

5

2 Ejen



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

EMPLEO DE UNA BASE DE DATOS PARA EL
CALCULO DE PROPIEDADES FISICAS Y
TERMODINAMICAS DE DIVERSOS COMPUESTOS

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A :
ALEJANDRO ALLIER MONTAÑO



MEXICO, D. F.

TESIS CON
FALSA DE ORIGEN

1994



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO SEGUN EL TEMA

PRESIDENTE : PROF. CESAR RINCON ORTA
VOCAL : PROF. MANUEL VAZQUEZ ISLAS
SECRETARIO : JOSE ANTONIO ORTIZ RAMIREZ
1er. SUPLENTE : MARIO LUIS CHIN AUYON
2do. SUPLENTE : EDUARDO ROMERO NOCHEBUENA

SITIO DONDE SE
DESARROLLO EL TEMA :

BIBLIOTECA DE LA FACULTAD DE
QUIMICA

BIBLIOTECA DE POSGRADO DE LA
FACULTAD DE QUIMICA

BIBLIOTECA CENTRAL DE LA UNAM

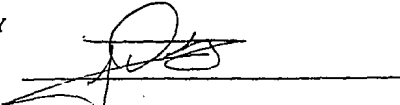
BIBLIOTECA DEL INSTITUTO MEXICANO
DEL PETROLEO

LABORATORIO DE COMPUTACION DE
LA FACULTAD DE QUIMICA

NOMBRE COMPLETO Y

FIRMA DEL ASESOR

DEL TEMA :

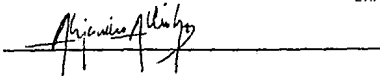

I.Q. JOSE ANTONIO ORTIZ RAMIREZ



EXAMENES PROFESIONALES
FAC. DE QUIMICA

NOMBRE Y FIRMA

DEL SUSTENTANTE :


ALEJANDRO ALLIER MONTAÑO

AGRADECIMIENTOS

A todas las personas del Departamento de Matemáticas de la Facultad, y en especial a César Rincón y Josefina Toledo, por haberme soportado tanto tiempo, y por haberme apoyado en forma directa o indirecta para que finalmente terminara esta tesis. Estoy seguro de que si no me hubieran permitido seguir dando clases, no hubiese tenido la motivación necesaria para llevar a cabo todo lo que hacia falta.

A David Ugalde, por su ayuda desinteresada y la forma tan sencilla en que logró hacerme comprender detalles importantes para estructurar gran parte del trabajo que tenía por delante. Gracias por compartir algo de lo que sabías conmigo.

DEDICATORIAS

A mis padres, no solo porque me dieron la vida, sino porque a través del tiempo me han demostrado que vale la pena vivirla.

A Eugenia y Emilio, porque me han enseñado que ser hermanos es mucho más que una simple coincidencia biológica.

A Patricia, porque entraste a mi vida a medio examen y te has convertido en mi pequeño universo, como si te trajera puesta debajo de mi piel.

A José, porque a veces siento que puedo ver a través de tus ojos.

A Eduardo, porque te aseguro que nada me ha parecido un sacrificio por ti.

A mi abuelita Evangelina, por demostrarme cuanto sabes querer.

A la Sra. Sara, porque quisiera pagarle de algún modo lo mucho que me ha dado.

A Victor, por ser el mejor ahijado del mundo.

A Luz Ma., Dani, Chema y Juan, porque siempre espero poder ayudarlos.

A mis tíos José, Emma y Conchita, porque me siento como un hijo más cuando estoy con ustedes.

A mi tío Guillermo, porque siempre he sentido que me has dado lo mejor de ti.

A Evangelina, porque el camino que te falta aún es largo, y me gustaría ayudarte a recorrerlo.

ÍNDICE

HIPÓTESIS	1
OBJETIVOS	2
JUSTIFICACIÓN	5
MATERIALES Y MÉTODOS	7
INTRODUCCIÓN	10
1.1 Propiedades Críticas	14
1.2 Temperatura de Ebullición	16
1.3 Volumen Molar en el Punto de Ebullición	17
1.4 Factor Acéntrico	18
1.5 Momento Dipolar	19
2.1 Conductividad Térmica	21
2.2 Conductividad Térmica de Gases	22
2.3 Conductividad Térmica de Líquidos	24
3.1 Densidad	27
3.2 Densidad de Gases	27
3.3 Densidad de Líquidos	29
4.1 Difusividad	32
4.2 Difusividad Binaria de Gas en Gas	33
4.3 Difusividad Binaria de Líquido en Líquido	35
4.4 Difusividad Binaria de Gas en Líquido	36
5.1 Presión de Vapor	38

6.1	Calor Específico	42
6.1.1	Calor Específico de Gas Ideal	43
6.1.2	Calor Específico de Líquidos	45
6.1.3	Calor Específico de Sólidos	46
6.2	Energía Libre de Formación de Gas Ideal	46
6.3	Entalpía de Formación de Gas Ideal	48
6.4	Entalpía de Vaporización de Gas Ideal	49
7.1	Tensión Superficial	52
8.1	Viscosidad	56
8.2	Viscosidad de Gases	57
8.3	Viscosidad de Líquidos	59
	RESULTADOS Y CONCLUSIONES	62
	BIBLIOGRAFÍA	64
	ANEXOS	
I.	Instalación del Programa	70
II.	Obtención de constantes de ecuaciones mediante el método de mínimos cuadrados	72
III.	Métodos numéricos comunes para la obtención de raíces en ecuaciones algebraicas	77
IV.	Constantes de correlaciones obtenidas mediante mínimos cuadrados	85

HIPÓTESIS

La automatización de cualquier proceso siempre tiene las ventajas de que el tiempo requerido para realizar el proceso se reduce considerablemente. En el caso en que se emplean bases de datos como parte del proceso de automatización, esto trae consigo la ventaja adicional de que una cantidad importante de información se encuentra concentrada y centralizada, de forma tal que el acceso a la información necesaria es mucho más ágil y sencillo.

OBJETIVOS

El objetivo de esta tesis es el generar una base de datos que brinde ayuda tangible a todas aquellas personas que tienen la necesidad de contar con información adecuada para el diseño de equipos de transferencia de masa y calor. Asimismo, el agrupar las diferentes correlaciones existentes en la literatura acerca de propiedades físicas y termodinámicas, y producir nuevas correlaciones que no existan, es otro objetivo primordial de este trabajo. Por último, proporcionar una forma alterna de determinar propiedades para compuestos que han sido poco estudiados experimentalmente, también se plantea como una meta importante dentro del trabajo desarrollado.

JUSTIFICACIÓN

¿Porque una base de datos que calcule propiedades de compuestos?. La respuesta es simple: no se ha desarrollado nada comparable en nuestro país, que se encuentre al alcance de cualquier persona interesada en ella. En el diseño de equipo de separación y de transferencia de masa y calor, es necesario conocer en detalle las propiedades físicas y térmicas de cada uno de los componentes del sistema, para así llegar al diseño adecuado del equipo que llevará a cabo la operación unitaria deseada. Sin embargo, es posible que la información necesaria no se encuentre disponible para el compuesto de interés, o que quizás se reporten extensas tablas pero no se encuentre la propiedad reportada a las condiciones de diseño. Una base de datos accesible a estudiantes, profesores, investigadores y profesionistas, que permita potencialmente añadir datos nuevos derivados de la experimentación, simplifica mucho el proceso de búsqueda de datos y permite al usuario disponer en una forma más adecuada de su tiempo.

MATERIALES Y MÉTODOS

La base de datos desarrollada para estimar propiedades de diversos compuestos, emplea archivos que tienen formato ASCII (American Standard Code for Information Interchange) y DBF (Data Base File, de Dbase IV¹), fácilmente reconocibles por la mayor parte de las computadoras personales empleadas actualmente. El único requerimiento para emplear la base de datos, es contar con una computadora que tenga instalado el ambiente WINDOWS², ya que todo el código fuente del programa fué escrito en VISUAL BASIC versión 3.0³ para WINDOWS. La razón que motivó esta decisión, es que probablemente WINDOWS continúe siendo un standard, como lo ha sido el sistema operativo MS-DOS⁴, durante un amplio período de tiempo. La mayoría de las computadoras que se venden hoy en día, traen ya instalado este tipo de sistemas de trabajo, lo cual no implica un gasto adicional en paquetería. Una de las ventajas al trabajar en WINDOWS, es que la información es fácilmente compartida entre diferentes aplicaciones, lo cual siempre es deseable. Pretendiendo que el programa fuese empleado por diversos usuarios durante el mayor tiempo posible, se decidió desarrollarlo en este tipo de ambiente, en vez de generar una versión para MS-DOS que resultase obsoleta en un tiempo mucho menor.

VISUAL BASIC es un lenguaje de programación extremadamente sencillo, pero que no por eso es menos poderoso que algunos otros lenguajes que existen en el mercado, como TURBO PASCAL y TURBO C⁵ para WINDOWS. Debido al ambiente gráfico en que se desarrolla cualquier aplicación en WINDOWS, es necesario que cualquier lenguaje de programación que desee crear aplicaciones en este entorno este orientado a objetos. Un objeto en nuestra vida cotidiana es un ente que reúne una serie de propiedades que lo diferencian con claridad de todas las demás cosas que le rodean. El primer paso para destruir un objeto consiste en comenzar a decir cuales son cada una de las características que posee. Podemos decir de un durazno por ejemplo, que es de color amarillo con rojo,

¹Dbase IV es marca registrada de Borland

²Windows es marca registrada de Microsoft Corporation

³Visual Basic es marca registrada de Microsoft Corporation

⁴MS-DOS es marca registrada de Microsoft Corporation

⁵Turbo Pascal y Turbo C son marcas registradas de Borland

que tiene una piel aterciopelada y que tiene un gusto y olor agradables, pero sin embargo no lo estamos describiendo tan adecuadamente como si lo colocásemos en la palma de una persona interesada en conocer un durazno. De igual forma, en cualquier lenguaje de programación orientada a objetos un objeto es un registro que cuenta con una serie de campos que son sus características, y además cuenta con métodos y procedimientos propios que pueden efectuar cálculos sobre los datos contenidos en su interior. Es este encapsulamiento una parte importante del concepto de objeto en la programación. De tal forma, cuando un objeto se encuentra definido por completo, no es necesario prestarle más atención para que así interactúe con los demás objetos existentes en un programa.

El equipo de cómputo con el cual se desarrolló la base de datos consistió en una computadora personal Hewlett-Packard modelo Vectra, con procesador 486 a 50 MHz y monitor a color Super VGA⁶. Por simplicidad y ahorro de espacio también, el programa fué compilado en diskettes de 3.5" de tamaño. Esto es recomendable ya que un disco flexible de 5.25", aunque tiene aproximadamente la misma capacidad de almacenamiento que uno más compacto, es susceptible de sufrir daño físico más fácilmente.

No es necesario tener exactamente este tipo de equipo para poder utilizar el programa PROPS.EXE, aunque si es necesario contar con un monitor a color EGA⁷, un procesador 386 o superior, y una unidad de discos flexibles de 3.5".

⁶Super Video Graphics Adapter

⁷Enhanced Graphics Adapter

INTRODUCCIÓN

En muchas ocasiones, cuando se diseña equipo una de las partes más laboriosas suele ser aquella en donde se recopila información preliminar, relacionada con las propiedades físicas y térmicas de diferentes compuestos. En este trabajo se pretende sistematizar y hacer más accesible este tipo de información a las personas involucradas en el diseño de equipo. Es posible dividir el trabajo desarrollado en esta tesis en dos grandes partes : una que se ocupa de estimar mediante correlaciones reportadas o generadas mediante mínimos cuadrados, las propiedades necesarias para una serie de compuestos, y otra que trata de calcular las propiedades mediante métodos de contribución de grupos funcionales elementales, por ejemplo : una molécula de etano se puede pensar como la unión de dos grupos funcionales metilo ($-CH_3$).

Aunque la primera parte es quizás la más sencilla, se ha tratado de incorporar material suficiente, de tal forma que los compuestos de empleo más común en la industria química se encuentren reportados en su mayoría.

En cuanto a la segunda parte, es fácil percibir que, al determinarse una propiedad dada para una serie homóloga, por ejemplo los n-alcanos, los incrementos o decrementos que se observan en la propiedad a condiciones constantes, parecen ser iguales entre miembros. Es justificable suponer, por lo tanto, que el incremento observado corresponde simplemente a la contribución que cierto grupo imparte a cada diferente miembro de la serie, en el caso de los n-alcanos, este miembro sería entonces el grupo funcional $-CH_2$. Es posible entonces, mediante el empleo de métodos estadísticos adecuados, determinar la influencia de cada grupo estructural fundamental y generar un algoritmo para estimar la propiedad de interés, de un compuesto para el cual no se hubiese llevado a cabo determinación experimental alguna, es decir, conociendo la estructura molecular del compuesto, éste podría ser "sintetizado" mediante adición de grupos, y la propiedad se estimaría sumando las contribuciones de cada grupo respectivo. Aunque suena fácil, el principal problema para desarrollar una técnica de contribución de grupos, estriba en la enorme cantidad de datos experimentales que hay que generar y procesar. Si además se

desea extender la técnica a diferentes condiciones de temperatura y presión, entonces el trabajo aumenta considerablemente. No es el objetivo del presente trabajo desarrollar tales métodos, sino integrar los ya existentes en un ambiente común, para poder estimar la propiedad necesaria para un número casi ilimitado de distintos compuestos. Tampoco se consideran mezclas, sino que únicamente se han examinado los procedimientos aplicables a compuestos puros. En general no es difícil extender los métodos aquí empleados a sistemas multicomponentes, si se utilizan las reglas de mezclado adecuadas para cada caso. El programa permite, en muchos casos, generar una expresión analítica para evaluar la propiedad de interés de cada compuesto, con lo que el usuario de la base de datos puede entonces emplear dichas correlaciones para diseño de equipo. A continuación se describen brevemente los diferentes métodos y correlaciones que se han empleado para determinar cada una de las propiedades que se incluyen en las bases de datos que maneja PROPS.EXE.

CAPITULO 1.

CONSTANTES CARACTERÍSTICAS DE COMPUESTOS

1.1 Propiedades Críticas.

La presión, volumen y temperatura críticos, son quizás las constantes de compuestos puros más ampliamente usadas. Las unidades base en las que se manejan en este trabajo son [bar], [cm³/mol] y [°K] respectivamente. Las propiedades críticas son necesarias para estimar propiedades como la densidad de líquidos, presión de vapor, momentos dipolares, tensión superficial, densidad de gases, viscosidad de gases y muchas otras. También es importante conocer estas constantes, debido a que en ocasiones la separación de una mezcla, puede o no ser efectuada dependiendo de las condiciones a las que se lleve a cabo. En este caso en particular, sería necesario evaluar las propiedades pseudocríticas de la mezcla, a partir de las propiedades críticas de cada uno de los componentes de la mezcla. Se han descrito con detalle (32)(34)(43) diversos algoritmos para realizar este tipo de cálculos en una forma eficiente.

El punto crítico de un compuesto puro se define como las condiciones de temperatura y presión, a las cuales las propiedades de la fase líquida y de la fase gaseosa del compuesto se parecen tanto entre sí, que no es posible diferenciarlas (10). En este punto y por arriba de él, líquido y gas forman una sola fase homogénea.

La temperatura crítica de una sustancia pura generalmente se obtiene midiendo la temperatura a la cual el menisco que se forma entre la fase líquida y la gaseosa desaparece al calentar el compuesto, o bien la temperatura a la cual aparece dicho menisco al enfriar la sustancia. Experimentalmente, se determinan ambas temperaturas, aunque es evidente que deben ser iguales entre sí. La presión crítica es la presión que se observa en el punto crítico, mientras que el volumen crítico es el volumen molar a estas condiciones de temperatura y presión.

La curva de presión de vapor para una sustancia pura define las condiciones de equilibrio para que coexistan las fases de líquido y gas. Esta curva comienza en el punto triple (ver figura 1.1) 2, en el cual el vapor, líquido y gas de la sustancia coexisten en equilibrio, y se extiende hasta el punto crítico C. A medida que el punto crítico se va

alcanzando a lo largo de esta curva de vaporización, las propiedades específicas de las fases gaseosa y líquida coexistentes se van pareciendo más, hasta que son idénticas en el punto crítico, en donde una sola fase se encuentra presente. A una presión más alta que la presión crítica P_c , y a una temperatura más alta que la temperatura crítica T_c , se dice que la fase homogénea se encuentra en la región super-crítica.

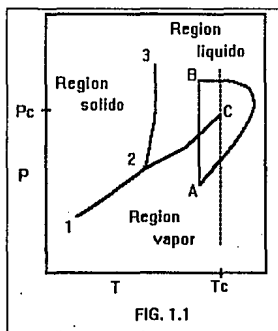


FIG. 1.1

Es posible ir de la fase gaseosa a la fase líquida en dos formas. En la fig. 1.1 se ve que se puede seguir un camino vertical a temperatura constante (menor que la temperatura crítica), entre los puntos A y B, de tal forma que al ir incrementándose la presión, se cruza la curva de vaporización y se observa un cambio abrupto en las propiedades del vapor, llevándose a cabo una condensación de este vapor en líquido, hasta que la única fase presente es líquida. También es posible seguir un camino entre A y B de tal forma que se rodease el punto crítico, sin cruzar la curva de vaporización. En este caso, no se observaría un cambio repentino en las propiedades, ni tampoco la formación de un menisco, y el proceso se llevaría a cabo de forma gradual.

La base de datos contiene en los archivos TC.DBF, VC.DBF, PC.DBF y ZC.DBF información de temperaturas críticas, volúmenes críticos, presiones críticas y factores de

compresibilidad críticos, para una cantidad suficiente de compuestos puros. La información resumida en esos archivos proviene de diferentes reportes (2)(28)(29)(43)(44)(53). Si es necesario estimar dichas constantes por un método de contribución de grupos, la base de datos hace uso del archivo TCPCVC.GRP para ello. En este archivo se encuentra la descripción de los grupos funcionales, junto con la contribución de cada uno de ellos a la temperatura, presión y volumen críticos. Aunque se han desarrollado recientemente métodos que permiten estimar las propiedades críticas de compuestos puros (10), mediante el número de carbonos presentes en el compuesto, se ha considerado que existen técnicas de contribución de grupos más generales. Las ecuaciones utilizadas son las sugeridas por Joback (44) y tienen la forma :

$$T_c = T_b(0.584 + 0.965 \sum_i n_i \Delta T_{ci} - (\sum_i n_i \Delta T_{ci})^2)^{-1}$$

$$P_c = (0.113 + 0.0032n_a - \sum_i n_i \Delta P_{ci})^{-2}$$

$$V_c = 17.5 + \sum_i n_i \Delta V_{ci}$$

En donde ΔT_{ci} , ΔP_{ci} y ΔV_{ci} son las contribuciones de cada grupo funcional a las propiedades T_c , P_c y V_c , respectivamente, mientras que n_a es el número total de diferentes átomos por los cuales está formado el compuesto para el cual se desea estimar las propiedades críticas. Los términos n_i representan el número de grupos del tipo i , presentes dentro de la molécula, que están contribuyendo cada uno con un factor ΔT_{ci} , ΔP_{ci} o ΔV_{ci} al valor total de la propiedad.

1.2 Temperatura de Ebullición.

La temperatura de ebullición, T_b , es la temperatura a la cual la fase líquida de una sustancia pura comienza a pasar a la fase gaseosa. Esta temperatura es función de la presión y se define como punto normal de ebullición, a la temperatura de ebullición que se registra a una presión equivalente a la presión atmosférica a nivel del mar. Generalmente se

utiliza T_b para denotar al punto normal de ebullición, indicando la presión a la que se hizo la determinación, en caso de que esta sea diferente de una atmósfera. La temperatura de ebullición se utiliza en varias correlaciones para estimar diferentes propiedades, incluyendo las propiedades críticas. Debido a que es una propiedad de fácil medición, hay un enorme volumen de reportes en la literatura, para un inmenso número de compuestos. Se pueden desconocer una gran cantidad de constantes de un compuesto, pero el punto normal de ebullición casi siempre es conocido. Por este hecho, es absurdo pretender realizar una base de datos de temperatura de ebullición que sea lo suficientemente representativa de la información existente, y que al mismo tiempo sea manejable por un programa y una computadora personal dentro de los standards convencionales.

Sin embargo, es precisamente el hecho de que existe una gran cantidad de información, lo que permite conocer con mucha mayor precisión las contribuciones de diferentes grupos funcionales al valor de esta constante, ya que con un mayor volumen de información las conclusiones estadísticas se vuelven más confiables.

Uno de los métodos de estimación más confiables de esta propiedad por contribución de grupos, es el método propuesto por Joback (44) :

$$T_b = 198 + \sum_i n_i \Delta T_{bi}$$

En esta ecuación ΔT_{bi} es la contribución de cada grupo funcional i a la temperatura de ebullición, y n_i es el número de grupos funcionales i presentes en la molécula.

En el archivo TCPCVC.GRP se encuentran los diferentes grupos funcionales para definir un compuesto, y las contribuciones respectivas de cada uno a la temperatura de ebullición. El programa desarrollado hace uso de dicho archivo, si el usuario no tiene información acerca del punto normal de ebullición del compuesto deseado.

1.3 Volumen Molar en el Punto de Ebullición.

El volumen molar en el punto normal de ebullición, V_b , se llega a emplear en correlaciones de coeficientes de difusión y algunas otras propiedades, por lo que se incluye en el presente trabajo. La base de datos determina V_b después de estimar V_c , empleando algebraicamente la forma propuesta por Tyn y Calus (44) :

$$V_b = 0.285V_c^{1.048}$$

1.4 Factor Acéntrico.

Una de las constantes de compuestos puros más comunes es el factor acéntrico, el cual se define como :

$$\omega = -\log P_{rr}(T_r = -0.7) - 1$$

Para obtener valores de ω , la presión de vapor reducida ($P_{vr} = P_v/P_c$) evaluada para $T_r = T/T_c = 0.7$ es necesaria. Se puede ver con claridad que el factor acéntrico es un número adimensional. Como se propuso originalmente, esta propiedad representaba la acentricidad, o no esfericidad, de una molécula. Para gases monoatómicos ω es por lo tanto, igual a cero. Inclusive compuestos no monoatómicos, tienen valores muy cercanos a cero. Sin embargo, para hidrocarburos de más alto peso molecular, el valor del factor acéntrico aumenta, de igual forma que aumenta al calcularse para sustancias más polares. Actualmente, el factor acéntrico es ampliamente utilizado como un parámetro que de alguna manera mide la complejidad de una molécula con respecto a la simetría y a la polaridad. Sin embargo, los valores tan grandes de ω ($\omega > 0.5$) para algunos compuestos altamente polares, no tienen un significado físico tan claro como lo tenía antes. Los factores acéntricos para una gran cantidad de compuestos puros (44) se encuentran compilados en el archivo ACENTRIC.DBF, del cual hace uso la base de datos. Aunque no se han desarrollado procedimientos para calcular específicamente el factor acéntrico mediante contribución de grupos, esta constante se puede estimar haciendo uso del archivo TCPCVC.GRP y empleando después la relación propuesta por Kesler y Lee (44) :

$$\omega = \frac{-\ln P_c - 5.92714 + 6.09648\theta^{-1} + 1.28862(\ln\theta) - 0.169347\theta^6}{15.2518 - 15.6875\theta^{-1} - 13.4721(\ln\theta) + 0.43577\theta^6}$$

En donde $\theta = T_b/T_c$ se puede estimar, al igual que P_c , mediante una técnica de contribución de grupos.

1.5 Momento dipolar.

El momento dipolar de un compuesto es empleado en una gran cantidad de correlaciones para determinación de propiedades. Un dipolo se entiende como una combinación de dos partículas cargadas eléctrica o magnéticamente de signo contrario, y separadas por una distancia muy pequeña. El momento dipolar se define como la carga de una de las partículas del dipolo, multiplicada por la distancia que separa las cargas dipolares (53). Se ha encontrado después de realizar experimentos para determinar la constante dieléctrica, que ciertos compuestos tienen momentos dipolares permanentes. Lógicamente, estos momentos están asociados con la transferencia de cargas eléctricas dentro de la molécula y por lo tanto son información útil acerca de la estructura del compuesto.

Existe poca información sobre la estimación de esta constante mediante contribución de grupos. Los pocos métodos existentes exigen un costo computacional relativamente alto y no garantizan a cambio una exactitud adecuada. Toda la información acerca del momento dipolar (44)(53) se encuentra compilada en el archivo MOMDIP.DBF, en donde se pueden consultar los momentos dipolares de poco más de 600 compuestos.

CAPITULO 2.

CONDUCTIVIDAD TÉRMICA

2.1 Conductividad Térmica.

Todos los cuerpos poseen la capacidad de poder transportar a través de si el calor. Hay compuestos o mezclas que conducen tan poco el calor, que son empleados como aislantes para mantener un sistema dado a temperatura constante. Es de gran importancia conocer cuantitativamente el grado en que un cuerpo es capaz de conducir flujos de calor, para realizar diseños eficientes en equipos de transferencia de calor. La conductividad térmica es el cuantificador de esta capacidad de transporte de calor.

