

Univerzitet u Beogradu
Tehnološko-metalurški fakultet

Danijela A. Soldatović

**Termodinamička analiza ravnotežnih,
volumetrijskih i transportnih svojstava
višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i
organskih rastvarača**

Doktorska disertacija



Tehnološko-metalurški fakultet
Univerzitet u Beogradu

Beograd, 2019.

University of Belgrade

Faculty of Technology and Metallurgy

Danijela A. Soldatović

**Thermodynamic analysis of phase equilibria,
volumetric and transport properties of
multicomponent systems of ionic liquids and
organic solvents**

Doctoral Dissertation



Tehnološko-metalurški fakultet
Univerzitet u Beogradu

Belgrade, 2019.

Mentor:

Dr Mirjana Kijevčanin, redovni profesor, Tehnološko-metalurški fakultet,
Univerzitet u Beogradu

Članovi komisije:

Dr Ivona Radović, redovni profesor, Tehnološko-metalurški fakultet,
Univerzitet u Beogradu

Dr Jelena Vuksanović, naučni saradnik, Tehnološko-metalurški fakultet,
Univerzitet u Beogradu

Dr Zoran Višak, docent, School of Engineering and Applied Sciences,
Univerzitet Aston

Datum odbrane: _____

Za doprinos u realizaciji ove teze najveću zahvalnost dugujem svom mentoru, Prof. Dr Mirjani Kijevčanin, na izuzetnoj podršci tokom izrade teze i na ukazanom poverenju.

Posebno se zahvaljujem Dr Jeleni Vuksanović, na velikoj pomoći prilikom eksperimentalne postavke i kontantnom praćenju svake istraživačke faze.

Prof. Dr Ivoni Radović i Dr Zoranu Višku zahvaljujem se na toploj saradnji, sugestijama i komentarima prilikom analize eksperimentalnih rezultata.

Veliku zahvalnost dugujem i svojoj kolegici i prijateljici Veri Sudar Lucić, čiji su mi saveti i nesebična podrška bili dragoceni.

Na kraju, zahvaljujem se i svojoj porodici na svakodnevnoj podršci tokom izrade ove disertacije.

Termodinamička analiza ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i organskih rastvarača

Rezime

U ovoj doktorskoj disertaciji eksperimentalno su određene rastvorljivosti binarnih i pseudo - binarnih smeša, odnosno termodinamičke ravnoteže tečno - tečno i čvrsto - tečno, kao i uticaj dodavanja različitih ko - rastvarača na pomeranje fazne ravnoteže, na atmosferskom pritisku i u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 371.15 K . Svi dobijeni rezultati prikazani su grafički, formiranjem faznih dijagrama temperatura - sastav. Izvršena su merenja ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema ekoloških rastvarača: jonskih tečnosti, polimera i alkohola sa organskim rastvaračima. Eksperimentalno su određivana termodinamička svojstva čistih komponenata i njihovih smeša u temperaturnom opsegu od T=(288.15-333.15) K i na atmosferskom pritisku. Eksperimentalno su merene gustine, indeksi refrakcije i viskoznosti ekoloških rastvarača u smeši sa industrijskim zagađivačima. Iz eksperimentalnih podataka izračunate su dopunske molarne zapremine V^E , promena viskoznosti $\Delta\eta$, promena indeksa refrakcije Δn_D kao i dopunske termodinamičke veličine: ΔG^{*E} dopunska Gibsova energija aktivacije viskoznog toka, ΔS^{*E} dopunska entropija i ΔH^{*E} dopunska entalpija, koeficijent izobarske ekspanzije α , dopunski koeficijent izobarske ekspanzije α^E . Izračunate termodinamičke veličine su korišćene za analizu specifičnih molekulskih interakcija i efekata mešanja između komponenata smeša, uzimajući u obzir geometrijska pakovanja između komponenata i uticaj temperature. Ravnotežni podaci čvrsto - tečno za sva četiri binarna sistema su uspešno korelisani NRTL modelom sa dva različita temperaturno zavisna parametra, Δg_{12} i Δg_{21} Fourier-ova transformaciona infracrvena (FT-IR) spektroskopija binarnih smeša nikotina sa alkoholima i odgovarajućih čistih komponenata izvedena je na 298.15 K. u cilju pojašnjenja molekulske strukture, intra - i inter - molekulskih interakcija u rastvorima. Modelovanje viskoziteta rađeno je sa dva modela: modelima doprinosa grupa UNIFAC-VISCO i ASOG-VISCO modelima, i korelativnim McAllister dvoparametarski *three-body* i troparametarski *four-body* modelima.

Na osnovu dobijenih rezultata ustanovljeno je da samo dodavanje PEG 2050 vodenom rastvoru anilina izazvalo značajan ko-rastvarač efekat dok je u slučaju PEG 35000 došlo do suprotnog efekta i on se pokazao kao anti - rastvarač smanjujući rastvorljivost *N,N*-dimetilanilina. Dobijeni rezultati korelisani NRTL modelom su pokazali dobro slaganje sa eksperimentalnim. Svi tipovi ekoloških rastvarača, razmatrani u ovoj tezi (polimeri, jonske tečnosti, alkoholi) su kompleksne strukture sa mogućnosti podešavanja njihovih svojstava za industrijsku primenu u tretmanu široko zastupljenih organskih rastvarača (nikotina, anilina, *N,N*-dimetilanilina, benzena, toluena, i ksilena). Stoga je značajna detaljna termodinamička karakterizacija i proširenje termodinamičke baze podataka za njihove smeše sa toksičnim hemikalijama. Analiza je pokazala da u smešama nikotina i propandiola dešavaju snažne interakcije u odnosu na smeše sa butanolima što je u skladu sa njihovom izrazito polarnom prirodom i sposobnošću da formiraju vodonične veze. Pokazalo se da samo simultana analiza dopunskih molarnih zapremina, dopunskih molarnih Gibsovih energija, dopunskih molarnih entalpija i dopunskih molarnih entropija aktivacije viskoznog toka mogu dati detaljno objašnjenje molekularnih interakcija koje postoje u smeši, naročito ako se molekuli komponenti razlikuju po veličini. U slučaju smeše PPG i aromatskih molekula analiza entalpijskog i entropijskog doprinosa ΔG^{*E} je pokazala da su visoko pozitivne vrednosti posledica negativnog entropijskog doprinosa zbog velike razlike u veličini molekula. Za modelovanje viskoziteta UNIFAC-VISCO model se pokazao kao bolje prediktivni model posebno na višim temperaturama i u sistemima sa izomerima ksilena.

Ključne reči: ravnoteža tečno-tečno, ravnoteža čvrsto-tečno, gustina, viskoznost, indeks refrakcije, jonske tečnosti, organski rastvarači, polimeri, modelovanje

Naučna oblast: Tehnološko inženjerstvo

Uža naučna oblast: Hemijsko inženjerstvo

Thermodynamic analysis of phase equilibria, volumetric and transport properties of multicomponent systems of ionic liquids and organic solvents

Summary

In this doctoral dissertation, binary and pseudobinary mixtures were experimentally determined. Those were thermodynamic equilibrium liquid - liquid and solid - liquid, as well as the influence of adding different co - solvents on the phase balance displacement at atmospheric pressure and in the temperature range from 288.15 K to 371.15 K. All obtained results are presented graphically by forming phase diagrams of temperature - content. Measurements of equilibrium, volumetric and transport properties of multicomponent ecological solvent systems were performed: ionic liquids, polymers and alcohols with organic solvents. The thermodynamic properties of pure components and their mixtures in the temperature range from $T = (288.15-333.15)$ K and at atmospheric pressure were determined experimentally. Density, refractive indices and viscosity of organic solvents in mixtures with industrial pollutants were experimentally measured. Complementary molar volumes V^E , change in viscosity $\Delta\eta$, change in refractive index Δn_D , as well as additional thermodynamic sizes were computed from the experimental data: ΔG^{*E} additional Gibbs viscosity current activation energy, ΔS^{*E} supplemental entropy and ΔH^{*E} supplemental enthalpy, coefficient of isobar expansion α , supplementary iso-expansion expansion ekspanzije α^E . The calculated thermodynamic quantities were used to analyze specific molecular interactions and mixing effects between the components of the mixture, taking into account the geometric packings between the components and the effect of the temperature. The equilibrium data firmly-fluently for all four binary systems were successfully correlated with the NRTL model with two different temperature-dependent parameters Δg_{12} and Δg_{21} . Fourier's transformation infrared (FT-IR) spectroscopy of binary mixtures of nicotine with alcohols and corresponding pure components was performed at 298.15 K in order to clarify molecular structure and intra - and intermolecular interactions in solutions.

The viscosity modeling was performed with two models: the contribution models of the UNIFAC-VISCO and ASOG-VISCO models and the correlative McAllister two-way three-body and three-parametric four-body models. On the basis of the obtained results, it was found that only the addition of PEG 2050 to an aqueous solution of aniline caused a significant co-solvent effect, whereas in the case of PEG 35000 the opposite effect was demonstrated and it proved to be an anti-solvent reducing the solubility of *N,N*-dimethylaniline. The obtained results correlated with the NRTL model revealed good agreement with the experimental. All types of ecological solvents discussed in this thesis (polymers, ionic liquids, alcohols) are complex structures with the ability to adjust their properties for industrial application in the treatment of widely-present organic solvents (nicotine, aniline, *N,N*-dimethylaniline, benzene, toluene, and xylene). Therefore, a detailed thermodynamic characterization and expansion of the thermodynamic database for their mixtures with toxic chemicals is significant. The analysis showed that mixtures of nicotine and propanediol occur in strong interactions compared to mixtures with butanols, which is accordant with their extremely polar nature and the ability to form hydrogen connections. It has been shown that only a simultaneous analysis of the additional molar volumes, additional molar Gibbs energies, additional molar enthalpies, and additional molar entropies of the viscous flow activation can give a detailed explanation of the molecular interactions that exist in the mixture, especially if the molecules of the components differ in size. In the case of a mixture of PPG and aromatic molecules, the analysis of enthalpy and entropy contribution has shown that highly positive values are the result of a negative entropy contribution due to a large difference in molecular size. For viscosity modeling, the UNIFAC-VISCO model proved to be a better predictive model, especially at higher temperatures and in systems with xylene isomers.

Keywords: liquid-liquid equilibria, solid-liquid equilibria, density, viscosity, refractive index, ionic liquids, organic solvents, polymers, modeling

Scientific area: Technological engineering

Special scientific topic: Chemical engineering

Sadržaj

1. Uvod	1
2. Teorijski deo	4
2.1 Ravnotežne osobine LLE, SLE	4
2.1.1 Termodinamička ravnoteža tečno-tečno, LLE	4
2.1.2 Termodinamička ravnoteža čvrsto-tečno, SLE	6
2.2 Volumetrijske i transportne osobine	9
3. Modelovanje termodinamičkih podataka	14
3.1 Modelovanje ravnotežnih podataka	14
3.2 Modelovanje dinamičke viskoznosti	17
4. Eksperimentalni deo	19
4.1 Izbor sistema	19
4.1.1 Polimeri	26
4.1.2 Alkoholi.....	28
4.1.3 Jonske tečnosti.....	28
4.1.4 Toksični rastvori	30
4.2 Pregled eksperimentalnih metoda	34
4.2.1 Eksperimentalna merenja ravnoteže tečno - tečno	34
4.2.2 Eksperimentalna merenja ravnoteže čvrsto - tečno.....	34
4.2.3 Eksperimentalno merenje gustine.....	35
4.2.4 Eksperimentalno merenje indeksa refrakcije	35
4.2.5 Eksperimentalno merenje viskoznosti.....	36
4.2.6 Fourier-ova transformaciona infracrvena spektroskopija	36
4.2.7 Karl-Fisher titraciona metoda.....	36
5. Rezultati eksperimentalnih merenja i modelovanja ispitivanih veličina	37
5.1 Rezultati eksperimentalnog merenja ravnotežnih podataka	38
5.1.1 Modelovanje ravnotežnih podataka	48
5.2 Rezultati eksperimentalnih merenja volumetrijskih i transportnih osobina 49	
5.2.1 Korišćenje alkohola u tretmanu nikotina u otpadnim vodenim tokovima.....	50
5.2.2 Uklanjanje toksičnih hemikalija korišćenjem jonskih tečnosti	61
5.2.3 Primena polipropilena u tretmanu toksičnih hemikalija	69
6. Zaključak	81
7. Literatura	85

1. Uvod

Prethodni vek obeležio je rapidni razvoj industrije zajedno sa porastom broja i količine hemikalija koje su korišćene u različitim proizvodnim procesima. Većina njih je toksična sa visokim negativnim uticajem na životnu sredinu i zdravlje čoveka. Statistika je dokazala da veliki udeo u formiranju ozona u troposferi zauzimaju upravo industrijski organski rastvarači. Stoga je 21.vek doneo sa sobom preokret ka upotrebi manje toksičnih i manje isparljivih supstanci a sve u cilju smanjenja zagađenja i smanjenja potrošnje resursa i energije. Sve ovo je objedinjeno kroz dizajn inovativnih procesa, implementaciju novih tehnologija visoke produktivnosti (vođenje procesa na nižim temperaturama i pritiscima) i planiranje prevencije zagađenja. Veliku ulogu u pomenutom smanjenju zagađenja ima i ispitivanje primene takozvanih ekološki prihvatljivih rastvarača.

Pored primene ekološki prihvatljivih rastvarača, važan aspekt projektovanja procesa je i dizajn energetske efikasne procesa to jest odvijanje istih u uslovima sobne temperature i atmosferskog pritiska.

Važnu ulogu u dobijanju proizvoda visoke čistoće igraju i separacioni procesi. Većina ovih procesa odvija se na višim temperaturama i pritiscima tako da osim što su ekonomski neisplativi, ove procese prati i emisija velike količine štetnih gasova. Ostali separacioni procesi (destilacija, apsorpcija, ekstrakcija) iziskuju poznavanje hemijskih struktura, kvantitativno određivanje parcijalnih ravnotežnih veličina smeša fluida, poznavanje specifičnih molekularnih interakcija, efekata mešanja, i još uvek su nedovoljno ispitani.

Poznavanje ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih osobina višekomponentnih sistema je od velikog značaja za analizu njihovog ponašanja. Analizom dobijenih osnovnih, izvedenih i parcijalnih termodinamičkih veličina mogu se objasniti međumolekulske interakcije u višekomponentnim sistemima i na taj način definisati specifično ponašanje i veliko odstupanje od idealnosti. Poznavanje parcijalnih veličina pri beskonačnom razblaženju je značajno i zbog utvrđivanja uticaja različitih toksičnih supstanci koje se u manjim količinama otpuštaju u okolinu.

Imajući u vidu navedenu problematiku cilj ove teze je bilo ispitivanje alternativnih rastvarača i njihove potencijalne primene u nekim separacionim procesima. Iznalaženje rastvarača velike selektivnosti doprinelo bi poboljšanju efikasnosti separacionog procesa i omogućilo takav dizajn ekološki prihvatljive separacije sa manjom količinom netoksičnog rastvarača. U disertaciji je izvršena detaljna termodinamička analiza ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih osobina svakog od alternativnih rastvarača pojedinačno ali i njihovih binarnih smeša sa toksičnim supstancama. Alternativni rastvarač je posmatran kao separacioni agens i kroz definisanje termodinamičkih ravnotežnih podataka njihovih smeša sa toksičnim supstancama analizirana je efikasnost ekološki prihvatljivog rastvarača. Analizirane su tri klase alternativnih rastvarača:

➤ Polimeri

Polietilen glikoli – PEG srednje molekulske mase 2050 i 35000. Polietilen glikoli zbog svojih osobina^{1,2,3,4,5,6} imaju veoma široku primenu u industriji^{7,8} kao potpuno netoksični i ekološki prihvatljivi polimeri.

Polipropilen glikol – PPG srednje molekulske mase 425 i 2000. Polipropilen glikoli su strukturno veoma slični polietilen glikolima^{9,10} i već su našli primenu u različitim industrijskim procesima¹¹ ali su nedovoljno istraženi u termodinamičkom smislu.

➤ Jonske tečnosti

Jonske tečnosti¹² su tečnosti 21. veka zbog svojih atraktivnih hemijskih karakteristika: niske isparljivosti^{13,14}, niske temperature topljenja^{15,16}, podesivih konformacijama¹⁷ koje impliciraju podesivim hemijskim karakteristikama, jonske odnosno polarne prirode^{18,19,20,21}, i raznolikosti dozvoljenih interakcija u njihovim smešama^{22,23,24,25,26}.

Za analizu su odabrane sledeće jonske tečnosti:

1-Butil-3-methylimidazolium triflate, [bmim][OTf] i

1-Butil-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide, [bmim][NTf₂]

➤ Alkoholi

Široko korišćeni rastvarači^{27,28} koji pokazuju u manjoj meri toksičnost. Za analizu su odabrani: 1-butanol, 2-butanol, 1,2-propandiol, i 1,3-propandiol.

Izabrane toksične supstance su: nikotin^{29,30}, anilin, *N,N*-dimetilanilin, benzen^{31,32}, toluene, o-, m-, p-ksilen. Sve ove supstance su veliki industrijski zagađivači i većina su sastavni deo otpadnih industrijskih tokova.

Prvi deo disertacije se bavio eksperimentalnim merenjima termodinamičkih ravnoteža tečno - tečno, (LLE - *Liquid - Liquid Equilibria*), binarnih i pseudo-binarnih smeša, i merenjem termodinamičke ravnoteže čvrsto - tečno, (SLE - *Solid - Liquid Equilibria*). Ispitivane su mogućnosti pomeranja oblasti rastvorljivosti, odnosno nerastvorljivosti dodavanjem ko - rastvarača ili anti - rastvarača.

U drugom delu je izvršena analiza mešljivosti alternativnih rastvarača sa izabranim toksičnim supstancama. Za određene smeše je ustanovljena potpuna mešljivost dok su neke ispoljile i delimičnu mešljivost. Za potpuno mešljive sisteme izvršena je detaljna termodinamička analiza smeša, merene su gustine, indeksi refrakcije i viskoznost. Pomoću određenih termodinamičkih veličina analizirane su molekulske interakcije u smešama što bitno doprinosi fundamentalnom razumevanju teorije tečnog stanja.

U cilju primene ispitivanih rastvarača i njihovih binarnih smeša neophodno je poznavanje termodinamike rastvora kako bi se konkretizovala njihova primena u industriji. Za neke procese je od interesa poznavanje osobina smeše, dok za druge procese važnost ima poznavanje parcijalnih osobina jedne komponente u smeši. Stoga je jedan deo teze bio posvećen proračunu ravnoteže faza a drugi određivanju transportnih i volumetrijskih svojstava. Na taj način termodinamičkom faznom karakterizacijom moguće je postaviti osnovu za dizajn sepracionog procesa kojim bi se vršilo uklanjanje toksičnih supstanci iz otpadnih industrijskih tokova.

2. Teorijski deo

2.1 Ravnotežne osobine LLE, SLE

2.1.1 Termodinamička ravnoteža tečno-tečno, LLE

U većini slučajeva prilikom mešanja dve tečnosti ne dolazi do formiranja homogene faze već do delimično mešljivih tečnih sistema. U takvim sistemima dolazi do formiranja dve faze, pri čemu je jedna faza bogatija jednom komponentom a druga faza drugom komponentom.

Matematičko opisivanje pomenutih ravnotežnih uslova³³ i neidealnosti obe faze, polazi od jednakosti fugaciteta dve tečne faze, tečne faze se označavaju sa I II u super skriptu:

$$\hat{f}_i^I = \hat{f}_i^{II} \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n) \quad (2.5)$$

i uvođenjem koeficijenata aktivnosti za obe komponente preko relacije $\hat{f}_i^I = x_i^{II} \gamma_i^{II} f_i^I$ kriterijum ravnoteže postaje:

$$x_i^I \gamma_i^I f_i^I = x_i^{II} \gamma_i^{II} f_i^{II} \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n) \quad (2.6)$$

Odnosno,

$$k_i^I = \frac{x_i^H}{x_i^I} = \frac{\gamma_i^I}{\gamma_i^H} \frac{f_i^I}{f_i^H} \quad (2.7)$$

Ravnotežni odnos k_i^I se zove koeficijent raspodele komponente i u dve tečne faze. Dok je fugacitet čiste komponente dat sledećom jednačinom:

$$f_i = \varphi_i^{sat} P_i^{sat} \exp \left[V_i^L \left(\frac{P - P^{sat}}{RT} \right) \right] \quad (2.8)$$

gde je: φ_i^{sat} - koeficijent fugaciteta čiste zasićene pare i na T i P_i^{sat} , V_i^L - molarna zapremina čiste tečnosti i na temperaturi T , P_i^{sat} - napon pare čiste tečne komponente i na temperaturi T .

Ako na datoj temperaturi T sistema svaka čista komponenta postoji u tečnom obliku, $f_i^I = f_i^H = f_i$, ravnoteža se svodi na:

$$x_i^I \gamma_i^I = x_i^H \gamma_i^H \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n) \quad (2.9)$$

Pa se jednačina (2.7) svodi na:

$$k_i^I = \frac{x_i^H}{x_i^I} = \frac{\gamma_i^I}{\gamma_i^H} \quad (2.10)$$

Koeficijenti aktivnosti za svaku komponenti γ_i^I i γ_i^H , funkcijski su identični, karakterišu ih samo različiti molski udeli na koje se odnose:

$$G^E = RT \sum_{i=1}^n x_i \ln \gamma_i \quad (2.11)$$

gde je G^E dopunska Gibsova energija.

Za termodinamički sistem tečno-tečno koji sadrži n komponenata važi:

$$\gamma_i^I = \gamma_i(x_1^I, x_2^I, \dots, x_{N-1}^I, T, P) \quad (2.12)$$

$$\gamma_i^H = \gamma_i(x_1^H, x_2^H, \dots, x_{N-1}^H, T, P) \quad (2.13)$$

Za binarni sistem tečno-tečno za koji je $p = \text{const.}$ ili temperaturama dovoljno niskim da se uticaj pritiska na koeficijent aktivnosti može zanemariti, jednačina (2.9) sa jednim nezavisnim molskim udelom po fazi postaje:

$$x_1^I \gamma_1^I = x_1^{II} \gamma_1^{II} \quad (2.14)$$

ili

$$(1 - x_1^I) \gamma_2^I = (1 - x_1^{II}) \gamma_2^{II} \quad (2.15)$$

gde su koeficijenti aktivnosti definisani:

$$\gamma_i^I = \gamma_i(x_1^I, T) \text{ i } \gamma_i^{II} = \gamma_i(x_1^{II}, T) \quad (2.16)$$

Fiksiranjem promenljive T i rešavanjem jednačina (2.15) i (2.16) za druge dve promenljive dobija se:

$$\ln \frac{\gamma_1^I}{\gamma_1^{II}} = \ln \frac{x_1^{II}}{x_1^I} \quad (2.17)$$

$$\ln \frac{\gamma_2^I}{\gamma_2^{II}} = \ln \frac{1 - x_1^{II}}{1 - x_1^I} \quad (2.18)$$

2.1.2 Termodinamička ravnoteža čvrsto-tečno, SLE

Ravnotežni uslovi čvrsto-tečno³⁴, SLE se opisuju analogno onima za sisteme tečno-tečno mada se umesto analitičkog modela najčešće koriste dijagrami dobijeni eksperimentalno. Za najjednostavniji slučaj fazne ravnoteže sistema jedne čvrste i jedne tečne komponente osnove jednačine su:

$$\hat{f}_i^L = \hat{f}_i^S \quad (2.19)$$

$$x_i \gamma_i^L f_i^L = z_i \gamma_i^S f_i^S \quad (2.20)$$

gde su x_i i z_i molski udeli komponente i u tečnom i čvrstom rastvoru, respektivno.

Ekvivalentno,

$$x_i \gamma_i^L = z_i \gamma_i^S \zeta_i \quad (2.20)$$

gde je

$$\zeta_i \equiv f_i^S(T, P) / f_i^L(T, P) \quad (2.21)$$

Desna strana ove jednačine definiše ψ_i kao odnos fugaciteta na temperaturi T i pritisku P sistema. Za svaku čistu komponentu na njenoj temperaturi topljenja $T_{m,i}$ važi:

$$f_i^S(T_{m,i}, P) = f_i^L(T_{m,i}, P) \quad (2.22)$$

Međutim na $T \neq T_{m,i}$ ova jednakost ne važi te je potrebno izvesti odgovarajuću formulu za ζ_i definisano jednačinom (2.21). S obzirom da svojstva čvrstih supstanci ne zavise od pritiska u značajnoj meri, radi lakšeg proračuna može se pretpostaviti da je referentna temperatura jednaka normalnoj temperaturi topljenja $T_{m,i}$. Shodno tome bilo za čvrstu bilo za tečnu komponentu može se definisati:

$$\Delta H_T^{fus} = \int_T^{T_m} C_P^L dT + \Delta H_{T_m}^{fus} + \int_{T_m}^T C_P^S dT \quad (2.23)$$

ili,

$$\Delta H_T^{fus} = \Delta H_{T_m}^{fus} + \int_{T_m}^T (C_P^S - C_P^L) dT \quad (2.24)$$

U svrhu lakšeg proračuna pretpostavimo da se čvrsta komponenta (1) rastvara u tečnoj komponenti (2). Polazna tačka je jednačina (2.20). Da bismo je primenili pretpostavimo da se tečna faza ne rastvara u čvrstoj fazi. Stoga je čvrsta faza čisto jednokomponentna dok je tečna faza dvokomponentna. Fazna jednačina se sada može napisati kao:

$$f_1^S(T, P) = \hat{f}_1^L(T, P, x_1) \quad (2.25)$$

i

$$\hat{f}_1^L(T, P, x_1) = x_1 \gamma_1(T, P, x_1) f_1^L \quad (2.26)$$

Iz ove dve jednačine ravnotežna rastvorljivost čvrste komponente (x_1) u tečnosti se može izraziti kao:

$$x_1 = \left(\frac{f_1^S}{f_1^L} \right) \left(\frac{1}{\gamma_1(T, P, x_1)} \right) \quad (2.27)$$

Kako su koeficijenti aktivnosti funkcije temperature i sastava imamo:

$$x_1 = \left(\frac{f_1^S}{f_1^L} \right) \left(\frac{1}{\gamma_1(T, x_1)} \right) \quad (2.28)$$

Sa pretpostavkom da je temperatura na kojoj se vrši rastvaranje jednaka temperaturi topljenja čvrste komponente onda je $f_1^S(T_m) = f_1^L(T_m)$.

Odatle proizilazi:

$$x_1 = \frac{1}{\gamma_1(T_m, x_1)} \quad (2.29)$$

Međutim za bilo koju temperaturu različitu od T_m mora se upotrebiti jednačina (2.28).

Odatle sledi:

$$\ln x_1 = -\ln \gamma_1 - \ln \left(\frac{f_1^S}{f_1^L} \right) \quad (2.30)$$

Zamenom članova u jednačini (2.30.) može se izraziti:

$$\ln x_1 = -\ln \gamma_1 - \left[\frac{\Delta H_{T_m}^{fus}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right) + \frac{(C_p^S - C_p^L)}{R} \left(1 - \frac{T_m}{T} - \ln \frac{T}{T_m} \right) \right] \quad (2.31)$$

Jednačina (2.31) se može rešiti iterativno sa pretpostavkom pogodnog modela koeficijenta aktivnosti za tečnu fazu (npr. van Laar, NRTL itd.). U posebnom slučaju gde posmatrana temperature T bliska temperaturi topljenja T_m , jednačina se može svesti na:

$$\ln x_1 = -\ln \gamma_1 - \left[\frac{\Delta H_{T_m}^{fus}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right) \right] \quad (2.32)$$

2.2 Volumetrijske i transportne osobine

Poznavanje volumetrijskih i transportnih osobina čistih komponenti i njihovih smeša je neophodno u industriji, kako za proračune i projektovanje tehnoloških procesa, tako i za projektovanje same tehnološke i procesne opreme.

Za opisivanje neidealnog ponašanja smeša koriste se sledeće termodinamičke veličine: gustina, dopunska molarna zapremina, parcijalna molarna zapremina, koeficijent zapreminske ekspanzije, indeks refrakcije i promena indeksa refrakcije smeše, kao i druge volumetrijske osobine smeša: koeficijent izobarske ekspanzije i izotermni koeficijent pritiska, dopunske molarne entalpije.

Dopunska molarna zapremina smeše V^E se definiše jednačinom:

$$V^E = V - \sum_{i=1}^N x_i V_i \quad (2.33)$$

gde je V molarna zapremina smeše, V_i molarna zapremina čiste komponente i , x_i molni udeo komponente i , a N broj komponenta smeše.

Promena indeksa refrakcije smeše Δn_D u odnosu na indeks refrakcije koji bi imala idealna smeša definisana je jednačinom:

$$\Delta n_D = n_D - \sum_{i=1}^N x_i n_{Di} \quad (2.34)$$

gde su n_D indeks refrakcije smeše, Δn_{Di} indeks refrakcije čiste komponente i , a x_i molni udeo komponente i .

Promena viskoznosti u odnosu na viskoznost čiste komponente se definiše jednačinom:

$$\Delta \eta = \eta - \sum_{i=1}^N x_i \eta_i \quad (2.35)$$

gde η predstavlja viskoznost smeše i η_i viskoznost čiste komponente i .

Za binarni sistem dopunska molarna zapremina V^E se određuje iz eksperimentalno izmerenih gustina smeše i čistih komponenta jednačinom:

$$V^E = \frac{x_1 M_1 + x_2 M_2}{\rho} - \left(\frac{x_1 M_1}{\rho_1} + \frac{x_2 M_2}{\rho_2} \right) \quad (2.36)$$

Promena indeksa refrakcije Δn_D se izvodi iz jednačine (2.34) a na osnovu eksperimentalno izmerenih indeksa refrakcije smeše i čistih komponenti:

$$\Delta n_D = n_D - (x_1 n_{D1} + x_2 n_{D2}) \quad (2.37)$$

U jednačinama (2.36) i (2.37) x_1 i x_2 predstavljaju molske udele, M_1 i M_2 molarne mase, ρ_1 i ρ_2 gustine i n_{D1} i n_{D2} indeksi refrakcije čistih komponenata 1 i 2, respektivno. Gustina smeše je označena sa ρ dok je n_D indeks refrakcije binarne smeše.

Vrednosti dopunske molarne zapremine V^E , promene viskoznosti $\Delta\eta$ i promene indeksa refrakcije Δn_D binarnih smeša se korelišu pomoću Redlich-Kisterovog (RK) polinoma³⁵ datog jednačinom:

$$Y_{ij} = x_i x_j \sum_{k=1}^m A_k (x_i - x_j)^{k-1} = x_i x_j \sum_{k=1}^m A_k (2x_i - 1)^{k-1} \quad (2.38)$$

gde je Y_{ij} označava dopunsku molarnu zapreminu V^E ili promenu indeksa refrakcije Δn_D binarnog sistema ij , dok su A_k parametri polinoma i $k+1$ broj parametara RK polinoma koji se određuje pomoću F-testa³⁶.

Za obradu eksperimentalnih podataka koristimo:

1. srednje kvadratno odstupanje („root mean square deviation “– RMSD):

$$\sigma = \left[\frac{\sum_{i=1}^K (Y_{eksp} - Y_{rač})_i^2}{K} \right]^{1/2} \quad (2.39)$$

gde je Y_{eksp} eksperimentalne vrednosti V^E i Δn_D binarne smeše, a $Y_{rač}$ izračunate vrednosti V^E i Δn_D iz jednačine (2.38) za binarnu smešu i K broj eksperimentalnih tačaka.

2. srednja procentualna greška PD (%):

$$PD(\%) = \frac{100}{K} \sum_{i=1}^K \left| \frac{Y_{eksp} - Y_{rač}}{Y_{eksp, \max}} \right|_i \quad (2.40)$$

gde je $Y_{eksp, \max}$ maksimalna eksperimentalna vrednost dopunske molarne zapremine V^E ili promene indeksa refrakcije Δn_D binarnog sistema, dok su ostale veličine kao u jednačini (2.39).

Za određivanje parcijalne molarne zapremine polazi se od Ridlich-Kisterove jednačine, oblika³⁷:

$$V^E = x_1 x_2 \sum_{p=0}^m A_p (x_1 - x_2)^p \quad (2.41)$$

gde je:

$$A_p = \sum_{q=0}^k A_{pq} T^q \quad (2.42)$$

kroz parametre A_p uvedena temperaturna zavisnost, i gde se optimalni broj parametara A_{pq} modifikovanog RK polinoma određuje primenom F-testa³⁶.

Temperaturni uticaj na molarnu zapreminu ili dopunsku molarnu zapreminu izražava se preko koeficijenta izobarske ekspanzije ili izobarske termičke ekspanzivnosti α , koji se definiše preko jednačine:

$$\alpha = (\partial \ln \rho / \partial T)_{P,x} = (1/V)(\partial V / \partial T)_{P,x} = (1/V^E)(\partial V^E / \partial T)_{P,x} \quad (2.43)$$

Molarna zapremina i dopunska molarna zapremina povezane su jednačinom:

$$V = \sum_{i=1}^N x_i V_i + V^E \quad (2.44)$$

gde N definiše broj komponenata smeše. Diferenciranjem jednačine (2.43) i njenim deljenjem sa V dobija se jednačina:

$$\alpha = V^{-1} \left[\left(\partial V^E / \partial T \right)_{p, x_i} + \sum_{i=1}^N \alpha_i x_i V_i \right] \quad (2.45)$$

gde α i α_i predstavljaju koeficijente izobarske ekspanzije smeše, odnosno čiste komponente. Dopunski koeficijent izobarske ekspanzije izračunava se jednačinom:

$$\alpha^E = \alpha - \sum_{i=1}^N \phi_i \alpha_i \quad (2.46)$$

gde ϕ_i predstavlja zapreminski udeo komponente i :

$$\phi_i = x_i V_i / \sum_{i=1}^N x_i V_i \quad (2.47)$$

Kada su nam poznate eksperimentalne vrednosti dopunskih molarnih zapremina smeše na više temperatura, možemo izračunati izotermni koeficijent pritiska dopunske molarne entropije $(\partial H^E / \partial P)_{T, x}$, koji predstavlja zavisnost dopunske molarne entropije od pritiska za određeni sastav i temperaturu, sledećom jednačinom:

$$\left(\partial H^E / \partial P \right)_{T, x} = V^E - T \left(\partial V^E / \partial T \right)_{p, x} \quad (2.48)$$

Ove veličine predstavljaju zavisnost dopunske molarne entalpije od pritiska, za određeni sastav i određenu temperaturu. Parcijalne molarne veličine su veoma značajne u analizi zavisnosti ekstenzivne veličine, kao što je zapremina, od sastava, pri $T, p = \text{const.}$ ukazujući na efekat ekspanzije ili kontrakcije zapremine sa sastavom. Parcijalne molarne zapremine komponenata 1 i 2, u dvokomponentnoj smeši \bar{V}_1 i \bar{V}_2 , izračunavaju se iz dopunske molarne zapremine korišćenjem sledećih jednačina:

$$\bar{V}_1 = V^E + V_1 + (1 - x_1) \left(\partial V^E / \partial x_1 \right)_{p, T} \quad (2.49)$$

$$\bar{V}_2 = V^E + V_2 + x_1 \left(\partial V^E / \partial x_1 \right)_{p, T} \quad (2.50)$$

gde su V_1 i V_2 molarne zapremine čistih komponenata 1 i 2. Iz jednačina (2.49) i (2.50) i diferenciranjem jednačine (2.41) po x_1 , dobijaju se sledeće jednačine za parcijalnu molarnu zapreminu:

$$\bar{V}_1 = V_1 + (1-x_1)^2 \left[\sum_{p=0}^m A_p (2x_1-1)^p + x_1 \sum_{p=1}^m 2pA_p (2x_1-1)^{p-1} \right] \quad (2.51)$$

$$\bar{V}_2 = V_2 + (1-x_2)^2 \left[\sum_{p=0}^m A_p (2x_1-1)^p + x_2 \sum_{p=1}^m (-2)pA_p (2x_1-1)^{p-1} \right] \quad (2.52)$$

Gde je parametar A_p je temperaturno zavisan definisan jednačinom (2.42). Dopunska parcijalna molarna zapremina komponente 1 i 2 se izračunava iz sledećih izraza:

$$\bar{V}_1^E = \bar{V}_1 - V_1 = V^E + (1-x_1) \left(\frac{\partial V^E}{\partial x_1} \right)_{p,T} \quad (2.53)$$

$$\bar{V}_2^E = \bar{V}_2 - V_2 = V^E + x_1 \left(\frac{\partial V^E}{\partial x_1} \right)_{p,T} \quad (2.54)$$

gde su \bar{V}_1 i \bar{V}_2 parcijalne molarne zapremine izračunate iz jednačina (2.51) i (2.52).

Dopunska molarna Gibsova energija aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} se definiše sledećom jednačinom:

$$\Delta G^{*E} = RT \left[\frac{\ln \eta V}{\eta_2 V_2} - \frac{x_1 \ln(\eta_1 V_1)}{\eta_2 V_2} \right] \quad (2.55)$$

dok se dopunska entropija i dopunska entalpija aktivacije viskoznog toka izračunavaju sledećim dvema jednačinama:

$$\Delta S^{*E} = - \left(\frac{\partial (\Delta G^{*E})}{\partial T} \right)_{p,x} \quad (2.56)$$

$$\Delta H^{*E} = \Delta G^{*E} - T \Delta S^{*E} \quad (2.57)$$

Vrednosti dopunske molarne Gibsove energije aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} se korelišu pomoću Redlich-Kisterovog (RK) polinoma³⁵ datom jednačinom (2.38).

3. Modelovanje termodinamičkih podataka

3.1 Modelovanje ravnotežnih podataka

Eksperimentalni ravnotežni podaci ispitivanih binarnih smeša korelisani su NRTL³⁸ i UNIQUAC modelima. Za modelovanje sistema tečno-tečno, potrebno je poznavanje temperature i sastava svake komponente u svakoj fazi rastvora. reference

NRTL metodom se koreliše G^E pomoću γ_i . Ovaj model povezuje koeficijent aktivnosti γ_i i molske udele x_i u tečnoj fazi, primenljiv je na delimično mešljive sisteme kao i na potpuno mešljive sisteme. Za binarne sisteme dopunska Gibbs-ova energija definisana je relacijom:

$$\frac{G^E}{RT} = \sum_{k=1}^2 x_k \ln \gamma_k \quad (3.1)$$

dok se koeficijent aktivnosti γ u NRTL modelu za binarne sisteme definiše pomoću sledećih jednačina:

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left[\frac{\tau_{12} G_{12}}{(x_2 + G_{12} x_1)^2} + \tau_{21} \left(\frac{G_{21}}{x_1 + G_{21} x_2} \right)^2 \right] \quad (3.2)$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left[\frac{\tau_{21} G_{21}}{(x_1 + G_{21} x_2)^2} + \tau_{12} \left(\frac{G_{12}}{x_2 + G_{12} x_1} \right)^2 \right] \quad (3.3)$$

Zamenom u jednačini (3.1) dobijamo:

$$\frac{G^E}{RT} = x_1 x_2 \left(\frac{\tau_{12} G_{12}}{x_2 + G_{12} x_1} + \frac{\tau_{21} G_{21}}{x_1 + G_{21} x_2} \right) \quad (3.4)$$

Gde su binarni interakcioni parametri definisani pomoću relacija (3.5) - (3.10)

$$G_{12} = \exp(-\alpha_{12} \tau_{12}) \quad (3.5)$$

$$G_{21} = \exp(-\alpha_{21} \tau_{21}) \quad (3.6)$$

$$\tau_{12} = \frac{\Delta g_{12}}{RT} \quad (3.7)$$

$$\tau_{21} = \frac{\Delta g_{21}}{RT} \quad (3.8)$$

$$G_{12} \neq G_{21} \quad (3.9)$$

$$\alpha_{12} = \alpha_{21} \quad (3.10)$$

gde su: T temperatura i R univerzalna gasna konstanta, $\alpha_{12} = \alpha_{21}$ parametri NRTL modela.

Δg_{12} i Δg_{21} su promene energetske parametara binarne smeše NRTL modela koji karakterišu interakciju molekula smeše. Shodno tome NRTL model ima tri parametra (α , Δg_{12} i Δg_{21}). Za veliki broj binarnih sistema pokazalo se da vrednost parametra α se kreće od 0.2 do 0.47. U slučaju kada nemamo dovoljan broj eksperimentalnih podataka, vrednost parametra α se može podesiti proizvoljno. Pokazalo se da temperatura ima veliki uticaj na dopunske osobine tako da je uvedeno nekoliko različitih formi temperaturno nezavisnih i zavisnih parametara Δg_{12} i Δg_{21} .

Forma I

$$\Delta g_{12} = A_{12} \quad (3.11)$$

$$\Delta g_{21} = A_{21} \quad (3.12)$$

Forma II

$$\Delta g_{12} = A_{12} + B_{12} T \quad (3.13)$$

$$\Delta g_{21} = A_{21} + B_{21} T \quad (3.14)$$

Forma III

$$\Delta g_{12} = A_{12} + B_{12}T + C_{12}T^2 \quad (3.15)$$

$$\Delta g_{21} = A_{21} + B_{21}T + C_{21}T^2 \quad (3.16)$$

Forma IV

$$\Delta g_{12} = A_{12} + B_{12}T + C_{12}/T^2 \quad (3.17)$$

$$\Delta g_{21} = A_{21} + B_{21}T + C_{21}/T^2 \quad (3.18)$$

i

Forma V

$$\Delta g_{12} = A_{12} + B_{12}T + C_{12} \ln T^2 \quad (3.19)$$

$$\Delta g_{21} = A_{21} + B_{21}T + C_{21} \ln T^2 \quad (3.20)$$

Binarni interakcioni parametri iz eksperimentalnih podataka određeni su primenom optimizacione tehnike za minimizovane funkcije cilja jednačinom:

$$OF = \sum_{j=1}^n (T_j^{\text{exp}} - T_j^{\text{calc}})^2 \quad (3.21)$$

gde je n broj eksperimentalnih tačaka, T_j^{exp} i T_j^{calc} označavaju eksperimentalne i izračunate vrednosti temperature. T_j^{calc} se izražava pomoću jednačine:

$$\ln x_i = \frac{\Delta_{fus} H_{m,i}}{RT} \left(\frac{T}{T_{m,i}} - 1 \right) - \ln \gamma_i \quad (3.22)$$

gde je γ_i koeficijent aktivnosti komponente i u smeši odgovarajuće temperature T , x_i molski udeo, R gasna konstanta. $T_{m,i}$ je temperatura topljenja čvrste faze i $\Delta_{fus} H_{m,i}$ molarna entalpija topljenja na istoj temperaturi.

Odstupanje izračunatih vrednosti temperature od eksperimentalno određenih definisano je apsolutnim srednjim odstupanjem ΔT , i srednjom procentualnom greškom $PD(T)$ za svaki binarni sistem

$$\Delta T = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |T_j^{\text{exp}} - T_j^{\text{calc}}| \quad (3.23)$$

$$PD(T), \% = \frac{100}{n} \sum_{j=1}^n \left| \frac{T_j^{\text{exp}} - T_j^{\text{calc}}}{T_j^{\text{exp}}} \right| \quad (3.24)$$

3.2 Modelovanje dinamičke viskoznosti

Viskoznost se može modelovati sa prediktivnim i korelativnim modelom. Prediktivni modeli koji su korišćeni u ovom radu su UNIFAC-VISCO^{39,40} i ASOG-VISCO⁴¹ modeli. Prediktivni modeli su u osnovi modeli doprinosa grupa preko kojih se može definisati koeficijent aktivnosti jednačinama:

UNIFAC-VISCO

$$\ln \eta = \sum_i x_i \ln(\eta_i V_i) - \ln V + \frac{\Delta^* g^{EC}}{RT} + \frac{\Delta^* g^{ER}}{RT} \quad (3.25)$$

gde se i indeks odnosi na čiste komponente, x_i je molski udeo komponente i , η dinamička viskoznost smeše.

ASOG-VISCO

$$\ln(\nu M) = \sum_i x_i (\nu_i V_i) - \frac{\Delta G^E}{RT} \quad (3.26)$$

gde se i indeks odnosi na čiste komponente, x_i je molski udeo komponente i , ν je kinematska viskoznost smeše, a ΔG^E je dopunska Gibsova energija. Parametri koji karakterišu interakcije između strukturnih grupa se nazivaju interakcioni parametri grupa: α_{nm} za UNIFAC-VISCO i m_{kl} i n_{kl} za ASOG-VISCO model.

Ako su parametri literaturno poznati nije ih potrebno određivati ponovo. U slučaju ispitivanih binarnih sistema bilo je potrebno odrediti i nove interakcione parametre iz eksperimentalnih podataka Marquardt optimizacionom tehnikom za minimizovanje funkcija cilja:

$$OF = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left(\frac{\eta_{\text{exp}} - \eta_{\text{calc}}}{\eta_{\text{exp}}} \right)^2 \rightarrow \min \quad (3.27)$$

gde je m broj eksperimentalnih tačaka i η_{exp} i η_{calc} eksperimentalna i izračunata

vrednost dinamičke viskoznosti. Na sličan način određuju se i novi interakcioni parametri za ASOG-VISCO model.

Od korelativnih modela u radu su korišćeni McAllister⁴² dvoparametarski *three-body* i troparametarski *four-body* model.

McAllister-3

$$\begin{aligned} \ln \nu = & x_1^3 \ln \nu_1 + 3x_1^2 x_2 \ln \nu_{12} + 3x_1 x_2^2 \ln \nu_{21} + x_2^3 \ln \nu_2 - \ln \left(x_1 + x_2 \frac{M_2}{M_1} \right) + \\ & 3x_1^2 x_2 \ln \left(\frac{2 + M_2/M_1}{3} \right) + 3x_1 x_2^2 \ln \left(\frac{2 + M_2/M_1}{3} \right) + x_2^3 \ln \left(\frac{M_2}{M_1} \right) \end{aligned} \quad (3.28)$$

gde su ν_{12} i ν_{21} interakcioni parametri dobijeni regresionom analizom, M_i i ν_i su molekulska masa i kinematska viskoznost čiste komponente i , redom.

McAllister-4

$$\begin{aligned} \ln \nu = & x_1^4 \ln \nu_1 + 4x_1^3 x_2 \ln \nu_{1112} + 6x_1^2 x_2^2 \ln \nu_{1122} + 4x_1 x_2^3 \ln \nu_{2221} + x_2^4 \ln \nu_2 - \\ & \ln \left(x_1 + x_2 \frac{M_2}{M_1} \right) + 4x_1^3 x_2 \ln \left(\frac{3 + M_2/M_1}{4} \right) + 6x_1^2 x_2^2 \ln \left(\frac{1 + M_2/M_1}{2} \right) + \\ & 4x_1 x_2^3 \ln \left(\frac{1 + 3M_2/M_1}{4} \right) + x_2^4 \ln \left(\frac{M_2}{M_1} \right) \end{aligned} \quad (3.29)$$

gde su ν_{1112} , ν_{1122} i ν_{2221} binarni interakcioni parametri dobijeni regresionom analizom.

Odstupanje izračunatih vrednosti dinamičke viskoznosti od eksperimentalno određenih definisano je maksimalnom procentualnom greškom PD_{\max} jednačinom:

$$PD_{\max}(\eta) = \frac{100}{m} \sum_{i=1}^m \left| \frac{\eta_{\text{exp}} - \eta_{\text{calc}}}{(\eta_{\text{exp}})_{\max}} \right|_i \quad (3.30)$$

gde je m broj eksperimentalnih tačaka, $(\eta_{\text{exp}})_{\max}$, maksimalna eksperimentalna vrednost η .

4. Eksperimentalni deo

4.1 Izbor sistema

Za analizu u ovoj disertaciji izabrane su komponente i smeše čije termodinamičke i termo fizičke osobine nisu poznate. Izabrane komponente su zastupljene u različitim industrijskim procesima. Neke od njih su visoko toksične supstance dok neke imaju izražen ekološki značaj. Analizirane su među molekulske veze i prostorna pakovanja u sistemima njihovo veće ili manje odstupanje od idealnosti, i na osnovu toga vršeno je planiranje eksperimenata i izbor hemikalija, kao i ispitivanje zamene jedne komponente smeše drugom.

Ovom disertacijom razmatrani su ekološki prihvatljivi rastvarači:

1. polimeri: PEG2050, PEG 35000, PPG 425, PPG 2000;
2. jonske tečnosti: 1-Butil-3-methylimidazolium triflate, $[bmim][OTf]$ i 1-Butil-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide, $[bmim][NTf_2]$;
3. alkoholi: 1-butanol, 2-butanol, 1,2-propandiol, 1,3-propandiol.

Izabrane toksične supstance su: nikotin, anilin, *N,N*-dimetilanilin, benzen, toluene, o-, m-, p-ksilen.

Tabelom 4.1 definisane su osnovne karakteristike hemikalija korišćenih u ovoj disertaciji. Sve hemikalije čuvane su u tamnim bocama u internoj atmosferi azota i ultrazvučno degazirane pre pripreme uzoraka.

Tabela 4.1 Čistoće, proizvođači i metode prečišćavanja hemikalija korišćenih u radu

Hemikalija	Proizvođač	Čistoća (maseni %)	Metoda prečišćavanja/sušenja
PEG 2050	Sigma-Adrich (Germany)	≥ 0.995	
PEG 35000	Sigma-Adrich (Germany)	≥ 0.995	
PPG 425	Acros Organics		
PPG 2000	Acros Organics		
PPG 4000	Acros Organics		
$[bmim][OTf]$	IOLITEC	0.99	
$[bmim][NTf_2]$	IOLITEC	0.99	
1-butanol	Merck	≥ 0.995	
2-butanol	Fluka	≥ 0.995	
1,2-propandiol	Fluka	≥ 0.995	
1,3-propandiol	Merck	≥ 0.98	
Nikotin	Merck	≥ 0.99	
Anilin	Sigma-Adrich	≥ 0.995	
<i>N,N</i> -dimetilanilin	Merck	≥ 0.99	
Benzen	Sigma-Adrich	≥ 0.99	Molekulska sita (3Å)
Toluen	Merck	0.995	Molekulska sita (3Å)
o-ksilen	Acros Organics	0.99	Molekulska sita (3Å)
p-ksilen	Acros Organics	0.99	
m-ksilen	Acros Organics	0.99	

Za nekolicinu čistih hemikalija, eksperimentalne vrednosti gustine, viskoznosti i indeksa refrakcije su poređene sa literaturnim vrednostima na određenoj temperaturi. Literaturna poređenja su predstavljena u tabeli 3.2. Literaturni podaci za nikotin i polipropilene su vrlo oskudni pa su data poređenja za pojedine termodinamičke veličine na samo određenim temperaturama.

Tabela 4.2 Gustine ρ , dinamičke viskoznosti η i indeksi refrakcije n_D čistih komponenata, poređenje sa literaturom

Komponenta	T/ K	$\rho/ 10^3 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$		$\eta/ \text{ mPa}\cdot\text{ s}$		n_D	
		Eksp.	Lit.	Eksp.	Lit.	Eksp.	Lit.
Nikotin	298.15	1.006162	1.0068 ⁴³ 1.0042 ⁴⁵	4.0477	3.9746 ⁴⁴	1.52439	1.525 ⁴⁵
	308.15	0.998055	0.9986 ⁴³	3.0883	3.1555 ⁴³	1.51988	
1-Butanol	298.15	0.805995	0.805907 ⁴⁵	2.5637	2.5562 ^{46,47}	1.39719	1.3973 ⁴⁸
	303.15	0.802148	0.80207 ⁴⁹	2.2582	2.256 ⁵⁰	1.39517	1.3959 ⁵¹
2-Butanol	293.15	0.807190	0.806591 ⁵²	3.7604		1.39715	
	298.15					1.39497	1.39523 ⁵³
	303.15			2.5664	2.496 ⁴⁸		
1,2-Propandiol	293.15	1.036296	1.03625 ⁵⁴	59.564	9.8 ⁵⁵	1.43279	
	298.15	1.032620	1.0326 ⁵⁴	44.143		1.43111	1.4314 ⁵²
1,3-Propandiol	293.15	1.053030	1.05338 ⁵⁶	52.307		1.43918	
	298.15	1.049903	1.04999 ⁵⁷	41.546	40.067 ⁵⁷	1.43783	1.4386 ⁵²
Anilin	293.15	1.021719	1.021747 ⁵⁸	4.4071	4.404 ⁵⁹	1.55343	1.5860 ⁵⁹
	298.15	1.0174	1.017404 ⁵⁸	3.7374	3.773 ⁶⁰	1.57366	1.58392 ⁶⁰
	303.15	1.0130	1.013152 ⁵⁸	3.1972	3.190 ⁶¹	1.57121	1.58128 ⁶⁰
N,N-dimetilanilin	293.15	0.9565	0.956033 ⁶²	1.415	1.373 ⁶²	1.55438	1.55832 ⁶²
	298.15	0.9523	0.951946 ⁶²	1.302	1.289 ⁶²	1.55187	1.55577 ⁶²
[bmim][OTf]	298.15	1.299073	1.29868 ⁶³	80.10	-	1.44346	1.43737 ⁶³
[bmim][NTf ₂]	293.15	1.439773	1.43927 ⁶⁴	61.467	62.08 ⁶⁴	1.42849	
	298.15	1.434963	1.43430 ⁶⁴	49.105	50.05 ⁶⁴	1.42691	1.42692 ⁶⁵
	303.15	1.430167	1.42940 ⁶⁴	39.953	41.24 ⁶⁶	1.42536	
Benzen	293.15	0.878959	0.87898 ⁶⁷	0.65534	0.603 ⁶⁷	1.50024	1.5010 ⁶⁷
	298.15	0.873619	0.87365 ⁶⁸	0.61510	0.6044 ⁶⁸	1.49693	1.4969 ⁶⁸
	303.15	0.868266	0.86829 ⁶⁸	0.57771	0.557 ⁶⁸	1.49340	1.4949 ⁶⁸
Toluen	288.15	0.87150	0.87179 ⁶⁹	0.6284		1.49921	1.4996 ⁷⁰ 1.4998 ⁷¹
	293.15	0.86684	0.86688 ⁷²	0.5926	0.58777 ⁷⁵	1.49631	1.497 ⁷⁰
			0.86683 ⁷³				1.497 ⁷¹
			0.86683 ⁷⁴				
	298.15	0.86218	0.86218 ⁷²	0.5698	0.55269 ⁷⁵	1.49338	1.4942 ⁷⁷
			0.86218 ⁷³				1.4944 ⁷⁰
			0.86232 ⁷⁶				1.49399 ⁷⁸
			0.86219 ⁷⁴				1.4942 ⁷¹ 1.4944 ⁷⁹
	303.15	0.85751	0.85751 ⁷³	0.5410	0.5372 ⁸⁰	1.49042	1.4913 ⁷⁷
			0.85754 ⁷⁴				1.4918 ⁷⁰
							1.4913 ⁷¹ 1.4913 ⁷⁹
	308.15	0.85283		0.5140	0.4927 ⁸²	1.48751	1.4883 ⁷⁷ 1.4884 ⁷¹ 1.4881 ⁷⁹
313.15	0.84815	0.84819 ⁷³	0.4854	0.4851 ⁸⁰	1.48461	1.4858 ⁷⁷	
		0.8484 ⁷⁶				1.48509 ⁷⁸ 1.4855 ⁷¹	
318.15	0.84344		0.4646	0.4376 ⁸²	1.48171	1.4826 ⁷¹	

	323.15	0.83873	0.83869 ⁷³ 0.83887 ⁷⁶	0.4421	0.4272 ⁸⁰ 0.4221 ⁵⁸	1.47889	
	328.15	0.83400		0.4209		1.47596	
	333.15	0.82925	0.82918 ⁷³	0.4035	0.3905 ⁸⁰	1.47305	
o-ksilen	288.15	0.88391	0.88286 ⁸³ 0.88407 ⁸⁴ 0.88329 ⁸⁵	0.869	0.871 ⁸⁶	1.50706	1.5072 ⁷⁰ 1.50775 ⁸⁷ 1.5079 ⁸⁸ 1.5083 ⁸⁹
	293.15	0.87972	0.87876 ⁸³ 0.87984 ⁹⁰ 0.87984 ⁹¹	0.8175	0.81 ⁸⁶	1.50440	1.5047 ⁷⁰ 1.5053 ⁸⁸ 1.5055 ⁸⁹
	298.15	0.87551	0.87471 ⁸³ 0.87567 ⁸⁴ 0.87528 ⁹² 0.87553 ⁸⁵ 0.87593 ⁹³	0.7661	0.756 ⁸⁶ 0.759 ⁹⁴ 0.7519 ⁹³	1.50173	1.5028 ⁹² 1.50262 ⁹⁵ 1.5018 ⁷⁰ 1.50257 ⁸⁷
	303.15	0.87130	0.87073 ⁸³ 0.87148 ⁹⁰ 0.87085 ⁸⁵	0.722	0.708 ⁸⁶ 0.7043 ⁹³	1.49906	1.5000 ⁷⁰ 1.5003 ⁸⁸ 1.5002 ⁸⁹
	308.15	0.86707	0.8673 ⁸⁴ 0.86682 ⁹² 0.86738 ⁹³	0.6809	0.676 ⁹⁶ 0.658 ⁹⁴ 0.665 ⁹⁷ 0.674 ⁹²	1.49644	1.4965 ⁹⁶ 1.4975 ⁹² 1.4978 ⁸⁸
	313.15	0.86283	0.86308 ⁸³ 0.86303 ⁹⁰ 0.86258 ⁸⁵	0.6437	0.627 ⁹⁸ 0.6451 ⁹⁹	1.49383	1.49466 ⁹⁵ 1.49724 ⁸⁷ 1.4948 ⁸⁹
	318.15	0.85857	0.85944 ⁸³ 0.85881 ⁸⁴ 0.8585 ¹⁰⁰	0.608	0.6117 ⁹⁹ 0.589 ⁹⁷	1.49124	1.49201 ⁸⁷ 1.4921 ⁸⁹
	323.15	0.85430	0.85600 ⁸³ 0.85451 ⁹⁰ 0.85433 ¹⁰⁰	0.5757	0.5549 ⁹³ 0.5711 ⁹⁹ 0.558 ¹⁰¹	1.48869	
	328.15	0.85001	0.85024 ⁸⁴ 0.8504 ¹⁰⁰	0.5458	0.5433 ⁹⁹	1.48604	1.48661 ⁸⁷
	333.15	0.84571	0.84591 ⁹⁰ 0.84612 ¹⁰⁰ 0.84526 ⁸⁵ 0.84591 ⁹¹	0.5221	0.504 ⁹⁸ 0.5105 ⁹⁹	1.48345	
m-ksilen	288.15	0.86855	0.86839 ⁸⁴ 0.8684 ⁸⁸ 0.86781 ¹⁰² 0.86832 ⁸⁶ 0.86859 ⁸⁹	0.6601	0.666 ⁸⁶	1.49868	1.49969 ⁸⁴ 1.4997 ⁸⁸ 1.4999 ⁷¹ 1.4997 ⁷⁰
	293.15	0.86427	0.8642 ⁸⁸ 0.86431 ⁹¹ 0.8636 ¹⁰² 0.86418 ¹⁰³ 0.86405 ⁸⁶ 0.86431 ⁸⁹	0.6322	0.619 ⁸⁶	1.49604	1.4973 ⁸⁸ 1.4974 ⁷¹ 1.4973 ⁷⁰ 1.49722 ¹⁰⁴

	298.15	0.85998	0.85983 ⁸⁴ 0.8602 ⁸⁸ 0.85983 ⁹¹ 0.85985 ¹⁰⁰ 0.85947 ¹⁰² 0.85988 ¹⁰³ 0.85977 ⁸⁶ 0.86002 ⁸⁹	0.5969	0.588 ¹⁰⁵ 0.581 ⁸⁶ 0.58 ¹⁰⁶ 0.583 ⁹² 0.584 ⁸⁵ 0.5834 ⁹³ 0.59 ¹⁰⁷ 0.587 ¹⁰¹	1.49339	1.49444 ⁸⁴ 1.4945 ⁸⁸ 1.4948 ⁷¹ 1.4944 ⁷⁰ 1.49466 ⁹⁵ 1.4946 ¹⁰⁶ 1.4947 ⁹² 1.49464 ¹⁰⁴ 1.4947 ¹⁰⁸
	303.15	0.85568	0.8553 ⁸⁸ 0.85564 ⁹¹ 0.85542 ¹⁰² 0.85556 ¹⁰³ 0.85547 ⁸⁶ 0.85574 ⁸⁹ 0.8556 ¹⁰⁹	0.5674	0.552 ⁸⁶ 0.548 ¹⁰⁶ 0.553 ⁸⁵ 0.5498 ⁹³	1.49074	1.492 ⁸⁸ 1.4922 ⁷¹ 1.4925 ⁷⁰ 1.492 ¹⁰⁶ 1.49198 ¹⁰⁴
	308.15	0.85136	0.85125 ⁸⁴ 0.8521 ⁸⁸ 0.85144 ¹⁰² 0.85145 ⁸⁹ 0.8511 ¹⁰⁹	0.5396	0.5229 ¹⁰⁵ 0.519 ¹⁰⁶ 0.531 ⁹² 0.5329 ⁹⁶ 0.524 ¹⁰¹	1.4881	1.48894 ⁸⁴ 1.4896 ⁸⁸ 1.4896 ⁷¹ 1.4898 ¹⁰⁶ 1.4888 ⁹² 1.4894 ¹⁰⁸
	313.15	0.84703	0.8469 ⁹¹ 0.84757 ¹⁰² 0.84685 ¹⁰³ 0.84717 ⁸⁹ 0.8469 ¹⁰⁹	0.5112		1.48545	1.487 ⁷¹
	318.15	0.84269	0.84258 ⁸⁴ 0.8422 ¹⁰⁰ 0.84385 ¹⁰² 0.8424 ¹⁰⁹	0.4888	0.4684 ¹⁰⁵ 0.471 ¹⁰¹	1.4828	1.48355 ⁸⁴ 1.4844 ⁷¹ 1.48653 ⁹⁵
	323.15	0.83833	0.83809 ⁹¹ 0.83809 ¹⁰⁰ 0.84029 ¹⁰² 0.83792 ¹⁰³ 0.84288 ⁸⁹ 0.8383 ¹⁰⁹	0.4657	0.448 ⁸⁵ 0.4486 ⁹³	1.48017	
	328.15	0.83395	0.83385 ⁸⁴ 0.83319 ¹⁰⁰ 0.8337 ¹⁰⁹	0.4439		1.47757	1.4782 ⁸⁴
	333.15	0.82956	0.82922 ⁹¹ 0.82936 ¹⁰⁰ 0.82901 ¹⁰³ 0.8296 ¹⁰⁹	0.4273		1.47489	
p-ksilen	288.15	0.86531	0.86507 ¹⁰² 0.8653 ⁷⁰ 0.86552 ¹¹⁰	0.6862	0.701 ⁸⁶	1.4977	1.4983 ⁷⁰ 1.49836 ⁸⁴
	293.15	0.86097	0.8608 ¹⁰² 0.86102 ¹⁰³ 0.86117 ¹¹⁰	0.6515	0.65 ⁸⁶	1.49493	1.4958 ⁷⁰ 1.4957 ¹¹¹

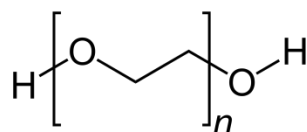
	298.15	0.85663	0.85659 ¹⁰² 0.85668 ¹⁰³ 0.85661 ¹¹²	0.6168	0.609 ⁹² 0.611 ⁸⁶	1.49221	1.4933 ⁵³ 1.49312 ⁹⁵ 1.4929 ⁷⁰ 1.49298 ⁸⁴ 1.4933 ⁹²
	303.15	0.85227	0.85247 ¹⁰² 0.85235 ⁸⁵ 0.85224 ¹¹² 0.852 ⁹⁹	0.5848	0.576 ⁸⁶ 0.5756 ³⁶ 0.566 ¹¹³ 0.5674 ⁵⁹	1.48939	1.4915 ⁷⁰
	308.15	0.84791	0.84797 ⁷⁰ 0.84812 ¹¹⁰	0.5548	0.548 ⁹² 0.54 ¹¹²	1.48658	1.4869 ⁹⁶ 1.48743 ⁸⁴ 1.4877 ⁹²
	313.15	0.84353	0.84451 ¹⁰² 0.84359 ¹⁰³ 0.84364 ⁸⁵ 0.84364 ¹¹²	0.5247	0.526 ⁶⁴ 0.514 ³⁶ 0.517 ¹¹³ 0.5178 ⁶⁵	1.48391	1.48444 ⁹⁵
	318.15	0.83914	0.84071 ¹⁰² 0.83903 ¹⁰⁰ 0.83921 ⁸⁵ 0.83942 ¹¹⁰ 0.8387 ⁹⁹	0.5001	0.4882 ⁶⁵	1.48126	1.48202 ⁸⁴
	323.15	0.83474	0.8349 ⁸⁵ 0.83476 ⁷⁰ 0.8345 ⁹⁹	0.4753	0.4641 ³⁶ 0.458 ⁵⁹ 0.4595 ⁶⁵	1.47853	
	328.15	0.83032	0.83007 ¹⁰⁰ 0.83039 ⁷⁰ 0.8299 ⁹⁹	0.4521	0.4439 ⁶⁵	1.47588	1.47654 ⁸⁴
	333.15	0.82588	0.82582 ¹⁰⁰ 0.82609 ⁸⁵ 0.82586 ⁷⁰	0.4342	0.425 ⁶⁴ 0.4171 ³⁶ 0.4189 ⁶⁵ 0.425 ¹¹²	1.47328	
PPG425	293.15	1.00794	1.02 ¹¹⁴				
	298.15	1.00394	1.0031 ¹¹⁵ 1.0025 ¹¹⁶	69.43	72.837 ¹¹⁷		
	303.15	0.99995	1.012 ¹¹⁴				
	313.15	0.99195	1.005 ¹¹⁴				
	318.15	0.98794	0.9872 ¹¹⁵ 0.9866 ¹¹⁶				
	323.15	0.98393	0.996 ¹¹⁴				
	333.15	0.97592	0.988 ¹¹⁴				
PPG2000	298.15		1.0155 ¹¹⁸				
	308.15		1.0074 ¹¹⁸				
	318.15		0.9990 ¹¹⁸				
	328.15		0.9910 ¹¹⁸				

Pored poređenja dodatno je vršeno i izračunavanje srednjeg relativnog odsupanja ($ADR = RD/n$, gde je n ukupan broj podataka iz literature za svako svojstvo i jedinjenje). Srednja relativna odsupanja dobijena su za gustinu i indeks refrakcije kod 2-butanola su iznosila 0.047% i 0.015%, respektivno, dok su odstupanja viskoznosti nikotina od literaturnih vrednosti $ADR = 1.46\%$. Srednja relativna odsupanja viskoznosti alkohola su nešto niža i iznose 0.85% za 1,2-propandiol. U poređenju sa literaturnim podacima za čiste komponente, (PPG 425, toluen, ksilene), vrednosti viskoznosti i indeksa refrakcije za aromatična jedinjenja su nešto viša, verovatno zbog prisustva vode, maseni rasponu od 0.035% do 0.04%. Voda ima više vrednosti za viskoznost ali niži indeks refrakcije od aromatičnih jedinjenja. Opet sa druge strane uticaj prisustva vode u proračunima je zanemarljiv i ne bi trebalo da utiče na izračunata odstupanja viskoznosti ili indeksa refrakcije aromatičnih jedinjenja. Ustanovljeno je da za sve supstance odstupanje od literaturnih podataka je bilo prihvatljivo.

