-2.11 için 20/20 °C'da)
- S : Entropi (Denklem 4.19, J/gmolK; Denklem 4.33, J/mol-karbon K)
- $S-S^*$  : Akışkanın entropi farkı (J/gmol.K)
- $S^*$  : İdeal-gaz halindeki akışkanın entropisi,  $S^*=S^*_T-S^*_0$
- t : Sıcaklık (°C)
- T : Mutlak sıcaklık (K)
- V : Toplam molar hacim (cm<sup>3</sup>/gmol)

- $w_i$  : i bileşeninin ağırlık fraksiyonu  
 $x_i$  : i bileşeninin sıvı mol fraksiyonu  
 $Z$  : Sıkıştırma faktörü

#### GREK SİMGELERİ

- $\Delta X$  : Herhangi bir X özelliğinin değişimi  
 $\mu$  : Dipol momenti (D= Debye)  
 $\nu$  : Kinematik viskozite ( $\text{cm}^2/\text{s}$ )  
 $\rho$  : Yoğunluk ( $\text{g}/\text{cm}^3$ , Denklem 4.36-4.37  $\text{gmol}/\text{cm}^3$ )  
 $\sigma$  : Yüzey gerilimi ( $\text{dyn}/\text{cm}$ )  
 $\Phi_i$  : i bileşeninin hacim fraksiyonu  
 $w$  : Merkezsizlik faktörü  
 $\delta$  : Çözünürlük parametresi ( $\text{J}/\text{cm}^3$ )<sup>1/2</sup>  
 $\eta$  : Viskozite ( $\text{g}/\text{cm s}$ )

#### ALT SİMGELER

- $b$  : 1 atm'deki kaynama noktası özelliği; fraksiyonlar için ortalama bir kaynama noktası özelliğini gösterir.  
 $c$  : Kritik özellik  
 $C$  : Yanma  
 $f$  : Elementlerden oluşum özelliği ( $\Delta H_f$ )  
 $i, j$  : Saf bir kimyasal madde veya bir karışımın bileşeni  
 $ij$  : Karışım içinde i-j bileşenlerinin etkileşmesi  
 $m$  : Karışım özelliği  
 $r$  : İndirgenmiş özellik (= özellik/kritik özellik)

V : Buharlařma

#### ÜST SİMGELER

L : Sıvı fazı

0 : Standart hal özelliđi

\* : İdeal-gaz özelliđi

R : Referans haldeki deđer

## GİRİŞ

Petrol sisteminin hidrojenle başlıyıp normal kaynama noktası  $300^{\circ}\text{C}$ 'e kadar giden bir dizi bileşimli içeren proses skemaları ile ilgili olarak, bir dizi araştırma çalışmaları için, genellikle tarım ürünleri, bitkiler ve hayvanların karışımları veya fraksiyonları kullanılır.

"tarım ürünleri" bileşimleri indirilebilir kimyasal maddelerdir : hidrojen, metan, etan, propan gibi. Hidrojenün karbon sayısının artması ile beraber indirilebilir kimyasal maddelerin sayısı da fazla artmaktadır. Metan karışımını oluşturduğunda bile, izomerlerin sayıları  $\text{C}_2$  için 2'e,  $\text{C}_3$  için 3'e,  $\text{C}_4$  için 4'e,  $\text{C}_5$  için 12'ye ve böylece giderek artmaktadır. Aynı bu izomerleri aynı bir dizi tepkime olarak, bazı  $\text{C}_{10}$  karışımları veya diğer hidrokarbon karışımları için bir tepkime yapılabilecek her maddede, her bir çok küçük olur.

## GİRİŞ

Bu tür "fraksiyonlar" olarak da bilinen "tarım ürünleri" karışımları ifadenin, petrol karışımının çok önemli biridir. Tarım ürünleri bileşimleri ifadenin genellikle  $\text{C}_{10}$ 'e kadar kullanılır, fakat aynı tür bir bileşimler "petrol fraksiyonları" olarak geçerler. Pratikte, aynı petrol karışımını belirli bir dizi bir karışım veya fraksiyona bölerler. Her fraksiyonun bir bir kimyasal yapıya sahip olduğu gibi, tarım ürünleri  $\text{C}_{10}$ 'e kadar da, böylece aynı bir dizi karışım olarak da ifade edilebilir. Bu tür karışımın (fraksiyonun) belirli bir kimyasal yapıya sahip olduğu gibi, aynı tür bir dizi olarak da ifade edilebilir.

## GİRİŞ

Petrol arıtımında, hidrojenden başlayıp normal kaynama noktası 500 °C'dan çok yüksek olan bir dizi bileşiği içeren proses akımları ile ilgileniriz. Bir akımı karakterize etmek için, genellikle tanımlanmış bileşikler ve tanımlanmamış karışımlar veya fraksiyonları kullanırız.

"Tanımlanmış" bileşikler belirlenebilen kimyasal maddelerdir : hidrojen, metan, benzen, fenol gibi. Hidrokarbonun karbon sayısının artması ile beraber belirlenebilir kimyasal madde sayısı da hızla artmaktadır. Sadece parafinler düşünüldüğünde bile, izomerlerin sayıları C<sub>5</sub> için 3'e, C<sub>6</sub> için 5'e, C<sub>7</sub> için 9'a, C<sub>8</sub> için 18'e ve böylece giderek artmaktadır. Bütün bu izomerleri rutin bir bazda teşhis etmek, hele C<sub>10+</sub> parafinler veya diğer hidrokarbon sınıfları için bu teşhisi yapmaya çalışmak hem pahalı, hem de çok güç olurdu.

Genelde "fraksiyonlar" olarak da bilinen "tanımlanmamış" karışımlar ifadesi, petrol karakterizasyonunu çok basitleştirmiştir. Tanımlanmış bileşikler ifadesi genellikle C<sub>5</sub>'e kadar kullanılır, fakat bütün daha ağır bileşikler "petrol fraksiyonları" içinde gruplanır. Pratikte, geniş petrol kesimleri çeşitli daha dar kesimlere veya fraksiyonlara bölünür. Her fraksiyon dar bir kaynama aralığına sahip olmalıdır ki, tercihen 28 °C'dan daha az, böylece yalnızca bir kaynama noktasına sahip (fraksiyonun ortalama kaynama noktasına eşit) tek bir süzde bileşik gibi işlem görebilsin.

Bu yaklaşım genellikle  $40^{\circ}\text{C}$ 'ın üzerindeki kaynama noktaları ( $t_b$ ) için kullanılır. (Genellikle belirlenmiş en ağır "tanımlanmış" bileşik olan n-pentanın normal kaynama noktası  $36,066^{\circ}\text{C}$ 'dir. (1)). Örnek olarak,  $100^{\circ}\text{C}$ 'da kaynayan bir fraksiyon  $95-105^{\circ}\text{C}$  aralığında kaynayan bileşikler içerir. Parafinlere örnek olarak n-heptan, 3 etil-pentan ve 17 adet  $\text{C}_8$  izomerleri verilebilir.

Fraksiyonların ( $t_b > 40^{\circ}\text{C}$ ) kullanımı ile yapılan basitleştirme parafinik ham petroler için çok başarılı olmuştur. Ancak, naften içeriği yüksek ham petrolün tek parametrelili karakterizasyonu başarılı olamamıştır. Naftenler ve parafinler arasında bir ayırım yapabilmek için ikinci bir parametreye, yapısal farklılıkların bir ölçütüne, ihtiyaç duyulmuştur. Bu da fraksiyonun yoğunluğu ile sağlanmıştır.

Petrol fraksiyonlarının karakterizasyonunda kullanılan ikinci parametre  $15,5/15,5^{\circ}\text{C}$ 'daki özgül ağırlıktır; bu, fraksiyonun  $15,5^{\circ}\text{C}$ 'daki yoğunluğunun  $15,5^{\circ}\text{C}$ 'daki suyun yoğunluğuna bölümüdür. Özgül ağırlığa eşdeğer olan diğer bir ağırlık  $^{\circ}\text{API}$ 'dir. Bir üçüncü alternatif, kaynama noktası ( $t_b$ ) ile özgül ağırlığın (SG) fonksiyonu olan Watson karakterizasyon faktörüdür.

SG veya  $K_w$ 'nın kullanımı, petrol fraksiyonlarındaki naftenlerin ve hatta aromatiklerin miktarını belirlemeyi mümkün kılar ( $15$ 'den daha fazla değişik tür naften, daha önce bahsedilen  $95-105^{\circ}\text{C}$ 'lik kesimde bulunabilir). Bununla birlikte, termodinamik korelasyonların çoğu parafinik/naftenik ham petrol özelliklerine dayanır.

Rafinerilerde işlenmiş sıvıların aromatikliği genellikle  $K_w$  ile ölçülür. Ham petrol fraksiyonları 12 civarında bir  $K_w$  değerine sahipken ağır parafinler 13'den büyük  $K_w$  değerine sahiptirler. Naftenlerin  $K_w$  değerleri 11'e kadar düşer. Bu nedenle, rafineri proses akımlarının özellikleri hakkında bilinenlerin çoğu  $K_w \geq 11$  olan fraksiyonlar içindir.

Kömür sıvıları ham petrolden daha çok aromatiktir. Kömür sıvıları,  $K_w$  değerleri 10'dan hatta 9'dan daha az olan fraksiyonlara sahiptirler. Bu nedenle, rafineri proses hesaplamalarında kullanılması için geliştirilen herhangi bir korelasyon kömür sıvılarına ya uygulanamaz veya, en iyi yaklaşım ile, deneysel bilgilerin aslında mevcut olmadığı bölgelere ekstrapole edilmeyi gerektirir.

Kömür sıvı fraksiyonlarının çok düşük  $K_w$  değerleri, aslında içerdikleri yüksek düzeyde PNA'lara (polinükleer aromatik hidrokarbonlar) bağlıdır. Kömür sıvıları, aynı zamanda, önemli miktarda özellikle oksijen ve azot heteroatomlarını içerir. Bu nedenle, kömür sıvılarının özelliklerini anlamak için, aynı zamanda, PNA'ların ve onların türevlerinin özelliklerini araştırmak zorundayız. Bu çalışmada iki tür bileşik üzerinde durulacaktır : fraksiyonlar halindeki kömür sıvıları ve kömür sıvılarına kendi karakteristiklerini veren tanımlanmış bileşikler olan model bileşikler.

### 1.1. KÖMÜR SIVILARININ HAM PETROLLE KARŞILAŞTIRILMASI

Hochman(2) kömür sıvılarının ve diğer sentetik yakıtların bileşimlerini Suudi Arabistan kökenli hafif Arap ham petrolü ile karşılaştırmıştır. İlgilenilen kömür sıvıları, doğrudan sıvılaştırma proseslerinden elde edilir : SRC-I, SRC-II, H-Coal, EDS ve diğerleri. Hochman'ın

karşılaştırması Tsonopoulos'da (3) olduğu gibi, EDS kömür sıvıları üzerinde odaklanır, fakat aşağıdaki yorumlar bütün "doğrudan" kömür sıvılarına uygulanmalıdır.

Hafif Arap ham petrolü ile doğrudan kömür sıvıları doymuş hidrokarbonlar (parafinler ve naftenler), olefinler ve aromatikler içeriği açısından çok farklıdırlar. Aşağıda, ham petrole, kömür sıvılarının bu açıdan karşılaştırılması gösterilmiştir :

Kimyasal Tür	Hafif Arap Ham Petrolü	Kömür Sıvıları
Doymuş hidrokarbonlar (ağ.%)	80	35
Olefinler (ağ.%)	-	5
Aromatikler (ağ.%)	20	60

Hafif Arap ham petrolü yalnızca ağ.% 20 aromatik, daha çok alkilbenzenler ( $K_w > 10$ ) içerir. Doğrudan kömür sıvıları ağ.% 60, ve çoğu kez daha fazla, en çoğu PNA ( $K_w < 10$ ) olan aromatikleri içerir. Doğrudan kömür sıvıları üzerindeki kütle spektrometrik ölçümleri ile, yoğunlaşmış iki-beş-halkalı bileşiklerin çoğunlukta olduğu ve halkaların takriben yarısının doymuş olduğu belirlenmiştir. Aromatikliğin bu yüksek düzeyi ve PNA'ların varlığı, kömür sıvılarının termodinamik ve taşınım özelliklerinin kestirimini güçleştiren faktörlerdir. PNA'ların yüksek içeriği aynı zamanda atomik hidrojen-karbon oranını önemli ölçüde azaltır : doğrudan kömür sıvılarında 1,5'dan 1'e, hafif Arap ham petrolünde 1,9'dan 1'e kadar (2).

Kömür sıvıları ile ham petrol arasındaki diğer önemli fark hetero-

atomların düzeyidir. Aşağıdaki karşılaştırma yine Hochman'dan (2) alınmıştır (2) :

Heteroatomlar	Hafif Arap Ham Petrolü	Kömür Sıvıları*
Kükürt (ağ.%)	1,8	0,2
Azot (ağ.%)	0,1	0,3
Oksijen (ağ.%)	-	2,0
Heteroatom içeren bileşikler (ağ.%)	10	25

\* Doğrudan sıvılaştırma proseslerinden elde edilen kömür sıvıları.

Hafif Arap ham petrolü yüksek düzeyde kükürt, çok az azot içerir ve aslında hiç oksijen içermez. EDS kömür sıvıları, EDS prosesinin içindeki hidrojenasyonun varlığı yüzünden az kükürt ve azot içermelerine rağmen çoğunlukla fenolik bileşiklerde olmak üzere yüksek düzeyde oksijen içerir. Diğer doğrudan kömür sıvılarında azot içeriği daha yüksek olmasına rağmen EDS kömür sıvılarında bulunan ağ.% 0,3 azot içeriği bile yüksektir çünkü azotun aromatik halkadan uzaklaştırılması oldukça zordur.

Heteroatomların varlığı, kömür sıvılarının özelliklerini etkiler ve ham petrolün özelliklerinden daha farklı olmasına neden olur. Yukarıdaki çizelgede görüldüğü gibi, kömür sıvılarındaki bileşiklerin ağ.% 25'i, buna karşılık hafif Arap ham petrolündeki bileşiklerin sadece ağ.% 10'u heteroatom içermektedir. Ham petrolde, heteroatomun büyük kısmı, çoğunlukla polar olmayan veya zayıf polar bileşiklerde bulunan

kükürttür. Böylece, hidrokarbonlar için geliştirilen korelasyonları kükürt içeren bileşiklere uygulamak daha olasıdır ve öyle de yapılır. Buna karşılık, kömür sıvılarında oksijen içeren bileşiklerin başlıca türü olan fenolik bileşikler çok polardır. Bu da petrol fraksiyonları korelasyonlarının kömür sıvı fraksiyonları için iyi sonuç vermeyebileceğini gösterir.

## 1.2. DOĞRUDAN KÖMÜR SIVILARININ KARŞILAŞTIRILMASI

Dooley (4) şu proseslerden (ve kömürlerden) elde edilen kömür sıvılarını karakterize etmiştir : COED (Utah, batı Kentucky), Synthoil (Batı Virginia) ve H-Coal (Illinois No.6). Dooley, kükürt dağılımı (ağ.% 0,05-0,42), azot dağılımı (ağ. % 0,23-0,79), damıtma eğrisi, halka sayısı dağılımı ve diğer özellikler hakkında veriler sunmuştur. En yüksek kükürt ve azot düzeyleri, üzerinde fazla durulmayan bir proses olan Synthoil prosesinden elde edilen sıvılarda bulunmuştur. Diğer proseslerden elde edilen sıvılar birbirine benzerdir.

Hipkin (5) doğrudan kömür sıvıları için çok ümit verici olan SRC-I, SRC-II, H-Coal ve EDS sıvılaştırma proseslerinden elde edilen "sentetik ham petrolere" ait verileri özetlemiştir; heteroatom verileri şöyledir :

Heteroatom	SRC-I	SRC-II	H-Coal	EDS
Kükürt (ağ.%)	0,89	0,29	0,32	0,12
Azot (ağ.%)	2,04	0,85	0,46	0,30
Oksijen (ağ.%)	4,52	3,72	1,80	1,92

SRC-I sentetik ham petrolü, diğerlerinden çok daha yüksek heteroatom içeriğine sahiptir, fakat aynı zamanda oda sıcaklığında katı oluşu ile de çok farklıdır. Akma noktası  $200^{\circ}\text{C}$ 'dan daha büyüktür. Diğer üç sentetik ham petrolün graviteleri  $19-31^{\circ}\text{API}$  ( $\text{SG} = 0,94-0,87$ ) aralığında değişirken, SRC-I'in gravitesi  $-14,6^{\circ}\text{API}$ 'dır ( $\text{SG} = 1,21$ ).

Diğer kömür sıvılarına göre EDS ve SRC-II kömür sıvıları üzerinde daha çok araştırma yapılmış ve bunların bir çok termofiziksel özellikleri hakkında deneysel veriler yayınlanmıştır. Bu nedenle, sentetik yakıtların termofiziksel özelliklerinin kestirimi için korelasyonların geliştirilmesinde daha çok bu deneysel veriler temel alınmıştır (3,6,7,8).

Kömür kaynağının, kömür sıvılarının özelliklerini etkilediği sanılır, ancak kullanılan kömür türü termodinamik veya taşınım özelliklerinde önemli farklılıklar yaratmaz. Bunun anlamı, verilen bir korelasyon Illinois No.6 kömürü sıvılarının özelliklerini Wyoming Wyodak kömürü sıvılarının özellikleri kadar iyi kestirir demektir. Bu duyarsızlık kömür sıvı fraksiyonlarının yalnızca kaynama noktası ve özgül ağırlık ile karakterizasyonundan kaynaklanmaktadır. Bunun gibi bir karakterizasyon, örneğin alkilbenzenler ve PNA'lar arasındaki farkları veya heteroatomların varlığı hakkında bir açıklama getiremez. ( $t_b$ , SG) karakterizasyonu ve buna dayanan korelasyonlar petrol fraksiyonları için geliştirilmiştir, ancak bu korelasyonların kömür sıvı fraksiyonlarına uygulanıp uygulanamayacağını göstermek de önemlidir.

### 1.3. KÖMÜR SIVILARI İÇİN MODEL BİLEŞİKLER

Model bileşikler, kömür sıvılarını karakterize etmek ve özelliklerini

kestirmek için özellikle fiziksel modellerin ve korelasyonların geliştirilmesinde önemlidir. Örneğin, model bileşiklerin buhar basıncı verileri, kömür sıvı fraksiyonları için buhar basıncı korelasyonlarını test etmek veya geliştirmek için kullanılabilir.

Bu dolaylı faydası ile beraber, model bileşiklerin en az üç doğrudan faydası vardır. Bir tanesi, proses akımında tanımlanmış bir bileşik önemli miktarlarda bulunduğu zaman, akımın özellikleri doğru biliniyor demektir. EDS kömür sıvılaştırma prosesinde önemli bir bileşik olan tetralin buna bir örnektir.

Model bileşiklerin bir diğer faydası, gelecekteki proseslerin araştırılmasında önem kazanmasıdır. Bu tür araştırmalar özellikle hazırlık safhalarında, çoğu kez tamamen, model bileşiklere dayanırlar. Örneğin, EDS prosesinin gelişmesinin ilk aşamalarında naftalinin tetraline olan hidrojenasyonu ile ilgilenilmiştir.

Son olarak, model bileşikler hayli karmaşık reaksiyon çalışmalarında önemlidir. Bu gibi reaksiyonlara bir örnek, kararlı sentetik yakıtların üretiminde esaslı bir adım olan denitrojenasyondur. Kömür sıvılarının denitrojenasyonunun henüz iyi anlaşılması nedeniyle şimdiki araştırmalar kinolin ve karbazol gibi model bileşiklere yönelmektedir.

Daha önce açıklandığı gibi, kömür sıvılarını petrol sıvılarından ayırt eden başlıca karakteristikleri, onların aromatikliği ve yüksek heteroatom içeriğidir. Özel olarak ilgilenilen aromatik hidrokarbonlar 2-5 halkalı PNA'lar ve özellikle onların kısmen hidrojene olmuş türevleridir. Yani zincirler genellikle kısadır :  $C_1$ 'den  $C_3$ 'e kadar.

Heteroatomların en önemlisi, çoğunlukla fenolik bileşiklerde bulunan oksijendir; diğer önemli bir heteroatom azottur ve en az önemli olan, kükürttür.

Aromatiklik ve heteroatom içeriğine ek olarak model bileşiklerin seçiminde düşünülen diğer iki husus şunlardır : i) kaynama noktalarının 200 °C üzerinde olması, ii) bazı özelliklerinin ve mümkünse kısmen hidrojene edilmiş türevlerinin özelliklerinin bilinmesi. Kaynama noktası hususu, dikkati hakkında az şey bilinen ve mevcut korelasyonların uygulanamadığı ağır bileşiklere çekmek için ortaya konmuştur.

## 2. KÖMÜR SIVILARININ VE MODEL BİLEŞİMLERİNİN KARAKTERİZASYONU

Kömür sıvılarının özelliklerinin karakterizasyonu için genel olarak üç tip karakterizasyon kullanılır : biri "petrol" fraksiyonu karakterizasyonudur; bunlar genellikle fraksiyonun normal kaynama noktasına ve  $15,5/15,5^{\circ}\text{C}$ 'deki özgül eğriliklerine dayanır. Diğer taraftan bileşiklerin karakterizasyonlarıdır; bunlar da genellikle taraftan bileşiklerin kritik noktalarına ve merkezizlik (acentric) faktörüne dayanır. Taraftan bileşiklerin karakterizasyonuna kömür sıvı fraksiyonlarında kullanılmak üzere ilk önce fraksiyonların kritik noktaları ve merkezizlik faktörleri tayin edilmelidir; böylece için de fraksiyonlar, edens bileşikler olarak gösterilebilmektedir.

### 2.1. FRAKSİYONLARIN KÖMÜR SIVILARININ VE MODEL

### 2. KÖMÜR SIVILARININ VE MODEL

#### BİLEŞİMLERİN KARAKTERİZASYONU

Model (9) taraftan bileşiklerin karakterizasyonu için gerekli özellikler bir (petrol) fraksiyonu karakterizasyonuna benzer bir özelliktedir. Bununla beraber, bir fraksiyonun çok kaynama noktasında bir karışımı elde etmesi ortalamaya normal kaynama noktası kullanılır. Özgül eğrilik ortalamaya kaynama noktaları değerlendirilir. Diğer taraftan bileşiklerin kullanılması ise bir özellik için, daha iyi karakterizasyonun kullanılabilirliği olarak olarak gösterilmektedir. Çizim 2.1.'de, hangi ortalamaların hangi spesifik özellikler için en iyi karakterizasyonu vereceği hakkındaki Model'in sonuçları verilmiştir.

Model (veya diğer) ortalamaya kaynama noktası, merkezizlik ortalamaya suyu hacmi (veya diğer) yüzölçümü karşı karşıya olan bir ortalamaya olan etkisi değerlendirilir. Her bir özellikte karakterizasyon

## 2. KÖMÜR SIVILARININ VE MODEL BİLEŞİKLERİN KARAKTERİZASYONU

Kömür sıvılarının özelliklerinin kestiriminde iki çeşit korelasyon kullanılır : biri "petrol" fraksiyonu korelasyonlarıdır; bunlar genellikle fraksiyonun normal kaynama noktasına ve 15,5/15,5 °C'daki özgül ağırlığına dayanır. Diğeri tanımlanmış bileşiklerin korelasyonlarıdır; bunlar da genellikle tanımlanmış bileşiklerin kritik sabitlerine ve merkezizlik (acentric) faktörüne dayanır. Tanımlanmış bileşiklerin korelasyonlarını kömür sıvı fraksiyonlarında kullanmak için ilk önce fraksiyonların kritik sabitleri ve merkezizlik faktörü tayin edilmelidir; bunun için de fraksiyonlar, sözde bileşikler olarak gösterilebilmelidir.

### 2.1. FRAKSİYONLARIN KARAKTERİZASYONU

Maxwell (9) tarafından belirtildiği gibi, ortalama özgül ağırlık bir (petrol) fraksiyonun doğrudan ölçülebilen bir özelliğidir. Bununla beraber, bir fraksiyon çok sayıda bileşenin bir karışımı olduğundan ortalama normal kaynama noktası ölçülemez. Değişik ortalama kaynama noktaları belirlenebilir. Uygun ortalamaların kullanılması ile bir özellik için, daha iyi korelasyonların kullanılabileceği ampirik olarak gösterilmiştir. Çizelge 2.1.'de, hangi ortalamaların hangi spesifik özellikler için en iyi korelasyonu vereceği hakkındaki Maxwell'in önerileri verilmiştir.

Hacim (veya ağırlık) ortalamalı kaynama noktası, sıcaklığın damıtılan sıvı hacmi (veya ağırlık) yüzdesine karşı çizilmesinden elde edilen damıtma eğrisinden hesaplanabilir. Dar bir aralıkta kaynayan

Çizelge 2.1. Özellik Kestirimi Korelasyonlarında Kullanılan Ortalama Kaynama Noktaları

Özellik	Kullanılan Ortalama Kaynama Noktası
Üzgül ağırlık	Aritmetik ortalama
Watson karakterizasyon faktörü	
Molekül ağırlığı	
Sözde kritik basınç	
Yanma ısısı	
Sözde kritik sıcaklık	Molar ortalama
Isısal genleşme	
Gerçek kritik sıcaklık	Ağırlık ortalama
Sıvı ısı sıçması	Hacim ortalama
Viskozite	

fraksiyonlar için, örneğin  $\Delta t_b \leq 28 \text{ }^\circ\text{C}$  olduğunda, bütün ortalamalar birbirine yaklaşmaktadır. Bu nedenle, hacim (veya ağırlık) ortalamalı kaynama noktası fraksiyonların hepsini temsil etmede kullanılabilir.

Geniş bir kesimin değişik ortalama kaynama noktaları, dar fraksiyonların hacim ortalamalı kaynama noktalarının uygun şekilde birleş-

tirilmesiyle bulunabilir. Bununla beraber MeABP (aritmetik ortalamalı kaynama noktası), (petrol) fraksiyonların molekül ağırlıklarını en iyi temsil eden kaynama noktası olarak ifade edilir (Maxwell,(9)). MeABP'nin doğrudan hesaplanması API Technical Data Book'ta şöyle verilmiştir (1) :

$$\text{MeABP } (^{\circ}\text{R}) = \frac{1}{2} \left[ \sum_{i=1}^n x_i T_{bi} + \left( \sum_{i=1}^n x_{vi} T_{bi}^{1/3} \right)^3 \right] \quad (2.1)$$

$x_i$ , mol fraksiyonu ;  $x_{vi}$ , i bileşeninin hacim fraksiyonu ; ve  $T_{bi}$ , i bileşeninin Rankine derecesi olarak normal kaynama noktasıdır.