La conductividad térmica se define como la constante de proporcionalidad , k, en la ley de Fourier de conducción de calor (10) :

$$q = -kA \frac{dT}{dx}$$

donde q es el flux de calor, A es el área perpendicular a la dirección del flujo de calor, y el término dT/dx es el gradiente de temperatura en la dirección del flujo de calor. Esta propiedad es necesaria para correlaciones y diseño de métodos para operaciones de transferencia de calor. La conductividad térmica puede ser usada directamente o bien en números adimensionales que se emplean en correlaciones, tales como el Prandtl, Nusselt y Graetz.

El grado de ordenamiento de una sustancia es usado a menudo para explicar la variación de la conductividad térmica con la temperatura, presión, composición y estado físico. Para un compuesto químico puro, los valores de la conductividad térmica aumentan en la secuencia : vapor, líquido, sólido amorfo y cristal. Esta generalización también se aplica cuando se comparan las conductividades térmicas de diferentes sustancias no puras. Tanto para gases como para líquidos, la conductividad térmica se incrementa al aumentar la presión, y por ende el ordenamiento molecular. Analizando la ecuación de Fourier, se deduce que las dimensiones de este propiedad son $[E/\theta MT]$. Las unidades empleadas en este trabajo son $[W/m^{\circ}K]$.

2.2 Conductividad Térmica de Gases.

Una característica de la conductividad térmica en gases es que esta propiedad aumenta de valor a medida que la presión ejercida sobre del gas se incrementa. Esto se debe principalmente a que en esas circunstancias, el ordenamiento molecular del gas es mayor.

Al contrario de los líquidos, la conductividad térmica de gases no necesariamente tiende a aumentar a medida que la temperatura disminuye. De hecho, para gases a bajas presiones, generalmente no se cumple que al bajar la temperatura aumente la conductividad térmica. La conductividad térmica de un gas es directamente proporcional tanto al calor específico como a la viscosidad. De esta forma, la conductividad térmica tiende a incrementarse con la temperatura, aunque esto tenga asociado un menor ordenamiento molecular, ya que al mismo tiempo las otras dos propiedades (calor específico y viscosidad) se incrementan.

La base de datos desarrollada emplea el archivo CONTERMG.DBF para calcular la conductividad térmica de gases, en base a la ecuación empírica de un polinomio de tercer grado :

$$k_x = A + BT + CT^2 + CT^3$$

El archivo mencionado contiene correlaciones para un número apreciable de compuestos puros, según correlaciones publicadas por Yaws et al. (57). Para estimar la conductividad térmica en $[W/(m^{\circ}K)]$ de algún compuesto que se encuentre en la base de datos, es necesario emplear la temperatura en $[^{\circ}K]$.

En el caso de que sea necesario estimar la conductividad térmica del gas definiendo la molécula, se seleccionó el método desarrollado por Ely y Hanley (44), el cual no se basa estrictamente en contribución de grupos, sino que se trata de un procedimiento desarrollado a partir de la teoría de los estados correspondientes. Para poder emplear este método, es necesario conocer T_c , V_c , Z_c , el peso molecular y el poder calorífico a volumen constante (C_v) del compuesto. Aunque es probable que algunos de estos parámetros no se conozcan, pueden ser estimados por medio de la base de datos. Se sugiere estimar C_v . en caso de no

conocerse, por medio de $C_v = C_p - R$, ya que dentro de la base de datos existen una gran cantidad de correlaciones y un método de contribución de grupos, para estimar el C_p de un compuesto dado. El procedimiento tiene la forma siguiente :

$$k_g = k_g^* + \frac{\eta^*}{M'} (1.32) \left(C_v - \frac{3R}{2} \right)$$

Donde :

k_g = conductividad térmica del compuesto [W/m²K]

M' = peso molecular [kg/mol]

C_v = poder calorífico del compuesto a volumen cte. [J/(mol²K)]

R = cte. universal de los gases = 8.314 [J/(mol²K)]

Los parámetros k_g^* y η^* se definen a continuación :

$$k_g^* = k_0 H$$

$$\eta^* = \eta_0 H \frac{M'}{16.04 * 10^{-3}}$$

El parámetro H se define como :

$$H = \left(\frac{16.04 * 10^{-3}}{M'} \right)^{1/2} f^{1/2} / h^{2/3}$$

En la anterior relación, f y h son unos factores que calculan el escalamiento de la temperatura y el volumen, con respecto al metano, utilizado como fluido de referencia :

$$f = \frac{T_c}{190.4} \Theta$$

$$h = \frac{V_c}{99.2} \Phi$$

La técnica propuesta por Ely y Hanley define un tipo especial de temperatura T^+ ,

como :

$$T^+ = T_r \quad 2 \geq T_r$$

$$T^+ = 2 \quad T_r > 2$$

y en base a T^+ se determinan Θ y Φ , que se interpretan como unos factores de geometría de la molécula de interés con respecto al metano :

$$\Theta = 1 + (\omega - 0.011)(0.56553 - 0.86276 \ln T^* - \frac{0.69852}{T^*})$$

$$\Phi = [1 + (\omega - 0.011)(0.3856 - 1.1617 \ln T^*)] \frac{0.288}{Z_c}$$

Por último, el factor de escalamiento f es empleado para determinar la temperatura equivalente T_0 para estimar la conductividad térmica y la viscosidad del fluido de referencia metano :

$$T_0 = \frac{T}{f}$$

$$\eta_0 = 10^{-7} \sum_{n=1}^9 C_n T_0^{(n-4)/3}$$

$$k_r^0 = 1944 \eta_0$$

Las constantes C_n son específicas para el metano y tienen los valores :

**CONSTANTES DEL FLUIDO DE REFERENCIA PARA
ESTIMAR CONDUCTIVIDAD TERMICA DE GASES
MEDIANTE EL PROCEDIMIENTO DE ELY-HANLEY**

$C_1 = 2.90774E+6$	$C_4 = -4.33190E+5$	$C_7 = 4.32517E+2$
$C_2 = -3.31287E+6$	$C_5 = 7.06248E+4$	$C_8 = -1.44591E+1$
$C_3 = 1.60810E+6$	$C_6 = -7.11662E+3$	$C_9 = 2.03712E-1$

Una descripción más detallada de las bases teóricas de este procedimiento, se encuentra en la obra de Prausnitz, Reid y Poling (44).

2.3 Conductividad Térmica de Líquidos.

De igual forma que en los gases, la conductividad térmica de la mayoría de los líquidos se incrementa a medida que la temperatura disminuye. Sin embargo, existen ciertos compuestos como los polioles y glicoles que, al igual que el agua, muestran un punto

máximo en su conductividad térmica. El archivo CONTERML.DBF es empleado por la base de datos para leer las constantes necesarias y emplearlas en una correlación que tiene la forma empírica :

$$k_l = A + BT + CT^2$$

Las constantes A, B y C son las reportadas Yaws et al. (57) para conductividad térmica de líquidos. Es necesario utilizar la temperatura en [°K] para obtener la conductividad térmica en [W/(m°K)].

Para estimar la conductividad térmica de líquidos puros mediante contribución de grupos, se emplea el método desarrollado por Latini et al. (44). Dicha técnica tiene la forma:

$$k_l = \frac{A(1 - T_r)^{0.38}}{T_r^{1/6}}$$

En donde :

k_l = conductividad térmica del líquido [W/(m°K)]

T_b = temperatura normal de ebullición [°K]

T_c = temperatura crítica [°K]

M = peso molecular [g/gmol]

$$T_r = T/T_c$$

$$A = \frac{A^* T_b^\alpha}{M^\beta T_c^\gamma}$$

Los parámetros A^* , α , β , y γ , son característicos de cada familia de compuestos. La anterior información se encuentra resumida en el archivo CONTERML.GRP, el cual es usado por la base de datos cuando es necesario. Los errores típicos que se obtienen se encuentran por abajo del 10%.

CAPITULO 3.

DENSIDAD.

3.1 Densidad.

La densidad es probablemente la propiedad física más conocida y se define sencillamente como la cantidad de materia que ocupa un volumen unitario dado. Obviamente, sus dimensiones son $[M/L^3]$, en el presente trabajo, se maneja la densidad en $[g/mol/cm^3]$.

3.2 Densidad de Gases.

La forma en que varía la densidad de un gas a bajas presiones y temperaturas se puede representar de forma adecuada por la ecuación del gas ideal :

$$PV = nRT$$

A medida que se van incrementando las condiciones de P y T, esta ecuación deja de predecir razonablemente los volúmenes molares, y es necesario emplear el factor de compresibilidad como una corrección a el comportamiento pronosticado por la ley de gas ideal :

$$P\bar{V} = ZRT$$

Aunque Z se define originalmente como el factor de compresibilidad $Z = \frac{PV}{RT}$, se han desarrollado una gran cantidad de correlaciones alternas para estimarlo, principalmente en base a la ley de los estados correspondientes. Aún cuando el uso de Z es un avance en la predicción de densidades de gases, no es satisfactorio en rangos de temperatura y presión más amplios. Debido a esto, han sido desarrolladas una gran cantidad de ecuaciones de estado, que representan la relación existente entre las variables P, V y T. Una ecuación de estado es simplemente una relación algebraica entre estas tres variables, que trata de explicar el comportamiento de un gas. Las primeras ecuaciones de estado que se generaron a partir de la ecuación del gas ideal fueron las ecuaciones de estado cúbicas. Ejemplos de estas ecuaciones son las de Van der Waals, la de Peng-Robinson, la de Redlich-Kwong y la de Soave, entre otras. Se les llama cúbicas porque para conocer el volumen molar a unas

condiciones dadas de P y T, hay que resolver un polinomio de grado tres para esta variable, o bien para Z. En términos generales, todas se desarrollan teóricamente introduciendo a la ecuación del gas ideal dos nuevos parámetros, uno que incluye las atracciones intermoleculares del gas y otro que incluye las repulsiones intermoleculares. Estos dos parámetros pueden ser calculados tomando en cuenta que en el punto crítico, la ecuación de estado debe tener un punto de inflexión. Así, dichos parámetros pueden ser correlacionados con la presión y la temperatura críticas. La ventaja que ofrecen es que pueden ser resueltas analíticamente ya sea para el volumen molar o para el factor de compresibilidad, sin necesidad de iterar para encontrar una raíz aproximada, como en el caso de ecuaciones más complejas. Una breve discusión del método que se emplea en este trabajo para resolver analíticamente una ecuación cúbica se encuentra en el anexo III. Sin embargo, estas ecuaciones cúbicas tienen la desventaja de que no representan fielmente a los datos experimentales para presiones y temperaturas aún más elevadas, en especial en las cercanías del punto crítico. Además, aunque es posible calcular las densidades tanto para la fase gaseosa como para la líquida, es necesario involucrar procedimientos indirectos, iterando para calcular los coeficientes de fugacidad de ambas fases, y encontrar la solución final. En la literatura se encuentran discusiones mucho más detalladas sobre este tema (6)(8)(10)(22)(23)(40)(44)(47).

En el presente trabajo, solo se utiliza la ecuación de Van der Waals de todas las ecuaciones cúbicas existentes. Se ha considerado que esta ecuación ajusta los datos P-V-T adecuadamente dentro de ciertos rangos, permaneciendo relativamente simple desde un punto de vista computacional.

La expresión analítica que desarrolló Van der Waals es :

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}$$

En donde $a = \frac{RT_c}{8P_c}$ y $b = \frac{27}{64} \frac{R^2 T_c^2}{P_c}$, esta ecuación se puede resolver también de

forma equivalente para el factor de compresibilidad como sigue :

$$Z^3 - (1 + B^*)Z^2 + A^*Z = 0$$

En donde $A^* = \frac{aP}{R^2T^2}$ y $B^* = \frac{bP}{RT}$, calculando después el volumen molar de la relación $P\bar{V} = ZRT$. Aunque, como se menciona anteriormente, las constantes a y b de la ecuación de Van der Waals pueden ser calculadas a partir de P_c y T_c , se recomienda que sean ajustadas mediante regresión de datos experimentales para cada compuesto. Dentro del archivo VDW.DBF se encuentran un resumen de estas constantes (53), determinadas por regresión, para alrededor de unos 130 compuestos.

3.3 Densidad de Líquidos.

Como es bien conocido, la densidad de líquidos se puede estimar mediante ecuaciones de estado. En el presente trabajo, sin embargo, solo se evalúa la densidad de líquido saturado mediante correlaciones. Existe poca información, y además no muy confiable, acerca de la estimación de esta propiedad mediante contribución de grupos. En el archivo DENSL.DBF, se encuentra un resumen (44)(58) de la información necesaria para que la base de datos estime la densidad de poco menos de 400 líquidos de acuerdo con las siguientes técnicas :

- (1) Método de Hankinson-Brobst-Thomson :

$$\frac{V_s}{V^*} = V_R^{(0)} [1 - \omega_{SRK} V_R^{(s)}] \quad [\text{cm}^3/\text{gmol}]$$

En donde :

$$V_R^{(0)} = 1 + a(1 - T_r)^{1/3} + b(1 - T_r)^{2/3} + c(1 - T_r) + d(1 - T_r)^{4/3}$$

$$0.25 < T_r < 0.95$$

y $V_R^{(s)} = [e + fT_r + gT_r^2 + hT_r^3] / (T_r - 1.00001)$, para $0.25 < T_r < 1$. T_r = Temperatura reducida = T/T_c ; el parámetro V^* es una constante particular para cada compuesto, que generalmente se encuentra cercana al volumen crítico, y ω_{SRK} es el factor acéntrico corregido para ajustar datos de presión de vapor cuando se emplea la ecuación de estado de

Soave-Redlich-Kwong. Las constantes necesarias para el cálculo anterior son las siguientes

:

**CONSTANTES PARA EVALUACIÓN DE DENSIDADES
DE LÍQUIDOS SEGÚN EL MÉTODO DE
HANKINSON-BROBST-THOMSON**

Constante	Valor	Constante	Valor
a	-1.52816	e	-0.296123
b	1.43907	f	0.386914
c	-0.81446	g	-0.0427258
d	0.190454	h	-0.0480645

(2) Técnica de Rackett modificada :

$$V_s = \frac{RT_c}{P_c} Z_{RA}^{[M(1-T_r)^{0.7}]}$$

[cm³/gmol]

(3) Ecuación empírica, derivada de la relación de Rackett :

$$V_s = M / (AB^{-[1-T_r]^{0.7}})$$

[cm³/gmol]

En donde M es el peso molecular del compuesto en [g/gmol]. Al igual que en la anterior relación, T_r = Temperatura reducida = T/T_c .

Dentro de este trabajo, no se considera la estimación de la densidad de líquidos mediante un método de contribución de grupos. El empleo de las anteriores correlaciones para determinar densidades, no tiene un error asociado de más del 5% en promedio.

CAPITULO 4.

DIFUSIVIDAD.

4.1 Difusividad.

La difusividad es una propiedad que se utiliza para el diseño de equipos de transferencia de masa. Cuando se habla de difusividad en este trabajo, se hace referencia implícitamente al coeficiente de difusión, el cual se define como la constante de proporcionalidad en la primera ley de Fick (10) :

$$\frac{N_A}{A} = -D_{AB} \frac{dC_A}{dx}$$

Donde N_1/A = flujo molar del componente A, por unidad de área, D_{AB} = difusividad del componente A en el componente B y C_A = concentración del componente A. Se ve que para que la anterior ecuación sea dimensionalmente homogénea, es necesario que el coeficiente D_{AB} tenga dimensiones de $[L^2/\theta]$, siendo las unidades más comúnmente usadas las de $[cm^2/s]$. Es posible definir teóricamente, aunque no tiene mucho sentido desde el punto de vista de las operaciones de transferencia de masa, D_{AA} , que sería el coeficiente de difusividad del componente A en una "mezcla" que consistiera exclusivamente de A. En tal sistema, no hay una transferencia neta de masa, ni tampoco existe la necesidad de llevar a cabo una separación. Por lo anterior, es necesario que existan al menos dos componentes en sistema dado, para poder definir una difusividad con sentido práctico. Como el presente trabajo está limitado a la estimación de las propiedades de compuestos puros, sólo se consideran sistemas binarios sin tomar en cuenta el efecto de la composición del sistema, por lo cual se incluyen dentro de la base de datos, métodos para estimar D_{AB}° , el coeficiente de difusividad a dilución infinita del componente A y para estimar D_{AB} , dando por hecho que la fracción mol de A en la mezcla es pequeña. Finalmente, aún cuando no se considere el efecto de la composición sobre de D_{AB} , la mayoría de las correlaciones emplean utilizan D_{AB}° , D_{BA}° y x_A como parámetros para calcular D_{AB} a diferentes composiciones, los cuales pueden ser estimados por el usuario, para calcular el valor de D_{AB} en una mezcla binaria, o de multicomponentes.

4.2 Difusividad Binaria de Gas en Gas.

La difusividad binaria de gases es quizás una de las pocas propiedades en que la teoría predice de forma más satisfactoria los resultados experimentales, que correlaciones empíricas basadas en los mismos datos (44). La expresión utilizada para determinar la difusividad es la propuesta por Chapman y Enskog, quienes desarrollaron dicha ecuación en forma independiente, aunque generalmente se les dá el crédito a ambos al hacer referencia a la expresión analítica :

$$D_{AB} = \frac{0.00266T^{3/2}}{PM_{AB}^{1/2}\sigma_{AB}^2\Omega_D}$$

En donde D_{AB} = coeficiente de difusión [cm^2/s], T = temperatura [$^\circ\text{K}$], P = presión [bar], σ_{AB} = longitud característica [\AA] y Ω_D = integral de difusión de colisión [adimensional].

El término M_{AB} se define como :

$$2\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)^{-1}$$

Por lo que es necesario conocer los pesos moleculares de los compuestos A y B, respectivamente, o bien alimentar las fórmulas reducidas de dichos compuestos al programa.

En el archivo DIFUSGAS.DBF, se resume la información (44) necesaria para estimar σ_{AB} y Ω_D , los últimos dos términos que también aparecen en la ecuación de Chapman-Enskog según :

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}$$

$$\Omega_D = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)}$$

$$T^* = \frac{kT}{\epsilon_{AB}}$$

$$\epsilon_{AB} = \left(\frac{\epsilon_A}{k} \frac{\epsilon_B}{k}\right)^{1/2}$$

Las constantes utilizadas para determinar Ω_D son las propuestas por Neufield (44), según la correlación empírica mencionada anteriormente y se resumen a continuación en la siguiente tabla :

**CONSTANTES PARA DETERMINAR Ω_D MEDIANTE
LA ECUACIÓN EMPÍRICA DE NEUFIELD**

Constante	Valor	Constante	Valor
A	1.06036	B	0.15610
C	0.19300	D	0.47635
E	1.03587	F	1.52996
G	1.76474	H	3.89411

En el archivo citado, se encuentra la información suficiente para determinar los coeficientes de difusión para poco más de 2,600 mezclas binarias comunes. El método utilizado supone que la concentración del soluto A en el solvente B es lo suficientemente baja como para no afectar en forma significativa el resultado final.

En caso de que no sea posible definir la combinación de gases deseada para estimar D_{AB} , es posible estimar esta propiedad mediante un método de contribución de grupos desarrollado por Fuller (44) :

$$D_{AB} = \frac{0.00143T^{1.75}}{PM_{AB}^{1/2}[(\sum v)_A^{1/3} + (\sum v)_B^{1/3}]^2}$$

En donde todos los términos se calculan igual que para la ecuación teórica, y las sumatorias $(\sum v)_A^{1/3}$ y $(\sum v)_B^{1/3}$, se calculan mediante contribución de grupos. Las unidades son también las mismas que para el caso anterior. La información correspondiente a esta contribución de grupos, se encuentra en el archivo DIFUSGAS.GRP. No es recomendable utilizar las técnicas incluidas en la base de datos para presiones mayores a 30 bar.

4.3 Difusividad Binaria de Líquido en Líquido.

Debido a que las moléculas se encuentran ordenadas en una forma compacta y, por ende, existen fuerzas intermoleculares mucho más importantes que en los gases, en los líquidos los coeficientes de difusión tienen valores apreciablemente más pequeños que aquellos que se determinan para gases. Asimismo, el efecto de la composición del sistema influye más en la determinación de D_{AB} , de tal forma que las correlaciones más empleadas determinan D_{AB}° , en vez de D_{AB} . D_{AB}° se define como el coeficiente de difusión a dilución infinita. Esto implica que cada molécula del soluto A se mueve dentro del solvente B, en un medio que consiste esencialmente de B puro. En aplicaciones de ingeniería, sin embargo, se considera que D_{AB}° es un coeficiente de difusión representativo para concentraciones de A hasta 10% en mol. La difusividad para mezclas binarias de líquidos se estima empleando el método de Tyn y Calus (44)(52) :

$$D_{AB}^{\circ} = 8.93 * 10^{-8} \frac{V_B^{0.267}}{V_A^{0.433}} \frac{T}{\eta_B} \left(\frac{\sigma_A}{\sigma_B} \right)^{0.15}$$

En donde V_B y V_A son los volúmenes molares en el punto de ebullición de A y B respectivamente, T es la temperatura [°K], η_B es la viscosidad del solvente a la temperatura T y σ_A y σ_B son las tensiones superficiales en los puntos de ebullición de A y B. El coeficiente de difusión se determina en [cm²/s]. Es necesario que el usuario evalúe estas propiedades dentro de la base de datos, antes de poder estimar D_{AB}° , pero es importante mencionar que todas pueden ser determinadas, incluso mediante algún método de contribución de grupos. Debido a que el exponente al que están elevadas σ_A y σ_B dentro de la ecuación anterior es pequeño, y las tensiones superficiales de hidrocarburos son semejantes en el punto de ebullición, el término $\left(\frac{\sigma_A}{\sigma_B} \right)^{0.15}$ tiende a la unidad, por lo que puede ser eliminado de la ecuación si el usuario así lo decide, de tal forma que la relación para D_{AB}° queda como :

$$D_{AB}^{\circ} = 8.93 * 10^{-8} \frac{V_B^{0.267}}{V_A^{0.433}} \frac{T}{\eta_B}$$

Se sugiere emplear esta forma de la ecuación de Tyn y Calus, a menos que los compuestos que forman el sistema binario difieran diametralmente en estructura y polaridad. Existe poca información acerca de como depende la difusividad de la presión, por lo que no se incluye la influencia de este parámetro en ninguna correlación.

4.4 Difusividad Binaria de Gas en Líquido.

Se ha utilizado la correlación propuesta por Wilke y Chang (44), para determinar coeficientes de difusión de gases diluidos en líquidos :

$$D_{AB}^0 = 1.1728 * 10^{-16} \frac{T(\chi M_B)^{1/2}}{\eta_B V_A^{0.6}}$$

En donde los subíndices A y B denotan al gas diluido y al líquido solvente, respectivamente; M es el peso molecular; T es la temperatura [°K]; η es la viscosidad a la temperatura T; V el volumen en el punto normal de ebullición [cm³/gmol] y χ es un parámetro que depende del tipo del solvente :

PARÁMETRO χ PARA ESTIMAR D_{AB}^0 MEDIANTE EL MÉTODO DE WILKE-CHANG

Solvente	χ
Agua	2.6
Metanol	1.9
Etanol	1.5
Otros solventes	1.0

De nuevo, antes de poder determinar D_{AB}^0 en [cm²/seg], es necesario conocer los parámetros anteriores, lo cual se puede realizar dentro de la base de datos.

CAPITULO 5.

PRESIÓN DE VAPOR.

5.1 Presión de Vapor.

La presión de vapor es una propiedad indispensable para el cálculo de puntos de burbuja y rocío, al igual que para el diseño de equipos de separación, en los que se necesita conocer el punto de equilibrio de un sistema dado. Asimismo se emplea para determinar entalpías de vaporización de líquidos. La presión de vapor se define como la presión que ejerce la fase gaseosa de un líquido al encontrarse en equilibrio con la fase líquida. Es claro que esta propiedad no se puede estimar sino para líquidos en condiciones de equilibrio, ya que para un vapor sobrecalentado solo existe una fase gaseosa, y por lo tanto no hay equilibrio líquido-vapor. De igual forma, la presión de vapor que ejerce un líquido subenfriado es tan pequeña que puede ser considerada igual a cero.