4.1.1 Polimeri

Polietilen glikol - PEG

Polietilen glikoli su polietarska jedinjenja vrlo širokog spektra primene, od farmaceutske, prehrambene, kozmetičke industrije preko ekstrakcionih tehnologija do biotehnoloških i bio medicinskih primena. Obično se označava formulom $H-(O-CH_2-CH_2)_n-OH$, tako da molekulska masa PEG-a zavisi od broja n , odnosno dužine lanca polimera.



Slika 4.1 Struktura polietilen glikola

Dobijaju se polimerizacijom etilen oksida i molarne mase im se kreću od 200 do 10000000 g/mol. Polietilen glikoli niže molarne mase od 1000 nalaze se u tečnom stanju dok su svi ostali u čvrstom stanju. Polietilen glikoli različitih molarnih masa imaju različite fizičke osobine kao i veliku primenu zbog uticaja dužine lanca, ali su im hemijske karakteristike gotovo identične. Polietilen glikoli nižih molekulskih masa su rastvorljivi u vodi za sve molske udele i na svim temperaturama zbog svojih hidrofilnih etilen oksidnih grupa koje sadrže. Tečni PEG ima veliku polarnost¹, dobri su davaoci i primaoci protona², tako da imaju sposobnost stvaranja među molekulskih vodoničnih veza³. Kao rastvarač ima sposobnost da menja svoju konformaciju iz polarne u nepolarnu, zavisno od supstance sa kojom je u kontaktu i zavisno od temperature. Na nižim temperaturama dominantno je polarno stanje dok sa porastom temperature raste i dominantnost nepolarnog stanja⁴. Za polarnu konformaciju karakteristična je niska energija i niska statička težina, dok je za nepolarnu konformaciju karakteristična viša energija i viša statička težina. Na taj način se polietilen glikoli prilagođavaju i dobro rastvaraju i nepolarna jedinjenja. Polarna struktura prisutna je u polarnim organskim rastvaračima ili vodi, a nepolarna u gasovitoj fazi, nepolarnim ili slabo polarnim medijumima. Polietilen glikoli viših molekulskih masa su izuzetno polarni, za $M=1500$ dipolni momenti se kreću od 6.53 D do 8.51 D u polarnim i nepolarnim rastvaračima, dok su za $M=200$, 3.06 D do 3.94 D¹.

Struktura polietilen glikola sa dužim lancem je dosta kompleksnija i zavisi u mnogome od prirode rastvarača⁵. Veze koje se formiraju između hidroksilnih grupa sa krajeva lanaca PEG-a i atoma kiseonika prisutnih u lancu su inter i intra-molekulske vodonične veze⁶. Što je lanac duži to je broj kiseonika prisutnih u lancu veći stoga je i tendencija formiranja ovih veza veća¹¹⁹. S druge strane asocijacija PEG-ih molekula je posledica inter-molekulskih vodoničnih veza³. Polietilen glikoli su ekološki prihvatljivi polimeri veoma niske toksičnosti da se primenjuju i kao aditivi hrani⁷. Kao biorazgradivi, neisparljivi¹²⁰, relativno niske temperature topljenja imaju široku primenu u mnogim industrijskim, biotehnološkim i bio medicinskim procesima⁸. Njihova cena je znatno niža u poređenju sa ostalim rastvaračima pa je i sa ekonomskog aspekta značajno je ispitati njihovo ponašanje u različitim sistemima.

Polipropilen glikol - PPG

Polipropilen glikoli kao i polietilen glikoli takođe imaju nisku toksičnost, nisku isparljivost i biorazgradivi su⁹. Kao takvi su odobreni da se koriste kao rastvarači koji ispunjavaju kriterijume VOC (*Volatile Organic Compounds*), definisane od strane US EPA *Safer Chemical Ingredients List*. U širokoj je upotrebi kao antipenušavi agens¹¹, u proizvodnji smola i bezalkoholnih pića¹⁰. Polipropilen glikoli su strukturno veoma slični polietilen glikolima ali za razliku od njih polipropilen glikoli su u širem opsegu molekulskih masa u tečnom stanju na sobnoj temperaturi, čak i za M=4000 PPG je viskozna tečnost na 20°C. Međutim dok je PEG M=400 (PEG400), potpuno rastvorljiv u vodi to nije slučaj sa PPG425, pokazuje nerastvorljivost pri porastu temperature do 50°C (LCST- *Lower-Critical-Solution-Temperature* u tečno-tečno faznom ponašanju)¹²¹. Polipropilen glikoli slično kao i PEG-ovi su izuzetno polarni: dipolni momenti za PEG400 i PPG425 su 3.8D i 3.6D, respektivno¹²²; i imaju sposobnost formiranja vodoničnih veza za PEG400 baznost vodonične veze je 0.65¹²³ a za PPG1200 je 0.67¹²⁴. I kod polipropilen glikola je prisutan fenomen prilagođavanja strukture (konformacije) iz polarne u nepolarne, zavisno od polarosti rastvarača sa kojim je u kontaktu, tako da u nepolarnim rastvaračima dominira nepolarne konformacije¹²⁵. Ovo u znatnome proširuje mogućnosti primene PPG i neophodnost ispitivanja njihovog ponašanja u različitim rastvorima.

4.1.2 Alkoholi

Alkoholi su organska jedinjenja koje karakteriše hidroksilna grupa. Njena polarnost omogućava međusobno povezivanje molekula jakim vodoničnim vezama kao i građenje asosovanih tečnosti. Molekuli alkohola teže disocijaciji iz svojih polimernih agregata i formiranju vodoničnih veza sa molekulima iz druge organske komponente u smeši. Stepenn disocijacije zavisi od afiniteta prema protonu funkcionalne grupe drugog molekula, akceptora protona. U zavisnosti od toga da li se hidroksilna grupa ponaša kao donator ili akceptor protona pokazuju osobine kiselina i/ili baza. Alkohole delimo na: primarne (*prim*), sekundarne (*sec*) i tercijarne (*terc*) u zavisnosti od broja ugljenikovih atoma za koju je vezana C-OH grupa. U vodi su rastvorljivi niži alkoholi do propanola, butanol i njegovi izomeri su delimično rastvorljivi, dok su viši alkoholi, od pentanola pa nadalje nerastvorljivi u vodi. Usled prisustva vodoničnih veza imaju više temperature ključanja od alkana ili etara. Koriste se u različitim granama industrije: u hemijskoj industriji za proizvodnju boja, agensa, lakova, proizvoda za hemijsko čišćenje deterženata²⁷, pesticida, insekticida, u farmaceutskoj industriji, kao inhibitori korozije²⁸.

4.1.3 Jonske tečnosti

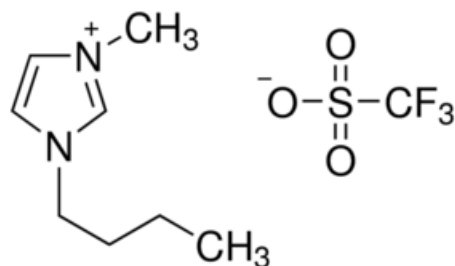
Jonske tečnosti su asimetrične organske soli koje se sastoje od velikog organskog katjona i relativno malog neorganskog anjona. One su u tečnom stanju na sobnoj temperaturi i imaju tačku topljenja ispod 100°C. Većina soli, u odnosu na jonske tečnosti, imaju visoku temperaturu topljenja, zbog prisustva veoma jakih jonskih veza koje se sastoje od jona ili jonskih parova. Od veličine jona i njegovog naelektrisanja zavisi i temperatura topljenja jonske tečnosti. Asimetrični katjoni, veći joni u jonskoj tečnosti, nižeg su naelektrisanja i imaju niže temperature topljenja, dok simetrični joni (katjoni) imaju više temperature topljenja. Za raskidanje jonskih, vodoničnih i Van der Waals-ovih veza potrebna je veća energija, što su joni veći i asimetričniji to im je potrebna manja energija za raskidanje tih veza, a samim tim je i niža temperatura topljenja^{15,16}. Njihove glavne karakteristike koje ih proglašavaju kao ekološku alternativu za organske rastvarače su:

- i) neisparljivost u širokom opsegu temperatura^{13,14} i kao takvi odlična su zamena za isparljive toksične organske rastvarače;
- ii) raznovrsna moć rastvaranja, mogu da rastvore i polarna i nepolarna jedinjenja^{126,127};
- iii) mogućnost podešavanja njihovih svojstava¹⁷ odabirom anjona ili promenom dužine lanca, dužinom lanca može se menjati njihova rastvorljivost;
- iv) jonska priroda (polarnost) i dobra kiselost i baznost vodonične veze, čija posledica je dobra sposobnost građenja vodoničnih veza^{18,19,20,21};
- v) raznolikost dozvoljenih interakcija u njihovim smešama kao što su: disperzione sile između alifatičnih lanaca prisutnih u smeši (smeša imidazolijum jonske tečnosti i alkohola¹⁸); snažne interakcije - Kolumbove sile²²; jon – dipol interakcije²³ i specifične interakcije sa aromatičnim jedinjenjima^{24,25,26}.

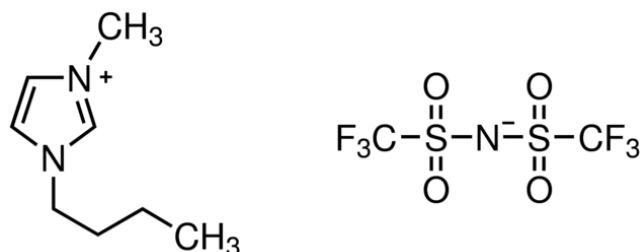
Na rastvorljivost jonskih tečnosti u vodi glavi uticaj ima anjon mada i katjon može uticati na hidrofobnost¹²⁸. Jonske tečnosti dobro rastvaraju polarne rastvarači kao što su voda, alkoholi, aceton i polietilen glikoli, relativno dobro rastvaraju i nepolarne kao što su areni (benzen i toluen), čak i makro molekule kao što su celuloza¹²⁹ i veliki broj polimera¹³⁰. Pored svog pozitivnog uticaja na životnu sredinu jonske tečnosti su i zbog gore navedenih osobina pronašle put u mnogim procesima: kao rastvarači u procesima separacije / ekstrakcije, za separaciju aminokiselina i prečišćavanje^{131,132,133}, separaciju ugljenih hidrata¹³⁴, za ekstrakciju proteina¹³⁵, ekstrakciju fenola¹³⁶, azo boja¹³⁷, za uklanjanje slobodnih masnih kiselina¹³⁸.

Imidazolijum jonske tečnosti $[C_4mim][OTf]$ i $[C_4mim][NTf_2]$ imaju imidazolijum katjon koji se ponaša kao donor protona, zahvaljujući vodoniku koji smešten između dva atoma azota u imidazolijum prstenu, tako da mogu graditi vodonične veze sa protonskim akceptorima¹³⁹. Ovo je u saglasnosti sa vrednostima za kiselost vodonične veze (α) datim u tabeli 5.7. Takođe ove dve jonske tečnosti su i akseptori protona zahvaljujući njihovim anjonskim grupama. U jonskim tečnostima katjon – anjon interakcije su posledica suptilnih ravnoteža između vodoničnih veza, Kolumbovih interakcija i interakcija disperzije između alkilnih lanaca²².

Spektroskopske analize pokazuju da su snažnije interakcije za $[C_n\text{mim}][\text{OTf}]$ nego za $[C_n\text{mim}][\text{NTf}_2]$ jonske tečnosti^{140,141}. Prisutna je i fina ravnoteža između jon – rastvarača i katjon – anjona što donosi jonsko uparivanje u jonskim tečnostima²². Odabrane jonske tečnosti imaju sledeće hemijske strukture:



Slika 4.2 Struktura 1-Butil-3-methylimidazolium triflate



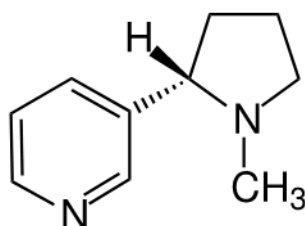
Slika 4.3 Struktura 1-Butil-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide

4.1.4 Toksični rastvori

Nikotin

Nikotin je visoko toksični alkaloid, sa smrtonosnom dozom od 30-60 mg²⁹. Prirodni je proizvod duvana i zato je široko zastupljen u duvanskoj industriji i njenim otpadnih produktima³⁰. Kao takav je veliki zagađivač vodenih tokova (dobro se rastvara hladnoj vodi ispod 61°C¹⁴²). Istraživanja novijeg datuma pokazuju da nikotin može da ima pozitivne efekte na neurodegenerativne poremećaje, Parkinsonovu bolest¹⁴³, i da može poslužiti u farmaceutskoj proizvodnji kao lek kod nekih bolesti^{144,145}. Jedna od glavnih zabrinutosti njegove široke primene jeste uklanjanje iz industrijskih otpadnih tokova.

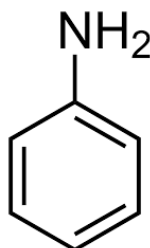
Nikotin može biti ekstrahovan hladnom vodom kao rastvaračem, ali se na kraju mora ukloniti iz vode korišćenjem toksičnih rastvarača¹⁴⁶. Cilj je ukloniti ga sa što manje isparljivim i manje toksičnim rastvaračem tj. ekološki prihvatljivim rastvaračem^{6,147,148}. Nikotin ima zamamljivu strukturu sa usamljenim elektronskim parom na atomu azotu, dva aromatična prstena, jedan aromatični (piridin) i jedan alifatični (pirolidin), visoko je polaran¹⁴⁹. pokazuje različite sposobnosti rotacije¹⁵⁰ i pojavljuje su u različitim nepolarnim, prostornim konformacijama u gasnoj fazi i u vodenim rastvorima^{151,152}.



Slika 4.4 Struktura nikotina

Anilin

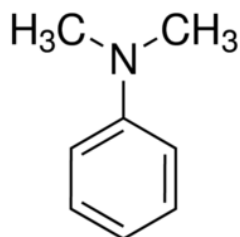
Anilin je najjednostavniji aromatični amin sastavljen od fenil prstena za koji je vezana amino grupa. Zbog visoke reaktivnosti amino grupe anilin je našao primenu u proizvodnji različitih industrijskih proizvoda. Najpoznatija komercijalna primena anilina je za metal difenil izocijanat koji se koristi u proizvodnji poliuretana, gume, polimera, boja i pigmenata, farmaceutskih proizvoda¹⁵³. Prva veštački dobijena boja proizvedena je od anilina, i mnogi ga i dalje koriste kao prekursor. Globala potrošnja anilina do 2015.godine procenjena je na 6.2 M tona¹⁵⁴. Čist anilin je uljana i bezbojna supstanca, vrlo neprijatnog mirisa i visoke toksičnosti. Na slici 4.5 prikazana je strukturna formula molekula anilina.



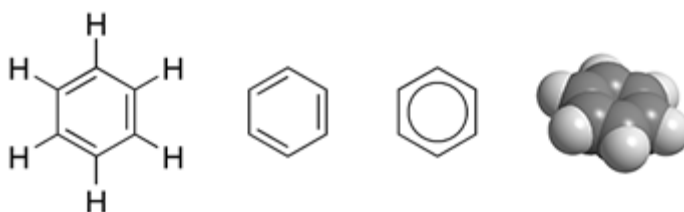
Slika 4.5 Struktura anilina

***N,N*-dimetilanilin**

N,N-dimetilanilin je među tri industrijski važna amina. Sastoji od dimetilamino grupe vezane za fenil grupu i predstavlja supstisuani derivat anilina. *N,N*-dimetilanilin se koristi kao reagens za proizvodnju metal furfurala, vodonik peroksida i kao rastvarač za proizvodnju vanilina¹⁵⁵. Na slici 4.6 prikazana je strukturna formula molekula *N,N*-dimetilanilina.

Slika 4.6 Struktura *N,N*-dimetilanilina***Benzen***

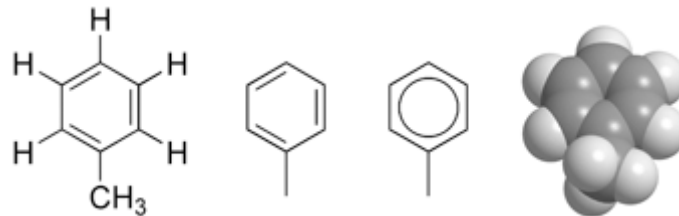
Benzen je najzastupljenija petrohemijska supstanca, koja je intermedijer u mnogim drugim proizvodnim procesima. Jedan je od najrasprostranjenijih VOC (*Volatile Organic Compounds*) zagađivača vazduha, i veoma ga je teško razgraditi¹⁵⁶. Koristi se u proizvodnji kumina, etilbenzena i cikloheksana. Bezbojna je tečnost, neprijatnog mirisa i male viskoznosti. Otrovan je i kancerogen i u tečnoj i gasovitoj fazi, pa je jedna od najstrože regulisanih supstanci u svetu^{31,32}. Svetska zdravstvena organizacija je povezala izlaganje ljudi benzenu sa nizom akutnih i dugoročno štetnih zdravstvenih efekata i bolesti, uključujući rak i aplastičnu anemiju.



Slika 4.7 Struktura benzena

Toluen

Toluen je supstanca koja je manje toksična od benzena i dobra mu je zamena kao industrijskom rastvaraču. Kao i benzen ima široku industrijsku primenu. Koristi se kao sirovina za proizvodnju gume, lepкова, neorganskih hemikalija i lekova.



Slika 4.8 Struktura toluena

Ksileni

Ksileni obuhvataju tri izomera dimetilbenzena: 1,2-dimetilbenze, 1,3-dimetilbenzen i 1,4-dimetilbenzen ili o-, m- i p-ksilen. Bezbojne su tečnosti, toksične, karakterističnog miris i koriste se kao rastvarači u mnogim procesima, industriji gume, kože i itd.

4.2 Pregled eksperimentalnih metoda

4.2.1 Eksperimentalna merenja ravnoteže tečno - tečno

Termodinamička ravnoteža tečno-tečno (LLE - *Liquid-Liquid Equilibria*) određivana je na atmosferskom pritisku 0.1MPa , u temperaturnom opsegu od 273.15 K do 351.15 K. Korišćen je vizuelni metod određivanja tačke zamućenja („cloud points”) dinamičkom tehnikom i tehnikom titracije rastvora. Dinamička tehnika je podrazumevala pripremu homogenog rastvora koji je hlađen ili zagrevan, pri konstantnom mešanju, do temperature na kojoj je došlo do zamućenja. Temperatura pri kojoj se javlja zamućenost pokazuje početak razdvajanja faza („cloud points”)¹¹⁹.

Ispitivani rastvori su pripremani u specijalnim tkz. *Pyrex* staklenim ćelijama sa magnetnim mešačem i teflonskim zatvaračem. Ćelija je uranjana u temperaturno kupatilo, ispunjeno vodom ili silikonskim uljem, koje je postavljano na magnetnu grejnu ploču. Temperatura je merena temperaturnim indikatorom Pt100, koji je takođe uronjen u temperaturno kupatilo sa preciznošću od $\pm 0.03\text{ K}$. Eksperimenti su ponavljani 3-4 puta, pri čemu je vođeno računa da poslednje ponavljanje bude jako sporo. Kod titracione tehnike rastvor je titrisan, pri konstantnoj temperaturi, dodavanjem jedne komponente, kroz Hamiltonov špric sa iglom, u drugu čistu komponentu dok ne dođe do zamućenja rastvora. Ceo proces je izvođen vrlo sporo, kap po kap, do pojave zamućenja. Vršeno je zapisivanje udela komponenti pri kojima je došlo do pojave druge faze na temperaturi izvođenja procesa.

4.2.2 Eksperimentalna merenja ravnoteže čvrsto - tečno

Ravnoteža čvrsto - tečno (SLE- *Solid -Liquid Equilibria*) binarnih smeša određivana je na atmosferskom pritisku 0.1MPa i u temperaturnom opsegu 298.15 K do 342.15 K. Za merenje je korišćena dinamička tehnika određivanja tačke zamućenja - posmatranje okom faznog prelaza, pri zagrevanju ili hlađenju.

Uzorak je pripreman u *Pyrex* staklenom koničnom sudu u kom se nalazi stirer. Konični sud je uvođen u vodeno ili uljano kupatilo, koje je smešteno na Heidolph magnetnoj mešalici kako bi se omogućilo mešanje. Vršeno je zagrevanje / hlađenje heterogene smeše dve komponente, uz konstantno mešanje, i posmatrano je rastvaranje. Temperatura pri kojoj je poslednji kristal čvrste supstance nestao usvajana je kao ravnotežna temperatura¹⁵⁷.

4.2.3 *Eksperimentalno merenje gustine*

Gustine čistih supstanci i binarnih smeša su merene na digitalnom vibrirajućem gustomeru za gasove i tečnosti (Anton Paar DMA 5000) sa U-cevi (sa ugrađenom automatskom korekcijom viskoznosti), i tačnošću instrumenta $\pm 5 \times 10^{-3} \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ i ponovljivošću $\pm 1 \times 10^{-3} \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Tačnost očitavanja temperature u ćeliji je do $\pm 0.001 \text{ K}$.

Opseg merenja gustina na Anton Paar DMA 5000 gustomeru je od 0 do $3 \times 10^3 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ i u opsegu temperatura od 288.15 K do 333.15 K.

Detaljan opis aparata, njegov princip rada, podešavanje i kalibrisanje aparature, kao i sam postupak merenja gustine i njene greške mogu se naći u doktorskoj disertaciji Dr Radović¹⁵⁸.

4.2.4 *Eksperimentalno merenje indeksa refrakcije*

Merenje indeksa refrakcije n_D čistih komponenti i binarnih smeša vršeno je na automatskom refraktometru (Anton Paar RXA 156), koji radi na talasnoj dužini 589 nm. On predstavlja nadogradnju na gustomer Anton Paar DMA 5000. Tokom merenja temperatura uzorka je održavana konstantnom pomoću ugrađenog termostata tačnosti $\pm 0.03 \text{ K}$. Opseg merenja indeksa refrakcije je od 1.38 do 1.52 i u temperaturnom opsegu od 288.15 K do 323.15 K. Kalibracija aparature je vršena svakodnevno korišćenjem Milipor vode. Detaljan opis refraktometra Anton Paar RXA 156, njegov princip rada, podešavanje i kalibrisanje aparature, kao i sam postupak merenja indeksa refrakcije i mogu se naći u doktorskoj tezi Dr Radović¹⁵⁸.

4.2.5 Eksperimentalno merenje viskoznosti

Viskoznost čistih supstanci i binarnih smeša su merene na digitalnom Stabinger viskozimetru (SVM 3000/G2). Viskozimetar je sastavljen od dve merne ćelije: jedna meri gustinu uzorka, dok druga meri dinamičku viskoznost. Ponovljivost merenja dinamičke viskoznosti je 0.35 % i gustine $\pm 0.5 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Tokom procedure merena temperatura u ćeliji je regulisana do $\pm 0.01 \text{ K}$ pomoću ugrađenog termostata. Opseg merenja viskoznosti je od 0.4 do 582 $\text{mPa}\cdot\text{s}$ i u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 333.15 K. Detaljan opis viskozimetra SVM 3000/G2, kao i princip merenja viskoznosti može se naći u literaturi, Spasojević¹⁵⁹.

4.2.6 Fourier-ova transformaciona infracrvena spektroskopija

Snimanje IR spektra pojedinih ispitivanih čistih komponenata i njihovih binarnih smeša vršeno je na FT-IR spektrofotometaru (Bopsegumem MB-102). Snimanje IR spektra je vršeno u opsegu 400 do 4000 cm^{-1} , pri rezoluciji od 4 cm^{-1} . Sva spektroskopska merenja su izvedena na temperaturi od 298.15 K.

4.2.7 Karl-Fisher titraciona metoda

Karl-Fisher titraciona metoda korišćena je za određivanje sadržaja vode u uzorku korišćenjem vodenog standarda 1 % (1mg/g H₂O) nabavljenog od proizvođača Merck.

5. Rezultati eksperimentalnih merenja i modelovanja ispitivanih veličina

Sva eksperimentalna merenja ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i organskih rastvarača obavljena su u Laboratoriji za Hemijsko-inženjerske parametre, na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu. Prvi deo disertacije se bavio eksperimentalnim merenjima termodinamičkih ravnoteža tečno - tečno, (LLE – *Liquid - Liquid Equilibria*), binarnih i pseudo - binarnih smeša, i merenjem termodinamičke ravnoteže čvrsto - tečno, (SLE – *Solid - Liquid Equilibria*). Kao pseudo - binarni sistemi obrađivani su vodeni rastvori ekološki prihvatljivih rastvarača sa industrijskim zagađivačima i ispitivane su mogućnosti pomeranja oblasti rastvorljivosti, odnosno nerastvorljivosti dodavanjem ko - rastvarača ili anti-rastvarača. Drugi deo doktorske disertacije se bavio eksperimentalnim merenjima vrednosti gustine, dinamičke viskoznosti i indeksa refrakcije binarnih smeša: polimera, alkohola i jonskih tečnosti sa nekoliko toksičnih hemikalija. Iz ovih eksperimentalnih podataka izračunate su dopunske molarne zapremine V^E , promena viskoznosti $\Delta\eta$, promena indeksa refrakcije Δn_D kao i dopunske termodinamičke veličine: ΔG^{*E} dopunska Gibsova energija aktivacije viskoznog toka, ΔS^{*E} dopunska entropija i ΔH^{*E} dopunska entalpija, koeficijent izobarske ekspanzije α , dopunski koeficijent izobarske ekspanzije α^E . Izračunate termodinamičke veličine su korišćene za analizu specifičnih molekulskih interakcija i efekata mešanja između komponenata smeša, uzimajući u obzir i uticaj temperature.

Sva merenja vršena su na atmosferskom pritisku i u temperaturnom opsegu od 288.15 K do 371.15 K. Tabele vezane za rezultate eksperimentalnih merenja, grafički prikazanim u ovom poglavlju, date su u okviru Priloga ove doktorske disertacije.

5.1 Rezultati eksperimentalnog merenja ravnotežnih podataka

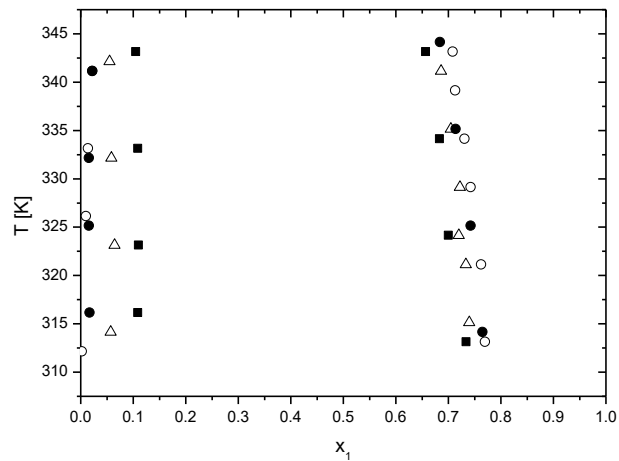
U okviru prve grupe merenja termodinamičke ravnoteže tečno - tečno, određivane su tačke zamućenja dva binarna sistema:

- anilin + H₂O;
- *N,N*-dimetilanilin + H₂O

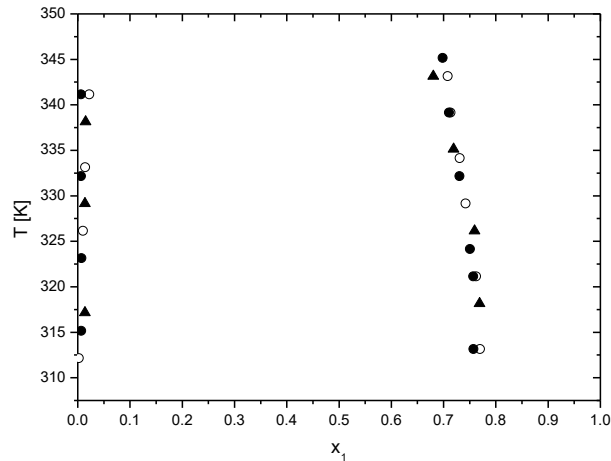
i četiri pseudo - binarna sistema:

- anilin + (PEG 2050 + H₂O);
- anilin + (PEG 35000 + H₂O);
- *N,N*-dimetilanilin + (PEG 2050 + H₂O);
- *N,N*-dimetilanilin + (PEG 35000 + H₂O).

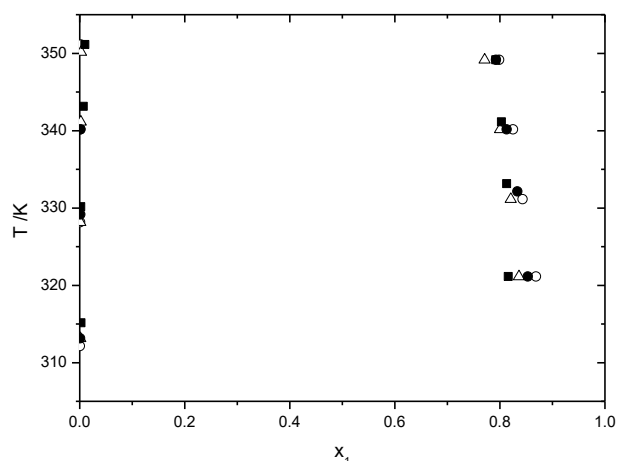
Sistemi su izabrani tako da se utvrdi uticaj različitih udela PEG 2050 i PEG 35000 na termodinamičku ravnotežu tečno - tečno (LLE). Eksperimentalno određene tačke zamućenja za binarne sisteme: anilin + H₂O i *N,N*-dimetilanilin + H₂O i četiri pseudo - binarna sistema: anilin + (PEG 2050 + H₂O), anilin + (PEG 35000 + H₂O), *N,N*-dimetilanilin + (PEG 2050 + H₂O) i *N,N*-dimetilanilin + (PEG 35000 + H₂O) date su zbirno na faznim dijagramima i grafički su prikazane na slikama 5.1 - 5.4. Rezultati eksperimentalno izmerenih molskih i masenih udela i temperature dati su u tabelama 5.1 - 5.4.



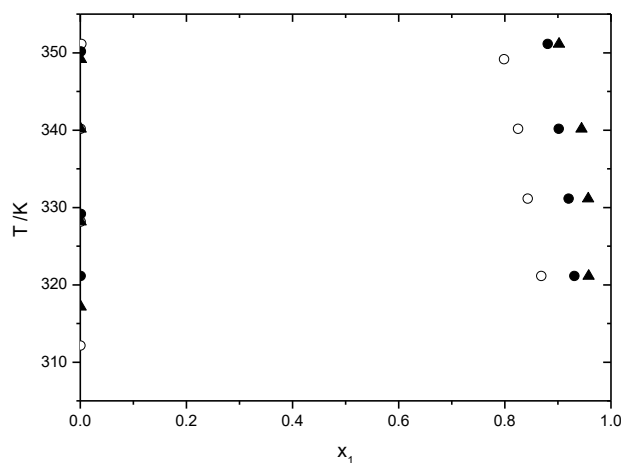
Slika 5.1 Fazni dijagram temperatura – sastav za ravnotežu tečno - tečno, na atmosferskom pritisku od 0.1MPa , za *i*) binarni sistem anilin (1) + H_2O (2), (\circ); *ii*) pseudo - binarni sistem anilin (1) + (PEG 2050 + H_2O) (2) za različite molske udele (x_{PEG}) PEG 2050 u (PEG 2050 + H_2O) rastvaraču, (\bullet), $x_{\text{PEG}} = 0.022$, (\triangle), $x_{\text{PEG}} = 0.0058$, (\blacksquare), $x_{\text{PEG}} = 0.0087$. x_1 predstavlja molski udeo anilina u rastvorima



Slika 5.2 Fazni dijagram temperatura – sastav za ravnotežu tečno - tečno, na atmosferskom pritisku od 0.1MPa , za *i*) binarni sistem anilin (1) + H_2O (2), (\circ); *ii*) pseudo - binarni sistem anilin (1) + (PEG 35000 + H_2O) (2) za različite molske udele (x_{PEG}) PEG 35000 u (PEG 35000 + H_2O) rastvaraču, (\bullet), $x_{\text{PEG}} = 2.720 \times 10^{-4}$; (\blacktriangle), $x_{\text{PEG}} = 1.285 \times 10^{-4}$. x_1 predstavlja molski udeo anilina u rastvorima



Slika 5.3 Fazni dijagram temperatura – sastav za ravnotežu tečno - tečno, na atmosferskom pritisku od 0.1MPa , za *i*) binarni sistem *N,N*-dimetilanilin (1) + H_2O (2), (\circ); *ii*) pseudo - binarni sistem *N,N*-dimetilanilin (1) + (PEG 2050 + H_2O) (2) za različite molske udele (x_{PEG}) PEG 2050 u (PEG 2050+ H_2O) rastvaraču, (\triangle), $x_{\text{PEG}} = 0.0058$; (\bullet), $x_{\text{PEG}} = 0.0022$; (\blacksquare), $x_{\text{PEG}} = 0.0087$. x_1 predstavlja molski udeo *N,N*-dimetilanilin u rastvorima



Slika 5.4 Fazni dijagram temperatura – sastav za ravnotežu tečno - tečno, na atmosferskom pritisku od 0.1MPa , za *i*) binarni sistem *N,N*-dimetilanilin (1) + H_2O (2), (\circ); *ii*) pseudo - binarni sistem *N,N*-dimetilanilin (1) + (PEG 35000 + H_2O) (2) različite molske udele (x_{PEG}) PEG 35000 u (PEG 35000+ H_2O) rastvaraču, (\blacktriangle), $x_{\text{PEG}} = 2.720 \times 10^{-4}$; (\bullet), $x_{\text{PEG}} = 1.285 \times 10^{-4}$ x_1 predstavlja molski udeo *N,N*-dimetilanilin u rastvorima.

Ponašanje oba binarna sistema: anilin + H₂O i *N,N*-dimetilanilin + H₂O je slično, s tim što se sa dijagrama (slika 5.1 do 5.4.) može uočiti da je *N,N*-dimetilanilin manje rastvoren u vodi za razliku od anilina. Ovo je posledica hidrofobnosti dimetilamino grupe vezane za fenil grupu. Kao što je poznato polietilen glikoli su dobri davaoci i primaoci protona tako da su u mogućnosti da formiraju jake vodonične veze. Vodonične veze između polietilen glikola i vode, na nižim temperaturama su veoma jake, tako da se pseudo - binarni rastvori heterogeni. Porastom temperature dolazi do slabljenja vodoničnih veza pseudo - binarna smeša postaje jednofazna. U slučaju pseudo - binarnih sistema uočen je efekat ko-rastvarača kod sistema anilin + (PEG 2050 + H₂O), (slika 5.1), gde se jasno može uočiti da sa porastom molskog udela PEG 2050, $x_{PEG} = 0.022$ do $x_{PEG} = 0.0087$, raste rastvorljivost anilina u vodenom rastvoru. Sa druge strane efekat anti rastvarača je uočen kod sistema *N,N*-dimetilanilin + (PEG 35000 + H₂O), (slika 5.4), gde je porast molskog udela PEG 35000 smanjivao rastvorljivost *N,N*-dimetilanilina u vodi. Ovo se može pripisati uticaju dužine lanca polimera PEG 35000. Pomenuti LLE rezultati su predstavljeni u tabelama 5.1- 5.4.

Tabela 5.1 Ravnoteža tečno - tečno, na atmosferskom pritisku od 0.1MPa, za sistem (anilin + PEG 2050 + H₂O); T_{cp} predstavlja temperaturu faznog razdvajanja („cloud points“), $x_{PEG,B}$ molски udeo i $w_{PEG,B}$ maseni udeo PEG 2050 u binarnom rastvoru (PEG 2050 + H₂O); $(x_{H_2O})_T$, $(x_{anilin})_T$ i $(x_{PEG})_T$ molски udeli vode, anilina i PEG 2050 u pseudo binarnoj smeši, respektivno ^{P1}

$(x_{anilin})_T$	$(x_{PEG})_T$	$(x_{H_2O})_T$	T_{cp} / K
anilin + PEG 2050 + H ₂ O ($x_{PEG,B} = 0.0058$ ili $w_{PEG,B} = 0.1138$)			
0.0574	0.0055	0.9371	314.15
0.0645	0.0055	0.9300	323.15
0.0584	0.0055	0.9361	332.15
0.0551	0.0055	0.9394	342.15
0.7398	0.0015	0.2587	315.15
0.7199	0.0016	0.2785	324.15
0.6860	0.0018	0.3122	341.15
0.7049	0.0017	0.2934	335.15
0.7223	0.0016	0.2761	329.15
anilin + PEG 2050 + H ₂ O ($x_{PEG,B} = 0.0022$ ili $w_{PEG,B} = 0.0463$)			
0.7334	0.0016	0.2650	321.15
0.7650	0.0005	0.2345	314.15
0.7423	0.0006	0.2571	325.15
0.7137	0.0006	0.2857	335.15
0.6841	0.0007	0.3152	344.15
0.0169	0.0022	0.9809	316.15
0.0155	0.0022	0.9823	325.15
0.0156	0.0022	0.9822	332.15
0.0222	0.0021	0.9757	341.15
anilin + PEG 2050 + H ₂ O ($x_{PEG,B} = 0.0087$ ili $w_{PEG,B} = 0.1619$)			
0.7338	0.0023	0.2639	313.15
0.7000	0.0026	0.2974	324.15
0.6832	0.0028	0.3140	334.15
0.6567	0.0030	0.3403	343.15
0.1085	0.0078	0.8837	316.15
0.1098	0.0077	0.8825	323.15
0.1085	0.0078	0.8837	333.15
0.1049	0.0078	0.8873	343.15

Tabela 5.2 Ravnoteža tečno - tečno, na atmosferskom pritisku 0.1MPa , za sistem (anilin + PEG 35000 + H₂O); T_{cp} predstavlja temperaturu faznog razdvajanja („cloud points“), $x_{PEG,B}$ molski udeo i $w_{PEG,B}$ maseni udeo PEG 35000 u binarnom rastvoru (PEG 35000 + H₂O); $(x_{H_2O})_T$, $(x_{anilin})_T$ i $(x_{PEG})_T$ molski udeli vode, anilina i PEG 35000 u pseudo binarnoj smeši, respektivno **P1**

$(x_{anilin})_T$	$(x_{PEG})_T$	$(x_{H_2O})_T$	T_{cp} / K
anilin + PEG 35000+ H ₂ O ($x_{PEG,B} = 2.720 \cdot 10^{-5}$ ili $w_{PEG,B} = 0.01008$)			
0.0066	$2.7 \cdot 10^{-5}$	0.9934	315.15
0.0072	$2.7 \cdot 10^{-5}$	0.9928	323.15
0.0063	$2.7 \cdot 10^{-5}$	0.9937	332.15
0.0062	$2.7 \cdot 10^{-5}$	0.9938	341.15
0.7504	$6.8 \cdot 10^{-6}$	0.2496	324.15
0.7304	$7.3 \cdot 10^{-6}$	0.2696	332.15
0.6982	$8.2 \cdot 10^{-6}$	0.3018	345.15
0.7103	$7.8 \cdot 10^{-6}$	0.2897	339.15
0.7571	$6.6 \cdot 10^{-6}$	0.2429	313.15
0.7566	$6.6 \cdot 10^{-6}$	0.2434	321.15
anilin + PEG 35000 + H ₂ O ($x_{PEG,B} = 1.285 \cdot 10^{-4}$ ili $w_{PEG,B} = 0.04607$)			
0.0139	$1.27 \cdot 10^{-4}$	0.9860	317.15
0.0139	$1.27 \cdot 10^{-4}$	0.9860	329.15
0.0152	$1.27 \cdot 10^{-4}$	0.9847	338.15
0.7691	$2.97 \cdot 10^{-5}$	0.2308	318.15
0.7594	$3.09 \cdot 10^{-5}$	0.2406	326.15
0.7193	$3.61 \cdot 10^{-5}$	0.2807	335.15
0.6804	$4.11 \cdot 10^{-5}$	0.3195	343.15

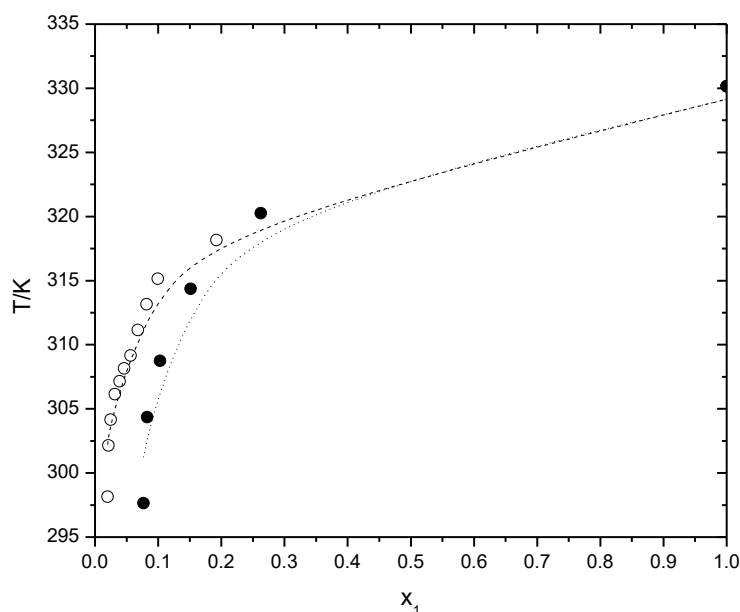
Tabela 5.3 Ravnoteža tečno - tečno, na atmosferskom pritisku 0.1MPa , za sistem (*N,N*-dimetilanilin + PEG 2050 + H₂O); T_{cp} predstavlja temperaturu faznog razdvajanja („cloud points“), $x_{PEG,B}$ molski udeo i $w_{PEG,B}$ maseni udeo PEG 2050 u binarnom rastvoru (PEG 2050 + H₂O); $(x_{H_2O})_T$, $(x_{DMA})_T$ i $(x_{PEG})_T$ molski udeli vode, *N,N*-dimetilanilina i PEG 2050 u pseudo binarnoj smeši, respektivno ^{P1}

$(x_{DMA})_T$	$(x_{PEG})_T$	$(x_{H_2O})_T$	T_{cp} / K
<i>N,N</i> -dimetilanilin + PEG 2050 + H ₂ O ($x_{PEG,B} = 0.0058$ ili $w_{PEG,B} = 0.08982$)			
0.0012	0.0058	0.9930	313.15
0.0011	0.0058	0.9931	328.15
0.0023	0.0058	0.9919	341.15
0.0028	0.0058	0.9914	350.15
0.8363	0.0009	0.1628	321.15
0.8208	0.0010	0.1782	331.15
0.8006	0.0012	0.1982	340.15
0.7709	0.0013	0.2278	349.15
<i>N,N</i> -dimetilanilin + PEG 2050 + H ₂ O ($x_{PEG,B} = 0.0022$ ili $w_{PEG,B} = 0.3600$)			
0.8533	0.0003	0.1464	321.15
0.8331	0.0004	0.1665	332.15
0.8130	0.0004	0.1866	340.15
0.7928	0.0005	0.2067	349.15
0.0019	0.0022	0.9959	340.15
0.0011	0.0022	0.9967	313.15
0.0012	0.0022	0.9966	329.15
<i>N,N</i> -dimetilanilin + PEG 2050 + H ₂ O ($x_{PEG,B} = 0.0087$ ili $w_{PEG,B} = 0.1293$)			
0.0068	0.0086	0.9846	343.15
0.0099	0.0086	0.9815	351.15
0.0025	0.0087	0.9888	315.15
0.0021	0.0087	0.9892	330.15
0.8128	0.0005	0.1867	333.15
0.8031	0.0029	0.1940	341.15
0.7923	0.0031	0.2046	349.15
0.8161	0.0004	0.1835	321.15

Tabela 5.4 Ravnoteža tečno - tečno, na atmosferskom pritisku 0.1MPa , za sistem (N,N-dimetilanilin + PEG 35000 + H₂O); T_{cp} predstavlja temperaturu faznog razdvajanja („cloud points“), $x_{PEG,B}$ molski udeo i $w_{PEG,B}$ maseni udeo PEG 35000 u binarnom rastvoru (PEG 35000 + H₂O); $(x_{H_2O})_T$, $(x_{DMA})_T$ i $(x_{PEG})_T$ molski udeli vode, N,N-dimetilanilin i PEG 35000 u pseudo binarnoj, respektivno **P1**

$(x_{DMA})_T$	$(x_{PEG})_T$	$(x_{H_2O})_T$	T_{cp} / K
<i>N,N</i> -dimetilanilin + PEG 35000 + H ₂ O ($x_{PEG,B} = 2.720 \cdot 10^{-5}$ ili $w_{PEG,B} = 0.0078$)			
0.0007	$2.72 \cdot 10^{-5}$	0.9992	317.15
0.0007	$2.71 \cdot 10^{-5}$	0.9992	328.15
0.0010	$2.70 \cdot 10^{-5}$	0.9989	340.15
0.0014	$2.70 \cdot 10^{-5}$	0.9986	349.15
0.9024	$3.40 \cdot 10^{-6}$	0.0976	351.15
0.9579	$1.00 \cdot 10^{-6}$	0.0421	321.15
0.9571	$1.20 \cdot 10^{-6}$	0.0429	331.15
0.9444	$1.50 \cdot 10^{-6}$	0.0556	340.15
<i>N,N</i> -dimetilanilin + PEG 35000 + H ₂ O ($x_{PEG,B} = 1.285 \cdot 10^{-4}$ ili $w_{PEG,B} = 0.0358$)			
0.9313	$8.800 \cdot 10^{-6}$	0.0686	321.15
0.9205	$1.020 \cdot 10^{-5}$	0.0795	331.15
0.9018	$1.260 \cdot 10^{-5}$	0.0982	340.15
0.8810	$1.530 \cdot 10^{-5}$	0.1189	351.15
0.0013	$1.284 \cdot 10^{-4}$	0.9986	350.15
0.0011	$1.284 \cdot 10^{-4}$	0.9988	321.15
0.0011	$1.284 \cdot 10^{-4}$	0.9988	329.15

U okviru druge grupe eksperimentalno je određena ravnoteža čvrsto-tečno (SLE), polimera PEG 2050 i PEG 35000 sa organskim rastvaračima: anilinom i *N,N*-dimetilanilinom. Fazni dijagram SLE, temperatura – sastav na pritisku 0.1MPa , dat je zbirno za sisteme PPG 2050 + anilin i PPG 2050 + *N,N*-dimetilanilin, (slikom 5.5), pošto je rastvorljivost PEG 35000 u ispitivanim organskim rastvaračima veoma niska i nepogodna za grafičko predstavljanje. Procenjena merna nesigurnost određivanja temperature je obično niža od $\pm 0.5\text{K}$ za oblasti manje bogate PEG-om, dok je u PEG-bogatoj oblasti merna nesigurnost išla do $\pm 1.0\text{K}$. Eksperimentalni podaci za ravnotežu čvrsto - tečno SLE, na atmosferskom pritisku 0.1MPa i u temperaturnom opsegu dati su u tabeli 5.5.



Slika 5.5 Temperatura - sastav SLE fazni dijagram, na atmosferskom pritisku 0.1MPa , za binarni sistem (PEG 2050 + *N,N*-dimetilanilin): (○) - eksperimentalni podaci; linija (---) predstavlja modelovanje korišćenjem NRTL modela. (●) - eksperimentalni podaci za binarni (PEG 2050 + anilin), poređenja radi; linija (···) korelisanih podataka uz pomoć NRTL modela; x_1 moljski udeo PEG 2050 u rastvoru

N,N-dimetilanilin je supstituisani derivat anilina sa dve metil grupe vezane za azot u fenil grupi pa je kiselost vodonične veze kod njega jednaka nuli ($\alpha_{DMA} = 0.00$)¹⁶⁰ dok je isti parametar za anilin dosta viši, $\alpha_{anilin} = 0.264$ ¹⁶⁰. S obzirom da je anilin bolji donor protona od *N,N*-dimetilanilina, i da gradi jače vodonične veze sa atomima kiseonika iz lanca polimera PEG 2050, koji je s druge strane akceptor protona ovo sve može biti razlog bolje rastvorljivosti PEG 2050 u anilinu (slika 5.5). Posmatrani uticaj dužine lanca polimera u ispitivanom čvrsto – tečno faznom ponašanju je pokazao da duži lanac vodi do lošije rastvorljivosti. Ovo se objašnjava činjenicom da duži lanac umanjuje kiselost vodonične veze polimera i ometa inter molekulske vodonične veze i dipol - dipol interakcije sa anilinom i *N,N*-dimetilanilinom.

Tabela 5.5 Eksperimentalni podaci za ravnotežu čvrsto - tečno SLE, na atmosferskom pritisku 0.1MPa, za binarne sisteme: PEG 2050 + *N,N*-dimetilanilin, PEG 35000 + anilin i PEG 35000 + *N,N*-dimetilanilin; x_{PEG} predstavlja molarni udeo i w_{PEG} maseni udeo PEG 2050 ili PEG 35000 u aniline ili *N,N*-dimetilanilinu; T temperature ravnoteže SLE

PEG 2050 + anilin		PEG 2050 + N, N-dimetilanilin		PEG 35000 + anilin		PEG 35000 + N, N-dimetilanilin	
x_{PEG}	T / K	x_{PEG}	T / K	x_{PEG}	T / K	x_{PEG}	T / K
0.0959	298.15	0.0199	298.15	0.0040	328.15	0.0004	312.15
0.1206	312.15	0.0215	302.15	0.0049	329.15	0.0006	313.15
0.1537	317.15	0.0250	304.15	0.0062	338.15	0.0009	315.15
0.2046	321.15	0.0316	306.15	0.0080	341.15	0.0015	316.15
0.2900	324.15	0.0390	307.15	0.0105	342.15	0.0023	321.15
0.1816	319.15	0.0461	308.15			0.0035	326.15
0.0888	304.15	0.0564	309.15			0.0052	330.15
0.0959	326.15	0.0678	311.15			0.0081	335.15
0.1206	298.15	0.0819	313.15			0.0138	339.15
		0.0993	315.15				

5.1.1 Modelovanje ravnotežnih podataka

Eksperimentalni podaci čvrsto - tečno su korelisani NRTL³⁸ modelom i dobijeni rezultati prikazani u tabeli 5.6 dok je grafički prikaz za binarne sisteme, PPG 2050 + anilin i PPG 2050 + *N,N*-dimetilanilin, dat slikom 5.5. Iz tabele 5.6 može se videti da u za sva četiri binarna sistema dobijeni zadovoljavajući rezultati i u skladu sa eksperimentalnim podacima. Srednja procentualna greška $PD(T)$ je za sva četiri sistema manja od 0.97%.

Tabela 5.6 Vrednosti parametara NRTL modela Δg_{12} i Δg_{21} , apsolutno srednje odstupanje ΔT , i srednja procentualna greška $PD(T)$ između eksperimentalnih i izračunatih podataka za četiri binarna sistema

$\Delta g_{12} / (\text{kJkmol}^{-1})$	$\Delta g_{21} / (\text{kJkmol}^{-1})$	$\Delta T / \text{K}$	$PD(T) / \%$
PEG 2050 + Aniline			
-12596	9317.2	1.70	0.55
PEG 2050 + <i>N, N</i> -dimetilanilin			
-9671.6	8725.2	1.10	0.36
PEG 35000 + Aniline			
-20339	19896	5.29	1.58
PEG 35000 + <i>N, N</i> -dimetilanilin			
-26009	22103	4.88	1.49

5.2 Rezultati eksperimentalnih merenja volumetrijskih i transportnih osobina

U ovom delu doktorske disertacije prikazana su eksperimentalna merenja vrednosti gustine, dinamičke viskoznosti i indeksa refrakcije polazeći od sledećih binarnih smeša:

- nikotin + 1-butanol;
- nikotin + 2-butanol;
- nikotin + 1,2-propandiol;
- nikotin + 1,3-propandiol;
- anilin + $[bmim][OTf]$;
- anilin + $[bmim][NTf_2]$;
- *N,N*-dimetilanilin + $[bmim][OTf]$;
- *N,N*-dimetilanilin + $[bmim][NTf_2]$;
- PPG 425 + toluen;
- PPG 425 + o-ksilen;
- PPG 425 + m-ksilen;
- PPG 425 + p-ksilen
- PPG 2000 + benzen;
- PPG 2000 + toluen;
- PPG 2000 + o-ksilen;
- PPG 2000 + m-ksilen;
- PPG 2000 + p-ksilen.

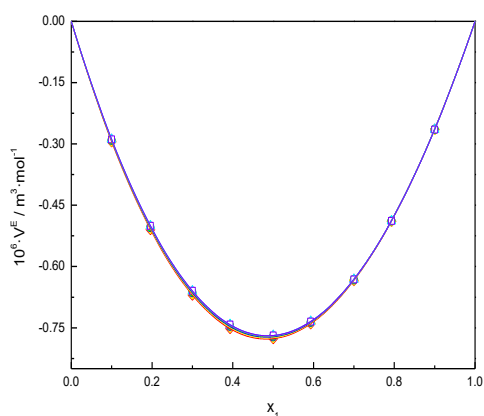
Za sisteme nikotin + 1-butanol / 2-butanol / 1,2-propandiol / 1,3-propandiol; PPG 425 + benzen / toluen / o-ksilen / m-ksilen / p-ksilen; PPG 2000 + benzen / toluen / o-ksilen / m-ksilen / p-ksilen je vršeno merenje u temperaturnom opsegu $T = (288.15 - 323.15) K$ sa temperaturnim korakom od 5 K na atmosferskom pritisku.

Dok je za sisteme anilin + [bmim][OTf]/[bmim][NTf₂] i N,N-dimetilanilin + [bmim][OTf]/[bmim][NTf₂] vršeno merenje u temperaturnom opsegu T=(288.15-333.15) K takođe sa temperaturnim korakom od 5 K i na atmosferskom pritisku.

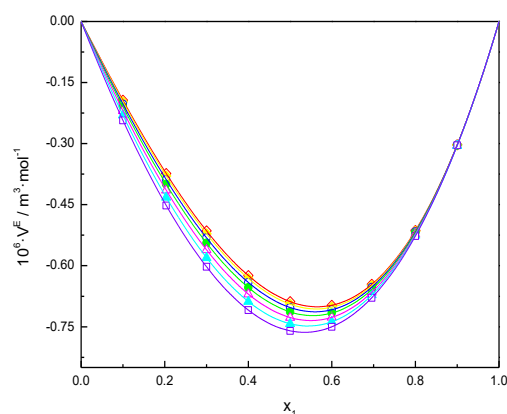
5.2.1 Korišćenje alkohola u tretmanu nikotina u otpadnim vodenim tokovima

Koristeći eksperimentalno određene vrednosti gustine, dinamičke viskoznosti i indeksa refrakcije izračunate su dopunska molarna zapremina V^E , promena indeksa refrakcije Δn_D i promena viskoznosti $\Delta\eta$, parcijalna molarna zapremina \bar{v}_i , dopunska parcijalna molarna zapremina \bar{v}_i^E , koeficijent izobarske ekspanzije α , dopunski koeficijent izobarske ekspanzije α^E . Ove veličine su fitovane Redlich-Kister polinomom³⁵, jednačine (2.33) i (2.34) i (2.35) parametri fitovanja i srednje kvadratno odstupanje jednačina (2.39) dati su u tabelama P1-P4.

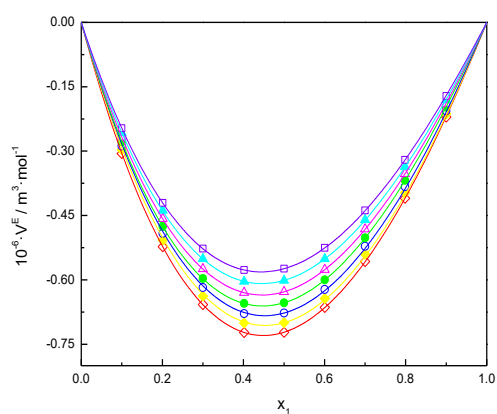
Slika 5.6 predstavlja grafički prikaz V^E ponašanja. Za sva četiri ispitivana sistema dobijene su negativne vrednosti dopunske molarne zapremine. Sistemi nikotin + 1-butanol i nikotin + 1,3-propandiol imaju simetrične krive sa minimumom u $x_1=0.5$. Za sistem nikotin + 2-butanol kriva je blago asimetrična i pomerena prema višim molskim udelima nikotina i minimum je oko $x_1=0.6$. Suprotno od pomenutog sistema kriva sistema nikotin + 1,2-propandiol je blago pomerena ka nižim molskim udelima nikotina i minimum je oko $x_1=0.4$. Dok je uticaj temperature za sistem sa 1-butanol zanemarljiv za sistem nikotin + 2-butanol negativne vrednosti dopunske molarne zapremine rastu sa porastom temperature. Obrnuti slučaj je sa smešama nikotina i propandiola (slika 5.6. c i d) gde imamo situaciju da sa porastom temperature opadaju vrednosti dopunske molarne zapremine.



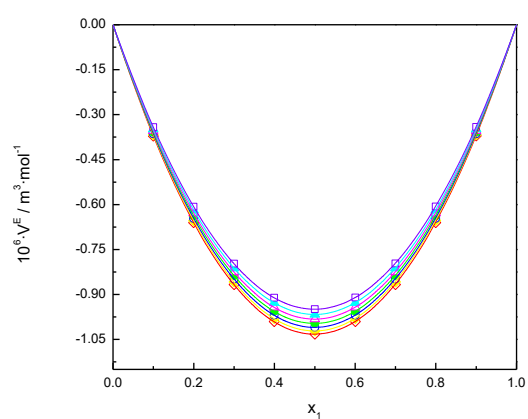
(a)



(b)



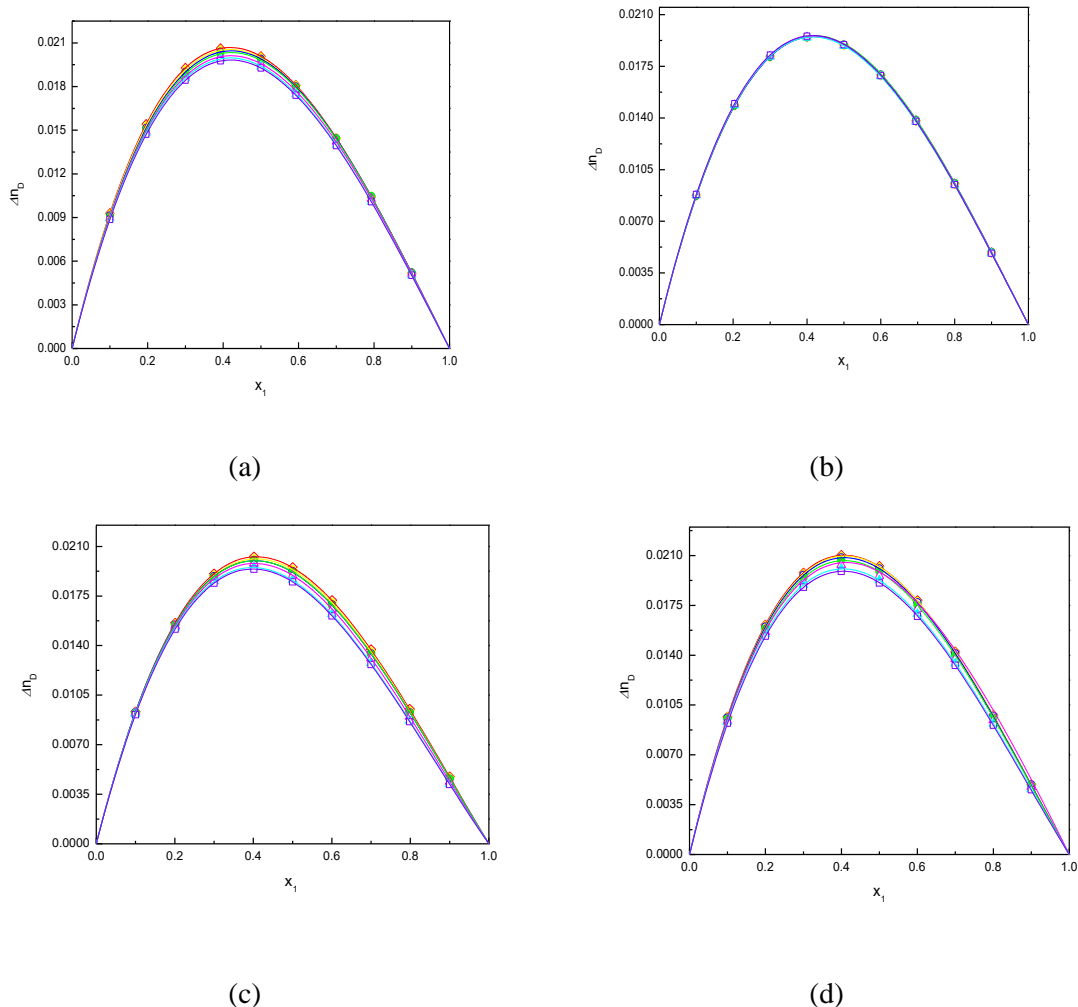
(c)



(d)

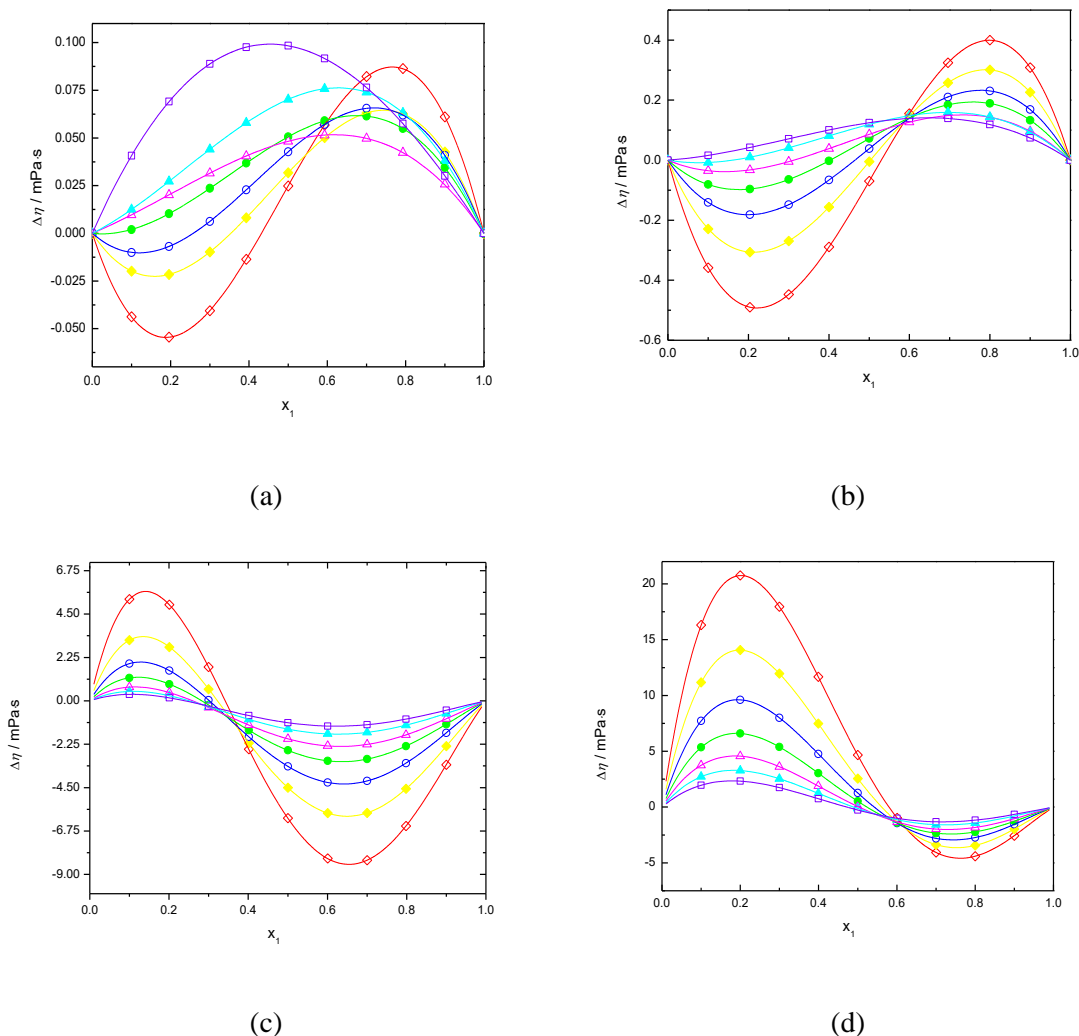
Slika 5.6 Eksperimentalne vrednosti dopunske molarne zapremine V^E za sisteme: (a) nikotin (1) + 1-butanol (2); (b) nikotin (1) + 2-butanol (2); (c) nikotin (1) + 1,2-propandiol (2); (d) nikotin (1) + 1,3-propandiol (2); gde x_1 označava molski udeo nikotina na sledećim temperaturama: (\diamond) 293.15 K, (\blacklozenge) 298.15 K, (\circ) 303.15 K, (\bullet) 308.15 K, (Δ) 313.15 K, (\blacktriangle) 318.15 K, (\square) 323.15 K, (—) RK jednačina

Promene indeksa refrakcije Δn_D za ispitivane sisteme prikazane su na slici 5.7. Za sva četiri sistema imamo pozitivna odstupanja promene indeksa refrakcije sa blago asimetričnim krivama ka nižim molskim udelima nikotina i maksimumom u $x_1=0.4$. Za sistem nikotin + 2-butanol uticaj temperature je zanemarljiv dok za ostale sisteme vrednosti promene indeksa refrakcije blago opadaju sa porastom temperature.