#### 2.1.1. Damıtma Eğrisi : Kaynama Noktası Dağılımı

Kömür sıvılarının damıtma eğrileri, sıcaklık programlı gaz kromatografi yöntemi ile elde edilir (3,10,11). Bu yöntem ile bir kalibrasyon eğrisi çizilir ve bu kalibrasyon eğrisinden fraksiyonun normal kaynama noktası bulunabilir.

Tsonopoulos (3), bu yöntemle EDS kömür sıvılarının normal kaynama noktalarının bulunmasında şu hususları açıklamıştır : kalibrasyon  $370^{\circ}\text{C}$  civarında gerçek kaynama noktasından en fazla  $15^{\circ}\text{C}$ 'lik bir farklılık göstermiştir ; yöntem  $540^{\circ}\text{C}$ 'a kadar güvenilir sonuçlar vermiştir ve bu sıcaklıkta elde edilen kaynama noktası gerçek kaynama noktasından  $25^{\circ}\text{C}$ 'lik bir farklılık gösterebilir.

Üzellikle  $500^{\circ}\text{C}$ 'nin üzerinde ve yakın kaynayan kömür sıvılarının karakterizasyonu için, daha çok araştırmanın yapılması gereklidir.

Kömür sıvıları genellikle 10 veya daha fazla fraksiyon ile gösterilir. Bu, damıtma eğrisinin 10 (veya daha fazla) dar bir aralıkta kaynayan ( $\Delta t_D < 28 \text{ }^\circ\text{C}$ ) fraksiyonlara ayrılması ile yapılır. Her fraksiyon kendi ortalama kaynama noktası ve özgül ağırlığı ile tanımlanır.

### 2.1.2. Özgül Ağırlık

Bir kesimi karakterize etmek için gereken en az bilgi, onun damıtma eğrisi ve  $15,5/15,5 \text{ }^\circ\text{C}$ 'daki özgül ağırlığı olan SG'dir. Bazen, kesimin (veya fraksiyonun) özgül ağırlığı yalnızca  $^\circ\text{API}$  olarak verilebilir. O durumda SG'yi hesaplamak için şu denklem kullanılabilir :

$$SG = \frac{141,5}{^\circ\text{API} + 131,5} \quad (2.2)$$

Eğer yalnızca  $T_D$  ve  $K_w$  biliniyorsa SG Watson karakterizasyon faktöründen hesaplanmalıdır :

$$K_w = 1,2164 T_D^{1/3} / SG \quad (2.3)$$

Geniş bir kesimin eğer yalnızca ortalama özgül ağırlığı biliniyorsa, kesimi oluşturan daha dar fraksiyonların özgül ağırlığının elde edilmesi gerekir. Bu mümkündür çünkü  $K_w$  aslında bir kesimin bütün fraksiyonları için sabit kalır. Örnek olarak,  $K_w = 11,5$  değerine sahip olan bir ham petrol düşünölsün, Bunun bütün fraksiyonlarının aynı zamanda  $K_w = 11,5$  değerine sahip oldukları bulunmuştur ve bu nedenle Denklem

(2.3) fraksiyonların SG değerini hesaplamak için kullanılabilir ( $K_w$ 'nın yaklaşık sabitliği, henüz ispat edilmemesine rağmen, kömür sıvılarına uygulamak için de sabit kabul edilir).

Bazen, ayrı ayrı fraksiyonların özgül ağırlığı bilinir ve geniş bir kesimin özgül ağırlığı hesaplanmak istenir. O durumda, fraksiyonların ideal olarak karıştığı kabul edilir ve kesimin hacmi (yoğunluğun tersi) fraksiyonların mol ortalama hacmine eşittir.

Bir özgül ağırlığın bilinmesi gerektiğini ifade etmemize rağmen, bu bilgiyi kullanmadan da sonuca varabiliriz. Eğer kaynama noktası biliniyorsa ve fraksiyon bir kömür sıvısı ise (özellikle, EDS veya SRC-II kömür sıvısı), o zaman Denklem (2.4) kullanılarak SG hesaplanabilir (3,8,12) :

$$\begin{aligned} SG = & - 0,144563 + 3,468548 \times 10^{-3} T_b - 3,171165 \times 10^{-6} T_b^2 \\ & + 1,144454 \times 10^{-9} T_b^3 \end{aligned} \quad (2.4)$$

Denklem (2.4) EDS ve SRC-II kömür sıvılarına ait 236 veri noktasının analizi ile Tsouopoulos (3) tarafından elde edilmiştir. Ortalama sapma 2,17 olarak bulunmuştur. Denklem (2.4) yalnızca kömür sıvıları için iyi sonuç verir. Ancak, sadece kaynama noktasına (veya herhangi bir diğer özellik) dayanan bir korelasyon sınırlı bir uygulanabilirliğe sahiptir.

### 2.1.3. Molekül Ağırlığının Kestirimi

Tanımlanmış bir bileşiğin molekül ağırlığı ona ait  $t_b$  ve SG değerlerinden kestirilmelidir. Kömür sıvıları için bazen sadece

$t_D$  bilinmesi halinde de oldukça güvenilir kestirimler (% 3-4 sapma ile) yapılabilir.

Molekül ağırlığının kestirimi için White (13) H-Coal ve Wilsonville kömür sıvılarının özellik verilerinden yararlanarak aşağıdaki korelasyonu geliştirmiştir :

$$M = 1,8167717 \times 10^{-5} T_D^{2,5497} SG^{-1,4002} \quad (2.5)$$

Bu denklem, molekül ağırlığını % 1,8 lik ortalama mutlak sapma ile kestirmektedir. Fakat SRC-II kömür sıvılarına uygulandığında ortalama mutlak sapma % 5,2'ye yükselmektedir.

White (13), ayrıca H-Coal, Wilsonville ve SRC-II kömür sıvılarının verilerine dayanarak şu korelasyonu geliştirmiştir :

$$M = 8,466928 \times 10^{-6} T_D^{2,6667} SG^{-1,7696} \quad (2.6)$$

Denklem (2.6)'da ortalama mutlak sapma % 3'tür.

Kömür sıvıları için SG bilinmediği durumda, M aşağıdaki denklemden hesaplanabilir (3) :

$$\begin{aligned} \ln M = & 1,850734 + 0,010472 T_D - 1,052192 \times 10^{-5} T_D^2 \\ & + 4,526337 \times 10^{-9} T_D^3 \end{aligned} \quad (2.7)$$

Denklem (2.7), EDS ve SRC-II kömür sıvı verileri esas alınarak geliştirilmiştir.

Molekül ağırlığının kestirimi için geliştirilmiş bir çok korelasyon mevcuttur (7, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22).

## 2.2. MODEL BİLEŞİKLER

Saf kimyasal maddelerin ve aynı zamanda model bileşiklerin termodinamik özellikleri, en iyi şekilde çeşitli karşılıklı-haller yöntemleri ile hesaplanabilir. Bu tür yöntemler en azından polar olmayan veya zayıf polar bileşikler için üç özelliğin bilinmesini gerektirir : kritik sıcaklık ( $T_c$ ), kritik basınç ( $P_c$ ) ve merkezizlik faktörü ( $\omega$ ).

Tanımlanmış bileşiklerin  $T_c$  ve  $P_c$  özelliklerinin kestirimi için çeşitli yöntemler mevcuttur, Reid (23). Kömür sıvı fraksiyonlarının  $T_c$  ve  $P_c$  değerleri kestirildikten sonra bunlar karşılıklı-haller yöntemleri aracılığıyla kömür sıvılarının özelliklerinin kestirimi için kullanılabilir. Bu tür  $T_c$  ve  $P_c$  korelasyonlarının geliştirilmesi, model bileşiklerin verileri temel alınarak yapılmalıdır.

Belirtildiği gibi, fraksiyonlar bir kaynama noktası aralığına sahip olmalarına rağmen, onların davranışı bu aralık dar olduğunda ( $\Delta t_D < 28^\circ\text{C}$ ) saf bileşiklerin davranışlarına benzer olmalıdır. Böylece, saf bileşikler için geliştirilen bir korelasyon dar bir aralıkta kaynayan fraksiyonlara da uygulanabilmektedir.

### 2.2.1. Kritik Özellikler ve Merkezsizlik Faktörü

Wetzel (24) SRC-II kömür sıvılarında bulunan 558 saf bileşiğe ait verileri incelemiştir, her bileşiğe ait bütün verilerin olmaması nedeniyle, bunlardan ancak 200 kadarını kullanarak kritik özellik ve merkezsizlik faktörü korelasyonlarını geliştirmiştir. Bu bileşikler çeşitli kimyasal gruplara göre şöyle sınıflandırılır : parafinik, aromatik, naftenik, kükürtlü heterosiklik, azotlu heterosiklik, oksijenli heterosiklik ve siklik.

Wetzel (24), Riazi ve Daubert'in (16) kritik özelliklere ve merkezsizlik faktörüne ait basit cebirsel ifadesini ve bu özelliklere ait veri bankasını kullanarak aşağıdaki korelasyonları elde etmiştir :

Kritik Sıcaklık :

$$T_c = 9,97 SG^{0,249} T_b^{0,691} \quad (2.8)$$

Kritik Basınç :

$$P_c = 0,956328 \times 10^6 SG^{1,95} T_b^{-1,65} \quad (2.9)$$

Kritik Hacim :

$$V_c = 4,93 \times 10^{-4} SG^{-1,66} T_b^{2,21} \quad (2.10)$$

Merkezsizlik Faktörü :

$$\omega = 7,01 \times 10^{-6} SG^{-0,645} T_b^{1,76} \quad (2.11)$$

Bu denklemlerde SG 20/20 °C'daki değerdir.

Wetzel'in geliřtirdiđi korelasyonlar, kritik özellikleri ve merkezizlik faktörünü en az diđer arařtırmacıların (1,14,15,16,17,18,19,20,25,26) geliřtirdiđi korelasyonlar kadar dođru hesaplar.

Wetzel'in bu özellikler için hesapladıđı yüzde ortalama mutlak sapmalar řöyledir :  $T_c$ , 1,2 (200 veri noktası için);  $P_c$ , 5,9 (175 veri noktası için);  $V_c$ , 5,9 (135 veri noktası için);  $w$ , 14,0 (140 veri noktası için).

Kritik Sıkıřtırma Faktörü :

Kritik sıkıřtırma faktörünün hesaplanması için ideal gaz kanunu kullanılmıřtır (23) :

$$Z_c = \frac{P_c V_c}{R T_c} \quad (2.12)$$

## 3. FRAKSİYONLARIN TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİNDE KULLANILAN KORELASYONLAR

... bu çalışmada, ... termofiziksel özelliklerin kestirimi için kullanılan korelasyonlar ...

### 3. FRAKSİYONLARIN TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİNDE KULLANILAN KORELASYONLAR

### 3. FRAKSİYONLARIN TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİNDE

#### KULLANILAN KORELASYONLAR

Bu bölümde, kömür sıvı fraksiyonlarının termofiziksel özelliklerini kestiren korelasyonlar incelenmiştir. Bu yapılırken, literatürde mevcut korelasyonların tamamına yakını araştırılmıştır. Bilgisayar programında, termofiziksel özelliklerin herbirini hesaplayan mevcut korelasyonların yaklaşık hepsine yer verilmiştir. Bilgisayar programında kestirimi yapılan termofiziksel özellikler ve ilgili denklemleri Çizelge 3.1.'de verilmiştir. Bu özelliklerden ilk sekiz tanesine ait korelasyonlar 2.bölümde sunulmuştur.

Ayrıca her korelasyona ait mevcut veri tabanı ve çeşitli sapma değerleri, korelasyonlarla beraber verilmiştir. Bu sapma bağıntıları aşağıda verilmiştir :

Yüzde (ortalama) sapma :

$$\% \text{ sapma} = (\text{deneysel-kestirim})/\text{deneysel} \times 100$$

Yüzde ortalama mutlak sapma :

$$\% \text{ AAD} = \sum | \text{deneysel-kestirim} | / N$$

Yüzde ortalama mutlak relatif sapma :

$$\% \text{ AARD} = \sum | \% \text{ sapma} | / N$$

N = veri noktası sayısı

Çizelge 3.1. Fraksiyonların Bilgisayar Programında Kestirimi Yapılan Termofiziksel Özellikleri ve İlgili Denklemleri

No.	Özellik	Denklem
1	Üzgül ağırlık	2.4
2	Watson Karakterizasyon faktörü	2.3
3	Molekül ağırlığı	2.5
4	Kritik sıcaklık	2.8
5	Kritik basınç	2.9
6	Kritik hacim	2.10
7	Merkezsizlik faktörü	2.11
8	Kritik sıkıştırma faktörü	2.12
9	Buhar basıncı	3.1
10	İdeal-gaz ısı sığası	3.2
11	Isı sığası	3.3
12	Buharlaşma ısısı	3.5
13	Yanma ısısı	3.6
14	Oluşum ısısı	3.7
15	Yoğunluk	3.9
16	Yüzey gerilimi	3.10
17	Viskozite	3.11
18	Isıl iletkenlik	3.15
19	Difüzyon katsayısı	3.16
20	Molar hacim	3.18
21	Dipol momenti	3.19
22	Kırılma indisi	3.22 - 3.23
23	Aromatiklik	3.24
24	Çözünürlük parametresi	3.25

### 3.1. BUHAR BASINCI

Gray (27), SRC-II kömür sıvılarına ait buhar basıncı verilerini incelemiş ve buhar basıncının kestirimi için aşağıdaki korelasyonu kullanmıştır :

$$\ln\left(\frac{P}{P_c}\right) = f^{(0)} + w f^{(1)} \quad (3.1)$$

$$f^{(0)}(T_r) = 5,671485 - \frac{5,809839}{T_r} - 0,867513 \ln(T_r) + 0,1383536 T_r^6 \quad (3.1a)$$

$$f^{(1)}(T_r) = 12,439604 - \frac{12,755971}{T_r} - 9,654169 \ln(T_r) + 0,316367 T_r^6 \quad (3.1b)$$

Kestirimin doğruluğu  $T_c$ ,  $P_c$  ve  $w$  değerlerine bağlıdır. Bu değerlere ait deneysel verilerin kullanılması buhar basıncı kestiriminin güvenilirliğini doğrudan etkiler. Eğer bu parametreler Wilson (18) veya Brule (19) korelasyonlarından elde edilirse buhar basıncı kestirimindeki ortalama mutlak relatif sapmalar sırasıyla % 6,33 ve % 4,39 olacaktır.

2.bölümde verilen  $T_c$ ,  $P_c$  ve  $w$  korelasyonları Wilson ve Brule korelasyonlarından daha iyi netice verirler; bu nedenle bu korelasyonlar, buhar basıncı kestirimlerini genelde daha güvenilir kılmaktadır.

### 3.2. İDEAL-GAZ ISI SIĞASI

Kesler ve Lee (14) ideal-gaz ısı siğası için aşağıdaki korelasyonu geliştirmişlerdir (0'dan 650 °C'a kadar) :

$$C_p^* = 4,1868 a + 7,53624 b T + 13,565232 c T^2 \quad (3.2)$$

$$a = - 0,32646 + 0,02678 K_w - CF(0,084773 - 0,080809 SG) \quad (3.2a)$$

$$b = - \left[ 1,3892 - 1,2122 K_w + 0,0383 K_w^2 - CF(2,1773 - 2,0826 SG) \right] \times 10^{-4} \quad (3.2b)$$

$$c = - \left[ 1,5393 + CF(0,78649 - 0,70423 SG) \right] \times 10^{-7} \quad (3.2c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} CF = \left[ (12,8/K_w - 1)(10,0/K_w - 1) \times 100 \right]^2 ; \quad 10 \leq K_w \leq 12,8 \\ \\ = 0 ; \quad K_w \leq 10 \quad \text{ve} \quad K_w \geq 12,8 \quad (3.2d) \end{array} \right.$$

Tsonopoulos (3), Kesler ve Lee tarafından açıkça belirtilmemesine rağmen, düzeltme teriminin (CF) yalnızca  $K_w$ 'nin 10-12,8 değerleri arasında kullanılması, aksi takdirde CF'in sıfır alınması gerektiğini önermektedir.

Denklem (3.2) model bileşiklerin verileri ile karşılaştırılmış ve kestirilen ideal-gaz ısı sığası değerlerinin deneysel verilerle oldukça uyumlu olduğu görülmüştür. Ayrıca, eğer yanlışlıkla CF'in sıfır olmayan değerleri kullanıldığında kestirimlerin çok zayıf (ve yanlış sıcaklık bağımlılığına sahip olan) değerler aldığı belirtilmiştir.

### 3.3. ISI SIĞASI

Isı sığası grup-katkı, eğri uydurma ve karşılıklı haller yöntemleri temel alınarak geliştirilen korelasyonlardan güvenilir bir şekilde kestirilebilir (3,28,29).

Tsonopoulos (3), yeni bir ısı sığası korelasyonu geliştirmek için 28 model bileşik (342 veri noktası) ve 24 kömür sıvısı fraksiyonuna (389 veri noktası) ait deneysel verileri temel alarak düzeltilmiş Watson-Nelson korelasyonunu elde etmiştir :

$$C_p = 4,1868(0,06759 + 0,05638 K_w) \times \left[ 0,6450 - 0,05959 SG + (1,2892 - 0,5264 SG) \left( \frac{1,8 T - 459,67}{1000} \right) \right] \quad (3.3)$$

Korelasyon, yukarıda belirtilen toplam 731 veri noktası için analiz edildiğinde ortalama mutlak sapma % 3,88 olmaktadır.

### 3.4. BUHARLAŞMA ISISI

Gray (27), SRC-II kömür sıvısı fraksiyonlarına ait normal kaynama noktasındaki deneysel buharlaşma ısısı verilerinden yararlanarak aşağıdaki basit doğrusal denklemi geliştirmiştir :

$$\Delta H_{Vb} = 0,08894 T_b - 1,5 \quad (3.4)$$

Bu denklem, % 3,68'lik ortalama mutlak relatif sapma ve % 7,01'lik maksimum sapma vermektedir.

Diğer sıcaklıklardaki buharlaşma ısıları Watson denkleminden bulunabilir :

$$\Delta H_{VT} = \Delta H_{Vb} \left( \frac{T_c - T}{T_c - T_b} \right)^{0,375} \quad (3.5)$$

### 3.5. YANMA ISISI

Tsonopoulos (3) tarafından, çeşitli sıvılaştırma ürünleri ve model bileşiklere ait 130 yanma ısısı verisi temel alınarak kömür sıvıları için aşağıdaki yanma ısısı korelasyonu geliştirilmiştir :

$$-\Delta H_c = 0,350622(C) + 1,14525(H) + 0,205349(S) + 0,061728(N) - 0,087266(O) \quad (3.6)$$

burada C,H,S,N ve O sırasıyla karbon, hidrojen, kükürt, azot ve oksijen elementlerinin organik maddedeki ağırlık yüzdeleridir.

Belirtilen veriler için yüzde ortalama sapma 0,55 ve ortalama hata 218 J/g olmaktadır.

### 3.6. OLUŞUM ISISI

Tsonopoulos (3) tarafından geliştirilen korelasyon kullanılmıştır :

$$-\Delta H_f^0 = 0,327592(C) + 1,417808(H) + 0,187747(S) + \Delta H_c - (H^* - H^L) \quad (3.7)$$

Burada  $\Delta H_f^0$  oluşum entalpisi ve  $H^*-H^L$  sıvıyı ideal gaz haline buharlaştırmak için gereken ısıdır.

### 3.7. YOĞUNLUK

Sıvı karışımların yoğunluğunun doğru kestirimleri kömür dönüşüm fabrikalarında tasarım ve çoğu proses cihazı spesifikasyonlarında önemlidir. Ayrıca, sıvı yoğunluklarının doğru kestirimleri, yeni gelişmekte olan dönüşüm proseslerinin çoğu için, yüksek sıcaklık ve basınçlara (500 °C'a ve 200 atm'e) kadar yapılabilmelidir.

Petrol türevli veya kömür türevli sıvılar için bu koşullarda çok az bilgi bulunmaktadır; ancak Hwang (30) ve Gray (7,12) tarafından yapılan yeni araştırmalar kömür-sıvı sistemlerinin yoğunluğu üzerinde önemli verilerin elde edilmesi ile sonuçlanmıştır. Bazıları 425 °C'nin üzerindeki sıcaklıklara ve 200 atm'den daha büyük basınçlara kadar olan bu veriler kömür-sıvı karışımlarının yoğunluğunun kestirimi için bir çok korelasyonun elde edilmesinde temel sağlamaktadır.

Hwang, EDS sıvıları için hidrojenin çözünmüş olduğu ve olmadığı durumlar için yoğunluk verilerinin analizinde, Riedel denkleminin bir formunu kullanmıştır :

$$\rho_r = \frac{\rho}{\rho_c} = 1 + 0,85 (1 - T_r) + (1,6916 + 0,9846 \omega)(1 - T_r)^{1/3} \quad (3.8)$$

$\rho$  Watson bağıntısı ile 15,5/15,5 °C'daki özgül ağırlıktan hesaplanır :

$$\rho = \rho_R \left( \frac{\rho^R}{\rho_R} \right) \quad (3.9)$$

burada  $\rho^R$ , 15,5 °C'daki yoğunluktur ve  $\rho_{15,5} = 0,999024$  SG bağıntısına göre özgül ağırlıktan hesaplanır;  $\rho_R$  ise 288,7 K için Denklem (3.8)'den elde edilir.

Korelasyondan elde edilen kestirimlerde bütün ortalama hatalar % 1 civarındadır. Kritik sıcaklığa yaklaşıldığında (25 - 40 °C kadar), sıvı yoğunluğundaki hatalar kolayca % 10'u bulmaktadır.

### 3.8. YÜZEY GERİLİMİ

Aslında hem model bileşikler için ve hem de petrol-veya kömür türevli sıvılar için yüksek sıcaklıklarda yüzey gerilimi verileri mevcut değildir. Ayrıca, model bileşikler için düşük sıcaklıklarda verilerin olmasına rağmen, çok az bileşik için bileşiğin normal kaynama noktasının üzerinde veriler vardır. Hwang (30), Gray ve Holder (8) ve Gray (7) tarafından yapılan yeni araştırmalar (370 °C ve 140 atm'e kadar) kömür sıvısı içeren karışımlarda yüzey gerilimi verileri sağlamıştır. Bununla beraber, model bileşikler ve model bileşiklerin iyi tanımlanmış karışımları üzerine yüksek sıcaklıklarda daha pek çok yüzey gerilimi verilerine ihtiyaç vardır.

Veri korelasyonu, aşağıdaki basit denklemin kullanılması ile mükemmeldir (% 5 sapmadan daha az; Gray (27)) :

$$\sigma_T = 0,0552 (1 - T_T)^{0,4} \quad (3.10)$$

burada  $\sigma_T$ ,  $\sigma / (7,29965 T_C^{1/3} P_C^{2/3})$  şeklinde tanımlanan indirgenmiş yüzey gerilimidir.

### 3.9 VİSKOZİTE

Üç taşınım özelliğinden-viskozite, ısı iletkenlik ve difüzyon katsayısı-proses tasarım hesaplamalarında en önemli olanı viskozitedir. Viskozite yalnız başına kullanılır (örneğin, basınç düşüşü hesaplamalarında) fakat aynı zamanda ısı iletkenlik (Prandtl sayısında) veya difüzyon katsayısı (Schmidt sayısında) ile beraber de kullanılır. Viskozite ve ısı iletkenlik için veriler, SRC-II kömür sıvıları için yayınlanmıştır. Difüzyon katsayısı için ise, kömür sıvılarına ait yayınlanmış bilgi mevcut değildir.

Viskozite üzerindeki tartışmaların çoğu Hwang (30) tarafından EDS kömür sıvılarının araştırılması ile hazırlanan raporlara dayanır. Buna ilave olarak, SRC-II kömür sıvıları verilerine ait görüşler Gray(7) tarafından verilmiştir.

Hwang (30) viskozite verilerinin analizinde, karşılıklı hal kavramlarını sıvı viskozitelerine uygulayan bir korelasyonu kullanmıştır. Korelasyon, Abbott ve Kaufmann (31,32) tarafından tanımlanmış bileşiklerin çok miktarda deneysel verilerinin analizi ile geliştirilmiştir.

Bu korelasyon genellikle donma noktası ile kritik nokta arasında uygulanabilir :

$$\ln v_r = \ln(v/v_c)$$

$$= A(\rho_r - 1) + B(\rho_r - 1)^{7/2} + \sum_{j=1}^5 C_j \left[ \exp(\rho_r - 1)^{(j+1)/2} - 1 \right] \quad (3.11)$$

İndirgenmiş yoğunluklar Denklem (3.8)'den hesaplanır. Denklem (3.11)'deki sabitler merkezsizlik faktörünün ve hidrokarbon türünün fonksiyonlarıdır; örneğin parafinler, olefinler, aromatikler gibi. Kömür-sıvı fraksiyonlarını en iyi temsil eden aromatikler için sabitler şöyledir :

$$A = 3,71104 \omega^2 \quad (3.12a)$$

$$B = 0,25121 - 0,65882 \omega \quad (3.12b)$$

$$C_1 = C_2 = 0 \quad (3.12c)$$

$$C_3 = 1,27195 \times 10^{-2} \quad (3.12d)$$

$$C_4 = -2,411 \times 10^{-4} \omega \quad (3.12e)$$

$$C_5 = 2,33529 \times 10^{-7} \omega^2 \quad (3.12f)$$

İndirgenmiş kinematik viskoziteyi dönüştürmek için gereken kritik kinematik viskozite, Uyehara ve Watson (3) korelasyonunun doğrudan

genişletilmiş şeklinden hesaplanır :

$$\sqrt{V_c} = 6,1154 \times 10^{-5} \frac{T_c^{5/6}}{M^{1/2}} \left( \frac{R Z_c}{P_c} \right)^{1/3} \quad (3.13)$$

EDS kömür sıvılarına ait 30 veri noktası için ortalama mutlak sapma, hesaplamalarda hidrojen ihmal edildiği zaman 16,2, edilmediği zaman 19,9 olmaktadır.

### 3.10. ISIL İLETKENLİK

Isıl iletkenlik ( $k_T$ ) hakkında kömür sıvılarının viskozitesinden daha az şey bilinir. Mevcut bilgilerin çoğu Gray (7) tarafından SRC-II kömür sıvıları için verilmiştir; ayrıca bazı ilave bilgiler Baltatu (33) ve diğerleri (34) tarafından SRC-I nafta ve COED damıtma kesimleri için sunulmuştur.

PROses tasarımımda  $k_T$ , akışlı sistemlerin ısı transferinde Prandtl sayısında ( $P_r = C_p \mu / k$ ) kullanılır.