La presión de vapor de un líquido es dependiente principalmente de la temperatura, de forma tal que la presión no influye significativamente en ella. Mientras mayor es la temperatura, mayores son los valores de la presión de vapor. Esto es evidente ya que, a medida que se incrementa la temperatura, acercándose más al punto de ebullición del líquido, hay una mayor tendencia a que las moléculas que se encuentran en fase líquida pasen a la fase gaseosa. Justo en el punto de ebullición, la presión de vapor del líquido se iguala a la atmosférica y es posible que la fase líquida pase completamente a fase gaseosa. En general, la relación entre la presión de vapor y la temperatura es de tipo exponencial. Existen una gran cantidad de ecuaciones que tratan de expresar esta relación, incluso utilizando fluidos de referencia, aunque en este trabajo se han escogido aquellas que representaban los datos de una forma adecuada, sin ser excesivamente difíciles de emplear. El archivo PRESVAP.DBF contiene correlaciones para la presión de vapor en función de la temperatura, para un poco más de 1200 compuestos diferentes. Las ecuaciones que se utilizan en cada caso son :

$$(1) \quad \ln(P_i / P_i^s) = (1-x)^{-1} [Ax + Bx^{1.5} + Cx^3 + Dx^6]$$
$$x = 1 - T / T_i$$

$$(2) \quad \ln P_v = A - \frac{B}{T+C}$$

$$\ln P_v = A \ln P_{v,0} + B$$

$$(3) \quad \ln P_{v,0} = 61.038849535 - \frac{7.206.45}{T} - 7.1385 \ln T + 4.0454925 \cdot 10^{-6} T^2$$

$$(4) \quad \ln P_v = \frac{A}{T} + B$$

Las unidades de P_v al emplear las anteriores correlaciones son [bar], mientras que T debe usarse en [°K]. La información en los anteriores archivos, es una compilación de la literatura existente (4)(10)(29)(41)(42)(43)(44)(53). Existe una gran información acerca de la presión de vapor, ya que es una propiedad relativamente fácil de medir. Como es de suponer, no todas las correlaciones que se incluyen en los archivos mencionados anteriormente ajustan en forma adecuada la presión de vapor, a lo largo de intervalos amplios de temperatura, es por esta razón que PRESVAP.DBF incluye los rangos de temperatura para los cuales es válida la correlación, para advertir al usuario en caso de que se trate de determinar la presión de vapor fuera de estos límites.

Aún cuando no se han desarrollado técnicas de estimación de esta propiedad por contribución de grupos, en el presente trabajo se utiliza una correlación que emplea el principio de estados correspondientes propuesta por Pitzer (44) :

$$\ln P_{vr} = f^{(0)}(T_r) + \omega f^{(1)}(T_r)$$

$$f^{(0)} = 5.292714 - \frac{6.09648}{T_r} - 1.28862 \ln T_r + 0.169347 T_r^6$$

$$f^{(1)} = 15.2518 - \frac{15.6875}{T_r} - 13.4721 \ln T_r + 0.43577 T_r^6$$

En donde $P_{vr} = P_v/P_c$, $T_r = T/T_c$.

Aunque la anterior ecuación puede utilizar un valor experimental o reportado en la literatura para el factor acéntrico, es recomendable que este se determine mediante la correlación propuesta por Kesler y Lee, que se explica en detalle en el capítulo 1.

CAPITULO 6.

PROPIEDADES TÉRMICAS.

La termodinámica es una herramienta muy valiosa para el diseño de equipos de transferencia de masa y calor. Mediante ecuaciones de estado, es posible cuantificar propiedades como la entropía, entalpía, energía libre de Gibbs y otras, relacionándolas directamente con variables operacionales como la temperatura, la presión y el volumen. Sin embargo, la evaluación de estas propiedades mediante expresiones analíticas no es sencillo y queda fuera del alcance de este trabajo, por lo cual se han seleccionado las propiedades termodinámicas de uso más común. El calor específico es una propiedad clave para la determinación de propiedades termodinámicas. La energía libre de formación de un compuesto es un indicador de la factibilidad de sintetizar un compuesto bajo determinadas condiciones. Las entalpías de formación y de vaporización también son importantes en el diseño de equipo de transferencia de calor y masa, como torres destilación y evaporadores, por ejemplo. Esto no significa, en absoluto, que estas propiedades sean las propiedades termodinámicas más importantes. Son, sin embargo, las más estudiadas y medidas experimentalmente, lo cual ha producido como consecuencia que existan una gran cantidad de métodos de contribución de grupos para estimarlas, haciéndolas por lo tanto congruentes y deseables dentro del contexto de este trabajo.

6.1 Calor Específico.

Es bien sabido que diferentes sustancias, dependiendo de sus estructuras, almacenan en forma diferente el calor. Conociendo esta capacidad de almacenamiento, es posible estimar la cantidad de calor que se necesita suministrar a una sustancia para elevar su temperatura a un nivel deseado. El calor específico es la propiedad que mide esta capacidad de almacenamiento, por lo que es requerido en una gran cantidad de correlaciones que involucran transferencia de calor y estimación de otras propiedades.

Dos tipos diferentes de calor específico son definidos, el calor específico a presión constante C_p , y el calor específico a volumen constante C_v . Aunque teóricamente es una cantidad de fácil medición, ya que basta suministrar a una sustancia una cantidad conocida

de calor y medir la diferencia de temperaturas producida en la sustancia, en la práctica resulta difícil determinar con exactitud la cantidad de calor que se aplica a un sistema debido a las pérdidas de calor. En este trabajo se utilizan correlaciones y métodos de contribución de grupos para la determinación del C_p solamente. Por lo anterior, las dimensiones del C_p tienen que ser $[E/M\theta]$, en este trabajo se emplean las unidades de $[J/gmol\ ^\circ K]$.

Debido a que el agua es el fluido de uso más común y natural, la definición de unidades de energía se hace fijando el poder calorífico del agua a presión constante igual a la unidad. Se define un Btu como la cantidad de calor necesario para elevar la temperatura de una libra masa de agua de $59.5\ ^\circ F$ a $60.5\ ^\circ F$, a una presión constante de una atmósfera ($C_p \text{ agua} = 1 \text{ Btu/lb} \cdot ^\circ F$). La caloría se define como la cantidad de calor necesaria para elevar la temperatura de un gramo masa de agua de $14.5\ ^\circ C$ a $15.5\ ^\circ C$, a una presión constante de una atmósfera ($C_p \text{ agua} = 1 \text{ cal/g} \cdot ^\circ C$). Es por esto que se puede interpretar el calor específico a presión constante de una sustancia, como el cociente de la cantidad de calor necesaria para elevar la temperatura de dicha sustancia de $14.5\ ^\circ C$ a $15.5\ ^\circ C$, entre la cantidad de calor que es necesario suministrar al agua para lograr el mismo efecto (6).

Por último, es importante mencionar que el C_p puede ser considerado constante en intervalos pequeños de temperatura, pero para rangos más amplios es necesario expresar la dependencia del C_p en T de formas más convenientes.

6.1.1 Calor Específico de Gas Ideal.

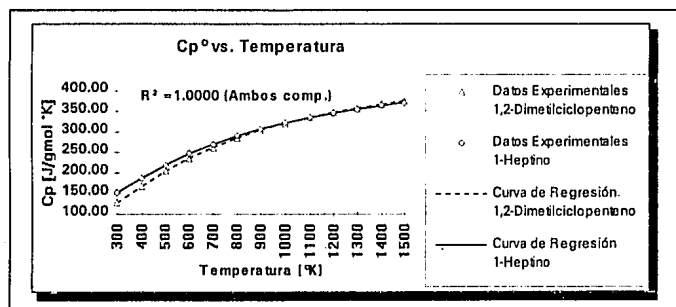
El calor específico a presión constante C_p , para diversos gases se calcula mediante un polinomio de tercer grado en la temperatura :

$$C_{p_i} = A + BT + CT^2 + DT^3$$

En donde T = temperatura [$^\circ K$] y C_p = calor específico del gas a presión constante [$J/gmol\ ^\circ K$]. Para tener menores errores, la anterior relación solo debe ser utilizada a bajas presiones, en donde se puede considerar al gas como ideal.

Se ha encontrado que una regresión polinómica de este tipo, para datos experimentales de C_p , genera resultados muy aceptables. La información resumida para emplear este modelo para poco más de 500 compuestos se encuentra en el archivo CPGASID.DBF. Aunque una cantidad importante de regresiones se encuentran publicadas (23)(44)(56), otra parte fue generada aplicando el método de mínimos cuadrados a datos experimentales reportados (4). Los resultados se reportan en detalle dentro del anexo IV. Una breve discusión acerca de la teoría involucrada en el método de mínimos cuadrados, se encuentra en el anexo II de este trabajo.

En general, las correlaciones obtenidas por mínimos cuadrados, reflejan adecuadamente los datos experimentales, como se ilustra para el caso de los compuestos 1,2-Dimetilciclopenteno y 1-Hepteno a continuación :



También es posible definir al compuesto de interés según esté conformado, determinando después los coeficientes del polinomio de tercer grado mediante una técnica de contribución de grupos desarrollada por Joback (44) :

$$Cp_a^0 = \left(\sum_{i=1}^4 n_i \Delta a_i - 37.93 \right) + \left(\sum_{i=1}^4 n_i \Delta b_i + 0.21 \right) T + \left(\sum_{i=1}^4 n_i \Delta c_i - 3.91 \cdot 10^{-4} \right) T^2 + \left(\sum_{i=1}^4 n_i \Delta d_i + 2.06 \cdot 10^{-7} \right) T^3$$

En donde k es el número de diferentes grupos funcionales que constituyen el compuesto de interés; n_i es el número de grupos del tipo i presentes en la molécula y Δa_i , Δb_i , Δc_i y Δd_i son las contribuciones de cada grupo a los coeficientes a , b , c y d del polinomio, respectivamente. La información requerida para estimar esta propiedad se encuentra contenida en el archivo DHDGCP.GRP.

6.1.2 Calor Específico de Líquidos.

Al igual que en el caso de gases, un polinomio de tercer grado es empleado para determinar el calor específico de líquidos a presión constante :

$$C_{p_L} = A + BT + CT^2 + DT^3$$

En donde T se debe emplear en $^{\circ}\text{K}$, para obtener el C_p en $\text{J/gmol}^{\circ}\text{K}$. No se recomienda tampoco emplear las correlaciones contenidas en el archivo CPLIQ.DBF para valores de presión elevados ($P_r > 0.8$) ni para temperaturas por arriba de $0.85T_c$. La información resumida en este archivo procede de diversas fuentes (43)(56).

Esta propiedad puede también ser estimada mediante un método aditivo de contribución de grupos, generado por Missenard (44) :

$$C_{p_L} = \sum_{i=1}^k n_i C_i$$

Siendo k el número de grupos funcionales diferentes que conforman el compuesto de interés; n_i el número de grupos funcionales del tipo i y C_i la contribución individual de cada grupo i . Aunque es un método muy sencillo, el de Missenard tiene la desventaja de que no es posible definir enlaces dobles y algunas otras contribuciones con la información reportada. Sin embargo, es posible estimar el calor específico para cualquier temperatura entre 248°K y 373°K .

6.1.3 Calor Específico de Sólidos.

Debido a que se encontró en la literatura existente (43) una cantidad apreciable de correlaciones para estimar el calor específico de sólidos, se decidió incorporar esta información a la base de datos, en el archivo CPSOL.DBF, aún cuando el interés de este trabajo está orientado hacia gases y líquidos. Las correlaciones empíricas son :

$$(1) \quad Cp_s = A + BT$$

$$(2) \quad Cp_s = A + BT + \frac{C}{T^2}$$

$$(3) \quad Cp_s = A + BT + CT^2$$

Las temperaturas se deben emplear en [°K] para obtener el Cp en [J/gmol°K].

6.2 Energía Libre de Formación de Gas Ideal.

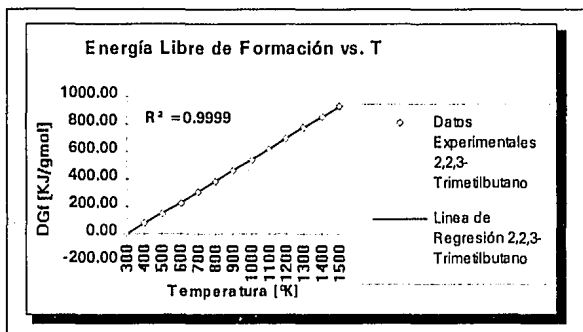
El ΔG_f es una información termodinámica extremadamente útil, ya que indica si una reacción, o la síntesis de un compuesto, es factible desde el punto de vista termodinámico. Por supuesto, también es necesario llevar a cabo pruebas cinéticas para determinar si el tiempo o la cantidad de calor necesaria para acelerar la reacción también pueden ser limitantes en un proceso. Una reacción de síntesis de un compuesto, es susceptible de ocurrir si y solo si el ΔG_f es menor a cero.

La energía libre de formación de gas ideal se calcula mediante correlaciones obtenidas al aplicar regresión lineal a datos experimentales. DFGASID.DBF es el archivo donde se concentra la información de diversas fuentes (4)(56) para calcular esta propiedad de acuerdo con la relación :

$$\Delta G_f = A + BT$$

Para evaluar adecuadamente esta expresión, es necesario utilizar T en [°K], de tal forma que ΔG_f se obtiene en unidades de [KJ/gmol]. Como en el caso del calor específico, una parte de estas correlaciones fue obtenida mediante análisis de regresión de datos experimentales reportados en la literatura. Detalles de estas regresiones se encuentran en el

anexo IV, aunque es importante notar que en este anexo las ctes. están reportadas de forma tal que ΔG_f las unidades en que se obtiene en [Kcal/gmol]. El ajuste para la gran mayoría de los compuestos es satisfactorio, como se muestra para el caso del 2,2,3-Trimetilbutano :



Si no existe una correlación para un compuesto dado, se puede estimar la energía libre de formación mediante contribución de grupos, siguiendo el método propuesto por Joback (44) :

$$\Delta G_f^0(298^\circ K) = 53.88 + \sum_{i=1}^k n_i \Delta G_{fi}$$

En donde hay que realizar la suma desde el primero hasta el k-ésimo grupo de los que conforman el compuesto. El término n_i se refiere al número de veces que el grupo del tipo i se encuentra en la molécula, mientras que ΔG_{fi} es la contribución de ese grupo particular al ΔG_f total. Las unidades en que se estima ΔG_f son [KJ/gmol]. Esta técnica solo permite determinar ΔG_f a una temperatura constante de 25 °C, mientras que las correlaciones amplían este rango de temperaturas un poco más, aunque no es recomendable utilizarlas para $T_r > 0.85$ y $P_r > 0.9$.

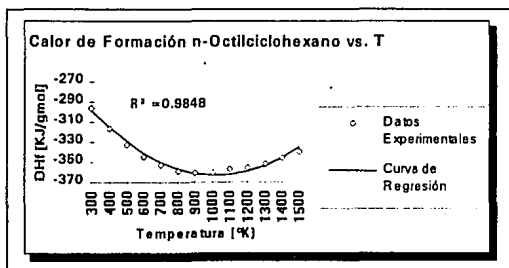
6.3 Entalpia de Formación de Gas Ideal.

La entalpia de formación de un compuesto puro es necesitada a menudo para calcular el calor que se desprende en una reacción química determinada (ΔH_f), dependiendo de la temperatura y, por supuesto, de los reactivos y productos involucrados en la reacción. Si para una reacción se determina que el ΔH_f es menor a cero, entonces la reacción es exotérmica y es necesario retirar calor del sistema mediante enfriamiento. Si el ΔH_f es positivo, entonces la reacción es endotérmica y hay que adicionar calor al sistema para que se lleve a cabo la reacción.

Yaws et al. han observado (56) que un polinomio de segundo grado en la temperatura representa satisfactoriamente la forma en que ΔH_f depende de la temperatura :

$$\Delta H_f = A + BT + CT^2$$

T debe ser alimentada en [°K], para obtener ΔH_f en [KJ/gmol]. Las ctes. A, B y C se encuentran compiladas dentro del archivo DHFGASID.DBF, el cual es empleado por la base de datos. Una parte de estas constantes, sin embargo, fue obtenida por regresión con mínimos cuadrados como se detalla en el anexo IV, en el cual con las ctes. reportadas se obtiene el ΔH_f en Kcal/gmol. Si se desea obtener esta propiedad en KJ/gmol es necesario multiplicar cada una de las ctes. por 4.1868 . Un caso típico de la forma en que los datos experimentales fueron ajustados se ilustra a continuación para el caso del n-Octilciclohexano



También es posible estimar el ΔH_f en [KJ/gmol] para cualquier compuesto a 298 °K, empleando el método de Joback, que para esta propiedad toma la forma :

$$\Delta H_f^0 = 68.29 + \sum_{i=1}^k n_i \Delta H_{fi}$$

En donde k es el número de diferentes grupos funcionales que constituyen la molécula de interés, n_i es el número de veces que un grupo el tipo i está presente en el compuesto y ΔH_{fi} es la contribución individual de cada grupo i al ΔH_f total. Las mismas restricciones que se establecen para el cálculo de ΔG_f mediante la técnica de Joback, aplican en este caso.

6.4 Entalpia de Vaporización de Gas Ideal.

La entalpia de vaporización de compuestos puros es útil para el diseño de equipos de transferencia de masa. En equipos de destilación por ejemplo, es necesario conocer las entalpias de vaporización de la mezcla que llega tanto al rehedidor como al condensador, para saber cuales son los requerimientos de calentamiento y enfriamiento respectivos de estos dos componentes de la torre.

La base de datos emplea una correlación empírica reportada por Yaws (56), para algunos compuestos comunes :

$$\Delta H_v = \Delta H_{v1} \left(\frac{T_c - T}{T_c - T_1} \right)^n$$

Esta relación no es más que una forma modificada de la ecuación propuesta originalmente por Watson (23), pero es bastante aceptable. La información para poder estimar valores de ΔH_v mediante esta expresión está resumida en el archivo QVAP.DBF. La temperatura debe ser empleada en [°K] y los resultados obtenidos tienen unidades de [KJ/gmol]. Para estimar ΔH_v en caso de que no exista una correlación, se emplea un método que emplea dos fluidos de referencia, benceno y carbazol, desarrollado por Stell y Torquato (44) :

$$\frac{\Delta H_v}{RT_c} = \left(\frac{\Delta H_v}{RT_c}\right)^{(R1)} + \left(\frac{\omega - \omega^{(R1)}}{\omega^{(R2)} - \omega^{(R1)}}\right) \left(\left(\frac{\Delta H_v}{RT_c}\right)^{(R2)} - \left(\frac{\Delta H_v}{RT_c}\right)^{(R1)}\right)$$

Para el benceno :

$$\left(\frac{\Delta H_v}{RT_c}\right)^{(R1)} = 6.537\tau^{1.3} - 2.467\tau^{5.6} - 77.521\tau^{1208} + 59.634\tau + 36.009\tau^2 - 14.606\tau^3$$

El término $\left(\frac{\Delta H_v}{RT_c}\right)^{(R2)} - \left(\frac{\Delta H_v}{RT_c}\right)^{(R1)}$ (que llamaremos Δ), es la diferencia entre las entalpias reducidas de vaporización del carbazol y el benceno y está dado por :

$$\Delta = -0.133\tau^{1.3} - 28.215\tau^{5.6} - 82.958\tau^{1208} + 99\tau + 19.105\tau^2 - 2.79\tau^3$$

Al utilizar las anteriores relaciones hay que definir $\tau = 1 - T_r$; $\omega^{(R1)} = 0.21$ y $\omega^{(R2)} =$

0.46.

CAPITULO 7.

TENSIÓN SUPERFICIAL.

7.1 Tensión Superficial.

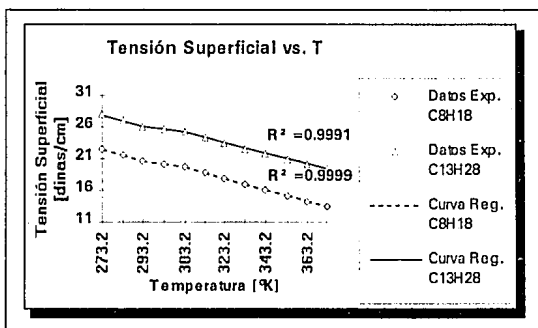
La superficie de un líquido se puede considerar como la frontera entre ese líquido y su fase gaseosa. Las moléculas que se encuentran justo en esta frontera sufren fenómenos interesantes, ya que no se encuentran sujetas a las mismas interacciones que una molécula justo en el medio del líquido. Una molécula que se halla en el "bulto" del líquido, es atraída y rechazada con cierta intensidad por los moléculas en fase líquida que le rodean, mientras que una molécula que se encuentre justo en la superficie del líquido, sólo sufre estas atracciones parcialmente, ya que la fase gaseosa no la atrae del mismo modo. Generalmente, la atracción que sufren las moléculas de la superficie por parte de las moléculas en fase gaseosa, es menor que la que sienten por parte de las moléculas que se encuentran en el bulto. Ciertos líquidos como el agua, además, debido a su estructura molecular, provocan que las moléculas de la superficie queden exponiendo hacia la fase gaseosa orbitales libres, de tal forma que en la superficie del líquido hay una mayor cantidad de energía que en el bulto del mismo. Esto provoca que los líquidos tiendan a ocupar la menor cantidad de área posible, de acuerdo con las condiciones en que se encuentren, es decir, el volumen de líquido existente, el contenedor en que se encuentre el líquido y las fuerzas externas que sobre de él actúen. Fenómenos semejantes ocurren entre líquidos inmiscibles, pero en el presente trabajo sólo se maneja la tensión superficial de líquidos puros.

Por todo lo anterior, se explica que la superficie del líquido se encuentre en tensión permanentemente. La tensión superficial no es más que un cuantificador de estos fenómenos, y se define como la fuerza ejercida sobre el plano de la superficie por unidad de longitud (53), aunque también se puede entender como la energía por unidad de área superficial que hay en un líquido. Por lo tanto, las dimensiones de la tensión superficial son $[E/L^2]$ y las unidades usuales [dinas/cm] (equivalentes a $[erg/cm^2]$) son las empleadas en este trabajo. La tensión superficial es una propiedad que tiene importancia en el diseño de equipos de transferencia de masa y calor, en reactores y flujo de fluidos.

En el archivo TENSSUP.DBF, se encuentran resumidas correlaciones empíricas propuestas por Yaws et al. (58) para evaluar esta propiedad de acuerdo con la relación :

$$\sigma = \sigma_1 \left(\frac{T_r - T}{T_c - T_1} \right)^n$$

Las unidades de la tensión superficial al emplear estas correlaciones son [dina/cm]. La constante σ_1 es la tensión superficial a la temperatura de referencia T_1 ; T_c es la temperatura crítica del compuesto y n es una constante particular para cada compuesto. Algunas de las correlaciones contenidas en el archivo TENSSUP.DBF, fueron generadas a partir de datos experimentales reportados en la literatura (4), utilizando mínimos cuadrados. En general los resultados del ajuste son satisfactorios, como se muestra a continuación para los compuestos 2-Metilheptano y n-Tridecano :



La anterior relación es consecuencia de la ecuación de Mc Leod-Sudgeon (44)(33), y es válida sólo a bajas temperaturas ($T_r < 0.9$), cuando la densidad de la fase gaseosa es despreciable en comparación a la densidad de la fase líquida.

Si se desea estimar la tensión superficial de un líquido a temperaturas más elevadas, o de un líquido cuya correlación no se encuentre entre las citadas anteriormente, es posible realizarlo mediante el método de contribución de grupos de Mc Leod-Sudgeon :

$$\sigma^{1/4} = P(\rho_L - \rho_G)$$

En donde el parámetro P puede ser estimado en la base de datos mediante contribución de grupos, empleando la información que se encuentra en el archivo TENSUP.GRP. Si el usuario desea conocer σ en [dina/cm], es necesario que se estime primero ρ_l y ρ_g , que son las densidades del líquido y del gas en [gmol/cm³].

CAPITULO 8.

VISCOSIDAD.

8.1 Viscosidad.

Es posible y fácil de comprobar en la vida diaria que existen diversos tipos de fluidos, y que una de las características físicas que más distinguen a un fluido de otro es que tanta resistencia a fluir, o que tan "espeso" es el fluido en cuestión. La viscosidad es simplemente una medida de la facilidad con que un fluido es capaz de fluir.

La viscosidad se define como la fuerza cortante por unidad de área que se le aplica a un fluido confinado, dividida entre el gradiente de velocidad que se genera dentro de dicho medio (10) :

$$\eta = \frac{-\tau_{yx}}{(\partial v_x / \partial y)}$$

Los fluidos para los cuales la viscosidad no depende de la magnitud de la fuerza cortante ejercida, son conocidos como fluidos Newtonianos. En este trabajo, sólo se consideran métodos predictivos de viscosidad, para fluidos de este tipo.

