

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO II

ESTUDIO DE LA FACTIBILIDAD TERMODINAMICA DE UNA RED DE REACCIONES PROPUESTAS COMO MECANISMO DEL PROCESO AQUACONVERSION[®].

Presentado ante la Ilustre
Universidad Central de Venezuela
Por las Brs. Aranguren Indira Y.
Portmann N. Aura Y.
Para optar al Título de
Ingeniero Químico.

Caracas , Junio 2008

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO II

ESTUDIO DE LA FACTIBILIDAD TERMODINAMICA DE UNA RED DE REACCIONES PROPUESTAS COMO MECANISMO DEL PROCESO AQUACONVERSION[®].

TUTOR ACADÉMICO: Prof. Humberto Kum.

TUTOR INDUSTRIAL: Dr. Iván Machín.

Presentado ante la Ilustre
Universidad Central de Venezuela
Por las Brs. Aranguren Indira Y.
Portmann N. Aura Y.
Para optar al Título de
Ingeniero Químico.

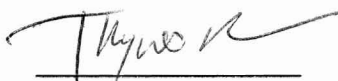
Caracas, Junio 2008

Caracas, Junio 2008

Los abajo firmantes, miembros del jurado designado por el Consejo de Escuela de Ingeniería Química, para evaluar el Trabajo Especial de Grado, presentada por las Bachilleres Indira Yasmari Aranguren y Aura Yohanna Portmann Niño, titulado:

“Estudio de la factibilidad termodinámica de una red de reacciones propuestas como mecanismo del proceso Aquaconversion[®]”.

Considerando que el mismo cumple con los requisitos exigidos en el plan de estudios conducentes al título de Ingeniero Químico, y sin que ellos signifiquen que se hacen solidarios con las ideas expuestas por los autores, lo declaran aprobado.



Prof. Trino Romero

Jurado



Prof. Humberto Kum

Tutor Académico



Prof. Luis García

Jurado



Dr. Ivan Machin

Tutor Industrial

*A mi abuela Pastora Aranguren quien
nos acompañó hasta el año 97,
espero estés orgullosa de mi.
A mi mamá Yasmína Aranguren
por su dedicación y apoyo.
Indira Aranguren.*

*Quiero dedicarle esta tesis a mí
Madre Fanny Niño a mi padre Ervin Portmann
Y a mi nana Ana Rodríguez (mi Teo).
Por su amor, su paciencia
su dulzura y consejos cuando más los
necesitaba. Los amo por ser las personas más
importantes en mi vida.
Aura Portmann.*

AGRADECIMIENTOS

El apoyo incondicional, la certeza de que puedo contar con su apoyo, y que ciegamente puedo confiar en ella porque es la única persona en el mundo que quiere lo mejor para mí, todo eso y mucho más te agradezco mamá. Desde las noches de traspasado de las que no tengo memoria hasta estos últimos instantes de preocupación, no tengo palabras para agradecerte toda mi vida para devolverte todo lo que me has dado, gracias. A mi abuela que siempre quiso verme graduada y que aguantó su aliento hasta el mismo día en que me gradúe de bachiller, quisiera que tus ojos pudieran mirar este logro, porque desde pequeña siempre estuviste detrás de mí, motivándome, no sólo con palabras si no con tu inquebrantable fe en mí, gracias.

Gracias a Dios, que me dio a mi mamá y a mi abuela, la mejor familia que he podido imaginar, por abrirme paso en esta aventura que ahora termina una etapa, por cada día de sol o lluvia que he vivido y disfrutado, por cada persona que he conocido en la vida y que me han sido de apoyo o de prueba. Gracias por todas las personas que conocí al inicio de mi carrera en Cagua, a la Sra. Celida le agradezco por recibirme en su casa como una amiga, recuerdo con agrado mis tiempos allá gracias a usted; y al Prof. Pedro Acosta. También le doy gracias a los profesores R. Martín, Salvatore, S. Marzuka, Rosalba S., McQuei, Jhonny V. A la Universidad Central de Venezuela, gracias.

Agradezco especialmente al profesor Humberto Kum, quien se convirtió para mí, no sólo en un mentor, si no en un amigo, porque es un ejemplo a seguir como profesional y como persona; lo admiro mucho. Por supuesto participó activamente en el desarrollo de esta Tesis, así que un millón de gracias. Agradezco a Iván Machin por enseñarnos Química Computacional, y siempre lo recordaré con estas palabras: "hay que reducir el efecto Morphy". Al profesor Trino Romero y Luis García por su cariño. Gracias a mi "compañera de tesis", como dice ella, Aura, ha sido un largo viaje hasta acá, pero lo hemos conseguido.

A Martha, por ser como una hermana para mí, A Kati por su apoyo y amistad, a Indira R. por su amistad y generosidad, a Daniela por compartir tantos momentos. Le agradezco a Nuria por compartir no sólo rumbas y playas, también amistad y apoyo, fue una fortuna conocerla. A mis panas, que me han alegrado la vida: Angela, Mervín, Valentín, Luis Arturo, Julio S., Ma. Gabriela C., Ana P., Efrén, Carlitos, Andrea, Carmarie, Oswaldo, Ricardito, Doctores Victor y Patricia, José A., Juan P., Nayi, al Sr. Franco, a la Familia Portmann y a Javier, a los Álvarez en Apure y a mi prima Juanita.

A Sobeida, "hermanita", por darme la oportunidad de trabajar unos meses en la Refinería El Palito, y a su papá el Sr. Pedro Silva. Al Sr. Tonny Padrón, a Plinio Arana, Siule Depablos y Luisana Torres por enseñarme los errores que debo corregir, Julio y a todos con quienes compartí y aprendí durante las pasantías y durante mi carrera.

Indira Yasmari Aranguren.

Quiero agradecerle este Trabajo Especial de Grado a Dios, por ser mi guía, compañero y mejor amigo en el camino de la vida y como estudiante en la universidad.

A la Universidad Central de Venezuela (UCV), por permitirme crecer intelectualmente dentro de sus grandiosos salones.

A mis padres Fanny y Ervin Portmann, por estar allí cuando mas los necesito y por ser las personas que me han brindado todo su amor a lo largo de mi vida, los amo mucho, gracias por darme la vida.

A mi Tío, mi bella nana por ayudarme y estar conmigo desde el momento que vine a este mundo, por darme animo y aliento cuando mas lo necesitaba, te quiero demasiado.

A Jonathian Portmann, mi hermano por ser parte de mi maravillosa familia.

A mi novio Javier Carvajal, por estar conmigo incondicionalmente y darme toda la fuerza, consejos y por decirme todos los días que el mundo conspira para que los sueños se hagan realidad como uno de mis mas valioso sueño el ser Ingeniera Químico.

A mi Tío Walter y Olivia, por ser parte de mi familia y por darme todo el ánimo y los consejos necesarios para alcanzar mis metas.

A la Señora Valentina, por siempre estar pendiente de mí y de todo lo relacionado a mis estudios.

A Indira mi compañera de tesis porque el esfuerzo valió la pena.

A mi Tutor Académico y amigo Prof Humberto Kum, por su ayuda incondicional y por extenderme la mano, en los momentos que más lo he necesitado.

A Iván Machin, Tutor Industrial, por enseñarme y colaborarnos un 100% en el desarrollo de la tesis, y convertirme en una chica con una visión más amplia en el área de Termodinámica.

Profesor Trino Romero y Luís García, jurados de este Trabajo Especial de Grado gracias por nutrirme de sus conocimientos y dar el visto bueno en este trabajo para ser una profesional.

A mis amigos de la biblioteca, Ramón, por prestarme siempre los libros, a Ernesto y Santiago, por los momentos divertidos.

A Maira Valera, por su apoyo su entusiasmo y su animo.

A mis amigos de la Sala de micro, el técnico Carlos, Valedith, David Useche, por su entusiasmo y colaboración en los momentos que necesitaba el uso de las computadoras.

A las muchachas de la residencia de Indira, Martha e Indira R. y al señor Franco por permitirme quedarme allí en el desarrollo de la tesis.

A todos aquellos que de una u otra forma colaboraron y nos extendieron su mano para lograr alcanzar nuestras metas. MIL GRACIAS....

Aura Portmann.

**Aranguren, Indira Y.
Portmann N., Aura Y.**

**ESTUDIO DE LA FACTIBILIDAD TERMODINÁMICA DE UNA RED
DE REACCIONES PROPUESTA COMO MECANISMO DEL PROCESO
AQUACONVERSION[®].**

**Tutor Académico: Prof. Humberto Kum. Tutor Industrial: Iván Machin.
Tesis. Caracas, U.C.V. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería
Química. Año 2008. 263 p.**

Palabras Claves: Espontaneidad química, Energía Libre de Gibbs, Método de contribuciones de grupo, propiedades termodinámicas.

Resumen: El proceso Aquaconversion[®] (AQC) fue concebido con la finalidad de aprovechar al máximo las fracciones residuales provenientes del proceso de destilación al vacío; este proceso de conversión de residuales también pudiera ser aplicado en el mejoramiento de crudos extrapesados, ya que, modifica las propiedades fisicoquímicas de los crudos, particularmente la gravedad API, su viscosidad, generando naftas, diesel y destilados medios de alta calidad. Para lograr un mayor dominio de esta tecnología se han desarrollado modelos cinéticos basados en pseudocomponentes; que son modelos limitados para el entendimiento a profundidad de lo que ocurre (a nivel molecular) en este proceso. Esta es la razón por la cual se necesita un modelo cinético molecular cuantitativo del proceso de AQC[®] que fue desarrollado recientemente en un Trabajo Especial de Grado (Carvajal, 2007), en el cual se creó un modelo cinético conformado por una red de 256 reacciones elementales compuestas por moléculas complejas, que pertenecen a los grupos representativos Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos (SARA) presentes en los crudos. Sin embargo, la información de tipo termodinámico relacionada a dicho modelo no ha sido desarrollada, de allí la importancia del presente Trabajo Especial de Grado, el cual tiene como propósito principal evaluar la espontaneidad de las 256 reacciones elementales propuestas para el modelo cinético del proceso AQC[®]. Se desarrolló una metodología que permitió evaluar la espontaneidad termodinámica de las 256 reacciones del mecanismo planteado que consiste de varias etapas. Se calculó las propiedades termodinámicas de las moléculas neutras y radicales libres de los Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos presentes en las reacciones del modelo cinético, mediante el uso de los métodos de contribuciones de grupo de Benson para radicales libres y los que se encuentran en el Manual de Ingeniero Químico Perry para moléculas neutras, utilizando para ello el programa computacional QBTherm[®]. Los métodos de contribuciones de grupo presentan un margen de error de aproximadamente $\pm 10\%$. Se calcularon las propiedades termodinámicas de las reacciones, Entalpía (ΔH_r), Entropía (ΔS_r) y la Energía Libre de Reacción (ΔG_r) con la cual se puede establecer la espontaneidad de las reacciones. Los resultados indican que el 53% de las reacciones del mecanismo no son espontáneas. De un total de 256 reacciones elementales 121 resultaron ser factibles termodinámicamente. En este trabajo también ha planteado una reacción química modelo (global) derivada de un modelo cinético molecular del proceso de Aquaconversion[®] basada en sistemas moleculares típicos presentes en residuos de crudos venezolanos.

