

Univerzitet u Beogradu  
Tehnološko-metalurški fakultet, Beograd

Jelena D. Smiljanić

**Eksperimentalno određivanje i modelovanje  
volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i viskoznosti  
smeša estara, alkohola, aromata i ketona**

Doktorska disertacija



Beograd, mart 2011

**Mentor:**

**Dr Mirjana Kijevčanin**

van. prof. Tehnološko-metalurškog fakulteta, Beograd

**Članovi komisije:**

**Dr Slobodan Šerbanović**

red. prof. Tehnološko-metalurškog fakulteta, Beograd

**Dr Dušan Grozdanić**

red. prof. Tehnološko-metalurškog fakulteta, Beograd

**Dr Ivona Radović**

docent Tehnološko-metalurškog fakulteta, Beograd

**Dr Nikola Klem**

red. prof. Građevinskog fakulteta, Beograd

Datum odbrane:

Datum promocije:

# Ekperimentalno određivanje i modelovanje volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i viskoznosti smeša estara, alkohola, aromata i ketona

## Apstrakt

U ovom radu eksperimentalno su određene gustine, indeksi refrakcije i viskoznosti binarnih i ternarnih smeša na atmosferskom pritisku i u širem temperaturnom intervalu. Za proučavanje navedenih osobina izabrani su sistemi alkohola (1-butanol i 2-butanola) sa hloroformom i benzenom, kao i sistemi aromatičnog estera (dimetilftalata) sa alkoholima (1-butanolom i 2-butanolom), tetrahidrofuranom i 2-butanonom. Eksperimentalna merenja su vršena na aparatima poslednje generacije visoke tačnosti: digitalnom gustinomeru Anton Paar DMA 5000, refraktometru Anton Paar RXA 156 i viskozimetru Anton Paar SVM 3000.

Na bazi rezultata eksperimentalnih merenja izračunate su dopunske molarne zapremine  $V^E$ , promene indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  i promena viskoznosti  $\Delta \eta$  smeša. Primenjena su dva različita tipa modela za izračunavanje  $V^E$  podataka: empirijski modeli polinomskog tipa i poluempirijski modeli bazirani na PRSV CEOS i dva tipa pravila mešanja (vdW1 i TCBT). Indeks refrakcije  $n_D$  je određen preko modela Lorentz-Lorentz, Dale-Gladstone, Eykman, Arago-Biot, Newton i Oster a i isti modeli u kombinaciji sa odgovarajućim termodinamičkim jednačinama su korišćeni i za predskazivanje  $V^E$  iz  $n_D$  i  $\rho$  podataka čistih komponenti. Za izračunavanje viskoznosti  $\eta$  su korišćene dve grupe modela: prediktivni (UNIFAC-VISCO) i korelativni (Teja-Rice i McAlister).

Kod sistema dimetilftalata sa 1-butanolom, 2-butanonom i tetrahidrofuranom utvrđeno je veoma neidealno ponašanje sa izrazito negativnim  $V^E$  vrednostima. Sisteme alkohol + benzen i dimetilftalat + 2-butanol karakterišu pozitivne vrednosti  $V^E$ , dok je kod sistema alkohol + hloroform dobijen S-oblik  $V^E$ - $x_1$  krive. Kod ternarnih sistema alkohol + hloroform + benzen,  $V^E$  podaci su za najveći deo koncentracionog ternarnog polja pozitivni. Za analizirane binarne sisteme  $\Delta n_D$  vrednosti su pozitivne, a  $\Delta \eta$  negativne. Poznavanje  $\Delta n_D$  i  $\Delta \eta$  doprinosi sveobuhvatnijem razumevanju ponašanja neidealnih rastvora.

Rezultati dobijeni korelisanjem  $V^E$  podataka analiziranih binarnih sistema ukazuju na mogućnost veoma uspešne primene poluempirijskih CEOS (vdW1) i CEOS/ $G^E$  modela (TCBT). Pri predskazivanju  $V^E$  ternarnih sistema, iz odgovarajućih binarnih podataka, mnogo uspešniji su pojedini empirijski modeli u odnosu na CEOS i CEOS/ $G^E$  modele. Uvođenjem ternarnih doprinosa u CEOS/ $G^E$  modele izvršeno je korelisanje  $V^E$  podataka ternarnih sistema, čime su greške značajno smanjene u odnosu na greške dobijene predskazivanjem. Pri izračunavanju  $n_D$  analiziranih binarnih sistema pomoću modela pravila mešanja nisu postignuti zadovoljavajući rezultati. Pri predskazivanju  $V^E$  iz  $n_D$  kao uspešnija su se pokazala Lorentz-Lorenz, Dale-Gladstone i Eykman pravila mešanja, a Arago-Biot kao najmanje uspešno, izuzev sistema dimetilftalat + alkohol kod koji su svi modeli dali veoma velike i neprihvatljive greške. Pri predskazivanju  $\eta$  podataka pomoću UNIFAC-VISCO modela dobijeni su loši rezultati za sve analizirane binarne sisteme, dok su uvođenjem novih interakcionih parametara greške proračuna smanjene. Rezultati korelisanja  $\eta$  podataka su bolji primenjujući dvo i troparametarski McAllister modele, u odnosu na jednoparametarski Teja-Rice model.

**Ključne reči:** eksperimentalna merenja, gustina, indeks refrakcije, viskoznost, binarne i ternarne smeše, dopunska molarna zapremina, promena indeksa refrakcije, promena viskoznosti, modelovanje, polinomi, kubne jednačine stanja

# Experimental determination and modeling of volumetric properties, refractive indices and viscosities of the mixtures of esters, alcohols, aromatics and ketones

## Abstract

In this thesis, densities, refractive indices and viscosities of binary and ternary mixtures have been experimentally determined at atmospheric pressure and in a broad temperature range. Systems selected included mixtures of alcohols (1-butanol and 2-butanol) with chloroform and benzene, as well as systems containing an aromatic ester (dimethylphtalate) and alcohols (1-butanol and 2-butanol), tetrahydrofurane and 2-butanone. Experimental measurements were conducted on high precision equipment of the latest generation: Anton Paar DMA 5000 digital density meter, Anton Paar RXA 156 refractometer and Anton Paar SVM 3000 viscometer.

Excess molar volumes  $V^E$ , changes of refractive indices  $\Delta n_D$  and changes of viscosities  $\Delta \eta$  of mixtures were calculated from experimental measurements.  $V^E$  data were calculated using two different models: empirical polynomial models and semi-empirical models based on the PRSV CEOS and two types of mixing rules (vdW1 and TCBT). The refractive indices  $n_D$  were determined using the Lorentz-Lorentz, Dale-Gladstone, Eykman, Arago-Biot, Newton and Oster models, respectively and the same models combined with the appropriate thermodynamic equations were used for the predictions of  $V^E$  data from  $n_D$  and  $\rho$  data of pure components.  $\eta$  data were analyzed using two groups of models: predictive UNIFAC-VISCO model and correlative Teja-Rice and McAlister models.

Dimethylphtalate + 1-butanol, + 2-butanone, + tetrahydrofuran mixtures demonstrated highly non-ideal behavior with extremely negative  $V^E$  values. Systems containing alcohol + benzene and dimethylphtalate + 2-butanol exhibited positive  $V^E$  values, while the system alcohol + chloroform was characterized by an S-shaped  $V^E - x_1$  curve. For the ternary alcohol + chloroform + benzene systems,  $V^E$  values were positive for the most of the ternary concentration field.  $\Delta n_D$  values of the analyzed binary systems were positive, while their  $\Delta \eta$  were negative. Information on  $\Delta n_D$  and  $\Delta \eta$  data contributes to a more comprehensive understanding of non-ideal behavior of solutions.

The results obtained by correlation of the  $V^E$  data for analyzed binary systems suggest a possibility of a successful application of semi-empirical CEOS (vdW1) and CEOS/ $G^E$  (TCBT) models. When predicting  $V^E$  data for ternary systems from the appropriate binary data, some empirical models proved more successful compared to the CEOS and CEOS/ $G^E$  models. The introduction of ternary contributions into the CEOS/ $G^E$  models when correlating  $V^E$  data for ternary systems resulted in significantly reduced errors compared to the ones obtained by prediction. Calculation of  $n_D$  of the analyzed binary systems using the mixing rules models did not yield satisfactory results. When predicting the  $V^E$  data from  $n_D$ , better results were achieved by application of the Lorentz-Lorenz, Dale-Gladstone and Eykman mixing rules, while Arago-Biot proved the least successful. The only exception were dimethylphtalate + alcohols systems where all models produced very large and unacceptable errors. Application of UNIFAC-VISCO model on  $\eta$  prediction yielded poor results for all analyzed binary systems, while introduction of the new interaction parameters resulted in reduction of errors. The results of  $\eta$  data correlation were better when two-and three parameter McAllister models were applied, compared to the ones obtained by application of one-parameter Teja-Rice model.

**Key words:** experimental measurements, density, refractive index, viscosity, binary and ternary mixtures, ternary mixtures, excess molar volume, deviation of refractive index, viscosity deviation, modeling, polynomial equations, equations of state

***Za inspiraciju, instrukcije i strpljenje koje su mi poklonili, za njihovu otvorenost u pružanju informacija iz oblasti nauke, tumačenju novog i razjašnjenju teškog, zahvaljujem se svojim učiteljima, mojim dragim profesorima:***

***dr Slobodanu Šerbanoviću,  
dr Bojanu Đorđeviću i  
dr Dušanu Grozdaniću;***

***Veliku zahvalnost i poštovanja iskazujem mojoj mentorki, dr Mirjani Kijevčanin, stručnjaku velikog znanja, čoveku širokih shvatanja i jos šireg, uvek prisutnog osmeha.***

***Mojoj prijateljici, dr Ivoni Radović, od srca zahvaljujem na nesebičnoj pomoći, na praktičnim savetima i vremenu koje mi je posvetila.***

***\* \* \* \* \****

***I na kraju, sa beskrajnom i večitom zahvalnošću ispisujem ime svog vrhovnog učitelja, Dušana Smiljanića, koga sam kao oca izgubila u mladosti, a koga kao učitelja imam i danas.***

---

## SADRŽAJ

---

1. UVOD .....	2
2. DOPUNSKE TERMODINAMIČKE OSOBINE VIŠEKOMPONENTNIH SISTEMA .....	5
2.1. DOPUNSKA MOLARNA ZAPREMINA, PROMENA INDEKSA REFRAKCIJE I PROMENA VISKOZNOSTI SMEŠA.....	5
3. EKSPERIMENTALNI DEO.....	8
3.1. IZBOR SISTEMA ZA ANALIZU .....	8
3.2. KORIŠĆENE HEMIKALIJE .....	18
3.3. PLANIRANJE EKSPERIMENTATA .....	19
3.4. POSTUPAK PRIPREME UZORKA .....	20
3.5. OSNOVNE KARAKTERISTIKE I NAČIN RADA GUSTINOMERA DMA 5000.....	21
3.6. OSNOVNE KARAKTERIRISTIKE I NAČIN RADA REFRAKTOMETRA RXA 156 .....	24
3.7. OSNOVNE KARAKTERISTIKE I NAČIN RADA VISKOZIMETRA SVM 3000.....	26
4. REZULTATI EKSPERIMENTALNIH MERENJA .....	29
4.1. REZULTATI EKSPERIMENTALNIH MERENJA BINARNIH SISTEMA.....	29
4.1.1. REZULTATI EKSPERIMENTALNIH MERENJA GUSTINE .....	29
4.1.2. REZULTATI EKSPERIMENTALNIH MERENJA INDEKSA REFRAKCIJE.....	45
4.1.3. REZULTATI EKSPERIMENTALNIH MERENJA VISKOZNOSTI.....	50
4.2. REZULTATI EKSPERIMENTALNIH MERENJA TERNARNIH SISTEMA.....	56
4.2.1. REZULTATI EKSPERIMENTALNIH MERENJA GUSTINE .....	56
5. MODELOVANJE DOPUNSKE MOLARNE ZAPREKINE, INDEKSA REFRAKCIJE I VISKOZNOSTI SMEŠA.....	61
5.1. MODELOVANJE OSOBINA BINARNIH SISTEMA.....	61
5.1.1. KORELISANJE $V^E$ POMOĆU CEOS I CEOS/ $G^E$ MODELA .....	61
5.1.2. IZRAČUNAVANJE $n_D$ I $V^E$ IZ INDEKSA REFRAKCIJE ČISTIH KOMPONENTI.....	73
5.1.3. PREDVIĐANJE I KORELISANJE VISKOZNOSTI $\eta$ .....	80
5.2. MODELOVANJE $V^E$ OSOBINA TERNARNIH SISTEMA .....	98
5.2.1. KORELISANJE $V^E$ POMOĆU CEOS I CEOS/ $G^E$ MODELA .....	98
5.2.2. PREDSKAZIVANJE $V^E$ POMOĆU EMPIRIJSKIH, CEOS I CEOS/ $G^E$ MODELA .....	99
6. ZAKLJUČCI .....	102
7. LITERATURA .....	107
PRILOG – TABELE.....	111

## 1. UVOD

Za potpuno razumevanje termodinamičkih i transportnih osobina čistih organskih jedinjenja i višekomponentnih tečnih smeša neophodno je poznavati njihove fizičko hemijske osobine u celom opsegu sastava, koje su merene na različitim uslovima pritisaka i temperatura. Studije termodinamičkih osobina doprinose razumevanju ponašanja različitih organskih jedinjenja i funkcionalnih grupa, a od velikog su značaja i za razumevanje međumolekulskih interakcija u binarnim i ternarnim smešama. Znanje o ovim osobinama je neophodno u većini inženjerskih proračuna gde su strujanje i mešanje fluida važan faktor. Ove informacije su veoma korisne za projektovanje industrijskih procesa i opreme kada je potrebno uspostaviti termodinamičke modele pomoću kojih se određuju osnovne veličine neophodne za materijalne, energetske i eksergetske bilanse.

U doktorskoj tezi su eksperimentalno određivani gustina, indeks refrakcije i viskoznost organskih jedinjenja, kao i njihovih binarnih i ternarnih smeša. Komponente sistema su izabrane tako da pripadaju različitim grupama jedinjenja, kao i da podaci za termodinamičke osobine binarnih i ternarnih sistema, koji se obrađuju u ovoj tezi, ne postoje u literaturi na pojedinim temperaturama ili temperaturnom intervalu, što pruža osnovu za proširenje baze podataka koja je za ove veličine već uspostavljena. Pri izboru sistema vodilo se računa da komponente i odgovarajuće smeše imaju široku industrijsku primenu, tj. da su značajne sa aspekta razvoja termodinamičkih modela koji bi se upotrebili za projektovanje postrojenja u različitim procesnim industrijama. Takođe, svaka rekonstrukcije postojećih postrojenja ima za cilj optimizaciju procesa proizvodnje i smanjenje emisije štetnih gasova, tako treba odabrati i komponente i smeše koji su zagađivači životne sredine. Odabrane komponente u realnim smešama su složenih struktura i prilikom mešanja se javljaju različiti tipovi međumolekulskih interakcija, što će usloviti manje ili veće odstupanje od idealne smeše.

Za analizu su odabrani sistemi alkohola (1-butanol i 2-butanol) sa hlorovanim organskim derivatom (hloroform), aromatom (benzen), aromatičnim estrom (dimetilftalat), cikličnim etrom (tetrahidrofuran) i alifatičnim ketonom (2-butanon): 1-butanol + hloroform, 1-butanol + benzen, 2-butanol + hloroform, 2-butanol + benzen, dimetilftalat + 1-butanol, dimetilftalat + 2-butanol, dimetilftalat + 2-butanon, dimetilftalat + tetrahidrofuran, 1-butanol + hloroform + benzen i 2-butanol + hloroform + benzen.

Esperimentalna merenja gustine su izvršena na digitalnom gustinomeru tipa Anton Paar DMA 5000, preciznosti  $10^{-6}$  g·cm<sup>-3</sup> i tačnosti  $5 \times 10^{-6}$  g·cm<sup>-3</sup>. Indeks refrakcije je određen pomoću Anton Paar RXA 156 refraktometra, preciznosti  $2 \times 10^{-5}$ . Viskoznost je merena pomoću viskozimetra SVM 3000, preciznosti 0.1%.

Na osnovu izmerenih gustina, indeksa refrakcije i viskoznosti određena su dopunska zapremina, promena indeksa refrakcije, odnosno promena viskoznosti smeša. Eksperimentalni podaci su obrađeni pomoću empirijskih jednačina Redlich-Kister i Nagata-Tamura, a rezultati su analizirani sa aspekta uticaja komponenata smeša, kao i uticaja temperature, na međumolekulske interakcije do kojih dolazi prilikom mešanja.

Pored eksperimentalnog određivanja u ovoj tezi je ispitana primenljivost različitih vrsta termodinamičkih modela (empirijskih i poluempirijskih) za predviđanje i korelisanje eksperimentalno dobijenih termofizičkih osobina višekomponentnih organskih smeša neelektrolita.

Uspešnost predviđanja dopunske zapremine sistema ispitana je primenom empirijskih jednačina Radojković [1], Kohler [2], Jacob-Fitzner [3], Colinet [4], Tsao-Smith [5], Toop [6], Scatchard [7] i Rastogi [8] polinomskog tipa.

Dopunska zapremina smeša je određena i primenom kubne jednačine stanja (PRSV) u koju su ugrađena savremena pravila mešanja kod kojih su parametri *a* i *b* funkcija sastava (vdW1) ili koji za određivanje koeficijenata aktivnosti uključuju modele na bazi dopunske Gibbsove energije (TCBT) [9-11].

Indeks refrakcije je važna osobina supstanci i ima široku primenu u industriji, kako za praćenje parametara tokom proizvodnog procesa, tako i za kontrolu kvaliteta. U hemijskoj industriji primenjuju se pri određivanju koncentracija u procesima destilacije ili rektifikacije, kao i u medicini i u industriji proizvodnje poluprovodnika.

Kako uvek postoji potreba za povezivanjem termodinamičkih veličina, u ovoj doktorskoj tezi dati su rezultati predviđanja dopunske molarne zapremine smeša iz indeksa refrakcije čistih komponenti korišćenjem Lorentz-Lorenz [12,13], Dale-Gladstone [14], Eykman [15], Arago-Biot [14], Newton [16] i Oster [17] pravila mešanja.

Viskoznost je važna termofizička osobina tečnosti. Njeno korišćenje je u tesnoj vezi sa mnogim praktičnim i teorijskim problemima, kao što su procesi koji uključuju prenos količine kretanja, toplote i mase, procesi sa biološkim membranama, itd. Osim toga, poznavanje viskoznosti tečnih smeša se smatra efikasnom metodom za izučavanje molekulskih interakcija u tečnim smešama.



U ovom radu su za određivanje viskoznosti smeša korišćeni prediktivni model UNIFAC-VISCO [18-19] i korelativni jednoparametarski Teja-Rice [18,20,21], dvoparametarski Three-body McAllister [22] i troparametarski Four-body McAllister [23] modeli. Kvalitet dobijenih rezultata primenom pomenutih modela je utvrđen poređenjem sa eksperimentalno određenim vrednostima. Korelativni modeli za izračunavanje viskoznosti tečnih smeša u sebi sadrže interakcione parametre. U slučaju UNIFAC-VISCO modela, na osnovu eksperimentalnih podataka, optimizacionom metodom su utvrđene nove vrednosti interakcionih parametara funkcionalnih grupa razmatranih komponenata.

Prednost primene prediktivnog modela je što se viskoznost smeša može izračunati na osnovu poznavanja viskoznosti čistih komponenata i doprinosa odgovarajućih funkcionalnih grupa. Nedostatak prediktivnog modela je što doprinosi pojedinih grupa moraju biti veoma precizno određeni da bi se dobili zadovoljavajući rezultati. Pogodni su za primenu pod različitim uslovima temperature, pritiska i sastava.

Korelativni modeli daju bolje rezultate u odnosu na prediktivne, ali uključuju optimizaciju jednog ili više interakcionih parametara, što zahteva eksperimentalne podatke, smanjuje fleksibilnost modela i ograničava njegovu primenu na uslove pritiska i temperatura pod kojima su interakcioni parametri određeni.

## 2. DOPUNSKE TERMODINAMIČKE OSOBINE VIŠEKOMPONENTNIH SISTEMA

### 2.1. DOPUNSKA MOLARNA ZAPREMINA, PROMENA INDEKSA REFRAKCIJE I PROMENA VISKOZNOSTI SMEŠA

Dopunska molarna zapremina  $V^E$ , promena indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  i promena viskoznosti  $\Delta \eta$  predstavljaju vrlo bitan kvalitativni i kvantitativni pokazatelj neidealnosti smeša, koja potiče od fizičke i hemijske različitosti komponenata.

Dopunska molarna zapremina smeše  $V^E$ , promena indeksa refrakcije smeše  $\Delta n_D$  i promena viskoznosti smeše  $\Delta \eta$  su definisane sledećim jednačinama:

$$V^E = V - \sum_{i=1}^N x_i V_i \quad (2.1)$$

$$\Delta n_D = n_D - \sum_{i=1}^N x_i n_{Di} \quad (2.2)$$

$$\Delta \eta = \eta - \sum_{i=1}^N x_i \eta_i \quad (2.3)$$

gde su  $V$ ,  $n_D$ ,  $\eta$  molarna zapremina, indeks refrakcije i viskoznost smeše,  $V_i$ ,  $n_{Di}$ ,  $\eta_i$  molarna zapremina, indeks refrakcije i viskoznost čiste komponente  $i$ ,  $x_i$  molski udeo komponente  $i$ , a  $N$  broj komponenata smeše.

Za slučaj binarnog sistema iz jednačina (2.1), (2.2) i (2.3) izvode se izrazi za dopunsku molarnu zapreminu  $V^E$ , promenu indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  i promenu viskoznosti  $\Delta \eta$  koje se određuju iz eksperimentalno izmerenih gustina, indeksa refrakcije i viskoznosti:

$$V^E = \frac{x_1 M_1 + x_2 M_2}{\rho} - \left( \frac{x_1 M_1}{\rho_1} + \frac{x_2 M_2}{\rho_2} \right) \quad (2.4)$$

$$\Delta n_D = n_D - (x_1 n_{D1} + x_2 n_{D2}) \quad (2.5)$$

$$\Delta \eta = \eta - (x_1 \eta_1 + x_2 \eta_2) \quad (2.6)$$

U jednačinama (2.4), (2.5) i (2.6)  $x_1$  i  $x_2$  predstavljaju molske udele komponenata 1 i 2, dok su  $M_1$  i  $M_2$ ,  $\rho_1$  i  $\rho_2$ ,  $n_{D1}$  i  $n_{D2}$  i  $\eta_1$  i  $\eta_2$  molarne mase, gustine, indeksi refrakcije i viskoznosti čistih komponenata 1 i 2, respektivno. Gustina, indeks refrakcije i viskoznost binarne smeše su označeni sa  $\rho$ ,  $n_D$  i  $\eta$ , respektivno.

Metode eksperimentalnog određivanja  $\rho$ ,  $n_D$  i  $\eta$  su prikazane u poglavlju 3.

Eksperimentalne vrednosti  $V^E$ ,  $\Delta n_D$  i  $\Delta \eta$  binarnih smeša, su u ovom radu prikazane tabelarno i grafički.

Analitička zavisnost eksperimentalnih vrednosti  $V^E$ ,  $\Delta n_D$  i  $\Delta \eta$  od sastava binarnih smeša daje se Redlich-Kisterovim (RK) polinomom [24]:

$$Y_{ij} = x_i x_j \sum_{k=1}^m A_k (x_i - x_j)^{k-1} = x_i x_j \sum_{k=1}^m A_k (2x_i - 1)^{k-1} \quad (2.7)$$

U jednačini (2.7),  $Y_{ij}$  označava dopunsku molarnu zapreminu  $V^E$  ili promenu indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  ili promenu viskoznosti  $\Delta \eta$  binarnog sistema, a  $A_k$  su parametri polinoma. Optimalan broj parametara RK polinoma se određuje primenom statističkog F-testa [25].

Grafičkim prikazom rezultata  $V^E - x_1$  ili  $\Delta n_D - x_1$  ili  $\Delta \eta - x_1$  dobija se bolji uvid u neidealno ponašanje binarne smeše. Iz grafičkih prikaza rezultata  $V^E - x_1$ ,  $\Delta n_D - x_1$  i  $\Delta \eta - x_1$  vide se različiti oblici krivih koji su rezultat delovanja različitih međumolekulskih interakcija komponenata, gde ili jedna dominira u celom koncentracionom opsegu ili se njihovi uticaji smenjuju sa promenom sastava i temperature.

Dobijaju se krive sa pozitivnim ili negativnim vrednostima  $V^E$ ,  $\Delta n_D$  i  $\Delta \eta$ , sa simetričnim ili nesimetričnim oblikom, S-oblikom krive koja menja znak, a sve u zavisnosti od toga da li preovlađuju sile kontrakcije ili ekspanzije u smeši. U slučaju da je razlika u veličinama molekula komponenata velika ili kad postoje veliki procepi u mreži molekula, tada dolazi do smeštanja molekula jedne komponente u šupljinu molekula druge komponente i javlja se kontrakcija smeše. Takođe, do kontrakcije smeše dolazi i u slučaju dipol-dipol i dipol-indukovani dipol interakcija ili delovanja van der Walsovovih sila. U slučaju da su prisutne sile disperzije, sterne (prostorne) smetnje ili imamo nepovoljno geometrijsko slaganje ili elektrostatičko odbijanje između molekula komponenata dolazi do ekspanzije smeše.

U ovom radu rezultati su grafički prikazani i na način:  $V^E/(x_1 x_2) - x_1$  ili  $\Delta n_D/(x_1 x_2) - x_1$  ili  $\Delta \eta/(x_1 x_2) - x_1$ , što je pogodno jer se koristi oblik zavisnosti čije odstupanje od linearnosti i vrednost nagiba dopunjuju sliku neidealnog ponašanja smeše.

Za slučaj ternarnog sistema iz jednačine (2.1) dobija se sledeća jednačina za izračunavanje dopunske molarne zapremine  $V^E$ :

$$V^E = \frac{x_1 M_1 + x_2 M_2 + x_3 M_3}{\rho} - \left( \frac{x_1 M_1}{\rho_1} + \frac{x_2 M_2}{\rho_2} + \frac{x_3 M_3}{\rho_3} \right) \quad (2.8)$$

U jednačini (2.8)  $\rho$  predstavlja gustinu ternerne smeše.

Dobijeni rezultati za dopunsku molarnu zapreminu  $V^E$  ternarnih sistema, kao i kod binarnih sistema, su prikazani tabelarno i grafički. Za analitički pristup korišćen je Nagata-Tamura (NT) polinom [26], koji primenjen na izračunavanje  $V^E$  ternarne smeše ima oblik:

$$V_{123}^E = V_{12}^E + V_{13}^E + V_{23}^E + x_1 x_2 x_3 RT (B_0 - B_1 x_1 - B_2 x_2 - B_3 x_1^2 - B_4 x_2^2 - B_5 x_1 x_2 - B_6 x_1^3 - B_7 x_2^3 - B_8 x_1^2 x_2) \quad (2.9)$$

gde  $B_0, B_1, \dots, B_8$  predstavljaju optimizovane parametre dobijene iz  $V^E$  podataka ternarnog sistema, a  $V_{ij}^E$  označavaju binarne doprinose dobijene iz jednačine (2.7) računane sa molskim udelima komponentata u ternarnoj smeši.

Za prikazivanje eksperimentalnih  $V^E$  podataka ternarnog sistema korišćena su tri tipa grafika:  $V^E - x_2$  po linijama konstantnog odnosa prve i treće komponente ( $x_1/x_3$ ), prostorni prikaz  $V^E$  površi dobijenih korelisanjem eksperimentalnih podataka Nagata-Tamura polinomom (jednačina (2.9)) i  $x_1 x_2 x_3$  dijagram u kojem su date linije konstantnih  $V_{123}^E$  vrednosti dobijene presecanjem ternarne površi horizontalnim ravnima.

Za prikazivanje rasipanja eksperimentalnih tačaka oko krive dobijene RK polinomom (jednačina (2.7)) ili oko površi dobijene NT polinomom (jednačina (2.9)) koriste se devijacija ( $\sigma$ ) i srednja procentualna greška (PD(%)), definisane sledećim jednačinama:

$$\sigma = \left[ \frac{\sum_{i=1}^K (Y_{\text{eksp}} - Y_{\text{rač}})_i^2}{K} \right]^{1/2} \quad (2.10)$$

$$PD(\%) = \frac{100}{K} \sum_{i=1}^K \left| \frac{Y_{\text{eksp}} - Y_{\text{rač}}}{Y_{\text{eksp,maks}}} \right|_i \quad (2.11)$$

gde  $Y_{\text{eksp}}$  predstavlja eksperimentalne,  $Y_{\text{rač}}$  izračunate i  $Y_{\text{eksp,maks}}$  maksimalne eksperimentalne vrednosti  $V^E$ ,  $\Delta n_D$  ili  $\Delta \eta$  iz jednačine (2.7) za binarnu ili iz jednačine (2.9) za ternarnu smešu.  $K$  je broj eksperimentalnih tačaka.

### 3. EKSPERIMENTALNI DEO

#### 3.1. IZBOR SISTEMA ZA ANALIZU

Termodinamičke osobine smeša i njihova zavisnost od sastava nalaze primenu u važnim hemijskim, industrijskim i biološkim procesima. Studije takvih osobina kao što su dopunska molarna zapremina, promena indeksa refrakcije i promena viskoznosti višekomponentnih tečnih smeša su korisne za razumevanje prirode i jačine međumolekulskih interakcija komponenata. Poznavanje transportnih i dopunskih termodinamičkih svojstava velikog broja sistema sa širokim rasponom molskih udela komponenata treba da posluži našem krajnjem cilju, a to je proširivanje baze termodinamičkih podataka. Nisu do sad poznate studije termodinamičkih osobina razmatranih sistema na odabranim uslovima merenja (temperature i pritiska), pa su ta saznanja bila smernica pri izboru sistema za analizu u okviru ove doktorske teze.

Takođe, vodilo se računa da termodinamičke osobine odabranih komponenata i odgovarajuće smeše budu široko rasprostranjene i značajne sa aspekta razvoja termodinamičkih modela koji bi se upotrebili za projektovanje novih postrojenja u različitim procesnim industrijama. Kako svaka rekonstrukcija postojećih postrojenja ima za cilj optimizaciju procesa proizvodnje i smanjenje emisije štetnih gasova, tako treba imati u vidu i ekološki značaj odabranih komponenata i smeša. Pri izboru komponenata u realnoj smeši se vodilo računa da su mešljive, da hemijski ne reaguju, da su različitih struktura i da prilikom mešanja formiraju više tipova međumolekulskih veza i pakovanja, što će usloviti manje ili veće odstupanje od idealne smeše.

Ponašanje alkohola sa aromatičnim ugljovodnikom je bilo predmet izučavanja mnogih istraživačkih laboratorija, pri čemu je pretpostavljeno raskidanje vodoničnih veza u alkoholu sa dodatkom benzena. Molekul benzena je nepolaran i neasosovan, dok su alkoholi polarna jedinjenja sa asosovanim vodoničnim vezama u čistom stanju. Binarne smeše benzena sa alkoholom su interesantne zbog mogućih slabih vodoničnih veza koje uključuju  $\pi$  elektrone benzena i protone hidroksilne grupe alkohola. Slabe vodonične veze aromatičnog prstena sa donorima protona, kao što je alkohol, igraju važnu ulogu u strukturi pojedinih biomolekula.

Alkoholi i benzen imaju široku primenu kao rastvarači u hemijskoj industriji. 1-Butanol se koristi u proizvodnji butilakrilata, butilacetata, dibutilftalata, butilestara i butiletara, kao što je etilen glikol monobutiletar. Ostale upotrebe uključuju industrijsku proizvodnju farmaceutskih proizvoda i polimera. Takođe, koristi se kao rastvarač za proizvodnju urea-formaldehidnih i melamin-formaldehidnih smola, rastvarač za ekstrakciju eteričnih ulja, u proizvodnji antibiotika, hormona i vitamina i rastvarač za premazna sredstva. 2-Butanol je intresantan kao mono hidroksi rastvarač. Nastaje prirodno kao proizvod fermentacije ugljenih hidrata, koristi se za proizvodnju ribljeg koncentrata proteina, voćnih esencija, kao začini hrani; njegova molekulska asimetrična struktura ga čini dobrim rastvaračem za asimetrične sinteze. Benzen se upotrebljava kao sredstvo za ekstrakciju i kao sirovina za druge proizvode.

U daljem tekstu biće dat kratak pregled objavljenih radova u poslednje dve decenije u kojima su eksperimentalni podaci analizirani sa aspekta međumolekulskih interakcija odabranih komponenata.

U radovima [27-29] se određivala dopunska molarna zapremina  $V^E$  binarnih sistema benzena sa linearnim alkoholima, gde je prikazano prisustvo slabih interakcija donator-primlac elektrona između aromatičnog prstena i vodonika hidroksilne grupe alkohola, kao i uticaj dužine lanca alkohola na dopunsku molarnu zapreminu  $V^E$ .

Pokazalo se od strane raznih istraživača [30-32] da grananje molekula u alkoholu utiče na vodonične veze, kao i na interakcije donator-primlac elektrona. Rezultati ukazuju da grananje alkil grupe butanola, pored hidroksilne grupe, pravi i vodonične veze i interakcije donator-primlac elektrona između molekula butanola i benzena manje efikasnim.

Pored alkohola i hloroform se koristi kao rastvarač u farmaceutskoj industriji i za proizvodnju boja i pesticida. Poznavanje dopunske molarne zapremine  $V^E$  i termodinamičkih osobina smeša su od značaja, kako za projektovanje skladišnih prostora, tako i za rukovanje ovim smešama. Binarne smeše alkohola i hloroforma su interesantne kako zbog njihove izražene sklonosti ka stvaranju vodoničnih veza između atoma kiseonika hidroksilne grupe alkohola i molekula hloroforma, tako i zbog specifične interakcije atoma kiseonika hidroksilne grupe alkohola i atoma hlora u molekulu hloroforma.

U radovima [33, 34] je ispitivan uticaj porasta alifatičnog niza u molekulu alkohola na volumetrijske, transportne i akustične osobine smeša linearnih alkohola i hloroforma.

Pregled literature je ukazao da su poznati podaci za gustinu  $\rho$  i dopunsku molarnu zapreminu  $V^E$  za binarnu smešu 1-butanola sa benzenom na 20°C [28], 25°C [27, 31], 30°C [29, 30] i 35°C [27, 32], 2-butanola sa benzenom na 30°C [30] i 35°C [32], kao i za binarnu smešu 1-butanola sa hloroformom na 30°C [33, 34] i 40°C [33].

Postoji nedostatak studije dopunske molarne zapremine  $V^E$ , kako u binarnoj tečnoj smeši hloroforma i linearnog molekula alkohola na drugim temperaturama, tako i u binarnoj tečnoj smeši hloroforma i razgranatog molekula alkohola.

Imajući u vidu gore navedene kriterijume za eksperimentalna merenja, u ovom radu odabrana su sledeća jedinjenja: linearni alkohol *1-butanol*; izomer butanola *2-butanol*, da bi se ispitaio efekat pozicije OH grupe u molekulu alkohola na dopunsku molarnu zapreminu  $V^E$ ; aromatični ugljovodonik: *benzen*, koji u smeši sa alkoholima svojom strukturom stvara dominantne interakcije između -OH grupe alkohola i  $\pi$  elektrona aromatičnog benzenovog prstena; alkilhalogenid: *hloroform*, koji u smeši sa alkoholima stvara tri vrste interakcija koje se javljaju između molekula hloroforma i alkohola.

Za analizu su odabrana četiri binarna sistema i dva ternarna sistema alkohola, hloroforma i benzena: *1-butanol+benzen*, *2-butanol+benzen*, *1-butanol+hloroform*, *2-butanol+hloroform*, *1-butanol+hloroform+benzen* i *2-butanol+hloroform+benzen*. Sva merenja su vršena u temperaturnom intervalu od 15 do 40°C da bi se ispitaio uticaj promene temperature na dopunsku molarnu zapreminu  $V^E$ .

U ovom radu su dati novi eksperimentalni podaci o termodinamičkim osobinama binarnih smeša koje sadrže aromatičan estar (*dimetilftalat*), alifatični keton (*2-butanon*), ciklični etar (*tetrahidrofuran*) i alkohole *prim-* i *sec-butanol*, u cilju ispitivanja uticaja prisustva različitih funkcionalnih grupa na termodinamičke osobine tečnih smeša.

Oksidovana jedinjenja, kao što su etri i alkoholi se koriste kao aditivi benzina i obimno se istražuju zbog velikog industrijskog značaja. Glavna primena tetrahidrofurana je kao industrijski rastvarač za PVC i lakove. Ftalati su daleko najrasprostranjeniji plastifikatori, primarno služe za omekšavanje i fleksibilnost polivinil hlorida (PVC), za aplikacije u industriji automobila, građevinskog materijala, kablova, parketa, medicinskih uređaja i igračaka. U manjoj količini ftalati se dodaju u lepkeve, zaptivače i boje kako bi im poboljšali performanse.

Takođe se koriste kao sastojci insekticida, kao rastvarači u lakovima i u pesticidima. 2-Butanon je jako polarno jedinjenje, koje pokazuje izrazite osobine rastvarača, zbog dielektrične konstante i drugih karakteristika. Iz tih razloga on je često pravi izbor rastvarača za različite premazne sisteme. Primeri specifične primene uključuju njegovo korišćenje kao rastvarača za nitrocelulozu, lakove, gumu, vinilne filmove, smole, polistiren, poliuretan i akrilne premaze, koristi se u proizvodnji sintetičke kože, papira i aluminijumske folije.

U radu [35] je ispitivan uticaj veličine i oblika molekula, dužine lanca i stepena molekulskog pakovanja na dopunsku molarnu zapreminu  $V^E$ , viskoznost  $\eta$  i dopunsku Gibbsovu energiju  $G^E$  smeša dimetilftalata i linearnih alkohola na temperaturama 25°C i 30°C. Međutim, smeše koje sadrže dimetilftalat sa tetrahidrofuranom i 2-butanonom nisu bile predmet izučavanja istraživačkih laboratorija.

Da bi se ispitao uticaj grananja alkohola i da bi se dobio uvid u uticaj promene temperature na dopunsku molarnu zapreminu  $V^E$ , promenu indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  i promenu viskoznosti  $\Delta\eta$  izabrana su četiri binarna sistema *dimetilftalat+1-butanol*, *dimetilftalat+2-butanol*, *dimetilftalat+2-butanon* i *dimetilftalat+tetrahidrofur*. Sva eksperimentalna merenja vršena su u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K, sa intervalom promene temperature od 5 K i na atmosferskom pritisku.

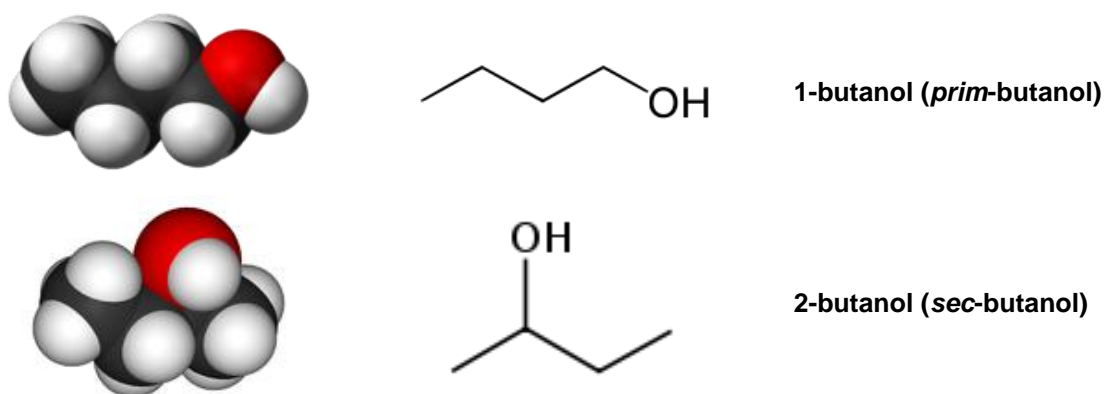
U daljem tekstu je data analiza fizičke strukture i osnovne karakteristike različitih klasa organskih jedinjenja kojima pripadaju komponente odabranih sistema.

**Alkoholi** su organska jedinjenja čija je opšta hemijska formula ROH, gde R može biti bilo koja alkilna ili supstituirana alkilna grupa. Ove grupe mogu biti primarne, sekundarne ili ternarne u otvorenom lancu ili ciklične; sadržavati dvostruke veze, atom halogena ili aromatični prsten. Svi alkoholi sadrže hidroksilnu (-OH) grupu, koja kao funkcionalna grupa određuje svojstva karakteristična za ovu vrstu jedinjenja. Promene u strukturnoj grupi R mogu uticati na brzinu kojom alkohol podleže nekoj reakciji, a u nekim slučajevima mogu uticati i na vrstu reakcije. Alkoholi sadrže vrlo polarnu -OH grupu, koja pre svega sadrži vodonik vezan na vrlo elektro negativan kiseonik, te na taj način stvara vodonične veze. Ovo svojstvo alkohola dolazi do izražaja kod interakcija alkohola u smešama.



Alkoholi su kao i voda asosovane tečnosti, a njihove veoma visoke tačke ključanja se pripisuju većoj energiji koju je potrebno utrošiti za raskidanje vodoničnih veza, koje vežu molekule među sobom. Niži alkoholi se mešaju sa vodom, sile koje drže molekule zajedno, su kod alkohola iste kao i kod vode, tako da se ove dve vrste molekula mogu mešati, a pojedine molekule međusobno zameniti. Naime, energija koja je potrebna da se raskine veza između dva molekula vode, odnosno dva molekula alkohola, nastaje oslobađanjem energije pri stvaranju iste veze između molekula vode i molekula alkohola. To važi, samo za niže alkohole u kojima je –OH grupa veliki deo molekula. Kad postoji dug alifatski lanac uz malu –OH grupu, jedinjenje ima više svojstva alkana.

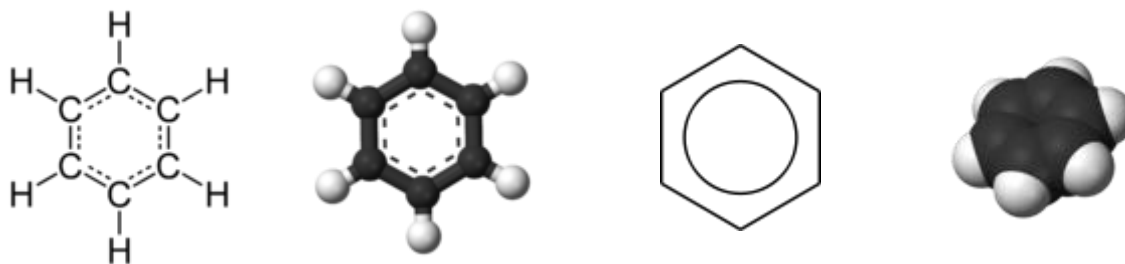
Na slici 3.1 su prikazane strukture alkohola koji su odabrani za analizu u ovoj doktorskoj tezi.



Slika 3.1 Strukture alkohola korišćenih u ovom radu

**Benzen** je najjednostavniji aromatični ugljovodonik. Benzenov prsten je šestočlani koji obrazuju atomi ugljenika u strukturi molekula ugljovodonika benzena. Osnovni je strukturni sastojak organskih aromatičnih jedinjenja. Slobodni elektronski parovi ugljenika u prstenu su delokalizovani iznad i ispod ravni prstena, grade delokalizovane elektronske oblake, koji u interakciji sa drugim polarnim molekulima formiraju interakcije dipol - indukovani dipol. Napolarni molekuli benzena međusobno se privlače Londonovim silama. Ovakva struktura je hemijski veoma postojana pa su jedinjenja koja poseduju benzenov prsten, i pored postojanja nezasićenih veza, pretežno dezaktivirana za reakcije adicije. Prsten je podložan elektrofilnom dejstvu, odnosno elektrofilnoj aromatičnoj supstituciji pri kojoj se održava aromatičnost. Dobijeni derivati imaju široku primenu.

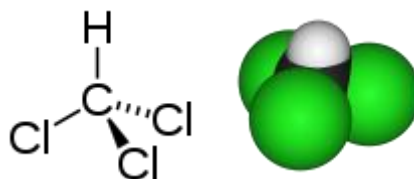
Na slici 3.2 je prikazana struktura benzena.



Slika 3.2 Struktura benzena

**Hloroform** je organsko jedinjenje, hemijske formule  $\text{CHCl}_3$ , bezbojna, slatko mirisna i gusta tečnost. Hloroform je uobičajeni rastvarač u laboratoriji, jer je relativno nereaktivan, meša se sa većinom organskih tečnosti, a povoljno je nestabilan. Hloroform je slabo polarno jedinjenje, koje u smešama nema mogućnost davanja protona, jer je u molekulu atom vodonika vezan za atom ugljenika. Molekuli hloroforma međusobno se privlače slabijim dipol-dipol interakcijama koje su Coulombovske prirode.

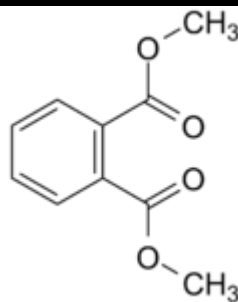
Na slici 3.3 je prikazana struktura hloroforma.



Slika 3.3 Struktura hloroforma

**Dimetilftalat** je ftalat hemijske formule  $(\text{CH}_3)_2(\text{C}_6\text{H}_4(\text{COO}))_2$ . To je metil ester ftalne kiseline i uglavnom se koristi kao aditiv za plastiku, povećava fleksibilnost, transparentnost, trajnost i dugovečnost. Estri su polarniji od etara, ali manje polarni od alkohola. Učestvuju u vodoničnim vezama, kao primaoci vodonika, ne kao donori vodonika, za razliku od alkohola. Ovo svojstvo estara da grade vodonične veze čini ih rastvorljivim u vodi. Prisutnost  $\text{C}=\text{O}$  grupe daje estrima polarni karakter. Estri podležu nukleofilnoj supstituciji, reakciji tipičnoj za derivate karboksilnih kiselina, dejstvo se dešava na atomu ugljenika karboksilne grupe koji je osiromašen elektronima, a rezultat toga je zamena  $-\text{OR}$  grupe sa  $-\text{OH}$  grupom.

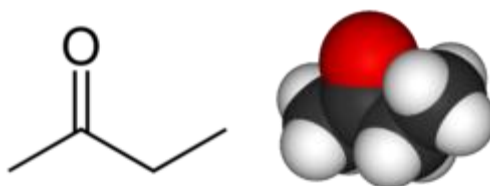
Na slici 3.4 je prikazana struktura dimetilftalata.



Slika 3.4 Struktura dimetilftalata

**2-butanon**, takođe poznat kao metil etil keton ili MEK, je organsko jedinjenje, hemijske formule  $\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{CH}_3$ . Polarna karbonilna grupa  $\text{C}=\text{O}$  čini ketone polarnim jedinjenjima, zbog čega su im tačke ključanja visoke. Budući da sadrže samo vodonikove atome vezane na ugljenike, ne mogu stvarati intermolekulske vodonične veze, pa su im tačke ključanja niže od odgovarajućih alkohola. Niži ketoni su dobro rastvorljivi u vodi, uglavnom zbog stvaranja vodoničnih veza s molekulima vode, rastvorljivi su i u uobičajenim rastvaračima. Karbonilna grupa  $\text{C}=\text{O}$  određuje reakcije ketona, a to je nukleofilna adicija na  $\text{C}=\text{O}$ . Karbonilna grupa ima dvostruku vezu između ugljenika i kiseonika, budući da su pokretljivi  $\pi$  elektroni jako pomereni prema kiseoniku, karbonilni ugljenik ima manjak elektrona, a karbonilni kiseonik je obogaćen elektronima. Budući da u toj reakciji dolazi do nastajanja veze sa karbonilnim ugljenikom, kome nedostaju elektroni, karbonilna grupa je najčešće sposobna da prihvati nukleofilne reagense, koji su bogati elektronima.

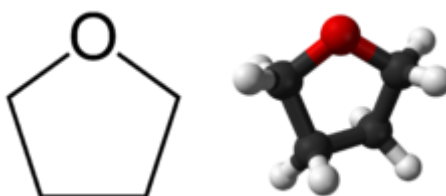
Na slici 3.5 je prikazana struktura 2-butanona.



Slika 3.5 Struktura 2-butanona

**Tetrahidrofuran** je ciklični etar, bezbojno, organsko jedinjenje mešljivo sa vodom, niske viskoznosti na uslovima standardne temperature i pritiska. Ovo heterociklično jedinjenje, hemijske formule  $(\text{CH}_2)_4\text{O}$ . Etri imaju malu vrednost dipolnog momenta. Temperature ključanja etara su relativno niske zbog male polarnosti, znatno niža od temperatura ključanja izomernih alkohola. Vodonične veze koje povezuju molekule alkohola, ne mogu postojati kod etara, koji sadrže vodonike vezane samo za ugljenike. Etri su ratvorljivi u vodi otprilike kao i alkoholi, što se pripisuje stvaranju vodoničnih veza molekula etra i molekula vode. Etri su relativno neaktivna jedinjenja. Etarska veza je stabilna prema kiselinama, oksidirajućim i redukirajućim sredstvima. Do cepanja etarske veze dolazi samo pod vrlo drastičnim uslovima: koncentrisane kiseline uz visoke temperature.

Na slici 3.6 je prikazana struktura tetrahidrofurana.



**Slika 3.6** Struktura tetrahidrofurana

U tabeli 3.1 su date osnovne fizičke karakteristike čistih komponenata: molarna masa  $M$ , kritični parametri  $T_c$ ,  $P_c$ ,  $V_c$ , faktor acentričnosti  $\omega$  i dipolni momenat  $\mu$ .

**Tabela 3.1** Fizičke karakteristike čistih supstanci

<b>Supstanca</b>	<b>M</b>	<b><math>T_c</math></b>	<b><math>P_c</math></b>	<b><math>V_c</math></b>	<b><math>\omega</math></b>	<b><math>\mu</math></b>
	$\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$	K	bar	$\text{cm}^3\cdot\text{mol}^{-1}$		Debye
1-butanol	74.123	563.05	44.23	273.00	0.590	1.80
2-butanol	74.123	536.05	41.79	269.00	0.574	1.70
Benzen	78.114	562.05	48.95	256.00	0.210	0
Hloroform	119.378	536.40	53.70	238.90	0.218	1.01
dimetilftalat	194.184	766.00	27.80	530.00	0.657	2.78
2-butanon	72.107	535.60	41.54	267.00	0.329	2.76
tetrahidrofuran	72.107	540.20	51.90	224.00	0.225	1.75

Idealni tečni rastvori se mogu definisati kao oni kod kojih međumolske interakcije postoje, ali su približno iste između molekula u čistom stanju kao i u smeši. Obrazovanje ovakvih idealnih rastvora, pri bilo kom kvantitativnom odnosu između komponenata, nije praćeno ni promenom zapremine ni nekim toplotnim efektom. Ovakvo ponašanje pokazuje mali broj smeša komponenata koje su sličnih fizičkih i hemijskih osobina, kao na primer izotopa i izotopskih jedinjenja, izomernih jedinjenja, optičkih antipoda, kao i nekih drugih jedinjenja kao što su n-heksan i n-heptan, etilbromid, etiljodid ili n-butilhlorid i n-butilbromid i slično. Tečni rastvori koji se pokoravaju Raulovom zakonu u čitavom opsegu koncentracija i pri svim temperaturama i pritiscima nazivaju se idealnim rastvorima. Idealne tečne smeše pokazuju aditivnost, znači da pritisak pare, gustina, indeks refrakcije, viskoznost i zapremina se linearno menjaju u zavisnosti od količine komponenata u smeši. Neidealni rastvori, realne smeše, pokazuju odstupanje od idealnog ponašanja, tj. pozitivno ili negativno odstupanje od Raulovog zakona. Osobine tečnosti ne pokazuju aditivnost, ne menjaju se linearno u zavisnosti od količine komponenata u smeši, pri mešanju se javlja toplotni efekat i pri mešanju komponente menjaju svoju zapreminu. Komponente se razlikuju po međumolekulskim silama, polarnosti, obliku i veličini molekula, pri mešanju formiraju različite tipove međumolekulskih veza. Rezultat toga je stvaranje van der Waalsovih i vodoničnih veza između molekula različite vrste.

**Van der Walsove veze** su elektrostatičke prirode i ostvaruju se interakcijama dipol-jon, dipol-dipol i indukovani dipol-jon. Molekul ima dipolni moment samo kada se središte negativnog i pozitivnog naboja ne poklope. Dipolni molekuli poseduju spoljašnje električno polje koje je puno slabije od električnog polja jona, ali ipak uzrokuje privlačenje dipolnih molekula, tzv. dipol-dipol privlačenje. Zbog dipolnog momenta takvi molekuli privlače i druge dipolne molekule, kao i pozitivne i negativne jone, tako da se mogu i s njima povezati u jon-dipolnoj vezi. Visoko pozitivno ili negativno nabijeni joni mogu i kod inače nepolarnih molekula izazvati dipol, tzv. indukovani dipol, deformacijom elektronske strukture molekula. Tako između jona i molekula nastaje jon-indukovano dipolno privlačenje.

**Vodonična veza** je vrsta slabe hemijske veze zasnovane na elektrostatičkom privlačenju između atoma vodonika i nekog nukleofilnog atoma koji sadrži slobodne elektronske parove. Ova veza je moguća kada je vodonik povezan kovalentnom vezom sa atomom velike elektronegativnosti (npr. kiseonik, fluor, azot) pri čemu se parcijalno naelektrisanje jako delokalizuje na krajevima malih, kompaktnih molekula ovog tipa. Iako komparativno slaba, vodonična veza je oko 5 puta jača od drugih, standardnih interakcija tipa dipol-dipol.

U tabeli 3.2 su date karakteristike koje su od značaja za analizu rezultata kod binarnih smeša: odnos kritičnih zapremina komponenata ( $V_{C1}/V_{C2}$ ) - da bi se istakla razlika u veličini molekula komponenata smeše, razlika acentričnih faktora ( $|\omega_1 - \omega_2|$ ) - ukazuje na nesimetričnost polja sila komponenata koje čine smešu, razlika dipolnih momenata ( $|\mu_1 - \mu_2|$ ) - ističe moguću izraženiju polarnost smeša u kojima se javljaju komponente sa različitim dipolnim momentima - nepolarne, slabo polarne i polarne.

**Tabela 3.2** Karakteristike binarnih sistema

<b>Sistem</b>	$V_{C1}/V_{C2}$	$ \omega_1 - \omega_2 $	$ \mu_1 - \mu_2  / Debye$
1-butanol (1) + benzen (2)	1.066	0.380	1.80
1-butanol (1) + hloroform (2)	1.143	0.372	0.79
2-butanol (1) + benzen (2)	1.051	0.364	1.70
2-butanol (1) + hloroform (2)	1.126	0.356	0.69
dimetilftalat (1) + 1-butanol (2)	1.941	0.067	0.98
dimetilftalat (1) + 2-butanol (2)	1.970	0.083	1.08
dimetilftalat (1) + 2-butanon (2)	1.985	0.328	0.02
dimetilftalat (1) + tetrahidrofuran (2)	2.366	0.432	1.03

### 3.2. KORIŠĆENE HEMIKALIJE

U ovom radu merene su gustine tečnih organskih jedinjenja: benzen i hloroform; gustine, indeksi refrakcija i viskoznosti: 1-butanol, 2-butanol, dimetilftalat, 2-butanon i tetrahidrofuran; gustine binarnih smeša: 1-butanol+benzen, 2-butanol+benzen, 1-butanol+hloroform i 2-butanol+hloroform; gustine, indeksi refrakcija i viskoznosti binarnih smeša: dimetilftalat+1-butanol, dimetilftalat+2-butanol, dimetilftalat+2-butanon i dimetilftalat+tetrahidrofuran i gustine ternarnih smeša: 1-butanol+hloroform+benzen i 2-butanol+hloroform+benzen.

Gustine, indeksi refrakcije i viskoznosti čistih komponenata i smeša merene su sa visokom preciznošću, zbog čega su korišćene hemikalije morale imati visoku čistoću. Korišćene hemikalije renomiranih proizvođača koje nisu prethodno prečišćavane, čuvane su na tamnom i hladnom mestu. U tabeli 3.3 date su vrednosti čistoće, kao i proizvođači korišćenih hemikalija.

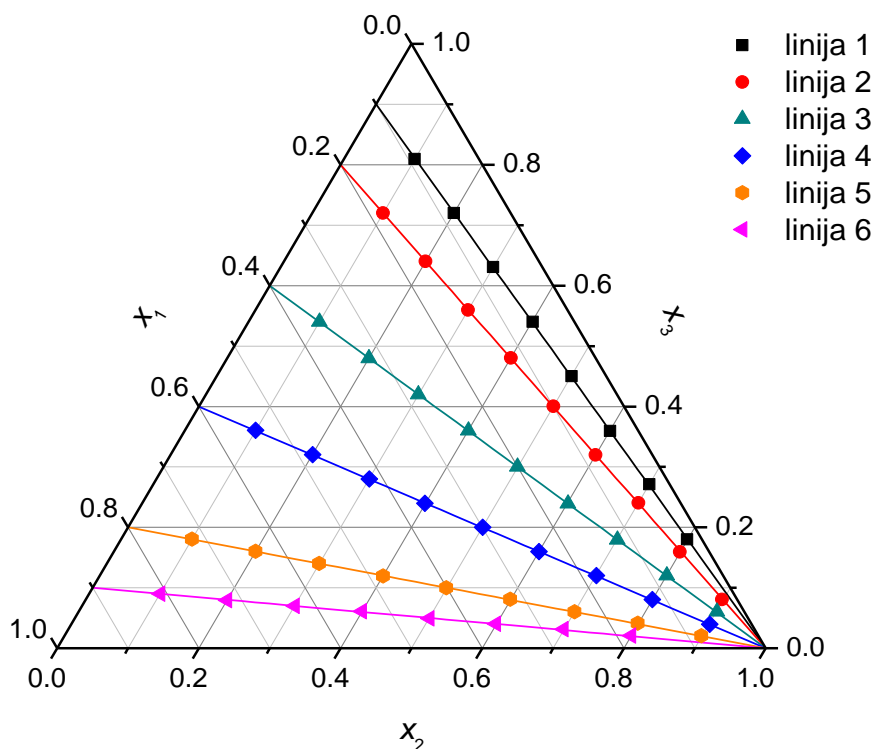
**Tabela 3.3** Supstance korišćene u eksperimentalnom radu

<i>Supstanca</i>	<i>Čistoća</i>	<i>Proizvođač</i>
1-butanol	≥ 99.5 mass %	Merck
2-butanol	≥ 99.0 mass %	Merck
benzen	99.9 mass %	Aldrich
hloroform	99.8 mass %	Riedel-de Haën
dimetilftalat	99 mass %	Fluka
2-butanon	≥ 99.5 %	Merck
tetrahidrofuran	Min 99.5 %	Merck

## 3.3. PLANIRANJE EKSPERIMENTATA

Za merenja gustine, indeksa refrakcije i viskoznosti binarnih smeša i merenja gustine ternarnih smeša pripremljeni su uzorci smeša tako da eksperimentalne tačke pokriju ceo koncentracioni opseg. Uzorci binarne smeše su imali molski udeo prve komponente od 0.1 do 0.9 sa korakom 0.1, dok su za ternarnu smešu sastavi pojedinih komponenti određivani pri konsantnom molskom udelu dve komponente.

Na slici 3.7 dat je dijagram zavisnosti  $x_1x_2x_3$  odakle se može videti način planiranja izvođenja eksperimenta, po linijama konsantnog odnosa  $x_1/x_3$ . Na osnovu ovog dijagrama određeni su sastavi pojedinih komponenti u smeši. U ovom radu su rađena dva ternarna sistema 1-butanol (1) + hloroform (2) + benzen (3) i 2-butanol (1) + hloroform (2) + benzen (3). Izabrano je šest linija konstantnog molskog udela 1-butanol, odnosno 2-butanol, odnosno benzena, dok je molski udeo hloroforma biran od 0.1 do 0.9 sa korakom 0.1.



**Slika 3.7** Dijagram zavisnosti  $x_1x_2x_3$  ternarnog sistema. Linije konstantnog odnosa  $x_1/x_3$ :  $x_1/x_3 = 0.111$  (linija 1);  $x_1/x_3 = 0.250$  (linija 2);  $x_1/x_3 = 0.667$  (linija 3);  $x_1/x_3 = 1.500$  (linija 4);  $x_1/x_3 = 4.000$  (linija 5);  $x_1/x_3 = 9.000$  (linija 6). Planirane eksperimentalne tačke su označene simbolima.



### 3.4. POSTUPAK PRIPREME UZORKA

Pravljenje binarnih i ternarnih smeša, čije su gustine, indeksi refrakcije i viskoznosti određuju, vrši se gravimetrijski na automatskoj vagi Mettler toledo AG204, slika 3.8. Uzorci su pravljene neposredno pre samih merenja, u balonima zapremine 10 cm<sup>3</sup> u koga se redom plastičnim špricom ubrizgavaju određene mase jedne po jedne čiste komponente. Na osnovu izmerenih masa računski se određuje molski sastav formirane smeše. Merenje mase je vršeno na automatskoj vagi preciznosti  $1 \cdot 10^{-4}$  g, tako da je tačnost u određivanju molskog sastava od  $1 \cdot 10^{-4}$ . Da bi merenje mase komponenata bilo što tačnije, pre početka merenja hemikalije su grejane u sušnici radi izdvajanja vezanih mehurića vazduha, a i tokom pravljenja uzoraka vodilo se računa o redosledu dodavanja usled isparavanja pojedinih komponenata.

Na osnovu izračunatog sastava smeše i izmerenih gustina, indeksa refrakcije i viskoznosti računati su dopunska molarna zapremina, promena indeksa refrakcije i promena viskoznosti smeša pomoću jednačina (2.4), (2.5), (2.6) i (2.8).



**Slika 3.8** Mettler Toledo AG204

### 3.5. OSNOVNE KARAKTERISTIKE I NAČIN RADA GUSTINOMERA DMA 5000

Eksperimentalna merenje gustina izvršena su na Tehološko-metalurškom fakultetu u Beogradu, u Laboratoriji za hemijsko-inženjersku termodinamiku. Gustine čistih supstanci, kao i binarnih i ternarnih smeša, merene su na digitalnom gustinomeru za gasove i tečnosti Anton Paar DMA 5000 (slika 3.9) sa preciznošću od  $1 \cdot 10^{-6} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  i tačnošću od  $5 \cdot 10^{-6} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  na atmosferskom pritisku i u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K sa korakom temperature od 5 K. Termostat ugrađen unutar gustinomera (poluprovodnički Peltierov element i sistem za održavanje konstantne temperature) omogućuje termičku stabilnost višu od  $\pm 0.002 \text{ K}$ , dok visoko precizni platinski termometar obezbeđuje tačnost očitavanja temperature do  $\pm 0.001 \text{ K}$ .



Slika 3.9 Digitalni gustinomer Anton Paar DMA 5000

**Princip rada gustinomera.** Princip rada uređaja svodi se na elektronsko merenje frekvencije ( $f$ ), odnosno perioda oscilovanja ( $P$ ), oscilatora. Gustinomer Anton Paar DMA 5000 sadrži softver za preračunavanje vrednosti perioda oscilovanja kapilare ispunjene uzorkom u vrednost gustine uzorka. Oscilator se sa sastoji od šuplje borsilikatne staklene U-cevi poznate zapremine i mase, koja se pomoću Piezo elementa elektronski pobuđuje i dovodi u stanje neprigušenih oscilacija. U-cev osciluje sopstvenom frekvencijom  $f$ , koja je u funkciji mase sistema, koja se meri optički, a beleži se period oscilovanja  $P$  koji se izračunava kao  $P=1/f$ . Masa ubrizganog uzorka menja sopstvenu frekvencu oscilovanja U-cevi zbog promene ukupne mase oscilatora, a zapremina uzorka je konstantna.

**Podešavanje aparature.** Podešavanje aparature je dovođenja aparature u stanje pogodno za upotrebu, određivanjem, odnosno podešavanjem vrednosti konstanti instrumenata A i B pomoću supstanci standardizovanih gustina, suvog vazduha i sveže degazirane, bi-destilovane vode. Podešavanje aparature vrši se ukoliko je odstupanje između očitanih i standardnih vrednosti gustina veće od  $\pm 0.00001 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ , obično na  $20 \text{ }^\circ\text{C}$ .

**Kalibrisanje aparature.** Kalibrisanje aparature se vrši metodom kontrole preciznosti uređaja, koja koristi sertifikovane standarde za gustinu tečnosti. Kalibrisanje se vrši pomoću vode visoke čistoće ("ultra pure water") koja se dobija uz Anton Paar DMA 5000 zajedno sa sertifikatima vrednosti njihovih standardizovanih gustina na različitim temperaturama sa tačnošću  $1\cdot 10^{-5} \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  (Priručnik proizvođača). Ukoliko su odstupanja gustine očitanih i standardnih vrednosti za vodu i vazduh datih u Priručniku proizvođača veće od  $\pm 0.00001 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  mora se pristupiti novom podešavanju instrumenta.

**Postupak merenja gustine uzorka.** Nakon spravljanja uzorka, pomoću plastičnog šprica se uzima zapremina oko  $5 \text{ cm}^3$  i vrši se lagano ubrizgavanje uzorka u kapilaru kroz ulazni otvor. Kada je kapilara potpuno napunjena, špric se ostavlja u otvoru kapilare sve vreme merenja. Pritiskom na dugme start počinje merenje gustine na početnoj zadatoj vrednosti temperature. Gustinomer automatski snižava temperaturu do sledeće zadate vrednosti i vreme potrebno za termostatisiranje do sledeće temperature je oko 10 minuta. Nakon svake izmerene gustine javlja se zvučni signal i na ekranu se pojavljuje izmerena vrednost na zadatoj temperaturi. Nakon završetka merenja gustina u zadatom temperaturnom intervalu, vrednosti se mogu očitati iz memorije aparata. Po završetku merenja gustine uzorka temperatura počinje automatski da raste do zadate početne vrednosti. Nakon završetka merenja, na mesto šprica stavlja se odgovarajuće crevo, kroz koje se nakon pritiska na dugme pump ubacuje vazduh kojim se potiskuje uzorak iz kapilare i ona se suši.