Evidentemente, la velocidad máxima dentro del fluido, se obtiene en el punto en el que se aplica la fuerza cortante. Se puede interpretar a la viscosidad como una medida de la fricción interna del fluido, la cual se opone a cualquier cambio dinámico en el movimiento del fluido. También se le puede considerar como la resistencia que muestran los fluidos y una gran cantidad de sólidos a cambiar de forma. Así, es mucho más fácil generar un gradiente de velocidad en fluidos que posean una baja viscosidad, como un gas, que en fluidos que tienen altas viscosidades, como hidrocarburos pesados o petróleo crudo, por ejemplo. Debido a esto, la viscosidad es una propiedad clave para realizar diseños que involucren flujo de fluidos. Es importante hacer notar que la viscosidad, a diferencia de las demás propiedades que se tratan en este trabajo, es una propiedad que no se puede definir en condiciones de equilibrio. Si no existe un gradiente de velocidad entre las capas internas del fluido, la definición de viscosidad no tiene sentido. Por otro lado, después de un tiempo de haberse aplicado la fuerza cortante al medio fluido, a medida que el sistema se va acercando al equilibrio, el gradiente de velocidad se va acercando a cero. Cuando el fluido

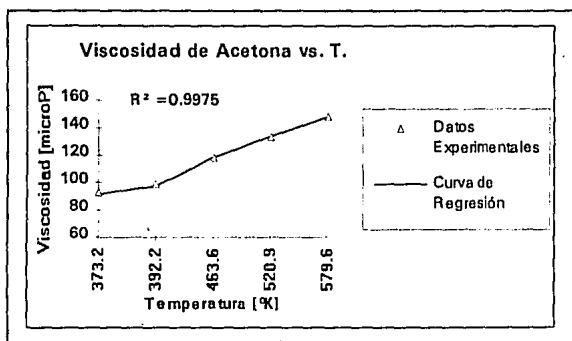
se encuentre en equilibrio de nuevo, no es posible hablar de viscosidad en un sentido estricto, ya que en ese momento no existirá un gradiente de velocidad. En esta forma, se sobreentiende que al hablarse de viscosidad, se hace referencia al gradiente de velocidad que se obtendrá en el momento justo de aplicar una fuerza cortante al fluido. Por la definición misma de viscosidad, se ve que esta propiedad debe tener dimensiones de $[F\theta/L^2]$ o bien de $[M/L\theta]$. Esta es la que se conoce como viscosidad absoluta. En general, las unidades más empleadas en el manejo de la viscosidad absoluta son los $[Nm/s^2]$ o Poise. Debido a que el Poise resulta ser un valor demasiado alto numéricamente para los valores experimentales determinados a diversos compuestos, se utilizan el cP y el μP para manejar prácticamente las unidades de viscosidad. Ocasionalmente, en ciertos trabajos se maneja la viscosidad cinemática, la cual se define como la viscosidad absoluta multiplicada por la densidad y que tiene dimensiones de $[L^2/\theta]$. En el sistema métrico, la viscosidad cinemática se expresa usualmente en $[cm^2/s]$, grupo de unidades que se define como Stoke. En adelante, al manejarse el término viscosidad, se sobreentenderá que se hace referencia a la viscosidad absoluta.

8.2 Viscosidad de Gases.

Ya que la viscosidad depende de la fricción interna del fluido, entonces los factores que influyen sobre esta propiedad son la temperatura, presión y la atracción existente entre las moléculas del fluido. En el caso de los gases, a mayor presión, las moléculas se encuentran con una probabilidad más alta de colisionar las unas con las otras, y por lo tanto la viscosidad aumenta. De igual forma, al subir la temperatura, las moléculas contienen una mayor cantidad de energía y también es más probable que haya un mayor número de colisiones, con lo cual aumenta la viscosidad. Dentro del archivo VISGAS.DBF, se encuentran las constantes necesarias para evaluar la viscosidad de gas en $[\mu P]$, de acuerdo a la siguiente correlación :

$$\eta = A + BT + CT^2$$

Una parte de estas constantes, al igual que se hizo para con otras propiedades, no fueron obtenidas directamente de la literatura (44), sino que fueron generadas a partir de datos experimentales reportados (4)(43). En el anexo IV se detallan los compuestos para los que se realizaron las regresiones, junto con los coeficientes de regresión, la desviación standard en la variable dependiente y el número de puntos con los que se contó. En general los modelos de regresión ajustan bien los datos experimentales, como se ilustra para el caso de la acetona :



En caso de que no se encuentre una correlación para un compuesto dado, se puede utilizar un método de contribución de grupos propuesto por Reichenberg (10)(44), para estimar la viscosidad en [μP] :

$$\eta = \frac{M^{1/2} T}{a \left[1 + 4 / T_c \right] \left[1 + 0.36 T_r (T_r - 1) \right]^{1/6}} \frac{T_r (1 + 270 \mu_r^4)}{T_r + 270 \mu_r^4}$$

En donde M = peso molecular del compuesto, T = Temperatura [°K], T_c = Temperatura crítica [°K], T_r = Temperatura reducida = T/T_c, y μ_r se define como el momento dipolar reducido del compuesto :

$$\mu_r = 52.46 \frac{\mu^2 P_c}{T_c^2}$$

En donde μ es el momento dipolar del compuesto y P_c la presión crítica del compuesto. El parámetro a^* se obtiene mediante la contribución de cada grupo integrante de la molécula según :

$$a^* = \sum_{i=1}^k n_i c_i$$

Hay que sumar todos los diferentes grupos, desde el primero hasta el k-ésimo. El factor n_i significa el número de grupos del tipo i que hay en la molécula, mientras que c_i es la contribución individual de cada grupo al parámetro a^* . El archivo VISGAS.GRP es utilizado por la base de datos para leer estas contribuciones. La principal limitante para la aplicación de éste método, es la relativa falta de información acerca del momento dipolar para diversos compuestos.

8.3 Viscosidad de Líquidos.

A diferencia de los gases, en líquidos un aumento en la temperatura provoca una disminución en la viscosidad. Esto se debe a que las moléculas se encuentran en un contacto mucho más íntimo que en los gases, y por lo tanto una disminución en la densidad, es decir, un menor número de moléculas por unidad de volumen, resulta ser mucho más significativo que el aumento en las colisiones intermoleculares, que ya existían desde antes, y entonces el líquido es capaz de fluir con mayor libertad a una temperatura más elevada que a una temperatura menor.

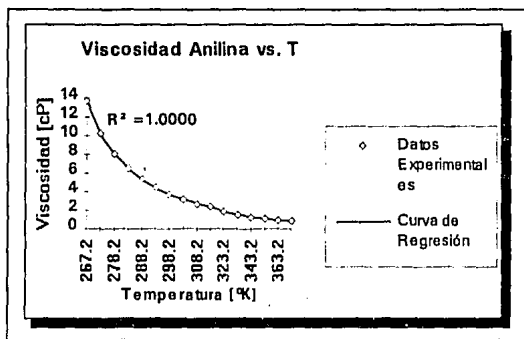
La base de datos hace uso del archivo VISLIQ.DBF, que resume información de diversas fuentes (44), para leer las constantes empleadas en las correlaciones siguientes :

$$(1) \quad \eta = AT^B$$

$$(2) \quad \ln \eta = A + \frac{B}{T}$$

$$(3) \quad \ln \eta = A + \frac{B}{T} + CT + DT^2$$

Una gran cantidad de estas constantes fueron generadas aplicando regresión lineal a datos reportados (4)(43)(57), utilizando el método de mínimos cuadrados. En general la calidad del ajuste es bastante aceptable, como se ve a continuación para el caso de la anilina:



Una técnica de contribución de grupos desarrollada por Orrick y Erbar (44) se emplea para encontrar las ctes. A y B en función de la estructura química del compuesto, en la siguiente relación :

$$\ln\left(\frac{\eta}{\rho M}\right) = A + \frac{B}{T}$$

En donde ρ es la densidad del líquido (g/cm^3) a 20°C y M es el peso molecular (g/gmol) del compuesto. La base de datos genera las ctes. A y B y a continuación calcula η . La información relativa a éste cálculo se encuentra en el archivo VISLIQ.GRP. Las ecuaciones para determinar A y B son las siguientes :

$$A = -(6.95 + 0.21C) + \sum_{i=1}^k n_i A_i$$

$$B = (275 + 99C) + \sum_{i=1}^k n_i B_i$$

En donde C es el número de átomos de carbono presentes en la molécula, que no estén incluidos en las contribuciones A_i y B_i ; k es el número de diferentes grupos presentes en la molécula y n_i es el número de grupos del tipo i presentes en la molécula.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES.

Durante el trabajo realizado en esta tesis, se construyeron 27 archivos compatibles con DBase IV, que ocupan un espacio en memoria igual a 1.27 MB. También se generaron 8 archivos con formato ASCII que desplazan una memoria de 12.5 KB. Es imposible presentar en forma impresa toda esta información por restricciones de espacio evidentes, aunque es posible consultarlas directamente en los diskettes que acompañan al presente trabajo. Dado que una parte importante de estos archivos DBase IV fué generada a partir de regresiones de datos experimentales reportados en la literatura, se decidió incluir dichos resultados en el anexo IV. Como se puede ver, se generaron un poco más de 600 nuevas correlaciones que no se encontraban reportadas en la literatura.

También se desarrolló un programa que interactúa con estos archivos, el cual consta de 39 módulos en total, ocupando alrededor de 400 KB en memoria. Debido a que el programa es compilado en código binario por VISUAL BASIC, no es posible imprimir el código fuente, aunque en todo caso el espacio que ocuparía dicha impresión volvería a ser una limitante. Si el lector se encuentra interesado en tener una copia del código fuente, el autor del presente trabajo se la proporcionará con gusto (544-5492). La forma en que el programa PROPS.EXE utiliza la información existente en las bases de datos y en los archivos ASCII se ha descrito con más detalle en la introducción. Se ha tratado, en la medida de lo posible, de desarrollar un programa que sea amigable con el usuario y relativamente fácil de usar. En este sentido es el usuario del programa quien tiene la última palabra.

Como se puede ver, el empleo de la base de datos que se ha desarrollado simplifica en gran medida el trabajo que un ingeniero de diseño de procesos tiene que realizar, y permite calcular un gran número de propiedades prácticamente para cualquier compuesto que se desee, en caso de que no existan correlaciones disponibles.

BIBLIOGRAFÍA.

1. Aly, F.A.; L.L. Lee. Self-consistent equations for calculating the ideal gas heat capacity, enthalpy, and entropy. *Fluid phase equilibria*, **6** : 169-179. (1981).
2. Ambrose, D. Vapor-Liquid critical properties. National physics laboratory, Teddington, NPL Rep. Chem. 98. (1979).
3. Anaya, A. Thermal conductivity of some insulating materials as a function of temperature. *Chem. Eng.* May 27 1986 : 153-154.
4. API Research Project 44. Handbook of vapor pressures and heats of vaporizations of hydrocarbon and related compounds. Thermodynamics Research Center, College Station, Texas, 1971.
5. Balan, G.P.; A.N. Hariharabaskaran, D.Srinivasan. Empirical formulas calculate steam properties quickly. *Chem. Eng.* Jan. 1991 : 139-140
6. Balzhiser, R.E.; M.R. Samuels; J.D. Eliassen. *Termodinámica química para ingenieros*. 1ª Ed., Madrid, España, 1980.
7. Cooper, H.W.; J.C. Goldfrank. BWR constants and new correlations. *Hydrocarbon Processing*, **46**, No. 12 : 141-146. (1967).
8. Chueh, P.L.; J.M. Prausnitz. Vapor-Liquid equilibria at high pressures. Vapor-Phase fugacity coefficients in non-polar and quantum-gas mixtures. I & EC Fundamentals, **6**, No. 4 : 492. (1967).
9. Chung, T-H.; L.L. Lee; K.E. Starling. Applications of kinetic gas theories and multiparameter correlation for prediction of dilute gas viscosity and thermal conductivity. *Ind. Eng. Chem. Fundam.* **23**, No. 1 : 8-13. (1984).
10. Danner, R.P.; T.E. Daubert, Manual for predicting chemical process design data. Design Institute for Physical Property Data. AIChE, 1983.
11. Doolittle, A.K.; I. Simon; R.M. Cornish. Compression of liquids. *AIChE Journal*, **6**, No. 1 : 150-162. (1960).
12. Fisher, C.H. Calculate critical values from the number of carbons. *Chem. Eng.* Jan. 1991 : 110-111.
13. Francis, A.W. Critical temperatures of pure hydrocarbons. *Ind. & Eng. Chem.* **49**, No. 10 : 1787-1788. (1957).

14. Francis, A.W. Pressure-Temperature-Liquid density relations of pure hydrocarbons. *Ind. & Eng. Chem.* **49**, No. 10 : 1779-1786. (1957).
15. Gambill, W.R. How P & T change liquid viscosity. *Chem. Eng.* Feb. 9, 1959 : 123-126.
16. Gambill, W.R. How to estimate liquid densities. *Chem. Eng.* Nov 16, 1959 : 193-194
17. Gambill, W.R. To get viscosity for a gas mixture. *Chem. Eng.* Nov. 17, 1958 : 157-160.
18. Gambill, W.R. You can predict heat capacities. *Chem. Eng.* May 1957 : 263-266.
19. Goletz, E.; Tassios, D. An Antoine type equation for liquid viscosity dependence to temperature. *Ind. Eng. Chem., Process Des. & Dev.* **16**, No. 1 : 75-79. (1977).
20. Hadden, S.T. Specific heat of hydrocarbons. *Hydrocarbon Processing*, **45**, No. 7. (1966).
21. Hayduk, W.; S.C. Cheng. Review of relation between diffusivity and solvent viscosity in dilute liquid solutions. *Chem. Eng. Science*. **26** : 635-646. (1971).
22. Heidemann, R.A. Computation of high pressure phase equilibria. *Fluid phase equilibria*, **14** : 55-78. (1978).
23. Hougen, O.A.; K.M. Watson; R.A. Ragatz. *Chemical Process Principles*. 2nd. Ed. Pt. II, Thermodynamics, Wiley, New York, 1959.
24. Innes, K.K.; Albright, L.F. Effect of temperature and solute volume on liquid diffusion coefficients. *Ind. & Eng. Chem.* **49**, No. 10 : 1793-1794. (1957).
25. Jamieson, D.T. Thermal conductivity. *Journal of Chemical and Engineering Data*. **24**, No. 3 : 244-246. (1979).
26. Jamieson, D.T.; G. Cartwright, Thermal conductivity of associated liquids. *Journal of Chemical and Engineering Data*. **25** : 199-201. (1980).
27. King, C.J. *Separation Processes*, 2nd Ed., Mc Graw Hill. New York. 1980, Chap. 2.
28. Kudchadker, A.P.; G.H Alani; B.J. Zwolinski. *Chem. Rev.*, **68** : 659. (1968).

29. Lange, N.A. Lange's Handbook of chemistry. 11th Ed. Mc Graw Hill, New York, 1973.
30. Luckas, M.; K. Lucas. Viscosity of liquids : an equation with parameters correlating with structural groups. *AIChE Journal*. **32**, No. 1 : 139-141. (1986).
31. Mathews, J.F. Critical constants of inorganic substances. *Chemical reviews*, **72**, No. 1 : 96-99. (1972).
32. McGarry, J. Correlation and prediction of the vapor pressure of pure liquids over large pressure ranges. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* **22** : 313-322. (1983).
33. Meissner, H.P.; A.S. Michaels. Surface tensions of pure liquids and liquid mixtures. *Industrial and Engineering Chemistry*, **41**, No12 : 2782-2787. (1949).
34. Michelsen, M.L. Calculation of phase envelopes and critical points for multicomponents mixtures. *Fluid phase equilibria*, **4** : 1-10. (1980).
35. Michelsen, M.L. Calculation of critical points from cubic two-constant equations of state. *AIChE Journal*. **27**, No. 3 : 521-523. (1980).
36. Miller, D.G. Graphical methods for determining a nonlinear constant in vapor pressure equations. *Ind. Eng. Chem. Fundam.* **2**, No. 1 : 68-73. (1963).
37. Ngai, I. Two programs for multicomponent distillation. *Chem. Eng. Aug.* 20, 1984 : 145-149.
38. Ogiwara, K.; Y. Arai; S. Saito. Thermal conductivities of liquid alcohols and their binary mixtures. *Journal of Chemical Engineering of Japan*. **15**, No. 5 : 335-342. (1982).
39. Ogiwara, K.; Y. Arai; S. Saito. Thermal conductivities of liquid hydrocarbons and their binary mixtures. *Ind. Eng. Chem. Fundam.* **19** : 295-300. (1980).
40. Orye, R.V. Prediction and correlation of phase equilibria and thermal properties with the BWR equation of state. I. & *EC Process Design and Development*. **8**, No. 4 : 579. (1969).
41. Othmer, D.F.; E-S Yu. *Ind. Eng. Chem.* Correlating vapor pressures and vapor volumes. **60**, No. 1 : 22-35. (1968).
42. Othmer, D.F.; P.W. Maurer ; C.J. Molinary ; R.C. Kowalski. *Ind. Eng. Chem.* Correlating vapor pressures and other physical properties. **49**, No. 1 : 125-137. (1957).

43. Perry, R.H.; D.W. Green, J.O. Maloney. Perry's Chemical Engineers Handbook. 6th Ed., Mc Graw Hill, New York, 1984.
44. Prausnitz, J.M; R.C. Reid; B. Poling. The properties of gases and liquids. 4th Ed., Mc Graw Hill, New York, 1984.
45. Rehberg, C.E. Adjustment of temperature scale of Cox charts. *Ind. Eng. Chem.* **42**, No. 5 : 829-830. (1980).
46. Reid, R.C.; J.L. San Jose. Estimating liquid heat capacities Pt. I. *Chem Eng.* Dec. **6**, 1976 : 161-164.
47. Rice, V.L. Program performs vapor-liquid equilibrium calculations. *Chem. Eng.* June **28**, 1986 : 80-86
48. Robinson, R.L.; Edmister W.C.; Dullien F.A.L. Diffusion coefficients for four homomorphic binary liquid systems. *5*, No. 1 : 74-79. (1966).
49. Tamplin, W.S.; D.A. Zuzic. Specific heat of organic hydrocarbons. *Hydrocarbon Processing.* **46**, No. 8 : 145-146. (1967).
50. Thompson P.A. A simple formula for the heat capacity of polyatomic gases, with constants for 143 substances. *Journal of Chem. and Eng. Data.* **22**, No.4 : 431-436. (1977).
51. Turner, J.C.R. On the formulation of the diffusion coefficient in isothermal binary systems. *Chem. Eng. Science.* **30** : 151-154. (1975).
52. Tyn, M.T. Estimating diffusion coefficients at any temperature. *Chem. Eng.* June **9**, 1975 : 106-107
53. Weast, R.C. Handbook of chemistry and physics. 1st Student Ed. CRC Press, Boca Raton, Fl., 1987.
54. Wilson, G.M. Vapor-Liquid equilibrium, A new expression for the excess free energy of mixing. *J. Am. Chem. Soc.* **86** : 127-133. (1964).
55. Wooley, R.J. Calculator program for finding values of physical properties. *Chem. Eng.* Mar. **31**, 1986 : 109-118.
56. Yaws, C.L. et al. Correlation constants for chemical compounds. *Chem. Eng.* Aug. **16**, 1976 : 79-87.

57. Yaws, C.L. et al. Correlation constants for chemical compounds. Chem. Eng. Nov. 22, 1976 : 153-162.
58. Yaws, C.L. et al. Correlation constants for chemical compounds. Chem. Eng. Oct. 25, 1976 : 127-135.
59. Yaws, C.L.; L. XiaoYan; L. Bu. The water solubility of naphtenes. Chem. Eng. 100, No. 10 : 122-123. (1994).

ANEXO I

INSTALACIÓN DEL PROGRAMA

Los disquettes que se encuentran anexos al presente trabajo, contienen todos los archivos necesarios para instalar el programa PROPS.EXE en el disco duro de cualquier computadora personal que cuente por lo menos con un espacio libre de 5MB, el sistema WINDOWS en la versión 3.1 o posterior, y además con una unidad para discos flexibles de 3.5" de alta densidad, es decir, con una capacidad de 1.44MB. La instalación de PROPS.EXE se puede llevar a cabo desde el programa administrador de archivos, que se encuentra en la ventana *Principal* o seleccionando directamente en el Administrador de Programas la opción *Ejecutar* que se encuentra en el menú *Archivo*.

En el primer caso, es necesario seleccionar la unidad A o B como unidad activa, dependiendo del nombre lógico que tenga asignado la unidad de 3.5" en la computadora en donde se desea instalar el programa, posicionando el ratón sobre el archivo ejecutable nombrado SETUP.EXE, en el cual se encuentra contenido todo el código necesario para la instalación, y apretando después la tecla ENTRAR ↵, o bien presionando dos veces el botón izquierdo del ratón para ejecutar así el programa de instalación. Después solo es necesario seguir paso a paso las indicaciones del programa de instalación.

En caso de que se desee instalar el programa mediante la segunda opción, el Administrador de Programas despliega un diálogo que pregunta acerca de la dirección y el nombre del archivo ejecutable que se desea ejecutar, para lo cual es necesario indicar en la línea A:\SETUP o bien B:\SETUP, dependiendo de cual sea el nombre lógico que tenga asignada la unidad de 3.5" en esa computadora. Al igual que en la primera opción, en adelante solo es necesario seguir las indicaciones del programa de instalación.

No es posible instalar PROPS.EXE directamente desde el sistema operativo, ya que el programa de instalación solo está diseñado para funcionar en un entorno que emplee WINDOWS, por lo que no puede ser ejecutado desde MS-DOS.

ANEXO II

OBTENCIÓN DE CONSTANTES DE ECUACIONES MEDIANTE EL MÉTODO DE MÍNIMOS CUADRADOS.

La regresión lineal múltiple es una herramienta valiosa que permite ajustar modelos empíricos a una serie de datos experimentales. De esta forma, se puede sintetizar en una ecuación sencilla el comportamiento de una propiedad (única variable dependiente) a lo largo de un rango de temperatura o presión (variables independiente), de forma exacta. Ya que dicha ecuación debe representar adecuadamente los datos experimentales de la propiedad, dentro de los límites en que esta fue determinada, se elimina la necesidad de llevar a cabo interpolaciones entre datos, en valores de las variables independientes para los cuales no se determinó la variable independiente.

La forma que tiene la ecuación lineal general :

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_mx_m$$

impone en términos matemáticos el problema de hallar $m + 1$ constantes para una ecuación dada, en donde m es el número de variables independientes, y la variable independiente, y x_1 hasta x_n las variables independientes. Debido a que se tienen $m + 1$ incógnitas (ya que existen $m + 1$ coeficientes en la ec. lineal gral.), es necesario generar $m + 1$ ecuaciones linealmente independientes, para tener un sistema con una solución única. Una condición matemática mínima para que exista esta solución, es que al menos se hallan realizado $m + 1$ determinaciones de la propiedad, a diferentes valores de las variables independientes, ya que de esta forma se puede plantear un sistema de $m + 1$ ecuaciones por sustitución directa en la ecuación propuesta. Evidentemente, 2 puntos definen por completo una línea recta, 3 puntos definen por completo un plano y así sucesivamente. Sin embargo, desde el punto de vista estadístico, es necesario que al menos se realicen $m + 2$ determinaciones experimentales, ya que de otra forma no sería posible calcular el error standard de la aproximación para la regresión lineal múltiple. A continuación se describe brevemente la forma en que se obtienen estas $m + 1$ ecuaciones.

Cuando el número de determinaciones experimentales es mayor que el número de constantes que se ajustan a los datos, como generalmente sucede, el problema realmente consiste, además de generar $m + 1$ ecuaciones, en asegurarse de que las $m + 1$ ecuaciones nos den las "mejores" constantes posibles. Con este fin, se define la función de error como :

$$a_0 n + a_1 \sum_i x_{1i} + a_2 \sum_i x_{2i} + \dots + a_{m-1} \sum_i x_{m-1i} + a_m \sum_i x_{mi} = \sum_i y_i$$

$$a_0 \sum_i x_{1i} + a_1 \sum_i x_{1i}^2 + a_2 \sum_i x_{1i} x_{2i} + \dots + a_{m-1} \sum_i x_{1i} x_{m-1i} + a_m \sum_i x_{1i} x_{mi} = \sum_i y_i x_{1i}$$

$$a_0 \sum_i x_{2i} + a_1 \sum_i x_{2i} x_{1i} + a_2 \sum_i x_{2i}^2 + \dots + a_{m-1} \sum_i x_{2i} x_{m-1i} + a_m \sum_i x_{2i} x_{mi} = \sum_i y_i x_{2i}$$

$$\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots$$

$$\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots$$

$$\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots$$

$$a_0 \sum_i x_{m-1i} + a_1 \sum_i x_{m-1i} x_{1i} + a_2 \sum_i x_{m-1i} x_{2i} + \dots + a_{m-1} \sum_i x_{m-1i}^2 + a_m \sum_i x_{m-1i} x_{mi} = \sum_i y_i x_{m-1i}$$

$$a_0 \sum_i x_{mi} + a_1 \sum_i x_{mi} x_{1i} + a_2 \sum_i x_{mi} x_{2i} + \dots + a_{m-1} \sum_i x_{mi} x_{m-1i} + a_m \sum_i x_{mi}^2 = \sum_i y_i x_{mi}$$

El anterior es un sistema de $m + 1$ ecuaciones lineales con $m + 1$ incógnitas, que puede ser resuelto fácilmente con diversos métodos y, dado que la estructura de la matriz de coeficientes resultante es simétrica, existen algoritmos especiales para resolver más rápidamente el sistema.

Usualmente es necesario tener un indicador de la calidad de la regresión, para lo cual se utiliza el coeficiente de regresión R^2 , el cual se define como :

$$R^2 = \frac{S_y - \varepsilon}{S_y}$$

En donde ε es la función de error definida anteriormente y S_y es la suma de las diferencias de cuadrados con respecto a la media definida como :

$$S_y = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

Así, el coeficiente de regresión es igual a 1 si la función de error es cero, lo cual significa que la ecuación propuesta explica perfectamente el comportamiento de los datos experimentales. Por el contrario, un coeficiente de regresión igual a cero indica que el valor numérico de la función de error es igual al de la desviación standard para y , lo que significa que el modelo no explica en absoluto la variación en los datos. Existen formas alternativas de definir el coeficiente de regresión, aunque quizás esta es la más general. Es importante recalcar que el coeficiente de regresión es un propiedad intrínseca de un conjunto de datos

cualquiera, como lo son el promedio o la desviación standard, y que de hecho se puede calcular antes de llevar a cabo una regresión para ciertos modelos.