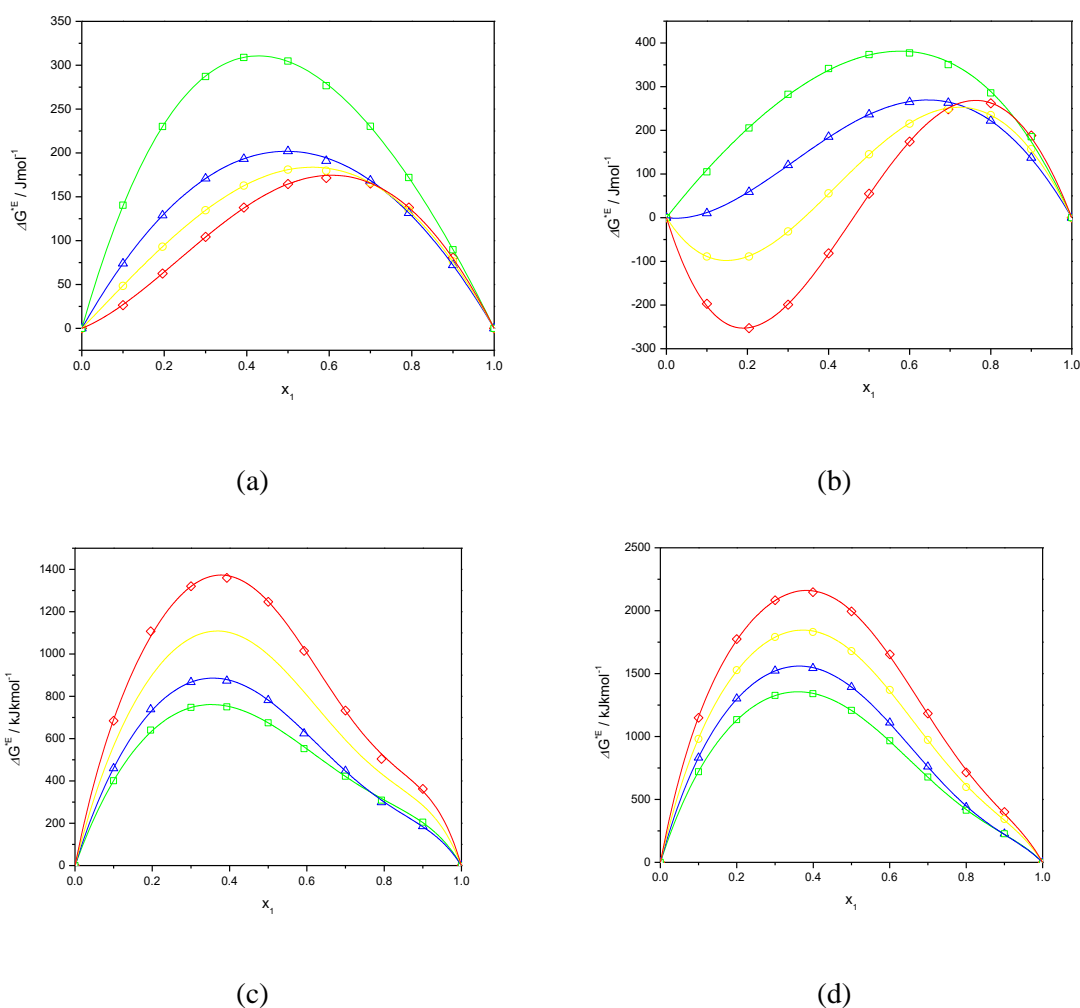
Slika 5.7 Eksperimentalne vrednosti promene indeksa refrakcije Δn_D za sisteme: (a) nikotin (1) + 1-butanol (2); (b) nikotin (1) + 2-butanol (2); (c) nikotin (1) + 1,2-propandiol (2); (d) nikotin (1) + 1,3-propandiol (2); gde x_1 označava molski udeo nikotina na sledećim temperaturama: (\diamond) 293.15 K, (\blacklozenge) 298.15 K, (\circ) 303.15 K, (\bullet) 308.15 K, (\triangle) 313.15 K, (\blacktriangle) 318.15 K, (\square) 323.15 K, (—) RK jednačina

Promene viskoznosti $\Delta\eta$ za sva četiri sistema prikazane su na slici 5.7. Vrednosti promene viskoznosti menjaju znak sa promenom molskog udela nikotina. Za sisteme sa 1-butanolom ili 2-butanolom kriva menja znak od negativnih do pozitivnih vrednosti, dok za sisteme sa 1,2-propandiolom ili 1,3-propandiolom kriva menja znak od pozitivnih do negativnih vrednosti.



Slika 5.8 Eksperimentalne vrednosti promene viskoznosti $\Delta\eta$ za sisteme: (a) nikotin (1) + 1-butanol (2); (b) nikotin (1) + 2-butanol (2); (c) nikotin (1) + 1,2-propandiol (2); (d) nikotin (1) + 1,3-propandiol (2); gde x_1 označava molni udeo nikotina na sledećim temperaturama: (\diamond) 293.15 K, (\blacklozenge) 298.15 K, (\circ) 303.15 K, (\bullet) 308.15 K, (\triangle) 313.15 K, (\blacktriangle) 318.15 K, (\square) 323.15 K, (—) RK jednačina

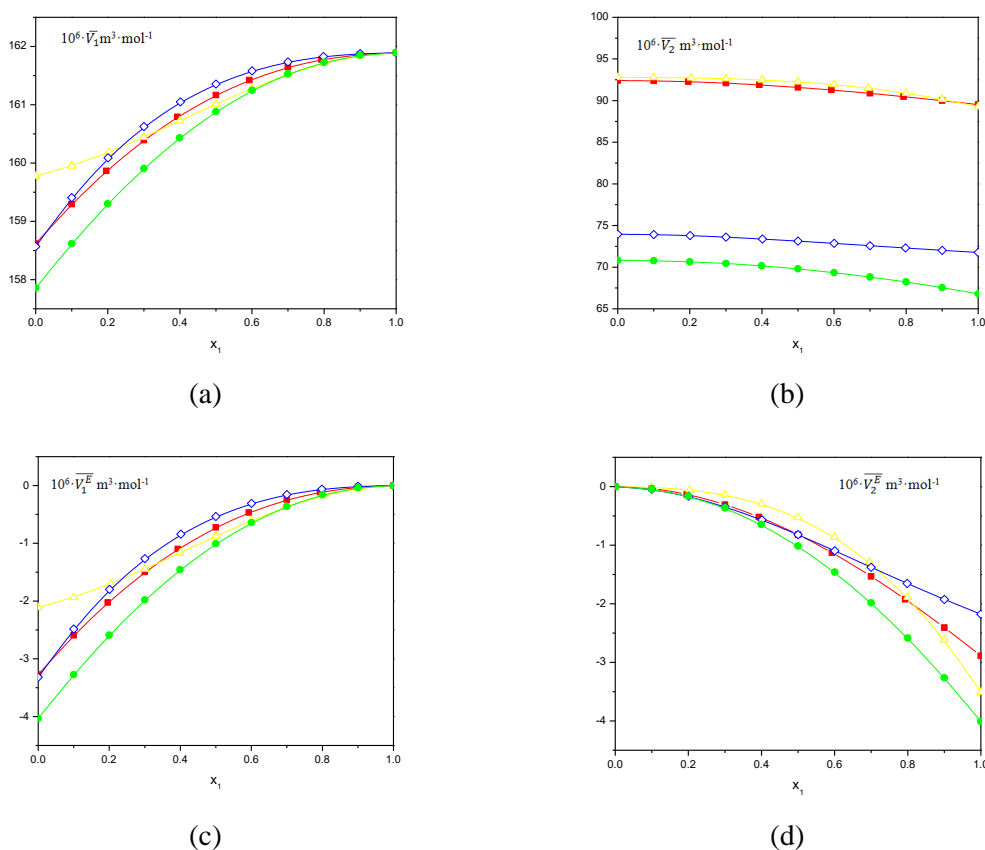
Za sisteme nikotin + 1-butanol i nikotin + 2-butanol minimum i maksimum je oko $x_1=0.2$ i $x_1=0.8$, respektivno. Za ova dva sistema vrednosti promene viskoznosti rastu sa porastom temperature i ostaju pozitivne u celom opsegu visokih koncentracija nikotina na ispitivanim temperaturama. Sistemi sa 1,2-propandiolom i 1,3-propandiolom pokazuju dva puta veće vrednosti promene viskoznosti u poređenju sa sistemima sa 1-butanolom i 2-butanolom. Izrazito negativne promene viskoznosti se javljaju u sistemu nikotin + 1,2-propandiol.



Slika 5.9 Dopunska Gibsova energija aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} za sisteme: (a) nikotin (1) + 1-butanol (2); (b) nikotin (1) + 2-butanol (2); (c) nikotin (1) + 1,2-propandiol (2); (d) nikotin (1) + 1,3-propandiol (2) na sledećim temperaturama: (\diamond) 293.15 K; (\circ) 303.15 K; (Δ) 313.15 K; (\square) 323.15 K. (—) RK jednačina

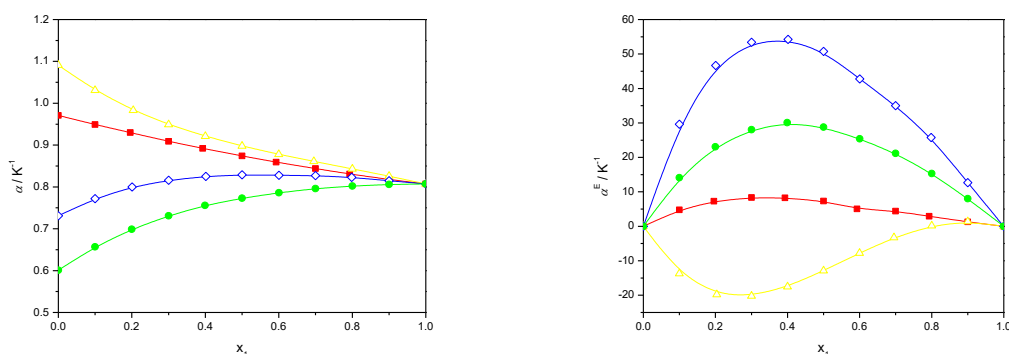
S-kriva menja znak iz pozitivnih u negativne vrednosti promene viskoziteta sa maksimumom $x_1=0.15$ i minimumom $x_1=0.65$ za sistem nikotin + 1,2-propandiol a $x_1=0.2$ i $x_1=0.75$, respektivno, za sistem nikotin + 1,3-propandiol. Sa porastom temperature promene viskoziteta se približavaju vrednosti nule.

Slika 4.9 pokazuje dopunsku Gibsovu energiju aktivacije viskoznog toka u zavisnosti od temperature. Pozitivne vrednosti ΔG^{*E} dobijene su za sisteme sa 1-butanolom, 1,2-propandiolom i 1,3-propandiolom na svim ispitivanim temperaturama, a za sistem sa 2-butanolom na višim temperaturama.



Slika 5.10 Parcijalne molarne zapremine a) \bar{v}_1 i b) \bar{v}_2 , i dopunske parcijalne molarne zapremine, c) \bar{v}_1^E i d) \bar{v}_2^E na 303.15 K za sisteme: (■) nikotin (1) + 1-butanol (2); (Δ) nikotin (1) + 2-butanol (2); (◇) nikotin (1) + 1,2-propandiol (2); (●) nikotin (1) + 1,3-propandiol (2)

Kriva zavisnosti ΔG^{*E} u odnosu na sastav ima oblik S-krive za sistem nikotin + 2-butanol na nižim temperaturama. Promena temperature značajno utiče na vrednosti ΔG^{*E} . Za sisteme sa 1-butanolom i 2-butanolom vrednosti ΔG^{*E} rastu sa porastom temperature dok za sisteme nikotina sa diolima je obrnut slučaj, odnosno vrednosti ΔG^{*E} opadaju sa porastom temperature. Dopunske termodinamičke veličine izračunate iz eksperimentalno određenih vrednosti gustine će pomoći u razumevanju neidealnog ponašanja posmatranih binarnih smeša. Slika 5.10 prikazuje da su vrednosti parcijalne molarne zapremine negativne za sva četiri sistema. Vrednosti koeficijenta izobarske ekspanzije rastu za sve tečnosti sa porastom temperature. Vrednosti α za butanole su veći od vrednosti za propandiole na istoj temperaturi.



Slika 5.11 Koeficijenti termalne ekspanzije, (a) α , i dopunski koeficijenti termalne ekspanzije, (b) α^E na 303.15 K za sisteme: (■) nikotin (1) + 1-butanol (2); (Δ) nikotin (1) + 2-butanol (2); (◇) nikotin (1) + 1,2-propandiol (2); (●) nikotin (1) + 1,3-propandiol (2).

Slika 5.11. pokazuje da za smeše nikotina i butanola vrednosti α opadaju sa porastom molskog udela nikotina. Međutim propandiol se ponašaju na drugačiji način tako da vrednosti α rastu sa porastom koncentracije nikotina. Takođe sa slike 5.11 se može uočiti da dopunski koeficijent termalne ekspanzije α^E ima pozitivne vrednosti za sve sisteme osim za sistem sa 2-butanolom. Izvedene volumetrijske i transportne osobine pružaju moguće objašnjenje prirode neidealnog ponašanja u smešama. Međutim samo spektroskopske analize mogu dati jasan uvid u molekularne interakcije između komponenti u smeši i potvrditi iznete pretpostavke.

FT-IR spektroskopska analiza urađena je za čiste komponente i njihove binarne smeše na sobnoj temperaturi i predstavljena je na slici 5.12. Odstupanje od idealnog ponašanja smeša može biti posledica mnogih faktora npr. interakcije različitih delova molekula putem vodoničnih veza, disperzione sile, interakcije dipol-dipol, geometrijsko pakovanje između molekula smeše itd¹⁶¹. Ispitivani sistemi pokazuju negativne vrednosti za dopunsku molarnu zapreminu, pozitivne vrednosti za promenu indeksa refrakcije, a u slučaju promene viskoziteta promenu znaka tj. S-krivu. Negativne vrednosti dopunske molarne zapremine obično se pojavljuju zbog:

1. vodoničnih veza između različitih molekula ili nekih slabijih interakcija poput interakcija dipol-dipol ili disperzionih sila;
2. dobrog geometrijskog pakovanja između različitih molekulskih grupa u smeši.

Tabela 5.7 prikazuje Kamlet-Taft parametre kiselosti i baznosti vodonične veze kao i relativnu polarizabilnost i dipolne momente čistih komponenti.

Tabela 5.7 Kamlet-Taft parametri α , β , i π^* i dipolni moment μ čistih komponenata

	α	β	π^*	μ/D
Nikotin				1.81
1-butanol ¹⁶²	0.79	0.84	0.47	1.66
2-butanol ¹⁶³	0.69	0.80	0.40	1.66
1,2-propandiol ¹²⁴	0.83	0.78	0.76	3.63
1,3-propandiol ¹²⁴	0.80	0.77	0.84	2.52

Dipolni momenti čistih komponenti, tabela 5.7, potvrđuju njihov različit polaritet posebno za diole. Sve komponente imaju dobru sposobnost stvaranja vodoničnih veza. Visoke vrednosti parametara kiselosti i baznosti vodonične veze dokazuju formiranje inermolekularnih vodoničnih veza. S druge strane nikotin je polarno jedinjenje koji se ponaša isključivo kao primalac vodonične veze sa dva mesta za prijem protona u svojim prstenima piridina i pirolidina¹⁶⁴. Negativne vrednosti dopunske molarne zapremine mogu se pripisati građenju vodoničnih veza i interakcijama dipol-dipol. Pozitivne vrednosti promene indeksa refrakcije su generalno pravilo npr. što je bolje pakovanje molekula to je manja brzina svetlosti odnosno veći indeks refrakcije¹⁶⁵.

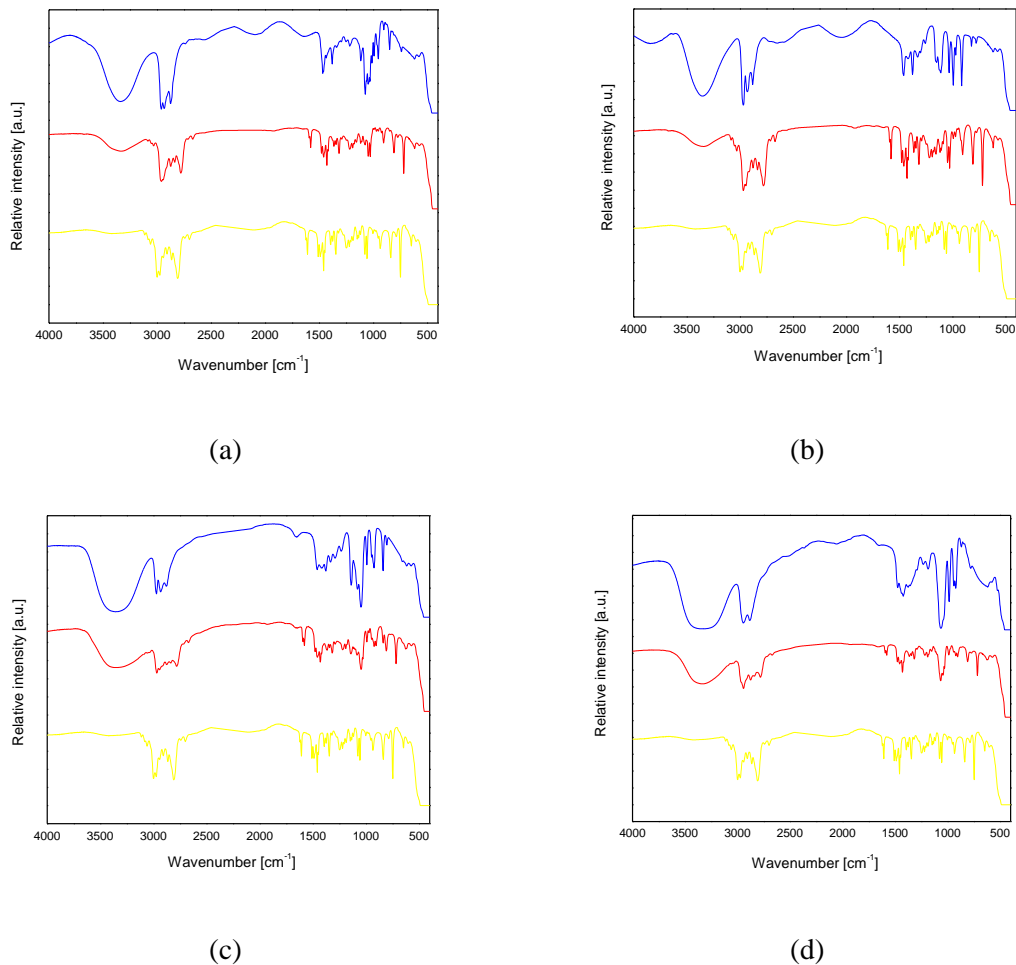
S-kriva dobijena za vrednosti promene viskoznosti u zavisnosti od sastava ukazuje da objašnjenje neidealnosti analiziranih sistema nije direktno. Fort i Moore¹⁶⁶ su predložili da negativna promena viskoziteta se pripise prisustvu disperzionih sila između različitih komponenti, dok se pozitivne promene viskoziteta mogu pripisati prisustvu specifičnih interakcija između njih. Reed i Taylor¹⁶⁷ su predložili da pozitivna promena ΔG^{*E} implicira na prisustvo specifičnih interakcija npr. vodoničnih veza, dok negativna ΔG^{*E} može biti prouzrokovana disperzionim silama. Apsolutne vrednosti $\Delta\eta$ i ΔG^{*E} prate sledeći redosled: 1,3-propandiol > 1,2-propandiol > 2-butanol > 1-butanol što nam govori da se najjače interakcije odvijaju između nikotina i 1,3-propandiola i 1,2-propandiola. Sa porastom temperature apsolutne vrednosti $\Delta\eta$ opadaju implicirajući da interakcije između komponenata postaju slabije. Porast temperature povećava termalnu energiju molekula i oslabljuje veze između sličnih ili različitih molekula.

Pozitivne vrednosti $\Delta\eta$ i maksimum ΔG^{*E} u oblastima bogatim diolima, slika 5.9 c i d, potvrđuje prisustvo specifičnih interakcija¹⁶⁶ dok sa porastom molskog udela nikotina disperzione sile postaju dominantnije. Negativna promena viskoziteta ukazuje na to da je protok binarnih smeša lakši u odnosu na čiste tečnosti. Ovako ponašanje viskoziteta je karakteristično za sisteme u kojima jedna komponenta stvara homoasocijat i u kojima se kompleksi rastvarač - rastvorak ne formiraju ili imaju nisku stabilnost¹⁶⁸. Raskidanje inter molekularnih vodoničnih veza u alkoholima omogućava smeši da lakše teče.

Slika 5.10 pokazuje da su negativne vrednosti \bar{v}_1^E i \bar{v}_2^E za sve sisteme, što ukazuje da su interakcije između različitih molekula jače nego među sličnim molekulima. To takođe znači da inra molekulske vodonične veze nisu raskinute u razblaženim oblastima. Dopunski koeficijenti termalne ekspanzije na slici 5.11 pokazuje pozitivan trend za sve sisteme osim za sistem sa 2-butanolom. Apsolutne vrednosti α^E slede redosled: 1-butanol < 2-butanol \approx 1,3-propandiol < 1,2-propandiol, što znači da je najveći uticaj temperature na vrednosti V^E za sistem sa 1,2-propandiolom. Ovaj zaključak je evidentan iz slike 5.6 gde se može uočiti da porast temperature ima neznatan uticaj na dopunsku molarnu zapreminu V^E za sistem koji sadrži 1-butanol. Samo u slučaju sistema sa 2-butanolom, sa porastom temperature rastu i negativne vrednosti V^E što je i razlog negativnih vrednosti α^E .

Zapis FT-IR spectra odgovara minimumu dopunske molarne zapremine pod pretpostavkom da su najintenzivnije interakcije između različitih komponenti u ovoj oblasti. Svi FT-IR spektari su zabeleženi na temperaturi 298.15 K.

Slika 5.12 (a) predstavlja FT-IR spektar za sistem nikotin + 1-butanol za udeo $x_1=0.5$. Moguće H-spajanje može se pratiti posmatranjem promene na OH-vezi. Iz spektra se vidi da je valencina traka koja odgovara OH grupi pomera ka višim talasnim dužinama (3347 cm^{-1}) u smeši pokazujući pik manjeg intenziteta, u poređenju sa čistim 1-butanolom (3336 cm^{-1}).



Slika 5.12 Infracrveni spektar za: (a) čist nikotin (žuto), čist 1-butanol (plavo) i sisteme nikotin + 1-butanol sa $x_{\text{nikotin}}=0.5$ (crveno); (b) čist nikotin (žuto), čist 2-butanol (plavo) i sistem nikotin + 2-butanol sa $x_{\text{nikotin}}=0.6$ (crveno); (c) čist nikotin (žuto), čist 1,2-propandiol (plavo), sistem nikotin + 1,2-propandiol sa $x_{\text{nicotine}}=0.4$ (crveno); (d) čist nikotin (žuto), čist 1,3-propandiol (plavo) i sistem nikotin + 1,3-propandiol sa $x_{\text{nikotin}}=0.5$ (crveno)

Negativne vrednosti V^E mogu biti objašnjene geometrijskim pakovanjem 1-butanola molekula ($V_m = 91.96 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$) u molekule nikotina ($V_m = 161.24 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$). Negativne vrednosti promene viskoziteta na niskim temperaturama (293.15 K, 298.15 K i 303.15 K) kod sistema nikotin + 1-butanol, posledica su narušenog međusobnog povezivanja molekula 1-butanola u smeši bogatoj alkoholom. Raskidanje veza prouzrokuje lakši protok, manje trenje niže vrednosti viskoziteta za smešu u poređenju sa čistim komponentama.

Slika 5.12 (b) prikazuje FT-IR spektar za sistem nikotin +2-butanol pri $x_1=0.6$. U ovom slučaju očekuje se ista pojava kao i slučaju prethodnog sistema s obzirom da 2-butanol ima ista svojstva kao 1-butanol. Stoga međusobno povezivanje molekula 2-butanola i stvaranje vodoničnih veza sa nikotinom su moguće. Rastezanje OH veze uslovljava pomeranje ka nižim talasnim dužinama (3340 cm^{-1}) u smeši prikazujući pik nižeg intenziteta u poređenju sa čistim 2-butanolom (3352 cm^{-1}). Ovo je takozvano *redshift* pomeranje koje ukazuje na produženje OH veze potvrđujući prisustvo novih hetero molekularnih interakcija između atoma H iz OH grupe i atoma N iz dva prstena nikotina. Ovaj efekat najverovatnije prouzrokuje efikasno geometrijsko pakovanje molekula u smeši i negativne vrednosti V^E . Dobro geometrijsko pakovanje molekula 2-butanola ($V_m = 92.30\text{ cm}^3\text{ mol}^{-1}$) u molekule nikotina ($V_m = 161.24\text{ cm}^3\text{ mol}^{-1}$) takođe može doprineti negativnim V^E vrednostima.

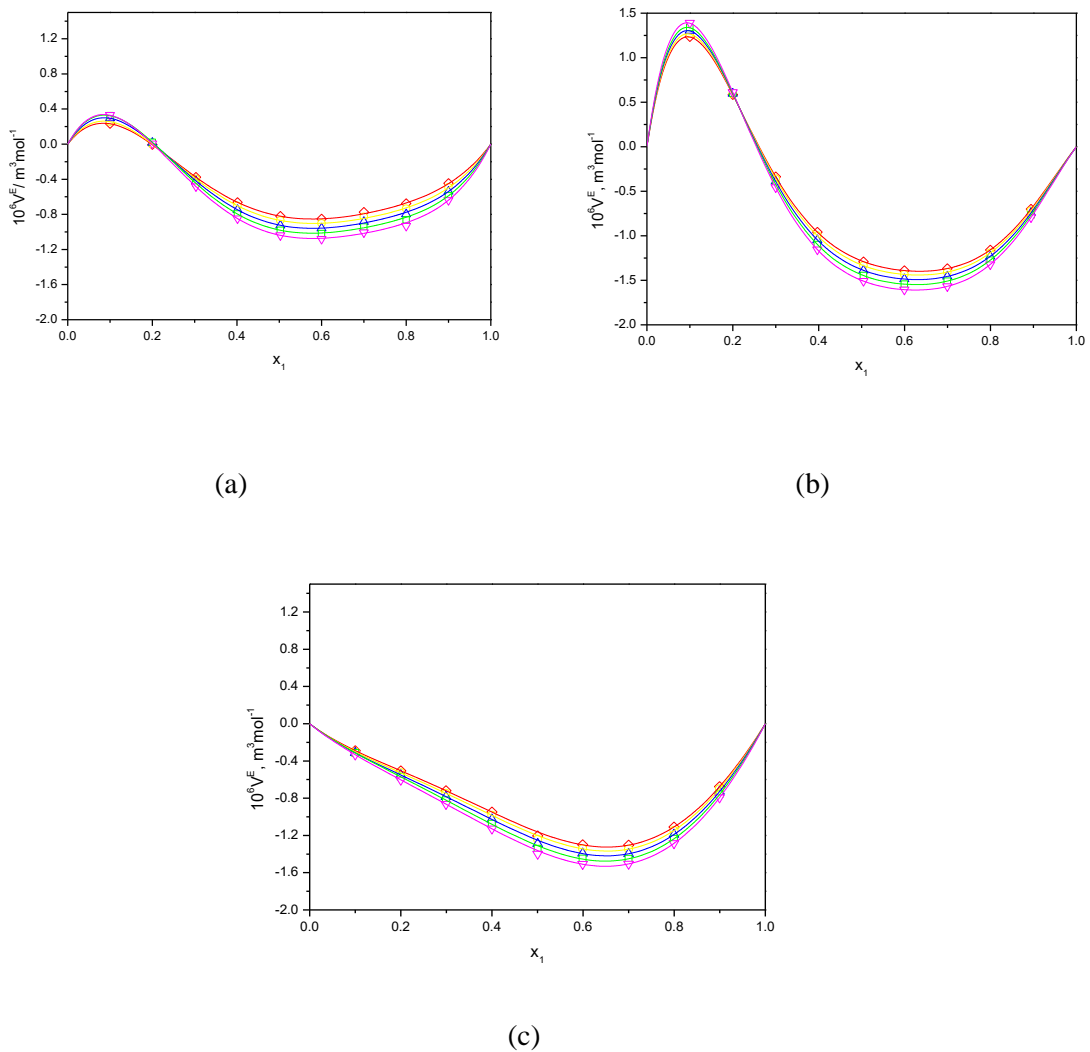
Slika 5.12 (c) i (d) prikazuju FT-IR spektre za sisteme nikotin + 1,2-propandiol za sastav $x_1=0.4$ i nikotin + 1,3-propandiol za sastav $x_1=0.5$. Kao dioli ovi alkoholi mogu formirati vodonične veze preko dve OH grupe. Za prvi sistem istežanje OH veze uslovljava pomeranje ka nižoj talasnoj dužini (3346 cm^{-1}) u smeši prikazujući pik nižeg intenziteta u poređenju sa čistim 1,2-propandiolom (3358 cm^{-1}). Slično ponašanje se primećuje za sistem sa 1,3-propandiolom. FT-IR spektar potvrđuje stvaranje vodoničnih veza između 1,3-propandiola i nikotina kroz *redshift* istežanje OH grupe. Rastezanje OH veze uslovljava pomeranje ka nižim talasnim dužinama (3315 cm^{-1}) u smeši prikazujući pik nižeg intenziteta u poređenju sa čistim 1,3-propandiolom (3329 cm^{-1}). Iz tabele 5.7 je očigledno da su 1,2-propandiol i 1,3-propandiol oba polarne komponente i dobri kako donori tako i akceptori vodonične veze. Sposobnost za formiranje vodoničnih veza sa dva atoma N u nikotinu potvrđuje se FT-IR analizom.

Molekuli se bolje pakuju u smeši uz pomoć vodoničnih veza što prouzrokuje smanjenje zapremine i negativne V^E vrednosti. Takođe nejednakost u moralnim zapreminama ($73.69\text{ cm}^3\text{ mol}^{-1}$ za 1,2-propandiol, $72.47\text{ cm}^3\text{ mol}^{-1}$ za 1,3-propandiol i $161.24\text{ cm}^3\text{ mol}^{-1}$ za nikotin) između različitih komponenata može doprineti efikasnijem geometrijskom pakovanju u smešama.

5.2.2 Uklanjanje toksičnih hemikalija korišćenjem jonskih tečnosti

Izvršena je termodinamička analiza smeše anilina i *N,N*-dimetilanilina sa dvema jonskim tečnostima: 1-Butil-3-methylimidazolium triflate, $[bmim][OTf]$ i 1-Butil-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl) imide, $[bmim][NTf_2]$. Eksperimentalno su merene gustine, indeks refrakcije i dinamička viskoznost za četiri binarna sistema: anilin / *N,N*-dimetilanilina + $[bmim][OTf]$ i $[bmim][NTf_2]$ na atmosferskom pritisku i u temperaturnom opsegu $T=(288.15-333.15)$ K. Iz eksperimentalnih podataka izračunate su dopunske molarne zapremine, vrednosti promene indeksa refrakcije i promene viskoznosti, dopunska molarna Gibsova energija aktivacije viskoznog toka i vrednosti su fitovane Redlich-Kister polinomom. Takođe entalpija i entropija koje su sastavni deo dopunske molarne Gibsove energije aktivacije viskoznog toka su utvrđene pri istom sastavu sistema za tri potpuno mešljiva sistema, osim sistema anilin + $[bmim][OTf]$ koji je delimično mešljiv.

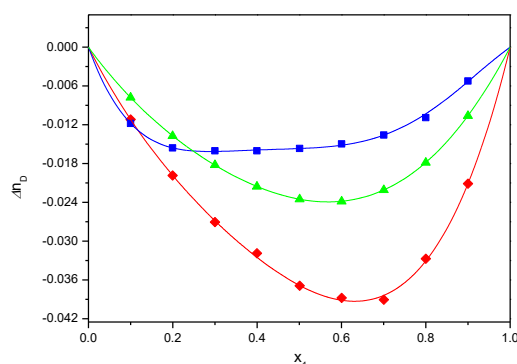
Dopunske molarne zapremine dobijene iz eksperimentalnih vrednosti kao i one izračunate korišćenjem RK-polinoma predstavljene su na slici 5.13 kao funkcija molskog udela amina x_1 . Sistemi anilin + $[C_4mim][NTf_2]$ i *N,N*-dimetilanilin + $[C_4mim][OTf]$ imaju V^E krivu S - oblika koja menja znak iz pozitivnih vrednosti u negativne sa porastom udela x_1 pri čemu su maksimum i minimum na $x_1=0.1$ i $x_1=0.6$, respektivno. Sistem *N,N*-dimetilanilin + $[bmim][NTf_2]$ prikazuje asimetričnu krivu sa negativnim V^E vrednostima i minimumom oko $x_1=0.6$. Za sve sisteme apsolutne vrednosti V^E u oblastima minimuma rastu sa porastom temperature od 288.15 K do 333.15 K.



Slika 5.13 Eksperimentalne vrednosti dopunske molarne zapremine V^E za sisteme: (a) anilin (1) + $[bmim][NTf_2]$ (2); (b) N,N -dimetilanilin (1) + $[bmim][OTf]$ (2); (c) N,N -dimetilanilin (1) + $[bmim][NTf_2]$ (2); gde x_1 označava molski udeo anilina ili N,N -dimetilanilina na sledećim temperaturama: (\diamond) 288.15 K, (\circ) 298.15 K, (Δ) 308.15 K, (\square) 318.15 K, (∇) 328 K, (—) RK jednačina

Na slici 5.14 prikazana je promena indeksa refrakcije u odnosu na molski udeo na 303.15 K zajedno sa vrednostima izračunatim iz RK polinoma. Svi posmatrani sistemi pokazuju negativne vrednosti promene indeksa refrakcije.

Prikazani su rezultati samo na temperaturi 303.15 K zbog zanemarljivog uticaja temperature na promenu indeksa refrakcije.

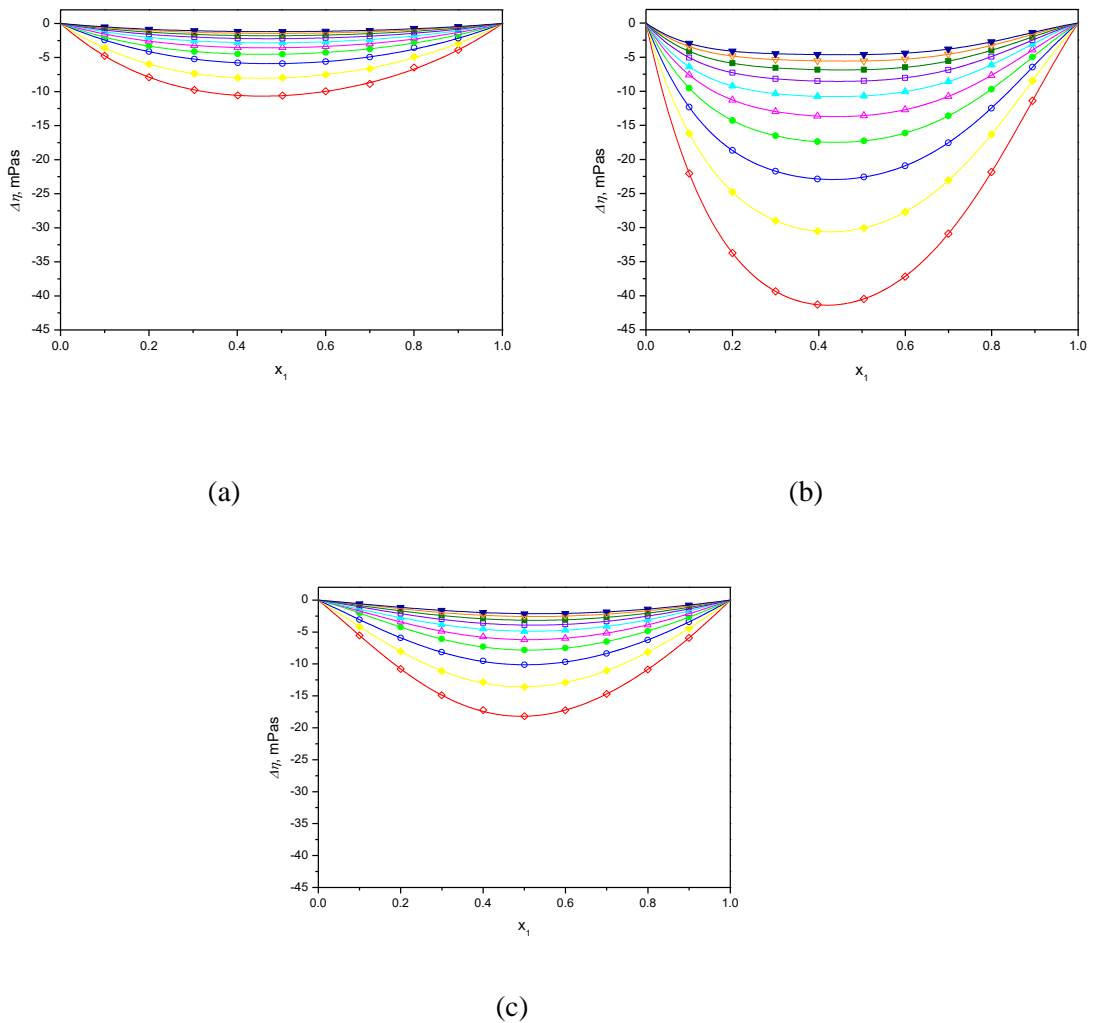


Slika 5.14 Eksperimentalne vrednosti promene indeksa refrakcije Δn_D za sisteme: (◆) anilin (1) + $[bmim][NTf_2]$ (2), (■) N,N -dimetilanilin (1) + $[bmim][OTf]$ (2), (▲) N,N -dimetilanilin (1) + $[bmim][NTf_2]$ (2); gde x_1 označava molski udeo anilina ili N,N -dimetilanilina na temperaturi 303.15 K, (—) RK jednačina

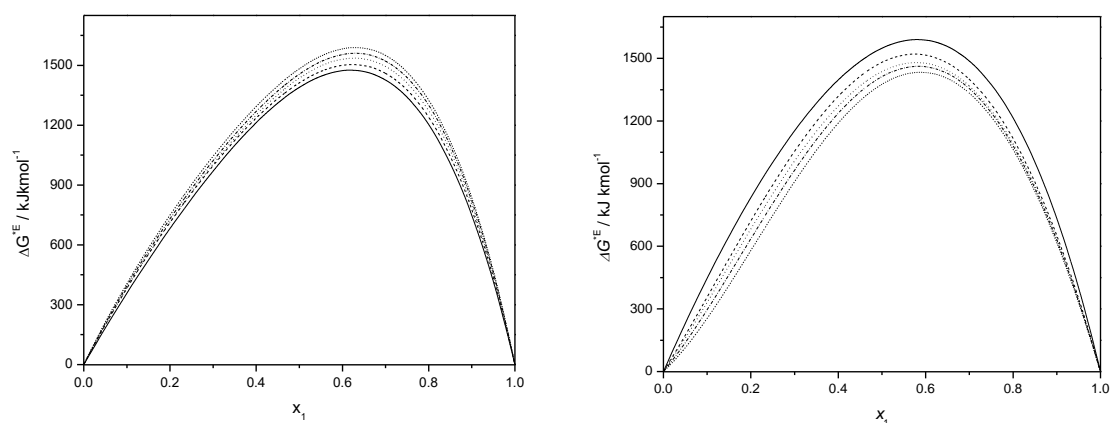
Promene viskoziteta u odnosu na molski udeo zajedno sa vrednostima izračunatim iz RK polinoma prikazane su na slici 5.15. Svi sistemi prikazuju negativne vrednosti promene viskoziteta. Apsolutne vrednosti promene viskoziteta opadaju sa porastom temperature od 288.15 K do 333.15 K, za sve posmatrane potpuno mešljive binarne smeše. Slika 5.16 prikazuje RK krive kao izračunate vrednosti za dopunsku molarnu Gibsonu energiju aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} za tri kompletno mešljiva sistema. Radi bolje preglednosti krive su date za pet odabranih izoterma. Može se uočiti da su vrednosti ΔG^{*E} pozitivne za sve proučavane potpuno mešljive sisteme.

Ispitivane smeše sastoje se od polarnih kompleksa sa mogućnošću povezivanja vodoničnim vezama i sposobnošću interakcija između molekula sličnog i različitog tipa. Anilin i N,N -dimetilanilin su polarna jedinjenja sa dipolnim momentima 1.59D i 1.55D, respektivno, što omogućava interakcije tipa dipol - dipol ili jon - dipol. Uzimajući u obzir parcijalno negativno naelektrisanje azota i parcijalno pozitivno naelektrisanje vodonika iz amino grupe evidentno je da anilin može biti kako donor tako i akceptor vodonične veze (tabela 5.8).

Međutim bez raspoloživih atoma vodonika N,N -dimetilanilin može biti samo akceptor vodonične veze. Tako, anilin i N,N -dimetilanilin mogu oba formirati veze sa anilinom sa više mogućnosti.

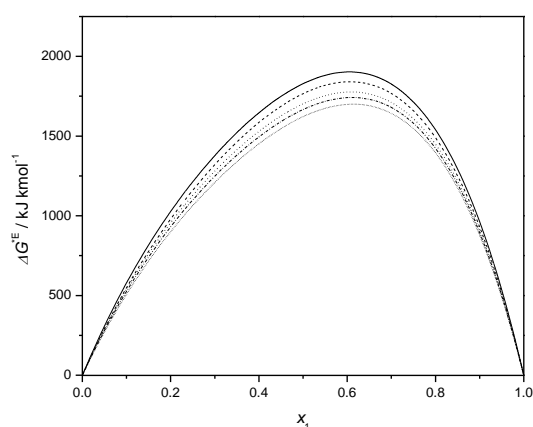


Slika 5.15 Eksperimentalne vrednosti promene viskoznosti $\Delta\eta$ za sisteme: (a) anilin (1) + $[bmim][NTf_2]$ (2); (b) N,N -dimetilanilin(1) + $[bmim][OTf]$ (2); (c) N,N -dimetilanilin (1) + $[bmim][NTf_2]$ (2); gde x_1 označava molski udeo anilina ili N,N -dimetilanilina na sledećim temperaturama: (\diamond) 288.15 K, (\blacklozenge) 293.15 K, (\circ) 298.15 K, (\bullet) 303.15 K, (Δ) 308.15 K, (\blacktriangle) 313.15 K, (\square) 318.15 K, (\blacksquare) 323.15 K, (∇) 328 K, (\blacktriangledown) 333 K, (—) RK jednačina



(a)

(b)



(c)

Slika 5.16 RK krive za dopunsku molarnu Gibsovu energiju aktivacije viskoznog toka $\Delta G^{\ddagger E}$ za sisteme: (a) anilin (1) + $[bmim][NTf_2]$ (2); (b) *N,N*-dimetilanilin (1) + $[bmim][OTf]$ (2); (c) *N,N*-dimetilanilin (1) + $[bmim][NTf_2]$ (2) na sledećim temperaturama: (- -) 288.15 K, (-) 298.15 K, (····) 308.15 K, (-.-.-) 318.15 K, (- - -) 333 K

Tabla 5.8 Dipolni moment (μ/D), kiselost vodonične veze (α) i baznost vodonične veze (β) ispitivanih rastvora i rastvarača

Hemikalija	α	β	μ/D
Anilin	0.264 ¹⁶⁰	0.38 ¹⁶⁹	1.51 ¹⁷⁰
<i>N, N</i> -dimetilanilin	0.00 ¹⁶⁰	0.35 ¹⁶⁹	1.61 ¹⁷⁰
[<i>bmim</i>][<i>OTf</i>]	0.625 ¹⁶	0.464 ¹⁶	-
[<i>bmim</i>][<i>NTf₂</i>]	0.617 ¹⁶	0.243 ¹⁶	-

Za jonske tečnosti situacija je dosta složenija obzirom na njihove specifične hemijske karakteristike. Imidazolijum jonske tečnosti [*C₄mim*][*OTf*] i [*C₄mim*][*NTf₂*] imaju imidazolijum katjon koji se ponaša kao donor protona, zahvaljujući vodoniku koji smešten između dva atoma azota u imidazolijum prstenu, tako da mogu graditi vodonične veze sa protonskim akceptorima¹³⁹. Ovo je u saglasnosti sa vrednostima za kiselost vodonične veze (α) datim u tabeli 5.8. Takođe ove dve proučavane jonske tečnosti su i akceptori protona zahvaljujući njihovim anjonskim grupama. Imidazolijum jonske tečnosti formiraju specifične anjon i katjon interakcije sa aromatičnim arenskim prstenom koji za rezultata ima formiranje *cage-like* strukture u rastvoru^{24,25,26}. Specifična interakcija anjon - aromatični arenski prsten ostvaruje se preko atoma kiseonika iz anjona i vodonika iz arenskog prstena. Ove interakcije su snažnije i mnogobrojnije sa [*NTf*]⁻ anjonom nego sa [*OTf*]⁻ anjonom, uglavnom zbog većeg broja atoma kiseonika¹⁷¹. Prema tome aromatična jedinjenja pokazuju bolju rastvorljivost u jonskim tečnostima sa [*NTf*]⁻ anjonom^{172,171,173}. Pomeranje valencine trake NH₂ - grupe ka nižim talasnim dužinama ukazuje ne samo na asocijaciju konstante i entalpije izvedene iz dopunske Gibsove energije smeše već i na samo - asocijaciju anilina. To je uglavnom postignuto preko N - H - N vodonične veze kroz dipol - dipol interakcije. U jonskim tečnostima katjon - anjon interakcije su posledica suptilnih ravnoteža između vodoničnih veza, Kolumbovih interakcija i interakcija disperzije između alkilnih lanaca²². Spektroskopske analize pokazuju da su snažnije interakcije za [*C_nmim*][*OTf*] nego za [*C_nmim*][*NTf₂*] jonske tečnosti^{140,141}. Još jedan fina ravnoteža ovaj put između jon - rastvarača i katjon - anjon donosi jonsko uparivanje u jonskim tečnostima²².

Detaljna analiza $[C_4mim][OTf]$ jonske tečnosti na molekularnom nivou¹⁷⁴ nam je otkrila da se uparivanje anjona vrši preko -CF₃ delova dva $[OTf]^-$ anjona. Dakle imamo dva anjona koja su okružena katjonskim kavezom sastavljenog u proseku od devet $[C_nmim]^+$ katjona. IR - infra crvena spektroskopska analiza $[C_nmim][NTf_2]$ otkrila je asocijaciju imidazolijum jona u jonskim parovima tj. klasterima i njihovu disocijaciju na slobodne jone odnosno manje klaster¹⁷⁵. Sve ovo vodi zaključku da asocijacija kroz jonsko sparivanje je snažnije u $[C_4mim][OTf]$ nego u $[C_4mim][NTf_2]$ zbog procesa disocijacije prisutne u $[C_4mim][NTf_2]$.

Negativne vrednosti dopunske molarne zapremine V^E mogu biti posledica:

- i) vodonične veze između jonske tečnosti i anilina;
- ii) spomenute katjon - aren i anjon - aren interakcije koje omogućavaju strukturu sličnu kavezu i;

ii) jon - dipol interakcije između jonskih tečnosti i polarnih molekula oba anilina.

Ove interakcije dovele su do efikasnijeg geometrijskog pakovanja u smeši u odnosu na čiste tečnosti, i one su dodatno olakšane i razlikom u veličini molekula prisutnih u svim smešama (tabela 5.9).

Tabela 5.9 Dopunske molarne karakteristike aktivacije viskoznog toka na 298.15 K za smeše istog sastava ($x_1=0.6$): dopunska Gibsova energija (ΔG^{*E}), entropija (ΔS^{*E}), entalpija (ΔH^{*E}) i $T\Delta S^{*E}$ entropijski doprinos ΔG^{*E}

$\Delta G^{*E} /$ kJ·kmol ⁻¹	$\Delta S^{*E} /$ kJ·kmol ⁻¹ ·K ⁻¹	$T\Delta S^{*E} /$ kJ·kmol ⁻¹	$\Delta H^{*E} /$ kJ·kmol ⁻¹	V_{m2}/V_{m1}^a
Anilin (1) + [C ₄ mim][NTf ₂] (2)				
1492.17	-2.3305	-694.49	797.68	3.2
N,N-dimetilanilin (1) + [C ₄ mim][OTf] (2)				
1475.32	3.3617	1001.79	2477.11	1.7
N,N-dimetilanilin (1) + [C ₄ mim][NTf ₂] (2)				
1826.6	4.5628	1359.71	3186.31	2.3

Međutim pozitivne vrednosti V^E koje se vide na slici 5.13. (a) i (b) rezultat su dominantnih prethodno navedenih interakcija između istih molekula u ispitivanim sistemima asocijacije anilina, katjon - anjon interakcija i jonsko sparivanje u jonskim tečnostima, koje su preovladale nad interakcijama između različitih molekula. Ekspanzija nakon mešanja se uvek posmatra u oblastima koje su bogatije jonskim tečnostima zbog anjon-katjon interakcija koje su povezane sa jonskim sparivanjem. Mnogo niže pozitivne vrednosti V^E u smeši anilin + $[bmim][NTf_2]$ u odnosu na smešu N,N -dimetilanilin + $[bmim][OTf]$, slika 5.13 (a) i (b), može se pripisati jačim katjon - anjon interakcijama i stabilnijem jonskom sparivanju u $[bmim][OTf]$ jonskoj tečnosti. Ove razlike u asocijaciji anilina i slabijih specifičnih interakcija katjon / anjon sa arenskim aromatičnim prstenom u slučaju $[bmim][OTf]$ razlog su nemešljivosti sistema anilin + $[bmim][OTf]$.

Mayer i dr.¹⁷⁶ navodi da je znak dopunske molarne Gibsove energije aktivacije viskoznog toka u sprezi sa dopunskom molarnom Gibsovom energijom ali da znak u suprotnosti sa prirodom intermolekularnih interakcija. Pozitivne vrednosti ukazuju na prisustvo snažnih interakcija između različitih tipova molekula dok negativne vrednosti ukazuju na njihovo odsustvo, odnosno na dominaciju interakcija između istih molekula. Ovo svojstvo uključuje volumetrijske i transportne osobine definisane jednačinom (2.55) koje nam pomažu u analizi interakcija i diskusiji istraživanih sistema. Pored funkcije ΔG^{*E} važno je razmotriti i entalpijski i entropijski doprinos ΔG^{*E} , naročito u slučaju sistema u kojima su prisutni molekuli koji se razlikuju po veličini.

Na slici 5.16 predstavljene su dobijene vrednosti dopunske molarne Gibsove energije viskoznog toka ΔG^{*E} za pet do deset izoterma radi bolje preglednosti. U tabeli 5.9 date su izračunate dopunske molarne karakteristike aktivacije viskoznog toka na 298.15 K za smeše istog sastava ($x_1=0.6$) za sva tri potpuno mešljiva sistema. Pozitivne vrednosti ΔG^{*E} i ΔH^{*E} ukazuju na snažne interakcije u sve tri smeše naročito u sistemu N,N -dimetilanilin + $[C_4mim][NTf_2]$ što je u skladu sa negativnim vrednostima V^E prikazanih na slici 4.13.

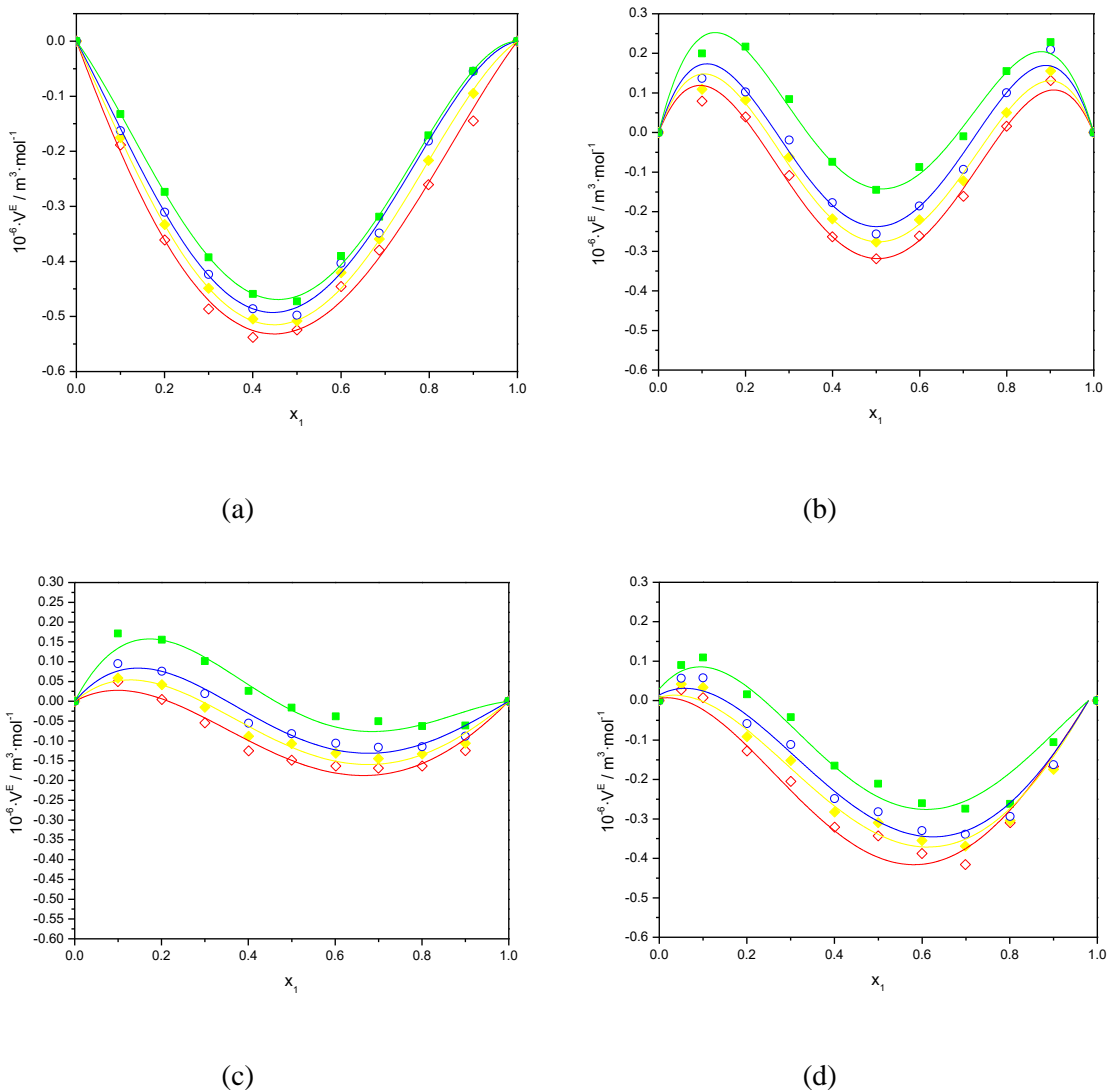
Negativne vrednosti dopunske molarne entropije aktivacije viskoznog toka za sistem anilin + [C₄mim][NTf₂] su uglavnom posledica razlike u veličini molekula i značajno doprinose pozitivnim vrednostima ΔG^{*E} . Negativna odstupanja viskoziteta prikazanih na slici 5.15 su posledica formiranja pomenutih jonskih agregacija u jonskim tečnostima koje nemaju sveukupni uticaj na postojeće interakcije. Ako se anilin ili *N,N*-dimetilanilin smeste u među molekulski prostor jonskih agregata prestaju da budu aktivni učesnici trenja te se stoga smanjuje viskozitet¹⁷⁷. S obzirom da se molekuli *N,N*-dimetilanilina ne mogu međusobno povezati putem vodoničnih veza, očekivano je efikasnije pakovanje u agregate jonskih tečnosti u poređenju sa anilinom, što objašnjava visoke vrednosti promene viskoziteta za sisteme sa *N,N*-dimetilanilinom.

5.2.3 Primena polipropilena u tretmanu toksičnih hemikalija

PPG425

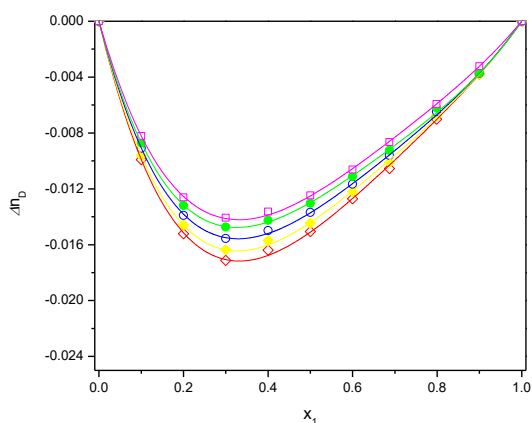
U cilju tretiranja toksičnih hemikalija analiza je proširena na ispitivanje polipropilena kao potencijalnih ekoloških rastvarača. U ovom delu doktorske disertacije prvo je ispitivan PPG 425 sa toksičnim hemikalijama: toluenom, ksilenima o-, m-, i p-. Eksperimentalno merenje gustine, viskoznosti i indeksa refrakcije vršeno je u temperaturnom opsegu $T = (288.15 - 323.15) K$ sa temperaturnim korakom od 5 K na atmosferskom pritisku. Iz eksperimentalno dobijenih termodinamičkih veličina izračunavana je dopunska molarna zapremina V^E , promena indeksa refrakcije Δn_D , promena viskoznosti $\Delta \eta$, dopunska molarna Gibsova energija viskoznog toka ΔG^{*E} i pomenute veličine su fitovane Redlich-Kister polinomom³⁵. Iz dobijenih vrednosti ΔG^{*E} izračunate su i dopunska molarna entropija (ΔS^{*E}) i dopunska molarna entalpija (ΔH^{*E}) aktivacije viskoznog toka.

Sa slike 5.17 može se uočiti da za sve sisteme osim sistema sa toluenom kriva dopunske molarne zapremine menja znak. Za sisteme PPG 425 + m-ksilen ili PPG 425 + p-ksilen kriva V^E menja znak od pozitivnih vrednosti ka negativnim sa porastom molskog udela PPG 425. Najviše apsolutne vrednosti V^E dobijene su za sistem sa toluenom, a najniže za sistem sa m-ksilenom.

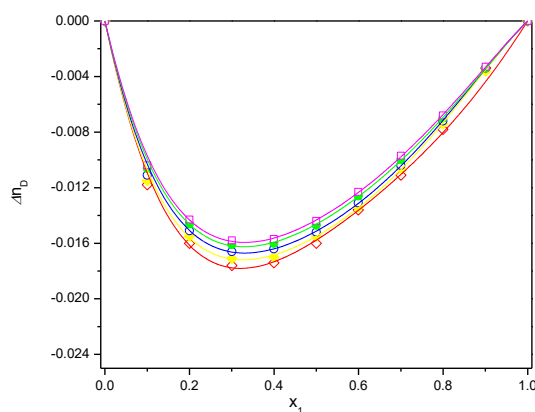


Slika 5.17 Eksperimentalne vrednosti dopunska molarne zapremine V^E za sisteme: (a) PPG 425 + toluen; (b) PPG 425 + o-ksilen; (c) PPG 425 + m-ksilen; (d) PPG 425 + p-ksilen; gde x_1 označava molni udeo PPG 425 na temperaturama: (\diamond) 288.15 K, (\blacklozenge) 298.15 K, (\circ) 308.15 K, (\blacksquare) 333.15 K, (—) RK jednačina

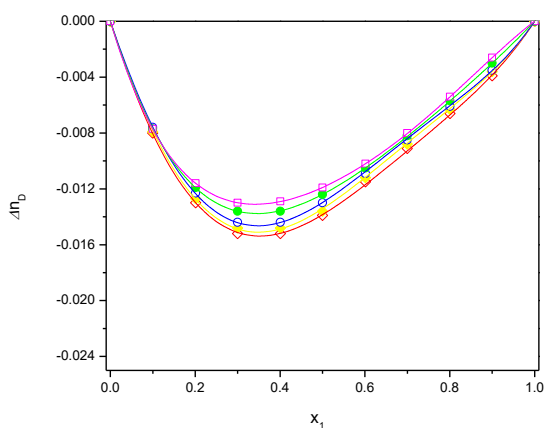
Krive promene indeksa refrakcije predstavljene na slici 5.18 blago su asimetrične za sve sisteme sa minimumom oko $x_1=0.3$. Apsolutne vrednosti promene indeksa refrakcije opadaju sa porastom temperature.



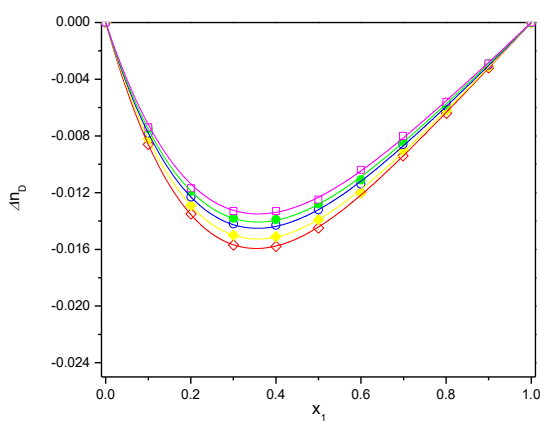
(a)



(b)



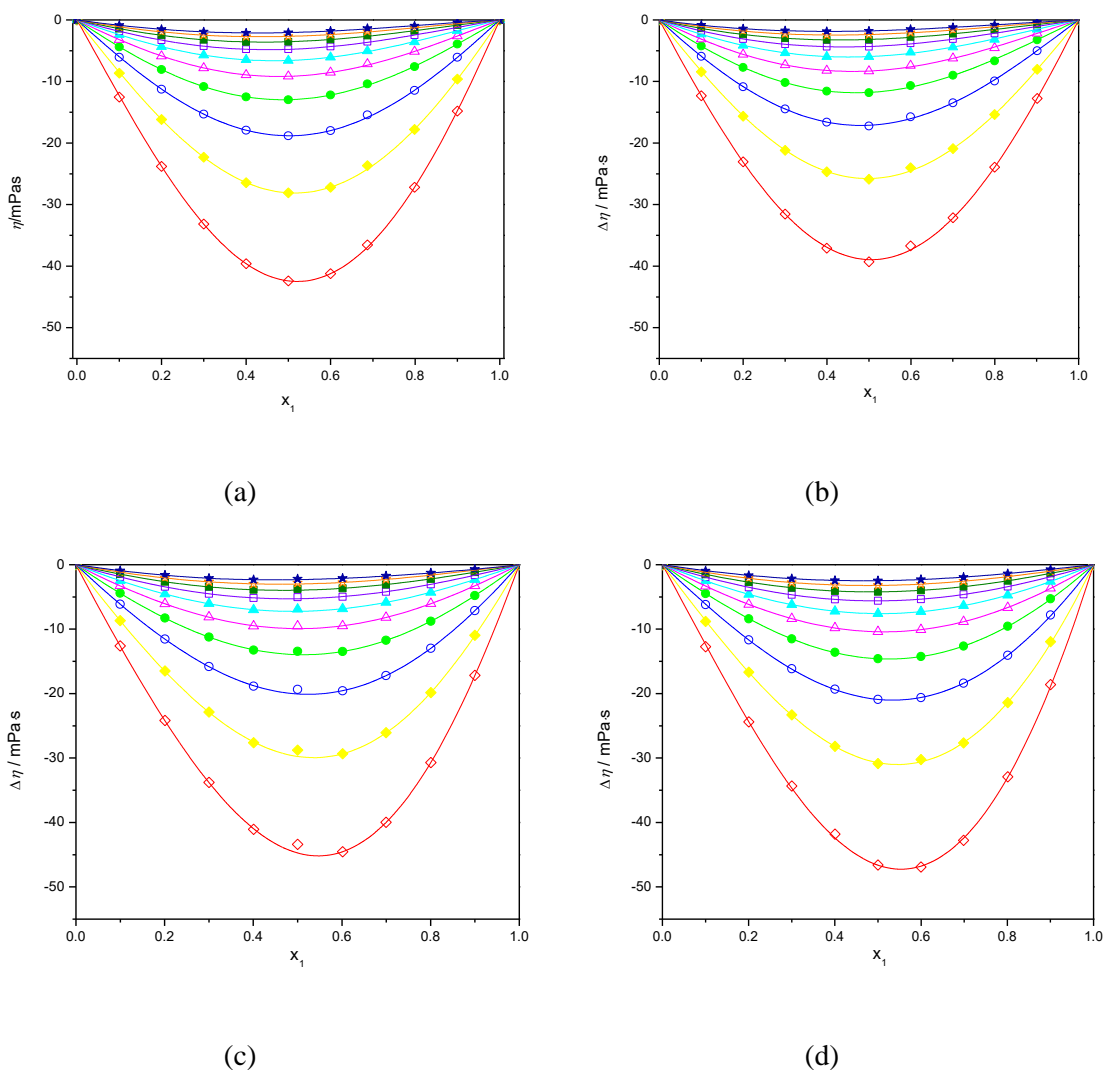
(c)



(d)

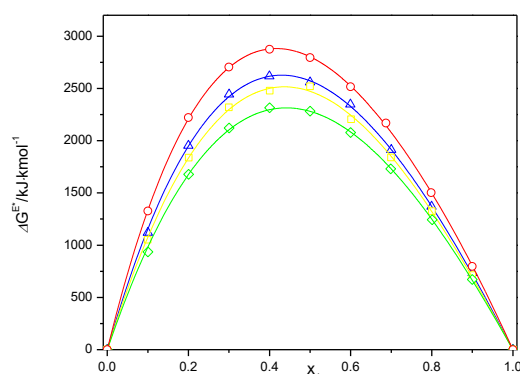
Slika 5.18 Eksperimentalne vrednosti promene indeksa refrakcije Δn_D za sisteme: (a) PPG 425+ toluen; (b) PPG 425 + o-ksilen; (c) PPG 425 + m-ksilen; (d) PPG 425 + p-ksilen; gde x_1 označava molski udeo PEGDA 425 na temperaturama: (\diamond) 288.15 K, (\blacklozenge) 298.15 K, (\circ) 308.15 K, (\bullet) 318.15 K, (\square) 328.15 K (—) RK jednačina

Slika 5.19 prikazuje negativne promene viskoznosti za sve sisteme. Krive promene viskoznosti u zavisnosti od sastava smeše su prilično simetrične za sve sisteme sa minimumom oko $x_1=0.5$. Apsolutne vrednosti promene viskoziteta opadaju sa porastom temperature što je izraženije pri nižim temperaturama. Vrednosti promene viskoziteta imaju visoke vrednosti u svim slučajevima. Slika 5.20 predstavlja dopunsku molarnu Gibsovu energiju aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} na temperaturi 308.15 K.