ÍNDICE GENERAL

	Pag.
Índice de Tablas.....	x
Índice de Gráficos.....	xii
Índice de Figuras	xiii
CAPITULO I: Aspectos Generales.....	1
1.1. Introducción.....	1
1.2. Objetivos.....	3
1.2.1. Objetivo General.....	3
1.2.2. Objetivos Específicos.....	3
1.3. Antecedentes.....	4
CAPITULO II: Marco Teórico.....	8
2.1. Residuo de Vacío.....	8
2.2. Procesos de Conversión de Residuales.....	9
2.2.1. Visbreaking.....	10
2.2.2. Aquaconversion [®]	11
2.3. Tipos de Hidrocarburos.....	13
2.3.1. Saturados.....	14
2.3.2. Aromáticos.....	15
2.3.3. Resinas.....	16
2.3.4. Asfaltenos.....	17
2.4. Método de Separación SARA.....	18
2.5. Mecanismos de Reacción.....	20
2.5.1. Radicales libres.....	20
2.6. Grupos Funcionales.....	22
2.7. Termodinámica Química.....	23
2.7.1. Capacidad Calorífica.....	23
2.7.2. Entalpía de formación.....	24
2.7.3. Entropía de formación.....	24
2.7.4. Energía Libre de Formación.....	25
2.7.5. Entalpía de Reacción.....	26

2.7.6. Entropía de Reacción.....	27
2.7.7. Espontaneidad y Cambio de Energía Libre de Reacciones.....	27
2.8. Equilibrio de las reacciones Químicas.....	28
2.9. Método de Contribuciones de Grupo.....	31
2.9.1. Método de Contribuciones de Grupo de Benson.....	31
2.9.2. Método de Contribuciones de Grupo del Perry´s Handbook.....	33
CAPITULO III: Marco Metodológico.....	37
3.1. Programa QBTherm [®]	37
3.2. Procedimiento de cálculo de las propiedades termodinámicas.....	38
3.2.1. Consideraciones para la simplificación del procedimiento de cálculo.....	38
3.2.2. Codificación de las moléculas que se encuentran en la red de reacciones del modelo cinético del proceso AQC [®]	42
3.2.3. Cálculo de Propiedades Termodinámicas.....	43
3.2.3.1. Propiedades termodinámicas de moléculas neutras.....	44
3.2.3.2. Desarrollo de un método que combina los métodos de contribuciones de grupos para moléculas neutras y el de Benson para radicales libres.....	47
3.2.3.3. Propiedades termodinámicas de radicales libres.....	48
3.2.3.4. Almacenar los datos de las moléculas neutras y radicales libres en la base de datos.....	49
3.2.3.5. Determinación de los cambios de Energía Libre de las reacciones en estudio.....	50
3.3. Análisis de las reacciones que resulten ser No Espontáneas.....	51
3.4. Depuración de la red de reacciones propuesta como mecanismo del proceso AQC [®]	52
3.5. Determinación de la conversión máxima del proceso AQC [®]	52
CAPITULO IV: Análisis de Resultados.....	55
4.1. Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas saturadas.....	55

4.2. Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Aromáticas	57
4.3. Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Resinas	60
4.4. Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Asfaltenos	63
4.5. Análisis comparativo de las reacciones que resultaron ser Espontáneas.....	69
4.6. Depuración de la red de reacciones propuesta como mecanismo del proceso AQC [®]	71
4.7. Análisis de las reacciones que resultaron ser No Espontáneas.....	73
4.8. Conversión máxima posible del proceso AQC [®] mediante la red de reacciones planteada	81
CAPITULO V	84
5.1. Conclusiones.....	84
5.2. Recomendaciones.....	86
5.3. Bibliografía.....	87
APÉNDICES	92
Apéndice A: Red de reacciones inicialmente propuesta y depurada como mecanismo del proceso AQC [®] .	
Apéndice B: Propiedades Termodinámicas de las reacciones químicas.	
Apéndice C: Propiedades Termodinámicas de las moléculas neutras.	
Apéndice D: Propiedades Termodinámicas de los radicales libres.	
Apéndice E: Reacciones No espontáneas.	
Apéndice F: Pesos moleculares de las moléculas neutras.	
Apéndice G: Pesos moleculares de los radicales libres y otras moléculas.	
Apéndice H: Aplicación del Método de contribuciones de grupo para el cálculo de las propiedades termodinámicas de las moléculas neutras usando el programa QBTherm [®] .	
Apéndice I: Aplicación del Método de contribuciones de grupo para el cálculo de las propiedades termodinámicas de los radicales libres.	

ÍNDICE DE TABLAS

	Pag.
Tabla 1. Contribuciones de grupos para radicales libres y moléculas neutras del Método de Benson (1969).....	35
Tabla 2. Contribuciones de grupos para moléculas neutras del Manual del Ingeniero Químico Perry(1999).....	36
Tabla 3: Identificación de las primeras moléculas neutras de cada grupo SARA.....	43
Tabla 4. Incorporación de los datos de la molécula neutras y radicalares en la hoja de Excel del programa QBTherm [®]	50
Tabla 5. Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Saturadas.....	55
Tabla 6. Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Aromáticas.....	58
Tabla 7. Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran Resinas.....	60
Tabla 8. Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran Asfaltenos.....	63
Tabla 9. Reacciones Espontáneas y No Espontáneas de cada tipo de reacciones estudiadas.....	69
Tabla 10. Reacciones que poseen un Energía Libre de Gibbs menor que 10Kcal/mol.....	72
Tabla 11. Nuevas reacciones a partir de las reacciones no espontáneas del	

mecanismo.....	75
Tabla 12. Comparación entre las energías libres de las reacciones originales y las nuevas reacciones.....	77
Tabla 13. Reacciones no espontáneas separadas en los grupos A y B.....	79
Tabla 14. Propiedades termodinámicas de los productos y reactivos del mecanismo de reacción planteado por Carvajal (2007).....	79
Tabla 15. Reacciones no espontáneas separadas en los grupos A y B.....	80
Tabla N° 16 Propiedades termodinámicas de los productos y reactivos del mecanismo de reacción planteado por Carvajal (2007).....	82
Tabla N° 17 Entalpía, entropía y energía libre de la reacción global a partir del mecanismo de reacción planteado por Carvajal (2007).....	82

ÍNDICE DE GRÁFICOS

	Pág.
Gráfico N° 1: Porcentaje de reacciones espontáneas que involucran saturados	57
Gráfico N° 2: Porcentaje de reacciones espontáneas que involucran aromáticos.....	59
Gráfico N° 3: Porcentaje de reacciones espontáneas que involucran Resinas.....	63
Gráfico N° 4: Porcentaje de reacciones espontáneas que involucran Resinas	69
Gráfico N° 5: Reacciones espontáneas con Saturados, Aromáticos Resinas y Asfaltenos.....	70
Gráfico N° 6: Porcentaje de reacciones espontáneas total.....	70
Gráfico N° 7: Porcentaje de reacciones espontáneas total.....	71
Gráfico N° 8: Comparación entre las cantidades de reacciones con $\Delta G < 0$ y las reacciones con $\Delta G < 10 \text{Kcal/mol}$	72
Gráfico N° 9: Reacciones no espontáneas con Saturados, Aromáticos Resinas y Asfaltenos.....	73
Gráfico N° 10: Comparación de los gráficos de distribución de los tipos de reacción en los grupos A y B.....	81

ÍNDICE DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Diagrama de algunas etapas del proceso de Refinación.....	9
Figura 2. Diagrama del proceso de Visbreaking con Soaker.....	11
Figura 3. Diagrama del proceso Aquaconversion (AQC [®]).....	13
Figura 4. Ejemplo de una molécula saturada presente en la fracción residual de un crudo.....	15
Figura 5. Ejemplo de una molécula aromática presente en un crudo pesado.....	16
Figura 6. Ejemplo de una resina que se encuentra en la fracción residual de un crudo.....	17
Figura 7. Ejemplo de un Asfalteno que se puede encontrar en un crudo pesado o fracción residual.....	18
Figura 8: Metodología general usada para la caracterización SARA de un crudo.....	19
Figura 9: Demostración de que en sistemas donde se producen fragmentos radicales pequeños, la entalpía de reacción gaseosa es igual a la reacción en fase sólida.....	40
Figura 10. Estructura de las moléculas representativas de cada grupo de hidrocarburos SARA.....	43
Figura 11. Interfase para usar el método de contribuciones de grupos del Manual del Ingeniero Químico Perry en el programa QBTherm [®]	45
Figura 12. Ejemplo de la identificación de grupos funcionales de una	

molécula.....	45
Figura 13. Identificación de los grupos que conforman la molécula en estudio, mediante el programa QBTherm [®]	46
Figura 14. Interfase visual que muestra los resultados obtenidos para las propiedades termodinámicas.....	47
Figura 15. Identificación de los grupos que conforman el segmento radicalar de la molécula en estudio, mediante el programa QBTherm [®]	49
Figura 16. Estructura de cada moléculas neutras y radicales estudiadas con el programa QBTherm [®]	50
Figura 17. Flujograma de la Metodología a seguir en el presente Trabajo Especial.....	54
Figura 18. Diagrama de clasificación de las reacciones del mecanismo de AQC [®]	74
Figura N° 19. Reacción no espontánea R167 del mecanismo planteado para el proceso AQC [®] convertida una reacción espontánea, R167A.....	76
Figura 20: Reacción no espontánea R254 del mecanismo planteado pata el proceso AQC [®] convertida en una reacción espontánea R254B.....	78

CAPITULO I

ASPECTOS GENERALES

1.1. INTRODUCCIÓN

Los crudos extrapesados de la Faja Petrolífera del Orinoco constituyen las mayores reservas de hidrocarburos de Venezuela; sin embargo, este tipo de crudos presenta numerosos problemas asociados con su refinación. En particular, los rendimientos en fracciones livianas son muy bajos por lo que se generan cantidades importantes de fracciones residuales cuando son sometidos a destilación. Para aprovechar estas fracciones residuales se hace necesario aplicar procesos de conversión, que permitan, además de aumentar su gravedad API, bajar su viscosidad con lo que se genera cierta conversión a naftas y destilados.