Aunque este método puede parecer a primera vista algo limitado, una gran cantidad de modelos pueden ser manipulados algebraicamente, y ajustados de tal forma tal que se posible determinar parámetros de regresión, usando la regresión múltiple. Desde ecuaciones polinómicas hasta ecuaciones exponenciales, por solo mencionar algunas, cumplen con los requisitos para poder ser transformadas y que por lo tanto se puedan ajustar datos experimentales con esos modelos.

ANEXO III

MÉTODOS NUMÉRICOS COMUNES PARA LA OBTENCIÓN DE RAÍCES EN ECUACIONES ALGEBRAICAS.

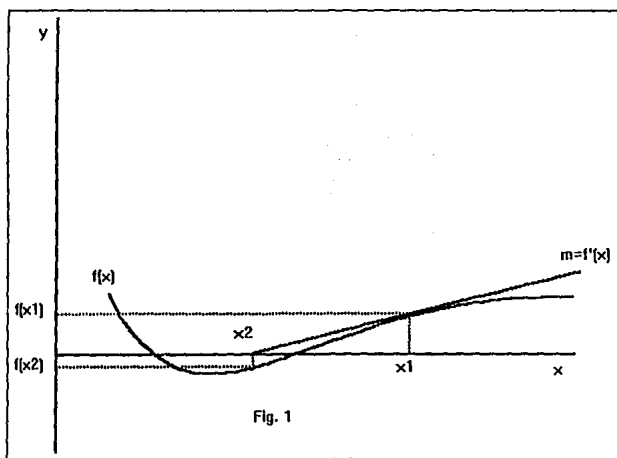
I) Método de Newton-Raphson.

El método de Newton-Raphson quizás es uno de los más conocidos y empleados, para la determinación numérica de raíces de ecuaciones algebraicas. A pesar de su popularidad, es probable que no siempre se conozcan sus desventajas y sus limitaciones. El desarrollo de su algoritmo está basado en consideraciones de cálculo diferencial elemental que se exponen a continuación.

La derivada de una función esta definida matemáticamente como el límite :

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta f(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = \lim_{(x_1 - x_2) \rightarrow 0} \frac{y_1 - y_2}{x_1 - x_2}$$

Geoméricamente, la derivada se puede interpretar como la pendiente de la recta tangente a la curva $f(x)$ en cualquier punto x . Este concepto se ilustra en la fig. 1.



Es importante notar en esta figura, que la derivada a la curva $f(x)$ en el punto x_1 , es la pendiente de la recta tangente a $f(x)$ ilustrada, con valor numérico igual a m .

Considerando que el punto x_2 es la intersección de esta recta tangente con el eje x , es posible determinar el valor de la pendiente m como sigue :

$$m = f'(x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_2)}{x_1 - x_2}$$

En esta relación se conocen todos los términos, pero generalmente se asume que el punto x_2 es una mejor aproximación a la raíz real de la ecuación $f(x) = 0$, por lo que $f(x_2)$ debe de tener un valor cercano a cero y por ende despreciable frente a $f(x_1)$. Tomando en cuenta estas consideraciones, la anterior relación se convierte en :

$$f'(x_1) = \frac{f(x_1)}{x_1 - x_2}$$

Ya que la variable de interés es en realidad x_2 , puesto que es una mejor aproximación a la raíz de $f(x)$ a partir de una aproximación inicial x_1 , esta nueva aproximación se puede expresar explícitamente en la forma :

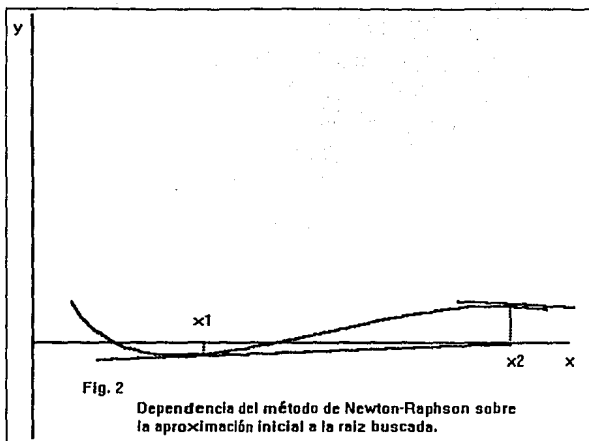
$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

En general, siguiendo los mismos argumentos expuestos, el algoritmo mediante el cual se calcularían aproximaciones sucesivas a la raíz de la ecuación es :

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

El método de Newton-Raphson tiene la ventaja de que cuando logra determinar una raíz, lo hace de una forma muy eficiente y rápida. Es una herramienta muy poderosa si se sabe utilizar adecuadamente. Sin embargo tiene dos deficiencias mayores : a) es posible que la raíz a la cual converge el algoritmo no sea la que se quería aproximar y b) puede suceder que el método no converja hacia ninguna raíz. Estos problemas se explican por el hecho de que el desarrollo del algoritmo depende de la aproximación inicial a la raíz, como se ilustra en la fig. 2. :

**ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA**



II) Método de Regula Falsi.

El método de Regula-Falsi es empleado cuando el tipo de funciones para las cuales se desea aproximar una raíz, tienen un comportamiento tal en las cercanías de la raíz, que se dificulta el empleo de otros algoritmos de iteración. A diferencia de la técnica empleada en el algoritmo de Newton-Raphson, el de Regula-Falsi es un procedimiento de tipo cerrado, es decir, es necesario "encapsular" la raíz dentro de un intervalo cerrado. La forma en que esto se puede lograr es evaluando la función en diferentes puntos, y seleccionando el intervalo cerrado de tal forma que los límites superior e inferior de este, x_1 y x_2 , cumplan con la relación $f(x_1)f(x_2) < 0$, lo cual se ilustra en la fig. 3.1. Se puede ver en esta figura, que si se traza una línea recta entre los puntos $(x_1, f(x_1))$ y $(x_2, f(x_2))$, entonces la intersección de esta recta con el eje de las abscisas, x_3 , genera una mejor aproximación a la raíz real de la función. Es posible conocer x_3 observando en la fig. 3.1, que se forman dos triángulos semejantes con vértice común en el punto $(x_3, 0)$, de tal forma que es posible expresar la igualdad :

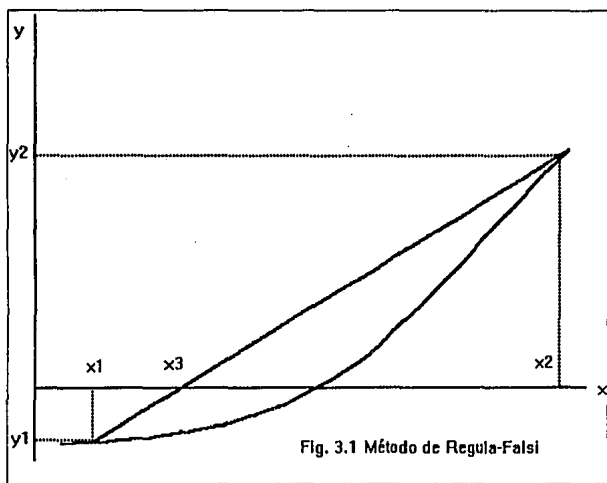
$$\left| \frac{x_3 - x_1}{y_1} \right| = \left| \frac{x_2 - x_3}{y_2} \right|$$

En donde es necesario aplicar la función de valor absoluto, debido a que $y_1 = f(x_1)$ es menor a cero. Modificando la anterior relación tomando en cuenta esta restricción se llega a:

$$\frac{x_1 - x_3}{y_1} = \frac{x_2 - x_3}{y_2}$$

Expresando esta relación para x_3 en términos explícitos se encuentra:

$$x_3 = \frac{y_1 x_2 - y_2 x_1}{y_1 - y_2}$$

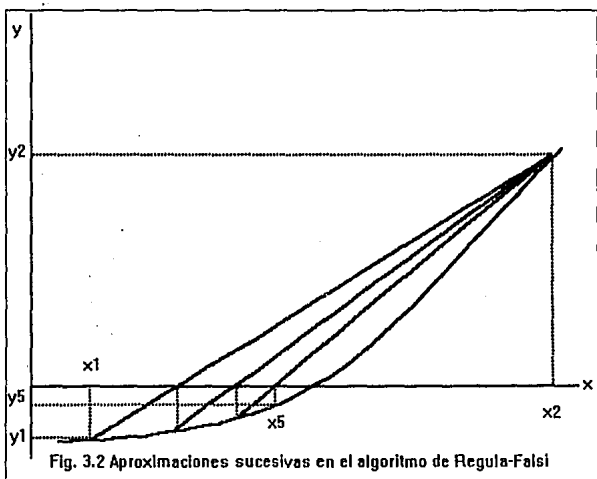


Una vez encontrada esta aproximación a la raíz, la aproximación sustituye entonces al límite del intervalo cuyo valor de $f(x_1)$ o $f(x_2)$ sea de igual signo a $f(x_3)$, para asegurar que entre los límites del nuevo intervalo la función cambia de signo, y por lo tanto que una raíz se encuentra en el intervalo. De forma general, si se representan los límites inferior y

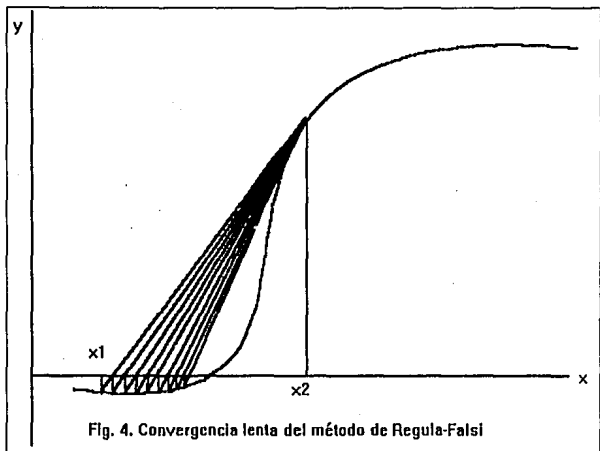
superior del intervalo por x_1 y x_5 , y a la aproximación a la raíz por x_r , tenemos que cada aproximación consecutiva queda definida por :

$$x_u = \frac{f(x_1)x_r - f(x_r)x_1}{f(x_1) - f(x_r)}$$

A medida que este proceso se repite, cada vez se van alcanzando mejores aproximaciones, como se muestra en la fig. 3.2, en donde la quinta aproximación, x_5 , está muy cerca de la raíz verdadera.



Como es de esperar, no en todos los casos es adecuado el empleo de este sistema de búsqueda de raíces. Aún cuando una de las exigencias del método es el encontrar un intervalo cerrado que contenga una raíz, y por lo tanto la convergencia del algoritmo esté asegurada, para ciertas funciones, como se ilustra en la fig. 4, el número de iteraciones antes de encontrar una aproximación adecuada a la raíz puede ser muy grande.



III) Método analítico para resolver ecuaciones cúbicas.

Una ecuación cúbica es un polinomio de tercer grado en alguna variable, generalmente representada por x , para el cual se desean conocer las raíces :

$$Ax^3 + Bx^2 + Cx + D = 0$$

Dividiendo los anteriores coeficientes entre el coeficiente A , siempre es posible expresar una ecuación cúbica en la forma :

$$x^3 + ax^2 + cx + d = 0$$

Llevando a cabo el cambio de variable $y = x + \frac{b}{3}$ y calculando los coeficientes $p = \frac{1}{3}(3c - b^2)$ y $q = \frac{1}{27}(27d - 9bc + 2b^3)$ es posible transformar la anterior ecuación cúbica en x a una ecuación cúbica en la variable y :

$$y^3 + py + q = 0$$

La resolución de dicha ecuación para y es mucho más simple que resolver la ecuación equivalente para x , pero es necesario determinar antes el término $R = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2$.

Las diferentes soluciones de la ecuación dependen del signo aritmético de R, como se detalla a continuación :

a) Si R es igual a cero, entonces la ecuación cúbica tiene tres soluciones reales, de las cuales al menos dos son iguales entre sí. Las raíces son :

$$y_1 = A + B$$

$$y_2 = -\frac{1}{2}(A + B)$$

$$y_3 = -\frac{1}{2}(A + B)$$

$$\text{En donde } A = B = \sqrt[3]{-\frac{q}{2}}$$

b) Si R es mayor a cero, solo existe una raíz real de la ecuación y dos complejas que son conjugadas la una de la otra. En ese caso, la única raíz real se determina mediante :

$$y_1 = A + B$$

Para lo cual es necesario primero calcular antes A y B como sigue :

$$A = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{R}}$$

$$B = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{R}}$$

c) En caso de que R sea menor a cero, entonces existen tres raíces reales diferentes en la ecuación, y es necesario determinarlas de la siguiente forma :

$$y_i = \pm 2 \sqrt[3]{-\frac{p}{3}} \cos\left(\frac{\phi}{3} + \frac{2\pi}{3}i\right); i = 1, 2, 3$$

En donde el parámetro ϕ se encuentra mediante la relación :

$$\phi = \cos^{-1}\left(\frac{q^2/4}{-p^3/27}\right)$$

El signo positivo aplica si el coeficiente q es menor a cero, mientras que el negativo se utiliza si q es mayor a cero.

ANEXO IV.

CONSTANTES DE CORRELACIÓN OBTENIDAS MEDIANTE MÍNIMOS CUADRADOS

Regresión de DHf vs. T.

$$\Delta H_f = A + BT + CT^2$$

DHf [Kcal/mol]; T [°K]

Formula	Nombre	A	B	C	n	R ²	Sy	Tmin	Tmax
C	Carbono	171.8913	6.374E-04	-3.489E-07	23	0.9544	0.19591	298.16	4000
C10H14	n-Butilbenceno	4.1407	-2.980E-02	1.286E-05	14	0.9931	0.31485	298.16	1500
C10H18	1-Deceno	18.5597	-3.475E-02	1.527E-05	14	0.9937	0.33896	298.16	1500
C10H20	n-Pentilicicloptano	-33.6534	-4.655E-02	2.128E-05	14	0.9903	0.51845	298.16	1500
C10H20	n-Butilciclohexano	-40.3849	-4.371E-02	2.165E-05	14	0.9816	0.56834	298.16	1500
C10H20	1-Deceno	-19.4385	-4.098E-02	1.808E-05	14	0.9928	0.42174	298.16	1500
C10H22	n-Decano	-48.2982	-4.572E-02	2.039E-05	14	0.9921	0.48468	298.16	1500
C11H16	n-Pentilbenceno	0.2153	-3.387E-02	1.481E-05	14	0.9931	0.35005	298.16	1500
C11H20	1-Undeceno	14.5994	-3.868E-02	1.711E-05	14	0.9932	0.38463	298.16	1500
C11H22	n-Hexilcicloptano	-37.6127	-5.048E-02	2.313E-05	14	0.9902	0.56351	298.16	1500
C11H22	n-Pentilciclohexano	-44.3445	-4.764E-02	2.350E-05	14	0.9822	0.61375	298.16	1500
C11H22	1-Undeceno	-23.3988	-4.491E-02	1.993E-05	14	0.9925	0.46749	298.16	1500
C11H24	n-Undecano	-52.2625	-4.964E-02	2.223E-05	14	0.9918	0.53168	298.16	1500
C12H18	n-Hexilbenceno	-3.7450	-3.780E-02	1.665E-05	14	0.9926	0.39575	298.16	1500
C12H22	1-Dodeceno	10.6392	-4.261E-02	1.895E-05	14	0.9929	0.43033	298.16	1500
C12H24	n-Heptilicicloptano	-41.5720	-5.441E-02	2.497E-05	14	0.9900	0.60860	298.16	1500
C12H24	n-Hxilciclohexano	-48.3042	-5.157E-02	2.534E-05	14	0.9827	0.65919	298.16	1500
C12H24	1-D. deceno	-27.3590	-4.884E-02	2.177E-05	14	0.9922	0.51324	298.16	1500
C12H26	n-Dodecano	-56.2169	-5.358E-02	2.408E-05	14	0.9914	0.58085	298.16	1500
C13H20	n-Heptilbenceno	-7.7052	-4.173E-02	1.850E-05	14	0.9923	0.44146	298.16	1500
C13H24	1-Trideceno	6.6790	-4.654E-02	2.080E-05	14	0.9926	0.47604	298.16	1500
C13H26	n-Octilicicloptano	-45.5313	-5.835E-02	2.682E-05	14	0.9899	0.65369	298.16	1500
C13H26	n-Heptilciclohexano	-52.2638	-5.551E-02	2.719E-05	14	0.9832	0.70463	298.16	1500
C13H26	1-Trideceno	-31.3192	-5.278E-02	2.362E-05	14	0.9920	0.55899	298.16	1500
C13H28	n-Tridecano	-60.3916	-5.707E-02	2.571E-05	14	0.9918	0.60086	298.16	1500
C14H22	n-Octilbenceno	-11.6654	-4.566E-02	2.034E-05	14	0.9920	0.48718	298.16	1500
C14H26	1-Tetradeceno	2.7188	-5.047E-02	2.264E-05	14	0.9923	0.52175	298.16	1500
C14H28	n-Nonilcicloptano	-49.4905	-6.228E-02	2.866E-05	14	0.9899	0.69879	298.16	1500
C14H28	n-Octilciclohexano	-56.1081	-5.977E-02	2.921E-05	14	0.9848	0.72377	298.16	1500
C14H28	1-Tetradeceno	-35.2794	-5.671E-02	2.546E-05	14	0.9917	0.60474	298.16	1500
C14H30	n-Tetradecano	-64.1456	-6.143E-02	2.776E-05	14	0.9912	0.66616	298.16	1500
C15H24	n-Nonilbenceno	-15.6256	-4.959E-02	2.218E-05	14	0.9918	0.53291	298.16	1500
C15H28	1-Pentadeceno	-1.2414	-5.440E-02	2.448E-05	14	0.9920	0.56748	298.16	1500

Formula	Nombre	A	B	C	n	R ²	Sy	Tmin	Tmax
C15H30	n-Decilciclopentano	-53.4498	-6.621E-02	3.051E-05	14	0.9898	0.74390	298.16	1500
C15H30	n-Nonilciclohexano	-60.1831	-6.337E-02	3.088E-05	14	0.9839	0.79557	298.16	1500
C15H30	1-Pentadeceno	-39.2396	-6.064E-02	2.730E-05	14	0.9915	0.65050	298.16	1500
C15H32	n-Pentadecano	-68.1052	-6.536E-02	2.960E-05	14	0.9911	0.71234	298.16	1500
C16H26	n-Decilbenceno	-19.5858	-5.352E-02	2.403E-05	14	0.9915	0.57864	298.16	1500
C16H30	1-Hexadecino	-5.2017	-5.833E-02	2.633E-05	14	0.9918	0.61321	298.16	1500
C16H32	n-Undecilciclohexano	-57.4091	-7.014E-02	3.235E-05	14	0.9897	0.78902	298.16	1500
C16H32	n-Decilciclohexano	-64.1428	-6.731E-02	3.272E-05	14	0.9842	0.84105	298.16	1500
C16H32	1-Hexadeceno	-43.1999	-6.457E-02	2.915E-05	14	0.9914	0.69626	298.16	1500
C16H34	n-Hexadecano	-72.0590	-6.930E-02	3.145E-05	14	0.9909	0.75850	298.16	1500
C17H28	n-Undecilbenceno	-23.5461	-5.745E-02	2.687E-05	14	0.9913	0.62438	298.16	1500
C17H32	1-Heptadeceno	-9.1619	-6.226E-02	2.817E-05	14	0.9916	0.65894	298.16	1500
C17H34	n-Dodecilciclohexano	-61.3684	-7.408E-02	3.420E-05	14	0.9897	0.83414	298.16	1500
C17H34	n-Undecilciclohexano	-68.1024	-7.124E-02	3.457E-05	14	0.9844	0.88654	298.16	1500
C17H34	1-Heptadeceno	-47.1601	-6.850E-02	3.099E-05	14	0.9912	0.74202	298.16	1500
C17H36	n-Heptadecano	-76.0128	-7.325E-02	3.330E-05	14	0.9908	0.80467	298.16	1500
C18H30	n-Dodecilbenceno	-27.5063	6.139E-02	2.771E-05	14	0.9912	0.67012	298.16	1500
C18H34	1-Octadeceno	-13.1221	-6.620E-02	3.002E-05	14	0.9914	0.70468	298.16	1500
C18H36	n-Tridecilciclohexano	-65.3277	-7.801E-02	3.604E-05	14	0.9896	0.87927	298.16	1500
C18H36	n-Dodecilciclohexano	-72.0621	-7.517E-02	3.641E-05	14	0.9847	0.93203	298.16	1500
C18H36	1-Octadeceno	-51.1203	-7.243E-02	3.283E-05	14	0.9911	0.78778	298.16	1500
C18H38	n-Octadecano	-79.9724	-7.718E-02	3.514E-05	14	0.9906	0.85086	298.16	1500
C19H32	n-Tridecilbenceno	-31.4665	-6.532E-02	2.956E-05	14	0.9910	0.71586	298.16	1500
C19H36	1-Nonadeceno	-17.0823	-7.013E-02	3.186E-05	14	0.9913	0.75043	298.16	1500
C19H38	n-Tetradecilciclohexano	-69.2870	-8.194E-02	3.788E-05	14	0.9896	0.92439	298.16	1500
C19H38	n-Tridecilciclohexano	-76.0217	-7.910E-02	3.825E-05	14	0.9849	0.97753	298.16	1500
C19H38	1-Nonadeceno	-55.0805	-7.636E-02	3.468E-05	14	0.9909	0.83353	298.16	1500
C19H40	n-Nonadecano	-83.9394	-8.109E-02	3.698E-05	14	0.9905	0.89601	298.16	1500
C20H34	n-Tetradecilbenceno	-35.4267	-6.925E-02	3.140E-05	14	0.9909	0.76161	298.16	1500
C20H38	1-Eicoseno	-21.0425	-7.406E-02	3.370E-05	14	0.9911	0.79617	298.16	1500
C20H40	n-Pentadecilciclohexano	-73.2462	-8.588E-02	3.973E-05	14	0.9895	0.96953	298.16	1500
C20H40	n-Tetradecilciclohexano	-79.9814	-8.304E-02	4.010E-05	14	0.9850	1.02304	298.16	1500
C20H40	1-Eicoseno	-59.0408	-8.029E-02	3.652E-05	14	0.9908	0.87930	298.16	1500
C20H42	n-Eicosano	-87.9004	-8.503E-02	3.882E-05	14	0.9904	0.94228	298.16	1500
C21H36	n-Pentadecilbenceno	-39.3869	-7.318E-02	3.324E-05	14	0.9907	0.80736	298.16	1500
C21H42	n-Hexadecilciclohexano	-77.2055	-8.981E-02	4.157E-05	14	0.9895	1.01466	298.16	1500
C21H42	n-Pentadecilciclohexano	-83.9411	-8.697E-02	4.194E-05	14	0.9852	1.06855	298.16	1500
C22H38	n-Hexadecilbenceno	-43.3472	-7.711E-02	3.509E-05	14	0.9906	0.85311	298.16	1500