Posle svakog merenja vrši se čišćenje kapilare najpre etanolom, a zatim acetonom, koji se takođe ubrizgavaju špricom i vrši se sušenje kapilare stavljanjem creva za dovod vazduha na otvor i puštanjem u rad vazdušne pumpe, pritiskom na dugme pump. Nakon toga počinje termostatiranje uzorka (u ovom slučaju vazduha) do početne vrednosti temperature, a zatim se na istoj meri gustina vazduha, čiju vrednost očitavamo na ekranu aparature. Ukoliko vrednost gustine nije zadovoljavajuća, ponovo se u rad pušta pumpa za vazduh. Procedura se ponavlja sve dok se ne dobije zadovoljavajuća vrednost gustine vazduha, što je merilo da je kapilara potpuno čista, čime je uređaj spreman za merenje gustine novog uzorka.

**Greške merenja gustine.** Postoji više mogućnosti nastajanja greške prilikom samog procesa merenja. Tokom punjenja kapilare, prilikom brzog ubrizgavanja tečnosti može doći do prodora mehurova vazduha u uzorak, što će prouzrokovati netačno merenje gustine. Takođe, hemikalije mogu dužim stajanjem da vežu mehurove vazduha ili vlagu, pa ih je pre pripreme uzorka potrebno degazirati, ili sušenjem u sušnici ili pomoću ultrazvučnog kupatila. Nedovoljno čista kapilara čini svako merenje gustine netačnim, pa treba posebnu pažnju posvetiti čišćenju kapilare.

### 3.6. OSNOVNE KARAKTERIRISTIKE I NAČIN RADA REFRAKTOMETRA RXA 156

Eksperimentalna merenja indeksa refrakcije, kako čistih supstanci, tako i njihovih binarnih smeša vršena su na refraktometru Anton Paar RXA 156, na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu, u Laboratoriji za hemijsko-inženjersku termodinamiku. Refraktometar RXA 156 predstavlja nadogradnju na gustinomer Anton Paar DMA 5000 (slika 3.10), tako da se merenje gustine i indeksa refrakcije vrši na istom uzorku na atmosferskom pritisku i u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K sa korakom temperature od 5 K. Automatsku kontrolu temperature vrše integrisani termostati u oba instrumenta. Refraktomer Anton Paar RXA 156 nema mogućnost temperaturnog skeniranja, tako da se podešavanje temperature refraktomera vrši odvojeno od podešavanja temperature gustinomera. Rezultati merenja gustine i indeksa refrakcije očitavaju se na displeju gustinomera DMA 5000.



Slika 3.10 Kombinovani sistem Anton Paar DMA 5000/RXA 156

**Princip rada refraktometra.** Uzorak čiji se indeks refrakcije meri je u kontaktu sa mernom prizmom i izložen je zračenju LED diode koja emituje natrijumovu D-liniju talasne dužine 589.3 nm. Pomoću visoko preciznog senzora registruje se i meri kritični ugao totalne refleksije, iz koga se izračunava indeks refrakcije uzorka. Opseg merenja indeksa refrakcije refraktometra RXA 156 je od 1.32 do 1.56 nD, dok je ponovljivost i standardna devijacija merenja  $2 \cdot 10^{-5}$  nD. Temperaturni merni opseg je od 10 do 70°C, a standardna devijacija merenja temperature 0.03°C.

**Podešavanje aparature.** Podešavanje aparature je dovođenje aparature u stanje pogodno za upotrebu pomoću sveže degazirane, bi-destilovane vode. Podešavanje se vrši se na 20 °C ukoliko je odstupanje između očitanih i vrednosti indeksa refrakcije odgovarajućeg standarda veće od  $\pm 0.00002$ , po proceduri datoj u Priručniku proizvođača.

**Kalibrisanje aparature.** Kalibrisanje aparature se vrši metodom kontrole preciznosti uređaja, na osnovu koje se utvrđuje da li je neophodno izvršiti podešavanje aparature ili je instrument spreman za merenje indeksa refrakcije novih uzoraka. Ukoliko kalibracija pokaže da je odstupanje indeksa refrakcije degazirane, bi-destilovane vode veće od  $\pm 0.00002$  u odnosu na odgovarajuće vrednosti iz Priručnika proizvođača aparat se mora ponovo podesiti.

**Postupak merenja indeksa refrakcije uzorka.** Refraktometar RXA 156 predstavlja nadogradnju na gustinomer DMA 5000 i sve komande koje poseduje DMA 5000 su zajedničke. Postupak merenja indeksa refrakcije izvodi se na sličan način kao i postupak merenje gustine. Uzorak oko 5 cm<sup>3</sup> se plastičnim špricom ubrizgava u kapilaru gustinomera i odgovarajućim silikonskim crevima (slika 3.10) prolazi do ćelije refraktometra. Refraktometar RXA 156 i gustinomer DMA 5000 imaju odvojene sisteme za termostatiranje, refraktometar ne podržava mogućnost temperaturnog skeniranja, pa se temperature na kojima se želi izmeriti vrednost indeksa refrakcije uzorka moraju ručno podešavati i menjati od početne ka krajnjoj vrednosti. Vreme neophodno da se uzorak termostatira je oko 5 min. Izmerene vrednosti indeksa refrakcije se moraju zabeležiti u trenutku kada termostat postigne zadatu vrednost temperature, jer ove vrednosti ne ostaju upamćene u memoriji gustinomera. Nakon završenog merenja indeksa refrakcije uzorka u željenom temperaturnom intervalu, uključuje se dugme start na gustinomeru, čime počinje merenje gustine istog uzorka. Čišćenje ćelija oba instrumenta vrši se po proceduri objašnjenj u Poglavlju 3.5.

### 3.7. OSNOVNE KARAKTERISTIKE I NAČIN RADA VISKOZIMETRA SVM 3000

Ekperimentalna merenja viskoznosti, kako čistih supstanci, tako i njihovih binarnih smeša vršena su na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu, u Laboratoriji za hemijsko-inženjersku termodinamiku na rotirajućem Stabinger viskozimetru Anton Paar SVM 3000 (slika 3.11) u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 323.15 K, sa korakom temperature od 5 K i na atmosferskom pritisku.



Slika 3.11 Viskozimetar Anton Paar SVM 3000

**Princip rada viskozimetra.** Princip rada je zasnovan na modifikovanom Couette principu sa brzo rotirajućim spoljnim cilindrom i unutrašnjim mernim cilindrom koji sporije rotira. Zasniva se na merenju obrtnog momenta i brzine. Korišćenjem oko  $2.5 \text{ cm}^3$  uzorka može se odrediti dinamička viskoznost, kinematska viskoznost, kao i gustina tečnosti različitih karakteristika, uključujući veoma viskozne supstance, kao što su npr. ulja za podmazivanje, sirova biljna ulja, vazelin, itd. Rotirajući magnet u SVM 3000 proizvodi vrtložno strujno polje sa obrtnim momentom zavisnim od brzine. Kombinovan sa integrisanim termostatom obezbeđuje veliku preciznost. Rezolucija obrtnog momenta iznosi 50 pNm. Zbog toga može da funkcioniše uz pomoć kompaktne merne ćelije, koja sadrži cev u kojoj se nalazi uzorak i koja rotira konstantnom brzinom. Rotor za merenje sa ugrađenim magnetom pluta u uzorku. Mala gustina rotora dozvoljava da on stalno bude u centru cevi, usled delovanja centrifugalne sile. Slobodno plivajući rotor ne zahteva ležište, a bez ležišta nema ni otpora. Ovo uređaj čini neosetljivim na vibracije.

Mala zapremina uzorka dozvoljava ekstremno brze temperaturne promene i vrlo kratko vreme za uravnotežavanje. Ubrzo posle početka merenja rotor dostiže konstantnu brzinu. Dinamička viskoznost se računa na osnovu brzine rotora. Da bi izračunali kinematsku viskoznost iz dinamičke viskoznosti, gustina uzorka mora biti poznata. Zbog toga, SVM 3000 poseduje ćeliju za merenje gustine koja radi na principu U-cevi koja osciluje. Obe ćelije se pune odjednom, dok se merenje vrši istovremeno. SVM 3000 pokriva opseg merenja dinamičke viskoznosti od 0 do 20000 mPas. Kada se koristi kapilarni viskozimetar, potrebno je iskoristiti ukupno 13 različitih kapilara da bi se pokrio ovako širok merni opseg. Viskozimetar SVM 3000 meri dinamičku viskoznost i gustinu uzorka i proračunava kinematsku viskoznost. Uređaj sadrži opcije "temperature table scan" i "temperature range scan" što proširuje njegovu primenu.

**Reproduktivnost** merene viskoznosti je 0.35% unutar radnog opsega podešavanja, a 1% izvan tog opsega; gustine  $0.0005 \text{ g/cm}^3$  u radnom opsegu od  $0.65$  do  $1.5 \text{ g/cm}^3$ ,  $0.0020 \text{ g/cm}^3$  izvan navedenog opsega i temperature  $0.02^\circ\text{C}$  od  $15^\circ\text{C}$  do  $105^\circ\text{C}$ , a  $0.05^\circ\text{C}$  izvan navedenog opsega.

**Opseg merenja** dinamičke viskoznosti je od  $0.2$  do  $20000 \text{ mPa}\cdot\text{s}$ , gustine od  $0.65$  do  $3 \text{ g/cm}^3$  i temperature od  $15^\circ\text{C}$  do  $105^\circ\text{C}$ .

**Ponovljivost** merene viskoznosti je  $0.1\%$ , gustine  $0.0001 \text{ g/cm}^3$  i temperature  $0.005^\circ\text{C}$ .

**Postupak merenja viskoznosti uzorka.** Pomoću staklenog šprica uzima se uzorak zapremine oko  $2.5 \text{ cm}^3$  i vrši se njegovo lagano ubrizgavanje u kapilaru kroz ulazni otvor. Špic nakon ubrizgavanja uzorka ostaje u otvoru kapilare sve do kraja merenja. Nakon ubrizgavanja uzorka vrši se podešavanje viskozimetra. Pritiskom na taster mode bira se jedan od sedam modula. Modul MO biramo ukoliko merimo viskoznost na jednoj temperaturi, a ako merimo u temperaturnom opsegu biramo modul M7. Zadavanje temperaturnog opsega vrši se na sledeći način: mode settings → temperature range scan+enter → start temperature+enter zadajemo početnu temperaturu → stop temperature+enter zadajemo krajnju temperaturu → temperature step+enter zadajemo temperaturni korak. Kada se završi podešavanje temperaturnog opsega, tasterom esc se vraćamo do measuring window. Pritiskom na taster enter potvrđuje se podešavanje, nakon čega se vraća u user level. Pritiskom na taster start počinje merenje viskoznosti i to od početne ka krajnjoj temperaturi. U toku merenja u svakom trenutku se na ekranu može očitati temperatura uzorka kao i izmerena viskoznost. Nakon završetka merenja rezultati merenja ostaju zabeleženi u memoriji aparata.



Čitanje rezultata se vrši na sledeći način: menu → data memory → browse.

Pomeranjem strelica  $\updownarrow$  čitaju se setovi merenja za različite temperature u okviru zadanog opsega, a pomeranjem strelica  $\longleftrightarrow$  čitaju se rezultati jednog merenja na jednoj temperaturi. Kada se završi merenje viskoznosti uzorka pristupa se čišćenju uređaja. Prvo se istisne uzorak iz kapilare, izvadi se špric, stavi se crevo za vazдушnu pumpu da bi se kapilara osušila. Pritisne se taster pump i pusti se da radi 10-15 sekundi, pa se pritisne taster pump za prekid. Ubrizgava se etanol, pritisne se taster start 10 sekundi i ponovo taster start za prekid. Zatim se uključuje vazдушna pumpa pritiskom na taster pump 10-15 sekundi, što omogućuje proticanje vazduha kroz kapilaru i njeno sušenje. Ubrizgava se aceton, pritisne se taster start 10 sekundi i ponovo taster start za prekid. Stavlja se crevo za vazduh, uključuje se vazдушna pumpa pritiskom na taster pump, pumpa se automatski gasi za 90 sekundi. Nakon čišćenja potrebno je sačekati 10-15 minuta da se temperatura i gustina vazduha u kapilari ustali. Merenju novog uzorka se može pristupiti ako je gustina vazduha u kapilari 0.0008-0.0009 g/cm<sup>3</sup>, kao znak da je kapilara čista. Ako gustina vazduha odstupa od navedenih vrednosti procedura čišćenja se sprovodi ponovo.

**Greške merenja viskoznosti.** Uticaj prisustva vazduha u kapilari uzrokuje netačno merenje viskoznosti. Uzorak se ubrizgava lagano kako bi se izbegla pojava mehurova vazduha u kapilari. Ukoliko se primeti prisustvo mehurova vazduha u kapilari, potrebno je uzorak istisnuti i pripremiti nov. Pri dužem stajanju supstanci može doći do prodora mehurova vazduha ili vlage, iz tog razloga pre samog merenja, supstance se degaziraju sušenjem u sušnici ili u ultrazvučnom kupatilu. Hemikalije se čuvaju na suvom, hladnom i tamnom mestu. Posebna pažnja se posvećuje čišćenju kapilare, mernih sudova i špriceva jer svako unošenje nečistoće čini merenje netačnim.

## 4. REZULTATI EKSPERIMENTALNIH MERENJA

### 4.1. REZULTATI EKSPERIMENTALNIH MERENJA BINARNIH SISTEMA

#### 4.1.1. Rezultati eksperimentalnih merenja gustine

Eksperimentalna merenja gustina odabranih binarnih sistema su rađena na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu, u Laboratoriji za hemijsko-inženjersku termodinamiku. Jedan od ciljeva je bio određivanje dopunskih molarnih zapremina,  $V^E$  na bazi eksperimentalno određenih gustina za osam binarnih sistema: 1-butanol + hloroform, 2-butanol + hloroform, 1-butanol + benzen, 2-butanol + benzen, dimetilftalat + 1-butanol, dimetilftalat + 2-butanol, dimetilftalat + 2-butanon i dimetilftalat + tetrahidrofur. Za određivanje dopunskih molarnih zapremina binarnih smeša bilo je neophodno odrediti gustine odgovarajućih čistih komponenti koje su činile smešu. Sva merenja za sisteme alkohola sa hloroformom i benzenom su vršena na atmosferskom pritisku i u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 313.15 K sa korakom od 5 K, a za sve sisteme sa dimetilftalom u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 323.15 K, sa korakom od 5 K i na atmosferskom pritisku. Sve tabele vezane za rezultate eksperimentalnih merenja date su u Prilogu ove doktorske disertacije.

U tabeli P1 dato je poređenje gustina čistih supstanci eksperimentalno dobijenih u ovom radu sa podacima preuzetim iz literature [27-30, 33-42], dok su u tabeli P2 date vrednosti gustina čistih supstanci određene u ovom radu u celom ispitivanom temperaturnom intervalu. Iz tabele P1 se uočava da je slaganje rezultata iz ovog rada sa odgovarajućim literaturnim vrednostima za najveći broj sistema veoma dobro.

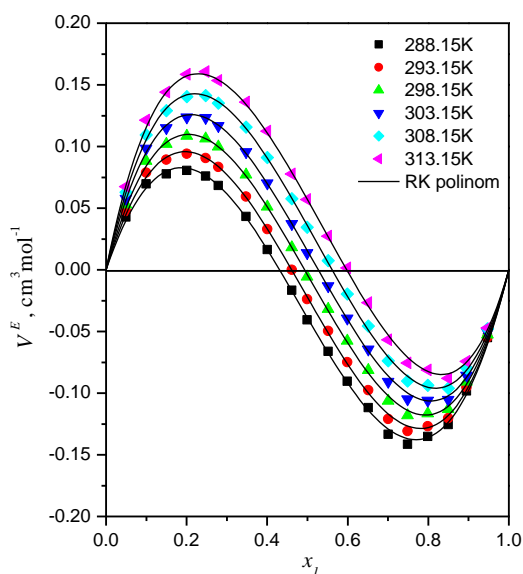
Osam binarnih sistema će zbog sličnosti i mogućnosti poređenja biti podeljeni u pet grupa: alkohol + hloroform, alkohol + benzen, dimetilftalat + alkohol, dimetilftalat + 2-butanon i dimetilftalat + tetrahidrofur.

## 4.1.1.1. SISTEMI ALKOHOL + HLOROFORM

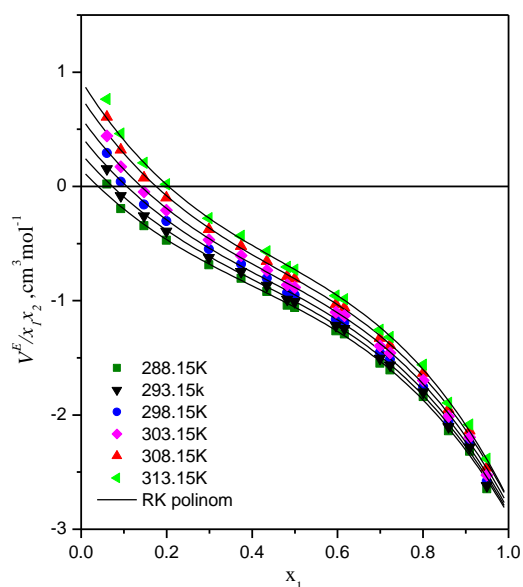
U okviru ove grupe, određene su dopunske molarne zapremine dva binarna sistema: 1-butanol + hloroform i 2-butanol + hloroform.

Izborom ovih sistema želelo se utvrditi kolika je neidealnost binarnih sistema alkohola i hloroforma, izražena kroz dopunsku molarnu zapreminu, kakav je uticaj grananja molekula butanola (*prim*-butanol, *sec*-butanol) na  $V^E$  vrednosti i koliko povećanje temperature utiče na odstupanje od idealnosti odabranih sistema.

Rezultati eksperimentalno izmerene gustine  $\rho$  i izračunate dopunske molarne zapremine  $V^E$  binarnih sistema (jednačina (2.4)) alkohol + hloroform dati su u tabeli P3, dok su u tabeli P4 date vrednosti optimalnog broja parametara Redlich-Kisterovog polinoma (RK)  $A_k$ , kao i odgovarajuća devijacija ( $\sigma$ ) i srednja procentualna greška (PD(%)) korelisanja [48, 49]. Na slici 4.1 su prikazane zavisnosti  $V^E - x_1$  i  $V^E/(x_1x_2) - x_1$ , u temperaturnom intervalu od 288.15 do 313.15 K, gde su punim linijama date vrednosti dobijene korelisanjem pomoću RK polinoma, a odgovarajućim simbolima eksperimentalne tačke.

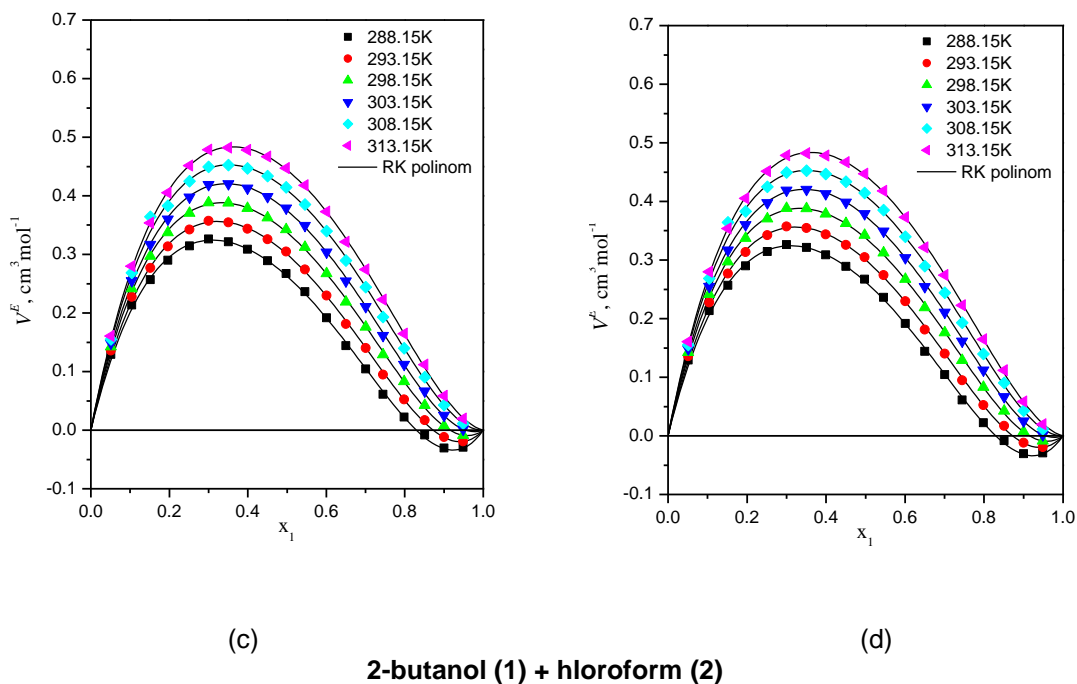


(a)



(b)

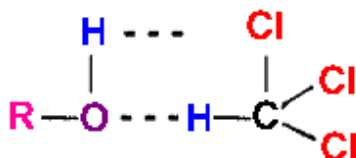
1-butanol (1) + hloroform (2)



**Slika 4.1** Zavisnost: (a)  $V^E - x_1$  za sistem 1-butanol (1) + hloroform (2), (b)  $V^E/(x_1 x_2) - x_1$  za sistem 1-butanol (1) + hloroform (2), (c)  $V^E - x_1$  za sistem 2-butanol (1) + hloroform (2) i (d)  $V^E/(x_1 x_2) - x_1$  za sistem 2-butanol (1) + hloroform (2) u temperaturnom intervalu od 288.15K do 313.15K. Simboli označavaju eksperimentalne vrednosti, a linije vrednosti dobijene RK polinom

Molekuli alkohola su međusobno povezani jakim vodoničnim vezama, ali u smeši sa drugom komponentom teže disocijaciji iz svojih polimernih agregata i formiranju vodoničnih veza sa molekulima druge vrste.

Sisteme alkohol + hloroform karakteriše tzv. S-oblik zavisnosti  $V^E - x_1$ , slika 4.1, koji ukazuje na veoma neidealno ponašanje ovih smeša. Neidealnost je posledica (slika 4.2): (a) raskidanja vodoničnih veza u alkoholima (u koncentracionom opsegu koji je bogat hloroformom), (b) međuprostornog smeštanja molekula hloroforma u mreže vodoničnih veza alkohola (u koncentracionom opsegu koji je bogat alkoholom), i (c) interakcija između molekula hloroforma i alkohola u različitim stepenima. Ukupna dopunska molarna zapremina  $V^E$  predstavlja zbir ova tri pomenuta efekta.



**Slika 4.2** Prikaz interakcija između molekula alkohola i hloroforma

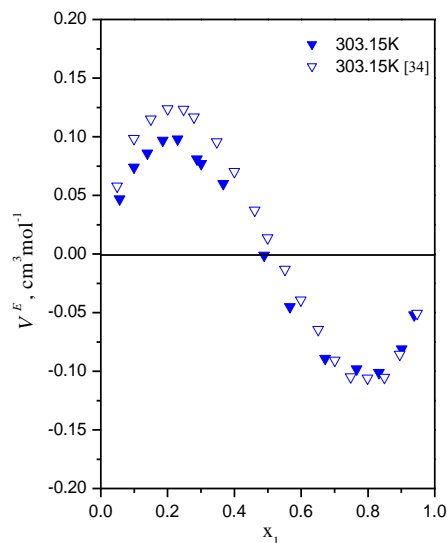
Za ispitivane smeše, vrednosti dopunske molarne zapremine  $V^E$  se mogu kvalitativno objasniti na osnovu rezultata suprotnih doprinosa koji dominiraju u određenim delovima molskog udela alkohola u smeši. Za manje udele alkohola u smeši, na osnovu oblika  $V^E - x_1$  zavisnosti i imajući u vidu gore navedene faktore, može se zaključiti da dominira raskidanje vodoničnih veza u alkoholu, što dovodi do ekspanzije zapremine smeše i pozitivnih vrednosti dopunske molarne zapremine  $V^E$ .

S druge strane, povećanjem udela alkohola dolazi do međuprostornog smeštanja molekula hloroforma u mreže vodoničnih veza alkohola i do interakcija između molekula alkohola i hloroforma, što vodi ka efikasnijem pakovanju smeše i negativnom odstupanju od idealnosti (negativne vrednosti dopunske molarne zapremine  $V^E$ ).

Uticaj temperature na dopunsku molarnu zapreminu ovih sistema je veoma izražen i sa porastom temperature  $V^E$  vrednosti se povećavaju. Stepem raskidanja vodoničnih veza u agregatima alkohola raste sa povećanjem temperature, pa vrednosti dopunske molarne zapremine rastu, pošto agregati imaju manju zapreminu od zapremine zbira svojih komponenata.

Takođe, može se zaključiti da se sa porastom temperature smanjuje koncentracioni opseg u kome je pakovanje u smeši efikasnije, odnosno opseg u kome dominiraju interakcije između raznorodnih molekula. Potrebno je dodati više alkohola u smešu da bi preovladale interakcije između raznorodnih molekula pri višim nego pri nižim temperaturama. Iz svega navedenog se zaključuje da porast temperature utiče negativno na efikasnost pakovanja molekula u smeši.

Međusobnim poređenjem rezultata dobijenih za primarni 1-butanol i razgranati 2-butanol (sec-butanol) zapaža se sledeći redosled u  $V^E$  vrednostima:  $V^E_{\text{sec-butanol}} > V^E_{\text{prim-butanol}}$ , što ukazuje da su interakcije između *prim*-butanola i hloroforma jače nego u smeši *sec*-butanola i hloroforma. Kako alkohol postaje razgranatiji, za očekivati je da sterne (prostorne) smetnje rastu od primarnih ka sekundarnim alkoholima. Vodonične veze su kod razgranatih alkohola slabije, tako da su između molekula 1-butanola, vodonične veze jače nego kod 2-butanola i teže se raskidaju, pa je i efekat dopunske molarne zapremine manje pozitivan.



**Slika 4.3** Zavisnost  $V^E$  -  $x_1$  na 303.15K sistema 1-butanol (1) + hloroform (2). Punim simbolima su pokazane eksperimentalne vrednosti iz ovog rada a praznim eksperimentalne vrednosti iz rada [34]

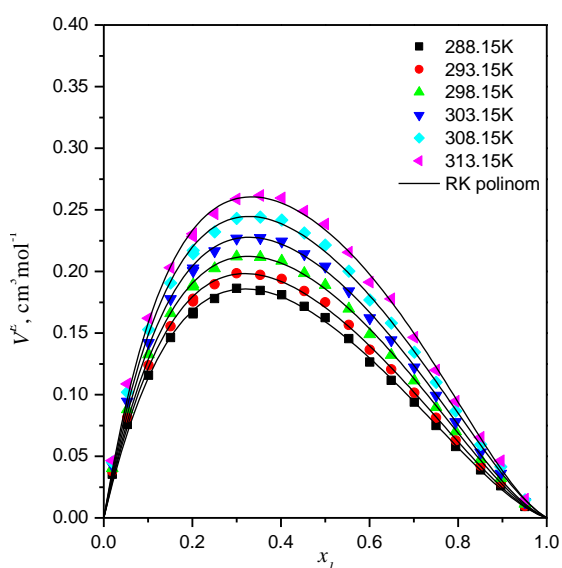
Na slici 4.3 pokazano je poređenje eksperimentalnih vrednosti dopunskih molarnih zapremina sistema 1-butanol + hloroforma na 303.15 K, dobijenih u ovom radu, sa literaturnim eksperimentalnim podacima [34]. Eksperimentalna maksimalna vrednost dopunske molarne zapremine  $V^E$  za  $x_1=0.2$  je manja u odnosu na literaturni podatak oko 10%, dok je u oblasti minimalne vrednosti dopunske molarne zapremine  $V^E$  za  $x_1=0.8$  veoma dobro slaganje, razlika je oko 3% u odnosu na literaturni podatak.

## 4.1.1.2. SISTEMI ALKOHOL + BENZEN

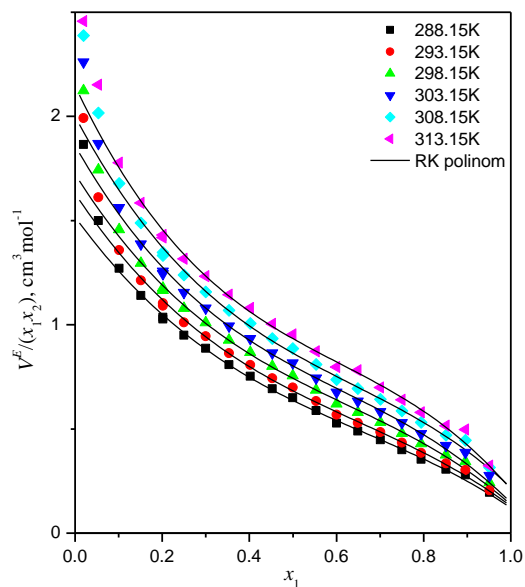
U okviru ove grupe, određene su dopunske molarne zapremine dva binarna sistema: 1-butanol + benzen i 2-butanol + benzen.

Izborom ovih sistema želelo se utvrditi kolika je neidealnost binarnih sistema alkohola i benzena, izražena kroz dopunsku molarnu zapreminu, kakav je uticaj grananja molekula butanola (*prim*-butanol, *sec*-butanol) na  $V^E$  vrednosti i koliko povećanje temperature utiče na odstupanje od idealnosti odabranih sistema.

Rezultati eksperimentalno izmerene gustine  $\rho$  i izračunate dopunske molarne zapremine  $V^E$  binarnih sistema (jednačina (2.4)) alkohol + benzen dati su u tabeli P3, dok su u tabeli P4 date vrednosti optimalnog broja parametara Redlich-Kisterovog polinoma (RK)  $A_k$ , kao i odgovarajuća devijacija ( $\sigma$ ) i srednja procentualna greška (PD(%)) korelisanja [48, 49]. Na slici 4.4 su prikazane zavisnosti  $V^E - x_1$  i  $V^E/(x_1x_2) - x_1$ , u temperaturnom intervalu od 288.15 do 313.15 K, gde su punim linijama date vrednosti dobijene korelisanjem pomoću RK polinoma, a odgovarajućim simbolima eksperimentalne tačke.

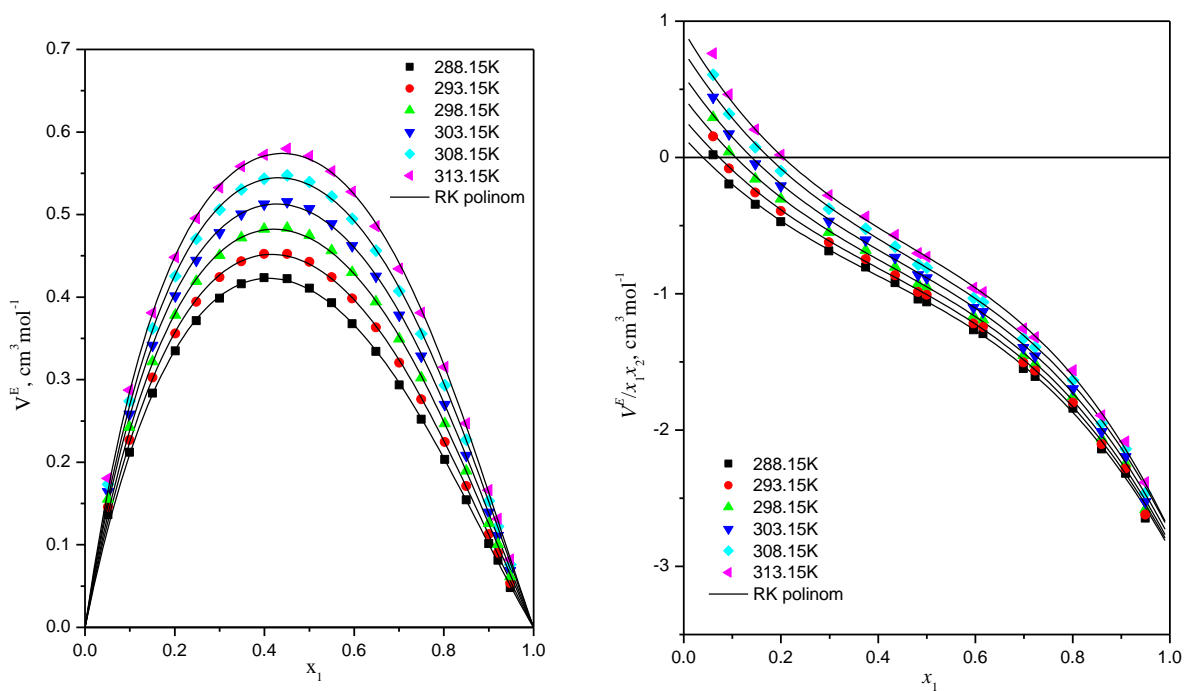


(a)



(b)

1-butanol (1) + benzen (3)



(c)

(d)

### 2-butanol (1) + benzen (3)

**Slika 4.4** Zavisnost: (a)  $V^E - x_1$  za sistem 1-butanol (1) + benzen (3), (b)  $V^E/(x_1x_2) - x_1$  za sistem 1-butanol (1) + benzen (3), (c)  $V^E - x_1$  za sistem 2-butanol (1) + benzen (3) i (d)  $V^E/(x_1x_2) - x_1$  za sistem 2-butanol (1) + benzen (3) u temperaturnom intervalu od 288.15K do 313.15K. Simboli označavaju eksperimentalne vrednosti, a linije vrednosti dobijene RK polinom

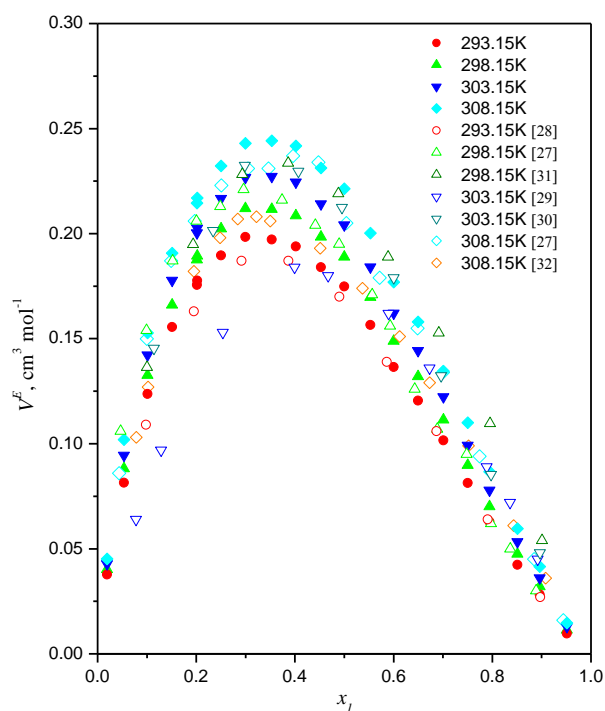
Sa slike 4.4 se uočava da za ispitivane sisteme alkohola sa benzenom, kriva  $V^E - x_1$  ima pozitivne  $V^E$  vrednosti za ceo koncentracioni opseg, kao i da  $V^E$  vrednosti rastu sa povećanjem temperature. Eksperimentalni podaci mogu biti objašnjeni sa aspekta dva suprotna doprinosa: (a) ekspanzija zapremine dovodi do pozitivnog doprinosa  $V^E$  vrednosti i potiče od raskidanja vodoničnih veza između molekula alkohola i fizičkih dipol-dipol interakcija između alkoholnih monomera i polimera i (b) kontrakcija zapremine rezultuje negativnim doprinosom  $V^E$  vrednosti i potiče od formiranja slabih  $\pi \cdots H$  veza između  $\pi$  elektrona benzenovog prstena i H atoma hidroksilne grupe alkohola. Pozitivne  $V^E$  vrednosti za ceo koncentracioni opseg sugerišu da je faktor (a) dominantan. Podjednako važan doprinos pozitivnim  $V^E$  vrednostima potiče od veličine molekula benzena ( $M=8.9968 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$ ) i 1-butanol/2-butanol ( $M=9.240 \times 10^{-5}/9.2789 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$ ), koja se ne razlikuje mnogo i koja sugeriše da se molekuli ne pakuju dobro jedni drugima u strukturu, što rezultuje ekspanzijom zapremine.



Sa slike 4.4 se može pratiti uticaj temperature na vrednosti dopunske molarne zapremine,  $V^E$ . Povećanje  $V^E$  vrednosti sa temperaturom kod ovih sistema se može objasniti činjenicom da vodonične veze sa povećanjem temperature postaju slabije, energija interakcija se smanjuje i rastojanje među molekulima se povećava dovodeći do ekspanzije zapremine.

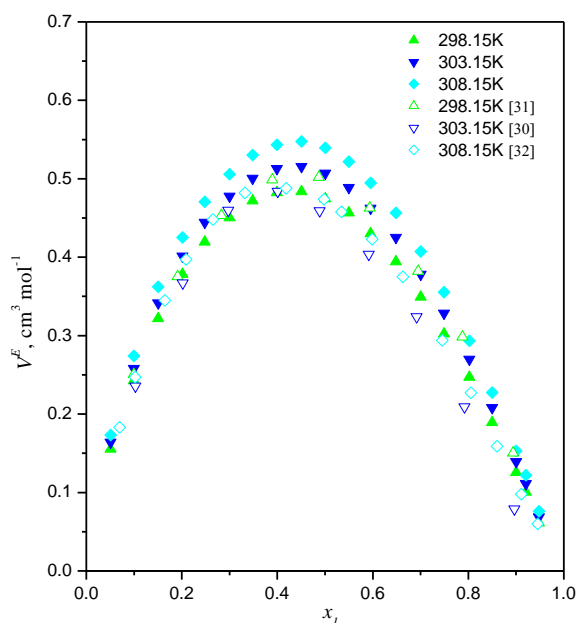
$V^E$  vrednosti su veće za sistem sa 2-butanolom nego sa 1-butanolom.  $V^E$  vrednosti postaju pozitivnije kako grananje alkohola raste. Jedna  $\text{CH}_3$  i jedna  $\text{CH}_3\text{CH}_2$  grupa na sekundarnom C atomu u 2-butanolu i jedna  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2$  grupa na primarnom C atomu u 1-butanolu stvaraju sterne smetnje pored hidroksilne grupe u poretku: 2-butanol > 1-butanol. Kao rezultat, pozitivno odstupanje  $V^E$  znači da je približavanje različitih molekula u smeši stereno sprečeno (zbog grananja u molekulima alkohola), dakle jačina interakcija ( $\pi\cdots\text{H}$  veze) između benzena i alkohola će biti u poretku: 1-butanol > 2-butanol.

Upoređivanjem zavisnosti  $V^E - x_1$  sistema alkohol (1) + hloroform (2) i alkohol (1) + benzen (2) (slike 4.1 i 4.4) može se primetiti da je bolje pakovanje molekula u smeši alkohol (1) + hloroform (2). Molekul hloroforma je manji od molekula benzena, što uzrokuje efikasnije pakovanje, pa usled toga dolazi do razlike u  $V^E$  vrednostima ovih sistema. Isto tako može se zaključiti da pri vrlo malim udelima alkohola u oba sistema dominiraju vodonične veze između molekula alkohola, a što smeša postaje bogatija alkoholom, to se dopunski efekti razlikuju za pomenute binarne sisteme.



**Slika 4.5** Zavisnost  $V^E - x_1$  za sistem 1-butanol (1) + benzen (3). Simbolima su pokazane eksperimentalne vrednosti iz ovog rada i radova iz literature na temperaturama 293.15K [28], 298.15K [27, 31], 303.15K [29, 30] i 308.15K [27, 32]

Na slici 4.5 se može pratiti poređenje eksperimentalnih  $V^E$  vrednosti sistema 1-butanol + benzen, dobijenih u ovom radu, sa literaturnim eksperimentalnim podacima [27-32]. Za maksimalnu vrednost dopunske molarne zapremine  $V^E$  za  $x_1=0.35$  razlika je ispod 4% za sve temperature, što je vrlo dobro slaganje. Eksperimentalne tačke Bhardwaya i saradnika [32] su nešto ispod vrednosti iz ovog rada, tako da je neslaganje veće i razlika je oko 15%.



**Slika 4.6** Zavisnost  $V^E$  -  $x_1$  za sistem 2-butanol (1) + benzen (3). Simbolima su pokazane eksperimentalne vrednosti iz ovog rada i eksperimentalne vrednosti iz literature na temperaturama 298.15K [31], 303.15K [30] i 308.15K [32]

Na slici 4.6 je pokazano poređenje eksperimentalnih  $V^E$  vrednosti sistema 2-butanol + benzen, dobijenih u ovom radu, sa literaturnim eksperimentalnim podacima [30-32]. Poređenje pokazuje vrlo dobro slaganje na 303.15K [30], razlika je oko 1.5% za  $x_1=0.5$ , dok su eksperimentalne tačke Bhardwaya i saradnika [32] na 308.15 K nešto ispod vrednosti iz ovog rada, kao kod sistem 1-butanol + benzen, tako da je neslaganje veće i razlika je oko 10% za  $x_1=0.5$ .

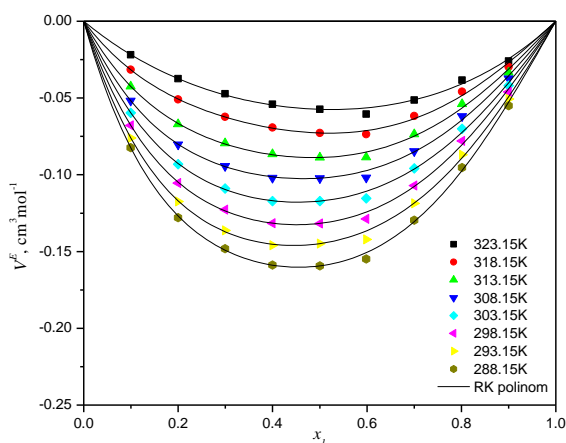
## 4.1.1.3. SISTEMI DIMETILFTALAT + ALKOHOL

U okviru ove grupe, određene su dopunske molarne zapremine dva binarna sistema: dimetilftalat + 1-butanol i dimetilftalat + 2-butanol.

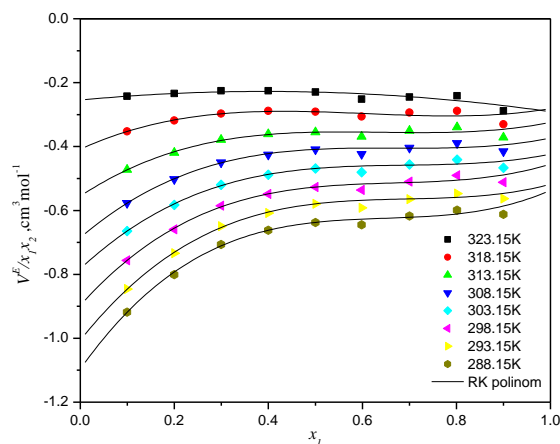
Izborom ovih sistema želelo se utvrditi sledeće: kolika je neidealnost binarnih sistema dimetilftalata i alkohola, kao i kakav je uticaj grananja molekula butanola (*prim*-butanol, *sec*-butanol) na  $V^E$  vrednosti i koliko povećanje temperature utiče na odstupanje od idealnosti odabranih sistema.

Rezultati eksperimentalno izmerene gustine  $\rho$  i izračunate dopunske molarne zapremine  $V^E$  (jednačina (2.4)) binarnih sistema dimetilftalat + alkohol dati su u tabeli P3, dok su u tabeli P4 date vrednosti optimalnog broja parametara Redlich-Kisterovog polinoma (RK)  $A_k$ , kao i odgovarajuća devijacija ( $\sigma$ ) i srednja procentualna greška (PD(%)) korelisanja.

Na slici 4.7 su prikazane zavisnosti  $V^E - x_1$  i  $V^E/(x_1x_2) - x_1$  za sistem dimetilftalat + alkohol u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K, gde su punim linijama date vrednosti dobijene korelisanjem pomoću RK polinoma, a odgovarajućim simbolima eksperimentalne tačke.

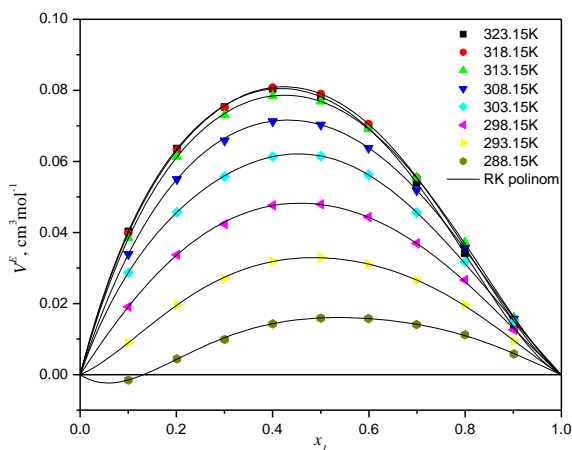


(a)

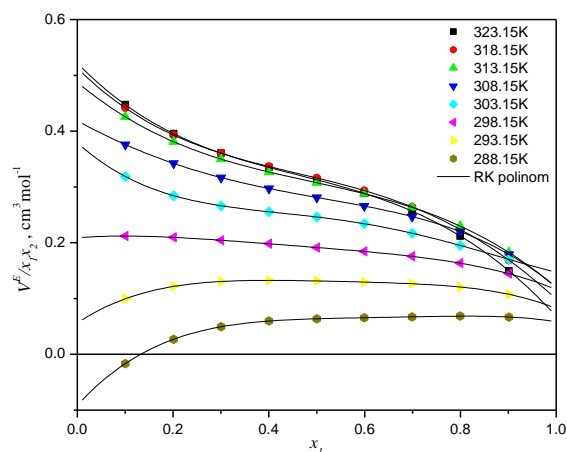


(b)

dimetilftalat (1) + 1-butanol (2)



(c)



(d)

### dimetilfthalat (1) + 2-butanol (2)

**Slika 4.7** Zavisnost: (a)  $V^E - x_1$  za sistem dimetilfthalat (1) + 1-butanol (2), (b)  $V^E/(x_1 x_2) - x_1$  za sistem dimetilfthalat (1) + 1-butanol (2), (c)  $V^E - x_1$  za sistem dimetilfthalat (1) + 2-butanol (2) i  $V^E/(x_1 x_2) - x_1$  za sistem dimetilfthalat (1) + 2-butanol (2) u temperaturnom intervalu od 288.15K do 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne vrednosti, a linije vrednosti dobijene RK polinom

Sa slike 4.7 se uočava da su kod sistema dimetilfthalat + 1-butanol, vrednosti dopunske molarne zapremine  $V^E$  negativne u celom koncentracionom polju, što govori o prisustvu specifičnih interakcija koje nastaju između molekula estera i alkohola. Negativne vrednosti dopunske molarne zapremine su indicija međumolekulskih sila koje se pojavljuju među molekulima kod kojih je vodonik vezan za kiseonik (alkohol) i molekula sa slobodnim parom elektrona na kiseoniku (estara). Kao što je ranije naglašeno, vodonikov atom je jedinstven po tome što oko njegovog jezgra kruži samo jedan elektron. Kad je vezan za druge elemente, jezgra vodonika, dakle proton, manje je zaštićen plaštom elektrona od jezgara drugih elemenata i može se jače približiti elektronskim ljuskama drugih molekula. Kao posledica javlja se privlačna sila između protona i bilo koje koncentracije negativnog naboja kod drugog molekula. Ako neki molekul, u ovom slučaju estara, ima atom sa slobodnim parom elektrona i ako taj atom nastoji da taj par elektrona jače veže sa protonom nego atom uz koji je proton vezan, proton prelazi sa jednog atoma na drugi. Zato, ako se molekuli jedan drugom dovoljno približe i ako su u povoljnoj orijentaciji za prelaz protona, doći će do stanja u kome atomi i jednog i drugog molekula gotovo jednako privlače taj proton. Pod takvim okolnostima može, ali ne mora, doći do prelaska protona sa jednog molekula na drugi. Međutim, u vreme kad su molekuli dovoljno blizu da bi moglo doći do prelaza, proton će jako privlačiti oba molekula i zato je privlačnost između molekula pojačana. Ovaj tip privlačenja je protonsko vezivanje ili vodonična veza, kako je i ranije objašnjeno.

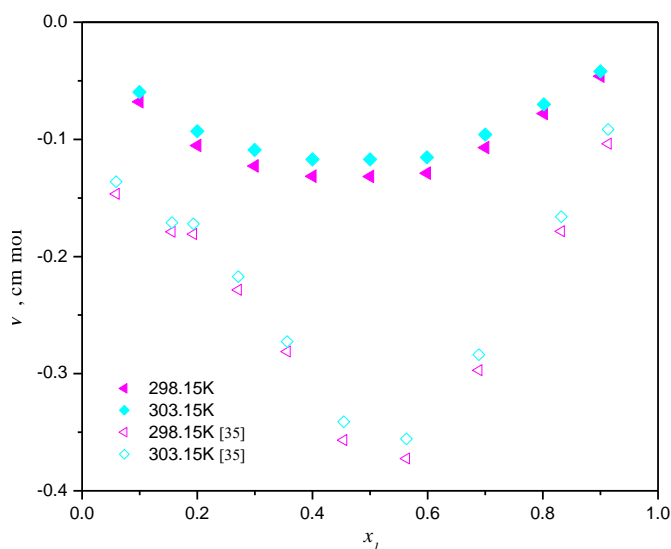
U smeši dimetilftalata i 1-butanola javlja se nekoliko efekata koji utiču na kontrakciju zapremine: (a) međuprostorno smeštanja 1-butanola u mrežu molekula dimetilftalata, što vodi gušćem pakovanju i (b) delovanje privlačne sile između slobodnog para elektrona molekula dimetilftalata, čiji je negativan naboj dovoljno izložen da se proton vezan za kiseonik u molekulu 1-butanola može toliko približiti elektronima, tj. dolazi do stvaranja vodonične veze. Takođe,  $\pi$ -elektronski oblak aromatičnog prstena je u interakciji sa hidroksilnom grupom dajući mali doprinos kontrakciji zapremine.

Sa slike 4.7 se može pratiti uticaj temperature na vrednosti dopunske molarne zapremine,  $V^E$ . Povećanje  $V^E$  vrednosti kod ovog sistema se može objasniti činjenicom da vodonične veze sa povećanjem temperature postaju slabije, energija interakcija se smanjuje i rastojanje među molekulima se povećava. Ovo utiče na smanjenje međumolekulskih interakcija i pospešuje ekspanziju zapremine.

Kod sistema dimetilftalata sa 2-butanolom (slika 4.7), pozitivne  $V^E$  vrednosti u celom koncentracionom opsegu pokazuju da su interakcije između različitih molekula slabije nego između istih molekula u čistim tečnostima, i da su sile disperzije dominantne u ponašanju ove smeše. Dakle, u sistemu povećanje slobodne zapremine se događa praveći smešu manje komprimovanom od idealne smeše, što u krajnjem ishodu dovodi do pozitivnih  $V^E$  vrednosti.

Objašnjenje za ponašanje smeše koja uključuje razgranati molekul alkohola (2-butanol) u poređenju sa 1-butanolom ukazuje i na sterno odbijanje usled grananja molekula alkohola koje dominira. Alkilna grupa je po veličina veća od vodonika i sprečava približavanje nukleofilnog reagensa molekulu, te je ovaj prostorni efekat prostorna ili sterna smetnja. Posledica sternih smetnji  $\text{CH}_3$  grupe alkohola, koja ometa formiranje vodoničnih veza, je da su vodonične veze kod razgranatih molekula alkohola slabije u odnosu na linearne molekule. Takođe, kada se hidroksilna grupa nalazi na sekundarnom ugljenikovom atomu, razgranati molekul stvara veće sterne smetnje za smeštanje molekula alkohola u molekul estra nego odgovarajući linearni molekul, pa su kao rezultat oba efekta  $V^E$  vrednosti pozitivne u celom koncentracionom opsegu. Dolazi do razlike od sistema sa linearnim alkoholom, gde efekat stvaranja vodoničnih veza kvantitativno nadmašuje sve ostale efekte uslovljavajući kontrakciju zapremine i negativne vrednosti dopunske molarne zapremine. Mogućnost intersticijalnog smeštanja se povećava što je molekul manji. Pretpostavlja se da je efekat intersticijalnog smeštanja molekula 2-butanola u molekul dimetilftalata zanemarljiv i da efekat raskidanja vodoničnih veza dominira uslovljavajući pozitivne  $V^E$  vrednosti.

Uticaj temperature na dopunsku molarnu zapreminu ovog sistema je veoma izražen i sa porastom temperature  $V^E$  vrednosti se povećavaju. Kao što je ranije navedeno, stepen asocijacije molekula alkohola se smanjuje sa porastom temperature.



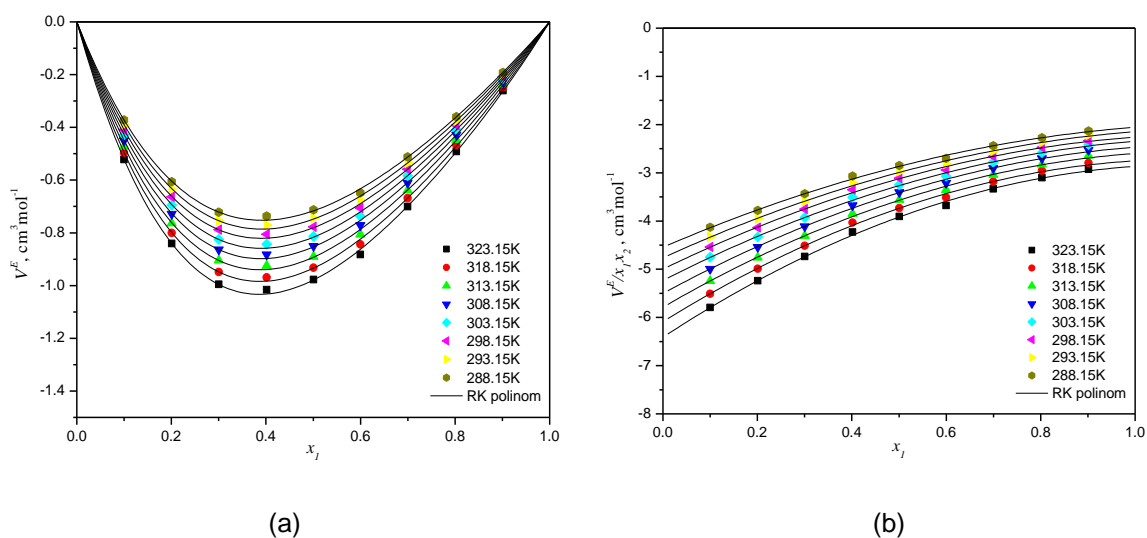
**Slika 4.8** Zavisnost  $V^E - x_1$  za sistem dimetilftalat (1) + 1-butanol (2). Punim simbolima su pokazane eksperimentalne vrednosti iz ovog rada, a praznim eksperimentalne vrednosti iz rada [35] na temperaturama 298.15K i 303.15K

Na slici 4.8 pokazano je poređenje eksperimentalnih  $V^E$  vrednosti sistema dimetilftalat + 1-butanol na 298.15K i 303.15 K, dobijenih u ovom radu, sa literaturnim eksperimentalnim podacima [35]. Uočava se da su krive  $V^E - x_1$  na 298.15 K i 303.15, dobijene u radu [35] ispod krivih dobijenih u ovom radu.

Za sistem dimetilftalat + 2-butanol nisu nađene literaturne  $V^E$  vrednosti.

## 4.1.1.4. SISTEMI DIMETILFTALAT + 2-BUTANON

Rezultati eksperimentalno izmerene gustine  $\rho$  i izračunate dopunske molarne zapremine  $V^E$  binarnog sistema dimetilftalat + 2-butanon dati su u tabeli P3, dok su u tabeli P4 date vrednosti optimalnog broja parametara RK polinoma  $A_k$ , kao i odgovarajuća devijacija ( $\sigma$ ) i srednja procentualna greška (PD(%)) korelisanja. Na slici 4.9 su prikazane zavisnosti  $V^E - x_1$  i  $V^E/(x_1x_2) - x_1$  za sistem dimetilftalat + 2-butanon u intervalu temperatura od 288.15 K do 323.15 K sa korakom od 5 K, gde su punim linijama date vrednosti dobijene korelisanjem pomoću RK polinoma, a odgovarajućim simbolima eksperimentalne tačke.



**Slika 4.9** Zavisnost: (a)  $V^E - x_1$  i (b)  $V^E/(x_1x_2) - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 2-butanon (2) u temperaturnom intervalu od 288.15K do 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne vrednosti, a linije vrednosti dobijene RK polinom

Krive  $V^E - x_1$  (slika 4.9) binarnog sistema dimetilftalata i 2-butanona su negativne u celom koncentracionom opsegu i blago asimetrične, minimumi se nalazi između molskih udela 0.35 i 0.40 dimetilftalata u smeši, što govori o prisustvu privlačnih sila koje proizilaze iz prisutnosti permanentnog dipola u molekulima. U ketonskoj grupi atomi ugljenika i kiseonika vezani su dvostrukom vezom, naboj jezgra kiseonika je veći od naboja jezgra ugljenika, a kako kiseonik ima slobodne parove elektrona, dvostruka veza ugljenik-kiseonik je polarna. Središte pozitivnog i negativnog naboja se ne poklapa, tj. molekul je električni dipol, koji je permanentan. Dipolni momenti molekula dimetilftalata i 2-butanona su oko 2.8 D, ovi dipolni momenti se sabiraju sa onima koje uzrokuje polarizabilnost molekula i povećavaju se privlačne sile među molekulima. Privlačne sile koje uzrokuju dipoli pre su proporcionalne kvadratu dipolnog momenta nego direktno proporcionalne.

Strukturni doprinos koji potiče od geometrijske podesnosti jedne komponente prema drugoj zbog razlike u molarnim zapreminama doprinosi negativnim  $V^E$  vrednostima.

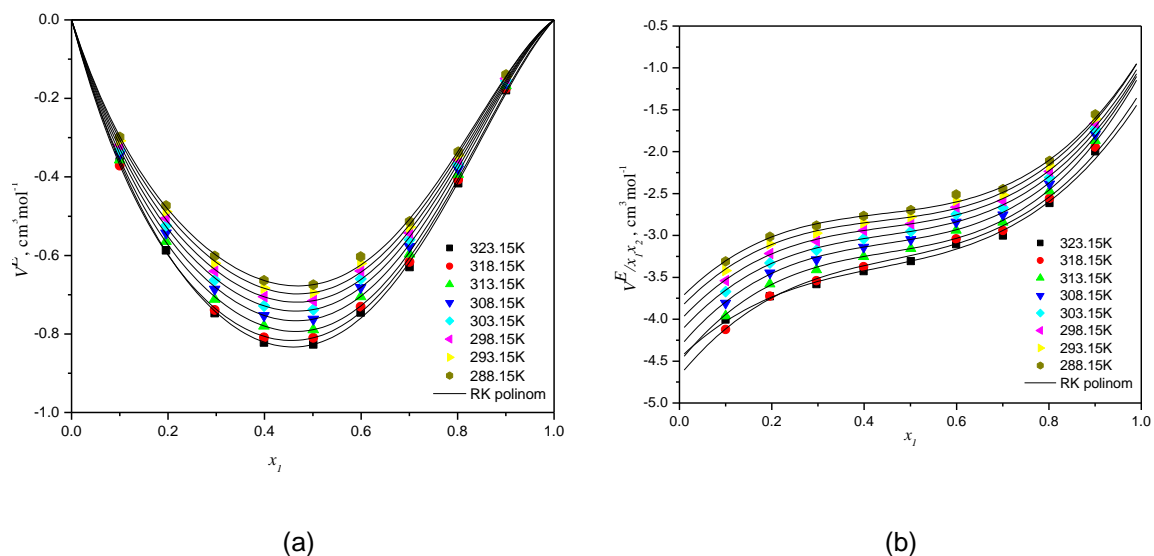
Kod smeše dimetilftalata sa 2-butanonom vrednosti dopunske molarne zapremine  $V^E$  se smanjuju sa povećanjem temperature. Uticaj temperature na  $V^E$  vrednosti kod ovog sistema se može objasniti činjenicom da povećanjem temperature raste i reaktivnost molekula, tako da naboj molekula postaje veći. Ovo utiče na povećanje međumolekulskih interakcija i pospešuje kontrakciju zapremine.

Za sistem dimetilftalat + 2-butanon nisu pronađene eksperimentalne  $V^E$  vrednosti u literaturi.



## 4.1.1.5. SISTEMI DIMETILFTALAT + TETRAHIDROFURAN

Rezultati eksperimentalno izmerene gustine  $\rho$  i izračunate dopunske molarne zapremine  $V^E$  binarnog sistema dimetilftalat + tetrahidrofuran dati su u tabeli P3, dok su u tabeli P4 date vrednosti optimalnog broja parametara RK polinoma  $A_k$ , kao i odgovarajuća devijacija ( $\sigma$ ) i srednja procentualna greška (PD(%)) korelisanja. Na slici 4.10 su prikazane zavisnosti  $V^E - x_1$  i  $V^E/(x_1x_2) - x_1$  za ovaj sistem u intervalu temperatura od 288.15 K do 323.15 K sa korakom od 5 K, gde su punim linijama date vrednosti dobijene korelisanjem pomoću RK polinoma, a odgovarajućim simbolima eksperimentalne tačke.



**Slika 4.10** Zavisnost: (a)  $V^E - x_1$  i (b)  $V^E/(x_1x_2) - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + tetrahidrofuran (2) u temperaturnom intervalu od 288.15K do 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne vrednosti, a linije vrednosti dobijene RK polinom

Sistem dimetilftalat (1) + tetrahidrofuran (2) karakteriše simetrična  $V^E - x_1$  kriva (slika 4.10) i negativne vrednosti  $V^E$  u celom koncentracionom opsegu. Tetrahidrofuran, zasićeno heterocoklično jedinjenje, ima svojstva alifatskog etra, dipolnog momenta oko 1.8D, na atomu kiseonika ima dva slobodna elektronska para. Pri mešanju dolazi do međusobnog privlačenja pozitivnog kraja molekula dimetilftalata i negativnog kraja molekula tetrahidrofurana, tj. dolazi do dipol-dipol interakcija, što rezultuje negativnim  $V^E$  vrednostima. Takođe, javlja se i prostorno smeštanje molekula tetrahidrofurana u molekule dimetilftalata, što pokazuje velika vrednost odnosa kritičnih zapremina ova dva molekula. Sa povećanjem temperature  $V^E$  vrednosti postaju više negativne, jer se povećava reaktivnost molekula.

Za ovaj sistem nisu nađeni literaturne eksperimentalne  $V^E$  vrednosti.

#### 4.1.2. Rezultati eksperimentalnih merenja indeksa refrakcije

Ekperimentalna merenja indeksa refrakcije odabranih binarnih sistema su rađena na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu, u Laboratoriji za hemijsko-inženjersku termodinamiku. Jedan od ciljeva je bio određivanje promene indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  na bazi eksperimentalno određenih indeksa refrakcije za četiri binarna sistema: dimetilftalat + 1-butanol, dimetilftalat + 2-butanol, dimetilftalat + 2-butanon i dimetilftalat + tetrahidrofuran. Sva merenja su vršena na atmosferskom pritisku i u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 323.15 K sa korakom od 5 K. Sve tabele vezane za rezultate eksperimentalnih merenja date su u Prilogu ove doktorske disertacije.

U tabeli P5 su date vrednosti indeksa refrakcije čistih supstanci u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 323.15 K, sa korakom od 5 K i na atmosferskom pritisku, određene u ovom radu. U literaturi nisu pronađene vrednosti indeksa refrakcije razmatranih sistema.

Kao što je već prethodno pomenuto, u okviru ove doktorske teze određeni su indeksi refrakcije  $n_D$  i izračunate promene indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  za četiri binarna sistema, koji će zbog sličnosti i mogućnosti poređenja biti podeljeni u tri grupe:

- dimetilftalat + alkoholi,
- dimetilftalat + 2-butanon i
- dimetilftalat + tetrahidrofuran

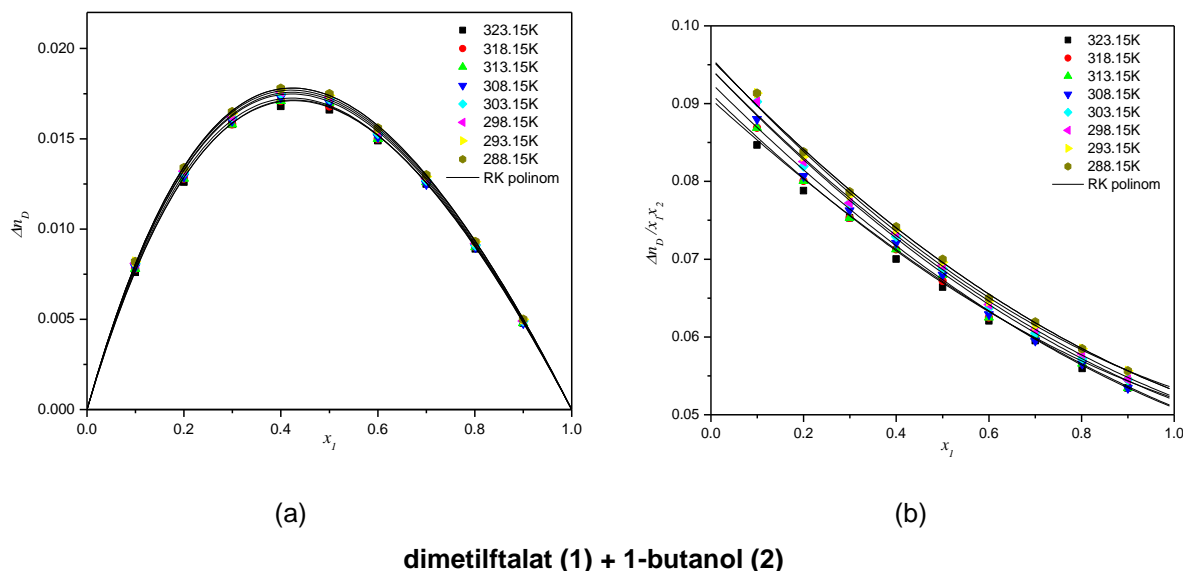
## 4.1.2.1. SISTEMI DIMETILFTALAT + ALKOHOL

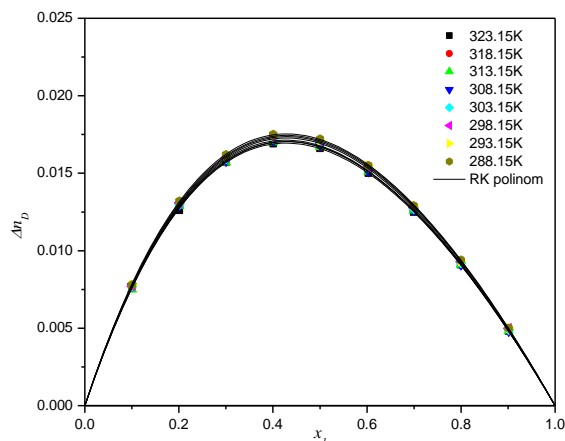
U okviru ove grupe, određena je promena indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  dva binarna sistema: dimetilftalat + 1-butanol i dimetilftalat + 2-butanol.