Desde finales de los años 70, PDVSA-Intevep ha venido desarrollando el proceso de Aquaconversion[®] (AQC), pero fue a partir del año 2002 cuando esta tecnología se aprobó para su implantación en el área de refinación. Este proceso de Aquaconversion[®] tiene como objetivo mejorar las propiedades fisicoquímicas y reológicas de crudos extrapesados y de residuos del proceso de destilación al vacío (PDVSA Intevep, 2006).

Para lograr un mayor dominio de la tecnología de Aquaconversion[®] se han desarrollado modelos cinéticos basados en pseudocomponentes que son cualitativos, es decir, no cuantitativos o especulativos; sin embargo, estos modelos son muy limitados para el entendimiento a profundidad de lo que ocurre (a nivel molecular) en este proceso. Esta es la razón por la cual se necesita un modelo cinético molecular cuantitativo del proceso de Aquaconversion[®].

Aún cuando esta tecnología ha sido evaluada y demostrada ampliamente tanto a escala piloto como comercial, los aspectos cinéticos y termodinámicos de las reacciones involucradas en el proceso aun no se conocen en su totalidad; en este

sentido, en PDVSA-Intevep recientemente se concluyó una Tesis de Grado, en la cual se desarrolló un modelo cinético molecular para las reacciones del proceso AQC[®], el cual está conformado por una red de 256 reacciones elementales compuestas por moléculas complejas, que pertenecen a los grupos representativos Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos (SARA) (Carvajal, 2007). Sin embargo, la información de tipo termodinámico relacionada a dicho modelo no ha sido desarrollada, de allí la importancia del presente Trabajo Especial de Grado, el cual tiene como propósito principal evaluar la espontaneidad de las 256 reacciones elementales propuestas para el modelo cinético del proceso AQC[®], lo que permitió perfeccionar dicho modelo cinético, ya que se estudió cada reacción elemental mediante la evaluación de la Energía Libre de Gibbs, lo que permitió descartar las reacciones que no eran espontáneas a las condiciones de operación del proceso fijadas en 430 °C y 1 atm.

La evaluación de la Energía Libre de Gibbs requirió del cálculo de la entalpía, entropía y capacidad calorífica de cada molécula involucrada en la red de reacciones elementales que conformaron la propuesta para el modelo cinético del proceso AQC[®]. En vista de que no se conocían datos termodinámicos de las moléculas dado que la mayoría de ellas son de gran tamaño, se requirió de métodos que permiten calcularlas y de una herramienta que agilice la ejecución de los cálculos termodinámicos para cada molécula, ya que, en total, son 240 moléculas que forman parte de la red de 256 reacciones. Los métodos de contribuciones de grupo dan respuesta a esta problemática ya que han sido desarrollados para calcular la capacidad calorífica en función de la temperatura, entalpía y entropía de formación de una molécula. Estos métodos se fundamentan en que las propiedades de los compuestos son la suma de las propiedades individuales de los grupos que constituyen la molécula.

Los métodos de contribuciones de grupo de Benson (1976) y los que se encuentran en el Manual del Ingeniero Químico de Perry (1999), así como el uso de la herramienta computacional QBTherm[®] (Machín, 2007), permitieron el logro de los objetivos planteados en el presente Trabajo Especial de Grado.

1.2. OBJETIVOS

Con el desarrollo del presente Trabajo Especial de Grado se alcanzaron los siguientes objetivos.

1.3.1. Objetivo General:

Establecer la espontaneidad de una red de reacciones elementales propuesta como mecanismo del proceso de Aquaconversion[®], mediante la aplicación de métodos basados en los principios termodinámicos.

1.3.2. Objetivos Específicos:

1. Identificar cada una de las moléculas que participan en la red de unas 256 reacciones que conforman el mecanismo propuesto para del proceso AQC[®].
2. Determinar las propiedades termodinámicas de cada una de las moléculas identificadas: ΔH_f , ΔS_f y capacidades caloríficas.
3. Precisar las reacciones que deberán incorporarse al modelo cinético con base a su espontaneidad o factibilidad termodinámica.
4. Analizar las reacciones elementales que resulten ser no espontáneas y establecer nuevas posibilidades de ruptura de sus enlaces.
5. Crear una base de datos para almacenar la información de las moléculas en estudio y sus propiedades termodinámicas.
6. Proponer la red factible de reacciones que conforman el mecanismo del proceso AQC[®], en función de su termodinámica.
7. Calcular la conversión máxima del proceso a través del mecanismo de reacción planteado.

1.3. ANTECEDENTES

En su mayoría, los antecedentes del presente Trabajo Especial de Grado corresponden a trabajos de investigación y desarrollo impulsados por PDVSA-Intevep, para darle solución al problema del manejo, transporte, procesamiento y valorización de los crudos extrapesados de la Faja Petrolífera del Orinoco. A continuación se presentan estos antecedentes en orden cronológico:

1. Solano, Karen C. “Estudio cinético de reacciones catalíticas de hidrocarburos modelo con vapor de agua”. (1995).

Esta investigación estuvo enfocada hacia la reformación selectiva de moléculas de hidrocarburos con vapor y consistió en el estudio de moléculas modelo con el interés de ejemplificar lo que pudiera suceder en procesos catalíticos desde el punto de vista de las reacciones entre constituyentes del crudo y el vapor de agua. Entre los compuestos modelo utilizados en esta tesis estaban: Tolueno, Tiofeno, Fenol y Dibenzotiofeno entre otros. Para demostrar la reactividad de estos compuestos, se efectuó un estudio termodinámico indicativo del tipo de productos esperados de la reacción de cada uno de ellos con vapor.

El criterio termodinámico utilizado para conocer el equilibrio de la reacción y la espontaneidad de un proceso fue resumido en términos de la Energía Libre de Gibbs, bajo este criterio de factibilidad termodinámica se calculó la energía libre de formación estándar de cada uno de los compuestos involucrados en las reacciones a través del método de contribuciones de grupo y posteriormente obteniendo la energía libre de reacción, este método de cálculo es el que se utilizará en el estudio de la espontaneidad de las 256 reacciones elementales que se estudiarán en el presente Trabajo Especial de Grado, el cual supone que el método termodinámico aproximado de contribuciones de grupo para moléculas en fases gaseosas disminuye la complejidad de los cálculos

2. Graterol, Ana Julia. “Modelo cinético detallado de todas las reacciones posibles para los hidrocarburos del C₁ al C₅”. (2004).

El desarrollo de este estudio fue motivado a la demanda de olefinas e iso-olefinas livianas que se obtienen como producto de la transformación de las fracciones de n-pentano, n-butano y 1-buteno contenido en las corrientes excedentes de las refineras, lo que requiere el perfeccionamiento de sistemas catalíticos eficaces para su transformación en productos de mayor valor agregado. El Trabajo de Graterol consistió en el desarrollo de un modelo cinético de tipo detallado (denominado TC5_V5) de todas las reacciones posibles para los hidrocarburos del C₁ al C₅, con el fin de poder predecir los productos que se forman en cada una de dichas reacciones. Para el desarrollo de este modelo cinético, fue necesario estudiar la factibilidad termodinámica de las reacciones; también se compararon los datos termodinámicos de las moléculas y reacciones con los encontrados en la bibliografía.

Debido a que el objetivo principal del trabajo consistió en construir un modelo cinético detallado que incluyera las reacciones que involucran la transformación del n-C₅, se requirió buscar los datos termodinámicos para todas las olefinas C₅, para lo cual se usó el programa QBTherm v1.0, que utiliza el método de adición de grupos que se encuentra en el Perry's Handbook (Perry, 1980). Es importante mencionar que esta metodología es muy similar a la que se requiere usar para el logro de los objetivos del presente Trabajo Especial de Grado.

3. Patete, Marian. “Desarrollo un modelo cinético para la gasificación de coque usando una molécula modelo representativa de un coque Venezolano”. (2005).

Este estudio contempló el diseño de una molécula modelo representativa del coque de Petrozuata y el desarrollo de un modelo cinético para la gasificación de este coque.

Se necesitó de un estudio cinético y termodinámico para alcanzar los objetivos de este trabajo, se usaron diversas reglas y métodos para el desarrollo del mecanismo de reacción construido, y también se evaluó el calor de reacción para cada una de las reacciones a 800 K en el proceso de gasificación con vapor de agua.

Se utilizó un programa computacional denominado THERMO4.v.3.0, el cual facilita la predicción de las composiciones en el equilibrio de sistemas de reacción, mediante el cálculo de la variación de la Energía Libre de Gibbs de las reacciones en estudio. Este trabajo aporta conocimientos sobre la ruptura de enlaces de las moléculas neutras y los radicales libres presentes en un modelo cinético, ya que, el mecanismo de reacción estudiado en el trabajo de Patete estaba conformado por este tipo de moléculas. Todo esto es un aporte importante para el desarrollo del presente Trabajo Especial de Grado, ya que en una de las etapas de la presente investigación se considerarán rupturas de enlaces de las moléculas que se encuentran en las reacciones no espontáneas para estudiar nuevamente su factibilidad termodinámica.

4. Betancor Mayerly y Sawaya Krystel. “Potencial de Generación de Dioxinas y Furanos, en el proceso de Reformación Catalítica de Naftas”. (2006).

Este trabajo está estrechamente relacionado con el presente Trabajo Especial de Grado, ya que en él se realizan cálculos de propiedades termodinámicas y el estudio de la espontaneidad de las reacciones químicas usando el mismo programa computacional QBTherm[®] (Machin, 2007). El objetivo principal de este proyecto fue determinar la posibilidad de formación de Dioxinas y Furanos desde el punto de vista termodinámico, en algunas de las secciones del proceso de reformación de naftas. Para conocer las reacciones químicas que pudieran generar policlorodibenzo-para-dioxinas (PCDD) y policlorodibenzofuranos (PCDF), se identificaron las variables críticas del proceso y se llevó a cabo la simulación de las reacciones para verificar o

descartar la formación de dichos compuestos en las reacciones químicas. Para ello se especificaron las propiedades termodinámicas (C_p , ΔH_f , ΔS_f), de las dioxinas y furanos.

Se utilizó el método de contribuciones de grupo y se calcularon las propiedades termodinámicas a través del uso de un programa computacional QBTherm[®] (Machín, 2007), además se calcularon las energías libres de reacción (ΔG_R), para establecer la espontaneidad de dichas reacciones químicas. Las reacciones que se estudiaron resultaron ser factibles termodinámicamente.

5. Carvajal, Jemmy. “Diseño de una metodología para el desarrollo de un modelo cinético molecular del proceso de Aquaconversion[®], bajo una aproximación térmica”. (2007).