Slika 5.19 Eksperimentalne vrednosti promene viskoznosti $\Delta\eta$ za sisteme: (a) toluen; (b) o-ksilen; (c) m-ksilen; (d) p-ksilen; gde x_1 označava molski udeo PPG 425 na temperaturama: (\diamond) 288.15 K, (\blacklozenge) 293.15 K, (\circ) 298.15 K, (\bullet) 303.15 K, (Δ) 308.15 K, (\blacktriangle) 313.15 K, (\square) 318.15 K, (\blacksquare) 323.15 K, (\star) 328.15 K, (\ast) 333.15 K, (—) RK jednačina

Pozitivne vrednosti promene dobijene su za sve sisteme. Neidealno ponašanje u binarnim smešama PPG425 sa toluenom i tri izomera ksilena može se protumačiti analiziranjem izračunatih dopunskih termodinamičkih osobina ili odstupanja uzimajući u obzir neke od osobina čistih komponenti, glavnih interakcija među molekulima sličnog i različitog tipa.



Slika 5.20 Dopunska Gibsova energija aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} za sisteme sa: (○) toluen; (Δ) o-ksilen; (□) m-ksilen; (◇) p-ksilen; na 308.15 K gde x_1 označava molski udeo PPG 425, (—) RK jednačina

Table 5.10 Kamlet-Taft parametri (kiselost vodonične veze α i baznost β), dipolni momenti (μ) i dielektrične konstante (ϵ) za ispitivane čiste komponente

Hemikalija	α	β	μ/D	ϵ
Toluen	0.00 ¹⁷⁸	0.11 ¹⁷⁸	0.36 ¹⁷⁹	2.3536 ¹⁸⁰
o-ksilen	0.00 ¹⁷⁸	0.12 ¹⁷⁸	0.62 ¹⁷⁹	2.4150 ¹⁸⁰
m-ksilen	0.00 ¹⁷⁸	0.12 ¹⁷⁸	0.30 ¹⁷⁹	2.3442 ¹⁸⁰
p-ksilen	0.00 ¹⁷⁸	0.12 ¹⁷⁸	0.00 ¹⁷⁹	2.2447 ¹⁸⁰
PPG1200 ^a	-0.03 ¹²⁴	0.67 ¹²⁴	-	-
PPG400	-	-	3.5 ¹²²	8.86 ¹²²

^a Nema dostupnih literaturnih podataka Kamlet-Taft parametara za PPG 425;

U tabeli 5.10 date su Kamlet-Taft parametri čistih komponenti, kiselost i baznost vodonične veze, dipolni moment i dielektrične konstante. Ova tabela prikazuje da su sve čiste komponente akceptori vodonične veze i da ni jedna od njih nije donor.

Dipolni momenti su niski ili jednaki nuli sa dielektričnim konstantama nižim od pet zbog čega se sve mogu smatrati nepolarnim komponentama¹⁸⁰. Kada se PPG (slično polietilen glikolu) rastvori u nepolarnim organskim rastvaračima dominiraju nepolarne strukture niskih unutrašnjih energija⁵. U skladu sa tim može se zaključiti da jake privlačne interakcije, vodonične veze i interakcije tipa dipol-dipol ne postoje u posmatranim sistemima.

Međutim kao u slučaju rastvora PEG u benzenu, slučajne pojave nepolarnih struktura i broj konformacija proizvode slabe ali brojne specifične privlačne interakcije sa nepolarnim rastvaračima¹⁸¹. Ovo je u skladu sa dobijenim vrednostima za dopunsku molarnu zapreminu, vrednosti su od neznatno negativnih do umereno negativnih (na 298.15 K V^E u opsegu od $\sim -0.10 \cdot 10^{-6} m^3 \cdot mol^{-1}$, sistem sa m-ksilenom, do $\sim -0.5 \cdot 10^{-6} m^3 \cdot mol^{-1}$ za sistem sa toluenom). Na višim temperaturama dominiraju nepolarne konformacije i interakcije sa nepolarnim rastvaračima su olakšane⁴ dajući negativne dopunske molarne zapremine što objašnjava i njihov temperaturni trend, slika 5.17. Vrednosti promene viskoznosti su izuzetno negativne kod su vrednosti promene dopunske molarne Gibsove energije viskoznog toka izuzetno pozitivne. Fort i Moore¹⁶⁶ smatraju da su razlog negativnog odstupanja viskoziteta posledica slabih interakcija između različitih molekula (sile disperzije). Mayer i saradnici su predložili¹⁸² da se ΔG^{*E} vrednosti analiziraju na molekulske interakcije, uzimajući u obzir volumetrijske i viskozne efekte, takođe su visoke pozitivne vrednosti ΔG^{*E} povezali sa prisustvom snažnih privlačnih interakcija što nije slučaj u ispitivanim sistemima. Razlog ovog neslaganja nalazi se u činjenici da se molekuli čistih komponenti proučavanih smeša veoma razlikuju po veličini (odnos molarnih zapremina na 25°C je između 3.4 i 4.0). Reed i Taylor¹⁶⁷ sugerišu naročito u slučaju sistema sa molekulima različite veličine, da analiza samo ΔG^{*E} funkcije nije dovoljna tj. da se doprinosi entalpije ΔH^{*E} i entropije ΔS^{*E} vrednostima ΔG^{*E} moraju uzeti u obzir da bi se u potpunosti razumelo ponašanje sistema. Ako se ΔG^{*E} računa koristeći jednačinu (2.55) pri datom sastavu dopunska entropija i dopunska entalpija se mogu izračunati iz jednačina 2.56 i 2.57. U tabeli P9 date su prethodno navedene termodinamičke veličine za sve proučavane sisteme na svim proučavanim temperaturama pri konstantnom (ekvimolarnom) sastavu smeša. Tabela P9 prikazuje da su doprinosi entropije ΔG^{*E} funkciji za sve posmatrane sisteme negativni tj. znatno veći nego doprinosi entalpije.

To ukazuje na činjenicu da je viskozni tok vođen entropijom i da su efekti entropije povezani sa različitom veličinom molekula razlog visoko pozitivnih vrednosti ΔG^{*E} . Ovi entropijski efekti najslabije izraženi u sistemu sa toluenom. Odgovarajuće ΔH^{*E} vrednosti koje se odnose na molekularne interakcije pozitivne su samo na nekim nižim temperaturama u slučaju PPG425 + toluen sistema ukazujući na ograničene jake privlačne interakcije na šta ukazuje i Meyer¹⁸².

Ovo je u skladu sa činjenicom da se najniže negativne vrednosti dopunske molarne zapremine nalaze u ovom sistemu ($\sim /0.5 \cdot 10^{-6} m^3 \cdot mol^{-1}$) i da u ovom slučaju nema promene znaka. Generalno veoma negativne ΔH^{*E} za ostala tri sistema ukazuju na odsustvo jakih asocijativnih interakcija¹⁸² te stoga su u saglasnosti sa dopunskim moralnim zapreminama koje su samo blago negativne i menjaju znak.

Svi proučavani sistemi imaju refraktivne indekse kao i njihove odstupanja od idealnosti. Ova činjenica ukazuje na dobro pakovanje struktura i skladu je sa analizom entropije viskoznog toka i različitom veličinom molekula čistih komponenti. Modelovanje viskoziteta rađeno je po dva modela predikativni i korelativni. Viskozitet je predviđana korišćenjem UNIFAC-VISCO^{39,40} i ASOG-VISCO⁴¹ modela. Za predviđanje korišćeni su parametri interakcije iz literature koji su dati u tabelama 5.11. i 5.12.

Table 5.11- UNIFAC-VISCO interakcioni parametri

<i>n/m</i>	α_{nm}						
	CH ₃	CH ₂	CH	OH	CH ₂ O	CH _{ar}	C _{ar}
CH ₃	0	-709.5 ^{39,40}	-911.38 ¹⁸³	594.4 ^{39,40}	-50.17 ¹⁸³	-119.5 ^{39,40}	-477.302 ¹⁸⁴
CH ₂	66.53 ^{39,40}	0	386.02 ¹⁸³	498.6 ^{39,40}	-319.93 ¹⁸³	406.7 ^{39,40}	-528.946 ¹⁸⁴
CH	-395.88 ¹⁸³	134.65 ¹⁸³	0	-684.26 ¹⁸³	-695.33 ¹⁸³	369.03 ¹⁸⁵	-70.52 ¹⁸⁵
OH	1209 ^{39,40}	-634.5 ^{39,40}	684.19 ¹⁸³	0	-619.36 ¹⁸³	197.7 ^{39,40}	-517.381 ¹⁸⁴
CH ₂ O	456.91 ¹⁸³	-340.25 ¹⁸³	112.61 ¹⁸³	25.34 ¹⁸³	0	-315.736 ¹⁸⁴	-530.478 ¹⁸⁴
CH _{ar}	237.2 ^{39,40}	-623.7 ^{39,40}	-167.52 ¹⁸⁵	419.3 ^{39,40}	-696.027 ¹⁸⁴	0	-446.993 ¹⁸⁴
C _{ar}	-371.26 ¹⁸⁴	-539.68 ¹⁸⁴	396.66 ¹⁸⁵	-653.74 ¹⁸⁴	-550.277 ¹⁸⁴	-292.381 ¹⁸⁴	0

Table 5.12 ASOG-VISCO interakcioni parametri

<i>k/l</i>	m_{kl}				
	CH ₂	OH	CH ₂ O	CH _{ar}	C _{ar}
CH ₂	0	-0.357 ⁴¹	-10.9924 ⁴¹	0 ⁴¹	1.8024 ¹⁸⁴
OH	14.146 ⁴¹	0	-2.2661 ⁴¹	5.9432 ⁴¹	1.0797 ¹⁸⁴
CH ₂ O	-33.9591 ⁴¹	1.5287 ⁴¹	0	0.6676 ⁴¹	0.15726 ¹⁸⁴
CH _{ar}	0 ⁴¹	-11.32 ⁴¹	-0.5917 ⁴¹	0	-0.2366 ¹⁸⁴
C _{ar}	-0.329712 ¹⁸⁴	0.121749 ¹⁸⁴	0.0417313 ¹⁸⁴	0 ¹⁸⁴	0

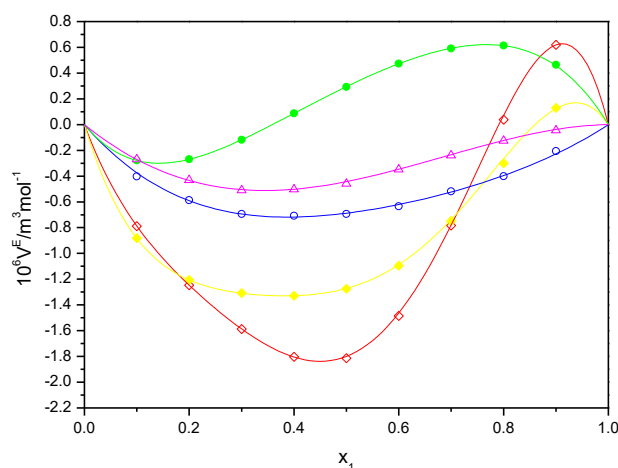
<i>k/l</i>	n_{kl}				
	CH ₂	OH	CH ₂ O	CH _{ar}	C _{ar}
CH ₂	0	469.65 ⁴¹	-1.928 ⁴¹	-418.5 ⁴¹	-2.0608 ⁴¹
OH	-6137 ¹⁸⁴	0	-14.965 ⁴¹	-1247 ¹⁸⁴	-0.0001 ⁴¹
CH ₂ O	-8.176 ⁴¹	-127.018 ⁴¹	0	537.3024 ⁴¹	-170.5928 ⁴¹
CH _{ar}	-187.4 ⁴¹	280.63 ⁴¹	236.477 ⁴¹	0	146.6703 ⁴¹
C _{ar}	-70.06 ⁴¹	7.877 ⁴¹	23.285 ⁴¹	-36.3902 ⁴¹	0

Podaci viskoznosti su korelisani sa McAllister⁴² dvoparametarski *three-body* i troparametarski *four-body* modelima. Mogućnost ovih modela za predviđanje dinamičkog viskoziteta proučavanih binarnih smeša kao i mogućnost korelacije eksperimentalnih podataka viskoznosti proverene su računanjem procenta devijacije PD_{\max} između eksperimentalnih i izračunatih viskoziteta jednačinom (3.27). Rezultati dobijeni UNIFAC-VISCO, ASOG-VISCO i McAllister za smeše PPG 425 + toluen/o-ksilen/ m-ksilen / p-ksilen u proučavanim temperaturnim opsezima dati su u tabeli P11. UNIFAC-VISCO model pokazao se boljim u predviđanju u odnosu na ASOG-VISCO naročito na višim temperaturama i kod sistema sa izomerima ksilena sa druge strane korelacioni modeli su pokazali dobre rezultate sa PD_{\max} manjim od 1% u većini slučajeva.

PPG2000

Nakon ispitivanja PPG425 analiza je proširena i na polipropilen molarne mase 2000 sa istim velikim industrijskim zagađivačima: benzenom, toluenom, o-, m- i p-ksilenom. Pet binarnih smeša PPG 2000 + benzen, PPG 2000 + toluen, PPG 2000 + o-ksilen, PPG 2000 + m-ksilen, PPG 2000 + p-ksilen ispitivane su u temperaturnom opsegu $T = (288.15 - 323.15) K$ sa korakom 5 K, na atmosferskom pritisku. Termodinamička svojstva kao što su gustina, viskoznost, i indeks refrakcije, merene su eksperimentalno. Rezultati su prikazani u tabeli P11. Iz ovih eksperimentalnih podataka izračunate su dopunske molarne zapremine V^E , promena viskoziteta $\Delta\eta$ i promena indeksa refrakcije Δn_D i dopunska molarna Gibsova energija viskoznog toka ΔG^{*E} . Sve pomenute veličine su fitovane Redlich-Kister polinomom.

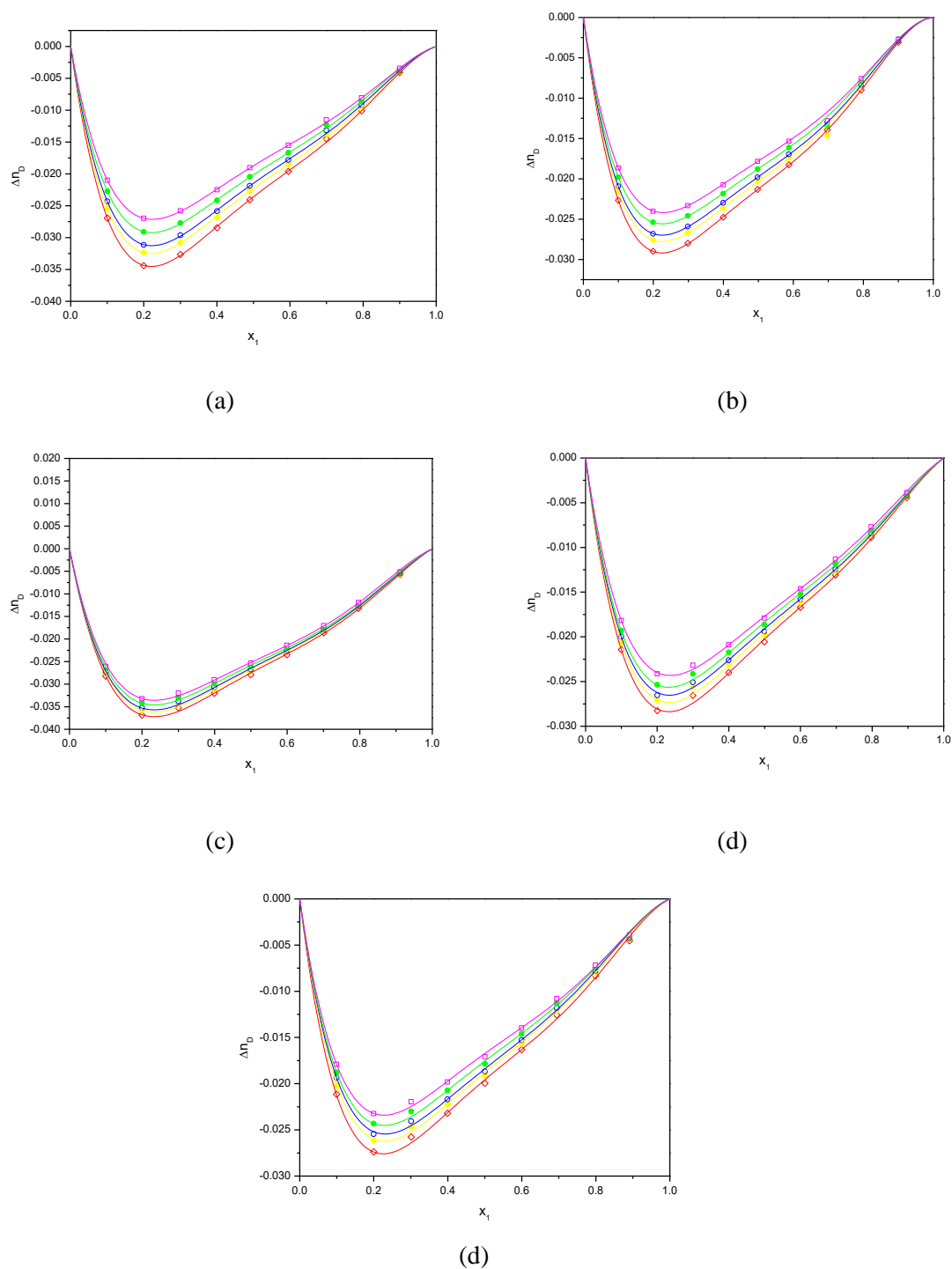
Slika 5.21 predstavlja grafički prikaz V^E ponašanja za svih pet binarnih smeša. Prikazani su rezultati samo na temperaturi 303.15 K. Za sve sisteme, osim o-ksilen, vrednosti dopunske molarne zapremine V^E menjaju znak. Vrednosti dopunske molarne zapremine za sisteme PPG2000 + benzen, PPG2000 + toluene, PPG2000 + m-ksilen, PPG2000 + p-ksilen menjaju znak iz negativnih u pozitivne vrednosti idući ka višim vrednostima molskog udela PPG 2000. Najviše apsolutne vrednosti V^E dobijene su za sistem PPG2000+benzene a najniže za sistem PPG 2000+ m-ksilen.



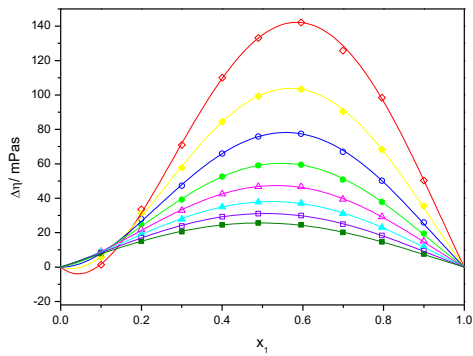
Slika 5.21 Eksperimentalne vrednosti dopunska molarne zapremine V^E za sisteme: (\diamond) benzen, (\blacklozenge) toluen; (\circ) o-ksilen; (\bullet) m-ksilen; (\triangle) p-ksilen; na 303.15 K gde x_1 označava molski udeo PPG 2000, (—) RK jednačina

Krive promene indeksa refrakcije za sve ispitivane binarne smeše prikazane su na slici 5.22. Sve krive su asimetrične sa minimumom oko $x_1=0.2$. Apsolutne vrednosti Δn_D opadaju sa porastom temperature za sve ispitivane sisteme. Na slici 5.23 prikazane su krive promene viskoznosti za sve sisteme. Vrednosti promene viskoznosti se menjaju iz neznatno negativnih vrednosti u pozitivne za sve binarne smeše. Za sisteme PPG2000 + benzen, PPG2000 + toluen i PPG2000 + o-ksilen minimum i maksimum krive javljaju se u $x_1=0.1$ i $x_1=0.6$, respektivno. Dok za sisteme PPG2000 + m-ksilen/p-ksilen, S-kriva promene viskoznosti menja znak iz negativnog u pozitivni sa minimumom oko $x_1=0.1$ i maksimumom u $x_1=0.7$. Za sve sisteme vrednosti promene viskoznosti rastu sa porastom temperature i postaju pozitivne u celom opsegu koncentracija pri višim temperaturama. Vrednosti promene viskoznosti su niske za sve ispitivane smeše.

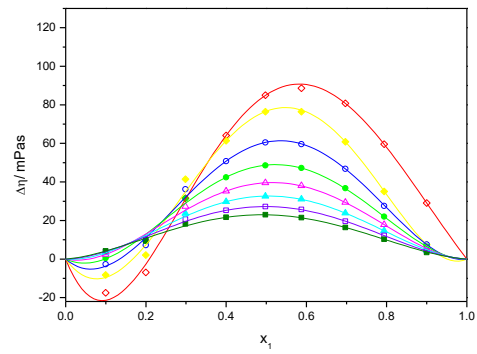
Slika 5.24 predstavlja dopunsku molarnu Gibsovu energiju aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} na temperaturi 308.15 K. Pozitivne vrednosti promene dobijene su za sve sisteme.



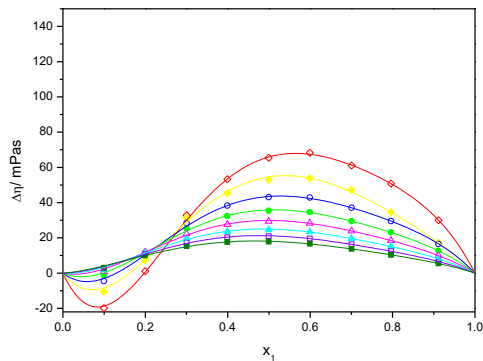
Slika 5.22 Eksperimentalne vrednosti promene indeksa refrakcije Δn_D za sisteme sa: (a) benzen; (b) toluen; (c) o- ksilen; (d) m- ksilen; (e) p- ksilen; gde x_1 označava molski udeo PEGDA 2000 na temperaturama: (\diamond) 288.15 K, (\blacklozenge) 298.15 K, (\circ) 303.15 K, (\bullet) 313.15 K, (Δ) 323.15 K (—) RK jednačina



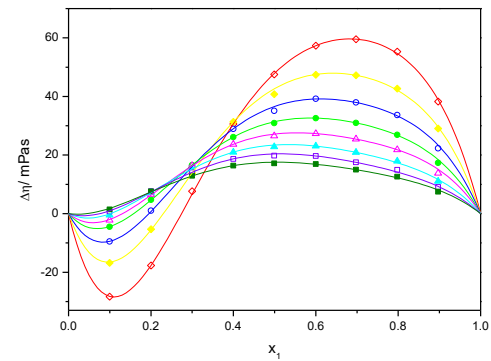
(a)



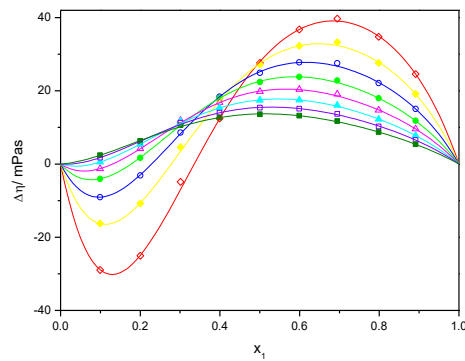
(b)



(c)

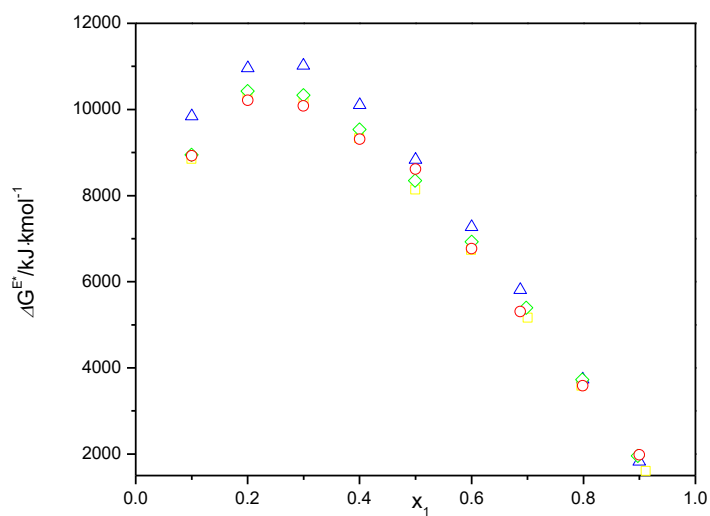


(d)



(d)

Slika 5.23 Eksperimentalne vrednosti promene viskoznosti $\Delta\eta$ za sisteme: (a) benzen (b) toluen; (c) o-ksilen; (d) m-ksilen; (e) p-ksilen; gde x_1 označava molni udeo PPG 2000 na temperaturama: (\diamond) 288.15 K, (\blacklozenge) 293.15 K, (\circ) 298.15 K, (\bullet) 303.15 K, (Δ) 308.15 K, (\blacktriangle) 313.15 K, (\square) 318.15 K, (\blacksquare) 323.15 K, (—) RK jednačina



Slika 5.24 Dopunska Gibsova energija aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} za sisteme sa: (○) toluen; (Δ) o-ksilen; (□) m-ksilen; (◇) p-ksilen; na 308.15 K gde x_1 označava molski udeo PPG 2000.

6. Zaključak

U ovoj doktorskoj disertaciji izvršena je termodinamička karakterizacija tri tipa ekoloških rastvarača: polimera, jonskih tečnosti i alkohola; i razmatrana je njihova potencijalna primena u separaciji organskih rastvarača.

- Ispitivano je fazno čvrsto-tečno ponašanje sistema PEG 2050 i PEG 35000 + anilin / *N,N*-dimetilanilin i određene su homogene i heterogene oblasti. Eksperimentalno je određena ravnoteža tečno - tečno pseudo binarnih sistema + anilin / *N,N*-dimetilanilin + PEG 2050 / PEG 35000 +H₂O.
- PEG 2050 je pokazao malo bolju rastvorljivost u anilinu nego u *N,N*-dimetilanilinu, verovatno zbog veće kiselosti vodonične veze anilina koji je stvorio jače vezivanje vodonika s lancem polimera. S druge strane duži lanac polimera izazvao je dramatično nižu rastvorljivost u oba ispitivana organska rastvarača.
- Dobijeni fazni dijagrami tečno - tečno pokazali su da samo dodavanje PEG 2050 vodenom rastvoru anilina izazvalo značajan ko-rastvarač efekat za anilin u vodi. U slučaju PEG 35000 došlo je do suprotnog efekta i on se pokazao kao anti-rastvarač smanjujući rastvorljivost *N,N*-dimetilanilina.
- Ravnotežni podaci čvrsto-tečno za sva četiri binarna sistema su korelisani NRTL modelom sa dva različita temperaturno zavisna parametra, Δg_{12} i Δg_{21} , i dobijeni rezultati korelacije su pokazali dobro slaganje sa eksperimentalnim.

Tretman nikotina u otpadnim tokovima primenom alkohola

- Ispitivana je mogućnost tretmana industrijskog zagađivača nikotina sa sledećim alkoholima: 1-butanol, 2-butanol, 1,2-propandiol i 1,3-propandiol. Za projektovanje industrijskih procesa neophodno je poznavanje termodinamičkih veličina čistih komponenta i njihovih smeša, stoga je vršeno eksperimentalno merenje gustine, viskoznosti i indeksa refrakcije u temperaturnom opsegu $T = (288.15 - 323.15) K$ i izračunate su dopunske molarne zapremine, promene indeksa refrakcije, promene viskoznosti i fitovane korišćenjem Redlich - Kister polinoma. Takođe dopunska Gibsova energija aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} , koeficijent termalne ekspanzije α , dopunski koeficijent termalne ekspanzije α^E , parcijalne molarne zapremine \bar{V}_i dopunske parcijalne molarne zapremine \bar{V}_i^E i njihove vrednosti pri beskonačnom razblaženju $\bar{V}_i^{E,\infty}$ koje su izračunate iz eksperimentalnih vrednosti korišćene su za analizu neidealnog ponašanja smeša. FT-IR analize spektra su vršene na 298.15 K kako za čiste tako i za odabrane binarne smeše kako bi se ispitale molekularne strukture smeša i moguće inter molekularne interakcije između komponenti.
- Za sve binarne sisteme ustanovljene su negativne vrednosti dopunske molarne zapremine dok su vrednosti promene indeksa refrakcije pozitivne. Krive promene viskoznosti u zavisnosti od sastava su S - oblika osim za sistem nikotin + 1-butanol gde S - kriva postoji na nižim temperaturama (293.15 K, 298.15 K i 303.15 K) dok su za više temperature promene viskoznosti pozitivne. Usled polarne prirode komponenti i njihove sposobnosti formiranja vodoničnih veza pretpostavljeno je da su moguće inter molekularne vodonične veze između molekula različitog tipa. FT - IR spektar dobijen za 298.15 K dokazuje prisustvo vodoničnih veza u sistemima nikotin + 2-butanol, nikotin + 1,2-propandiol i nikotin + 1,3-propandiol što je u saglasnosti sa negativnim vrednostima V^E i pozitivnim vrednostima $\Delta\eta$ za date molske udele. Za smešu nikotin + 1-butanol ne postoje dokazi o formiranju vodoničnih veza tako da razlog za negativne V^E vrednosti može biti efikasno geometrijsko pakovanje.

- Takođe, negativne dopunske parcijalne molarne zapremine pri beskonačnom razblaženju ukazuju da privlačne sile dominiraju u rastvorima što dovodi do efikasnog geometrijskog pakovanja molekula.
- Uzimajući u obzir sve izmerene i izračunate veličine može se zaključiti da se u smešama nikotina i propandiola dešavaju snažnije interakcije u odnosu na smeše sa butanolima što je u skladu sa njihovom izraženom polarnom prirodom i dobrom sposobnošću da formiraju vodonične veze.

Tretman toksičnih hemikalija jonskim tečnostima

- Ispitivane su vrednosti gustine i viskozitetu za četiri binarne smeše anilin + [bmim][OTf], anilin + [bmim][NTf₂], N,N-dimetilanilin + [bmim][OTf], N,N-dimetilanilin + [bmim][NTf₂] na temperaturama T=(288.15-333.15) K i pri konstantnom pritisku. Dopunske molarne zapremine V^E , promene indeksa refrakcije, promene vrednosti viskoznosti kao i dopunske Gibsova energija aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} , izračunate su iz eksperimentalnih vrednosti i korelisane Redlich - Kister polinomom.
- Visoke negativne vrednosti dopunske molarne zapremine V^E , pozitivne dopunske molarne Gibsove energije i dopunske molarne entalpije aktivacije viskoznog toka ΔH^{*E} ukazuju na dominaciju jakih pozitivnih interakcija između molekula različitog tipa - Kolumbove sile, vodonične veze i interakcije jon - dipol. Ove interakcije preovlađuju u odnosu na udruživanje molekula anilina, uparivanje jona i katjon - anjon interakcije koje postoje među molekulima čistih komponenti. Međutim razlike u veličini molekula različitog tipa značajno doprinose pozitivnim vrednostima ΔG^{*E} kod sistema anilin + [bmim][NTf₂], što se ne sme zanemariti.
- Pokazano je da samo simultana analiza dopunskih molarnih zapremina, dopunskih molarnih Gibsovih energija, dopunskih molarnih entalpija i dopunskih molarnih entropija aktivacije viskoznog toka mogu dati detaljno objašnjenje molekularnih interakcija koje postoje u smeši, naročito ako se molekuli komponenti razlikuju po veličini.

Tretman toksičnih hemikalija polipropilenima

- Za smeše benzen / toluen / o-ksilen / m-ksilen/ p-ksilen + PPG425 / PPG2000 eksperimentalno su merene gustine, viskoznosti i indeksi refrakcije u temperaturnom opsegu $T = (288.15 - 323.15) K$ i izračunate dopunska molarna zapremina V^E , promene viskoznosti $\Delta\eta$, promene indeksa refrakcije Δn_D i dopunska Gibsova energija aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} i korelisane Redlich - Kister polinomom.
- Vrednosti dopunske molarne zapremine V^E se kreću od blago negativnih (smeša sa m-ksilenom) do umereno negativnih (smeša sa toluenom). Za sve sisteme primećena je promena znaka za vrednosti V^E osim u slučaju smeše sa toluenom. Vrednosti Δn_D i $\Delta\eta$ su negativne u celom temperaturnom ispitivanom opsegu za sve smeše, dok su vrednosti ΔG^{*E} pokazale pozitivan trend za sve binarne sisteme.
- Analiza Kamlet - Taft parametara, dielektrične konstante i dipolnih momenata čistih komponenata kao i nepolarnih konformacija PPG u smeši sa nepolarnim aromatičnim rastvaračima ukazuje na odsustvo vodoničnih veza kao i dipol - dipol interakcija u ispitivanim sistemima. Dominantne interakcije u posmatranim sistemima su slabe i brojne specifične interakcije između praktično nepolarnog PPG 425 i aromatičnih rastvarača što je u saglasnosti sa vrednostima za dopunsku molarnu zapreminu i dobijene vrednosti za promene.
- Analiza entalpijskog i entropijskog doprinosa dopunskoj Gibsovoj energiji aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} je pokazala da su visoke pozitivne vrednosti posledica negativnog entropijskog doprinosa, zbog velike razlike u veličini molekula PPG i aromatskih molekula a ne jakih interakcija u ispitivanim sistemima.
- Za modelovanje viskoznosti primenjeni su prediktivni UNIFAC-VISCO i ASOG-VISCO modeli doprinosa grupa gde su određivani i interaktivni parametri za oba modela i dvoparametarski McAllister modeli. UNIFAC-VISCO se pokazao kao bolji prediktivni model, posebno na višim temperaturama i u sistemima sa izomerima ksilena.

7. Literatura

- (1) Rudan-Tasic, D.; Klofutar, C. Apparent Specific Polarization and Dipole Moment of Some Poly(Oxyethylene) Glycols in 1,4-Dioxane and Benzene Solutions at 298.15 K. *Monatshefte für Chemie* **2005**, *136*, 1171–1182. <https://doi.org/10.1007/s00706-005-0323-x>.
- (2) JANG, M. D.; PARK, J. H.; KIM, I.-W.; RYU, Y. K.; CHO, E. H.; LEE, Y. K. Dipolarity, Hydrogen-Bond Basicity and Hydrogen-Bond Acidity of Aqueous Poly(Ethylene Glycol) Solutions. *Anal. Sci.* **2005**, *18* (12), 1357–1360. <https://doi.org/10.2116/analsci.18.1357>.
- (3) Philippova, O. E.; Kuchanov, S. I.; Topchieva, I. N.; Kabanov, V. A. Hydrogen Bonds in Dilute Solutions of Poly(Ethylene Glycol). *Macromolecules* **1985**, *18* (8), 1628–1633. <https://doi.org/10.1021/ma00150a018>.
- (4) Linse, P.; Bjoerling, M. Lattice Theory for Multicomponent Mixtures of Copolymers with Internal Degrees of Freedom in Heterogeneous Systems. *Macromolecules* **1991**, *24* (25), 6700–6711. <https://doi.org/10.1021/ma00025a022>.
- (5) Chun-yan Chen, †; Mark A. Even, ‡; Jie Wang, ‡ and; Zhan Chen*, †. Sum Frequency Generation Vibrational Spectroscopy Studies on Molecular Conformation of Liquid Polymers Poly(Ethylene Glycol) and Poly(Propylene Glycol) at Different Interfaces. **2002**, 9130–9135. <https://doi.org/10.1021/MA020614J>.
- (6) Visak, Z. P.; Ilharco, L. M.; Garcia, A. R.; Najdanovic-Visak, V.; Fareleira, J. M. N. A.; Caetano, F. J. P.; Kijevcanin, M. L.; Serbanovic, S. P. Volumetric Properties and Spectroscopic Studies of Pyridine or Nicotine Solutions in Liquid Polyethylene Glycols. *J. Phys. Chem. B* **2011**, *115* (26), 8481–8492. <https://doi.org/10.1021/jp202464h>.
- (7) CFR - Code of Federal Regulations Title 21.
- (8) *Poly(Ethylene Glycol) Chemistry*; Harris, J. M., Ed.; Springer US: Boston, MA, 1992. <https://doi.org/10.1007/978-1-4899-0703-5>.

- (9) Heldebrant, D. J.; Witt, H. N.; Walsh, S. M.; Ellis, T.; Rauscher, J.; Jessop, P. G. Liquid Polymers as Solvents for Catalytic Reductions. *Green Chem.* **2006**, *8* (9), 807–815. <https://doi.org/10.1039/b605405f>.
- (10) Hansson, A.; Andersson, J.; Leufvén, A. The Effect of Sugars and Pectin on Flavour Release from a Soft Drink-Related Model System. *Food Chem.* **2001**, *72* (3), 363–368. [https://doi.org/10.1016/S0308-8146\(00\)00243-0](https://doi.org/10.1016/S0308-8146(00)00243-0).
- (11) Morão, A.; Maia, C. I.; Fonseca, M. M. R.; Vasconcelos, J. M. T.; Alves, S. S. Effect of Antifoam Addition on Gas-Liquid Mass Transfer in Stirred Fermenters. *Bioprocess Eng.* **1999**, *20* (2), 165–172. <https://doi.org/10.1007/s004490050576>.
- (12) Ruiz-Aceituno, L.; Sanz, M. L.; Ramos, L. Use of Ionic Liquids in Analytical Sample Preparation of Organic Compounds from Food and Environmental Samples. *TrAC - Trends Anal. Chem.* **2013**, *43*, 121–145. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2012.12.006>.
- (13) MacFarlane, D. R.; Seddon, K. R. Ionic Liquids—Progress on the Fundamental Issues. *Aust. J. Chem.* **2007**, *60* (1), 3–5. <https://doi.org/10.1071/CH06478>.
- (14) Paulechka, Y. U.; Kabo, G. J.; Blokhin, A. V.; Vydrov, O. A.; Magee, J. W.; Frenkel, M. Thermodynamic Properties of 1-Butyl-3-Methylimidazolium Hexafluorophosphate in the Ideal Gas State †. *J. Chem. Eng. Data* **2003**, *48* (3), 457–462. <https://doi.org/10.1021/je025591i>.
- (15) Huddleston, J. G.; Visser, A. E.; Reichert, W. M.; Willauer, H. D.; Broker, G. A.; Rogers, R. D. Characterization and Comparison of Hydrophilic and Hydrophobic Room Temperature Ionic Liquids Incorporating the Imidazolium Cation. *Green Chem.* **2001**, *3* (4), 156–164. <https://doi.org/10.1039/b103275p>.
- (16) Zhang, S.; Sun, N.; He, X.; Lu, X.; Zhang, X. Physical Properties of Ionic Liquids: Database and Evaluation. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **2006**, *35* (4), 1475–1517. <https://doi.org/10.1063/1.2204959>.
- (17) FREEMANTLE, M. DESIGNER SOLVENTS. *Chem. Eng. News* **1998**, *76* (13), 32–37. <https://doi.org/10.1021/cen-v076n013.p032>.
- (18) Crosthwaite, J. M.; Aki, S. N. V. K.; Maginn, E. J.; Brennecke, J. F.; Jacob M. Crosthwaite; Sudhir N. V. K. Aki; Edward J. Maginn, A.; Brennecke*, J. F. Liquid Phase Behavior of Imidazolium-Based Ionic Liquids with Alcohols. *J. Phys. Chem. B* **2004**, *108* (16), 5113–5119. <https://doi.org/10.1021/JP037774X>.
- (19) Crowhurst, L.; Mawdsley, P. R.; Perez-Arlandis, J. M.; Salter, P. A.; Welton, T. Solvent–Solute Interactions in Ionic Liquids. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2003**, *5* (13), 2790–2794. <https://doi.org/10.1039/B303095D>.
- (20) Cammarata, L.; Kazarian, S. G.; Salter, P. A.; Welton, T. Molecular States of Water in Room Temperature Ionic Liquids. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2001**, *3* (23), 5192–5200. <https://doi.org/10.1039/b106900d>.

- (21) Domańska, U.; Casás, L. M. Solubility of Phosphonium Ionic Liquid in Alcohols, Benzene, and Alkylbenzenes. *J. Phys. Chem. B* **2007**, *111* (16), 4109–4115. <https://doi.org/10.1021/jp070293j>.
- (22) Fumino, K.; Reimann, S.; Ludwig, R. Probing Molecular Interaction in Ionic Liquids by Low Frequency Spectroscopy: Coulomb Energy, Hydrogen Bonding and Dispersion Forces. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16* (40), 21903–21929. <https://doi.org/10.1039/c4cp01476f>.
- (23) Wang, J.; Tian, Y.; Zhao, Y.; Zhuo, K. A Volumetric and Viscosity Study for the Mixtures of 1-n-Butyl-3-Methylimidazolium Tetrafluoroborate Ionic Liquid with Acetonitrile, Dichloromethane, 2-Butanone and N, N - Dimethylformamide. *Green Chem.* **2003**, *5* (5), 618. <https://doi.org/10.1039/b303735e>.
- (24) Holbrey, J. D.; Reichert, W. M.; Nieuwenhuyzen, M.; Sheppard, O.; Hardacre, C.; Rogers, R. D. Liquid Clathrate Formation in Ionic Liquid-Aromatic Mixtures. *Chem. Commun.* **2003**, *9* (4), 476–477.
- (25) Deetlefs, M.; Hardacre, C.; Nieuwenhuyzen, M.; Sheppard, O.; Soper, A. K. Structure of Ionic Liquid-Benzene Mixtures. *J. Phys. Chem. B* **2005**, *109* (4), 1593–1598. <https://doi.org/10.1021/jp047742p>.
- (26) Lachwa, J.; Bento, I.; Duarte, M. T.; Lopes, J. N. C.; Rebelo, L. P. N. Condensed Phase Behaviour of Ionic Liquid-Benzene Mixtures: Congruent Melting of a [Emim][NTf2].C₆H₆ Inclusion Crystal. *Chem. Commun. (Camb)*. **2006**, No. 23, 2445–2447. <https://doi.org/10.1039/b602675c>.
- (27) Radović, I. R.; Kijevčanin, M. L.; Djordjević, E. M.; Djordjević, B. D.; Šerbanović, S. P. Influence of Chain Length and Degree of Branching of Alcohol+chlorobenzene Mixtures on Determination and Modelling of VE by CEOS and CEOS/GE Mixing Rules. *Fluid Phase Equilib.* **2008**, *263* (2), 205–213. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2007.09.028>.
- (28) Tomé, L. I. N.; Rosado, M. T. S.; Ermelinda, M.; Eusébio, S.; Redinha, J. S. Molecular Structure of Mono- and 1,2-Aminoderivatives of Cyclohexane: Steric Strain Effects as Determining Factors. *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **2007**, *804* (1–3), 65–74. <https://doi.org/10.1016/j.theochem.2006.09.035>.
- (29) Gosselin, R. E.; Gleason, M. N.; Hodge, H. C. (Harold C.; Smith, R. P. (Roger P. *Clinical Toxicology of Commercial Products: Acute Poisoning*; Williams & Wilkins, 1976.
- (30) Novotny, T. E.; Zhao, F. Consumption and Production Waste: Another Externality of Tobacco Use. *Tob. Control* **1999**, *8* (1), 75–80. <https://doi.org/10.1136/TC.8.1.75>.
- (31) Capleton, A. C.; Levy, L. S. An Overview of Occupational Benzene Exposures and Occupational Exposure Limits in Europe and North America. *Chem. Biol. Interact.* **2005**, *153–154*, 43–53. <https://doi.org/10.1016/j.cbi.2005.03.007>.
- (32) Carrieri, M.; Tranfo, G.; Pigni, D.; Paci, E.; Salamon, F.; Scapellato, M. L.;

- Fracasso, M. E.; Manno, M.; Bartolucci, G. B. Correlation between Environmental and Biological Monitoring of Exposure to Benzene in Petrochemical Industry Operators. *Toxicol. Lett.* **2010**, *192* (1), 17–21. <https://doi.org/10.1016/j.toxlet.2009.07.015>.
- (33) Perry, R. .; Perry, S.; Green, D. .; Maloney, J. . *Gasification*, in: R. H. Perry, (Ed.), *Perry's Chemical Engineers' Handbook, 7th Ed.*; 1997. <https://doi.org/10.1021/ed027p533.1>.
- (34) DeHoff, R. T. *Thermodynamics in Materials Science*; CRC/Taylor & Francis: New York, 2006.
- (35) Redlich, O.; Kister, A. T. Algebraic Representation of Thermodynamic Properties and the Classification of Solutions. *Ind. Eng. Chem.* **1948**, *40* (2), 345–348. <https://doi.org/10.1021/ie50458a036>.
- (36) Philip R. Bevington, D. K. R. Bevington_opt.Pdf. 2003, pp 1–12.
- (37) Resa, J. M.; Gonzalez, C.; Concha, R. G.; Iglesias, M. Influence of Temperature on Excess Molar Volumes for Butyl Acetate + Aromatic Hydrocarbons. *Phys. Chem. Liq.* **2004**, *42* (5), 493–520. <https://doi.org/10.1080/00319100410001724557>.
- (38) Renon, H.; Prausnitz, J. M. Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for Liquid Mixtures. *AIChE J.* **1968**, *14* (1), 135–144. <https://doi.org/10.1002/aic.690140124>.
- (39) Chevalier, J. L.; Petrino, P.; Gaston-Bonhomme, Y. Estimation Method for the Kinematic Viscosity of a Liquid-Phase Mixture. *Chem. Eng. Sci.* **1988**, *43* (6), 1303–1309. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(88\)85104-2](https://doi.org/10.1016/0009-2509(88)85104-2).
- (40) Gaston-Bonhomme, Y.; Petrino, P.; Chevalier, J. L. UNIFAC—VISCO Group Contribution Method for Predicting Kinematic Viscosity: Extension and Temperature Dependence. *Chem. Eng. Sci.* **1994**, *49* (11), 1799–1806. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(94\)80065-0](https://doi.org/10.1016/0009-2509(94)80065-0).
- (41) Tochigi, K.; Yoshino, K.; Rattan, V. K. Prediction of Kinematic Viscosities for Binary and Ternary Liquid Mixtures with an ASOG-VISCO Group Contribution Method. *Int. J. Thermophys.* **2005**, *26* (2), 413–419. <https://doi.org/10.1007/s10765-005-4505-x>.
- (42) McAllister, R. A. The Viscosity of Liquid Mixtures. *AIChE J.* **1960**, *6* (3), 427–431. <https://doi.org/10.1002/aic.690060316>.
- (43) Babak S.F. Viscosity and Density of Binary Mixtures of Nicotine. *Zh. Obs. Khim.* **1949**, *19* (1604).
- (44) Bajić, D. M.; Jovanović, J.; Živković, E. M.; Visak, Z. P.; Šerbanović, S. P.; Kijevčanin, M. L. Experimental Measurement and Modelling of Viscosity of the Binary Systems Pyridine or Nicotine with Polyethylene Glycols at T = (288.15–333.15) K. New UNIFAC–VISCO and ASOG–VISCO Interaction Parameters.

- Fluid Phase Equilib.* **2013**, *338*, 282–293.
<https://doi.org/10.1016/J.FLUID.2012.11.021>.
- (45) Fleming, R.; Saunders, L. The Magneto-Optic Rotations of Some Two-Component Liquid Systems. *J. Chem. Soc.* **1955**, *0* (0), 4147.
<https://doi.org/10.1039/jr9550004147>.
- (46) Artigas, H.; Lafuente, C.; Martin, S.; Pardo, J.; Urieta, J. S. Viscosities for Binary Mixtures of 1-Bromobutane and 1,4-Dibromobutane with Isomeric Butanols at 298.15 and 313.15 K. *Int. J. Thermophys.* **2001**, *22* (6), 1629–1642.
<https://doi.org/10.1023/A:1013118030427>.
- (47) Mussari, L.; Postigo, M.; Lafuente, C.; Royo, F. M.; Urieta, J. S. Viscosity Measurements for the Binary Mixtures of 1,2-Dichloroethane or 1,2-Dibromoethane with Isomeric Butanols. *J. Chem. Eng. Data* **2000**, *45* (1), 86–91.
<https://doi.org/10.1021/je990211n>.
- (48) Weng†, W.-L. Densities and Viscosities for Binary Mixtures of Anisole with 2-Butanol, 2-Methyl-1-Propanol, and 2-Methyl-2-Propanol. **1999**.
<https://doi.org/10.1021/JE980283Z>.
- (49) Timmermans, J.; 1882-. Physico-Chemical Constants of Pure Organic Compounds. Elsevier: New York 1950.
- (50) F. Mato, J. C. Viscosity of Binary Liquid Mixtures. III. Systems Benzene-Alcohols. *An. Quim.* **1970**, *66*, 127.
- (51) Sarkar, L.; Roy, M. N. Investigation on Viscous Synergism and Antagonism Prevailing in Binary Mixtures of Cyclohexylamine with Isomeric Butanols by Volumetric, Viscometric, Refractive Index and Ultrasonic Speed Measurements. *Phys. Chem. Liq.* **2011**, *49* (2), 219–236.
<https://doi.org/10.1080/00319100903538837>.
- (52) Hales, J. L. L.; Ellender, J. H. H. Liquid Densities from 293 to 490 K of Nine Aliphatic Alcohols. *J. Chem. Thermodyn.* **1976**, *8* (12), 1177–1184.
[https://doi.org/10.1016/0021-9614\(76\)90126-9](https://doi.org/10.1016/0021-9614(76)90126-9).
- (53) Rodríguez, A.; Canosa, J.; Tojo, J. Density, Refractive Index, and Speed of Sound of Binary Mixtures (Diethyl Carbonate + Alcohols) at Several Temperatures. *J. Chem. Eng. Data* **2001**, *46* (6), 1506–1515.
<https://doi.org/10.1021/je010148d>.
- (54) W.S. Jones, W. S. T. Physical Properties of Propylene Glycol in Glycols. *Am. Chem. Soc. Monogr. 114* **1952**, 210–240.
- (55) Litovitz, T. A.; Higgs, R.; Meister, R. Ultrasonic Propagation and Its Relation to Molecular Structure in the Diols. *J. Chem. Phys.* **1954**, *1281* (1954), 1281–1283.
<https://doi.org/10.1063/1.1740382>.
- (56) Riddick, J. A.; Bunger, W. B.; Sakano, T. K. Organic Solvents: Physical Properties and Methods of Purification. Fourth Edition. John Wiley and

- Sons, New York, NY January 1, 1986.
- (57) George, J.; Sastry, N. V. Densities, Dynamic Viscosities, Speeds of Sound, and Relative Permittivities for Water + Alkanediols (Propane-1,2- and -1,3-Diol and Butane-1,2-, -1,3-, -1,4-, and -2,3-Diol) at Different Temperatures. *J. Chem. Eng. Data* **2003**, *48* (6), 1529–1539. <https://doi.org/10.1021/je0340755>.
- (58) Alonso, I.; Mozo, I.; De La Fuente, I. G.; González, J. A.; Cobos, J. C. Thermodynamics of Ketone+amine Mixtures 7. Volumetric and Speed of Sound Data at (293.15, 298.15 and 303.15) K for 2-Pentanone+aniline, +N-Methylaniline, or +pyridine Systems. *J. Mol. Liq.* **2011**, *160* (3), 180–186. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2011.03.015>.
- (59) Tsierkezos, N. G.; Palaiologou, M. M.; Molinou, I. E. Densities and Viscosities of 1-Pentanol Binary Mixtures at 293.15 K. *J. Chem. Eng. Data* **2000**, *45* (2), 272–275. <https://doi.org/10.1021/je9902138>.
- (60) Katz, M.; Lobo, P. W.; Minano, A. S.; Solimo, H.; Miñano, A. S.; Sólino, H. Viscosities, Densities, and Refractive Indices of Binary Liquid Mixtures. *Can. J. Chem.* **1971**, *49* (15), 2605–2609. <https://doi.org/10.1139/v71-429>.
- (61) Kharat, S. J.; Nikam, P. S. Density and Viscosity Studies of Binary Mixtures of Aniline+benzene and Ternary Mixtures of (Aniline+benzene+N,N-Dimethylformamide) at 298.15, 303.15, 308.15, and 313.15 K. *J. Mol. Liq.* **2007**, *131–132*, 81–86. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2006.08.053>.
- (62) Master, Z. R.; Malek, N. I. Molecular Interaction Study through Experimental and Theoretical Volumetric, Acoustic and Refractive Properties of Binary Liquid Mixtures at Several Temperatures 1. N,N-Dimethylaniline with Aryl, and Alkyl Ethers. *J. Mol. Liq.* **2014**, *196*, 120–134. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2014.03.027>.
- (63) Arce, A.; Rodríguez, H.; Soto, A. Purification of Ethyl Tert-Butyl Ether from Its Mixtures with Ethanol by Using an Ionic Liquid. *Chem. Eng. J.* **2006**, *115* (3), 219–223. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2005.10.010>.
- (64) Vraneš, M.; Zec, N.; Tot, A.; Papović, S.; Dožić, S.; Gadžurić, S. Density, Electrical Conductivity, Viscosity and Excess Properties of 1-Butyl-3-Methylimidazolium Bis(Trifluoromethylsulfonyl)Imide + Propylene Carbonate Binary Mixtures. *J. Chem. Thermodyn.* **2014**, *68*, 98–108. <https://doi.org/10.1016/J.JCT.2013.08.034>.
- (65) Domínguez, I.; González, E. J.; González, R.; Domínguez, Á.; Domínguez, I.; González, E. J.; González, R.; Domínguez, A. Extraction of Benzene from Aliphatic Compounds Using Commercial Ionic Liquids as Solvents: Study of the Liquid-Liquid Equilibrium at T = 298.15 K. *J. Chem. Eng. Data* **2011**, *56* (8), 3376–3383. <https://doi.org/10.1021/je200334e>.
- (66) Vraneš, M.; Zec, N.; Tot, A.; Papović, S.; Dožić, S.; Gadžurić, S. Density, Electrical Conductivity, Viscosity and Excess Properties of 1-Butyl-3-Methylimidazolium Bis(Trifluoromethylsulfonyl)Imide+propylene Carbonate

- Binary Mixtures. *J. Chem. Thermodyn.* **2014**, *68*, 98–108. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2013.08.034>.
- (67) Kolská, Z.; Dvořáková, D.; Mika, J.; Boublík, T. Volumetric Behavior of the Binary Systems Benzene-Cyclohexane and Benzene-2,2,4-Trimethyl-Pentane at Temperatures 293.15-323.15K. *Fluid Phase Equilib.* **2011**, *303* (2), 157–161. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2011.01.018>.
- (68) Bhatia, S. C.; Sangwan, J.; Bhatia, R. Densities, Speeds of Sound and Viscosities of Binary Liquid Mixtures of Octan-2-ol with Benzene and Halobenzenes at 298.15 and 303.15 K. *J. Mol. Liq.* **2011**, *161*, 95–101. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2011.04.019>.
- (69) G. Egloff. *Physical Constants of Hydrocarbons*; Reinhold Publishing Corp: New York.
- (70) Al-Kandary, J. A.; Al-Jimaz, A. S.; Abdul-Latif, A.-H. M. Excess Molar Volumes and Refractive Indices of (Methoxybenzene+benzene, or Toluene, or o-Xylene, or m-Xylene, or p-Xylene, or Mesitylene) Binary Mixtures between T=(288.15 to 303.15)K. *J. Chem. Thermodyn.* **2006**, *38* (11), 1351–1361. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2006.02.001>.
- (71) Calvar, N.; González, B.; Gómez, E.; Canosa, J. Density, Speed of Sound, and Refractive Index for Binary Mixtures Containing Cycloalkanes and Aromatic Compounds at $T = 313.15$ K. *J. Chem. Eng. Data* **2009**, *54* (4), 1334–1339. <https://doi.org/10.1021/je8009336>.
- (72) *TRC Thermodynamic Tables : Hydrocarbons.*; Thermodynamic Research Center, Texas Engineering Experiment Station, Texas A&M University System,: College Station, TX :, 1985.
- (73) Thermodynamics Research Center, TRC-Thermodynamic Tables - Hydrocarbons. *Texas A&M Univ. Syst. Coll. Stn.* **1994**, TX 77843-3111.
- (74) Hales, J. .; Townsend, R. Liquid Densities from 293 to 490 K of Nine Aromatic Hydrocarbons. *J. Chem. Thermodyn.* **1972**, *4* (5), 763–772. [https://doi.org/10.1016/0021-9614\(72\)90050-X](https://doi.org/10.1016/0021-9614(72)90050-X).
- (75) Mussche, M. J.; Verhoeve, L. A. Viscosity of Ten Binary and One Ternary Mixtures. *J. Chem. Eng. Data* **1975**, *20* (1), 46–50. <https://doi.org/10.1021/je60064a020>.
- (76) Kashiwagi, H.; Hashimoto, T.; Tanaka, Y.; Kubota, H.; Makita, T. Thermal Conductivity and Density of Toluene in the Temperature Range 273?373 K at Pressures up to 250 MPa. *Int. J. Thermophys.* **1982**, *3* (3), 201–215. <https://doi.org/10.1007/BF00503316>.
- (77) Bolotnikov, M. F.; Verveiko, V. N.; Verveiko, M. V. Speeds of Sound, Densities, and Isentropic Compressibilities of Poly(Propylene Glycol)-425 at Temperatures from (293.15 to 373.15) K and Pressures up to 100 MPa. *J. Chem. Eng. Data* **2004**, *49* (3), 631–634. <https://doi.org/10.1021/je034212y>.