Izborom ovih sistema želelo se utvrditi sledeće: kolika je neidealnost binarnih sistema dimetilftalata i alkohola, kao i kakav je uticaj grananja molekula butanola (*prim*-butanol, *sec*-butanol) na promenu indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  i koliko povećanje temperature utiče na odstupanje od idealnosti odabranih sistema.

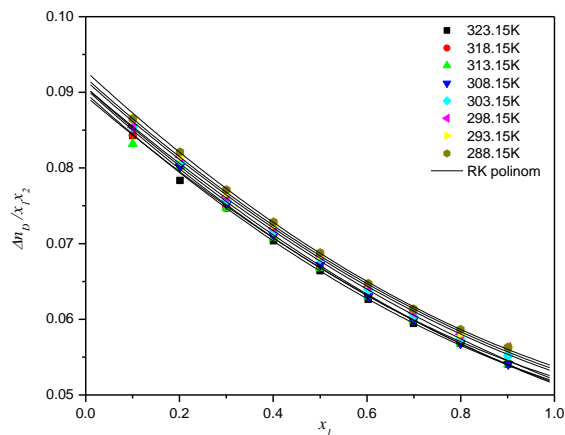
Rezultati eksperimentalno izmerenog indeksa refrakcije  $n_D$  i izračunate promene indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  (jednačina (2.5)) binarnih sistema dimetilftalat + alkohol dati su u tabeli P6, dok su u tabeli P7 date vrednosti optimalnog broja parametara Redlich-Kisterovog polinoma (RK)  $A_k$ , kao i odgovarajuća devijacija ( $\sigma$ ) i srednja procentualna greška (PD(%)) korelisanja.

Na slici 4.11 su prikazane zavisnosti  $\Delta n_D - x_1$  i  $\Delta n_D/(x_1x_2) - x_1$  za sistem dimetilftalat + alkohol u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K, gde su punim linijama date vrednosti dobijene korelisanjem pomoću RK polinoma, a odgovarajućim simbolima eksperimentalne tačke.





(c)



(d)

### dimetilftalat (1) + 2-butanol (2)

**Slika 4.11** Zavisnost: (a)  $\Delta n_D - x_1$  za sistem dimetilftalat (1) + 1-butanol (2), (b)  $\Delta n_D/(x_1 x_2) - x_1$  za sistem dimetilftalat (1) + 1-butanol (2), (c)  $\Delta n_D - x_1$  za sistem dimetilftalat (1) + 2-butanol (2) i (d)  $\Delta n_D/(x_1 x_2) - x_1$  za sistem dimetilftalat (1) + 2-butanol (2) u temperaturnom intervalu od 288.15K do 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne vrednosti, a linije vrednosti dobijene RK polinom

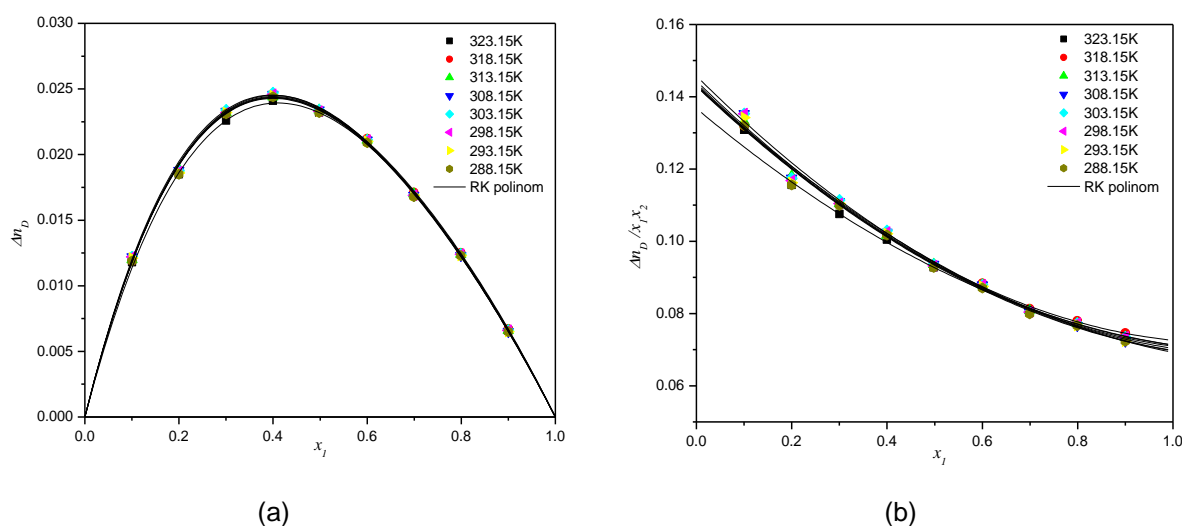
Kriva  $\Delta n_D - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 1-butanol (2) je asimetrična (slika 4.11a) i karakteriše je pozitivna vrednost  $\Delta n_D$  u celom koncentracionom opsegu, što je uslovljeno stvaranjem vodoničnih veza i efikasnim pakovanjem molekula u smeši. Kriva  $\Delta n_D - x_1$  ovog sistema dostiže maksimum pri udelu dimetilftalata od oko 0.4 na svim temperaturama. Uočava se da sa porastom temperature dolazi do smanjenja  $\Delta n_D$  vrednosti od maksimalnog 0.0178, na temperaturi 288.15K do 0.0168, što je maksimalna vrednost na temperaturi 323.15 K.

Kriva  $\Delta n_D - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 2-butanol (2) (slika 4.11c) ima takođe pozitivne vrednosti  $\Delta n_D$  u celom koncentracionom opsegu.

Sa slike 4.11 se uočava da je uticaj temperature mali za oba sistema dimetilftalat + alkohol, pa se krive za različite izoterme skoro preklapaju.

## 4.1.2.2. SISTEM DIMETILFTALAT + 2-BUTANON

Rezultati eksperimentalno izmerenog indeksa refrakcije  $n_D$  i zračunate promene indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  binarnog sistema dimetilftalat + 2-butanon dati su u tabeli P6, dok su u tabeli P7 date vrednosti optimalnog broja parametara RK polinoma  $A_k$ , kao i odgovarajuća devijacija ( $\sigma$ ) i srednja procentualna greška (PD(%)) korelisanja. Na slici 4.12 su prikazane zavisnosti  $\Delta n_D - x_1$  i  $\Delta n_D/(x_1x_2) - x_1$  za sistem dimetilftalat + 2-butanon u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K, gde su punim linijama date vrednosti dobijene korelisanjem pomoću RK polinoma, a odgovarajućim simbolima eksperimentalne tačke. U literaturi nikada do sada nisu rađeni indeksi refrakcije za ovaj sistem.



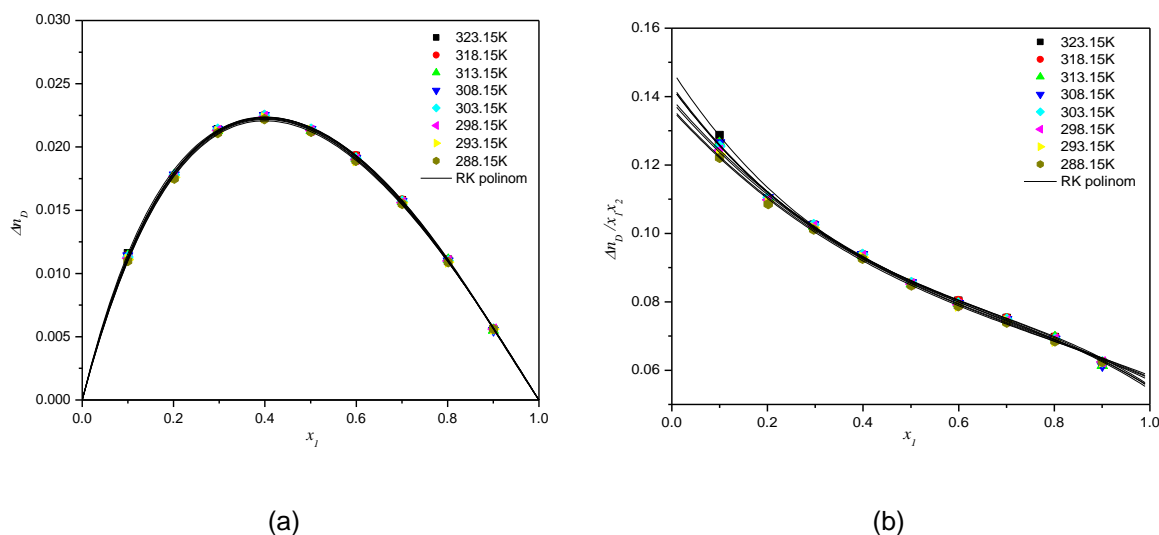
**Slika 4.12** Zavisnost: (a)  $\Delta n_D - x_1$  i (b)  $\Delta n_D/(x_1x_2) - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 2-butanon (2) u temperaturnom intervalu od 288.15K do 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne vrednosti, a linije vrednosti dobijene RK polinom

Sistem dimetilftalat (1) + 2-butanon (2) karakteriše blago asimetrična  $\Delta n_D - x_1$  kriva (slika 4.12) i pozitivne vrednosti  $\Delta n_D$  u celom koncentracionom opsegu, sa maksimumom koji je pomećen ka molskim udelima dimetilftalata u smeši oko 0.4 na svim temperaturama. Pozitivne vrednosti promene indeksa refrakcije ukazuju na stvaranje kompleksa. Uticaj temperature na  $\Delta n_D$  vrednosti je zanemarljiv.

Vrednosti dopunskih molarnih zapremina istog sistema su negativne u celom koncentracionom polju, što je uslovljeno dipol-dipol privlačnim silama i efikasnijim pakovanjem molekula u smeši.

## 4.1.2.3. SISTEM DIMETILFTALAT + TETRAHIDROFURAN

Rezultati eksperimentalno izmerenog indeksa refrakcije  $n_D$  i izračunate promene indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  binarnog sistema dimetilftalat + tetrahidrofuran dati su u tabeli P6, dok su u tabeli P7 date vrednosti optimalnog broja parametara RK polinoma  $A_k$ , kao i odgovarajuća devijacija ( $\sigma$ ) i srednja procentualna greška (PD(%)) korelisanja. Na slici 4.13 su prikazane zavisnosti  $\Delta n_D - x_1$  i  $\Delta n_D/(x_1x_2) - x_1$  za sistem dimetilftalat + tetrahidrofuran u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K, gde su punim linijama date vrednosti dobijene korelisanjem pomoću RK polinoma, a odgovarajućim simbolima eksperimentalne tačke.



**Slika 4.13** Zavisnost: (a)  $\Delta n_D - x_1$  i (b)  $\Delta n_D/(x_1x_2) - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + tetrahidrofuran (2) u temperaturnom intervalu od 288.15K do 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne vrednosti, a linije vrednosti dobijene RK polinom

Sistem dimetilftalt (1) + tetrahidrofuran (2) karakteriše blago asimetrična pozitivna  $\Delta n_D - x_1$  kriva (slika 4.13) u celom koncentracionom opsegu. Takođe, se uočava da promena temperature ne utiče na  $\Delta n_D$  vrednosti.

#### 4.1.3. Rezultati eksperimentalnih merenja viskoznosti

Ekperimentalna merenja viskoznosti odabranih binarnih sistema su rađena na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu, u Laboratoriji za hemijsko-inženjersku tremodinamiku. Jedan od ciljeva je bio određivanje promene viskoznosti  $\Delta\eta$  na bazi eksperimentalno određenih viskoznosti za četiri binarna sistema: dimetilftalat + 1-butanol, dimetilftalat + 2-butanol, dimetilftalat + 2-butanon i dimetilftalat + tetrahidrofuran. Sva merenja su vršena na atmosferskom pritisku i u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 323.15 K sa korakom od 5 K. Sve tabele vezane za rezultate eksperimentalnih merenja date su u Prilogu ove doktorske disertacije.

U tabeli P8 je dat uporedni prikaz viskoznosti čistih supstanci na atmosferskom pritisku, eksperimentalno dobijenih u ovom radu sa podacima preuzetim iz literature [35-42], dok su u tabeli P9 date vrednosti viskoznosti čistih supstanci u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 323.15 K, sa korakom od 5 K i na atmosferskom pritisku, određene u ovom radu. Iz tabele P8 se uočava da je slaganje rezultata iz ovog rada sa odgovarajućim literaturnim vrednostima veoma dobro.

Kao što je već prethodno pomenuto, u okviru ove doktorske teze određene su viskoznosti i izračunate promene viskoznosti za četiri binarna sistema, koji će zbog sličnosti i mogućnosti poređenja biti podeljeni u tri grupe:

- dimetilftalat + alkoholi,
- dimetilftalat + 2-butanon i
- dimetilftalat + tetrahidrofuran.

## 4.1.3.1. SISTEMI DIMETILFTALAT + ALKOHOL

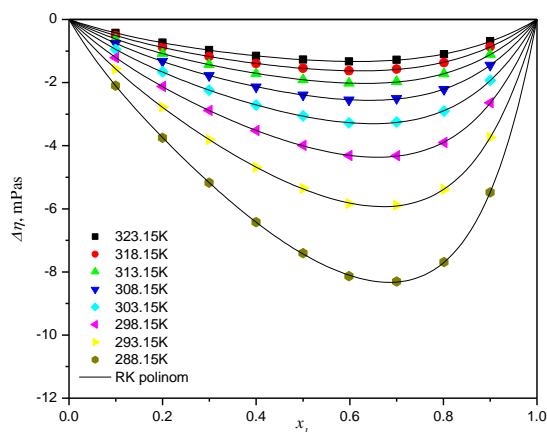
U okviru ove grupe, određena je promena viskoznosti dva binarna sistema:

- dimetilftalat + 1-butanol
- dimetilftalat + 2-butanol

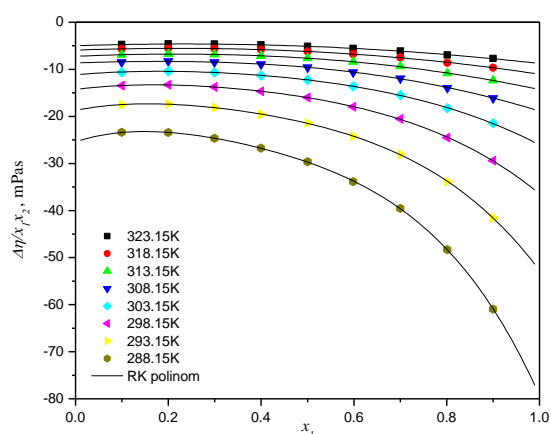
Izborom ovih sistema želelo se utvrditi sledeće: kolika je neidealnost binarnih sistema dimetilftalata i alkohola, kao i kakav je uticaj grananja molekula butanola (*prim*-butanol, *sec*-butanol) na  $\Delta\eta$  vrednosti i koliko povećanje temperature utiče na odstupanje od idealnosti odabranih sistema.

Rezultati eksperimentalno izmerene viskoznosti  $\eta$  i izračunate promene viskoznosti  $\Delta\eta$  (jednačina (2.6)) binarnih sistema dimetilftalat + alkohol dati su u tabeli P10, dok su u tabeli P11 date vrednosti optimalnog broja parametara Redlich-Kisterovog polinoma (RK)  $A_k$ , kao i odgovarajuća devijacija ( $\sigma$ ) i srednja procentualna greška (PD(%)) korelisanja.

Na slici 4.14 su prikazane zavisnosti  $\Delta\eta - x_1$  i  $\Delta\eta/(x_1x_2) - x_1$  za sistem dimetilftalat + alkohol u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K, gde su punim linijama date vrednosti dobijene korelisanjem pomoću RK polinoma, a odgovarajućim simbolima eksperimentalne tačke.



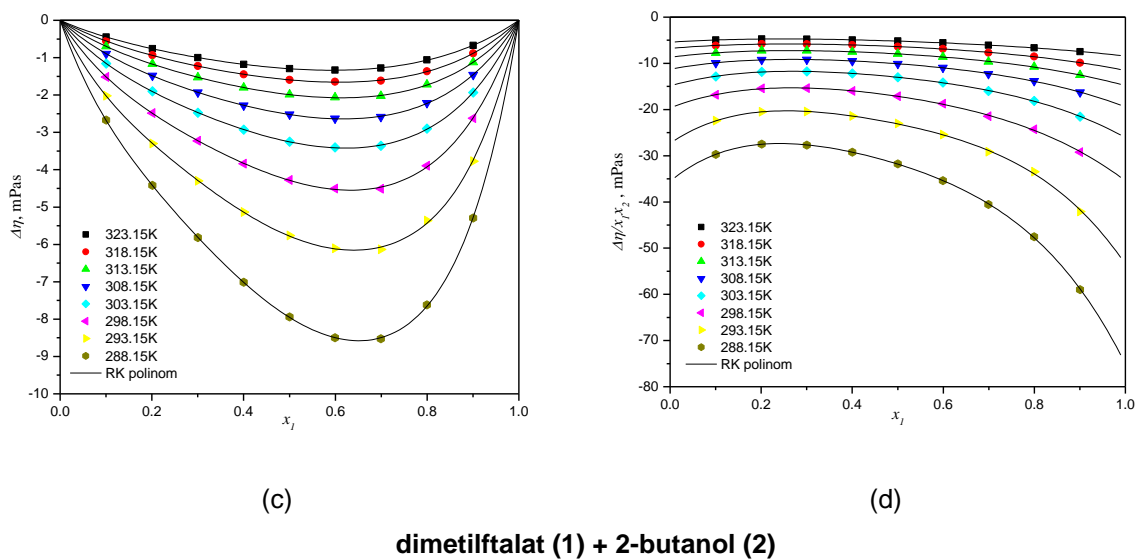
(a)



(b)

dimetilftalat (1) +1-butanol (2)

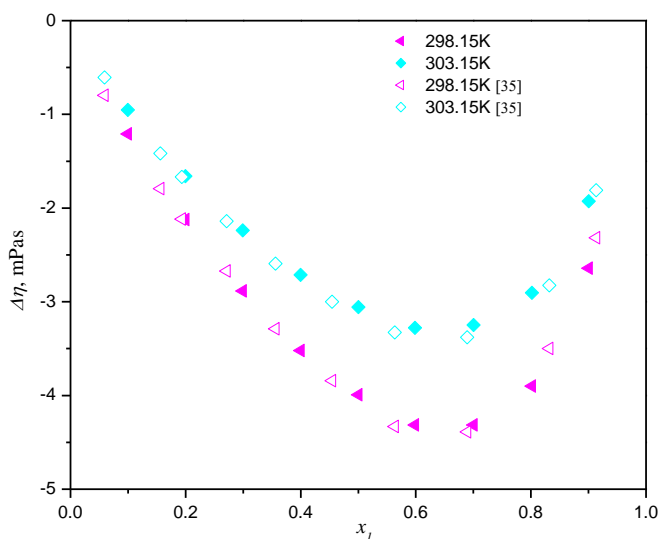




**Slika 4.14** Zavisnost: (a)  $\Delta\eta - x_1$  za sistem dimetilftalat (1) + 1-butanol (2), (b)  $\Delta\eta/(x_1x_2) - x_1$  za sistem dimetilftalat (1) + 1-butanol (2), (c)  $\Delta\eta - x_1$  za sistem dimetilftalat (1) + 2-butanol (2) i (d)  $\Delta\eta/(x_1x_2) - x_1$  za sistem dimetilftalat (1) + 2-butanol (2) u temperaturnom intervalu od 288.15K do 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne vrednosti, a linije vrednosti dobijene RK polinom

Na slici 4.14 prikazana je kriva  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 1-butanol (2) i dimetilftalat (1) + 2-butanol (2). Ove smeše karakteriše negativna vrednost  $\Delta\eta$  u celom koncentracionom opsegu. Negativne vrednosti  $\Delta\eta$  pokazuju da je posmatrani sistem manje viskozan od viskoznosti njegovih čistih komponenti. Sa povećanjem temperature  $\Delta\eta$  vrednosti postaju manje negativne. Smeša sa jakim interakcijama između različitih molekula, kada je težnja komponenta ka isparavanju u rastvoru manja nego u čistom stanju, pokazuje negativna odstupanja od Raulovog zakona, odnosno pozitivno odstupanje viskoznosti. Takođe, kada su adhezione sile (sile između različitih molekula) slabije od kohezionih sila (sile između istorodnih molekula), komponente imaju veću težnju za isparavanjem kada su u smeši i tada je parcijalni pritisak pare za svaku od komponenta veći od onog izračunatog prema Raulovom zakonu, znači pozitivno odstupanje od Raulovog zakona, odnosno negativno odstupanje viskoznosti.

Sa povećanjem temperature vrednosti za  $\eta$ , a samim tim i za  $\Delta\eta$  postaju manje negativne. Zapaža se da je uticaj temperature kod ove grupe sistema veoma veliki.



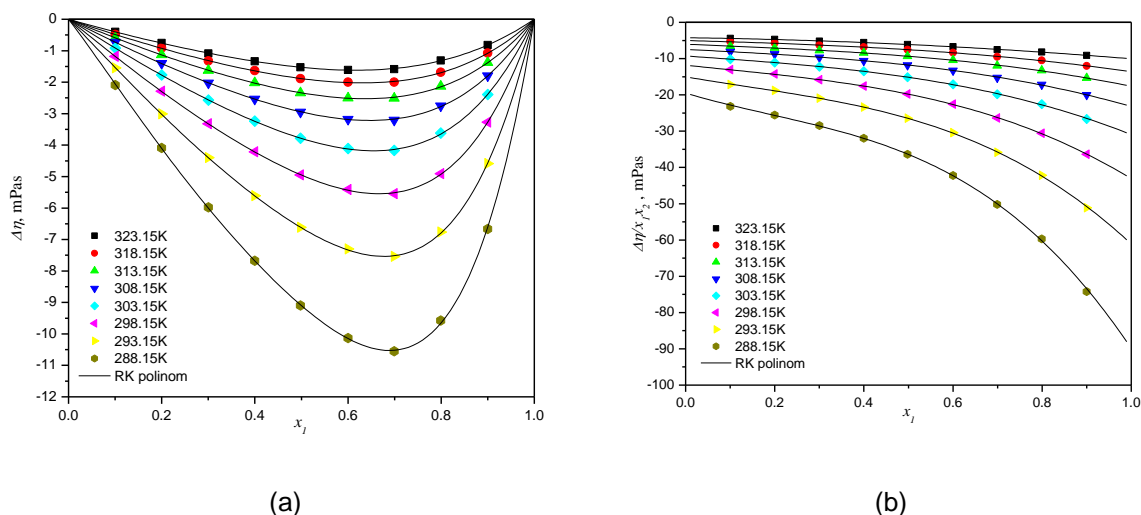
**Slika 4.15** Zavisnost  $\Delta\eta - x_1$  za sistem dimetilfthalat (1) + 1-butanol (2). Simbolima su pokazane eksperimentalne vrednosti iz ovog rada i eksperimentalne vrednosti iz rada [35] na temperaturama 298.15K i 303.15K

Na slici 4.15 pokazano je poređenje eksperimentalnih  $\Delta\eta$  vrednosti sistema dimetilfthalat + 1-butanol na temperaturama 298.15K i 303.15 K, dobijenih u ovom radu, sa literaturnim eksperimentalnim podacima [35]. Uočava se da krive  $\Delta\eta - x_1$  imaju isti trend i odlično se slažu u celom koncentracionom opsegu.

Za sistem dimetilfthalat + 2-butanol nisu nađene literaturne  $\eta$  vrednosti.

## 4.1.3.2. SISTEM DIMETILFTALAT + 2-BUTANON

Rezultati eksperimentalno izmerene viskoznosti  $\eta$  i izračunate promene viskoznosti  $\Delta\eta$  binarnog sistema dimetilftalat + 2-butanon dati su u tabeli P10, dok su u tabeli P11 date vrednosti optimalnog broja parametara RK polinoma  $A_k$ , kao i odgovarajuća devijacija ( $\sigma$ ) i srednja procentualna greška (PD(%)) korelisanja. Na slici 4.16 su prikazane zavisnosti  $\Delta\eta - x_1$  i  $\Delta\eta/(x_1x_2) - x_1$  za sistem dimetilftalat + 2-butanon u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K, gde su punim linijama date vrednosti dobijene korelisanjem pomoću RK polinoma, a odgovarajućim simbolima eksperimentalne tačke.



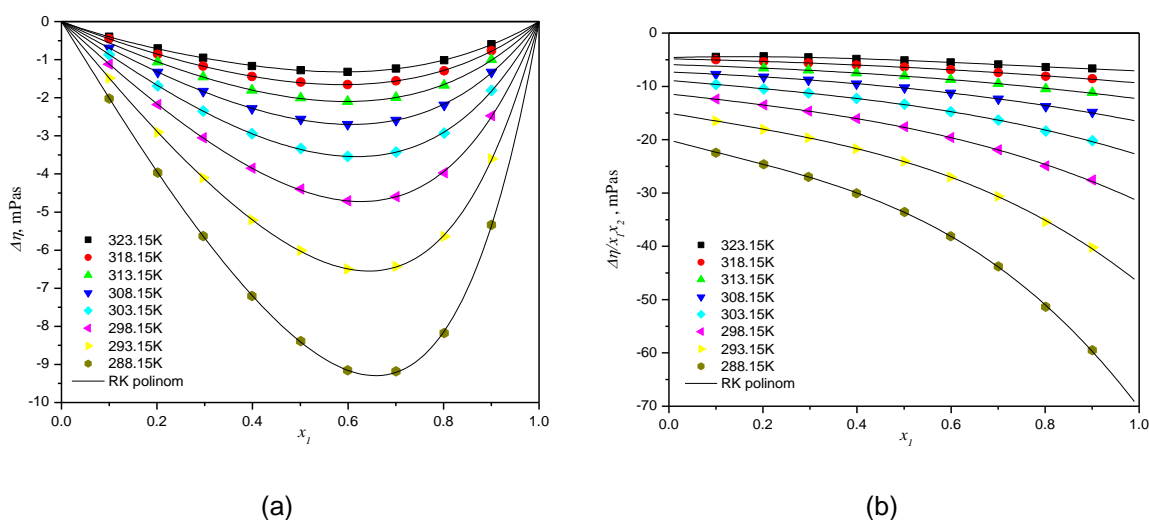
**Slika 4.16** Zavisnost: (a)  $\Delta\eta - x_1$  i (b)  $\Delta\eta/(x_1x_2) - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 2-butanon (2) u temperaturnom intervalu od 288.15K do 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne vrednosti, a linije vrednosti dobijene RK polinom

Promena viskoznosti zavisi od molekularnih interakcija, kao i od veličine i oblika molekula. Kao što se sa slike 4.16 vidi kriva  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 2-butanon (2) je negativna u celom koncentracionom opsegu, što odgovara da binarni sistem pokazuje pozitivno odstupanje od Raulovog zakona i endotermno ponašanje. Negativna promena viskoznosti je karakteristična za sistema gde su disperzione sile dominantne. Sa povećanjem temperature  $\Delta\eta$  vrednosti postaju manje negativne.

Za sistem dimetilftalat + 2-butanon nisu pronađene literaturne  $\eta$  vrednosti.

## 4.1.3.3. SISTEM DIMETILFTALAT + TETRAHIDROFURAN

Rezultati eksperimentalno izmerene viskoznosti  $\eta$  i izračunate promene viskoznosti  $\Delta\eta$  binarnog sistema dimetilftalat + tetrahidrofurani dati su u tabeli P10, dok su u tabeli P11 date vrednosti optimalnog broja parametara RK polinoma  $A_k$ , kao i odgovarajuća devijacija ( $\sigma$ ) i srednja procentualna greška (PD(%)) korelisanja. Na slici 4.17 su prikazane zavisnosti  $\Delta\eta - x_1$  i  $\Delta\eta/(x_1x_2) - x_1$  za sistem dimetilftalat + tetrahidrofurani u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K, gde su punim linijama date vrednosti dobijene korelisanjem pomoću RK polinoma, a odgovarajućim simbolima eksperimentalne tačke.



**Slika 4.17** Zavisnost: (a)  $\Delta\eta - x_1$  i (b)  $\Delta\eta/(x_1x_2) - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + tetrahidrofurani (2) u temperaturnom intervalu od 288.15K do 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne vrednosti, a linije vrednosti dobijene RK polinom

Na slici 4.17 prikazana je negativna kriva  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + tetrahidrofurani (2) u celom koncentracionom opsegu. Negativne  $\Delta\eta$  vrednosti znače da je smeša više viskozna od čistih komponenta. Sa povećanjem temperature  $\Delta\eta$  vrednosti postaju manje negativne.

Za sistem dimetilftalat + tetrahidrofurani nisu nađene literaturne  $\eta$  vrednosti.

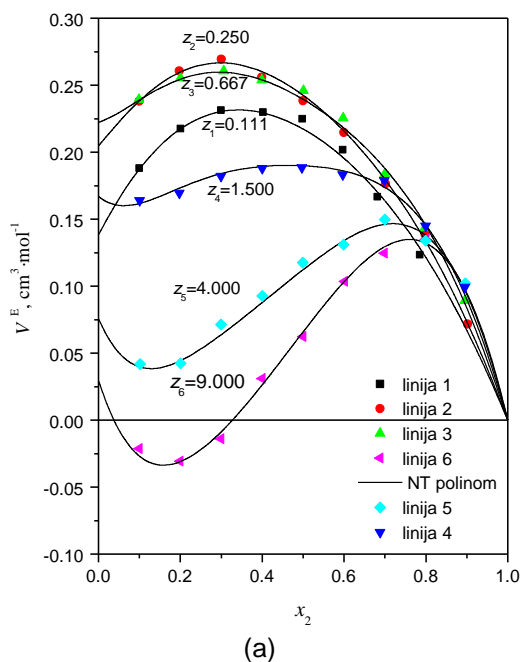
## 4.2. REZULTATI EKSPERIMENTALNIH MERENJA TERNARNIH SISTEMA

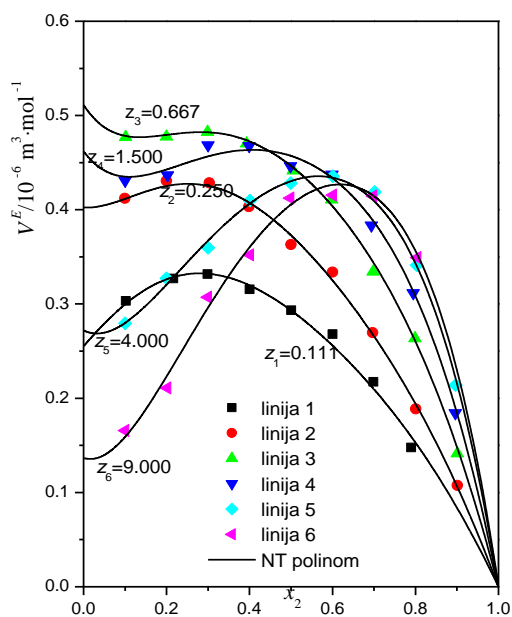
### 4.2.1. Rezultati eksperimentalnih merenja gustine

Određene su gustine  $\rho$  i izračunate dopunske molarne zapremine  $V^E$  dva ternarna sistema:

- 1-butanol + hloroform + benzen
- 2-butanol + hloroform + benzen

Merenja su vršena na atmosferskom pritisku i u temperaturnom intervalu od 288.15 do 313.15K. U tabeli P12 dati su rezultati merenja za oba sistema, dok se u tabeli P13 nalaze parametri Nagata-Tamura (NT) polinoma (jednačina 2.9), kao i rezultati korelisanja eksperimentalnih  $V^E$  podataka NT polinomom dati preko srednjeg procentualnog odstupanja (PD(%)) i odgovarajuće devijacije ( $\sigma$ ). Eksperimentalno određivanje  $V^E$  podataka ternarnih sistema je vršeno po linijama konstantnog odnosa  $x_1/x_3$  koje se kreću od vrednosti  $z_1=0.111$  za najvišu liniju do  $z_6=9.000$  za najnižu liniju na dijagramu (slika 4.18), gde su punim linijama date vrednosti dobijene korelisanjem pomoću NT polinoma, a odgovarajućim simbolima eksperimentalne tačke.

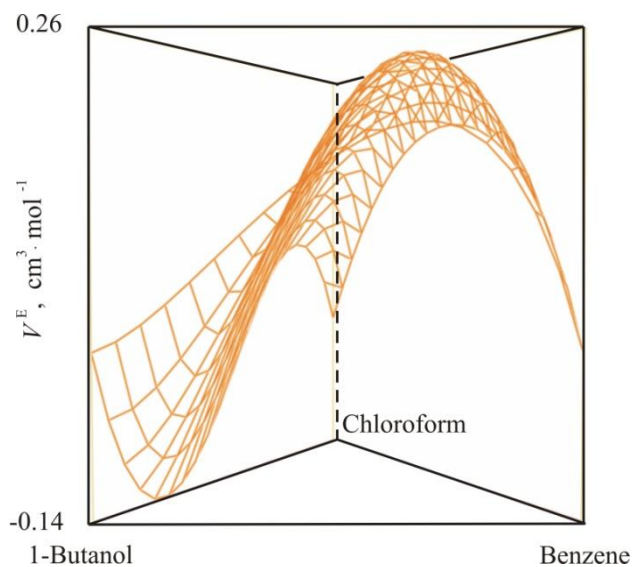




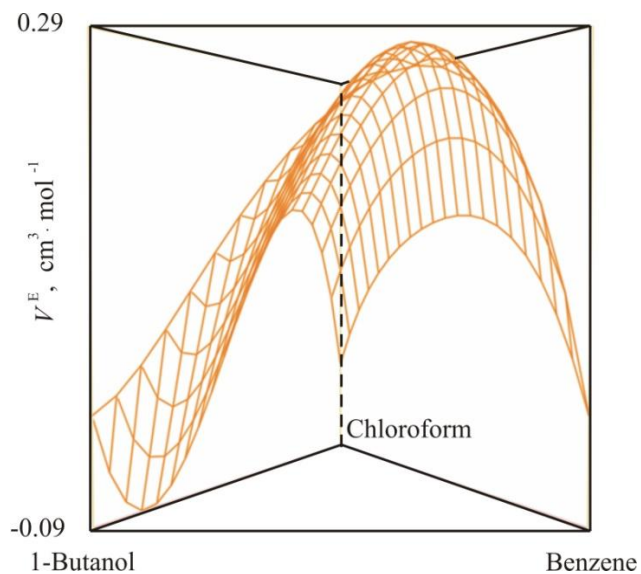
(b)

**Slika 4.18** Zavisnost  $V^E - x_2$  sistema: a) 1-butanol (1) + hloroform (2) + benzen (3) i b) 2-butanol (1) + hloroform (2) + benzen (3) na temperaturi 303.15K. Simboli označavaju eksperimentalne vrednosti:  $x_1/x_3 = 0.111$  (linija 1),  $x_1/x_3 = 0.250$  (linija 2),  $x_1/x_3 = 0.667$  (linija 3),  $x_1/x_3 = 1.500$  (linija 4),  $x_1/x_3 = 4.000$  (linija 5),  $x_1/x_3 = 9.000$  (linija 6), a a linije vrednosti dobijene NT polinom

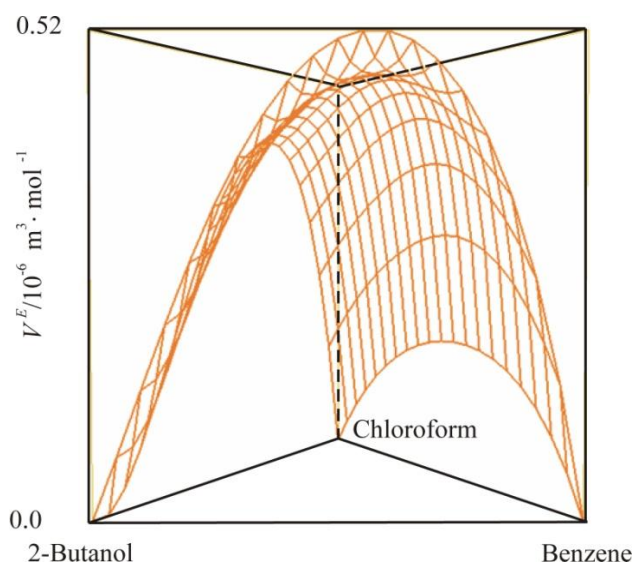
Na slici 4.19 je dat prikaz ternarne  $V^E$  površi ispitivanih ternarnih sistema.



(a)



(b)

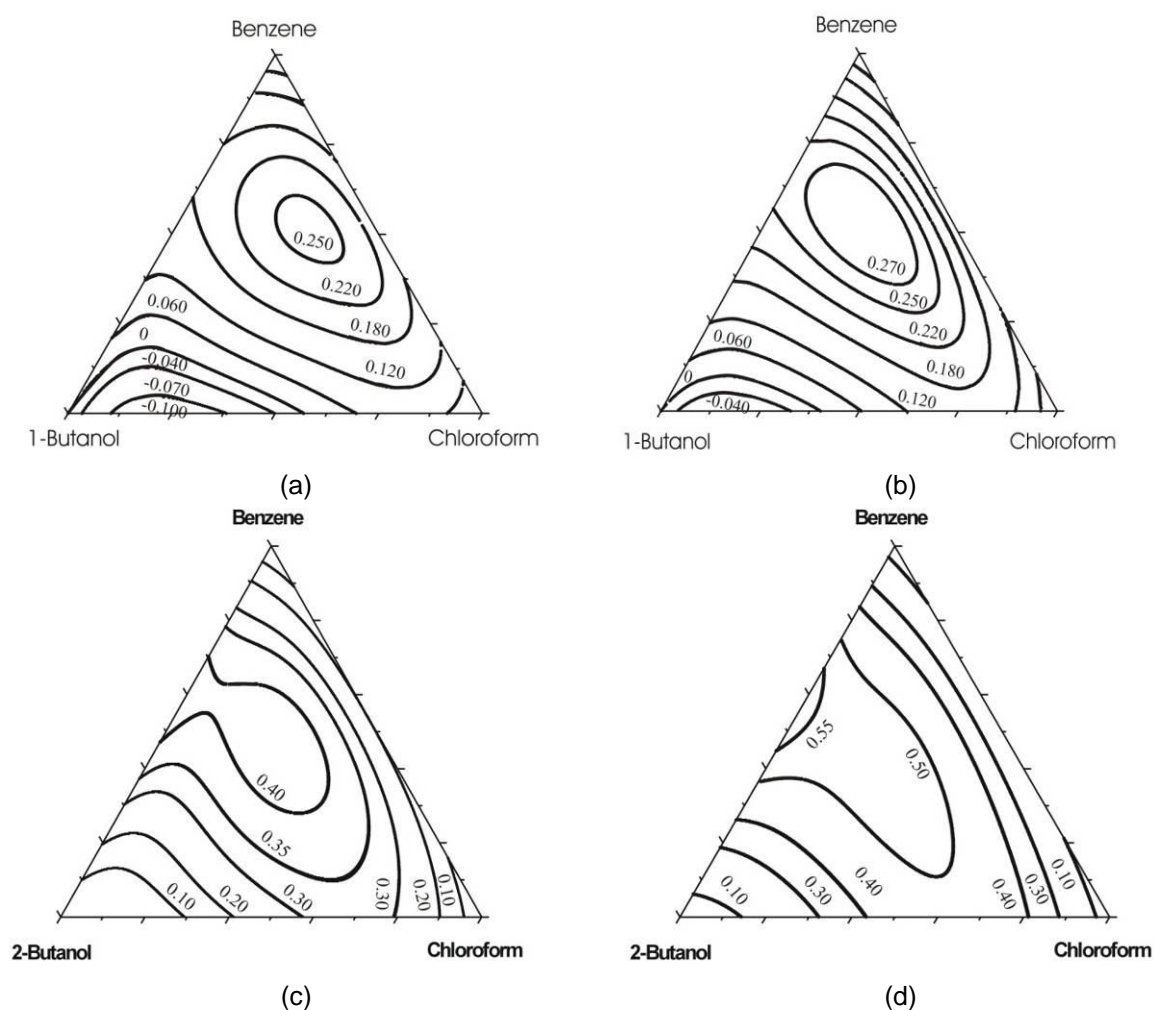


(c)

**Slika 4.19** Prostorni prikaz površi ternarnog sistema 1-butanol (1) + hloroform (2) + benzen (3) na temperaturama: a) 288.15K i b) 313.15K i sistema 2-butanol (1) + hloroform (2) + benzen (3) na temperaturi c) 313.15K

Ovakvim načinom prikaza  $V^E$  podataka ternarnih sistema stiče se realističan uvid u pojave koje nastaju u ternarnoj smeši prilikom mešanja komponenata. Na slici 4.20 dat je  $x_1x_2x_3$  dijagram u kojem su date linije konstantnih  $V^E_{123}$  vrednosti dobijene presecanjem ternarne površi (slika 4.18) odgovarajućim horizontalnim ravnima, konstantnih  $V^E$  vrednosti.

Binarni sistemi alkohol + hloroform i alkohol + benzen su analizirani u poglavlju 4.1.1 Za smešu hloroform + benzen, dobijene su pozitivne  $V^E$  vrednosti u celom koncentracionom polju. Benzen, kao akceptor protona, formira slabe komplekse sa hloroformom, uslovljavajući manje efikasno pakovanje ove smeše. Benzen u sistemima sa polarnim jedinjenjima gradi veze dipol-indukovani dipol. Moglo bi se zaključiti da u ovom sistemu te veze nisu jake, odnosno ne dominiraju. Na osnovu toga može se reći da dolazi do prostornog odbijanja između molekula hloroforma i molekula benzena, odnosno dominiraju interakcije dipol-dipol između molekula hloroforma. Te veze su mnogo jače od interakcija dipol-indukovani dipol i to se ispoljava pozitivnim vrednostima  $V^E$  u celom koncentracionom opsegu, što uslovljava loše pakovanje molekula u smeši.



**Slika 4.20** Krive konstantnih  $V^E$  vrednosti ternarnih sistema 1-butanol (1) + hloroform (2) + benzen (3) na temperaturama: a) 288.15K i b) 313.15K, i 2-butanol (1) + hloroform (2) + benzen (3) na temperaturama c) 288.15K i d) 313.15K



Kao što se sa slika 4.18 i 4.19 uočava,  $V^E$  vrednosti ternarnih sistema alkohol + hloroform + benzen su u najvećem delu ternarnog koncentracionog polja pozitivne, osim u delu polja sa velikim sadržajem 1-butanola, gde dominiraju uticaji binarne smeše alkohola sa hloroformom, koji su za veće udele alkohola pokazivale negativne  $V^E$  vrednosti.

Pozitivne  $V^E$  vrednosti ukazuju da je manje efikasno pakovanje molekula izazvano sternim smetnjama, koje su posledica formiranja kompleksa hloroform + benzen, i prostornog odbijanja između alkilnog lanca alkohola i atoma hlora hloroforma. Negativne  $V^E$  vrednosti se mogu pripisati jačim specifičnim interakcijama vodonikovog atoma hidroksilne grupe alkohola i atoma hlora u molekulu hloroforma. Tu je prisutna i interakcija između vodonikovog atoma iz molekula hloroforma, kao akceptora elektrona, sa atomom kiseonika iz molekula alkohola, kao donora elektrona.

## 5. MODELOVANJE DOPUNSKE MOLARNE ZAPREMINE, INDEKSA REFRAKCIJE I VISKOZNOSTI SMEŠA

### 5.1. MODELOVANJE OSOBINA BINARNIH SISTEMA

#### 5.1.1. Korelisanje $V^E$ pomoću CEOS i CEOS/ $G^E$ modela

U ovom radu izvršeno je korelisanje  $V^E$  osobina binarnih smeša, eksperimentalno određenih na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu, u Laboratoriji za hemijsko-inženjersku termodinamiku. Primenjeni su modeli bazirani na kubnoj jednačini stanja Stryjek-Vera modifikaciji Peng-Robinsonove kubne jednačinu stanja PRSV CEOS [9], koja ima veoma široku primenu, a i pokazala se kao veoma uspešna u određivanju dopunskih termodinamičkih osobina binarnih smeša. Za izračunavanje parametara smeše, u PRSV CEOS su ugrađena dva tipa pravila mešanja: (1) pravilo mešanja kod koga su parametri smeše PRSV CEOS  $a$  i  $b$  funkcija sastava – van der Waals jedan fluid (vdW1) [10] i (2) pravilo mešanja kod koga se za određivanje parametara smeše  $a$  i  $b$  koristi model koeficijenata aktivnosti  $T_w$  i saradnika (TCBT) [11], baziran na dopunskoj Gibbsovoj energiji ( $G^E$ ).

Opšti oblik dvoparametarske PRSV CEOS [9] dat je sledećom jednačinom:

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a(T)}{(V + ub)(V + wb)} \quad (5.1)$$

gde  $P$ ,  $T$ ,  $V$  i  $R$  označavaju pritisak, temperaturu, molarnu zapreminu i gasnu konstantu, respektivno.  $u$  i  $w$  se za PRSV CEOS izračunavaju prema izrazima [9]:  $u = 1 - \sqrt{2}$  i  $w = 1 + \sqrt{2}$ . Za čistu supstancu energetski parametar  $a_i$  i kovolumen  $b_i$  se izračunavaju iz sledećeg seta jednačina:

$$a_i(T) = 0.457235 \frac{(RT_{ci})^2}{P_{ci}} \left\{ 1 + m_i (1 - T_{ri}^{1/2}) \right\}^2 \quad (5.2)$$

$$b_i = 0.077796 \frac{RT_{ci}}{P_{ci}} \quad (5.3)$$

$$m_i = k_{0i} + k_{1i} (1 + T_{ri}^{1/2}) (0.7 - T_{ri}) \quad (5.4)$$

$$k_{0i} = 0.378893 + 1.4897153\omega_i - 0.1713848\omega_i^2 + 0.0196554\omega_i^3 \quad (5.5)$$

$T_{ci}$  i  $P_{ci}$  su kritična temperatura i kritični pritisak komponente  $i$  u jednačinama (5.2)-(5.5),  $T_{ri}$  je redukovana temperatura  $T/T_{ci}$ ,  $\omega_i$  je factor acentričnosti, dok je  $k_{ij}$  parametar čiste supstance [9].

Za određivanje parametara  $a$  i  $b$  smeše, korišćena su, napred navedena, dva različita tipa pravila mešanja: vdW1 i TCBT.

Energetski parametar  $a$  vdW1 pravila mešanja [10] je definisan sledećom jednačinom:

$$a = \sum_i \sum_j x_i x_j (a_i a_j)^{1/2} [1 - k_{ij} + l_{ij}(x_i - x_j)] \quad (5.6)$$

dok je kovolumen  $b$  definisan sledećim pravilom kombinovanja:

$$b = \sum_i \sum_j x_i x_j (b_i b_j)^{1/2} (1 - m_{ij}) \quad (5.7)$$

gde su  $k_{ij}$ ,  $l_{ij}$  and  $m_{ij}$  binarni interakcioni parametri.

Twu i saradnici [11] su razvili TCBT pravilo mešanja za uslove bez referentnog pritiska koje povezuje dopunsku Gibbsovu energiju  $G^E$  sa dopunskom Gibbsovom energijom baziranoj na van der Waalsovom referentnom fluidu (vdW),  $G_{vdW}^E$ , na sledeći način:

$$\begin{aligned} \frac{G^E}{RT} - \frac{G_{vdW}^E}{RT} + (Z - Z_{vdW}) = \ln \left\{ \left( \frac{V_{vdW}^* - 1}{V^* - 1} \right) \left( \frac{b_{vdW}}{b} \right) \right\} - \\ - \frac{1}{w - u} \left\{ \frac{a^*}{b^*} \ln \left( \frac{V^* + w}{V^* + u} \right) - \frac{a_{vdW}^*}{b_{vdW}^*} \ln \left( \frac{V_{vdW}^* + w}{V_{vdW}^* + u} \right) \right\} \end{aligned} \quad (5.8)$$

gde se  $G_{vdW}^E$  izračunava iz PRSV kubne jednačine stanja, a  $V^* = V/b = Z/b^*$  označava redukovanu zapreminu tečnosti na pritisku i temperaturi smeše.  $Z$  i  $Z_{vdW}$  su odgovarajući faktori kompresibilnosti, izračunavaju se iz jednačine (5.1), izraženoj u  $Z$  formi. Zahteva se iterativni postupak za određivanje  $V^*$ , pošto jednačina za  $V^*$  nema eksplicitno rešenje. Parametri  $a_{vdW}$  i  $b_{vdW}$  se određuju iz jednačina (5.6) i (5.7), dok se redukovani parametri  $a^*$ ,  $b^*$ ,  $a_{vdW}^*$  i  $b_{vdW}^*$  izračunavaju iz izraza:

$$a^* = Pa/R^2T^2 \quad b^* = Pb/RT \quad (5.9)$$

Kao  $G^E$  model korišćena je NRTL jednačina koju su uveli Renon i Prausnitz [43] na bazi lokalnog sastava. NRTL jednačina je izabrana iz razloga njene velike fleksibilnosti koju ispoljava kada se parametri izraze u funkciji temperature:

$$\frac{G^E}{RT} = \sum_i x_i \frac{\sum_j x_j G_{ji} \tau_{ji}}{\sum_k x_k G_{ki}} \quad (5.10)$$

Za binarnu smešu važe sledeće jednačine:

$$\begin{aligned} G_{12} &= \exp(-\alpha_{12} \tau_{12}) & G_{21} &= \exp(-\alpha_{12} \tau_{21}) \\ \tau_{12} &= (g_{12} - g_{22}) / RT = \Delta g_{12} / RT & \tau_{21} &= (g_{21} - g_{11}) / RT = \Delta g_{21} / RT \end{aligned} \quad (5.11)$$

Pri korelisanju u temperaturnom intervalu, za binarne interakcione parametre korišćena je linearna temperaturna zavisnost:

$$Y = Y_1 + Y_2 T \quad (5.12)$$

gde je  $Y = k_{ij}, l_{ij}, m_{ij}, \Delta g_{12}$  i  $\Delta g_{21}$ . Modeli korišćeni u ovom radu definisani su setovima odgovarajućih jednačina: modeli vdW jednačinama (5.1) - (5.7) i (5.12), gde su za vdW1-1  $l_{ij}=m_{ij}=0$ , a za vdW1-2  $l_{ij}=0$ , modeli TCBT jednačinama (5.1) - (5.12), za TCBT-2 su  $k_{ij}=l_{ij}=m_{ij}=0$  i  $\alpha_{ij}=0.3$ , a za TCBT-3  $l_{ij}=m_{ij}=0$  i  $\alpha_{ij}=0.3$ .

Za optimizaciju parametara modela korišćena je Marquardt optimizaciona tehnika [44] i njene modifikacije, sa sledećom funkcijom cilja:

$$OF = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{V_{\text{eksp}}^E - V_{\text{rač}}^E}{V_{\text{rač}}^E} \right)_i^2 \rightarrow \min \quad (5.13)$$

Kvalitet korelisanja  $V^E$  podataka ocenjen je preko devijacije  $\sigma$  (jednačina 2.10) i srednje procentualne greške PD(%) (jednačina 2.11).

U okviru ove teze izvršeno je korelisanje  $V^E$  podataka binarnih sistema za koje su prethodno eksperimentalno određeni  $V^E$  podaci:

- alkohol + hloroform
- alkohola + benzen
- dimetilftalat + alkohol
- dimetilftalat + 2-butanon
- dimetilftalat + tetrahidrofuran

Parametri u svim pravilima mešanja su tretirani kao temperaturno nezavisni (korelisanje na svakoj izotermi) i kao linearno temperaturno zavisni (korelisanje u temperaturnom intervalu). Rezultati korelisanja i vrednosti optimizovanih temperaturno nezavisnih parametara za 8 binarna sistema dati su u tabeli P14, dok su u tabeli P15 dati rezultati dobijeni za temperaturni interval pomoću modela u koje je ugrađena linearna temperaturna zavisnost parametara.

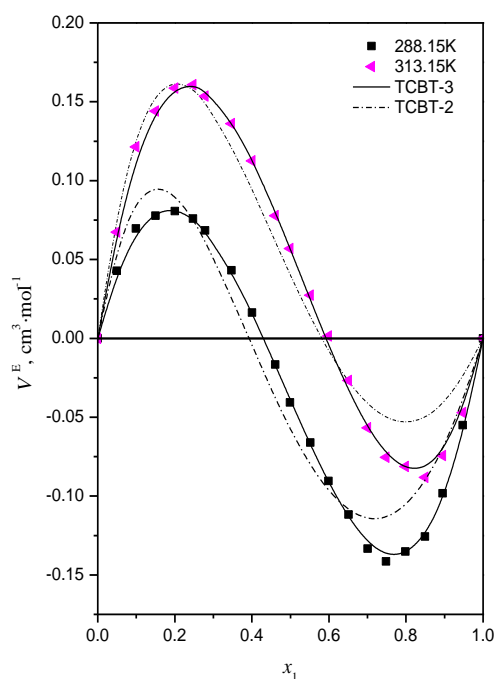
## 5.1.1.1. SISTEMI ALKOHOL + HLOROFORM

Rezultati korelisanja  $V^E$  podataka binarnih sistema alkohol + hloroform, uključujući vrednosti parametara primenjenih modela na svakoj izotermi posebno, kao i u temperaturnom intervalu, dati su u tabeli P14 i P15.

Analizirajući rezultate koji su dobijeni na svakoj izotermi za smešu linearnog alkohola, 1-butanola sa hloroformom, evidentno je da troparametarski modeli vdW1-3 i TCBT-3 veoma uspešno korelišu  $V^E$  podatke ovog sistema, pri čemu greška raste sa porastom temperature. Dvoparametarski vdW1-2 i TCBT-2 modeli u svim slučajevima veoma loše korelišu  $V^E$  podatke. Takođe, pri fitovanju u temperaturnom intervalu troparametarski modeli daju bolje rezultate od dvoparametarskih CEOS i CEOS/ $G^E$  modela, koji nisu pogodni za opisivanje složenog neidealnog ponašanja sistema 1-butanol sa hloroformom, koje karakteriše S-oblik  $V^E - x_1$  krive (slika 4.1a).

Kod sistema sekundarnog alkohola, 2-butanola i hloroforma greška korelisanja dobijena vdW1-2, TCBT-2, vdW1-3 i TCBT-3 modelima se smanjuje sa povećanjem temperature, što se može objasniti činjenicom da se sa povećanjem temperature izraženost S-oblika  $V^E - x_1$  krive smanjuje.

Na slici 5.1 su prikazani eksperimentalni  $V^E$  podaci sistema 1-butanol + hloroform na temperaturama 288.15 i 313.15 K, kao i krive TCBT-2 i TCBT-3 modela. Naime, pri korelisanju na svakoj izotermi troparametarski TCBT-3 model je skoro u svim slučajevima dao srednju procentualnu grešku manju od 2%, što je dobar rezultat. Na slici 5.1 se vidi da krive dobijene TCBT-3 modelom, odlično prate trend eksperimentalnih tačaka, dok dvoparametarski TCBT-2 model zaostaje mnogo u kvalitetu dobijenih rezultata.



**Slika 5.1** Korelisanje  $V^E$  podataka binarnog sistema 1-butanol (1) + hloroform (2) na 288.15 i 313.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke, puna linija TCBT-3 model, isprekidana linija TCBT-2 model

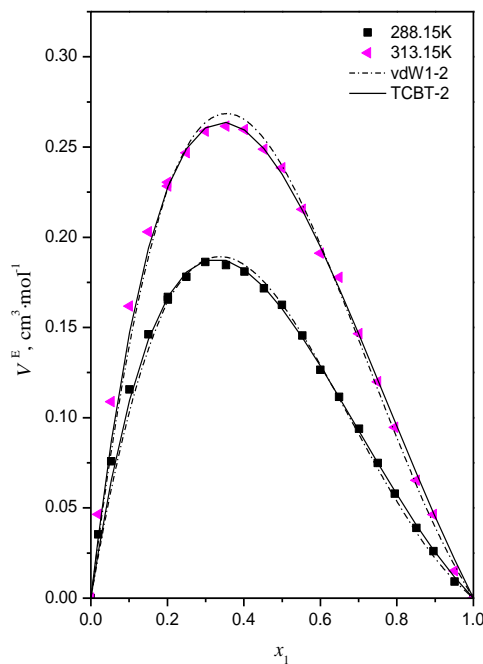
Kao najlošije, kod ove grupe sistema, pokazalo se dvoparametarsko TCBT-2 pravilo mešanja, kako se to vidi na slici 5.1. Razlika između kvaliteta rezultata dobijenih sa TCBT-2 modelom smanjuje sa povećanjem razgranatosti lanca butanola (od primarnog ka sekundarnom) i u navedenim slučajevima TCBT-2 model postaje sve uspješniji. vdW1-3 model je kod sistema 1-butanol i 2-butanol sa hloroformom dao manju grešku korelisanja od TCBT-2 modela, iako vdW1-3 pravilo mešanja ima veći broj optimizovanih parametara. Pri generisanju jedinstvenog seta temperaturno nezavisnih parametara za ceo temperaturni interval, dobijeni su lošiji rezultati nego kada je korelisanje vršeno za svaku izotermu posebno, što je i očekivano. Kada se u modele ugrade temperaturno zavisni parametri, postiže se značajno poboljšanje rezultata pri korelisanju  $V^E$  podataka ove grupe sistema u ispitivanom temperaturnom intervalu (tabela P15).

## 5.1.1.2. SISTEMI ALKOHOL + BENZEN

Kod grupe sistema alkohol + benzen eksperimentalne  $V^E$  vrednosti su pozitivne u celom konecentracionom polju. Analizirane su dve smeše benzene sa izomerima alkohola (prim-butanol i sec-butanol). U pogledu kvaliteta dobijenih rezultata korelisanja  $V^E$  podataka, ponašaju se relativno slično i u oba slučaja su postignuti veoma dobri rezultati (tabela P14 i P15).

Kod sistema 1-butanol sa benzenom, izražena je dominacija troparametarskog vdW1-3 modela, kao najuspešnijeg sa greškom ispod 2%, dok su TCBT-2 i TCBT-3 modeli dali vrlo slične rezultate. Iznenadjuće loš rezultat je dobijen korelisanjem TCBT-2 modelom u temperaturnom intervalu, gde su parametri tretirani kao temperaturno nezavisni. Slično ponašanje se zapaža i kod sistema 2-butanol + benzen, gde troparametarski modeli daju manju grešku u odnosu na dvoparametarske modele.

Na slici 5.2 su prikazani eksperimentalni  $V^E$  podaci sistema 1-butanol + benzen na temperaturama 288.15K i 313.15 K, kao i krive vdW1-2 i TCBT-2 modela. Sa slike 5.2 se uočava da oba dvoparametarska modela, vdW1-2 i TCBT-2 veoma dobro korelišu  $V^E$  podatke ovog sistema.



**Slika 5.2** Korelisanje  $V^E$  podataka binarnog sistema 1-butanol (1) + benzen (2) na temperaturama 288.15 i 313.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke, puna linija TCBT-2 model, isprekidana linija vdW1-2 model

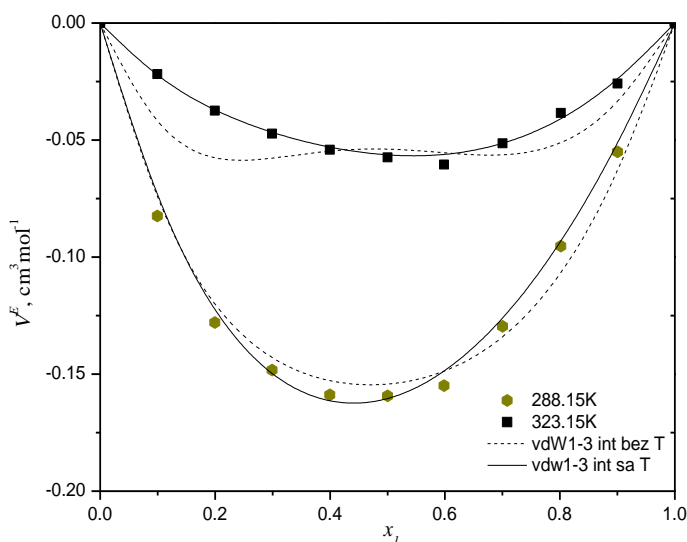


## 5.1.1.3. SISTEMI DIMETILFTALAT + ALKOHOL

Rezultati korelisanja  $V^E$  podataka binarnih sistema dimetilftalat + alkohol, uključujući vrednosti parametara primenjenih modela na svakoj izotermi posebno, kao i u temperaturnom intervalu, dati su u tabelama P14 i P15.

Analizirajući rezultate koji su dobijeni na svakoj izotermi za smešu dimetilftalat sa linearnim alkoholom, 1-butanolom, evidentno je da troparametarski modeli vdW1-3 i TCBT-3 veoma uspešno korelišu  $V^E$  podatke ovog sistema. Oba modela su dala srednju procentualnu grešku manju od 2% na svim temperaturama, osim u slučaju TCBT-3 modela, koji je dao grešku od 2.19% na temperaturi 323.15K. Kao, najlošiji se pokazao dvoparametrski TCBT-2 model, ali i u slučaju ovog modela greške su ispod 3% na svim temperaturama.

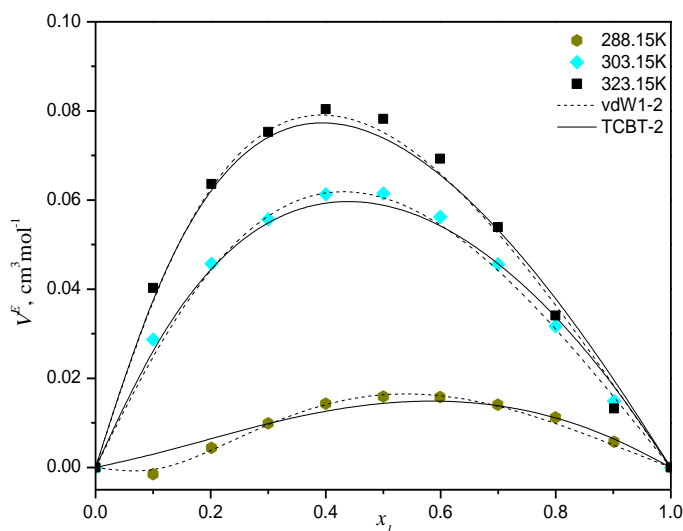
Pri generisanju jedinstvenog seta temperaturno nezavisnih parametara za ceo temperaturni interval, dobijeni su lošiji rezultati nego kada je korelisanje vršeno za svaku izotermu posebno, što je i očekivano. Kada se u modele ugrade temperaturno zavisni parametri, postiže se značajno poboljšanje rezultata pri korelisanju  $V^E$  podataka ove grupe sistema u temperaturnom intervalu (tabela P15). Na slici 5.3 su prikazani eksperimentalni  $V^E$  podaci sistema dimetilftalat + 1-butanol na temperaturama 288.15 i 323.15 K, kao i krive vdW1-3 modela pri fitovanju u temperaturnom intervalu, sa i bez temperaturno zavisnih parametara.



**Slika 5.3** Korelisanje  $V^E$  podataka binarnog sistema dimetilftalat (1) + 1-butanol (2) na temperaturama 288.15 i 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke, a linije su vdW1-3 model pri fitovanju u temperaturnom intervalu, puna linija sa temperaturno zavisnim, isprekidana linija bez temperaturno zavisnih parametara

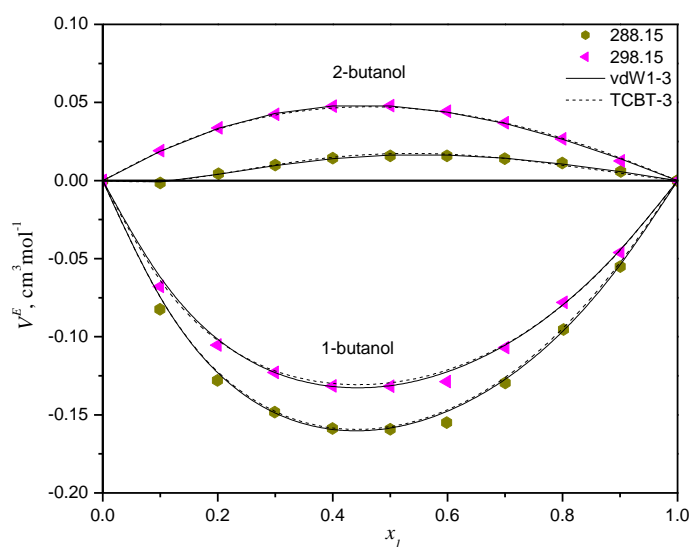
Kod sistema dimetilftalat sa sekundarnim alkoholom, 2-butanolom, izražena je dominacija troparameterskog vdW1-3 modela, kao najuspešnijeg sa greškom ispod 2.5%. Najlošije rezultate je dao TCBT-2 model sa greškom od oko 8% na temperaturi 288.15K (tabela P14). Takođe, velike greške su dobijeni i pri korelisanju u temperaturnom intervalu, ni uvođenje temperaturno zavisnih parametara nije dalo očekivano poboljšanje (tabela P15).