Formula	Nombre	A	B	C	n	R ²	Sy	Tmin	Tmax
C22H44	n-Hexadecilciclohexano	-87.9007	-9.090E-02	4.379E-05	14	0.9853	1.11407	298.16	1500
C2H2	Acetileno	54.5181	-8.742E-04	-3.081E-07	14	0.9971	0.03367	298.16	1500
C3H4	Propadieno	47.7423	-6.927E-03	2.400E-06	14	0.9990	0.03994	298.16	1500
C3H4	Metilacetileno	46.1644	-6.897E-03	2.263E-06	14	0.9996	0.02773	298.16	1500
C4H10	n-Butano	-24.5716	-2.214E-02	9.325E-06	14	0.9949	0.21119	298.16	1500
C4H10	2-Metilpropano	-25.5435	-2.586E-02	1.225E-05	14	0.9996	0.07141	200	1500
C4H6	1,2-Butadieno	41.7837	-1.170E-02	4.490E-06	14	0.9980	0.08259	298.16	1500
C4H6	1-Butino	42.4158	-1.129E-02	4.222E-06	14	0.9986	0.06993	298.16	1500
C4H6	2-Butino	38.3718	-1.298E-02	4.767E-06	14	0.9988	0.07601	298.16	1500
C4H8	cis-2-Buteno	3.3485	-1.863E-02	7.745E-06	14	0.9970	0.16094	298.16	1500
C4H8	trans-2-Buteno	1.8183	-1.771E-02	7.067E-06	14	0.9953	0.17976	298.16	1500
C4H8	Isobutileno	0.3192	-1.706E-02	6.861E-06	14	0.9971	0.13280	298.16	1500
C5H10	Ciclopentano	-11.6086	2.752E-02	1.204E-05	14	0.9928	0.29566	298.16	1500
C5H10	1-Penteno	0.4054	-2.135E-02	8.880E-06	14	0.9958	0.18961	298.16	1500
C5H10	cis-2-Penteno	-0.8900	-2.299E-02	9.423E-06	14	0.9959	0.20795	298.16	1500
C5H10	trans-2-Penteno	-2.0151	-2.193E-02	8.959E-06	14	0.9962	0.18994	298.16	1500
C5H10	2-Metil-1-buteno	-3.4722	-2.060E-02	8.625E-06	14	0.9958	0.17957	298.16	1500
C5H10	2-Metil-2-buteno	-4.3463	-2.288E-02	9.290E-06	14	0.9966	0.19085	298.16	1500
C5H10	3-Metil-1-buteno	-2.1707	-1.879E-02	7.935E-06	14	0.9956	0.16460	298.16	1500
C5H12	n-Pentano	-28.4583	-2.607E-02	1.117E-05	14	0.9942	0.25712	298.16	1500
C5H12	2-Metilbutano	-29.9202	-2.734E-02	1.205E-05	14	0.9951	0.27503	200	1500
C5H12	2,2-Dimetilpropano	-33.1001	-2.573E-02	1.160E-05	18	0.9926	0.30323	200	1500
C5H8	1,2-Pentadieno	38.4698	-1.439E-02	5.931E-06	14	0.9964	0.12025	298.16	1500
C5H8	cis-1,3-Pentadieno	22.8107	-1.624E-02	6.558E-06	14	0.9953	0.16157	298.16	1500
C5H8	trans-1,3-Pentadieno	22.1999	-1.422E-02	5.783E-06	14	0.9944	0.15134	298.16	1500
C5H8	1,4-Pentadieno	28.9397	1.462E-02	6.014E-06	14	0.9968	0.11576	298.16	1500
C5H8	2,3-Pentadieno	37.3739	-1.666E-02	6.711E-06	14	0.9964	0.14566	298.16	1500
C5H8	3-Metil-1,2-butadieno	34.8711	-1.517E-02	6.158E-06	14	0.9967	0.12406	298.16	1500
C5H8	Ciclopenteno	13.4461	-2.210E-02	9.213E-06	14	0.9945	0.22625	298.16	1500
C5H8	1-Pentino	38.3755	-1.512E-02	6.064E-06	14	0.9974	0.11313	298.16	1500
C5H8	2-Pentino	35.2994	-1.741E-02	6.748E-06	14	0.9981	0.11721	298.16	1500
C5H8	3-Metil-1-butino	36.3481	-1.470E-02	5.914E-06	14	0.9967	0.12290	298.16	1500
C6H10	Ciclohexeno	3.8852	-2.288E-02	1.062E-05	14	0.9867	0.28888	298.16	1500
C6H10	1-Hexeno	34.4005	-1.902E-02	7.893E-06	14	0.9964	0.15679	298.16	1500
C6H12	Metilciclopentano	-17.9898	-3.026E-02	1.347E-05	14	0.9919	0.32568	298.16	1500
C6H12	1-Hexeno	-3.5977	-2.526E-02	1.071E-05	14	0.9949	0.23881	298.16	1500
C6H12	cis-2-Hexeno	-3.4398	-3.181E-02	1.510E-05	9	0.9999	0.03928	298.16	1000
C6H12	trans-2-Hexeno	-5.1560	-2.899E-02	1.333E-05	9	0.9983	0.15174	298.16	1000

Formula	Nomb're	A	B	C	n	R ²	Sy	Tmin	Tmax
C6H12	cis-3-Hexeno	-3.4062	-3.202E-02	1.528E-05	9	0.9998	0.06056	298.16	1000
C6H12	trans-3-Hexeno	-5.1014	-2.929E-02	1.378E-05	9	0.9995	0.08489	298.16	1000
C6H12	2-Metil-1-penteno	-6.2260	-2.879E-02	1.375E-05	9	0.9998	0.04793	298.16	1000
C6H12	2-Metil-2-penteno	-7.0013	-3.121E-02	1.466E-05	9	0.9997	0.06709	298.16	1000
C6H12	3-Metil-1-penteno	-4.3780	-2.762E-02	1.718E-05	9	0.9977	0.09784	298.16	1000
C6H12	cis-3-Metil-2-penteno	-6.3073	-3.134E-02	1.478E-05	9	1.0000	0.02723	298.16	1000
C6H12	trans-3-Metil-2-penteno	-6.3073	-3.134E-02	1.478E-05	9	1.0000	0.02723	298.16	1000
C6H12	4-Metil-1-penteno	-3.6388	-3.139E-02	1.459E-05	9	0.9997	0.07139	298.16	1000
C6H12	cis-4-Metil-2-penteno	-5.9237	-2.875E-02	1.353E-05	9	0.9997	0.05773	298.16	1000
C6H12	trans-4-Metil-2-penteno	-7.3046	-2.729E-02	1.302E-05	9	0.9999	0.03363	298.16	1000
C6H12	2-Etil-1-buteno	-5.5700	-2.895E-02	1.397E-05	9	0.9997	0.06228	298.16	1000
C6H12	2,3-Dimetil-1-buteno	-8.2014	-2.580E-02	1.223E-05	9	0.9998	0.04465	298.16	1000
C6H12	2,3-Dimetil-2-buteno	-7.7448	-3.162E-02	1.479E-05	9	1.0000	0.02773	298.16	1000
C6H12	3,3-Dimetil-1-buteno	-6.4660	-3.046E-02	1.407E-05	9	0.9996	0.07509	298.16	1000
C6H14	n-Hexano	-32.4495	-3.001E-02	1.302E-05	14	0.9936	0.30179	298.16	1500
C6H14	2-Metilpentano	-32.7152	-3.537E-02	1.756E-05	9	0.9998	0.06173	298.16	1000
C6H14	3-Metilpentano	-31.9211	-3.583E-02	1.744E-05	9	0.9998	0.05738	298.16	1000
C6H14	2,2-Dimetilbutano	-35.3700	-3.577E-02	1.800E-05	9	0.9995	0.08666	298.16	1000
C6H14	2,3-Dimetilbutano	-33.2991	-3.636E-02	1.803E-05	9	0.9997	0.07637	298.16	1000
C7H12	1-Hepteno	30.4403	-2.295E-02	9.736E-06	14	0.9955	0.20218	298.16	1500
C7H14	Etilciclopentano	-21.7683	-3.478E-02	1.579E-05	14	0.9912	0.27544	298.16	1500
C7H14	cis-1,2-Dimetilciclopentano	-22.7982	-3.324E-02	1.522E-05	14	0.9886	0.39995	298.16	1500
C7H14	1,1-Dimetilciclopentano	-24.8939	-3.327E-02	1.532E-05	14	0.9878	0.40887	298.16	1500
C7H14	trans-1,2-Dimetilciclopentano	-24.5026	-3.321E-02	1.514E-05	14	0.9892	0.39254	298.16	1500
C7H14	cis-1,3-Dimetilciclopentano	-23.7626	-3.321E-02	1.514E-05	14	0.9892	0.39254	298.16	1500
C7H14	trans-1,3-Dimetilciclopentano	-24.3026	-3.321E-02	1.514E-05	14	0.9892	0.39254	298.16	1500
C7H14	Metilciclohexano	-29.0665	-3.300E-02	1.652E-05	14	0.9778	0.46213	298.16	1500
C7H14	1-Hepteno	-7.5579	-2.919E-02	1.255E-05	14	0.9942	0.28453	298.16	1500
C7H16	n-Heptano	-36.4106	-3.394E-02	1.486E-05	14	0.9931	0.34713	298.16	1500
C7H16	2-Metilhexano	-37.0161	-3.799E-02	1.879E-05	9	0.9930	0.11559	298.16	1000
C7H16	3-Metilhexano	-36.1345	-3.897E-02	1.940E-05	9	0.9994	0.11163	298.16	1000
C7H16	3-Etilpentano	-35.3453	-3.956E-02	1.946E-05	9	0.9994	0.11543	298.16	1000
C7H16	2,2-Dimetilpentano	-39.6020	-3.870E-02	1.988E-05	7	0.9990	0.13436	298.16	1000
C7H16	2,3-Dimetilpentano	-37.9051	-3.858E-02	1.918E-05	9	0.9991	0.13631	298.16	1000
C7H16	2,4-Dimetilpentano	-38.7438	-3.813E-02	1.938E-05	9	0.9989	0.14275	298.16	1000
C7H16	3,3-Dimetilpentano	-38.5280	-3.857E-02	1.996E-05	9	0.9989	0.13599	298.16	1000
C7H16	2,2,3-Trimetilbutano	-40.8770	-3.277E-02	1.472E-05	14	0.9901	0.38236	298.16	1500
CBH10	o-Xileno	10.1754	-2.219E-02	9.113E-06	14	0.9960	0.19547	298.16	1500

Formula	Nombre	A	B	C	n	R ²	Sy	Tmin	Tmax
C8H10	m-Xileno	9.9949	-2.321E-02	9.529E-06	14	0.9954	0.22116	298.16	1500
C8H10	p-Xileno	10.2981	-2.368E-02	9.654E-06	14	0.9958	0.21757	298.16	1500
C8H14	1-Octino	26.4801	-2.689E-02	1.158E-05	14	0.9948	0.24771	298.16	1500
C8H16	n-Propiliclopentano	-25.8379	-3.867E-02	1.760E-05	14	0.9903	0.43440	298.16	1500
C8H16	Etiliciclohexano	-32.3122	-3.637E-02	1.817E-05	14	0.9783	0.50506	298.16	1500
C8H16	1,1-Dimetilciclohexano	-34.2427	-3.773E-02	1.923E-05	14	0.9736	0.55945	298.16	1500
C8H16	cis-1,2-Dimetilciclohexano	-32.2499	-3.712E-02	1.867E-05	14	0.9748	0.55010	298.16	1500
C8H16	trans-1,2-Dimetilciclohexano	-34.4487	-3.592E-02	1.817E-05	14	0.9717	0.55907	298.16	1500
C8H16	cis-1,3-Dimetilciclohexano	-35.3088	-3.702E-02	1.880E-05	14	0.9757	0.52875	298.16	1500
C8H16	trans-1,3-Dimetilciclohexano	-33.2748	-3.705E-02	1.843E-05	14	0.9791	0.50925	298.16	1500
C8H16	cis-1,4-Dimetilciclohexano	-33.3274	-3.699E-02	1.840E-05	14	0.9777	0.52552	298.16	1500
C8H16	trans-1,4-Dimetilciclohexano	-35.4343	3.636E-02	1.843E-05	14	0.9739	0.54120	298.16	1500
C8H16	1-Octeno	-11.5181	-3.312E-02	1.440E-05	14	0.9937	0.33026	298.16	1500
C8H18	n-Octano	-39.6473	-3.937E-02	1.742E-05	14	0.9876	0.53164	298.16	1500
C8H18	2-Metilheptano	-40.8004	-4.238E-02	2.105E-05	9	0.9995	0.10522	298.16	1000
C8H18	3-Metilheptano	-40.0739	-4.259E-02	2.117E-05	9	0.9995	0.11358	298.16	1000
C8H18	4-Metilheptano	-39.8101	-4.310E-02	2.143E-05	9	0.9996	0.10028	298.16	1000
C8H18	3-Etilhexano	-39.0087	-4.513E-02	2.242E-05	9	0.9995	0.11111	298.16	1000
C8H18	2,2-Dimetilhexano	-42.8946	-4.317E-02	2.224E-05	9	0.9992	0.13327	298.16	1000
C8H18	2,3-Dimetilhexano	-41.1367	-3.982E-02	1.991E-05	9	0.9987	0.16122	298.16	1000
C8H18	2,4-Dimetilhexano	-41.6336	-4.294E-02	2.146E-05	9	0.9992	0.13859	298.16	1000
C8H18	2,5-Dimetilhexano	-42.5993	-4.217E-02	2.110E-05	9	0.9992	0.13399	298.16	1000
C8H18	3,3-Dimetilhexano	-41.7493	-4.345E-02	2.251E-05	9	0.9990	0.15033	298.16	1000
C8H18	3,4-Dimetilhexano	-39.7826	-4.416E-02	2.225E-05	9	0.9996	0.09927	298.16	1000
C8H18	2-Metil-3-etilpentano	-39.9211	-4.189E-02	2.093E-05	9	0.9995	0.10812	298.16	1000
C8H18	3-Metil-3-etilpentano	-40.4579	-4.362E-02	2.280E-05	9	0.9997	0.07337	298.16	1000
C8H18	2,2,3-Trimetilpentano	-41.9156	-4.277E-02	2.216E-05	9	0.9992	0.12852	298.16	1000
C8H18	2,2,4-Trimetilpentano	-42.8756	-4.277E-02	2.216E-05	9	0.9992	0.12852	298.16	1000
C8H18	2,3,3-Trimetilpentano	-41.0927	-4.251E-02	2.202E-05	9	0.9994	0.11465	298.16	1000
C8H18	2,3,4-Trimetilpentano	-41.6238	-4.124E-02	2.087E-05	9	0.9991	0.13787	298.16	1000
C8H18	2,2,3,3-Tetrametilbutano	-43.2695	-4.324E-02	2.342E-05	9	0.9989	0.14350	298.16	1000
C9H10	alfa-Metilestireno	32.2025	-2.065E-02	8.470E-06	14	0.9948	0.20816	298.16	1500
C9H10	cis-beta-Metilestireno	34.2025	-2.065E-02	8.470E-06	14	0.9948	0.20816	298.16	1500
C9H10	trans-beta-Metilestireno	33.0824	-2.016E-02	8.389E-06	14	0.9939	0.21576	298.16	1500
C9H10	o-Metilestireno	33.5025	-2.065E-02	8.470E-06	14	0.9948	0.20816	298.16	1500
C9H10	m-Metilestireno	32.8025	-2.065E-02	8.470E-06	14	0.9948	0.20816	298.16	1500
C9H10	p-Metilestireno	32.6025	-2.065E-02	8.470E-06	14	0.9948	0.20816	298.16	1500
C9H12	n-Propilbenceno	8.3690	-2.610E-02	1.119E-05	14	0.9925	0.29185	298.16	1500

Formula	Nombre	A	B	C	n	R ²	Sy	Tmin	Tmax
C9H12	1-Metil-2-etilbenceno	6.6350	-2.519E-02	1.080E-05	14	0.9945	0.24939	298.16	1500
C9H12	1-Metil-3-etilbenceno	6.1666	-2.635E-02	1.109E-05	14	0.9945	0.26074	298.16	1500
C9H12	1-Metil-4-etilbenceno	5.9816	-2.882E-02	1.122E-05	14	0.9949	0.25893	298.16	1500
C9H12	1,2,3-Trimetilbenceno	4.7864	-2.780E-02	1.138E-05	14	0.9965	0.23183	298.16	1500
C9H12	1,2,4-Trimetilbenceno	3.6739	-2.754E-02	1.130E-05	14	0.9963	0.23589	298.16	1500
C9H12	1,3,5-Trimetilbenceno	3.2895	-2.815E-02	1.163E-05	14	0.9956	0.25827	298.16	1500
C9H16	1-Nonino	22.5199	-3.082E-02	1.342E-05	14	0.9942	0.29331	298.16	1500
C9H18	n-Butilciclopentano	-29.6941	-4.261E-05	1.944E-05	14	0.9904	0.47340	298.16	1500
C9H18	n-Propilciclohexano	-36.6359	-3.973E-02	1.977E-05	14	0.9809	0.52050	298.16	1500
C9H18	1-Noneno	-15.4783	-3.705E-02	1.624E-05	14	0.9932	0.37599	298.16	1500
C9H20	n-Nonano	-44.3372	-4.178E-02	1.854E-05	14	0.9924	0.43844	298.16	1500
H	Hidrógeno	51.6699	1.573E-03	-1.556E-07	25	0.9987	0.04272	298.16	5000
N	Nitrógeno	85.4170	1.042E-03	-5.692E-08	25	0.9889	0.11437	298.16	5000
O	Oxígeno	58.9859	1.075E-03	-1.299E-07	25	0.9876	0.07492	298.16	5000
OH	Hidroxilo	10.2016	-3.357E-04	-6.221E-11	23	0.9971	0.02283	298.16	5000

Formula	Nombre	A	B	n	R ²	Sy	Tmin	Tmax
C15H30	n-Derilciclohexano	-82.7755	3.5799E-01	14	0.9999	1.67430	298.16	1500
C15H30	n-Nonilciclohexano	-87.3485	3.6419E-01	14	0.9999	1.34842	298.16	1500
C15H30	1-Pentadeceno	-66.1390	3.4465E-01	14	0.9999	1.43870	298.16	1500
C15H32	n-Pentadecano	-97.3286	3.7764E-01	14	0.9999	1.64944	298.16	1500
C16H26	n-Decilbenceno	-43.6836	2.9513E-01	14	0.9999	1.37135	298.16	1500
C16H30	1-Hexadeceno	-31.3859	3.3929E-01	14	0.9999	1.48421	298.16	1500
C16H32	n-Undecilciclohexano	-88.4563	3.8327E-01	14	0.9999	1.76433	298.16	1500
C16H32	n-Decilciclohexano	-93.0293	3.8947E-01	14	0.9999	1.43869	298.16	1500
C16H32	1-Hexadeceno	-71.8198	3.6993E-01	14	0.9999	1.52910	298.16	1500
C16H34	n-Hexadecano	-103.0095	4.0292E-01	14	0.9999	1.73978	298.16	1500
C17H28	n-Undecilbenceno	-49.3644	3.2041E-01	14	0.9999	1.46165	298.16	1500
C17H32	1-Heptadeceno	-37.0467	3.6458E-01	14	0.9999	1.57453	298.16	1500
C17H34	n-Dodecilciclohexano	-94.1371	4.0855E-01	14	0.9999	1.85440	298.16	1500
C17H34	n-Undecilciclohexano	-98.7101	4.1475E-01	14	0.9999	1.52897	298.16	1500
C17H34	1-Heptadeceno	-77.5007	3.9521E-01	14	0.9999	1.61950	298.16	1500
C17H36	n-Heptadecano	-108.6903	4.2820E-01	14	0.9999	1.83012	298.16	1500
C18H30	n-Dodecilbenceno	-55.0452	3.4569E-01	14	0.9999	1.55196	298.16	1500
C18H34	1-Octadeceno	-42.7275	3.8986E-01	14	0.9999	1.66486	298.16	1500
C18H36	n-Tridecilciclohexano	-99.8180	4.3384E-01	14	0.9999	1.94451	298.16	1500
C18H36	n-Dodecilciclohexano	-104.3910	4.4003E-01	14	0.9999	1.61927	298.16	1500
C18H36	1-Octadeceno	-83.1815	4.2049E-01	14	0.9999	1.70991	298.16	1500
C18H38	n-Octadecano	-114.3711	4.5348E-01	14	0.9999	1.92047	298.16	1500
C19H32	n-Tridecilbenceno	-60.7260	3.7097E-01	14	0.9999	1.64229	298.16	1500
C19H36	1-Nonadeceno	-48.4083	4.1514E-01	14	0.9999	1.75520	298.16	1500
C19H38	n-Tetradecilciclohexano	-105.4988	4.5912E-01	14	0.9999	2.03464	298.16	1500
C19H38	n-Tridecilciclohexano	-110.0718	4.6531E-01	14	0.9999	1.70959	298.16	1500
C19H38	1-Nonadeceno	-88.8623	4.4577E-01	14	0.9999	1.80032	298.16	1500
C19H40	n-Nonadecano	-120.0519	4.7876E-01	14	0.9999	2.01083	298.16	1500
C20H34	n-Tetradecilbenceno	-66.4069	3.9625E-01	14	0.9999	1.73264	298.16	1500
C20H38	1-Eicosano	-53.8822	4.4023E-01	14	0.9999	1.94916	298.16	1500
C20H40	n-Pentadecilciclohexano	-111.1796	4.8440E-01	14	0.9999	2.12480	298.16	1500
C20H40	n-Tetradecilciclohexano	-115.7526	4.9059E-01	14	0.9999	1.79992	298.16	1500
C20H40	1-Eicosano	-94.5431	4.7105E-01	14	0.9999	1.89073	298.16	1500
C20H42	n-Eicosano	-125.7327	5.0404E-01	14	0.9999	2.10120	298.16	1500
C21H36	n-Pentadecilbenceno	-72.0877	4.2153E-01	14	0.9999	1.82299	298.16	1500
C21H42	n-Hexadecilciclohexano	-116.8604	5.0968E-01	14	0.9999	2.21499	298.16	1500
C21H42	n-Pentadecilciclohexano	-121.4334	5.1567E-01	14	0.9999	1.89026	298.16	1500
C22H38	n-Hexadecilbenceno	-77.7685	4.4681E-01	14	0.9999	1.91335	298.16	1500

Regresión de DGf vs. T.

$$\Delta G_f = A + BT$$

DGf [Kcal/mol]; T [°K]

Formula	Nombre	A	B	n	R ²	Sy	Tmin	Tmax
C	Carbono	171.8761	-3.7448E-02	23	1.0000	0.21641	298.16	4000
C10H14	n-Butilbenceno	-9.5947	1.4359E-01	14	0.9998	0.83068	298.16	1500
C10H18	1-Deceno	2.7190	1.8761E-01	14	0.9999	0.94283	298.16	1500
C10H20	n-Pentilciclopentano	-54.3714	2.3159E-01	14	0.9998	1.22507	298.16	1500
C10H20	n-Butilciclohexano	-58.9444	2.3779E-01	14	0.9999	0.89766	298.16	1500
C10H20	1-Deceno	-37.7349	2.1825E-01	14	0.9999	0.98685	298.16	1500
C10H22	n-Decano	-68.9245	2.5123E-01	14	0.9999	1.19804	298.16	1500
C11H16	n-Pentilbenceno	-15.2795	1.6873E-01	14	0.9998	0.92028	298.16	1500
C11H20	1-Undeceno	-2.9618	2.1289E-01	14	0.9999	1.03297	298.16	1500
C11H22	n-Hexilciclopentano	-60.0522	2.5687E-01	14	0.9999	1.31475	298.16	1500
C11H22	n-Pentilciclohexano	-64.6252	2.6307E-01	14	0.9999	0.98770	298.16	1500
C11H22	1-Undeceno	-43.4157	2.4353E-01	14	0.9999	1.07720	298.16	1500
C11H24	n-Undecano	-74.6054	2.7652E-01	14	0.9999	1.28827	298.16	1500
C12H18	n-Hexilbenceno	-20.9603	1.9401E-01	14	0.9998	1.01041	298.16	1500
C12H22	1-Dodeceno	-8.6426	2.3817E-01	14	0.9999	1.12315	298.16	1500
C12H24	n-Heptilciclopentano	-65.7331	2.8215E-01	14	0.9999	1.40453	298.16	1500
C12H24	n-Hexilciclohexano	-70.3060	2.8835E-01	14	0.9999	1.07782	298.16	1500
C12H24	1-Dodeceno	-49.0966	2.8881E-01	14	0.9999	1.16756	298.16	1500
C12H26	n-Dodecano	-80.2862	3.0180E-01	14	0.9999	1.37854	298.16	1500
C13H20	n-Heptilbenceno	-28.6411	2.1929E-01	14	0.9999	1.10059	298.16	1500
C13H24	1-Trideceno	-14.3234	2.6345E-01	14	0.9999	1.21338	298.16	1500
C13H26	n-Octilciclopentano	-71.4139	3.0743E-01	14	0.9999	1.49439	298.16	1500
C13H26	n-Heptilciclohexano	-75.9869	3.1363E-01	14	0.9999	1.16798	298.16	1500
C13H26	1-Trideceno	-54.7774	2.9409E-01	14	0.9999	1.25793	298.16	1500
C13H28	n-Tridecano	-85.9670	3.2780E-01	14	0.9999	1.46882	298.16	1500
C14H22	n-Octilbenceno	-32.3219	2.4457E-01	14	0.9999	1.19082	298.16	1500
C14H26	1-Tetradeceno	-20.0042	2.8873E-01	14	0.9999	1.30363	298.16	1500
C14H28	n-Nonilciclopentano	-77.0947	3.3271E-01	14	0.9999	1.58432	298.16	1500
C14H28	n-Octilciclohexano	-81.6677	3.3891E-01	14	0.9999	1.25819	298.16	1500
C14H28	1-Tetradeceno	-60.4582	3.1938E-01	14	0.9999	1.34831	298.16	1500
C14H30	n-Tetradecano	-91.6478	3.5263E-01	14	0.9999	1.55913	298.16	1500
C15H24	n-Nonilbenceno	-38.0028	2.6985E-01	14	0.9999	1.28107	298.16	1500
C15H28	1-Pentadeceno	-25.6851	3.1401E-01	14	0.9999	1.39391	298.16	1500