Gray (7),  $k_T$ 'nin SG ile olan bağımlılığını incelemiş ve SRC-II sıvıları için  $k_T$ 'nin artan SG ile azaldığını, bu arada azalan SG ile ise arttığını görmüştür. Bu uyuşmaz durumun varlığına rağmen,  $k_T$ 'nin T'ye olan doğrudan bağımlılığı bir çok mühendislik uygulamaları için yeterli olabilir (1) :

$$k_T = 1,312 \times 10^{-3} - 1,419869 \times 10^{-6} t \quad (3.14)$$

Kritik sıcaklığa yaklaşıldığında,  $k_T$ 'nin sonsuza gittiği durumda, Denklem (3.14) geçersizdir.

Gray, Riedel (3) tarafından önerilen,  $k_T$  ile  $T_T$  arasındaki bir bağıntı ile SRC-II kömür sıvı deneysel verilerini incelemiştir. Bağıntı şöyledir :

$$k_T = 5,35073 \times 10^{-4} + 1,017673 \times 10^{-3}(1 - T_T)^{2/3} \quad (3.15)$$

Yukarıdaki her iki bağıntı SRC-II kömür sıvı verilerine uygulandığında toplam 74 veri noktası için ortalama mutlak sapma, sırasıyla 7,4 ve 3,0 olmaktadır. Araştırılan SRC-II sıvıları için son bağıntı en iyi olmasına rağmen uygulanabilirliği oldukça sınırlıdır. Bu nedenle  $T_T > 0,85$  koşulu ile Denklem (3,14), kaba bir kestirim yöntemi olarak faydalıdır. Kömür sıvı fraksiyonları ve onların karışımları için daha güvenilir ve genelleştirilmiş bir korelasyonun geliştirilmesi, yüksek indirgenmiş sıcaklık verilerini gerektirmektedir.

### 3.11. DİFÜZYON KATSAYISI

Difüzyon katsayısı, proses tasarımında en az önemli olan taşınım özelliğidir. Bu nedenle, literatürde kömür sıvılarındaki difüzyon katsayıları hakkında bilgi bulunmamaktadır.

Difüzyon katsayıları öncelikle kütle transfer özelliklerini belirtmede, Schimdt sayısının ( $Sc = \mu / \rho D$ ) hesaplanmasında kullanılır. İzotermal kütle transferi için,  $Sc$  sayısının rolü  $P_T$ 'ın ısı transferindeki rolüne benzerdir.

Sıvılardaki difüzyonun iki şekli ile ilgilenilir : i) (çoğunlukla) hidrokarbon sıvılarının (çoğunlukla) hidrokarbon sıvıları içinde difüzenmesi; ii) H<sub>2</sub> ve metan gibi gazların, (çoğunlukla) hidrokarbon sıvılarında difüzenmesi.

Her iki durum için de API Technical Data Book (1), Umese (35) tarafından geliştirilen aşağıdaki denklemi önermektedir :

$$D_{AB} = 2,750859 \times 10^{-10} \left( \frac{T}{\eta_B} \right) \left( \frac{\bar{r}_B}{\bar{r}_A^{2/3}} \right) \quad (3.16)$$

$D_{AB}$ , sonsuz seyreltik çözünenin (bileşen A), çözücü (bileşen B) içindeki, cm<sup>2</sup>/s olarak difüzyon katsayısıdır.  $\eta_B$ , g/cm s olarak çözücünün viskozitesi ve  $\bar{r}_i$ , Å olarak i bileşeninin dönme çapıdır. Hidrokarbonlar için  $\bar{r}_i$  değerleri API Technical Data Book'ta (1) verilmiştir.

Çözünen konsantrasyonu büyük olduğu zaman Denklem (3.16)'daki  $\eta_B$ , çözücü viskozitesi olarak alınmalıdır.

Polar olmayan sıvı veya gazların polar olmayan sıvılardaki difüzyonuna ait deneysel veriler kestirim değerleri ile karşılaştırıldığında ortalama hata % 16 olmaktadır.

Kömür sıvı fraksiyonlarının  $\bar{r}_i$  değerleri aşağıdaki bağıntı ile yaklaşık olarak hesaplanabilir :

$$\bar{r}_i = 1,0 + 9,5 w \quad (3.17)$$

### 3.12. MOLAR HACİM

Riazi ve Daubert'in (16) geliştirdiği aşağıdaki korelasyon kullanılmıştır (20 °C ve 1 atm'de) :

$$LMV = 2,659365 \times 10^{-4} T_D^{2,1262} SG^{-1,8688} \quad (3.18)$$

Korelasyon sabitlerinin bulunmasında 128 saf madde verisi temel alınmıştır. Ortalama sapma % 2,8 olarak belirtilmiştir.

### 3.13. DİPOL MOMENTİ

Watanasiri (26) 115 saf madde (aromatik, heterosiklik, alifatik, naftenik) verisini temel alarak bir dipol momenti korelasyonu geliştirmiştir. Korelasyon, polar olmayan, polar ve birleşen (associating) bileşiklere uygulanabilir. Böylece denklem, tanımlanmayan kömür akışkanları için çok kullanışlıdır. Dipol momenti aşağıdaki gibi indirgenmiş formda ifade edilmiştir :

$$\mu_T = 100 \mu / (0,5804897 T_c V_c)^{1/2} \quad (3.19)$$

İndirgenmiş dipol moment için olan korelasyon

$$\mu_T = (u_1 / u_4) + (u_2 \times u_3) \quad (3.20)$$

burada kırılma indisinin hesaplanması için geliştirilen bağıntı malzemenin yarısının kaynadığı kaynama noktası ve yoğunluğun fonksiyonlarıdır.

$$u_1 = (197,933/M + 0,039177 M) V_c T_c \quad (3.21a)$$

$$u_2 = 0,318350 \times 10^{-2} V_c + 0,956247 \times 10^{-2} T_D - 0,54790 \times 10^{-3} HVNP \quad (3.21b)$$

$$u_3 = -1,34634 w + 0,906609 \ln(w) \quad (3.21c)$$

$$u_4 = -4,85638 - 0,013548 M + 0,271949 \times 10^{-3} M^2 + 1,04024 \ln(M) \quad (3.21d)$$

ve

$$HVNP = - 10397,5 + 46,2681 T_D - 1373,91 T_D^{1/2} + 4595,81 \ln T_D \quad (3.21e)$$

Korelasyon, literatürde mevcut tek korelasyondur ve ortalama mutlak relatif sapma yüzde 25'tir.

### 3.14. KIRILMA İNDİSİ VE AROMATİKLİK

White (13) tarafından yapılan araştırmada, H-Coal ve Wilsonville ürünü kömür sınıfları için kırılma indisi ile malzemenin yarısının kaynadığı kaynama noktası, yoğunluk, molekül ağırlığı, aromatiklik ve atomik hidrojenin karbona oranı arasındaki ilişki açıklanmıştır.

Kırılma indisinin hesaplanması için geliştirilen bağıntı malzemenin yarısının kaynadığı kaynama noktası ve yoğunluğun ölçümlerine dayanır :

$M < 200$  için,

$$n = 0,166 T_D^{0,5045} (M/\rho)^{-0,1814} \quad (3.22)$$

$M \geq 200$  için,

$$n = 0,127534 T_D^{0,5761} (M/\rho)^{-0,2182} \quad (3.23)$$

Ortalama mutlak sapma, her iki korelasyon için sırasıyla yüzde 0,24 ve yüzde 0,47'dir ve korelasyonlar Riazi ve Daubert (16) bağıntısından daha doğrudurlar. Ayrıca, bu korelasyonlar yeniden düzenlenip  $T_D$ ,  $M$  ve  $\rho$  için çözülebilirler. Bu husus önemlidir çünkü bu parametrelerin ölçümü kırılma indisinden daha zordur.

Sıkça aranan bir özellik olan yakıtların aromatikliği ( $f_a$ ), tayini zor ve zaman alan bir özelliktir. White (13), kömür sıvılarına ait aromatiklik, atomik hidrojenin karbona oranı ve kırılma indisi verilerinden yararlanarak aşağıdaki korelasyonu geliştirmiştir :

$$f_a = 5,243 (H/C)^{-2,681} (n)^{-3,6964} \quad (3.24)$$

H NMR spektroskopisi ile belirlenen ve kestirilen aromatiklik değerleri arasındaki ortalama mutlak sapma  $0,037 f_a$  değeri kadardır ve ortalama mutlak sapma yüzde 3,69'dur.

Verilen bir damıtma fraksiyonu için, şu eğilimler gözlenebilir : fraksiyonun aromatikliği arttığında kırılma indisi artar ve fraksiyonda atomik hidrojenin karbona oranı azaldığında, kırılma indisi artar.

Kırılma indisi, kömürden elde edilen materyallerin diğer çeşitli fiziksel ve kimyasal özellikleriyle ilişkisi olan bir özelliktir; ölçümü hızlı ve güvenilirdir ve pahalı cihazlar ve uzmanlık gerektirmez.

### 3.15. ÇÖZÜNÜRLÜK PARAMETRESİ

Çözünürlük parametresinin hesaplanması için API Technical Data Book'ta (36) önerilen korelasyon kullanılmıştır :

$$\delta = \left[ \left( 1000 \times \Delta H_V - \frac{RT}{M} \right) \times \rho \right]^{1/2} \quad (3.25)$$

burada

$\Delta H_V$  = 25 °C'daki buharlaşma ısısı

$\rho$  = 25 °C'da yoğunluk

T = sıcaklık, 298,15 K

#### 4. SAF SENTETİK YAKITLARIN TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİNDE KULLANILAN KORELASYONLAR

Bu bölümde, saf sentetik yakıtların termofiziksel özelliklerini hesaplayan korelasyonlara yer verilmiştir. Bu korelasyonlar, bütün sıvılara uygulanabilir niteliktedir. Korelasyonların doğruluğu büyük ölçüde Reid'den (23) yararlanılmıştır. Bilgisayar programında kestirimi yapılan saf sentetik yakıtlara ait termofiziksel özellikler ve ilgili denklemleri Çizelge 4.1.'de verilmiştir.

#### 4.1. SAF SENTETİK YAKITLARIN TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİNDE KULLANILAN KORELASYONLAR

Kritik sıcaklık, basınç ve hacim hesaplamalarında en iyi yöntemlerden biri Lydersen (23) yöntemiştir. Bu hesaplama yöntemi  $T_c$ ,  $P_c$  ve  $v_c$ 'nin hesaplanmasında aşağıdaki katkılarını uygular. Bağıntılar :

Kritik sıcaklık :

$$T_c = T_b \left[ 0,567 + \frac{\sum \Delta T}{T_b} - \left( \frac{\sum \Delta T}{T_b} \right)^2 \right]^{-1} \quad (4.1)$$

Kritik basınç :

$$P_c = 10,34 + \left( \frac{\sum \Delta P}{T_b} \right)^2 \quad (4.2)$$

#### 4. SAF SENTETİK YAKITLARIN TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİNDE KULLANILAN KORELASYONLAR

Bu bölümde, saf sentetik yakıtların termofiziksel özelliklerini hesaplayan korelasyonlara yer verilmiştir. Bu korelasyonlar, bütün sıvılara uygulanabilir niteliktedir. Korelasyonların seçiminde büyük ölçüde Reid'den (23) yararlanılmıştır. Bilgisayar programında kestim yapılan saf sentetik yakıtlara ait termofiziksel özellikler ve ilgili denklemleri Çizelge 4.1.'de verilmiştir.

##### 4.1. KRİTİK ÖZELLİKLER

Kritik sıcaklık, basınç ve hacim hesaplanmasında en iyi yöntemlerden biri Lydersen (23) yöntemidir. Bu hesaplama yöntemi  $T_c$ ,  $P_c$  ve  $V_c$ 'nin hesaplanmasında yapısal katkıları uygular. Bağlıntılar :

Kritik sıcaklık :

$$T_c = T_D \left[ 0,567 + \sum \Delta_T - \left( \sum \Delta_T \right)^2 \right]^{-1} \quad (4.1)$$

Kritik basınç :

$$P_c = M(0,34 + \sum \Delta_P)^{-2} \quad (4.2)$$

Çizelge 4.1. Saf Sentetik Yakıtların Bilgisayar Programında Kestirimi  
Kritik Yapılan Termofiziksel Özellikleri ve İlgili Denklemleri

No	Özellik	Denklem
1	Kritik sıcaklık	4.1
2	Kritik basınç	4.2
3	Kritik hacim	4.3
4	Kritik sıkıştırma faktörü	4.4
5	Merkezsizlik faktörü	4.5
6	Kaynama noktası	4.6
7	Molar hacim	4.8
8	Yoğunluk	4.9
9	Isı sığası	4.12
10	Buhar basıncı	4.13
11	Buharlaştırma ısısı	4.18
12	Buharlaştırma entropisi	4.19
13	İdeal-gaz ısı sığası	4.20
14	Viskozite	4.22-4.23
15	Isıl iletkenlik	4.28
16	Yüzey gerilimi	4.29-4.30
17	Entropi	4.33
18	Çözünürlük parametresi	4.35
19	Entalpi farkı	4.36
20	Entropi farkı	4.37

Kritik hacim : (23) buhar basıncı denklemleri kullanılırsa,

$$V_c = 40 + \sum \Delta v \quad (4.3)$$

$\Delta_T$ ,  $\Delta_P$  ve  $\Delta_v$  Lydersen'in kritik-özellik katkılarıdır ve değerleri değişik atomlar veya atom grupları için verilen katkıların toplanmasıyla elde edilir. Bu metodu uygulamak için, yalnızca normal kaynama noktası ( $T_D$ ) ve molekül ağırlığı gerekmektedir.  $T_c$  hesaplanmasında hatalar genellikle % 2'den azdır; fakat yüksek molekül ağırlıklı (>100) polar olmayan maddeler için olan hatalar % 5'e kadar çıkar.  $P_c$  ve  $V_c$  için olan hatalar genellikle  $T_c$  için olan hataların iki katıdır.

Saf sıvıların kritik özellikleri ve merkezsizlik faktörü 3.bölümde verilen, model bileşikler için Wetzel tarafından geliştirilen korelasyonlar ile de oldukça iyi hesaplanabilirler.

Kritik sıkıştırma faktörü :

$$Z_c = \frac{P_c V_c}{RT_c} \quad (4.4)$$

#### 4.2. MERKEZSİZLİK FAKTÖRÜ

Merkezsizlik faktörü, bir molekülün merkezsizliğini ve küresel olmayışlığını gösterir; bazı yöntemlerde geometri ve polarite ile beraber bir molekülün kompleksliğini ölçün oldukça çok kullanılan bir parametredir.

Eğer Lee-Kesler (23) buhar basıncı denklemi kullanılırsa,

$$w = \frac{-\ln P_c - 5,92714 + 6,09648\theta^{-1} + 1,28862 \ln\theta - 0,169347\theta^6}{15,2518 - 15,6875\theta^{-1} - 13,4721 \ln\theta + 0,43577\theta^6} \quad (4.5)$$

yazılır. Burada  $\theta$ ,  $T_b/T_c$ 'dir.

Lee ve Kesler, korelasyonun  $w$  değerlerini, hidrokarbonların  $w$  değerlerine çok yakın hesapladığını belirtmişlerdir.

#### 4.3. KAYNAMA NOKTASI

Normal kaynama sıcaklığı ( $T_b$ ) genellikle sentez edilen ve araştırılan materyaller için mevcuttur; olmadığı durumlarda yaklaşık değeri hesaplanmalıdır. Miller (37)  $T_c$ ,  $P_c$  ve  $V_c$  için olan Lydersen grup-katkı yöntemini Rackett sıvı yoğunluğu bağıntısı ile birleştirmiş ve şu korelasyonu geliştirmiştir :

$$T_b = 0,012186 \theta e^{\beta} \quad (4.6)$$

burada  $\theta$ ,  $T_b/T_c$  dir ve Denklem (4.1)'den elde edilir.  $\beta$  ise,

$$\beta = \frac{[(1-\theta)^{2/7} - 0,048] \ln V_c + (1-\theta)^{2/7} \ln P_c + 1,255}{(1-\theta)^{2/7}} \quad (4.8)$$

Korelasyon, 25 farklı bileşik verisi için test edilmiş ve  $T_D$ 'deki ortalama hata yaklaşık yüzde 10 olarak belirtilmiştir. Hesaplama için yalnızca bileşiğin yapısı ve molekül ağırlığı gerekmektedir.

#### 4.4. MOLAR HACİM

Normal kaynama noktasındaki sıvı molar hacminin hesaplanmasında Tyn ve Calus (23) yöntemi kullanılmıştır;  $LMV_D$  kritik hacimle ilişkili olarak verilmiştir :

$$LMV_D = 0,285 V_C^{1,048} \quad (4.8)$$

Bu basit bağıntı düşük sıcaklıkta kaynayan birbirine yakın özellik gösteren gazlar ( $He$ ,  $H_2$ ,  $Ar$ ,  $Kr$ ) ve bazı polar azot ve fosfor bileşikleri ( $HCN$ ,  $PH_3$ ) dışında genelde yüzde 3 sapma ile doğru sonuç verir.

Denklem (3.18) ile verilen Riazi ve Daubert korelasyonu, saf sıvıların molar hacmini iyi kestirir ve daha çok ve çeşitli saf sıvılara uygulanabilir niteliktedir.

#### 4.5. YOĞUNLUK

Yamada ve Gunn, Rackett (23) denklemini küçük bir düzenleme ile aşağıdaki şekilde önermişlerdir :

$$V = V^R Z_{CR} \exp \phi(T_R, T_R^R) \quad (4.9)$$

burada

$$Z_{CR} = 0,29056 - 0,08775 \omega \quad (4.10)$$

$$\phi(T_R, T_R^R) = (1 - T_R)^{2/7} - (1 - T_R^R)^{2/7} \quad (4.11)$$

$V^R$ , bir sıvının  $T_R^R$  referans (indirgenmiş) sıcaklığındaki molar hacmidir. Polar olmayan doygun sıvıların çoğu için hatalar yüzde 1'den daha azdır.

#### 4.6. ISI SIĞASI

Sıvı ısı sığaları için uygulanabilen hesaplama yöntemleri dört genel gruba ayrılır : teorik, grup-katkı, karşılıklı haller ve Watson'un termodinamik çevrimi.

Luria ve Benson (23) hidrokarbonlar için normal kaynama noktasının altındaki sıcaklıklarda uygulanabilen bir grup-katkı yöntemi önermişlerdir :

$$C_p = 4,1868(A + BT + C T^2 + D T^3) \quad (4.12)$$

Burada A,B,C ve D polinom katsayılarıdır.

Fraksiyonlar için Denklem (3.3) ile verilen ısı sıçması korelasyonu, saf sıvılara da uygulanabilmektedir.

#### 4.7. BUHAR BASINCI

Buhar basıncı hesaplamalarında daha doğruya ulaşmak için birçok araştırmacı üç parametrelili formlar önermişlerdir. Pitzer ifadesi bunlardan en başarılı olanlardan birisidir :

$$\ln P_{VR} = f^{(0)}(T_R) + \omega f^{(1)}(T_R) \quad (4.13)$$

Lee ve Kesler  $f^{(0)}$  ve  $f^{(1)}$  fonksiyonlarını geniş bir indirgenmiş sıcaklık aralığında oluşturmaya çalışmışlar ve aşağıdaki analitik formda tarif etmişlerdir :

$$f^{(0)} = 5,97714 - \frac{6,09648}{T_R} - 1,28862 \ln T_R + 0,169347 T_R^6 \quad (4.14)$$

$$f^{(1)} = 15,2518 - \frac{15,6875}{T_R} - 13,4721 \ln T_R + 0,43577 T_R^6 \quad (4.15)$$

Merkezsizlik faktörü değerleri elde yoksa, daha önce verilen Denklem (4.5)'den hesaplanmalıdır. Pitzer denkleminin Lee-Kesler formu, buhar basınçlarını  $T_D$  ve  $T_C$  arasında genellikle yüzde 1-2'lik sapma ile kestirir.

#### 4.8. BUHARLAŞMA ISISI

Pitzer (23), buharlaşma ısısının  $T$ ,  $T_r$  ve  $w$  ile ilişkili olduğu aşağıdaki denklemi vermiştir :

$$\frac{\Delta H_V}{T} = \Delta S_V^{(0)} + w \Delta S_V^{(1)} \quad (4.16)$$

Burada  $\Delta S_V^{(0)}$  ve  $\Delta S_V^{(1)}$  entropi biriminde, örneğin J/g-molK olarak  $T_r$ 'nin fonksiyonu şeklindedir. Denklem (4.16)  $T_r/R$  ile çarpılırsa

$$\frac{\Delta H_V}{RT_c} = \frac{T_r}{R} (\Delta S_V^{(0)} + w \Delta S_V^{(1)}) \quad (4.17)$$

haline gelir.  $\Delta H_V/RT_c$  yalnızca  $w$  ve  $T_r$ 'nin fonksiyonudur.  $0,6 < T_r \leq 1,0$  aralığı için korelasyonun analitik ifadesi aşağıdaki gibidir :

$$\frac{\Delta H_V}{RT_c} = 7,08 \times 10^{-3} (1 - T_r)^{0,354} + 10,95 \times 10^{-3} w(1 - T_r)^{0,456} \quad (4.18)$$

#### 4.9. BUHARLAŞMA ENTROPİSİ

Normal kaynama noktasındaki buharlaşma entropisinin hesaplanması için, en önemli denklemlerden biri olan Kistiakowsky denklemi (23)

kullanılmıştır :

$$\frac{\Delta H_{Vb}}{T_b} = \Delta S_{Vb} = 36,6345 + R \ln T_b \quad (4.19)$$

#### 4.10. İDEAL-GAZ ISI SİĞASI

İdeal-gaz ısı sığasının hesaplanması için aşağıdaki denklem kullanılmıştır (23) :

$$C_p^* = 4,1868(A + BT + CT^2 + DT^3) \quad (4.20)$$

Burada A,B,C ve D sabitlerdir. Bunların değerleri Denklem (4.12)'de verilenlerle aynı değildir.

Ayrıca, Denklem (3.2) de saf sıvıların ideal-gaz ısı sığalarının hesaplanmasında kullanılabilir.

#### 4.11. VİSKOZİTE

Viskozite hesaplamalarını mümkün kılacak basit şekilde ifade edilebilen teoriler henüz bulunmadığından ampirik kestirim yöntemleri kullanılır. Bu yöntemler teoriye ters düşmezler; bu yöntemlerle bazı bilinmeyen veya hesaplanamayan teorik sabitler yapıdan veya diğer fiziksel özelliklerden ampirik olarak tahmin edilebilir.

#### 4.11.1. Düşük Sıcaklıklarda Viskozite Hesaplanması

Van Velzen, Cardozo ve Lungenkamp (23),

$$\eta = A e^{B/T} \quad (4.21)$$

şeklindeki Andrade korelasyonunu (23) aşağıdaki şekilde düzenlemişlerdir :

$$\log(100 \eta) = B \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \quad (4.22)$$

B ve  $T_0$  yapı ile ilişkili sabitlerdir. Denklem (4.22)  $T_r = 0,75$ 'in altındaki sıcaklık aralıklarında uygulanabilir.

#### 4.11.2. Yüksek Sıcaklıklarda Viskozite Hesaplanması

Letsou ve Stiel'in (23) geliştirdiği korelasyon kullanıldı :

$$\eta \xi = \left[ (\eta \xi)^{(0)} + w (\eta \xi)^{(1)} \right] \times \frac{1}{100} \quad (4.23)$$

$(\eta \xi)^{(0)}$  ve  $(\eta \xi)^{(1)}$  sadece indirgenmiş sıcaklığın fonksiyonları olan parametrelerdir. Letsou ve Stiel bu fonksiyonları  $0,76 \leq T_r \leq 0,98$  aralığında,

$$(\eta\xi)^{(0)} = 0,015174 - 0,02135 T_R + 0,0075 T_R^2 \quad (4.24)$$

$$(\eta\xi)^{(1)} = 0,042552 - 0,07674 T_R + 0,0340 T_R^2 \quad (4.25)$$

şeklinde ifade etmişlerdir. Burada,

$$\xi = \frac{T_c^{1/6}}{M^{1/2} P^{2/3} c} \quad (4.26)$$

Bu korelasyon, doymun sıvı viskozitelerini  $T_R = 0,76$  ve daha yüksek sıcaklıklarda hesaplayan en iyi yöntemdir; 14 sıvıya ait veriler kullanılarak geliştirilmiştir.  $T_R = 0,92$ 'ye kadar olan sıcaklıklarda ortalama hata yüzde 3'tür.

#### 4.12. ISIL İLETKENLİK

Riazi ve Faghri (38), saf maddelerin ısı iletkenlik verilerini kullanarak  $T_D$  ve  $SG$ 'ye bağımlı olan şu korelasyonu geliştirmişlerdir :

$$k_T = 1,73062 \times 10^{-6} \left[ 4,3(1,8 T_D - 459,67)^{0,2983} SG^{0,5478} - 111,47(1,8 T_D - 459,67)^{0,2983} SG^{0,0094} \right] \times \left( \frac{1,8 T - 459,67}{300} \right) + 1,929129 \times 10^{-4} (1,8 T_D - 459,67)^{0,2983} SG^{0,0094} \quad (4.28)$$

Denklem (4.28), kaynama noktaları 40 ve 350 °C aralığında olan sıvıların ısı iletkenliklerini donma noktası ile normal kaynama noktası arasında ve 30 atmosferden düşük basınçlarda kestirmek için kullanılabilir; 13 farklı sıvının 120 veri noktası kullanılarak geliştirilmiştir. Ortalama sapma yüzde 3,8 ve maksimum sapma yüzde 12'dir.

#### 4.13. YÜZEY GERİLİMİ

##### 4.13.1. Hidrojen Bağlı Sıvıların Yüzey Gerilimi

Yüzey gerilimini hesaplamak için Macleod-Sugden korelasyonunun sıcaklığa göre düzeltilmiş şekli kullanılmıştır :

$$\sigma = \left( \frac{[P]}{LMV_B} \right)^4 \left( \frac{1 - T_r}{1 - T_{br}} \right)^{4n} \quad (4.29)$$

Parakor,  $[P]$  , sıcaklıktan bağımsız bir parametredir ve molekül yapısından hesaplanır. n üstel değeri 0,25 ile 0,31 arasında değişir; organik sıvılar için 0,31 değeri kullanılabilir. Hatalar normal olarak yüzde 5-10'dan daha düşüktür.

##### 4.13.2. Hidrojen Bağlı Olmayan Sıvıların Yüzey Gerilimi

Karşılıklı haller korelasyonu kullanılmıştır (23) :

$$\sigma = P_c^{2/3} T_c^{1/3} Q (1 - T_r)^{11/9} \quad (4.30)$$

burada

$$A = 0,1207 \left( 1 + \frac{T_{br} \ln P_c}{1 - T_{br}} \right) - 0,281 \quad (4.31)$$

Hatalar genelde yüzde 5'ten daha azdır.