Na slici 5.4 su prikazani eksperimentalni  $V^E$  podaci sistema dimetilftalat + 2-butanol na temperaturama 288.15K, 303K i 323.15 K, kao i krive vdW1-2 i TCBT-2 modela. Sa slike se uočava da oba dvoparameterska modela, vdW1-2 i TCBT-2 dobro korelišu  $V^E$  podatke ovog sistema na temperaturi 303.15K. Kod oba sistema je greška manja od 2.5%. Nešto lošiji rezultat je na temperaturi 323.15K, gde su greške oba modela ispod 3%, a najlošiji rezultati su na temperaturi 288.15K, na kojoj je vdW1-2 model dao znatno manju grešku u odnosu na TCBT-2 model.



**Slika 5.4** Korelisanje  $V^E$  podataka binarnog sistema dimetilftalat (1) + 2-butanol (2) na temperaturama 288.15, 303.15 i 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke, puna linija TCBT-2 model, a isprekidana vdW1-2 model

Na slici 5.5 su prikazane eksperimentalne  $V^E$  vrednosti oba binarna sistema dimetilftalata sa alkoholima (dimetilftalat + 1-butanol i dimetilftalat + 2-butanol) na temperaturama 288.15K i 298.15K, kao i krive vdW1-3 i TCBT-3 modela. Uočavamo da na temperaturi od 288.15K manje greške daju oba modela za sistem sa 1-butanolom, dok na temperaturama 298.15K vdW1-3 model daje bolji rezultat za sistem sa 2-butanolom. Približno ista greška, za oba sistema, se dobija korelisanjem TCBT-3 modelom, što je rezultat jako malih  $V^E$  vrednosti sistema sa 2-butanolom, pa su i srednja procentualna odstupanja znatno veća.

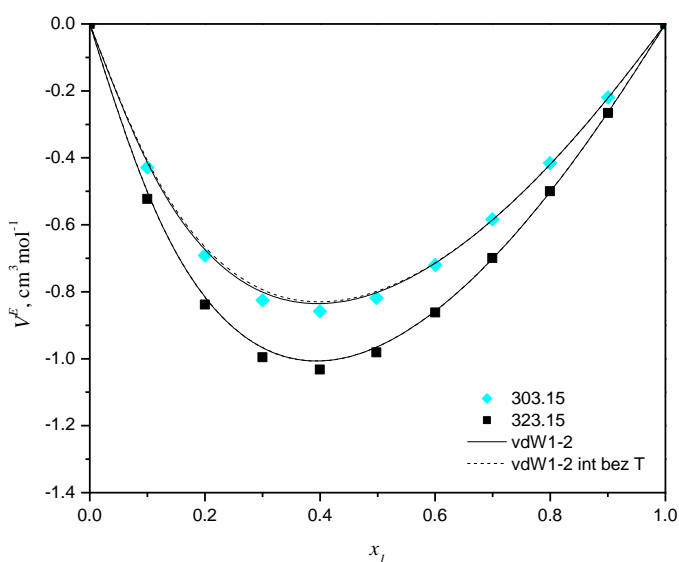


**Slika 5.5** Korelisanje  $V^E$  podataka binarnog sistema dimetilftalat (1) + 1-butanol (2) ili 2-butanol (2) na temperaturama 288.15 i 298.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke, puna linija vdW1-3 model, a isprekidana TCBT-3 model

## 5.1.1.4. SISTEM DIMETILFTALAT + 2-BUTANON

Rezultati korelisanja  $V^E$  podataka binarnog sistema dimetilftalat + 2-butanon, kao i vrednosti parametara primenjenih modela na svakoj izotermi posebno, kao i u temperaturnom intervalu, dati su u tabelama P14 i P15.

Analizirajući rezultate koji su dobijeni na svakoj izotermi za smešu dimetilftalat + 2-butanon uočava se dominacija troparametarskih modela vdW1-3 i TCBT-3 nad dvoparametarskim vdW1-2 i TCBT-2, sa greškom ispod 0.3% na svim temperaturama. Takođe, i dvoparametarski vdW1-2 i TCBT-2 modeli daju vrlo dobre rezultate sa greškama ispod 1%. Dobri rezultati su dobijeni korelisanjem vdW i TCBT modelima u temperaturnom intervalu, i u slučaju kada su parametri tretirani kao temperaturno nezavisni. Kada se u modele vdW i TCBT ugrade temperaturno zavisni parametri, postiže se neznatno poboljšanje (tabela P15), tako da se ne ukazuje potreba za uvođenjem temperaturno zavisnih binarnih interakcionih parametara u modele. Na slici 5.6 su prikazani eksperimentalni  $V^E$  podaci sistema dimetilftalat + 2-butanon na temperaturama 303.15 i 323.15 K, kao i krive vdW1-2 modela na svakoj izotermi posebno, kao i pri fitovanju u temperaturnom intervalu bez temperaturno zavisnih parametara.

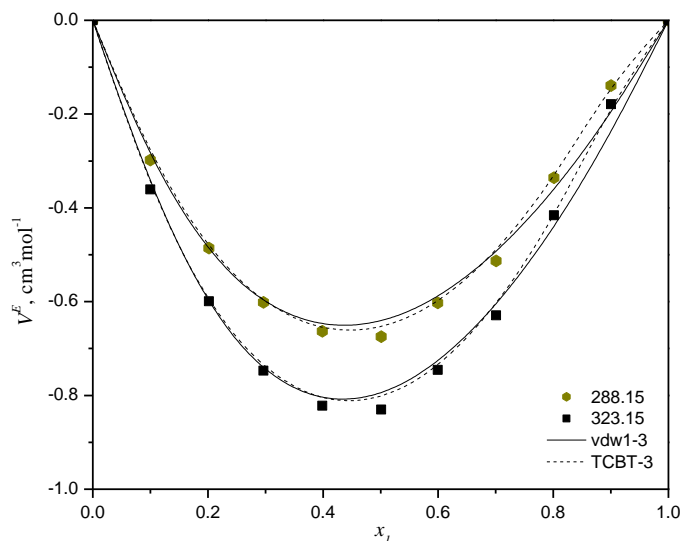


**Slika 5.6** Korelisanje  $V^E$  podataka binarnog sistema dimetilftalat (1) + 2-butanon (2). Simboli označavaju eksperimentalne tačke, puna linija je vdW1-2 model na temperaturama 303.15 i 323.15K, a isprekidana linija je vdW1-2 model pri fitovanju u temperaturnom intervalu bez temperaturno zavisnih parametara

## 5.1.1.5. SISTEM DIMETILFTALAT + TETRAHIDROFURAN

Rezultati korelisanja i vrednosti optimizovanih temperaturno nezavisnih parametara sistema dimetilftalat + tetrahidrofuran dati su u tabeli P14, dok su u tabeli P15 dati rezultati dobijeni za temperaturni interval pomoću modela u koje je ugrađena linearna temperaturna zavisnost parametara.

Ovaj sistem karakterišu negativne  $V^E$  vrednosti i simetrične  $V^E - x_1$  krive. Naime, pri korelisanju na svakoj izotermi troparametarski TCBT-3 model je skoro u svim slučajevima dao srednju procentualnu grešku manju od 1%, što je jako dobar rezultat. Na slici 5.7 se vidi da krive dobijene TCBT-3 modelom, odlično prate trend eksperimentalnih tačaka. Ni dvoparametarski TCBT-2 model ne zaostaje mnogo u kvalitetu dobijenih rezultata. Kvalitet rezultata vdW1-3 modela je malo lošiji od rezultata dobijenih TCBT-2 modelom, pri čemu je greška ispod 3%. Kao najlošije se pokazalo dvoparametarsko vdW1-2 pravilo mešanja (tabela P14). Pri generisanju jedinstvenog seta temperaturno nezavisnih parametara za ceo temperaturni interval, dobijeni su lošiji rezultati nego kada je korelisanje vršeno za svaku izotermu posebno, što je i očekivano. Kada se u modele ugrade temperaturno zavisni parametri, ne postiže se značajno poboljšanje rezultata pri korelisanju  $V^E$  podataka ovog sistema u temperaturnom intervalu (tabela P15).



**Slika 5.7** Korelisanje  $V^E$  podataka binarnog sistema dimetilftalat (1) + tetrahidrofuran (2) na temperaturama 288.15 i 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke, puna linija je vdW1-3 model, a isprekidana linija je TCBT-3 model

5.1.2. Izračunavanje  $n_D$  i  $V^E$  iz indeksa refrakcije čistih komponenti

U ovom radu izvršeno je izračunavanje indeksa refrakcije  $n_D$  četiri binarne smeše (dimetilftalat + 1-butanol, + 2-butanol, + 2-butanon i + tetrahidrofuran) iz indeksa refrakcije čistih komponenata pomoću modela pravila mešanja. Zajedničko za sve modele pravila mešanja je to što su svi bazirani na elektromagnetnoj teoriji svetlosti, koja podrazumeva da su molekuli tečnih smeša dipoli, ili skup dipola indukovanih od strane spoljašnjeg magnetnog polja. Ukoliko ovi uslovi nisu zadovoljeni, ne može se primeniti ovaj pristup [14]. U ovom radu su primenjeni sledeći modeli:

**Lorentz-Lorenz (L-L) [12,13]**

$$\frac{n_D^2 - 1}{n_D^2 + 2} = \sum_{i=1}^N \left[ \phi_i \left( \frac{n_{Di}^2 - 1}{n_{Di}^2 + 2} \right) \right] \quad (5.14)$$

**Dale-Gladstone (D-G) [14]**

$$n_D - 1 = \sum_{i=1}^N \left[ \phi_i (n_{Di} - 1) \right] \quad (5.15)$$

**Eykman (EyK) [15]**

$$\frac{n_D^2 - 1}{n_D + 0.4} = \sum_{i=1}^N \left[ \phi_i \left( \frac{n_{Di}^2 - 1}{n_{Di} + 0.4} \right) \right] \quad (5.16)$$

**Arago-Biot (A-B) [14]**

$$n_D = \sum_{i=1}^N \left[ \phi_i (n_{Di}) \right] \quad (5.17)$$

**Newton (New) [16]**

$$n_D^2 - 1 = \sum_{i=1}^N \left[ \phi_i (n_{Di}^2 - 1) \right] \quad (5.18)$$

**Oster (Ost) [17]**

$$\frac{(n_D^2 - 1) \cdot (2n_D^2 + 1)}{n_D^2} = \sum_{i=1}^N \left[ \phi_i \left( \frac{(n_{Di}^2 - 1) \cdot (2n_{Di}^2 + 1)}{n_{Di}^2} \right) \right] \quad (5.19)$$

U jednačinama (5.14)-(5.20),  $\phi_i$  predstavlja zapreminski udeo komponente u smeši, koji se računa prema sledećoj jednačini:

$$\phi_i = \frac{x_i V_i}{\sum_{i=1}^N x_i V_i} \quad (5.20)$$

gde su  $V_i$  i  $n_{Di}$  molarna zapremina i indeks refrakcije komponente  $i$ , a  $x_i$  njen molski udeo.

Od gore navedenih jednačina, najpoznatija je Lorentz-Lorenz (jednačina 5.14), prvi put izvedena 1880 godine, nezavisno od strane dva autora H. A. Lorentza i L. Lorenza [12,13].

Jednačine D-G i A-B su veoma slične, i nađeno je da slede iz L-L jednačine ukoliko su indeksi refrakcije komponenata smeše približno isti, tj  $n_{D1} \approx n_{D2}$ .

Predviđanje dopunske molarne zapremine  $V^E$  iz indeksa refrakcije čistih komponenti izvršeno je pomoću tri tipa jednačina [45]:

**Tip I.** Ova jednačina, kojom se povezuju  $V^E$  i  $n_D$  podaci smeše, bazirana je na upotrebi funkcije masenog udela za odnos  $f(n_D)/\rho$ :

$$\frac{f(n_D)}{\rho} = \sum_{i=1}^2 w_i \frac{f(n_{Di})}{\rho_i} \quad (5.21)$$

kao i definicione jednačine dopunske molarne zapremine binarnih i ternarnih smeša (jednačine (2.4) i (2.8)). Tip I jednačina ima sledeći oblik:

$$V^E = \sum_{i=1}^2 \left[ \left( f(n_{Di}) - f(n_D) \right) \left( \frac{x_i V_i}{f(n_D)} \right) \right] \quad (5.22)$$

gde su  $w_i$ ,  $\rho_i$ ,  $n_{Di}$  i  $x_i$  maseni udeo, gustina, indeks refrakcije i molski udeo komponente  $i$ , dok  $f(n_{Di})$  i  $f(n_D)$  predstavljaju funkcije indeksa refrakcije čiste komponente  $i$  i smeše, a  $V_i$  je molarna zapremina komponente  $i$ . Najčešće korišćene jednačine za  $f(n_D)$  su: Lorentz-Lorenz (L-L), Dale-Gladstone (D-G), Eykman (Eyk), Arago- Biot (A-B), Newton (New) i Oster (Ost), za koje se funkcija  $f(n_D)$  izračunava iz sledećih jednačina:

$(n_D^2 - 1)/(n_D^2 + 2)$ ,  $n_D - 1$ ,  $(n_D^2 - 1)/(n_D + 0.4)$ ,  $n_D$ ,  $n_D^2 - 1$  i  $(n_D^2 - 1)(2n_D^2 + 1)/n_D^2$ , respektivno.

**Tip II.** Ako se u jednačini (5.22) funkcija  $V^E$  od  $n_D$  razvije u prvi red za  $n_{D\phi} = n_{D1}\phi_1 + n_{D2}\phi_2$ , dobija se jednačina [46]:

$$V^E = \sum_{i=1}^2 x_i V_i \left( \frac{f(n_{Di})}{f(n_{D\phi})} - 1 \right) - \Delta_\phi n_D \left[ \frac{f'(n_{D\phi})}{f^2(n_{D\phi})} \sum_{i=1}^2 x_i V_i f(n_{Di}) \right] \quad (5.23)$$

gde je  $f(n_{D\phi})$  funkcija indeksa refrakcije smeše, kao u jednačini (5.22), dok  $f'(n_{D\phi})$  predstavlja prvi izvod  $f(n_{D\phi})$ .  $\Delta_{\phi}n_D$  je odstupanje indeksa refrakcije smeše od indeksa refrakcije idealne smeše:

$$\Delta_{\phi}n_D = n_D - (n_{D1}\phi_1 + n_{D2}\phi_2) \quad (5.24)$$

gde su  $n_{D1}$  i  $n_{D2}$  indeksi refrakcije čistih supstanci, dok su  $\phi_1$  i  $\phi_2$  zapreminski udeli komponenti 1 i 2 u smeši.

**Tip III.** Specijalan slučaj jednačine (5.24) za uslov  $n_{D1}=n_{D2}$  vodi ka relaciji sledećeg oblika [46]:

$$V^E = -\Delta_{\phi}n_D \left[ \frac{f'(n_{D1})}{f(n_{D1})} \sum_{i=1}^2 x_i V_i \right] \quad (5.25)$$

gde su oznake iste kao i u prethodnim jednačinama.

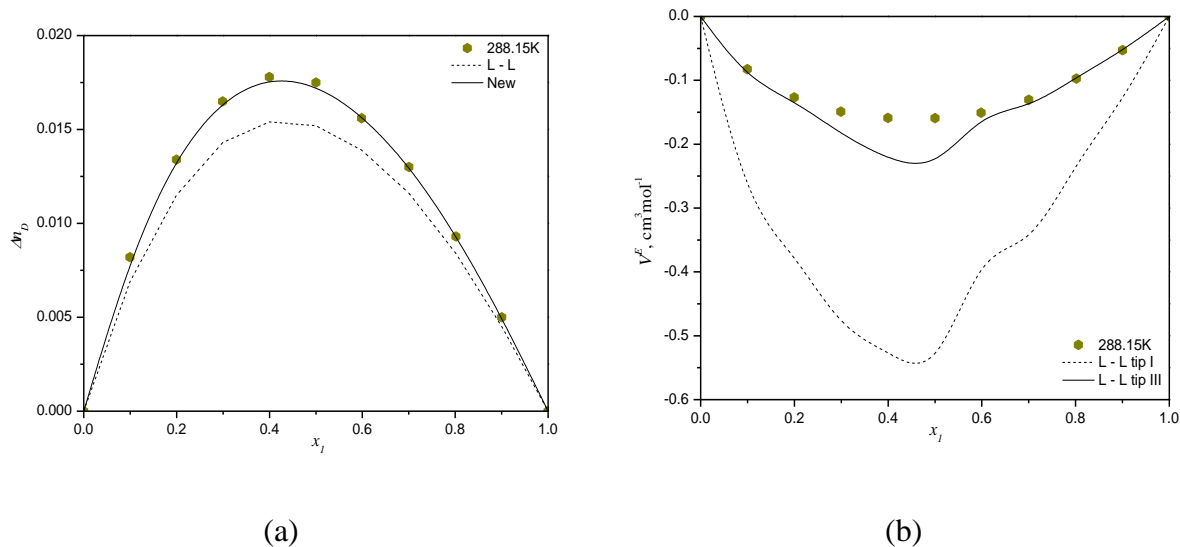
Kvalitet dobijenih rezultata izračunavanja  $n_D$  je ocenjen kroz devijaciju  $\sigma$ , dok je za predviđanje  $V^E$  ispitivanih smeša kvalitet ocenjen kroz  $\sigma$  i PD(%), definisanih jednačinama (2.10) i (2.11). Rezultati ispitivanih binarnih sistema dati su u tabeli P16.



## 5.1.2.1. SISTEMI DIMETILFTALAT + ALKOHOL

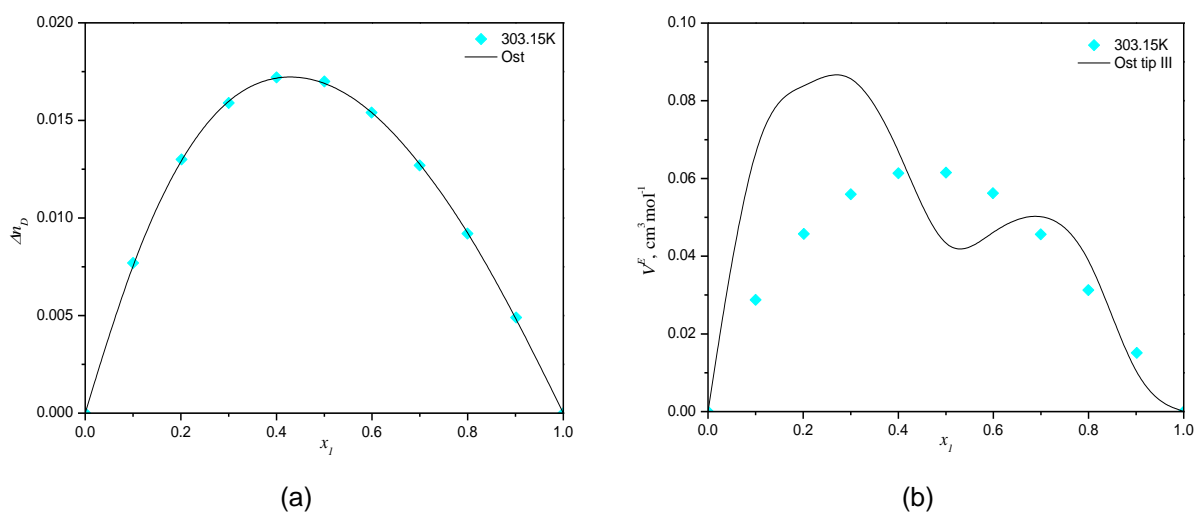
Kvalitet dobijenih a linije vrednosti dobijene RK polinom rezultata izračunavanja  $n_D$  je ocenjen kroz devijaciju  $\sigma$ , dok je za predskazivanja  $V^E$  ispitivanih smeša kvalitet ocenjen kroz  $\sigma$  i PD(%), definisanih jednačinama (2.10) i (2.11). Rezultati ispitivanih binarnih sistema dimetilftalat + alkohol dati su u tabeli P16.

Iz tabele P16 uočava se da su greške dobijene izračunavanjem indeksa refrakcije smeše dimetilftalat + 1-butanol, pomoću modela pravila mešanja, veoma velike za sve analizirane slučajeve, osim u slučaju pomoću New pravila mešanja. Ovo se zaključuje poređenjem odgovarajućih devijacija dobijenih pomoću pravila mešanja, sa jedne strane i RK polinoma, sa druge strane, gde su ove prve i nekoliko desetina puta veće. To je takođe potvrđeno poređenjem eksperimentalnih tačaka sa krivama dobijenim izračunavanjem indeksa refrakcije na temperaturi 288.15 K pomoću L-L i New pravila mešanja (slika 5.8a). U slučaju predviđanja  $V^E$  podataka iz indeksa refrakcije, kao najlošije se pokazala Tip I jednačina sa L-L pravilom mešanja, dok Tip III jednačina sa L-L pravilom mešanja, za sve temperature, daje najbolje rezultate (slika 5.8b)



**Slika 5.8** Zavisnost: (a)  $\Delta n_D - x_1$  i (b)  $V^E - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 1-butanol (2) na temperaturi 288.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke. Puna linija je New model, a isprekidana je L-L model (a) i puna linija Tip III- L-L model, a isprekidana je Tip I- L-L model (b)

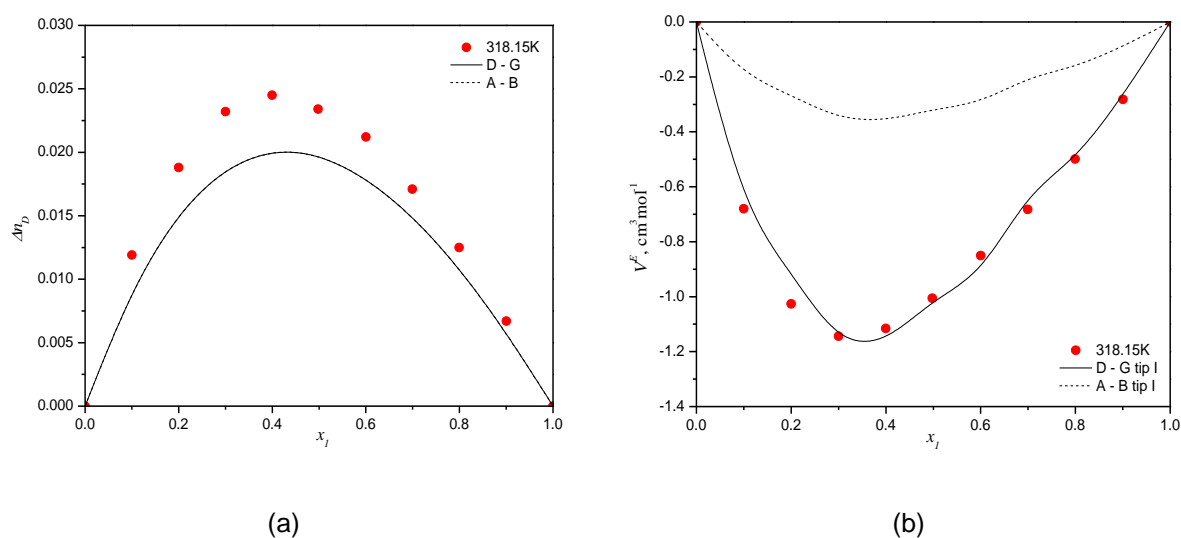
U slučaju sistema dimetilftalat sa 2-butanolom, greške dobijene izračunavanjem indeksa refrakcije pomoću svih modela pravila mešanja su veće nego u slučaju sistema sa 1-butanolom (tabela P16). Najmanja greška je dobijena izračunavanjem indeksa refrakcije na temperaturi 303.15K pomoću Ost pravila mešanja (slika 5.9a), dok je u slučaju predviđanja  $V^E$  podataka iz indeksa refrakcije najmanja greška dobijena pomoću Tip I jednačine sa Ost pravilom mešanja na temperaturi 303.15K, koja je inače velika i iznosi 35% (slika 5.9b).



**Slika 5.9** Zavisnost: (a)  $\Delta n_D$  -  $x_1$  i (b)  $V^E$  -  $x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 2-butanol (2) na temperaturi 303.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke. Linije označavaju Ost model (a) i Tip III- Ost model (b)

## 5.1.2.2. SISTEM DIMETILFTALAT + 2-BUTANON

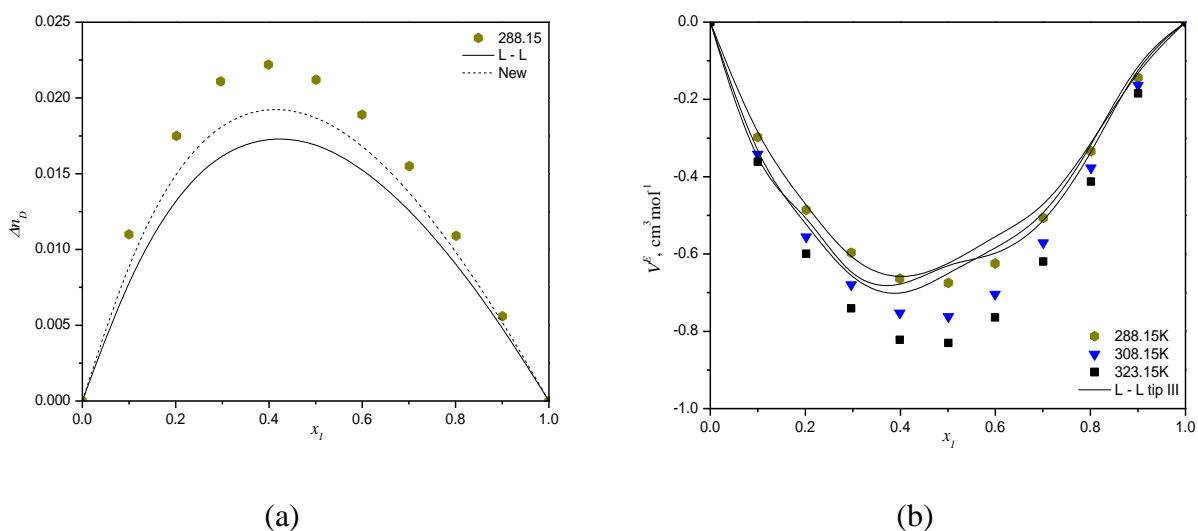
Kod sistema dimetilftalat + 2-butanon (table P16) ni jedno od primenjenih pravila mešanja ne uspeva da predvidi odstupanje indeksa refrakcije smeše od idealne smeše, kao što je na slici 5.10a prikazano za D-G i A-B pravila mešanja. Sa druge strane, pri predviđanju  $V^E$  vrednosti model Tip I jednačine sa D-G pravilom mešanja veoma dobro prati eksperimentalne tačke, koji je dao najmanju grešku, ispod 3.5%, na temperaturi 318.15K. Najlošije je, A-B pravilo mešanja (slika 5.10b).



**Slika 5.10** Zavisnost: (a)  $\Delta n_D - x_1$  i (b)  $V^E - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 2-butanon (2) na temperaturi 318.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke, puna linija označava Tip I jednačine sa D-G modelom, a isprekidana je Tip I sa A-B modelom

## 5.1.2.3. SISTEM DIMETILFTALAT + TETRAHIDROFURAN

Kod sistema dimetilftalat + tetrahidrofur, nijedno pravilo mešanja nije uspešno u izračunavanju indeksa refrakcije smeše na svim temperaturama. Na slici 5.11a se vidi da krive dobijene New modelom, kao najuspešnijim, ne prate dobro trend eksperimentalnih tačaka, kao ni kriva L-L modela, koji se pokazao kao najbolji. Za razliku od prethodnih sistema, kod ovog sistema primenjena jednačina za  $V^E$  izračunavanje ima veliki uticaj i ovde je Tip III jednačina superiorna u odnosu na Tip I i II za niže izoterme za L-L, D-G i Eyk modele. New model je dao najmanju grešku za Tip I, a Ost model za Tip II jednačine. Na slici 5.9b dato je poređenje eksperimentalnih i predviđenih  $V^E$  vrednosti pomoću Tip III – L-L modela na temperaturama 288.15K, 308.15K i 323.15K, gde se uočava koliko je primenjeni model uspešniji na temperaturi 288.15K nego na 323.15 K.



**Slika 5.11** Zavisnost: (a)  $\Delta n_D - x_1$  na temperaturi 288.15K i (b)  $V^E - x_1$  na temperaturama 288.15, 308.15 i 323.15K sistema dimetilftalat (1) + tetrahidrofur (2). Simboli označavaju eksperimentalne tačke, puna linija označava L-L model, a isprekidana je New model

### 5.1.3. Predviđanje i korelisanje viskoznosti $\eta$

U ovom radu su za određivanje vrednosti viskoznosti  $\eta$  binarnih smeša dimetilftalata sa alkoholima, 2-butanonom i tetrahidrofuranom korišćeni prediktivni model, model doprinosa grupa UNIFAC-VISCO [18, 19] i korelativni modeli: jednoparametarski Teja-Rice [18,20,21], dvoparametarski Three-body McAllister [22] i troparametarski Four-body McAllister [23]. Kvalitet rezultata dobijenih svakom od pomenutih metoda je utvrđen poređenjem sa eksperimentalno određenim vrednostima.

Model doprinosa grupa posmatra tečnost kao rastvor funkcionalnih grupa od kojih su sastavljeni molekuli komponenata rastvora. Smatra se da je neka fizička veličina rastvora zbir doprinosa funkcionalnih grupa koje ga čine. Doprimos jedne grupe je nezavisan od doprinosa druge grupe, odnosno zanemaruje se mesto na kojem se data grupa nalazi u molekulu.

Prednost ovog modela je što u rastvorima koji se koriste u industriji postoji znatno manji broj funkcionalnih grupa nego komponenata rastvora. Tačnost korelisanja i predviđanja raste sa smanjenjem broja grupa na koje se molekul deli, a najveća je kada se ceo molekul posmatra kao jedna funkcionalna grupa. Pri podeli molekula na funkcionalne grupe, potrebno je naći balans između zahteva za tačnošću modela i zahteva za postojanjem relativno malog broja grupa.

Model doprinosa grupa prvo je razvijen za predviđanje koeficijenata aktivnosti tečne faze rastvora neelektrolita ravnoteže para-tečnost, a zatim je proširen i na izračunavanje različitih termodinamičkih osobina, između ostalih i na izračunavanje viskoznosti. Najpoznatiji model doprinosa grupa koji je razvijeni za predviđanje vrednosti viskoznosti je UNIFAC-VISCO [18, 19]. Model doprinosa grupa sadrži binarne interakcije parametre grupa, koji se određuju korelisanjem odgovarajućih eksperimentalnih podataka binarnih sistema koji sadrže te funkcionalne grupe. Jednom određeni, ovi interakcioni parametri mogu da služe za predviđanje osobina svih rastvora koji sadrže date grupe, a za koje ne postoje eksperimentalni podaci. Ovako je znatno smanjen broj eksperimentalnih podataka neophodnih za termodinamička izračunavanja, jer je broj funkcionalnih grupa prisutnih u rastvorima znatno manji od broja mogućih komponenata rastvora. Takođe se na osnovu relativno malog broja grupa (50-100), može termodinamički obrađivati više hiljada najrazličitijih rastvora.

U tabeli 5.1 su date identifikovane funkcionalne grupe u molekulima komponenata izabranih binarnih sistema.

**Tabela 5.1** Identifikacija grupa u molekulima komponenata izabranih binarnih sistema

molekul	UNIFAC-VISCO	
	grupa	Broj grupa
Dimetilftalat	CH <sub>3</sub>	2
	ACH <sup>a</sup>	4
	COO	1
	AC <sup>b</sup>	2
1-Butanol / 2-Butanol	CH <sub>3</sub>	1
	CH <sub>2</sub>	3
	OH	1
2-Butanon	CH <sub>3</sub>	1
	CH <sub>2</sub>	1
	CH <sub>3</sub> CO	1
Tetrahidrofuran	THF	1

<sup>a</sup>ACH - CH grupa u aromatičnom jedinjenju

<sup>b</sup>AC - C atom u aromatičnom jedinjenju

Chevalier, Petrino i Gaston-Bonhomme [18,19] su modifikovali UNIFAC model i nazvali su ga UNIFAC-VISCO. UNIFAC-VISCO model služi za izračunavanje viskoznosti, iz sledeće jednačine:

$$\ln \eta_m = \sum_i x_i \ln(\eta_i V_i) - \ln V_m + \frac{\Delta^* g^{EC}}{RT} + \frac{\Delta^* g^{ER}}{RT} \quad (5.26)$$

gde je  $\eta_i$  viskoznost čiste komponente  $i$ ,  $V_i$  molarna zapremina komponente  $i$  a  $V_m$  molarna zapremina smeše.

U modelu UNIFAC-VISCO dopunska molarna energija aktivacije  $\Delta^* g^E$  se računa kao suma dva dela. Prvi je kombinatorijalni deo  $\Delta^* g^{EC}$ , koji ukazuje na razlike u veličini i obliku molekula u smeši. Drugi deo je rezidualni  $\Delta^* g^{ER}$  u kome su prikazane energetske interakcije između strukturalnih grupa molekula u smeši.

$$\Delta^* g^E = \Delta^* g^{EC} + \Delta^* g^{ER} \quad (5.27)$$

$$\Delta^* g^E = RT \sum_i x_i \ln \gamma_i^* \quad (5.28)$$

gde je  $T$  temperatura,  $\gamma_i^*$  koeficijent aktivnosti komponente  $i$ ,  $R$  gasna konstanta, a  $x_i$  molski udeo komponente. Koeficijent aktivnosti  $\gamma_i^*$  se izračunava kao suma kombinatorijalnog dela  $\gamma_i^{*C}$  i rezidualnog dela  $\gamma_i^{*R}$ .

Kombinatorijalni deo je isti kao i za UNIFAC model i dat je sledećom jednačinom:

$$\frac{\Delta^* g^{EC}}{RT} = \sum_i x_i \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} \sum_i q_i x_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} \quad (5.29)$$

gde je  $z$  koordinacioni broj koji je jednak 10,  $\theta_i$  i  $\phi_i$  su molekulski površinski udeo i molekulski segmentni udeo, respektivno, koji se definišu na sledeći način:

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \quad (5.30)$$

$$\phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (5.31)$$

gde je  $q_i$  van der Waals'ov parametar površine čistih komponenti i  $r_i$  van der Waals'ov parametar zapremine čistih komponenti.

Ako je  $n_k^{(i)}$  broj grupa vrste k u molekulu i onda se  $q_i$  i  $r_i$  računaju kao:

$$q_i = \sum_k n_k^{(i)} Q_k \quad (5.32)$$

$$r_i = \sum_k n_k^{(i)} R_k \quad (5.33)$$

gde je  $Q_k$  konstanta koja reprezentuje površinu grupe, a  $R_k$  konstanta koja reprezentuje veličinu grupe. Vrednosti za  $Q_k$  i  $R_k$  [18] funkcionalnih grupa u molekulima komponenata izabranih binarnih sistema su date u tabeli 5.2.

**Tabela 5.2** Vrednosti  $Q_k$  i  $R_k$  za funkcionalne grupe u molekulima komponenata u izabranim sistemima

Grupa k	$R_k$	$Q_k$
CH <sub>3</sub>	0.9011	0.848
ACH	0.5313	0.400
COO	1.0020	0.880
AC	0.3652	0.120
CH <sub>2</sub>	0.6744	0.540
OH	1.0000	1.200
CH <sub>3</sub> CO	1.6724	1.488
THF	0.9183	1.100

<sup>a</sup>ACH - CH grupa u aromatičnom jedinjenju

<sup>b</sup>AC - C atom u aromatičnom jedinjenju

Rezidualni deo se računa iz sledećih jednačina:

$$\frac{\Delta^* g^{ER}}{RT} = -\sum x_i \ln \gamma_i^{*R} \quad (5.34)$$

$$\ln \gamma_i^{*R} = \sum_k n_k^{(i)} [\ln \gamma_k^* - \ln \gamma_k^{*(i)}] \quad (5.35)$$

$$\ln \gamma_k^* = Q_k [1 - \ln(\sum_m \theta_m \Psi_{mk}^*) - \sum_m \frac{\theta_m \Psi_{km}^*}{\sum_n \theta_n \Psi_{nm}^*}] \quad (5.36)$$

$$\theta_m = \frac{Q_m X_m}{\sum_k X_k Q_k} \quad (5.37)$$

gde je  $X_m$  molski udeo grupa u smeši,  $\theta_m$  površinski udeo grupa u smeši,  $\gamma_k^*$  koeficijent aktivnosti grupe k u smeši svih grupa aktuelne smeše,  $\gamma_k^{*(i)}$  koeficijent aktivnosti grupe k u smeši grupa koja je formirana samo od grupa čiste komponente i.

Osim znaka minus u jednačini (5.34) sve ostalo je identično kao kod jednačina za izračunavanje rezidualnog dela kod UNIFAC modela. Razlike između UNIFAC i UNIFAC-VISCO modela su u tome što se grupe biraju drugačije i što se parametri interakcije drugačije računaju.

Parametri interakcije kod UNIFAC-VISCO modela se računaju iz sledeće jednačine:

$$\Psi_{nm}^* = \exp\left(-\frac{\alpha_{nm}}{298}\right) \quad (5.38)$$

Vrednosti za  $\alpha_{nm}$  [18] funkcionalnih grupa u molekulima komponenata izabranih binarnih sistema su dati u tabeli 5.3, pri čemu su označene sve funkcionalne grupe za koje  $\alpha_{nm}$  vrednosti nisu poznate u UNIFAC-VISCO modelu, već su preuzete iz UNIFAC modela.

**Tabela 5.3** Vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  za funkcionalne grupe u molekulima komponenata izabranih binarnih sistema

	$\alpha_{nm}$							
	CH <sub>3</sub>	ACH	COO	AC*	CH <sub>2</sub>	OH	CH <sub>3</sub> CO*	THF*
CH <sub>3</sub>	0	-119.5	-172.4	61.13	-709.5	594.4	476.4	251.5
ACH	237.2	0	-49.85	0	-623.7	419.3	25.77	32.14
COO	-44.25	-36.17	0	317.6	541.6	186.8	123.4	-247.8
AC*	-11.12	0	103.50	0	-11.12	636.10	25.77	32.14
CH <sub>2</sub>	66.53	406.7	1172.0	61.13	0	498.6	476.4	0
OH	1209.0	197.7	68.35	89.60	-634.5	0		
CH <sub>3</sub> CO*	26.76	140.1	-18.80	140.1	26.76		0	
THF*	83.36	52.13	417.0	52.13	83.36			0

\* Funkcionalne grupe za koje su  $\alpha_{nm}$  vrednosti preuzete iz UNIFAC modela

Korelativni modeli za izračunavanje viskoznosti tečnih smeša sadrže interakcione parametre. Interakcioni parametri se računaju optimizacijom iz eksperimentalnih podataka za smeše.

Po modelu, koju su predložili Teja i Rice [18,20,21], viskoznost tečne smeše se računa iz sledeće jednačine:

$$\ln(\eta_m \varepsilon_m) = \ln(\eta\varepsilon)^{(R1)} + [\ln(\eta\varepsilon)^{(R2)} - \ln(\eta\varepsilon)^{(R1)}] \frac{\omega_m - \omega^{(R1)}}{\omega^{(R2)} - \omega^{(R1)}} \quad (5.39)$$

gde se superskripti (R1) i (R2) odnose na dva referentna fluida,  $\eta$  je dinamička viskoznost,  $\omega$  faktor acentričnosti, a  $\varepsilon$  je parametar koji se definiše na sledeći način:

$$\varepsilon = \frac{V_c^{2/3}}{(T_c M)^{1/2}} \quad (5.40)$$

Parametar  $\varepsilon_m$  se definiše jednačinom:

$$\varepsilon_m = \frac{V_{cm}^{2/3}}{(T_{cm} M_m)^{1/2}} \quad (5.41)$$

gde  $V_{cm}$ ,  $T_{cm}$ ,  $M_m$  predstavljaju kritičnu zapreminu smeše, kritičnu temperaturu smeše i molarnu masu smeše, respektivno.

Autori su predložili sledeća pravila za izračunavanje parametara smeše:



$$V_{cm} = \sum_i \sum_j x_i x_j V_{cij} \quad (5.42)$$

$$T_{cm} = \frac{\sum_i \sum_j x_i x_j T_{cij} V_{cij}}{V_{cm}} \quad (5.43)$$

$$M_m = \sum_i x_i M_i \quad (5.44)$$

$$\omega_m = \sum_i x_i \omega_i \quad (5.45)$$

$$V_{cij} = \frac{(V_{ci}^{1/3} + V_{cj}^{1/3})^3}{8} \quad (5.46)$$

$$T_{cij} V_{cij} = \Psi_{ij} (T_{ci} T_{cj} V_{ci} V_{cj})^{1/2} \quad (5.47)$$

gde je  $\psi_{ij}$  parametar interakcije koji se dobija optimizacijom iz eksperimentalnih podataka i određuje se za svaku smešu posebno.

U koliko se, kod binarne smeše, za referentni fluid (R1) odabere prva komponenta, a za referentni fluid (R2) druga komponenta smeše onda se viskoznost binarnih smeša određuje iz jednačine:

$$\ln(\eta_m \varepsilon_m) = x_1 \ln(\eta \varepsilon)_1 + x_2 \ln(\eta \varepsilon)_2 \quad (5.48)$$

McAllister modeli [22,23] za izračunavanje viskoznosti tečnih smeša su korelativni modeli. McAllister modeli su razvijeni i mogu se primenjivati isključivo za izračunavanje viskoznosti binarnih tečnih smeša.

Three-body McAllister (3McAllister) [22] je dvoparametarski model. Prema ovom modelu viskoznost binarne tečne smeše se računa iz jednačine:

$$\begin{aligned} \ln \nu &= x_1^3 \ln \nu_1 + 3x_1^2 x_2 \ln \nu_{12} + 3x_1 x_2^2 \ln \nu_{21} + x_2^3 \ln \nu_2 \\ &- \ln(x_1 + x_2 M_2 / M_1) + 3x_1^2 x_2 \ln[(2 + M_2 / M_1) / 3] \\ &+ 3x_1 x_2^2 \ln[(1 + 2M_2 / M_1) / 3] + x_2^3 \ln(M_2 / M_1) \end{aligned} \quad (5.49)$$

gde su  $\nu_{12}$  i  $\nu_{21}$  binarni parametri modela koji se dobijaju optimizacijom iz eksperimentalnih podataka.

Four-body McAllister (4McAllister) [23] je troparametarski model. Viskoznost binarne tečne smeše se po ovom modelu računa iz jednačine:

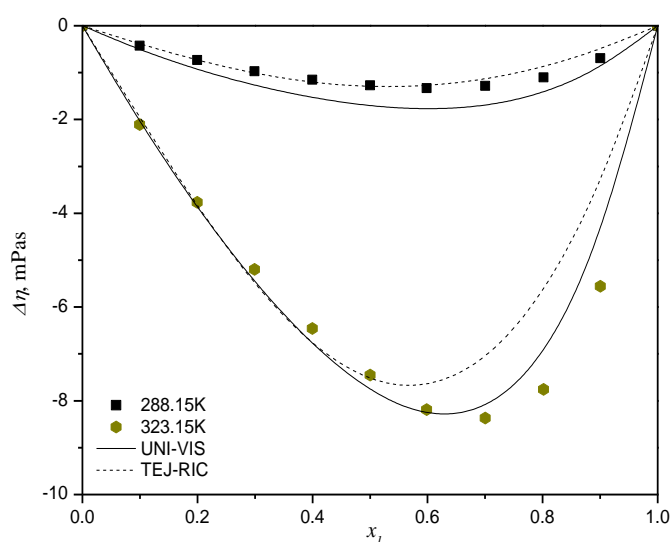
$$\begin{aligned} \ln \nu_m &= x_1^4 \ln \nu_1 + 4x_1^3 x_2 \ln \nu_{1112} + 6x_1^2 x_2^2 \ln \nu_{1122} \\ &+ 4x_1 x_2^3 \ln \nu_{2221} + x_2^4 \ln \nu_2 - \ln[x_1 + x_2 M_2 / M_1] \\ &+ 4x_1^3 x_2 \ln[(3 + M_2 / M_1) / 4] + 6x_1^2 x_2^2 \ln[(1 + M_2 / M_1) / 2] \\ &+ 4x_1 x_2^3 \ln[(1 + 3M_2 / M_1) / 4] + x_2^4 \ln[M_2 / M_1] \end{aligned} \quad (5.50)$$

gde su  $\nu_{1112}$ ,  $\nu_{1122}$  i  $\nu_{2221}$  binarni parametri modela koji se dobijaju optimizacijom iz eksperimentalnih podataka.

## 5.1.3.1. SISTEMI DIMETILFTALAT + ALKOHOL

Kvalitet dobijenih rezultata predviđanja i korelisanja viskoznosti  $\eta$  je ocenjen kroz  $\sigma$  i PD(%), definisanih jednačinama (2.10) i (2.11). Rezultati ispitivanih binarnih sistema dimetilftalat + alkohol dati su u tabeli P17.

Za sistem dimetilftalat + 1-butanol prediktivni model UNIFAC-VISCO daje loše vrednosti predviđanja viskoznosti, pri čemu greška raste sa povećanjem temperature. Korelativni modeli Teja-Rice, 3McAllister i 4McAllister daju bolje rezultate. Kod ovih modela kvalitet korelisanja se povećava sa porastom temperature sistema, sem u slučaju 4McAllister modela koji daje ujednačene greške od oko 0.2% na svim temperaturama.

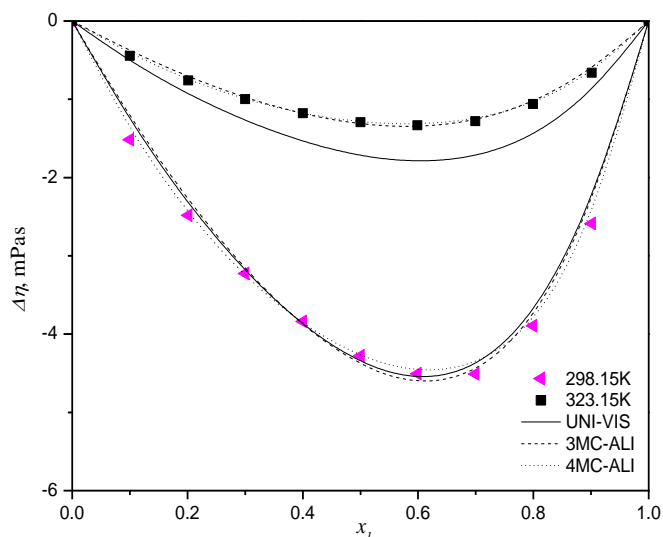


**Slika 5.12** Zavisnost:  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 1-butanol (2) na temperaturama 288.15K i 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke, puna linija je UNIFAC-VISCO model, a isprekidana linija je Teja-Rice model

Na slici 5.12 su prikazane eksperimentalne vrednosti  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat + 1-butanol na temperaturama 288.15K i 323.15K, kao i krive UNIFAC-VISCO i Teja-Rice modela. Uočava se da Teja-Rice daje bolje rezultate na višoj temperaturi smeše na kojoj UNIFAC-VISCO model daje lošije rezultate nego na temperaturi 288.15 K.

Prediktivni model UNIFAC-VISCO, u slučaju smeše dimetilftalat + 2-butanol daje veliko odstupanje od eksperimentalnih vrednosti viskoznosti. Sa povećanjem temperature greška opada, tako da na temperaturi 298.15K iznosi 1.12%, a 7.43% na temperaturi 323.15K (tabela P17).

Korelativni jednoparametarski Teja-Rice model daje greške od 5.33% do 1.54%, pri čemu kvalitet korelisanja raste sa povećanjem temperature. Dvoparametrski 3McAllister i troparametarski 4McAllister modeli daju dobre vrednosti viskoznosti za ovaj binarni sistem, a kvalitet korelisanja raste sa povećanjem temperature.



**Slika 5.13** Zavisnost:  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 2-butanol (2) na temperaturama 298.15K i 323.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke, puna linija je UNIFAC-VISCO, a isprekidane linije su 3McAllister i 4McAllister modeli

Na slici 5.13 su prikazane eksperimentalne vrednosti  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat + 2-butanol na temperaturama 298.15K i 323.15K, kao i krive UNIFAC-VISCO, 3McAllister i 4McAllister modela. Na nižoj temperaturi smeše UNIFAC-VISCO model daje manju grešku od 3McAllister modela, dok je pri višoj temperaturi situacija obrnuta. Najbolji kvalitet korelisanja se dobija pomoću 4McAllister, koji daje najveću grešku od 0.44% na temperaturi 298.15K, a najmanju od 0.23% na temperaturi 323.15K.

5.1.3.1.1. Određivanje novih interakcionih parametara  $\alpha_{nm}$ 

Kod sistema dimetilftalata sa alkoholima prediktivni model UNIFAC-VISCO daje loše rezultate predviđanja viskoznosti, pri korišćenju interakcionih parametara  $\alpha_{nm}$  međusobnih interakcija grupe AC sa grupama CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, COO i OH (koje su preuzete iz UNIFAC modela [18]). Radi dobijanja boljih rezultata predviđanja vrednosti viskoznosti binarnih smeša dimetilftalata sa alkoholima bilo je potrebno odrediti nove vrednosti interakcionih parametara.

Novi parametri se mogu dobiti optimizacijom iz eksperimentalno izmerenih vrednosti viskoznosti za ove smeše korišćenjem sledeće jednačine za minimizaciju funkcije cilja OF:

$$OF = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|\eta_{i,eksp} - \eta_{i,calc}|}{\eta_{i,eksp}} \quad (5.51)$$

Optimizacija je vršena funkcijom cilja OF uz pomoću programa napisanog u FORTRAN programskom jeziku, tako da vrednost jednačine (5.51) bude minimalna. Za eksperimentalne vrednosti viskoznosti dimetilftalat + 1-butanol za interval temperatura od 288.15 K do 323.15 K sa korakom od 5 K, dobijene su nove vrednosti interakcionih parametara (tabela 5.4).

**Tabela 5.4** Vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  dobijeni optimizacijom, uz korišćenje Chevalierovih parametara

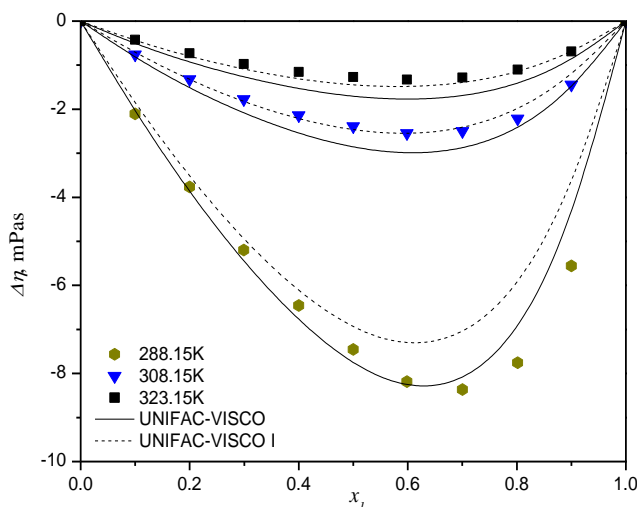
	$\alpha_{nm}$					
	CH <sub>3</sub>	ACH	COO	AC <sup>*1</sup>	CH <sub>2</sub>	OH
CH <sub>3</sub>	0	-119.5	-172.4	-455.9	-709.5	594.4
ACH	237.2	0	-49.85	0	-623.7	419.3
COO	-44.25	-36.17	0	156.89	541.6	186.8
AC <sup>*1</sup>	-480.4	0	5108.1	0	167.3	-379.1
CH <sub>2</sub>	66.53	406.7	1172.0	26.408	0	498.6
OH	1209.0	197.7	68.35	91.93	-634.5	0

\*1Nove vrednosti interakcionih parametara dobijeni optimizacijom

U tabeli 5.4 prikazane su vrednosti  $\alpha_{nm}$  interakcionih parametara, pri čemu su zadržani interakcioni parametri po Chevalieru za interakcije grupa CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, ACH, COO i OH, dok su određene nove vrednosti interakcionih parametara međusobnih interakcija grupe AC sa grupama CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, COO, ACH i OH. Kao početne pretpostavke pri optimizaciji su uzete vrednosti  $\alpha_{nm}$  parametara iz UNIFAC modela (tabela 5.3).

Kvalitet dobijenih rezultata predviđanja viskoznosti sistema dimetilftalat + 1-butanol UNIFAC-VISCO modelom sa vrednostima  $\alpha_{nm}$  interakcionog parametara iz tabela 5.4 je dat u tabeli P18 i predstavlja UNIFAC-VISCO / model.

Slika 5.14 prikazuje eksperimentalne vrednosti  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat + 1-butanol na temperaturama 288.15K, 308.15K i 323.15K, kao i krive UNIFAC-VISCO modela sa vrednostima interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  iz tabela 5.3 i 5.4.



**Slika 5.14** Zavisnost  $\Delta\eta - x_1$  od sastava smeše dimetilftalat (1) + 1-butanol (2). Simbolima su označene eksperimentalne vrednosti, punom linijom UNIFAC-VISCO, a isprekidanom linijom UNIFAC-VISCO I

Sa slike 5.14 uočavamo da UNIFAC-VISCO I model, u odnosu na UNIFAC-VISCO model, daje manju grešku predviđanja na temperaturi 308.15K od 1.18% u odnosu na 4.55% i na temperaturi 323.15K od 2.53%, u odnosu na 7.38%. (tabele P17 i P18).

Novom optimizacijom sa drugačijim početnim pretpostavkama za vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  za eksperimentalne vrednosti viskoznosti dimetilftalat + 1-butanol sistema za interval temperatura od 288.15 K do 323.15 K sa korakom od 5 K, dobijene su nove vrednosti interakcionih parametara (tabela 5.5) međusobnih interakcija grupe AC sa grupama CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, COO i OH.

**Tabela 5.5** Vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  dobijeni optimizacijom, uz korišćenje Chevalierovih parametara

	$\alpha_{nm}$					
	CH <sub>3</sub>	ACH	COO	AC <sup>*2</sup>	CH <sub>2</sub>	OH
CH <sub>3</sub>	0	-119.5	-172.4	123.4	-709.5	594.4
ACH	237.2	0	-49.85	0	-623.7	419.3
COO	-44.25	-36.17	0	639.65	541.6	186.8
AC <sup>*2</sup>	-22.43	0	208.35	0	-22.43	-8.269
CH <sub>2</sub>	66.53	406.7	1172.0	-0.856	0	498.6
OH	1209.0	197.7	68.35	-1.254	-634.5	0

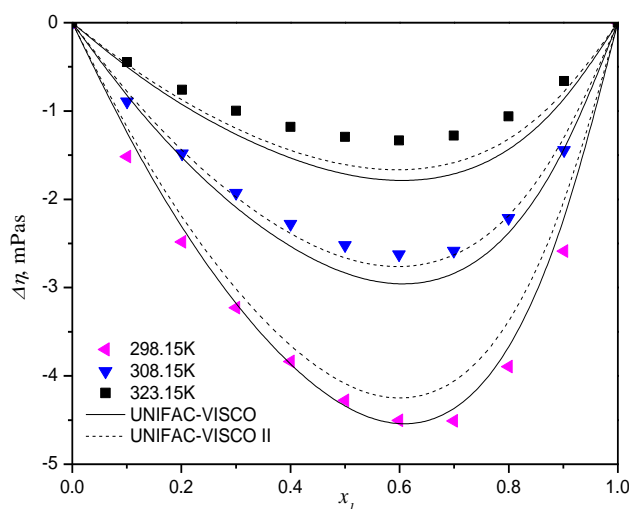
<sup>\*2</sup>Nove vrednosti interakcionih parametara dobijeni optimizacijom

U tabeli 5.5 prikazane su vrednosti interakcionih parametara, pri čemu su zadržani interakcioni parametri po Chevalieru, interakcije grupa  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{ACH}$ ,  $\text{COO}$  i  $\text{OH}$ , dok su određene nove vrednosti međusobnih interakcija grupe  $\text{AC}$  sa grupama  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{COO}$  i  $\text{OH}$ . Kao početne pretpostavke pri optimizaciji su uzete vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  iz UNIFAC modela (tabela 5.4).

Kvalitet dobijenih rezultata predviđanja viskoznosti sistema dimetilftalat + 1-butanol UNIFAC-VISCO modelom sa vrednostima  $\alpha_{nm}$  interakcionog parametra iz tabela 5.5 UNIFAC-VISCO // dat je u tabeli P18.

Upoređujući rezultate dobijene UNIFAC-VISCO I i II modelom za sistem dimetilftalat + 1-butanol (tabela P18) vidimo da manje greške predviđanja na nižim temperaturama od 288.15 do 298.15K, a na višim veće, daje UNIFAC-VISCO II model.

Slika 5.15 prikazuje eksperimentalne vrednosti  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat + 2-butanol na temperaturama 298.15K, 308.15K i 323.15K, kao i krive UNIFAC-VISCO modela sa vrednostima interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  iz tabela 5.3 i 5.5.



**Slika 5.15** Zavisnost  $\Delta\eta - x_1$  od sastava smeše dimetilftalat (1) + 2-butanol (2). Simbolima su označene eksperimentalne vrednosti, punom linijom UNIFAC-VISCO, a isprekidanom linijom UNIFAC-VISCO II

Sa slike 5.15 uočavamo da UNIFAC-VISCO II model, u odnosu na UNIFAC-VISCO model daje manju grešku predviđanja na temperaturi 308.15K od 1.35%, u odnosu na 3.08% i na temperaturi 323.15K od 5.41%, u odnosu na 7.43%, a veću grešku na temperaturi 298.15K od 2.68%, u odnosu na 1.12% (tabele P17 i P18).

Ako uzmemo u obzir da je u sistemu dimetilftalat + 2-butanol, OH grupa vezana za sekundarni C atom, pa se i interakcije ove grupe OH<sub>s</sub> razlikuju u odnosu na interakcije OH grupe vezane za primarni C atom, onda možemo iskoristiti korigovane vrednosti parametara  $\alpha_{nm}$  međusobnih interakcija grupa CH<sub>3</sub> - CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub> - OH<sub>s</sub> i CH<sub>2</sub> - OH<sub>s</sub> koje je odredio Đuriš [47] za eksperimentalne vrednosti viskoznosti 2-butanol + oktan za interval temperatura od 293.15 do 323.15 K sa korakom 5 K.

U tabeli 5.6 su prikazane vrednosti interakcionih parametara, tako da su svi parametri promenjeni u odnosu na parametre koje je prvobitno dao Chevalier u UNIFAC-VISCO prediktivnom modelu.

**Tabela 5.6** Korigovane vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  dobijeni optimizacijom [47]

	$\alpha_{nm}$		
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub>	OH <sub>s</sub>
CH <sub>3</sub>	0	-1950.4	924.29
CH <sub>2</sub>	95.07	0	789.78
OH <sub>s</sub>	2485.7	472.70	0

U tabeli 5.7 prikazane su vrednosti  $\alpha_{nm}$  interakcionih parametara, pri čemu su uzeti parametri međusobnih interakcija grupa CH<sub>3</sub> - CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub> - OH<sub>s</sub> i CH<sub>2</sub> - OH<sub>s</sub> (tabela 5.6) Đuriš [47], zadržani interakcioni parametri po Chevalieru međusobnih interakcija grupa ACH - CH<sub>3</sub>, ACH - CH<sub>2</sub>, ACH - COO, ACH - OH, COO - CH<sub>3</sub>, COO - CH<sub>2</sub> i COO - OH (tabela 5.3), kao i parametri interakcija grupe AC sa grupama CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, COO i OH preuzetim iz UNIFAC modela (tabela 5.3).

**Tabela 5.7** Vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$

	$\alpha_{nm}$					
	CH <sub>3</sub>	ACH	COO	AC	CH <sub>2</sub>	OH <sub>s</sub>
CH <sub>3</sub>	0	-119.5	-172.4	61.13	-1950.4	924.29
ACH	237.2	0	-49.85	0	-623.7	419.3
COO	-44.25	-36.17	0	317.6	541.6	186.8
AC	-11.12	0	103.50	0	-11.12	636.10
CH <sub>2</sub>	95.07	406.7	1172.0	61.13	0	789.78
OH <sub>s</sub>	2485.7	197.7	68.35	89.60	427.70	0

U tabeli 5.8 prikazane su vrednosti  $\alpha_{nm}$  interakcionih parametara, pri čemu su uzeti parametri međusobnih interakcija grupa CH<sub>3</sub> - CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub> - OH<sub>s</sub> i CH<sub>2</sub> - OH<sub>s</sub> (tabela 5.6) Đuriš [47], zadržani interakcioni parametri po Chevalieru međusobnih interakcija grupa ACH - CH<sub>3</sub>, ACH - CH<sub>2</sub>, ACH - COO, ACH - OH, COO - CH<sub>3</sub>, COO - CH<sub>2</sub> i COO - OH (tabela 5.3), a uzete nove vrednosti parametara interakcija grupe AC sa grupama CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, COO i OH dobijene optimizacijom (tabela 5.5).

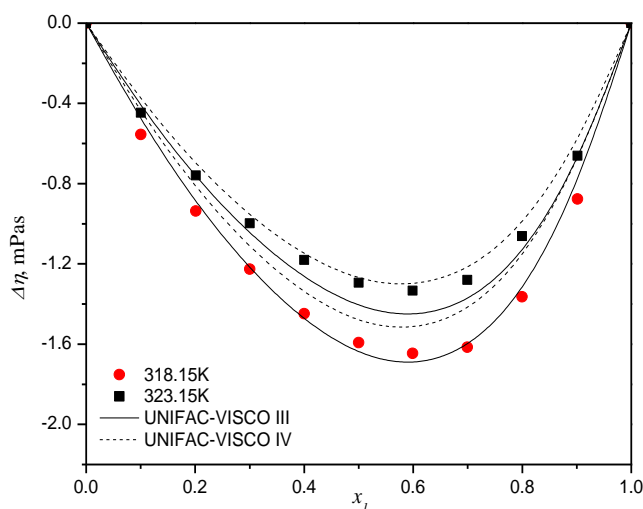
**Tabela 5.8** Vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$ 

	$\alpha_{nm}$					
	CH <sub>3</sub>	ACH	COO	AC	CH <sub>2</sub>	OH <sub>s</sub>
CH <sub>3</sub>	0	-119.5	-172.4	123.4	-1950.4	924.29
ACH	237.2	0	-49.85	0	-623.7	419.3
COO	-44.25	-36.17	0	639.65	541.6	186.8
AC	-22.43	0	208.35	0	-22.43	-8.269
CH <sub>2</sub>	95.07	406.7	1172.0	-0.856	0	789.78
OH <sub>s</sub>	2485.7	197.7	68.35	-1.254	427.70	0

Kvalitet dobijenih rezultata predviđanja viskoznosti UNIFAC-VISCO modelom sa vrednostima  $\alpha_{nm}$  interakcionog parametra iz tabela 5.7 UNIFAC-VISCO III i 5.8 UNIFAC-VISCO IV sistema dimetilftalat + 2-butanol dat je u tabeli P18.

Upoređujući rezultate sistema dimetilftalat + 2-butanol dobijene UNIFAC-VISCO modelom (tabela P17) sa rezultatima dobijenim UNIFAC-VISCO III modelom (tabela P18), vidi se da je kvalitet predviđanja UNIFAC-VISCO III modelom mnogo bolji na temperaturama višim od 313.15 K, a lošiji na temperaturama nižim od 303.15 K, dok je ista greška dobijena na temperaturi 308.15 K.

Na slici 5.16 su prikazane eksperimentalne vrednosti  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat + 2-butanol na temperaturama 318.15 K i 323.15 K, kao i krive UNIFAC-VISCO modela sa vrednostima interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  iz tabela 5.7 i 5.8.



**Slika 5.16** Zavisnost  $\Delta\eta - x_1$  od sastava smeše dimetilftalat (1) + 2-butanol (2). Simbolima su označene eksperimentalne vrednosti, punom linijom UNIFAC-VISCO III, a isprekidanom linijom UNIFAC-VISCO IV

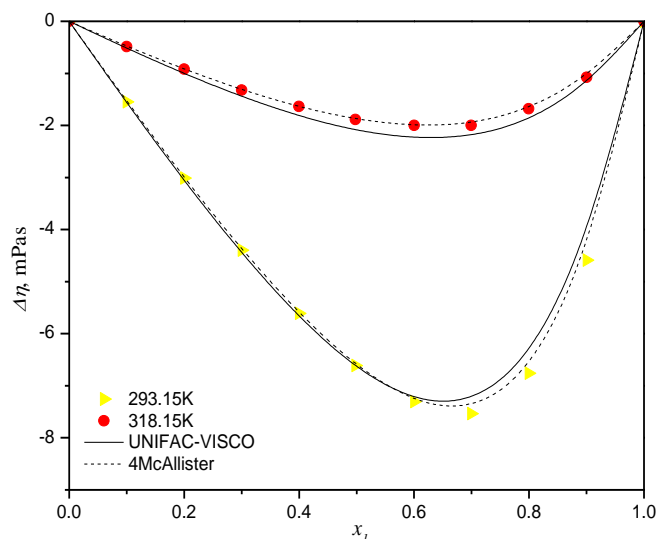
Sa slike 5.16 uočavamo da UNIFAC-VISCO III model daje manju grešku predviđanja na temperaturi 318.15 K od 0.76%, u odnosu na grešku od 2.53% za UNIFAC-VISCO IV, koji je dao bolji kvalitet predviđanja na temperaturi 323.15 K sa greškom od 0.85%, u odnosu na 1.81% (tabela P18).



## 5.1.3.2. SISTEM DIMETILFTALAT + 2-BUTANON

Za sistem dimetilftalat + 2-butanon prediktivni model UNIFAC-VISCO daje bolje vrednosti predviđanja viskoznosti nego u slučaju sistema dimetilftalat + alkoholi (tabela P17), pri čemu greška raste sa povećanjem temperature. Korelativni model Teja-Rice daje veća odstupanje od McAllister modela, pri čemu se i kod ovog modela greška proračuna smanjuje sa povećanjem temperature smeše.

Na slici 5.17 su prikazane eksperimentalne vrednosti  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat + 2-butanon na temperaturama 293.15 K i 318.15 K, kao i krive UNIFAC-VISCO i 4McAllister modela.