- (78) Shams, A. K. *Densities, Refractive Indices and Excess Properties of Binary Mixtures of Acetonitrile with Benzene, Toluene, m-Xylene and Mesitylene at Temperatures from (298.15 to 313.15) K*; 2011; Vol. 14.
- (79) Nain, A. K. Refractive Indices of Binary Mixtures of Tetrahydrofuran with Aromatic Hydrocarbon at Temperatures from (288.15 to 318.15) K. *J. Chem. Eng. Data* **2008**, 53 (3), 850–853. <https://doi.org/10.1021/je700564c>.
- (80) Singh, R. P.; Sinha, C. P. Viscosities and Activation Energies of Viscous Flow of the Binary Mixtures of N-Hexane with Toluene, Chlorobenzene and 1-Hexanol. *J. Chem. Eng. Data* **1984**, 29 (2), 132–135. <https://doi.org/10.1021/je00036a010>.
- (81) Nath, J.; Narain, B. Binary Systems of Tetrachloroethylene with Benzene, Toluene, p-Xylene, Carbon Tetrachloride, and Cyclohexane. 2. Viscosities at 303.15 K. *J. Chem. Eng. Data* **1983**, 28 (3), 296–297. <https://doi.org/10.1021/je00033a003>.
- (82) Bolat, G.; Lisa, G.; Popa, I. M. Experimental Dynamic Viscosities of Binary Mixtures: Acetic Acid + Water, Benzene, Toluene, n-Hexane, n-Heptane AT 296.15, 302.15, 308.15, 314.15 and 319.15 K. *Sci. study Res.* **2005**, VI (2), 181–190.
- (83) Gonzalez-Olmos, R.; Iglesias, M.; Santos, B. M. R. ; Mattedi, S.; Goenaga, J. M.; Resa, J. M. Influence of Temperature on Thermodynamic Properties of Substituted Aromatic Compounds. *Phys. Chem. Liq.* **2010**, 48 (2), 257–271. <https://doi.org/10.1080/00319100902839145>.
- (84) Zhang, Y.; Dong, H.; Yue, Y.; Wu, C. Effect of Temperature and Composition on the Density, Refractive Index, and Excess Quantities of Binary Mixtures of 2,4,6,8-Tetramethyl-2,4,6,8-Tetraethenylcyclotetrasiloxane with Aromatic Hydrocarbons. *J. Chem. Thermodyn.* **2013**, 57, 114–130. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2012.08.010>.
- (85) Yang, T.; Xia, S.; Song, S.; Fu, X.; Ma, P. Densities and Viscosities of *N*-Formylmorpholine (NFM) + *p*-Xylene, + *o*-Xylene, + *m*-Xylene at Different Temperatures and Atmospheric Pressure. *J. Chem. Eng. Data* **2007**, 52 (5), 2062–2066. <https://doi.org/10.1021/je7002513>.
- (86) Al-Kandary, J. A.; Al-Jimaz, A. S.; Abdul-Latif, A.-H. H. M. Viscosities, Densities, and Speeds of Sound of Binary Mixtures of Benzene, Toluene, o-Xylene, m-Xylene, p-Xylene, and Mesitylene with Anisole at (288.15, 293.15, 298.15, and 303.15) K. *J. Chem. Eng. Data* **2006**, 51 (6), 2074–2082. <https://doi.org/10.1021/je060170c>.
- (87) González, B.; González, E. J.; Calvar, N.; Domínguez, I.; Canosa, J. Density, Speed of Sound, and Refractive Index for Binary Mixtures Containing Cycloalkanes with *o*-Xylene, *m*-Xylene, *p*-Xylene, and Mesitylene at $T = (298.15 \text{ and } 313.15) \text{ K}$. *J. Chem. Eng. Data* **2010**, 55 (6), 2294–2305. <https://doi.org/10.1021/je901020a>.
- (88) Moumouzias, G.; Ritzoulis, G. Densities, Relative Permittivities, and Refractive

- Indices of the Binary Systems Propylene Carbonate + o-Xylene and Propylene Carbonate + m-Xylene at (15, 20, 25, 30, and 35)°C. *J. Chem. Eng. Data* **2000**, *45* (2), 202–206. <https://doi.org/10.1021/je990247f>.
- (89) Nain, A. K. Densities and Volumetric Properties of Binary Mixtures of Tetrahydrofuran with Some Aromatic Hydrocarbons at Temperatures from 278.15 to 318.15 K. *J. Solution Chem.* **2006**, *35* (10), 1417–1439. <https://doi.org/10.1007/s10953-006-9071-8>.
- (90) Chen, J.; Shen, R.; Liu, W.; Yu, G. Corrigendum to ' "A Study of Densities and Volumetric Properties of Binary Mixtures of N-Methyl-2-Pyrrolidone with Xylene at Different Temperatures and Atmospheric Pressure." *J. Chem. Thermodynamics* **2007**, *39*, 534–535. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2006.11>.
- (91) Gu, Y.; Wu, J. Volumetric Properties of Binary Mixtures of (N, N-Diethylformamide+xylenes) at Temperatures between T=293.15 K and T=353.15 K at P=0.1 MPa. *J. Mol. Liq.* **2008**, *137* (1–3), 165–173. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2007.06.007>.
- (92) Bhatia, S. C.; Rani, R.; Bhatia, R. Viscosities, Densities, Speeds of Sound and Refractive Indices of Binary Mixtures of o-Xylene, m-Xylene, p-Xylene, Ethylbenzene and Mesitylene with 1-Decanol at 298.15 and 308.15K. *J. Mol. Liq.* **2011**, *159* (2), 132–141. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2010.12.011>.
- (93) Kashiwagi, H.; Makita, T. Viscosity of Twelve Hydrocarbon Liquids in the Temperature Range 298–348 K at Pressures up to 110 MPa. *Int. J. Thermophys.* **1982**, *3* (4), 289–305. <https://doi.org/10.1007/BF00502346>.
- (94) Bhatia, S. C.; Rani, R.; Bhatia, R. Densities, Speeds of Sound, and Isentropic Compressibilities of Binary Mixtures of {Alkan-1-Ols + 1,2-Dimethylbenzene, or 1,3-Dimethylbenzene, or 1,4-Dimethylbenzene, or Ethylbenzene} at (293.15, 303.15, and 313.15) K. *J. Chem. Eng. Data* **2011**, *56* (4), 1675–1681. <https://doi.org/10.1021/je100734t>.
- (95) Ali, A.; Nain, A. K. K.; Chand, D.; Ahmad, R. Volumetric, Ultrasonic, Viscometric and Refractive Index Behavior of Binary Mixtures of 2,2,4-Trimethylpentane with Aromatic Hydrocarbons: An Experimental and Theoretical Study. *J. Mol. Liq.* **2006**, *128* (1–3), 32–41. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2005.02.007>.
- (96) Nayak, J. N.; Aralaguppi, M. I.; Aminabhavi, T. M. Density, Viscosity, Refractive Index, and Speed of Sound in the Binary Mixtures of Ethyl Chloroacetate with Aromatic Liquids at 298.15, 303.15, and 308.15 K. *J. Chem. Eng. Data* **2002**, *47* (4), 964–969. <https://doi.org/10.1021/je0200158>.
- (97) Exarchos, N. C.; Tasioula-Margari, M.; Demetropoulos, I. N. Viscosities and Densities of Dilute Solutions of Glycerol Trioleate + Octane, + p-Xylene, + Toluene, and + Chloroform. *J. Chem. Eng. Data* **1995**, *40* (3), 567–571. <https://doi.org/10.1021/je00019a005>.
- (98) Et-Tahir, A.; Boned, C.; Lagourette, B.; Xans, P. Determination of the Viscosity

- of Various Hydrocarbons and Mixtures of Hydrocarbons versus Temperature and Pressure. *Int. J. Thermophys.* **1995**, *16* (6), 1309–1334. <https://doi.org/10.1007/BF02083543>.
- (99) Rathnam, M. V.; Mohite, S.; Kumar, M. S. Thermophysical Properties of Isoamyl Acetate or Methyl Benzoate + Hydrocarbon Binary Mixtures, at (303.15 and 313.15) K †. *J. Chem. Eng. Data* **2009**, *54* (2), 305–309. <https://doi.org/10.1021/je800325d>.
- (100) Garg, S. K.; Banipal, T. S.; Ahluwalia, J. C. Heat Capacities and Densities of Liquid O-Xylene, m-Xylene, p-Xylene, and Ethylbenzene, at Temperatures from 318.15 K to 373.15 K and at Pressures up to 10 MPa. *J. Chem. Thermodyn.* **1993**, *25* (1), 57–62. <https://doi.org/10.1006/jcht.1993.1007>.
- (101) Yang, J.-H.; Dai, L.-Y.; Wang, X.-Z.; Chen, Y.-Q. Densities and Viscosities of Binary Mixtures of Methyl 4-Chlorobutyrate with Aromatic Hydrocarbons at $T =$ (298.15 to 318.15) K. *J. Chem. Eng. Data* **2009**, *54* (8), 2332–2337. <https://doi.org/10.1021/je900194v>.
- (102) Gonzalez-Olmos, R.; Iglesias, M.; Santos, B. M. R. ; Mattedi, S.; Goenaga, J. M.; Resa, J. M.; Goenaga, J. M.; Mattedi, S.; Gonzalez-Olmos, R.; Santos, B. M. R. ; et al. Influence of Temperature on Thermodynamic Properties of Substituted Aromatic Compounds. *Phys. Chem. Liq.* **2010**, *48* (2), 257–271. <https://doi.org/10.1080/00319100902839145>.
- (103) Behroozi, M.; Zarei, H. Volumetric Properties of Binary Mixtures of Tributylamine with Benzene Derivatives and Comparison with ERAS Model Results at Temperatures from (293.15 to 333.15)K. *J. Chem. Thermodyn.* **2012**, *47*, 276–287. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2011.10.027>.
- (104) Forziati, A. F.; Rossini, F. D. Physical Properties of Sixty API-NBS Hydrocarbons. *J. Res. Natl. Bur. Stand. (1934)*. **1949**, *43*. <https://doi.org/10.6028/jres.043.039>.
- (105) Nain, A. K. Ultrasonic and Viscometric Studies of Molecular Interactions in Binary Mixtures of Tetrahydrofuran with Some Aromatic Hydrocarbons at Temperatures from 288.15 to 318.15 K. *Phys. Chem. Liq.* **2007**, *45* (4), 371–388. <https://doi.org/10.1080/00319100701230405>.
- (106) Aralaguppi, M. I.; Aminabhavi, T. M.; Harogoppad, S. B.; Balundgi, R. H. Thermodynamic Interactions in Binary Mixtures of Dimethyl Sulfoxide with Benzene, Toluene, 1,3-Dimethylbenzene, 1,3,5-Trimethylbenzene, and Methoxybenzene from 298.15 to 308.15 K. *J. Chem. Eng. Data* **1992**, *37* (3), 298–303. <https://doi.org/10.1021/je00007a006>.
- (107) Serrano, L.; Silva, J. A.; Farelo, F. Densities and Viscosities of Binary and Ternary Liquid Systems Containing Xylenes. *J. Chem. Eng. Data* **1990**, *35* (3), 288–291. <https://doi.org/10.1021/je000061a018>.
- (108) Plucknett, W. K.; Dowd, R. T. Refraction and Polarization Properties of Binary Solutions of the Nitrotoluene Isomers with the Xylene Isomers, Chloroform and

- Cyclohexane. *J. Chem. Eng. Data* **1963**, *8* (2), 207–210. <https://doi.org/10.1021/je60017a021>.
- (109) Song, C.-Y.; Shen, H.-Z.; Zhao, J.-H.; Wang, L.-C.; Wang, F.-A. Densities and Viscosities of Binary Mixtures of Vitamin K₃ with Benzene, Toluene, Ethylbenzene, *o*-Xylene, *m*-Xylene, and *p*-Xylene from (303.15 to 333.15) K. *J. Chem. Eng. Data* **2008**, *53* (5), 1110–1115. <https://doi.org/10.1021/je7006549>.
- (110) George, J.; Sastry, N. V. Densities, Excess Molar Volumes, Viscosities, Speeds of Sound, Excess Isentropic Compressibilities, and Relative Permittivities for C_mH_{2m+1}(OCH₂CH₂)_N. *J. Chem. Eng. Data* **2003**, *48* (4), 977–989. <https://doi.org/10.1021/je034005y>.
- (111) Vittal Prasad, T. E.; Chandrika, K.; Haritha, M.; Geetha, N. B.; Prasad, D. H. L. Density and Viscosity of Ethanol + *o*-Xylene, Ethanol + *m*-Xylene, Ethanol + *p*-Xylene and Methanol + *o*-Xylene Mixtures. *Phys. Chem. Liq.* **2014**, *37* (4), 429–434. <https://doi.org/10.1080/00319109908031446>.
- (112) Wang, H.; Hu, L.; Wu, Y. Excess Volumes and Partial Molar Volumes of Binary Mixtures of 1,2-Propanediol Carbonate with Xylene in the Temperature Range of (293.15 to 353.15)K. *J. Chem. Thermodyn.* **2005**, *37* (10), 1119–1129. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2005.01.017>.
- (113) M.V. Rathnam, S. M. Viscosity, Density, and Refractive Index of Some (Ester + Hydrocarbon) Binary Mixtures at 303.15 K and 313.15 K. **2005**, 325–329. <https://doi.org/10.1021/JE0400052>.
- (114) P. Zoller, D. J. W. *Standard Pressure Volume Temperature Data for Polymers - David Walsh, Paul Zoller - Google Књиге*; 1995.
- (115) Changsheng Yang; Peisheng Ma, * and; Zhou, Q. Excess Molar Volumes and Viscosities of Binary Mixtures of Sulfolane with Benzene, Toluene, Ethylbenzene, *p*-Xylene, *o*-Xylene, and *m*-Xylene at 303.15 and 323.15 K and Atmospheric Pressure. *J. Chem. Eng. Data* **2004**, *49*, 881–885. <https://doi.org/10.1021/JE0341920>.
- (116) Lee, M.-J.; Tuan, Y.-C.; Lin, H. Pressure–Volume–Temperature Properties for Binary and Ternary Polymer Solutions of Poly(Ethylene Glycol), Poly(Propylene Glycol), and Poly(Ethylene Glycol Methyl Ether) with Anisole. *Polymer (Guildf)*. **2003**, *44* (14), 3891–3900. [https://doi.org/10.1016/S0032-3861\(03\)00320-3](https://doi.org/10.1016/S0032-3861(03)00320-3).
- (117) Zafarani-Moattar, M. T.; Salabat, A. Measurement and Correlation of Viscosities, Densities, and Water Activities for the System Poly(Propylene Glycol) + MgSO₄ + H₂O at 25°C. *J. Solution Chem.* **1998**, *27* (7), 663–673. <https://doi.org/10.1023/A:1022650025229>.
- (118) Eliassi, A.; Modarress, H. Excess Volume of Polymer/Solvent Mixtures and Proposed Model for Prediction of Activity of Solvents Based on Excess Volume Data. *J. Appl. Polym. Sci.* **2005**, *95* (5), 1219–1227. <https://doi.org/10.1002/app.21314>.

- (119) Ivanis, G. R.; Vuksanovic, J. M.; Calado, M. S.; Kijevcanin, M. L.; Serbanovic, S. P.; Visak, Z. P. Liquid–Liquid and Solid–Liquid Equilibria in the Solutions of Poly(Ethylene Glycol) with Several Organic Solvents. *Fluid Phase Equilib.* **2012**, *316*, 74–84. <https://doi.org/10.1016/J.FLUID.2011.12.013>.
- (120) Heather D. Willauer; Jonathan G. Huddleston, * and; Rogers*, R. D. Solvent Properties of Aqueous Biphasic Systems Composed of Polyethylene Glycol and Salt Characterized by the Free Energy of Transfer of a Methylene Group between the Phases and by a Linear Solvation Energy Relationship. **2002**. <https://doi.org/10.1021/IE0107800>.
- (121) Malcolm, G. N.; Rowlinson, J. S. The Thermodynamic Properties of Aqueous Solutions of Polyethylene Glycol, Polypropylene Glycol and Dioxane. *Trans. Faraday Soc.* **1957**, *53* (0), 921–931. <https://doi.org/10.1039/tf9575300921>.
- (122) Loveluck, G. D. Dipole Moment Studies on Polyethylene and Polypropylene Glycols of Low Molecular Weight. *J. Chem. Soc.* **1961**, *0* (0), 4729–4732. <https://doi.org/10.1039/jr9610004729>.
- (123) Kim, I.-W.; Jang, M. D.; Ryu, Y. K.; Cho, E. H.; Lee, Y. K.; Park, J. H. Dipolarity, Hydrogen-Bond Basicity and Hydrogen-Bond Acidity of Aqueous Poly(Ethylene Glycol) Solutions. *Anal. Sci.* **2002**, *18* (12), 1357–1360.
- (124) Jessop, P. G.; Jessop, D. A.; Fu, D.; Phan, L. Solvatochromic Parameters for Solvents of Interest in Green Chemistry. *Green Chem.* **2012**, *14* (5), 1245–1259. <https://doi.org/10.1039/c2gc16670d>.
- (125) Chun-yan Chen, †; Mark A. Even, ‡; Jie Wang, ‡ and; Zhan Chen*, †. Sum Frequency Generation Vibrational Spectroscopy Studies on Molecular Conformation of Liquid Polymers Poly(Ethylene Glycol) and Poly(Propylene Glycol) at Different Interfaces. **2002**, 9130–9135. <https://doi.org/10.1021/MA020614J>.
- (126) Visak, Z. P.; Calado, M. S.; Vuksanovic, J. M.; Ivanis, G. R.; Branco, A. S. H.; Grozdanic, N. D.; Kijevcanin, M. L.; Serbanovic, S. P. Solutions of Ionic Liquids with Diverse Aliphatic and Aromatic Solutes – Phase Behavior and Potentials for Applications: A Review Article. *Arab. J. Chem.* **2014**. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2014.10.003>.
- (127) Visak, Z. P. Some Aspects of Ionic Liquids as Diverse and Versatile Sustainable Solvents. *J. Solution Chem.* **2012**, *41* (10), 1673–1695. <https://doi.org/10.1007/s10953-012-9899-z>.
- (128) Huddleston, J. G.; Visser, A. E.; Reichert, W. M.; Willauer, H. D.; Broker, G. A.; Rogers, R. D. Characterization and Comparison of Hydrophilic and Hydrophobic Room Temperature Ionic Liquids Incorporating the Imidazolium Cation. *Green Chem.* **2001**, *3* (4), 156–164. <https://doi.org/10.1039/b103275p>.
- (129) Richard P. Swatloski; Scott K. Spear; John D. Holbrey, A.; Rogers*, R. D. Dissolution of Cellulose with Ionic Liquids. **2002**, 4974–4975. <https://doi.org/10.1021/JA025790M>.

- (130) Winterton, N. Solubilization of Polymers by Ionic Liquids. *J. Mater. Chem.* **2006**, *16* (44), 4281–4293. <https://doi.org/10.1039/b610143g>.
- (131) Wang, J.; Pei, Y.; Zhao, Y.; Hu, Z. Recovery of Amino Acids by Imidazolium Based Ionic Liquids from Aqueous Media. *Green Chem.* **2005**, *7* (4), 196–202. <https://doi.org/10.1039/b415842c>.
- (132) Tomé, L. I. N.; Catambas, V. R.; Teles, A. R. R.; Freire, M. G.; Marrucho, I. M.; Coutinho, J. A. P. Tryptophan Extraction Using Hydrophobic Ionic Liquids. *Sep. Purif. Technol.* **2010**, *72* (2), 167–173. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2010.02.002>.
- (133) Pei, Y.; Li, Z.; Liu, L.; Wang, J. Partitioning Behavior of Amino Acids in Aqueous Two-Phase Systems Formed by Imidazolium Ionic Liquid and Dipotassium Hydrogen Phosphate. *J. Chromatogr. A* **2012**, *1231*, 2–7. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2012.01.087>.
- (134) Carneiro, A. P.; Rodríguez, O.; Macedo, E. A. Solubility of Monosaccharides in Ionic Liquids – Experimental Data and Modeling. *Fluid Phase Equilib.* **2012**, *314*, 22–28. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2011.10.011>.
- (135) Yan, H.; Wu, J.; Dai, G.; Zhong, A.; Chen, H.; Yang, J.; Han, D. Interaction Mechanisms of Ionic Liquids [Cnmim]Br (N=4, 6, 8, 10) with Bovine Serum Albumin. *J. Lumin.* **2012**, *132* (3), 622–628. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2011.10.026>.
- (136) Ni, X.; Xing, H.; Yang, Q.; Wang, J.; Su, B.; Bao, Z.; Yang, Y.; Ren, Q. Selective Liquid–Liquid Extraction of Natural Phenolic Compounds Using Amino Acid Ionic Liquids: A Case of α -Tocopherol and Methyl Linoleate Separation. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2012**, *51* (18), 6480–6488. <https://doi.org/10.1021/ie201682h>.
- (137) Yan, H.; Gao, M.; Qiao, J. New Ionic Liquid Modified Polymeric Microspheres for Solid-Phase Extraction of Four Sudan Dyes in Foodstuff Samples. *J. Agric. Food Chem.* **2012**, *60* (27), 6907–6912. <https://doi.org/10.1021/jf301224t>.
- (138) Manic, M. S.; Najdanovic-Visak, V.; da Ponte, M. N.; Visak, Z. P. Extraction of Free Fatty Acids from Soybean Oil Using Ionic Liquids or Poly(Ethyleneglycol)S. *AIChE J.* **2011**, *57* (5), 1344–1355. <https://doi.org/10.1002/aic.12349>.
- (139) Jacob M. Crosthwaite; Sudhir N. V. K. Aki; Edward J. Maginn, A.; Brennecke*, J. F. Liquid Phase Behavior of Imidazolium-Based Ionic Liquids with Alcohols. *J. Phys. Chem. B* **2004**, *108*, 5113–5119. <https://doi.org/10.1021/JP037774X>.
- (140) Fernandes, A. M.; Rocha, M. A. A.; Freire, M. G.; Marrucho, I. M.; Coutinho, J. A. P.; Santos, L. M. N. B. F. Evaluation of Cation-Anion Interaction Strength in Ionic Liquids. *J. Phys. Chem. B* **2011**, *115* (14), 4033–4041. <https://doi.org/10.1021/jp201084x>.
- (141) Bini, R.; Bortolini, O.; Chiappe, C.; Pieraccini, D.; Siciliano, T. Development of

- Cation/Anion “Interaction” Scales for Ionic Liquids through ESI-MS Measurements. *J. Phys. Chem. B* **2007**, *111* (3), 598–604. <https://doi.org/10.1021/jp0663199>.
- (142) Timmermans, J. *The Physico-Chemical Constants of Binary Systems in Concentrated Solutions*; Interscience Publishers.: New York ;London, 1960.
- (143) Quik, M. Smoking, Nicotine and Parkinson’s Disease. *Trends Neurosci.* **2004**, *27* (9), 561–568. <https://doi.org/10.1016/j.tins.2004.06.008>.
- (144) Newhouse, P.; Potter, A.; Singh, A. Effects of Nicotinic Stimulation on Cognitive Performance. *Curr. Opin. Pharmacol.* **2004**, *4* (1), 36–46. <https://doi.org/10.1016/j.coph.2003.11.001>.
- (145) Ng, Y. P.; Or, T. C. T.; Ip, N. Y. Plant Alkaloids as Drug Leads for Alzheimer’s Disease. *Neurochem. Int.* **2015**, *89*, 260–270. <https://doi.org/10.1016/j.neuint.2015.07.018>.
- (146) Miguel A. García, †; Antonio de Lucas; Jose L. Valverde, A.; Rodríguez*, J. F. Liquid–Liquid Equilibria of Nicotine + Water + Toluene at Various Temperatures. **2000**, *45* (4), 540–543. <https://doi.org/10.1021/JE990257G>.
- (147) Grozdanic, N. D.; Najdanovic-Visak, V.; Kijevcanin, M. L.; Serbanovic, S. P.; Nunes da Ponte, M.; Visak, Z. P. Liquid–Liquid Phase Equilibria in Nicotine (Aqueous) Solutions. *Fluid Phase Equilib.* **2011**, *310* (1–2), 198–206. <https://doi.org/10.1016/J.FLUID.2011.08.022>.
- (148) Visak, Z. P.; Yague, S. L.; Lopes, J. N. C.; Rebelo, L. P. N. Nicotine: On the Potential Role of Ionic Liquids for Its Processing and Purification. *J. Phys. Chem. B* **2007**, *111* (28), 7934–7937. <https://doi.org/10.1021/jp073788h>.
- (149) Ochoa, M. L.; Harrington, P. B. Detection of Methamphetamine in the Presence of Nicotine Using in Situ Chemical Derivatization and Ion Mobility Spectrometry. *Anal. Chem.* **2004**, *76* (4), 985–991. <https://doi.org/10.1021/ac035123r>.
- (150) D.E.Elmore, D. A. D. A Computational Study of Nicotine Conformations in the Gas Phase and in Water. *J.Org.Chem.* **2000**, *65*, 742–747.
- (151) J.F. Whidby, W.B. EdwardsIII, T. P. P. Isomeric Nicotines. Their Solution Conformation and Proton, Deuterium, Carbon-13, and Nitrogen-15 Nuclear Magnetic Resonance,. *J. Org. Chem.* **1979**, *44* (794–798).
- (152) T.P. Pitner, W.B. EdwardsIII, R.L. Bassfield, J. F. W. The Solution Conformation of Nicotine. A 1H and 2H Nuclear Magnetic Resonance Investigation,. *J. Am. Chem. Soc.* **1978**, *100*, 246–251.
- (153) Kahl, T.; Schröder, K.-W.; Lawrence, F. R.; Marshall, W. J.; Höke, H.; Jäckh, R. Aniline. *Ullmann’s Encycl. Ind. Chem.* **2002**. https://doi.org/10.1002/14356007.A02_303.
- (154) Aniline: A Global Strategic Business Report; Global Industry Analysts; *INC. San*

Jose 2010.

- (155) Gowrisankar, M.; Venkateswarlu, P.; Siva, K.; Sivarambabu, S. Volumetric , Speed of Sound Data and Viscosity at (303 . 15 and 308 . 15) K for the Binary Mixtures of N , N-Dimethylaniline + Aliphatic Ketones. *J. Ind. Eng. Chem.* **2014**, *20* (2), 405–418. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2013.04.035>.
- (156) Liu, Y.; Zhou, H.; Cao, R.; Liu, X.; Zhang, P.; Zhan, J.; Liu, L. Facile and Green Synthetic Strategy of Birnessite-Type MnO₂ with High Efficiency for Airborne Benzene Removal at Low Temperatures. *Appl. Catal. B Environ.* **2019**, *245*, 569–582. <https://doi.org/10.1016/J.APCATB.2019.01.023>.
- (157) and, U. D.; Marciniak, A. Solubility of Ionic Liquid [Emim][PF₆] in Alcohols†. **2004**, *108*, 2376–2382. <https://doi.org/10.1021/JP030582H>.
- (158) Radović, I. *Doktorska Disertacija*; Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, 2008.
- (159) Spasojević, V. *Doktorska Disertacija*; Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, 2014.
- (160) Abraham, M. H.; Grellier, P. L.; Prior, D. V.; Duce, P. P.; Morris, J. J.; Taylor, P. J. Hydrogen Bonding. Part 7. A Scale of Solute Hydrogen-Bond Acidity Based on Log K Values for Complexation in Tetrachloromethane. *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* **1989**, *0* (6), 699–711. <https://doi.org/10.1039/p29890000699>.
- (161) Lj Kijevčanin, M.; Djordjević, B. D.; Radović, I. R.; Živković, E. M.; Ž Tasić, A.; Šerbanović, S. P. *Modeling of Volumetric Properties of Organic Mixtures Based on Molecular Interactions*; 2012.
- (162) Hofmann, K.; Schreiter, K.; Seifert, A.; Ruffer, T.; Lang, H.; Spange, S. Solvatochromism and Linear Solvation Energy Relationship of Diol- and Proline-Functionalized Azo Dyes Using the Kamlet–Taft and Catalán Solvent Parameter Sets. *New J. Chem.* **2008**, *32* (12), 2180–2188. <https://doi.org/10.1039/b809055f>.
- (163) Drmanić, S. Ž.; Nikolić, J. B.; Marinković, A. D.; Jovanović, B. Ž. A Comparative Study of the Linear Solvation Energy Relationship for the Reactivity of Pyridine Carboxylic Acids with Diazodiphenylmethane in Protic and Aprotic Solvents. *J. Serbian Chem. Soc.* **2012**, *77* (10), 1311–1338. <https://doi.org/10.2298/JSC120713078D>.
- (164) Jérôme Graton, †; Michel Berthelot, †; Jean-François Gal, §; Sandrine Girard, ‡, #; Christian Laurence, *, †; Jacques Lebreton, ‡; Jean-Yves Le Questel, †; Pierre-Charles Maria, § and; Nauš, P. Site of Protonation of Nicotine and Nornicotine in the Gas Phase: Pyridine or Pyrrolidine Nitrogen? **2002**. <https://doi.org/10.1021/JA017770A>.
- (165) Lomba, L.; Aznar, I.; Gascón, I.; Lafuente, C.; Giner, B. Thermophysical Study of the Furan Family. *Thermochim. Acta* **2015**, *617*, 54–64. <https://doi.org/10.1016/j.tca.2015.08.013>.

- (166) Fort, R. J.; Moore, W. R. Viscosities of Binary Liquid Mixtures. *Trans. Faraday Soc.* **1966**, *62* (0), 1112–1119. <https://doi.org/10.1039/tf9666201112>.
- (167) Reed, T. M.; Taylor, T. E. Viscosities of Liquid Mixtures. *J. Phys. Chem.* **1959**, *63* (1), 58–67. <https://doi.org/10.1021/j150571a016>.
- (168) Sharma, S.; Makavana, M. Density and Viscometric Study of Binary Liquid Mixtures of Morpholine with Some Aromatic Hydrocarbons at Temperatures 303.15, 308.15 and 313.15K. *Fluid Phase Equilib.* **2014**, *375*, 219–227. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2014.05.008>.
- (169) Abraham, M. H.; Grellier, P. L.; Prior, D. V.; Morris, J. J.; Taylor, P. J. Hydrogen Bonding. Part 10. Scale of Solute Hydrogen-Bond Basicity Using Log K Values for Complexation in Tetrachloromethane. *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* **1990**, No. 4, 521–529.
- (170) FISCHER, I. Dipole Moments of Some Ortho-Substituted Anilines. *Nature* **1950**, *165* (4189), 239–239. <https://doi.org/10.1038/165239a0>.
- (171) Blesic, M.; Lopes, J. N. C.; Pádua, A. A. H.; Shimizu, K.; Gomes, M. F. C.; Rebelo, L. P. N. Phase Equilibria in Ionic Liquid-Aromatic Compound Mixtures, Including Benzene Fluorination Effects. *J. Phys. Chem. B* **2009**, *113* (21), 7631–7636. <https://doi.org/10.1021/jp902178g>.
- (172) Calado, M. S.; Petrovski, Z.; Manic, M. S.; Najdanovic-Visak, V.; Macedo, E. A.; Visak, Z. P. Liquid–Liquid Equilibria of Imidazolium Ionic Liquids Having Bistriflamide or Triflate Anions with Aromatic Non-Polar and Polar Compounds. *Fluid Phase Equilib.* **2013**, *337*, 67–72. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2012.10.007>.
- (173) Ferreira, A. R.; Freire, M. G.; Ribeiro, J. C.; Lopes, F. M.; Crespo, J. G.; Coutinho, J. A. P. An Overview of the Liquid–Liquid Equilibria of (Ionic Liquid + Hydrocarbon) Binary Systems and Their Modeling by the Conductor-like Screening Model for Real Solvents. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2011**, *50* (9), 5279–5294. <https://doi.org/10.1021/ie102471b>.
- (174) Schwenzer, B.; Kerisit, S. N.; Vijayakumar, M. Anion Pairs in Room Temperature Ionic Liquids Predicted by Molecular Dynamics Simulation, Verified by Spectroscopic Characterization. *RSC Adv.* **2014**, *4* (11), 5457–5464. <https://doi.org/10.1039/c3ra46069j>.
- (175) Yokozeki, A.; Kasprzak, D. J.; Shiflett, M. B. Thermal Effect on C-H Stretching Vibrations of the Imidazolium Ring in Ionic Liquids. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2007**, *9* (36), 5018–5026. <https://doi.org/10.1039/b706497g>.
- (176) R. Meyer, M.; Meyer, J.; Metzger, A.; Peneloux, J. ÉTUDE THERMODYNAMIQUE DES MÉLANGES BINARIES. Étude Comparative Entre. *Chim. Phys.* **1971**, *62*, 406–412.
- (177) Chowdhury, M. A.; Majid, M. A.; Saleh, M. A. Volumetric and Viscometric Behaviour of Binary Systems: (1-Hexanol + Hydrocarbons). *J. Chem.*

- Thermodyn.* **2001**, 33 (3), 347–360. <https://doi.org/10.1006/jcht.2000.0751>.
- (178) C.L.Yaws. *Chemical Properties Handbook*, McGraw-Hil.; Beijing, 1999.
- (179) Gupta, V.; Maken, S.; Kalra, K. C.; Singh, K. C. *Dielectric Constants and Refractive Indices of I-Propanol or 2-Propanol + Cyclohexane, Benzene, Toluene, 0-, m-and p-Xylene at 308.15 K*; 1996; Vol. 35.
- (180) W.H.Brown, C.S.Foote, B. L. I. *Organic Chemistry, 5th Edition*, CENGAGE Le.; 2009.
- (181) Tasaki, K. Conformation and Dynamics of Poly(Oxyethylene) in Benzene Solution: Solvent Effect from Molecular Dynamics Simulation. *Macromolecules* **1996**, 29 (27), 8922–8933. <https://doi.org/10.1021/ma9602785>.
- (182) Meyer, R.; Meyer, M.; Metzger, J.; Peneloux, A. Étude Thermodynamique Des Mélanges Binaires. *J. Chim. Phys.* **1971**, 68, 406–412. <https://doi.org/10.1051/jcp/1971680406>.
- (183) Bajić, D. M.; Ivaniš, G. R.; Visak, Z. P.; Živković, E. M.; Šerbanović, S. P.; Kijevčanin, M. L. Densities, Viscosities, and Refractive Indices of the Binary Systems (PEG200 + 1,2-Propanediol, +1,3-Propanediol) and (PEG400 + 1,2-Propanediol, +1,3-Propanediol) at (288.15 to 333.15) K and Atmospheric Pressure: Measurements and Modeling. *J. Chem. Thermodyn.* **2013**, 57, 510–529. <https://doi.org/10.1016/J.JCT.2012.07.024>.
- (184) Vuksanović, J. M.; Živković, E. M.; Radović, I. R.; Djordjević, B. D.; Šerbanović, S. P.; Kijevčanin, M. L. Experimental Study and Modelling of Volumetric Properties, Viscosities and Refractive Indices of Binary Liquid Mixtures Benzene + PEG 200/PEG 400 and Toluene + PEG 200/PEG 400. *Fluid Phase Equilib.* **2013**, 345, 28–44. <https://doi.org/10.1016/J.FLUID.2013.02.010>.
- (185) Bajić, D. M.; Živković, E. M.; Jovanović, J.; Šerbanović, S. P.; Kijevčanin, M. L. Experimental Measurements and Modelling of Volumetric Properties, Refractive Index and Viscosity of Binary Systems of Ethyl Lactate with Methyl Ethyl Ketone, Toluene and n-Methyl-2-Pirrolidone at 288.15–323.15K and Atmospheric Pressure. New UNIFAC–VISCO A. *Fluid Phase Equilib.* **2015**, 399, 50–65. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2015.04.017>.

Tabela P1 Gustina ρ , dopunska molarna zapremina V^E , indeks refrakcije n_D , promena indeksa refrakcije Δn_D , viskoznost η i promena viskoznosti $\Delta\eta$ za četiri binarne smeše nikotin (1) + 1-butanol (2), nikotin (1) + 2-butanol (2), nikotin (1) + 1,2-propandiol (2), nikotin (1) + 1,3-propandiol (2), na temperaturama $T = (293.15 - 323.15)$ K i na atmosferskom pritisku P^2

x_1	$10^3 \cdot \rho / \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	$10^6 \cdot V^E / \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	n_D	Δn_D	$\eta / \text{mPa} \cdot \text{s}$	$\Delta \eta / \text{mPa} \cdot \text{s}$
Nikotin (1) + 1-butanol (2)						
293.15 K						
0.0000	0.809819		1.39922		2.9144	
0.1000	0.845043	-0.2947	1.42126	0.0093	3.0486	-0.0438
0.1960	0.874098	-0.5095	1.44053	0.0154	3.2088	-0.0545
0.3000	0.901216	-0.6698	1.45673	0.0193	3.4078	-0.0406
0.3931	0.922268	-0.7516	1.46978	0.0206	3.6007	-0.0136
0.5000	0.943285	-0.7764	1.48302	0.0201	3.8292	0.0249
0.5930	0.960358	-0.7401	1.49254	0.0181	4.0271	0.0568
0.7000	0.975308	-0.6345	1.50289	0.0145	4.2424	0.0822
0.7931	0.987593	-0.4893	1.51169	0.0104	4.4124	0.0864
0.9000	1.000011	-0.2643	1.51909	0.0052	4.5776	0.0611
1.0000	1.010232		1.52665		4.6943	
298.15 K						
0.0000	0.805995		1.39719		2.5637	
0.1000	0.841123	-0.2930	1.41913	0.0092	2.6923	-0.0198
0.1960	0.870112	-0.5071	1.43825	0.0153	2.8330	-0.0216
0.3000	0.897182	-0.6670	1.45448	0.0191	2.9991	-0.0098
0.3931	0.918206	-0.7489	1.46759	0.0205	3.1551	0.0082
0.5000	0.939205	-0.7741	1.48076	0.0200	3.3374	0.0318
0.5930	0.956271	-0.7384	1.49031	0.0180	3.4937	0.0501
0.7000	0.971222	-0.6335	1.50065	0.0144	3.6656	0.0631
0.7931	0.983509	-0.4889	1.50945	0.0104	3.8032	0.0626
0.9000	0.995934	-0.2643	1.51685	0.0052	3.9420	0.0427
1.0000	1.006162		1.52439		4.0477	
303.15 K						
0.0000	0.802148		1.39517		2.2582	
0.1000	0.837185	-0.2915	1.41697	0.0091	2.3741	-0.0100
0.1960	0.866114	-0.5047	1.43598	0.0151	2.4982	-0.0069
0.3000	0.89314	-0.6644	1.45225	0.0190	2.6423	0.0063
0.3931	0.914139	-0.7464	1.46538	0.0204	2.7762	0.0228
0.5000	0.935124	-0.7720	1.47856	0.0199	2.9307	0.0428
0.5930	0.952186	-0.7368	1.48808	0.0180	3.0623	0.0571
0.7000	0.967138	-0.6326	1.49847	0.0144	3.2054	0.0656
0.7931	0.979432	-0.4885	1.50721	0.0104	3.3191	0.0620
0.9000	0.991866	-0.2643	1.51463	0.0052	3.4326	0.0408
1.0000	1.002103		1.52214		3.5177	
308.15 K						
0.0000	0.798276		1.39311		1.9938	
0.1000	0.833229	-0.2903	1.41481	0.0090	2.1053	0.0020
0.1960	0.862102	-0.5028	1.43367	0.0150	2.2186	0.0103
0.3000	0.889089	-0.6621	1.45000	0.0189	2.3457	0.0236
0.3931	0.910068	-0.7442	1.46318	0.0203	2.4609	0.0368
0.5000	0.931041	-0.7703	1.47630	0.0198	2.5917	0.0506
0.5930	0.948102	-0.2903	1.48583	0.0090	2.7019	0.0020
0.7000	0.963059	-0.5028	1.49623	0.0150	2.8214	0.0103

0.7931	0.975360	-0.6621	1.504495	0.0189	2.9168	0.0236
0.9000	0.987806	-0.7442	1.51238	0.0203	3.0133	0.0368
1.0000	0.998055		1.51988		3.0883	
313.15 K						
0.0000	0.794372		1.39102		1.7774	
0.1000	0.829249	-0.2893	1.41270	0.0090	1.8852	0.0097
0.1960	0.858073	-0.5014	1.43148	0.0149	1.9898	0.0201
0.3000	0.885026	-0.6606	1.44779	0.0187	2.1032	0.0315
0.3931	0.905989	-0.7429	1.46096	0.0201	2.2034	0.0406
0.5000	0.926955	-0.7693	1.47404	0.0196	2.3161	0.0483
0.5930	0.944017	-0.7349	1.48355	0.0177	2.4102	0.0515
0.7000	0.958981	-0.6317	1.49404	0.0142	2.5138	0.0497
0.7931	0.971292	-0.4884	1.50280	0.0103	2.5977	0.0423
0.9000	0.983751	-0.2645	1.51035	0.0051	2.6856	0.0257
1.0000	0.994014		1.51790		2.7583	
318.15 K						
0.0000	0.790429		1.38896		1.5887	
0.1000	0.825240	-0.2888	1.41058	0.0089	1.6835	0.0125
0.1960	0.854022	-0.5007	1.42931	0.0148	1.7772	0.0272
0.3000	0.880948	-0.6599	1.44562	0.0186	1.8796	0.0441
0.3931	0.901899	-0.7422	1.45876	0.0199	1.9700	0.0580
0.5000	0.922862	-0.7688	1.47184	0.0194	2.0703	0.0703
0.5930	0.939982	-0.7346	1.48131	0.0175	2.1523	0.0758
0.7000	0.954903	-0.6316	1.49183	0.0140	2.2385	0.0740
0.7931	0.967226	-0.4884	1.50058	0.0101	2.3044	0.0125
0.9000	0.979704	-0.2647	1.50823	0.0050	2.3672	0.0272
1.0000	0.989984		1.51592		2.4114	
323.15 K						
0.0000	0.786444		1.38688		1.3723	
0.1000	0.821198	-0.2887	1.40842	0.0089	1.4953	0.0407
0.1960	0.849946	-0.5005	1.42705	0.0147	1.6027	0.0691
0.3000	0.876851	-0.6597	1.44337	0.0184	1.7080	0.0888
0.3931	0.897795	-0.7421	1.45655	0.0198	1.7935	0.0976
0.5000	0.918759	-0.7688	1.46958	0.0193	1.8822	0.0984
0.5930	0.935834	-0.7347	1.47906	0.0174	1.9521	0.0917
0.7000	0.950822	-0.6318	1.48961	0.0139	2.0249	0.0765
0.7931	0.963162	-0.4886	1.49837	0.0101	2.0826	0.0575
0.9000	0.975660	-0.2648	1.50604	0.0050	2.1432	0.0301
1.0000	0.985962		1.51373		2.1954	
Nikotin (1) + 2-butanol (2)						
293.15 K						
0.0000	0.807190		1.39715		3.7604	
0.1000	0.841874	-0.1933	1.41889	0.0088	3.4956	-0.3584
0.2036	0.873003	-0.3736	1.43839	0.0149	3.4603	-0.4902
0.3000	0.898284	-0.5145	1.45420	0.0182	3.5930	-0.4474
0.4000	0.921306	-0.6244	1.46843	0.0195	3.8447	-0.2892
0.5000	0.941501	-0.6883	1.48084	0.0190	4.1572	-0.0698
0.6000	0.959218	-0.6971	1.49173	0.0169	4.4757	0.1552
0.6956	0.974099	-0.6458	1.50103	0.0138	4.7343	0.3244
0.8000	0.988293	-0.5135	1.51029	0.0095	4.9074	0.3997
0.9000	1.000071	-0.3029	1.51858	0.0049	4.9093	0.3082
1.0000	1.010232		1.52665		4.6944	
298.15 K						
0.0000	0.803049		1.39497		3.0933	
0.1000	0.837728	-0.1970	1.41668	0.0087	2.9599	-0.2292
0.2036	0.868857	-0.3797	1.43618	0.0149	2.9808	-0.3067
0.3000	0.894137	-0.5216	1.45199	0.0182	3.1102	-0.2693

0.4000	0.917159	-0.6314	1.46621	0.0195	3.3187	-0.1561
0.5000	0.937354	-0.6945	1.47864	0.0189	3.5655	-0.0046
0.6000	0.955075	-0.7020	1.48952	0.0169	3.8130	0.1473
0.6956	0.969963	-0.6492	1.49880	0.0138	4.0152	0.2580
0.8000	0.984171	-0.5151	1.50803	0.0095	4.1578	0.3007
0.9000	0.995971	-0.3030	1.51632	0.0049	4.1788	0.2265
1.0000	1.006162		1.52439		4.0477	
303.15 K						
0.0000	0.798829		1.39274		2.5664	
0.1000	0.833532	-0.2027	1.41438	0.0087	2.5207	-0.1409
0.2036	0.864676	-0.3887	1.43393	0.0148	2.5785	-0.1816
0.3000	0.889965	-0.5317	1.44972	0.0182	2.7035	-0.1482
0.4000	0.912993	-0.6411	1.46397	0.0195	2.8807	-0.0663
0.5000	0.933194	-0.7028	1.47644	0.0190	3.0804	0.0384
0.6000	0.950921	-0.7081	1.48735	0.0169	3.2771	0.1400
0.6956	0.965820	-0.6530	1.49664	0.0139	3.4386	0.2105
0.8000	0.980047	-0.5168	1.50585	0.0096	3.5583	0.2308
0.9000	0.991873	-0.3032	1.51410	0.0049	3.5911	0.1685
1.0000	1.002103		1.52214		3.5177	
308.15 K						
0.0000	0.794525		1.39045		2.1494	
0.1000	0.829273	-0.2098	1.41211	0.0087	2.1621	-0.0812
0.2036	0.860452	-0.3999	1.43166	0.0149	2.2443	-0.0963
0.3000	0.885762	-0.5444	1.44747	0.0182	2.3666	-0.0645
0.4000	0.908808	-0.6536	1.46172	0.0195	2.5228	-0.0022
0.5000	0.929021	-0.7135	1.47420	0.0087	2.6910	-0.0812
0.6000	0.946761	-0.7164	1.48511	0.0149	2.8534	-0.0963
0.6956	0.961675	-0.6585	1.49439	0.0182	2.9869	-0.0645
0.8000	0.975925	-0.5194	1.50359	0.0195	3.0896	-0.0022
0.9000	0.987783	-0.3040	1.51184	0.0190	3.1276	0.0721
1.0000	0.998055		1.51988		3.0883	
313.15 K						
0.0000	0.790127		1.38803		1.8160	
0.1000	0.824949	-0.2191	1.40979	0.0088	1.8750	-0.0352
0.2036	0.856182	-0.4146	1.42936	0.0149	1.9754	-0.0325
0.3000	0.881530	-0.5611	1.44519	0.0182	2.0938	-0.0049
0.4000	0.904598	-0.6697	1.45945	0.0195	2.2316	0.0385
0.5000	0.924831	-0.7274	1.47192	0.0189	2.3732	0.0860
0.6000	0.942588	-0.7268	1.48284	0.0169	2.5079	0.1266
0.6956	0.957521	-0.6653	1.49217	0.0138	2.6201	0.1488
0.8000	0.971798	-0.5226	1.50145	0.0095	2.7127	0.1429
0.9000	0.983692	-0.3047	1.50978	0.0049	2.7608	0.0965
1.0000	0.994014		1.51790		2.7583	
318.15 K						
0.0000	0.785636	-	1.38571		1.5484	
0.1000	0.820559	-0.2302	1.40753	0.0088	1.6270	-0.0077
0.2036	0.851865	-0.4321	1.42710	0.0149	1.7338	0.0098
0.3000	0.877259	-0.5805	1.44297	0.0182	1.8484	0.0411
0.4000	0.900359	-0.6881	1.45725	0.0195	1.9742	0.0807
0.5000	0.920616	-0.7426	1.46971	0.0189	2.0991	0.1193
0.6000	0.938394	-0.7377	1.48065	0.0168	2.2144	0.1482
0.6956	0.953350	-0.6719	1.49001	0.0137	2.3079	0.1592
0.8000	0.967662	-0.5252	1.49933	0.0095	2.3826	0.1438
0.9000	0.979601	-0.3051	1.50772	0.0048	2.4187	0.0936
1.0000	0.989984		1.51592		2.4114	
323.15 K						
0.0000	0.781043		1.38322		1.3319	

0.1000	0.816090	-0.2430	1.40509	0.0088	1.4342	0.0161
0.2036	0.847491	-0.4521	1.42476	0.0150	1.5502	0.0424
0.3000	0.872943	-0.6027	1.44065	0.0183	1.6620	0.0712
0.4000	0.896089	-0.7092	1.45496	0.0195	1.7781	0.1007
0.5000	0.916374	-0.7600	1.46747	0.0190	1.8884	0.1250
0.6000	0.934178	-0.7500	1.47843	0.0169	1.9891	0.1393
0.6956	0.949160	-0.6789	1.48779	0.0138	2.0715	0.1392
0.8000	0.963511	-0.5272	1.49711	0.0095	2.1412	0.1186
0.9000	0.975504	-0.3042	1.50550	0.0048	2.1829	0.0739
1.0000	0.985962		1.51373		2.1594	
Nikotin (1) + 1,2-propandiol (2)						
293.15 K						
0.0000	1.036296		1.43279		59.564	
0.1000	1.035043	-0.3056	1.45151	0.0093	59.354	5.2718
0.2009	1.033097	-0.5226	1.46746	0.0156	53.524	4.9818
0.3000	1.030493	-0.6574	1.48003	0.0191	44.848	1.7509
0.4016	1.027642	-0.7226	1.49070	0.0203	35.018	-2.5102
0.5000	1.024734	-0.7221	1.49923	0.0195	26.039	-6.0774
0.6005	1.021544	-0.6644	1.50631	0.0172	18.440	-8.1745
0.7000	1.018730	-0.5573	1.51219	0.0137	12.887	-8.2670
0.7983	1.015983	-0.4098	1.51744	0.0095	9.2690	-6.4920
0.9000	1.012956	-0.2207	1.52199	0.0047	6.8754	-3.3145
1.0000	1.010232		1.52665		4.6943	
298.15 K						
0.0000	1.032620		1.43111		44.143	
0.1000	1.031100	-0.2968	1.44969	0.0093	43.285	3.1431
0.2009	1.029060	-0.5073	1.46560	0.0155	38.882	2.7850
0.3000	1.026320	-0.6379	1.47804	0.0190	32.722	0.6008
0.4016	1.023440	-0.7007	1.48864	0.0201	25.845	-2.1958
0.5000	1.020540	-0.7000	1.49711	0.0194	19.595	-4.5007
0.6005	1.017360	-0.6437	1.50413	0.0170	14.246	-5.8199
0.7000	1.014590	-0.5397	1.50997	0.0136	10.265	-5.8104
0.7983	1.011830	-0.3966	1.51520	0.0094	7.5758	-4.5592
0.9000	1.008870	-0.2136	1.51971	0.0047	5.7065	-2.3523
1.0000	1.006162		1.52439		4.0477	
303.15 K						
0.0000	1.028910		1.42941		33.248	
0.1000	1.027180	-0.2879	1.44800	0.0093	32.209	1.9290
0.2009	1.025000	-0.4917	1.46377	0.0155	28.847	1.5664
0.3000	1.022190	-0.6180	1.47612	0.0189	24.365	0.0331
0.4016	1.019270	-0.6785	1.48662	0.0200	19.443	-1.8653
0.5000	1.016350	-0.6774	1.49496	0.0193	14.987	-3.3943
0.6005	1.013170	-0.6225	1.50195	0.0169	11.165	-4.2299
0.7000	1.010420	-0.5216	1.50774	0.0134	8.2838	-4.1519
0.7983	1.007680	-0.3831	1.51296	0.0093	6.2856	-3.2287
0.9000	1.004770	-0.2062	1.51749	0.0046	4.8342	-1.6582
1.0000	1.002100		1.52214		3.5177	
308.15 K						
0.0000	1.025160		1.42773		25.503	
0.1000	1.023280	-0.2786	1.44622	0.0092	24.456	1.1899
0.2009	1.020910	-0.4754	1.46193	0.0154	21.870	0.8660
0.3000	1.018080	-0.5970	1.47424	0.0188	18.562	-0.2184
0.4016	1.015090	-0.6550	1.48462	0.0200	14.976	-1.5252
0.5000	1.012140	-0.6534	1.49301	0.0192	11.733	-2.5604
0.6005	1.008980	-0.5999	1.49987	0.0168	8.9348	-3.1081
0.7000	1.006130	-0.5021	1.50568	0.0134	6.7911	-3.0208
0.7983	1.003540	-0.3682	1.51076	0.0092	5.2638	-2.3455
0.9000	1.000640	-0.1976	1.51530	0.0046	4.1199	-1.2122

1.0000	0.998055		1.51988		3.0883	
313.15 K						
0.0000	1.021390		1.42601		19.781	
0.1000	1.019300	-0.2679	1.44441	0.0092	18.792	0.7104
0.2009	1.016800	-0.4575	1.46029	0.0154	16.791	0.4283
0.3000	1.013890	-0.5744	1.47230	0.0187	14.329	-0.3449
0.4016	1.010880	-0.6298	1.48255	0.0198	11.691	-1.2535
0.5000	1.007920	-0.6279	1.49092	0.0190	9.3022	-1.9653
0.6005	1.004790	-0.5760	1.49774	0.0166	7.2236	-2.3351
0.7000	1.002030	-0.4817	1.50345	0.0131	5.6053	-2.2601
0.7983	0.999390	-0.3530	1.50870	0.0090	4.4249	-1.7667
0.9000	0.996550	-0.1893	1.51312	0.0044	3.5321	-0.9311
1.0000	0.994010		1.51790		2.7583	
318.15 K						
0.0000	1.017570		1.42429		15.759	
0.1000	1.015290	-0.2574	1.44265	0.0092	14.912	0.4874
0.2009	1.012660	-0.4380	1.45843	0.0153	13.341	0.2640
0.3000	1.009700	-0.5510	1.47031	0.0185	11.449	-0.3046
0.4016	1.006650	-0.6037	1.48043	0.0195	9.4383	-0.9603
0.5000	1.003690	-0.6013	1.48871	0.0186	7.6203	-1.4639
0.6005	1.000580	-0.5511	1.49555	0.0162	6.0308	-1.7129
0.7000	0.997850	-0.4604	1.50118	0.0128	4.7795	-1.6380
0.7983	0.995250	-0.3363	1.50651	0.0087	3.8391	-1.2645
0.9000	0.992460	-0.1806	1.51100	0.0042	3.0936	-0.6554
1.0000	0.989980		1.51592		2.4114	
323.15 K						
0.0000	1.013720		1.42257		12.747	
0.1000	1.011250	-0.2469	1.44081	0.0091	12.030	0.3380
0.2009	1.008510	-0.4207	1.45653	0.0152	10.782	0.1556
0.3000	1.005480	-0.5273	1.46833	0.0184	9.3057	-0.2752
0.4016	1.002410	-0.5770	1.47837	0.0194	7.7462	-0.7632
0.5000	0.999450	-0.5740	1.48665	0.0185	6.3390	-1.1320
0.6005	0.996370	-0.5254	1.49341	0.0161	5.1039	-1.3068
0.7000	0.993670	-0.4383	1.49904	0.0127	4.1241	-1.2385
0.7983	0.991100	-0.3204	1.50435	0.0086	3.3747	-0.9489
0.9000	0.988380	-0.1716	1.50881	0.0042	2.7650	-0.4877
1.0000	0.985960		1.51373		2.1954	
Nikotin (1) + 1,3-propandiol (2)						
293.15 K						
0.0000	1.053030		1.43918		52.307	
0.1000	1.049361	-0.3717	1.45763	0.0097	63.859	16.307
0.1999	1.045432	-0.6605	1.47282	0.0161	63.550	20.760
0.3000	1.041303	-0.8672	1.48522	0.0198	55.974	17.957
0.3994	1.037045	-0.9905	1.49551	0.0210	44.968	11.678
0.5000	1.032672	-1.0323	1.50314	0.0203	33.152	4.6643
0.6004	1.028248	-0.9905	1.50913	0.0178	22.752	-0.9682
0.7000	1.023757	-0.8668	1.51461	0.0142	14.909	-4.0675
0.8000	1.019327	-0.6602	1.51947	0.0098	9.8052	-4.4115
0.9000	1.014739	-0.3709	1.52280	0.0049	6.8940	-2.5711
1.0000	1.010232		1.52665		4.6943	
298.15 K						
0.0000	1.049903		1.43783		41.546	
0.1000	1.045959	-0.3678	1.45610	0.0096	48.970	11.171
0.1999	1.041826	-0.6536	1.47118	0.0161	48.129	14.076
0.3000	1.037545	-0.8582	1.48350	0.0197	42.256	11.958
0.3994	1.033174	-0.9802	1.49364	0.0209	34.045	7.4758
0.5000	1.028722	-1.0215	1.50131	0.0202	25.351	2.5551

0.6004	1.024243	-0.9802	1.50702	0.0178	17.707	-1.3251
0.7000	1.019713	-0.8578	1.51264	0.0142	11.927	-3.3701
0.8000	1.015262	-0.6533	1.51729	0.0098	8.1055	-3.4419
0.9000	1.010666	-0.3670	1.52064	0.0049	5.8317	-1.9676
1.0000	1.006162		1.52439		4.0477	
303.15 K						
0.0000	1.046773		1.43648		33.221	
0.1000	1.042554	-0.3635	1.45463	0.0096	37.969	7.7181
0.1999	1.038215	-0.6460	1.46959	0.0160	36.901	9.6176
0.3000	1.033780	-0.8482	1.48179	0.0196	32.314	8.0036
0.3994	1.029295	-0.9689	1.49178	0.0209	26.123	4.7656
0.5000	1.024769	-1.0098	1.49939	0.0201	19.637	1.2683
0.6004	1.020238	-0.9690	1.50520	0.0177	13.946	-1.4411
0.7000	1.015677	-0.8482	1.51056	0.0141	9.6241	-2.8059
0.8000	1.011203	-0.6462	1.51508	0.0097	6.7220	-2.7363
0.9000	1.006607	-0.3635	1.51845	0.0049	4.9427	-1.5473
1.0000	1.002103		1.52214		3.5177	
308.15 K						
0.0000	1.043635		1.43515		26.867	
0.1000	1.039137	-0.3587	1.45312	0.0095	29.839	5.3502
0.1999	1.034593	-0.6375	1.46793	0.0159	28.714	6.6014
0.3000	1.030008	-0.8371	1.48000	0.0194	25.116	5.3841
0.3994	1.025410	-0.9562	1.48991	0.0206	20.407	3.0372
0.5000	1.020811	-0.9965	1.49739	0.0199	15.504	0.5283
0.6004	1.016232	-0.9563	1.50305	0.0175	11.194	-1.3965
0.7000	1.011637	-0.8371	1.50843	0.0140	7.8851	-2.3375
0.8000	1.007147	-0.6378	1.51294	0.0096	5.6209	-2.2236
0.9000	1.002550	-0.3587	1.51623	0.0048	4.1998	-1.2687
1.0000	0.998055		1.51988		3.0883	
313.15 K						
0.0000	1.040490		1.43382		21.846	
0.1000	1.035712	-0.3536	1.45171	0.0094	23.687	3.7505
0.1999	1.030963	-0.6284	1.46637	0.0156	22.595	4.5655
0.3000	1.026228	-0.8251	1.47831	0.0192	19.740	3.6215
0.3994	1.021521	-0.9425	1.48799	0.0204	16.108	1.8855
0.5000	1.016849	-0.9823	1.49571	0.0196	12.357	0.0561
0.6004	1.012221	-0.9427	1.50113	0.0172	9.0597	-1.3262
0.7000	1.007597	-0.8251	1.50703	0.0137	6.5134	-1.9719
0.8000	1.003094	-0.6286	1.51089	0.0095	4.7488	-1.8272
0.9000	0.998498	-0.3536	1.51476	0.0048	3.6247	-1.0438
1.0000	0.994014		1.51790		2.7583	
318.15 K						
0.0000	1.037329		1.43240		18.125	
0.1000	1.032271	-0.3479	1.45006	0.0093	19.277	2.7232
0.1999	1.027317	-0.6183	1.46458	0.0155	18.260	3.2760
0.3000	1.022434	-0.8119	1.47640	0.0189	15.948	2.5380
0.3994	1.017622	-0.9274	1.48604	0.0201	13.080	1.2309
0.5000	1.012878	-0.9665	1.49341	0.0193	10.142	-0.1258
0.6004	1.008206	-0.9275	1.49907	0.0169	7.5589	-1.1319
0.7000	1.003556	-0.8119	1.50429	0.0134	5.5492	-1.5768
0.8000	0.999040	-0.6186	1.50872	0.0092	4.1275	-1.4268
0.9000	0.994453	-0.3479	1.51216	0.0046	3.1801	-0.8038
1.0000	0.989984		1.51592		2.4114	
323.15 K						
0.0000	1.034157		1.43101		15.211	
0.1000	1.028815	-0.3417	1.44849	0.0092	15.872	1.9628
0.1999	1.023658	-0.6073	1.46287	0.0153	14.935	2.3260

0.3000	1.018628	-0.7973	1.47460	0.0188	13.049	1.7431
0.3994	1.013715	-0.9107	1.48415	0.0199	10.763	0.750
0.5000	1.008898	-0.9490	1.49147	0.0191	8.4372	-0.2654
0.6004	1.004185	-0.9106	1.49703	0.0167	6.3889	-1.0072
0.7000	0.999506	-0.7969	1.50221	0.0133	4.7824	-1.3181
0.8000	0.994989	-0.6069	1.50660	0.0091	3.6254	-1.1725
0.9000	0.990406	-0.3409	1.50996	0.0045	2.8368	-0.6606
1.0000	0.985962		1.51373		2.1954	

Tabela P2 Parametri A_p i odgovarajuća srednja kvadratna odstupanja Redlich-Kisterovog polinoma σ za binarne smeše nikotin (1) + 1-butanol (2), nikotin (1) + 2-butanol (2), nikotin (1) + 1,2-propandiol (2), nikotin (1) + 1,3-propandiol (2), na temperaturama $T = (293.15 - 323.15)$ K i na atmosferskom pritisku

<i>Veličina</i>	<i>T/K</i>	A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	$10^2 \cdot \sigma$
Nikotin (1) + 1-butanol (2)							
$10^6 \cdot V^E / \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	293.15	-3.1060	0.2149	0.0091	-	-	0.0004
	298.15	-3.0971	0.2033	0.0085	-	-	0.0004
	303.15	-3.0887	0.1929	0.0088	-	-	0.0004
	308.15	-3.0816	0.1836	0.0078	-	-	0.0004
	313.15	-3.0778	0.1752	0.0081	-	-	0.0003
	318.15	-3.0759	0.1709	0.0078	-	-	0.0003
	323.15	-3.0758	0.1695	0.0082	-	-	0.0004
Δn_D	293.15	0.0803	-0.0286	0.0002	-	-	0.00002
	298.15	0.0799	-0.0281	0.0001	-	-	0.00002
	303.15	0.0796	-0.0272	-0.0004	-	-	0.00002
	308.15	0.0792	-0.0267	-0.0005	-	-	0.00002
	313.15	0.0783	-0.0268	0.0003	-	-	0.00002
	318.15	0.0776	-0.0272	-0.0003	-	-	0.00001
	323.15	0.0771	-0.0268	-0.0002	-	-	0.00003
$\Delta \eta / \text{mPa} \cdot \text{s}$	293.15	0.0996	0.7327	-0.0050	-0.0103	-	0.00010
	298.15	0.1270	0.4342	0.0001	-0.0006	-	0.00001
	303.15	0.1709	0.3532	0.0001	-0.0006	-	0.00001
	308.15	0.2024	0.2257	0.0001	-0.0003	-	0.00001
	313.15	0.1928	0.1073	0.0044	0.0064	-	0.00006
	318.15	0.2809	0.1782	0.0002	-0.0005	-	0.00001
	323.15	0.3934	-0.0732	0.0005	-0.0010	-	0.00002
$\Delta G^{*E} / \text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$	293.15	658.1	366.7	-100.3	-	-	1.3
	303.15	723.9	187.6	-50.4	-	-	1.3
	313.15	807.4	-13.3	5.9	-	-	1.4
	323.15	1217.2	-344.6	92.0	-	-	1.1
Nikotin (1) + 2-butanol (2)							
$10^6 \cdot V^E / \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	293.15	-2.7531	-0.7591	-0.0039	-	-	0.0001
	298.15	-2.7781	-0.7358	0.0006	-	-	0.0000
	303.15	-2.8111	-0.6980	0.0007	-	-	0.0000
	308.15	-2.8542	-0.6539	0.0008	-	-	0.0000
	313.15	-2.9095	-0.5945	-0.0001	-	-	0.0000
	318.15	-2.9704	-0.5179	-0.0046	-	-	0.0001
	323.15	-3.0401	-0.4249	0.0003	-	-	0.0000
Δn_D	293.15	0.0758	-0.0272	0.0004	-	-	0.00003
	298.15	0.0758	-0.0271	-0.0002	-	-	0.00003
	303.15	0.0760	-0.0264	-0.0007	-	-	0.00003
	308.15	0.0762	-0.0265	-0.0008	-	-	0.00003
	313.15	0.0758	-0.0272	-0.00002	-	-	0.00002
	318.15	0.0756	-0.0276	0.0002	-	-	0.00002
	323.15	0.0760	-0.0277	-0.0003	-	-	0.00003
$\Delta \eta / \text{mPa} \cdot \text{s}$	293.15	-0.2791	4.6317	0.0002	-0.0071	-	0.0001
	298.15	-0.0187	3.1626	0.0048	-0.0010	-	0.0001
	303.15	0.1534	2.1512	0.0005	-0.0071	-	0.0001
	308.15	0.2884	1.4912	0.0006	-0.0071	-	0.0001
	313.15	0.3442	0.9193	-0.0050	-0.0102	-	0.0001
	318.15	0.4769	0.7058	0.0005	-0.0074	-	0.0001
	323.15	0.4999	0.4048	0.0005	-0.0073	-	0.0001
$\Delta G^{*E} / \text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$	293.15	211.0	2684.78	-496.1	-	-	3.4
	303.15	577.5	1687.4	-337.2	-	-	1.7
	313.15	945.2	857.2	-198.7	-	-	1.4

	323.15	1490.3	445.2	135.8	-	-	6.4
Nikotin (1) + 1,2-propandiol (2)							
$10^6 \cdot V^E / m^3 \cdot mol^{-1}$	293.15	-2.8882	0.5942	-0.0391	-	-	0.0006
	298.15	-2.7997	0.5828	-0.0394	-	-	0.0006
	303.15	-2.7093	0.5720	-0.0391	-	-	0.0006
	308.15	-2.6135	0.5645	-0.0346	-	-	0.0005
	313.15	-2.5115	0.5502	-0.0305	-	-	0.0005
	318.15	-2.4051	0.5377	-0.0300	-	-	0.0005
	323.15	-2.2961	0.5277	-0.0300	-	-	0.0005
Δn_D	293.15	0.0780	-0.0320	0.0001	-	-	0.00002
	298.15	0.0774	-0.0320	0.0004	-	-	0.00003
	303.15	0.0768	-0.0325	0.0011	-	-	0.00002
	308.15	0.0768	-0.0323	-0.0007	-	-	0.00003
	313.15	0.0759	-0.0334	-0.0004	-	-	0.00003
	318.15	0.0744	-0.0344	0.0004	-	-	0.00003
	323.15	0.0740	-0.0342	0.0000	-	-	0.00002
$\Delta \eta / mPa \cdot s$	293.15	-24.3099	-59.6338	54.9556	0.0039	-	0.0008
	298.15	-18.0006	-38.1530	34.9934	-0.0019	-	0.0008
	303.15	-13.5766	-24.9033	23.5652	-0.0023	-	0.0005
	308.15	-10.2414	-16.6755	15.8081	-0.0051	-	0.0003
	313.15	-7.8617	-11.3991	10.3701	-0.0086	-	0.0002
	318.15	-5.8575	-7.9394	7.7053	-0.0142	-	0.0007
	323.15	-4.5319	-5.7418	5.8089	-0.0171	-	0.0015
$\Delta G^{*E} / J \cdot mol^{-1}$	293.15	4992.7	-3891.1	-1341.3	2409.1	4055.7	12.4
	303.15	3987.5	-3171.3	-487.5	1890.9	2564.5	6.1
	313.15	3129.1	-2693.7	-243.9	1196.1	1496.4	3.2
	323.15	2699.2	-2128.3	344.1	1169.8	1074.4	2.0
Nikotin (1) + 1,3-propandiol (2)							
$10^6 \cdot V^E / m^3 \cdot mol^{-1}$	293.15	-4.1302	0.0154	0.0242	-	-	0.0011
	298.15	-4.0873	0.0156	0.0249	-	-	0.0012
	303.15	-4.0398	0.0108	0.0171	-	-	0.0010
	308.15	-3.9867	0.0103	0.0165	-	-	0.0010
	313.15	-3.9296	0.0100	0.0158	-	-	0.0009
	318.15	-3.8666	0.0094	0.0151	-	-	0.0009
	323.15	-3.7968	0.0140	0.0210	-	-	0.0010
Δn_D	293.15	0.0809	-0.0333	0.0003	-	-	0.00003
	298.15	0.0808	-0.0327	-0.0002	-	-	0.00003
	303.15	0.0803	-0.0328	0.0004	-	-	0.00002
	308.15	0.0795	-0.0325	0.0001	-	-	0.00003
	313.15	0.0782	-0.0324	0.0006	-	-	0.00004
	318.15	0.0770	-0.0328	0.0004	-	-	0.00003
	323.15	0.0764	-0.0326	-0.0004	-	-	0.00002
$\Delta \eta / mPa \cdot s$	293.15	18.6602	-131.0195	90.0666	-0.2014	-	0.0031
	298.15	10.2187	-91.2252	63.9452	-0.0013	-	0.0013
	303.15	5.0691	-64.3429	45.6637	0.0022	-	0.0008
	308.15	2.1034	-45.9721	32.1756	-0.0043	-	0.0018
	313.15	0.2206	-33.3297	23.1456	0.0361	-	0.0019
	318.15	-0.5056	-24.5154	17.4462	0.0324	-	0.0011
	323.15	-1.0634	-18.2373	12.9645	0.0242	-	0.0008
$\Delta G^{*E} / J \cdot mol^{-1}$	293.15	7996.0	-5397.1	-2316.4	74.2	5041.7	16.9
	303.15	6724.4	-4991.4	-1585.4	722.4	3980.8	11.7
	313.15	5574.6	-4634.5	-1361.2	582.2	2859.8	7.6
	323.15	4829.3	-3993.6	-748.1	809.5	2199.7	5.0