#### 4.14. ENTROPİ

Wen'in (39) kömür türevli organik bileşikler için önerdiği korelasyon :

$$S = a + b (H_n/C_n) + c (O_n/C_n) + d (N_n/C_n) + e (S_n/C_n) \quad (4.32)$$

Burada a,b,c,d ve e elde edilebilen sabitlerdir ve  $H_n/C_n$ ,  $O_n/C_n$ ,  $N_n/C_n$  ve  $S_n/C_n$ , sırasıyla organik bileşikte bulunan hidrojen, oksijen, azot ve kükürt atom sayılarının karbonun atom sayısına oranlarıdır.

40 adet organik bileşik verisinden yararlanılarak bulunan sabitlerle beraber korelasyon şöyledir :

$$S = 4,69 + 18,41 (H_n/C_n) + 44,61 (O_n/C_n) + 86,01 (N_n/C_n) + 86,61 (S_n/C_n) \quad (4.33)$$

#### 4.15. ÇÖZÜNÜRLÜK PARAMETRESİ

Bir sıvının çözünürlük parametresi,  $\delta$ , kohesiv (türdeş yapışık) enerji yoğunluğunun karekökü şeklinde tanımlanan, uygun teori ile beraber çözeltilerin bir çok termodinamik özelliğinin hesaplanmasını sağlayan bir niceliktir. Kohesiv enerji yoğunluğunun kendisi, aynı bir sıcaklık için, buharlaşma enerjisinin ( $\Delta E_v$ ) molar hacme oranı şeklinde tanımlanır.

680 bileşiğe ait çözünürlük parametresi değerleri Hoy (40) tarafından verilmiştir.

Fedors'un (41) çözünürlük parametresinin hesaplanması için önerdiği korelasyon :

$$\delta_2^2 = \delta_1^2 \left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{2,27} + \frac{R}{V_2} \left[ T_1 \left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{1,27} - T_2 \right] \quad (4.34)$$

$T_1$  ve  $T_2$  sıcaklıkları arasındaki fark  $150^\circ\text{C}$ 'dan daha fazla olmadığı zaman ve her ikisi birden sıvının normal kaynama noktasında veya bundan düşük olduğu zaman, sağ taraftaki ikinci terim birinci terime göre ihmal edilebilir ve böylece :

$$\delta_2 = \delta_1 \left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{1,13} = \delta_1 \left(\frac{\rho_2}{\rho_1}\right)^{1,13} \quad (4.35)$$

Bu ifade sıcaklıktan bağımsız çözünürlük parametresinin, sıcaklıktan bağımsız yoğunluğun bilinmesi ile hesaplanacağı anlamını ifade eder.

#### 4.16. ENTALPİ VE ENTROPİ FARKI

Bu (19,42) entalpi ve entropi farkı için aşağıdaki çok-parametrelilik-karşılıklı-haller (MPCS) korelasyonlarını geliştirmiştir.

Entalpi için :

$$\begin{aligned} \frac{(H-H^*)}{R(E_x/k)} = \rho^* & \left[ E_1 T^* - 2E_2 - 4E_3 T^{*-2} + 5E_9 T^{*-3} \right. \\ & \left. - 6E_{11} T^{*-4} \right] + \rho^{*2} \left[ E_5 T^* - 1,5 E_6 - 2E_{10} T^{*-1} \right] \\ & + 0,2 \rho^{*5} \left[ 6E_7 + 7E_{12} T^{*-1} \right] + E_8 \left[ 3 - (3 + 0,5 E_4 \rho^{*2} \right. \\ & \left. - E_4^2 \rho^{*4}) \exp(-4 \rho^{*2}) \right] E_4^{-1} T^{*-2} \end{aligned} \quad (4.36)$$

burada H akışkanın entalpisi ve H\* akışkanın sistem sıcaklığındaki ideal-gaz-hal entalpisidir. Entalpiyi elde etmek için ideal-gaz entalpisi hesaplanmalıdır.

Entropi için :

$$\begin{aligned} \frac{S-S^*}{R} = - \ln & \left[ \rho^* RT^* E_x/k \sigma_x^3 \right] \\ & - \rho^* \left[ E_1 + 2E_3 T^{*-3} - 3E_9 T^{*-4} + 4E_{11} T^{*-5} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - 0,5 \rho^{*2} \left[ E_5 + E_{10} T^{*-2} \right] + 0,2 E_{12} \rho^{*5} T^{*-2} \\ & + 2E_B \left[ 1 - (1 + 0,5 E_4 \rho^{*2}) \exp(-E_4 \rho^{*2}) \right] E_4^{-1} T^{*-3} \end{aligned} \quad (4.37)$$

burada S akışkanın entropisi ve S\* akışkanın sistem sıcaklığı ve birim basıncındaki (1 atm, 1 kPa, vb..) ideal-gaz entropisidir.

Yukarıdaki korelasyonların kullanımı,  $\epsilon$  (veya  $T_c$ ),  $\sigma$  (veya  $\rho_c$ ) ve  $\chi$  karakterizasyon parametrelerinin bilinmesini gerektirir.

$E_i$  katsayıları (19) şu bağıntıdan hesaplanır :

$$E_i = a_i + \chi b_i \quad (4.38)$$

$a_i$  ve  $b_i$  evrensel sabitlerdir. Benedict-Webb-Rubin yönelme (orientation) parametresi ( $\chi$ ) ise şu şekilde hesaplanır (19) :

$$\begin{aligned} \chi & = 333,333 + 151,244 (T_c/T_b) - 519,84 (T_b/T_c) \\ & + 38,9063 (T_b/T_c)^4 + 1255,01 \log (T_b/T_c) \end{aligned} \quad (4.39)$$

Yukarıdaki bağıntılarda yeralan  $\rho^*$ ,  $T^*$ ,  $\epsilon/k$  ve  $\sigma$  değerleri ise şöyle hesaplanırlar :

$$\rho^* = 0,3189 \rho / \rho_c \quad (4.40)$$

$$T^* = 1,2593 T / T_c \quad (4.41)$$

$$\epsilon/k = T_c / 1,2593 \quad (4.42)$$

$$\sigma^3 = 0,3189 / \rho_c \quad (4.43)$$

Entalpi farkı için ortalama mutlak sapma yüzde 2,3'tür.

TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN HESAPLAMASI  
YILLIK İZLENİMLERİ

## 5. BİLEŞİMİ BELİRLİ SENTETİK YAKIT KARIŞIMLARININ TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİNDE KULLANILAN KORELASYONLAR

En sonunda, bileşimi belirli sentetik yakıt karışımlarının termodinamik özelliklerini hesaplayan korelasyonlara yer verilmektedir. Bu korelasyonlar, bütün sivilere uygulanabilir niteliktedir. Korelasyonların seçilmesinde Reid'den (23) yararlanılmaktadır. Bilgisayar programında kestirimi yapılan bileşimli belirli sentetik yakıt karışımlarının ait termodinamik özellikler ve ilgili özellikleri Çizelge 5.1.'de verilmiştir.

### 5.1. KALIN HADİM

#### 5. BİLEŞİMİ BELİRLİ SENTETİK YAKIT KARIŞIMLARININ

#### TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİNDE

#### KULLANILAN KORELASYONLAR

Durum  $v_{ij}$  karışım sıcaklığında  $v_{ij}$  için  $v_{ij}$  olarak kabul edilmektedir.

## 5. BİLEŞİMİ BELİRLİ SENTETİK YAKIT KARIŞIMLARININ TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİNDE KULLANILAN KORELASYONLAR

Bu bölümde, bileşimi belirli sentetik yakıt karışımlarının ter-  
mofiziksel özelliklerini hesaplayan korelasyonlara yer verilmiştir.  
Bu korelasyonlar, bütün sıvılara uygulanabilir niteliktedir. Korelas-  
yonların seçiminde Reid'den (23) yararlanılmıştır. Bilgisayar progra-  
mında kestirimi yapılan bileşimi belirli sentetik yakıt karışımlarına  
ait termofiziksel özellikler ve ilgili denklemleri Çizelge 5.1.'de  
verilmiştir.

### 5.1. MOLAR HACİM

Büyük oranda farklılık göstermeyen bileşenleri içeren sıvı kari-  
şımları için, normal basınçlarda Amagat kanununu (23) kabul etmek  
çoğunlukla iyi bir kuraldır,

$$LMV_m = \sum_j \chi_j LMV_j \quad (5.1)$$

burada  $V_j$ , karışım sıcaklığındaki saf sıvı j'nin molar hacmini gös-  
termektedir.

5.2. KRİTİK SICAKLIK

Çizelge 5.1. Bileşimi Belirli Sentetik Yakıt Karışımlarının Bilgisayar Programında Kestirimi Yapılan Termofiziksel Özellikleri ve İlgili Denklemleri

No	Özellik	Denklem
1	Molar hacim	5.1
2	Kritik sıcaklık	5.2
3	Kritik hacim ve yoğunluk	5.5
4	Kritik basınç	5.6
5	Kritik sıkıştırma faktörü	5.7
6	Merkezsizlik faktörü	5.8
7	Viskozite	5.10
8	Isıl iletkenlik	5.11
9	Yüzey gerilimi	5.14
10	Isı sığası	5.16
11	Difüzyon katsayısı	5.17

5.3. KRİTİK HACİM VE YOĞUNLUK

May Kırılı (23)

$$\frac{1}{\rho_{cm}} = v_{cm} = \sum_{j=1}^n x_j v_{cj}$$

(5.5)

## 5.2. KRİTİK SICAKLIK

Chueh-Prausnitz yöntemi (23) :

$$T_{cm} = \sum_i \sum_j \varnothing_i \varnothing_j T_{cij} \quad (5.2)$$

burada  $\varnothing_i$ ,

$$\varnothing_i = \frac{\alpha_i V_{ci}}{\sum_j \alpha_j V_{cj}} \quad (5.3)$$

olarak tanımlanan bir hacim fraksiyonudur, ve

$$T_{cij} = (1 - k_{ij})(T_{ci} T_{cj})^{1/2} \quad (5.4)$$

$k_{ij}$  bir ikili etkileşim parametresidir; normalde 0-0,2 arasındadır.

## 5.3. KRİTİK HACİM VE YOĞUNLUK

Kay kuralı (23) :

$$\frac{1}{\rho_{cm}} = V_{cm} = \sum_j \alpha_j V_{cj} \quad (5.5)$$

#### 5.4. KRİTİK BASINÇ

Kay kuralı (23) :

$$P_{cm} = \sum_j \alpha_j P_{cj} \quad (5.6)$$

#### 5.5. KRİTİK SIKIŞTIRMA FAKTÖRÜ

Kay kuralı (23) :

$$Z_{cm} = \sum_j \alpha_j Z_{cj} \quad (5.7)$$

#### 5.6. MERKEZSİZLİK FAKTÖRÜ

Kay kuralı (23) :

$$w_m = \sum_j \alpha_j w_j \quad (5.8)$$

#### 5.7. VİSKOZİTE

Sıvı karışımlarının viskoziteleri genellikle şu şekillerde ifade edilirler (23) :

$$f(\eta_m) = \sum_i \sum_j \alpha_i \alpha_j f(\eta_{ij}) \quad (5.9)$$

veya

$$f(\eta_m) = \sum_j \chi_j f(\eta_j) \quad (5.10)$$

Bu bağıntılarda  $f(\eta)$ ;  $\eta$ ,  $\ln \eta$  veya  $1/\eta$  şeklinde olabilir ve  $\chi_j$  sıvının hacim, ağırlık veya mol fraksiyonu olabilir. Ancak,  $f(\eta)$  için  $\ln \eta$  ve  $X$  = mol fraksiyonu tercih edilir.

### 5.8. ISIL İLETKENLİK

Sıvı karışımları için, Reid (23) ve API (1) Li yöntemini önermişlerdir :

$$k_{T,m} = \sum_i \sum_j \phi_i \phi_j k_{T,ij} \quad (5.11)$$

burada

$$k_{T,ij} = 2(k_{T,i}^{-1} + k_{T,j}^{-1})^{-1} \quad (5.12)$$

$$\phi_i = \frac{\chi_i \cdot LMV_i}{\sum_j \chi_j \cdot LMV_j} \quad (5.13)$$

## 5.9. YÜZEY GERİLİMİ

Bir sıvı karışımının yüzey gerilimi, saf bileşenlerin yüzey gerilimlerinin basit bir fonksiyonu değildir çünkü bir karışımın yüzey bileşimi karışımın bileşimi ile aynı değildir. Karışımın bileşimi bilinse de yüzey bileşimi pek bilinemez.

Bir karışımın yüzey gerilimi ( $\sigma_m$ ), genellikle saf bileşenlerin mol fraksiyonu ortalamalı yüzey gerilimlerinden daha düşüktür.

$\sigma_m$ 'in hesaplanması için önerilen yöntemler ikiye ayrılır : a) saf sıvılar için önerilen ampirik korelasyonları temel alanlar, b) termodinamikten türetilenler.

Sulu olmayan karışımların yüzey gerilimi :

Karşılıklı-haller yöntemi (23) :

$$\sigma_m = P_{cm}^{2/3} T_{cm}^{1/3} \Theta (1 - T_{rm})^{11/9} \quad (5.14)$$

burada

$$\Theta = 0,1207 \left( 1 + \frac{T_{brm} \ln P_{cm}}{1 - T_{brm}} \right) - 0,281 \quad (5.15)$$

Hatalar genellikle yüzde 5-10'dan daha azdır.

### 5.10. ISI SIĞASI

$$C_{pm} = \sum_j \chi_j C_{pj} \quad (5.16)$$

### 5.11. DİFÜZYON KATSAYISI

Çözünen A ve çözücü B'nin ikili karışımı için, A'nın B içindeki sonsuz seyreltik çözeltisi içinde A'nın difüzyonuna ait difüzyon katsayısı  $D_{AB}$ , her A molekülünün aslında B'nin oluşturduğu bir çevre içinde bulunduğunu ifade eder. Mühendislikte, bununla beraber,  $D_{AB}$ 'nin, A'nın mol yüzdesinin 5, belki hatta 10 olduğu konsantrasyonlara kadar difüzyon katsayısını temsil ettiği varsayılır.

$D_{AB}$  için oldukça geniş kullanılan korelasyon, özünde Stokes-Einstein bağıntısının ampirik bir düzenlemesi olan Wilke-Chang korelasyonudur :

$$D_{AB} = 7,4 \times 10^{-10} \frac{(\phi M_B)^{1/2} T}{\eta_B \cdot LMV_{BA}^{0.6}} \quad (5.17)$$

$D_{AB}$  = çözünen A'nın çok düşük konsantrasyonlarda çözücü B içindeki karşılıklı difüzyon katsayısı

$M_B$  = çözücü B'nin molekül ağırlığı

$\eta_B$  = çözücü B'nin viskozitesi

$LMV_{BA}$  = çözünen A'nın kaynama noktasındaki molar hacmi

$\phi$  = çözücü B'nin birleşme faktörü, birimsiz

$LMV_{bA}$ 'nin deęeri Denklem (4.8)'den hesaplanabilir.  $\emptyset$ 'nin deęeri çözücü su ise 2,6, metanol ise 1,9, etanol ise 1,5 ve dięer çözücüler durumunda 1,0 alınmalıdır.

Wilke ve Chang (23), 251 çözünen-çözücü sistemini test etmişler ve ortalama hatayı yaklaşık yüzde 10 olarak bulmuşlardır.

## 6. GELİŞTİRİLEN BİLGİSAYAR PROGRAMININ İÇERİĞİ

(SYNTHRMFZ)

Geliştirilen program, bilgisayar ekranında görüleceği üzere, sentetik yakıtların şu üç durumu için hesaplama yapar :

- 1) FAKSİYONLARIN TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİ
- 2) SAĞ SENTETİK YAKITLARA AİT VERİLER VE TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİ
- 3) BİLEŞİMİ BELİMLİ SENTETİK YAKIT KARİŞİMLERİNİN TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİ

Bu üç durumda bir termo fiziksel konutun yanına yazılır :

## 6. GELİŞTİRİLEN BİLGİSAYAR PROGRAMININ İÇERİĞİ

(SYNTHRMFZ)

a) Funksiyonların termo fiziksel özellikleri hesaplamak isteniyorsa "1" tuşuna basılır ve,

Özellikleri hesaplamak istendiğinde Sıcaklığı Giriniz (K) :

İhtiyaçta Kaynakları Giriniz (K) :

soruları cevaplandırılır. Daha sonra, diğer özelliklerin hesaplanmasında değişken olarak verilen çeşitli özelliklere ait verilerin bilinip bilinmediği sorulmaktadır :

## 6. GELİŞTİRİLEN BİLGİSAYAR PROGRAMININ İÇERİĞİ

(SYNTHRMFZ)

Geliştirilen program, bilgisayar ekranında görüleceği üzere, sentetik yakıtların şu üç durumu için hesaplama yapar :

- 1) FRAKSİYONLARIN TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİ
- 2) SAF SENTETİK YAKITLARA AİT VERİLER VE TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİ
- 3) BİLEŞİMİ BELİRLİ SENTETİK YAKIT KARIŞIMLARININ TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİ

Bu üç durumdan bir tanesi aşağıdaki komutun yanına yazılır :

SEÇİM NO :

a) Fraksiyonların termofiziksel özellikleri hesaplanmak isteniyorsa "1" tuşuna basılır ve,

Özellikleri Hesaplamak İsteddiğiniz Sıcaklığı Giriniz (K) :

Ortalama Kaynama Noktasını Giriniz (K) :

soruları cevaplandırılır. Daha sonra, diğer özelliklerin hesaplanmasında değişken olarak yeralan çeşitli özelliklere ait verilerin bilinip bilinmediği cevaplandırılır :

Üzgül Ağırlığı Biliyorsunuz (E/H) ? :

Kritik Sıcaklığı Biliyorsunuz (E/H) ? :

Kritik Basıncı Biliyorsunuz (E/H) ? :

Kritik Hacmi Biliyorsunuz (E/H) ? :

Merkezsizlik Faktörünü Biliyorsunuz (E/H) ? :

Molekül Ağırlığını Biliyorsunuz (E/H) ? :

Yoğunluğu Biliyorsunuz (E/H) ? :  $\text{cm}^3/\text{g}$

Bunlara ait veriler biliniyorsa programa girilir ve diğer özelliklerin hesaplanmasında bu veriler kullanılır; bilinmiyorsa, bunlar hesaplanır ve diğer özelliklerin hesaplanmasında kullanılırlar. Böylece, yalnızca fraksiyonun ortalama kaynama noktasının bilinmesi ile aşağıdaki bütün özellikler hesaplanabilmektedir :

Üzgül Ağırlık	SG	:
Molekül Ağırlığı	M	:
Kritik Sıcaklık	$T_c$	K :
Kritik Basıncı	$P_c$	atm :
Kritik Hacim	$V_c$	$\text{cm}^3/\text{gmol}$ :
Merkezsizlik faktörü	w	:
Watson Karakterizasyon F.	$K_w$	:
Molar Hacim	LMV	$\text{cm}^3/\text{gmol}$ :
İdeal-Gaz Isı Sığası	$C_p^*$	J/g K :
Isı Sığası	$C_p$	J/g K :
Isıl iletkenlik	k	J/cm s K :

Buharlařma Isısı	$dH_{VT}$	$\text{kJ/gmol}$	:
Yüzey Gerilimi	$\sigma$	$\text{dyn/cm}$	:
Yoğunluk	$\rho$	$\text{g/cm}^3$	:
Kritik Sıkıřtırma Fak.	$Z_c$		:
Buhar basıncı	$P$	$\text{atm}$	:
Dipol Momenti	$\mu$	$D$	:
Viskozite	$\nu$	$\text{cm}^2/\text{s}$	:
Kırılma İndisi	$n$		:
Çözünürlük Parametresi	$\delta$	$(\text{J/cm}^3)^{1/2}$	:

Bunlarla birlikte, belirtilen bazı verilerin bilinmesi ile ařa-  
ğıdaki özellikler de hesaplanır :

Aromatikliğin hesaplanması için H/C yüzde ağı. oranını (kuru  
bazda) giriniz :

Aromatiklik  $f_a$  :

Difüzyon katsayısının hesaplanması için çözünen (1) ve çözücünün  
(2) merkezsizlik faktörlerini ve çözücünün viskozitesini ( $\text{g/cm s}$ )

sırayla giriniz :

Difüzyon katsayısı  $D_{12}$   $\text{cm}^2/\text{s}$  :

Yanma ısısının hesaplanması için C,H,S,N,O ağırlık yüzdelerini

sırayla giriniz : - - - -

Yanma ısısı  $dH_c$   $\text{kJ/g}$  :

Çizelge 6.1. Yeni Madde (SYNBASE) Verilen Termofiziksel Özellikler

Oluşum ısısının hesaplanması için C,H,S ağırlık yüzdelerini ve sıvıyı ideal-gaz haline buharlaştırmak için gereken ısı miktarını  $H^* - H^L$  (kJ/g) sırayla giriniz : - - -

Oluşum ısısı  $dH_f^0$  kJ/g :

Böylece fraksiyonların termofiziksel özellikleri hesaplanmış olur.

b) Programın, saf sentetik yakıtlara ait veriler ve termofiziksel özelliklerinin kestirimi kısmına geçilmek isteniyorsa SEÇİM NO : komutu için "2" tuşuna basılır. Bu kısım dört bölümden oluşur :

- 1) SYNBASE
- 2) YENİ MADDE KAYIT ETME
- 3) KAYITLI MADDE LİSTESİ
- 4) TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİ HESAPLAMA
- 0) PROGRAM BİTİRME

Bu durumlardan bir tanesi aşağıdaki komutun yanına yazılır :

SEÇİM NO :

SYNBASE bölümünde 291 adet saf sentetik yakıt bileşiği için Çizelge 6.1.'de verilen termofiziksel özelliklere ait veriler mevcuttur (43,44,45,23).

YENİ MADDE KAYIT ETME bölümü, SYNBASE bölümüne yeni madde verilerinin kayıt edilmesi için kullanılır; bunun için yeni maddenin kayıt numarası ile adını girmek ve ardından her özelliğe ait verileri belirtilen birimlerde girmek gerekmektedir, olmayan veriler için 'YOK' yazılır.

Çizelge 6.1. Veri Bankasında (SYNBASE) Yeralan Termofiziksel Özellikler

Molekül ağırlığı

Kritik yoğunluk

Kritik hacim

Kritik basınç

Kritik sıcaklık

Yoğunluk (293,15 K'de)

Kaynama noktası

Donma noktası

Merkezsizlik faktörü

Kırılma indisi (293,15 K'de)

Yüzey gerilimi (293,15 K'de)

Dielektrik sabiti (293,15 K'de)

Dipol momenti

Kritik sıkıştırma faktörü

İdeal-gaz ısı sığası sabiti A

İdeal-gaz ısı sığası sabiti B

İdeal-gaz ısı sığası sabiti C

İdeal-gaz ısı sığası sabiti D

Viskozite sabiti B

Viskozite sabiti  $T_0$

Standart oluşum entalpisi

Standart oluşum Gibbs enerjisi

Buharlaştırma ısısı

Çözünürlük parametresi

Çizelge 6.1. Veri Bankasında (SYNBASE) Yeralan Termofiziksel Özellikler

Molekül ağırlığı

Kritik yoğunluk

Kritik hacim

Kritik basınç

Kritik sıcaklık

Yoğunluk (293,15 K'de)

Kaynama noktası

Donma noktası

Merkezsizlik faktörü

Kırılma indisi (293,15 K'de)

Yüzey gerilimi (293,15 K'de)

Dielektrik sabiti (293,15 K'de)

Dipol momenti

Kritik sıkıştırma faktörü

İdeal-gaz ısı sığası sabiti A

İdeal-gaz ısı sığası sabiti B

İdeal-gaz ısı sığası sabiti C

İdeal-gaz ısı sığası sabiti D

Viskozite sabiti B

Viskozite sabiti  $T_0$

Standart oluşum entalpisi

Standart oluşum Gibbs enerjisi

Buharlaştırma ısısı

Çözünürlük parametresi

KAYITLI MADDE LİSTESİ bölümünde, SYNBASE'de yer alan maddelerin listesi mevcuttur.

TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİ HESAPLAMA bölümü, SYNBASE'de yer alan maddelerin termofiziksel özelliklerinin hesaplanması için kullanılır. Bunun için "4" tuşuna basıldıktan sonra, özellikleri hesaplanmak istenen maddenin adı, KAYITLI MADDE LİSTESİ'nde yer aldığı şekilde yazılır :

MADDE ADI :  
Daha sonra ekranda o maddeye ait Çizelge 6.1.'de verilen özellikler yer alır. Eğer, Çizelge 4.1.'de verilen özellikler hesaplanmak isteniyorsa,

#### OLMAYAN ÖZELLİKLERİ VE DİĞER ÖZELLİKLERİ HESAPLAMAK İÇİN

$T_c, P_c, V_c$  ve  $T_b$ 'nin hepsine ait değerler varsa H, herhangi birine ait değer yoksa E tuşuna basınız. (E/H) :

sorusu şu şekilde cevaplandırılmalıdır : i) eğer  $T_c, P_c, V_c$  ve  $T_b$  değerlerinden herhangi birisi veya hepsi yoksa "E" tuşuna basılır. Bu durumda ekranda, bu değerlerin grup-katkı yöntemi ile hesaplanması için, kimyasal gruplar yer alır ve her grubun altına bileşikte bulunan sayısı yazılır; olmayan gruplar için 0 yazılır. Ardından şu sorular cevaplandırılır :

- Elinizde  $P_c$  değeri var mı (E/H) ? :  
Elinizde  $V_c$  değeri var mı (E/H) ? :  
Elinizde  $T_b$  değeri var mı (E/H) ? :

Elinizde  $T_c$  değeri var mı (E/H) ? :  
Elinizde  $Z_c$  değeri var mı (E/H) ? :  
Elinizde  $w$  değeri var mı (E/H) ? :  
Elinizde LMV değeri var mı (E/H) ? :

Eğer, diğer özelliklerin hesaplanmasında değişken olarak yer alan bu özelliklerin verileri biliniyorsa programa girilir; bilinmiyorsa program bunları hesaplar; ii) Eğer  $T_c, P_c, V_c$  ve  $T_b$  değerlerinin hepsi mevcutsa "H" tuşuna basılır (bu durumda "E" tuşuna basılırsa, sadece, grup-katkı yöntemi ile kullanılmayacak olan gereksiz bir hesaplama yapılır). Bundan sonraki işlem sırası şöyledir :

Molekül Ağırlığı,  $M$  :  
Kritik Basınç,  $P$  atm :  
Kritik Hacim,  $V_c$   $cm^3/gmol$  :  
Kaynama Noktası  $T_b$  K :  
Kritik Sıcaklık,  $T_c$  K :  
Kritik Sıkıştırma Fak.,  $Z_c$  :  
Merkezsizlik Faktörü,  $w$  :  
Buharlaştırma Entropisi,  $dSV_b$  J/gmolK :  
Molar Hacim LMV  $cm^3/gmol$  :

Buhar basıncı, buharlaşma ısısı, yoğunluk, yüzey gerilimi, ısı iletkenlik, entropi farkı, entalpi farkı, viskozite, ısı iletkenlik, çözünürlük parametresi ve ısı sığasının hesaplanması için

Isıl İletken SICAKLIĞI VERİNİZ (K) : n, özgül ağırlık değeri biliniyorsa program verilir; bilinmiyorsa varsa veri bankasındaki yoğunluktan yararlanılır; yoksa ısıl iletkenlik hesaplanamaz.