**Slika 5.17** Zavisnost:  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + 2-butanon (2) na temperaturama 293.15K i 318.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke, puna linija je UNIFAC-VISCO model, a isprekidana linija je 4McAllister model

Sa slike 5.17 uočavamo da prediktivni model daje veće odstupanje u odnosu na korelativni model, a odstupanje je veće na višoj temperaturi smeše.

U ovom radu su za smešu dimetilftalat + 2-butanon određene nove vrednosti interakcionih parametara za UNIFAC-VISCO model. Novi parametri se mogu dobiti optimizacijom iz eksperimentalno izmerenih vrednosti viskoznosti korišćenjem jednačine za minimizaciju funkcije cilja OF, jednačine (5.51).

Optimizacija je vršena uz pomoću programa napisanog u FORTRAN programskom jeziku, tako da vrednost jednačine (5.51) bude minimalna. Za eksperimentalne vrednosti viskoznosti dimetilftalat + 2-butanon za interval temperatura od 288.15 K do 323.15 K sa korakom od 5 K, dobijenu se nove vrednosti interakcionih parametara (tabela 5.9).

U tabeli 5.9 prikazane su vrednosti interakcionih parametara, pri čemu su zadržani interakcioni parametri po Chevalieru za interakcije grupa CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, ACH i COO, uzeti parametri iz UNIFAC modela međusobnih interakcija grupe AC sa CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, COO i ACH, dok su određene nove vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  za interakcije grupe CH<sub>3</sub>CO sa CH<sub>3</sub>, ACH, COO, AC i CH<sub>2</sub>. Kao početne pretpostavke za optimizaciju za interakcije grupe CH<sub>3</sub>CO sa grupama CH<sub>3</sub>, ACH, COO, AC i CH<sub>2</sub> su uzete vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  iz UNIFAC modela (tabela 5.3).

**Tabela 5.9** Vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  dobijeni optimizacijom, uz korišćenje Chevalierovih parametara

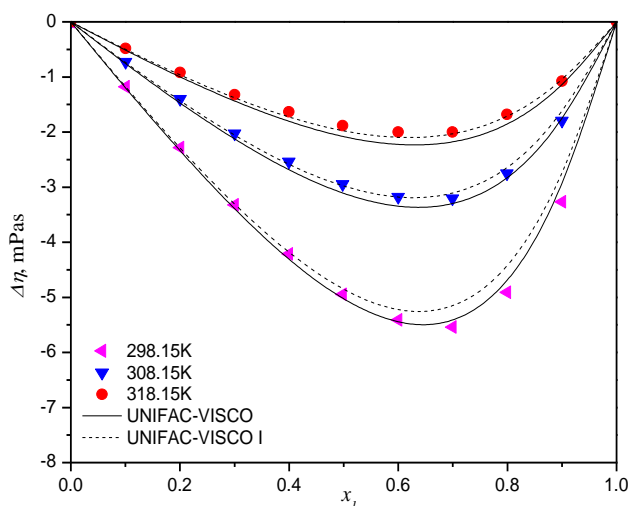
	$\alpha_{nm}$					
	CH <sub>3</sub>	ACH	COO	AC	CH <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> CO*
CH <sub>3</sub>	0	-119.5	-172.4	61.13	-709.5	170.30
ACH	237.2	0	-49.85	0	-623.7	15.926
COO	-44.25	-36.17	0	317.6	541.6	72.271
AC	-11.12	0	103.5	0	-11.12	15.926
CH <sub>2</sub>	66.53	406.7	1172.0	61.13	0	752.48
CH <sub>3</sub> CO*	16.564	82.184	-25.96	86.72	36.956	0

\*Nove vrednosti interakcionih parametara dobijeni optimizacijom

Rezultati ispitivanog binarnog sistema dimetilftalat + 2-butanon za UNIFAC-VISCO model I, II i III dati su u tabeli P18. U svim modelima za vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  su uzeti interakcioni parametri po Chevalieru za interakcije grupa CH<sub>3</sub>, ACH, CH<sub>2</sub> i COO i optimizovane vrednosti interakcionog parametra grupe CH<sub>3</sub>CO sa CH<sub>3</sub>, ACH, COO, CH<sub>2</sub> i AC. Modeli I, II i III se razlikuju u vrednostima interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  međusobnih interakcija grupe AC sa CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, COO i ACH, tako da model I ove parametre koristi iz UNIFAC modela, model II koristi optimizovane vrednosti iz tabela 5.4, a model III optimizovane vrednosti iz tabela 5.5. Interakcioni parametri za model I su prikazani u tabeli 5.9.

Upoređujući rezultate dobijene UNIFAC-VISCO / modelom (tabela P18), u odnosu na UNIFAC-VISCO model sa vrednostima  $\alpha_{nm}$  parametara iz UNIFAC modela iz tabele 5.3 (tabela P17) međusobnih interakcija  $\text{CH}_3\text{CO}$  sa grupama  $\text{CH}_3$ ,  $\text{ACH}$ ,  $\text{COO}$  i  $\text{CH}_2$  vidimo da se dobija bolji kvalitet predviđanja na višim temperaturama od 303.15K.

Na slici 5.18 su prikazane eksperimentalne vrednosti  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat + 2-butanon na temperaturama 298.15, 308.15K i 318.15K, kao i krive UNIFAC-VISCO modela sa vrednostima interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  iz tabele 5.3 i 5.9.



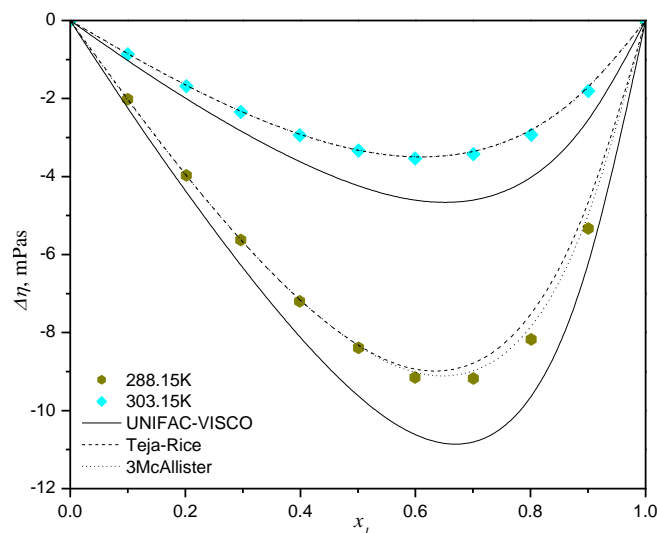
**Slika 5.18** Zavisnost  $\Delta\eta - x_1$  od sastava smeše dimetilftalat (1) + 2-butanon (2). Simbolima su označene eksperimentalne vrednosti, punom linijom UNIFAC-VISCO, a isprekidanom linijom UNIFAC-VISCO I

Sa slike 5.18 uočavamo da UNIFAC-VISCO / model daje manju grešku predviđanja na temperaturi 308.15 K od 0.65% i na temperaturi 323.15 K od 2.53%, u odnosu na grešku od 2.14% na temperaturi 308.15 K i 4.52% na temperaturi 323.15 K UNIFAC-VISCO modela, koji je dao bolji kvalitet predskazivanja na temperaturi 298.15 K sa greškom od 0.85%, u odnosu na 1.37% (tabele P17 i P18).

## 5.1.3.3. SISTEM DIMETILFTALAT + TETRAHIDROFURAN

Prediktivni model UNIFAC-VISCO u slučaju sistema dimetilftalat + tetrahidrofuran daje veliko odstupanje od eksperimentalnih vrednosti viskoznosti i sa povećanjem temperature greške predviđanja rastu. Korelativni modeli Teja-Rice i McAllister daju dobre vrednosti viskoznosti za ovaj binaran sistem. Takođe kod ovog sistema korelativni modeli daju bolje rezultate sa povećanjem temperature smeše.

Na slici 5.19 prikazana je zavisnost  $\Delta\eta - x_1$  smeše dimetilftalat sa tetrahidrofuranom, punim linijama prikazane su vrednosti viskoznosti dobijene korišćenjem UNIFAC-VISCO modela, a isprekidanim Teja-Rice i 3McAllister modela dok su simbolima prikazane eksperimentalne vrednosti.



**Slika 5.19** Zavisnost:  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat (1) + tetrahidrofuran (2) na temperaturama 288.15 i 303.15K. Simboli označavaju eksperimentalne tačke, puna linija je UNIFAC-VISCO model, a isprekidane linije su Teja-rice i 3McAllister modeli

Sa slike 5.19 se jasno vidi da prediktivni model daje veliko odstupanje u odnosu na korelativne modele. Odstupanje prediktivnog modela UNIFAC-VISCO se povećava sa povećanjem temperature smeše, dok su korelativni modeli Teja-Rice i McAllister najuspešniji na temperaturi 303.15K, dajući istu grešku od 0.12% (tabela P17).

U ovom radu su za smešu dimetilftalat + tetrahidrofuran određene nove vrednosti interakcionih parametara za UNIFAC-VISCO model. Optimizacija je vršena uz pomoću programa napisanog na FORTRAN programskom jeziku, tako da vrednost funkcije cilja OF u jednačini (5.51) bude minimalna. Za eksperimentalne vrednosti viskoznosti dimetilftalat + tetrahidrofuran za interval temperatura od 288.15 K do 323.15 K sa korakom od 5 K, dobijenu se nove vrednosti interakcionih parametara (tabela 5.10).

U tabeli 5.10 prikazane su vrednosti interakcionih parametara, pri čemu su zadržani interakcioni parametri po Chevalieru za interakcije grupa CH<sub>3</sub>, ACH i COO, uzeti optimizovani parametri međusobnih interakcija grupe AC sa CH<sub>3</sub>, COO i ACH (tabela 5.5), dok su određene nove vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  za interakcije grupe THF sa CH<sub>3</sub>, ACH, COO i AC. Kao početne pretpostavke za interakcije grupe THF sa grupama CH<sub>3</sub>, ACH, COO i AC su uzete vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  iz UNIFAC modela (tabela 5.3)

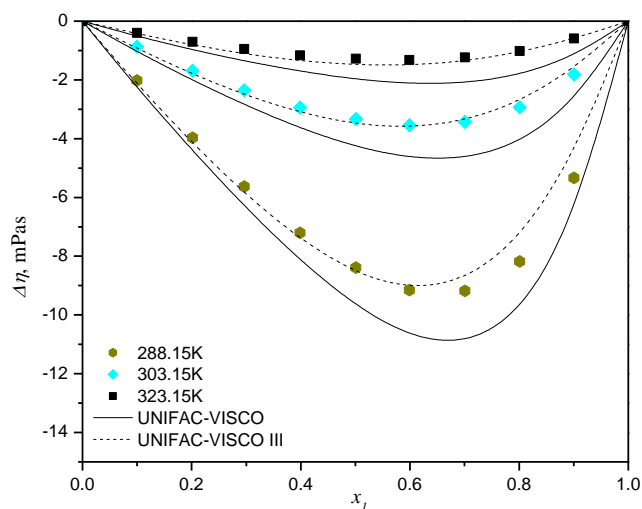
**Tabela 5.10** Vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  dobijeni optimizacijom, uz korišćenje Chevalierovih parametara

		$\alpha_{nm}$				
		CH <sub>3</sub>	ACH	COO	AC	THF*
CH <sub>3</sub>		0	-119.5	-172.4	123.4	1146.1
ACH		237.2	0	-49.85	0	138.62
COO		-44.25	-36.17	0	639.65	794.05
AC		-22.43	0	208.35	0	121.1
THF*		-102.9	-118.4	-700.6	-30.39	0

\*Nove vrednosti interakcionih parametara dobijeni optimizacijom

Rezultati ispitivanog binarnog sistema dimetilftalat + tetrahidrofuran za UNIFAC-VISCO model I, II i III dati su u tabeli P18. U svim modelima za vrednosti interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  su uzeti interakcioni parametri po Chevalieru za interakcije grupa CH<sub>3</sub>, ACH i COO i optimizovane vrednosti interakcionog parametra THF sa CH<sub>3</sub>, ACH, COO i AC. Modeli I, II i III se razlikuju u vrednostima interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  međusobnih interakcija grupe AC sa CH<sub>3</sub>, COO i ACH, tako da model I ove parametre koristi iz UNIFAC modela, model II koristi optimizovane vrednosti iz tabele 5.4, a model III optimizovane vrednosti iz tabele 5.5. Interakcioni parametri za model III su prikazani u tabeli 5.10.

Slika 5.20 prikazuje eksperimentalne vrednosti  $\Delta\eta - x_1$  sistema dimetilftalat + tetrahidrofuran na temperaturama 288.15, 303.15K i 323.15K, kao i krive UNIFAC-VISCO modela sa vrednostima interakcionog parametra  $\alpha_{nm}$  iz tabele 5.3 i 5.10.



**Slika 5.20** Zavisnost  $\Delta\eta$  -  $x_1$  od sastava smeše dimetilftalat (1) + tetrahidrofuran (2). Simbolima su označene eksperimentalne vrednosti, punom linijom UNIFAC-VISCO model, a isprekidanom linijom UNIFAC-VISCO III model

Sa slike 5.20 uočavamo da UNIFAC-VISCO III model daje manje greške predviđanja, na temperaturi 288.15 K od 2.03%, na temperaturi 303.15 K od 1.58% i na temperaturi 323.15 K od 2.64%, u odnosu na grešku UNIFAC-VISCO modela koji daje greške od 7.36%, 9.75% i 12.96% na temperaturama 288.15 K, 303.15 K i 323.15 K, respektivno (tabele P17 i P18).

## 5.2. MODELOVANJE $V^E$ OSOBINA TERNARNIH SISTEMA

### 5.2.1. Korelisanje $V^E$ pomoću CEOS i CEOS/ $G^E$ modela

U ovom radu izvršeno je korelisanje  $V^E$  osobina ternarnih smeša, eksperimentalno određenih na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu, u Laboratoriji za hemijsko-inženjersku termodinamiku. Kao i kod binarnih, tako i kod ternarnih svi proračuni su vršeni pomoću modela PRSV CEOS sa dva pravila mešanja: vdW1 i TCBT (poglavlje 5.1.1).

Kao  $G^E$  model korišćena je NRTL jednačina (5.10). Za binarnu smešu važe jednačine (5.11), dok se za ternarnu smešu koristi sledeći izraz:

$$\tau'_{ij} = \tau_{ij} + \frac{\sum_{k=1}^n x_k \Delta g_{ijk}}{RT} \quad (5.52)$$

U jednačinama (5.11) veličine  $\Delta g_{12}$  i  $\Delta g_{21}$  su binarni energetski parametri, dok je  $\Delta g_{ijk}$  ternarni doprinos. Kod ternarnih sistema, modeli vdW korišćeni u ovom radu definisani su setovima jednačina (5.1) - (5.7) i (5.12) gde su za vdW1-1  $l_{ij}=m_{ij}=0$ , a za vdW1-2  $l_{ij}=0$ , modeli TCBT setovima jednačina (5.1) - (5.12) i (5.52), za TCBT-2 su  $k_{ij}=l_{ij}=m_{ij}=0$  i  $\alpha_{ij}=0.3$ , a za TCBT-3  $l_{ij}=m_{ij}=0$  i  $\alpha_{ij}=0.3$ .

Za određivanje parametara modela korišćena je Marquardt optimizaciona tehnika [44] i njene modifikacije, sa funkcijom cilja koja je data jednačinom (5.13).

U okviru ove teze izvršeno je korelisanje  $V^E$  osobina CEOS/ $G^E$  modelima ternarnih sistema alkohol + hloroform + benzen za koje su prethodno eksperimentalno određene  $V^E$  vrednosti. U modelima su prisutni temperaturno nezavisni i temperaturno zavisni binarni interakcioni parametri, generisani iz  $V^E$  vrednosti odgovarajućih binarnih sistema (tabele P14 i P15), kao i ternarni doprinosi (jednačina (5.52)), generisani iz vrednosti ternarnih sistema. Rezultati korelisanja, kao i odgovarajući ternarni doprinosi su dati u tabeli P19. Uvođenjem ternarnog doprinosa u CEOS/ $G^E$  modele, za oba ispitivana sistema, dobijaju se dobri rezultati korelisanja na svakoj izotermi posebno. U slučaju sistema sa 1-butanol, pri korelisanju u temperaturnom intervalu, nešto lošiji rezultati su dobijeni TCBT-2 modelom sa temperaturno nezavisnim binarnim interakcionim parametrima, dok su ostali rezultati za temperaturni interval zadovoljavajući.

5.2.2. Predskazivanje  $V^E$  pomoću empirijskih, CEOS i CEOS/ $G^E$  modela

U ovom radu su testirani i najčešće korišćeni empirijski modeli za predviđanje  $V^E$  osobina ternarnih smeša iz odgovarajućih vrednosti binarnih sistema. Izabrani modeli za ovaj tip proračuna su sledeći:

**Model Radojkovića i saradnika [1]**

$$Y_{123} = Y_{12} + Y_{13} + Y_{23} \quad (5.53)$$

Sa  $Y$  je označeno  $V^E$ , u jednačini (5.15) binarni doprinosi  $Y_{12}$ ,  $Y_{13}$  i  $Y_{23}$  se direktno izračunavaju iz RK polinoma (2.7) korišćenjem molskih udela ternarne smeše.

**Kohler model [2]**

$$Y_{123} = (x_1 + x_2)^2 Y_{12}(x_1^a, x_2^a) + (x_1 + x_3)^2 Y_{13}(x_1^a, x_3^a) + (x_2 + x_3)^2 Y_{23}(x_2^a, x_3^a) \quad (5.54)$$

Ovaj model je simetričan, tretirajući sve binarne kombinacije na identičan način. Molski udeli u binarnim doprinosima se izračunavaju kao  $x_i^a = 1 - x_j^a = x_i / (x_i + x_j)$ .

**Jacob–Fitzner model [3]**

$$\begin{aligned} Y_{123} = & x_1 x_2 / [(x_1 + x_3 / 2)(x_2 + x_3 / 2)] Y_{12}(x_1^b, x_2^b) + \\ & + x_1 x_3 / [(x_1 + x_2 / 2)(x_3 + x_2 / 2)] Y_{13}(x_1^b, x_3^b) + \\ & + x_2 x_3 / [(x_2 + x_1 / 2)(x_3 + x_1 / 2)] Y_{23}(x_2^b, x_3^b) \end{aligned} \quad (5.55)$$

gde je  $x_i^b = 1 - x_j^b = (1 + x_i - x_j) / 2$ .

**Colinet model [4]**

$$Y_{123} = 0.5 \left\{ \begin{aligned} & \left[ \frac{x_2}{1-x_1} \right] Y(x_1, 1-x_1) + \left[ \frac{x_1}{1-x_2} \right] Y(1-x_2, x_2) + \\ & \left[ \frac{x_3}{1-x_1} \right] Y(x_1, 1-x_1) + \left[ \frac{x_1}{1-x_3} \right] Y(1-x_3, x_3) + \\ & \left[ \frac{x_3}{1-x_2} \right] Y(x_2, 1-x_2) + \left[ \frac{x_2}{1-x_3} \right] Y(1-x_3, x_3) \end{aligned} \right\} \quad (5.56)$$

**Tsao–Smith model [5]**

$$Y_{123} = \left[ \frac{x_2}{1-x_1} \right] Y_{12}(x_1^c, x_2^c) + \left[ \frac{x_3}{1-x_1} \right] Y_{13}(x_1^c, x_3^c) + (1-x_1) Y_{23}(x_2^c, x_3^c) \quad (5.57)$$



Ovaj model je asimetričan, binarni doprinosi se izračunavaju na sledeći način:

- a)  $x_i^c = x_i$  i  $x_j^c = 1 - x_i^c$  za binarne sisteme 1-2 i 1-3, i  $x_2^c = 1 - x_3^c = x_2 / (x_2 + x_3)$  za binarni sistem 2-3 (opcija a),
- b)  $x_i^c = x_2$  i  $x_j^c = 1 - x_i^c$  za binarne sisteme 2-1 i 2-3, i  $x_1^c = 1 - x_3^c = x_1 / (x_1 + x_3)$  za binarni sistem 1-3 (opcija b),
- c)  $x_i^c = x_3$  i  $x_j^c = 1 - x_i^c$  za binarne sisteme 3-1 i 3-2, i  $x_1^c = 1 - x_2^c = x_1 / (x_1 + x_2)$  za binarni sistem 1-2 (opcija c).

#### Toop model [6]

$$Y_{123} = \left[ x_2 / (1 - x_1) \right] Y_{12}(x_1^c, x_2^c) + \left[ x_3 / (1 - x_1) \right] Y_{13}(x_1^c, x_3^c) + (1 - x_1)^2 Y_{23}(x_2^c, x_3^c) \quad (5.58)$$

gde se binarni molski udeli  $x_i^c$  i  $x_j^c$  izračunavaju isto kao u Tsao-Smith modelu (jednačina 5.56).

#### Scatchard model [7]

$$Y_{123} = \left[ x_2 / (1 - x_1) \right] Y_{12}(x_1^c, x_2^c) + \left[ x_3 / (1 - x_1) \right] Y_{13}(x_1^c, x_3^c) + Y_{23}(x_2, x_3) \quad (5.59)$$

gde se binarni molski udeli  $x_i^c$  i  $x_j^c$  izračunavaju isto kao u Tsao-Smith modelu (jednačina 5.56).

#### Rastogi model [8]

$$Y_{123} = 0.5 \left[ (x_1 + x_2) Y_{12}(x_1^a, x_2^a) + (x_1 + x_3) Y_{13}(x_1^a, x_3^a) + (x_2 + x_3) Y_{23}(x_2^a, x_3^a) \right] \quad (5.60)$$

gde je  $x_i^a = 1 - x_j^a = x_i / (x_i + x_j)$ .

Rezultati predviđanja  $V^E$  osobina ispitivanih ternarnih sistema alkohol + hloroform + benzen pomoću empirijskih modela iz odgovarajućih  $V^E$  vrednosti binarnih sistema, dati su u tabeli P20.

U slučaju sistema 1-butanol + hloroform + benzen se kao najbolji ističu asimetrični a-tip Toop i Scatchard modeli, koji su dali veoma dobre rezultate za  $V^E$  sa greškom ispod 4% za sve izoterme. Poređenjem asimetričnih modela (Toop i Scatchard) vidi se da greška opada po sledećem redosledu: b-tip > c-tip > a-tip.

Kod sistema koji uključuje razgranati 2-butanol (2-butanol + hloroform + benzen) mogu se izvesti slični zaključci po sledećim pitanjima: kao i kod prethodnog sistema mnogo boljim rezultatom ističe se Toop i Scatchard a-tip modela, ali rezultati predviđanja nisu tako dobri kao u prethodnom slučaju (greška je između 4.28% i 5.34% gde se prva vrednost greške odnosi na najnižu, a druga na najvišu izotermu).

Kod oba sistema kao najlošiji se pokazao b-tip Toop i Scatchard modela. U slučaju sistema sa 2-butanolom kao najbolji se pokazao Kohler model sa greškom ispod 3%, dok se Rastogi model pokazao kao najlošiji i za oba sistema je dao grešku preko 20%.

U ovom radu izvršeno je predviđanje  $V^E$  osobina CEOS i CEOS/ $G^E$  modelima ternarnih sistema *alkohol + hloroform + benzen*, korišćenjem binarnih interakcionih parametara, koji su generisani korelisanjem  $V^E$  vrednosti odgovarajućih binarnih sistema (tabele P14 i P15). Rezultati  $V^E$  predviđanja za oba ternarna sistema su dati u tabeli P21.

Kod sistema sa 1-butanolom, analizom rezultata se zapaža da predviđanje obavljeno jednostavnim vdW1-2 modelom bi moglo da se tretira kao prihvatljivo, sa greškama oko 5%. Greške dobijene vdW1-3 modelom su oko 20%, izuzetak je rezultat od 2.62% dobijen vdW1-3 modelom sa temperaturno nezavisnim interakcionim parametrima za temperaturni interval. Slično se ponaša i sistem sa 2-butanolom sa greškama između 5% i 12 %.

Za razliku od CEOS modela, pri predviđanju CEOS/ $G^E$  modelima ne dobijaju se tako ujednačeni rezultati za svaku izotermu. Razlog ovome bi mogao ležati u činjenici što je pri generisanju parametara iz  $V^E$  vrednosti binarnih sistema CEOS/ $G^E$  modelima, traženjem globalnog minimuma, moguće pronaći veći broj lokalnih minimuma sa sličnom greškom, koja je najvažniji kriterijum za izbor rezultata. Tako npr. za sistem 1-butanol + hloroform + benzen, TCBT-3 model se pokazao kao uspešniji od TCBT-2 modela, s tim što su greške dobijene TCBT-2 modelom velike i iznose preko 10%. U slučaju sistema 2-butanol + hloroform + benzen, TCBT-2 i TCBT-3 modeli su dali loš kvalitet predviđanja na svakoj izotermi. Slični rezultati se dobijaju i za temperaturni interval i karakteristično je da je jednostavniji model TCBT-2, sa temperaturno nezavisnim interakcionim parametrima, dao manju grešku predviđanja od 5.49% u odnosu na TCBT-3 model (tabela P21).

## 6. ZAKLJUČCI

Na osnovu svega iznetog u ovoj tezi, mogu se dati sledeći zaključci:

1. U ovom radu su ispitivane termo-fizičke osobine binarnih i ternarnih smeša, koje sadrže industrijski i ekološki važne komponente (estri, alkoholi, aromati, ketoni). Ispitivanja su izvršena na atmosferskom pritisku i u širem opsegu temperatura.
2. Izvršena je analiza izbora komponenata koje ulaze u sastav binarnih i ternarnih sistema odabranih za eksperimentalna merenja gustine, indeksa refrakcije i viskoznosti na atmosferskom pritisku i u temperaturnom intervalu.
3. Date su osnovne karakteristike i detaljan opis rada uređaja na kojima su izvođena eksperimentalna merenja u okviru Laboratorije za hemijsko-nženjersku termodinamiku Tehnološko-metalurškog fakulteta u Beogradu:
  - digitalnog gustomera Anton Paar DMA 5000, namenjenog merenju gustina tečnosti i gasova pri atmosferskom pritisku u opsegu merenja gustine od 0 do 3 g/cm<sup>3</sup> i u temperaturnom opsegu od 0 do 90°C, sa ponovljivošću merenja gustine od 1x10<sup>-6</sup> g·cm<sup>-3</sup> i sa tačnošću merenja gustine od 5x10<sup>-6</sup> g·cm<sup>-3</sup>, pri čemu je termička stabilnost viša od ±0.002 K,
  - refraktometra Anton Paar RXA 156, namenjenog merenju indeksa refrakcije tečnih fluida u opsegu merenja indeksa refrakcije od 1.32 do 1.56 nD i u temperaturnom opsegu od 10 do 70 °C, sa ponovljivošću merenja indeksa refrakcije od 2x10<sup>-5</sup> nD i temperature od 0.03°C
  - viskozimetra Anton Paar SVM 3000, namenjenog merenju viskoznosti tečnih fluida u opsegu merenja dinamičke viskoznosti od 0.2 do 20000 mPas u temperaturnom opsegu od 15 do 105°C, sa ponovljivošću merenja viskoznosti od 0.1% i temperature od 0.005°C.
4. Eksperimentalno su određene gustine  $\rho$  čistih komponenti: benzen i hloroform na šest temperatura: 288.15, 293.15, 298.15, 303.15, 308.15 i 313.15, dimetilftalat, 1-butanol, 2-butanol, 2-butanon i tetrahidrofuran na osam temperatura 288.15, 293.15, 298.15, 303.15, 308.15, 313.15, 318.15 i 323.15 K i na atmosferskom pritisku. Dobijeni rezultati su upoređeni sa literaturnim vrednostima i ustanovljeno je veoma dobro slaganje.
5. Eksperimentalno su izmerene gustine  $\rho$  i određene dopunske molarne zapremine  $V^E$  osam binarnih sistema: 1-butanol + hloroform, 2-butanol + hloroform, 1-butanol + benzen, 2-butanol + benzen, dimetilftalat + 1-butanol, dimetilftalat + 2-butanol, dimetilftalat + 2-butanon i dimetilftalat + tetrahidrofuran. Merenja su za prva četiri sistema vršena u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 313.15 K sa korakom od 5

- K, a za druga četiri u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 323.15 K. Sva merenja su vršena na atmosferskom pritisku. Dobijeni eksperimentalni podaci su upoređeni sa dostupnim literaturnim podacima i utvrđena su veoma dobra slaganja. Rezultati za dopunsku molarnu zapreminu koji su izračunati iz gustina su obrađeni pomoću Redlich-Kisterovog polinoma. Kod grupe sistema alkohol + hloroform utvrđen je tzv. S-oblik zavisnosti  $V^E - x_1$ , koje ukazuje veoma neidealno ponašanje ovih smeša, što je rezultat prisustva tri vrste interakcija između molekula hloroforma i molekula alkohola, kao i njihovih suprotnih doprinosa koji dominiraju u određenim delovima molskog udela alkohola u smeši. Kod sistema alkohol + benzen utvrđene su pozitivne vrednosti  $V^E$  pri mešanju, koje ukazuju da je efekat raskidanja vodoničnih veza molekula alkohola, koji uslovljava ekspanziju zapremine, kvantitativno nadmašio stvaranje heteroasocijata između molekula alkohola i benzena, što rezultira manje efikasnim pakovanjem u ovim smešama. Kod sistema dimetilftalat + alkohol utvrđeno je da sistem sa 1-butanolom daje negativne vrednosti  $V^E$  pri mešanju, koje ukazuju na prisustvo snažnih vodoničnih veza između raznorodnih molekula, a da sistem sa 2-butanolom daje pozitivne vrednosti  $V^E$  koje ukazuju da dominira sterno odbijanje usled grananja alkohola u odnosu na specifične interakcije između molekula različite vrste. Kod sistema dimetilftalat + 2-butanon i dimetilftalat + tetrahidrofuran utvrđene su negativne vrednosti  $V^E$  u celom koncentracionom opsegu, što govori o prisustvu privlačnih sila koje proizilaze iz prisutnosti permanentnog dipola u molekulima tj. dipol-dipol interakcija.
- Izmerene su gustine  $\rho$  i određene dopunske molarne zapremine  $V^E$  za dva ternarna sistema, za koje eksperimentalni podaci, ni na jednoj temperaturi, u savremenoj literaturi nisu pronađeni: 1-butanol + hloroform + benzen i 2-butanol + hloroform + benzen na šest temperatura u intervalu od 288.15K do 313.15K sa korakom od 5 K i na atmosferskom pritisku. Dobijeni  $V^E$  podaci su obrađeni pomoću Nagata-Tamura polinoma sa devet optimizovanih parametara. Kod analiziranih sistema,  $V^E$  podaci su za najveći deo koncentracionog ternarnog polja pozitivni, što ukazuje da sterne smetnje koje su posledica formiranja kompleksa hloroform + benzen i prostorno odbijanje između alkilnog lanca alkohola i atoma hlora hloroforma, kvantitativno nadmašuju specifične interakcije između molekula alkohola i hloroforma, koji utiču na kontrakciju zapremine, a dominantni su kod ternarnih smeša sa velikim molskim udelom alkohola.
  - Eksperimentalno su određeni indeksi refrakcije  $n_D$  pet čistih komponenti: dimetilftalat, 1-butanol, 2-butanol, 2-butanon i tetrahidrofuran na osam temperatura 288.15, 293.15, 298.15, 303.15, 308.15, 313.15, 318.15 i 323.15 K i pri atmosferskom pritisku. Dobijeni rezultati su upoređeni sa literaturnim vrednostima i ustanovljeno je veoma dobro slaganje.

8. Eksperimentalno su izmereni indeksi refrakcije  $n_D$  i određene promene indeksa refrakcije smeše  $\Delta n_D$ , u odnosu na idealnu smešu, četiri binarna sistema: dimetilftalat + 1-butanol, dimetilftalat + 2-butanol, dimetilftalat + 2-butanon i dimetilftalat + tetrahidrofuran na osam temperatura 288.15, 293.15, 298, 15, 303.15, 308.15, 313.15, 318.15 i 323.15 K i pri atmosferskom pritisku, za koje podaci nisu pronađeni u literaturi. Za sve sisteme dobijene su pozitivne  $\Delta n_D$  vrednosti.
9. Eksperimentalno su određene viskoznosti  $\eta$  pet čistih komponenti: dimetilftalat, 1-butanol, 2-butanol, 2-butanon i tetrahidrofuran na osam temperatura 288.15, 293.15, 298.15, 303.15, 308.15, 313.15, 318.15 i 323.15 K i pri atmosferskom pritisku. Dobijeni rezultati su upoređeni sa literaturnim vrednostima i ustanovljeno je veoma dobro slaganje
10. Eksperimentalno su izmerene viskoznosti  $\eta$  i određene promene viskoznosti smeše  $\Delta \eta$ , u odnosu na idealnu smešu, četiri binarna sistema: dimetilftalat + 1-butanol, dimetilftalat + 2-butanol, dimetilftalat + 2-butanon i dimetilftalat + tetrahidrofuran na osam temperatura 288.15, 293.15, 298, 15, 303.15, 308.15, 313.15, 318.15 i 323.15 K i pri atmosferskom pritisku za koje podaci nisu pronađeni u literaturu, osim za sistem dimetilftalat + 1-butanol. Za sve sisteme dobijene su negativne  $\Delta \eta$  vrednosti.
11. U okviru ove teze izvršeno je korelisanje i predviđanje dobijenih eksperimentalnih osobina dopunskih molarnih zapremina  $V^E$  binarnih i ternarnih smeša pomoću dva tipa modela: (i) empirijskih jednačina polinomskeg tipa (Radojković, Kohler, Jacob-Fitzner, Tsao-Smith, Toop, Scatchard) i (ii) poluempirijskih modela koji uključuju modifikaciju Peng-Robinsonove kubne jednačine stanja (PRSV CEOS) i dva osnovna tipa pravila mešanja: pravilo mešanja kod koga su parametri smeše PRSV CEOS funkcija sastava – van der Waals jedan fluid (vdW1) pravilo mešanja i pravilo mešanja kod koga se za određivanje parametara smeše koristi model koeficijenata aktivnosti, baziran na dopunskoj Gibbsovoj energiji ( $G^E$ ) - TCBT pravilo mešanja. Pored modelovanja  $V^E$ , izvršeno je i izračunavanje  $n_D$  binarnih smeša, kao i predskazivanje  $V^E$  iz  $n_D$  čistih supstanci na bazi Lorentz-Lorenz, Dale-Gladstone, Eykman, Arago-Biot, Newton i Oster pravila mešanja i tri tipa jednačina za  $V^E$  izračunavanja. Izvršeno je modelovanje  $\eta$  binarnih smeša korišćenjem prediktivnog (UNIFAC-VISCO) i korelativnih (Teja-Rice i McAllister) modela. U slučaju UNIFAC-VISCO modela određene su i nove vrednosti interakcionih parametara.

Rezultati modelovanja pokazuju sledeće:

- Pri predviđanju  $V^E$  osobina ternarnih sistema: 1-butanol + hloroform + benzen i 2-butanol + hloroform + benzen, za pojedine modele dobijeni su dobri rezultati. Kao najbolji su se u slučaju sistema sa 1-butanolom pokazali a-tip Toop-a i Scatchard modeli, kod koga je alkohol asimetrična komponenta, a kod sistema

sa 2-butanolom Kohler model, dok je za oba sistema Rastogi model dao neprihvatljive rezultate sa greškom i od preko 20%.

- Izvršeno je korelisanje  $V^E$  osobina 8 binarnih sistema: 1-butanol + hloroform, 2-butanol + hloroform, 1-butanol + benzen, 2-butanol + benzen, dimetilftalat + 1-butanol, dimetilftalat + 2-butanol, dimetilftalat + 2-butanon i dimetilftalat + tetrahidrofuran. Parametri u primenjenim pravilima mešanja su tretirani kao temperaturno nezavisni (korelisanje na svakoj izotermi) i kao linearno temperaturno zavisni (korelisanje u temperaturnom intervalu). Kod sistema alkohol + hloroform najbolji se pokazao troparametarski CEOS/ $G^E$  (TCBT-3 model), a najlošije rezultate je dao dvoparametarski TCBT-2 model. Pri generisanju jedinstvenog seta temperaturno nezavisnih parametara, za ceo temperaturni interval, dobijeni su lošiji rezultati nego kada je korelisanje vršeno za svaku izotermu posebno, što je i očekivano. Kada se u modele ugrade temperaturno zavisni parametri, postiže se značajno poboljšanje rezultata korelisanja  $V^E$  osobina. Pri korelisanju na svakoj izotermi, kod sistema alkohol + benzen, dobijeni su dobri rezultati sa dominacijom troparametarskih TCBT-3 i vdW1-3 modela. Pri korelisanju u temperaturnom intervalu, najlošiji je TCBT-2 model sa temperaturno nezavisnim parametrima za sistem sa 1-butanolom, pa je neophodno uvesti temperaturnu zavisnost u binarne interakcione parametre. Kod sistema sa 2-butanolom, uvođenjem temperaturno zavisnih parametara se ne postiže značajno poboljšanje rezultata korelisanja  $V^E$  osobina. Kod dva sistema dimetilftalat + alkohol neophodno je koristiti troparametarske modele, vdW1-3 i TCBT-3 da bi se postigao dobar rezultat korelisanja na svakoj izotermi. U temperaturnom intervalu, kod sistema sa 1-butanolom za CEOS modele, poboljšanje se postiže uvođenjem temperaturno zavisnih parametara. Kod sistema dimetilftalat + 2-butanon, postignuti su veoma dobri rezultati korelisanja, pri čemu svi modeli daju grešku oko 1%. Kod sistema dimetilftalat + tetrahidrofuran, CEOS/ $G^E$  modeli su se pokazali uspešnijim u odnosu na CEOS modele. Uključivanjem temperature zavisnosti u binarne interakcione parametre CEOS i CEOS/ $G^E$  modela kod sistema dimetilftalata sa 2-butanonom i tetrahidrofuranom nije postignuto značajno poboljšanje u kvalitetu korelisanja.
- Predviđanje  $V^E$  osobina izvršeno je za dva ternarna sistema: 1-butanol + hloroform + benzen i 2-butanol + hloroform + benzen. Dobijeni su loši rezultati, sa greškama iznad 5%, osim za sistem 1-butanol + hloroform + benzen, gde je vdW1-3 model značajno bio uspešniji u predviđanju ternarnih  $V^E$  osobina u temperaturnom intervalu sa temperaturno nezavisnim parametrima, sa greškom od 2.62%. Uvođenjem ternarnih doprinosa u CEOS/ $G^E$  modele

izvršeno je korelisanje  $V^E$  osobina dva ternarna sistema, čime je greška značajno smanjena u odnosu na grešku dobijenu samo predviđanjem osobina ovih sistema.

- Izvršeno je izračunavanje indeksa refrakcije  $n_D$  četiri binarne smeše: dimetilftalat + 1-butanol, dimetilftalat + 2-butanol, dimetilftalat + 2-butanon i dimetilftalat + tetrahidrofuran iz indeksa refrakcije čistih komponenata, kao i predviđanje njihovih  $V^E$  vrednosti iz indeksa refrakcije i gustina čistih supstanci. Pri izračunavanju indeksa refrakcije binarnih smeša nisu postignuti zadovoljavajući rezultati. Prilikom predskazivanja  $V^E$  iz  $n_D$  najbolji rezultati se postižu pomoću Lorentz-Lorenz, Dale-Gladstone i Eykman pravila mešanja kod sistema dimetilftalata sa 2-butanonom i tetrahidrofuranom, dok je Arago-Biot pravilo mešanja najmanje uspešno. Kod sistema dimetilftalat + alkohol svi modeli pravila mešanja su dali veoma velike i neprihvatljive greške. Primenjena jednačina za  $V^E$  izračunavanja nije od većeg uticaja.
- Izvršeno je modelovanje viskoznosti  $\eta$  četiri binarne smeše. Prediktivni modeli UNIFAC-VISCO daje greške u opsegu od 0.85% za sistem dimetilftalat + 2-butanon do 12.96% za sistem dimetilftalat + tetrahidrofuran. Greška proračuna se povećava sa povećanjem temperature. Kada se u UNIFAC-VISCO modelu koriste novi interakcioni parametri dobijeni optimizacijom, greške proračuna viskoznosti su se smanjile (od 0.65% do 12.76%). Korelativni modeli Teja-Rice i McAllister daju dobre rezultate, naročito na višim temperaturama. McAllister modeli (3McAllister i 4McAllister) koji su dvo i troparametarski daju nešto bolje rezultate od jednoparametarskog Teja-Rice modela.

12. Merenja i modelovanje termodinamičkih osobina binarnih i ternarnih smeša izvršena u ovoj tezi, pomoći će boljem razumevanju složenih struktura i ponašanja jako neidealnih sistema i pružiće osnove za racionalno projektovanje procesa i opreme sa aspekta optimizacije i zaštite životne sredine.

## 7. LITERATURA

- [1] N. Radojković, A. Tasić, D. Grozdanić, B. Djordjević, D. Malić, *J. Chem. Thermodyn.*, 9 (1977) 349
- [2] F. Kohler, *Monatsh. Chem.*, 91 (1960) 738
- [3] K. T. Jacob, K. Fitzner, *Thermochim. Acta*, 18 (1977) 197
- [4] C. Colinet, Ph.D. Thesis, University of Grenoble, France, 1967
- [5] C. C. Tsao, J. M. Smith, *Chem. Eng. Prog. Symp. Series*, 49 (1953) 107
- [6] G. W. Toop, *Trans. TMS-AIME*, 233 (1965) 850
- [7] G. Scatchard, L. B. Ticknor, J. R. Goates, E. R. McCartney, *J. Am. Chem. Society*, 74 (1952) 3721
- [8] R. P. Rastogi, J. Nath, S. S. Das, *J. Chem. Eng. Data*, 22 (1977) 249
- [9] R. Stryjek, J. H. Vera, *Can. J. Chem. Eng.*, 64 (1986) 323
- [10] Y. Adachi, H. Sugie, *Fluid Phase Equilib.*, 23 (1986) 103
- [11] C. H. Twu, J. E. Coon, D. Bluck, B. Tilton, *Fluid Phase Equilib.*, 158-160 (1999) 271
- [12] H. A Lorentz, *Wied. Ann.*, 9 (1880) 641
- [13] L. Lorenz, *Wied. Ann.*, 11 (1880) 70
- [14] W. J. Heller, *J. Phys. Chem.*, 69 (1965) 1123
- [15] A. Piñeiro, P. Brocos, A. Amigo, M. Pintos, R. Bravo, *J. Chem. Thermodyn.*, 31 (1999) 931
- [16] J. R. Partington, *An advanced Treatise on Physical Chemistry*, vol. 4, sec. X, Longmans&Green, London, 1953
- [17] G. Oster, *Chem. Rev.*, 43 (1948) 319
- [18] B. E. Poling, J. M. Prausnitz, J. P. O'Connell, *The Properties of Gases and Liquids*, 5<sup>th</sup> ed.; McGraw-Hill, New York, 2001
- [19] J. L. Chevalier, P. Petrino, Y. Gaston-Bonhomme, *Chem. Eng. Sci.*, 43 (1988) 1303-1309
- [20] A. S. Teja, P. Rice, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 20 (1981) 77-81
- [21] A. S. Teja, P. Rice, *Chem. Eng. Science*, 36 (1981) 7-10
- [22] J. L. Chevalier, P. Petrino, Y. Gaston-Bonhomme, *J. Chem. Eng. Data*, 35 (1990) 206-212
- [23] M. N. M. Al-Hayan, Abdul-Haq M Abdul-latif, *J. Chem. Thermodyn.*, 38 (2006) 68-74.
- [24] O. Redlich, A. Kister, *Ind. Eng. Chem.*, 40 (1948) 345
- [25] P. R. Bevington, D. K. Robinson, *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*, McGraw-Hill, Singapore, 1994
- [26] I. Nagata, K. Tamura, *J. Chem. Thermodyn.*, 22 (1990) 279
- [27] C. H. Yung, F. N. Tsai, *J. Chem. Eng. Data*, 39 (1994) 441-443



- [28] P. Munk, A. Qin, D. Hoffman, *Collect. Czech. Chem. Commun.*, 58 (1993) 2612-2624
- [29] K. S. Kumar, N. V. Reddy, *Phys. Chem. Liq.*, 39 (2001) 117-123
- [30] A. Ali, A. K. Nain, B. Lal, D. Chand, *Intern. J. Thermophys.*, 25 (2004) 1835-1847
- [31] V. Rodriguez, C. Lafuente, M. C. Lopez, F. M. Royo, J. S. Urieta, *J. Chem. Thermodyn.*, 25 (1993) 679-685
- [32] U. Bhardway, S. Maken, K. Singh, *J. Chem Thermodyn.*, 28 (1996) 1173-1177
- [33] U. B. Kadam, A. P. Hiray, A. B. Sawant, M. Hasan, *J. Chem. Eng. Data*, 51 (2006) 60-63
- [34] Z. H. Lang, H. S. Jun, *Phys. Chem. Liq.*, 31 (1996) 49-62
- [35] A. A. Rostami, M. J. Chaichi, M. Sharifi, *Monatshefte fur Chemie*, 138 (2007) 967-971
- [36] S. Martinez, R. Garriga, P. Perez, M. Gracia, *Fluid Phase Equilib.*, 168 (2000) 267-279
- [37] R. A. Clara, A. C. Gomez Marigliano, H. N. Solimo, *J. Chem. Thermodyn.*, 40 (2008) 292-297
- [38] S. B. Lomte, M. J. Bawa, M. K. Lande, B. R. Arbad, *J. Chem. Eng. Data*, 54 (2009) 127-130
- [39] S. Faranda, G. Foca, A. Marchetti, G. Palyi, L. Tassi, C. Zucchi, *J. Mol. Liq.*, 111 (2004) 117-123
- [40] A. Valen, I. Gascon, C. Lafuente, J. S. Urieta, F. M. Royo, M. Postigo, *Intern. J. Thermophys.*, 23 (2002) 1587-1598
- [41] M. Postigo, A. Mariano, L. Mussari, A. Camacho, J. Urieta, *Fluid Phase Equilib.*, 207 (2003) 193-207
- [42] A. Valen, I. Gascon, C. Lafuente, M. C. Lopez, F. M. Royo, *Phys. Chem. Liq.*, 41 (2003) 239-247
- [43] H. Renon, J. M. Prausnitz, *Chem. Eng. Sci.*, 22 (1967) 299
- [44] D. W. Marquardt, *J. Soc. Ind. Appl. Math.*, 2 (1963) 431
- [45] I. R. Radović, M. Lj. Kijevčanin, M. Z. Gabrijel, S. P. Šerbanović, B. D. Djordjević, *Chem. Papers*, 62(3) (2008) 1-11
- [46] M. Nakata, M. Sakurai, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1.*, 83 (1987) 2449
- [47] M. Đuriš, *Diplomski rad*, Tehnolološko metalurški fakultet (2009)
- [48] J. D. Smiljanić, M. Lj. Kijevčanin, B. D. Đorđević, D. K. Grozdanić, S. P. Šerbanović, *Intern. J. Thermophys.* 29 (2008) 586-609
- [49] J. D. Smiljanić, M. Lj. Kijevčanin, B. D. Đorđević, D. K. Grozdanić, S. P. Šerbanović, *J. Chem. Eng. Data* 53 (2008) 1965-1969

## LISTA SIMBOLA

$a$ i $b$	– parametri jednačine stanja
$A$ i $B$	– konstante digitalnog gustinomera
$A_k$	– parametri Redlich-Kisterovog polinoma
$B_0, \dots, B_8$	– parametri Nagata-Tamura polinoma
$G^E$	– dopunska molarna Gibbsova energija
$G_{ij}$	– parametar u NRTL modelu
$K$	– broj eksperimentalnih tačaka
$k_{0i}, k_{1i}$	– parametri
$K_A$	– konstanta asocijacije
$k_{ij}, l_{ij}, m_{ij}$	– binarne interakcione konstante
$m$	– broj parametara Redlich-Kisterovog polinoma
$m_i$	– koeficijent
$M_i$	– molarna masa komponente $i$
$N$	– broj komponenata smeše
$n_D$	– indeks refrakcije
$n_{Di}$	– indeks refrakcije komponente $i$
$\Delta n_D$	– promena indeksa refrakcije smeše
$\eta$	– viskoznost
$\eta_i$	– viskoznost komponente $i$
$\Delta \eta$	– promena viskoznosti smeše
$OF$	– funkcija cilja
$P$	– pritisak
$PD$	– srednja procentualna greška
$R$	– gasna konstanta
$T$	– temperatura
$T_0$	– standardna temperatura (298.15 K)
$V$	– molarna zapremina
$V^E$	– dopunska molarna zapremina
$V_i$	– molarna zapremina komponente $i$
$V^*$	– zapremina krute sfere
$w_i$	– maseni udeo komponente $i$
$x_i$	– molski udeo komponente $i$
$Z$	– faktor kompresibilnosti

**GRČKA SLOVA**

- $\alpha$  – koeficijent izobarske ekspanzije  
 $\alpha_{ij}$  – binarni interakcioni parametar u NRTL modelu za dopunsku Gibbsovu energiju  
 $\tau_{ji}$  – binarni interakcioni parametar u NRTL modelu za dopunsku Gibbsovu energiju  
 $\varphi$  – koeficijent fugaciteta  
 $\Phi_i$  – zapreminski udeo krute sfere  
 $\phi_i$  – zapreminski udeo komponente  $i$   
 $\rho$  – gustina  
 $\kappa_T$  – koeficijent izotermske kompresibilnosti  
 $\rho_i$  – gustina komponente  $i$   
 $\Sigma$  – “root-mean-square-deviation” (RMSD)  
 $\omega$  – faktor acentričnosti  
 $\mu$  – dipolni momenat

**DONJI INDEKSI**

- $c$  – kritične veličine  
 $i, j, 1, 2, 3$  – komponente smeše  
 $rač$  – izračunate vrednosti  
 $eksp$  – eksperimentalne vrednosti  
 $r$  – redukovana veličine  
 $vdW$  – van der Waalsov referentni fluid

**GORNJI INDEKSI**

- $E$  – dopunska veličina

---

**PRILOG - TABELE**

---

Tabela P1 Gustine  $\rho$  čistih supstanci i poređenje sa literaturnim podacima

Supstanca	T/K	$\rho$ (g·cm <sup>-3</sup> )	
		Ovaj rad	Literaturni podaci
1-Butanol	288.15	0.813373	0.81324 [36]
	293.15	0.809573	0.81004 [28]
	298.15	0.805762	0.8057 [27], 0.80645 [35], 0.80548 [36], 0.80576 [40], 0.80574 [41]
	303.15	0.801923	0.80203 [29], 0.8019 [30], 0.80231 [33], 0.8023 [34], 0.80271 [35], 0.8022 [37]
	308.15	0.798053	0.79811 [36]
	313.15	0.794147	0.79437 [33], 0.79422 [40], 0.79436 [41]
	318.15	0.790231	0.79020 [36]
2-Butanol	288.15	0.810689	0.81044 [36], 0.810081 [39]
	293.15	0.806646	0.80648 [38], 0.806073 [39]
	298.15	0.802528	0.80206 [36], 0.80235 [38], 0.802010 [39], 0.80241 [42]
	303.15	0.798326	0.7988 [30], 0.79896 [38], 0.797859 [39]
	308.15	0.794030	0.79398 [36], 0.79418 [38], 0.793553 [39]
	313.15	0.789632	0.789190 [39], 0.78963 [42]
	318.15	0.785117	0.78500 [36], 0.79007 [38], 0.784687 [39]
Benzen	293.15	0.878918	0.87925 [28]
	298.15	0.873582	0.8737 [27]
	303.15	0.868233	0.86846 [29], 0.8682 [30]
Hloroform	303.15	1.469612	1.46921 [33], 1.4705 [34]
	313.15	1.450413	1.44974 [33]
Dimetilftalat	298.15	1.186933	1.18657 [35]
	303.15	1.182276	1.18218 [35]
2-Butanon	288.15	0.810133	0.81001[36], 0.810305 [39]
	293.15	0.804926	0.80492 [38], 0.805129 [39]
	298.15	0.799695	0.79961 [36], 0.79970 [38], 0.799891 [39]
	303.15	0.794435	0.79438 [36], 0.7945 [37], 0.79481 [38], 0.794672 [39]
	308.15	0.789142	0.78918 [36], 0.78978 [38], 0.789402 [39]
	313.15	0.783814	0.78375 [36], 0.78432 [38], 0.784122 [39]
	318.15	0.778451	0.77837 [36], 0.77826 [39]
Tetrahidrofuran	298.15	0.882330	0.88196 [40], 0.88250 [41], 0.88196 [42]
	313.15	0.865736	0.86538 [40], 0.86593 [41], 0.86538 [42]

Tabela P2 Gustine  $\rho$  čistih supstanci u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 323.15 K

T/K	$\rho$ (g·cm <sup>-3</sup> )						
	1-Butanol	2-Butanol	Benzen	Hloroform	Dimetilfitalat	2-Butanon	Tetrahidrofuran
288.15	0.813373	0.810689	0.884246	1.498077	1.196257	0.810133	0.893223
293.15	0.809573	0.806646	0.878918	1.488638	1.191593	0.804926	0.887792
298.15	0.805762	0.802528	0.873582	1.479148	1.186933	0.799695	0.882330
303.15	0.801923	0.798326	0.868233	1.469612	1.182276	0.794435	0.876836
308.15	0.798053	0.794030	0.862871	1.460025	1.177622	0.789142	0.871306
313.15	0.794147	0.789632	0.857498	1.450413	1.172969	0.783814	0.865736
318.15	0.790231	0.785117			1.168316	0.778451	0.860127
323.15	0.786238	0.780515			1.163668	0.773047	0.854771

Tabela P3 Gustine  $\rho$  i dopunske molarne zapremine  $V^E$  binarnih sistema

$x_1$	$\rho$ (g·cm <sup>-3</sup> )	$V^E$ (cm <sup>3</sup> ·mol <sup>-1</sup> )	$x_1$	$\rho$ (g·cm <sup>-3</sup> )	$V^E$ (cm <sup>3</sup> ·mol <sup>-1</sup> )	$x_1$	$\rho$ (g·cm <sup>-3</sup> )	$V^E$ (cm <sup>3</sup> ·mol <sup>-1</sup> )
<b>1-Butanol (1) + Hloroform (2)</b>								
$T = 288.15 \text{ K}$								
0.0000	1.498077	0.0000	0.3474	1.238343	0.0432	0.7008	1.001030	-0.1334
0.0493	1.458967	0.0428	0.4003	1.201440	0.0163	0.7485	0.970420	-0.1414
0.0994	1.420117	0.0696	0.4610	1.159744	-0.0166	0.7987	0.938452	-0.1352
0.1499	1.381858	0.0777	0.4993	1.133810	-0.0406	0.8495	0.906492	-0.1256
0.2003	1.344302	0.0806	0.5517	1.098600	-0.0661	0.8953	0.877854	-0.0982
0.2476	1.309654	0.0759	0.5989	1.067377	-0.0904	0.9475	0.845530	-0.0551
0.2790	1.286969	0.0684	0.6510	1.033234	-0.1118	1.0000	0.813373	0.0000
$T = 293.15 \text{ K}$								
0.0000	1.488638	0.0000	0.3474	1.231070	0.0593	0.7008	0.995760	-0.1209
0.0493	1.449824	0.0477	0.4003	1.194482	0.0330	0.7485	0.965404	-0.1308
0.0994	1.411277	0.0788	0.4610	1.153143	0.0001	0.7987	0.933697	-0.1268
0.1499	1.373340	0.0894	0.4993	1.127428	-0.0239	0.8495	0.901999	-0.1203
0.2003	1.336110	0.0940	0.5517	1.092600	-0.0496	0.8953	0.873588	-0.0953
0.2476	1.301761	0.0906	0.5989	1.061553	-0.0749	0.9475	0.841510	-0.0547
0.2790	1.279278	0.0834	0.6510	1.027696	-0.0976	1.0000	0.809573	0.0000
$T = 298.15 \text{ K}$								
0.0000	1.479148	0.0000	0.3474	1.223746	0.0771	0.7008	0.990450	-0.1063
0.0493	1.440633	0.0528	0.4003	1.187479	0.0511	0.7485	0.960349	-0.1181
0.0994	1.402389	0.0883	0.4610	1.146500	0.0182	0.7987	0.928907	-0.1166
0.1499	1.364771	0.1019	0.4993	1.121002	-0.0057	0.8495	0.897472	-0.1130
0.2003	1.327863	0.1086	0.5517	1.086400	-0.0318	0.8953	0.869292	-0.0908
0.2476	1.293819	0.1064	0.5989	1.055688	-0.0577	0.9475	0.837462	-0.0526
0.2790	1.271534	0.0998	0.6510	1.022116	-0.0815	1.0000	0.805762	0.0000
$T = 303.15 \text{ K}$								
0.0000	1.469612	0.0000	0.3474	1.216374	0.0957	0.7008	0.985097	-0.0906
0.0493	1.431398	0.0578	0.4003	1.180425	0.0704	0.7485	0.955255	-0.1047
0.0994	1.393449	0.0984	0.4610	1.139809	0.0373	0.7987	0.924082	-0.1059
0.1499	1.356152	0.1150	0.4993	1.114527	0.0138	0.8495	0.892910	-0.1052
0.2003	1.319568	0.1238	0.5517	1.080300	-0.0130	0.8953	0.864961	-0.0856
0.2476	1.285822	0.1233	0.5989	1.049776	-0.0393	0.9475	0.833386	-0.0506
0.2790	1.263746	0.1168	0.6510	1.016495	-0.0645	1.0000	0.801923	0.0000
$T = 308.15 \text{ K}$								
0.0000	1.460025	0.0000	0.3474	1.208943	0.1157	0.7008	0.979698	-0.0739
0.0493	1.422115	0.0628	0.4003	1.173313	0.0910	0.7485	0.950115	-0.0901
0.0994	1.384450	0.1094	0.4610	1.133064	0.0577	0.7987	0.919208	-0.0937
0.1499	1.347474	0.1291	0.4993	1.107999	0.0345	0.8495	0.888303	-0.0961
0.2003	1.311210	0.1404	0.5517	1.074000	0.0074	0.8953	0.860590	-0.0797
0.2476	1.277767	0.1413	0.5989	1.043814	-0.0196	0.9475	0.829272	-0.0479
0.2790	1.255896	0.1352	0.6510	1.010818	-0.0456	1.0000	0.798053	0.0000

Nastavak Tabele P3

T = 313.15 K								
0.0000	1.450413	0.0000	0.3474	1.201478	0.1361	0.7008	0.974260	-0.0568
0.0493	1.412816	0.0674	0.4003	1.166161	0.1125	0.7485	0.944940	-0.0755
0.0994	1.375410	0.1214	0.4610	1.126294	0.0777	0.7987	0.914297	-0.0813
0.1499	1.338756	0.1441	0.4993	1.101418	0.0570	0.8495	0.883670	-0.0881
0.2003	1.302801	0.1586	0.5517	1.067800	0.0273	0.8953	0.856188	-0.0743
0.2476	1.269664	0.1608	0.5989	1.037803	0.0015	0.9475	0.825138	-0.0471
0.2790	1.248018	0.1536	0.6510	1.005107	-0.0267	1.0000	0.794147	0.0000
1-Butanol (1) + Benzen (3)								
T = 288.15 K								
0.0000	0.884246	0.0000	0.2997	0.860741	0.1863	0.7010	0.833239	0.0938
0.0193	0.882483	0.0353	0.3532	0.856936	0.1846	0.7502	0.829979	0.0749
0.0534	0.879595	0.0758	0.4019	0.853504	0.1809	0.7945	0.827051	0.0579
0.1013	0.875720	0.1157	0.4525	0.850000	0.1716	0.8511	0.823296	0.0389
0.1509	0.871829	0.1462	0.4998	0.846738	0.1625	0.8961	0.820299	0.0260
0.2016	0.867984	0.1654	0.5532	0.843129	0.1455	0.9510	0.816663	0.0091
0.2018	0.867955	0.1669	0.6004	0.839985	0.1265	1.0000	0.813373	0.0000
0.2500	0.864382	0.1780	0.6493	0.836693	0.1115			
T = 293.15 K								
0.0000	0.878918	0.0000	0.2997	0.855806	0.1984	0.7010	0.828949	0.1016
0.0193	0.877168	0.0377	0.3532	0.852081	0.1972	0.7502	0.825772	0.0813
0.0534	0.874309	0.0815	0.4019	0.848721	0.1939	0.7945	0.822920	0.0629
0.1013	0.870495	0.1237	0.4525	0.845300	0.1840	0.8511	0.819258	0.0424
0.1509	0.866677	0.1555	0.4998	0.842111	0.1748	0.8961	0.816336	0.0282
0.2016	0.862908	0.1756	0.5532	0.838594	0.1565	0.9510	0.812791	0.0096
0.2018	0.862874	0.1777	0.6004	0.835529	0.1365	1.0000	0.809573	0.0000
0.2500	0.859372	0.1896	0.6493	0.832317	0.1205			
T = 298.15 K								
0.0000	0.873582	0.0000	0.2997	0.850849	0.2120	0.7010	0.824631	0.1114
0.0193	0.871844	0.0402	0.3532	0.847201	0.2116	0.7502	0.821537	0.0898
0.0534	0.869007	0.0881	0.4019	0.843914	0.2086	0.7945	0.818759	0.0701
0.1013	0.865255	0.1326	0.4525	0.840574	0.1984	0.8511	0.815196	0.0475
0.1509	0.861506	0.1660	0.4998	0.837460	0.1889	0.8961	0.812348	0.0320
0.2016	0.857807	0.1876	0.5532	0.834030	0.1697	0.9510	0.808897	0.0113
0.2018	0.857776	0.1894	0.6004	0.831042	0.1488	1.0000	0.805762	0.0000
0.2500	0.854344	0.2023	0.6493	0.827910	0.1320			
T = 303.15 K								
0.0000	0.868233	0.0000	0.2997	0.845866	0.2268	0.7010	0.820282	0.1223
0.0193	0.866507	0.0428	0.3532	0.842294	0.2272	0.7502	0.817269	0.0993
0.0534	0.863694	0.0945	0.4019	0.839080	0.2245	0.7945	0.814569	0.0779
0.1013	0.859995	0.1422	0.4525	0.835817	0.2142	0.8511	0.811102	0.0533
0.1509	0.856309	0.1778	0.4998	0.832778	0.2042	0.8961	0.808331	0.0361
0.2016	0.852685	0.2004	0.5532	0.829436	0.1841	0.9510	0.804977	0.0129
0.2018	0.852651	0.2026	0.6004	0.826525	0.1622	1.0000	0.801923	0.0000
0.2500	0.849285	0.2167	0.6493	0.823473	0.1443			



Nastavak Tabele P3

T = 308.15 K								
0.0000	0.862871	0.0000	0.2997	0.840854	0.2430	0.7010	0.815895	0.1346
0.0193	0.861158	0.0452	0.3532	0.837357	0.2442	0.7502	0.812965	0.1100
0.0534	0.858360	0.1019	0.4019	0.834214	0.2418	0.7945	0.810343	0.0867
0.1013	0.854713	0.1528	0.4525	0.831029	0.2313	0.8511	0.806975	0.0596
0.1509	0.851089	0.1907	0.4998	0.828059	0.2214	0.8961	0.804274	0.0415
0.2016	0.847536	0.2145	0.5532	0.824804	0.2002	0.9510	0.801025	0.0147
0.2018	0.847499	0.2170	0.6004	0.821974	0.1769	1.0000	0.798053	0.0000
0.2500	0.844201	0.2322	0.6493	0.819001	0.1580			
T = 313.15 K								
0.0000	0.857498	0.0000	0.2997	0.835830	0.2587	0.7010	0.811483	0.1466
0.0193	0.855809	0.0465	0.3532	0.832400	0.2615	0.7502	0.808640	0.1199
0.0534	0.853019	0.1088	0.4019	0.829324	0.2597	0.7945	0.806094	0.0946
0.1013	0.849433	0.1619	0.4525	0.826217	0.2488	0.8511	0.802822	0.0653
0.1509	0.845861	0.2030	0.4998	0.823320	0.2385	0.8961	0.800189	0.0463
0.2016	0.842375	0.2283	0.5532	0.820157	0.2155	0.9510	0.797051	0.0151
0.2018	0.842342	0.2305	0.6004	0.817402	0.1912	1.0000	0.794147	0.0000
0.2500	0.839110	0.2468	0.6493	0.814449	0.1778			
2-Butanol (1) + Hloroform (2)								
T = 288.15 K								
0.0000	1.498077	0.0000	0.3507	1.230331	0.3212	0.7008	0.995873	0.1045
0.0514	1.455494	0.1293	0.3995	1.196108	0.3086	0.7446	0.968172	0.0610
0.1045	1.413169	0.2135	0.4502	1.161114	0.2892	0.7984	0.934396	0.0221
0.1518	1.376623	0.2566	0.4978	1.128734	0.2674	0.8507	0.901918	-0.0085
0.1962	1.342918	0.2899	0.5460	1.096473	0.2363	0.9000	0.871623	-0.0307
0.2512	1.302057	0.3142	0.6008	1.060390	0.1915	0.9486	0.841905	-0.0291
0.2998	1.266638	0.3264	0.6498	1.028633	0.1441	1.0000	0.810636	0.0000
T = 293.15 K								
0.0000	1.488638	0.0000	0.3507	1.222738	0.3546	0.7008	0.990150	0.1403
0.0514	1.446330	0.1359	0.3995	1.188782	0.3436	0.7446	0.962681	0.0949
0.1045	1.404262	0.2277	0.4502	1.154060	0.3258	0.7984	0.929195	0.0524
0.1518	1.367944	0.2769	0.4978	1.121936	0.3050	0.8507	0.897001	0.0170
0.1962	1.33487	0.3135	0.5460	1.089932	0.2743	0.9000	0.866988	-0.0120
0.2512	1.293918	0.3423	0.6008	1.054140	0.2295	0.9486	0.837558	-0.0193
0.2998	1.258765	0.3574	0.6498	1.022642	0.1812	1.0000	0.806586	0.0000
T = 298.15 K								
0.0000	1.479148	0.0000	0.3507	1.215093	0.3877	0.7008	0.984367	0.1761
0.0514	1.437119	0.1424	0.3995	1.181401	0.3787	0.7446	0.957128	0.1288
0.1045	1.395310	0.2415	0.4502	1.146952	0.3624	0.7984	0.923929	0.0829
0.1518	1.359220	0.2968	0.4978	1.115083	0.3425	0.8507	0.892021	0.0425
0.1962	1.326007	0.3370	0.5460	1.083337	0.3121	0.9000	0.862285	0.0070
0.2512	1.285732	0.3701	0.6008	1.047833	0.2672	0.9486	0.833137	-0.0087
0.2998	1.250843	0.3882	0.6498	1.016588	0.2186	1.0000	0.802469	0.0000
T = 303.15 K								
0.0000	1.469612	0.0000	0.3507	1.207393	0.4205	0.7008	0.978521	0.2108
0.0514	1.427863	0.1486	0.3995	1.173963	0.4133	0.7446	0.951510	0.1617