Formula	Nombre	A	B	n	R ²	Sy	Tmin	Tmax
C22H44	n-Hexadecilciclohexano	-127.1142	5.4115E-01	14	0.9999	1.98061	298.16	1500
C2H2	Acetileno	53.7174	-1.3001E-02	14	0.9995	0.12330	298.16	1500
C3H4	Propadieno	44.2057	1.2533E-02	14	0.9972	0.28075	298.16	1500
C3H4	Metilacetileno	42.5263	1.1624E-02	14	0.9969	0.27547	298.16	1500
C4H10	n-Butano	-34.8892	9.9755E-02	14	0.9998	0.64375	298.16	1500
C4H10	2-Metilpropano	-36.3976	1.0288E-01	17	0.9997	0.71963	250	1500
C4H6	1,2-Butadieno	36.0700	3.5967E-02	14	0.9993	0.40498	298.16	1500
C4H6	1-Butino	36.8433	3.6299E-02	14	0.9993	0.40589	298.16	1500
C4H6	2-Butino	31.9074	3.9150E-02	14	0.9992	0.47881	298.16	1500
C4H8	cis-2-Buteno	-6.1343	6.9887E-02	14	0.9995	0.64999	298.16	1500
C4H8	trans-2-Buteno	-6.6572	6.9673E-02	14	0.9996	0.58540	298.16	1500
C5H10	1-Penteno	-9.2904	9.1803E-02	14	0.9998	0.53412	298.16	1500
C5H10	cis-2-Penteno	-11.7771	9.3288E-02	14	0.9997	0.70259	298.16	1500
C5H10	trans-2-Penteno	-12.0605	9.3522E-02	14	0.9998	0.57219	298.16	1500
C5H10	2-Metil-1-buteno	-13.1167	9.2676E-02	14	0.9998	0.61669	298.16	1500
C5H10	2-Metil-2-buteno	-15.2317	9.5066E-02	14	0.9997	0.72444	298.16	1500
C5H10	3-Metil-1-buteno	-10.9261	9.3592E-02	14	0.9998	0.55978	298.16	1500
C5H12	n-Pentano	-40.5013	1.2507E-01	14	0.9998	0.73999	298.16	1500
C5H12	2-Metilbutano	-41.8655	1.2578E-01	17	0.9998	0.81105	250	1500
C5H12	2,2-Dimetilpropano	-44.2281	1.3365E-01	17	0.9998	0.73265	250	1500
C5H8	1,2-Pentadieno	31.6707	6.0099E-02	14	0.9997	0.43274	298.16	1500
C5H8	cis-1,3-Pentadieno	15.0472	6.3729E-02	14	0.9996	0.52056	298.16	1500
C5H8	trans-1,3-Pentadieno	15.4271	6.3505E-02	14	0.9997	0.43907	298.16	1500
C5H8	1,4-Pentadieno	22.0153	6.0211E-02	14	0.9997	0.45229	298.16	1500
C5H8	2,3-Pentadieno	29.4325	6.3493E-02	14	0.9996	0.53985	298.16	1500
C5H8	3-Metil-1,2-butadieno	27.6777	6.3820E-02	14	0.9997	0.48032	298.16	1500
C5H8	Ciclo-penteno	3.0295	7.5065E-02	14	0.9996	0.66279	298.16	1500
C5H8	1-Pentino	31.1231	6.1209E-02	14	0.9996	0.49384	298.16	1500
C5H8	2-Pentino	26.8441	6.2491E-02	14	0.9995	0.59560	298.16	1500
C5H8	3-Metil-1-butino	29.3078	6.3913E-02	14	0.9997	0.47880	298.16	1500
C6H10	Ciclo-hexeno	-6.2139	1.0203E-01	14	0.9998	0.54032	298.16	1500
C6H10	1-Hexino	25.4423	8.6490E-02	14	0.9997	0.58324	298.16	1500
C6H12	Metilciclo-pentano	-31.6909	1.3056E-01	14	0.9998	0.79586	298.16	1500
C6H12	1-Hexeno	-15.0116	1.1712E-01	14	0.9998	0.62576	298.16	1500
C6H12	cis-2-Hexeno	-15.9914	1.1566E-01	9	0.9996	0.61532	298.16	1000
C6H12	trans-2-Hexeno	-16.6855	1.1637E-01	9	0.9997	0.56676	298.16	1000
C6H12	cis-3-Hexeno	-16.0110	1.1739E-01	9	0.9996	0.62888	298.16	1000
C6H12	trans-3-Hexeno	-16.5309	1.1740E-01	9	0.9997	0.52604	298.16	1000

Formula	Nombre	A	B	n	R*2	Sy	Tmin	Tmax
C6H12	2-Metil-1-penteno	-17.5108	1.1533E-01	9	0.9997	0.55855	298.16	1000
C6H12	2-Metil-2-penteno	-19.2936	1.1739E-01	9	0.9997	0.59190	298.16	1000
C6H12	3-Metil-1-penteno	-13.4106	1.1231E-01	9	0.9999	0.29852	298.16	1000
C6H12	cis-3-Metil-2-penteno	-18.6666	1.1738E-01	9	0.9997	0.59981	298.16	1000
C6H12	trans-3-Metil-2-penteno	-18.6666	1.1656E-01	9	0.9996	0.60821	298.16	1000
C6H12	4-Metil-1-penteno	-15.0934	1.1745E-01	9	0.9997	0.54725	298.16	1000
C6H12	cis-4-Metil-2-penteno	-17.2698	1.1766E-01	9	0.9997	0.56298	298.16	1000
C6H12	trans-4-Metil-2-penteno	-17.9873	1.1801E-01	9	0.9997	0.53929	298.16	1000
C6H12	2-Etil-1-buteno	-16.8826	1.1672E-01	9	0.9997	0.55914	298.16	1000
C6H12	2,3-Dimetil-1-buteno	-18.3399	1.1815E-01	9	0.9998	0.50180	298.16	1000
C6H12	2,3-Dimetil-2-buteno	-20.3815	1.2145E-01	9	0.9996	0.63532	298.16	1000
C6H12	3,3-Dimetil-1-buteno	-17.7612	1.2313E-01	9	0.9998	0.52194	298.16	1000
C6H14	n-Hexano	-46.2180	1.5022E-01	14	0.9998	0.83103	298.16	1500
C6H14	2-Metilpentano	-47.6872	1.5157E-01	14	0.9998	0.79085	298.16	1500
C6H14	3-Metilpentano	-47.2873	1.5229E-01	14	0.9998	0.83679	298.16	1500
C6H14	2,2-Dimetilbutano	-50.3884	1.5681E-01	14	0.9999	0.77024	298.16	1500
C6H14	2,3-Dimetilbutano	-48.7216	1.5563E-01	14	0.9998	0.81835	298.16	1500
C7H12	1-Hepteno	19.7615	1.1177E-01	14	0.9998	0.67292	298.16	1500
C7H14	Etilciclopentano	-37.2796	1.5568E-01	14	0.9998	0.93320	298.16	1500
C7H14	cis-1,2-Dimetilciclopentano	-37.6045	1.5816E-01	14	0.9998	0.82308	298.16	1500
C7H14	1,1-Dimetilciclopentano	-39.6609	1.5979E-01	14	0.9999	0.80073	298.16	1500
C7H14	trans-1,2-Dimetilciclopentano	-39.3170	1.5800E-01	14	0.9998	0.82536	298.16	1500
C7H14	cis-1,3-Dimetilciclopentano	-38.5770	1.5800E-01	14	0.9998	0.82536	298.16	1500
C7H14	trans-1,3-Dimetilciclopentano	-39.1170	1.5800E-01	14	0.9998	0.82536	298.16	1500
C7H14	Metilciclohexano	-42.9337	1.6214E-01	14	0.9999	0.64507	298.16	1500
C7H14	1-Hepteno	-20.6925	1.4241E-01	14	0.9999	0.71597	298.16	1500
C7H16	n-Heptano	-51.8821	1.7539E-01	14	0.9998	0.92758	298.16	1500
C7H16	2-Metilhexano	-51.7385	1.7350E-01	9	0.9998	0.70982	298.16	1000
C7H16	3-Metilhexano	-51.1743	1.7272E-01	9	0.9998	0.70142	298.16	1000
C7H16	3-Etilpentano	-50.7971	1.7613E-01	9	0.9998	0.76121	298.16	1000
C7H16	2,2-Dimetilpentano	-54.4553	1.8014E-01	9	0.9998	0.68666	298.16	1000
C7H16	2,3-Dimetilpentano	-52.9277	1.7531E-01	9	0.9998	0.73925	298.16	1000
C7H16	2,4-Dimetilpentano	-53.7308	1.7978E-01	9	0.9996	0.99579	298.16	1000
C7H16	3,3-Dimetilpentano	-53.2231	1.7805E-01	9	0.9998	0.68755	298.16	1000
C7H16	2,2,3-Trimetilbutano	-55.5730	1.8520E-01	14	0.9999	0.82217	298.16	1000
C8H10	o-Xileno	-0.3168	9.5217E-02	14	0.9997	0.69071	298.16	1500
C8H10	m-Xileno	-0.9701	9.4703E-02	14	0.9997	0.71597	298.16	1500
C8H10	p-Xileno	-0.9454	9.6282E-02	14	0.9997	0.74462	298.16	1500

Formula	Nombre	A	B	n	R ²	Sy	Tmin	Tmax
C8H14	1-Octino	14.0807	1.3705E-01	14	0.9998	0.76278	298.16	1500
C8H16	n-Propilclopentano	-43.1030	1.8101E-01	14	0.9998	1.04151	298.16	1500
C8H16	Etilciclohexano	-47.6335	1.8708E-01	14	0.9999	0.70686	298.16	1500
C8H16	1,1-Dimetilciclohexano	-49.7424	1.9128E-01	14	0.9999	0.67845	298.16	1500
C8H16	cis-1,2-Dimetilciclohexano	-47.7207	1.8909E-01	14	0.9999	0.70738	298.16	1500
C8H16	trans-1,2-Dimetilciclohexano	-49.4054	1.8941E-01	14	0.9999	0.67931	298.16	1500
C8H16	cis-1,3-Dimetilciclohexano	-50.6932	1.8993E-01	14	0.9999	0.69797	298.16	1500
C8H16	trans-1,3-Dimetilciclohexano	-48.7538	1.8856E-01	14	0.9999	0.86749	298.16	1500
C8H16	cis-1,4-Dimetilciclohexano	-48.8756	1.9020E-01	14	0.9999	0.73744	298.16	1500
C8H16	trans-1,4-Dimetilciclohexano	-50.4634	1.9090E-01	14	0.9999	0.67107	298.16	1500
C8H16	1-Octeno	-26.3733	1.6769E-01	14	0.9999	0.80623	298.16	1500
C8H18	n-Octano	-57.5629	2.0067E-01	14	0.9999	1.01768	298.16	1500
C8H18	2-Metilheptano	-57.1153	1.9902E-01	9	0.9998	0.76837	298.16	1000
C8H18	3-Metilheptano	-56.4915	1.9767E-01	9	0.9998	0.77021	298.16	1000
C8H18	4-Metilheptano	-56.4240	1.9980E-01	9	0.9998	0.77458	298.16	1000
C8H18	3-Etilhexano	-56.4473	1.9952E-01	9	0.9998	0.81889	298.16	1000
C8H18	2,2-Dimetilhexano	-59.3225	2.0475E-01	9	0.9998	0.75419	298.16	1000
C8H18	2,3-Dimetilhexano	-56.5061	2.0097E-01	9	0.9998	0.73905	298.16	1000
C8H18	2,4-Dimetilhexano	-58.0798	2.0134E-01	9	0.9998	0.76226	298.16	1000
C8H18	2,5-Dimetilhexano	-58.9166	2.0309E-01	9	0.9998	0.77551	298.16	1000
C8H18	3,3-Dimetilhexano	-58.2556	2.0321E-01	9	0.9998	0.74921	298.16	1000
C8H18	3,4-Dimetilhexano	-56.7091	2.0123E-01	9	0.9998	0.78054	298.16	1000
C8H18	2-Metil-3-etilpentano	-56.0514	2.0224E-01	9	0.9998	0.76357	298.16	1000
C8H18	3-Metil-3-etilpentano	-56.8216	2.0413E-01	9	0.9998	0.73377	298.16	1000
C8H18	2,2,3-Trimetilpentano	-58.1960	2.0608E-01	9	0.9998	0.75350	298.16	1000
C8H18	2,2,4-Trimetilpentano	-59.1381	2.0655E-01	9	0.9998	0.73217	298.16	1000
C8H18	2,3,3-Trimetilpentano	-57.2494	2.0436E-01	9	0.9998	0.74505	298.16	1000
C8H18	2,3,4-Trimetilpentano	-57.5005	2.0518E-01	9	0.9998	0.75965	298.16	1000
C8H18	2,2,3,3-Tetrametilbutano	-59.2899	2.1403E-01	9	0.9999	0.67513	298.16	1000
C9H10	alfa-Metilestireno	22.4127	8.8499E-02	14	0.9997	0.65216	298.16	1500
C9H10	cis-beta-Metilestireno	24.4127	8.8499E-02	14	0.9997	0.65216	298.16	1500
C9H10	trans-beta-Metilestireno	23.6033	8.8846E-02	14	0.9997	0.61405	298.16	1500
C9H10	o-Metilestireno	23.7127	8.8499E-02	14	0.9997	0.65216	298.16	1500
C9H10	m-Metilestireno	23.0119	8.7099E-02	14	0.9997	0.65182	298.16	1500
C9H10	p-Metilestireno	22.8127	8.8499E-02	14	0.9997	0.65216	298.16	1500
C9H12	n-Propilbenceno	-3.6492	1.1823E-01	14	0.9998	0.73698	298.16	1500
C9H12	1-Metil-2-etilbenceno	-5.1338	1.1823E-01	14	0.9998	0.74761	298.16	1500
C9H12	1-Metil-3-etilbenceno	-6.1261	1.1770E-01	14	0.9998	0.77112	298.16	1500

Formula	Nombre	A	B	n	R ²	Sy	Tmin	Tmax
C9H12	1-Metil-4-etilbenceno	-8.5688	1.1927E-01	14	0.9998	0.79883	298.16	1500
C9H12	1,2,3-Trimetilbenceno	-8.4075	1.2199E-01	14	0.9997	0.85591	298.16	1500
C9H12	1,2,4-Trimetilbenceno	-9.3889	1.2061E-01	14	0.9997	0.84642	298.16	1500
C9H12	1,3,5-Trimetilbenceno	-10.0270	1.2357E-01	14	0.9997	0.85080	298.16	1500
C9H16	1-Nonano	8.3999	1.6233E-01	14	0.9998	0.85276	298.16	1500
C9H18	n-Butilciclopentano	-48.6906	2.0631E-01	14	0.9998	1.13551	298.16	1500
C9H18	n-Propilciclohexano	-53.4040	2.1247E-01	14	0.9999	0.79374	298.16	1500
C9H18	1-Noneno	-32.0541	1.9297E-01	14	0.9999	0.89653	298.16	1500
C9H20	n-Nonano	-63.2347	2.2595E-01	14	0.9999	1.10784	298.16	1500
H	Hidrógeno	53.6623	-1.4287E-02	25	0.9995	0.43384	298.16	5000
N	Nitrógeno	86.9392	-1.5946E-02	25	0.9997	0.38373	298.16	5000
O	Oxígeno	-73.8717	3.1350E-01	14	0.9995	3.44669	298.16	5000
OH	Hidroxilo	9.6603	-3.2767E-03	24	0.9989	0.15346	298.16	5000

Regresión de Cp vs. T.

$$C_p = A + BT + CT^2 + DT^3$$

Cp [J/mol°K]; T [°K]

Formula	Nombre	A	B	C	D	R ²	n	Sy	Tmin	Tmax
C	Carbono	20.7366	1.8340E-04	-1.2600E-07	4.7420E-11	0.9608	25	0.19346	298.16	5000
C10H18	1-Decino	7.52377	8.4530E-01	-4.8420E-04	1.0820E-07	0.9999	14	1.04407	298.16	1500
C10H20	n-Pentiliclopentano	-53.0196	1.0133E+00	-5.7416E-04	1.2582E-07	1.0000	14	1.03682	298.16	1500
C11H16	n-Pentilbenceno	-34.5601	9.3760E-01	-5.6380E-04	1.2970E-07	1.0000	14	0.77298	298.16	1500
C11H20	1-Undecino	10.6581	9.2290E-01	-5.1740E-04	1.1280E-07	1.0000	14	0.60929	298.16	1500
C11H22	n-Pentiliciclohexano	-63.3647	1.1740E+00	-6.8240E-04	1.5110E-07	1.0000	14	1.03526	298.16	1500
C12H18	n-Hexilbenceno	-35.4951	1.0330E+00	-6.1820E-04	1.4170E-07	1.0000	14	0.77584	298.16	1500
C12H22	1-Dodecino	9.9430	1.0170E+00	-5.7040E-04	1.2440E-07	1.0000	14	0.63418	298.16	1500
C12H24	n-Hexiliciclohexano	-64.2539	1.2690E+00	-7.3740E-04	1.6360E-07	1.0000	14	1.09853	298.16	1500
C13H20	n-Heptilbenceno	-35.7894	1.1250E+00	-6.6890E-04	1.5240E-07	1.0000	14	0.92260	298.16	1500
C13H24	1-Tridecino	23.7050	1.0510E+00	-5.5530E-04	1.1260E-07	0.9994	14	4.24061	298.16	1500
C13H26	n-Heptiliciclohexano	-64.8218	1.3630E+00	-7.9010E-04	1.7510E-07	1.0000	14	1.16383	298.16	1500
C14H22	n-Octilbenceno	-36.8982	1.2210E+00	-7.2510E-04	1.6530E-07	1.0000	14	0.98298	298.16	1500
C14H26	1-Tetradecino	8.4794	1.2050E+00	-6.7750E-04	1.4790E-07	1.0000	14	0.80223	298.16	1500
C14H28	n-Octiliciclohexano	-58.7353	1.4350E+00	-8.3550E-04	1.8970E-07	0.9988	14	7.68607	298.16	1500
C15H24	n-Nonilbenceno	-37.6133	1.3150E+00	-7.7820E-04	1.7680E-07	1.0000	14	0.99992	298.16	1500
C15H28	1-Pentadecino	8.0206	1.2980E+00	-7.2870E-04	1.5870E-07	1.0000	14	0.85490	298.16	1500
C15H30	n-Noniliciclohexano	-66.2675	1.5500E+00	-8.9550E-04	1.9780E-07	1.0000	14	1.31334	298.16	1500
C16H26	n-Decilbenceno	-38.0155	1.4070E+00	-8.2960E-04	1.8770E-07	1.0000	14	1.14548	298.16	1500
C16H30	1-Hexadecino	7.3239	1.3920E+00	-7.8180E-04	1.7020E-07	1.0000	14	0.95170	298.16	1500
C16H32	n-Undeciliclopentano	-57.0111	1.5761E+00	-8.9220E-04	1.9521E-07	1.0000	14	1.24669	298.16	1500
C17H28	n-Undecilbenceno	-38.8239	1.5020E+00	-8.8350E-04	1.9970E-07	1.0000	14	1.18778	298.16	1500
C17H32	1-Heptadecino	6.4596	1.4860E+00	-8.3590E-04	1.8220E-07	1.0000	14	0.98284	298.16	1500
C17H34	n-Undeciliciclohexano	-67.7583	1.7390E+00	-1.0030E-03	2.2160E-07	1.0000	14	1.40402	298.16	1500
C17H34	1-Heptadeceno	-8.8986	1.5620E+00	-8.7450E-04	1.8960E-07	1.0000	14	1.05952	298.16	1500
C18H30	n-Dodecilbenceno	-39.4262	1.5950E+00	-9.3610E-04	2.1110E-07	1.0000	14	1.24895	298.16	1500
C18H34	1-Octadecino	5.4696	1.5820E+00	-8.9110E-04	1.9460E-07	1.0000	14	1.00491	298.16	1500
C18H36	n-Dodeciliciclohexano	-68.3847	1.8330E+00	-1.0560E-03	2.3280E-07	1.0000	14	1.41343	298.16	1500
C19H32	n-Tridecilbenceno	-40.9643	1.6930E+00	-9.9490E-04	2.2490E-07	1.0000	14	1.24203	298.16	1500
C19H36	1-Nonadecino	4.7475	1.6760E+00	-9.4490E-04	2.0660E-07	1.0000	14	1.10257	298.16	1500
C19H38	n-Tetradeciliclopentano	-59.3997	1.8593E+00	-1.0536E-03	2.3086E-07	1.0000	14	1.30338	298.16	1500
C19H38	n-Trideciliciclohexano	-69.3011	1.9280E+00	-1.1100E-03	2.4520E-07	1.0000	14	1.56655	298.16	1500
C19H38	1-Nonadeceno	-10.5037	1.7510E+00	-9.8250E-04	2.1350E-07	1.0000	14	1.1928	298.16	1500

Formula	Nombre	A	B	C	D	R ²	n	Sy	Tmin	Tmax
C20H34	n-Tetradecilbenceno	-41.0325	1.7840E+00	-1.0440E-03	2.3480E-07	1.0000	14	1.37859	298.16	1500
C20H38	1-Eicosino	4.5967	1.7670E+00	-9.9420E-04	2.1670E-07	1.0000	14	1.23771	298.16	1500
C20H40	n-Pentadecilciclohexano	-60.1107	1.9534E+00	-1.1069E-03	2.4245E-07	1.0000	14	1.37371	298.16	1500
C20H40	n-Tetradecilciclohexano	-70.2175	2.0230E+00	-1.1650E-03	2.5760E-07	1.0000	14	1.71013	298.16	1500
C20H40	1-Eicoseno	-11.1721	1.8440E+00	-1.0330E-03	2.2410E-07	1.0000	14	1.35984	298.16	1500
C21H36	n-Pentadecilbenceno	-42.0073	1.8790E+00	-1.0990E-03	2.4710E-07	1.0000	14	1.39272	298.16	1500
C21H42	n-Hexadecilciclohexano	-60.8328	2.0476E+00	-1.1607E-03	2.5444E-07	1.0000	14	1.45029	298.16	1500
C21H42	n-Pentadecilciclohexano	-70.5878	2.1150E+00	-1.2160E-03	2.6800E-07	1.0000	14	1.72104	298.16	1500
C22H38	n-Hexadecilbenceno	-42.5258	1.9720E+00	-1.1510E-03	2.5840E-07	1.0000	14	1.48536	298.16	1500
C22H44	n-Hexadecilciclohexano	-71.2875	2.2090E+00	-1.2690E-03	2.7960E-06	1.0000	14	1.69434	298.16	1500
C5H8	cis-1,3-Pentadieno	-15.2799	4.4780E-01	-2.8210E-04	6.8630E-08	0.9999	14	0.70118	298.16	1500
C5H8	2,3-Pentadieno	12.7552	3.4600E-01	-1.7440E-04	3.3580E-08	1.0000	14	0.13799	298.16	1500
C5H8	2-Pentino	11.0625	3.4150E-01	-1.6950E-04	3.2290E-08	1.0000	14	0.20147	298.16	1500
C5H8	3-Metil-1-butino	9.6750	3.8110E-01	-2.1210E-04	5.0300E-08	1.0000	14	0.37632	298.16	1500
C6H10	1-Metilciclohexano	-37.4870	5.4970E-01	-3.0940E-04	6.6640E-08	1.0000	14	0.49015	298.16	1500
C6H10	3-Metilciclohexano	-43.0872	-5.7280E-01	-3.3370E-04	7.4460E-08	1.0000	14	0.50964	298.16	1500
C6H10	4-Metilciclohexano	-42.2535	5.6900E-01	-3.2980E-04	7.3130E-08	1.0000	14	0.42060	298.16	1500
C6H10	1-Hexino	14.0291	4.5360E-01	-2.5170E-04	5.4810E-08	1.0000	14	0.33867	298.16	1500
C6H12	2-Metil-1-penteno	1.6789	5.3280E-01	-3.0000E-04	6.6110E-08	1.0000	9	0.13324	298.16	1000
C6H12	3-Metil-1-penteno	-14.0693	6.4550E-01	-4.0770E-04	1.0830E-07	1.0000	9	0.08279	298.16	1000
C6H12	4-Metil-1-penteno	-13.3970	5.6090E-01	-3.3030E-04	7.8590E-08	1.0000	9	0.24334	298.16	1000
C6H12	2-Etil-1-buteno	-13.4787	6.0320E-01	-4.0320E-04	1.1440E-07	1.0000	9	0.15627	298.16	1000
C7H12	1-Heptino	13.8535	5.4500E-01	-3.0160E-04	6.5060E-08	1.0000	14	0.33104	298.16	1500
C7H12	1,2-Dimetilciclohexano	-30.9648	6.2590E-01	-3.4760E-04	7.4180E-08	1.0000	14	0.53751	298.16	1500
C7H12	1,3-Dimetilciclohexano	-37.0749	6.5080E-01	-3.7370E-04	8.2410E-08	1.0000	14	0.47518	298.16	1500
C7H12	1,4-Dimetilciclohexano	-36.8422	6.4860E-01	-3.7140E-04	8.1640E-08	1.0000	14	0.49467	298.16	1500
C7H12	1,5-Dimetilciclohexano	-36.8659	6.5020E-01	-3.7410E-04	8.2850E-08	1.0000	14	0.52441	298.16	1500
C7H12	3,3-Dimetilciclohexano	-51.7257	6.9930E-01	-4.1040E-04	9.0950E-08	1.0000	14	0.61006	298.16	1500
C7H12	cis-3,4-Dimetilciclohexano	-46.3403	6.8790E-01	-4.1080E-04	9.3820E-08	1.0000	14	0.58484	298.16	1500
C7H12	trans-3,4-Dimetilciclohexano	-41.5559	6.7040E-01	-3.9480E-04	8.9150E-08	1.0000	14	0.63145	298.16	1500
C7H12	cis-3,5-Dimetilciclohexano	-41.5559	6.7040E-01	-3.9480E-04	8.9150E-08	1.0000	14	0.63145	298.16	1500
C7H12	trans-3,5-Dimetilciclohexano	-41.5559	6.7040E-01	-3.9480E-04	8.9150E-08	1.0000	14	0.63145	298.16	1500
C7H14	cis-1,3-Dimetilciclohexano	-54.1076	7.5710E-01	-4.4570E-04	1.0090E-07	1.0000	14	0.67341	298.16	1500
C7H14	trans-1,3-Dimetilciclohexano	-54.1076	7.5710E-01	-4.4570E-04	1.0090E-07	1.0000	14	0.67341	298.16	1500
C8H14	1-Octino	13.0997	6.3930E-01	-3.5530E-04	7.6910E-08	1.0000	14	0.44421	298.16	1500
C8H18	2,2,3,3-Tetrametilbutano	-44.9970	9.8100E-01	-6.7270E-04	1.8290E-07	1.0000	9	0.42929	298.16	1000
C9H10	cis-beta-Metilestireno	-17.3123	6.5550E-01	-3.9400E-04	9.0270E-07	1.0000	14	0.56779	298.16	1500
C9H10	trans-beta-Metilestireno	-19.8408	6.7270E-01	-4.1430E-04	9.7130E-08	0.9999	14	0.75735	298.16	1500