Buhar Basıncı,	P	atm	:
Buharlaştırma Isısı,		kJ/gmol	: , < 0,75
Yoğunluk	$\rho$	gmol/cm <sup>3</sup>	:
Entropi Farkı	S-S*	J/gmol-K	:
Entalpi Farkı	H-H*	J/gmol	:
Çözünürlük Parametresi	$\delta$	(J/cm <sup>3</sup> ) <sup>1/2</sup>	:
Isıl İletkenlik	$k_T$	J/cm s K	:
Yüzey Gerilimi	$\sigma$	dyn/cm	:
Viskozite	$\eta$	g/cm s	:
Entropi	S	J/mol-karbon K	:
Isı Sığası	$C_p$	J/gmol	:

Yukarıdaki özelliklerin her olasılıkta hesaplanabilmesi için program, aşağıdaki şekilde düzenlenmiştir :

- Yoğunluğun hesaplanması için, varsa veri bankasındaki referans yoğunluk kullanılır; yoksa, eğer bu değer biliniyorsa programa verilir, bilinmiyorsa yoğunluk hesaplanamaz.

- Yoğunluk hesaplanamıyorsa entropi farkı, entalpi farkı ve çözünürlük parametresi de hesaplanamaz.

- Yüzey gerilimi, bileşik hidrojen bağı ile sonlanıyorsa grup-katkı yöntemi ile, değilse korelasyon ile hesaplanır.

- Isıl iletkenliğinin hesaplanması için, özgül ağırlık değeri biliniyorsa programa verilir; bilinmiyorsa varsa veri bankasındaki yoğunluktan yararlanılır; yoksa ısı iletkenlik hesaplanamaz.

- Viskozite,  $T_r > 0,75$  için korelasyon ile hesaplanır.  $T_r < 0,75$  için ise varsa veri bankasındaki; yoksa programa verilmesi gereken sabitler kullanılarak hesaplanır; aksi durumda hesaplanamaz.

-İdeal-gaz ısı sığası, varsa veri bankasındaki; yoksa programa verilmesi gereken sabitler kullanılarak hesaplanır; aksi durumda hesaplanamaz.

- Çözünürlük parametresi, varsa bu özelliğin veri bankasındaki referans değerinden hesaplanır; yoksa özelliğin genel tanımından yararlanılarak buharlaşma ısısının kullanılması ile hesaplanır.

-Isı sığası, grup-katkı yöntemi ile hesaplanır.

Bu hususların da dikkate alınmasıyla saf sentetik yakıtlara ait termofiziksel özellikler hesaplanmış olur.

c) Sentetik yakıt karışımlarının termofiziksel özellikleri hesaplanmak isteniyorsa SEÇİM NO: komutu için "3" tuşuna basılır ve sırayla aşağıdaki sorular cevaplandırılır :

Bileşen sayısı :

1. Bileşenin mol kesri :
1. Bileşenin molar hacmi  $\text{cm}^3/\text{gmol}$  :
1. Bileşenin kritik hacmi  $\text{cm}^3/\text{gmol}$  :
1. Bileşenin kritik basıncı atm :
1. Bileşenin kritik sıkıştırma faktörü :
1. Bileşenin merkezizlik faktörü :
1. Bileşenin ısı sığası  $\text{J/gmol K}$  :
1. Bileşenin ısı iletkenliği  $\text{J/cm s K}$  :
1. Bileşenin kritik sıcaklığı  $\text{K}$  :
1. Bileşenin viskozitesi  $\text{g/cm s}$

Bu işlem, her bileşen için tekrarlanır. Bundan sonra ekranda, karışımın bu özelliklerinin hesaplanmış değerleri yeralır. Daha sonra, yüzey geriliminin hesaplanması için, sıcaklık ve karışımın kaynama noktası programa verilir. Difüzyon katsayısının hesaplanması için ise, çözücünün molekül ağırlığı ve viskozitesi ile çözünenin kaynama noktasındaki molar hacmi programa verilir.

## 7. SONUÇ VE ÖNERİLER

Geliştirilen bu paket program (SYNTHESIS), sentetik yakıtların termodinamik özelliklerinin nihaiye girdi ve çıkışlı bir şekilde araştırılmaması Turbo Pascal dilinde hazırlanmıştır; basit ve kolay anlaşılır bir yapıya sahiptir.

Program, sadece kayma noktasının bilirmesi ile frekansların 20 özelliğini (bir kayma noktasının bilirmesi ile özellik sayısı 24'e çıkarılmaktadır), moleküler yapının bilirmesi ile saf sentetik yakıtların 20 özelliğini ve bileşen özelliklerinin bilirmesi ile de sentetik yakıt karışımlarının 11 özelliğini hesaplamaktadır. Sonuçta, bu üç değişik durum için 55 termodinamik özellik için ve güvenilir bir şekilde hesaplanmaktadır.

## 7. SONUÇ VE ÖNERİLER

Programda, 291 saf sentetik yakıt için bir veri tabanı (SYNBASE) oluşturulmuştur. Bu veri tabanı yeni madde özelliklerinin eklenmesi ile geliştirildiği kadar genişletilebilir.

Programda yer alan korreksiyonlar değiştirilebilir veya program, yeni özelliklerin hesaplanması için korreksiyonlar eklenebilir.

Sonuç olarak, kapsamlı bir çalışmayı içeren ve araştırma, geliştirme, eğitim alanlarında çok yararlı olacak bir bilgisayar paket programı geliştirilmiştir.

## 7. SONUÇ VE ÖNERİLER

Geliştirilen bu paket program (SYNTHRMFZ), sentetik yakıtların termofiziksel özelliklerinin oldukça geniş ve dikkatli bir şekilde araştırılmasıyla Turbo Pascal dilinde hazırlanmıştır; basit ve kolay anlaşılır bir yapıya sahiptir.

Program, sadece kaynama noktasının bilinmesi ile fraksiyonların 20 özelliğini (bir kaç verinin daha bilinmesi ile özellik sayısı 24'e çıkmaktadır), molekül sel yapının bilinmesi ile saf sentetik yakıtların 20 özelliğini ve bileşen özelliklerinin bilinmesi ile de sentetik yakıt karışımlarının 11 özelliğini hesaplamaktadır. Sonuçta, bu üç değişik durum için 55 termofiziksel özellik akıcı ve güvenilir bir şekilde hesaplanmaktadır.

Programda, 291 saf sentetik yakıt için bir veri bankası (SYNBASE) oluşturulmuştur. Bu veri bankası, yeni madde verilerinin eklenmesi ile istenildiği kadar genişletilebilir.

Programda yeralan korelasyonlar değiştirilebilir veya programa, yeni özelliklerin hesaplanması için korelasyonlar eklenebilir.

Sonuç olarak, kapsamlı bir çalışmayı içeren ve araştırma, uygulama, eğitim alanlarında çok yararlı olabilecek bir bilgisayar paket programı geliştirilmiştir.

KAYNAKLAR

1. American Petroleum Institute, "Technical Data Book-Petroleum Refining", 4th Ed., API, Washington DC, 1983.
2. Hochman, J.M., "Synthetic Fuels : Are They Different ?", CHEMTECH, 12, 500, 1982.
3. Tsouopoulos, C.; Heidman, J.L.; Hwang, S.-C.; "Thermodynamic and Transport Properties of Coal Liquids", Wiley, 1986.
4. Dooley, J.E., Lanning, W.C., Thompson, C.J., "Characterization Data for Syncrudes and Their Implication for Refining", in M.L. Gorbaty and B.M. Harney (eds.), Refining of Synthetic Crudes, Advances in Chemistry Series, No.179, American Chemical Society, Washington DC, 1979.
5. Hipkin, H.G., Lin, T.C., Lu, K.C., "Survey of Design Data Needs for Refining Synthetic Crudes", American Petroleum Institute, Washington DC, December 1981.
6. Gray, J.A., "Selected Physical, Chemical and Thermodynamic Properties of Narrow Boiling Range Coal Liquids from the SRC-II Process", Report No.DOE/ET/10104-7, April 1981.

7. Gray, J.A., Brady, C.J., Cunningham, J.R., Freeman, J.R., Wilson, G.M., "Thermophysical Properties of Coal Liquids.1. Selected Physical, Chemical and Thermodynamic Properties of Narrow Boiling Range Coal Liquids", Ind.Eng.Chem.Process Design Dev., 22, 410, 1983.
8. Gray, J.A., Holder, C.D., "Selected Physical, Chemical and Thermodynamic Properties of Narrow Boiling Range Coal Liquids from the SRC-II Process", Supplementary Property Data, Report No. DOE/ET/10104-44, April, 1982.
9. Maxwell, J.B., "Data Book on Hydrocarbons", Van Nostrand, Princeton, NJ, 1950.
10. Green, L.E., "Chromatograph Gives Boiling Point", Hydrocarbon Processing, 55(5), 205, 1976.
11. Pannell, R.B., Sood, A., "Simulated Distillation of Coal Liquids", J.Chromat.Sci., 20, 433, 1982.
12. Holder, G.D., Gray, J.A., "Thermophysical Properties of Coal Liquids.2. Correlating Coal Liquid Densities", Ind.Eng.Chem.Process Des.Dev., 22, 424, 1983.
13. White, C.M., Perry, M.B., Schmidt, C.E., Douglas, L.J., "Relationship between Refractive Indices and Other Properties of Coal Hydrogenation Distillates", Energy-Fuels, 1, 99, 1987.

14. Kesler, M.G., Lee, B.I., "Improve Prediction of Enthalpy of Fractions", Hydrocarbon Processing, 53, 153, 1976.
15. Daubert, T.E., "Property Predictions" Hydrocarbon Processing, 107, March 1980.
16. Riazi, M.R., Daubert, T.E., "Simplify Property Predictions", Hydrocarbon Processing, 115, March 1980.
17. Newman, S.A., "Correlations Evaluated for Coal-Tar Liquids", Hydrocarbon Processing, 133, Dec. 1981.
18. Wilson, G.M., Johnston, G.H., Hwang, S.C., Tsonopoulos, C., "Volatility of Coal Liquids at High Temperatures and Pressures", Ind.Eng.Chem.Process Des.Dev., 20-1, 94, 1981.
19. Brule, M.R., Lin, C.T., Lee, L.L., Starling, K.E., "Multiparameter Corresponding-States Correlations of Coal-Fluid Thermodynamic Properties", AIChE J., 28-4, 616, 1982.
20. Twu, C.H., "An Internally Consistent Correlation for Predicting The Critical Properties and Molecular Weights of Petroleum and Coal-Tar Liquids", Fluid-Phase Equilibria, 16, 137, 1984.
21. Rao, V.K., Bardun, M.F., "Estimating The Molecular Weight of Petroleum Fractions", Ind.Eng.Chem.Process Des.Dev., 24, 498, 1985.

22. Rodgers, P.A., Creagh, A.L., Prange, M.M., Prausnitz, J.M., "Molecular Weight Distributions for Heavy Fossil Fuels from Gel-Permeation Chromatography and Characterization Data", Ind.Eng.Chem.Res., 26, 2312, 1987.
23. Reid, R.C., Prausnitz, J.M., Sherwood, T.K., "The Properties of Gases and Liquids", Third Ed., McGraw-Hill, 1977.
24. Roman, C.E., Luther, J.E., Wetzel, D.M., "Estimation of Properties of Coal Liquids", Energy Progress, 6-4, 235, 1986.
25. Nokay, R., "Estimate Petrochemical Properties", Chem Eng., 66(4), 147, 1959.
26. Watanasiri, S., Owens, V.H., Starling, K.E., "Correlations for Estimating Critical Constants, Acentric Factor, and Dipole Moment for Undefined Coal-Fluid Fractions", Ind.Eng.Chem.Process Des.Dev., 22, 294, 1985.
27. Gray, J.A., Holder, G.D., Brady, C.J., Cunningham, J.R., Freeman, J.R., Wilson, G.M., "Thermophysical Properties of Coal Liquids.3. Vapor Pressure and Heat of Vaporization of Narrow Boiling Coal Liquid Fractions", Ind.Eng.Chem. Process Des.Dev., 24, 97, 1985.
28. Taha, A.S., Turner, P.A., Rowland, B., "Calculation of Transport Properties of Mixtures for Synfuels Process Design", Ind.Eng.Chem. Process Des.Dev., 24, 344, 1985.

28. Allen, D.T., Behmanesh, N., Eatough, D.J., White, C.M., "Narrow-Boiling Distillates of Coal Liquefaction Products : 2.Heat Capacities", Fuel, Vol.67, 127, Jan.1988.
29. Rodgers, P.A., Creagh, A.L., Prausnitz, J.M., "Correlation of Liquid Heat Capacities for Fossil Fuels Using Characterization Data", Fuel, Vol.67, 134, Jan.1988.
30. Hwang, S.C., Tsonopoulos, C., Cunningham, J.R., Wilson, G.M., "Density, Viscosity, and Surface Tension of Coal Liquids at High Temperatures and Pressures", Ind.Eng.Chem.Process Des.Dev., 21, 127, 1982.
31. Abbott, M.M., Kaufmann, T.G., "Correlation of Orthobaric Kinematic Viscosities of Liquid n-Alkanes", Can.J.Chem.Eng., 48, 90, 1970.
32. Abbott, M.M., Kaufmann, T.G., Domash, L., "A Correlation for Predicting Liquid Viscosities of Petroleum Fractions", Can.J.Chem.Eng., 49, 379, 1971.
33. Baltatu, M.E., Ely, J.F., Hanley, H.J.M., "Thermal Conductivity of Coal-Derived Liquids and Petroleum Fractions", Ind.Eng.Chem.Process, 24, 325, 1985.
34. Teja, A.S., Thurner, P.A., Pasumarti, B., "Calculation of Transport Properties of Mixtures for Synfuels Process Design", Ind.Eng.Chem. Process Des.Dev., 24, 344, 1985.

35. Umesi, N.O., "Correlating Diffusion Coefficients in Dilute Liquid Mixtures", M.S.thesis, The Pennsylvania State University, May 1980.
36. Miknis, F.P., Sullivan, S., Mason, G., "Characterization of Interim Reference Shales", Western Research Institute, Laramie, Wyoming, March 1986.
37. Perry, R.H., Green, D., Perry's Chemical Engineering Handbook, Sixth Ed., McGraw-Hill, 1984.
38. Riazi, M.R., Faghri, A., "Thermal Conductivity of Liquid and Vapor Hydrocarbon Systems : Pentanes and Heavier at Low Pressures", Ind.Eng.Chem.Process Des.Dev., 24,398,1985.
39. Ikumi, S., Luo, C.D., Wen, C.Y., "A Method of Estimating Entropies of Coals and Coal Liquids", Can.J.Chem.Eng., Vol.60,551,1982.
40. Hoy, K.L., "New Values of the Solubility Parameters From Vapor Pressure Data", Journal of Paint Technology, Vol.42, No.541, Feb.1970.
41. Fedors, R.F., "A Method for Estimating Both the Solubility Parameters and Molar Volumes of Liquids", Polymer Engineering and Science, Vol.14,No.2, Feb.1974.

42. Brule, M.R., Lee, L.L., Starling, K.E., "Predicting Thermodynamic Properties for Fossil-Fuel Chemicals", Chemical Engineering, 19, 155, Nov. 1979.
  
43. Lin, C.T., Brule, M.R., Young, F.K., Lee, L.L., Starling, K.E., "Data Bank for Synthetic Fuels Part 1. Basic Data Needed for Predicting Properties of Coal-Derived Fluids", Hydrocarbon Processing, 229, May 1980.
  
44. Lin, C.T., Young, F.K., Brule, M.R., Lee, L.L., Starling, K.E., "Data Bank for Synthetic Fuels Part 2, Properties Constants for 161 One-and-Two-Ring Coal Chemicals", Hydrocarbon Processing, 117, August 1980.
  
45. Lin, C.T., Young, F.K., Brule, M.R., Lee, L.L., Starling, K.E., "Data Bank for Synthetic Fuels Part 3. Properties Constants for 137 More Coal Chemicals", Hydrocarbon Processing, 225, November 1980.



```

CONST
  MAXNUMBEROFPRODUCTS=500;
Type
  Tip1=Array1..70 Of Integer;
TYPE
  PRODUCTNAME=STRING250;
  PRODUCT=RECORD
    NAME:PRODUCTNAME;
    ITEMNUMBER: INTEGER;
    MW,ROD,VC,PC,TC,RO,TD,TF,w,n,SIG,DIE,MU,ZC,A,B,C,D,BO,TO
    ,DELHFO,DELOFO,DELHV,DELTA:string4150;
  END;
TYPE Seri=ARRAY1..200 OF REAL;
Var
  Bs: Integer;
  No: Tip1;
  Tw, Tbm, Tcm, Sgm, Mwm, Pcm, Vcm, wm, Kwm, LMwm, CpOm, Cplm, km, DHVTm, Sigam, Rom, Zcm,
  Pvm, Mum, Num, nm, Deltam, fam, Dabm, DHcm, DHfom: Real;
  Biris: Real;
  Cevap1, Cevap2, Cevap3: Char;
  SECIM: INTEGER;
  PRODUCTFILE: FILE OF PRODDUCT;
  PRODUCTREC: PRODUCT;
  I, PNR, MADDEND: INTEGER;
  ITEMNAME, ISTEENHADDE: PRODUCTNAME;
  MWA, ROCA, VCA, PCA, TCA, ROA, TBA, TFA, WA, NA, SIGA, DIEA, MUA, ZCA, AA, BA, CA,
  DA, BOA, TOA, DELHFOA, DELGFOA, DELHVA, DELTAA :string4150;
  HESAP, HESAP1, hesap2, HESAP4: CHAR;
  MW1, ROD1, VC1, PC1, TC1, RO1, TD1, TF1, w1, n1, SIG1, DIE1, MU1, ZC1, A1
  , B1, C1, D1, BO1, TO1, DELHFO1, DELGFO1, DELHV1, DELTA1, P1: REAL;
  MWAH, ROCAH, VCAH, PCAH, TCAH, ROAH, TFAH, WAH, NAH, SIGAH, DIEAH, MUAH, ZCAH,
  AAH, DAH, CAH, DAH, BOAH, TOAH, DELHFOAH, DELGFOAH, DELHVAH, DELTAAH, PAH, TBAH
  , LMVAH, DSVDAH, SD: REAL;
  n, KOD: integer;
  dv, dt, dp, T: Real;
  PT, DHVDT, ROT, SIGMAT, ETAYT, KT, SCBALT, ENTDEPT, ENTRODEPT, ETADT, CPAT,
  DELTAT, DELTADT, Cpt, sigmat, dr: REAL;
  x, LMVwz, Vcmz, ROCwz, Pcmz, Zcmz, wcz, Cpmz, kETAmz, ETAmz, FIOwz, LAMwz, Tcmz: Seri;
  LMVwk, Vcmk, ROCwk, Pcmk, Zcmk, wwk, Cpmk, kETAmk, ETAmk, LAMwk, Tcmk, TBwX, TX, SIGMAwk, B,
  F, M, T1, VIS, L, D12: REAL;
  I1, O, J: INTEGER;
  HESAP3: CHAR;
Function Ust(x, a: Real): Real;
Begin
  Ust:=Exp(a*Ln(abs(x)));
End;
Function Sgf(Tb: Real): Real;
Begin
  Sgf:=-0.144563+3.468548e-3*Tb-3.171165e-6*ust(Tb, 2)+1.144454E-9*ust(Tb, 3);
End;
Function MWf(Tb, Sg: Real): Real;
Begin
  MWf:=1.816717E-5*ust(Tb, 2.5497)*ust(Sg, -1.4002);
End;
Function Tcf(Tb, Sg: Real): Real;
Begin
  Tcf:=9.97*ust(Tb, 0.691)*ust(Sg, 0.249);
End;

```

```

Function Pf(Tb,Sg:Real):Real;
Begin
  Pf:=9.5632845E5*Ust(Tb,-1.65)*Ust(Sg,1.95);
End;

```

```

Function Vcf(Tb,Sg:Real):Real;
Begin
  Vcf:=4.93E-4*Ust(Tb,2.21)*Ust(Sg,-1.66);
End;

```

```

Function wf(Tb,Sg:Real):Real;
Begin
  wf:=7.01E-6*Ust(Tb,1.76)*Ust(Sg,-0.645);
End;

```

```

Function Kwf(Tb,Sg:Real):Real;
Begin
  Kwf:=1.2164*Ust(Tb,1/3)/Sg;
End;

```

```

Function LMVf(Tb,Sg:Real):Real;
Begin
  LMVf:=2.659365E-4*Ust(Tb,2.1262)*Ust(Sg,-1.8688);
End;

```

```

Function CpOf(T,Sg,Kw:Real):Real;
Var a,b,c,d,Cf:Real;
Begin
  If (Kw=10) and (Kw<=12.8) then
    Begin
      d:=(12.8/Kw-1)*(10.0/Kw-1)*100;
      Cf:=Ust(d,2);
    End
  Else
    Begin
      Cf:=0;
    End;
  a:=-0.32646+0.02678*Kw-Cf*(0.084773-0.080809*Sg);
  b:=-(1.3892-1.2122*Kw+0.0383*Ust(Kw,2)-Cf*(2.1773-2.0826*Sg))*1E-4;
  c:=-(1.5393+Cf*(0.78649-0.70423*Sg))*1E-7;
  CpOf:=4.1868*a+7.53624*b*T+13.565232*c*Ust(T,2);
End;

```

```

Function CpLf(T,Sg,Kw:Real):Real;
Begin
  CpLf:=4.1868*(0.06759+0.05638*Kw)*(0.6450-0.05959*Sg+(1.2892-0.5264*Sg)*(1.8*T-459.67)/1000);
End;

```

```

Function kf(T,Tc:Real):Real;
Begin
  kf:=5.35073E-4+1.017673E-3*Ust(1-T/Tc,2/3);
End;

```

```

Function DHVTf(T,Tc:Real):Real;
Begin
  DHVTf:=(0.08894*Tb-1.5)*Ust((Tc-T)/(Tc-Tb),0.375);
End;

```

```

Function Sigmaf(T,Tc,Pc:Real):Real;
Begin
  Sigmaf:=0.402941*Ust(1-T/Tc,0.4)*ust(Tc,1/3)*ust(Pc,2/3);
End;

```

```

Function Rof(T,Sg,Tc,w:Real):Real;
Begin

```

```

ROY:=(1+0.85*(1-1/Tc)+(1.6916+0.9846*w)*Ust(1-1/Tc,1/3)*0.447024*Sq/
(1+0.85*(1-288.7/Tc)+(1.6916+0.9846*w)*Ust(1-288.7/Tc,1/3));
End;

Function Zcf(Tc,Vc,Pc,Pr:Real):Real;
Begin
  Zcf:=Pc*Vc/(82.06*Tc);
End;

Function PVf(T,Tc,Pc,w:Real):Real;
Var a:Real;
Begin
  a:=5.671405-5.809837*Tc/T-0.867513*ln(T/Tc)+0.1383536*Ust(T/Tc,6)+
  w*(12.437804-12.755971*Tc/T-9.654169*ln(T/Tc)+0.316367*Ust(T/Tc,6));
  PVf:=Pc*exp(a);
End;

Function Muf(Tb,Tc,Vc,MW,w:Real):Real;
Var HWNP,u1,u2,u3,u4:Real;
Begin
  HWNP:=-10397.5+46.2681*Tb-1373.91*Ust(Tb,1/2)+4595.81*ln(Tb);
  u1:=(197.933/MW+0.039177*MW)*Vc/Tc;
  u2:=0.31835*1E-2*Vc+0.956247*1E-2*Tb-0.54790*1E-3*HWNP;
  u3:=-1.34634*w+0.906609*ln(w);
  u4:=-4.85638-0.013548*MW+0.271949*1E-3*Ust(MW,2)+1.04024*ln(MW);
  Muf:=(u1/u4)+(u2*u3)/100)*Ust(0.5804897*Tc*Vc,1/2);
End;

Function Nuf(T,Tc,Pc,MW,w,Zc:Real):Real;
Var Indro,Krin,Elen:Real;
Begin
  Indro:=1+0.85*(1-1/Tc)+(1.6916+0.9846*w)*ust(1-1/Tc,1/3);
  Krin:=2.657472E-4*ust(Tc,5/6)/ust(MW,1/2)*ust(Zc/Pc,1/3);
  Elen:=3.71104*ust(w,2)*(Indro-1)+10.25121-0.65882*w)*ust(Indro-1,7/2)+
  1.27195E-2*(exp(ust(Indro-1,2))-1)-2.411E-4*w*(exp(ust(Indro-1,5/2))-1)+
  2.33529E-7*ust(w,2)*(exp(ust(Indro-1,3))-1);
  Nuf:=Krin*exp(Elen);
End;

Function nf(Tb,MW,Ro:Real):Real;
Begin
  IF MW<=200 then
  Begin
    nf:=0.166*ust(Tb,0.5045)*ust(MW/Ro,-0.1814);
  End
  Else
  Begin
    nf:=0.127534*ust(Tb,0.5761)*ust(MW/Ro,-0.2182);
  End;
End;

Function Deltaf(Tb,Tc,MW,Ro:Real):Real;
Var Dentr:Real;
Begin
  Dentr:=(88.94*Tb-1500)/MW*ust((Tc-298.15)/(Tc-Tb),0.375);
  Deltaf:=ust(Dentr-2478.8191/MW)*Ro,1/2);
End;

Function faf(n:Real):Real;
Var HoranC:Real;
Begin
  write('Degeri VERIMIZ K/C : ');Readln(HoranC);
  faf:=5.243*ust(HoranC,-2.681)*ust(n,-3.6964);
End;

Function Dabf(T:Real):Real;