En este trabajo se plantea el modelo cinético del proceso Aquaconversion[®] para los cuales fue necesario proponer moléculas modelo representativas de las diversas fracciones de la separación SARA de un residuo de vacío. Como se trata de una aproximación térmica del proceso AQC[®], el modelo cinético planteado está basado en un mecanismo de ruptura de enlaces C-C, con formación de radicales libres, contemplándose también rupturas tipo puente entre sistemas policondensados aromáticos, como en el caso de las resinas y asfaltenos, originándose una red de 256 reacciones elementales.

Las 256 reacciones que conforman el modelo cinético molecular en el proceso AQC[®], requieren de un estudio termodinámico que permita corroborar la posibilidad de ocurrencia a través del estudio de la espontaneidad mediante la energía libre de Gibbs de estas reacciones a las condiciones de operación del proceso. Este estudio termodinámico se desarrollará como objetivo principal del presente Trabajo Especial de Grado, para proponer la red de reacciones definitiva del modelo cinético del proceso AQC[®].

CAPITULO II

MARCO TEÓRICO

En este capítulo se presentan los conceptos y conocimientos necesarios para soportar el desarrollo y la interpretación de los resultados del presente Trabajo Especial de Grado.

2.1. Residuo de Vacío

Para obtener productos útiles a partir del petróleo se requiere de un conjunto de procesos químicos y físicos conocido como Procesos de Refinación, los cuales a su vez se pueden dividir en: Procesos de Separación Física y Procesos de Conversión (Aquino, 2005). Entre los procesos de separación física cabe destacar el de destilación fraccionada en el cual se separan las diferentes fracciones que se caracterizan por un intervalo o rango definido de puntos de ebullición.

En la destilación atmosférica se obtienen varios cortes livianos, como lo son: gases, LPG, naftas, kerosén y gasóleos entre otros. Así mismo por el fondo de la torre de destilación se obtiene la fracción denominada residuo atmosférico, que luego es sometida a una destilación al vacío, de donde se generan cortes de gasóleos más pesados (gasóleos de vacío) y el residuo de vacío (Speight, 1980).

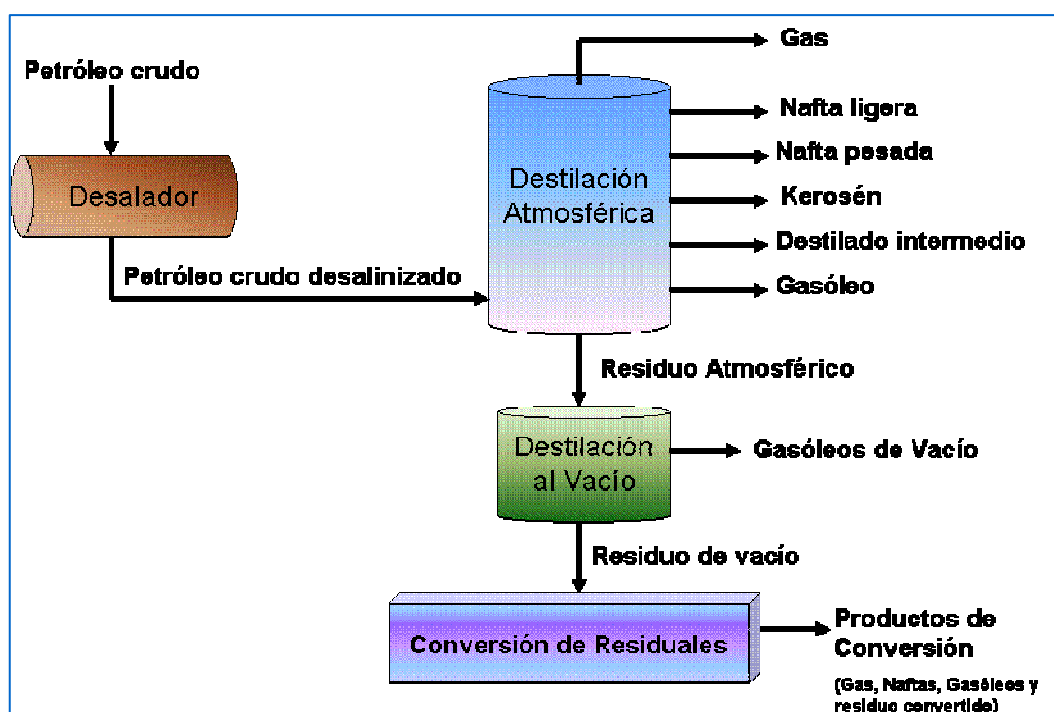
La destilación al vacío se lleva a cabo a presiones que se encuentran en el rango de 25 a 40 mmHg, porque las bajas presiones permiten que los componentes del crudo alimentado ebullican y se vaporicen a menor temperatura, sin embargo, la temperatura está limitada a menos de 380°C, ya que por encima de este valor empiezan a ocurrir reacciones de craqueo térmico. (De Bruijn, 2000).

El residuo de la destilación al vacío está formado por compuestos que tienen entre 60 y 100 átomos de carbono, y para cada uno de estos compuestos existen de $2,2 \times 10^{22}$ a $5,92 \times 10^{39}$ isómeros (Algelt, 1994). Este residuo de vacío contiene compuestos cuyos puntos de ebullición son muy elevados (615 a 708 °C), y un alto peso molecular que le confieren alta densidad y alta viscosidad, lo que acarrea dificultades para su transporte y procesamiento (Speight, 1980). También contiene

la mayoría de los contaminantes presentes en el petróleo como metales, sales, asfaltenos, nitrógeno y azufre, y es usado generalmente en la manufactura de asfaltos y como alimentación a unidades de procesos de conversión de residuales (De Bruijn, 2000).

En la figura 1 se observa el esquema de procesamiento de un crudo en las primeras etapas del proceso de refinación hasta llegar a los procesos de conversión de residuales.

Figura 1: Diagrama de algunas etapas del proceso de Refinación.



2.2. Procesos de Conversión de Residuales

Los procesos de Conversión de Residuales se llevan a cabo a altas temperaturas, por encima de 400 °C en la mayoría de los casos, ya que, se requiere que moléculas muy grandes se rompan generando moléculas mas pequeñas (De Bruijn, 2000), pues el objetivo de estos procesos es el aprovechamiento de los cortes de crudos, que son prácticamente imposibles de destilar, para obtener productos de mayor valor comercial.

En particular, los procesos Visbreaking(VB) y Aquaconversion(AQC[®]) están estrechamente vinculados, debido a que las reacciones que ocurren en ambos casos son muy similares. En principio, se presume que las diferencias observadas entre ellos se debe a que el catalizador usado en AQC[®] es capaz de disociar el agua generando una reacción de transferencia de hidrógeno hacia las moléculas de la alimentación. En el proceso AQC[®] existe una mejora de 4 a 6 puntos en la gravedad API de la carga, que por supuesto es mejor con respecto al incremento en °API obtenido en el proceso de VB que es de 2 a 3 unidades (Pereira, 1998).

2.2.1. Visbreaking (VB)

El VB es un proceso que consiste en transformar el residuo atmosférico o de vacío de una torre de destilación de petróleo en compuestos más livianos, mediante el craqueo térmico, a su vez la ruptura de las grandes moléculas se traduce en una disminución de la viscosidad del residuo. El Visbreaking es un proceso térmico que consiste en la ruptura de los enlaces C-C tipo puente que permiten liberar los sistemas policondensados aromáticos originalmente unidos entre sí, formando agregados moleculares, lográndose como resultado un aumento en la gravedad API; es decir, una disminución de la viscosidad (Bruijn, 2000).

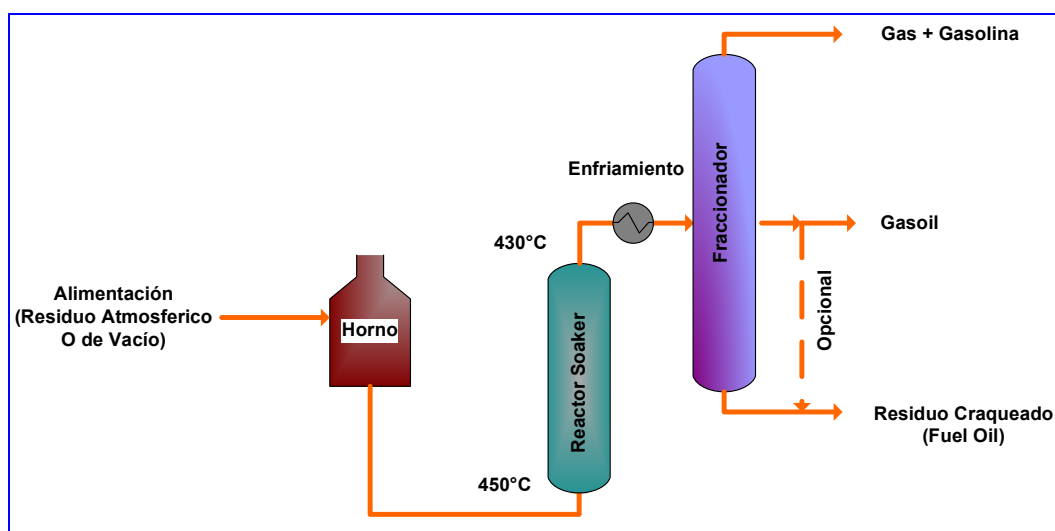
En el proceso VB, la carga se deshidrogena para dar olefinas, así como también puede ocurrir la aromatización de las estructuras naftenicas de las moléculas del sistema de reacción, de esta forma se propone una reacción que pueda representar el proceso de Visbreaking (Machín, 1998):



Donde R y R' son unidades policondensadas que están unidas por un puente alifático P . El proceso de VB implica que parte de la molécula, por ejemplo el fragmento R , se deshidrogena, transformándose en R'' . Luego, el hidrógeno liberado de este proceso es adsorbido por R' y $R''P$ para dar $R'-H$ y $R''-PH$, respectivamente, donde $R'-H$ puede ser una olefina. Este mecanismo sugiere que el rendimiento de este proceso es función de la cantidad de moléculas del tipo

$R - P - R'$ existentes en la carga, y de la naturaleza del puente P . Si el puente P (cadena alifática) es corto, entonces, será poco reactivo ante el proceso de Visbreaking, si el puente P es largo, entonces, P es muy reactivo bajo las condiciones del proceso de Visbreaking. Es bueno observar que dependiendo de la capacidad de deshidrogenación que tenga la carga (fragmento R) se brindará el hidrógeno necesario para que se lleve a cabo este proceso (Machín, 1998).

Figura 2: Diagrama del proceso de Visbreaking con Soaker.