Nastavak Tabele P3

0.1045	1.386310	0.2552	0.4502	1.139784	0.3985	0.7984	0.918598	0.1121
0.1518	1.350438	0.3171	0.4978	1.108172	0.3792	0.8507	0.886972	0.0669
0.1962	1.317475	0.3603	0.5460	1.076680	0.3492	0.9000	0.857508	0.0252
0.2512	1.277488	0.3980	0.6008	1.041465	0.3041	0.9486	0.828637	0.0016
0.2998	1.242862	0.4190	0.6498	1.010475	0.2547	1.0000	0.798268	0.0000
$T = 308.15 \text{ K}$								
0.0000	1.460025	0.0000	0.3507	1.199637	0.4523	0.7008	0.972606	0.2441
0.0514	1.418552	0.1549	0.3995	1.166469	0.4467	0.7446	0.945820	0.1932
0.1045	1.377261	0.2684	0.4502	1.132555	0.4336	0.7984	0.913194	0.1399
0.1518	1.341169	0.3642	0.4978	1.101201	0.4146	0.8507	0.881842	0.0906
0.1962	1.308892	0.3831	0.5460	1.069960	0.3851	0.9000	0.852648	0.0427
0.2512	1.269191	0.4251	0.6008	1.035031	0.3397	0.9486	0.824049	0.0115
0.2998	1.234823	0.4492	0.6498	1.004296	0.2894	1.0000	0.793974	0.0000
$T = 313.15 \text{ K}$								
0.0000	1.450413	0.0000	0.3507	1.191855	0.4820	0.7008	0.966647	0.2742
0.0514	1.409223	0.1605	0.3995	1.158940	0.4783	0.7446	0.940069	0.2229
0.1045	1.368203	0.2801	0.4502	1.125284	0.4670	0.7984	0.907737	0.1646
0.1518	1.332784	0.3537	0.4978	1.094196	0.4473	0.8507	0.876651	0.1116
0.1962	1.300274	0.4053	0.5460	1.063209	0.4178	0.9000	0.847715	0.0585
0.2512	1.260861	0.4514	0.6008	1.028552	0.3729	0.9486	0.819385	0.0198
0.2998	1.226744	0.4786	0.6498	0.998072	0.3214	1.0000	0.789588	0.0000
<b>2-Butanol (1) + Benzen (3)</b>								
$T = 288.15 \text{ K}$								
0.0000	0.884246	0.0000	0.3995	0.850206	0.4236	0.8020	0.822968	0.2034
0.0511	0.879005	0.1364	0.4509	0.846443	0.4221	0.8501	0.819958	0.1545
0.0995	0.874598	0.2121	0.5003	0.842930	0.4109	0.9003	0.816841	0.1014
0.1508	0.870038	0.2836	0.5498	0.839481	0.3932	0.9206	0.815571	0.0812
0.2013	0.865756	0.3349	0.5953	0.836405	0.3678	0.9479	0.813918	0.0482
0.2482	0.861906	0.3713	0.6487	0.832839	0.3341	1.0000	0.810636	0.0000
0.2999	0.857802	0.3987	0.7006	0.829455	0.2936			
0.3486	0.854032	0.4160	0.7493	0.826321	0.2519			
$T = 293.15 \text{ K}$								
0.0000	0.878918	0.0000	0.3995	0.845195	0.4523	0.8020	0.818513	0.2246
0.0511	0.873672	0.1458	0.4509	0.841484	0.4524	0.8501	0.815598	0.1710
0.0995	0.869288	0.2270	0.5003	0.838020	0.4427	0.9003	0.812581	0.1129
0.1508	0.864768	0.3025	0.5498	0.834641	0.4242	0.9206	0.811356	0.0902
0.2013	0.860542	0.3558	0.5953	0.831624	0.3983	0.9479	0.809763	0.0537
0.2482	0.856739	0.3944	0.6487	0.828134	0.3634	1.0000	0.806586	0.0000
0.2999	0.852686	0.4241	0.7006	0.824830	0.3207			
0.3486	0.848964	0.4434	0.7493	0.821777	0.2763			
$T = 298.15 \text{ K}$								
0.0000	0.873582	0.0000	0.3995	0.840142	0.4824	0.8020	0.813996	0.2469
0.0511	0.868329	0.1553	0.4509	0.836485	0.4837	0.8501	0.811166	0.1894
0.0995	0.863962	0.2424	0.5003	0.833076	0.4746	0.9003	0.808250	0.1258
0.1508	0.859480	0.3219	0.5498	0.829753	0.4564	0.9206	0.807068	0.1005
0.2013	0.855297	0.3783	0.5953	0.826793	0.4301	0.9479	0.804848	0.0473

Nastavak Tabele P3

0.2482	0.851537	0.4192	0.6487	0.823373	0.3942	1.0000	0.802469	0.0000
0.2999	0.847539	0.4504	0.7006	0.820147	0.3493			
0.3486	0.843861	0.4719	0.7493	0.817171	0.3022			
T = 303.15 K								
0.0000	0.868233	0.0000	0.3995	0.835049	0.5129	0.8020	0.809406	0.2699
0.0511	0.862976	0.1642	0.4509	0.831441	0.5155	0.8501	0.806660	0.2082
0.0995	0.858615	0.2581	0.5003	0.828083	0.5071	0.9003	0.803837	0.1394
0.1508	0.854167	0.3417	0.5498	0.824816	0.4888	0.9206	0.802699	0.1113
0.2013	0.850022	0.4014	0.5953	0.821907	0.4623	0.9479	0.801212	0.0687
0.2482	0.846304	0.4444	0.6487	0.818555	0.4252	1.0000	0.798268	0.0000
0.2999	0.842351	0.4779	0.7006	0.815401	0.3783			
0.3486	0.838722	0.5007	0.7493	0.812497	0.3287			
T = 308.15 K								
0.0000	0.862871	0.0000	0.3995	0.829915	0.5434	0.8020	0.804738	0.2933
0.0511	0.857607	0.1733	0.4509	0.826350	0.5476	0.8501	0.802072	0.2273
0.0995	0.853248	0.2741	0.5003	0.823043	0.5393	0.9003	0.799339	0.1532
0.1508	0.848827	0.3621	0.5498	0.819822	0.5217	0.9206	0.798245	0.1221
0.2013	0.844715	0.4252	0.5953	0.816964	0.4947	0.9479	0.796182	0.0587
0.2482	0.841033	0.4706	0.6487	0.813675	0.4564	1.0000	0.793974	0.0000
0.2999	0.837125	0.5059	0.7006	0.810590	0.4073			
0.3486	0.833539	0.5303	0.7493	0.807751	0.3555			
T = 313.15 K								
0.0000	0.857498	0.0000	0.3995	0.824757	0.5723	0.8020	0.800010	0.3152
0.0511	0.852241	0.1805	0.4509	0.821214	0.5798	0.8501	0.797401	0.2472
0.0995	0.847888	0.2874	0.5003	0.817964	0.5707	0.9003	0.794766	0.1662
0.1508	0.843480	0.3811	0.5498	0.814795	0.5525	0.9206	0.793720	0.1313
0.2013	0.839390	0.4483	0.5953	0.811961	0.5276	0.9479	0.791731	0.0626
0.2482	0.835746	0.4955	0.6487	0.808752	0.4857	1.0000	0.789588	0.0000
0.2999	0.831881	0.5325	0.7006	0.805733	0.4343			
0.3486	0.828336	0.5582	0.7493	0.802949	0.3809			
<b>Dimetilftalat (1) + 1-Butanol (2)</b>								
T = 288.15 K								
0.0000	0.813373	0.0000	0.3999	1.022544	-0.1588	0.8016	1.150286	-0.0953
0.0997	0.877193	-0.0824	0.5000	1.059925	-0.1593	0.9002	1.174239	-0.0550
0.1998	0.932375	-0.1280	0.5985	1.092775	-0.1549	1.0000	1.196257	0.0000
0.2994	0.980153	-0.1482	0.7001	1.123063	-0.1296			
T = 293.15 K								
0.0000	0.809573	0.0000	0.3999	1.018081	-0.1459	0.8016	1.145626	-0.0870
0.0997	0.873146	-0.0760	0.5000	1.055372	-0.1448	0.9002	1.169573	-0.0506
0.1998	0.928143	-0.1174	0.5985	1.088175	-0.1422	1.0000	1.191593	0.0000
0.2994	0.975792	-0.1362	0.7001	1.118425	-0.1186			
T = 298.15 K								
0.0000	0.805762	0.0000	0.3999	1.013603	-0.1316	0.8016	1.140963	-0.0780
0.0997	0.869077	-0.0679	0.5000	1.050829	-0.1317	0.9002	1.164909	-0.0460
0.1998	0.923892	-0.1054	0.5985	1.083569	-0.1288	1.0000	1.186933	0.0000
0.2994	0.971414	-0.1228	0.7001	1.113783	-0.1070			

Nastavak Tabele P3

T = 303.15 K								
0.0000	0.801923	0.0000	0.3999	1.009110	-0.1171	0.8016	1.136307	-0.0701
0.0997	0.864981	-0.0596	0.5000	1.046264	-0.1171	0.9002	1.160249	-0.0419
0.1998	0.919619	-0.0931	0.5985	1.078957	-0.1154	1.0000	1.182276	0.0000
0.2994	0.967016	-0.1090	0.7001	1.109141	-0.0958			
T = 308.15 K								
0.0000	0.798053	0.0000	0.3999	1.004597	-0.1020	0.8016	1.131646	-0.0619
0.0997	0.860864	-0.0518	0.5000	1.041686	-0.1022	0.9002	1.155586	-0.0373
0.1998	0.915319	-0.0803	0.5985	1.074335	-0.1018	1.0000	1.177622	0.0000
0.2994	0.962593	-0.0943	0.7001	1.104494	-0.0847			
T = 313.15 K								
0.0000	0.794147	0.0000	0.3999	1.000064	-0.0866	0.8016	1.126983	-0.0540
0.0997	0.856701	-0.0424	0.5000	1.037105	-0.0888	0.9002	1.150927	-0.0334
0.1998	0.910989	-0.0671	0.5985	1.069705	-0.0886	1.0000	1.172969	0.0000
0.2994	0.958146	-0.0795	0.7001	1.099840	-0.0736			
T = 318.15 K								
0.0000	0.790231	0.0000	0.3999	0.995510	-0.0692	0.8016	1.122318	-0.0459
0.0997	0.852519	-0.0316	0.5000	1.032500	-0.0728	0.9002	1.146268	-0.0297
0.1998	0.906628	-0.0509	0.5985	1.065059	-0.0736	1.0000	1.168316	0.0000
0.2994	0.953674	-0.0623	0.7001	1.095178	-0.0617			
T = 323.15 K								
0.0000	0.786238	0.0000	0.3999	0.990935	-0.0541	0.8016	1.117649	-0.0384
0.0997	0.848279	-0.0218	0.5000	1.027868	-0.0574	0.9002	1.141607	-0.0259
0.1998	0.902232	-0.0374	0.5985	1.060404	-0.0605	1.0000	1.163668	0.0000
0.2994	0.949172	-0.0473	0.7001	1.090512	-0.0514			
Dimetilftalat (1) + 2-Butanol (2)								
T = 288.15 K								
0.0000	0.810689	0.0000	0.4001	1.019601	0.0143	0.7996	1.148474	0.0112
0.1002	0.874348	-0.0015	0.5002	1.057273	0.0159	0.9015	1.173860	0.0058
0.2014	0.929895	0.0044	0.5991	1.090584	0.0158	1.0000	1.196257	0.0000
0.3002	0.977298	0.0099	0.6993	1.120969	0.0141			
T = 293.15 K								
0.0000	0.806646	0.0000	0.4001	1.014971	0.0318	0.7996	1.143777	0.0196
0.1002	0.870052	0.0090	0.5002	1.052596	0.0329	0.9015	1.169182	0.0094
0.2014	0.925438	0.0196	0.5991	1.085884	0.0311	1.0000	1.191593	0.0000
0.3002	0.972737	0.0270	0.6993	1.116262	0.0266			
T = 298.15 K								
0.0000	0.802528	0.0000	0.4001	1.010315	0.0476	0.7996	1.139082	0.0266
0.1002	0.865694	0.0191	0.5002	1.047905	0.0479	0.9015	1.164505	0.0126
0.2014	0.920934	0.0337	0.5991	1.081177	0.0443	1.0000	1.186933	0.0000
0.3002	0.968144	0.0423	0.6993	1.111556	0.0369			
T = 303.15 K								
0.0000	0.798326	0.0000	0.4001	1.005631	0.0613	0.7996	1.134390	0.0317
0.1002	0.861267	0.0287	0.5002	1.043188	0.0615	0.9015	1.159831	0.0149
0.2014	0.916383	0.0457	0.5991	1.076453	0.0562	1.0000	1.182276	0.0000
0.3002	0.963512	0.0557	0.6993	1.106844	0.0456			

Nastavak Tabele P3

T = 308.15 K								
0.0000	0.794030	0.0000	0.4001	1.000925	0.0713	0.7996	1.129692	0.0356
0.1002	0.856794	0.0339	0.5002	1.038469	0.0703	0.9015	1.155162	0.0157
0.2014	0.911783	0.0550	0.5991	1.071730	0.0638	1.0000	1.177622	0.0000
0.3002	0.958844	0.0659	0.6993	1.102127	0.0519			
T = 313.15 K								
0.0000	0.789632	0.0000	0.4001	0.996185	0.0784	0.7996	1.124995	0.0372
0.1002	0.852235	0.0384	0.5002	1.033719	0.0769	0.9015	1.150489	0.0160
0.2014	0.907129	0.0613	0.5991	1.066989	0.0691	1.0000	1.172969	0.0000
0.3002	0.954133	0.0730	0.6993	1.097404	0.0554			
T = 318.15 K								
0.0000	0.785117	0.0000	0.4001	0.991415	0.0808	0.7996	1.120295	0.0362
0.1002	0.847597	0.0398	0.5002	1.028949	0.0790	0.9015	1.145817	0.0148
0.2014	0.902417	0.0632	0.5991	1.062233	0.0705	1.0000	1.168316	0.0000
0.3002	0.949381	0.0752	0.6993	1.092675	0.0555			
T = 323.15 K								
0.0000	0.780515	0.0000	0.4001	0.986618	0.0804	0.7996	1.115591	0.0341
0.1002	0.842887	0.0403	0.5002	1.024163	0.0782	0.9015	1.141144	0.0132
0.2014	0.897649	0.0636	0.5991	1.057467	0.0693	1.0000	1.163668	0.0000
0.3002	0.944587	0.0753	0.6993	1.087937	0.0539			
Dimetilftalat (1) + 2-Butanon (2)								
T = 288.15 K								
0.0000	0.810133	0.0000	0.3997	1.028421	-0.7521	0.7993	1.152382	-0.3654
0.1002	0.878718	-0.3732	0.4982	1.064972	-0.7180	0.9002	1.175594	-0.1930
0.2001	0.936554	-0.6033	0.6001	1.098150	-0.6325	1.0000	1.196257	0.0000
0.3002	0.986029	-0.7214	0.6993	1.126710	-0.5131			
T = 293.15 K								
0.0000	0.804926	0.0000	0.3997	1.023492	-0.7856	0.7993	1.147645	-0.3810
0.1002	0.873583	-0.3908	0.4982	1.060097	-0.7495	0.9002	1.170897	-0.2014
0.2001	0.931496	-0.6312	0.6001	1.093325	-0.6599	1.0000	1.191593	0.0000
0.3002	0.981040	-0.7541	0.6993	1.121930	-0.5351			
T = 298.15 K								
0.0000	0.799695	0.0000	0.3997	1.018554	-0.8203	0.7993	1.142920	-0.3987
0.1002	0.868432	-0.4095	0.4982	1.055216	-0.7822	0.9002	1.166211	-0.2133
0.2001	0.926423	-0.6605	0.6001	1.088500	-0.6888	1.0000	1.186933	0.0000
0.3002	0.976038	-0.7882	0.6993	1.117157	-0.5590			
T = 303.15 K								
0.0000	0.794435	0.0000	0.3997	1.013619	-0.8584	0.7993	1.138181	-0.4155
0.1002	0.863253	-0.4286	0.4982	1.050340	-0.8181	0.9002	1.161513	-0.2197
0.2001	0.921334	-0.6915	0.6001	1.083676	-0.7197	1.0000	1.182276	0.0000
0.3002	0.971032	-0.8250	0.6993	1.112377	-0.5835			
T = 308.15 K								
0.0000	0.789142	0.0000	0.3997	1.008665	-0.8976	0.7993	1.133454	-0.4348
0.1002	0.858059	-0.4500	0.4982	1.045448	-0.8548	0.9002	1.156830	-0.2305
0.2001	0.916232	-0.7249	0.6001	1.078843	-0.7518	1.0000	1.177622	0.0000
0.3002	0.966010	-0.8636	0.6993	1.107599	-0.6098			

Nastavak Tabele P3

T = 313.15 K								
0.0000	0.783814	0.0000	0.3997	1.003704	-0.9394	0.7993	1.128729	-0.4556
0.1002	0.852838	-0.4727	0.4982	1.040552	-0.8941	0.9002	1.152149	-0.2420
0.2001	0.911111	-0.7604	0.6001	1.074009	-0.7863	1.0000	1.172969	0.0000
0.3002	0.960975	-0.9048	0.6993	1.102822	-0.6381			
T = 318.15 K								
0.0000	0.778451	0.0000	0.3997	0.998730	-0.9835	0.7993	1.124009	-0.4785
0.1002	0.847588	-0.4965	0.4982	1.035648	-0.9357	0.9002	1.147473	-0.2551
0.2001	0.905966	-0.7975	0.6001	1.069173	-0.8232	1.0000	1.168316	0.0000
0.3002	0.955922	-0.9479	0.6993	1.098047	-0.6688			
T = 323.15 K								
0.0000	0.773047	0.0000	0.3997	0.993761	-1.0322	0.7993	1.119269	-0.4998
0.1002	0.842312	-0.5225	0.4982	1.030746	-0.9810	0.9002	1.140780	-0.2660
0.2001	0.900811	-0.8386	0.6001	1.064331	-0.8620	1.0000	1.163668	0.0000
0.3002	0.950870	-0.9959	0.6993	1.093257	-0.6994			
Dimetilftalat (1) + Tetrahidrofuran(2)								
T = 288.15 K								
0.0000	0.893223	0.0000	0.3989	1.072728	-0.6633	0.8013	1.165669	-0.3358
0.1001	0.951806	-0.2981	0.5009	1.101964	-0.6745	0.9004	1.181524	-0.1394
0.2019	1.000397	-0.4856	0.5992	1.125852	-0.6028	1.0000	1.196257	0.0000
0.2966	1.038220	-0.6014	0.7006	1.147415	-0.5133			
T = 293.15 K								
0.0000	0.887792	0.0000	0.3989	1.067701	-0.6834	0.8013	1.160910	-0.3454
0.1001	0.946485	-0.3080	0.5009	1.097024	-0.6947	0.9004	1.176814	-0.1440
0.2019	0.995169	-0.5000	0.5992	1.120978	-0.6204	1.0000	1.191593	0.0000
0.2966	1.033099	-0.6201	0.7006	1.142600	-0.5274			
T = 298.15 K								
0.0000	0.882330	0.0000	0.3989	1.062668	-0.7050	0.8013	1.156155	-0.3560
0.1001	0.941143	-0.3188	0.5009	1.092073	-0.7154	0.9004	1.172107	-0.1490
0.2019	0.989952	-0.5181	0.5992	1.116104	-0.6395	1.0000	1.186933	0.0000
0.2966	1.027969	-0.6403	0.7006	1.137790	-0.5429			
T = 303.15 K								
0.0000	0.876836	0.0000	0.3989	1.057632	-0.7285	0.8013	1.151403	-0.3675
0.1001	0.935781	-0.3307	0.5009	1.087120	-0.7378	0.9004	1.167407	-0.1550
0.2019	0.984707	-0.5362	0.5992	1.111228	-0.6598	1.0000	1.182276	0.0000
0.2966	1.022833	-0.6625	0.7006	1.132980	-0.5596			
T = 308.15 K								
0.0000	0.871306	0.0000	0.3989	1.052580	-0.7530	0.8013	1.146650	-0.3796
0.1001	0.930389	-0.3431	0.5009	1.082165	-0.7622	0.9004	1.162703	-0.1607
0.2019	0.979440	-0.5555	0.5992	1.106351	-0.6817	1.0000	1.177622	0.0000
0.2966	1.017681	-0.6861	0.7006	1.128170	-0.5774			
T = 313.15 K								
0.0000	0.865736	0.0000	0.3989	1.047524	-0.7800	0.8013	1.141900	-0.3931
0.1001	0.924971	-0.3568	0.5009	1.077208	-0.7890	0.9004	1.158004	-0.1674
0.2019	0.974157	-0.5767	0.5992	1.101471	-0.7053	1.0000	1.172969	0.0000
0.2966	1.012514	-0.7114	0.7006	1.123357	-0.5964			

Nastavak Tabele P3

---

$T = 318.15 \text{ K}$								
0.0000	0.860127	0.0000	0.3989	1.042457	-0.8089	0.8013	1.137144	-0.4070
0.1001	0.919522	-0.3713	0.5009	1.072177	-0.8098	0.9004	1.153304	-0.1745
0.2019	0.968881	-0.6025	0.5992	1.096585	-0.7305	1.0000	1.168316	0.0000
0.2966	1.007333	-0.7388	0.7006	1.118541	-0.6168			
$T = 323.15 \text{ K}$								
0.0000	0.854771	0.0000	0.3989	1.037375	-0.8218	0.8013	1.132391	-0.4161
0.1001	0.914043	-0.3608	0.5009	1.067215	-0.8267	0.9004	1.148606	-0.1791
0.2019	0.963530	-0.6012	0.5992	1.091695	-0.7455	1.0000	1.163668	0.0000
0.2966	1.002133	-0.7473	0.7006	1.113723	-0.6295			

---

**Tabela P4** Optimizovani parametri RK polinoma, srednja procentualna greška odstupanja PD (%) i devijacija  $\sigma$  ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ ) dobijeni korelisanjem  $V^E$  osobina binarnih sistema

$T/K$	$A_0$	$A_1$	$A_2$	$A_3$	$A_4$	PD %	$\sigma$ ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ )
<b>1-Butanol (1) + Hloroform (2)</b>							
288.15	-0.1560	-1.1307	-0.0291	-0.0178		1.40	0.0024
293.15	-0.0893	-1.1449	-0.0304	-0.0563		1.49	0.0023
298.15	-0.0162	-1.1487	-0.0234	-0.0999		1.56	0.0023
303.15	0.0616	-1.1487	-0.0036	-0.1630		1.43	0.0023
308.15	0.1429	-1.1688	0.0071	-0.1847		1.29	0.0022
313.15	0.2277	-1.1652	0.01475	-0.2317		1.59	0.0037
<b>1-Butanol (1) + Benzen (3)</b>							
288.15	0.6370	-0.5121	0.1825	-0.1858		1.05	0.0027
293.15	0.6827	-0.5362	0.1967	-0.2141		1.13	0.0031
298.15	0.7429	-0.5456	0.1876	-0.2473		1.19	0.0035
303.15	0.8026	-0.5673	0.2010	-0.2891		1.22	0.0038
308.15	0.8636	-0.5964	0.2457	-0.2946		1.25	0.0041
313.15	0.9346	-0.5902	0.2435	-0.3799		1.34	0.0044
<b>2-Butanol (1) + Hloroform (2)</b>							
288.15	1.0504	-1.1978	-0.1714	-0.6499		0.88	0.0038
293.15	1.2009	-1.1766	-0.1263	-0.6160		0.75	0.0037
298.15	1.3494	-1.1398	-0.0566	-0.6362		0.66	0.0033
303.15	1.4992	-1.1193	-0.0257	-0.6102		0.56	0.0031
308.15	1.6393	-1.1043	0.0421	-0.6028		0.79	0.0065
313.15	1.7762	-1.0943	0.0509	-0.5588		0.44	0.0028
<b>2-Butanol (1) + Benzen (3)</b>							
288.15	1.6377	-0.5773	0.1394	-0.2855		0.54	0.0040
293.15	1.7600	-0.5555	0.1710	-0.3552		0.59	0.0043
298.15	1.8863	-0.5394	0.2152	-0.3921		0.59	0.0046
303.15	2.0131	-0.5161	0.2763	-0.4742		0.58	0.0045
308.15	2.1439	-0.5051	0.3112	-0.4877		0.57	0.0048
313.15	2.2685	-0.4595	0.3562	-0.6197		0.55	0.0045
<b>Dimetilftalat (1) + 1-Butanol (2)</b>							
288.15	-0.6374	0.0790	-0.1792	0.2006		1.04	0.0021
293.15	-0.5793	0.0863	-0.1828	0.1575		1.11	0.0021
298.15	-0.5267	0.0710	-0.1492	0.1498		1.19	0.0021
303.15	-0.4686	0.0610	-0.1346	0.1183		1.27	0.0021
308.15	-0.4087	0.0386	-0.1204	0.1173		1.43	0.0021
313.15	-0.3550	0.0149	-0.0847	0.1005		1.72	0.0019
318.15	-0.2911	-0.0193	-0.0537	0.0829		1.98	0.0018
323.15	-0.2294	-0.0186	-0.0432	0.0004		2.21	0.0019



Nastavak Tabele P4

Dimetilftalat (1) + 2-Butanol (2)							
288.15	0.0638	0.0123	-0.0255	0.0624	-0.0546	1.79	0.0003
293.15	0.1315	-0.0085	-0.0104	0.0214	-0.0519	0.80	0.0003
298.15	0.1915	-0.0343	-0.0054	-0.0120	-0.0235	0.83	0.0005
303.15	0.2461	-0.0515	-0.0365	-0.0644	0.0535	0.36	0.0003
308.15	0.2812	-0.0760	0.0064	-0.0728	-0.0181	0.54	0.0004
313.15	0.3075	-0.0943	-0.0062	-0.0895	0.0024	0.41	0.0004
318.15	0.3160	-0.1044	-0.0268	-0.1026	0.0165	0.39	0.0004
323.15	0.3128	-0.1121	-0.0283	-0.1147	0.0107	0.30	0.0003
Dimetilftalat (1) + 2-Butanon (2)							
288.15	-2.8675	1.2443	-0.4322			0.59	0.0074
293.15	-2.9931	1.3083	-0.4613			0.57	0.0075
298.15	-3.1240	1.3690	-0.5048			0.55	0.0075
303.15	-3.2672	1.4431	-0.5209			0.56	0.0079
308.15	-3.4136	1.5164	-0.5711			0.55	0.0080
313.15	-3.5706	1.5936	-0.6228			0.54	0.0082
318.15	-3.7368	1.6678	-0.6826			0.51	0.0082
323.15	-3.9176	1.7716	-0.7208			0.50	0.0087
Dimetilftalat (1) + Tetrahydrofuran (2)							
288.15	-2.6986	0.3765	0.3855	1.0737		0.83	0.0085
293.15	-2.7797	0.3896	0.4101	1.1170		0.80	0.0087
298.15	-2.8622	0.4216	0.3845	1.1240		0.77	0.0085
303.15	-2.9520	0.4544	0.3826	1.1361		0.76	0.0085
308.15	-3.0495	0.4699	0.3800	1.1922		0.74	0.0087
313.15	-3.1571	0.4934	0.3777	1.2369		0.70	0.0089
318.15	-3.2404	0.6075	0.2676	1.0932		0.77	0.0076
323.15	-3.3078	0.6088	0.3930	0.9423		0.76	0.0079

**Tabela P5** Indeksi refrakcije  $n_D$  čistih supstanci u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K

T/K	Dimetilftalat	1- Butanol	2-Butanol	2-Butanon	Tetrahidrofur
	$n_D$				
288.15	1.517791	1.401345	1.399511	1.381527	1.410349
293.15	1.515648	1.399316	1.397363	1.378923	1.407689
298.15	1.513544	1.397303	1.395150	1.376309	1.404984
303.15	1.511455	1.395230	1.392926	1.373655	1.402271
308.15	1.509428	1.393179	1.390643	1.371016	1.399566
313.15	1.507360	1.391099	1.388323	1.368336	1.396847
318.15	1.505237	1.389009	1.385961	1.365648	1.394165
323.15	1.503203	1.386876	1.383517	1.362944	1.391299

**Tabela P6** Indeksi refrakcije  $n_D$  i izračunate promene indeksa refrakcije  $\Delta n_D$  binarnih sistema u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K

$x_1$	$n_D$	$\Delta n_D$	$x_1$	$n_D$	$\Delta n_D$	$x_1$	$n_D$	$\Delta n_D$
<b>Dimetilftalat (1) + 1-Butanol (2)</b>								
$T = 288.15 \text{ K}$								
0.0000	1.401345	0.0000	0.3999	1.465704	0.0178	0.8016	1.503983	0.0093
0.0997	1.421143	0.0082	0.5000	1.477085	0.0175	0.9002	1.511180	0.0050
0.1998	1.437962	0.0134	0.5985	1.486625	0.0156	1.0000	1.517791	0.0000
0.2994	1.452681	0.0165	0.7001	1.495836	0.0130			
$T = 293.15 \text{ K}$								
0.0000	1.399316	0.0000	0.3999	1.463528	0.0177	0.8016	1.501831	0.0093
0.0997	1.419074	0.0082	0.5000	1.474908	0.0174	0.9002	1.509025	0.0050
0.1998	1.435837	0.0133	0.5985	1.484457	0.0155	1.0000	1.515648	0.0000
0.2994	1.450516	0.0164	0.7001	1.493645	0.0129			
$T = 298.15 \text{ K}$								
0.0000	1.397303	0.0000	0.3999	1.461357	0.0176	0.8016	1.499661	0.0092
0.0997	1.416986	0.0081	0.5000	1.472737	0.0173	0.9002	1.506893	0.0049
0.1998	1.433737	0.0132	0.5985	1.482267	0.0154	1.0000	1.513544	0.0000
0.2994	1.448352	0.0162	0.7001	1.491477	0.0128			
$T = 303.15 \text{ K}$								
0.0000	1.395230	0.0000	0.3999	1.459178	0.0175	0.8016	1.497526	0.0091
0.0997	1.414891	0.0081	0.5000	1.470565	0.0172	0.9002	1.504743	0.0049
0.1998	1.431584	0.0131	0.5985	1.480099	0.0153	1.0000	1.511455	0.0000
0.2994	1.446178	0.0162	0.7001	1.489294	0.0127			
$T = 308.15 \text{ K}$								
0.0000	1.393179	0.0000	0.3999	1.456939	0.0173	0.8016	1.495372	0.0090
0.0997	1.412657	0.0079	0.5000	1.468336	0.0170	0.9002	1.502628	0.0048
0.1998	1.429322	0.0129	0.5985	1.477947	0.0152	1.0000	1.509428	0.0000
0.2994	1.443994	0.0160	0.7001	1.487102	0.0125			
$T = 313.15 \text{ K}$								
0.0000	1.391099	0.0000	0.3999	1.454693	0.0171	0.8016	1.493299	0.0090
0.0997	1.410481	0.0078	0.5000	1.466198	0.0170	0.9002	1.500605	0.0048
0.1998	1.427124	0.0128	0.5985	1.475848	0.0152	1.0000	1.507360	0.0000
0.2994	1.441702	0.0158	0.7001	1.485069	0.0126			
$T = 318.15 \text{ K}$								
0.0000	1.389009	0.0000	0.3999	1.452566	0.0171	0.8016	1.491207	0.0090
0.0997	1.408349	0.0078	0.5000	1.463950	0.0168	0.9002	1.498530	0.0049
0.1998	1.425014	0.0128	0.5985	1.473756	0.0152	1.0000	1.505237	0.0000
0.2994	1.439649	0.0158	0.7001	1.482991	0.0126			
$T = 323.15 \text{ K}$								
0.0000	1.386876	0.0000	0.3999	1.450235	0.0168	0.8016	1.489058	0.0089
0.0997	1.406090	0.0076	0.5000	1.461645	0.0166	0.9002	1.496400	0.0048
0.1998	1.422736	0.0126	0.5985	1.471561	0.0151	1.0000	1.503203	0.0000
0.2994	1.437504	0.0158	0.7001	1.480826	0.0125			

Nastavak Tabele P6

Dimetilfталat (1) + 2-Butanol (2)								
$T = 288.15 \text{ K}$								
0.0000	1.399511	0.0000	0.4001	1.464235	0.0174	0.7996	1.503446	0.0094
0.1002	1.419170	0.0078	0.5002	1.475911	0.0172	0.9015	1.511151	0.0050
0.2014	1.436505	0.0132	0.5991	1.485973	0.0156	1.0000	1.517791	0.0000
0.3002	1.451221	0.0162	0.6993	1.495155	0.0129			
$T = 293.15 \text{ K}$								
0.0000	1.397363	0.0000	0.4001	1.462089	0.0174	0.7996	1.501264	0.0093
0.1002	1.416979	0.0078	0.5002	1.473665	0.0171	0.9015	1.508988	0.0050
0.2014	1.434290	0.0131	0.5991	1.483728	0.0155	1.0000	1.515648	0.0000
0.3002	1.448976	0.0161	0.6993	1.492958	0.0129			
$T = 298.15 \text{ K}$								
0.0000	1.395150	0.0000	0.4001	1.459819	0.0173	0.7996	1.499107	0.0093
0.1002	1.414758	0.0077	0.5002	1.471434	0.0171	0.9015	1.506845	0.0050
0.2014	1.432048	0.0131	0.5991	1.481580	0.0155	1.0000	1.513544	0.0000
0.3002	1.446721	0.0160	0.6993	1.490759	0.0128			
$T = 303.15 \text{ K}$								
0.0000	1.392926	0.0000	0.4001	1.457549	0.0172	0.7996	1.496923	0.0092
0.1002	1.412518	0.0077	0.5002	1.469210	0.0170	0.9015	1.504696	0.0049
0.2014	1.429793	0.0130	0.5991	1.479337	0.0154	1.0000	1.511455	0.0000
0.3002	1.444444	0.0159	0.6993	1.488555	0.0127			
$T = 308.15 \text{ K}$								
0.0000	1.390643	0.0000	0.4001	1.455269	0.0171	0.7996	1.494748	0.0091
0.1002	1.410199	0.0077	0.5002	1.466886	0.0168	0.9015	1.502562	0.0048
0.2014	1.427507	0.0129	0.5991	1.477007	0.0152	1.0000	1.509428	0.0000
0.3002	1.442142	0.0158	0.6993	1.486331	0.0126			
$T = 313.15 \text{ K}$								
0.0000	1.388323	0.0000	0.4001	1.452950	0.0170	0.7996	1.492630	0.0091
0.1002	1.407789	0.0075	0.5002	1.464579	0.0167	0.9015	1.500470	0.0048
0.2014	1.425153	0.0129	0.5991	1.474838	0.0152	1.0000	1.507360	0.0000
0.3002	1.439746	0.0157	0.6993	1.484154	0.0126			
$T = 318.15 \text{ K}$								
0.0000	1.385961	0.0000	0.4001	1.450683	0.0170	0.7996	1.490469	0.0091
0.1002	1.405485	0.0076	0.5002	1.462358	0.0167	0.9015	1.498345	0.0049
0.2014	1.422844	0.0129	0.5991	1.472619	0.0152	1.0000	1.505237	0.0000
0.3002	1.437492	0.0157	0.6993	1.481941	0.0126			
$T = 323.15 \text{ K}$								
0.0000	1.383517	0.0000	0.4001	1.448303	0.0169	0.7996	1.488284	0.0091
0.1002	1.403090	0.0076	0.5002	1.460005	0.0166	0.9015	1.496213	0.0048
0.2014	1.420261	0.0126	0.5991	1.470321	0.0151	1.0000	1.503203	0.0000
0.3002	1.435104	0.0157	0.6993	1.479715	0.0125			

Nastavak Tabele P6

Dimetilftalat (1) + 2-Butanon (2)								
$T = 288.15 \text{ K}$								
0.0000	1.381527	0.0000	0.3997	1.460421	0.0244	0.7993	1.502714	0.0123
0.1002	1.407051	0.0119	0.4982	1.472608	0.0232	0.9002	1.510706	0.0065
0.2001	1.427334	0.0185	0.6001	1.484249	0.0209	1.0000	1.517791	0.0000
0.3002	1.445548	0.0231	0.6993	1.493620	0.0168			
$T = 293.15 \text{ K}$								
0.0000	1.378923	0.0000	0.3997	1.458076	0.0245	0.7993	1.500529	0.0123
0.1002	1.404712	0.0121	0.4982	1.470303	0.0233	0.9002	1.508547	0.0065
0.2001	1.424889	0.0186	0.6001	1.481980	0.0210	1.0000	1.515648	0.0000
0.3002	1.443151	0.0232	0.6993	1.491406	0.0169			
$T = 298.15 \text{ K}$								
0.0000	1.376309	0.0000	0.3997	1.455756	0.0246	0.7993	1.498352	0.0124
0.1002	1.402241	0.0122	0.4982	1.468007	0.0233	0.9002	1.506402	0.0066
0.2001	1.422430	0.0187	0.6001	1.479718	0.0211	1.0000	1.513544	0.0000
0.3002	1.440754	0.0232	0.6993	1.489179	0.0169			
$T = 303.15 \text{ K}$								
0.0000	1.373655	0.0000	0.3997	1.453418	0.0247	0.7993	1.496179	0.0124
0.1002	1.399646	0.0122	0.4982	1.465697	0.0234	0.9002	1.504257	0.0066
0.2001	1.419984	0.0188	0.6001	1.477457	0.0211	1.0000	1.511455	0.0000
0.3002	1.438393	0.0234	0.6993	1.486959	0.0169			
$T = 308.15 \text{ K}$								
0.0000	1.371016	0.0000	0.3997	1.450914	0.0246	0.7993	1.493994	0.0123
0.1002	1.397049	0.0122	0.4982	1.463386	0.0234	0.9002	1.502106	0.0065
0.2001	1.417523	0.0188	0.6001	1.475198	0.0211	1.0000	1.509428	0.0000
0.3002	1.435897	0.0233	0.6993	1.484750	0.0169			
$T = 313.15 \text{ K}$								
0.0000	1.368336	0.0000	0.3997	1.448335	0.0244	0.7993	1.491868	0.0124
0.1002	1.394299	0.0120	0.4982	1.461006	0.0234	0.9002	1.500055	0.0066
0.2001	1.415022	0.0189	0.6001	1.472890	0.0211	1.0000	1.507360	0.0000
0.3002	1.433281	0.0232	0.6993	1.482515	0.0170			
$T = 318.15 \text{ K}$								
0.0000	1.365648	0.0000	0.3997	1.445906	0.0245	0.7993	1.489726	0.0125
0.1002	1.391583	0.0119	0.4982	1.458641	0.0234	0.9002	1.497963	0.0067
0.2001	1.412402	0.0188	0.6001	1.470610	0.0212	1.0000	1.505237	0.0000
0.3002	1.430774	0.0232	0.6993	1.480319	0.0171			
$T = 323.15 \text{ K}$								
0.0000	1.362944	0.0000	0.3997	1.443056	0.0241	0.7993	1.487476	0.0124
0.1002	1.388781	0.0118	0.4982	1.456023	0.0232	0.9002	1.495817	0.0066
0.2001	1.409556	0.0185	0.6001	1.468098	0.0210	1.0000	1.503203	0.0000
0.3002	1.427683	0.0226	0.6993	1.477948	0.0169			

Nastavak Tabele P6

Dimetilftalat (1) + Tetrahidrofuran (2)								
$T = 288.15 \text{ K}$								
0.0000	1.410349	0.0000	0.3989	1.475434	0.0222	0.8013	1.507331	0.0109
0.1001	1.432134	0.0110	0.5009	1.485375	0.0212	0.9004	1.512658	0.0056
0.2019	1.449580	0.0175	0.5992	1.493602	0.0189	1.0000	1.517791	0.0000
0.2966	1.463306	0.0211	0.7006	1.501140	0.0155			
$T = 293.15 \text{ K}$								
0.0000	1.407689	0.0000	0.3989	1.473086	0.0223	0.8013	1.505124	0.0109
0.1001	1.429586	0.0111	0.5009	1.483028	0.0213	0.9004	1.510509	0.0056
0.2019	1.447090	0.0176	0.5992	1.491326	0.0189	1.0000	1.515648	0.0000
0.2966	1.460907	0.0212	0.7006	1.498902	0.0156			
$T = 298.15 \text{ K}$								
0.0000	1.404984	0.0000	0.3989	1.470699	0.0224	0.8013	1.502949	0.0110
0.1001	1.427062	0.0112	0.5009	1.480693	0.0213	0.9004	1.508341	0.0056
0.2019	1.444592	0.0177	0.5992	1.489059	0.0190	1.0000	1.513544	0.0000
0.2966	1.458506	0.0213	0.7006	1.496678	0.0156			
$T = 303.15 \text{ K}$								
0.0000	1.402271	0.0000	0.3989	1.468324	0.0225	0.8013	1.500761	0.0110
0.1001	1.424509	0.0113	0.5009	1.478373	0.0214	0.9004	1.506188	0.0056
0.2019	1.442097	0.0178	0.5992	1.486770	0.0191	1.0000	1.511455	0.0000
0.2966	1.456037	0.0214	0.7006	1.494439	0.0157			
$T = 308.15 \text{ K}$								
0.0000	1.399566	0.0000	0.3989	1.465889	0.0225	0.8013	1.498586	0.0110
0.1001	1.421950	0.0114	0.5009	1.475973	0.0214	0.9004	1.503997	0.0055
0.2019	1.439559	0.0178	0.5992	1.484500	0.0191	1.0000	1.509428	0.0000
0.2966	1.453525	0.0214	0.7006	1.492229	0.0157			
$T = 313.15 \text{ K}$								
0.0000	1.396847	0.0000	0.3989	1.463380	0.0224	0.8013	1.496460	0.0111
0.1001	1.419336	0.0114	0.5009	1.473490	0.0213	0.9004	1.501891	0.0055
0.2019	1.436998	0.0178	0.5992	1.482203	0.0191	1.0000	1.507360	0.0000
0.2966	1.450962	0.0213	0.7006	1.490011	0.0157			
$T = 318.15 \text{ K}$								
0.0000	1.394165	0.0000	0.3989	1.460956	0.0225	0.8013	1.494304	0.0111
0.1001	1.416691	0.0114	0.5009	1.471170	0.0214	0.9004	1.499776	0.0056
0.2019	1.434327	0.0177	0.5992	1.479989	0.0193	1.0000	1.505237	0.0000
0.2966	1.448417	0.0213	0.7006	1.487801	0.0158			
$T = 323.15 \text{ K}$								
0.0000	1.391299	0.0000	0.3989	1.458327	0.0224	0.8013	1.492104	0.0111
0.1001	1.414068	0.0116	0.5009	1.468650	0.0213	0.9004	1.497647	0.0056
0.2019	1.431510	0.0176	0.5992	1.477634	0.0193	1.0000	1.503203	0.0000
0.2966	1.445884	0.0214	0.7006	1.485543	0.0158			

**Tabela P7** Optimizovani parametri RK polinoma, srednja procentualna greška odstupanja PD (%) i devijacija  $\sigma$  dobijeni korelisanjem  $\Delta n_D$  podataka binarnih sistema

T/K	$A_0$	$A_1$	$A_2$	$A_3$	$A_4$	PD %	$\sigma$
<b>Dimetilftalat (1) + 1-Butanol (2)</b>							
288.15	0.0696	-0.0213	0.0048			0.33	0.0001
293.15	0.0691	-0.0212	0.0056			0.41	0.0001
298.15	0.0686	-0.0211	0.0047			0.46	0.0001
303.15	0.0682	-0.0213	0.0049			0.44	0.0001
308.15	0.0674	-0.0209	0.0044			0.45	0.0001
313.15	0.0671	-0.0198	0.0036			0.49	0.0001
318.15	0.0670	-0.0196	0.0047			0.38	0.0001
323.15	0.0662	-0.0194	0.0043			0.37	0.0001
<b>Dimetilftalat (1) + 2-Butanol (2)</b>							
288.15	0.0687	-0.0195	0.0046			0.18	0.0000
293.15	0.0684	-0.0193	0.0043			0.13	0.0000
298.15	0.0681	-0.0192	0.0042			0.26	0.0001
303.15	0.0677	-0.0193	0.0036			0.20	0.0000
308.15	0.0671	-0.0196	0.0040			0.12	0.0000
313.15	0.0668	-0.0189	0.0037			0.21	0.0001
318.15	0.0668	-0.0190	0.0046			0.28	0.0001
323.15	0.0664	-0.0190	0.0045			0.17	0.0001
<b>Dimetilftalat (1) + 2-Butanon (2)</b>							
288.15	0.0933	-0.0366	0.0129			0.69	0.0003
293.15	0.0936	-0.0366	0.0128			0.74	0.0003
298.15	0.0936	-0.0364	0.0137			0.85	0.0003
303.15	0.0941	-0.0377	0.0139			0.80	0.0003
308.15	0.0943	-0.0369	0.0119			0.71	0.0002
313.15	0.0937	-0.0360	0.0136			0.48	0.0002
318.15	0.0940	-0.0359	0.0144			0.54	0.0002
323.15	0.0927	-0.0327	0.0113			0.57	0.0002
<b>Dimetilftalat (1) + Tetrahidrofuran (2)</b>							
288.15	0.0849	-0.0325	0.0124	-0.0063		0.37	0.0001
293.15	0.0853	-0.0327	0.0117	-0.0068		0.44	0.0001
298.15	0.0855	-0.0327	0.0126	-0.0076		0.48	0.0001
303.15	0.0861	-0.0329	0.0120	-0.0082		0.49	0.0001
308.15	0.0862	-0.0313	0.0123	-0.0128		0.55	0.0001
313.15	0.0858	-0.0313	0.0132	-0.0124		0.56	0.0001
318.15	0.0863	-0.0308	0.0128	-0.0132		0.48	0.0001
323.15	0.0861	-0.0309	0.0155	-0.0152		0.58	0.0002

Tabela P8 Viskoznosti  $\eta$  čistih supstanci i poređenje sa literaturnim podacima

Supstanca	T/K	$\eta$ (mPas)	
		Ovaj rad	Literaturni podaci
Dimetilftalat	298.15	13.796	13.76169 [35]
	303.15	11.066	11.11102 [35]
1-Butanol	288.15	3.3748	3.354 [36]
	298.15	2.5809	2.60264 [35], 2.560 [36], 2.564 [41]
	303.15	2.2719	2.25262 [35], 2.195 [37]
	308.15	2.0081	1.991 [36]
	313.15	1.7820	1.766 [41]
	318.15	1.5872	1.574 [36]
	2-Butanol	288.15	4.546
293.15		3.7604	3.6316 [38]
298.15		3.0933	3.068 [36], 2.9975 [38]
303.15		2.5664	2.4978 [38]
308.15		2.1494	2.128 [36], 2.0542 [38]
313.15		1.8160	1.7989 [38]
318.15		1.5484	1.533 [36]
2-Butanon	288.15	0.43603	0.436 [36]
	293.15	0.41363	0.3956 [38]
	298.15	0.39621	0.392 [36], 0.2828 [38]
	303.15	0.37927	0.372 [36], 0.347 [37], 0.2666 [38]
	308.15	0.36258	0.354 [36], 0.2601 [38]
	313.15	0.34613	0.338 [36], 0.2545 [38]
	318.15	0.33031	0.322 [36]
Tetrahidrofuran	298.15	0.48821	0.459 [41]
	313.15	0.42859	0.401 [41]



**Tabela P9** Viskoznosti  $\eta$  čistih supstanci u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K

T/K	Dimetilftalat	1- Butanol	2-Butanol	2-Butanon	Tetrahidrofuran
	$\eta$ (mPas)				
288.15	23.189	3.3748	4.5460	0.43063	0.52938
293.15	17.626	2.9446	3.7604	0.41363	0.50849
298.15	13.796	2.5809	3.0933	0.39621	0.48821
303.15	11.066	2.2719	2.5664	0.37927	0.46834
308.15	9.0640	2.0081	2.1494	0.36258	0.44865
313.15	7.5580	1.7820	1.8160	0.34613	0.42859
318.15	6.3997	1.5872	1.5484	0.33031	0.40722
323.15	5.4933	1.4188	1.3319	0.31675	0.38401

**Tabela P10** Viskoznosti  $\eta$  i izračunate promene viskoznosti  $\Delta\eta$  binarnih sistema u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K

$x_1$	$\eta$ (mPas)	$\Delta\eta$	$x_1$	$\eta$ (mPas)	$\Delta\eta$	$x_1$	$\eta$ (mPas)	$\Delta\eta$
<b>Dimetilftalat (1) + 1-Butanol (2)</b>								
$T = 288.15$ K								
0.0000	3.374800	0.0000	0.3999	4.876500	-6.4220	0.8016	11.570000	-7.6879
0.0997	3.253900	-2.0964	0.5000	5.873000	-7.4089	0.9002	15.734000	-5.4775
0.1998	3.586400	-3.7473	0.5985	7.099300	-8.1343	1.0000	23.189000	0.0000
0.2994	4.135000	-5.1722	0.7001	8.940100	-8.3066			
$T = 293.15$ K								
0.0000	2.944600	0.0000	0.3999	4.131900	-4.6838	0.8016	9.327700	-5.3855
0.0997	2.837200	-1.5711	0.5000	4.929300	-5.3560	0.9002	12.427000	-3.7338
0.1998	3.097000	-2.7809	0.5985	5.899400	-5.8320	1.0000	17.626000	0.0000
0.2994	3.534900	-3.8053	0.7001	7.331400	-5.8916			
$T = 298.15$ K								
0.0000	2.580900	0.0000	0.3999	3.545000	-3.5208	0.8016	7.670900	-3.9000
0.0997	2.489300	-1.2097	0.5000	4.194400	-3.9941	0.9002	10.036000	-2.6407
0.1998	2.698200	-2.1235	0.5985	4.977800	-4.3153	1.0000	13.796000	0.0000
0.2994	3.055100	-2.8836	0.7001	6.116800	-4.3158			
$T = 303.15$ K								
0.0000	2.271900	0.0000	0.3999	3.074500	-2.7142	0.8016	6.417100	-2.9042
0.0997	2.196600	-0.9521	0.5000	3.612100	-3.0569	0.9002	8.261500	-1.9268
0.1998	2.369500	-1.6595	0.5985	4.256500	-3.2787	1.0000	11.066000	0.0000
0.2994	2.665800	-2.2391	0.7001	5.181000	-3.2479			
$T = 308.15$ K								
0.0000	2.008100	0.0000	0.3999	2.692100	-2.1377	0.8016	5.448700	-2.2154
0.0997	1.948900	-0.7627	0.5000	3.143800	-2.3923	0.9002	6.913300	-1.4465
0.1998	2.095400	-1.3225	0.5985	3.682700	-2.5484	1.0000	9.064000	0.0000
0.2994	2.345500	-1.7751	0.7001	4.446400	-2.5015			
$T = 313.15$ K								
0.0000	1.782000	0.0000	0.3999	2.377100	-1.7147	0.8016	4.686800	-1.7252
0.0997	1.737600	-0.6203	0.5000	2.762000	-1.9080	0.9002	5.871200	-1.1104
0.1998	1.863300	-1.0727	0.5985	3.219400	-2.0195	1.0000	7.558000	0.0000
0.2994	2.079300	-1.4320	0.7001	3.860200	-1.9656			
$T = 318.15$ K								
0.0000	1.587200	0.0000	0.3999	2.115000	-1.3967	0.8016	4.077400	-1.3675
0.0997	1.556400	-0.5106	0.5000	2.446700	-1.5468	0.9002	5.051200	-0.8682
0.1998	1.667500	-0.8812	0.5985	2.840300	-1.6272	1.0000	6.399700	0.0000
0.2994	1.855400	-1.1727	0.7001	3.384600	-1.5718			
$T = 323.15$ K								
0.0000	1.418800	0.0000	0.3999	1.894500	-1.1537	0.8016	3.583000	-1.1019
0.0997	1.400000	-0.4250	0.5000	2.183500	-1.2726	0.9002	4.396200	-0.6906
0.1998	1.499900	-0.7330	0.5985	2.526400	-1.3310	1.0000	5.493300	0.0000
0.2994	1.665700	-0.9730	0.7001	2.991000	-1.2804			

Nastavak Tabele P10

Dimetilfталat (1) + 2-Butanol (2)								
$T = 288.15 \text{ K}$								
0.0000	4.546000	0.0000	0.4001	4.991900	-7.0132	0.7996	11.833000	-7.6199
0.1002	3.736700	-2.6773	0.5002	5.929800	-7.9414	0.9015	16.117000	-5.2356
0.2014	3.880900	-4.4198	0.5991	7.218000	-8.4970	1.0000	23.189000	0.0000
0.3002	4.324900	-5.8177	0.6993	9.056900	-8.5261			
$T = 293.15 \text{ K}$								
0.0000	3.760400	0.0000	0.4001	4.173200	-5.1348	0.7996	9.482400	-5.3649
0.1002	3.130000	-2.0197	0.5002	4.934500	-5.7615	0.9015	12.547000	-3.7129
0.2014	3.256700	-3.2962	0.5991	5.958800	-6.1085	1.0000	17.626000	0.0000
0.3002	3.625000	-4.2979	0.6993	7.324100	-6.1325			
$T = 298.15 \text{ K}$								
0.0000	3.093300	0.0000	0.4001	3.538700	-3.8368	0.7996	7.757200	-3.8940
0.1002	2.647900	-1.5178	0.5002	4.168300	-4.2785	0.9015	10.15400	-2.5882
0.2014	2.765800	-2.4830	0.5991	4.999800	-4.5055	1.0000	13.796000	0.0000
0.3002	3.079300	-3.2270	0.6993	6.068700	-4.5090			
$T = 303.15 \text{ K}$								
0.0000	2.566400	0.0000	0.4001	3.037900	-2.9292	0.7996	6.460400	-2.9023
0.1002	2.261600	-1.1565	0.5002	3.567300	-3.2506	0.9015	8.318000	-1.9110
0.2014	2.375500	-1.9027	0.5991	4.254900	-3.4036	1.0000	11.066000	0.0000
0.3002	2.646500	-2.4715	0.6993	5.151200	-3.3590			
$T = 308.15 \text{ K}$								
0.0000	2.149400	0.0000	0.4001	2.636300	-2.2796	0.7996	5.464600	-2.2137
0.1002	1.947900	-0.8943	0.5002	3.088200	-2.5199	0.9015	6.939600	-1.4433
0.2014	2.060400	-1.4816	0.5991	3.666100	-2.6258	1.0000	9.064000	0.0000
0.3002	2.297800	-1.9297	0.6993	4.400400	-2.5844			
$T = 313.15 \text{ K}$								
0.0000	1.816000	0.0000	0.4001	2.309700	-1.8037	0.7996	4.685000	-1.7223
0.1002	1.691000	-0.7003	0.5002	2.700600	-1.9875	0.9015	5.878500	-1.1139
0.2014	1.802600	-1.1698	0.5991	3.193400	-2.0626	1.0000	7.558000	0.0000
0.3002	2.013100	-1.5266	0.6993	3.804800	-2.0266			
$T = 318.15 \text{ K}$								
0.0000	1.548400	0.0000	0.4001	2.040600	-1.4488	0.7996	4.063500	-1.3640
0.1002	1.478800	-0.5557	0.5002	2.382800	-1.5922	0.9015	5.045700	-0.8761
0.2014	1.589400	-0.9361	0.5991	2.808600	-1.6462	1.0000	6.399700	0.0000
0.3002	1.778700	-1.2261	0.6993	3.325500	-1.6154			
$T = 323.15 \text{ K}$								
0.0000	1.331900	0.0000	0.4001	1.816500	-1.1804	0.7996	3.597900	-1.0615
0.1002	1.302300	-0.4466	0.5002	2.119900	-1.2935	0.9015	4.422500	-0.6609
0.2014	1.411000	-0.7590	0.5991	2.491000	-1.3340	1.0000	5.493300	0.0000
0.3002	1.583800	-0.9974	0.6993	2.962400	-1.2796			

Nastavak Tabele P10

Dimetilftalat (1) + 2-Butanon (2)								
$T = 288.15 \text{ K}$								
0.0000	0.430630	0.0000	0.3997	1.855000	-7.6722	0.7993	9.045400	-9.5760
0.1002	0.621910	-2.0891	0.4982	2.670400	-9.0984	0.9002	14.250000	-6.6677
0.2001	0.894450	-4.0901	0.6001	3.957600	-10.1303	1.0000	23.189000	0.0000
0.3002	1.283600	-5.9791	0.6993	5.795200	-10.5504			
$T = 293.15 \text{ K}$								
0.0000	0.413630	0.0000	0.3997	1.682500	-5.6109	0.7993	7.411000	-6.7605
0.1002	0.590470	-1.5478	0.4982	2.374200	-6.6146	0.9002	11.318000	-4.5902
0.2001	0.846690	-3.0111	0.6001	3.439200	-7.3036	1.0000	17.626000	0.0000
0.3002	1.183200	-4.3976	0.6993	4.916500	-7.5337			
$T = 298.15 \text{ K}$								
0.0000	0.396210	0.0000	0.3997	1.537200	-4.2149	0.7993	6.198300	-4.9084
0.1002	0.559640	-1.1792	0.4982	2.126000	-4.9460	0.9002	9.190300	-3.2684
0.2001	0.793530	-2.2840	0.6001	3.026100	-5.4113	1.0000	13.796000	0.0000
0.3002	1.096100	-3.3227	0.6993	4.225200	-5.5415			
$T = 303.15 \text{ K}$								
0.0000	0.379270	0.0000	0.3997	1.412900	-3.2379	0.7993	5.304400	-3.6168
0.1002	0.531890	-0.9182	0.4982	1.921100	-3.7823	0.9002	7.606200	-2.3933
0.2001	0.746320	-1.7714	0.6001	2.686300	-4.1061	1.0000	11.066000	0.0000
0.3002	1.018200	-2.5692	0.6993	3.684400	-4.1681			
$T = 308.15 \text{ K}$								
0.0000	0.362580	0.0000	0.3997	1.304100	-2.5364	0.7993	4.568100	-2.7495
0.1002	0.504720	-0.7297	0.4982	1.748700	-2.9489	0.9002	6.398900	-1.7967
0.2001	0.702530	-1.4012	0.6001	2.405700	-3.1786	1.0000	9.064000	0.0000
0.3002	0.948660	-2.0261	0.6993	3.242400	-3.2051			
$T = 313.15 \text{ K}$								
0.0000	0.346130	0.0000	0.3997	1.208300	-2.0204	0.7993	3.978900	-2.1317
0.1002	0.478900	-0.5899	0.4982	1.598000	-2.3411	0.9002	5.460400	-1.3779
0.2001	0.662140	-1.1271	0.6001	2.173200	-2.5008	1.0000	7.558000	0.0000
0.3002	0.886190	-1.6249	0.6993	2.877700	-2.5117			
$T = 318.15 \text{ K}$								
0.0000	0.330310	0.0000	0.3997	1.122200	-1.6340	0.7993	3.499600	-1.6820
0.1002	0.454410	-0.4841	0.4982	1.468100	-1.8860	0.9002	4.716700	-1.0773
0.2001	0.625600	-0.9192	0.6001	1.972700	-1.9999	1.0000	6.399700	0.0000
0.3002	0.829520	-1.3228	0.6993	2.575300	-1.9993			
$T = 323.15 \text{ K}$								
0.0000	0.316750	0.0000	0.3997	1.050400	-1.3354	0.7993	3.141300	-1.3131
0.1002	0.434720	-0.4007	0.4982	1.367300	-1.5284	0.9002	4.159200	-0.8175
0.2001	0.600060	-0.7525	0.6001	1.810700	-1.6125	1.0000	5.493300	0.0000
0.3002	0.785140	-1.0856	0.6993	2.350800	-1.5859			

Nastavak Tabele P10

Dimetilftalat (1) + Tetrahidrofuran (2)								
$T = 288.15 \text{ K}$								
0.0000	0.52938	0.0000	0.3989	2.40160	-7.1667	0.8013	10.58100	-8.1055
0.1001	0.78600	-2.0116	0.5009	3.53390	-8.3457	0.9004	15.67500	-5.2571
0.2019	1.15550	-3.9489	0.5992	5.00640	-9.1006	1.0000	23.18900	0.0000
0.2966	1.64600	-5.6042	0.7006	7.28670	-9.1180			
$T = 293.15 \text{ K}$								
0.0000	0.50849	0.0000	0.3989	2.15550	-5.1812	0.8013	8.63810	-5.5867
0.1001	0.74260	-1.4794	0.5009	3.10660	-5.9761	0.9004	12.37500	-3.5461
0.2019	1.07270	-2.8918	0.5992	4.31280	-6.4525	1.0000	17.62600	0.0000
0.2966	1.50550	-4.0800	0.7006	6.12050	-6.3805			
$T = 298.15 \text{ K}$								
0.0000	0.48821	0.0000	0.3989	1.94720	-3.8495	0.8013	7.18070	-3.9710
0.1001	0.70282	-1.1175	0.5009	2.75560	-4.3985	0.9004	9.99810	-2.4724
0.2019	0.99857	-2.1765	0.5992	3.75630	-4.7059	1.0000	13.79600	0.0000
0.2966	1.38320	-3.0521	0.7006	5.21370	-4.5979			
$T = 303.15 \text{ K}$								
0.0000	0.46834	0.0000	0.3989	1.76940	-2.9263	0.8013	6.06320	-2.8970
0.1001	0.66597	-0.8632	0.5009	2.46310	-3.3136	0.9004	8.23850	-1.7720
0.2019	0.93136	-1.6766	0.5992	3.30330	-3.5152	1.0000	11.06600	0.0000
0.2966	1.27600	-2.3356	0.7006	4.49630	-3.3968			
$T = 308.15 \text{ K}$								
0.0000	0.44865	0.0000	0.3989	1.61620	-2.2691	0.8013	5.18890	-2.1632
0.1001	0.61968	-0.6914	0.5009	2.21680	-2.5473	0.9004	6.90650	-1.2994
0.2019	0.86978	-1.3183	0.5992	2.93010	-2.6809	1.0000	9.06400	0.0000
0.2966	1.18140	-1.8226	0.7006	3.92010	-2.5645			
$T = 313.15 \text{ K}$								
0.0000	0.42859	0.0000	0.3989	1.48280	-1.7897	0.8013	4.49420	-1.6472
0.1001	0.65314	-0.4891	0.5009	2.00740	-1.9923	0.9004	5.87030	-0.9776
0.2019	0.81357	-1.0544	0.5992	2.61870	-2.0818	1.0000	7.55800	0.0000
0.2966	1.09720	-1.4460	0.7006	3.45040	-1.9731			
$T = 318.15 \text{ K}$								
0.0000	0.40722	0.0000	0.3989	1.36520	-1.4324	0.8013	3.93310	-1.2759
0.1001	0.55702	-0.4500	0.5009	1.82790	-1.5810	0.9004	5.05610	-0.7467
0.2019	0.76188	-0.8552	0.5992	2.35660	-1.6413	1.0000	6.39970	0.0000
0.2966	1.02120	-1.1634	0.7006	3.06280	-1.5428			
$T = 323.15 \text{ K}$								
0.0000	0.38401	0.0000	0.3989	1.26060	-1.1615	0.8013	3.47390	-1.0042
0.1001	0.49574	-0.3977	0.5009	1.67390	-1.2694	0.9004	4.40400	-0.5804
0.2019	0.71370	-0.7018	0.5992	2.13560	-1.3099	1.0000	5.49330	0.0000
0.2966	0.95223	-0.9472	0.7006	2.73880	-1.2248			

**Tabela P11** Optimizovani parametri RK polinoma, srednja procentualna greška odstupanja PD (%) i devijacija  $\sigma$  (mPas) dobijeni korelisanjem  $\Delta\eta$  podataka binarnih sistema