Tabela P3 Parcijalna molarna zapremina \bar{V}_i , dopunska parcijalna molarna zapremina \bar{V}_i^E , koeficijent izobarske ekspanzije α , dopunski koeficijent izobarske ekspanzije α^E za binarne smeše nikotin (1) + 1-butanol (2), nikotin (1) + 2-butanol (2), nikotin (1) + 1,2-propandiol (2), nikotin (1) + 1,3-propandiol (2), na temperaturama $T = (293.15 - 323.15)$ K i na atmosferskom pritisku

x_1	$10^3 \cdot \alpha /$ (K ⁻¹)	$10^6 \alpha^E /$ (K ⁻¹)	$10^6 \cdot \bar{V}_1 /$ (m ³ · mol ⁻¹)	$10^6 \bar{V}_2 /$ (m ³ · mol ⁻¹)	$10^6 \cdot \bar{V}_1^E /$ (m ³ · mol ⁻¹)	$10^6 \cdot \bar{V}_2^E /$ (m ³ · mol ⁻¹)
Nikotin (1) + 1-butanol (2)						
293.15 K						
0.0000	0.962		157.2751	91.5266	-3.3118	
0.1000	0.941	4.7563	157.9689	91.4903	-2.6179	-0.0363
0.1960	0.921	7.2123	158.5485	91.3898	-2.0384	-0.1368
0.3000	0.901	8.2900	159.0846	91.2133	-1.5023	-0.3133
0.3931	0.885	8.1968	159.4872	91.0000	-1.0997	-0.5266
0.5000	0.867	7.3078	159.8641	90.6964	-0.7228	-0.8302
0.5930	0.851	5.0368	160.1219	90.3861	-0.4649	-1.1405
0.7000	0.837	4.3840	160.3432	89.9822	-0.2437	-1.5444
0.7931	0.825	2.9071	160.4748	89.5954	-0.1121	-1.9312
0.9000	0.812	1.2759	160.5617	89.1176	-0.0252	-2.4091
1.0000	0.801		160.5869	88.6446		-2.8820
298.15 K						
0.0000	0.967		157.9446	91.9609	-3.2919	
0.1000	0.945	4.7757	158.6312	91.9249	-2.6053	-0.0360
0.1960	0.925	7.2400	159.2055	91.8253	-2.0310	-0.1355
0.3000	0.905	8.3183	159.7375	91.6502	-1.4990	-0.3107
0.3931	0.888	8.2219	160.1377	91.4382	-1.0988	-0.5227
0.5000	0.870	7.3261	160.5130	91.1358	-0.7234	-0.8251
0.5930	0.855	5.0398	160.7703	90.8261	-0.4662	-1.1348
0.7000	0.840	4.3874	160.9916	90.4220	-0.2448	-1.5388
0.7931	0.828	2.9075	161.1236	90.0341	-0.1129	-1.9268
0.9000	0.815	1.2741	161.2111	89.5532	-0.0254	-2.4076
1.0000	0.804		161.2365	89.0756		-2.8853
303.15 K						
0.0000	0.971		158.6167	92.4019	-3.2728	
0.1000	0.949	4.7928	159.2962	92.3663	-2.5933	-0.0356
0.1960	0.930	7.2622	159.8654	92.2676	-2.0241	-0.1343
0.3000	0.909	8.3409	160.3936	92.0937	-1.4959	-0.3082
0.3931	0.892	8.2415	160.7916	91.8828	-1.0979	-0.5191
0.5000	0.874	7.3389	161.1656	91.5815	-0.7240	-0.8204
0.5930	0.859	5.0378	161.4224	91.2723	-0.4671	-1.1296
0.7000	0.844	4.3892	161.6438	90.8682	-0.2457	-1.5337
0.7931	0.831	2.9051	161.7761	90.4792	-0.1135	-1.9227
0.9000	0.818	1.2710	161.8640	89.9961	-0.0256	-2.4058
1.0000	0.807		161.8895	89.5149		-2.8870
308.15 K						
0.0000	0.976		159.2888	92.8501	-3.2574	
0.1000	0.954	4.8052	159.9628	92.8148	-2.5833	-0.0353
0.1960	0.934	7.2791	160.5280	92.7168	-2.0182	-0.1333
0.3000	0.913	8.3569	161.0529	92.5439	-1.4932	-0.3062
0.3931	0.896	8.2533	161.4490	92.3341	-1.0972	-0.5160
0.5000	0.878	7.3460	161.8217	92.0338	-0.7245	-0.8163
0.5930	0.862	5.0306	162.0780	91.7252	-0.4681	-1.1249
0.7000	0.848	4.3862	162.2995	91.3209	-0.2467	-1.5292
0.7931	0.835	2.9010	162.4320	90.9310	-0.1141	-1.9191

0.9000	0.822	1.2671	162.5204	90.4452	-0.0258	-2.4048
1.0000	0.811		162.5462	89.9599		-2.8902
313.15 K						
0.0000	0.981		159.9621	93.3064	-3.2449	
0.1000	0.958	4.8120	160.6309	93.2714	-2.5761	-0.0350
0.1960	0.938	7.2866	161.1924	93.1740	-2.0146	-0.1324
0.3000	0.918	8.3627	161.7147	93.0020	-1.4922	-0.3045
0.3931	0.900	8.2549	162.1094	92.7929	-1.0976	-0.5135
0.5000	0.882	7.3427	162.4813	92.4932	-0.7257	-0.8133
0.5930	0.866	5.0148	162.7376	92.1847	-0.4694	-1.1218
0.7000	0.851	4.3772	162.9593	91.7798	-0.2477	-1.5266
0.7931	0.838	2.8920	163.0923	91.3887	-0.1147	-1.9177
0.9000	0.825	1.2614	163.1810	90.9006	-0.0259	-2.4058
1.0000	0.814		163.2070	90.4119		-2.8945
318.15 K						
0.0000	0.986		160.6323	93.7719	-3.2390	
0.1000	0.963	4.8115	161.2988	93.7369	-2.5725	-0.0349
0.1960	0.943	7.2840	161.8586	93.6398	-2.0127	-0.1320
0.3000	0.922	8.3570	162.3797	93.4682	-1.4917	-0.3036
0.3931	0.904	8.2460	162.7736	93.2595	-1.0977	-0.5123
0.5000	0.886	7.3309	163.1451	92.9602	-0.7263	-0.8117
0.5930	0.870	4.9425	163.4013	92.6517	-0.4701	-1.1201
0.7000	0.855	4.3636	163.6231	92.2467	-0.2482	-1.5252
0.7931	0.842	2.8810	163.7563	91.8549	-0.1150	-1.9169
0.9000	0.829	1.2537	163.8453	91.3655	-0.0260	-2.4064
1.0000	0.817		163.8713	90.8747		-2.8972
323.15 K						
0.0000	0.991		161.3027	94.2470	-3.2371	
0.1000	0.968	4.8047	161.9682	94.2121	-2.5716	-0.0349
0.1960	0.947	7.2711	162.5273	94.1152	-2.0125	-0.1319
0.3000	0.926	8.3402	163.0480	93.9437	-1.4918	-0.3033
0.3931	0.909	8.2262	163.4418	93.7350	-1.0980	-0.5120
0.5000	0.890	7.3100	163.8132	93.4357	-0.7266	-0.8113
0.5930	0.874	4.9613	164.0695	93.1272	-0.4703	-1.1198
0.7000	0.858	4.3451	164.2914	92.7220	-0.2484	-1.5250
0.7931	0.846	2.8654	164.4247	92.3300	-0.1151	-1.9171
0.9000	0.832	1.2456	164.5137	91.8401	-0.0261	-2.4069
1.0000	0.821		164.5398	91.3489		-2.8981
Nikotin (1) + 2-butanol (2)						
293.15 K						
0.0000	1.080		158.589	91.8247	-1.9979	
0.1000	1.021	-13.4927	158.7248	91.8168	-1.8621	-0.0079
0.2036	0.974	-19.4941	158.9304	91.7790	-1.6565	-0.0457
0.3000	0.940	-19.9389	159.1641	91.6995	-1.4228	-0.1253
0.4000	0.912	-17.2707	159.4322	91.5539	-1.1547	-0.2708
0.5000	0.890	-12.7118	159.7088	91.3262	-0.8781	-0.4985
0.6000	0.870	-7.6713	159.976	90.9980	-0.6109	-0.8268
0.6956	0.853	-3.2566	160.206	90.5731	-0.3809	-1.2516
0.8000	0.836	0.1405	160.4096	89.9659	-0.1773	-1.8588
0.9000	0.819	1.3632	160.5395	89.2248	-0.0474	-2.5999
1.0000	0.801		160.5869	88.3086		-3.5161
298.15 K						
0.0000	1.085		159.1948	92.2982	-2.0417	
0.1000	1.026	-13.6009	159.3440	92.2896	-1.8925	-0.0086
0.2036	0.979	-19.6499	159.5610	92.2498	-1.6755	-0.0484
0.3000	0.945	-20.0969	159.8030	92.1675	-1.4335	-0.1308
0.4000	0.916	-17.4082	160.0774	92.0186	-1.1591	-0.2796

0.5000	0.894	-12.8143	160.3580	91.7877	-0.8785	-0.5106
0.6000	0.874	-7.7371	160.6272	91.4570	-0.6093	-0.8412
0.6956	0.857	-3.2897	160.8576	91.0314	-0.3789	-1.2668
0.8000	0.839	0.1335	161.0606	90.4260	-0.1758	-1.8722
0.9000	0.822	1.3673	161.1896	89.6905	-0.0469	-2.6077
1.0000	0.804		161.2365	88.7849		-3.5133
303.15 K						
0.0000	1.091		159.7771	92.7858	-2.1124	
0.1000	1.031	-13.6983	159.9520	92.7759	-1.9376	-0.0099
0.2036	0.983	-19.7781	160.1887	92.7326	-1.7008	-0.0532
0.3000	0.949	-20.2175	160.4436	92.6460	-1.4460	-0.1398
0.4000	0.921	-17.5013	160.7267	92.4924	-1.1628	-0.2934
0.5000	0.898	-12.8722	161.0123	92.2575	-0.8773	-0.5283
0.6000	0.878	-7.7590	161.2835	91.9245	-0.6061	-0.8613
0.6956	0.861	-3.2850	161.5139	91.4990	-0.3757	-1.2868
0.8000	0.843	0.1542	161.7157	90.8973	-0.1738	-1.8885
0.9000	0.826	1.3880	161.8433	90.1698	-0.0462	-2.6160
1.0000	0.807		161.8895	89.2774		-3.5084
308.15 K						
0.0000	1.097		160.3467	93.2884	-2.1995	
0.1000	1.036	-13.7987	160.5523	93.2769	-1.9939	-0.0115
0.2036	0.988	-19.9120	160.8128	93.2294	-1.7334	-0.0590
0.3000	0.954	-20.3408	161.0834	93.1376	-1.4628	-0.1509
0.4000	0.925	-17.5966	161.3773	92.9783	-1.1688	-0.3101
0.5000	0.902	-12.9282	161.6691	92.7384	-0.8770	-0.5501
0.6000	0.882	-7.7782	161.9431	92.4021	-0.6031	-0.8864
0.6956	0.864	-3.2761	162.1738	91.9761	-0.3724	-1.3123
0.8000	0.846	0.1793	162.3745	91.3780	-0.1716	-1.9104
0.9000	0.829	1.4101	162.5006	90.6590	-0.0455	-2.6295
1.0000	0.811		162.5462	89.7811		-3.5073
313.15 K						
0.0000	1.103		160.8919	93.8077	-2.3151	
0.1000	1.042	-13.8879	161.1392	93.7941	-2.0678	-0.0136
0.2036	0.993	-20.0211	161.4316	93.7409	-1.7754	-0.0668
0.3000	0.958	-20.4354	161.7231	93.6421	-1.4839	-0.1656
0.4000	0.929	-17.6523	162.0311	93.4753	-1.1758	-0.3324
0.5000	0.906	-12.9444	162.3310	93.2290	-0.8760	-0.5787
0.6000	0.886	-7.7587	162.6083	92.8887	-0.5987	-0.9190
0.6956	0.868	-3.2334	162.8392	92.4625	-0.3678	-1.3452
0.8000	0.850	0.2300	163.0383	91.8695	-0.1687	-1.9382
0.9000	0.832	1.4476	163.1624	91.1621	-0.0446	-2.6456
1.0000	0.814		163.2070	90.3036		-3.5041
318.15 K						
0.0000	1.109		161.4142	94.3439	-2.4571	
0.1000	1.047	-13.9623	161.7158	94.3275	-2.1555	-0.0164
0.2036	0.998	-20.1010	162.0487	94.2673	-1.8226	-0.0766
0.3000	0.963	-20.4864	162.3658	94.1600	-1.5055	-0.1840
0.4000	0.934	-17.6598	162.6906	93.9843	-1.1807	-0.3596
0.5000	0.910	-12.9084	162.9993	93.7308	-0.8721	-0.6131
0.6000	0.889	-7.6883	163.2797	93.3869	-0.5917	-0.9570
0.6956	0.872	-3.1452	163.5100	92.9619	-0.3613	-1.3820
0.8000	0.854	0.3140	163.7065	92.3770	-0.1648	-1.9670
0.9000	0.836	1.5032	163.8280	91.6850	-0.0433	-2.6589
1.0000	0.817		163.8713	90.8510		-3.4929
323.15 K						
0.0000	1.116		161.9249	94.8987	-2.6149	
0.1000	1.053	-14.0270	162.2839	94.8794	-2.2559	-0.0193

0.2036	1.003	-20.1662	162.6616	94.8112	-1.8782	-0.0875
0.3000	0.968	-20.5143	163.0085	94.6940	-1.5313	-0.2047
0.4000	0.938	-17.6429	163.3536	94.5075	-1.1862	-0.3912
0.5000	0.914	-12.8416	163.6736	94.2449	-0.8663	-0.6538
0.6000	0.893	-7.5860	163.9582	93.8961	-0.5816	-1.0027
0.6956	0.876	-3.0257	164.1880	93.4725	-0.3518	-1.4263
0.8000	0.857	0.4251	164.3808	92.8987	-0.1590	-2.0001
0.9000	0.839	1.5752	164.4984	92.2298	-0.0414	-2.6689
1.0000	0.821		164.5398	91.4340		-3.4647
Nikotin (1) + 1,2-propandiol (2)						
293.15 K						
0.0000	0.726		157.0654	73.4250	-3.5215	
0.1000	0.766	29.4525	157.9485	73.3793	-2.6384	-0.0457
0.2009	0.793	46.3995	158.6711	73.2521	-1.9157	-0.1728
0.3000	0.809	53.0412	159.2360	73.0643	-1.3509	-0.3607
0.4016	0.818	53.8596	159.6856	72.8224	-0.9013	-0.6026
0.5000	0.822	50.3838	160.0134	72.5544	-0.5735	-0.8706
0.6005	0.821	42.4270	160.2556	72.2593	-0.3313	-1.1657
0.7000	0.820	34.7358	160.4187	71.9576	-0.1682	-1.4673
0.7983	0.816	25.5436	160.5188	71.6607	-0.0681	-1.7643
0.9000	0.809	12.5967	160.5721	71.3642	-0.0148	-2.0608
1.0000	0.801		160.5869	71.0919		-2.3331
298.15 K						
0.0000	0.729		157.8149	73.6864	-3.4219	
0.1000	0.769	29.5555	158.6756	73.6418	-2.5612	-0.0445
0.2009	0.796	46.5291	159.3790	73.5181	-1.8578	-0.1683
0.3000	0.812	53.2496	159.9282	73.3354	-1.3086	-0.3509
0.4016	0.822	54.0727	160.3647	73.1006	-0.8721	-0.5858
0.5000	0.826	50.5753	160.6826	72.8407	-0.5542	-0.8456
0.6005	0.825	42.5902	160.9171	72.5551	-0.3197	-1.1313
0.7000	0.823	34.8511	161.0747	72.2636	-0.1621	-1.4228
0.7983	0.820	25.6556	161.1713	71.9771	-0.0655	-1.7093
0.9000	0.812	12.6302	161.2226	71.6916	-0.0142	-1.9947
1.0000	0.804		161.2368	71.4301		-2.2563
303.15 K						
0.0000	0.731		158.5696	73.9520	-3.3204	
0.1000	0.772	29.6258	159.4074	73.9087	-2.4827	-0.0433
0.2009	0.800	46.6671	160.0913	73.7884	-1.7987	-0.1636
0.3000	0.816	53.4199	160.6247	73.6110	-1.2654	-0.3410
0.4016	0.825	54.2599	161.0480	73.3833	-0.8421	-0.5687
0.5000	0.829	50.7663	161.3557	73.1317	-0.5343	-0.8203
0.6005	0.828	42.7633	161.5824	72.8557	-0.3077	-1.0964
0.7000	0.827	34.9973	161.7344	72.5746	-0.1557	-1.3775
0.7983	0.823	25.7733	161.8272	72.2990	-0.0628	-1.6530
0.9000	0.815	12.6837	161.8764	72.0254	-0.0136	-1.9267
1.0000	0.807		161.8900	71.7756		-2.1764
308.15 K						
0.0000	0.734		159.3327	74.2226	-3.2126	
0.1000	0.775	29.6626	160.1451	74.1805	-2.4003	-0.0420
0.2009	0.803	46.8190	160.8084	74.0639	-1.7370	-0.1587
0.3000	0.819	53.5708	161.3255	73.8919	-1.2199	-0.3306
0.4016	0.829	54.4572	161.7355	73.6713	-0.8098	-0.5512
0.5000	0.833	50.9797	162.0331	73.4281	-0.5123	-0.7945
0.6005	0.832	42.9456	162.2516	73.1619	-0.2937	-1.0607
0.7000	0.830	35.2541	162.3976	72.8920	-0.1478	-1.3305
0.7983	0.827	25.8966	162.4862	72.6293	-0.0591	-1.5933
0.9000	0.819	12.7769	162.5327	72.3710	-0.0127	-1.8516

1.0000	0.811		162.5453	72.1390		-2.0836
313.15 K						
0.0000	0.737		160.1154	74.4965	-3.0922	
0.1000	0.778	29.7275	160.8980	74.4560	-2.3096	-0.0405
0.2009	0.806	46.9475	161.5373	74.3436	-1.6704	-0.1529
0.3000	0.822	53.7455	162.0357	74.1778	-1.1719	-0.3187
0.4016	0.832	54.6409	162.4308	73.9653	-0.7768	-0.5312
0.5000	0.836	51.1673	162.7173	73.7311	-0.4903	-0.7654
0.6005	0.835	43.0985	162.9273	73.4753	-0.2803	-1.0212
0.7000	0.834	35.3305	163.0672	73.2167	-0.1404	-1.2798
0.7983	0.830	26.0095	163.1517	72.9662	-0.0559	-1.5304
0.9000	0.822	12.8242	163.1957	72.7217	-0.0119	-1.7748
1.0000	0.814		163.2076	72.5047		-1.9918
318.15 K						
0.0000	0.740		160.8992	74.7762	-2.9728	
0.1000	0.781	29.7961	161.6548	74.7371	-2.2172	-0.0391
0.2009	0.809	47.0926	162.2711	74.6287	-1.6009	-0.1475
0.3000	0.826	53.9212	162.7509	74.4692	-1.1211	-0.3070
0.4016	0.836	54.8477	163.1305	74.2650	-0.7415	-0.5112
0.5000	0.840	51.3737	163.4051	74.0405	-0.4668	-0.7357
0.6005	0.839	43.2811	163.6060	73.7960	-0.2660	-0.9802
0.7000	0.837	35.4877	163.7392	73.5497	-0.1328	-1.2265
0.7983	0.833	26.1300	163.8194	73.3121	-0.0526	-1.4641
0.9000	0.825	12.8878	163.8609	73.0816	-0.0111	-1.6946
1.0000	0.817		163.8720	72.8788		-1.8974
323.15 K						
0.0000	0.742		161.6863	75.0602	-2.8538	
0.1000	0.784	29.8790	162.4161	75.0224	-2.1241	-0.0377
0.2009	0.813	47.2453	163.0101	74.9180	-1.5300	-0.1422
0.3000	0.829	54.1263	163.4715	74.7646	-1.0687	-0.2956
0.4016	0.839	55.0709	163.8355	74.5688	-0.7046	-0.4914
0.5000	0.843	51.5984	164.0980	74.3542	-0.4421	-0.7060
0.6005	0.842	43.4742	164.2893	74.1214	-0.2509	-0.9387
0.7000	0.841	35.6556	164.4155	73.8881	-0.1246	-1.1721
0.7983	0.837	26.2693	164.4911	73.6643	-0.0491	-1.3959
0.9000	0.829	12.9525	164.5298	73.4490	-0.0103	-1.6112
1.0000	0.821		164.5401	73.2618		-1.7984
Nikotin (1) + 1,3-propandiol (2)						
293.15 K						
0.0000	0.597		156.4655	70.3874	-4.1214	
0.1000	0.653	14.1009	157.2402	70.3465	-3.3467	-0.0409
0.1999	0.694	22.9974	157.9391	70.2232	-2.6478	-0.1642
0.3000	0.726	27.8837	158.5608	70.0159	-2.0261	-0.3714
0.3994	0.750	29.8805	159.0979	69.7271	-1.4890	-0.6603
0.5000	0.767	28.5687	159.5582	69.3510	-1.0287	-1.0364
0.6004	0.780	25.1915	159.9328	68.8927	-0.6540	-1.4946
0.7000	0.790	20.9658	160.2204	68.3583	-0.3664	-2.0291
0.8000	0.796	15.1643	160.4252	67.7441	-0.1616	-2.6432
0.9000	0.799	7.9580	160.5468	67.0557	-0.0400	-3.3317
1.0000	0.801		160.5869	66.2968		-4.0906
298.15 K						
0.0000	0.599		157.1585	70.5970	-4.0780	
0.1000	0.655	14.1139	157.9246	70.5566	-3.3118	-0.0404
0.1999	0.697	23.0406	158.6160	70.4346	-2.6204	-0.1624
0.3000	0.728	27.9572	159.2313	70.2295	-2.0052	-0.3675
0.3994	0.753	29.9787	159.7629	69.9436	-1.4735	-0.6534
0.5000	0.770	28.6747	160.2185	69.5713	-1.0179	-1.0257

0.6004	0.783	25.2941	160.5894	69.1177	-0.6471	-1.4793
0.7000	0.793	21.0599	160.8740	68.5888	-0.3625	-2.0082
0.8000	0.799	15.2364	161.0766	67.9812	-0.1598	-2.6158
0.9000	0.803	7.9981	161.1969	67.3003	-0.0396	-3.2967
1.0000	0.804		161.2365	66.5502		-4.0468
303.15 K						
0.0000	0.601		157.8560	70.8081	-4.0335	
0.1000	0.657	14.1290	158.6165	70.7680	-3.2731	-0.0401
0.1999	0.699	23.0892	159.3007	70.6473	-2.5888	-0.1608
0.3000	0.731	28.0394	159.9084	70.4447	-1.9811	-0.3634
0.3994	0.756	30.0880	160.4329	70.1627	-1.4566	-0.6454
0.5000	0.773	28.7895	160.8823	69.7954	-1.0073	-1.0127
0.6004	0.786	25.4040	161.2483	69.3478	-0.6412	-1.4603
0.7000	0.796	21.1557	161.5297	68.8249	-0.3599	-1.9832
0.8000	0.802	15.3123	161.7305	68.2227	-0.1591	-2.5854
0.9000	0.806	8.0357	161.8500	67.5455	-0.0395	-3.2626
1.0000	0.807		161.8895	66.7962		-4.0119
308.15 K						
0.0000	0.603		158.5657	71.0210	-3.9805	
0.1000	0.659	14.1497	159.3162	70.9814	-3.2300	-0.0396
0.1999	0.702	23.1459	159.9914	70.8623	-2.5547	-0.1587
0.3000	0.734	28.1294	160.5911	70.6624	-1.9551	-0.3586
0.3994	0.758	30.2063	161.1086	70.3841	-1.4375	-0.6369
0.5000	0.776	28.9140	161.5521	70.0217	-0.9941	-0.9992
0.6004	0.789	25.5217	161.9132	69.5800	-0.6329	-1.4410
0.7000	0.799	21.2625	162.1909	69.0639	-0.3552	-1.9571
0.8000	0.806	15.3943	162.3891	68.4696	-0.1571	-2.5514
0.9000	0.809	8.0805	162.5071	67.8011	-0.0390	-3.2199
1.0000	0.811		162.5462	67.0611		-3.9599
313.15 K						
0.0000	0.605		159.2832	71.2357	-3.9238	
0.1000	0.661	14.1734	160.0232	71.1967	-3.1837	-0.0390
0.1999	0.704	23.2077	160.6889	71.0792	-2.5181	-0.1565
0.3000	0.737	28.2264	161.2800	70.8822	-1.9270	-0.3535
0.3994	0.761	30.3305	161.7900	70.6079	-1.4169	-0.6278
0.5000	0.779	29.0455	162.2271	70.2508	-0.9799	-0.9849
0.6004	0.792	25.6480	162.5830	69.8154	-0.6239	-1.4203
0.7000	0.802	21.3747	162.8567	69.3067	-0.3502	-1.9290
0.8000	0.809	15.4795	163.0521	68.7208	-0.1549	-2.5149
0.9000	0.812	8.1270	163.1685	68.0616	-0.0385	-3.1740
1.0000	0.814		163.2070	67.3319		-3.9038
318.15 K						
0.0000	0.606		160.0104	71.4527	-3.8609	
0.1000	0.663	14.2020	160.7387	71.4144	-3.1326	-0.0384
0.1999	0.707	23.2786	161.3937	71.2988	-2.4776	-0.1540
0.3000	0.739	28.3347	161.9753	71.1050	-1.8961	-0.3478
0.3994	0.764	30.4656	162.4771	70.8351	-1.3943	-0.6176
0.5000	0.782	29.1893	162.9070	70.4837	-0.9643	-0.9690
0.6004	0.796	25.7842	163.2573	70.0554	-0.6141	-1.3974
0.7000	0.806	21.4953	163.5266	69.5548	-0.3447	-1.8979
0.8000	0.812	15.5739	163.7189	68.9782	-0.1525	-2.4746
0.9000	0.816	8.1767	163.8334	68.3293	-0.0379	-3.1235
1.0000	0.817		163.8713	67.6106		-3.8421
323.15 K						
0.0000	0.608		160.7500	71.6719	-3.7898	
0.1000	0.666	14.2367	161.4630	71.6343	-3.0768	-0.0376
0.1999	0.709	23.3576	162.1058	71.5209	-2.4340	-0.1510

0.3000	0.742	28.4529	162.6775	71.3303	-1.8624	-0.3416
0.3994	0.767	30.6097	163.1711	71.0649	-1.3687	-0.6070
0.5000	0.785	29.3443	163.5941	70.7192	-0.9457	-0.9527
0.6004	0.799	25.9304	163.9384	70.2981	-0.6014	-1.3738
0.7000	0.809	21.6293	164.2028	69.8068	-0.3370	-1.8651
0.8000	0.815	15.6724	164.3911	69.2421	-0.1487	-2.4298
0.9000	0.819	8.2346	164.5029	68.6087	-0.0369	-3.0632
1.0000	0.821		164.5398	67.9101		-3.7618

Tabela P4 Dopunska parcijalna molarna zapremina u beskonačnim razblaženjima $\bar{V}_i^{E,\infty}$ za binarne smeše nikotin (1) + 1-butanol (2), nikotin (1) + 2-butanol (2), nikotin (1) + 1,2-propandiol (2), nikotin (1) + 1,3-propandiol (2), na temperaturama $T = (293.15 - 323.15)$ K i na atmosferskom pritisku

T / K	Nikotin (1) + 1-butanol (2)		Nikotin(1) + 2-butanol (2)		Nikotin (1) + 1,2-propandiol (2)		Nikotin (1) + 1,3-propandiol (2)	
	$\bar{V}_1^{E,\infty}$	$\bar{V}_2^{E,\infty}$	$\bar{V}_1^{E,\infty}$	$\bar{V}_2^{E,\infty}$	$\bar{V}_1^{E,\infty}$	$\bar{V}_2^{E,\infty}$	$\bar{V}_1^{E,\infty}$	$\bar{V}_2^{E,\infty}$
293.15	-2.8820	-3.3118	-3.5161	-1.9979	-2.3331	-3.5215	-4.0906	-4.1214
298.15	-2.8853	-3.2919	-3.5133	-2.0417	-2.2563	-3.4219	-4.0468	-4.0780
303.15	-2.8870	-3.2728	-3.5084	-2.1124	-2.1764	-3.3204	-4.0119	-4.0335
308.15	-2.8902	-3.2574	-3.5073	-2.1995	-2.0836	-3.2126	-3.9599	-3.9805
313.15	-2.8945	-3.2449	-3.5041	-2.3151	-1.9918	-3.0922	-3.9038	-3.9238
318.15	-2.8972	-3.2390	-3.4929	-2.4571	-1.8974	-2.9728	-3.8421	-3.8609
323.15	-2.8981	-3.2371	-3.4647	-2.6149	-1.7984	-2.8538	-3.7618	-3.7898

Tabela P5 Gustina ρ , indeks refrakcije n_D , viskoznost η , dopunska molarna zapremina V^E , promena indeksa refrakcije Δn_D , promena viskoznosti $\Delta\eta$, dopunska Gibsova energija aktivacije viskoznoeg toka ΔG^{*E} za četiri binarne smeše anilin (1) + [bmim][OTf] (2), anilin (1) + [bmim][NTf₂] (2), *N,N*-dimetilanilin (1) + [bmim][OTf] (2), *N,N*-dimetilanilin (1) + [bmim][NTf₂] (2), na temperaturama $T = (293.15 - 333.15)$ K i na atmosferskom pritisku ^{P3}

x_1	$10^{-3} \cdot \rho /$ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	$10^6 \cdot V^E /$ $\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	n_D	Δn_D	$\eta /$ $\text{mPa} \cdot \text{s}$	$\Delta \eta /$ $\text{mPa} \cdot \text{s}$	$\Delta G^{*E} /$ $\text{kJ} \cdot \text{kmol}^{-1}$
Anilin (1) + [bmim][OTf] (2)							
288.15 K							
0.0000	1.307033		1.44683		132.73		
0.1000	1.295182	-0.0695	1.44875	-0.01124	110.29	-9.6918	393.44
0.1995	1.283218	-0.3519	1.45427	-0.01881	90.929	-16.383	751.88
0.3002	1.269204	-0.6193	1.46197	-0.02437	74.073	-20.410	1080.45
0.8999	1.092436	-0.6254	1.55554	-0.00971	8.9529	-9.1243	567.14
1.0000	1.026063		1.57842		5.3238		
293.15 K							
0.0000	1.303052		1.44518		101.99		
0.1000	1.291189	-0.0729	1.44710	-0.01117	85.319	-6.9126	398.31
0.1995	1.279242	-0.3643	1.45273	-0.01857	70.615	-11.907	754.11
0.3002	1.265234	-0.6388	1.46041	-0.02407	57.649	-15.047	1075.14
0.8999	1.088325	-0.6506	1.55343	-0.00955	7.3122	-6.8629	561.48
1.0000	1.021719		1.57608		4.4071		
298.15 K							
0.0000	1.299073		1.44346		80.098		
0.1000	1.287211	-0.0784	1.44590	-0.01058	67.554	-4.9082	406.05
0.1995	1.275283	-0.3793	1.45117	-0.01827	56.107	-8.7569	757.36
0.3002	1.261284	-0.6612	1.45885	-0.02369	45.897	-11.278	1069.45
0.8999	1.084224	-0.6769	1.55099	-0.00964	6.1835	-5.1976	582.19
1.0000	1.017377		1.57366		3.7374		
303.15 K							
0.0000	1.295101		1.44173		64.024		
0.1000	1.283232	-0.0827	1.44421	-0.01047	54.549	-3.3919	421.15
0.1995	1.271339	-0.3958	1.44961	-0.01795	45.501	-6.3875	771.87
0.3002	1.257359	-0.6867	1.45731	-0.02329	37.272	-8.4918	1075.15
0.8999	1.080133	-0.7045	1.54888	-0.00937	5.2561	-4.0299	592.05
1.0000	1.013036		1.57121		3.1972		
308.15 K							
0.0000	1.291142		1.44001		52.180		
0.1000	1.279282	-0.0898	1.44228	-0.01065	44.414	-2.8259	408.75
0.1995	1.267401	-0.4116	1.44804	-0.01775	37.163	-5.1614	756.53
0.3002	1.253428	-0.7101	1.45578	-0.02302	30.614	-6.7360	1062.33
0.8999	1.076041	-0.7317	1.54696	-0.00932	4.5383	-3.1864	599.76
1.0000	1.008701		1.56922		2.7797		
313.15 K							
0.0000	1.287216		1.43836		42.756		
0.1000	1.275359	-0.0963	1.44069	-0.01053	36.564	-2.1611	408.89
0.1995	1.263491	-0.4274	1.44646	-0.01755	30.703	-4.0110	752.86
0.3002	1.249522	-0.7333	1.45423	-0.02272	25.372	-5.2827	1052.96
0.3996	1.233065	-0.9670	1.46460	-0.02514	20.752	-5.8957	1303.19
0.8999	1.071955	-0.7592	1.54499	-0.00908	3.9294	-2.5508	585.84
1.0000	1.004367		1.56693		2.4451		
318.15 K							
0.0000	1.283296		1.43664		35.664		

0.1000	1.271436	-0.1019	1.43895	-0.01048	30.601	-1.7124	408.94
0.1995	1.259588	-0.4437	1.44490	-0.01727	25.829	-3.1502	756.81
0.3002	1.245630	-0.7584	1.45273	-0.02233	21.474	-4.1318	1062.30
0.3996	1.229165	-0.9972	1.46306	-0.02472	17.672	-4.6031	1317.61
0.8999	1.067872	-0.7876	1.54306	-0.00875	3.5034	-2.0094	634.99
1.0000	1.000032		1.56462		2.1589		
323.15 K							
0.0000	1.279401		1.43514		30.005		
0.1000	1.267536	-0.1076	1.43748	-0.01038	25.849	-1.3485	409.98
0.1995	1.255705	-0.4598	1.44337	-0.01714	21.903	-2.5008	757.61
0.3002	1.241754	-0.7831	1.45120	-0.02213	18.284	-3.2920	1062.50
0.3996	1.225279	-1.0271	1.46149	-0.02448	15.114	-3.6711	1317.76
0.8999	1.063793	-0.8162	1.54091	-0.00870	3.1166	-1.6212	650.57
1.0000	0.995699		1.56234		1.9272		
328.15 K							
0.0000	1.275524		1.43340		25.497		
0.1000	1.263653	-0.1132	1.43627	-0.00979	22.165	-0.9564	424.50
0.1995	1.251838	-0.4763	1.44193	-0.01672	18.816	-1.9408	766.08
0.3002	1.237896	-0.8086	1.44970	-0.02170	15.710	-2.6545	1059.57
0.3996	1.221411	-1.0583	1.45996	-0.02403	13.016	-2.9872	1308.66
0.8999	1.059717	-0.8455	1.53860	-0.00871	2.7553	-1.3610	621.56
1.0000	0.991363		1.55998		1.7380		
333.15 K							
0.0000	1.271667		1.43174		22.001		
0.1000	1.259780	-0.1177	1.43450	-0.00984	19.072	-0.8863	409.04
0.1995	1.247981	-0.4918	1.44050	-0.01639	16.227	-1.6991	747.98
0.3002	1.234047	-0.8335	1.44823	-0.02135	13.629	-2.2406	1048.13
0.3996	1.217551	-1.0890	1.45843	-0.02368	11.382	-2.4570	1309.04
0.8999	1.055642	-0.8753	1.53668	-0.00849	2.4742	-1.1469	615.70
1.0000	0.987025		1.55779		1.5766		
Anilin (1) + [bmim][NTf ₂] (2)							
288.15 K							
0.0000	1.444602		1.43005		78.366		
0.1000	1.429320	0.2327	1.43345	-0.01143	66.293	-4.7684	353.45
0.2000	1.414292	-0.0060	1.43943	-0.02029	55.873	-7.8844	680.78
0.3029	1.396823	-0.3754	1.44732	-0.02767	46.483	-9.7585	980.72
0.4013	1.376421	-0.6623	1.45691	-0.03268	38.491	-10.563	1219.23
0.5024	1.350010	-0.8208	1.46678	-0.03781	31.090	-10.580	1396.12
0.6002	1.317472	-0.8504	1.47935	-0.03975	24.560	-9.9663	1472.62
0.7000	1.274617	-0.7753	1.49386	-0.04005	18.376	-8.8605	1400.77
0.8002	1.218196	-0.6754	1.51519	-0.03359	13.458	-6.4596	1237.97
0.9000	1.140406	-0.4470	1.54191	-0.02167	8.7427	-3.8853	731.97
1.0000	1.026063		1.57842		5.3238		
293.15 K							
0.0000	1.439773		1.42849		61.467		
0.1000	1.424435	0.2457	1.43189	-0.01136	52.155	-3.6064	353.78
0.2000	1.409452	-0.0022	1.43785	-0.02016	44.097	-5.9581	681.18
0.3029	1.392057	-0.3853	1.44570	-0.02749	36.821	-7.3626	981.50
0.4013	1.371719	-0.6817	1.45527	-0.03245	30.600	-7.9686	1219.77
0.5024	1.345355	-0.8445	1.46510	-0.03755	24.825	-7.9751	1397.00
0.6002	1.312864	-0.8757	1.47762	-0.03945	19.712	-7.5073	1474.42
0.7000	1.270074	-0.8015	1.49204	-0.03977	14.860	-6.6651	1406.48
0.8002	1.213766	-0.7045	1.51325	-0.03334	10.932	-4.8757	1238.59
0.9000	1.136059	-0.4698	1.53980	-0.02152	7.1901	-2.9230	741.05
1.0000	1.021719		1.57608		4.4071		
298.15 K							
0.0000	1.434963		1.42691		49.105		

0.1000	1.419578	0.2569	1.43030	-0.01129	42.127	-2.4416	372.25
0.2000	1.404638	-0.0001	1.43625	-0.02001	35.896	-4.1351	709.47
0.3029	1.387313	-0.3964	1.44409	-0.02727	30.125	-5.2382	1011.95
0.4013	1.367035	-0.7018	1.45364	-0.03216	25.120	-5.7783	1247.89
0.5024	1.340717	-0.8689	1.46342	-0.03722	20.424	-5.8883	1418.46
0.6002	1.308274	-0.9021	1.47588	-0.03911	16.280	-5.5951	1492.17
0.7000	1.265540	-0.8279	1.49022	-0.03942	12.396	-4.9517	1433.03
0.8002	1.209352	-0.7348	1.51131	-0.03303	9.2228	-3.5790	1275.35
0.9000	1.131711	-0.4922	1.53766	-0.02132	6.1000	-2.1742	768.69
1.0000	1.017377		1.57366		3.7374		
303.15 K							
0.0000	1.430167		1.42536		39.953		
0.1000	1.414683	0.2785	1.42875	-0.01119	34.275	-2.0025	365.85
0.2000	1.399798	0.0091	1.43467	-0.01985	29.281	-3.3205	702.36
0.3029	1.382583	-0.4079	1.44248	-0.02706	24.700	-4.1197	1009.52
0.4013	1.362376	-0.7244	1.45201	-0.03188	20.726	-4.4773	1252.56
0.5024	1.336109	-0.8964	1.46174	-0.03689	16.980	-4.5069	1432.22
0.6002	1.303703	-0.9302	1.47411	-0.03878	13.641	-4.2513	1514.42
0.7000	1.261029	-0.8566	1.48841	-0.03905	10.469	-3.7549	1461.53
0.8002	1.204950	-0.7662	1.50937	-0.03270	7.8019	-2.7391	1292.65
0.9000	1.127376	-0.5160	1.53552	-0.02110	5.1984	-1.6744	783.71
1.0000	1.013036		1.57121		3.1972		
308.15 K							
0.0000	1.425396		1.42378		33.224		
0.1000	1.409836	0.2954	1.42756	-0.01076	28.629	-1.5502	371.84
0.2000	1.394997	0.0155	1.43355	-0.01931	24.550	-2.5848	711.92
0.3029	1.377870	-0.4187	1.44091	-0.02692	20.774	-3.2284	1020.12
0.4013	1.357739	-0.7475	1.45037	-0.03177	17.484	-3.5229	1263.38
0.5024	1.331522	-0.9247	1.46007	-0.03678	14.381	-3.5478	1444.49
0.6002	1.299147	-0.9584	1.47232	-0.03875	11.578	-3.3733	1522.34
0.7000	1.256526	-0.8848	1.48656	-0.03903	8.9185	-2.9945	1466.59
0.8002	1.200555	-0.7975	1.50737	-0.03279	6.7063	-2.1562	1306.44
0.9000	1.123044	-0.5395	1.53381	-0.02086	4.4973	-1.3268	794.50
1.0000	1.008701		1.56922		2.7797		
313.15 K							
0.0000	1.420644		1.42221		27.68		
0.1000	1.405007	0.3127	1.42582	-0.01087	23.937	-1.2194	373.01
0.2000	1.390224	0.0202	1.43180	-0.01936	20.594	-2.0395	712.75
0.3029	1.373181	-0.4310	1.43935	-0.02669	17.481	-2.5553	1019.24
0.4013	1.353117	-0.7709	1.44870	-0.03159	14.757	-2.7965	1260.15
0.5024	1.326932	-0.9509	1.45842	-0.03650	12.174	-2.8280	1437.47
0.6002	1.294609	-0.9877	1.47054	-0.03854	9.8433	-2.6907	1513.80
0.7000	1.252038	-0.9141	1.48489	-0.03863	7.6074	-2.4082	1451.60
0.8002	1.196176	-0.8302	1.50551	-0.03251	5.7701	-1.7169	1297.15
0.9000	1.118718	-0.5634	1.53165	-0.02081	3.8978	-1.0708	782.06
1.0000	1.004367		1.56693		2.4451		
318.15 K							
0.0000	1.415912		1.42062		23.534		
0.1000	1.400224	0.3248	1.42455	-0.01047	20.444	-0.9529	380.88
0.2000	1.385489	0.0211	1.43051	-0.01891	17.662	-1.5971	726.79
0.3029	1.368521	-0.4456	1.43784	-0.02640	15.054	-2.0055	1038.46
0.4013	1.348521	-0.7963	1.44704	-0.03136	12.758	-2.1979	1283.48
0.5024	1.322379	-0.9808	1.45679	-0.03618	10.573	-2.2221	1465.42
0.6002	1.290087	-1.0181	1.46874	-0.03831	8.5859	-2.1188	1544.55
0.7000	1.247569	-0.9450	1.48331	-0.03811	6.6766	-1.8948	1487.62
0.8002	1.191802	-0.8632	1.50383	-0.03202	5.0931	-1.3365	1335.76
0.9000	1.114401	-0.5884	1.52982	-0.02040	3.4614	-0.8350	818.79
1.0000	1.000032		1.56462		2.1589		

323.15 K							
0.0000	1.411205		1.41906		20.134		
0.1000	1.395499	0.3304	1.42303	-0.01047	17.563	-0.7507	386.43
0.2000	1.380806	0.0166	1.42900	-0.01891	15.224	-1.2691	735.11
0.3029	1.363896	-0.4628	1.43637	-0.02640	13.016	-1.6032	1047.91
0.4013	1.343941	-0.8215	1.44538	-0.03136	11.061	-1.7669	1292.66
0.5024	1.317835	-1.0099	1.45515	-0.03618	9.1925	-1.7944	1473.32
0.6002	1.285580	-1.0488	1.46695	-0.03831	7.5008	-1.7055	1555.32
0.7000	1.243108	-0.9756	1.48152	-0.03811	5.8640	-1.5252	1500.38
0.8002	1.187439	-0.8968	1.50209	-0.03202	4.4980	-1.0669	1349.49
0.9000	1.110085	-0.6132	1.52767	-0.02040	3.0763	-0.6716	830.25
1.0000	0.995699		1.56234		1.9272		
328.15 K							
0.0000	1.406519		1.41754		17.388		
0.1000	1.390821	0.3305	1.42160	-0.01019	15.223	-0.6004	390.34
0.2000	1.376169	0.0068	1.42756	-0.01847	13.239	-1.0188	741.28
0.3029	1.359300	-0.4822	1.43487	-0.02582	11.355	-1.2926	1055.20
0.4013	1.339380	-0.8475	1.44376	-0.03094	9.6791	-1.4285	1300.26
0.5024	1.313300	-1.0386	1.45352	-0.03558	8.0756	-1.4498	1482.30
0.6002	1.281088	-1.0804	1.46518	-0.03786	6.6086	-1.3863	1561.81
0.7000	1.238659	-1.0071	1.47963	-0.03761	5.1939	-1.2391	1508.61
0.8002	1.183084	-0.9312	1.50014	-0.03138	4.0024	-0.8625	1356.08
0.9000	1.105774	-0.6387	1.52555	-0.02019	2.7547	-0.5483	834.57
1.0000	0.991363		1.55998		1.7380		
333.15 K							
0.0000	1.401863		1.41607		15.203		
0.1000	1.386230	0.3190	1.42023	-0.01001	13.339	-0.5013	391.78
0.2000	1.371600	-0.0108	1.42615	-0.01827	11.632	-0.8460	745.13
0.3029	1.354732	-0.5024	1.43336	-0.02564	10.007	-1.0686	1061.55
0.4013	1.334824	-0.8710	1.44215	-0.03079	8.5568	-1.1780	1308.80
0.5024	1.308765	-1.0648	1.45188	-0.03540	7.1587	-1.1984	1490.69
0.6002	1.276612	-1.1123	1.46349	-0.03764	5.8817	-1.1427	1572.32
0.7000	1.234223	-1.0390	1.47809	-0.03718	4.6391	-1.0254	1517.94
0.8002	1.178736	-0.9659	1.49835	-0.03113	3.5874	-0.7118	1362.52
0.9000	1.101466	-0.6645	1.52372	-0.01990	2.4767	-0.4625	831.75
1.0000	0.987025		1.55779		1.5766		
<i>N,N</i> -dimetilanolin (1) + [bmim][OTf] (2)							
288.15 K							
0.0000	1.307033		1.44683		132.73		
0.1000	1.278755	1.2347	1.44584	-0.01200	97.562	-22.049	373.97
0.2000	1.259843	0.5850	1.45266	-0.01619	72.760	-33.731	756.89
0.2998	1.240770	-0.3372	1.46260	-0.01723	54.032	-39.366	1118.06
0.3970	1.218275	-0.9589	1.47305	-0.01749	39.343	-41.303	1401.05
0.5045	1.187961	-1.2908	1.48486	-0.01751	26.078	-40.465	1566.28
0.5996	1.156536	-1.3910	1.49664	-0.01621	16.868	-37.198	1535.61
0.6997	1.118531	-1.3677	1.50891	-0.01496	10.048	-30.886	1354.71
0.7994	1.074391	-1.1586	1.52309	-0.01176	6.0030	-21.851	1170.53
0.8945	1.024790	-0.6999	1.53966	-0.00566	3.9911	-11.386	1189.36
1.0000	0.960561		1.55693		1.5363		
293.15 K							
0.0000	1.303052		1.44518		101.99		
0.1000	1.274738	1.2430	1.44403	-0.01207	75.735	-16.191	371.40
0.2000	1.255825	0.5846	1.45093	-0.01609	57.087	-24.776	752.93
0.2998	1.236751	-0.3480	1.46105	-0.01687	42.836	-28.984	1111.74
0.3970	1.214251	-0.9772	1.47150	-0.01704	31.523	-30.515	1392.45
0.5045	1.183917	-1.3122	1.48334	-0.01693	21.166	-30.055	1555.54
0.5996	1.152465	-1.4119	1.49484	-0.01581	13.934	-27.716	1535.08

0.6997	1.114431	-1.3862	1.50700	-0.01459	8.5024	-23.074	1375.87
0.7994	1.070274	-1.1738	1.52096	-0.01151	5.2067	-16.337	1215.10
0.8945	1.020670	-0.7095	1.53735	-0.00551	3.5327	-8.4405	1251.75
1.0000	0.956451		1.55438		1.3563		
298.15 K							
0.0000	1.299073		1.44346		80.098		
0.1000	1.270627	1.2677	1.44235	-0.01195	59.887	-12.331	345.14
0.2000	1.251754	0.5928	1.44926	-0.01588	45.657	-18.682	711.40
0.2998	1.232735	-0.3594	1.45949	-0.01647	34.748	-21.727	1061.57
0.3970	1.210244	-0.9981	1.46995	-0.01654	25.939	-22.877	1334.03
0.5045	1.179882	-1.3351	1.48200	-0.01615	17.761	-22.584	1494.97
0.5996	1.148405	-1.4346	1.49301	-0.01545	11.923	-20.929	1475.33
0.6997	1.110355	-1.4084	1.50531	-0.01400	7.4189	-17.545	1312.15
0.7994	1.066178	-1.1919	1.51888	-0.01124	4.6147	-12.493	1137.95
0.8945	1.016554	-0.7197	1.53505	-0.00538	3.1694	-6.4451	1158.39
1.0000	0.952341		1.55187		1.3015		
303.15 K							
0.0000	1.295101		1.44173		64.024		
0.1000	1.266571	1.2844	1.44080	-0.01180	48.108	-9.6339	326.30
0.2000	1.247732	0.5943	1.44788	-0.01559	36.997	-14.463	683.13
0.2998	1.228746	-0.3742	1.45795	-0.01604	28.436	-16.755	1026.62
0.3970	1.206256	-1.0214	1.46843	-0.01603	21.687	-17.398	1321.35
0.5045	1.175869	-1.3608	1.48089	-0.01566	14.771	-17.561	1431.55
0.5996	1.144364	-1.4596	1.49130	-0.01497	10.231	-16.127	1455.06
0.6997	1.106290	-1.4316	1.50345	-0.01359	6.4709	-13.599	1293.11
0.7994	1.062092	-1.2110	1.51687	-0.01090	4.1022	-9.7049	1126.87
0.8945	1.012447	-0.7307	1.53276	-0.00524	2.8489	-4.9842	1140.52
1.0000	0.948236		1.54936		1.2058		
308.15 K							
0.0000	1.291142		1.44001		52.180		
0.1000	1.262510	1.3041	1.43911	-0.01159	39.484	-7.5899	315.46
0.2000	1.243710	0.5973	1.44618	-0.01520	30.690	-11.278	670.96
0.2998	1.224771	-0.3901	1.45644	-0.01560	23.901	-12.972	1019.38
0.3970	1.202286	-1.0467	1.46689	-0.01554	18.272	-13.638	1291.65
0.5045	1.171872	-1.3884	1.47873	-0.01518	12.854	-13.568	1449.64
0.5996	1.140336	-1.4864	1.48959	-0.01447	8.8656	-12.701	1430.13
0.6997	1.102236	-1.4566	1.50161	-0.01315	5.7133	-10.742	1279.27
0.7994	1.058013	-1.2315	1.51490	-0.01051	3.6810	-7.6842	1117.75
0.8945	1.008345	-0.7427	1.53055	-0.00502	2.5797	-3.9300	1122.56
1.0000	0.944127		1.54684		1.1232		
313.15 K							
0.0000	1.287216		1.43836		42.756		
0.1000	1.258510	1.3186	1.43774	-0.01123	32.189	-6.3972	271.51
0.2000	1.239726	0.5985	1.44482	-0.01477	25.202	-9.2135	615.60
0.2998	1.220810	-0.4045	1.45497	-0.01520	19.910	-10.345	970.94
0.3970	1.198332	-1.0714	1.46529	-0.01520	15.464	-10.737	1253.86
0.5045	1.167889	-1.4158	1.47718	-0.01472	11.043	-10.675	1414.87
0.5996	1.136329	-1.5144	1.48789	-0.01410	7.6919	-10.061	1386.59
0.6997	1.098196	-1.4823	1.49976	-0.01285	5.0320	-8.5466	1236.61
0.7994	1.053938	-1.2518	1.51284	-0.01036	3.3024	-6.1187	1084.92
0.8945	1.004242	-0.7543	1.52837	-0.00492	2.3544	-3.1010	1100.63
1.0000	0.940018		1.54448		1.0561		
318.15 K							
0.0000	1.283296		1.43664		35.664		
0.1000	1.254479	1.3396	1.43635	-0.01083	27.140	-5.0561	276.02
0.2000	1.235738	0.6011	1.44343	-0.01427	21.457	-7.2706	622.74
0.2998	1.216868	-0.4217	1.45349	-0.01473	17.100	-8.1663	978.24

0.3970	1.194395	-1.0988	1.46371	-0.01474	13.396	-8.4987	1260.67
0.5045	1.163922	-1.4459	1.47544	-0.01434	9.6814	-8.4848	1425.37
0.5996	1.132326	-1.5435	1.48615	-0.01364	6.8398	-8.0280	1407.21
0.6997	1.094164	-1.5097	1.49788	-0.01246	4.5399	-6.8561	1264.87
0.7994	1.049877	-1.2746	1.51079	-0.01004	3.0111	-4.9269	1110.59
0.8945	1.000145	-0.7674	1.52618	-0.00468	2.1442	-2.4954	1096.77
1.0000	0.935905		1.54197		0.9805		
323.15 K							
0.0000	1.279401		1.43514		30.005		
0.1000	1.250427	1.3681	1.43520	-0.01037	22.961	-4.1357	266.25
0.2000	1.231751	0.6070	1.44218	-0.01381	18.300	-5.8879	610.47
0.2998	1.212944	-0.4390	1.45195	-0.01444	14.716	-6.5689	966.23
0.3970	1.190477	-1.1270	1.46212	-0.01440	11.633	-6.8251	1248.76
0.5045	1.159970	-1.4765	1.47361	-0.01412	8.4999	-6.8316	1413.99
0.5996	1.128336	-1.5732	1.48438	-0.01325	6.0756	-6.4899	1399.12
0.6997	1.090145	-1.5382	1.49601	-0.01206	4.0880	-5.5660	1261.94
0.7994	1.045825	-1.2983	1.50878	-0.00968	2.7466	-4.0076	1110.92
0.8945	0.996044	-0.7797	1.52398	-0.00439	1.9719	-2.0163	1091.35
1.0000	0.931792		1.53937		0.9197		
328.15 K							
0.0000	1.275524		1.43365		25.497		
0.1000	1.246428	1.3908	1.43339	-0.01058	19.601	-3.4326	255.31
0.2000	1.227792	0.6106	1.44049	-0.01381	15.740	-4.8307	597.38
0.2998	1.209033	-0.4568	1.45046	-0.01414	12.769	-5.3431	954.65
0.3970	1.186570	-1.1558	1.46058	-0.01405	10.185	-5.5330	1238.96
0.5045	1.156033	-1.5089	1.47208	-0.01365	7.5217	-5.5484	1406.02
0.5996	1.124366	-1.6056	1.48260	-0.01295	5.4352	-5.2924	1394.28
0.6997	1.086139	-1.5686	1.49409	-0.01179	3.7018	-4.5601	1260.48
0.7994	1.041775	-1.3227	1.50684	-0.00933	2.5173	-3.2888	1112.62
0.8945	0.991944	-0.7926	1.52177	-0.00422	1.8163	-1.6472	1080.34
1.0000	0.927674		1.53688		0.8649		
333.15 K							
0.0000	1.271667		1.43225		22.001		
0.1000	1.242408	1.4204	1.43166	-0.01081	16.906	-2.9767	232.33
0.2000	1.223832	0.6169	1.43882	-0.01388	13.642	-4.1228	566.87
0.2998	1.205138	-0.4754	1.44898	-0.01391	11.157	-4.4935	925.85
0.3970	1.182682	-1.1864	1.45912	-0.01371	8.9817	-4.6101	1214.73
0.5045	1.152106	-1.5420	1.47056	-0.01325	6.7056	-4.6091	1386.63
0.5996	1.120397	-1.6379	1.48110	-0.01244	4.8956	-4.4048	1378.65
0.6997	1.082133	-1.5993	1.49253	-0.01123	3.3652	-3.8149	1242.59
0.7994	1.037729	-1.3481	1.50501	-0.00894	2.3113	-2.7570	1094.46
0.8945	0.987844	-0.8064	1.52018	-0.00349	1.6733	-1.3806	1046.80
1.0000	0.923549		1.53446		0.8192		
<i>N,N</i> -dimetilanilin (1) + [bmim][NTf ₂] (2)							
288.15 K							
0.0000	1.444602		1.43005		78.366		
0.1000	1.423700	-0.2891	1.43332	-0.00941	65.145	-5.5381	557.22
0.2000	1.399694	-0.5053	1.44011	-0.01532	52.220	-10.780	1019.03
0.2993	1.372576	-0.7182	1.44864	-0.01938	40.497	-14.874	1384.71
0.4001	1.341053	-0.9475	1.45838	-0.02244	30.392	-17.234	1674.77
0.5005	1.304777	-1.2035	1.46912	-0.02443	21.717	-18.196	1829.72
0.5993	1.261856	-1.2987	1.48116	-0.02493	15.082	-17.240	1887.68
0.7000	1.209252	-1.3047	1.49562	-0.02325	9.8872	-14.698	1808.45
0.7996	1.144994	-1.1091	1.51276	-0.01875	6.0691	-10.864	1543.05
0.8997	1.063998	-0.6753	1.53321	-0.01099	3.3318	-5.9105	992.99
1.0000	0.960561		1.55693		1.5363		
293.15 K							

0.0000	1.439773		1.42849		61.467		
0.1000	1.418925	-0.2991	1.43230	-0.00879	51.308	-4.1482	547.90
0.2000	1.394944	-0.5177	1.43898	-0.01470	41.414	-8.0314	1005.64
0.2993	1.367853	-0.7326	1.44723	-0.01895	32.388	-11.088	1369.41
0.4001	1.336370	-0.9649	1.45673	-0.02213	24.573	-12.844	1661.94
0.5005	1.300132	-1.2221	1.46737	-0.02413	17.787	-13.595	1822.02
0.5993	1.257281	-1.3203	1.47936	-0.02458	12.540	-12.902	1889.12
0.7000	1.204753	-1.3264	1.49375	-0.02286	8.3653	-11.024	1821.97
0.7996	1.140586	-1.1276	1.51072	-0.01843	5.2492	-8.1533	1577.00
0.8997	1.059697	-0.6848	1.53091	-0.01085	2.9573	-4.4281	1051.90
1.0000	0.956451		1.55438		1.3563		
298.15 K							
0.0000	1.434963		1.42691		49.105		
0.1000	1.414130	-0.3017	1.43114	-0.00827	41.271	-3.0540	528.65
0.2000	1.390192	-0.5269	1.43772	-0.01418	33.636	-5.9085	972.55
0.2993	1.363147	-0.7476	1.44574	-0.01856	26.637	-8.1604	1328.33
0.4001	1.331711	-0.9843	1.45508	-0.02183	20.444	-9.5348	1608.49
0.5005	1.295510	-1.2428	1.46563	-0.02382	15.055	-10.124	1768.26
0.5993	1.252716	-1.3423	1.47759	-0.02420	10.765	-9.6911	1826.60
0.7000	1.200253	-1.3471	1.49190	-0.02248	7.2879	-8.3547	1749.12
0.7996	1.136191	-1.1474	1.50869	-0.01814	4.6421	-6.2392	1491.88
0.8997	1.055443	-0.7003	1.52859	-0.01074	2.6734	-3.4228	967.00
1.0000	0.952341		1.55187		1.3015		
303.15 K							
0.0000	1.430167		1.42536		39.953		
0.1000	1.409355	-0.3056	1.42995	-0.00780	34.050	-2.0288	539.73
0.2000	1.385461	-0.5378	1.43643	-0.01372	27.969	-4.2348	977.88
0.2993	1.358465	-0.7649	1.44424	-0.01823	22.257	-6.0990	1319.20
0.4001	1.327069	-1.0050	1.45342	-0.02155	17.164	-7.2862	1582.96
0.5005	1.290910	-1.2656	1.46391	-0.02351	12.731	-7.8290	1730.62
0.5993	1.248178	-1.3673	1.47583	-0.02384	9.2071	-7.5247	1786.13
0.7000	1.195774	-1.3700	1.49006	-0.02210	6.3377	-6.4923	1716.32
0.7996	1.131807	-1.1680	1.50666	-0.01785	4.1200	-4.8507	1473.62
0.8997	1.051188	-0.7152	1.52630	-0.01062	2.4177	-2.6744	954.69
1.0000	0.948236		1.54936		1.2058		
308.15 K							
0.0000	1.425396		1.42378		33.224		
0.1000	1.404620	-0.3129	1.42865	-0.00743	28.313	-1.7006	519.16
0.2000	1.380762	-0.5508	1.43507	-0.01332	23.374	-3.4303	948.20
0.2993	1.353800	-0.7821	1.44273	-0.01788	18.754	-4.8622	1287.20
0.4001	1.322444	-1.0260	1.45177	-0.02124	14.656	-5.7245	1559.92
0.5005	1.286328	-1.2894	1.46218	-0.02319	10.963	-6.1945	1702.38
0.5993	1.243651	-1.3926	1.47405	-0.02348	8.0178	-5.9682	1758.74
0.7000	1.191328	-1.3971	1.48820	-0.02172	5.5845	-5.1689	1688.69
0.7996	1.127432	-1.1896	1.50464	-0.01753	3.6838	-3.8724	1450.58
0.8997	1.046915	-0.7278	1.52404	-0.01045	2.2052	-2.1377	945.27
1.0000	0.944127		1.54684		1.1232		
313.15 K							
0.0000	1.420644		1.42221		27.680		
0.1000	1.399879	-0.3157	1.42670	-0.00774	23.602	-1.4159	497.42
0.2000	1.376064	-0.5612	1.43323	-0.01343	19.606	-2.7488	917.88
0.2993	1.349160	-0.8014	1.44107	-0.01773	15.882	-3.8295	1255.82
0.4001	1.317847	-1.0499	1.45018	-0.02095	12.501	-4.5268	1519.77
0.5005	1.281766	-1.3149	1.46051	-0.02290	9.4384	-4.9163	1657.05
0.5993	1.239143	-1.4198	1.47224	-0.02325	7.0046	-4.7197	1721.27
0.7000	1.186872	-1.4219	1.48627	-0.02153	4.9305	-4.1128	1645.85
0.7996	1.123067	-1.2123	1.50267	-0.01731	3.2994	-3.0921	1409.96
0.8997	1.042665	-0.7434	1.52201	-0.01020	2.0275	-1.6990	933.33

1.0000	0.940018		1.54448		1.0561		
318.15 K							
0.0000	1.415912		1.42062		23.534		
0.1000	1.395135	-0.3141	1.42597	-0.00678	20.225	-1.0538	502.74
0.2000	1.371374	-0.5699	1.43242	-0.01246	16.903	-2.1207	922.46
0.2993	1.344539	-0.8216	1.43989	-0.01705	13.767	-3.0167	1256.82
0.4001	1.313265	-1.0744	1.44865	-0.02052	10.925	-3.5854	1522.95
0.5005	1.277222	-1.3421	1.45879	-0.02256	8.3347	-3.9113	1666.47
0.5993	1.234649	-1.4484	1.47046	-0.02288	6.2126	-3.8051	1720.22
0.7000	1.182449	-1.4512	1.48445	-0.02112	4.4216	-3.3250	1649.37
0.7996	1.118711	-1.2362	1.50071	-0.01694	3.0050	-2.4952	1427.60
0.8997	1.038413	-0.7592	1.51979	-0.01001	1.8576	-1.3850	936.04
1.0000	0.935905		1.54197		0.9805		
323.15 K							
0.0000	1.411205		1.41906		20.134		
0.1000	1.390486	-0.3270	1.42495	-0.00615	17.371	-0.8420	496.18
0.2000	1.366754	-0.5882	1.43135	-0.01178	14.597	-1.6942	912.20
0.2993	1.339938	-0.8422	1.43857	-0.01650	11.968	-2.4152	1244.95
0.4001	1.308709	-1.1008	1.44711	-0.02009	9.5610	-2.8854	1508.12
0.5005	1.272694	-1.3697	1.45713	-0.02215	7.3589	-3.1584	1652.75
0.5993	1.230171	-1.4779	1.46873	-0.02243	5.5351	-3.0838	1707.16
0.7000	1.178008	-1.4768	1.48264	-0.02064	3.9795	-2.7045	1637.56
0.7996	1.114358	-1.2600	1.49873	-0.01653	2.7390	-2.0313	1421.77
0.8997	1.034168	-0.7756	1.51752	-0.00978	1.7159	-1.1310	933.81
1.0000	0.931792		1.53937		0.9197		
328.15 K							
0.0000	1.406519		1.41754		17.388		
0.1000	1.385825	-0.3336	1.42320	-0.00628	15.089	-0.6463	496.20
0.2000	1.362132	-0.6029	1.42958	-0.01182	12.736	-1.3473	907.35
0.2993	1.335356	-0.8638	1.43688	-0.01638	10.490	-1.9526	1234.43
0.4001	1.304172	-1.1286	1.44549	-0.01980	8.4432	-2.3339	1498.49
0.5005	1.268181	-1.3985	1.45552	-0.02175	6.5477	-2.5705	1642.49
0.5993	1.225709	-1.5090	1.46707	-0.02199	4.9761	-2.5095	1702.90
0.7000	1.173594	-1.5061	1.48084	-0.02023	3.6206	-2.2012	1641.43
0.7996	1.110014	-1.2852	1.49675	-0.01622	2.5042	-1.6719	1412.61
0.8997	1.029921	-0.7924	1.51531	-0.00960	1.5914	-0.9307	933.12
1.0000	0.927674		1.53688		0.8649		
333.15 K							
0.0000	1.401863		1.41607		15.203		
0.1000	1.381198	-0.3417	1.42174	-0.00618	13.193	-0.5719	481.38
0.2000	1.357538	-0.6184	1.42807	-0.01168	11.194	-1.1324	890.89
0.2993	1.330796	-0.8857	1.43531	-0.01619	9.2883	-1.6096	1221.22
0.4001	1.299644	-1.1551	1.44389	-0.01955	7.5157	-1.9324	1481.48
0.5005	1.263665	-1.4246	1.45389	-0.02143	5.8640	-2.1399	1622.21
0.5993	1.221256	-1.5403	1.46540	-0.02162	4.4944	-2.0885	1684.99
0.7000	1.169190	-1.5362	1.47910	-0.01984	3.2881	-1.8463	1615.48
0.7996	1.105672	-1.3107	1.49485	-0.01588	2.2985	-1.4032	1390.64
0.8997	1.025666	-0.8084	1.51318	-0.00940	1.4848	-0.7771	927.32
1.0000	0.923549		1.53446		0.8192		