La carga o alimentación en el proceso Visbreaking puede consistir de un Residuo de vacío o atmosférico con cierta proporción de hidrocarburos de 25 °API a 35 °API. Las temperaturas de operación o de reacción en el VB varían entre 420 °C y 500 °C y la presión dentro del horno, entre 3 a 20 atm. Como se observa en la figura 2, en este proceso se dispone de una cámara de reacción Soaker donde se completa el craqueo de las moléculas, y por último la torre de fraccionamiento donde se obtienen gases C_1-C_4 y los cortes de gasolina, gasoil y residuo craqueado. (Giavarini, 1986).

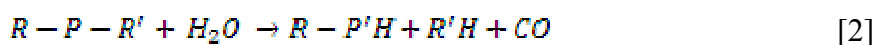
2.2.2. Aquaconversion[®] (AQC).

El proceso AQC[®] tiene por finalidad mejorar las propiedades fisicoquímicas de los crudos, particularmente la gravedad API y su contenido de azufre. La carga o

alimentación generalmente es un residuo proveniente de la destilación al vacío de un crudo por lo general pesado o extra-pesado. (Machín, 2006).

La tecnología Aquaconversion[®], es un proceso catalítico que constituye una alternativa para la conversión de residuales y mejoramiento de crudos pesados, generando naftas, diesel y destilados medios de buena calidad. El proceso se basa en una reacción de vapocraqueo termocatalítico, que como su nombre lo indica utiliza vapor de agua, un catalizador (a base de Niquel y Potasio), bajas temperaturas y bajas presiones. (Pereira, 1998).

Desde el punto de vista práctico se ha encontrado que el AQC[®], tiene las características de varios procesos clásicos, como lo son: hidrotratamiento (HDT), visbreaking (VB), hidrocraqueo moderado (HCM), estos son procesos con tratamientos suaves sobre los crudos. El proceso de Aquaconversion[®] usa temperaturas alrededor de 430 °C sin la generación excesiva de coque, la conversión (Residuo 500+) (Machín, 2006). La ecuación representativa del proceso de AQC[®] es la siguiente:

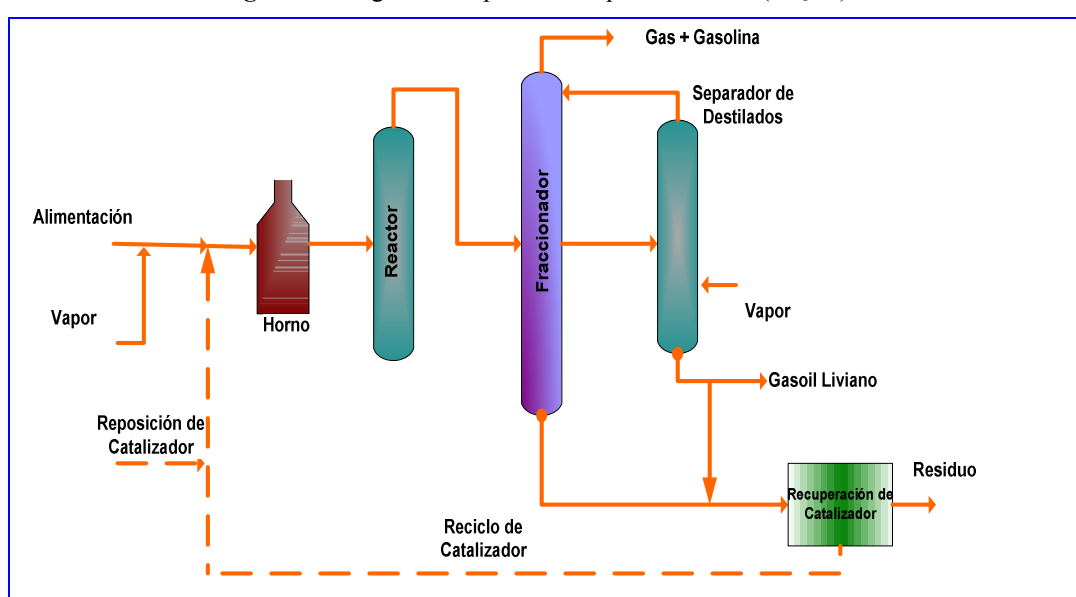


Donde R y R' son unidades policondensadas que están unidas por un puente alifático P . El fragmento $R - P$ se degrada para transformarse en $R - P'$. En esta reacción el agua transfiere hidrógeno al hidrocarburo, pero el oxígeno del agua reacciona con el hidrocarburo, en este caso reacciona sobre el puente P y la ruptura del puente ocurre vía un proceso tipo Steam Reforming (SR), El proceso de SR implica reacciones del agua sobre algunas partes de las moléculas orgánicas de la alimentación para su conversión en CO_x y H_2 . (Machín, 2006).

En la figura 3 se muestra un diagrama simplificado del proceso AQC[®] donde puede observarse que a la alimentación se le inyecta vapor de agua y un catalizador a presión atmosférica antes de entrar al horno de precalentamiento, de donde sale a 420 °C aproximadamente para entrar al reactor tubular; en ambos equipos ocurre el craqueo térmico de las moléculas de alto peso molecular obteniéndose una conversión moderada de la carga residual, los productos de

reacción obtenidos son llevados a una columna de fraccionamiento, donde son separados en naftas, gas, gasolinas y gasoil liviano, la corriente del fondo de la fraccionadora es llevada a una sección en la que se recupera el catalizador y se recircula al proceso y la parte intermedia obtenida es un corte que pasa a un tambor de separación de livianos. Por el tope del tambor se obtienen hidrocarburos livianos los cuales se reinyectan a la fraccionadora y por el fondo del tambor se obtiene gasoil liviano (PDVSA Intevep, 2006).

Figura 3: Diagrama del proceso Aquaconversion (AQC®).



2.3. Tipos de Hidrocarburos

El petróleo es esencialmente una mezcla compleja de varios cientos de miles de hidrocarburos de diferente peso molecular con contenido variable de impurezas por lo general en forma de heteroátomos, éste resulta de la descomposición de materias orgánicas de origen animal y vegetal (Delgado, 2006). El término de hidrocarburos se refiere a compuestos cuyas moléculas están conformadas por átomos de carbono e hidrógeno. (Brown, 1998).

Los hidrocarburos se clasifican en:

- **Saturados:** también conocidos como alcanos, los cuales no tienen ningún enlace doble o triple entre los átomos de carbono, por ejemplo hidrocarburos parafínicos (n-hexano, n-octano) y nafténicos (ciclopentano, ciclohexano, etc.) (Aquino, 2005).
- **Insaturados,** tienen uno o más enlaces dobles o triples entre los átomos de carbono.

Según los enlaces sean dobles o triples se los clasifica en:

- **Alquenos:** contienen uno o más enlaces dobles
- **Alquinos:** contienen uno o más enlaces triples.
- **Aromáticos:** los cuales tienen al menos un anillo aromático o bencénicos (anillo de seis átomos de carbono unidos por enlaces dobles deslocalizados). (Solomons, 1999).

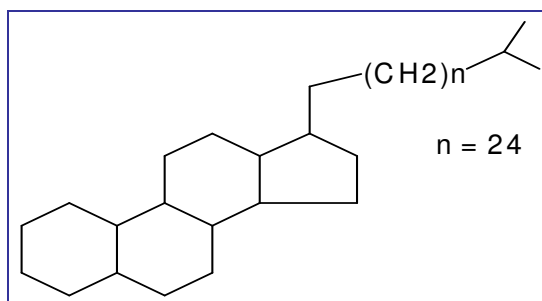
La complejidad de los crudos pesados ha constituido un motivo para efectuar su separación en subfracciones fisicoquímicamente representativas. Puede afirmarse que la forma más común de caracterizar los crudos es mediante la separación en fracciones representativas o grupos de hidrocarburos tales como: saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos, conocida por sus iniciales como SARA. (Algelt, 1994; Carbognani, 1999).

2.3.1. Saturados

Son hidrocarburos que se caracterizan por tener solamente enlaces sencillos (enlaces σ). El carbono en hibridación sp^3 dirige sus cuatro orbitales moleculares según los vértices de un tetraedro regular. Tal es la disposición que se encuentra en el metano, y en todos los compuestos saturados, conocidos también como parafinas o alifáticos. Cuando una cadena abierta de carbonos saturados se cierra sobre sí misma, el compuesto resultante recibe el nombre de cicloparafina o nafteno (Battaner, 2000).

La porción saturada de una fracción residual de un crudo está conformada por largas cadenas alquílicas o también pueden estar unidas a anillos naftenicos, como se observa en la figura 4, donde n corresponde al número de carbono, en el caso de este ejemplo n es igual 24. En los hidrocarburos saturados los puntos de fusión y de ebullición aumentan con el número de átomos de carbono, son considerados aceites viscosos, no polares. Los valores más bajos de ebullición y fusión corresponden a los hidrocarburos de cadena ramificada. Su reactividad química es baja debido a la alta estabilidad del enlace $C-H$.

Figura 4: Ejemplo de una molécula saturada presente en la fracción residual de un crudo.



2.3.2. Aromáticos

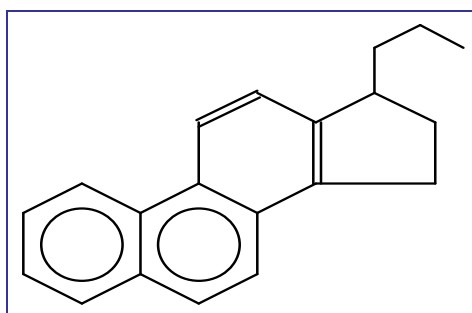
Cuando se forman estructuras cíclicas a partir de carbonos en hibridación sp^2 , cuyos orbitales moleculares se encuentran dirigidos según los vértices de un triángulo equilátero, se forman los llamados compuestos aromáticos. El representante más característico de este grupo es el benceno, C_6H_6 .

Los compuestos aromáticos pueden estar formados por varios ciclos o anillos a la vez, dando lugar a una gran variedad de estructuras. Así, la unión de dos anillos bencénicos da lugar al naftaleno. Pueden unirse más anillos, dando lugar a estructuras más complejas como el antraceno (Battaner, 2000).

Los aromáticos son no polares y buenos solventes, el peso molecular aproximado está comprendido en el intervalo de $3 \times 10^2 - 2 \times 10^3 \text{ gr/mol}$ para los aromáticos presentes en fracciones residuales de crudo o petróleo pesado y extrapesado, su

estructura es considerada plana y son especialmente estables (Cremades, 2006). La figura 5 es un ejemplo de una molécula aromática de las que se pueden encontrar en crudos pesados o fracciones residuales. Este tipo de compuestos no necesariamente está formado únicamente por cadenas de átomos de carbono, pueden entrar otros átomos en el ciclo, dando lugar a lo que se conoce como heterociclos.

Figura 5: Ejemplo de una molécula aromática presente en un crudo pesado.