T/K	$A_0$	$A_1$	$A_2$	$A_3$	$A_4$	PD %	$\sigma$ mPas
<b>Dimetilftalat (1) + 1-Butanol (2)</b>							
288.15	-29.7185	-17.1474	-13.6917	-9.7824	-8.9328	0.13	0.0142
293.15	-21.4753	-11.6412	-9.6791	-5.3450	-4.5554	0.14	0.0105
298.15	-16.0104	-8.1339	-7.0069	-2.9482	-2.3302	0.20	0.0100
303.15	-12.2515	-5.8218	-5.1624	-1.6238	-1.1926	0.25	0.0094
308.15	-9.5695	-4.3028	-4.1816	-0.8053		0.28	0.0094
313.15	-7.6341	-3.2225	-3.1244	-0.3118		0.27	0.0078
318.15	-6.1990	-2.4075	-2.2770	-0.1569		0.28	0.0062
323.15	-5.1028	-1.8621	-1.7634	-0.0276		0.26	0.0045
<b>Dimetilftalat (1) + 2-Butanol (2)</b>							
288.15	-31.8140	-15.2950	-12.1504	-4.4709	-11.3413	0.14	0.0168
293.15	-23.1114	-10.1390	-8.1341	-2.9237	-9.1416	0.38	0.0342
298.15	-17.1361	-7.3020	-6.6569	-0.5849	-3.7324	0.36	0.0210
303.15	-13.0151	-5.1008	-4.6016	-0.4953	-2.8539	0.23	0.0094
308.15	-10.0886	-3.7576	-3.5029	-0.3093	-1.7537	0.27	0.0086
313.15	-7.9569	-2.8526	-2.6750	-0.2090	-1.1165	0.31	0.0079
318.15	-6.3739	-2.2059	-2.0804	-0.1765	-0.6938	0.35	0.0072
323.15	-5.1861	-1.6679	-1.2527	0.1736	-0.4812	0.24	0.0037
<b>Dimetilftalat (1) + 2-Butanon (2)</b>							
288.15	-36.4067	-25.3340	-18.2801	-9.8458		0.32	0.0420
293.15	-26.5098	-17.6975	-11.5331	-5.3266		0.22	0.0206
298.15	-19.8029	-12.5547	-7.6477	-3.0751		0.20	0.0150
303.15	-15.1479	-9.0833	-4.9503	-1.7497		0.31	0.0169
308.15	-11.7820	-6.6644	-3.5329	-1.2025		0.32	0.0152
313.15	-9.3569	-4.9760	-2.4717	-0.8080		0.38	0.0137
318.15	-7.5417	-3.8550	-1.7753	-0.4445		0.43	0.0115
323.15	-6.1132	-2.9114	-1.0269	0.0060		0.37	0.0089
<b>Dimetilftalat (1) + Tetrahydrofuran (2)</b>							
288.15	-33.4291	-20.0319	-11.3009	-4.4937		0.20	0.0243
293.15	-23.9657	-13.2136	-6.6039	-2.2368		0.24	0.0210
298.15	-17.6840	-8.8378	-3.8201	-1.2562		0.24	0.0189
303.15	-13.3160	-6.1789	-2.4057	-0.4603		0.33	0.0151
308.15	-10.2461	-4.3833	-1.4981	-0.0010		0.37	0.0127
313.15	-8.0454	-2.9403	-0.6578	-0.7116		0.74	0.0187
318.15	-6.3678	-2.2431	-0.6323	0.1581		0.42	0.0089
323.15	-5.1077	-1.7111	-0.5757	0.5363		0.52	0.0080

**Tabela P12** Gustina  $\rho$  i dopunska molarna zapremina  $V^E$  ternarnih sistema u temperaturnom intervalu od 288.15 do 313.15 K

$x_1$	$x_2$	$\rho$ (g·cm <sup>-3</sup> )	$V^E$ (cm <sup>3</sup> ·mol <sup>-1</sup> )	$x_1$	$x_2$	$\rho$ (g·cm <sup>-3</sup> )	$V^E$ (cm <sup>3</sup> ·mol <sup>-1</sup> )
<b>1-Butanol (1) + Hloroform (2) + Benzen (3)</b>							
$T = 288.15$ K							
0.0906	0.0999	0.931435	0.1738	0.5389	0.1010	0.899497	0.1145
0.0787	0.2010	0.989208	0.2135	0.4856	0.1974	0.956866	0.1359
0.0698	0.2996	1.046683	0.2336	0.4200	0.2995	1.019836	0.1492
0.0591	0.4023	1.108113	0.2377	0.3606	0.4006	1.083361	0.1538
0.0547	0.4980	1.166249	0.2289	0.3000	0.4971	1.145811	0.1552
0.0405	0.5972	1.228764	0.2122	0.2388	0.5967	1.211706	0.1546
0.0294	0.6816	1.282824	0.2016	0.1801	0.6987	1.280679	0.1487
0.0203	0.7851	1.351079	0.1311	0.1207	0.7997	1.351169	0.1209
0.1793	0.0999	0.924387	0.2138	0.0615	0.8957	1.420354	0.0837
0.1712	0.1977	0.979833	0.2437	0.7128	0.1020	0.888415	0.0144
0.1417	0.3001	1.040893	0.2593	0.6404	0.2010	0.948600	0.0082
0.1197	0.3995	1.101288	0.2499	0.5584	0.2992	1.010178	0.0314
0.1001	0.5004	1.163756	0.2353	0.4790	0.4004	1.074927	0.0493
0.0793	0.5994	1.226676	0.2127	0.3993	0.4995	1.139982	0.0727
0.0588	0.7018	1.293355	0.1745	0.3206	0.5992	1.206986	0.0913
0.0433	0.7983	1.357306	0.1367	0.2393	0.6997	1.276532	0.1087
0.0186	0.9020	1.428941	0.0739	0.1605	0.7998	1.347822	0.0992
0.3607	0.0993	0.910702	0.2050	0.0809	0.8963	1.418925	0.0791
0.3199	0.2003	0.970092	0.2271	0.8111	0.0999	0.881131	-0.0822
0.2776	0.3061	1.033855	0.2362	0.7185	0.1999	0.942900	-0.0636
0.2384	0.3991	1.091477	0.2324	0.6289	0.2991	1.005673	-0.0556
0.1979	0.5010	1.155872	0.2256	0.5411	0.3998	1.070364	-0.0161
0.1587	0.5980	1.218808	0.2062	0.4498	0.5004	1.137082	0.0122
0.1217	0.6993	1.286139	0.1653	0.3579	0.6015	1.205629	0.0594
0.0803	0.7980	1.353781	0.1284	0.2669	0.6985	1.273712	0.0798
0.0410	0.8957	1.422419	0.0811	0.1791	0.7991	1.345658	0.0964
$T = 293.15$ K							
0.0906	0.0999	0.925887	0.1778	0.5389	0.1010	0.894582	0.1296
0.0787	0.2010	0.983315	0.2141	0.4856	0.1974	0.951609	0.1455
0.0698	0.2996	1.040436	0.2320	0.4200	0.2995	1.014123	0.1585
0.0591	0.4023	1.101474	0.2346	0.3606	0.4006	1.077169	0.1639
0.0547	0.4980	1.159228	0.2256	0.3000	0.4971	1.139140	0.1650
0.0405	0.5972	1.221313	0.2085	0.2388	0.5967	1.204553	0.1616
0.0294	0.6816	1.275166	0.1867	0.1801	0.6987	1.272941	0.1579
0.0203	0.7851	1.342752	0.1284	0.1207	0.7997	1.342891	0.1273
0.1793	0.0999	0.918970	0.2205	0.0615	0.8957	1.411506	0.0887
0.1712	0.1977	0.974084	0.2482	0.7128	0.1020	0.883840	0.0218
0.1417	0.3001	1.034746	0.2614	0.6404	0.2010	0.943582	0.0179
0.1197	0.3995	1.094734	0.2510	0.5584	0.2992	1.004682	0.0429
0.1001	0.5004	1.156780	0.2354	0.4790	0.4004	1.068925	0.0619

Nastavak Tabele P12

0.0793	0.5994	1.219254	0.2127	0.3993	0.4995	1.133454	0.0861
0.0588	0.7018	1.285446	0.1748	0.3206	0.5992	1.199949	0.1019
0.0433	0.7983	1.348934	0.1370	0.2393	0.6997	1.268877	0.1213
0.0186	0.9020	1.420062	0.0720	0.1605	0.7998	1.339580	0.1095
0.3607	0.0993	0.905562	0.2148	0.0809	0.8963	1.410088	0.0863
0.3199	0.2003	0.964564	0.2349	0.8111	0.0999	0.876597	-0.0636
0.2776	0.3061	1.027894	0.2427	0.7185	0.1999	0.938013	-0.0543
0.2384	0.3991	1.085106	0.2383	0.6289	0.2991	1.000288	-0.0435
0.1979	0.5010	1.149034	0.2311	0.5411	0.3998	1.064458	-0.0020
0.1587	0.5980	1.211497	0.2117	0.4498	0.5004	1.130614	0.0282
0.1217	0.6993	1.278317	0.1706	0.3579	0.6015	1.198647	0.0710
0.0803	0.7980	1.345434	0.1330	0.2669	0.6985	1.266105	0.0936
0.0410	0.8957	1.413555	0.0837	0.1791	0.7991	1.337448	0.1079
$T = 298.15 \text{ K}$							
0.0906	0.0999	0.920323	0.1823	0.5389	0.1010	0.889639	0.1465
0.0787	0.2010	0.977401	0.2154	0.4856	0.1974	0.946317	0.1571
0.0698	0.2996	1.034161	0.2314	0.4200	0.2995	1.008370	0.1698
0.0591	0.4023	1.094806	0.2321	0.3606	0.4006	1.070941	0.1752
0.0547	0.4980	1.152171	0.2230	0.3000	0.4971	1.132428	0.1761
0.0405	0.5972	1.213828	0.2050	0.2388	0.5967	1.197330	0.1716
0.0294	0.6816	1.267429	0.1744	0.1801	0.6987	1.265158	0.1680
0.0203	0.7851	1.334382	0.1259	0.1207	0.7997	1.334546	0.1356
0.1793	0.0999	0.913529	0.2285	0.0615	0.8957	1.402612	0.0939
0.1712	0.1977	0.968308	0.2539	0.7128	0.1020	0.879232	0.0314
0.1417	0.3001	1.028567	0.2647	0.6404	0.2010	0.938529	0.0295
0.1197	0.3995	1.088148	0.2530	0.5584	0.2992	0.999147	0.0563
0.1001	0.5004	1.149765	0.2366	0.4790	0.4004	1.062876	0.0767
0.0793	0.5994	1.211791	0.2135	0.3993	0.4995	1.126878	0.1013
0.0588	0.7018	1.277502	0.1751	0.3206	0.5992	1.192843	0.1154
0.0433	0.7983	1.340520	0.1374	0.2393	0.6997	1.261173	0.1350
0.0186	0.9020	1.411118	0.0713	0.1605	0.7998	1.331279	0.1212
0.3607	0.0993	0.900395	0.2262	0.0809	0.8963	1.401202	0.0939
0.3199	0.2003	0.959004	0.2444	0.8111	0.0999	0.872028	-0.0423
0.2776	0.3061	1.021894	0.2510	0.7185	0.1999	0.933090	-0.0430
0.2384	0.3991	1.078697	0.2456	0.6289	0.2991	0.994861	-0.0292
0.1979	0.5010	1.142154	0.2379	0.5411	0.3998	1.058510	0.0139
0.1587	0.5980	1.204145	0.2180	0.4498	0.5004	1.124115	0.0448
0.1217	0.6993	1.270448	0.1769	0.3579	0.6015	1.191589	0.0861
0.0803	0.7980	1.337037	0.1385	0.2669	0.6985	1.258449	0.1086
0.0410	0.8957	1.404643	0.0865	0.1791	0.7991	1.329180	0.1207
$T = 303.15 \text{ K}$							
0.0906	0.0999	0.914732	0.1879	0.5389	0.1010	0.884667	0.1641
0.0787	0.2010	0.971460	0.2174	0.4856	0.1974	0.940990	0.1697
0.0698	0.2996	1.027856	0.2314	0.4200	0.2995	1.002577	0.1823
0.0591	0.4023	1.088107	0.2299	0.3606	0.4006	1.064666	0.1880
0.0547	0.4980	1.145079	0.2209	0.3000	0.4971	1.125667	0.1886



Nastavak Tabele P12

0.0405	0.5972	1.206307	0.2018	0.2388	0.5967	1.190050	0.1834
0.0294	0.6816	1.259585	0.1668	0.1801	0.6987	1.257328	0.1789
0.0203	0.7851	1.325972	0.1235	0.1207	0.7997	1.326143	0.1450
0.1793	0.0999	0.908057	0.2379	0.0615	0.8957	1.393672	0.0993
0.1712	0.1977	0.962500	0.2606	0.7128	0.1020	0.874591	0.0418
0.1417	0.3001	1.022349	0.2694	0.6404	0.2010	0.933435	0.0424
0.1197	0.3995	1.081525	0.2559	0.5584	0.2992	0.993567	0.0712
0.1001	0.5004	1.142715	0.2382	0.4790	0.4004	1.056782	0.0927
0.0793	0.5994	1.204292	0.2145	0.3993	0.4995	1.120257	0.1176
0.0588	0.7018	1.269511	0.1762	0.3206	0.5992	1.185676	0.1309
0.0433	0.7983	1.332062	0.1382	0.2393	0.6997	1.253417	0.1498
0.0186	0.9020	1.402114	0.0715	0.1605	0.7998	1.322923	0.1339
0.3607	0.0993	0.895193	0.2392	0.0809	0.8963	1.392267	0.1020
0.3199	0.2003	0.953408	0.2552	0.8111	0.0999	0.867437	-0.0214
0.2776	0.3061	1.015857	0.2604	0.7185	0.1999	0.928130	-0.0308
0.2384	0.3991	1.072249	0.2539	0.6289	0.2991	0.989396	-0.0141
0.1979	0.5010	1.135231	0.2458	0.5411	0.3998	1.052519	0.0309
0.1587	0.5980	1.196748	0.2253	0.4498	0.5004	1.117570	0.0624
0.1217	0.6993	1.262540	0.1835	0.3579	0.6015	1.184465	0.1035
0.0803	0.7980	1.328606	0.1436	0.2669	0.6985	1.250742	0.1246
0.0410	0.8957	1.395692	0.0892	0.1791	0.7991	1.320855	0.1347
$T = 308.15 \text{ K}$							
0.0906	0.0999	0.909117	0.1942	0.5389	0.1010	0.879675	0.1814
0.0787	0.2010	0.965493	0.2199	0.4856	0.1974	0.935620	0.1838
0.0698	0.2996	1.021520	0.2320	0.4200	0.2995	0.996737	0.1964
0.0591	0.4023	1.081372	0.2285	0.3606	0.4006	1.058343	0.2022
0.0547	0.4980	1.137945	0.2197	0.3000	0.4971	1.118863	0.2019
0.0405	0.5972	1.198745	0.1991	0.2388	0.5967	1.182714	0.1966
0.0294	0.6816	1.251642	0.1631	0.1801	0.6987	1.249442	0.1910
0.0203	0.7851	1.317514	0.1215	0.1207	0.7997	1.317691	0.1550
0.1793	0.0999	0.902557	0.2484	0.0615	0.8957	1.384679	0.1051
0.1712	0.1977	0.956662	0.2683	0.7128	0.1020	0.869909	0.0534
0.1417	0.3001	1.016091	0.2755	0.6404	0.2010	0.928301	0.0563
0.1197	0.3995	1.074857	0.2603	0.5584	0.2992	0.987945	0.0871
0.1001	0.5004	1.135626	0.2404	0.4790	0.4004	1.050635	0.1104
0.0793	0.5994	1.196753	0.2160	0.3993	0.4995	1.113580	0.1355
0.0588	0.7018	1.261470	0.1781	0.3206	0.5992	1.178458	0.1474
0.0433	0.7983	1.323565	0.1388	0.2393	0.6997	1.245604	0.1659
0.0186	0.9020	1.393049	0.0726	0.1605	0.7998	1.314511	0.1476
0.3607	0.0993	0.889956	0.2536	0.0809	0.8963	1.383274	0.1109
0.3199	0.2003	0.947777	0.2670	0.8111	0.0999	0.862844	-0.0032
0.2776	0.3061	1.009777	0.2713	0.7185	0.1999	0.923125	-0.0174
0.2384	0.3991	1.065755	0.2636	0.6289	0.2991	0.983881	0.0025
0.1979	0.5010	1.128264	0.2545	0.5411	0.3998	1.046476	0.0493
0.1587	0.5980	1.189307	0.2333	0.4498	0.5004	1.110971	0.0814
0.1217	0.6993	1.254576	0.1913	0.3579	0.6015	1.177285	0.1222

## Nastavak Tabele P12

0.0803	0.7980	1.320130	0.1490	0.2669	0.6985	1.242979	0.1417
0.0410	0.8957	1.386690	0.0921	0.1791	0.7991	1.312472	0.1497
$T = 313.15 \text{ K}$							
0.0906	0.0999	0.903502	0.1992	0.5389	0.1010	0.874675	0.1969
0.0787	0.2010	0.959515	0.2220	0.4856	0.1974	0.930242	0.1962
0.0698	0.2996	1.015161	0.2332	0.4200	0.2995	0.990878	0.2099
0.0591	0.4023	1.074634	0.2259	0.3606	0.4006	1.052000	0.2159
0.0547	0.4980	1.130771	0.2200	0.3000	0.4971	1.112032	0.2153
0.0405	0.5972	1.191159	0.1966	0.2388	0.5967	1.175356	0.2096
0.0294	0.6816	1.243655	0.1609	0.1801	0.6987	1.241530	0.2032
0.0203	0.7851	1.309028	0.1198	0.1207	0.7997	1.309220	0.1646
0.1793	0.0999	0.897040	0.2590	0.0615	0.8957	1.375665	0.1108
0.1712	0.1977	0.950816	0.2750	0.7128	0.1020	0.865196	0.0652
0.1417	0.3001	1.009798	0.2831	0.6404	0.2010	0.923143	0.0696
0.1197	0.3995	1.068159	0.2655	0.5584	0.2992	0.982294	0.1028
0.1001	0.5004	1.128523	0.2421	0.4790	0.4004	1.044466	0.1274
0.0793	0.5994	1.189204	0.2166	0.3993	0.4995	1.106856	0.1549
0.0588	0.7018	1.253412	0.1797	0.3206	0.5992	1.171241	0.1618
0.0433	0.7983	1.315067	0.1380	0.2393	0.6997	1.237743	0.1834
0.0186	0.9020	1.383942	0.0747	0.1605	0.7998	1.306053	0.1627
0.3607	0.0993	0.884700	0.2679	0.0809	0.8963	1.374240	0.1208
0.3199	0.2003	0.942119	0.2794	0.8111	0.0999	0.858299	0.0064
0.2776	0.3061	1.003675	0.2821	0.7185	0.1999	0.918097	-0.0049
0.2384	0.3991	1.059428	0.2575	0.6289	0.2991	0.978341	0.0184
0.1979	0.5010	1.121270	0.2636	0.5411	0.3998	1.040403	0.0676
0.1587	0.5980	1.181862	0.2398	0.4498	0.5004	1.104344	0.1003
0.1217	0.6993	1.246591	0.1989	0.3579	0.6015	1.170087	0.1402
0.0803	0.7980	1.311632	0.1543	0.2669	0.6985	1.235174	0.1599
0.0410	0.8957	1.377672	0.0946	0.1791	0.7991	1.304056	0.1652

## 2-Butanol (1) + Hloroform (2) + Benzen (3)

$T = 288.15 \text{ K}$							
0.0893	0.1023	0.931552	0.2720	0.5393	0.1003	0.895121	0.3429
0.0776	0.2164	0.996741	0.3111	0.4785	0.2021	0.956122	0.3502
0.0707	0.2988	1.044779	0.3230	0.4192	0.3000	1.015938	0.3842
0.0592	0.4006	1.105856	0.3147	0.3617	0.3993	1.078192	0.3869
0.0489	0.5008	1.167292	0.2977	0.2988	0.4987	1.142735	0.3713
0.0409	0.6001	1.229395	0.2742	0.2415	0.5993	1.208944	0.3693
0.0318	0.6986	1.292917	0.2216	0.1819	0.6937	1.273769	0.3268
0.0211	0.7895	1.353366	0.1541	0.1218	0.7944	1.344587	0.2694
0.1793	0.0998	0.922232	0.3590	0.0615	0.8960	1.418831	0.1629
0.1589	0.1999	0.979863	0.3883	0.7190	0.1002	0.883928	0.1023
0.1410	0.3031	1.040533	0.3954	0.6412	0.1996	0.943235	0.2342
0.1207	0.3985	1.098484	0.3765	0.5596	0.3001	1.005985	0.2621
0.0994	0.5001	1.161692	0.3439	0.4795	0.4012	1.070227	0.3151
0.0798	0.6005	1.225342	0.3202	0.3981	0.4995	1.135048	0.3282
0.0620	0.6968	1.288205	0.2606	0.3200	0.6006	1.202867	0.3472

Nastavak Tabele P12

0.0388	0.8009	1.358452	0.1862	0.2374	0.7020	1.273342	0.3522
0.0191	0.9009	1.427480	0.1065	0.1563	0.8031	1.346520	0.2842
0.3452	0.1017	0.910081	0.4001	0.0806	0.8970	1.417156	0.1833
0.3190	0.1999	0.966860	0.4079	0.8103	0.1000	0.877077	0.0943
0.2808	0.2987	1.026137	0.4190	0.7182	0.2020	0.939813	0.1193
0.2379	0.3933	1.084890	0.4125	0.6298	0.2995	1.000621	0.2050
0.1893	0.5052	1.156072	0.3926	0.5383	0.4010	1.066006	0.2465
0.1583	0.5986	1.216195	0.3680	0.4497	0.4984	1.130133	0.3085
0.1187	0.6980	1.282903	0.2995	0.3602	0.6008	1.199718	0.3192
0.0788	0.7992	1.352448	0.2403	0.2698	0.6978	1.267890	0.3298
0.0387	0.9007	1.424872	0.1311	0.1753	0.8042	1.345141	0.2934

T = 293.15 K

0.0893	0.1023	0.925918	0.2819	0.5393	0.1003	0.889950	0.3715
0.0776	0.2164	0.990728	0.3162	0.4785	0.2021	0.950526	0.3779
0.0707	0.2988	1.038476	0.3257	0.4192	0.3000	1.009906	0.4120
0.0592	0.4006	1.099173	0.3149	0.3617	0.3993	1.071709	0.4137
0.0489	0.5008	1.160217	0.2961	0.2988	0.4987	1.135783	0.3959
0.0409	0.6001	1.221908	0.2719	0.2415	0.5993	1.201517	0.3913
0.0318	0.6986	1.284951	0.2218	0.1819	0.6937	1.265880	0.3448
0.0211	0.7895	1.345011	0.1518	0.1218	0.7944	1.336186	0.2835
0.1793	0.0998	0.916679	0.3757	0.0615	0.8960	1.409935	0.1699
0.1589	0.1999	0.973957	0.4015	0.7190	0.1002	0.878695	0.1596
0.1410	0.3031	1.034248	0.4058	0.6412	0.1996	0.937839	0.2648
0.1207	0.3985	1.091818	0.3852	0.5596	0.3001	1.000103	0.2944
0.0994	0.5001	1.154616	0.3499	0.4795	0.4012	1.063872	0.3461
0.0798	0.6005	1.217838	0.3248	0.3981	0.4995	1.128149	0.3615
0.0620	0.6968	1.280276	0.2635	0.3200	0.6006	1.195480	0.3763
0.0388	0.8009	1.350045	0.1867	0.2374	0.7020	1.265502	0.3724
0.0191	0.9009	1.418567	0.1068	0.1563	0.8031	1.338078	0.3033
0.3452	0.1017	0.904682	0.4248	0.0806	0.8970	1.408243	0.1939
0.3190	0.1999	0.961099	0.4303	0.8103	0.1000	0.872297	0.1173
0.2808	0.2987	1.019980	0.4394	0.7182	0.2020	0.934505	0.1499
0.2379	0.3933	1.078327	0.4310	0.6298	0.2995	0.994821	0.2391
0.1893	0.5052	1.149015	0.4086	0.5383	0.4010	1.059688	0.2816
0.1583	0.5986	1.208723	0.3821	0.4497	0.4984	1.123309	0.3432
0.1187	0.6980	1.274959	0.3111	0.3602	0.6008	1.192367	0.3508
0.0788	0.7992	1.344027	0.2482	0.2698	0.6978	1.260006	0.3582
0.0387	0.9007	1.415954	0.1346	0.1753	0.8042	1.336771	0.3104

T = 298.15 K

0.0893	0.1023	0.920260	0.2926	0.5393	0.1003	0.884729	0.4012
0.0776	0.2164	0.984693	0.3216	0.4785	0.2021	0.944873	0.4071
0.0707	0.2988	1.032148	0.3287	0.4192	0.3000	1.003828	0.4401
0.0592	0.4006	1.092462	0.3152	0.3617	0.3993	1.065180	0.4407
0.0489	0.5008	1.153108	0.2947	0.2988	0.4987	1.128779	0.4212
0.0409	0.6001	1.214384	0.2698	0.2415	0.5993	1.194033	0.4141
0.0318	0.6986	1.276985	0.2196	0.1819	0.6937	1.257927	0.3641

Nastavak Tabele P12

0.0211	0.7895	1.336611	0.1496	0.1218	0.7944	1.327738	0.2976
0.1793	0.0998	0.911092	0.3937	0.0615	0.8960	1.400984	0.1772
0.1589	0.1999	0.968017	0.4158	0.7190	0.1002	0.873353	0.2234
0.1410	0.3031	1.027927	0.4170	0.6412	0.1996	0.932382	0.2963
0.1207	0.3985	1.085120	0.3941	0.5596	0.3001	0.994163	0.3273
0.0994	0.5001	1.147505	0.3562	0.4795	0.4012	1.057460	0.3775
0.0798	0.6005	1.210301	0.3292	0.3981	0.4995	1.121199	0.3950
0.0620	0.6968	1.272305	0.2665	0.3200	0.6006	1.188035	0.4060
0.0388	0.8009	1.341587	0.1877	0.2374	0.7020	1.257581	0.3947
0.0191	0.9009	1.409611	0.1069	0.1563	0.8031	1.329588	0.3223
0.3452	0.1017	0.899239	0.4509	0.0806	0.8970	1.399286	0.2040
0.3190	0.1999	0.955298	0.4535	0.8103	0.1000	0.867446	0.1417
0.2808	0.2987	1.013777	0.4608	0.7182	0.2020	0.929136	0.1809
0.2379	0.3933	1.071718	0.4503	0.6298	0.2995	0.988963	0.2734
0.1893	0.5052	1.141915	0.4249	0.5383	0.4010	1.053311	0.3171
0.1583	0.5986	1.201209	0.3963	0.4497	0.4984	1.116431	0.3780
0.1187	0.6980	1.266975	0.3226	0.3602	0.6008	1.184951	0.3832
0.0788	0.7992	1.335564	0.2559	0.2698	0.6978	1.252075	0.3865
0.0387	0.9007	1.406992	0.1380	0.1753	0.8042	1.328324	0.3290
$T = 303.15 \text{ K}$							
0.0893	0.1023	0.914583	0.3033	0.5393	0.1003	0.879454	0.4310
0.0776	0.2164	0.978633	0.3271	0.4785	0.2021	0.939165	0.4365
0.0707	0.2988	1.025793	0.3316	0.4192	0.3000	0.997696	0.4684
0.0592	0.4006	1.085723	0.3155	0.3617	0.3993	1.058598	0.4678
0.0489	0.5008	1.145967	0.2934	0.2988	0.4987	1.121725	0.4464
0.0409	0.6001	1.206821	0.2680	0.2415	0.5993	1.186494	0.4374
0.0318	0.6986	1.268979	0.2175	0.1819	0.6937	1.249926	0.3833
0.0211	0.7895	1.328166	0.1478	0.1218	0.7944	1.319243	0.3117
0.1793	0.0998	0.905475	0.4122	0.0615	0.8960	1.391991	0.1843
0.1589	0.1999	0.962043	0.4305	0.7190	0.1002	0.868027	0.2795
0.1410	0.3031	1.021571	0.4286	0.6412	0.1996	0.926864	0.3274
0.1207	0.3985	1.078387	0.4031	0.5596	0.3001	0.988166	0.3597
0.0994	0.5001	1.140353	0.3629	0.4795	0.4012	1.050977	0.4097
0.0798	0.6005	1.202722	0.3339	0.3981	0.4995	1.114192	0.4283
0.0620	0.6968	1.264295	0.2695	0.3200	0.6006	1.180536	0.4355
0.0388	0.8009	1.333087	0.1887	0.2374	0.7020	1.249577	0.4189
0.0191	0.9009	1.400602	0.1075	0.1563	0.8031	1.321050	0.3411
0.3452	0.1017	0.893757	0.4772	0.0806	0.8970	1.390282	0.2141
0.3190	0.1999	0.949449	0.4775	0.8103	0.1000	0.862525	0.1656
0.2808	0.2987	1.007531	0.4825	0.7182	0.2020	0.923705	0.2109
0.2379	0.3933	1.065060	0.4703	0.6298	0.2995	0.983042	0.3072
0.1893	0.5052	1.134768	0.4417	0.5383	0.4010	1.046873	0.3521
0.1583	0.5986	1.193649	0.4107	0.4497	0.4984	1.109495	0.4123
0.1187	0.6980	1.258942	0.3344	0.3602	0.6008	1.177476	0.4156
0.0788	0.7992	1.327058	0.2635	0.2698	0.6978	1.244090	0.4154
0.0387	0.9007	1.397981	0.1415	0.1753	0.8042	1.319796	0.3493

Nastavak Tabele P12

T = 308.15 K							
0.0893	0.1023	0.908883	0.3140	0.5393	0.1003	0.874122	0.4607
0.0776	0.2164	0.972545	0.3328	0.4785	0.2021	0.933401	0.4658
0.0707	0.2988	1.019409	0.3347	0.4192	0.3000	0.991502	0.4970
0.0592	0.4006	1.078953	0.3157	0.3617	0.3993	1.051955	0.4952
0.0489	0.5008	1.138786	0.2924	0.2988	0.4987	1.114606	0.4723
0.0409	0.6001	1.199213	0.2666	0.2415	0.5993	1.178898	0.4607
0.0318	0.6986	1.260922	0.2160	0.1819	0.6937	1.241866	0.4029
0.0211	0.7895	1.319672	0.1462	0.1218	0.7944	1.310697	0.3256
0.1793	0.0998	0.899823	0.4314	0.0615	0.8960	1.382942	0.1915
0.1589	0.1999	0.956036	0.4455	0.7190	0.1002	0.862811	0.3168
0.1410	0.3031	1.015181	0.4402	0.6412	0.1996	0.921277	0.3581
0.1207	0.3985	1.071616	0.4124	0.5596	0.3001	0.982107	0.3912
0.0994	0.5001	1.133160	0.3698	0.4795	0.4012	1.044424	0.4419
0.0798	0.6005	1.195102	0.3385	0.3981	0.4995	1.107137	0.4603
0.0620	0.6968	1.256237	0.2728	0.3200	0.6006	1.172976	0.4648
0.0388	0.8009	1.324532	0.1902	0.2374	0.7020	1.241496	0.4442
0.0191	0.9009	1.391541	0.1082	0.1563	0.8031	1.312458	0.3598
0.3452	0.1017	0.888232	0.5037	0.0806	0.8970	1.381222	0.2243
0.3190	0.1999	0.943554	0.5016	0.8103	0.1000	0.857531	0.1887
0.2808	0.2987	1.001237	0.5043	0.7182	0.2020	0.918203	0.2401
0.2379	0.3933	1.058352	0.4907	0.6298	0.2995	0.977052	0.3402
0.1893	0.5052	1.127568	0.4590	0.5383	0.4010	1.040367	0.3866
0.1583	0.5986	1.186042	0.4251	0.4497	0.4984	1.102490	0.4464
0.1187	0.6980	1.250860	0.3463	0.3602	0.6008	1.169940	0.4476
0.0788	0.7992	1.318502	0.2711	0.2698	0.6978	1.236041	0.4427
0.0387	0.9007	1.388915	0.1453	0.1753	0.8042	1.311198	0.3704
T = 313.15 K							
0.0893	0.1023	0.903171	0.3242	0.5393	0.1003	0.868750	0.4889
0.0776	0.2164	0.966455	0.3368	0.4785	0.2021	0.927600	0.4934
0.0707	0.2988	1.013021	0.3362	0.4192	0.3000	0.985265	0.5248
0.0592	0.4006	1.072176	0.3145	0.3617	0.3993	1.045280	0.5212
0.0489	0.5008	1.131574	0.2920	0.2988	0.4987	1.107438	0.4984
0.0409	0.6001	1.191578	0.2654	0.2415	0.5993	1.171261	0.4839
0.0318	0.6986	1.252827	0.2154	0.1819	0.6973	1.233764	0.4227
0.0211	0.7895	1.311138	0.1455	0.1218	0.7944	1.302105	0.3403
0.1793	0.0998	0.894157	0.4494	0.0615	0.8960	1.373846	0.1998
0.1589	0.1999	0.950011	0.4598	0.7190	0.1002	0.857625	0.3434
0.1410	0.3031	1.008778	0.4506	0.6412	0.1996	0.915678	0.3833
0.1207	0.3985	1.064826	0.4209	0.5596	0.3001	0.975988	0.4223
0.0994	0.5001	1.125932	0.3773	0.4795	0.4012	1.037828	0.4726
0.0798	0.6005	1.187455	0.3431	0.3981	0.4995	1.100075	0.4883
0.0620	0.6968	1.248140	0.2768	0.3200	0.6006	1.165369	0.4939
0.0388	0.8009	1.315943	0.1922	0.2374	0.7020	1.233374	0.4693
0.0191	0.9009	1.382431	0.1104	0.1563	0.8031	1.303824	0.3787
0.3452	0.1017	0.882694	0.5275	0.0806	0.8970	1.372121	0.2351

Nastavak Tabele P12

---

0.3190	0.1999	0.937638	0.5239	0.8103	0.1000	0.852471	0.2103
0.2808	0.2987	0.994917	0.5250	0.7182	0.2020	0.912656	0.2662
0.2379	0.3933	1.051597	0.5118	0.6298	0.2995	0.971009	0.3715
0.1893	0.5052	1.120330	0.4765	0.5383	0.4010	1.033801	0.4205
0.1583	0.5986	1.178404	0.4392	0.4497	0.4984	1.095435	0.4797
0.1187	0.6980	1.242738	0.3587	0.3602	0.6008	1.162346	0.4797
0.0788	0.7992	1.309913	0.2789	0.2698	0.6978	1.227950	0.4704
0.0387	0.9007	1.379815	0.1495	0.1753	0.8042	1.302559	0.3915

---

**Tabela P13** Rezultati korelisanja dopunske molarne zapremine  $V^E$  ternarnih sistema pomoću Nagata-Tamura polinoma u temperaturnom intervalu od 288.15 do 313.15K

T/K	288.15	293.15	298.15	303.15	308.15	313.15
<b>1-Butanol (1) + Hloroform (2) + Benzen (3)</b>						
$B_0$	0.000153825	0.000192765	0.000301890	0.000456279	0.000487559	0.000764345
$B_1$	-0.001400236	-0.001469417	-0.001196975	-0.000497282	-0.000606782	0.000846175
$B_2$	-0.004986467	-0.004595174	-0.004061509	-0.003511480	-0.003115626	-0.002063474
$B_3$	0.000326288	0.001158315	0.001870931	0.001417442	0.001953750	-0.000781523
$B_4$	0.008546248	0.007256036	0.006306097	0.005629129	0.004220536	0.002233096
$B_5$	0.011299753	0.010881385	0.009545005	0.007364400	0.007620003	0.006361033
$B_6$	0.004206231	0.002605596	0.000808057	-0.000117943	-0.000932854	0.000742926
$B_7$	-0.005114154	-0.003926873	-0.003301855	-0.002780192	-0.001638295	-0.000291680
$B_8$	-0.016492352	-0.014890244	-0.012594609	-0.008915574	-0.008869510	-0.007672470
PD (%)	1.61	1.33	1.05	1.07	1.16	1.35
$\sigma$ ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ )	0.0059	0.0044	0.0035	0.0035	0.0040	0.0049
<b>2-Butanol (1) + Hloroform (2) + Benzen (3)</b>						
$B_0$	0.001104208	0.001338440	0.001720529	0.001910606	0.002081600	0.001956614
$B_1$	0.008815453	0.010784413	0.013545173	0.015280126	0.015881665	0.014745502
$B_2$	-0.006720469	-0.005924979	-0.004258923	-0.003790124	-0.002710462	-0.002830139
$B_3$	-0.013151385	-0.017185639	-0.022932686	-0.026300536	-0.027082573	-0.023815623
$B_4$	0.015597272	0.014096904	0.010986349	0.010877616	0.008283174	0.008173406
$B_5$	0.003817361	0.000021587	-0.005936963	-0.010227017	-0.011547688	-0.010755459
$B_6$	0.009405530	0.010548209	0.012540126	0.013256730	0.013394619	0.011031612
$B_7$	-0.010538530	-0.009178461	-0.006581219	-0.006469226	-0.004348863	-0.004416439
$B_8$	-0.013300074	-0.005269863	0.006147340	0.014698378	0.016521588	0.015224600
PD (%)	1.78	1.48	1.26	1.02	1.02	0.96
$\sigma$ ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ )	0.0124	0.0095	0.0072	0.0062	0.0064	0.0064

**Tabela P14** Rezultati korelisanja  $V^E$  binarnih sistema pomoću temperaturno nezavisnih PRSV CEOS i CEOS/ $G^E$  modela

$T$ (K)	$k_{ij,1}$	$l_{ij,1}$	$m_{ij,1}$	$\Delta g_{12,1}$ (J·mol <sup>-1</sup> )	$\Delta g_{21,1}$ (J·mol <sup>-1</sup> )	$PD$ (%)	$\sigma$ (cm <sup>3</sup> ·mol <sup>-1</sup> )
<b>1-Butanol (1) + Hloroform (2)</b>							
288.15							
vdW1-2	0.118095		0.004616			5.02	0.0077
vdW1-3	0.161222	0.016781	0.011121			1.80	0.0031
TCBT-2				-0.227514·10 <sup>4</sup>	0.358796·10 <sup>4</sup>	11.95	0.0191
TCBT-3	-0.102056			-0.208666·10 <sup>4</sup>	-0.166802·10 <sup>4</sup>	1.45	0.0026
293.15							
vdW1-2	0.116317		0.004616			5.51	0.0079
vdW1-3	0.158348	0.016140	0.011180			2.18	0.0036
TCBT-2				-0.228780·10 <sup>4</sup>	0.359391·10 <sup>4</sup>	12.86	0.0190
TCBT-3	-0.103018			-0.207367·10 <sup>4</sup>	-0.164897·10 <sup>4</sup>	1.51	0.0024
298.15							
vdW1-2	0.114053		0.004507			5.94	0.0078
vdW1-3	0.153585	0.014975	0.010893			2.73	0.0040
TCBT-2				-0.228963·10 <sup>4</sup>	0.357902·10 <sup>4</sup>	13.88	0.0187
TCBT-3	-0.104831			-0.207702·10 <sup>4</sup>	-0.164153·10 <sup>4</sup>	1.69	0.0023
303.15							
vdW1-2	0.111754		0.004375			5.53	0.0078
vdW1-3	0.148987	0.013911	0.010595			2.94	0.0044
TCBT-2				-0.228586·10 <sup>4</sup>	0.355394·10 <sup>4</sup>	12.88	0.0184
TCBT-3	-0.104183			-0.203210·10 <sup>4</sup>	-0.159719·10 <sup>4</sup>	1.54	0.0025
308.15							
vdW1-2	0.109364		0.004200			4.67	0.0078
vdW1-3	0.143458	0.012562	0.010087			2.89	0.0049
TCBT-2				-0.227858·10 <sup>4</sup>	0.352440·10 <sup>4</sup>	10.90	0.0180
TCBT-3	-0.106571			-0.205027·10 <sup>4</sup>	-0.158964·10 <sup>4</sup>	1.50	0.0028
313.15							
vdW1-2	0.106399		0.003930			4.63	0.0091
vdW1-3	0.141854	0.012872	0.010266			3.23	0.0064
TCBT-2				-0.226975·10 <sup>4</sup>	0.349191·10 <sup>4</sup>	9.92	0.0185
TCBT-3	-0.106781			-0.201376·10 <sup>4</sup>	-0.156483·10 <sup>4</sup>	1.98	0.0045
288.15-313.15							
vdW1-2	0.105648		0.003265			10.32	0.0162
vdW1-3	0.078784	-0.011786	-0.00100			8.39	0.0129
TCBT-2				-0.225785·10 <sup>4</sup>	0.350293·10 <sup>4</sup>	15.22	0.0249
TCBT-3	-0.035211			0.433231·10 <sup>4</sup>	-0.366352·10 <sup>4</sup>	6.32	0.0106



Nastavak Tabele P14

1-Butanol (1) + Benzen (3)							
288.15							
vdW1-2	0.072488		0.001219		2.15	0.0054	
vdW1-3	-0.010097	-0.026079	-0.009948		1.53	0.0035	
TCBT-2				$-0.874348 \cdot 10^3$	$0.170486 \cdot 10^4$	1.31	0.0037
TCBT-3	-0.000999			$-0.959123 \cdot 10^3$	$0.176730 \cdot 10^4$	1.31	0.0036
293.15							
vdW1-2	0.073404		0.001530		2.21	0.0060	
vdW1-3	-0.114739	-0.059758	-0.023765		1.02	0.0030	
TCBT-2				$-0.927679 \cdot 10^3$	$0.175449 \cdot 10^4$	1.42	0.0042
TCBT-3	-0.001710			$-0.106730 \cdot 10^4$	$0.185799 \cdot 10^4$	1.42	0.0041
298.15							
vdW1-2	0.073769		0.001743		2.32	0.0068	
vdW1-3	-0.109752	-0.057224	-0.023889		1.08	0.0035	
TCBT-2				$-0.954670 \cdot 10^3$	$0.176918 \cdot 10^4$	1.47	0.0050
TCBT-3	-0.001058			$-0.104883 \cdot 10^4$	$0.184507 \cdot 10^4$	1.45	0.0048
303.15							
vdW1-2	0.074272		0.001979		2.43	0.0076	
vdW1-3	-0.104235	-0.054626	-0.023925		1.15	0.0040	
TCBT-2				$-0.101517 \cdot 10^4$	$0.183326 \cdot 10^4$	1.50	0.0053
TCBT-3	-0.004758			$-0.137346 \cdot 10^4$	$0.210231 \cdot 10^4$	1.50	0.0052
308.15							
vdW1-2	0.074701		0.002200		2.55	0.0085	
vdW1-3	-0.097806	-0.051798	-0.023813		1.26	0.0046	
TCBT-2				$-0.103397 \cdot 10^4$	$0.184074 \cdot 10^4$	1.59	0.0062
TCBT-3	-0.005844			$-0.150969 \cdot 10^4$	$0.223456 \cdot 10^4$	1.58	0.0058
313.15							
vdW1-2	0.074715		0.002380		2.66	0.0092	
vdW1-3	-0.100089	-0.051531	-0.024909		1.41	0.0052	
TCBT-2				$-0.105207 \cdot 10^4$	$0.184635 \cdot 10^4$	1.77	0.0072
TCBT-3	-0.006118			$-0.156877 \cdot 10^4$	$0.229562 \cdot 10^4$	1.73	0.0063
288.15-313.15							
vdW1-2	0.067754		0.000879		4.55	0.0117	
vdW1-3	0.042318	-0.009610	-0.002949		1.77	0.0056	
TCBT-2				$-0.882690 \cdot 10^3$	$0.165950 \cdot 10^4$	10.31	0.0270
TCBT-3	-0.028657			$0.226899 \cdot 10^4$	$-0.230477 \cdot 10^4$	2.76	0.0083

Nastavak Tabele P14

2-Butanol (1) + Hloroform (2)							
288.15							
vdW1-2	0.157330		0.009336			3.57	0.0134
vdW1-3	0.165829	0.002687	0.010745			3.51	0.0133
TCBT-2				-0.216506·10 <sup>4</sup>	0.344341·10 <sup>4</sup>	5.77	0.0239
TCBT-3	-0.136202			-0.265498·10 <sup>4</sup>	-0.195557·10 <sup>4</sup>	2.27	0.0095
293.15							
vdW1-2	0.149196		0.008217			3.09	0.0127
vdW1-3	0.150946	0.000539	0.008516			3.08	0.0127
TCBT-2				-0.211884·10 <sup>4</sup>	0.334900·10 <sup>4</sup>	4.64	0.0214
TCBT-3	-0.133630			-0.258695·10 <sup>4</sup>	-0.185140·10 <sup>4</sup>	2.02	0.0092
298.15							
vdW1-2	0.141093		0.007065			2.67	0.0120
vdW1-3	0.135609	-0.001640	0.006104			2.69	0.0120
TCBT-2				-0.208357·10 <sup>4</sup>	0.327828·10 <sup>4</sup>	3.70	0.0186
TCBT-3	-0.130200			-0.250362·10 <sup>4</sup>	-0.173847·10 <sup>4</sup>	1.79	0.0087
303.15							
vdW1-2	0.133827		0.006038			2.31	0.0115
vdW1-3	0.120562	-0.003850	0.003647			2.35	0.0113
TCBT-2				-0.204830·10 <sup>4</sup>	0.320851·10 <sup>4</sup>	2.97	0.0162
TCBT-3	-0.130295			-0.248438·10 <sup>4</sup>	-0.167231·10 <sup>4</sup>	1.57	0.0083
308.15							
vdW1-2	0.129037		0.005445			2.42	0.0141
vdW1-3	0.089708	-0.011107	-0.001805			2.48	0.0126
TCBT-2				-0.200590·10 <sup>4</sup>	0.312684·10 <sup>4</sup>	2.57	0.0149
TCBT-3	-0.129644			-0.244980·10 <sup>4</sup>	-0.160090·10 <sup>4</sup>	1.73	0.0112
313.15							
vdW1-2	0.121326		0.004371			1.81	0.0108
vdW1-3	0.093550	-0.007617	-0.000936			1.78	0.0098
TCBT-2				-0.195751·10 <sup>4</sup>	0.302955·10 <sup>4</sup>	1.98	0.0128
TCBT-3	-0.123571			-0.232659·10 <sup>4</sup>	-0.145845·10 <sup>4</sup>	1.19	0.0074
288.15-313.15							
vdW1-2	0.125487		0.004511			5.14	0.0223
vdW1-3	0.095341	-0.011793	-0.000739			3.46	0.0164
TCBT-2				-0.203153·10 <sup>4</sup>	0.317299·10 <sup>4</sup>	4.12	0.0208
TCBT-3	0.006397			-0.176685·10 <sup>4</sup>	0.304956·10 <sup>4</sup>	4.09	0.0196

Nastavak Tabele P14

2-Butanol (1) + Benzen (3)							
288.15							
vdW1-2	0.095909		0.003206		1.57	0.0096	
vdW1-3	-0.091403	-0.043316	-0.023293		0.81	0.0054	
TCBT-2				$-0.966054 \cdot 10^3$	$0.170593 \cdot 10^4$	1.01	0.0065
TCBT-3	-0.060945			$-0.802640 \cdot 10^3$	$-0.116020 \cdot 10^4$	0.96	0.0070
293.15							
vdW1-2	0.093416		0.002899		1.70	0.0111	
vdW1-3	-0.079994	-0.038873	-0.022653		1.01	0.0067	
TCBT-2				$-0.935304 \cdot 10^3$	$0.165643 \cdot 10^4$	1.13	0.0078
TCBT-3	-0.060678			$-0.779650 \cdot 10^3$	$-0.113216 \cdot 10^4$	1.11	0.0082
298.15							
vdW1-2	0.090478		0.002498		1.84	0.0127	
vdW1-3	-0.063524	-0.033468	-0.021177		1.14	0.0079	
TCBT-2				$-0.895157 \cdot 10^3$	$0.159507 \cdot 10^4$	1.19	0.0092
TCBT-3	-0.013166			$-0.202209 \cdot 10^4$	$0.264741 \cdot 10^4$	1.16	0.0080
303.15							
vdW1-2	0.087570		0.002093		1.98	0.0143	
vdW1-3	-0.051377	-0.029299	-0.020150		1.23	0.0091	
TCBT-2				$-0.866852 \cdot 10^3$	$0.155124 \cdot 10^4$	1.27	0.0105
TCBT-3	-0.013652			$-0.201655 \cdot 10^4$	$0.260747 \cdot 10^4$	1.18	0.0094
308.15							
vdW1-2	0.084988		0.001741		2.12	0.0922	
vdW1-3	-0.043596	-0.026331	-0.019656		1.37	0.0104	
TCBT-2				$-0.827853 \cdot 10^3$	$0.149367 \cdot 10^4$	1.39	0.0122
TCBT-3	-0.024679			$-0.293235 \cdot 10^4$	$0.377273 \cdot 10^4$	1.17	0.0083
313.15							
vdW1-2	0.082435		0.001426		2.18	0.0172	
vdW1-3	-0.039472	-0.024168	-0.019627		1.47	0.0115	
TCBT-2				$-0.754468 \cdot 10^3$	$0.139036 \cdot 10^4$	1.51	0.0142
TCBT-3	-0.024964			$-0.293049 \cdot 10^4$	$0.374324 \cdot 10^4$	1.12	0.0089
288.15-313.15							
vdW1-2	0.082976		0.001328		1.92	0.0147	
vdW1-3	0.068739	-0.005014	-0.001017		1.86	0.0285	
TCBT-2				$-0.891459 \cdot 10^3$	$0.158666 \cdot 10^4$	1.98	0.0130
TCBT-3	-0.033999			$0.383900 \cdot 10^4$	$-0.322962 \cdot 10^4$	1.39	0.0100

Nastavak Tabele P14

Dimetilfталat (1) + 1-Butanol (2)							
288.15							
vdW1-2	-0.053150		-0.070972			1.87	0.0033
vdW1-3	0.015512	0.029323	-0.065328			1.39	0.0026
TCBT-2				$-0.142198 \cdot 10^4$	$0.182445 \cdot 10^4$	2.20	0.0043
TCBT-3	0.050742			$-0.253409 \cdot 10^3$	$0.528494 \cdot 10^4$	1.21	0.0026
293.15							
vdW1-2	-0.050322		-0.071051			1.89	0.0031
vdW1-3	0.009081	0.025816	-0.066023			1.40	0.0025
TCBT-2				$-0.138246 \cdot 10^4$	$0.172002 \cdot 10^4$	2.35	0.0042
TCBT-3	-0.126409			$-0.578560 \cdot 10^4$	$-0.224343 \cdot 10^3$	1.00	0.0022
298.15							
vdW1-2	-0.047017		-0.071099			1.72	0.0025
vdW1-3	-0.007299	0.017570	-0.067651			1.30	0.0022
TCBT-2				$-0.133786 \cdot 10^4$	$0.161634 \cdot 10^4$	2.30	0.0036
TCBT-3	-0.129127			$-0.585012 \cdot 10^4$	$-0.223434 \cdot 10^3$	1.18	0.0024
303.15							
vdW1-2	-0.043541		-0.071132			1.64	0.0021
vdW1-3	-0.014821	0.012930	-0.068567			1.30	0.0020
TCBT-2				$-0.127977 \cdot 10^4$	$0.150007 \cdot 10^4$	2.38	0.0034
TCBT-3	-0.130093			$-0.587432 \cdot 10^4$	$-0.176920 \cdot 10^3$	1.05	0.0019
308.15							
vdW1-2	-0.040201		-0.071181			1.70	0.0020
vdW1-3	-0.020720	0.008922	-0.069389			1.40	0.0019
TCBT-2				$-0.123900 \cdot 10^4$	$0.141521 \cdot 10^4$	2.58	0.0031
TCBT-3	-0.131255			$-0.590022 \cdot 10^4$	$-0.134811 \cdot 10^3$	1.27	0.0017
313.15							
vdW1-2	-0.036565		-0.071196			1.59	0.0017
vdW1-3	-0.033820	0.001279	-0.070937			1.55	0.0017
TCBT-2				$-0.115748 \cdot 10^4$	$0.128109 \cdot 10^4$	2.54	0.0028
TCBT-3	-0.133785			$-0.594959 \cdot 10^4$	$-0.130501 \cdot 10^3$	1.32	0.0017
318.15							
vdW1-2	-0.032467		-0.071190			1.57	0.0016
vdW1-3	-0.041309	-0.004192	-0.072049			1.65	0.0016
TCBT-2				$-0.118787 \cdot 10^4$	$0.130320 \cdot 10^4$	2.64	0.0023
TCBT-3	-0.135529			$-0.597812 \cdot 10^4$	$-0.106881 \cdot 10^3$	1.57	0.0015
323.15							
vdW1-2	-0.029081		-0.071228			1.82	0.0016
vdW1-3	-0.047306	-0.008783	-0.073049			1.90	0.0015
TCBT-2				$0.194997 \cdot 10^3$	$-0.260759 \cdot 10^3$	2.38	0.0018
TCBT-3	-0.137299			$-0.600600 \cdot 10^4$	$-0.821194 \cdot 10^2$	2.19	0.0016
288.15-323.15							
vdW1-2	-0.023977		-0.069552			38.00	0.0438
vdW1-3	0.078256	0.053791	-0.059885			8.63	0.0095
TCBT-2				$-0.450201 \cdot 10^2$	$0.106749 \cdot 10^6$	31.79	0.0515
TCBT-3	-0.050885			$-0.455943 \cdot 10^4$	$0.324673 \cdot 10^4$	10.08	0.0129

Nastavak Tabele P14

Dimetilfталat (1) + 2-Butanol (2)							
288.15							
vdW1-2	-0.031605		-0.075505			3.19	0.0006
vdW1-3	-0.045899	-0.007358	-0.076692			2.34	0.0004
TCBT-2				$0.980681 \cdot 10^3$	$-0.879851 \cdot 10^3$	7.88	0.0018
TCBT-3	0.003701			$-0.128547 \cdot 10^4$	$0.181510 \cdot 10^4$	5.43	0.0010
293.15							
vdW1-2	-0.027504		-0.075602			1.84	0.0007
vdW1-3	-0.043204	-0.008221	-0.076949			0.72	0.0003
TCBT-2				$0.121558 \cdot 10^4$	$-0.106856 \cdot 10^4$	4.43	0.0017
TCBT-3	0.000436			$-0.301587 \cdot 10^3$	$0.327007 \cdot 10^3$	2.21	0.0009
298.15							
vdW1-2	-0.023487		-0.075679			1.76	0.0009
vdW1-3	-0.040848	-0.009243	-0.077220			0.86	0.0005
TCBT-2				$0.737114 \cdot 10^3$	$-0.692682 \cdot 10^3$	4.19	0.0023
TCBT-3	0.000393			$0.929894 \cdot 10^2$	$-0.858818 \cdot 10^2$	1.28	0.0009
303.15							
vdW1-2	-0.019771		-0.075763			1.74	0.0014
vdW1-3	-0.033794	-0.007585	-0.077051			1.67	0.0012
TCBT-2				$0.122421 \cdot 10^4$	$-0.108537 \cdot 10^4$	2.32	0.0018
TCBT-3	0.000368			$0.110564 \cdot 10^3$	$-0.106986 \cdot 10^3$	1.75	0.0014
308.15							
vdW1-2	-0.016685		-0.075862			1.57	0.0014
vdW1-3	-0.023023	-0.003481	-0.076466			1.47	0.0013
TCBT-2				$0.118075 \cdot 10^4$	$-0.105597 \cdot 10^4$	1.76	0.0019
TCBT-3	0.000312			$0.118765 \cdot 10^3$	$-0.120425 \cdot 10^3$	1.37	0.0015
313.15							
vdW1-2	-0.013830		-0.075960			1.67	0.0016
vdW1-3	-0.013146	0.000381	-0.075893			1.67	0.0016
TCBT-2				$0.112497 \cdot 10^4$	$-0.101509 \cdot 10^4$	1.96	0.0022
TCBT-3	0.000085			$0.922912 \cdot 10^3$	$-0.849360 \cdot 10^3$	1.81	0.0020
318.15							
vdW1-2	-0.011499		-0.076068			2.04	0.0020
vdW1-3	-0.002566	0.005046	-0.075157			1.98	0.0019
TCBT-2				$0.104063 \cdot 10^4$	$-0.950328 \cdot 10^3$	2.60	0.0027
TCBT-3	0.003241			$-0.141231 \cdot 10^4$	$0.188410 \cdot 10^4$	2.01	0.0019
323.15							
vdW1-2	-0.009211		-0.076174			2.36	0.0024
vdW1-3	0.003634	0.007356	-0.074819			2.23	0.0021
TCBT-2				$0.100523 \cdot 10^4$	$-0.921756 \cdot 10^3$	2.81	0.0031
TCBT-3	0.002852			$-0.142034 \cdot 10^4$	$0.186179 \cdot 10^4$	2.32	0.0023
288.15-323.15							
vdW1-2	-0.005453		-0.074532			vv	0.0511
vdW1-3	0.101825	0.064757	-0.063954			32.33	0.0158
TCBT-2				$0.196046 \cdot 10^3$	$-0.208223 \cdot 10^3$	12.54	0.0055
TCBT-3	0.000131			$-0.146799 \cdot 10^3$	$0.142289 \cdot 10^3$	12.47	0.0064

Nastavak Tabele P14

Dimetilftalat (1) + 2-Butanon (2)							
288.15							
vdW1-2	-0.017411		-0.070000			1.03	0.0088
vdW1-3	-0.1441144	-0.089341	-0.080643			0.07	0.0006
TCBT-2				$0.238051 \cdot 10^4$	$-0.196447 \cdot 10^4$	0.45	0.0043
TCBT-3	0.066893			$-0.165679 \cdot 10^2$	$0.499024 \cdot 10^4$	0.22	0.0019
293.15							
vdW1-2	-0.016704		-0.069973			1.02	0.0090
vdW1-3	-0.141053	-0.087807	-0.080743			0.07	0.0007
TCBT-2				$0.232941 \cdot 10^4$	$-0.193619 \cdot 10^4$	0.48	0.0050
TCBT-3	0.069215			$0.129403 \cdot 10^2$	$0.507511 \cdot 10^4$	0.19	0.0017
298.15							
vdW1-2	-0.015763		-0.069928			0.95	0.0089
vdW1-3	-0.129799	-0.080615	-0.080141			0.10	0.0011
TCBT-2				$0.226342 \cdot 10^4$	$-0.189821 \cdot 10^4$	0.49	0.0058
TCBT-3	0.070578			$0.371372 \cdot 10^1$	$0.512446 \cdot 10^4$	0.23	0.0022
303.15							
vdW1-2	-0.014979		-0.069902			0.99	0.0096
vdW1-3	-0.132951	-0.083594	-0.080768			0.08	0.0009
TCBT-2				$0.220068 \cdot 10^4$	$-0.185934 \cdot 10^4$	0.53	0.0072
TCBT-3	0.071558			$-0.172254 \cdot 10^2$	$0.515346 \cdot 10^4$	0.25	0.0024
308.15							
vdW1-2	-0.014138		-0.069877			0.93	0.0095
vdW1-3	-0.122596	-0.076952	-0.080199			0.12	0.0015
TCBT-2				$0.205311 \cdot 10^4$	$-0.176616 \cdot 10^4$	0.57	0.0080
TCBT-3	0.073524			$0.226092 \cdot 10^7$	$0.521298 \cdot 10^4$	0.23	0.0025
313.15							
vdW1-2	-0.013204		-0.069843			0.87	0.0094
vdW1-3	-0.111214	-0.069634	-0.079483			0.17	0.0021
TCBT-2				$0.185963 \cdot 10^4$	$-0.163526 \cdot 10^4$	0.59	0.0084
TCBT-3	0.069338			$-0.187796 \cdot 10^3$	$0.502814 \cdot 10^4$	0.32	0.0034
318.15							
vdW1-2	-0.011999		-0.069783			0.79	0.0092
vdW1-3	-0.095871	-0.059663	-0.078320			0.24	0.0028
TCBT-2				$-0.123200 \cdot 10^3$	$0.878972 \cdot 10^5$	0.48	0.0056
TCBT-3	0.001051			$-0.786515 \cdot 10^2$	$0.826162 \cdot 10^5$	0.26	0.0029
323.15							
vdW1-2	-0.011394		-0.069798			0.81	0.0099
vdW1-3	-0.098762	-0.062306	-0.078937			0.22	0.0029
TCBT-2				$-0.113461 \cdot 10^3$	$0.872052 \cdot 10^5$	0.42	0.0052
TCBT-3	0.078635			$0.138685 \cdot 10^2$	$0.536759 \cdot 10^4$	0.31	0.0041
288.15-323.15							
vdW1-2	-0.013178		-0.069769			1.25	0.0132
vdW1-3	-0.001321	0.008702	-0.068608			1.19	0.0122
TCBT-2				$0.224844 \cdot 10^4$	$-0.188715 \cdot 10^4$	0.98	0.0141
TCBT-3	-0.001925			$0.272803 \cdot 10^4$	$-0.224095 \cdot 10^4$	0.93	0.0101

Nastavak Tabele P14

Dimetilfталат (1) + Tetrahidrofuran (2)						
288.15						
vdW1-2	-0.033483		-0.111829		3.33	0.0291
vdW1-3	-0.148896	-0.082801	-0.121498		2.79	0.0254
TCBT-2				$0.451752 \cdot 10^4$	$-0.322575 \cdot 10^4$	1.62 0.0134
TCBT-3	0.003716			$0.624883 \cdot 10^5$	$-0.434538 \cdot 10^3$	0.96 0.0080
293.15						
vdW1-2	-0.031689		-0.111727		3.29	0.0297
vdW1-3	-0.148933	-0.084385	-0.121851		2.74	0.0258
TCBT-2				$0.451156 \cdot 10^4$	$-0.324198 \cdot 10^4$	1.55 0.0138
TCBT-3	0.003756			$0.640833 \cdot 10^5$	$-0.429942 \cdot 10^3$	0.95 0.0085
298.15						
vdW1-2	-0.030135		-0.111645		3.23	0.0300
vdW1-3	-0.147973	-0.085062	-0.122132		2.67	0.0259
TCBT-2				$0.450607 \cdot 10^4$	$-0.325805 \cdot 10^4$	1.51 0.0141
TCBT-3	0.003386			$0.653649 \cdot 10^5$	$-0.449280 \cdot 10^3$	0.92 0.0073
303.15						
vdW1-2	-0.028471		-0.111552		3.16	0.0302
vdW1-3	-0.147979	-0.086534	-0.122508		2.61	0.0259
TCBT-2				$0.449398 \cdot 10^4$	$-0.327055 \cdot 10^4$	1.48 0.0144
TCBT-3	0.003232			$0.666497 \cdot 10^5$	$-0.454411 \cdot 10^3$	0.90 0.0074
308.15						
vdW1-2	-0.026752		-0.111457		3.10	0.0307
vdW1-3	-0.145334	-0.086126	-0.122664		2.56	0.0262
TCBT-2				$0.448335 \cdot 10^4$	$-0.328227 \cdot 10^4$	1.47 0.0149
TCBT-3	0.002943			$0.678110 \cdot 10^5$	$-0.465451 \cdot 10^3$	0.88 0.0074
313.15						
vdW1-2	-0.025029		-0.111358		3.03	0.0311
vdW1-3	-0.141666	-0.084976	-0.122722		2.51	0.0263
TCBT-2				$0.446564 \cdot 10^4$	$-0.329002 \cdot 10^4$	1.47 0.0156
TCBT-3	0.002761			$0.691599 \cdot 10^5$	$-0.469168 \cdot 10^3$	0.86 0.0076
318.15						
vdW1-2	-0.023729		-0.111327		2.91	0.0305
vdW1-3	-0.141155	-0.085788	-0.123106		2.37	0.0255
TCBT-2				$0.445563 \cdot 10^4$	$-0.330327 \cdot 10^4$	1.29 0.0142
TCBT-3	0.002834			$0.707690 \cdot 10^5$	$-0.456943 \cdot 10^3$	0.70 0.0072
323.15						
vdW1-2	-0.018229		-0.111047		3.10	0.0324
vdW1-3	-0.145968	-0.093874	-0.124237		2.33	0.0261
TCBT-2				$0.700456 \cdot 10^5$	$-0.581224 \cdot 10^3$	0.89 0.0089
TCBT-3	0.001701			$0.720859 \cdot 10^5$	$-0.488252 \cdot 10^3$	0.78 0.0086
288-15-323.15						
vdW1-2	-0.024822		-0.111278		3.64	0.0347
vdW1-3	-0.011761	0.009816	-0.110004		3.51	0.0343
TCBT-2				$-0.188388 \cdot 10^4$	$0.169039 \cdot 10^4$	2.57 0.0294
TCBT-3	0.004648			$0.710281 \cdot 10^5$	$-0.353694 \cdot 10^3$	2.29 0.0223

**Tabela P15** Rezultati korelisanja  $V^E$  pomoću temperaturno zavisnih PRSV CEOS i CEOS/ $G^E$  modela binarnih sistema u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K

	$k_{ij,1}$ $k_{ij,2}$ (K <sup>-1</sup> )	$l_{ij,1}$ $l_{ij,2}$ (K <sup>-1</sup> )	$m_{ij,1}$ $m_{ij,2}$ (K <sup>-1</sup> )	$\Delta g_{12,1}$ (J mol <sup>-1</sup> ) $\Delta g_{12,2}$ (J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	$\Delta g_{21,1}$ (J mol <sup>-1</sup> ) $\Delta g_{21,2}$ (J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	$PD(V^E)$ (%)	$\sigma$ (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )
<b>1-Butanol (1) + Hloroform (2)</b>							
vdW1-2	0.242915 -0.433310·10 <sup>-3</sup>		0.010923 -0.217876·10 <sup>-4</sup>			5.23	0.0081
vdW1-3	-0.624748 0.118716·10 <sup>-2</sup>	-0.470872 0.107091·10 <sup>-2</sup>	0.011328 -0.198891·10 <sup>-3</sup>			5.22	0.0082
TCBT-2				-0.244877·10 <sup>4</sup> 0.487381·10 <sup>0</sup>	0.490222·10 <sup>4</sup> -0.433531·10 <sup>1</sup>	12.24	0.0185
TCBT-3	-0.104824			-0.479366·10 <sup>4</sup> 0.910166·10 <sup>1</sup>	-0.279641·10 <sup>4</sup> 0.388945·10 <sup>1</sup>	2.90	0.0055
<b>1-Butanol (1) + Benzen (3)</b>							
vdW1-2	0.047307 0.884307·10 <sup>-4</sup>		-0.012036 0.461597·10 <sup>-4</sup>			2.39	0.0072
vdW1-3	4.537100 -0.152230·10 <sup>-1</sup>	1.359240 -0.463663·10 <sup>-2</sup>	0.651174 -0.221563·10 <sup>-2</sup>			4.01	0.0102
TCBT-2				0.535297·10 <sup>3</sup> -0.518576·10 <sup>1</sup>	0.101258·10 <sup>4</sup> 0.281591·10 <sup>1</sup>	1.91	0.0058
TCBT-3	0.017819			0.187177·10 <sup>4</sup> -0.638858·10 <sup>1</sup>	0.134081·10 <sup>4</sup> 0.584935·10 <sup>0</sup>	1.90	0.0062
<b>2-Butanol (1) + Hloroform (2)</b>							
vdW1-2	0.555269 -0.138580·10 <sup>-2</sup>		0.064022 -0.190507·10 <sup>-3</sup>			2.65	0.0124
vdW1-3	-0.436320 0.691321·10 <sup>-3</sup>	-0.460170 0.117079·10 <sup>-2</sup>	0.034449 -0.280084·10 <sup>-3</sup>			1.28	0.0064
TCBT-2				-0.443941·10 <sup>4</sup> 0.787767·10 <sup>1</sup>	0.766205·10 <sup>4</sup> -0.146660·10 <sup>2</sup>	3.90	0.0191
TCBT-3	-0.122533			-0.305163·10 <sup>4</sup> 0.233151·10 <sup>1</sup>	-0.599010·10 <sup>4</sup> 0.145597·10 <sup>2</sup>	1.96	0.0097
<b>2-Butanol (1) + Benzen (3)</b>							
vdW1-2	0.251713 -0.540732·10 <sup>-3</sup>		0.024007 -0.721597·10 <sup>-4</sup>			1.90	0.0135
vdW1-3	-0.049832 -0.116107·10 <sup>-4</sup>	-0.121043 0.300958·10 <sup>-3</sup>	0.246361 -0.148693·10 <sup>-3</sup>			1.22	0.0243
TCBT-2				0.346054·10 <sup>3</sup> -0.432537·10 <sup>1</sup>	0.302302·10 <sup>3</sup> 0.456175·10 <sup>1</sup>	1.49	0.0102
TCBT-3	-0.037378			0.169056·10 <sup>7</sup> -0.194981·10 <sup>4</sup>	-0.243959·10 <sup>4</sup> 0.492638·10 <sup>1</sup>	1.29	0.0103