```

```

var L1AD,wa,wb:real;
Begin
  Write('Sirayla VERINIZ : ');
  Read(wa);Write('-');Read(wb);Write('-');
  Readln(ETAb);
  Dabf:=2.750859E-10*(T/ETAb)*((1+9.5*wb)/ust(1+9.5*wa,2/3));
End;

Function DHcf:Real;
Var C,H,S,N,O:Real;
Begin
  Write('Sirayla VERINIZ (C,H,S,N,O) : ');Read(C);
  Write('-');Read(H);Write('-');Read(S);Write('-');Read(N);Write('-');Readln(O);
  DHcf:=0.350622*C+1.14525*H+0.205349*S+0.061728*N-0.087266*O;
End;

Function DHfof(DHc:real):Real;
Var C,H,S,HstHL:Real;
Begin
  Write('Sirayla VERINIZ (C,H,S,ve Ho-H..kJ/g) : ');
  Read(C);Write('-');Read(H);Write('-');Read(S);Write('-');Readln(HstHL);
  DHfof:=0.327592*C+1.4178*H+0.187747*S+DHc-HstHL;
End;

FUNCTION PTF(PCAH,WAH,TCAH,T:REAL):REAL;
VAR FO,F1:REAL;
BEGIN
  FO:=5.92714-6.09648*TCAH/T-1.26862*LN(T/TCAH)+0.169347*UST((T/TCAH),6);
  F1:=15.2518-15.6875*TCAH/T-13.4721*LN(T/TCAH)+0.43577*UST((T/TCAH),6);
  PTF:=-PCAH*EXP(FO+WAH*F1);
END;

FUNCTION DHVBTF(T,TCAH,WAH:REAL):REAL;
VAR A,B:REAL;
BEGIN
  A:=0.05686312*UST((1-T/TCAH),0.354);
  B:=0.0910383*WAH*UST((1-T/TCAH),0.456);
  DHVBTF:=-TCAH*(A+B);
END;

FUNCTION ROTF(T,TCAH,WAH,R01:REAL):REAL;
VAR A1:REAL;
BEGIN
  A1:=UST(1-T/TCAH,2/7)-UST(1-293.15/TCAH,2/7);
  ROTF:=-R01/UST(0.29056-0.08775*WAH,A1);
END;

FUNCTION TBAHF(VCAH,PCAH,dT:REAL):REAL;
VAR BETA,TETA:REAL;
BEGIN
  TETA:=0.567*dT-UST(dT,2);
  BETA:=(UST(1-TETA,2/7)-0.048)*LN(VCAH)+UST(1-TETA,2/7)*LN(PCAH)+1.255/UST(1-TETA,2/7);
  TBAHF:=0.012186*TETA*EXP(BETA);
END;

FUNCTION SIGMATF(T,TCAH,PCAH,TBAH:REAL):REAL;
VAR B:REAL;
BEGIN
  B:=0.1207*(1+(TBAH/TCAH*LN(PCAH)/(1-TBAH/TCAH)))-0.281;
  SIGMATF:=-UST(PCAH,2/3)*UST(TCAH,1/3)*B*UST(1-T/TCAH,11/9);
END;

FUNCTION ETAYTF(T,TCAH,PCAH,WAH,MW1:REAL):REAL;
VAR A,B,C:REAL;
BEGIN

```

```

M:=(0.010174-0.02130*1/TCAH+0.0070*UST(1/TCAH,2));
B:=(0.042552-0.07674*T/TCAH+0.034*UST(T/TCAH,2))*WAH;
C:=(UST(TCAH,1/6)*UST(MW1,-1/2)*UST(PCAH,-2/3));
ETAYTF:=(A+B)/(100*C);
END;

```

```

FUNCTION KTF(MW1,T,TBAH,SG,R01:REAL):REAL;
BEGIN
KTF:=(7.44166E-6*UST(1.8*TBAH-459.67,0.2963)*UST(SG,0.5478)-1.929122E-4*UST(1.8*TBAH-459.67,0.2983)*UST(SG,0.0094))*
((1.8*T-459.67)/300)+1.929129E-4*UST(1.8*TBAH-459.67,0.2983)*UST(SG,0.0094);
END;

```

```

FUNCTION ENTDEPTF(T,TBAH,TCAH,VCAH,Rdtf:REAL):REAL;
VAR GAMA,EK1,EK2,EK3,EK4,EK5,EK6,EK7,EK8,EK9,EK10,EK11,EK12,IR,IT,REPSK,ENT,ENTRODEPTF:REAL;
BEGIN
GAMA:=333.333+151.244*TCAH/TBAH-519.841*TBAH/TCAH+38.9063*UST(TBAH/TCAH,4)+1255.01*LN(TBAH/TCAH)/2.303;
EK1:=1.45707+GAMA*0.32872;
EK2:=4.98813-GAMA*2.64379;
EK3:=2.20704+GAMA*11.3273;
EK4:=4.86121;
EK5:=4.59311+GAMA*2.79779;
EK6:=5.06707+GAMA*10.3901;
EK7:=11.4071+GAMA*10.373;
EK8:=9.22469+GAMA*20.5388;
EK9:=0.0094624+GAMA*2.7601;
EK10:=1.40858-GAMA*3.11349;
EK11:=0.015273+GAMA*0.18915;
EK12:=3.51486+GAMA*0.9426;
IR:=0.3189*Rdtf*VCAH;
IT:=1.2593*T/TCAH;
REPSK:=8.314*TCAH/1.2593;
ENT:=IR*(EK1*IT-2*EK2-4*EK3*UST(IT,-2)+5*EK9*UST(IT,-3)-6*EK11*UST(IT,-4))+
UST(IR,2)*(EK5*IT-1.5*EK6-2*EK10*UST(IT,-1))+0.2*UST(IR,5)*(6*EK7+7*EK12*UST(IT,-1))+
EK8*(3-(3+0.5*EK4*UST(IR,2)-UST(EK4,2))*UST(IR,4))*EXP(-EK4*UST(IR,2))*UST(EK4,-1)*UST(IT,-2);
ENTRODEPTF:=ENT*REPSK;

```

```

ENTRODEPTF:=-8.314*LN(IR*8.314*IT*TCAH/(0.40159*VCAH))-
8.314*IR*(EK1+2*EK3*UST(IT,-3)-3*EK9*UST(IT,-4)+4*EK11*UST(IT,-5))-
4.157*UST(IR,2)*(EK5+EK10*UST(IT,-2))+1.6628*EK12*UST(IR,5)*UST(IT,-2)+
16.628*EK8*(1-(1+0.5*EK4*UST(IR,2))*EXP(-EK4*UST(IR,2))*UST(EK4,-1)*UST(IT,-3));

```

```

writeln('ENTROPI FARKI.....S-Sd...J/gmdl K.... ',ENTRODEPTF:8:4);
END;

```

```

FUNCTION ETADTF(T,B01,T01:REAL):REAL;
BEGIN
ETADTF:=ust(10,B01*((1/T-1/T01))/100);
END;

```

```

FUNCTION CPOTF(T,AAH,BAH,CAH,DAH:REAL):REAL;
BEGIN
CPOTF:=4.1868*(AAH+BAH*T+CAH*UST(T,2)+DAH*UST(T,3));
END;

```

```

FUNCTION DELTATF(DELTA1,R01,ROT:REAL):REAL;
BEGIN
DELTATF:=2.04616*DELTA1*UST(ROT/R01,1.13);
END;

```

```

FUNCTION DELTABTF(T,DHVB,T,ROT:REAL):REAL;
BEGIN
DELTABTF:=UST((1000*DHVB-T-8.314*T)*ROT,1/2);
END;

```

```

FUNCTION CPF(T,A,B,C,D:REAL):REAL;
BEGIN

```



```

LINKLN;
REPEAT
WRITE('ENTER PRODUCT NUMBER(0=STOP)');READLN(PNR);
IF (PNR)=1) AND (PNR<=MAXNUMBEROFPRODUCTS) THEN
BEGIN
SEEK(PRODUCTFILE,PNR-1);READ(PRODUCTFILE,PRODUCTREC);
WITH PRODUCTREC DO
BEGIN
WRITE('ENTER NAME OF PRODUCT(' ,NAME,25,' ) ');
READLN(NAME);
WRITE('ENTER MOLEKUL AGIRLIGI.....MW..... : ');READLN(MW);
WRITE('ENTER KRITIK YOGUNLUK .....ROc...cm3/gmol. : ');READLN(ROc);
WRITE('ENTER KRITIK HACIM.....Vc ...cm3/gmol. : ');READLN(VC);
WRITE('ENTER KRITIK BASINC.....Pc.....atm..... : ');READLN(PC);
WRITE('ENTER KRITIK SICAKLIK.....Tc....K..... : ');READLN(TC);
WRITE('ENTER YOGUNLUK..(293 K.de).RO...gmol/cm3. : ');READLN(RO);
WRITE('ENTER KAYNAMA NOKTASI.....Tb....K..... : ');READLN(TB);
WRITE('ENTER DONMA NOKTASI.....Tf....K..... : ');READLN(TF);
WRITE('ENTER MERKEZSIZLIK FAKTORU.w..... : ');READLN(w);
WRITE('ENTER KIRILMA INDISI.....n.(293 K.de)... : ');READLN(n);
WRITE('ENTER YUZYEY GERILIMI(293 K.de)...dyn/cm... : ');READLN(SIG);
WRITE('ENTER DIELEKTRIK SABITI....D.(293 K.de)... : ');READLN(DIE);
WRITE('ENTER DIPOL MOMENTI .....Debye.... : ');READLN(MU);
WRITE('ENTER KRITIK SIKISTIRMA F..Zc..... : ');READLN(IC);
WRITE('ENTER IDEAL-GAZ ISI SIGASI SABITI..... A. : ');READLN(A);
WRITE('ENTER IDEAL-GAZ ISI SIGASI SABITI..... B. : ');READLN(B);
WRITE('ENTER IDEAL-GAZ ISI SIGASI SABITI..... C. : ');READLN(C);
WRITE('ENTER IDEAL-GAZ ISI SIGASI SABITI..... D. : ');READLN(D);
WRITE('ENTER VAN VELSEN VISKOZITE SABITI.....B. : ');READLN(BO);
WRITE('ENTER VAN VELZEN VISKOZITE SABITI.....TO. : ');READLN(TO);
WRITE('ENTER STANDART OLUSUM ENTALPISI.293 K.de(kcal/gmol) : ');READLN(DELHFO);
WRITE('ENTER ST. GIBBS OLUSUM ENERJISI.293 K.de(kcal/gmol) : ');READLN(DELGFO);
WRITE('ENTER BUHARLASMA ISISInormalKN.da....(cal/gmol).... : ');READLN(DELHV);
WRITE('ENTER COZUNURLUK PARAMET. 293 Kde (cal/cm3,1/2).... : ');READLN(DELTA);
ITEMNUMBER:=PNR;
END;
SEEK(PRODUCTFILE,PNR-1);
WRITE(PRODUCTFILE,PRODUCTREC);
CLASCR;WRITELN;
END;
UNTIL (PNR<1) OR (PNR>MAXNUMBEROFPRODUCTS);
CLOSE(PRODUCTFILE);
END;

```

```

PROCEDURE VERIARAMA;
BEGIN
I:=0;
ASSIGN(PRODUCTFILE,'PRODUCT.DTA');RESET(PRODUCTFILE);
WRITE('MADDE ISMI : ');READLN(ISTENENMADDE);
REPEAT
BEGIN
I:=I+1;
READ(PPRODUCTFILE,PRODUCTREC);
WITH PRODUCTREC DO
BEGIN
ITEMNAME:=NAME;
MADDEND:=ITEMNUMBER;
MWA:=MW;
ROCA:=ROc;
VCA:=VC;
PCA:=PC;
TCA:=TC;
ROA:=RO;
TBA:=TB;
TFA:=TF;

```

```

WA:=w;
nA:=n;
SIGA:=SIG;
DIEA:=DIE;
MUA:=MU;
ZCA:=ZC;
AA:=A;
BA:=B;
CA:=C;
DA:=D;
BOA:=BO;
TOA:=TO;
DELHFOA:=DELHFO;
DELSFOA:=DELSFO;
DELHVA:=DELHV;
DELTA:=DELTA;
END;
END;
UNTIL ITEMNAME=ISTENENHADDE;
WRITELN(MADDEND, ' ', ITEMNAME);
WRITELN('MOLEKUL AGIRLIGI.... MW..... : ',MWA);
WRITELN('KRITIK YOGUNLUK..... R0c...cm3/gmol : ',ROCA);
WRITELN('KRITIK HADIM.....Vc...cm3/gmol : ',VCA);
WRITELN('KRITIK BASINC.....Pc...atm..... : ',PCA);
WRITELN('KRITIK SICAKLIK.....Tc...K..... : ',TCA);
WRITELN('YOGUNLUK..(293 Kde)..R0...cm3/gmol : ',ROA);
WRITELN('KAYNAMA NOKTASI.....Tb...K..... : ',TBA);
WRITELN('DONMA NOKTASI.....Tf...K..... : ',TFA);
WRITELN('MERKEZSIZLIK FAKTORU.w..... : ',wA);
WRITELN('KIRILMA INDISI.....n.(293 Kde).. : ',nA);
WRITELN('YUZEY BERILIMI..(293 Kde).dyn/cm.. : ',SIGA);
WRITELN('DIELEKTRIK SABITI..(293 Kde)..... : ',DIEA);
WRITELN('DIPOL MOMENTI... (293 Kde)..... : ',MUA);
WRITELN('KRITIK SIKISTIRMA FAK..Zc..... : ',ZCA);
WRITELN('IDEAL-GAZ ISI SIGASI SABITI.....A : ',AA);
WRITELN('IDEAL-GAZ ISI SIGASI SABITI.....B : ',BA);
WRITELN('IDEAL-GAZ ISI SIGASI SABITI.....C : ',CA);
WRITELN('IDEAL-GAZ ISI SIGASI SABITI.....D : ',DA);
REPEAT UNTIL KEYPRESSED;
WRITELN('VAN VELZEN VIZKOZITE SABITI.....B : ',BOA);
WRITELN('VAN VELZEN VIZKOZITE SABITI.....T : ',TOA);
WRITELN('STANDART OLUSUM ENTALPISI 293 Kde (kcal/gmol).. : ',DELHFOA);
WRITELN('ST. OLUSUM GIBBS ENERJISI 293 Kde (kcal/gmol).. : ',DELSFOA);
WRITELN('BUHARLASMA ISISI normal KN.de.... (cal/gmol).. : ',DELHVA);
WRITELN('DOZUNURLUK PARAMETRESI 293 Kde ... (cal/cm3,1/2).. : ',DELTA);
GOTOXY(46,8);WRITE('*****');
GOTOXY(46,9);WRITE('*****');
GOTOXY(46,10);WRITE('***OLMAYAN OZELLIKLERI VE DIGER');
GOTOXY(46,11);WRITE('***OZELLIKLERI HESAPLAMAK ICIN');
GOTOXY(46,13);WRITE('***Pc,Tc,Vc ve Tb.nin hepsi varsa');
GOTOXY(46,14);WRITE('***H,herhangi biri yoksa E');
GOTOXY(46,15);WRITE('***tusuna basiniz (E/H) ? : ');
READ(KBD,HESAP);
IF HESAP='E' THEN
BEGIN
CLRSCL;
WRITELN('KRITIK OZELLIKLERIN VE KAYNAMA NOKTASININ GRUP-KATKI YONTENI');
WRITELN('ILE HESAPLANMASI');
WRITELN;
n:=0;dV:=0;dP:=0;dt:=0;
WRITELN('ASAGIDAKILER H a l k a O l m a y a n KATKILARDIR');
WRITELN;
WRITELN('DCH3 adedi : ');Read(n);
dt:=dt+0.02*n;dP:=dP+0.227*n;dV:=dV+55*n;
WRITELN;
WRITELN;

```

```
writeln('3');
writeln('DCH2 adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.02*n;dP:=dP+0.227*n;dV:=dV+55*n;
WRITELN;
WRITELN;
writeln('3');
writeln('DCH adedi:');
writeln('3');READ(n);
dt:=dt+0.012*n;dP:=dP+0.210*n;dV:=dV+51*n;
WRITELN;
WRITELN;
writeln('3');
writeln('DCD adedi:');
writeln('3');READ(n);
dt:=dt+0.00*n;dP:=dP+0.210*n;dV:=dV+41*n;
WRITELN;
WRITELN;
writeln('#CH2 adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.018*n;dP:=dP+0.198*n;dV:=dV+45*n;
WRITELN;
WRITELN;
writeln('3');
writeln('#CH adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.018*n;dP:=dP+0.198*n;dV:=dV+45*n;
WRITELN;
WRITELN;
writeln('3');
writeln('#CD adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.0*n;dP:=dP+0.198*n;dV:=dV+36*n;
WRITELN;
writeln('#CH adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.0*n;dP:=dP+0.198*n;dV:=dV+36*n;
WRITELN;
writeln('pCH adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.005*n;dP:=dP+0.153*n;dV:=dV+36*n;
WRITELN;
writeln('pCD adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.005*n;dP:=dP+0.153*n;dV:=dV+36*n;
WRITELN;
WRITELN('ASAGIDAKILER H a l k a KATKILARIDIR');
WRITELN;
writeln('DCH2D adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.013*n;dP:=dP+0.184*n;dV:=dV+44.5*n;
WRITELN;
WRITELN;
writeln('3');
writeln('DCH adedi:');
writeln('3');READ(n);
dt:=dt+0.012*n;dP:=dP+0.192*n;dV:=dV+46*n;
WRITELN;
WRITELN;
writeln('3');
writeln('DCD adedi:');
writeln('3');READ(n);
dt:=dt+(-0.007)*n;dP:=dP+0.154*n;dV:=dV+46*n;
WRITELN;
WRITELN;
writeln('3');
writeln('#CH adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.011*n;dP:=dP+0.154*n;dV:=dV+37*n;
WRITELN;
WRITELN;
writeln('3');
writeln('#CD adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.011*n;dP:=dP+0.154*n;dV:=dV+36*n;
WRITELN;
```

```

WRITELN;
WriteLn('MCH adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.011*n;dp:=dp+0.154*n;dV:=dV+36*n;
WRITELN;
WRITELN('ASAGIDAKILER H a l d j e n KATKILARIDIR');
WRITELN;
WriteLn('BF adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.018*n;dp:=dp+0.224*n;dV:=dV+18*n;
WRITELN;
WriteLn('BCI adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.017*n;dp:=dp+0.320*n;dV:=dV+49*n;
WRITELN;
WriteLn('BDr adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.010*n;dp:=dp+0.50*n;dV:=dV+70*n;
WRITELN;
WriteLn('DI adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.012*n;dp:=dp+0.83*n;dV:=dV+95*n;
WRITELN;
WRITELN('ASAGIDAKILER O k s i j e n KATKILARIDIR');
WRITELN;
WriteLn('DOH (alkoller) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.082*n;dp:=dp+0.06*n;dV:=dV+18*n;
WRITELN;
WriteLn('DOH (fenoller) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.031*n;dp:=dp+(-0.02)*n;dV:=dV+3*n;
WRITELN;
WriteLn('DOD (halkaolmayan) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.014*n;dp:=dp+0.16*n;dV:=dV+20*n;
WRITELN;
WriteLn('DOD (halka) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.014*n;dp:=dp+0.12*n;dV:=dV+8*n;
WRITELN;
WRITELN;
WriteLn('3');
WriteLn('DCMO (halkaolmayan) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.040*n;dp:=dp+0.29*n;dV:=dV+60*n;
WRITELN;
WRITELN;
WriteLn('3');
WriteLn('DCMD (halka) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.033*n;dp:=dp+0.2*n;dV:=dV+50*n;
WRITELN;
WRITELN;
WriteLn('3');
WriteLn('HCMD (aldehit) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.048*n;dp:=dp+0.33*n;dV:=dV+73*n;
WRITELN;
WRITELN;
WriteLn('DCOOH (asit) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.085*n;dp:=dp+0.4*n;dV:=dV+80*n;
WRITELN;
WriteLn('DCOOD (ester) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.087*n;dp:=dp+0.47*n;dV:=dV+80*n;
WRITELN;
WriteLn('MD (yukaridaki baglardan hari) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.02*n;dp:=dp+0.12*n;dV:=dV+11*n;
WRITELN;
WRITELN('ASAGIDAKILER A z o t KATKILARIDIR');
WRITELN;
WriteLn('DHH2 adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.031*n;dp:=dp+0.095*n;dV:=dV+28*n;
WRITELN;
WRITELN;
WriteLn('3');
WriteLn('DHH (halkaolmayan) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.031*n;dp:=dp+0.135*n;dV:=dV+37*n;

```

```

WRITELN;
WRITELN;
WriteIn(' 3');
WriteIn('DWH (halka) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.024*n;dp:=dp+0.07*n;dv:=dv+27*n;
WRITELN;
WRITELN;
WriteIn(' 3');
WriteIn('DND (halka) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.014*n;dp:=dp+0.17*n;dv:=dv+42*n;
WRITELN;
WRITELN;
WriteIn(' 3');
WriteIn('DND (halka) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.007*n;dp:=dp+0.13*n;dv:=dv+32*n;
WRITELN;
WriteIn('DCH adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.060*n;dp:=dp+0.36*n;dv:=dv+80*n;
WRITELN;
WriteIn('DND2 adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.055*n;dp:=dp+0.42*n;dv:=dv+78*n;
WRITELN;
WRITELN('ACAGIDAKILER K u k u r t KATKILARIDIR');
WRITELN;
WriteIn('DCH adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.015*n;dp:=dp+0.27*n;dv:=dv+55*n;
WRITELN;
WriteIn('DSB (halka) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.015*n;dp:=dp+0.27*n;dv:=dv+55*n;
WRITELN;
WriteIn('DSB (halka) adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.008*n;dp:=dp+0.24*n;
WRITELN;
WriteIn('MS adedi:');Read(n);
dt:=dt+0.003*n;dp:=dp+0.24*n;dv:=dv+47*n;
WRITELN;
WRITELN;
WriteIn(' 3');
WriteIn('DSiB adedi:');
WriteIn(' 3');READ(n);
dt:=dt+0.03*n;dp:=dp+0.54*n;
WRITELN;
WRITELN;
WriteIn('DBD adedi:');
WriteIn(' 3');READ(n);
dt:=dt+0.03*n;
END
ELSE
BEGIN
END;
VAL(MWA,MW1,KOD);
VAL(RCCA,ROC1,KOD);
VAL(VCA,VC1,KOD);
VAL(PCA,PC1,KOD);
VAL(TCA,TC1,KOD);
VAL(TBA,TB1,KOD);
VAL(ROA,RO1,KOD);
VAL(TFA,TF1,KOD);
VAL(wA,w1,KOD);
VAL(nA,n1,KOD);
VAL(SIGA,SIG1,KOD);
VAL(DIEA,DIE1,KOD);
VAL(MUA,MU1,KOD);
VAL(ZCA,ZC1,KOD);
VAL(AA,A1,KOD);
VAL(BA,B1,KOD);

```

```

VAL(DA,C1,KOD);
VAL(DA,D1,KOD);
VAL(BOA,B01,KOD);
VAL(TOA,T01,KOD);
VAL(DELF0A,DELF01,KOD);
VAL(DELF0A,DELF01,KOD);
VAL(DELHVA,DELHVA1,KOD);
VAL(DELTAA,DELTA1,KOD);
CLRSCL;

WRITELN('MOLEKUL ADIRLIBI.....MW..... : ',MW:0:4);
IF PCA='YOK' THEN
  BEGIN
    WRITE('Elimizde Pc degeri VARMI ? (EBH) : ');READLN(HESAP1);
    IF HESAP1='E' THEN
      BEGIN WRITE('Degeri VERIN : ');READLN(PCAH);END
    ELSE
      BEGIN PCAH:=MW/UST((0.34+dp),2);
        WRITELN('KRITIK BASINC.....Pc.....atm..... : ',PCAH:0:4);END;
      END
    ELSE
      BEGIN
        PCAH=PC1;WRITELN('KRITIK BASINC ..... Pc ... atm..... : ',PCAH:0:4);
        END;
  END
IF VCA='YOK' THEN
  BEGIN
    WRITE('Elimizde Vc degeri VARMI ? (EBH) : ');READLN(HESAP1);
    IF HESAP1='E' THEN
      BEGIN WRITE('Degeri VERIN : ');READLN(VCAH);END
    ELSE
      BEGIN VCAH:=40+dV;
        WRITELN('KRITIK HACIM.....Vc.....cm3/gmol.... : ',VCAH:0:4);END;
      END
    ELSE
      BEGIN
        VCAH=VC1; WRITELN('KRITIK HACIM .....Vc.....cm3/gmol.... : ',VCAH:0:4);
        END;
  END
IF TBA='YOK' THEN
  BEGIN
    WRITE('Elimizde Tb degeri VARMI ? (E/H) : ');READLN(HESAP1);
    IF HESAP1='E' THEN
      BEGIN
        WRITE('Degeri VERIN : ');READLN(TBAH);
        END
      ELSE
        BEGIN
          TBAH:=TBAHF(VCAH,PCAH,DT);
          WRITELN('KAYNAMA NOKTASI.....Tb.....K..... : ',TBAH:7:3);
          END;
        END
      ELSE
        BEGIN
          TBAH:=TB1;WRITELN('KAYNAMA NOKTASI .....Tb .....K..... : ',TBAH:0:4);
          END;
  END
IF TCA='YOK' THEN
  BEGIN
    WRITE('Elimizde Tc degeri VARMI? (EBH) : ');READLN(HESAP1);
    IF HESAP1='E' THEN
      BEGIN WRITE('Degeri VERIN : '); READLN(TCAH); END
    ELSE
      BEGIN TCAH:=TBAH/(0.567+dt-UST(dt,2));
        WRITELN('KRITIK SICAKLIK.....Tc.....K..... : ',TCAH:0:4);END;
  END