2.3.3. Resinas

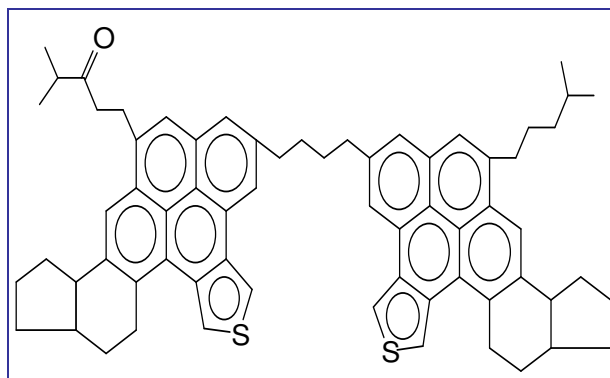
La fracción conocida como “Resinas”, esta constituida por compuestos que se solubilizan cuando el petróleo (o un corte residual de un crudo) se disuelve en un n-alcano, y su composición depende del solvente empleado. Son consideradas muy polares y poseen un peso molecular alto, aproximadamente en el rango de $5 \times 10^2 - 5 \times 10^4 \text{ gr/mol}$ (Cremades, 2006).

Las Resinas se consideran como un producto intermedio originado en la transformación del crudo en Asfaltenos, proceso que ocurre tanto por oxidación como por tratamiento directo con oxígeno y azufre (Speight, 1980).

La estructura de las Resinas involucra largas cadenas parafínicas con anillos nafténicos unidos; así como también grandes cantidades de aromáticos unidos entre si formando unidades policondensadas que también contienen heteroátomos. (Cremades, 2006).

En la figura 6 se observa una molécula modelo de una Resina tal como las que se encuentran en la fracción residual de un crudo o en un crudo pesado.

Figura 6: Ejemplo de una Resina que se encuentra en la fracción residual de un crudo.

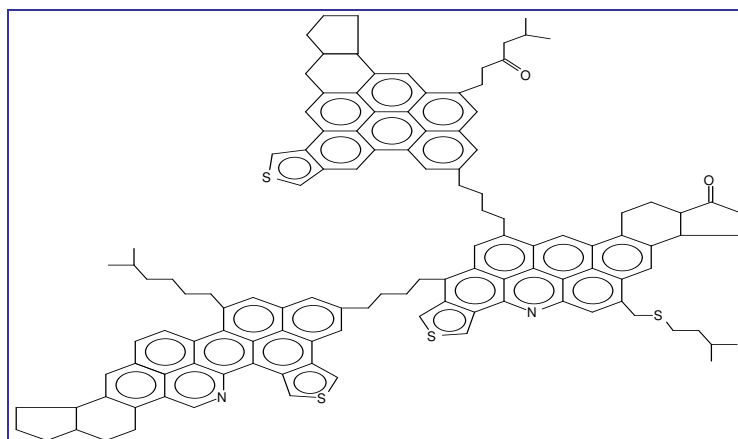


2.3.4. Asfaltenos

A pesar de la diversidad de criterios que se adoptan al definir los Asfaltenos, se ha llegado a un consenso al catalogarlos como la fracción de crudo soluble en tolueno o benceno e insoluble en una parafina normal (n-pentano a n-heptano).

Los Asfaltenos están constituidos principalmente por anillos aromáticos ligados con cadenas alquílicas y cicloalcanos, además de compuestos heterocíclicos con átomos de nitrógeno, azufre y oxígeno. (Delgado, 2006).

Estudios recientes muestran que la relación C/H en los Asfaltenos está por el orden de 1: 1.1, y que aproximadamente el 40% del carbono presente, es aromático. La estructura de los Asfaltenos es muy variada y depende del origen del crudo de donde provienen. Se pueden considerar como materiales aromáticos altamente polares y de alto peso molecular de $10^3 - 10^5 \text{ gr/mol}$ (Cremades, 2006). Con el incremento de la aromaticidad y el contenido de heteroátomos aumenta el peso molecular de la fracción de Asfaltenos. La estructura de las moléculas de Asfaltenos muestra que son hidrocarburos con partes relativamente polares dadas por los complejos poliaromáticos los cuales pueden tener de 4 hasta 20 anillos bencénicos, como se muestra en la figura 7. Los diferentes tipos de heteroátomos presentes en los Asfaltenos están conformados por grupos funcionales tales como: carboxilos, benzotiofenos, cetonas, aldehídos, sulfuros, nitrógenos, entre otros. (Delgado, 2006).

Figura 7: Ejemplo de un Asfalteno que se puede encontrar en un crudo pesado o fracción residual.

2.4 Método de Separación SARA

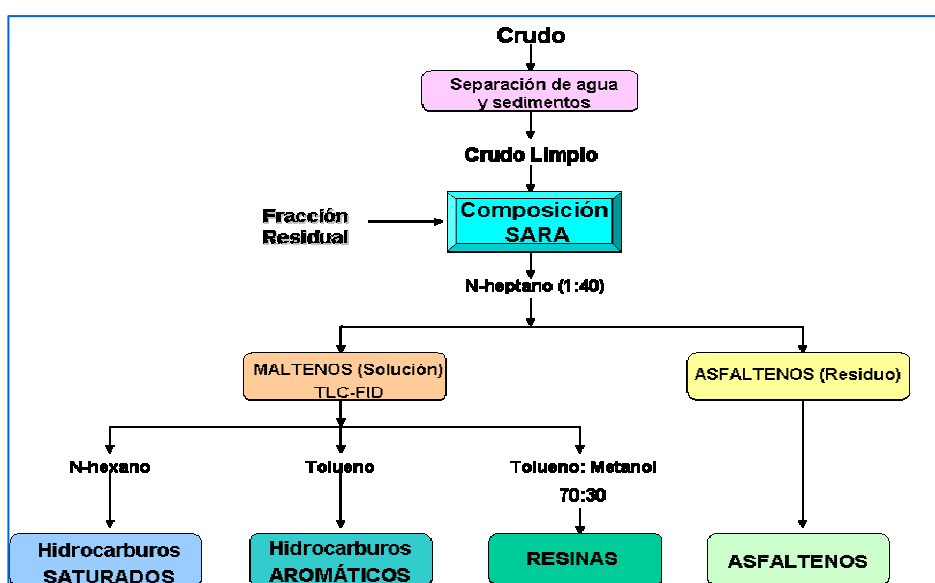
La caracterización de los crudos, es un proceso dinámico que permite obtener información química detallada del crudo y sus fracciones tanto química como físicamente representativas, empleando por lo general procedimientos normalizados y desarrollados para propósitos específicos de caracterización. (Carbognani, 1999).

Un aspecto que complica la caracterización de la fracción no destilable de un residuo, reside en la existencia de fuerzas de atracción intermolecular, que son variables entre las diversas familias de compuestos que integran el petróleo, debido a esta complicación de la destilación se requiere someter este residuo no destilable a otros esquemas de separación que faciliten la caracterización, como la separaciones químicas a través del fraccionamiento cromatográfico. La forma mas común de lograr fracciones representativas es mediante la separación de grupos de compuestos a través de un método de análisis que permite fraccionar y cuantificar un crudo en cuatro familias de hidrocarburos con propiedades afines: Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos conocido como SARA (Carbognani, 1999). El método SARA se desarrolló en los años 70. Su principio fundamental es la separación basada en fenómenos físicos de adsorción como el método de cromatografía líquida de alta presión (HPLC), que generalmente utiliza una

columna empacada y diferentes solventes para obtener las subfracciones de saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos del crudo(Sol, 1985).

La técnica de cromatografía de capa fina conocido como TLC-FID, consiste en separar el crudo en las fracciones SARA, mediante el uso de los solventes n-heptano, n-hexano, tolueno y metanol. El procedimiento para la separación del crudo mediante el método TLC-FID se realiza como se muestra en la figura 4, el n-heptano permite la separación de los Maltenos y Asfaltenos; posteriormente, en la columna empacada, los Maltenos se separan añadiendo n-hexano para obtener la fracción saturada; luego se añade tolueno para obtener los Aromáticos y para finalizar se agrega una solución de tolueno y metanol en proporción 70:30 (p/p) para obtener las Resinas (Tissot, 1984). En la figura 4 se muestra un esquema general de separación SARA para la caracterización de crudos mediante la técnica TLC-FID.

Figura 8: Metodología general usada para la caracterización SARA de un crudo.



Existen otros métodos basados en la separación de grupos de hidrocarburos conocidos como el SEF, con base a sus iniciales inglesas (Solvent Eluted Fractionation), el cual separa los grupos de los hidrocarburos a través de la diferencia de solubilidad y otro método conocido es el ABAN que se desarrolló como sustituto de otras metodologías basadas en extracción líquida debido a la

insolubilidad de las fracciones de alto peso molecular ,este método genera grupo de hidrocarburos Ácidos, Básicos, Anfoteritos y Neutros (Sol, 1985).

2.5. Mecanismos de Reacción

Un mecanismo de reacción describe la ruptura y formación de enlaces además de los cambios de posiciones relativas de átomos durante la reacción que transforma los reactivos en productos. Los mecanismos de reacción son de gran importancia en los estudios de las reacciones químicas ya que describen los detalles de cómo se forman los productos finales e intermediarios, lo que permite predecir lo que ocurriría en una reacción si se cambian las condiciones a la cual se lleva a cabo (Brown, 1998).

Se consideran dos tipos de mecanismos dependiendo del número de etapas que conlleven, se tienen las reacciones elementales, las cuales transcurren en una sola etapa, superan una sola barrera energética y se representan mediante una sola ecuación estequiométrica y las reacciones complejas que transcurren en dos o más etapas con formación de intermediarios, superan diferentes barreras energéticas y se expresan en varias ecuaciones estequiométricas o en una global; en esta última no se encuentran presentes los intermediarios un ejemplo de este tipo de mecanismo son los radicales libres. (Blanco, 2002).

También se considera un tipo de mecanismo, llamado molecular detallado, el cual corresponde a la transformación de reactivos en productos pero usando solo reacciones donde están contemplados la formación o la ruptura de un solo enlace.

2.5.1. Radicales Libres

Son fragmentos orgánicos que tiene un electrón desapareado. Si se tiene una molécula $A:B$, y se rompe el enlace de manera que A y B retienen cada uno de los electrones del enlace produciéndose dos fragmentos neutros A^\bullet y B^\bullet ; estos

fragmentos son los radicales o radicales libres. Este tipo de ruptura de enlace se llama homólisis (Gram, 1999; Brown, 1998).