Tabela P6 Parametri A_p i odgovarajuća srednja kvadratna odstupanja σ za binarne smeše anilin + [bmim][OTf], aniline + [bmim][NTf₂], *N,N*-dimetilanilin + [bmim][OTf] i *N,N*-dimetilanilin + [bmim][NTf₂], na temperaturama $T = (293.15 - 333.15)$ K i na atmosferskom pritisku

<i>Veličina</i>	<i>T/K</i>	A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	σ
Anilin (1) + [bmim][OTf] (2)							
$10^6 \cdot V^E/m^3 \cdot mol^{-1}$	288.15	-4.0543	-3.4438	-2.6990	-0.6542	4.6855	0.0005
	293.15	-4.1633	-3.4986	-2.8005	-0.8045	4.7230	0.0005
	298.15	-4.2808	-3.5462	-2.9184	-0.9557	4.7625	0.0005
	303.15	-4.4043	-3.5726	-3.0747	-1.1669	4.8750	0.0005
	308.15	-4.5336	-3.6343	-3.1610	-1.2889	4.8614	0.0005
	313.15	-4.6590	-3.6946	-3.2791	-1.4234	4.8898	0.0005
	318.15	-4.7919	-3.7471	-3.3987	-1.5881	4.9410	0.0005
	323.15	-4.9248	-3.8054	-3.51978	-1.7451	4.9897	0.0005
	328.15	-5.0638	-3.8680	-3.6398	-1.9050	5.0421	0.0005
	333.15	-5.2014	-3.9355	-3.7667	-2.0743	5.1126	0.0005
Δn_D	288.15	-0.1166	-0.0040	0.0012	0.0178		0.0006
	293.15	-0.1150	-0.0051	0.0004	0.0211		0.0005
	298.15	-0.1135	-0.0032	0.0019	0.0153		0.0006
	303.15	-0.1115	-0.0042	0.0016	0.0185		0.0006
	308.15	-0.1103	-0.0054	-0.0003	0.0184		0.0005
	313.15	-0.1087	-0.0045	0.0007	0.0195		0.0005
	318.15	-0.1074	-0.0050	0.0020	0.0207		0.0006
	323.15	-0.1062	-0.0055	0.0016	0.0229		0.0006
	328.15	-0.1045	-0.0050	0.0026	0.0190		0.0006
	333.15	-0.1033	-0.0056	0.0035	0.0182		0.0006
$\Delta \eta/mPa \cdot s$	288.15	-88.543	14.086	-24.932	-15.783		0.8035
	293.15	-66.365	8.9851	-15.764	-13.350		0.3716
	298.15	-50.036	7.7725	-9.5124	-15.245		0.3694
	303.15	-38.555	5.4886	-4.1468	-15.452		0.2621
	308.15	-30.136	4.5578	-5.0643	-10.985		0.1900
	313.15	-23.823	3.3912	-3.6154	-9.4493		0.1439
	318.15	-18.617	2.4783	-3.1857	-7.0552		0.1188
	323.15	-14.844	2.0073	-2.5636	-6.0688		0.0699
	328.15	-11.985	2.3661	-1.3797	-8.0764		0.0381
	333.15	-9.6898	2.5164	-2.4921	-6.7383		0.0268
$\Delta G^{*E}/kJ \cdot kmol^{-1}$	288.15	5727.55	1236.62	-654.88			8.4515
	293.15	5652.81	1159.85	-541.79			8.0588
	298.15	5612.91	1248.98	-231.22			7.6932
	303.15	5579.37	1208.75	42.53			7.3238
	308.15	5580.75	1347.40	0.68			7.1086
	313.15	5691.73	1347.54	-418.21			17.4500
	318.15	5799.96	1674.20	-97.70			14.1225
	323.15	5791.75	1738.61	63.51			13.3994
	328.15	5728.05	1499.85	-35.05			18.6463
	333.15	5750.16	1572.30	-281.40			20.6359
Anilin (1) + [bmim][NTf ₂] (2)							
$10^6 \cdot V^E/m^3 \cdot mol^{-1}$	288.15	-3.2746	-1.8072	3.2284	-4.5865		0.0131
	293.15	-3.3693	-1.8543	3.2853	-4.9093		0.0136

	298.15	-3.4665	-1.9029	3.3294	-5.2108	0.0149	
	303.15	-3.5767	-1.9149	3.5199	-5.6376	0.0160	
	308.15	-3.6894	-1.9690	3.6484	-5.9795	0.0182	
	313.15	-3.7942	-1.9678	3.7537	-6.4290	0.0215	
	318.15	-3.9137	-2.0095	3.8299	-6.7654	0.0232	
	323.15	-4.0301	-2.0518	3.8468	-7.0265	0.0253	
	328.15	-4.1447	-2.0859	3.7974	-7.2624	0.0267	
	333.15	-4.2490	-2.1559	3.6364	-7.3083	0.0276	
Δn_D	288.15	-0.1497	-0.0699	-0.0511		0.0007	
	293.15	-0.1487	-0.0692	-0.0507		0.0007	
	298.15	-0.1473	-0.0683	-0.0504		0.0007	
	303.15	-0.1460	-0.0679	-0.0503		0.0007	
	308.15	-0.1457	-0.0687	-0.0507		0.0006	
	313.15	-0.1449	-0.0690	-0.0486		0.0005	
	318.15	-0.1443	-0.0690	-0.0425		0.0005	
	323.15	-0.1432	-0.0683	-0.0447		0.0005	
	328.15	-0.1421	-0.0695	-0.0416		0.0004	
	333.15	-0.1413	-0.0673	-0.0422		0.0004	
$\Delta\eta/\text{mPa}\cdot\text{s}$	288.15	-42.408	6.1419	-8.8439		0.2101	
	293.15	-31.967	4.7498	-6.7242		0.1476	
	298.15	-23.557	1.8537	-3.2639		0.1442	
	303.15	-18.034	2.3201	-3.6879		0.0987	
	308.15	-14.255	1.5303	-2.7278		0.0984	
	313.15	-11.345	1.0783	-2.0967		0.0873	
	318.15	-8.9272	0.8051	-1.5880		0.0784	
	323.15	-7.1915	0.6233	-1.0178		0.0628	
	328.15	-5.8313	0.4264	-0.7793		0.0556	
	333.15	-4.8032	0.3561	-0.7522		0.0494	
$\Delta G^{*E}/\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$	288.15	5559.71	2715.49	920.35		19.3814	
	293.15	5562.91	2739.18	964.18		17.0730	
	298.15	5649.67	2752.65	1259.23		20.0153	
	303.15	5707.56	2907.29	1224.87		17.1330	
	308.15	5744.36	2910.44	1305.61		19.6058	
	313.15	5718.76	2838.92	1269.74		21.2901	
	318.15	5823.93	2969.81	1458.38		22.1407	
	323.15	5860.02	2997.13	1552.07		22.4089	
	328.15	5891.19	2999.15	1577.16		22.4089	
	333.15	5932.26	3005.31	1530.51		22.3447	
<i>N,N</i> -dimetilnilin (1) + [bmim][OTf] (2)							
$10^6\cdot V^E/\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$	288.15	-5.1289	-3.7663	4.5686	-14.7340	13.1024	0.0002
	293.15	-5.2131	-3.7880	4.6294	-14.8872	13.2061	0.0004
	298.15	-5.3073	-3.7884	4.6846	-15.2668	13.5444	0.0002
	303.15	-5.4098	-3.7939	4.7082	-15.5494	13.8445	0.0002
	308.15	-5.5214	-3.7914	4.7595	-15.8950	14.1445	0.0005
	313.15	-5.6334	-3.8209	4.8265	-16.1247	14.3614	0.0006
	318.15	-5.7526	-3.8242	4.8483	-16.4815	14.7357	0.0005
	323.15	-5.8741	-3.8188	4.8314	-16.9237	15.2925	0.0004
	328.15	-6.0044	-3.8389	4.8712	-17.2720	15.6872	0.0005
	333.15	-6.1374	-3.8355	4.8835	-17.7386	16.2187	0.0006
Δn_D	288.15	-0.0701	0.0029	-0.0411	0.0676		0.0008

	293.15	-0.0677	0.0031	-0.0449	0.0686	0.0007
	298.15	-0.0646	0.0054	-0.0494	0.0629	0.0006
	303.15	-0.0627	0.0050	-0.0506	0.0625	0.0005
	308.15	-0.0608	0.0045	-0.0485	0.0651	0.0005
	313.15	-0.0589	0.0043	-0.0494	0.0603	0.0006
	318.15	-0.0574	0.0042	-0.0464	0.0583	0.0006
	323.15	-0.0565	0.0053	-0.0405	0.0557	0.0006
	328.15	-0.0546	0.0042	-0.0443	0.0610	0.0005
	333.15	-0.0530	0.0056	-0.0433	0.0681	0.0007
$\Delta\eta/\text{mPa}\cdot\text{s}$	288.15	-162.24	41.310	-31.398	57.821	0.0439
	293.15	-120.48	28.009	-21.659	45.226	0.0378
	298.15	-90.514	18.873	-18.638	38.037	0.0388
	303.15	-69.237	12.057	-15.504	33.436	0.0254
	308.15	-54.354	8.7434	-13.250	28.326	0.0272
	313.15	-42.758	6.1441	-14.062	28.139	0.0229
	318.15	-33.978	4.1240	-11.272	22.828	0.0178
	323.15	-27.353	2.7675	-9.7048	19.871	0.0176
	328.15	-22.211	1.8511	-8.6047	17.463	0.0147
	333.15	-18.451	1.5141	-8.3293	15.783	0.0105
$\Delta G^{\text{E}}/\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$	288.15	6195.49	1989.33	-570.71		26.9528
	293.15	6163.43	2210.71	-164.92		32.5902
	298.15	5924.80	2055.07	-505.48		26.8703
	303.15	5780.59	2145.93	-456.51		32.9596
	308.15	5748.48	2134.82	-565.65		31.5798
	313.15	5602.05	2218.14	-943.61		37.5740
	318.15	5650.58	2323.18	-794.65		36.2771
	323.15	5609.20	2383.41	-791.50		37.4232
	328.15	5580.40	2455.21	-817.90		38.5494
	333.15	5504.67	2523.02	-1025.49		37.6908
<i>N,N</i> -dimetilanilin (1) + [bmim][NTf ₂] (2)						
$10^6\cdot V^{\text{E}}/\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$	288.15	-4.6472	-3.7438	-1.0962	1.6778	0.0410
	293.15	-4.7234	-3.8096	-1.1454	1.7862	0.0404
	298.15	-4.8037	-3.8246	-1.1765	1.6694	0.0409
	303.15	-4.8955	-3.8455	-1.1966	1.5835	0.0407
	308.15	-5.0026	-3.9030	-1.2022	1.6165	0.0380
	313.15	-5.1046	-3.9282	-1.2012	1.5167	0.0379
	318.15	-5.2366	-3.9573	-1.1186	1.3745	0.0330
	323.15	-5.3282	-3.9900	-1.2302	1.3869	0.0367
	328.15	-5.4476	-4.0259	-1.2452	1.3332	0.0356
	333.15	-5.5678	-4.0741	-1.2668	1.3236	0.0316
Δn_{D}	288.15	-0.0977	-0.0269	-0.0242	0.0253	0.0000
	293.15	-0.0965	-0.0262	-0.0193	0.0190	0.0000
	298.15	-0.0952	-0.0252	-0.0159	0.0129	0.0000
	303.15	-0.0940	-0.0240	-0.0127	0.0073	0.0000
	308.15	-0.0927	-0.0233	-0.0101	0.0040	0.0000
	313.15	-0.0916	-0.0243	-0.0124	0.0116	0.0000
	318.15	-0.0902	-0.0246	-0.0045	0.0038	0.0000
	323.15	-0.0886	-0.0243	0.0004	-0.0011	0.0000
	328.15	-0.0870	-0.0227	-0.0016	-0.0003	0.0000
	333.15	-0.0857	-0.0214	-0.0010	-0.0012	0.0000

$\Delta\eta/\text{mPa}\cdot\text{s}$	288.15	-72.785	2.4244	14.472	-7.6696	0.1984
	293.15	-54.327	1.1092	10.534	-4.6512	0.1414
	298.15	-40.495	-0.5991	7.1285	-2.9692	0.0821
	303.15	-31.312	-1.5597	8.1687	-4.4809	0.0677
	308.15	-24.774	-1.3835	5.4580	-2.4964	0.0984
	313.15	-19.477	-1.5518	3.4406	-0.5881	0.0612
	318.15	-15.642	-1.6416	3.3045	-0.9872	0.0581
	323.15	-12.624	-1.5975	2.6386	-0.5883	0.0438
	328.15	-10.280	-1.28678	2.3834	-1.0626	0.0471
	333.15	-8.4808	-1.3960	1.5564	-0.0256	0.0288
$\Delta G^{*E}/\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$	288.15	7314.83	2671.43	1962.09		21.2393
	293.15	7285.33	2936.64	2281.26		31.9475
	298.15	7064.92	2661.06	1811.14		21.2545
	303.15	6919.69	2527.89	2079.04		20.5495
	308.15	6808.88	2567.73	1963.82		23.7784
	313.15	6641.17	2538.31	1870.71		27.2068
	318.15	6665.53	2567.79	1922.90		26.9087
	323.15	6608.37	2585.40	1937.03		27.6569
	328.15	6561.93	2589.87	1985.08		24.8779
	333.15	6488.37	2578.78	1897.92		28.7549

Tabela P7 Gustina ρ , indeks refrakcije n_D , viskoznost η , dopunska molarna zapremina V^E , promena indeksa refrakcije Δn_D , promena viskoznosti $\Delta\eta$, dopunska Gibsova energija aktivacije viskoznoeg toka ΔG^{*E} za četiri binarne smeše PPG 425 (1) + toluen (2), PPG 425 (1) + o-ksilen (2), PPG 425 (1) + m-ksilen(2), PPG 425 (1) + p-ksilen (2), na temperaturama $T = (293.15 - 333.15)$ K i na atmosferskom pritisku ^{P4}

x_1	$10^3 \cdot \rho /$ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	$10^6 \cdot V^E /$ $\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	n_D	Δn_D	$\eta /$ $\text{mPa} \cdot \text{s}$	$\Delta \eta /$ $\text{mPa} \cdot \text{s}$	$\Delta G^{*E} /$ $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
PPG 425 (1) + toluen (2)							
288.15 K							
0.0000	0.87150		1.49921		0.6284		
0.1001	0.91579	-0.1886	1.48429	-0.0099	1.699	-12.55	1382.2
0.2002	0.94353	-0.3612	1.47397	-0.0152	4.091	-23.78	2358.7
0.2998	0.96226	-0.4865	1.46708	-0.0171	8.264	-33.16	2834.7
0.4003	0.97573	-0.5378	1.46278	-0.0164	15.49	-39.61	3065.1
0.5001	0.98565	-0.5244	1.45912	-0.0151	26.28	-42.41	3020.7
0.6000	0.99324	-0.4457	1.45647	-0.0127	41.05	-41.23	2742.2
0.6869	0.99864	-0.3796	1.45427	-0.0106	57.56	-36.55	2357.7
0.7985	1.00426	-0.2607	1.45222	-0.0070	82.10	-27.19	1646.7
0.9000	1.00847	-0.1449	1.45037	-0.0038	108.4	-14.81	872.8
1.0000	1.01191		1.44915		136.7		
293.15 K							
0.0000	0.86684		1.49631		0.5926		
0.1001	0.91124	-0.1813	1.48161	-0.0098	1.495	-8.643	1308.8
0.2002	0.93906	-0.3459	1.47158	-0.0149	3.515	-16.17	2316.0
0.2998	0.95785	-0.4620	1.46485	-0.0168	6.877	-22.31	2793.8
0.4003	0.97141	-0.5140	1.46062	-0.0161	12.32	-26.45	2990.3
0.5001	0.98145	-0.5142	1.45703	-0.0147	20.19	-28.10	2932.5
0.6000	0.98908	-0.4303	1.45443	-0.0124	30.64	-27.17	2651.0
0.6869	0.99452	-0.3664	1.45230	-0.0103	42.42	-23.67	2291.5
0.7985	1.00016	-0.2358	1.45027	-0.0069	58.96	-17.78	1585.5
0.9000	1.00440	-0.1185	1.44833	-0.0038	76.80	-9.616	838.5
1.0000	1.00794		1.44727		95.95		
298.15 K							
0.0000	0.86218		1.49338		0.5698		
0.1001	0.90669	-0.1751	1.47897	-0.0096	1.401	-6.062	1337.3
0.2002	0.93459	-0.3332	1.46920	-0.0146	3.086	-11.27	2270.4
0.2998	0.95348	-0.4489	1.46264	-0.0164	5.907	-15.31	2772.0
0.4003	0.96713	-0.5045	1.45848	-0.0157	10.20	-17.93	2951.6
0.5001	0.97725	-0.5079	1.45494	-0.0144	16.20	-18.81	2885.4
0.6000	0.98492	-0.4202	1.45239	-0.0122	23.92	-17.97	2601.7
0.6869	0.99041	-0.3592	1.45032	-0.0101	32.44	-15.44	2246.2
0.7985	0.99605	-0.2165	1.44832	-0.0067	44.10	-11.46	1552.2
0.9000	1.00032	-0.0949	1.44641	-0.0038	56.47	-6.079	821.8
1.0000	1.00394		1.44540		69.43		
303.15 K							
0.0000	0.85751		1.49042		0.5410		
0.1001	0.90213	-0.1685	1.47648	-0.0092	1.284	-4.371	1331.7
0.2002	0.93012	-0.3207	1.46682	-0.0142	2.718	-8.051	2241.5

0.2998	0.94910	-0.4340	1.46042	-0.0159	5.030	-10.83	2727.6
0.4003	0.96285	-0.4937	1.45631	-0.0153	8.472	-12.52	2909.4
0.5001	0.97305	-0.5014	1.45289	-0.0141	13.13	-12.96	2842.0
0.6000	0.98076	-0.4100	1.45035	-0.0119	18.99	-12.21	2563.0
0.6869	0.98630	-0.3526	1.44838	-0.0098	25.24	-10.40	2204.4
0.7985	0.99194	-0.1936	1.44636	-0.0066	33.76	-7.577	1526.83
0.9000	0.99623	-0.0685	1.44457	-0.0036	42.60	-3.923	810.0
1.0000	0.99995		1.44352		51.63		
308.15 K							
0.0000	0.85283		1.48751		0.5140		
0.1001	0.89756	-0.1625	1.47383	-0.0091	1.181	-3.219	1326.6
0.2002	0.92566	-0.3108	1.46443	-0.0139	2.416	-5.869	2220.3
0.2998	0.94473	-0.4235	1.45822	-0.0155	4.357	-7.794	2704.3
0.4003	0.95857	-0.4860	1.45417	-0.0150	7.136	-8.916	2874.4
0.5001	0.96885	-0.4979	1.45089	-0.0137	10.77	-9.157	2794.4
0.6000	0.97660	-0.4033	1.44833	-0.0117	15.27	-8.534	2516.6
0.6869	0.98219	-0.3485	1.44640	-0.0096	20.03	-7.151	2167.7
0.7985	0.98785	-0.1816	1.44442	-0.0065	26.37	-5.142	1501.7
0.9000	0.99217	-0.0546	1.44251	-0.0037	32.83	-2.616	796.2
1.0000	0.99595		1.44165		39.33		
313.15 K							
0.0000	0.84815		1.48461		0.4854		
0.1001	0.89299	-0.1562	1.47118	-0.0089	1.096	-2.400	1352.9
0.2002	0.92119	-0.3009	1.46205	-0.0136	2.164	-4.342	2219.3
0.2998	0.94038	-0.4174	1.45609	-0.0151	3.782	-5.719	2679.8
0.4003	0.95428	-0.4764	1.45205	-0.0146	6.040	-6.484	2838.1
0.5001	0.96463	-0.4915	1.44885	-0.0133	8.943	-6.581	2757.7
0.6000	0.97244	-0.3978	1.44630	-0.0114	12.47	-6.056	2482.8
0.6869	0.97807	-0.3431	1.44440	-0.0094	16.11	-5.028	2132.9
0.7985	0.98384	-0.2020	1.44244	-0.0064	20.93	-3.570	1478.5
0.9000	0.98821	-0.0829	1.44050	-0.0037	25.80	-1.747	787.5
1.0000	0.99195		1.43976		30.56		
318.15 K							
0.0000	0.84344		1.48171		0.4646		
0.1001	0.88840	-0.1498	1.46862	-0.0087	1.011	-1.840	1325.2
0.2002	0.91672	-0.2927	1.45974	-0.0132	1.947	-3.290	2188.2
0.2998	0.93601	-0.4093	1.45383	-0.0147	3.347	-4.264	2661.0
0.4003	0.95000	-0.4705	1.44991	-0.0143	5.238	-4.769	2817.5
0.5001	0.96042	-0.4871	1.44675	-0.0130	7.611	-4.775	2735.1
0.6000	0.96828	-0.3936	1.44428	-0.0111	10.43	-4.339	2459.1
0.6869	0.97395	-0.3373	1.44235	-0.0092	13.2	-3.560	2091.9
0.7985	0.97976	-0.1943	1.44049	-0.0062	17.00	-2.500	1459.0
0.9000	0.98416	-0.0755	1.43854	-0.0037	20.72	-1.200	777.1
1.0000	0.98794		1.43786		24.30		
323.15 K							
0.0000	0.83873		1.47889		0.4421		
0.1001	0.88381	-0.1440	1.46612	-0.0085	0.9399	-1.422	1327.0
0.2002	0.91225	-0.2852	1.45736	-0.0129	1.764	-2.517	2178.0
0.2998	0.93164	-0.4026	1.45155	-0.0145	2.971	-3.220	2647.1
0.4003	0.94572	-0.4658	1.44773	-0.0140	4.555	-3.564	2795.2

0.5001	0.95621	-0.4831	1.44463	-0.0128	6.491	-3.542	2703.3
0.6000	0.96413	-0.3921	1.44223	-0.0109	8.763	-3.185	2427.0
0.6869	0.96982	-0.3325	1.44051	-0.0089	11.05	-2.561	2082.9
0.7985	0.97567	-0.1870	1.43853	-0.0061	13.97	-1.787	1439.7
0.9000	0.98011	-0.0680	1.43686	-0.0034	16.86	-0.8410	770.1
1.0000	0.98393		1.43597		19.62		
328.15 K							
0.0000	0.83400		1.47596		0.4209		
0.1001	0.87920	-0.1382	1.46354	-0.0082	0.8793	-1.110	1339.8
0.2002	0.90777	-0.2791	1.45496	-0.0126	1.608	-1.950	2173.5
0.2998	0.92726	-0.3953	1.44932	-0.0141	2.650	-2.469	2630.9
0.4003	0.94144	-0.4644	1.44555	-0.0136	3.996	-2.697	2776.9
0.5001	0.95198	-0.4775	1.44254	-0.0125	5.593	-2.664	2675.4
0.6000	0.95997	-0.3900	1.44019	-0.0106	7.448	-2.375	2398.2
0.6869	0.96569	-0.3249	1.43853	-0.0086	9.318	-1.866	2062.9
0.7985	0.97152	-0.1534	1.43658	-0.0059	11.63	-1.304	1420.4
0.9000	0.97598	-0.0288	1.43503	-0.0032	13.91	-0.6095	753.0
1.0000	0.97993		1.43406		16.09		
333.15 K							
0.0000	0.82925		1.47305		0.4035		
0.1001	0.87459	-0.1325	1.46097	-0.0080	0.8386	-0.8687	1383.4
0.2002	0.90329	-0.2736	1.45266	-0.0122	1.473	-1.539	2156.2
0.2998	0.92289	-0.3928	1.44723	-0.0136	2.377	-1.932	2600.4
0.4003	0.93715	-0.4590	1.44349	-0.0132	3.512	-2.106	2730.7
0.5001	0.94775	-0.4726	1.44064	-0.0120	4.864	-2.053	2636.8
0.6000	0.95582	-0.3903	1.43824	-0.0103	6.415	-1.804	2367.2
0.6869	0.96156	-0.3188	1.43664	-0.0083	7.969	-1.382	2040.7
0.7985	0.96750	-0.1712	1.43463	-0.0058	9.830	-0.9741	1398.9
0.9000	0.97201	-0.0539	1.43310	-0.0032	11.71	-0.4157	749.5
1.0000	0.97592		1.43219		13.43		
PPG 425 (1) + o-ksilen (2)							
288.15							
0.0000	0.88391		1.50706		0.8690		
0.1000	0.91924	0.0794	1.48945	-0.0118	2.147	-12.31	1190.8
0.2001	0.94343	0.0396	1.47947	-0.0160	4.999	-23.05	2138.1
0.3001	0.96119	-0.1085	1.47208	-0.0176	10.10	-31.54	2678.6
0.3995	0.97450	-0.2631	1.46653	-0.0174	18.07	-37.08	2885.6
0.5002	0.98463	-0.3190	1.46210	-0.0160	29.52	-39.30	2823.7
0.5993	0.99223	-0.2615	1.45873	-0.0136	45.58	-36.71	2616.7
0.7004	0.99845	-0.1610	1.45542	-0.0111	63.90	-32.12	2129.3
0.7996	1.00331	0.0159	1.45300	-0.0078	85.57	-23.93	1537.2
0.9010	1.00767	0.1315	1.45146	-0.0034	110.5	-12.77	811.9
1.0000	1.01191		1.44915		136.7		
293.15 K							
0.0000	0.87972		1.50440		0.8175		
0.1000	0.91500	0.0949	1.48701	-0.0117	1.886	-8.445	1115.2
0.2001	0.93920	0.0619	1.47719	-0.0158	4.216	-15.64	2051.7
0.3001	0.95699	-0.0840	1.46990	-0.0174	8.168	-21.20	2570.3
0.3995	0.97033	-0.2394	1.46441	-0.0172	14.17	-24.66	2776.9
0.5002	0.98049	-0.2963	1.46006	-0.0158	22.52	-25.88	2718.8

0.5993	0.98813	-0.2392	1.45652	-0.0136	33.81	-24.03	2510.3
0.7004	0.99437	-0.1388	1.45358	-0.0108	46.55	-20.90	2042.8
0.7996	0.99925	0.0367	1.45126	-0.0075	61.53	-15.36	1479.8
0.9010	1.00365	0.1472	1.44944	-0.0035	78.51	-8.025	785.1
1.0000	1.00794		1.44727		95.95		
298.15 K							
0.0000	0.87551		1.50173		0.7661		
0.1000	0.91075	0.1093	1.48461	-0.0115	1.732	-5.901	1148.2
0.2001	0.93496	0.0824	1.47492	-0.0155	3.659	-10.85	2024.7
0.3001	0.95279	-0.0620	1.46771	-0.0171	6.898	-14.48	2548.3
0.3995	0.96616	-0.2183	1.46227	-0.0170	11.58	-16.62	2741.9
0.5002	0.97636	-0.2765	1.45804	-0.0155	17.89	-17.23	2675.2
0.5993	0.98402	-0.2205	1.45462	-0.0134	26.19	-15.73	2465.4
0.7004	0.99029	-0.1223	1.45170	-0.0106	35.39	-13.47	2008.3
0.7996	0.99520	0.0503	1.44932	-0.0074	45.74	-9.938	1442.9
0.9010	0.99963	0.1555	1.44737	-0.0036	57.64	-5.001	770.6
1.0000	1.00394		1.44540		69.43		
303.15 K							
0.0000	0.87130		1.49906		0.7220		
0.1000	0.90650	0.1235	1.48223	-0.0113	1.571	-4.241	1131.1
0.2001	0.93072	0.1026	1.47265	-0.0153	3.191	-7.718	1981.9
0.3001	0.94858	-0.0400	1.46556	-0.0168	5.817	-10.18	2489.8
0.3995	0.96199	-0.1969	1.46016	-0.0167	9.497	-11.56	2674.8
0.5002	0.97222	-0.2564	1.45598	-0.0153	14.36	-11.83	2613.5
0.5993	0.97991	-0.2020	1.45263	-0.0131	20.56	-10.68	2402.8
0.7004	0.98621	-0.1063	1.44973	-0.0104	27.37	-9.005	1961.7
0.7996	0.99116	0.0622	1.44739	-0.0073	34.78	-6.652	1403.5
0.9010	0.99561	0.1621	1.44537	-0.0036	43.36	-3.229	753.8
1.0000	0.99995		1.44352		51.63		
308.15 K							
0.0000	0.86707		1.49644		0.6809		
0.1000	0.90224	0.1370	1.47986	-0.0111	1.434	-3.112	1120.3
0.2001	0.92658	0.1026	1.47039	-0.0151	2.815	-5.600	1952.6
0.3001	0.94436	-0.0192	1.46337	-0.0166	4.972	-7.308	2442.6
0.3995	0.95781	-0.1775	1.45814	-0.0164	7.903	-8.219	2616.4
0.5002	0.96813	-0.2564	1.45386	-0.0152	11.72	-8.295	2559.5
0.5993	0.97580	-0.1858	1.45054	-0.0131	16.44	-7.407	2347.2
0.7004	0.98213	-0.0932	1.44770	-0.0104	21.54	-6.210	1913.3
0.7996	0.98703	0.1004	1.44546	-0.0072	27.05	-4.533	1370.7
0.9010	0.99148	0.2094	1.44365	-0.0034	33.31	-2.191	734.0
1.0000	0.99595		1.44165		39.33		
313.15 K							
0.0000	0.86283		1.49383		0.6437		
0.1000	0.89797	0.1507	1.47748	-0.0109	1.321	-2.314	1121.7
0.2001	0.92221	0.1446	1.46826	-0.0148	2.501	-4.128	1924.7
0.3001	0.94015	0.0021	1.46133	-0.0163	4.280	-5.340	2391.4
0.3995	0.95362	-0.1563	1.45602	-0.0162	6.630	-5.965	2551.3
0.5002	0.96393	-0.2213	1.45187	-0.0149	9.628	-5.978	2491.1
0.5993	0.97168	-0.1669	1.44857	-0.0129	13.30	-5.270	2286.3
0.7004	0.97804	-0.0765	1.44579	-0.0102	17.19	-4.404	1860.8

0.7996	0.98307	0.0775	1.44354	-0.0070	21.40	-3.158	1337.5
0.9010	0.98760	0.1600	1.44186	-0.0033	26.08	-1.521	714.2
1.0000	0.99195		1.43976		30.56		
318.15 K							
0.0000	0.85857		1.49124		0.6080		
0.1000	0.89369	0.1636	1.47528	-0.0106	1.211	-1.766	1106.3
0.2001	0.91796	0.1643	1.46594	-0.0146	2.238	-3.111	1903.1
0.3001	0.93592	0.0230	1.45911	-0.0161	3.765	-3.953	2377.5
0.3995	0.94944	-0.1362	1.45386	-0.0160	5.726	-4.348	2536.6
0.5002	0.95980	-0.2090	1.44985	-0.0147	8.120	-4.340	2457.9
0.5993	0.96756	-0.1493	1.44660	-0.0126	11.03	-3.783	2249.4
0.7004	0.97395	-0.0615	1.44382	-0.0100	14.08	-3.125	1831.2
0.7996	0.97895	0.1127	1.44159	-0.0070	17.34	-2.213	1316.6
0.9010	0.98347	0.2072	1.43973	-0.0034	20.90	-1.058	701.0
1.0000	0.98794		1.43786		24.30		
323.15 K							
0.0000	0.85430		1.48869		0.5757		
0.1000	0.88941	0.1759	1.47295	-0.0105	1.120	-1.360	1102.1
0.2001	0.91370	0.1812	1.46360	-0.0145	2.017	-2.369	1885.7
0.3001	0.93170	0.0428	1.45685	-0.0160	3.313	-2.978	2345.6
0.3995	0.94524	-0.1163	1.45169	-0.0159	4.945	-3.239	2499.6
0.5002	0.95564	-0.1881	1.44775	-0.0146	6.906	-3.196	2421.8
0.5993	0.96343	-0.1302	1.44454	-0.0126	9.228	-2.761	2209.7
0.7004	0.96986	-0.0463	1.44183	-0.0099	11.66	-2.251	1800.6
0.7996	0.97491	0.1173	1.43961	-0.0069	14.23	-1.579	1293.9
0.9010	0.97947	0.2018	1.43788	-0.0033	16.99	-0.746	688.0
1.0000	0.98393		1.43597		19.62		
328.15 K							
0.0000	0.85001		1.48604		0.5458		
0.1000	0.88512	0.1877	1.47048	-0.0104	1.040	-1.061	1100.9
0.2001	0.90943	0.1995	1.46130	-0.0143	1.831	-1.826	1874.3
0.3001	0.92746	0.0632	1.45467	-0.0158	2.940	-2.271	2319.2
0.3995	0.94104	-0.0956	1.44959	-0.0157	4.312	-2.444	2467.7
0.5002	0.95146	-0.1631	1.44568	-0.0144	5.936	-2.385	2389.6
0.5993	0.95929	-0.1101	1.44256	-0.0123	7.821	-2.041	2174.6
0.7004	0.96576	-0.0287	1.43990	-0.0097	9.785	-1.648	1771.7
0.7996	0.97088	0.1181	1.43766	-0.0068	11.83	-1.142	1273.2
0.9010	0.97550	0.1858	1.43588	-0.0033	14.02	-0.530	676.6
1.0000	0.97993		1.43406		16.09		
333.15 K							
0.0000	0.84571		1.48345		0.5221		
0.1000	0.88081	0.1995	1.46822	-0.0101	0.9862	-0.827	1132.5
0.2001	0.90516	0.2171	1.45917	-0.0140	1.678	-1.427	1860.5
0.3001	0.92322	0.0843	1.45270	-0.0154	2.645	-1.750	2298.2
0.3995	0.93684	-0.0740	1.44769	-0.0153	3.818	-1.860	2441.8
0.5002	0.94729	-0.1447	1.44373	-0.0141	5.177	-1.801	2358.3
0.5993	0.95515	-0.0875	1.44048	-0.0122	6.743	-1.514	2146.0
0.7004	0.96166	-0.0095	1.43784	-0.0097	8.360	-1.202	1749.9
0.7996	0.96675	0.1551	1.43573	-0.0067	10.03	-0.818	1258.3
0.9010	0.97138	0.2283	1.43417	-0.0031	11.78	-0.372	667.7

1.0000	0.97592		1.43219		13.43		
PPG 425 (1) + m-ksilen (2)							
288.15 K							
0.0000	0.86856		1.49868		0.6601		
0.0997	0.90777	0.0499	1.48574	-0.0080	1.610	-12.60	1089.2
0.2008	0.93495	0.0046	1.47572	-0.0130	3.743	-24.16	1952.1
0.3000	0.95418	-0.0546	1.46859	-0.0152	7.702	-33.78	2479.7
0.4008	0.96895	-0.1253	1.46362	-0.0152	14.12	-41.07	2663.0
0.4999	0.98012	-0.1490	1.46001	-0.0139	24.86	-43.39	2735.0
0.6014	0.98927	-0.1637	1.45738	-0.0115	37.86	-44.55	2399.0
0.6995	0.99649	-0.1690	1.45493	-0.0091	55.94	-39.96	2012.4
0.8004	1.00266	-0.1633	1.45248	-0.0066	78.86	-30.70	1456.1
0.9000	1.00774	-0.1245	1.45021	-0.0039	105.9	-17.18	784.9
1.0000	1.01191		1.44915		136.7		
293.15 K							
0.0000	0.86427		1.49604		0.6322		
0.0997	0.90355	0.0495	1.48315	-0.0080	1.450	-8.677	1033.3
0.2008	0.93068	0.0242	1.47342	-0.0129	3.228	-16.49	1882.1
0.3000	0.94995	-0.0336	1.46641	-0.0150	6.365	-22.86	2390.0
0.4008	0.96477	-0.1051	1.46146	-0.0150	11.22	-27.61	2557.2
0.4999	0.97596	-0.1228	1.45791	-0.0138	19.20	-28.79	2636.2
0.6014	0.98516	-0.1452	1.45537	-0.0114	28.55	-29.35	2313.0
0.6995	0.99243	-0.1577	1.45290	-0.0090	41.29	-26.07	1942.0
0.8004	0.99861	-0.1450	1.45056	-0.0064	57.08	-19.85	1404.9
0.9000	1.00373	-0.1167	1.44855	-0.0036	75.49	-10.94	760.4
1.0000	1.00794		1.44727		95.95		
298.15 K							
0.0000	0.85998		1.49339		0.5969		
0.0997	0.89926	0.0588	1.48071	-0.0079	1.338	-6.115	1059.5
0.2008	0.92640	0.0418	1.47112	-0.0127	2.851	-11.53	1880.8
0.3000	0.94572	-0.0151	1.46423	-0.0148	5.448	-15.80	2384.9
0.4008	0.96058	-0.0882	1.45936	-0.0148	9.341	-18.85	2552.7
0.4999	0.97181	-0.1071	1.45584	-0.0136	15.43	-19.36	2610.9
0.6014	0.98105	-0.1310	1.45335	-0.0112	22.38	-19.58	2287.5
0.6995	0.98835	-0.1447	1.45100	-0.0088	31.58	-17.20	1913.9
0.8004	0.99455	-0.1332	1.44863	-0.0063	42.72	-12.97	1380.5
0.9000	0.99970	-0.1061	1.44660	-0.0036	55.41	-7.137	742.6
1.0000	1.00394		1.44540		69.43		
303.15 K							
0.0000	0.85568		1.49074		0.5674		
0.0997	0.89494	0.0718	1.47824	-0.0078	1.229	-4.424	1052.3
0.2008	0.92212	0.0595	1.46884	-0.0125	2.524	-8.266	1856.9
0.3000	0.94149	0.0025	1.46209	-0.0145	4.670	-11.22	2349.3
0.4008	0.95639	-0.0707	1.45732	-0.0145	7.790	-13.24	2513.1
0.4999	0.96767	-0.0930	1.45383	-0.0133	12.51	-13.43	2562.5
0.6014	0.97694	-0.1176	1.45134	-0.0110	17.77	-13.48	2243.9
0.6995	0.98425	-0.1279	1.44906	-0.0086	24.57	-11.74	1873.6
0.8004	0.99049	-0.1227	1.44672	-0.0062	32.67	-8.768	1350.5
0.9000	0.99564	-0.0895	1.44473	-0.0035	41.75	-4.779	726.3
1.0000	0.99995		1.44352		51.63		

308.15 K							
0.0000	0.85136		1.48810		0.5396		
0.0997	0.89055	0.0950	1.47588	-0.0076	1.135	-3.268	1051.1
0.2008	0.91783	0.0759	1.46653	-0.0123	2.252	-6.053	1837.7
0.3000	0.93725	0.0192	1.45981	-0.0144	4.046	-8.130	2319.3
0.4008	0.95220	-0.0552	1.45507	-0.0144	6.582	-9.505	2478.7
0.4999	0.96353	-0.0820	1.45186	-0.0130	10.30	-9.509	2518.9
0.6014	0.97282	-0.1059	1.44933	-0.0109	14.36	-9.483	2205.1
0.6995	0.98016	-0.1164	1.44708	-0.0085	19.51	-8.179	1839.6
0.8004	0.98644	-0.1150	1.44484	-0.0061	25.54	-6.045	1325.4
0.9000	0.99162	-0.0882	1.44279	-0.0035	32.20	-3.255	713.0
1.0000	0.99595		1.44165		39.33		
313.15 K							
0.0000	0.84703		1.48545		0.5112		
0.0997	0.88621	0.1081	1.47328	-0.0076	1.057	-2.483	1074.7
0.2008	0.91353	0.0925	1.46422	-0.0121	2.028	-4.531	1838.7
0.3000	0.93300	0.0361	1.45771	-0.0140	3.513	-6.040	2284.1
0.4008	0.94800	-0.0386	1.45314	-0.0140	5.587	-6.990	2439.2
0.4999	0.95937	-0.0677	1.44989	-0.0127	8.556	-6.902	2475.0
0.6014	0.96871	-0.0931	1.44732	-0.0107	11.74	-6.839	2167.0
0.6995	0.97607	-0.1051	1.44509	-0.0084	15.72	-5.835	1808.5
0.8004	0.98238	-0.1060	1.44294	-0.0059	20.29	-4.278	1301.3
0.9000	0.98759	-0.0829	1.44110	-0.0032	25.27	-2.291	698.7
1.0000	0.99195		1.43976		30.56		
318.15 K							
0.0000	0.84269		1.48280		0.4888		
0.0997	0.88185	0.1235	1.47066	-0.0077	0.9774	-1.883	1051.7
0.2008	0.90923	0.1087	1.46195	-0.0119	1.832	-3.424	1815.1
0.3000	0.92875	0.0532	1.45567	-0.0136	3.125	-4.508	2275.2
0.4008	0.94380	-0.0226	1.45121	-0.0136	4.865	-5.168	2425.4
0.4999	0.95522	-0.0552	1.44795	-0.0124	7.283	-5.037	2450.1
0.6014	0.96458	-0.0800	1.44529	-0.0105	9.834	-4.962	2144.3
0.6995	0.97197	-0.0924	1.44311	-0.0082	12.97	-4.186	1788.0
0.8004	0.97831	-0.0963	1.44109	-0.0057	16.51	-3.041	1285.4
0.9000	0.98356	-0.0784	1.43936	-0.0030	20.30	-1.618	687.9
1.0000	0.98794		1.43786		24.30		
323.15 K							
0.0000	0.83833		1.48017		0.4657		
0.0997	0.87748	0.1372	1.46797	-0.0078	0.9115	-1.462	1054.8
0.2008	0.90492	0.1244	1.45962	-0.0117	1.667	-2.633	1808.9
0.3000	0.92449	0.0691	1.45367	-0.0132	2.780	-3.432	2259.4
0.4008	0.93959	-0.0071	1.44934	-0.0131	4.245	-3.898	2404.8
0.4999	0.95106	-0.0447	1.44595	-0.0121	6.233	-3.749	2421.9
0.6014	0.96045	-0.0675	1.44324	-0.0104	8.300	-3.674	2119.2
0.6995	0.96788	-0.0803	1.44103	-0.0082	10.81	-3.068	1767.3
0.8004	0.97424	-0.0863	1.43925	-0.0055	13.59	-2.204	1268.3
0.9000	0.97952	-0.0733	1.43769	-0.0027	16.55	-1.158	680.1
1.0000	0.98393		1.43597		19.62		
328.15 K							
0.0000	0.83395		1.47757		0.4439		

0.0997	0.87305	0.1600	1.46550	-0.0077	0.8524	-1.150	1059.7
0.2008	0.90061	0.1395	1.45728	-0.0116	1.525	-2.051	1806.5
0.3000	0.92023	0.0846	1.45154	-0.0130	2.490	-2.648	2247.0
0.4008	0.93537	0.0085	1.44720	-0.0129	3.738	-2.977	2389.6
0.4999	0.94690	-0.0327	1.44392	-0.0119	5.389	-2.828	2397.6
0.6014	0.95632	-0.0538	1.44123	-0.0102	7.086	-2.758	2097.6
0.6995	0.96377	-0.0650	1.43909	-0.0080	9.115	-2.281	1746.7
0.8004	0.97016	-0.0733	1.43736	-0.0054	11.35	-1.619	1255.5
0.9000	0.97548	-0.0665	1.43582	-0.0026	13.69	-0.8393	673.0
1.0000	0.97993		1.43406		16.09		
333.15 K							
0.0000	0.82956		1.47489		0.4273		
0.0997	0.86868	0.1710	1.46294	-0.0077	0.8014	-0.9209	1049.5
0.2008	0.89628	0.1557	1.45498	-0.0114	1.409	-1.622	1799.2
0.3000	0.91596	0.1012	1.44946	-0.0126	2.228	-2.100	2196.6
0.4008	0.93115	0.0263	1.44533	-0.0125	3.308	-2.330	2350.6
0.4999	0.94272	-0.0159	1.44197	-0.0116	4.678	-2.209	2344.5
0.6014	0.95218	-0.0381	1.43930	-0.0099	6.130	-2.109	2070.5
0.6995	0.95966	-0.0506	1.43718	-0.0078	7.772	-1.757	1713.1
0.8004	0.96609	-0.0627	1.43545	-0.0053	9.552	-1.282	1218.2
0.9000	0.97144	-0.0614	1.43396	-0.0025	11.43	-0.7034	644.4
1.0000	0.97592		1.43219		13.43		
PPG 425 (1) + p-ksilen (2)							
288.15 K							
0.0000	0.86531		1.49770		0.6862		
0.0500	0.88751	0.0275					
0.1000	0.90566	0.0075	1.48429	-0.0086	1.578	-12.71	951.6
0.2003	0.93363	-0.1274	1.47452	-0.0135	3.556	-24.38	1756.4
0.3003	0.95346	-0.2050	1.46746	-0.0157	7.193	-34.34	2241.8
0.4001	0.96854	-0.3210	1.46250	-0.0158	13.29	-41.82	2466.4
0.4999	0.97999	-0.3428	1.45896	-0.0145	22.08	-46.61	2399.5
0.5998	0.98936	-0.4158	1.45662	-0.0120	35.37	-46.91	2216.9
0.6987	0.99668	-0.3878	1.45441	-0.0094	52.96	-42.78	1860.3
0.8010	1.00285	-0.3097	1.45240	-0.0064	76.74	-32.91	1361.6
0.9001	1.00774	-0.1672	1.45082	-0.0032	104.5	-18.61	740.7
1.0000	1.01191		1.44915		136.7		
293.15 K							
0.0000	0.86097		1.49493		0.6515		
0.0500	0.88317	0.0346					
0.1000	0.90131	0.0211	1.48177	-0.0084	1.389	-8.793	856.5
0.2003	0.92932	-0.1081	1.47220	-0.0132	3.075	-16.67	1706.6
0.3003	0.94918	-0.1784	1.46528	-0.0153	5.967	-23.30	2172.4
0.4001	0.96433	-0.3004	1.46042	-0.0154	10.60	-28.18	2379.1
0.4999	0.97583	-0.3244	1.45692	-0.0142	17.42	-30.87	2357.8
0.5998	0.98520	-0.3858	1.45461	-0.0117	27.09	-30.24	2173.0
0.6987	0.99258	-0.3680	1.45243	-0.0092	39.57	-27.67	1823.3
0.8010	0.99882	-0.3053	1.45046	-0.0063	55.60	-21.39	1316.0
0.9001	1.00374	-0.1656	1.44890	-0.0031	74.49	-11.95	717.3
1.0000	1.00794		1.44727		95.95		
298.15 K							

0.0000	0.85663		1.49221		0.6168		
0.0500	0.87881	0.0421					
0.1000	0.89696	0.0338	1.47936	-0.0082	1.314	-6.185	935.9
0.2003	0.92501	-0.0912	1.46989	-0.0129	2.722	-11.68	1702.4
0.3003	0.94487	-0.1516	1.46317	-0.0150	5.123	-16.16	2166.6
0.4001	0.96012	-0.2823	1.45838	-0.0151	8.836	-19.32	2369.3
0.4999	0.97167	-0.3094	1.45493	-0.0139	14.10	-20.92	2341.4
0.5998	0.98106	-0.3691	1.45264	-0.0120	21.27	-20.62	2145.5
0.6987	0.98848	-0.3547	1.45047	-0.0090	30.30	-18.40	1793.1
0.8010	0.99479	-0.3040	1.44851	-0.0062	41.67	-14.07	1292.6
0.9001	0.99975	-0.1741	1.44698	-0.0031	54.74	-7.820	701.1
1.0000	1.00394		1.44540		69.43		
303.15 K							
0.0000	0.85227		1.48939		0.5848		
0.0500	0.87445	0.0488					
0.1000	0.89261	0.0458	1.47680	-0.0080	1.208	-4.481	935.6
0.2003	0.92069	-0.0741	1.46757	-0.0126	2.418	-8.391	1688.7
0.3003	0.94060	-0.1321	1.46103	-0.0146	4.410	-11.50	2143.0
0.4001	0.95590	-0.2647	1.45635	-0.0147	7.402	-13.61	2341.7
0.4999	0.96751	-0.2942	1.45297	-0.0135	11.51	-14.59	2309.9
0.5998	0.97693	-0.3538	1.45068	-0.0117	16.94	-14.26	2109.3
0.6987	0.98438	-0.3405	1.44851	-0.0088	23.63	-12.62	1759.0
0.8010	0.99074	-0.2984	1.44659	-0.0061	31.91	-9.562	1266.1
0.9001	0.99572	-0.1689	1.44506	-0.0031	41.25	-5.279	685.3
1.0000	0.99995		1.44352		51.63		
308.15 K							
0.0000	0.84791		1.48658		0.5548		
0.0500	0.87008	0.0566					
0.1000	0.88824	0.0576	1.47427	-0.0078	1.115	-3.317	936.1
0.2003	0.91637	-0.0584	1.46527	-0.0123	2.162	-6.159	1677.0
0.3003	0.93632	-0.1113	1.45884	-0.0142	3.833	-8.366	2122.1
0.4001	0.95168	-0.2487	1.45427	-0.0143	6.270	-9.799	2314.2
0.4999	0.96334	-0.2820	1.45094	-0.0132	9.539	-10.40	2282.1
0.5998	0.97279	-0.3391	1.44870	-0.0114	13.74	-10.07	2078.3
0.6987	0.98028	-0.3299	1.44655	-0.0086	18.81	-8.842	1729.9
0.8010	0.98668	-0.2938	1.44465	-0.0059	24.97	-6.644	1243.6
0.9001	0.99169	-0.1623	1.44313	-0.0030	31.82	-3.640	672.0
1.0000	0.99595		1.44165		39.33		
313.15 K							
0.0000	0.84353		1.48391		0.5247		
0.0500	0.86569	0.0640					
0.1000	0.88387	0.0690	1.47187	-0.0076	1.039	-2.489	962.9
0.2003	0.91205	-0.0424	1.46305	-0.0120	1.951	-4.589	1683.5
0.3003	0.93209	-0.1051	1.45671	-0.0139	3.344	-6.200	2099.0
0.4001	0.94746	-0.2316	1.45220	-0.0140	5.331	-7.210	2278.4
0.4999	0.95916	-0.2669	1.44885	-0.0130	7.956	-7.582	2246.8
0.5998	0.96866	-0.3275	1.44668	-0.0112	11.25	-7.288	2043.0
0.6987	0.97618	-0.3172	1.44456	-0.0085	15.16	-6.348	1699.3
0.8010	0.98262	-0.2891	1.44270	-0.0058	19.85	-4.731	1221.1
0.9001	0.98761	-0.1401	1.44120	-0.0030	24.98	-2.578	658.9

1.0000	0.99195		1.43976		30.56		
318.15 K							
0.0000	0.83914		1.48126		0.5001		
0.0500	0.86130	0.0711					
0.1000	0.87950	0.0797	1.46938	-0.0075	0.9605	-1.920	946.0
0.2003	0.90771	-0.0273	1.46070	-0.0119	1.764	-3.503	1667.2
0.3003	0.92791	-0.1113	1.45442	-0.0138	2.976	-4.672	2094.8
0.4001	0.94323	-0.2153	1.44997	-0.0139	4.655	-5.368	2274.5
0.4999	0.95499	-0.2536	1.44678	-0.0128	6.812	-5.587	2232.3
0.5998	0.96453	-0.3189	1.44463	-0.0111	9.440	-5.337	2025.7
0.6987	0.97207	-0.3052	1.44255	-0.0084	12.52	-4.607	1682.1
0.8010	0.97855	-0.2806	1.44074	-0.0058	16.16	-3.402	1207.4
0.9001	0.98358	-0.1405	1.43929	-0.0029	20.08	-1.843	649.9
1.0000	0.98794		1.43786		24.30		
323.15 K							
0.0000	0.83474		1.47853		0.4753		
0.0500	0.85689	0.0780					
0.1000	0.87512	0.0896	1.46694	-0.0073	0.8959	-1.494	953.7
0.2003	0.90338	-0.0127	1.45838	-0.0116	1.607	-2.703	1666.3
0.3003	0.92357	-0.0825	1.45225	-0.0135	2.653	-3.571	2086.7
0.4001	0.93899	-0.1989	1.44786	-0.0136	4.070	-4.065	2260.3
0.4999	0.95081	-0.2406	1.44470	-0.0126	5.834	-4.212	2211.8
0.5998	0.96040	-0.3131	1.44258	-0.0109	7.979	-3.979	2004.7
0.6987	0.96796	-0.2924	1.44057	-0.0082	10.45	-3.406	1663.6
0.8010	0.97449	-0.2760	1.43880	-0.0056	13.32	-2.492	1193.5
0.9001	0.97952	-0.1273	1.43735	-0.0029	16.37	-1.339	641.9
1.0000	0.98393		1.43597		19.62		
328.15 K							
0.0000	0.83032		1.47608		0.4521		
0.0500	0.85248	0.0847					
0.1000	0.87072	0.0999	1.46451	-0.0074	0.8376	-1.178	961.7
0.2003	0.89904	0.0014	1.45600	-0.0117	1.472	-2.113	1668.8
0.3003	0.91929	-0.0683	1.45017	-0.0133	2.383	-2.766	2082.7
0.4001	0.93475	-0.1826	1.44596	-0.0133	3.589	-3.120	2249.8
0.4999	0.94662	-0.2264	1.44254	-0.0125	5.068	-3.202	2199.7
0.5998	0.95625	-0.2961	1.44046	-0.0104	6.829	-3.003	1989.5
0.6987	0.96384	-0.2777	1.43872	-0.0080	8.825	-2.553	1648.1
0.8010	0.97042	-0.2696	1.43684	-0.0056	11.12	-1.856	1180.7
0.9001	0.97546	-0.1120	1.43537	-0.0029	13.54	-0.993	633.9
1.0000	0.97993		1.43406		16.09		
333.15 K							
0.0000	0.82588		1.47328		0.4342		
0.0500	0.84805	0.0901					
0.1000	0.86632	0.1095	1.46203	-0.0071	0.7606	-0.973	859.4
0.2003	0.89468	0.0159	1.45383	-0.0112	1.364	-1.673	1673.1
0.3003	0.91495	-0.0422	1.44796	-0.0130	2.155	-2.182	2064.1
0.4001	0.93050	-0.1650	1.44378	-0.0131	3.190	-2.443	2224.4
0.4999	0.94242	-0.2107	1.44065	-0.0121	4.451	-2.479	2179.4
0.5998	0.95207	-0.2743	1.43869	-0.0104	5.920	-2.309	1968.6
0.6987	0.95971	-0.2603	1.43673	-0.0078	7.562	-1.952	1628.2

0.8010	0.96635	-0.2620	1.43493	-0.0054	9.437	-1.406	1166.5
0.9001	0.97141	-0.1053	1.43354	-0.0028	11.37	-0.760	622.8
1.0000	0.97592		1.43219		13.43		

Tabela P8 Parametri A_p odgovarajuća srednja kvadratna odstupanja σ za binarne smeše PPG 425 (1) + toluen (2), PPG 425 (1) + o-ksilen (2), PPG 425 (1) + m-ksilen(2), PPG 425 (1) + p-ksilen (2), na temperaturama $T = (293.15 - 333.15)$ K i na atmosferskom pritisku

Veličina	T/K	A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	σ
PPG 425 (1) + toluen (2)							
$V^E/10^{-6} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	288.15	-2.0875	0.8806	0.3911	-0.9315	-	0.0055
	293.15	-2.0114	0.7824	0.5517	-0.5548	-	0.0077
	298.15	-1.9924	0.7103	0.7672	-0.2379	-	0.0095
	303.15	-1.9681	0.6451	1.0206	0.0748	-	0.0119
	308.15	-1.9499	0.5952	1.1628	0.2406	-	0.0136
	313.15	-1.9024	0.5967	0.8984	-0.1392	-	0.0127
	318.15	-1.8851	0.5773	0.9971	-0.1044	-	0.0126
	323.15	-1.8732	0.5573	1.0924	-0.0528	-	0.0118
	328.15	-1.8825	0.5466	1.4934	0.3317	-	0.0112
	333.15	-1.8494	0.5699	1.2729	-0.0395	-	0.0082
Δn_D	288.15	-0.0604	0.0425	-0.0245	-	-	0.0002
	293.15	-0.0589	0.0412	-0.0263	-	-	0.0001
	298.15	-0.0576	0.0404	-0.0261	-	-	0.0002
	303.15	-0.0563	0.0389	-0.0238	-	-	0.0001
	308.15	-0.0549	0.0372	-0.0254	-	-	0.0001
	313.15	-0.0532	0.0360	-0.0269	-	-	0.0001
	318.15	-0.0519	0.0346	-0.0265	-	-	0.0001
	323.15	-0.0512	0.0352	-0.0231	-	-	0.0001
	328.15	-0.0500	0.0347	-0.0211	-	-	0.0001
	333.15	-0.0480	0.0333	-0.0220	-	-	0.0001
$\Delta \eta / \text{mPas} \cdot \text{s}$	288.15	-169.62	-16.94	30.24	-	-	0.4184
	293.15	-112.4	-7.892	18.52	-	-	0.3373
	298.15	-75.26	-0.6691	12.89	-	-	0.2402
	303.15	-51.83	3.018	9.104	-	-	0.1648
	308.15	-36.63	3.986	6.834	-	-	0.1187
	313.15	-26.33	4.411	5.292	-	-	0.0900
	318.15	-19.10	4.417	3.485	-	-	0.0723
	323.15	-14.17	3.962	2.586	-	-	0.0576
	328.15	-10.66	3.458	1.745	-	-	0.0502
	333.15	-8.214	3.143	1.690	-	-	0.0509
$\Delta G^{*E} / \text{kJ} \cdot \text{kmol}^{-1}$	288.15	12074.1	-3524.6	885.6	-	-	17.4
	293.15	11768.5	-3561.7	704.3	-	-	25.4
	298.15	11571.4	-3654.8	860.5	-	-	13.4
	303.15	11387.0	-3646.5	926.3	-	-	10.2
	308.15	11211.9	-3700.7	1041.0	-	-	10.2
	313.15	11046.6	-3810.7	1351.8	-	-	10.2
	318.15	10952.6	-3803.2	1159.6	-	-	3.8
	323.15	10844.2	-3834.8	1274.8	-	-	8.5
	328.15	10729.7	-3946.1	1411.8	-	-	11.5
	333.15	10557.9	-3973.1	1782.7	-	-	22.4
PPG 425 (1) + o-ksilen (2)							
$V^E/10^{-6} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	288.15	-1.2760	-0.4802	3.9108	1.2027	-	0.0059
	293.15	-1.1902	-0.5176	4.0920	1.2078	-	0.0065
	298.15	-1.1060	-0.5481	4.1458	1.2063	-	0.0069

	303.15	-1.0228	-0.5813	4.1902	1.1849	-	0.0073
	308.15	-1.0254	-0.6589	4.6272	1.7929	-	0.0073
	313.15	-0.8789	-0.5663	4.3774	0.6039	-	0.0089
	318.15	-0.8256	-0.7595	4.5930	1.5566	-	0.0157
	323.15	-0.7529	-0.7077	4.5694	1.2474	-	0.0151
	328.15	-0.6525	-0.6264	4.5689	0.5800	-	0.0113
	333.15	-0.5749	-0.7277	4.7188	1.3227	-	0.0164
Δn_D	288.15	-0.0631	0.0382	-0.0345	0.0114	-	0.0003
	293.15	-0.0631	0.0358	-0.0261	0.0220	-	0.0003
	298.15	-0.0620	0.0345	-0.0268	0.0239	-	0.0003
	303.15	-0.0608	0.0346	-0.0277	0.0215	-	0.0003
	308.15	-0.0605	0.0333	-0.0248	0.0224	-	0.0003
	313.15	-0.0596	0.0326	-0.0232	0.0233	-	0.0003
	318.15	-0.0585	0.0336	-0.0248	0.0182	-	0.0002
	323.15	-0.0583	0.0330	-0.0237	0.0189	-	0.0002
	328.15	-0.0573	0.0336	-0.0236	0.0166	-	0.0002
	333.15	-0.0563	0.0300	-0.0233	0.0238	-	0.0002
$\Delta\eta/\text{mPas}\cdot\text{s}$	288.15	-155.8	-4.122	24.78	-	-	0.3472
	293.15	-103.1	1.318	18.24	-	-	0.2394
	298.15	-68.47	5.900	11.93	-	-	0.1816
	303.15	-47.10	6.829	8.431	-	-	0.1534
	308.15	-33.18	6.259	5.595	-	-	0.1147
	313.15	-23.81	5.498	3.665	-	-	0.0788
	318.15	-17.24	4.871	2.277	-	-	0.6691
	323.15	-12.69	4.277	1.402	-	-	0.0375
	328.15	-9.482	3.690	0.9026	-	-	0.0280
	333.15	-7.120	3.247	0.5318	-	-	0.0221
$\Delta G^{*E}/\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$	288.15	11424.9	-3022.1	-75.5	-	-	24.9
	293.15	10926.3	-2899.1	126.5	-	-	32.1
	298.15	10778.0	-3036.2	128.2	-	-	21.5
	303.15	10519.4	-3005.0	154.7	-	-	19.1
	308.15	10291.1	-3016.3	222.3	-	-	16.8
	313.15	10034.6	-3001.6	406.3	-	-	13.2
	318.15	9923.7	-3055.6	371.9	-	-	15.7
	323.15	9765.3	-3082.1	464.3	-	-	13.5
	328.15	9623.1	-3130.7	582.0	-	-	11.7
	333.15	9491.8	-3181.2	801.1	-	-	8.0
PPG 425 (1) + m-ksilen (2)							
$V^E/10^{-6}\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$	288.15	-0.5962	-0.4439	0.2843	-1.1982	-	0.0050
	293.15	-0.4913	-0.5881	0.2176	-0.9257	-	0.0104
	298.15	-0.4284	-0.6350	0.2949	-0.8414	-	0.0105
	303.15	-0.3722	-0.6520	0.4561	-0.7665	-	0.0084
	308.15	-0.3280	-0.6372	0.5763	-0.9974	-	0.0064
	313.15	-0.2711	-0.6657	0.6438	-1.0341	-	0.0060
	318.15	-0.2211	-0.6565	0.7384	-1.1664	-	0.0048
	323.15	-0.1789	-0.6366	0.8324	-1.2878	-	0.0041
	328.15	-0.1310	-0.1310	-0.1310	-0.1310	-	0.0046
	333.15	-0.0638	-0.6103	1.0431	-1.5585	-	0.0043
Δn_D	288.15	-0.0554	0.0366	-0.0169	-0.0113	-	0.0009
	293.15	-0.0547	0.0377	-0.0153	-0.0110	-	0.0008

	298.15	-0.0537	0.0390	-0.0155	-0.0150	-	0.0008
	303.15	-0.0528	0.0357	-0.0157	-0.0088	-	0.0008
	308.15	-0.0519	0.0384	-0.0153	-0.0160	-	0.0008
	313.15	-0.0508	0.0351	-0.0148	-0.0073	-	0.0007
	318.15	-0.0496	0.0317	-0.0152	0.0013	-	0.0008
	323.15	-0.0482	0.0283	-0.0157	0.0113	-	0.0007
	328.15	-0.0476	0.0275	-0.0154	0.0127	-	0.0007
	333.15	-0.0462	0.0253	-0.0167	0.0172	-	0.0007
$\Delta\eta/\text{mPas}\cdot\text{s}$	288.15	-179.0	-38.30	20.74	10.71	-	0.5770
	293.15	-119.0	-19.95	15.21	6.544	-	0.4225
	298.15	-80.24	-8.670	10.11	2.749	-	0.3065
	303.15	-55.84	-3.240	7.194	1.421	-	0.2373
	308.15	-39.67	-0.4275	5.172	1.047	-	0.1834
	313.15	-28.93	1.343	3.821	-0.0812	-	0.1489
	318.15	-21.12	1.982	2.536	-0.1316	-	0.1115
	323.15	-15.81	2.246	1.915	-0.1565	-	0.0925
	328.15	-11.98	2.229	1.411	-0.0703	-	0.0760
	333.15	-9.256	2.252	0.4218	-1.232	-	0.0492
$\Delta G^{*E}/\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$	288.15	10697.4	-2542.8	-273.7	-	-	31.3
	293.15	10321.4	-2399.2	-343.1	-	-	33.5
	298.15	10241.0	-2581.4	-260.6	-	-	28.3
	303.15	10024.7	-2564.2	11.3	-	-	27.8
	308.15	9890.0	-2664.9	-87.7	-	-	24.7
	313.15	9702.8	-2783.2	273.6	-	-	21.4
	318.15	9607.7	-2724.4	228.3	-	-	21.9
	323.15	9507.8	-2784.9	287.9	-	-	20.2
	328.15	9422.5	-2839.7	383.6	-	-	18.8
	333.15	9269.2	-2914.8	299.5	-	-	13.0
PPG 425 (1) + p-ksilen (2)							
$V^E/10^{-6}\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$	288.15	-1.0341	0.1715	-0.6304	-3.5982	-	0.0112
	293.15	-0.9985	0.1287	-0.5625	-3.6314	-	0.0111
	298.15	-0.9648	0.067	-0.5187	-3.6516	-	0.0116
	303.15	-0.9371	0.0609	-0.4381	-3.7342	-	0.0103
	308.15	-0.9005	0.0141	-0.3752	-3.7472	-	0.0109
	313.15	-0.8577	-0.0343	-0.3248	-3.7583	-	0.0114
	318.15	-0.8196	-0.1301	-0.2223	-3.5913	-	1.9034
	323.15	-0.7895	-0.1097	-0.1728	-3.7372	-	0.0133
	328.15	-0.753	-0.1468	-0.1115	-3.7199	-	0.0137
	333.15	-0.7141	-0.1732	-0.0518	-3.7063	-	0.0147
Δn_D	288.15	-0.0577	0.0375	-0.0124	-	-	0.0001
	293.15	-0.0563	0.0365	-0.0122	-	-	0.0001
	298.15	-0.0556	0.0350	-0.0115	-	-	0.0001
	303.15	-0.0540	0.0339	-0.0120	-	-	0.0001
	308.15	-0.0528	0.0332	-0.0115	-	-	0.0001
	313.15	-0.0515	0.0320	-0.0114	-	-	0.0001
	318.15	-0.0513	0.0320	-0.0105	-	-	0.0001
	323.15	-0.0504	0.0309	-0.0095	-	-	0.0001
	328.15	-0.0493	0.0305	-0.0099	-	-	0.0001
	333.15	-0.0482	0.0301	-0.0102	-	-	0.0001
$\Delta\eta/\text{mPas}\cdot\text{s}$	288.15	-186.5	-45.69	19.60	-	-	0.3017