```

```

LTD
ELSE
BEGIN
  TCAH:=TC1;WRITELN('KRITIK SICAKLIK .....Tc ....K..... : ',TCAH:0:4);
  END;

IF ZCA='YOK' THEN
BEGIN
  WRITE('Clinizde Zc degeri VARI MI ? (E/H) : ');READLN(HESAP1);
  IF HESAP1='E' THEN
    BEGIN WRITE('Degeri VERIN : ');READLN(ZCAH);END
  ELSE BEGIN ZCAH:=PCAH*VCAH/82.06/TCAH;
  WRITELN('KRITIK SIKISTIRMA FAK..Zc..... : ',ZCAH:8:4);END;
  END
ELSE
BEGIN
  ZCAH:=ZC1;WRITELN('KRITIK SIKISTIRMA FAK..Zc..... : ',ZCAH:6:4);
  END;
IF WA='YOK' THEN
BEGIN
  WRITE('Elinizde w degeri VARI MI ? (E/H) : ');READLN(HESAP1);
  IF HESAP1='E' THEN
    BEGIN WRITE('Degeri VERIN : ');READLN(WAH) END
  ELSE BEGIN WAH:=(1-LN(PCAH)-5.92714+6.09648*TCAH/TBAH+1.28662*LN(TBAH/TCAH)-
  0.169347*UST((TBAH/TCAH),6))/
  (15.2518-15.6075*TCAH/TBAH-13.4721*LN(TBAH/TCAH)+0.43577*UST((TBAH/TCAH),6));
  WRITELN('MERKEZSIZLIK FAKTORU...w..... : ',WAH:6:4);END;
  END
ELSE
BEGIN
  WAH:=w1;
  WRITELN('MERKEZSIZLIK FAK.....w..... : ',WAH:8:4);
  END;

BEGIN
  DSVBAH:=36.6345+8.314*LN(TBAH);
  WRITELN('BUHARLASMA ENTROPISI...dSvb...J/gmol K.... : ',DSVBAH:10:4);
  END;

WRITE('elinizde molar hacim degeri(k.n.da) VARI MI ? (E/H) : ');READLN(HESAP1);
IF HESAP1='E' THEN
  BEGIN WRITE('degeri VERIN : ');READLN(LMVAH);END
ELSE BEGIN LMVAH:=0.285*UST(VCAH,1.040);
  WRITELN('MOLAR HACIM.....LMV....cm3/gmol.... : ',LMVAH:8:4);END;
WRITELN;

WRITELN('Buhar basinci, Buharlasma Entalpisi, Yogunluk, Entalpi farki, ');
WRITELN('Entropi farki, Yuzey Gerilim, Viskozite, Ideal gaz isi sigasi ');
WRITELN('Isi Sigasi, Isi iletkenlik degerlerinin hesaplanmasi icin ');
WRITE('SICAKLIGI VERINIZ (K) : ');READLN(T);

PT:=PTf(PCAH,WAH,TCAH,T);WRITELN('BUHAR BASINCI.....Pvap...atm..... : ',PT:8:5);
DHVBT:=DHVBTf(T,TCAH,WAH);WRITELN('BUHARLASMA ISISI.....dHvap.kJ/gmol..... : ',DHVBT:12:5);
IF ROA='YOK' THEN
BEGIN
  WRITE('293.15 K deki ref.Yogunlugu biliyormusunuz(E/H) ? : ');READLN(HESAP4);
  IF HESAP4='E' THEN
    BEGIN
      WRITE('Degeri VERINIZ g/mol/cm3 : ');READLN(RO1);
      ROT:=ROTf(T,TCAH,WAH,RO1);
      WRITELN('YOGUNLUK.....g/mol/cm3.... : ',ROT:8:6);
      ENTDEPT:=ENTDEPTf(T,TBAH,TCAH,VCAH,ROT);
      WRITELN('ENTALPI FARKI.....H-Hd..J/gmol..... : ',ENTDEPT:8:4);
      IF DELTAA='YOK' THEN
        BEGIN
          DELTABT:=DELTABTf(T,DHVBT,ROT);

```

```

WRITELN('COZUNURLUK PARAMETRESI.....(J/cm3,1/2)... : ',DELTA1:8:4);
END
ELSE
BEGIN
DELTA1:=DELTA1F(DELTA1,R01,ROT);
WRITELN('COZUNURLUK PARAMETRESI.....(J/cm3,1/2)... : ',DELTA1:8:4);
END;
END
ELSE
BEGIN
WRITELN('YOGUNLUK,ENTROPI FARKI,ENTALPI FARKI,COZUNURLUK ');
WRITELN('PARAMETRESI HESAPLANAMAZ');
END;
END
ELSE
BEGIN
ROT:=ROT1F(T,TCAN,WAH,R01);
WRITELN('YOGUNLUK.....g/mol/cm3.... : ',ROT:8:6);
ENTDEPT:=ENTDEPT1F(T,TBAH,TCAN,VCAN,ROT);
WRITELN('ENTALPI FARKI.....H-H0.....J/gmol..... : ',ENTDEPT:8:4);
IF DELTAA='YOK' THEN
BEGIN
DELTAB1:=DELTAB1F(T,DHVB1,ROT);
WRITELN('COZUNURLUK PARAMETRESI.....(J/cm3,1/2)... : ',DELTAB1:8:4);
END
ELSE
BEGIN
DELTA1:=DELTA1F(DELTA1,R01,ROT);
WRITELN('COZUNURLUK PARAMETRESI..... (J/cm3,1/2). : ',DELTA1:8:4);
END;
END;
BEGIN
WRITE('Elinizde 15.5 C daki Ozgul Agirlik degeri VARMI ? (E/H) : ');READLN(HESAP1);
IF HESAP1='E' THEN
BEGIN
WRITE('SG : ');READLN(SG);
KT:=KTF(MW1,T,TBAH,SG,R01);
WRITELN('ISIL ILETKENLIK.....k.....J/cm s K.... : ',KT:8:4);
END
ELSE
BEGIN
IF ROA='YOK' THEN
BEGIN
WRITELN('ISIL ILETKENLIK HESAPLANAMAZ');
END
ELSE
BEGIN
SG:=MW1*R01;
KT:=KTF(MW1,T,TBAH,SG,R01);
WRITELN('ISIL ILETKENLIK.....k.....J/cm s K.... : ',KT:8:6);
END
END
END;
WRITE('Bilesik hidrojen bagi ile mi sonlaniyor (E/H) ? ');READLN(HESAP2);
IF HESAP2='H' THEN
BEGIN
SIGMAT:=SIGMAT1F(T,TCAN,PCAN,TBAH);
WRITELN('YUZY GERILIMI.....dyn/cm..... : ',SIGMAT:8:6);
END;
if t/tcsh>=0.75 then
begin
ETAYT:=ETAYT1F(T,TCAN,PCAN,WAH,MW1);
WRITELN('ETAYT.....dyn/cm..... : ',ETAYT:8:6);

```

```

WRITELN('VİSKOZİTE (yrsek sic.).....g/cm s..... : ',L1AY1:8:6);
end
else
begin
if (b0a='YOK') or (t0a='YOK') THEN
BEGIN
WRITE('Elinizde Van Velsen viskozite sabitleri VARMI ? (E/H) : ');READLN(HESAP1);
IF HESAP1='E' THEN
BEGIN
WRITE('B : ');READ(B01);WRITE('      T0 : ');READLN(T01);
ETADT:=ETADTF(T,B01,T01);
WRITELN('VİSKOZİTE (dsk sic.).....g/cm s..... : ',ETADT:8:6);
END
ELSE
WRITELN('VİSKOZİTE (dusuk sic.) HESAPLANAMAZ ');
END
ELSE
BEGIN
ETADT:=ETADTF(T,B01,T01);
WRITELN('VİSKOZİTE (dsk sic.).....g/cm s..... : ',ETADT:8:6);
END
end;

if (aa='YOK') OR (ba='YOK') OR (da='YOK') or (ca='YOK') THEN
BEGIN
WRITE('Elinizde ideal-gaz isi sigasi sabitleri VARMI (E/H) ? ');READLN(HESAP1);
IF HESAP1='E' THEN
BEGIN
WRITE('A : ');READ(A1);WRITE('      B : ');READ(B1);
WRITE('      C : ');READ(C1);WRITE('      D : ');READLN(D1);
CPOT:=CPOTF(T,A1,B1,C1,D1);
WRITELN('IDEAL-GAZ ISI SIGASI...Cp0....J/gmol K.... : ',CPOT:8:4);
END
ELSE
BEGIN
WRITELN('IDEAL GAZ ISI SIGASI HESAPLANAMAZ');
END
END
ELSE
BEGIN
CPOT:=CPOTF(T,A1,B1,C1,D1);
WRITELN('IDEAL-GAZ ISI SIGASI...Cp0....J/gmol K.... : ',CPOT:8:4);
END;
WRITE('Bilesikteki H,O,N,S,C atom sayilarini biliyormusunuz (E/H) ? : ');
READLN(HESAP4);
IF HESAP4='E' THEN
BEGIN
SCOALT:=SCOALTF;WRITELN('ENTROPI....S.cal.....J/mol-karbon K.... : ',SCOALT:8:4);
END
ELSE
BEGIN
WRITELN('ENTROPI HESAPLANAMAZ');
END;
WRITELN;
WRITE('Isi Sigasinin grup-katki yontemiyle hesaplanmasini istiyormusunuz(E/H):');
READLN(HESAP4);
IF HESAP4='H' THEN
BEGIN
WRITELN('ISI SIGASI HESAPLANAMAZ');
END
ELSE
BEGIN
n1=0;
WRITELN;
WRITELN('ACAGIDA dort-bagli bir karbon C ile, diger bir karbonla zift-bagli');
WRITELN('olan karbon Cd ile, diger bir karbonu uclu-bag ile bagli olan karbon Ct');

```

```

WRITELN;
WRITE('CD(C)(H)3 ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,8.459,2.113E-3,-5.605E-5,1.723E-7));
WRITE('CD(C)2(H)2 ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,-1.383,7.049E-2,-2.063E-4,2.269E-7));
WRITE('CD(C)3(H) ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,2.489,-4.617E-2,3.181E-4,-4.565E-7));
WRITE('CD(C)4 ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,9.116,-2.354E-1,1.287E-3,-1.906E-6));
WRITE('CdB(H)2 ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,8.153,1.776E-2,-1.576E-4,2.542E-7));
WRITE('CdB(C)(H) ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,5.792,-1.228E-2,6.036E-5,-1.926E-8));
WRITE('CdB(C)2 ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,8.005,-9.456E-2,4.620E-4,-6.547E-7));
WRITE('CdB(Cd)(H) ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,8.127,-7.171E-2,3.074E-4,-5.462E-7));
WRITE('Ca ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,13.756,-1.338E-1,6.553E-4,-9.447E-7));
WRITE('CdB(Cb)(C) ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,5.745,-1.085E-1,5.898E-4,-6.983E-7));
WRITE('CB(Cd)2(H)2 ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,9.733,-1.100E-1,5.522E-4,-6.852E-7));
WRITE('CD(Cd)(C)(H)2 ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,3.497,-1.568E-2,1.808E-4,-3.277E-7));
WRITE('CD(Cd)(C)2(H) ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,2.232,-1.773E-2,2.812E-4,-4.199E-7));
WRITE('CD(Cb)(C)(H)2 ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,30.192,-2.812E-1,1.002E-3,-1.115E-6));
WRITE('CtD(H) ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,30.122,-2.081E-1,5.945E-4,-3.430E-7));
WRITE('CtD(C) ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,-10.407,1.662E-1,-5.679E-4,6.667E-7));
WRITE('CDB(H) ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,-1.842,5.778E-2,-1.716E-4,1.995E-7));
WRITE('CDB(C) ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,28.807,-2.824E-1,9.779E-4,-1.103E-6));
WRITE('CDB(Cb) ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,-3.780,2.563E-2,1.190E-5,-9.774E-8));
WRITELN;
WRITELN('ASASIDAKILER H A L K A L A R ICIN OLAN DÜZELTME TERİMLERİDİR');
WRITELN;
WRITE('IFT BAS İLE CIS ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,14.299,-1.646E-1,6.069E-4,7.716E-7));
WRITE('CYCLOPROPANE HALKASI ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,28.469,-2.676E-1,6.534E-4,1.636E-7));
WRITE('CYCLOBUTANE HALKASI ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,6.060,-3.114E-2,-2.461E-4,8.349E-7));
WRITE('CYCLOPENTANE HALKASI ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,34.261,-3.803E-1,1.161E-3,-1.118E-6));
WRITE('SPIROPENTANE HALKASI ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,32.469,-1.991E-1,1.820E-4,4.090E-7));
WRITE('CYCLOHEXANE HALKASI ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,13.021,-1.468E-1,2.802E-4,-3.185E-8));
WRITE('CYCLOHEPTANE HALKASI ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,210.72,-2.344,8.235E-3,-9.500E-6));
WRITE('CYCLOOCTANE HALKASI ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,1691.9,-1.680E1,5.523E-2,-6.033E-5));
WRITE('CYCLOPENTENE HALKASI ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,13.650,-1.126E-1,7.257E-5,3.400E-7));
WRITE('CYCLOHEXENE HALKASI ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,5.360,-3.456E-2,-2.232E-4,7.324E-7));
WRITE('CYCLOHEPTATRIENE HALKASI ADEDI:');READLN(n);
Cpt=Cpt+n*(CpF(T,-22.158,3.985E-1,-2.059E-3,2.063E-6));
WRITE('CYCLOOCTATETRAENE HALKASI ADEDI:');READLN(n);

```

```

Cpt:=Cpt+n*(CpF1), 1.060,2.137E-1,-1.772E-3,3.167E-077;
WRITELN('SON İKİ GRUP ');
WRITE('DECALYDROHAPHITHALENE HALKASI (cis ve trans) ADEDİ:');READLN(n);
Cpt:=Cpt+n*(CpF(T,141.05,-1.510,4.773E-3,-4.872E-6));
WRITE('1,2,3,4-TETRAHYDROHAPHITHALENE HALKASI ADEDİ:');READLN(n);
Cpt:=Cpt+n*(CpF(T, 212.05,2.203, 7.571E-3,0.505E-6));
WRITELN;
WRITELN('İSİ SİGASI.....Cp.....3/gmol K.... : ',CPT:0:4);
END;
WRITELN;
IF HESAP2='E' THEN
BEGIN
WRITELN('Yuzey Beriliminin grup-katki yontemiyle hesaplanmasini');
WRITE('Istiyormusunuz (E/W) ? : ');READLN(HESAP4);
IF HESAP4='H' THEN
BEGIN
WRITELN('YUZEY BERILIMI HESAPLANAMAZ');
END
ELSE
BEGIN
WRITELN;
N:=0;DR:=0;
WRITELN('ASAGIDAKILER karbon-hidrojen KATKILARIDIR');
WRITELN;
WRITE('C ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+9.0*n;
WRITE('H ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+15.5*n;
WRITE('CH3D ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+55.5*n;
WRITE('BCH2D ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+40*n;
WRITE('CH3DCH(CH3)D ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+133.3*n;
WRITE('CH3DCH2DCH(CH3)D ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+171.7*n;
WRITE('CH3DCH2DCH2DCH(CH3)D ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+211.7*n;
WRITE('CH3DCH(CH3)DCH2D ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+173.3*n;
WRITE('CH3DCH2DCH(C2H5)D ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+209.5*n;
WRITE('CH3DC(CH3)2D ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+170.4*n;
WRITE('CH3DCH2DC(CH3)2D ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+207.5*n;
WRITE('CH3DCH(CH3)DCH(CH3)D ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+207.9*n;
WRITE('CH3DCH(CH3)DC(CH3)2D ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+243.5*n;
WRITE('C6H5D ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+189.6*n;
WRITELN;
WRITELN('ASAGIDAKILER ozel grup KATKILARIDIR');
WRITELN;
WRITE('DCOOD ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+63.8*n;
WRITE('DCCOH ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+73.8*n;
WRITE('DOH ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+27.8*n;
WRITE('DNH2 ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+42.5*n;
WRITE('DOB ADEDİ:');READLN(n);
dr:=dr+20*n;
WRITE('DNO2 (nitrit) ADEDİ:');READLN(n);

```

```

dr:=dr/4*n;
WRITE('DN03 (nitrat) ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/93*n;
WRITE('D00(NH2) ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr+91.7*n;
WRITE('ND (keton) karbon atomu ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr+22.3*n;
WRITE('NO (keton) drt karbon atomu ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr+20*n;
WRITE('ND (keton) bes karbon atomu ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr+18.5*n;
WRITE('NO (keton) alti karbon atomu ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr+17.3*n;
WRITE('DCHO ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/86*n;
WRITE('O (yukarida belirtilmeyen) ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/20*n;
WRITE('N (yukarida belirtilmeyen) ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/17.5*n;
WRITE('S ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/49.1*n;
WRITE('P ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/40.5*n;
WRITE('F ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/26.1*n;
WRITE('Cl ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/55.2*n;
WRITE('Br ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/68*n;
WRITE('I ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/90.3*n;
WRITE('ETHYLENIC BAG (terminal) ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/19.1*n;
WRITE('ETHYLENIC BAG (2,3 pozisyonu) ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/17.7*n;
WRITE('ETHYLENIC BAG (3,4 pozisyonu) ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/16.3*n;
WRITE('L BAG ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/40.6*n;
WRITE('KAPALI HALKA -uyeli ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/12.5*n;
WRITE('KAPALI HALKA drt-uyeli ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/6.0*n;
WRITE('KAPALI HALKA bes-uyeli ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/3.0*n;
WRITE('KAPALI HALKA alti-uyeli ADEDI:');READLN(n);
dr:=dr/0.8*n;
SIGNAHT:=SIGNAHT(DR,LMVAH,T,TCAN,TBAH);
WRITELN('YUZIEY GERILINI.....dyn/cm..... : ',SIGNAHT/8:4);
END;

```

```

END;
CLOSE (PRODUCTFILE);
END;

```

```

PROCEDURE LISTE;
BEGIN
ASSIGN (PRODUCTFILE, 'PRODUCT.DTA'); RESET (PRODUCTFILE);
I:=0;
WHILE NOT EOF (PRODUCTFILE) DO
BEGIN
READ (PRODUCTFILE, PRODUCTREC);
WITH PRODUCTREC DO
BEGIN
IF NAME(<>)' THEN
BEGIN

```

```

WRITELN('HARML');
I:=I+1;
IF I/20=TRUNC(I/20) THEN
  BEGIN WRITELN('ENTERE BASINIZ ...');READLN;END;
END;
END;
END;
WRITELN('DOSYA SONU...<ENTERE BASINIZ>...');READLN;
CLOSE(PRODUCTFILE);
END;

```

```

Begin
  ClrScr;
  WriteLn('1- FRAKSİYONLARIN TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİ ');
  WriteLn('2- SAĞ SENTETİK YAKITLARA AIT VERİLER VE TERMOFİZİKSEL ');
  WriteLn('   ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİ ');
  WriteLn('3- BİLESİMİ BELİRLİ SENTETİK YAKIT KARISIMLARININ ');
  WriteLn('   TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KESTİRİMİ ');
  WriteLn;
  Write('Seiminizin numarasını verin : ');ReadLn(Cevap1);
  If cevap1='1' Then
    Begin
      ClrScr;
      Write('ÖZELLİKLERİ HESAPLAMAK İSTEDİĞİNİZ SICAKLIĞI VERİNİZ (K) : ');ReadLn(Tm);
      Write('ORTALAMA KAYNAMA NOKTASINI VERİNİZ (K) : ');ReadLn(Tbm);
      Write('Spesifik Graviteyi biliyor musunuz (E/H) ? ');ReadLn(Cevap2);
      If cevap2 in 'A','H' Then Sgm:=Sgf(Tbm) Else Begin Write('SG 15.5/15.5 C da : ');ReadLn(Sgm);End;
      Write('Kritik Sıcaklığı biliyor musunuz (E/H) ? ');ReadLn(Cevap2);
      If cevap2 in 'A','H' Then Tcm:=Tcf(Tbm,Sgm) Else Begin Write('Tc ( K) : ');ReadLn(Tcm);End;
      Write('Kritik Basıncı biliyor musunuz (E/H) ? ');ReadLn(Cevap2);
      If cevap2 in 'A','H' Then Pcm:=Pcf(Tbm,Sgm) Else Begin Write('Pc ( atm) : ');ReadLn(Pcm);End;
      Write('Kritik Hacimi biliyor musunuz (E/H) ? ');ReadLn(Cevap2);
      If cevap2 in 'A','H' Then Vcm:=Vcf(Tbm,Sgm) Else Begin Write('Vc ( cm3/gmol) : ');ReadLn(Vcm);End;
      Write('Merkezsizlik Faktörü biliyor musunuz (E/H) ? ');ReadLn(Cevap2);
      If cevap2 in 'A','H' Then wm:=wf(Tbm,Sgm) Else Begin Write('w : ');ReadLn(wm);End;
      Write('Molekül Ağırlığını biliyor musunuz (E/H) ? ');ReadLn(Cevap2);
      If cevap2 in 'A','H' Then MMw:=MWf(Tbm,Sgm) Else Begin Write('MW : ');ReadLn(MMw);End;
      Write('Yogunluğu biliyor musunuz (E/H) ? ');ReadLn(Cevap2);
      If cevap2 in 'A','H' Then Row:=Rof(Tm,Sgm,Tcm,wm) Else Begin Write('Yogunluk (g/cm3) : ');ReadLn(Row);End;
      ClrScr;
      WriteLn('İSL AGIRLIK ..... SG ..... : ',Sgm:5:5);
      WriteLn('MOLEKÜL AGIRLIĞI ..... MW ..... : ',MMw:5:5);
      WriteLn('KRİTİK SICAKLIK ..... Tc .... (K) ..... : ',Tcm:5:5);
      WriteLn('KRİTİK BASIN ..... Pc .... (atm) ..... : ',Pcm:5:5);
      WriteLn('KRİTİK HACİM ..... Vc .... (cm3/gmol) .. : ',Vcm:5:5);
      WriteLn('MERKEZSİZLİK FAK. .... w ..... : ',wm:5:5);
      Kwm:=Kwf(Tbm,Sgm);WriteLn('WATSON KARAKT. FAK. .... Kw ..... : ',Kwm:5:5);
      LMVw:=LMVf(Tbm,Sgm);WriteLn('SIVI MOLAR HACİMİ ..... LMV .. (cm3/gmol) ... : ',LMVw:5:5);
      Cp0w:=Cp0f(Tm,Sgm,Kwm);WriteLn('İDEAL-GAZ İSİ SİĞAĞI ..... Cpx ... (J/gmol K) .. : ',Cp0w:5:5);
      Cplw:=Cplf(Tm,Sgm,Kwm);WriteLn('İSİ SİĞAĞI ..... Cp ... (J/gmol K) .. : ',Cplw:5:5);
      km:=kf(Tm,Tcm);WriteLn('İSİL İLETKENLİK ..... k ..... (J/s cm K) ... : ',km:5:5);
      DHVTw:=DHVTf(Tm,Tbm,Tcm);WriteLn('BUHARLASMA İSİSİ ..... DHVT .. (kJ/gmol) .... : ',DHVTw:5:5);
      Sigw:=Sigwf(Tm,Tcm,Pcm);WriteLn('YİZEY GERİLİMİ ..... e .... (dyn/cm) ..... : ',Sigw:5:5);
      Row:=Rof(Tm,Sgm,Tcm,wm);WriteLn('YOGUNLUK ..... (g/cm3) ..... : ',Row :5:5);
      Zcw:=Zcf(Tcm,Vcm,Pcm);WriteLn('KRİTİK SIKIŞTIRMA FAK. .... Zc ..... : ',Zcw:5:5);
      PVw:=PVf(Tm,Tcm,Pcm,wm);WriteLn('BUHAR BASINCI ..... PV ... (atm) ..... : ',PVw:5:5);
      Mw:=Mwf(Tbm,Tcm,Vcm,MMw,wm);WriteLn('DİPOL MOMENTİ ..... f ..... (D) ..... : ',Mw:5:5);
      Num:=Nuf(Tm,Tcm,Pcm,MMw,wm,Zcw);WriteLn('VİSKOZİTE ..... (cm2/s) ..... : ',Num:5:5);
      n:=nf(Tbm,MMw,Row);WriteLn('KIRILMA İNDİSİ ..... n ..... : ',n:5:5);
      Deltaw:=Deltaf(Tbm,Tcm,MMw,Row);WriteLn('ÖZÜNÜRLÜK PARAMETRESİ ..... λ(J/cm3)/2Ü . : ',Deltaw:5:5);
      WriteLn('Aromatikliğin hesaplanması için H/C Zg. (kuru bazda) oranı ');
      Write('elinizde VARMI (E/H) ? : ');ReadLn(Cevap3);
      if cevap3='E' then
        begin
          fa:=faf(nm);WriteLn('AROMATİKLİK ..... fa ..... : ',fa:5:5);

```

```

end
else
begin
writel('AROMATIKLIK HESAPLANAMAZ');
end;
WRITELN('Difuzyon Katsayisinin hesaplanmasi icin cozunenin(1) ve cozucunun (2)');
WRITELN('merkezsizlik faktorleri ve cozucunun viskozitesi(g/cm s) degerleri');
WRITE('elinizde VARI MI (E/H) ? : ');READLN(Cevap3);
if Cevap3='E' then
begin
Dabm:=Dabf(Tm);Writel('DIFUZYON KATSAYISI ..... D12 ... (cm2/s) ..... :',Dabm:5:10);
end
else
begin
writel('DIFUZYON KATSAYISI HESAPLANAMAZ');
end;
WRITELN('Yanma Isisinin hesaplanmasi icin C,H,S,N,O Xag. oranlari ');
WRITE('elinizde varmi (E/H) ? : ');READLN(Cevap3);
if Cevap3='E' then
begin
DHcm:=DHcf;Writel('YANMA ISISI ..... DHc ... (kJ/g) ..... :',DHcm:5:5);
end
else
begin
writel('YANMA ISISI HESAPLANAMAZ');
end;
WRITELN('Olusum Isisinin hesaplanmasi icin C,H,S Xag.oranlari ve siviye ideal-');
WRITELN('gaz haline buharlastirmak icin gereken isi miktarı (Ho-H) degeri');
WRITE('elinizde varmi (E/H) ? : ');READLN(Cevap3);
if Cevap3='E' then
begin
DHfo:=DHfof(DHcm);Writel('OLUSUM ISISI ..... DHfo .. (kJ/g) ..... :',DHfo:5:5);
end
else
begin
writel('OLUSUM ISISI HESAPLANAMAZ');
end;
end
End

```

```

Else if cevap1='2' Then
Begin
BEGIN
REPEAT
BEGIN
CLSCLR;
WRITELN;
WRITELN;
WRITELN('          1. SYNDASE          (kullanmayiniz)  ');
WRITELN('          2. YENI MADDE KAYIT ETME ');
WRITELN('          3. KAYITLI MADDE LISTESI ');
WRITELN('          4. TERMOFIZIKSEL OZELLIKLERIN HESAPLANMASI ');
WRITELN('          0. PROGRAMI BITIRME ');
WRITELN;
WRITELN;
WRITE('          SECIM NO : ');READLN(SECIM);
CASE SECIM OF
1 : BEGIN
DOSYAACMA;
END;
2 : BEGIN
VERIGIRISI;
END;

```

```

3 : BEGIN
  LISTE;
  END;
4 : BEGIN
  VERIARAMA;
  REPEAT UNTIL KEYPRESSED;
  END;
0 : BEGIN
  END;
END;
END;
UNTIL SECIM=0;
END;
END

```

```

Else if cevap='3' Then
begin
BEGIN
  LMVmk:=0;
  Vcmk:=0;
  Pcmk:=0;
  Zcmk:=0;
  wmk:=0;
  Cpmk:=0;
  KETAmk:=0;
  LAMmk:=0;
  Tcmk:=0;
END;
CLRCR;