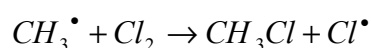
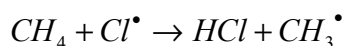
Los mecanismos de reacción por radicales libres se dan en tres pasos: la iniciación, la propagación y la terminación de la cadena. La iniciación solo rompe un enlace y es este el paso o etapa donde se forman los radicales libres, el calor de reacción para este caso es simplemente la energía de ruptura del enlace. En la propagación un radical genera a otro a partir de la reacción con una molécula neutra y por último el tercer paso, la terminación, donde se consumen uno o ambos reactivos intermedios y la posterior interacción molecular de ambos radicales para poder disipar la alta energía que contienen y así poder formar la molécula diatómica (Solomons, 1999).

A continuación se presenta un ejemplo del mecanismo de reacción por radicales libres, la cloración del metano:

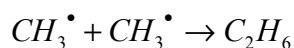
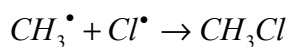
Iniciación de la cadena:



Propagación de la cadena:



Terminación de la cadena:



El modelo cinético desarrollado por Carvajal 2007, se fundamenta en un mecanismo de ruptura de enlaces C-C con formación de radicales libres debido a que la red de reacciones propuesta considero aproximaciones térmicas para el proceso de AQC[®]. Los radicales libres son altamente reactivos a causa de que tienen un electrón desapareado y se diferencian de los mecanismos de ruptura

heterolítica o iónica como los son los carbocationes y carboaniones, ya que, los átomos de estos retienen ambos electrones (Wade, 1993).

2.6. Grupos Funcionales

Una de las grandes ventajas de la teoría estructural es que permite clasificar el gran número de compuestos orgánicos en un número relativamente menor de familias, basándose en sus estructuras (Benson, 1976; Joback, 1984). Las moléculas de los compuestos de una familia en particular se caracterizan por la presencia de cierta distribución de átomos llamada grupo funcional (Solomons, 1999).

Un grupo funcional es la parte de una molécula en donde ocurre la mayoría de sus reacciones químicas. Es esta parte la que efectivamente determina las propiedades químicas y físicas de un compuesto. Por ejemplo, el grupo funcional de un alqueno es el enlace doble carbono-carbono ($C = C$). La mayoría de las reacciones químicas de los alquenos son las que poseen el enlace doble carbono-carbono. El grupo funcional de un alquino es el enlace triple carbono-carbono. Los alcanos no tienen un grupo funcional porque sus moléculas tienen enlaces sencillos carbono-carbono y enlaces carbono-hidrógeno ($C - H$), pero estos enlaces se encuentran presentes en la mayoría de las moléculas orgánicas; los enlaces $C - C$ y $C - H$ son, en general, mucho menos reactivos que los grupos funcionales que tienen enlaces dobles o triples, en el caso de los alcoholes son considerados compuestos orgánicos que contienen al grupo hidroxilo ($-OH$) como grupo funcional, en los aldehído y las cetonas el grupo funcional esta dado por el grupo carbonilo ($C = O$), y en los ácidos carboxílicos están dados por el grupo carbonilo ($-COOH$). (Brown, 1998; Gram, 1999; Solomons, 1999).

La mayoría de grupos funcionales presentes en las moléculas orgánicas contienen carbonos unidos a distintos heteroátomos. Una amplia variedad reacciones químicas pueden tener lugar sobre el carbono o los heteroátomos de dicho grupo (Gram, 1999).

2.7. Termodinámica Química.

La Termodinámica Química o Termoquímica es el área de la termodinámica que estudia las relaciones entre las reacciones químicas y los cambios de energía (Brown, 1998). Para describir un proceso químico se necesita tanto de un modelo cinético que describa la distribución de los productos lejos de las condiciones de equilibrio, como de un estudio termodinámico que permita establecer los rendimientos máximos en el equilibrio para una reacción o conjunto de reacciones dadas; este estudio requiere del cálculo de las propiedades termodinámicas, Capacidad Calorífica, Entalpía, Entropía y Cambio de Energía Libre, tanto de los compuestos como de las reacciones a estudiar.

2.7.1. Capacidad Calorífica

Una propiedad característica de todo compuesto es su capacidad calorífica (C_p), la cual se define como la energía necesaria para aumentar en un grado la temperatura de un compuesto, y se expresa en $\text{cal}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ (Smith, 2003).

La capacidad calorífica (C_p) se puede medir bajo condiciones de presión constante o de volumen constante. La capacidad calorífica a presión constante se expresa normalmente como una función polinómica de la temperatura absoluta T (Lide, 1980).

$$C_{p(T)} = a + (b \cdot 10^{-3})T + (c \cdot 10^{-6})T^2 + \frac{d \cdot 10^5}{T^2} \quad [3]$$

Donde:

$C_{p(T)}$: Capacidad calorífica a la temperatura T requerida.

a, b, c y d : Son constantes de la capacidad calorífica sus valores son particulares para cada compuesto.

T : Temperatura absoluta expresada en Kelvin.

2.7.2. Entalpía de formación.

La entalpía de formación de un compuesto se define como el calor liberado o absorbido a presión constante en una reacción hipotética para formar 1 mol del compuesto a partir de sus elementos (en su estado más estable) a condiciones estándar, 1 atm y 298K (Abrams, 2002). La entalpía de formación depende de la temperatura y de la presión. Para calcular el calor o entalpía de formación de una sustancia a cualquier otra temperatura, distinta de la estándar, se utiliza la siguiente ecuación (Lide, 1980; Perry, 1999):

$$\Delta H_{f(T)} = \Delta H_{f(298K)} + \int_{298K}^T Cp dT \quad [4]$$

Donde:

$\Delta H_{f(298K)}$: Entalpía estándar de formación a 298 K .

$\Delta H_{f(T)}$: Entalpía de formación a la temperatura absoluta T .

Cp : Capacidad calorífica del compuesto en estudio.

Si se sustituye Cp de la ecuación [3] en la integral de la ecuación [4] y se integra, se tiene:

$$\Delta H_{f(T)} = \Delta H_{f(298K)} + a(T - 298) + \frac{1}{2}(b \cdot 10^{-3})(T^2 - 298^2) + (c \cdot 10^{-6})(T^3 - 298^3) - (d \cdot 10^5) \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298} \right) \quad [5]$$

2.7.3. Entropía de formación.

La entropía de formación de un compuesto se define como el cambio de entropía de una reacción hipotética que a partir de sus elementos (en su estado más estable) genera un mol del compuesto a condiciones estándar (1atm y 298K), se considera

que la entropía de los elementos en su estado más estable es cero (Brown, 1998).

La entropía de formación depende de la temperatura y de la presión.

Para calcular la entropía de formación de una sustancia a cualquier otra temperatura, distinta de la estándar, se utiliza la siguiente ecuación (Lide, 1980; Perry, 1999):

$$S_{f(T)} = S_{f(298K)} + \int_{298K}^T \left(\frac{C_p}{T} \right) dT \quad [6]$$

Sustituyendo la ecuación [3] en la ecuación [6] e integrando, se tiene:

$$S_{f(T)} = S_{f(298K)} + a \cdot \ln\left(\frac{T}{298}\right) + (b \cdot 10^{-3})(T - 298) + \frac{1}{2}(c \cdot 10^{-6})(T^2 - 298^2) - \frac{1}{2}(d \cdot 10^5) \left(\frac{1}{T^2} - \frac{1}{298^2} \right) \quad [7]$$

Donde:

$S_{f(T)}$: Entropía de formación a la temperatura T

$S_{f(298K)}$: Entropía de formación a $298K$.

C_p : Capacidad calorífica.

a, b, c, d : Constantes de la capacidad calorífica para el compuesto en estudio.

2.7.4. Energía libre de formación.

La energía libre de formación, ΔG_f , es el cambio de energía libre asociado con la formación de una sustancia a partir de sus elementos en condiciones estándar. (Brown, 1998; Lide, 1980). La energía libre de Gibbs de formación se define como:

$$\Delta G_{f(T)} = \Delta H_{f(T)} - T\Delta S_{f(T)} \quad [8]$$

Donde:

$\Delta G_{f(T)}$:Energía libre de formación a la temperatura T.

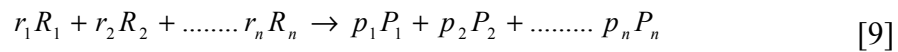
$\Delta H_{f(T)}$: Entalpía de formación a la temperatura T.

$\Delta S_{f(T)}$: Entropía de formación a la temperatura T.

T : Temperatura absoluta en Kelvin.

2.7.5. Entalpía de reacción.

Si se tiene una reacción representada por la siguiente expresión:



Donde:

R_1, R_2 y R_n : Reactivos.

r_1, r_2 y r_n : Coeficiente estequiométrico de los reactivos.

P_1, P_2 y P_n : Productos.

p_1, p_2 y p_n : Coeficiente estequiométrico de los productos.

La Entalpía de la reacción [9] se define como la suma de las entalpías de formación de los productos menos la suma de las entalpías de formación de los reactantes, y se expresa mediante la ecuación [10] (Lide, 1980; Perry, 1999).

$$\Delta H_{r(T)} = \sum_i p_i \cdot \Delta H_{f_{P_i(T)}} - \sum_j r_j \cdot \Delta H_{f_{R_j(T)}} \quad [10]$$

Donde:

$\Delta H_{r(T)}$: Es el calor de la reacción a la temperatura T de la reacción [9].

$\Delta H_{f_{P_i(T)}}$: Calor de formación de los compuestos P_i a la temperatura T.

$\Delta H_{f_{R_j(T)}}$: Calor de formación del compuesto R_j a la temperatura T.

p_i y r_j : Son los coeficientes estequiométricos de la reacción.

2.7.6. Entropía de reacción.

La entropía de la reacción [9] se define como:

$$\Delta S_r = \sum_i p_i \cdot Sf(P_i) - \sum_j r_j \cdot Sf(R_j) \quad [11]$$

Donde:

ΔS_r : La entropía de la reacción [9].

$Sf(P_i)$ y $Sf(R_j)$: Son las entropías de formación de los compuestos P_i y R_j respectivamente (Lide, 1980; Perry, 1999).

2.7.7. Espontaneidad y Energía Libre de las reacciones químicas.

Un proceso espontáneo tiene un sentido característico, aun cuando la energía se conserva y esto puede depender en gran medida de la temperatura del sistema en estudio.

Casi todas las reacciones y procesos químicos tienen una direccionalidad inherente, es decir, son espontáneos en un sentido y no espontáneos en el sentido inverso. La espontaneidad de un proceso esta relacionada con el trayecto que el sistema sigue del estado inicial al estado final (Brown, 1998).

En un proceso reversible, el sistema puede ir en un sentido y otro entre estados a lo largo del mismo trayecto y en un proceso irreversible el sistema no puede regresar a su estado original a lo largo de la misma trayectoria. Se considera que todo proceso espontáneo es irreversible (Brown, 1998).