	293.15	-122.9	-24.87	10.51	-	-	0.1676
	298.15	-83.60	-12.82	8.455	-	-	0.0562
	303.15	-58.36	-6.447	6.080	-	-	0.0333
	308.15	-41.61	-2.696	4.416	-	-	0.1093
	313.15	-30.34	-0.7823	3.300	-	-	0.0073
	318.15	-22.44	0.3965	2.342	-	-	0.0812
	323.15	-16.84	1.014	1.696	-	-	0.0046
	328.15	-12.86	1.322	1.324	-	-	0.0035
	333.15	-9.915	1.410	1.410	-	-	0.0141
$\Delta G^{*E}/\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$	288.15	9720.0	-2043.4	-140.3	-	-	30.7
	293.15	9516.2	-1834.1	-612.2	-	-	40.2
	298.15	9362.2	-2099.1	18.0	-	-	22.4
	303.15	9231.1	-2164.1	38.1	-	-	20.7
	308.15	9123.9	-2222.7	38.2	-	-	18.2
	313.15	8999.1	-2332.4	142.7	-	-	9.9
	318.15	8917.5	-2360.9	215.1	-	-	15.6
	323.15	8839.3	-2434.9	314.2	-	-	14.4
	328.15	8785.8	-2519.3	377.8	-	-	13.0
	333.15	8763.2	-2406.5	-204.5	-	-	37.5

Table P9 Dopunske molarne veličine aktivacije viskoznog toka: dopunska Gibsova energija (ΔG^{*E}), entropija (ΔS^{*E}) i entalpija (ΔH^{*E}); $T\Delta S^{*E}$ entropijski doprinos ΔG^{*E} , na 298.15 K

T/K	$\Delta G^{*E} /$ kJ kmol ⁻¹	$\Delta S^{*E} /$ kJ kmol ⁻¹ K ⁻¹	$T\Delta S^{*E} /$ kJ kmol ⁻¹	$\Delta H^{*E} /$ kJ kmol ⁻¹	$V_{m1}/V_{m2}^{(a)}$
PPG425 + toluen					
288.15	2682.43	-6.93	-2030.39	595.87	3.96
293.15	2711.05	-7.08	-2109.43	652.04	
298.15	2738.15	-7.54	-2285.45	601.62	
303.15	2761.65	-8.32	-2563.18	452.70	
308.15	2802.98	-9.41	-2947.34	198.47	
313.15	2846.75	-10.82	-3442.65	-144.36	
318.15	2892.85	-12.54	-4053.85	-595.90	
323.15	2942.13	-14.58	-4785.66	-1161.00	
328.15	3018.53	-16.94	-5642.80	-1843.53	
333.15	2639.48	-7.09	-2043.60	-2624.27	
PPG425 + o-ksilen					
288.15	2372.95	-10.66	-3072.86	-699.91	3.49
293.15	2405.77	-11.35	-3329.11	-923.34	
298.15	2441.32	-12.27	-3659.37	-1218.05	
303.15	2480.92	-13.41	-4067.01	-1586.09	
308.15	2508.65	-14.78	-4555.41	-2046.76	
313.15	2572.77	-16.37	-5127.94	-2555.16	
318.15	2629.85	-18.19	-5787.97	-3158.12	
323.15	2694.50	-20.23	-6538.89	-3844.39	
328.15	2731.57	-22.50	-7384.06	-4652.49	
333.15	2856.22	-24.99	-8326.86	-5470.64	
PPG425 + m-ksilen					
288.15	2317.30	-10.07	-2901.31	-584.01	3.43
293.15	2355.63	-11.44	-3352.36	-996.73	
298.15	2376.95	-12.83	-3826.02	-1449.07	
303.15	2401.93	-14.26	-4322.75	-1920.83	
308.15	2425.70	-15.72	-4842.99	-2417.29	
313.15	2472.50	-17.20	-5387.20	-2914.70	
318.15	2506.18	-18.72	-5955.81	-3449.64	
323.15	2560.25	-20.27	-6549.30	-3989.05	
328.15	2580.35	-21.84	-7168.09	-4587.74	
333.15	2674.35	-23.45	-7812.65	-5138.30	
PPG425 + p-ksilen					
288.15	2190.80	-8.75	-2522.70	-331.90	3.41
293.15	2196.45	-9.80	-2873.96	-677.51	
298.15	2209.83	-10.88	-3244.65	-1034.82	
303.15	2229.38	-11.99	-3635.22	-1405.85	
308.15	2249.78	-13.13	-4046.13	-1796.36	
313.15	2280.98	-14.30	-4477.83	-2196.85	
318.15	2307.78	-15.50	-4930.75	-2622.98	
323.15	2340.55	-16.73	-5405.36	-3064.81	
328.15	2379.05	-17.99	-5902.11	-3523.06	
333.15	2430.00	-19.27	-6421.43	-3991.43	

Table P10 Rezultati predskazivanja i korelisanja viskoznosti za ispitivane binarne sisteme, na temperaturama (288.15 - 333.15) K i atmosferskom pritisku

T/K	Prediktivni modeli		Korelativni modeli	
	UNIFAC- VISCO	ASOG- VISCO	McAlister - 3	McAlister - 4
	$PD_{max}/\%$	$PD_{max}/\%$	$PD_{max}/\%$	$PD_{max}/\%$
PPG 425 (1) + toluen (2)				
288.15	14.93	14.70	0.12	0.08
293.15	14.88	16.48	0.12	0.15
298.15	15.09	17.94	0.13	0.15
303.15	15.24	19.28	0.16	0.12
308.15	15.32	20.69	0.16	0.14
313.15	15.38	21.96	0.19	0.14
318.15	15.45	23.32	0.20	0.06
323.15	15.54	24.58	0.23	0.14
328.15	15.54	25.90	0.25	0.18
333.15	15.42	27.17	0.34	0.24
PPG 425 (1) + o-ksilen (2)				
288.15	16.28	18.29	0.19	0.15
293.15	16.12	20.77	0.21	0.15
298.15	16.37	22.63	0.24	0.17
303.15	16.41	24.77	0.24	0.17
308.15	16.43	26.96	0.24	0.16
313.15	16.33	29.27	0.25	0.15
318.15	16.42	31.15	0.26	0.15
323.15	16.41	33.10	0.26	0.13
328.15	16.38	34.97	0.28	0.11
333.15	16.40	36.71	0.32	0.10
PPG 425 (1) + m-ksilen (2)				
288.15	14.17	24.54	0.50	0.41
293.15	14.12	21.10	0.59	0.48
298.15	14.45	22.80	0.64	0.51
303.15	14.58	24.73	0.74	0.57
308.15	14.70	26.61	0.86	0.62
313.15	14.77	28.50	0.96	0.59
318.15	14.94	30.24	1.02	0.67
323.15	15.03	31.92	1.16	0.71
328.15	15.12	33.52	1.38	0.74
333.15	14.97	35.72	0.90	0.54
PPG 425 (1) + p-ksilen (2)				
288.15	12.73	21.12	0.14	0.08
293.15	12.84	23.23	0.09	0.07
298.15	13.11	25.05	0.10	0.05
303.15	13.25	26.99	0.11	0.06
308.15	13.38	28.88	0.12	0.06
313.15	13.44	30.79	0.13	0.04
318.15	13.61	32.50	0.14	0.05
323.15	13.71	34.19	0.16	0.05
328.15	13.81	35.78	0.17	0.05
333.18	13.80	37.53	0.19	0.07

Tabla P11 Gustina ρ , indeks refrakcije n_D , viskoznost η , dopunska molarna zapremina V^E , promena indeksa refrakcije Δn_D , promena viskoznosti $\Delta\eta$, dopunska Gibsova energija aktivacije viskoznog toka ΔG^{*E} za četiri binarne smeše PPG 2000 (1) + toluen (2), PPG 2000 (1) + o-ksilen (2), PPG 2000 (1) + m-ksilen(2), PPG 2000 (1) + p-ksilen (2), na temperaturama $T = (293.15 - 323.15)$ K i na atmosferskom pritisku (0.1 MPa)

x_1	$10^3\rho/kg\cdot m^{-3}$	$10^{-6}V^E/m^3\cdot mol^{-1}$	n_D	Δn_D	$\eta/mPa\cdot s$	$\Delta\eta/mPa\cdot s$	$\Delta G^{*E}/J\cdot mol^{-1}$
PPG 2000 (1) + benzen (2)							
288.15 K							
0.0000	0.884288	-	1.50348	-	0.7018	-	-
0.1003	0.974775	-0.7645	1.47142	-0.0269	60.41	1.371	11057.501
0.1997	0.991057	-1.1810	1.45887	-0.0344	150.3	33.48	12138.442
0.3003	0.997852	-1.4847	1.45553	-0.0326	246.3	70.96	11772.958
0.4005	1.001454	-1.6814	1.45458	-0.0285	343.8	110.1	10819.882
0.4899	1.003367	-1.6909	1.45442	-0.0241	418.9	133.1	9624.410
0.5958	1.004680	-1.3837	1.45347	-0.0196	489.4	142.1	7934.866
0.6993	1.005342	-0.7174	1.45329	-0.0145	533.2	125.7	6061.078
0.7958	1.005709	0.0684	1.45276	-0.0101	561.9	98.36	4205.841
0.9000	1.006186	0.6217	1.45342	-0.0041	574.5	50.29	2084.029
1.0000	1.007138	-	1.45244	-	582.3	-	-
293.15 K							
0.0000	0.878959	-	1.50024	-	0.6553	-	-
0.1003	0.970415	-0.7668	1.46904	-0.0262	48.03	5.866	10920.572
0.1997	0.986956	-1.2042	1.45690	-0.0334	114.5	31.16	11981.544
0.3003	0.993865	-1.5278	1.45362	-0.0317	182.6	57.68	11610.147
0.4005	0.997520	-1.7347	1.45270	-0.0277	250.8	84.44	10667.816
0.4899	0.999455	-1.7433	1.45253	-0.0234	302.7	99.34	9488.019
0.5958	1.000783	-1.4280	1.45160	-0.0191	350.6	103.4	7818.663
0.6993	1.001455	-0.7504	1.45143	-0.0141	380.4	90.41	5971.227
0.7958	1.001831	0.0441	1.45090	-0.0098	398.3	68.35	4132.428
0.9000	1.002315	0.6058	1.45164	-0.0039	408.7	35.54	2052.045
1.0000	1.003264	0.0000	1.45059	-	414.5	-	-
298.15 K							
0.0000	0.873619	-	1.49693	-	0.6151	-	-
0.1003	0.966084	-0.7741	1.46671	-0.0254	39.11	8.005	10811.858
0.1997	0.982863	-1.2231	1.45494	-0.0324	89.22	27.89	11841.897
0.3003	0.989878	-1.5574	1.45171	-0.0307	139.2	47.27	11471.091
0.4005	0.993588	-1.7717	1.45081	-0.0268	188.3	65.96	10536.099
0.4899	0.995550	-1.7796	1.45064	-0.0227	225.4	75.82	9370.416
0.5958	0.996897	-1.4575	1.44974	-0.0185	259.2	77.47	7719.552
0.6993	0.997584	-0.7724	1.44957	-0.0137	280.1	66.91	5893.991
0.7958	0.997969	0.0327	1.44903	-0.0096	292.7	50.17	4077.963
0.9000	0.998461	0.6030	1.44962	-0.0039	300.2	25.95	2024.701
1.0000	0.999415	0.0000	1.44874	-	304.6	-	-
303.15 K							
0.0000	0.868266	-	1.49340	-	0.5770	-	-
0.1003	0.961776	-0.7888	1.46442	-0.0243	32.33	8.808	10726.423
0.1997	0.978782	-1.2466	1.45297	-0.0311	70.99	24.73	11732.429
0.3003	0.985894	-1.5872	1.44980	-0.0296	108.5	39.23	11359.558

0.4005	0.989656	-1.8040	1.44892	-0.0259	144.7	52.54	10429.020
0.4899	0.991648	-1.8137	1.44875	-0.0219	171.7	59.09	9271.724
0.5958	0.993016	-1.4849	1.44789	-0.0178	196.3	59.47	7637.763
0.6993	0.993713	-0.7841	1.44772	-0.0132	211.3	50.77	5829.693
0.7958	0.994105	0.0377	1.44719	-0.0092	220.4	37.78	4032.653
0.9000	0.994605	0.6193	1.44774	-0.0038	226.0	19.47	2002.790
1.0000	0.995574	-	1.44690	-	229.3	-	-
308.15 K							
0.0000	0.862898	-	1.49004	-	0.5414	-	-
0.1003	0.957478	-0.8078	1.46201	-0.0235	27.29	9.083	10679.209
0.1997	0.974712	-1.2768	1.45099	-0.0301	57.54	21.84	11647.906
0.3003	0.981918	-1.6226	1.44791	-0.0286	86.32	32.89	11272.316
0.4005	0.985728	-1.8402	1.44705	-0.0250	113.6	42.54	10343.532
0.4899	0.987742	-1.8421	1.44688	-0.0211	133.6	46.82	9189.992
0.5958	0.989135	-1.5113	1.44602	-0.0172	152.1	46.64	7572.426
0.6993	0.989847	-0.8011	1.44586	-0.0127	163.2	39.38	5779.274
0.7958	0.990252	0.0255	1.44535	-0.0089	169.8	29.17	3995.511
0.9000	0.990763	0.6122	1.44592	-0.0036	174.2	15.08	1986.745
1.0000	0.991735	-	1.44507	-	176.6	-	-
313.15 K							
0.0000	0.85751	-	1.48677	-	0.5054	-	-
0.1003	0.95319	-0.8321	1.45969	-0.0227	23.13	8.743	10641.749
0.1997	0.97065	-1.3149	1.44897	-0.0291	47.35	19.20	11593.426
0.3003	0.97795	-1.6667	1.44600	-0.0277	69.88	27.82	11214.304
0.4005	0.98181	-1.8840	1.44517	-0.0242	90.89	34.96	10284.999
0.4899	0.98380	-1.8385	1.44500	-0.0204	106.2	37.84	9136.305
0.5958	0.98525	-1.5380	1.44417	-0.0167	120.1	37.10	7522.834
0.6993	0.98598	-0.8163	1.44402	-0.0123	128.4	31.14	5737.934
0.7958	0.98639	0.0245	1.44350	-0.0086	133.7	23.00	3970.938
0.9000	0.98691	0.6196	1.44409	-0.0035	137.0	11.89	1973.552
1.0000	0.98790	-	1.44324	-	138.9	-	-
318.15 K							
0.0000	0.85211	-	1.48351	-	0.4767	-	-
0.1003	0.94890	-0.8579	1.45738	-0.0219	19.91	8.337	10609.360
0.1997	0.96660	-1.3582	1.44701	-0.0281	39.58	17.01	11541.745
0.3003	0.97400	-1.7187	1.44411	-0.0268	57.56	23.86	11161.824
0.4005	0.97790	-1.9367	1.44329	-0.0234	74.00	29.21	10231.098
0.4899	0.97996	-1.9341	1.44313	-0.0198	85.72	31.04	9080.524
0.5958	0.98139	-1.5779	1.44231	-0.0161	96.34	29.94	7471.784
0.6993	0.98213	-0.8432	1.44216	-0.0119	102.8	24.90	5699.063
0.7958	0.98255	0.0104	1.44167	-0.0084	106.8	18.28	3940.507
0.9000	0.98308	0.6169	1.44213	-0.0035	109.5	9.400	1958.855
1.0000	0.98406	-	1.44143	-	111.1	-	-
323.15 K							
0.0000	0.84668	-	1.48021	-	0.4466	-	-
0.1003	0.94461	-0.8855	1.45513	-0.0210	17.35	7.888	10615.294
0.1997	0.96256	-1.4060	1.44513	-0.0270	33.38	14.97	11511.853
0.3003	0.97006	-1.7779	1.44220	-0.0258	48.01	20.56	11134.773
0.4005	0.97400	-1.9981	1.44144	-0.0225	60.96	24.50	10194.586
0.4899	0.97608	-1.9752	1.44127	-0.0190	70.14	25.64	9042.269
0.5958	0.97753	-1.6214	1.44048	-0.0155	78.56	24.53	7439.882
0.6993	0.97828	-0.8762	1.44032	-0.0115	83.50	20.17	5668.729

0.7958	0.97872	-0.0125	1.43982	-0.0081	86.66	14.66	3917.004
0.9000	0.97925	0.6035	1.44021	-0.0035	88.92	7.501	1946.554
1.0000	0.98024	-	1.43960	-	90.37	-	-
PPG 2000 (1) + toluen (2)							
288.15 K							
0.0000	0.87150	-	1.49921	-	0.6284	-	-
0.1001	0.96596	-0.8597	1.47188	-0.0227	41.182	-17.4992	10122.466
0.2002	0.98575	-1.1911	1.46093	-0.0290	110.01	-6.8985	11321.419
0.2998	0.99400	-1.2995	1.45726	-0.0280	205.84	31.5181	11279.965
0.4003	0.99863	-1.3156	1.45576	-0.0248	297.27	64.0803	10405.925
0.5001	1.00143	-1.2483	1.45460	-0.0213	375.25	84.9932	9103.779
0.6000	1.00312	-1.0480	1.45348	-0.0183	431.00	88.6268	7495.372
0.6869	1.00457	-0.7010	1.45265	-0.0139	487.02	80.7781	6053.009
0.7985	1.00546	-0.2703	1.45307	-0.0090	522.06	59.5694	3945.019
0.9000	1.00625	0.1538	1.45403	-0.0031	553.21	29.0566	1978.591
1.0000	1.00714	-	1.45244	-	582.32	-	-
293.15 K							
0.0000	0.86684	-	1.49631	-	0.5926	-	-
0.1001	0.96179	-0.8671	1.46970	-0.0220	33.659	-8.2376	10015.889
0.2002	0.98170	-1.1989	1.45892	-0.0283	85.437	2.1123	11179.673
0.2998	0.99001	-1.3088	1.45535	-0.0273	165.58	41.4066	11291.620
0.4003	0.99469	-1.3294	1.45384	-0.0242	227.40	61.3443	10348.972
0.5001	0.99751	-1.2685	1.45271	-0.0208	283.11	76.4534	9059.270
0.6000	0.99923	-1.0785	1.45160	-0.0178	320.23	76.4868	7454.427
0.6869	1.00069	-0.7310	1.44956	-0.0149	349.98	60.7977	5965.603
0.7985	1.00158	-0.2875	1.45121	-0.0088	364.27	35.0667	3826.175
0.9000	1.00239	0.1275	1.44738	-0.0078	380.56	7.4890	1860.930
1.0000	1.00326	-	1.45059	-	414.46	-	-
298.15 K							
0.0000	0.86218	-	1.49338	-	0.5698	-	-
0.1000	0.95763	-0.8734	1.46737	-0.0216	28.203	-2.7110	9909.994
0.2001	0.97766	-1.2006	1.45693	-0.0276	68.562	7.2126	11053.095
0.3001	0.98604	-1.3089	1.45343	-0.0266	127.54	36.1808	11131.813
0.3995	0.99076	-1.3343	1.45194	-0.0236	172.92	50.7860	10208.394
0.5002	0.99362	-1.2818	1.45083	-0.0203	212.41	60.4548	8930.119
0.5993	0.99535	-1.0940	1.44974	-0.0174	238.78	59.5844	7349.468
0.7004	0.99683	-0.7492	1.44760	-0.0147	259.43	46.8460	5878.797
0.7996	0.99772	-0.2962	1.44935	-0.0086	269.57	27.5843	3773.475
0.9010	0.99853	0.1327	1.44553	-0.0077	281.74	7.5208	1843.713
1.0000	0.99942	-	1.44874	-	304.62	-	-
303.15 K							
0.0000	0.85751	-	1.49042	-	0.5410	-	-
0.1000	0.95347	-0.8817	1.46517	-0.0209	23.888	0.5139	9844.586
0.2001	0.97364	-1.2065	1.45495	-0.0268	55.669	9.3931	10958.682
0.3001	0.98207	-1.3091	1.45151	-0.0259	100.34	31.4826	11017.623
0.3995	0.98682	-1.3287	1.45004	-0.0230	134.42	42.4139	10107.540
0.5002	0.98970	-1.2744	1.44895	-0.0198	163.02	48.5678	8834.287
0.5993	0.99146	-1.0958	1.44788	-0.0170	182.19	47.2327	7271.123
0.7004	0.99296	-0.7482	1.44709	-0.0130	196.84	36.7644	5812.771
0.7996	0.99387	-0.3005	1.44750	-0.0084	204.22	22.0205	3733.931
0.9010	0.99469	0.1289	1.44834	-0.0029	212.92	6.4693	1825.397
1.0000	0.99557	-	1.44690	-	229.33	-	-

308.15 K							
0.0000	0.85283	-	1.48751	-	0.5140	-	-
0.1000	0.94932	-0.8934	1.46287	-0.0204	20.495	2.4046	9797.015
0.2001	0.96962	-1.2179	1.45297	-0.0261	45.916	10.1964	10882.173
0.3001	0.97811	-1.3190	1.44960	-0.0252	80.434	27.3318	10922.751
0.3995	0.98291	-1.3405	1.44813	-0.0224	106.20	35.2777	10014.749
0.5002	0.98582	-1.2885	1.44708	-0.0193	127.77	39.5632	8753.990
0.5993	0.98759	-1.1022	1.44601	-0.0166	142.03	38.0516	7205.384
0.7004	0.98910	-0.7574	1.44395	-0.0140	152.71	29.3903	5757.638
0.7996	0.99001	-0.2988	1.44565	-0.0082	158.21	17.8599	3701.339
0.9010	0.99084	0.1374	1.44197	-0.0073	164.52	5.4967	1809.618
1.0000	0.99174	-	1.44507	-	176.63	-	-
313.15 K							
0.0000	0.84815	-	1.48461	-	0.4854	-	-
0.1000	0.94518	-0.9083	1.46069	-0.0198	17.624	3.3238	9757.248
0.2001	0.96562	-1.2375	1.45100	-0.0254	38.349	10.1925	10831.570
0.3001	0.97417	-1.3372	1.44767	-0.0246	65.533	23.7140	10855.858
0.3995	0.97899	-1.3544	1.44624	-0.0218	85.592	29.7644	9953.077
0.5002	0.98192	-1.2980	1.44522	-0.0188	102.02	32.6147	8695.454
0.5993	0.98371	-1.1144	1.44417	-0.0161	112.88	31.0690	7157.561
0.7004	0.98524	-0.7647	1.44228	-0.0135	120.85	23.8411	5716.889
0.7996	0.98616	-0.3056	1.44381	-0.0079	125.08	14.6855	3678.283
0.9010	0.98700	0.1290	1.44228	-0.0051	129.59	4.5255	1795.021
1.0000	0.98790	-	1.44324	-	138.91	-	-
318.15 K							
0.0000	0.84344	-	1.48171	-	0.4646	-	-
0.1000	0.94104	-0.9249	1.45847	-0.0192	15.452	3.9440	9725.802
0.2001	0.96162	-1.2595	1.44901	-0.0247	32.524	9.9394	10776.702
0.3001	0.97023	-1.3597	1.44575	-0.0239	54.245	20.7387	10784.567
0.3995	0.97509	-1.3754	1.44435	-0.0213	69.987	25.2825	9882.978
0.5002	0.97804	-1.3175	1.44333	-0.0183	82.784	27.2240	8632.758
0.5993	0.97985	-1.1368	1.44231	-0.0157	91.174	25.6994	7105.870
0.7004	0.98138	-0.7775	1.44162	-0.0120	97.259	19.6344	5674.241
0.7996	0.98232	-0.3165	1.44195	-0.0078	100.54	12.2150	3653.244
0.9010	0.98316	0.1283	1.44266	-0.0028	104.19	4.1332	1789.160
1.0000	0.98406	-	1.44143	-	111.12	-	-
323.15 K							
0.0000	0.83873	-	1.47889	-	0.4421	-	-
0.1000	0.93690	-0.9433	1.45632	-0.0187	13.601	4.1843	9708.698
0.2001	0.95763	-1.2846	1.44704	-0.0240	27.854	9.4357	10744.507
0.3001	0.96630	-1.3866	1.44382	-0.0233	45.479	18.1850	10737.605
0.3995	0.97120	-1.4034	1.44244	-0.0207	58.049	21.6542	9835.645
0.5002	0.97418	-1.3463	1.44148	-0.0178	68.186	22.9695	8589.505
0.5993	0.97600	-1.1598	1.44046	-0.0153	74.791	21.5177	7070.243
0.7004	0.97755	-0.8049	1.43869	-0.0128	79.540	16.3926	5644.938
0.7996	0.97849	-0.3368	1.44012	-0.0076	82.138	10.2947	3636.998
0.9010	0.97934	0.1137	1.43686	-0.0067	84.798	3.4222	1776.707
1.0000	0.98024	-	1.43960	-	90.368	-	-
PPG 2000 (1) + o-ksilen (2)							
288.15 K							
0.0000	0.88391	-	1.50706	-	0.8690	-	-
0.0998	0.96497	-0.4220	1.47338	-0.0282	39.03	-19.87	9129.037

0.1999	0.98438	-0.6285	1.45927	-0.0369	118.2	1.069	10691.188
0.3003	0.99298	-0.7301	1.45540	-0.0353	208.3	32.84	10580.540
0.3992	0.99771	-0.7374	1.45321	-0.0320	286.2	53.23	9710.444
0.4994	1.00082	-0.7062	1.45187	-0.0279	356.7	65.41	8471.430
0.5991	1.00286	-0.6346	1.45084	-0.0235	417.6	68.34	7015.130
0.7005	1.00439	-0.5130	1.45013	-0.0187	469.3	61.11	5373.353
0.7965	1.00551	-0.3906	1.45036	-0.0132	514.7	50.73	3736.087
0.9114	1.00653	-0.1968	1.45157	-0.0057	560.8	30.04	1678.316
1.0000	1.00714	-	1.45244	-	582.3	-	-
293.15 K							
0.0000	0.87972	-	1.50440	-	0.8175	-	-
0.0998	0.96093	-0.4156	1.47103	-0.0280	31.55	-10.55	8984.444
0.1999	0.98039	-0.6150	1.45732	-0.0363	90.86	7.356	10519.014
0.3003	0.98904	-0.7220	1.45347	-0.0348	156.4	31.41	10417.398
0.3992	0.99379	-0.7347	1.45131	-0.0316	211.4	45.42	9559.621
0.4994	0.99693	-0.7162	1.44999	-0.0275	260.3	52.92	8337.776
0.5991	0.99898	-0.6541	1.44896	-0.0232	302.5	53.90	6906.143
0.7005	1.00052	-0.5340	1.44828	-0.0184	337.8	47.22	5289.508
0.7965	1.00164	-0.4133	1.44858	-0.0130	364.9	34.59	3652.291
0.9114	1.00266	-0.2114	1.44977	-0.0056	395.0	17.20	1621.257
1.0000	1.00326	-	1.45059	-	414.5	-	-
298.15 K							
0.0000	0.87551	-	1.50173	-	0.7661	-	-
0.0998	0.95689	-0.4076	1.46883	-0.0276	26.55	-4.538	8929.863
0.1999	0.97641	-0.5986	1.45536	-0.0358	71.83	10.32	10395.941
0.3003	0.98510	-0.7063	1.45153	-0.0343	120.4	28.40	10287.266
0.3992	0.98988	-0.7209	1.44942	-0.0312	160.4	38.32	9438.678
0.4994	0.99304	-0.7095	1.44812	-0.0271	195.6	43.06	8232.545
0.5991	0.99511	-0.6507	1.44711	-0.0229	225.7	42.92	6819.127
0.7005	0.99665	-0.5307	1.44642	-0.0182	250.7	37.06	5223.071
0.7965	0.99778	-0.4114	1.44671	-0.0128	272.3	29.49	3629.569
0.9114	0.99880	-0.2098	1.44790	-0.0055	294.2	16.54	1628.686
1.0000	0.99942	-	1.44874	-	304.6	-	-
303.15 K							
0.0000	0.87130	-	1.49906	-	0.7220	-	-
0.0998	0.95286	-0.4020	1.46663	-0.0272	22.38	-1.154	8853.624
0.1999	0.97244	-0.5861	1.45338	-0.0353	58.27	11.85	10304.179
0.3003	0.98118	-0.6944	1.44960	-0.0338	94.66	25.29	10171.635
0.3992	0.98598	-0.7077	1.44754	-0.0307	124.4	32.44	9330.585
0.4994	0.98915	-0.6943	1.44624	-0.0268	150.3	35.41	8137.792
0.5991	0.99123	-0.6345	1.44525	-0.0226	172.3	34.62	6740.869
0.7005	0.99279	-0.5181	1.44457	-0.0180	190.4	29.56	5162.646
0.7965	0.99392	-0.4009	1.44487	-0.0126	206.0	23.14	3587.185
0.9114	0.99496	-0.2051	1.44607	-0.0055	221.7	12.64	1608.192
1.0000	0.99557	-	1.44690	-	229.3	-	-
308.15 K							
0	0.86707	-	1.49644	-	0.6809	-	-
0.0998	0.94884	-0.3989	1.46450	-0.0268	19.10	0.8544	8794.171
0.1999	0.96848	-0.5783	1.45141	-0.0348	47.75	11.90	10216.377
0.3003	0.97727	-0.6931	1.44768	-0.0333	75.87	22.35	10077.001
0.3992	0.98207	-0.6865	1.44564	-0.0303	98.50	27.58	9242.412
0.5016	0.98527	-0.6811	1.44438	-0.0264	118.0	29.41	8060.307

0.5991	0.98736	-0.6291	1.44339	-0.0223	134.4	28.32	6675.721
0.7005	0.98893	-0.5088	1.44272	-0.0177	147.9	23.92	5113.616
0.7965	0.99007	-0.3881	1.44300	-0.0125	159.4	18.55	3552.288
0.9114	0.99111	-0.1965	1.44418	-0.0054	171.0	9.969	1592.365
1.0000	0.99174	-	1.44507	-	176.6	-	-
313.15 K							
0.0000	0.86283	-	1.49383	-	0.6437	-	-
0.0998	0.94482	-0.4000	1.46228	-0.0265	16.401	1.9583	8732.810
0.1999	0.96454	-0.5783	1.44947	-0.0342	39.632	11.349	10137.325
0.3003	0.97333	-0.6763	1.44576	-0.0329	61.787	19.622	9994.492
0.3992	0.97818	-0.6862	1.44376	-0.0299	79.374	23.534	9166.303
0.4994	0.98139	-0.6797	1.44249	-0.0261	94.338	24.644	7992.590
0.5991	0.98350	-0.6245	1.44155	-0.0220	106.900	23.421	6620.116
0.7005	0.98507	-0.5030	1.44089	-0.0175	117.140	19.641	5070.427
0.7965	0.98623	-0.4000	1.44120	-0.0123	125.860	15.087	3521.901
0.9114	0.98727	-0.2083	1.44236	-0.0054	134.740	8.0804	1580.094
1.0000	0.98790	-	1.44324	-	138.910	-	-
318.15 K							
0.0000	0.85857	-	1.49124	-	0.6080	-	-
0.0998	0.94081	-0.4031	1.45993	-0.0263	14.34	2.702	8710.287
0.1999	0.96060	-0.5818	1.44756	-0.0337	33.45	10.75	10087.759
0.3003	0.96943	-0.6816	1.44386	-0.0324	51.14	17.34	9935.204
0.3992	0.97430	-0.6905	1.44189	-0.0295	65.02	20.29	9110.100
0.4994	0.97753	-0.6853	1.44066	-0.0257	76.69	20.89	7941.726
0.5991	0.97964	-0.6314	1.43970	-0.0217	86.45	19.64	6577.670
0.7005	0.98122	-0.5054	1.43907	-0.0173	94.37	16.35	5037.994
0.7965	0.98238	-0.4008	1.43948	-0.0121	101.1	12.44	3499.533
0.9114	0.98344	-0.2078	1.44063	-0.0052	107.9	6.552	1569.385
1.0000	0.98406	-	1.44143	-	111.1	-	-
323.15 K							
0.0000	0.85430	-	1.48869	-	0.5757	-	-
0.0998	0.93680	-0.4079	1.45773	-0.0261	12.60	3.058	8685.393
0.1999	0.95666	-0.5855	1.44566	-0.0332	28.52	9.999	10044.386
0.3003	0.96555	-0.6935	1.44197	-0.0320	42.87	15.33	9884.908
0.3992	0.97044	-0.7115	1.44003	-0.0291	54.01	17.59	9062.858
0.4994	0.97368	-0.6960	1.43885	-0.0253	63.30	17.88	7900.169
0.5991	0.97579	-0.6332	1.43789	-0.0214	71.02	16.65	6542.969
0.7005	0.97738	-0.5074	1.43726	-0.0170	77.25	13.77	5011.147
0.7965	0.97854	-0.3838	1.43769	-0.0119	82.49	10.39	3479.219
0.9114	0.97960	-0.1887	1.43883	-0.0051	87.86	5.446	1560.523
1.0000	0.98024	-	1.43960	-	90.37	-	-
PPG 2000 (1) + m- ksilen (2)							
288.15 K							
0.0000	0.86856	-	1.49868	-	0.6601	-	-
0.0997	0.95850	-0.2792	1.47264	-0.0214	30.34	-28.31	9097.699
0.2001	0.98035	-0.2905	1.46116	-0.0283	99.38	-17.67	10776.280
0.2998	0.98994	-0.1511	1.45826	-0.0266	182.7	7.668	10713.371
0.3998	0.99535	0.0580	1.45619	-0.0240	263.8	30.61	9880.820
0.4992	0.99881	0.2799	1.45504	-0.0206	338.5	47.52	8663.262
0.6001	1.00129	0.4780	1.45422	-0.0167	407.1	57.35	7185.870
0.6976	1.00311	0.6044	1.45332	-0.0131	466.0	59.57	5601.529
0.7977	1.00462	0.6215	1.45292	-0.0089	512.0	55.29	3826.980

0.8970	1.00591	0.4591	1.45274	-0.0045	560.7	38.27	2028.276
1.0000	1.00714	-	1.45244	-	582.3	-	-
293.15 K							
0.0000	0.86427	-	1.49604	-	0.6322	-	-
0.0997	0.95444	-0.2793	1.47047	-0.0210	25.10	-16.79	8969.327
0.2001	0.97636	-0.2856	1.45924	-0.0277	78.12	-5.322	10624.942
0.2998	0.98599	-0.1459	1.45634	-0.0261	138.5	13.82	10544.713
0.3998	0.99143	0.0570	1.45431	-0.0236	197.4	31.29	9738.534
0.4992	0.99492	0.2694	1.45318	-0.0202	248.0	40.77	8520.380
0.6001	0.99741	0.4597	1.45235	-0.0164	296.4	47.42	7075.309
0.6976	0.99924	0.5851	1.45144	-0.0129	336.6	47.23	5514.857
0.7977	1.00075	0.6093	1.45105	-0.0087	373.4	42.67	3805.609
0.8970	1.00203	0.4578	1.45084	-0.0044	400.9	29.06	1999.529
1.0000	1.00326	-	1.45059	-	414.5	-	-
298.15 K							
0.0000	0.85998	-	1.49339	-	0.5969	-	-
0.0997	0.95038	-0.2770	1.468321	-0.0206	21.41	-9.501	8931.005
0.2001	0.97233	-0.2545	1.45733	-0.0271	62.48	1.044	10517.577
0.2998	0.98200	-0.1004	1.45444	-0.0256	107.9	16.19	10432.889
0.3998	0.98749	0.0916	1.45244	-0.0231	151.1	28.94	9631.498
0.4992	0.99103	0.2775	1.45132	-0.0198	187.4	35.06	8422.484
0.6001	0.99356	0.4433	1.45048	-0.0161	222.2	39.20	6995.911
0.6976	0.99539	0.5633	1.44956	-0.0127	250.6	37.94	5452.561
0.7977	0.99690	0.6055	1.44917	-0.0086	276.7	33.64	3765.021
0.8970	0.99817	0.4787	1.44899	-0.0043	295.6	22.30	1977.760
1.0000	0.99942	-	1.44874	-	304.6	-	-
303.15 K							
0.0000	0.85568	-	1.49074	-	0.5674	-	-
0.0997	0.94633	-0.2786	1.46639	-0.0200	18.87	-4.502	8947.261
0.2001	0.96840	-0.2694	1.45542	-0.0265	51.06	4.714	10428.751
0.2998	0.97811	-0.1175	1.45252	-0.0251	85.72	16.57	10330.086
0.3998	0.98361	0.0872	1.45058	-0.0226	118.2	26.12	9535.337
0.4992	0.98714	0.2927	1.44946	-0.0194	145.7	30.89	8349.320
0.6001	0.98967	0.4727	1.44861	-0.0158	170.5	32.60	6925.285
0.6976	0.99152	0.5911	1.44772	-0.0124	191.1	30.98	5397.926
0.7977	0.99304	0.6142	1.44732	-0.0084	209.9	26.88	3727.986
0.8970	0.99433	0.4654	1.44716	-0.0043	223.1	17.36	1956.554
1.0000	0.99557	-	1.44690	-	229.3	-	-
308.15 K							
0.0000	0.85136	-	1.48810	-	0.5396	-	-
0.0997	0.94229	-0.2815	1.46421	-0.0196	15.87	-2.223	8832.093
0.2001	0.96443	-0.2689	1.45355	-0.0259	42.34	6.562	10355.953
0.2998	0.97418	-0.1118	1.45059	-0.0246	69.69	16.36	10259.006
0.3998	0.97970	0.0972	1.44871	-0.0222	94.62	23.68	9465.725
0.4992	0.98326	0.3048	1.44761	-0.0190	115.0	26.53	8277.906
0.6001	0.98580	0.4842	1.44675	-0.0155	133.5	27.33	6864.630
0.6976	0.98766	0.5998	1.44590	-0.0122	148.8	25.44	5350.779
0.7977	0.98919	0.6191	1.44549	-0.0083	162.8	21.81	3697.628
0.8970	0.99049	0.4669	1.44533	-0.0042	172.3	13.83	1939.957
1.0000	0.99174	-	1.44507	-	176.6	-	-
313.15 K							
0.0000	0.84703	-	1.48545	-	0.5112	-	-

0.0997	0.93825	-0.2893	1.46192	-0.0193	13.80	-0.5066	8798.797
0.2001	0.96048	-0.2777	1.45164	-0.0254	35.52	7.317	10302.431
0.2998	0.97027	-0.1171	1.44865	-0.0241	57.26	15.26	10198.109
0.3998	0.97581	0.0971	1.44684	-0.0217	76.825	20.98	9409.665
0.4992	0.97938	0.3091	1.44575	-0.0186	92.42	22.82	8224.293
0.6001	0.98193	0.4908	1.44489	-0.0152	106.6	23.08	6820.497
0.6976	0.98380	0.6057	1.44413	-0.0119	118.0	20.92	5311.616
0.7977	0.98535	0.6219	1.44369	-0.0081	128.9	17.94	3676.306
0.8970	0.98665	0.4663	1.44352	-0.0041	135.7	11.07	1924.713
1.0000	0.98790	-	1.44324	-	138.9	-	-
318.15 K							
0.0000	0.84269	-	1.48280	-	0.4888	-	-
0.0997	0.93421	-0.2982	1.46011	-0.0186	12.22	0.6973	8781.388
0.2001	0.95653	-0.2877	1.44978	-0.0247	30.27	7.645	10254.825
0.2998	0.96636	-0.1245	1.44674	-0.0237	47.77	14.11	10139.772
0.3998	0.97193	0.0934	1.44496	-0.0213	63.40	18.68	9357.416
0.4992	0.97551	0.3087	1.44389	-0.0183	75.48	19.76	8172.782
0.6001	0.97808	0.4925	1.44304	-0.0149	86.54	19.66	6778.597
0.6976	0.97996	0.6082	1.44234	-0.0116	95.17	17.50	5274.633
0.7977	0.98150	0.6242	1.44190	-0.0079	103.7	14.94	3654.171
0.8970	0.98281	0.4677	1.44172	-0.0040	108.8	9.111	1912.796
1.0000	0.98406	-	1.44143	-	111.1	-	-
323.15							
0.0000	0.83833	-	1.48017	-	0.4657	-	-
0.0997	0.93018	-0.3098	1.45795	-0.0182	10.84	1.414	8767.874
0.2001	0.95259	-0.3018	1.44792	-0.0241	26.03	7.572	10223.442
0.2998	0.96246	-0.1375	1.44483	-0.0232	40.30	12.89	10097.634
0.3998	0.96805	0.0823	1.44306	-0.0209	52.78	16.37	9309.999
0.4992	0.97165	0.2993	1.44201	-0.0179	62.50	17.15	8134.800
0.6001	0.97423	0.4849	1.44120	-0.0146	71.32	16.90	6749.159
0.6976	0.97612	0.6030	1.44056	-0.0113	78.18	15.00	5254.617
0.7977	0.97767	0.6221	1.44012	-0.0077	84.77	12.59	3638.328
0.8970	0.97899	0.4684	1.43992	-0.0039	88.60	7.495	1901.813
1.0000	0.98024	-	1.43960	-	90.37	-	-
PPG 2000 (1) + p-ksilen (2)							
288.15 K							
0.0000	0.86531	-	1.49770	-	0.6862	-	-
0.0994	0.95710	-0.2780	1.47205	-0.0212	29.56	-28.94	8949.278
0.2000	0.97989	-0.4488	1.46126	-0.0274	91.96	-25.05	10514.003
0.3011	0.99014	-0.5434	1.45830	-0.0258	170.9	-4.896	10460.631
0.3992	0.99567	-0.5226	1.45643	-0.0232	245.3	12.47	9655.212
0.5003	0.99846	-0.4619	1.45510	-0.0200	319.3	27.62	8957.278
0.5994	1.00180	-0.3513	1.45426	-0.0163	386.1	36.77	7030.427
0.6948	1.00355	-0.2261	1.45368	-0.0126	444.5	39.71	5511.484
0.7987	1.00503	-0.1008	1.45321	-0.0083	500.0	34.77	3728.545
0.8912	1.00609	-0.0209	1.45283	-0.0045	543.6	24.58	2060.921
1.0000	1.00714	-	1.45244	0.0000	582.3	-	-
293.15 K							
0.0000	0.86097	-	1.49493	-	0.6515	-	-
0.0994	0.95289	-0.2375	1.46990	-0.0206	25.52	-16.27	8941.406
0.2000	0.97588	-0.4422	1.45931	-0.0268	72.65	-10.76	10387.002
0.3011	0.98617	-0.5388	1.45637	-0.0252	129.8	4.581	10307.887

0.3992	0.99175	-0.5296	1.45453	-0.0227	183.2	17.33	9516.492
0.5003	0.99456	-0.4774	1.45322	-0.0195	234.9	27.20	8821.593
0.5994	0.99791	-0.3673	1.45238	-0.0160	281.0	32.31	6924.160
0.6948	0.99972	-0.3118	1.45181	-0.0123	321.5	33.31	5430.814
0.7987	1.00126	-0.2870	1.45135	-0.0082	358.8	27.65	3670.779
0.8912	1.00233	-0.2436	1.45097	-0.0044	388.6	19.14	2030.064
1.0000	1.00326	-	1.45059	-	414.5	-	-
298.15 K							
0.0000	0.85663	-	1.49221	-	0.6168	-	-
0.0994	0.94884	-0.2438	1.46771	-0.0202	21.78	-9.052	8897.489
0.2000	0.97188	-0.4336	1.45739	-0.0261	58.28	-3.133	10277.194
0.3011	0.98221	-0.5209	1.45446	-0.0247	100.7	8.568	10177.521
0.3992	0.98783	-0.5159	1.45263	-0.0222	140.4	18.38	9404.058
0.5003	0.99066	-0.4704	1.45134	-0.0191	177.6	24.93	8710.156
0.5994	0.99403	-0.3605	1.45051	-0.0156	210.6	27.78	6838.374
0.6948	0.99584	-0.2890	1.44994	-0.0121	239.4	27.52	5363.714
0.7987	0.99736	-0.2345	1.44949	-0.0080	265.6	22.13	3624.578
0.8912	0.99844	-0.1781	1.44911	-0.0044	286.6	15.05	2005.093
1.0000	0.99942	-	1.44874	-	304.6	-	-
303.15 K							
0.0000	0.85227	-	1.48939	-	0.5848	-	-
0.0994	0.94485	-0.2698	1.46583	-0.0193	19.25	-4.077	8925.637
0.2000	0.96790	-0.4305	1.45543	-0.0255	48.04	1.703	10211.097
0.3011	0.97827	-0.5102	1.45253	-0.0241	80.19	10.73	10081.749
0.3992	0.98391	-0.5027	1.45073	-0.0217	109.9	17.95	9309.240
0.5003	0.98676	-0.4585	1.44946	-0.0187	137.4	22.37	8617.191
0.5994	0.99015	-0.3484	1.44863	-0.0153	161.5	23.82	6765.663
0.6948	0.99194	-0.2391	1.44808	-0.0118	182.3	22.82	5304.357
0.7987	0.99345	-0.1244	1.44764	-0.0078	201.3	17.98	3584.967
0.8912	0.99452	-0.0439	1.44727	-0.0043	216.3	11.83	1981.742
1.0000	0.99557	-	1.44690	-	229.3	-	-
308.15 K							
0.0000	0.84791	-	1.48658	-	0.5548	-	-
0.0994	0.94074	-0.2587	1.46321	-0.0192	16.80	-1.254	8910.418
0.2000	0.96392	-0.4322	1.45344	-0.0248	39.96	4.192	10147.368
0.3011	0.97433	-0.5051	1.45059	-0.0235	65.51	11.94	10023.892
0.3992	0.97999	-0.4951	1.44883	-0.0212	87.68	16.83	9230.557
0.5003	0.98286	-0.4497	1.44759	-0.0182	108.5	19.81	8540.322
0.5994	0.98627	-0.3382	1.44677	-0.0149	126.5	20.40	6705.361
0.6948	0.98809	-0.2550	1.44622	-0.0115	142.0	19.09	5256.875
0.7987	0.98963	-0.1808	1.44579	-0.0076	155.9	14.74	3550.123
0.8912	0.99072	-0.1189	1.44543	-0.0042	167.1	9.586	1963.740
1.0000	0.99174	-	1.44507	-	176.6	-	-
313.15 K							
0.0000	0.84353	-	1.48391	-	0.5247	-	-
0.0994	0.93667	-0.2646	1.46108	-0.0188	14.82	0.5418	8919.567
0.2000	0.95996	-0.4416	1.45144	-0.0243	33.62	5.416	10101.269
0.3011	0.97041	-0.5131	1.44865	-0.0230	53.91	11.71	9966.907
0.3992	0.97610	-0.4978	1.44694	-0.0207	71.16	15.39	9171.873
0.5003	0.97897	-0.4492	1.44571	-0.0179	87.20	17.44	8480.529
0.5994	0.98240	-0.3352	1.44492	-0.0146	101.0	17.50	6659.742
0.6948	0.98423	-0.2537	1.44438	-0.0113	112.8	16.09	5220.568

0.7987	0.98578	-0.1846	1.44395	-0.0075	123.3	12.24	3524.888
0.8912	0.98688	-0.1260	1.44360	-0.0041	131.6	7.777	1946.430
1.0000	0.98790	-	1.44324	-	138.9	-	-
318.15 K							
0.0000	0.83914	-	1.48126	-	0.5001	-	-
0.0994	0.93274	-0.3172	1.45896	-0.0183	13.24	1.744	8934.545
0.2000	0.95605	-0.4803	1.44946	-0.0238	28.73	6.102	10064.128
0.3011	0.96649	-0.5243	1.44675	-0.0225	45.06	11.26	9916.282
0.3992	0.97220	-0.5016	1.44505	-0.0203	58.69	14.03	9118.988
0.5003	0.97510	-0.4600	1.44384	-0.0175	71.23	15.39	8425.481
0.5994	0.97854	-0.3387	1.44306	-0.0143	81.94	15.13	6616.560
0.6948	0.98037	-0.2474	1.44252	-0.0111	91.04	13.69	5185.243
0.7987	0.98192	-0.1546	1.44210	-0.0073	99.13	10.27	3500.794
0.8912	0.98301	-0.0807	1.44177	-0.0040	105.6	6.554	1935.266
1.0000	0.98406	-	1.44143	-	111.1	-	-
323.15 K							
0.0000	0.83474	-	1.47853	-	0.4753	-	-
0.0994	0.92858	-0.2900	1.45676	-0.0179	11.81	2.403	8944.347
0.2000	0.95205	-0.4689	1.44750	-0.0232	24.76	6.303	10040.803
0.3011	0.96259	-0.5380	1.44485	-0.0220	38.11	10.57	9882.458
0.3992	0.96833	-0.5205	1.44317	-0.0198	49.05	12.69	9081.864
0.5003	0.97123	-0.4686	1.44197	-0.0171	59.05	13.60	8386.745
0.5994	0.97468	-0.3371	1.44122	-0.0140	67.55	13.20	6587.681
0.6948	0.97643	-0.1030	1.44068	-0.0108	74.68	11.74	5160.986
0.7987	0.97794	0.0932	1.44026	-0.0072	81.00	8.727	3483.527
0.8912	0.97905	0.1765	1.43993	-0.0039	85.98	5.392	1922.800
1.0000	0.98024	-	1.43960	-	90.37	-	-

Tabla P12 Parametri A_p odgovarajuća srednja kvadratna odstupanja σ za binarne smeše PPG 2000 (1) + benzen (2), PPG 2000 (1) + toluen (2), PPG 2000 (1) + o-ksilen (2), PPG 2000 (1) + m-ksilen(2), PPG 2000 (1) + p-ksilen (2), na temperaturama $T = (293.15 - 323.15)$ K i na atmosferskom pritisku

Funkcija	T/K	A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	σ
PPG 2000(1) + benzen (2)							
$V^E/10^{-6} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	288.15	-6.7127	2.9136	9.2633	10.47	-	
	293.15	-6.9202	3.0259	9.4295	10.15	-	
	298.15	-7.0621	3.0825	9.5632	10.11	-	
	303.15	-7.1992	3.1492	9.7928	10.34	-	
	308.15	-7.3186	3.2653	9.7530	10.29	-	
	313.15	-7.4724	3.4296	9.8467	10.37	-	
	318.15	-7.6711	3.5724	9.9105	10.40	-	
	323.15	-7.8855	3.7542	9.8902	10.27	-	
Δn_D	288.15	-0.0944	0.0885	-0.1217	0.1088	-	
	293.15	-0.0920	0.0847	-0.1173	0.1092	-	
	298.15	-0.0891	0.0824	-0.1148	0.1036	-	
	303.15	-0.0859	0.0807	-0.1095	0.0962	-	
	308.15	-0.0828	0.0779	-0.1060	0.0935	-	
	313.15	-0.0806	0.0747	-0.1013	0.0914	-	
	318.15	-0.0776	0.0728	-0.0988	0.0856	-	
	323.15	-0.0749	0.0703	-0.0947	0.0803	-	
$\Delta \eta / \text{mPas} \cdot \text{s}$	288.15	539.76	337.33	-391.91	-	-	
	293.15	401.58	196.17	-277.52	-	-	
	298.15	305.89	118.33	-191.45	-	-	
	303.15	237.94	69.729	-132.37	-	-	
	308.15	188.16	38.122	-89.208	-	-	
	313.15	151.85	19.294	-61.388	-	-	
	318.15	124.33	5.4332	-42.816	-	-	
	323.15	102.53	-3.3243	-29.641	-	-	
PPG 2000 (1) + toluen (2)							
$V^E/10^{-6} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	288.15	-4.98254	2.52317	1.53270	6.94814	-	
	293.15	-5.06394	2.38405	1.44967	7.04396	-	
	298.15	-5.11782	2.21582	1.51974	7.42835	-	
	303.15	-5.08854	2.21138	1.35726	7.47713	-	
	308.15	-5.14510	2.17631	1.42654	7.75771	-	
	313.15	-5.18282	2.25067	1.29132	7.71886	-	
	318.15	-5.26031	2.28734	1.24500	7.81837	-	
	323.15	-5.37557	2.27453	1.15607	7.89591	-	
Δn_D	288.15	-0.0850	0.0672	-0.0909	0.1077	-	
	293.15	-0.0830	0.0668	-0.0888	0.1012	-	
	298.15	-0.0812	0.0638	-0.0859	0.1027	-	
	303.15	-0.0790	0.0618	-0.0836	0.0990	-	
	308.15	-0.0770	0.0596	-0.0815	0.0979	-	
	313.15	-0.0750	0.0591	-0.0782	0.0935	-	
	318.15	-0.0730	0.0576	-0.0772	0.0887	-	
	323.15	-0.0712	0.0560	-0.0743	0.0858	-	
$\Delta \eta / \text{mPas} \cdot \text{s}$	288.15	340.85	269.85	-466.06	125.77	-	
	293.15	306.78	158.070	-496.96	-62.430	-	
	298.15	242.47	85.052	-345.51	-11.370	-	
	303.15	194.96	41.327	-246.56	3.2335	-	

	308.15	158.38	20.962	-178.24	0.5562	-
	313.15	130.72	6.5671	133.89	6.7412	-
	318.15	108.99	-1.8696	99.790	5.6162	-
	323.15	91.837	-7.0680	75.248	5.8134	-
PPG 2000 (1) + o-ksilen (2)						
$V^E/10^{-6} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	288.15	-2.8157	1.2613	-0.9734	-	-
	293.15	-2.8490	1.0817	-0.9735	-	-
	298.15	-2.8183	1.0026	-0.8933	-	-
	303.15	-2.7517	1.0163	-0.9221	-	-
	308.15	-2.7251	1.0822	-0.8852	-	-
	313.15	-2.6757	0.9532	-1.0158	-	-
	318.15	-2.6973	0.9701	-0.9965	-	-
	323.15	-2.7696	1.0671	-0.6568	-	-
Δn_D	288.15	-0.1100	0.0863	-0.1282	0.1024	-
	293.15	-0.1086	0.0849	-0.1256	0.1021	-
	298.15	-0.1074	0.0828	-0.1232	0.1035	-
	303.15	-0.1060	0.0817	-0.1218	0.1013	-
	308.15	-0.1046	0.0798	-0.1193	0.1010	-
	313.15	-0.1033	0.0780	-0.1170	0.1005	-
	318.15	-0.1021	0.0771	-0.1125	0.1014	-
	323.15	-0.1008	0.0758	-0.1104	0.0995	-
$\Delta \eta / \text{mPas} \cdot \text{s}$	288.15	263.69	129.98	-290.21	356.16	-
	293.15	218.43	72.933	-247.02	185.68	-
	298.15	174.01	34.216	-140.09	177.28	-
	303.15	143.51	13.135	-101.09	127.44	-
	308.15	119.54	-0.6739	-70.770	93.761	-
	313.15	100.08	-7.8774	-50.0361	72.926	-
	318.15	84.778	-11.964	-36.417	55.580	-
	323.15	72.430	-13.964	-25.574	42.607	-
PPG 2000 (1) + m-ksilen (2)						
$V^E/10^{-6} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	288.15	1.1281	4.3222	-0.2752	1.1648	-
	293.15	1.0858	4.1310	-0.2193	1.4528	-
	298.15	1.1174	3.5552	-0.0635	2.5594	-
	303.15	1.1788	3.9369	-0.2926	1.8322	-
	308.15	1.2272	3.9504	-0.3814	1.8576	-
	313.15	1.2445	4.0220	-0.4815	1.8239	-
	318.15	1.2430	4.0769	-0.5446	1.8498	-
	323.15	1.2054	4.1103	-0.5803	1.9316	-
Δn_D	288.15	-0.0810	0.0737	-0.0962	0.0723	-
	293.15	-0.0799	0.0739	-0.0939	0.0684	-
	298.15	-0.0781	0.0712	-0.0924	0.0687	-
	303.15	-0.0763	0.0683	-0.0890	0.0673	-
	308.15	-0.0750	0.0674	-0.0874	0.0650	-
	313.15	-0.0735	0.0667	-0.0867	0.0640	-
	318.15	-0.0722	0.0646	-0.0800	0.0617	-
	323.15	-0.0708	0.0633	-0.0785	0.0597	-
$\Delta \eta / \text{mPas} \cdot \text{s}$	288.15	191.87	265.84	-213.90	305.25	-
	293.15	170.61	159.02	-158.32	245.64	-
	298.15	146.33	97.987	-111.62	198.03	-
	303.15	125.52	61.662	-77.479	147.27	-
	308.15	108.64	32.658	-58.207	131.63	-
	313.15	93.693	17.719	-47.917	96.753	-

	318.15	81.552	7.4613	-39.897	76.279	-
	323.15	70.236	2.4746	-25.255	62.168	-
PPG 2000 (1) + p-ksilen (2)						
$V^E/10^{-6} \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	288.15	-1.74249	1.92840	-1.88407	-3.59461	-
	293.15	-1.81408	1.80040	-1.28227	-2.76078	-
	298.15	-1.79199	1.69349	-0.80964	-1.82526	-
	303.15	-1.74646	1.66875	-0.63520	-1.33107	-
	308.15	-1.71207	1.68007	-0.55731	-1.01803	-
	313.15	-1.70636	1.74680	-0.68392	-1.13081	-
	318.15	-1.72981	1.77302	-0.73404	-0.96587	-
	323.15	-1.79714	2.53230	1.60840	1.36106	-
Δn_D	288.15	-0.0783	0.0676	-0.0940	0.0859	-
	293.15	-0.0768	0.0673	-0.0881	0.0800	-
	298.15	-0.0751	0.0660	-0.0862	0.0776	-
	303.15	-0.0736	0.0638	-0.0815	0.0754	-
	308.15	-0.0716	0.0636	-0.0839	0.0698	-
	313.15	-0.0702	0.0613	-0.0807	0.0738	-
	318.15	-0.0685	0.0599	-0.0814	0.0696	-
	323.15	-0.0669	0.0575	-0.0793	0.7000	-
$\Delta \eta / \text{mPas} \cdot \text{s}$	288.15	111.71	245.92	-224.62	181.93	-
	293.15	109.80	150.37	-157.10	137.33	-
	298.15	100.79	92.564	-113.16	107.11	-
	303.15	90.338	57.430	-80.075	74.131	-
	308.15	79.644	34.094	-57.247	57.583	-
	313.15	70.078	20.770	-41.402	40.350	-
	318.15	61.886	10.487	-28.237	30.826	-
	323.15	54.789	4.0490	-21.038	21.877	-

Literatura -verifikacija naučnog doprinosa doktorske disertacije

(P1) Soldatović, D. A.; Vuksanović, J. M.; Radović, I. R.; Kijevčanin, M. L. Thermodynamic and Spectroscopic Interpretation of Molecular Interactions of Nicotine + Alcohol Binary Mixtures. *J. Chem. Thermodyn.* **2016**, *102*, 105–129. (IF (2016)=2.726; ISSN: 0021-9614), <https://doi.org/10.1016/J.JCT.2016.07.005>.

(P2) Soldatović, D.; Vuksanović, J.; Radović, I.; Višak, Z.; Kijevčanin, M. Excess Molar Volumes and Viscosity Behaviour of Binary Mixtures of Aniline/or N,N-Dimethylaniline with Imidazolium Ionic Liquids Having Triflate or Bistriflamide Anion. *J. Chem. Thermodyn.* **2017**, *109*, 137–154. (IF (2017)=2.631; ISSN: 0021-9614), <https://doi.org/10.1016/J.JCT.2017.02.007>.

(P3) Vuksanović, J.; **Soldatović, D.;** Radović, I.; Višak, Z.; Kijevčanin, M. Thermodynamic Characterization of Binary Mixtures of Poly(Propylene Glycol) 425 with Toluene and o-, m- and p-Xylenes. *J. Chem. Thermodyn.* **2019**, *131*, 393–403 (IF (2017)=2.631; ISSN: 0021-9614), <https://doi.org/10.1016/J.JCT.2018.11.020>.

(P4) Soldatović, D.; Grozdanić, N.; Višak, Z.; Radović, I.; Kijevčanin, M. Effects of Solid Poly (Ethylene Glycols) Addition to the Solutions of Aniline or N,N-Dimethylaniline with Water: Experimental Measurements and Modeling. *J. Serbian Chem. Soc.* 2016, *81* (7), 789–798. (IF (2016)=0.822; ISSN: 0352-5139), <https://doi.org/10.2298/JSC160317058S>.

Biografija autora

Danijela A. Soldatović, dipl. inž. tehnologije, je rođena 7.2.1979. godine u Ivanjici gde je i završila osnovnu školu i gimnaziju (opšti smer). Školske 1998/99 godine upisala je Tehnološko-metalurški fakultet u Beogradu, smer Hemijsko inženjerstvo. Na ovom smeru je diplomirala 2007. godine sa temom „Dobijanje mikro čestica metodom emulzifikacije u cilju kontrolisanog otpuštanja aroma”, sa ocenom 10, pod mentorstvom Prof. dr Branka Bugarskog. Školske 2008/2009 godine upisala je doktorske studije na studijskom programu Hemijsko inženjerstvo. Položila je sve ispite na doktorskim studijama, kao i završni ispit, sa prosečnom ocenom 9,83.

Od oktobra 2007-2011. godine bila je angažovana na Tehnološko-metalurškom fakultetu kao saradnik na istraživačkom projektu: 1. „*Interakcija imobilisanih ćelija, tkiva i biološki aktivnih molekula u bio reaktorskim sistemima*”, evidencioni broj: 142075, 2006-2010.godine, rukovodilac Prof. dr Branko Bugarski, projekat osnovnih istraživanja, kao i na projektima saradnje sa privredom: 1. *Glavni tehnološki projekat fabrika za flaširanje vode za piće Sige – Žagubica*, investitor DMR d.o.o. Petrovac na Mlavi, 2008. godine, 2. *Glavni tehnološki projekat sistema za prečišćavanje otpadnih voda doma slepih „Zbrinjavanje”*, investitor Opština Pančevo, dom slepih „Zbrinjavanje”, 2008. godine, 3. *Glavni tehnološki projekat postrojenja za proizvodnju tehničke i prečišćene natrijumkarboksimetilceluloze*, investitor Valve Profil Kraljevo, fabrika u Lučanima (Milan Blagojević Lučani), 2008. godine, 4. *Generalni projekat Postrojenja za kontrolu mirisa i tretman industrijske otpadne vode u Fabrici za obradu vode HIP Petrohemija – Pančevo*, investitor Veolia Water Solutions & Technologies in Serbia– Beograd, 2009. godine, 5. *Idejni tehnološki projekat Postrojenja za kontrolu mirisa i tretman industrijske otpadne vode u Fabrici za obradu vode HIP Petrohemija – Pančevo*, investitor Veolia Water Solutions & Technologies in Serbia– Beograd, 2010. godine, 6. *Glavni tehnološki projekat Postrojenja za preradu radioaktivnog otpada (PPO)*, investitor Institut za nuklearne nauke Vinča, 2010. godine, 7. *Studija o proceni uticaja na životnu sredinu Postrojenja za preradu radioaktivnog otpada (PPO)*, investitor Institut za nuklearne nauke Vinča, 2010. godine.

Od letnjeg semestra 2008/2009. godine do 2010/2011. godine bila je angažovana na izvođenju računskih vežbi iz predmeta Osnovi projektovanja. Od 2011. godine zaposlena je u JP „Nuklearni objekti Srbije“, kao Inženjer za kondicioniranje izvora, u Sektoru za upravljanje radioaktivnim otpadom. Od decembra 2018. godine je Rukovodilac Odeljenja za preradu radioaktivnog otpada.

U oblasti naučnog rada autor i koautor pet radova u međunarodnim časopisima, kao i radova sa nacionalnih i međunarodnih skupova.

Прилог 1.

Изјава о ауторству

Име и презиме аутора Данијела А. Солдатовић

Број индекса 4025/2008

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

Термодинамичка анализа равнотежних, волуметријских и транспортних својстава

вишекомпонентних система јонских течности и органских растварача

- резултат сопственог истраживачког рада;
- да дисертација у целини ни у деловима није била предложена за стицање друге дипломе према студијским програмима других високошколских установа;
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио/ла интелектуалну својину других лица.

Потпис докторанда

У Београду, 27.05.2019.

Д. Солдатовић

Прилог 2.

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора Данијела А. Солдатовић

Број индекса 4025/2008

Студијски програм Хемијско инжењерство

Наслов рада Термодинамичка анализа равнотежних, волуметријских и транспортних својстава вишекомпонентних система јонских течности и органских растварача

Ментор Др Мирјана Кијевчанин

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла ради похрањена у **Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског назива доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

У Београду, 27.05.2019.

Потпис докторанда

Д. Солдатовић

Прилог 3.

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Термодинамича анализа равнотежних, волуметријских и транспортних својстава

вишекомпонентних система јонских течности и органских растварача

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Београду и доступну у отвореном приступу могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство
2. Ауторство – некомерцијално
3. Ауторство – некомерцијално – без прерада
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима
5. Ауторство – без прерада
6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци.
Кратак опис лиценци је саставни део ове изјаве).

Потпис докторанда

У Београду, 27.05.2019.



1. **Ауторство.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.
2. **Ауторство – некомерцијално.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.
3. **Ауторство – некомерцијално – без прерада.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.
4. **Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.
5. **Ауторство – без прерада.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.
6. **Ауторство – делити под истим условима.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.