```

```

WRITE('Bilesen Sayisi:');
READLN(D);
FOR II:=1 TO D DO
BEGIN
  WRITE(II,'Bilesenin Mol Kesri..... : ');
  READLN(XAIIU);
  WRITE(II,'BILESENIN MOLAR HACMI.....cm3/gmol.... : ');
  READLN(LMVmZAIU);
  WRITE(II,'BILESENIN KRITIK HACMI.....cm3/gmol.... : ');
  READLN(VcmZAIU);
  WRITE(II,'BILESENIN KRITIK BASINCI....atm..... : ');
  READLN(PcmZAIU);
  WRITE(II,'BILESENIN KRITIK SIKISTIRMA FAKTR .... : ');
  READLN(ZcmZAIU);
  WRITE(II,'BILESENIN MERKEZSIZLIK FAKTR..... : ');
  READLN(wmZAIU);
  WRITE(II,'BILESENIN ISI SIBAGI.....J/gmol K... : ');
  READLN(CpmZAIU);
  WRITE(II,'BILESENIN VSKOZITESI.....g/cm s..... : ');
  READLN(KETAmZAIU);
  WRITE(II,'BILESENIN ISIL ILETKENLIGI..J/cm s K... : ');
  READLN(LAMmZAIU);
  WRITE(II,'BILESENIN KRITIK SICAKLIGI..K..... : ');
  READLN(TcmZAIU);
  LMVmk:=LMVmk+XAIIU*LMVmZAIU;
  Vcmk:=Vcmk+XAIIU*VcmZAIU;
  ROcmk:=1/Vcmk;
  Pcmk:=Pcmk+XAIIU*PcmZAIU;
  Zcmk:=Zcmk+XAIIU*ZcmZAIU;
  wmk:=wmk+XAIIU*wmZAIU;
  Cpmk:=Cpmk+XAIIU*CpmZAIU;
  KETAmk:=KETAmk+XAIIU*LN(KETAmZAIU);
  ETAmk:=EXP(KETAmk);
END;

```

```

WRITELN;
WRITELN;
for II:=1 to o do
begin
  writeLn(xXII0:4:3,'*',lavmZXXII0:7:3,'*',vcmZXXII0:7:3,'*',pcmZXXII0:7:3,'*',zcmZXXII0:4:3,'*',
  wmZXXII0:4:3,'*',cpmZXXII0:7:3,'*',etcmZXXII0:0:6,'*',lamZXXII0:0:6,'*',TcmZXXII0:0:3);
end;
WRITELN;

```

```

for II:=1 to o do
begin
  fcomZXXII0:=xXII0*lavmZXXII0/lavmk;
end;
for II:=1 to o do
begin
  for j:=1 to o do
  begin
    lamk:=lamk+fcomZXXII0*fcomZXXII0*2*ust((1/lamZXXII0+1/lamZXXII0),-1);
  end;
end;
for II:=1 to o do
begin
  for j:=1 to o do
  begin
    Tcmk:=Tcmk+fcomZXXII0*fcomZXXII0*ust(TcmZXXII0*TcmZXXII0,1/2);
  end;
end;

```

```

WRITELN('MOLAR HACIM ..... LMV...cm3/gmol.. : ',LMVmk:7:3);
WRITELN('KRITIK SICAKLIK ..... Vcm ...cm3/gmol.. : ',Vcmk:7:3);
WRITELN('KRITIK YOCUNLUK ..... R0cm ..gmol/cm3.. : ',R0cmk:10:6);
WRITELN('KRITIK BASINC ..... Pcm ...atm..... : ',Pcmk:7:3);
WRITELN('KRITIK SIKISTIRMA FAK. Zcm ..... : ',Zcmk:7:3);
WRITELN('MERKEZSIZLIK FAK. ....wm ..... : ',wmk:7:3);
WRITELN('ISI SIGASI .....Cpm ...J/gmol K . : ',Cpmk:7:3);
WRITELN('VIZKOSITE ..... ..g/cm s ... : ',ETAmk:10:6);
WRITELN('ISIL ILETKENLIK .....km....J/s cm K . : ',LAMmk:10:6);
WRITELN('KRITIK SICAKLIK .....Tcm ...K ..... : ',Tcmk:7:3);
WRITELN;

```

```

WRITELN('Yuzey Gerilimini hesaplamak icin, karisimin ');
WRITE('kaynama noktası elinizde VARI (E/H) ? ');READLN(HESAP3);
IF HESAP3='E' THEN
BEGIN
  WRITE('karisimin kaynama noktasini VERINIZ (K) : ');READLN(TBmX);
  WRITE('hesaplamak istediginiz sicakligi VERINIZ (K) : ');READLN(TX);
  Q:=0.1207*(1+(TBmX/Tcmk*LN(Pcmk))/(1-TBmX/Tcmk))-0.281;
  SIGMAmk:=UST(Pcmk,2/3)*UST(Tcmk,1/3)*Q*UST(1-TX/Tcmk,11/9);
  WRITELN('YUZELY GERILIMI ..... dyn/cm ..... : ',SIGMAmk:8:4);
END
ELSE
BEGIN
  WRITELN('YUZELY GERILIMI HESAPLANAMAZ');
END;

```

```

WRITE('Difuzyon katsayisini hesaplamak icin,');
write('cozucunun molekuli agirligi,cozucunun viskozitesi');
WRITE('cozunenin k.n.ndaki molar hacmi degerleri elinizde VARI (E/H) ? ');
READLN(HESAP3);
IF HESAP3='E' THEN
BEGIN
  WRITE('Cozucunun Molekul Agirligi : ');READLN(M);
  WRITE('Cozucunun Viskozitesi (g/cm s) : ');READLN(VIS);
  WRITE('cozucunun k.n.daki molar hacmi (cm3/gmol) : ');READLN(L);
  WRITE('Hesaplamak istediginiz sicakligi VERINIZ : ');READLN(T1);
  WRITELN('cozuneninin birlesme faktorunu Abu deger COZUCU su ise 2.6,metanol ise 1.9,');

```

```
WRITE( BCANDI ISB 1.0 VE Digerleri YENI ISB 1.0 DIFU VERINIZ : ');READLN(FI);
```

```
D12:=7.4E-10*UST(F*M,1/2)*T1/(VIS*UST(L,0.6));
```

```
WRITELN('DIFUZYON KATSAYISI ....D12 ...cm2/s .... : ',D12:10:0);
```

```
END
```

```
ELSE
```

```
BESIN
```

```
WRITELN('DIFUZYON KATSAYISI HESAPLANMAZ');
```




























```
END;
```




























```
End;
```























```
End.
```



























EN-2 VERİ BANKASINDA (SYNOPSIS) YERALAN MODELERİN LİSTESİ



















EK-2 VERİ BANKASINDA (SYNBASE) YERALAN MADDELERİN LİSTESİ

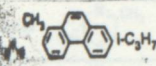

















C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>		Benzene
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>		Toulene
C <sub>8</sub> H <sub>8</sub>		Styrene
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>		O-xylene
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>		m-xylene
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>		p-xylene
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>		ethylbenzene
C <sub>9</sub> H <sub>10</sub>		O-methylstyrene
C <sub>9</sub> H <sub>10</sub>		p-methylstyrene
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>		1,2,3 trimethylbenzene
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>		1,2,4 trimethylbenzene
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>		1,3,5 trimethylbenzene
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>		1-ethyl-2-methylbenzene
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>		1-ethyl-3-methylbenzene
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>		1-ethyl-4-methylbenzene
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>		n-propyl benzene
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>		isopropyl benzene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		1,2,3,4 tetra methylbenzene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		1,2,3,5 tetra methylbenzene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		1,2,4,5 tetra methylbenzene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		2-ethyl m-xylene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		2-ethyl p-xylene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		3-ethyl o-xylene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		4-ethyl o-xylene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		4-ethyl m-xylene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		5-ethyl m-xylene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		1,2 diethyl benzene

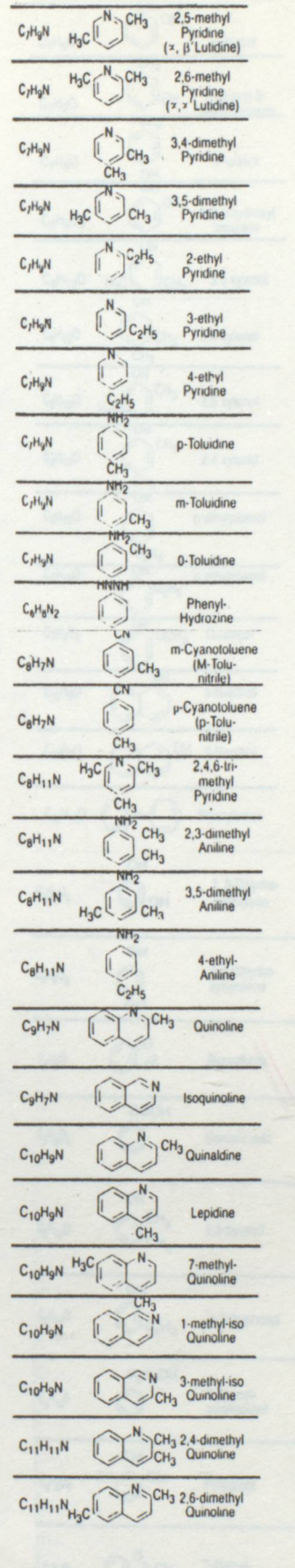
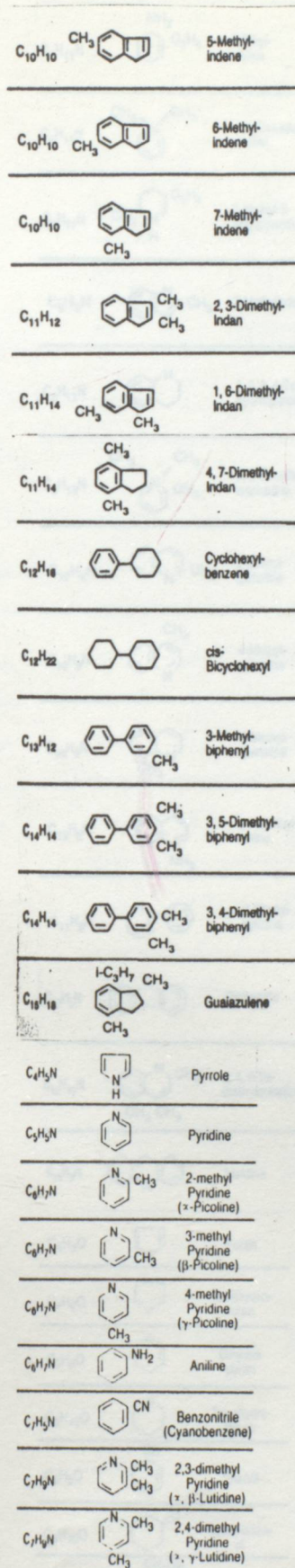
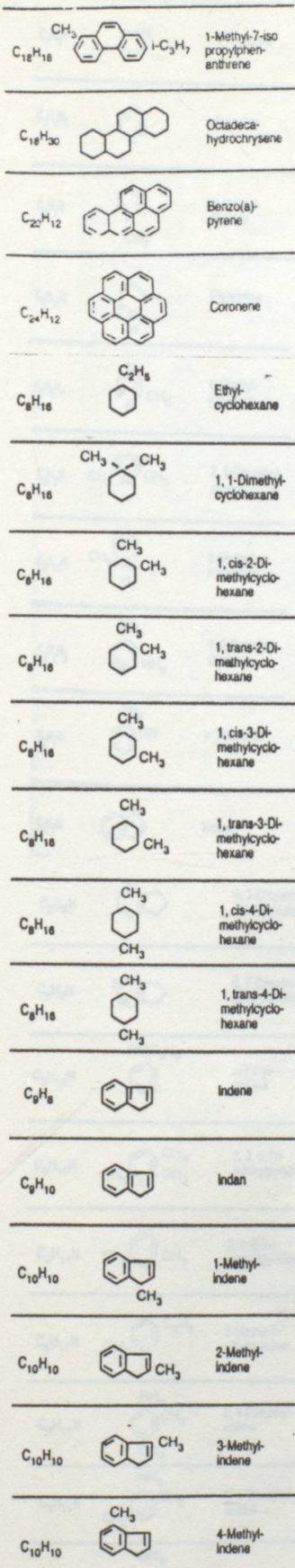
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		1,3 diethyl benzene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		1,4 diethyl benzene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		o-isopropyl-toluene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		m-isopropyl-toluene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		p-isopropyl-toluene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		o-propyl-toluene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		m-propyl-toluene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		p-propyl-toluene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		isobutylbenzene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		sec-butylbenzene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		tert-butylbenzene
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>		n-butylbenzene
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>		pentamethylbenzene
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>		3 propyl-o-xylene
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>		2 propyl-m-xylene
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>		2 propyl-p-xylene
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>		2,3 dimethyl cumene
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>		3,5 dimethyl cumene
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>		2,5 dimethyl cumene
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>		2,4 diethyl toluene
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>		3,5 diethyl toluene
C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>		Naphthalene
C <sub>11</sub> H <sub>10</sub>		1-methyl-Naphthalene
C <sub>11</sub> H <sub>10</sub>		2-methyl Naphthalene
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>		1,2-dimethyl Naphthalene
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>		1,3-dimethyl Naphthalene
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>		1,4-dimethyl Naphthalene

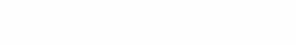
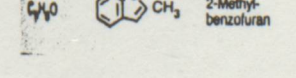
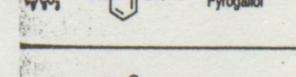
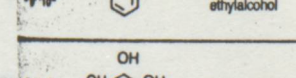
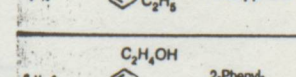
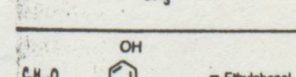
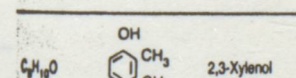
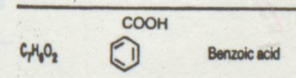
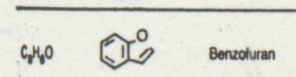
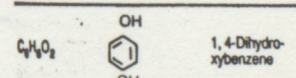
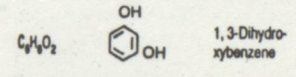
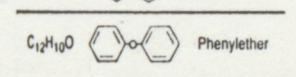
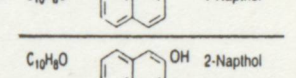
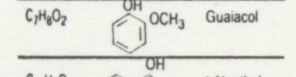
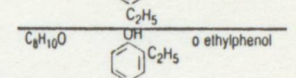
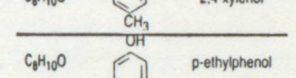
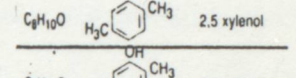
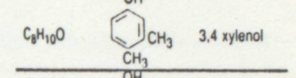
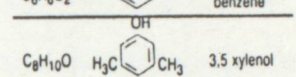
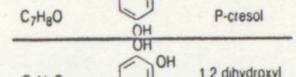
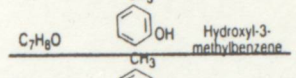
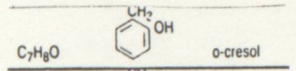
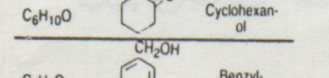
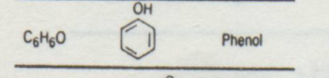
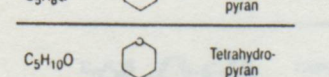
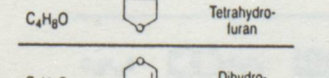
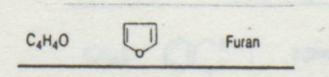
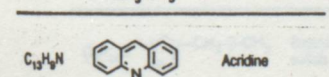
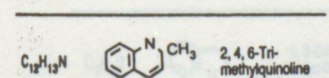
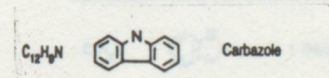
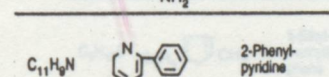
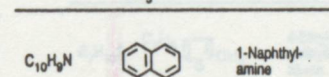
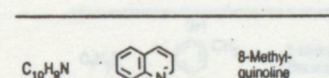
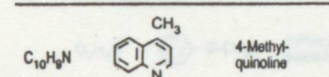
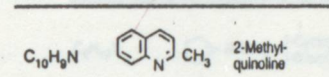
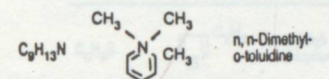
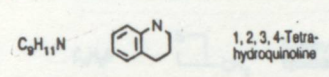
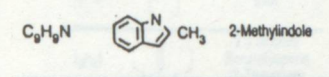
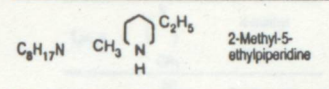
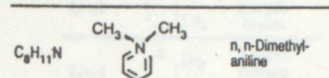
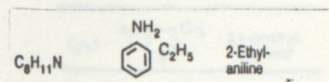
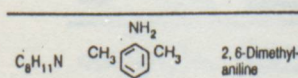
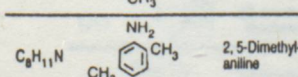
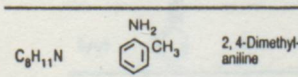
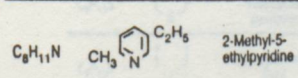
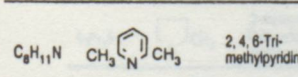
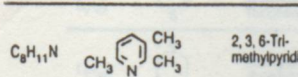
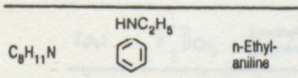
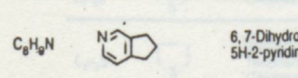
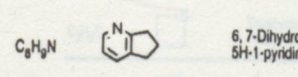
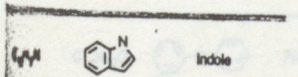
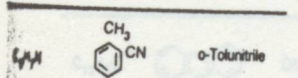
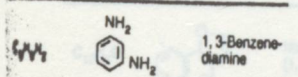
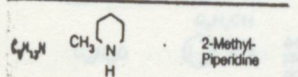
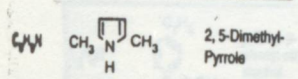
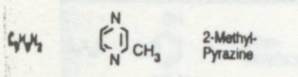
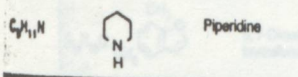
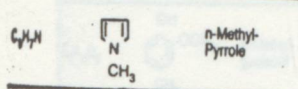
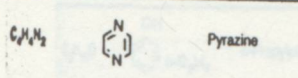
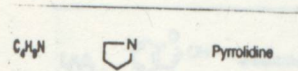
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>		1,5-dimethyl Naphthalene
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>		1,6-dimethyl Naphthalene
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>		1,7-dimethyl Naphthalene
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>		2,3-dimethyl Naphthalene
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>		2,6-dimethyl Naphthalene
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>		2,7-dimethyl Naphthalene
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>		1-ethyl Naphthalene
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>		2-ethyl Naphthalene
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>		5-Ethyl-1,2,4-trimethylbenzene
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>		2-Ethyl-1,3,5-trimethylbenzene
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>		5-Propyl-m-xylene
C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>		1,2-Diisopropylbenzene
C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>		1,3-Diisopropylbenzene
C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>		1,4-Diisopropylbenzene
C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>		1-Phenylhexane
C <sub>13</sub> H <sub>12</sub>		Diphenylmethane
C <sub>13</sub> H <sub>14</sub>		1-n-Propyl-Naphthalene
C <sub>13</sub> H <sub>14</sub>		2-n-Propyl-Naphthalene
C <sub>14</sub> H <sub>18</sub>		1-n-Butyl-Naphthalene
C <sub>14</sub> H <sub>18</sub>		2-n-Butyl-Naphthalene
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub>		1,3-cyclo Pentadiene
C <sub>5</sub> H <sub>8</sub>		Cyclopentene

C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>		Cyclopentane
C <sub>6</sub> H <sub>8</sub>		1,3-cyclohexadiene
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub>		1-methyl-Cyclopentene
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub>		3-methyl-Cyclopentene
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub>		Cyclohexene
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>		Methyl-Cyclopentane
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>		Cyclohexane
C <sub>7</sub> H <sub>12</sub>		1-methyl-Cyclohexene
C <sub>7</sub> H <sub>12</sub>		4-methyl-Cyclohexene
C <sub>7</sub> H <sub>14</sub>		1,1-dimethyl-Cyclopentane
C <sub>7</sub> H <sub>14</sub>		Methyl-Cyclohexane
C <sub>8</sub> H <sub>14</sub>		1,4-dimethyl-Cyclohexane
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub>		1,cis-2-dimethyl-Cyclohexane
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub>		1,trans-3-dimethyl-Cyclohexane
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub>		1,cis-3-dimethyl-Cyclohexane
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub>		1,trans-4-dimethyl-Cyclohexane
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub>		1,cis-4-dimethyl-Cyclohexane
C <sub>9</sub> H <sub>18</sub>		n-propyl-Cyclohexane
C <sub>10</sub> H <sub>12</sub>		Tetralin
C <sub>10</sub> H <sub>18</sub>		trans-Decalin
C <sub>10</sub> H <sub>18</sub>		cis-Decalin
C <sub>11</sub> H <sub>14</sub>		2-methyl-Tetralin
C <sub>11</sub> H <sub>14</sub>		6-methyl-Tetralin
C <sub>12</sub> H <sub>10</sub>		Biphenyl
C <sub>14</sub> H <sub>14</sub>		3,3-dimethyl-Biphenyl
C <sub>12</sub> H <sub>10</sub>		Acenaphthene

C <sub>12</sub> H <sub>14</sub>		2a, 3, 4, 5-Tetrahydro-acenaphthene
C <sub>13</sub> H <sub>10</sub>		Fluorene
C <sub>13</sub> H <sub>12</sub>		2,3-Dihydro-1H-Benz(e)indene
C <sub>13</sub> H <sub>16</sub>		Hexahydro-turanene
C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>		Anthracene
C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>		Phenanthrene
C <sub>16</sub> H <sub>12</sub>		1-Methyl-anthracene
C <sub>14</sub> H <sub>24</sub>		Tetradeca-hydroanthracene
C <sub>14</sub> H <sub>24</sub>		Tetradeca-hydrophenanthrene
C <sub>16</sub> H <sub>10</sub>		Pyrene
C <sub>16</sub> H <sub>10</sub>		Fluoranthene
C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>		Chrysene
C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>		Benz(a)-anthracene
C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>		Naphthacene
C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>		Triphenylene
C <sub>18</sub> H <sub>14</sub>		o-Terphenyl
C <sub>18</sub> H <sub>14</sub>		m-Terphenyl
C <sub>18</sub> H <sub>14</sub>		p-Terphenyl

C <sub>17</sub> H <sub>18</sub>		1-Methyl-7-iso-propylphenanthrene
C <sub>18</sub> H <sub>18</sub>		Octadeca-hydrochrysene
C <sub>18</sub> H <sub>18</sub>		Benzo(a)-pyrene
C <sub>18</sub> H <sub>18</sub>		Coronene
C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>		Anthracene
C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>		Phenanthrene
C <sub>15</sub> H <sub>12</sub>		1-Methyl-anthracene
C <sub>14</sub> H <sub>24</sub>		Tetradeca-hydroanthracene
C <sub>14</sub> H <sub>24</sub>		Tetradeca-hydrophenanthrene
C <sub>16</sub> H <sub>10</sub>		Pyrene
C <sub>16</sub> H <sub>10</sub>		Fluoranthene
C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>		Chrysene
C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>		Benz(a)-anthracene
C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>		Naphthacene
C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>		Triphenylene
C <sub>18</sub> H <sub>14</sub>		o-Terphenyl
C <sub>18</sub> H <sub>14</sub>		m-Terphenyl
C <sub>18</sub> H <sub>14</sub>		p-Terphenyl





$C_8H_6O$		2-Benzofuranol
$C_9H_{10}O$		n-Propylphenol
$C_9H_{10}O$		4-Methylguaiacol
$C_{10}H_{10}O$		5,7-Dimethylbenzofuran
$C_9H_{10}O$		p-Tert-butylphenol
$C_{10}H_{12}O$		p-Ethyl-beta-phenyl-ethyl-alcohol
$C_{10}H_{14}O$		o-Ethyl-beta-phenyl-ethyl-alcohol
$C_{12}H_8O$		Naphthol-(1,2-b)uran
$C_{12}H_8O$		Dibenzofuran
$C_{12}H_{10}O$		Phenylether
$C_4H_6S$		Thiacyclobutane
$C_4H_4S$		Thiophene
$C_4H_6S$		Tetrahydrothiophene (Thiolane)
$C_5H_6S$		2-methylthiophene
$C_5H_6S$		3-methylthiophene
$C_5H_{10}S$		Tetrahydrothiopyran
$C_5H_{10}S$		2-methylthiacyclopentane
$C_5H_{12}S$		3-methylthiacyclopentane
$C_5H_{10}S$		Cyclopentanethiol
$C_6H_6S$		Benzenethiol
$C_6H_6S$		2,3-dimethylthiophene
$C_6H_6S$		2,4-dimethylthiophene
$C_6H_6S$		2,5-dimethylthiophene

$C_6H_6S$		3,4-dimethylthiophene
$C_6H_{10}S$		3-methylthiacyclohexane
$C_6H_{10}S$		2-methylthiacyclohexane
$C_6H_{10}S$		4-methylthiacyclohexane
$C_6H_{10}S$		Cyclohexanethiol
$C_7H_8S$		2,3-dihydrobenzothiophene (1-Thiaindan)
$C_4H_8S$		3-Methylthiacyclobutane
$C_6H_8S$		3-Ethylthiophene
$C_6H_{12}S$		1-Cyclopentyl-1-thiaethane
$C_7H_8S$		1-Phenyl-1-thiaethane
$C_7H_8S$		2-Methylbenzenethiol
$C_7H_{10}S$		4-Ethyl-2-methylthiophene
$C_7H_{10}S$		5-Ethyl-2-methylthiophene
$C_8H_8S$		1-Thiaindan
$C_8H_8S$		2,3-Dihydrobenzothiophene
$C_8H_{10}S$		Benzyl-methylsulfide
$C_9H_{10}S$		2-Thiatetralin
$C_{10}H_{10}S$		2-Ethyl-1-thiaindene
$C_{12}H_{10}S$		Phenylsulfide
$C_{10}H_{18}S_2$		1,2-Dicyclopentyl-1,2-dithiane

## ÖZGEÇMİŞ

1965'de Erzincan'da doğdu. İlk ve orta öğrenimini İstanbul'da tamamladı. 1982 yılında Yıldız Üniversitesi Kimya Mühendisliği Bölümünde lisans öğrenimine başlayarak, 1986 yılında tamamladı. Aynı yıl Yıldız Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Mühendisliğinde Yüksek Lisans'a başladı. 1987-1989 yılları arasında Yıldız Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Kimya Mühendisliği Bölümü Kimyasal Teknolojiler Anabilim Dalında Araştırma Görevlisi olarak çalıştı.