Formule	Nombre	A	B	C	D	R ²	n	Sy	Tmin	Tmax
C9H10	o-Metilestireno	-17.3123	6.5550E-01	-3.9400E-04	9.0270E-07	1.0000	14	0.56779	298.16	1500
C9H10	m-Metilestireno	-17.3123	6.5550E-01	-3.9400E-04	9.0270E-07	1.0000	14	0.56779	298.16	1500
C9H10	p-Metilestireno	-17.3123	6.5550E-01	-3.9400E-04	9.0270E-07	1.0000	14	0.56779	298.16	1500
C9H16	1-Nonino	12.1247	7.3450E-01	-4.1000E-04	8.9110E-08	1.0000	14	0.41547	298.16	1500
C9H18	n-Butilciclopentano	-52.0294	9.1801E-01	-5.1952E-04	1.1377E-07	0.9999	14	1.04090	298.16	1500
H	Hidrógeno	4.9680	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	1.0000	25	0.00000	298.16	5000
N	Nitrógeno	4.9680	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	1.0000	25	0.00000	298.16	5000
O	Oxígeno	22.1086	-1.6430E-03	5.7670E-07	-5.2540E-11	0.8894	25	0.12908	298.16	5000
OH	Hidroxilo	28.4182	2.3000E-03	5.4500E-07	-1.1680E-10	0.9840	24	0.46310	298.16	5000

Regresión de Ts vs. T.

$$\sigma = \sigma_1 \left[\frac{[T_c - T]}{[T_c - T_1]} \right]^z$$

Ts [dina/cm]; T [°K]

Formula	Nombre	Tens 1	T1	Tc	z	n	R ²	Sy	Tmin	Tmax
C10H22	n-Decano	28.02	273.16	619.16	1.2594	19	0.9990	0.00790	253.16	423.16
C11H24	n-Undecano	26.82	273.16	640.16	1.2899	19	0.9991	0.00708	253.16	423.16
C12H26	n-Dodecano	25.44	293.16	659.16	1.2709	17	0.9991	0.00602	273.16	423.16
C13H28	n-Tridecano	26.1	293.16	677.16	1.2645	17	0.9991	0.00575	273.16	423.16
C14H30	n-Tetradecano	26.2	298.16	695.16	1.2728	16	0.9994	0.00441	283.16	423.16
C15H32	n-Pentadecano	26.7	298.16	710.16	1.2671	16	0.9989	0.00560	283.16	423.16
C16H34	n-Hexadecano	26.7	303.16	725.16	1.2956	15	0.9995	0.00345	293.16	423.16
C17H36	n-Heptadecano	27.1	303.16	735.16	1.3032	10	0.9973	0.00500	293.16	373.16
C18H38	n-Octadecano	27.5	303.16	750.16	1.2806	10	0.9979	0.00422	293.16	373.16
C19H40	n-Nonadecano	27.8	303.16	760.16	1.2877	10	0.9975	0.00446	293.16	373.16
C20H42	n-Eicosano	28.1	303.16	775.16	1.2471	10	0.9967	0.00494	293.16	373.16
C4H10	n-Butano	23.4	173.16	425.17	1.1945	8	1.0000	0.00084	173.16	273.16
C4H10	2-Metilpropano	22.6	193.16	408.14	1.2007	10	1.0000	0.00074	173.16	263.16
C5H12	n-Pentano	17.1	273.16	469.78	1.2079	8	0.9998	0.00195	253.16	313.16
C5H12	2-Metilbutano	17.17	273.16	460.89	1.2023	7	1.0000	0.00025	253.16	303.16
C6H14	n-Hexano	24.7	233.16	507.86	1.3346	12	0.9934	0.01645	233.16	333.16
C6H14	2-Metilpentano	17.38	293.16	498.06	1.1926	8	1.0000	0.00073	273.16	333.16
C6H14	3-Metilpentano	18.12	293.16	504.36	1.2427	8	0.9997	0.00244	273.16	333.16
C6H14	2,2-Dimetilbutano	16.3	293.16	489.36	1.1742	6	0.9996	0.00201	273.16	313.16
C6H14	2,3-Dimetilbutano	17.37	293.16	500.26	1.2014	7	1.0000	0.00048	273.16	323.16
C7H16	n-Heptano	24.3	253.16	540.17	1.2027	14	1.0000	0.00096	243.16	363.16
C7H16	2-Metilhexano	23.29	263.16	531.06	1.1546	14	1.0000	0.00097	243.16	363.16
C7H16	3-Metilhexano	22.2	263.16	535.56	1.2215	14	1.0000	0.00133	243.16	363.16
C7H16	3-Etilpentano	22.8	263.16	540.76	1.2320	14	1.0000	0.00145	243.16	363.16
C7H16	2,2-Dimetilpentano	20.9	263.16	520.86	1.2000	14	1.0000	0.00054	243.16	343.16
C7H16	2,3-Dimetilpentano	22.9	263.16	537.76	1.2011	13	0.9999	0.00133	243.16	353.16
C7H16	2,4-Dimetilpentano	21	263.16	520.26	1.2027	13	0.9999	0.00172	243.16	353.16
C7H16	3,3-Dimetilpentano	22.5	263.16	536.16	1.1982	13	1.0000	0.00128	243.16	353.16
C7H16	2,2,3-Trimetilbutano	20.66	273.16	531.46	1.2092	12	1.0000	0.00118	253.16	353.16
C8H18	n-Octano	26.52	243.16	599.36	1.2108	18	0.9998	0.00364	233.16	393.16
C8H18	2-Metilheptano	20.6	293.16	561.16	1.2019	12	0.9999	0.00167	273.16	373.16
C8H18	3-Metilheptano	21.17	293.16	565.16	1.2805	12	0.9906	0.01772	273.16	373.16

Formula	Nombre	Tens 1	T1	Tc	z	n	R^2	Sy	Tmin	Tmax
C8H18	4-Metilheptano	21	293.16	563.16	1.2035	12	0.9999	0.00134	273.16	373.16
C8H18	3-Etilhexano	21.51	293.16	567.16	1.2007	12	1.0000	0.00041	273.16	373.16
C8H18	2,2-Dimetilhexano	19.6	293.16	562.16	1.1981	12	0.9999	0.00130	273.16	373.16
C8H18	2,3-Dimetilhexano	20.99	293.16	568.16	1.2027	12	0.9999	0.00122	273.16	373.16
C8H18	2,4-Dimetilhexano	20.05	293.16	555.16	1.2020	12	0.9999	0.00165	273.16	373.16
C8H18	2,5-Dimetilhexano	19.73	293.16	552.16	1.1967	12	1.0000	0.00123	273.16	373.16
C8H18	3,3-Dimetilhexano	20.63	293.16	564.16	1.1949	12	1.0000	0.00117	273.16	373.16
C8H18	3,4-Dimetilhexano	21.64	293.16	571.16	1.1969	12	1.0000	0.00085	273.16	373.16
C8H18	3-Metil-3-etilpentano	21.99	293.16	578.16	1.1989	12	0.9999	0.00122	273.16	373.16
C8H18	2,2,3-Trimetilpentano	20.67	293.16	567.16	1.1967	12	0.9999	0.00124	273.16	373.16
C8H18	2,2,4-Trimetilpentano	18.77	293.16	544.31	1.1944	11	1.0000	0.00093	273.16	363.16
C8H18	2,3,3-Trimetilpentano	21.56	293.16	576.16	1.1933	12	1.0000	0.00102	273.16	373.16
C8H18	2,3,4-Trimetilpentano	21.14	293.16	568.16	1.1991	12	1.0000	0.00114	273.16	373.16
C9H20	n-Nonano	27.2	253.16	595.16	1.2384	20	0.9991	0.00852	243.16	423.16

Regresión de Viscosidad de líquidos vs. T.

$$\ln(\mu) = A + \frac{B}{T} + CT + DT^2$$

$$\ln(\mu) = A + \frac{B}{T}$$

Visc [cP]; T [°K]

Formula	Nombre	A	B	C	D	n	R ²	Tmin	Tmax
Bi	Bismuto	-52.4724	1.1841E+04	7.8782E-02	-3.9186E-05	5	0.9780	558.16	873.16
C10H14	n-Butilbenceno	-12.2300	2.2330E+03	2.1417E-02	-1.8923E-05	36	0.9999	248.16	423.16
C10H20	n-Pentilciclopentano	11.4299	-2.4343E+02	-5.2741E-02	5.8272E-05	27	0.9998	253.16	383.16
C10H20	n-Butilciclohexano	4.2045	7.1324E+02	-3.4567E-02	4.3837E-05	27	0.9999	253.16	383.16
C10H20	1-Deceno	-15.8259	2.5491E+03	3.2331E-02	-2.9752E-05	24	0.9998	273.16	388.16
C10H22	n-Decano	-15.0499	2.5120E+03	2.9989E-02	-2.7734E-05	42	1.0000	243.16	448.16
C11H16	n-Pentilbenceno	-41.6462	5.6879E+03	1.0615E-01	-9.9878E-05	36	0.9995	248.16	423.16
C11H22	n-Hexilciclopentano	12.8989	-3.0864E+02	-5.7381E-02	6.2594E-05	27	0.9993	253.16	383.16
C11H22	n-Pentilciclohexano	-17.3968	3.1104E+03	3.3103E-02	-2.7697E-05	25	0.9998	263.16	383.16
C11H22	1-Undeceno	-17.2402	2.8319E+03	3.5308E-02	-3.1787E-05	24	0.9999	273.16	388.16
C11H24	n-Undecano	-15.9109	2.7470E+03	3.0977E-02	-2.7514E-05	45	1.0000	248.16	488.16
C12H18	n-Hexilbenceno	-44.4221	6.1173E+03	1.1319E-01	-1.0596E-04	35	0.9996	253.16	423.16
C12H24	n-Heptilciclopentano	17.3127	-7.2827E+02	-7.0369E-02	7.4931E-05	27	0.9999	253.16	383.16
C12H24	n-Hexilciclohexano	-15.6641	3.0257E+03	2.7450E-02	-2.2255E-05	25	0.9998	263.16	383.16
C12H24	1-Dodeceno	-24.9743	3.7612E+03	5.8636E-02	-5.5536E-05	24	0.9999	273.16	388.16
C12H26	n-Dodeceno	-15.6843	2.8391E+03	2.9232E-02	-2.5075E-05	46	1.0000	263.16	488.16
C13H20	n-Heptilbenceno	-46.0436	6.3980E+03	1.1720E-01	-1.0942E-04	35	0.9996	253.16	423.16
C13H26	n-Octilciclopentano	21.9563	-1.1440E+03	-8.4926E-02	-8.9655E-05	27	0.9999	253.16	383.16
C13H26	n-Heptilciclohexano	-10.2729	2.5781E+03	9.5217E-03	-3.2547E-06	25	0.9994	263.16	383.16
C13H26	1-Trideceno	-22.5066	3.6225E+03	4.9515E-02	-4.5014E-05	24	0.9999	273.16	388.16
C13H28	n-Trideceno	-16.2812	3.0226E+03	2.9826E-02	-2.4843E-05	49	1.0000	268.16	508.16
C14H22	n-Octilbenceno	-47.8808	6.7157E+03	1.2153E-01	-1.1295E-04	35	0.9997	253.16	423.16
C14H28	n-Nonilciclopentano	24.3720	-1.3295E+03	-9.2484E-02	9.7118E-05	27	0.9999	253.16	383.16
C14H28	n-Octilciclohexano	-10.8851	2.6964E+03	1.2070E-02	-7.0045E-06	25	0.9998	263.16	383.16
C14H28	1-Tetradecano	-27.3499	4.2656E+03	6.2952E-02	-5.7567E-05	24	0.9999	273.16	388.16
C14H30	n-Tetradecano	-11.9454	2.5882E+03	1.7579E-02	-1.3780E-05	51	0.9969	278.16	528.16
C15H24	n-Nonilbenceno	-51.0085	7.1725E+03	1.2971E-01	-1.2027E-04	35	0.9997	253.16	423.16
C15H30	n-Decilciclopentano	28.3829	-1.6788E+03	-1.0531E-01	1.1034E-04	27	0.9999	253.16	383.16

Formula	Nombre	A	B	C	D	n	R ²	Tmin	Tmax
C15H30	n-Nonilciclohexano	-12.7381	2.9969E+03	1.6981E-02	-1.1719E-05	25	0.9999	263.16	383.16
C15H30	1-Pentadeceno	-32.1254	4.8761E+03	7.6890E-02	-7.1393E-05	24	0.9999	273.16	388.16
C15H32	n-Pentadecano	-16.1857	3.2077E+03	2.7837E-02	-2.1908E-05	53	1.0000	283.16	543.16
C16H26	n-Decilbenceno	-52.6735	7.4808E+03	1.3310E-01	-1.2249E-04	35	0.9997	253.16	423.16
C16H32	n-Undecilciclopentano	29.9614	-1.7801E+03	-1.1023E-01	1.1501E-04	26	0.9998	258.16	383.16
C16H32	n-Decilciclohexano	-21.9657	4.0780E+03	4.4899E-02	-4.0229E-05	24	0.9999	268.16	383.16
C16H32	1-Hexadeceno	-26.9864	4.4064E+03	6.0495E-02	-5.4375E-05	23	0.9999	278.16	388.16
C16H34	n-Hexadecano	-15.6535	3.2245E+03	2.5935E-02	-1.9899E-01	54	1.0000	293.16	558.16
C17H28	n-Undecilbenceno	-49.8084	7.2506E+03	1.2397E-01	-1.1334E-04	34	0.9998	258.16	423.16
C17H34	n-Dodecilciclopentano	28.4180	-1.5421E+03	-1.0592E-01	1.1084E-04	25	0.9999	263.16	383.16
C17H34	n-Undecilciclohexano	-40.5270	6.2141E+03	1.0007E-01	-9.5078E-05	22	0.9999	278.16	383.16
C17H34	1-Heptadeceno	-28.3550	4.6200E+03	6.4618E-02	-5.8826E-05	22	0.9999	283.16	388.16
C17H36	n-Heptadecano	-15.4962	3.2912E+03	2.4842E-02	-1.8505E-05	57	1.0000	293.16	573.16
C18H30	n-Dodecilbenceno	-41.4914	6.3990E+03	9.8954E-02	-8.8871E-05	32	0.9999	268.16	423.16
C18H36	n-Tridecilciclopentano	18.9466	-4.4882E+02	-7.7197E-02	8.1609E-05	23	0.9999	273.16	383.16
C18H36	n-Dodecilciclohexano	-52.1767	7.5902E+03	1.3434E-01	-1.2896E-04	21	1.0000	283.16	383.16
C18H36	1-Octadeceno	-24.5134	4.2777E+03	5.2380E-02	-4.6143E-05	20	1.0000	293.16	388.16
C18H38	n-Octadecano	-15.7251	3.3881E+03	2.5035E-02	-1.8421E-05	58	0.9999	303.16	588.16
C19H32	n-Tridecilbenceno	-39.8841	6.3086E+03	9.3396E-02	-8.3035E-05	31	1.0000	273.16	423.16
C19H38	n-Tetradecilciclopentano	17.8960	-2.5075E+02	-7.4794E-02	7.9655E-05	22	1.0000	278.16	383.16
C19H38	n-Tridecilciclohexano	-69.3720	9.5970E+04	1.8473E-01	-1.7839E-04	19	1.0000	293.16	383.16
C19H38	1-Nonadeceno	-35.2137	5.5924E+03	8.2579E-02	-7.4695E-05	19	1.0000	298.16	388.16
C19H40	n-Nonadecano	16.6483	3.5911E+03	2.6650E-02	-1.9255E-05	61	0.9999	303.16	603.16
C20H34	n-Tetradecilbenceno	-36.0735	5.9435E+03	8.1969E-02	-7.2023E-05	29	0.9999	283.16	423.16
C20H40	n-Pentadecilciclopentano	4.6907	1.2964E+03	-3.6107E+02	4.1776E-05	20	0.9999	288.16	383.16
C20H40	n-Tetradecilciclohexano	-61.5867	8.8026E+03	1.6108E-01	-1.5494E-04	18	1.0000	298.16	383.16
C20H40	1-Eicoseno	-50.1552	7.3856E+03	1.2516E-01	-1.1522E-04	18	1.0000	303.16	388.16
C20H42	n-Eicosano	-16.3646	3.6189E+03	2.5566E-02	-1.8153E-05	62	0.9999	308.16	613.16
C21H36	n-Pentadecilbenceno	-42.2852	6.7573E+03	9.8596E-02	-8.6944E-05	28	0.9998	288.16	423.16
C21H42	n-Hexadecilciclopentano	2.3373	1.6464E+03	-3.0093E-02	3.6509E-05	19	1.0000	293.16	383.16
C21H42	n-Pentadecilciclohexano	-58.3477	8.4911E+03	1.5148E-01	-1.4581E-04	17	1.0000	303.16	383.16
C22H38	n-Hexadecilbenceno	-34.2363	5.8875E+03	7.5338E-02	-6.5017E-05	26	1.0000	298.16	423.16
C22H44	n-Hexadecilciclohexano	-53.8358	7.9913E+03	1.3922E-01	-1.3512E-04	16	1.0000	308.16	383.16
C3H5N3O6	Trinitrato de glicerina	-306.9810	3.7175E+04	8.8002E-01	-8.6376E-04	5	1.0000	283.16	333.16
C3H8O3	Glicerina	-512.3310	5.4510E+04	1.7341E+00	-2.0320E-03	13	0.9995	231.16	303.16
C4H10	n-Butano	-1.3750	3.8536E+02	-7.8379E-03	7.2533E-06	19	1.0000	183.16	273.16
C4H10	Isobutano	-4.8191	7.0217E+02	6.4430E-03	-1.4089E-05	15	1.0000	193.16	263.16
C4H10O	Eter dietílico	-12.0038	1.4621E+03	3.0149E-02	-3.8080E-05	13	0.9999	173.16	373.16

Formula	Nombre	A	B	C	D	n	R ²	Tmin	Tmax
C5H10	1-Penteno	-3.3620	6.4608E+02	-2.2208E-03	2.3984E-06	19	0.9998	183.16	273.16
C5H12	n-Pentano	-12.8875	1.4021E+03	3.7963E-02	-5.2059E-05	34	1.0000	143.16	308.16
C5H12	Isopentano	-9.8595	1.3187E+03	2.0866E-02	-2.6131E-05	17	0.9999	223.16	303.16
C5H12	Neopentano	-54.1336	5.9364E+03	1.6591E-01	-1.8807E-04	6	1.0000	258.16	283.16
C6H12	Metilciclohexano	-2.9985	8.2836E+02	-1.3068E-03	1.4441E-06	21	1.0000	248.16	348.16
C6H12	1-Hexeno	12.8585	-7.0650E+02	-6.2370E-02	7.5597E-05	25	0.9992	218.16	338.16
C6H12O6	Glucosa	-1,717.2400	2.4750E+05	4.0481E+00	-3.2061E-03	8	0.9999	295.16	373.16
C6H14	n-Hexano	-12.5853	1.5816E+03	3.1978E-02	-3.8928E-05	34	1.0000	178.16	343.16
C6H7N	Anilina	-77.8527	1.1137E+04	1.8824E-01	-1.6104E-04	16	1.0000	267.16	373.16
C7H14	Etilciclohexano	-2.7143	8.3551E+02	-2.9925E-03	2.0184E-06	26	0.9999	253.16	378.16
C7H14	Metilciclohexano	-5.2235	1.2716E+03	3.2360E-03	-4.3235E-06	26	1.0000	248.16	373.16
C7H14	1-Hepteno	2.9649	1.5174E+02	-2.2682E-02	2.4736E-05	20	0.9986	273.16	368.16
C7H16	n-Heptano	-15.0374	2.0013E+03	3.7225E-02	-4.1597E-05	39	1.0000	183.16	373.16
C8H16	n-Propilciclohexano	-9.1430	1.6693E+03	1.3960E-02	-1.1958E-05	27	0.9998	253.16	383.16
C8H16	Etilciclohexano	-4.0834	1.2508E+03	-3.0250E-03	6.1978E-06	28	0.9999	248.16	383.16
C8H16	1-Octeno	-13.5180	2.0370E+03	2.7686E-02	-2.6726E-05	24	0.9998	273.16	388.16
C8H18	n-Octano	-13.5727	2.0412E+03	2.9355E-02	-3.0267E-05	37	1.0000	218.16	398.16
C9H12	n-Propilbenceno	-9.7901	1.8620E+03	1.5225E-02	-1.3682E-05	25	0.9999	303.16	423.16
C9H12	Isopropilbenceno	-15.3738	2.3918E+03	3.3785E-02	-3.4012E-05	13	1.0000	273.16	333.16
C9H12	1-Metil-4-etilbenceno	-7.6603	1.5589E+03	8.4334E-03	-5.5678E-06	15	1.0000	283.16	353.16
C9H18	n-Butilciclohexano	-1.5810	9.8052E+02	-1.0164E-02	1.2785E-05	27	0.9999	253.16	383.16
C9H18	n-Propilciclohexano	-5.4246	1.5329E+03	-1.1522E-03	6.2848E-06	28	1.0000	248.16	383.16
C9H18	1-Noneno	-10.7542	1.8670E+03	1.8176E-02	-1.6444E-05	24	0.9996	273.16	388.16
C9H20	n-Nonano	-15.5831	2.4194E+03	3.3406E-02	-3.2585E-05	42	1.0000	218.16	423.16
Cd	Cadmio	-0.5769	5.8434E+02			3	0.9977	622.16	876.16
H2SO4	Acido sulfúrico	341.6415	-3.2143E+04	-1.1494E+00	1.2588E-03	9	0.9949	321.96	353.16
Hg	Mercurio	-1.1188	3.7986E+02	1.1042E-03	-6.9311E-07	22	1.0000	253.16	613.16
P	Fosforo	-82.4249	1.0000E+04	2.3637E-01	-2.3396E-04	7	0.9999	294.66	353.06
Pb	Plomo	10.9100	-1.9615E+03	-1.4568E-02	5.8492E-06	8	0.9817	623.16	1117.16
Sb	Antimonio	-1.6942	1.9223E+03			4	0.9436	918.16	1123.16
Sin formula	Aceite de castor	-162.3920	2.4099E+04	3.9724E-01	-3.4179E-04	5	1.0000	283.16	373.16
Sin formula	Aceite de oliva	-8.8215	3.8890E+03			4	0.9999	283.16	343.16
Sin formula	Aceite de frijol de soya	-6.9436	3.2486E+03			4	0.9908	293.16	363.16
Sin formula	Turpentina	-59.7452	7.3398E+03	1.7191E-01	-1.7796E-04	6	0.9996	273.16	343.16
Sn	Estaño	-5.7403	1.9505E+03	6.7256E-03	-3.0113E-06	10	0.9878	513.16	1023.16

Regresión de Viscosidad de líquidos vs. T.

$$\mu = A + BT + CT^2$$

$$\mu = A + BT + CT^2 + DT^3$$

Visc [cP]; T [°K]

Formula	Nombre	A	B	C	D	n	R ²	Tmin	Tmax
C3H6O	Acetona	-6.0338E+01	4.9242E-01	-2.2978E-04		5	0.9975	383.16000	579.76
C3H6O2	Acetato de metilo	-1.1526E+02	7.8110E-01	-5.5421E-04		4	0.9978	372.96000	491.66
C3H8O	Alcohol isopropilico	1.3148E+02	-2.6540E-01	5.2411E-04		4	0.9658	372.96000	566.26
C4H10O	Eter dietilico	-1.0472E+01	3.0871E-01	-7.8649E-05		8	0.9990	273.16000	550.96
C4H8O2	Acetato de etilo	1.0320E+01	1.8138E-01	1.1529E-04		6	0.9998	273.16000	485.66
CS2	Disulfuro de carbono	-2.8918E+00	3.4720E-01	-8.6053E-06		5	1.0000	273.16000	582.96
Hg	Mercurio	-3.1697E+01	4.9747E-01	8.5029E-04		4	0.9993	546.16000	653.16
Sin formula	Aire	8.7493E-01	7.3295E-01	-4.4984E-04	1.3540E-07	25	0.9995	78.96000	1407.16