Nastavak Tabele P15

Dimetilftalat (1) + 1-Butanol (2)					
vdW1-2	-0.258994 0.711329·10 <sup>-3</sup>		-0.069441 -0.553704·10 <sup>-5</sup>		1.80 0.0024
vdW1-3	-0.255864 0.736755·10 <sup>-3</sup>	-0.004887 0.321767·10 <sup>-4</sup>	-0.071124 0.320011·10 <sup>-5</sup>		1.80 0.0023
TCBT-2			0.976960·10 <sup>3</sup> -0.326492·10 <sup>1</sup>	-0.267587·10 <sup>6</sup> 0.116719·10 <sup>4</sup>	5.55 0.0077
TCBT-3-0.000825			0.837748·10 <sup>3</sup> -0.296883·10 <sup>1</sup>	-0.395151·10 <sup>6</sup> 0.160254·10 <sup>4</sup>	5.31 0.0084
Dimetilftalat (1) + 2-Butanol (2)					
vdW1-2	-0.184901 0.542919·10 <sup>-3</sup>		-0.067312 -0.278081·10 <sup>-4</sup>		8.82 0.0043
vdW1-3	4.18081 -0.140428·10 <sup>-1</sup>	2.46160 -0.823212·10 <sup>-2</sup>	0.332141 -0.136279·10 <sup>-2</sup>		27.84 0.0143
TCBT-2			0.759930·10 <sup>7</sup> -0.179742·10 <sup>5</sup>	0.364325·10 <sup>3</sup> 0.155299·10 <sup>4</sup>	31.92 0.0188
TCBT-3 0.000268			-0.743494·10 <sup>6</sup> 0.290121·10 <sup>4</sup>	-0.127436·10 <sup>4</sup> 0.289316·10 <sup>4</sup>	11.08 0.0065
Dimetilftalat (1) + 2-Butanon (2)					
vdW1-2	-0.070121 0.182110·10 <sup>-3</sup>		-0.071974 0.682204·10 <sup>-5</sup>		0.92 0.0093
vdW1-3	-0.301555 0.596217·10 <sup>-3</sup>	-0.156700 0.269540·10 <sup>-3</sup>	-0.075577 -0.135687·10 <sup>-4</sup>		0.14 0.0019
TCBT-2			0.231799·10 <sup>4</sup> 0.415122·10 <sup>4</sup>	-0.718315·10 <sup>3</sup> 0.190597·10 <sup>1</sup>	1.09 0.0119
TCBT-3 0.003217			-0.765334·10 <sup>3</sup> 0.675588·10 <sup>4</sup>	0.104024·10 <sup>6</sup> -0.917134·10 <sup>2</sup>	0.95 0.0110
Dimetilftalat (1) + Tetrahidrofuran (2)					
vdW1-2	-0.157522 0.426210·10 <sup>-3</sup>		-0.118672 0.234781·10 <sup>-4</sup>		3.21 0.0308
vdW1-3	-0.555673 0.133562·10 <sup>-2</sup>	-0.277120 0.621480·10 <sup>-3</sup>	-0.133904 0.368663·10 <sup>-4</sup>		2.62 0.0262
TCBT-2			-0.186845·10 <sup>4</sup> 0.430832·10 <sup>1</sup>	-0.395192·10 <sup>4</sup> 0.762160·10 <sup>4</sup>	6.85 0.0593
TCBT-3 0.006398			-0.186013·10 <sup>3</sup> 0.435306·10 <sup>4</sup>	-0.539167·10 <sup>3</sup> 0.104767·10 <sup>1</sup>	3.81 0.0356

**Tabela P16** Rezultati izračunavanja indeksa refrakcije  $n_D$  i predviđanja dopunskih molarnih zapremina  $V^E$  binarnih smeša u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15K

T/K	Jedn.	Osobina	Greška	Model						
				L-L	D-G	Eyk	A-B	New	Ost	
<b>Dimetilftalat + 1-Butanol</b>										
288.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0017	0.0008	0.0011	0.0008	0.0001	0.0003	
		$V^E$	$\sigma$	0.2587	0.0842	0.1343	0.0636	0.1548	0.0626	
		$PD(\%)$	$w^*$	43.96	75.39	38.57	92.60	34.50		
	Tip II	$V^E$	$\sigma$	0.2591	0.0847	0.1347	0.0636	0.1544	0.0680	
		$PD(\%)$	$w$	44.18	75.60	38.55	92.32	38.53		
		$V^E$	$\sigma$	0.0373	0.0647	0.0533	0.0656	0.1021	0.0866	
	Tip III	$PD(\%)$	$w$	15.25	32.51	25.45	39.79	55.08	45.82	
	293.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0017	0.0008	0.0010	0.0008	0.0002	0.0003
			$V^E$	$\sigma$	0.2622	0.0846	0.1361	0.0561	0.1582	0.0630
$PD(\%)$			$w$	48.86	84.20	37.33	$w$	38.19		
Tip II		$V^E$	$\sigma$	0.2625	0.0850	0.1364	0.0561	0.1578	0.0687	
		$PD(\%)$	$w$	49.08	84.40	37.30	$w$	42.83		
		$V^E$	$\sigma$	0.0395	0.0657	0.0549	0.0580	0.1013	0.0860	
Tip III		$PD(\%)$	$w$	18.68	36.83	29.49	38.60	60.27	50.28	
298.15		Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0016	0.0007	0.0010	0.0007	0.0002	0.0002
			$V^E$	$\sigma$	0.2623	0.0818	0.1343	0.0503	0.1675	0.0691
	$PD(\%)$		$w$	50.92	91.10	36.68	$w$	46.50		
	Tip II	$V^E$	$\sigma$	0.2626	0.0821	0.1347	0.0502	0.1671	0.0747	
		$PD(\%)$	$w$	51.13	91.30	36.66	$w$	51.76		
		$V^E$	$\sigma$	0.0398	0.0638	0.0539	0.0519	0.0965	0.0819	
	Tip III	$PD(\%)$	$w$	20.50	38.47	31.06	37.99	62.12	51.67	
	303.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0016	0.0006	0.0009	0.0006	0.0003	0.0002
			$V^E$	$\sigma$	0.2638	0.0807	0.1341	0.0439	0.1763	0.0749
$PD(\%)$			$w$	55.13	$w$	35.83	$w$	56.87		
Tip II		$V^E$	$\sigma$	0.2641	0.0810	0.1344	0.0439	0.1760	0.0804	
		$PD(\%)$	$w$	55.33	$w$	35.81	$w$	62.91		
		$V^E$	$\sigma$	0.0417	0.0636	0.0545	0.0454	0.0935	0.0797	
Tip III		$PD(\%)$	$w$	24.70	42.10	34.95	37.21	65.36	54.45	
308.15		Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0014	0.0005	0.0008	0.0005	0.0004	0.0001
			$V^E$	$\sigma$	0.2463	0.0607	0.1137	0.0442	0.2113	0.1020
	$PD(\%)$		$w$	46.24	93.31	41.79	$w$	94.91		
	Tip II	$V^E$	$\sigma$	0.2465	0.0609	0.1139	0.0442	0.2111	0.1071	
		$PD(\%)$	$w$	46.37	93.44	41.77	$w$	$w$		
		$V^E$	$\sigma$	0.0336	0.0482	0.0418	0.0454	0.0702	0.0596	
	Tip III	$PD(\%)$	$w$	26.45	35.70	31.04	43.00	51.65	43.51	
	313.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0013	0.0004	0.0007	0.0004	0.0005	0.0001
			$V^E$	$\sigma$	0.2459	0.0527	0.1096	0.0363	0.2185	0.1036
$PD(\%)$			$w$	43.09	$w$	39.39	$w$	$w$		
Tip II		$V^E$	$\sigma$	0.2461	0.0528	0.1097	0.0363	0.2184	0.1087	
		$PD(\%)$	$w$	43.21	$w$	39.38	$w$	$w$		
		$V^E$	$\sigma$	0.0285	0.0425	0.0365	0.0373	0.0626	0.0526	
Tip III		$PD(\%)$	$w$	20.32	32.27	26.73	40.56	52.20	41.68	

Nastavak Tabele P16

318.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0013	0.0004	0.0007	0.0004	0.0004	0.0001
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2644	0.0643	0.1258	0.0213	0.2007	0.0834
			PD(%)	vv	76.87	vv	27.92	vv	vv
	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2645	0.0645	0.1259	0.0213	0.2005	0.0894
			PD(%)	vv	77.03	vv	27.90	vv	vv
	Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.0365	0.0530	0.0462	0.0223	0.0747	0.0637
		PD(%)	41.13	62.57	53.78	29.40	90.49	76.40	
323.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0012	0.0003	0.0006	0.0003	0.0006	0.0002
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2514	0.0468	0.1094	0.0200	0.2304	0.1072
			PD(%)	vv	64.16	vv	32.92	vv	vv
	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2515	0.0469	0.1095	0.0200	0.2303	0.1116
			PD(%)	vv	64.27	vv	32.91	vv	vv
	Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.0267	0.0382	0.0334	0.0206	0.0538	0.0456
		PD(%)	35.90	51.68	45.19	34.26	74.72	62.42	
<b>Dimetilftalat + 2-Butanol</b>									
288.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0014	0.0005	0.0008	0.0005	0.0005	0.0001
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3333	0.1373	0.1962	0.0518	0.1261	0.0319
			PD(%)	vv	vv	vv	vv	vv	vv
	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3334	0.1374	0.1963	0.0518	0.1260	0.0351
			PD(%)	vv	vv	vv	vv	vv	vv
	Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1082	0.1267	0.1192	0.0507	0.1504	0.1406
		PD(%)	vv	vv	vv	vv	vv	vv	
293.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0014	0.0004	0.0007	0.0004	0.0005	0.0002
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3415	0.1419	0.2024	0.0621	0.1253	0.0297
			PD(%)	vv	vv	vv	vv	vv	70.14
	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3416	0.1420	0.2025	0.0621	0.1252	0.0321
			PD(%)	vv	vv	vv	vv	vv	73.11
	Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1147	0.1318	0.1249	0.0610	0.1537	0.1444
		PD(%)	vv	vv	vv	vv	vv	vv	
298.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0014	0.0004	0.0007	0.0004	0.0005	0.0002
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3485	0.1450	0.2072	0.0711	0.1262	0.0273
			PD(%)	vv	vv	vv	vv	v	46.09
	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3486	0.1451	0.2073	0.0711	0.1261	0.0296
			PD(%)	vv	vv	vv	vv	vv	49.71
	Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1200	0.1356	0.1293	0.0701	0.1559	0.1470
		PD(%)	vv	vv	vv	vv	vv	vv	
303.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0013	0.0003	0.0006	0.0003	0.0006	0.0002
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3486	0.1401	0.2044	0.0765	0.1361	0.0263
			PD(%)	vv	vv	vv	vv	vv	35.16
	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3487	0.1402	0.2045	0.0766	0.1360	0.0288
			PD(%)	vv	vv	vv	vv	vv	38.08
	Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1185	0.1318	0.1264	0.0757	0.1492	0.1413
		PD(%)	vv	vv	vv	vv	vv	vv	

Nastavak Tabele P16

		$n_D$	$\sigma$	0.0012	0.0002	0.0005	0.0002	0.0007	0.0003
308.15	Tip I	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3347	0.1187	0.1862	0.0746	0.1650	0.0399
			PD(%)	vv	vv	vv	96.97	vv	52.62
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3347	0.1188	0.1863	0.0746	0.1649	0.0423
308.15	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3347	0.1188	0.1863	0.0746	0.1649	0.0423
			PD(%)	vv	vv	vv	96.97	vv	56.26
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1032	0.1123	0.1086	0.0740	0.1241	0.1185
308.15	Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1032	0.1123	0.1086	0.0740	0.1241	0.1185
			PD(%)	vv	vv	vv	96.17	vv	vv
		$n_D$	$\sigma$	0.0011	0.0002	0.0005	0.0002	0.0008	0.0004
313.15	Tip I	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3288	0.1079	0.1773	0.0746	0.1842	0.0538
			PD(%)	vv	vv	vv	88.27	vv	64.22
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3288	0.1079	0.1773	0.0747	0.1842	0.0554
313.15	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3288	0.1079	0.1773	0.0747	0.1842	0.0554
			PD(%)	vv	vv	vv	88.27	vv	66.33
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.0964	0.1033	0.1005	0.0742	0.1123	0.1079
313.15	Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.0964	0.1033	0.1005	0.0742	0.1123	0.1079
			PD(%)	vv	vv	vv	87.80	vv	vv
		$n_D$	$\sigma$	0.0012	0.0002	0.0005	0.0002	0.0007	0.0004
318.15	Tip I	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3385	0.1149	0.1855	0.0778	0.1797	0.0472
			PD(%)	vv	vv	vv	89.41	vv	54.56
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3385	0.1149	0.1855	0.0778	0.1796	0.0494
318.15	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3385	0.1149	0.1855	0.0778	0.1796	0.0494
			PD(%)	vv	vv	vv	89.42	vv	57.31
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1021	0.1097	0.1066	0.0772	0.1196	0.1146
318.15	Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1021	0.1097	0.1066	0.0772	0.1196	0.1146
			PD(%)	vv	vv	vv	88.86	vv	vv
		$n_D$	$\sigma$	0.0011	0.0001	0.0004	0.0001	0.0008	0.0005
323.15	Tip I	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3201	0.0897	0.1630	0.0694	0.2154	0.0756
			PD(%)	vv	98.73	vv	79.25	vv	91.27
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3201	0.0897	0.1630	0.0694	0.2153	0.0767
323.15	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3201	0.0897	0.1630	0.0694	0.2153	0.0767
			PD(%)	vv	98.74	vv	79.25	vv	92.64
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.0827	0.0868	0.0851	0.0691	0.0923	0.0895
323.15	Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.0827	0.0868	0.0851	0.0691	0.0923	0.0895
			PD(%)	92.24	96.24	94.59	78.99	vv	98.73
		<b>Dimetilfталat + 2-Butanon</b>							
		$n_D$	$\sigma$	0.0042	0.0029	0.0033	0.0029	0.0017	0.0022
288.15	Tip I	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2654	0.1030	0.1386	0.4395	0.1735	0.1025
			PD(%)	26.32	8.92	12.15	45.94	17.09	8.65
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2704	0.1079	0.1436	0.4390	0.1683	0.1332
288.15	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2704	0.1079	0.1436	0.4390	0.1683	0.1332
			PD(%)	26.79	9.26	12.52	45.89	16.43	11.82
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1539	0.0813	0.0932	0.4487	0.1568	0.1126
288.15	Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1539	0.0813	0.0932	0.4487	0.1568	0.1126
			PD(%)	12.40	6.25	7.27	46.84	14.42	10.37
		$n_D$	$\sigma$	0.0043	0.0030	0.0034	0.0030	0.0018	0.0023
293.15	Tip I	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2707	0.1061	0.1424	0.4570	0.1718	0.1009
			PD(%)	26.09	9.04	12.30	45.91	15.95	7.80
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2760	0.1113	0.1477	0.4564	0.1662	0.1332
293.15	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2760	0.1113	0.1477	0.4564	0.1662	0.1332
			PD(%)	26.58	9.41	12.69	45.86	15.27	11.31
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1384	0.0793	0.0927	0.4666	0.1592	0.1110
293.15	Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1384	0.0793	0.0927	0.4666	0.1592	0.1110
			PD(%)	12.16	5.65	6.76	46.82	14.58	9.88

Nastavak Tabele P16

		$n_D$	$\sigma$	0.0043	0.0031	0.0034	0.0031	0.0019	0.0024
298.15	Tip I	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2711	0.1065	0.1422	0.4779	0.1789	0.1068
			PD(%)	25.05	8.89	11.73	46.26	15.95	8.16
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2768	0.1120	0.1479	0.4773	0.1730	0.1414
298.15	Tip II	$\sqrt{E}$	PD(%)	25.26	9.26	12.12	46.21	15.26	11.77
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1470	0.0818	0.0984	0.4878	0.1583	0.1082
			PD(%)	12.64	5.58	6.98	47.16	13.94	9.12
		$n_D$	$\sigma$	0.0044	0.0031	0.0035	0.0031	0.0019	0.0024
303.15	Tip I	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2699	0.1045	0.1399	0.5028	0.1862	0.1122
			PD(%)	23.60	8.37	11.02	46.25	16.00	8.18
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2759	0.1102	0.1459	0.5022	0.1799	0.1529
303.15	Tip II	$\sqrt{E}$	PD(%)	24.11	8.73	11.42	46.19	15.30	18.22
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1603	0.0896	0.1094	0.5132	0.1580	0.1079
			PD(%)	13.14	5.88	7.45	47.14	13.13	8.45
		$n_D$	$\sigma$	0.0044	0.0031	0.0035	0.0031	0.0019	0.0024
308.15	Tip I	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2448	0.0853	0.1152	0.5369	0.2226	0.1401
			PD(%)	20.07	7.48	8.65	48.22	19.61	11.54
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2509	0.0900	0.1210	0.5363	0.2159	0.1847
308.15	Tip II	$\sqrt{E}$	PD(%)	20.56	7.80	8.97	48.16	18.93	15.91
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1875	0.0986	0.1299	0.5473	0.1278	0.0873
			PD(%)	16.14	7.01	10.11	49.08	9.75	6.59
		$n_D$	$\sigma$	0.0044	0.0031	0.0035	0.0031	0.0018	0.0024
313.15	Tip I	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2226	0.0565	0.0856	0.5638	0.2463	0.1551
			PD(%)	18.27	4.60	6.32	48.54	21.18	13.03
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2285	0.0597	0.0911	0.5632	0.2389	0.2084
313.15	Tip II	$\sqrt{E}$	PD(%)	18.75	4.89	6.62	48.49	20.53	17.49
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2083	0.1087	0.1468	0.5743	0.1011	0.0737
			PD(%)	17.26	7.79	11.44	49.38	7.52	4.99
		$n_D$	$\sigma$	0.0044	0.0031	0.0035	0.0031	0.0019	0.0024
318.15	Tip I	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2119	0.0539	0.0752	0.5938	0.2657	0.1713
			PD(%)	16.78	3.49	5.43	49.00	21.78	13.76
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2180	0.0552	0.0804	0.5931	0.2577	0.2309
318.15	Tip II	$\sqrt{E}$	PD(%)	17.26	3.81	5.73	48.95	21.13	18.35
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2294	0.1276	0.1670	0.6044	0.0999	0.0857
			PD(%)	18.03	8.52	12.33	49.82	7.60	5.30
		$n_D$	$\sigma$	0.0042	0.0027	0.0033	0.0029	0.0016	0.0021
323.15	Tip I	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1332	0.1100	0.0629	0.6503	0.3821	0.2736
			PD(%)	9.80	7.69	3.83	51.39	29.99	21.32
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1379	0.1049	0.0598	0.6498	0.3751	0.3333
323.15	Tip II	$\sqrt{E}$	PD(%)	10.19	7.26	3.51	51.35	29.46	25.69
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.3099	0.2091	0.2498	0.6603	0.1019	0.1510
			PD(%)	23.65	15.06	18.59	52.13	6.43	9.71

Nastavak Tabele P16

			Dimetilfталat + Tetrahidrofuran						
288.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0035	0.0027	0.0029	0.0027	0.0019	0.0022
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2081	0.1400	0.1507	0.3052	0.0653	0.0783
			PD(%)	27.87	17.87	19.46	42.52	7.85	9.31
	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2118	0.1441	0.1545	0.3048	0.0696	0.0600
			PD(%)	28.35	18.40	19.96	42.46	8.32	7.27
		Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.0325	0.0851	0.0511	0.3105	0.2035
			PD(%)	3.92	10.86	6.17	43.28	27.65	20.72
293.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0035	0.0027	0.0029	0.0027	0.0020	0.0023
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2124	0.1434	0.1542	0.3157	0.0686	0.0814
			PD(%)	27.59	17.66	19.28	42.63	7.73	9.06
	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2163	0.1477	0.1582	0.3152	0.0730	0.0603
			PD(%)	28.08	18.21	19.79	42.57	8.20	6.80
		Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.0359	0.0862	0.0522	0.3211	0.2067
			PD(%)	4.22	10.55	5.84	43.39	27.31	20.16
298.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0036	0.0028	0.0030	0.0028	0.0020	0.0023
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2161	0.1463	0.1573	0.3276	0.0728	0.0849
			PD(%)	27.11	17.38	18.86	42.99	7.94	9.18
	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2202	0.1508	0.1615	0.3272	0.0772	0.0607
			PD(%)	27.61	17.94	19.39	42.94	8.37	6.68
		Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.0404	0.0865	0.0528	0.3333	0.2088
			PD(%)	4.64	10.22	5.79	43.76	26.68	19.33
303.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0036	0.0028	0.0030	0.0028	0.0020	0.0023
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2154	0.1444	0.1557	0.3420	0.0733	0.0843
			PD(%)	25.96	16.46	17.86	43.53	8.15	8.91
	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2196	0.1490	0.1600	0.3416	0.0773	0.0571
			PD(%)	26.46	17.02	18.38	43.47	8.43	6.09
		Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.0471	0.0820	0.0501	0.3478	0.2046
			PD(%)	5.23	9.27	5.37	44.29	25.18	17.70
308.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0036	0.0028	0.0030	0.0028	0.0020	0.0023
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2016	0.1300	0.1416	0.3633	0.0766	0.0801
			PD(%)	23.05	14.02	15.55	44.85	9.22	9.14
	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.2057	0.1344	0.1457	0.3628	0.0785	0.0567
			PD(%)	23.52	14.56	16.05	44.79	9.40	6.59
		Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.0677	0.0686	0.0482	0.3691	0.1833
			PD(%)	7.50	7.22	5.63	45.60	21.91	14.84
313.15	Tip I	$n_D$	$\sigma$	0.0035	0.0027	0.0030	0.0027	0.0019	0.0023
		$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1855	0.1136	0.1253	0.3859	0.0826	0.0774
			PD(%)	20.36	11.12	12.78	45.92	8.91	8.85
	Tip II	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.1895	0.1175	0.1291	0.3855	0.0822	0.0634
			PD(%)	20.81	11.64	13.26	45.87	9.08	6.32
		Tip III	$\sqrt{E}$	$\sigma$	0.0876	0.0657	0.0525	0.3918	0.1601
			PD(%)	9.64	6.38	5.40	46.65	18.57	11.55

Nastavak Tabele P16

	$n_D$	$\sigma$	0.0036	0.0027	0.0030	0.0027	0.0019	0.0023
318.15	Tip I	$V^E$	0.1733	0.0972	0.1101	0.4048	0.0766	0.0660
		$PD(\%)$	18.57	9.33	11.04	46.53	7.76	6.76
318.15	Tip II	$V^E$	0.1774	0.1011	0.1139	0.4044	0.0747	0.0626
		$PD(\%)$	19.02	9.84	11.50	46.48	7.49	6.28
318.15	Tip III	$V^E$	0.0953	0.0437	0.0502	0.4108	0.1466	0.0867
		$PD(\%)$	10.31	4.65	4.87	47.24	16.54	9.47
	$n_D$	$\sigma$	0.0035	0.0027	0.0029	0.0027	0.0019	0.0022
323.15	Tip I	$V^E$	0.1709	0.1011	0.1115	0.4171	0.1106	0.0920
		$PD(\%)$	17.56	9.11	10.15	47.04	11.74	9.43
323.15	Tip II	$V^E$	0.1747	0.1041	0.1148	0.4167	0.1082	0.0935
		$PD(\%)$	17.99	9.35	10.48	46.99	11.51	9.84
323.15	Tip III	$V^E$	0.1167	0.0604	0.0742	0.4230	0.1357	0.0825
		$PD(\%)$	12.74	5.55	7.67	47.74	14.60	8.25

\*vv-velika vrednost

**Tabela P17** Rezultati predviđanja i korelisanja viskoznosti  $\eta$  binarnih smeša u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 323.15 K

Modeli	Parametri modela	AAD [mPas]	Greška proračuna		
			PD(%)	PDM(%)	$\sigma$ (mPas)
<b>Dimetilftalat (1) + 1-Butanol (2)</b>					
<i>T = 288.15K</i>					
<i>Prediktivni model- model doprinosa grupa</i>					
UNIFAC- VISCO		0.3332	4.48	2.12	0.4218
<i>Korelativni modeli</i>					
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.312090$	0.7622	8.47	4.84	1.0719
3McAllister	$V_{12} = 5.565425$ $V_{21} = 4.060100$	0.1791	3.38	1.14	0.2014
4McAllister	$V_{1122} = 6.64050$ $V_{1112} = 6.70560$ $V_{2221} = 2.99974$	0.0279	0.58	0.18	0.0348
<i>T = 293.15K</i>					
<i>Prediktivni model - model doprinosa grupa</i>					
UNIFAC- VISCO		0.2679	5.16	2.16	0.3013
<i>Korelativni modeli</i>					
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.257853$	0.5219	7.18	4.20	0.7215
3McAllister	$V_{12} = 4.862929$ $V_{21} = 3.383100$	0.1325	2.96	1.07	0.1462
4McAllister	$V_{1122} = 5.41670$ $V_{1112} = 5.73670$ $V_{2221} = 2.64537$	0.0274	0.61	0.22	0.0314
<i>T = 298.15K</i>					
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>					
UNIFAC- VISCO		0.2603	6.42	2.59	0.3055
<i>Korelativni modeli</i>					
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.206040$	0.3677	6.14	3.66	0.5010
3McAllister	$V_{12} = 4.268853$ $V_{21} = 2.880900$	0.1003	2.62	1.00	0.1098
4McAllister	$V_{1122} = 4.52160$ $V_{1112} = 4.94870$ $V_{2221} = 2.34776$	0.0247	0.62	0.25	0.0278
<i>T = 303.15K</i>					
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>					
UNIFAC- VISCO		0.2884	8.10	3.49	0.3299
<i>Korelativni modeli</i>					
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.156348$	0.2653	5.28	3.21	0.3569
3McAllister	$V_{12} = 3.768544$ $V_{21} = 2.493700$	0.0775	2.34	0.94	0.0845
4McAllister	$V_{1122} = 3.84510$ $V_{1112} = 4.30540$ $V_{2221} = 2.09820$	0.0212	0.60	0.26	0.0239
<i>T = 308.15K</i>					
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>					
UNIFAC- VISCO		0.3149	9.83	4.55	0.3462
<i>Korelativni modeli</i>					
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.107779$	0.1952	4.57	2.82	0.2600
3McAllister	$V_{12} = 3.345875$ $V_{21} = 2.190500$	0.0610	2.11	0.88	0.0664
4McAllister	$V_{1122} = 3.32170$ $V_{1112} = 3.77590$ $V_{2221} = 1.88365$	0.0174	0.56	0.25	0.0197



## Nastavak Tabele P17

$T = 313.15\text{K}$							
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.3259	11.39	5.55	0.3525	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.060237$		0.1456	3.95	2.48	0.1924	
3McAllister	$V_{12} = 2.991104$	$V_{21} = 1.944500$	0.0487	1.91	0.83	0.0530	
4McAllister	$V_{1122} = 2.90460$	$V_{1112} = 3.34030$	$V_{2221} = 1.70382$	0.0145	0.52	0.25	0.0163
$T = 318.15\text{K}$							
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.3280	12.85	6.49	0.3517	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.016500$		0.1100	3.44	2.18	0.1434	
3McAllister	$V_{12} = 2.689865$	$V_{21} = 1.743400$	0.0390	1.73	0.77	0.0425	
4McAllister	$V_{1122} = 2.56100$	$V_{1112} = 2.98070$	$V_{2221} = 1.54832$	0.0120	0.49	0.24	0.0135
$T = 323.15\text{K}$							
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.3244	14.18	7.38	0.3458	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 0.0291000$		0.0839	2.99	1.91	0.1085	
3McAllister	$V_{12} = 2.432737$	$V_{21} = 1.575300$	0.0310	1.55	0.70	0.0339	
4McAllister	$V_{1122} = 2.27170$	$V_{1112} = 2.68110$	$V_{2221} = 1.41905$	0.0104	0.47	0.24	0.0116
<b>Dimetilfталat (1) + 2-Butanol (2)</b>							
$T = 288.15\text{K}$							
<i>Prediktivni model- model doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.6488	9.52	4.03	0.6936	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.528129$		0.8588	10.04	5.33	1.1359	
3McAllister	$V_{12} = 6.25590$	$V_{21} = 3.28383$	0.2181	3.97	1.35	0.2567	
4McAllister	$V_{1122} = 6.74160$	$V_{1112} = 7.15410$	$V_{2221} = 2.68300$	0.0621	1.21	0.39	0.0799
$T = 293.15\text{K}$							
<i>Prediktivni model - model doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.3124	5.71	2.49	0.3508	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.468438$		0.6009	8.78	4.79	0.7837	
3McAllister	$V_{12} = 5.27257$	$V_{21} = 2.83690$	0.1721	3.83	1.37	0.2105	
4McAllister	$V_{1122} = 5.72473$	$V_{1112} = 5.85704$	$V_{2221} = 2.29137$	0.0527	1.17	0.42	0.0674

## Nastavak Tabele P17

$T = 298.15K$							
<i>Prediktivni model - model doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.1134	2.77	1.12	0.1320	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.392688$		0.4071	7.28	4.01	0.5226	
3McAllister	$V_{12} = 4.58058$	$V_{21} = 2.45072$	0.1216	3.28	1.20	0.1475	
4McAllister	$V_{1122} = 4.64228$	$V_{1112} = 5.07466$	$V_{2221} = 2.07099$	0.0448	1.16	0.44	0.0561
$T = 303.15K$							
<i>Prediktivni model - model doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.1431	3.95	1.72	0.1665	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.311787$		0.2823	6.00	3.39	0.3617	
3McAllister	$V_{12} = 3.97949$	$V_{21} = 2.18211$	0.0959	2.98	1.15	0.1130	
4McAllister	$V_{1122} = 3.96070$	$V_{1112} = 4.36622$	$V_{2221} = 1.85518$	0.0287	0.91	0.35	0.0362
$T = 308.15K$							
<i>Prediktivni model - model doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.2141	6.43	3.08	0.2436	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.230400$		0.2011	5.00	2.90	0.2576	
3McAllister	$V_{12} = 3.47648$	$V_{21} = 1.95843$	0.0733	2.64	1.06	0.0861	
4McAllister	$V_{1122} = 3.40405$	$V_{1112} = 3.79508$	$V_{2221} = 1.67993$	0.0219	0.78	0.32	0.0273
$T = 313.15K$							
<i>Prediktivni model - model doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.2640	8.96	4.49	0.2962	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.147900$		0.1454	4.17	2.47	0.1867	
3McAllister	$V_{12} = 3.07359$	$V_{21} = 1.76182$	0.0567	2.31	0.96	0.0662	
4McAllister	$V_{1122} = 2.95580$	$V_{1112} = 3.34339$	$V_{2221} = 1.53503$	0.0160	0.65	0.27	0.0209
$T = 318.15K$							
<i>Prediktivni model - model doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.2988	11.65	5.92	0.3269	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = -0.064800$		0.1066	3.48	2.11	0.1378	
3McAllister	$V_{12} = 2.72528$	$V_{21} = 1.61373$	0.0438	2.05	0.87	0.0513	
4McAllister	$V_{1122} = 2.58403$	$V_{1112} = 2.96357$	$V_{2221} = 1.39909$	0.0147	0.66	0.29	0.0167

## Nastavak Tabele P17

$T = 323.15K$							
<i>Prediktivni model - model doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.3288	14.34	7.43	0.3544	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 0.025852$		0.0682	2.59	1.54	0.0853	
3McAllister	$V_{12} = 2.51092$	$V_{21} = 1.46157$	0.0275	1.51	0.62	0.0333	
4McAllister	$V_{1122} = 2.21599$	$V_{1112} = 2.74995$	$V_{2221} = 1.32253$	0.0103	0.54	0.23	0.0125
<b>Dimetilftalat (1) + 2-Butanon (2)</b>							
$T = 288.15K$							
<i>Prediktivni model- model doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.2265	4.08	1.59	0.3393	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 0.2895000$		0.3025	5.73	2.12	0.4519	
3McAllister	$V_{12} = 3.85290$	$V_{21} = 1.53790$	0.0204	0.46	0.14	0.0312	
4McAllister	$V_{1122} = 2.36880$	$V_{1112} = 5.76807$	$V_{2221} = 1.18240$	0.0223	0.61	0.16	0.0309
$T = 293.15K$							
<i>Prediktivni model - model doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.1154	3.86	1.02	0.1528	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 0.300000$		0.1815	5.52	1.60	0.2460	
3McAllister	$V_{12} = 3.42210$	$V_{21} = 1.41630$	0.0156	0.50	0.14	0.0222	
4McAllister	$V_{1122} = 2.08720$	$V_{1112} = 4.96879$	$V_{2221} = 1.13670$	0.0148	0.61	0.13	0.0198
$T = 298.15K$							
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.0779	4.65	0.85	0.0859	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 0.300000$		0.1253	6.06	1.36	0.1382	
3McAllister	$V_{12} = 3.05910$	$V_{21} = 1.31680$	0.0140	0.51	0.15	0.0202	
4McAllister	$V_{1122} = 1.89060$	$V_{1112} = 4.30886$	$V_{2221} = 1.07210$	0.0130	0.65	0.14	0.0173
$T = 303.15K$							
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.1031	6.38	1.36	0.1145	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 0.300000$		0.0967	6.80	1.27	0.1137	
3McAllister	$V_{12} = 2.77470$	$V_{21} = 1.22480$	0.0131	0.55	0.17	0.0195	
4McAllister	$V_{1122} = 1.74475$	$V_{1112} = 3.79042$	$V_{2221} = 1.00009$	0.0132	0.58	0.17	0.0177

## Nastavak Tabele P17

$T = 308.15K$							
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.1372	8.20	2.14	0.1481	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 0.711018$		0.0715	2.76	1.12	0.0971	
3McAllister	$V_{12} = 2.50690$	$V_{21} = 1.15440$	0.0111	0.51	0.17	0.0166	
4McAllister	$V_{1122} = 1.61440$	$V_{1112} = 3.34392$	$V_{2221} = 0.94300$	0.0114	0.58	0.18	0.0150
$T = 313.15K$							
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.1576	9.79	2.89	0.1703	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 0.798930$		0.0526	2.31	0.96	0.0709	
3McAllister	$V_{12} = 2.27580$	$V_{21} = 1.09250$	0.0104	0.53	0.19	0.0148	
4McAllister	$V_{1122} = 1.50529$	$V_{1112} = 2.97246$	$V_{2221} = 0.893264$	0.0103	0.61	0.19	0.0137
$T = 318.15K$							
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.1686	11.14	3.57	0.1825	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 0.879120$		0.0393	1.93	0.83	0.0528	
3McAllister	$V_{12} = 2.0753$	$V_{21} = 1.03610$	0.0094	0.57	0.20	0.0127	
4McAllister	$V_{1122} = 1.40390$	$V_{1112} = 2.66001$	$V_{2221} = 0.84240$	0.0090	0.59	0.19	0.0119
$T = 323.15K$							
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			0.1881	12.93	4.52	0.2040	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 0.984258$		0.0222	1.34	0.53	0.0286	
3McAllister	$V_{12} = 1.96870$	$V_{21} = 0.97040$	0.0084	0.61	0.20	0.0116	
4McAllister	$V_{1122} = 1.28430$	$V_{1112} = 2.48750$	$V_{2221} = 0.81950$	0.0072	0.61	0.17	0.0086
<b>Dimetilftalat (1) + Tetrahidrofuran (2)</b>							
$T = 288.15K$							
<i>Prediktivni model- model doprinosa grupa</i>							
UNIFAC- VISCO			1.1532	30.21	7.36	1.2827	
<i>Korelativni modeli</i>							
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 0.845559$		0.1256	2.04	0.80	0.1857	
3McAllister	$V_{12} = 5.25920$	$V_{21} = 2.09350$	0.0357	1.50	0.23	0.0426	
4McAllister	$V_{1122} = 2.99290$	$V_{1112} = 7.43560$	$V_{2221} = 1.63790$	0.0244	0.89	0.16	0.0281

## Nastavak Tabele P17

$T = 293.15K$					
<i>Prediktivni model - model doprinosa grupa</i>					
UNIFAC- VISCO			0.9592	28.16	7.75 1.0686
<i>Korelativni modeli</i>					
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 0.954261$		0.0624	1.24	0.50 0.0909
3McAllister	$V_{12} = 4.65347$	$V_{21} = 1.81007$	0.0154	0.33	0.12 0.0241
4McAllister	$V_{1122} = 2.79277$	$V_{1112} = 6.23328$	$V_{2221} = 1.37231$	0.0185	0.57 0.15 0.0231
$T = 298.15K$					
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>					
UNIFAC- VISCO			0.8793	29.35	8.79 0.9752
<i>Korelativni modeli</i>					
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 1.04514$		0.0264	0.63	0.26 0.0396
3McAllister	$V_{12} = 4.10168$	$V_{21} = 1.65766$	0.0123	0.32	0.12 0.0189
4McAllister	$V_{1122} = 2.53526$	$V_{1112} = 5.32242$	$V_{2221} = 1.26096$	0.0139	0.45 0.14 0.0183
$T = 303.15K$					
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>					
UNIFAC- VISCO			0.8029	30.30	9.75 0.8863
<i>Korelativni modeli</i>					
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 1.13010$		0.0101	0.33	0.12 0.0175
3McAllister	$V_{12} = 3.63380$	$V_{21} = 1.52955$	0.0101	0.33	0.12 0.0152
4McAllister	$V_{1122} = 2.30322$	$V_{1112} = 4.60062$	$V_{2221} = 1.16945$	0.0110	0.38 0.13 0.0149
$T = 308.15K$					
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>					
UNIFAC- VISCO			0.7323	30.93	10.60 0.8056
<i>Korelativni modeli</i>					
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 1.18800$		0.0168	0.81	0.24 0.0214
3McAllister	$V_{12} = 3.24825$	$V_{21} = 1.40970$	0.0097	0.45	0.14 0.0136
4McAllister	$V_{1122} = 2.11271$	$V_{1112} = 4.01389$	$V_{2221} = 1.07854$	0.0097	0.45 0.14 0.0135
$T = 313.15K$					
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>					
UNIFAC- VISCO			0.6778	32.46	11.55 0.7362
<i>Korelativni modeli</i>					
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 1.30500$		0.0183	1.60	0.31 0.0222
3McAllister	$V_{12} = 2.90227$	$V_{21} = 1.32465$	0.0141	1.32	0.24 0.0218
4McAllister	$V_{1122} = 1.87927$	$V_{1112} = 3.56397$	$V_{2221} = 1.06224$	0.0159	1.51 0.27 0.0208

## Nastavak Tabele P17

		T = 318.15K			
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>					
UNIFAC- VISCO		0.6179	32.37	12.22	0.6739
<i>Korelativni modeli</i>					
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 1.32480$	0.0245	1.28	0.48	0.0287
3McAllister	$V_{12} = 2.62647$ $V_{21} = 1.22574$	0.0085	0.48	0.17	0.0104
4McAllister	$V_{1122} = 1.78612$ $V_{1112} = 3.14220$ $V_{2221} = 0.95017$	0.0071	0.40	0.14	0.0094
		T = 323.15K			
<i>Prediktivni modeli - modeli doprinosa grupa</i>					
UNIFAC- VISCO		0.5707	32.72	12.96	0.6231
<i>Korelativni modeli</i>					
Teja- Rice	$\psi_{tr} = 1.36890$	0.0352	2.29	0.80	0.0403
3McAllister	$V_{12} = 2.38650$ $V_{21} = 1.16058$	0.0102	1.09	0.23	0.0139
4McAllister	$V_{1122} = 1.67967$ $V_{1112} = 2.79877$ $V_{2221} = 0.88121$	0.0102	1.01	0.23	0.0136

Tabela P18 Rezultati predviđanja viskoznosti UNIFAC-VISCO modelom binarnih smeša u temperaturnom intervalu od 288.15 do 323.15 K

Greška proračuna																
AAD mPas	PD(%)	PDm(%)	$\sigma$ (mPas)	AAD mPas	PD(%)	PDm(%)	$\sigma$ (mPas)	AAD mPas	PD(%)	PDm(%)	$\sigma$ (mPas)					
<b>Dimetilfitalat (1) + 1-Butanol (2)</b>																
I				II				III								
288.15	0.7445	9.00	4.73	0.9434	0.3879	3.92	2.47	0.5952								
293.15	0.4300	6.22	3.46	0.5556	0.2262	3.29	1.82	0.3143								
298.15	0.2307	3.81	2.30	0.3184	0.1651	3.53	1.65	0.1957								
303.15	0.1226	2.37	1.48	0.1742	0.1596	4.45	1.93	0.1845								
308.15	0.0813	2.15	1.18	0.0992	0.1750	5.79	2.53	0.2073								
313.15.	0.0772	2.73	1.32	0.0868	0.2041	7.39	3.48	0.2286								
318.15	0.0870	3.68	1.72	0.1056	0.2227	8.92	4.41	0.2427								
323.15	0.1111	5.11	2.53	0.1261	0.2324	10.32	5.29	0.2499								
<b>Dimetilfitalat (1) + 2-Butanol (2)</b>																
I				II				III				IV				
288.15K	0.6926	10.21	4.30	0.7357	0.9947	14.55	6.17	1.0493	1.6280	24.32	10.10	1.6952	2.0572	30.65	12.76	2.1506
293.15	0.3470	6.37	2.77	0.3809	0.5847	10.54	4.66	0.6151	1.0847	19.95	8.65	1.1186	1.4229	26.03	11.34	1.4750
298.15	0.1195	2.89	1.18	0.1413	0.2718	6.00	2.68	0.2911	0.6721	15.00	6.62	0.6881	0.9425	20.82	9.28	0.9722
303.15	0.1310	3.67	1.58	0.1486	0.0912	2.49	1.10	0.1115	0.3966	10.53	4.77	0.4034	0.6166	16.11	7.41	0.6328
308.15	0.1975	5.96	2.85	0.2256	0.0937	3.04	1.35	0.1072	0.2121	6.64	3.06	0.2162	0.3941	12.01	5.68	0.4033
313.15.	0.2483	8.39	4.22	0.2805	0.1478	5.23	2.52	0.1707	0.0851	3.16	1.45	0.0932	0.2377	8.35	4.04	0.2431
318.15	0.2854	11.11	5.66	0.3135	0.1945	7.66	3.85	0.2183	0.0385	1.72	0.76	0.0455	0.1274	5.09	2.53	0.1315
323.15	0.3173	13.81	7.18	0.3428	0.2392	10.48	5.41	0.2597	0.0802	3.46	1.81	0.0907	0.0374	1.87	0.85	0.0408

Nastavak Tabele P18

Dimetilfitalat (1) + 2-Butanon (2)												
I			II			III						
288.15	0.4273	7.79	3.00	0.5873	0.4277	7.83	3.00	0.5872	0.4622	8.76	3.24	0.6268
293.15	0.2407	4.84	2.13	0.3381	0.2408	4.84	2.13	0.3380	0.2673	5.49	2.36	0.3697
298.15	0.1255	2.95	1.37	0.1829	0.1254	2.93	1.36	0.1827	0.1457	3.37	1.59	0.2081
303.15	0.0609	2.39	0.80	0.0811	0.0605	2.35	0.80	0.0808	0.0712	2.33	0.94	0.0990
308.15	0.0419	2.92	0.65	0.0453	0.0415	2.88	0.65	0.0449	0.0420	2.47	0.66	0.0464
313.15	0.0535	4.12	0.98	0.0616	0.0532	4.08	0.97	0.0613	0.0410	3.32	0.75	0.0483
318.15	0.0761	5.57	1.61	0.0829	0.0759	5.53	1.61	0.0826	0.0620	4.73	1.32	0.0685
323.15	0.1051	7.47	2.53	0.1130	0.1049	7.44	2.52	0.1129	0.0925	6.64	2.22	0.0993
Dimetilfitalat (1) + Tetrahydrofuran (2)												
I			II			III						
288.15	0.3054	9.05	1.95	0.3761	0.3111	10.98	1.98	0.3460	0.3178	8.88	2.03	0.4011
293.15	0.2154	6.31	1.74	0.2740	0.2185	8.18	1.77	0.2449	0.2280	6.20	1.84	0.2966
298.15	0.1588	6.54	1.59	0.1784	0.1810	8.75	1.81	0.1948	0.1613	6.24	1.61	0.1888
303.15	0.1300	6.92	1.58	0.1422	0.1679	9.47	2.04	0.1861	0.1299	6.58	1.58	0.1414
308.15	0.1216	7.37	1.76	0.1338	0.1608	9.98	2.33	0.1870	0.1159	6.90	1.68	0.1261
313.15	0.1241	8.98	2.11	0.1405	0.1721	11.80	2.93	0.1930	0.1188	8.53	2.02	0.1303
318.15	0.1211	8.83	2.39	0.1409	0.1716	11.80	3.39	0.1911	0.1112	8.25	2.20	0.1298
323.15	0.1285	9.38	2.92	0.1474	0.1743	12.34	3.96	0.1937	0.1164	8.74	2.64	0.1365



**Tabela P19** Rezultati korelisanja  $V^E$  pomoću PRSV CEOS i CEOS/ $G^E$  modela ternarnih sistema u temperaturnom intervalu od 288.15 do 313.15 K

T / K	$\Delta g_{123}$ (J·mol <sup>-1</sup> ) $\Delta g_{132}$ (J·mol <sup>-1</sup> )	$\Delta g_{213}$ (J·mol <sup>-1</sup> ) $\Delta g_{231}$ (J·mol <sup>-1</sup> )	$\Delta g_{312}$ (J·mol <sup>-1</sup> ) $\Delta g_{321}$ (J·mol <sup>-1</sup> )	PD (%)	$\sigma$ (cm <sup>3</sup> ·mol <sup>-1</sup> )
<b>1-Butanol (1) + Hlororform (2) + Benzen (3)</b>					
<i>T</i> = 288.15					
TCBT-2	0.242155·10 <sup>4</sup> -0.432052·10 <sup>3</sup>	-0.354164·10 <sup>4</sup> 0.419419·10 <sup>4</sup>	-0.100651·10 <sup>4</sup> 0.134159·10 <sup>6</sup>	2.66	0.0111
TCBT-3	0.758883·10 <sup>4</sup> 0.903925·10 <sup>4</sup>	-0.940626·10 <sup>3</sup> -0.422690·10 <sup>2</sup>	-0.578481·10 <sup>4</sup> -0.894742·10 <sup>4</sup>	1.67	0.0064
<i>T</i> = 293.15					
TCBT-2	0.243634·10 <sup>4</sup> -0.406890·10 <sup>3</sup>	-0.350073·10 <sup>4</sup> 0.410023·10 <sup>4</sup>	-0.102652·10 <sup>4</sup> 0.117706·10 <sup>6</sup>	2.34	0.0094
TCBT-3	-0.341819·10 <sup>4</sup> 0.756450·10 <sup>4</sup>	0.130816·10 <sup>3</sup> -0.313663·10 <sup>4</sup>	-0.235320·10 <sup>3</sup> 0.649785·10 <sup>4</sup>	1.60	0.0060
<i>T</i> = 298.15					
TCBT-2	0.243936·10 <sup>4</sup> -0.478844·10 <sup>3</sup>	-0.340318·10 <sup>4</sup> 0.395155·10 <sup>4</sup>	-0.900287·10 <sup>3</sup> 0.986065·10 <sup>5</sup>	2.00	0.0077
TCBT-3	0.726134·10 <sup>4</sup> 0.809144·10 <sup>4</sup>	-0.451356·10 <sup>3</sup> -0.530041·10 <sup>3</sup>	-0.575173·10 <sup>4</sup> -0.837497·10 <sup>4</sup>	1.38	0.0044
<i>T</i> = 303.15					
TCBT-2	0.237066·10 <sup>4</sup> -0.492765·10 <sup>3</sup>	-0.305383·10 <sup>4</sup> 0.363026·10 <sup>4</sup>	-0.815095·10 <sup>3</sup> -0.286823·10 <sup>4</sup>	1.76	0.0066
TCBT-3	-0.397164·10 <sup>4</sup> 0.827809·10 <sup>4</sup>	-0.388234·10 <sup>3</sup> -0.341436·10 <sup>4</sup>	0.960691·10 <sup>3</sup> 0.724872·10 <sup>4</sup>	1.16	0.0041
<i>T</i> = 308.15					
TCBT-2	0.237568·10 <sup>4</sup> -0.610811·10 <sup>3</sup>	-0.306729·10 <sup>4</sup> 0.360214·10 <sup>4</sup>	-0.652608·10 <sup>3</sup> -0.148557·10 <sup>5</sup>	1.64	0.0061
TCBT-3	-0.429031·10 <sup>4</sup> 0.961359·10 <sup>4</sup>	-0.257027·10 <sup>3</sup> -0.378274·10 <sup>4</sup>	-0.250666·10 <sup>3</sup> 0.836248·10 <sup>4</sup>	1.24	0.0042
<i>T</i> = 313.15					
TCBT-2	0.246110·10 <sup>4</sup> -0.660702·10 <sup>3</sup>	-0.328388·10 <sup>4</sup> 0.346506·10 <sup>4</sup>	-0.470757·10 <sup>3</sup> 0.275323·10 <sup>6</sup>	1.72	0.0066
TCBT-3	-0.447078·10 <sup>4</sup> 0.988870·10 <sup>4</sup>	-0.104401·10 <sup>4</sup> -0.380606·10 <sup>4</sup>	0.148843·10 <sup>4</sup> 0.874493·10 <sup>4</sup>	1.38	0.0049
<i>T</i> = 288.15-323.15 <sup>a</sup>					
TCBT-2	0.331960·10 <sup>4</sup> 0.367322·10 <sup>4</sup>	-0.259234·10 <sup>4</sup> 0.840441·10 <sup>3</sup>	-0.828002·10 <sup>3</sup> -0.591097·10 <sup>4</sup>	8.14	0.0265
TCBT-3	0.115991·10 <sup>4</sup> -0.299962·10 <sup>4</sup>	-0.388894·10 <sup>2</sup> 0.301905·10 <sup>4</sup>	-0.692183·10 <sup>3</sup> 0.894278·10 <sup>3</sup>	2.38	0.0083
<i>T</i> = 288.15-323.15 <sup>b</sup>					
TCBT-2	0.266526·10 <sup>4</sup> -0.290106·10 <sup>4</sup>	-0.517119·10 <sup>4</sup> 0.464600·10 <sup>4</sup>	0.465144·10 <sup>4</sup> 0.128070·10 <sup>6</sup>	2.87	0.0107
TCBT-3	0.209318·10 <sup>4</sup> -0.110182·10 <sup>4</sup>	0.196298·10 <sup>4</sup> 0.379155·10 <sup>4</sup>	-0.427686·10 <sup>4</sup> -0.548159·10 <sup>5</sup>	4.00	0.0142

Nastavak Tabele P19

2-Butanol (1) + Hlororform (2) + Benzen (3)					
$T = 288.15$					
TCBT-2	$0.204091 \cdot 10^4$ $-0.371641 \cdot 10^4$	$0.345123 \cdot 10^4$ $-0.322741 \cdot 10^4$	$0.553647 \cdot 10^4$ $-0.186615 \cdot 10^5$	3.96	0.0240
TCBT-3	$0.391234 \cdot 10^4$ $-0.412829 \cdot 10^4$	$0.101389 \cdot 10^5$ $0.787602 \cdot 10^4$	$-0.646914 \cdot 10^4$ $-0.913092 \cdot 10^4$	3.89	0.0228
$T = 293.15$					
TCBT-2	$0.224964 \cdot 10^4$ $-0.653142 \cdot 10^2$	$-0.528556 \cdot 10^4$ $0.744776 \cdot 10^4$	$-0.286027 \cdot 10^4$ $0.208718 \cdot 10^2$	3.53	0.0213
TCBT-3	$0.126640 \cdot 10^5$ $-0.624199 \cdot 10^4$	$-0.183598 \cdot 10^4$ $0.111098 \cdot 10^5$	$0.682639 \cdot 10^4$ $-0.852836 \cdot 10^4$	3.32	0.0193
$T = 298.15$					
TCBT-2	$0.207048 \cdot 10^4$ $-0.376508 \cdot 10^4$	$0.337238 \cdot 10^4$ $-0.301787 \cdot 10^4$	$0.511174 \cdot 10^4$ $0.225245 \cdot 10^4$	3.08	0.0175
TCBT-3	$0.763351 \cdot 10^3$ $0.105692 \cdot 10^4$	$0.962553 \cdot 10^4$ $-0.492357 \cdot 10^4$	$-0.696609 \cdot 10^4$ $0.757514 \cdot 10^4$	3.06	0.0178
$T = 303.15$					
TCBT-2	$0.234628 \cdot 10^4$ $-0.193370 \cdot 10^3$	$-0.535657 \cdot 10^4$ $0.690508 \cdot 10^4$	$-0.243968 \cdot 10^4$ $0.157865 \cdot 10^5$	2.64	0.0160
TCBT-3	$0.115363 \cdot 10^5$ $-0.516002 \cdot 10^4$	$0.199689 \cdot 10^4$ $0.110699 \cdot 10^5$	$0.233889 \cdot 10^4$ $-0.666385 \cdot 10^4$	2.61	0.0154
$T = 308.15$					
TCBT-2	$0.233718 \cdot 10^4$ $-0.295733 \cdot 10^3$	$-0.528075 \cdot 10^4$ $0.670400 \cdot 10^4$	$-0.222376 \cdot 10^4$ $0.139884 \cdot 10^5$	2.36	0.0151
TCBT-3	$0.106022 \cdot 10^5$ $-0.401854 \cdot 10^4$	$0.335121 \cdot 10^4$ $0.103802 \cdot 10^5$	$0.161251 \cdot 10^4$ $-0.692785 \cdot 10^4$	2.20	0.0138
$T = 313.15$					
TCBT-2	$0.231450 \cdot 10^4$ $-0.536491 \cdot 10^3$	$-0.522712 \cdot 10^4$ $0.652393 \cdot 10^4$	$-0.178761 \cdot 10^4$ $0.105119 \cdot 10^5$	2.06	0.0139
TCBT-3	$0.103149 \cdot 10^5$ $-0.385670 \cdot 10^4$	$0.302390 \cdot 10^4$ $0.990619 \cdot 10^4$	$0.182072 \cdot 10^4$ $-0.678580 \cdot 10^4$	1.94	0.0127
$T = 288.15-323.15^a$					
TCBT-2	$0.425304 \cdot 10^4$ $-0.289665 \cdot 10^1$	$-0.310880 \cdot 10^4$ $0.577474 \cdot 10^4$	$-0.350464 \cdot 10^4$ $-0.450424 \cdot 10^4$	3.60	0.0214
TCBT-3	$0.719296 \cdot 10^4$ $-0.305088 \cdot 10^4$	$-0.543144 \cdot 10^4$ $0.658332 \cdot 10^4$	$-0.373939 \cdot 10^3$ $-0.390375 \cdot 10^4$	2.88	0.0174
$T = 288.15-323.15^b$					
TCBT-2	$0.234902 \cdot 10^4$ $-0.852324 \cdot 10^3$	$-0.211530 \cdot 10^4$ $-0.182102 \cdot 10^4$	$0.319852 \cdot 10^4$ $0.144430 \cdot 10^5$	6.32	0.0378
TCBT-3	$0.255817 \cdot 10^4$ $0.697489 \cdot 10^4$	$-0.159793 \cdot 10^4$ $0.304736 \cdot 10^2$	$0.106276 \cdot 10^4$ $0.673914 \cdot 10^4$	5.81	0.0334

**Tabela P20** Rezultati predviđanja  $V^L$  ternarnih sistema empirijskim modelima od 288.15 do 313.15 K

T/K	288.15		293.15		298.15		303.15		308.15		313.15	
	PD (%)	$\sigma$	PD (%)	$\sigma$	PD (%)	$\sigma$	PD (%)	$\sigma$	PD (%)	$\sigma$	PD (%)	$\sigma$
<b>1-Butanol (1) + Hloroform (2) + Benzen (3)</b>												
Radojković	9.27	0.0289	9.27	0.0291	9.15	0.0293	9.12	0.0297	9.29	0.0306	8.92	0.0303
Kohler	7.63	0.0266	7.51	0.0266	7.43	0.0266	7.34	0.0268	7.34	0.0273	6.91	0.0265
Jacob-Fitzner	9.27	0.0289	9.27	0.0291	9.15	0.0293	9.12	0.0297	9.29	0.0306	8.92	0.0303
Colinet	8.67	0.0270	8.60	0.0270	8.44	0.0270	8.32	0.0270	8.35	0.0275	7.90	0.0268
Tsao-Smith <sup>a</sup>	10.29	0.0317	9.95	0.0307	9.47	0.0297	9.34	0.0295	9.00	0.0290	9.07	0.0300
Tsao-Smith <sup>b</sup>	7.69	0.0265	7.38	0.0260	6.99	0.0248	6.91	0.0243	6.66	0.0238	6.12	0.0220
Tsao-Smith <sup>c</sup>	11.83	0.0435	11.25	0.0424	10.63	0.0409	10.03	0.0395	9.39	0.0383	8.46	0.0356
Toop <sup>a</sup>	<b>3.06</b>	<b>0.0106</b>	<b>3.10</b>	<b>0.0100</b>	<b>3.02</b>	<b>0.0096</b>	<b>3.19</b>	<b>0.0102</b>	<b>3.33</b>	<b>0.0109</b>	<b>3.80</b>	<b>0.0127</b>
Toop <sup>b</sup>	14.46	0.0447	14.54	0.0455	14.71	0.0461	14.79	0.0469	14.92	0.0480	14.57	0.0477
Toop <sup>c</sup>	11.92	0.0384	11.95	0.0390	11.94	0.0395	11.94	0.0401	11.97	0.0411	11.47	0.0406
Scatchard <sup>a</sup>	<b>2.93</b>	<b>0.0105</b>	<b>2.93</b>	<b>0.0097</b>	<b>2.81</b>	<b>0.0091</b>	<b>2.97</b>	<b>0.0097</b>	<b>3.08</b>	<b>0.0103</b>	<b>3.45</b>	<b>0.0117</b>
Scatchard <sup>b</sup>	15.95	0.0491	16.02	0.0500	16.09	0.0505	16.12	0.0512	16.28	0.0526	15.83	0.0523
Scatchard <sup>c</sup>	12.37	0.0381	12.48	0.0389	12.56	0.0396	12.73	0.0406	12.89	0.0419	12.65	0.0420
Rastogi	<b>23.30</b>	<b>0.0681</b>	<b>23.41</b>	<b>0.0683</b>	<b>23.65</b>	<b>0.0692</b>	<b>23.79</b>	<b>0.0706</b>	<b>24.08</b>	<b>0.0728</b>	<b>24.15</b>	<b>0.0745</b>
<b>2-Butanol (1) + Hloroform (2) + Benzen (3)</b>												
Radojković	4.89	0.0271	4.59	0.0260	4.28	0.0252	3.96	0.0252	3.84	0.0259	3.93	0.0270
Kohler	<b>3.20</b>	<b>0.0180</b>	<b>2.78</b>	<b>0.0156</b>	<b>2.38</b>	<b>0.0137</b>	<b>2.10</b>	<b>0.0129</b>	<b>2.01</b>	<b>0.0127</b>	<b>1.93</b>	<b>0.0126</b>
Jacob-Fitzner	4.89	0.0271	4.59	0.0260	4.28	0.0252	3.96	0.0252	3.84	0.0259	3.93	0.0270
Colinet	4.37	0.0243	3.99	0.0225	3.59	0.0208	3.23	0.0201	3.10	0.0203	3.10	0.0210
Tsao-Smith <sup>a</sup>	9.65	0.0539	9.04	0.0520	8.56	0.0505	8.12	0.0496	7.74	0.0491	7.31	0.0487
Tsao-Smith <sup>b</sup>	4.94	0.0260	5.52	0.0287	6.17	0.0329	6.88	0.0380	7.50	0.0430	8.00	0.0473
Tsao-Smith <sup>c</sup>	3.82	0.0196	3.74	0.0202	4.25	0.0232	4.84	0.0274	5.45	0.0319	5.74	0.0356
Toop <sup>a</sup>	5.34	0.0318	5.10	0.0306	4.95	0.0297	4.74	0.0298	4.64	0.0303	4.48	0.0307
Toop <sup>b</sup>	8.72	0.0410	7.94	0.0394	7.15	0.0380	6.61	0.0370	6.20	0.0367	5.88	0.0369
Toop <sup>c</sup>	6.15	0.0310	5.58	0.0297	4.97	0.0286	4.59	0.0282	4.25	0.0280	4.02	0.0282
Scatchard <sup>a</sup>	5.27	0.0313	5.03	0.0301	4.86	0.0291	4.65	0.0291	4.53	0.0296	4.28	0.0297
Scatchard <sup>b</sup>	9.59	0.0460	8.79	0.0447	8.00	0.0437	7.46	0.0430	7.03	0.0430	6.73	0.0433
Scatchard <sup>c</sup>	6.79	0.0351	6.29	0.0341	5.77	0.0334	5.35	0.0332	5.14	0.0336	5.06	0.0345
Rastogi	<b>24.10</b>	<b>0.1060</b>	<b>24.08</b>	<b>0.1108</b>	<b>24.04</b>	<b>0.1162</b>	<b>23.99</b>	<b>0.1218</b>	<b>23.90</b>	<b>0.1276</b>	<b>23.80</b>	<b>0.1337</b>

<sup>a</sup> alkohol (1-butanol ili 2-butanol) je asimetrična komponenta<sup>b</sup> hloroform je asimetrična komponenta<sup>c</sup> benzen je asimetrična komponenta

**Tabela P21** Rezultati predviđanja  $V^E$  pomoću PRSV CEOS i CEOS/ $G^E$  modela ternarnih sistema u temperaturnom intervalu od 288.15 do 313.15 K

T / K	vdW1-2		vdW1-3		TCBT-2		TCBT-3	
	PD (%)	$\sigma$ ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ )	PD (%)	$\sigma$ ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ )	PD (%)	$\sigma$ ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ )	PD (%)	$\sigma$ ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ )
<b>1-Butanol (1) + Hloroform (2) + Benzen (3)</b>								
288.15	5.51	0.0175	7.72	0.0233	vv <sup>c</sup>	vv	15.83	0.0552
293.15	5.32	0.0168	20.98	0.0645	vv	vv	27.62	0.0870
298.15	5.06	0.0162	20.67	0.0638	vv	vv	18.77	0.0642
303.15	4.87	0.0160	20.25	0.0632	vv	vv	12.47	0.0425
308.15	4.75	0.0162	19.49	0.0618	vv	vv	18.80	0.0722
313.15	4.84	0.0175	19.83	0.0639	vv	vv	19.17	0.0712
288.15 – 313.15 <sup>a</sup>	5.07	0.0186	2.62	0.0094	14.37	0.0506	11.75	0.0377
288.15 – 313.15 <sup>b</sup>	5.03	0.0167	31.72	0.1027	vv	vv	vv	vv
<b>2-Butanol(1) + Hloroform (2) + Benzen (3)</b>								
288.15	6.07	0.0332	10.28	0.0478	73.57	0.3819	43.67	0.2146
293.15	5.57	0.0303	8.64	0.0424	70.40	0.3826	32.22	0.1643
298.15	12.09	0.0729	5.53	0.0301	68.03	0.3868	69.07	0.3730
303.15	5.81	0.0300	5.61	0.0308	65.69	0.3907	83.21	0.4673
308.15	6.27	0.0313	4.63	0.0279	63.30	0.3934	vv	vv
313.15	7.27	0.0357	4.68	0.0288	61.48	0.3983	vv	vv
288.15 – 313.15 <sup>a</sup>	11.27	0.0711	10.08	0.0613	5.49	0.0332	15.57	0.0915
288.15 – 313.15 <sup>b</sup>	11.80	0.0725	7.10	0.0397	66.75	0.3864	75.58	0.4390

<sup>a</sup> predviđanje  $V^E$  korišćenjem temperaturno nezavisnih binarnih parametara

<sup>b</sup> predviđanje  $V^E$  korišćenjem temperaturno zavisnih binarnih parametara

<sup>c</sup> velika vrednost

Прилог 1.

## Изјава о ауторству

Изјављујем да је докторска дисертација под насловом

**Eksperimentalno određivanje i modelovanje  
volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i viskoznosti  
smeša estara, alkohola, aromata i ketona**

---

---

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

У Београду, 9.10.2019.

Потпис

Jelena Stanić

Прилог 2.

## Изјава о коришћењу

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

**Eksperimentalno određivanje i modelovanje  
volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i viskoznosti  
smeša estara, alkohola, aromata i ketona**

која је моје ауторско дело.

Сагласан/на сам да електронска верзија моје дисертације буде доступна у отвореном приступу.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду 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 прераде

4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима

5. Ауторство – без прераде

6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци. Кратак опис лиценци дат је на следећој страници.)

Потпис



У Београду, 9.10.2019.

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 прераде. 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 прераде. 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.