Una reacción espontánea puede ser muy rápida o muy lenta, la termodinámica puede indicar cual es el sentido de una reacción pero no dice nada con respecto a la velocidad de la reacción para esto se considera la cinética química.

Es importante destacar que el cambio de entalpía y entropía de un proceso esta ultima esta relacionada con la aleatoriedad o desorden cuanto mayor es el

desorden mayor es la entropía, donde la espontaneidad es controlada en este caso por la segunda ley de la termodinámica, esta ley establece la irreversibilidad de un proceso que conduce a la espontaneidad del mismo ($\Delta S_{univ} > 0$). Tanto la entalpía como la entropía son factores indispensables para conocer si una reacción es favorable o no, la combinación de estos parámetros termodinámicos da origen a la energía libre de Gibbs la cual se utiliza para conocer si una reacción química es espontánea o no.

La energía libre de la reacción [9] se define como:

$$\Delta G_{r(T)} = \sum_i p_i \cdot \Delta Gf_{P_i(T)} - \sum_j r_j \cdot \Delta Gf_{R_j(T)} \quad [12]$$

Donde:

$\Delta G_{r(T)}$: Es la energía libre de la reacción [9] a la temperatura T .

ΔGf_{P_i} : Energías libre de los productos P_i y esta dado por la ecuación [13]

ΔGf_{R_j} : Energía libre de los reactantes R_j y esta dado por la ecuación [14]

p_i y r_j : Coeficientes estequiométricos de los productos y reactivos respectivamente.

$$\Delta Gf_{P_i(T)} = \Delta Hf_{P_i(T)} - T \cdot Sf_{P_i(T)} \quad [13]$$

$$\Delta Gf_{R_j(T)} = \Delta Hf_{R_j(T)} - T \cdot Sf_{R_j(T)} \quad [14]$$

La función $\Delta G_{r(T)}$ permite establecer la espontaneidad de una reacción química.

Cuando $\Delta G_{r(T)} < 0$ la reacción es termodinámicamente espontánea; si $\Delta G_{r(T)} > 0$, la reacción es no espontánea termodinámicamente (Lide, 1980; Perry, 1999).

2.8. Equilibrio de las reacciones Químicas.

La energía de Gibbs total (G^t) de un sistema cerrado a temperatura y presión constantes debe disminuir durante un proceso irreversible y la condición para el

equilibrio se alcanza cuando G^t logre su valor mínimo. En este estado de equilibrio, se tiene que:

$$(dG^t)_{T,P} = 0 \quad [15]$$

Por esto si una mezcla de especies químicas no se halla en equilibrio químico, cualquier reacción que ocurra a temperatura y presión constantes debe conducir a una disminución de la energía libre de Gibbs total del sistema; así que es posible escribir para G^t como una función de la coordenada de reacción (ϵ) y buscar el valor de ϵ que minimiza G^t , o diferenciar la expresión e igualarla a cero y resolver para ϵ . Este último procedimiento casi siempre se usa para reacciones simples y conduce al método de las constantes de equilibrio (Smith, Van Ness, 2003).

Mediante la expresión [15] y la ecuación [8] para una reacción química, se obtiene la expresión para la constante de equilibrio K (Smith, 1975):

$$\Delta G^0 = -RT \ln K \quad [16]$$

La constante de equilibrio es el valor numérico que se obtiene de la relación entre las concentraciones de productos y reactivos en el equilibrio de una reacción química (Brown, 1998).



La constante de equilibrio K de la reacción [17] se puede obtener mediante la siguiente ecuación:

$$K = K_p K_\alpha \quad [18]$$

Donde:

$$K_\alpha = \frac{\left[\frac{f'}{P_t} \right]_C^c \left[\frac{f'}{P_t} \right]_D^d}{\left[\frac{f'}{P_t} \right]_A^a \left[\frac{f'}{P_t} \right]_B^b} \quad [19]$$

$$K_p = \frac{(y_c p_t)^c (y_D p_t)^d}{(y_A p_t)^a (y_B p_t)^b} = K_y p_t^{c+d-(a+b)} \quad [20]$$

$$K_y = \frac{y_C^c y_D^d}{y_A^a y_B^b} \quad [21]$$

Sustituyendo [19], [20] y [21] en [18] se obtiene:

$$K = p_t^{c+d-(a+b)} K_\alpha K_y \quad [22]$$

En estas ecuaciones:

a, b, c, d : son los coeficientes estequiométricos de los reactivos y productos de la reacción [17].

y_A, y_B, y_C, y_D : son las composiciones de los reactivos y productos en la reacción [17].

p_t : es la presión total a la cual se encuentra el sistema.

f' : fugacidad del componente puro (Smith, 1975).

Si se asume que en una reacción en fase gaseosa, es válida la ley de los gases ideales, $f'/p_t=1$ en todos los casos y $K_\alpha=1$, entonces la ecuación [22] se transforma en (Smith, 1975):

$$K = 1 = p_t^{c+d-(a+b)} (1) K_y = K_y = \frac{y_C^c y_D^d}{y_A^a y_B^b} \quad [23]$$

La ecuación [23] permite la evaluación del cociente de composición K_y en términos de la constante del equilibrio K para reacciones en estado gaseoso. Este es un paso necesario hacia el cómputo de las conversiones en equilibrio a partir de los datos de la energía libre. Los pasos necesarios son: 1) Evaluar ΔG^0 , 2) Determinar la constante de equilibrio K a partir de ΔG^0 usando la ecuación [16], 3) Obtener K_y y finalmente 4) Calcular la conversión a partir de K_y (Smith, 1975).

2.9. Métodos de Contribuciones de Grupo.

Las propiedades fisicoquímicas de las moléculas dependen de la estructura molecular. Las moléculas se pueden entender como constituidas por grupos, o grupos funcionales, y cada grupo está constituido por un conjunto específicos de átomos (Joback, 1984; Solomons, 1999).

La Química Orgánica ha demostrado que estos grupos conservan sus propiedades sin importar el tipo de molécula al que pertenecen, e incluso conservan su integridad química sin importar el ambiente (moléculas o estructuras químicas) que rodea dicho grupo. Este principio empírico ha sido tomado por los métodos de contribuciones de grupo, que se fundamentan en que las propiedades de los compuestos son la suma de las propiedades individuales de los grupos que constituyen la molécula (Benson, 1976; Joback, 1984). En términos generales los métodos asumen que una propiedad P de interés, se puede expresar como:

$$P = \sum_i \alpha_i p_i \quad [24]$$

Donde:

p_i : Es un valor numérico asociado al grupo funcional “i”.

α_i : Es el número de veces en que está repetido el grupo funcional “i”. El parámetro p_i constituye lo que se denomina contribución del grupo (Benson, 1976; Lide, 1980).

2.9.1. Método de Contribuciones de Grupo de Benson (1976).

Benson en la década de los años 50, desarrolló un método de adición de grupo el cual se fundamenta en que cada grupo funcional posee una energía asociada, permitiendo así los cálculos de propiedades termodinámicas para moléculas complejas. Benson estimó la entalpía de formación y la entropía a la temperatura de 298K para cada grupo representativo. Los coeficientes a , b , c y d de la

ecuación de la capacidad calorífica en función de la temperatura fueron estimados en un rango de temperatura que va de 300 a 1000 K. Todas estas propiedades están modeladas como una función lineal de la suma de contribuciones de grupo. El método del Benson contiene alrededor de 250 grupos y 40 correcciones para estructuras de anillos.

Benson también estableció una metodología para calcular las propiedades termodinámicas de radicales libres. Para calcular las propiedades termodinámicas de un radical libre de tipo orgánico, se trata a esta molécula igual que una molécula neutra, es decir se deben descomponer los aportes de energía por grupos de átomos haciendo uso de estimaciones empíricas. La Tabla 1 muestra los valores para las propiedades entalpía de formación, entropía de formación y capacidad calorífica para diferentes temperaturas, de diferentes radicales libres de hidrocarburos.

El método de Benson es uno de los más precisos que existen, pero es complicado debido a que se requiere entender la nomenclatura usada por Benson para definir los grupos. En la Tabla 1 se presenta un listado con la nomenclatura usada por Benson para describir algunos grupos representativos; dicho listado facilita la comprensión y aplicación del método de Benson en el cálculo de las propiedades termodinámicas de los radicales libres complejos, este método de contribuciones de grupo también es usado en el cálculo de moléculas neutras, no obstante para el desarrollo del siguiente Trabajo Especial de grado, se utilizó sólo para la evaluación de las propiedades termodinámicas de los radicales libres, dado que no se conoce otro método más sencillo para tal fin. La nomenclatura usada por Benson para la identificación de los grupos funcionales en radicales libres orgánicos se puede observar mediante algunos ejemplos (Benson, 1976):

- $\left[\cdot C - (C)(H)_2 \right]$: Un radical carbono unido a dos átomos de hidrógeno ($\cdot CH_2$), que a su vez está unido a un átomo de carbono.

- $\left[C - (C^{\bullet})(H)_3 \right]$: Un átomo de carbono unido a tres átomos de hidrógeno (CH_3), que a su vez está unido a un radical carbono ($\bullet C$).
- $[C_B - C^{\bullet}]$: Un átomo de carbono perteneciente a un anillo benceno unido a un radical carbono.
- $[N_A - (N_A^{\bullet})(C)]$: Un átomo de nitrógeno (llamado nitrógeno azino) unido a un carbono mediante un enlace simple, y éste a su vez está unido por un doble enlace a otro átomo de nitrógeno radical ($N = N^{\bullet}$).

2.9.2. Método de Contribuciones de Grupo del Perry's Handbook.

En el Manual del Ingeniero Químico de Perry 1999, se encuentra una tabla de contribuciones de grupo para estimar las propiedades termodinámicas de cualquier molécula. Esta tabla, que se ha incluido como Tabla 2 en el presente Trabajo Especial, es un resumen de varios trabajos realizados acerca de la estimación de propiedades termodinámicas de moléculas mediante el método de contribuciones de grupo.

El método de adición de grupo desarrollado por Rihani y Doraiswamy reportados en el Manual de Perry, es sencillo y razonablemente preciso; en él se hace uso de los valores que aparecen en la Tabla 2 para determinar las constantes de la ecuación de la capacidad calorífica; la cual es un polinomio sencillo en función de la temperatura (Perry, 1999).

Verma y Doraiswamy (1965) propusieron que a través de la sumatoria del calor formación asociada a cada grupo funcional presente en la Tabla 2 se obtiene la energía de formación de la molécula en estudio utilizando adecuadamente la ecuación [4] (Perry, 1999).

La energía libre de formación se puede calcular con base en los calores estándar y las entropías de formación o a partir de las compilaciones de referencias estándar. Los métodos de estimación no son muy precisos. Van Krevelen y Chermin (1951) sugirieron una ecuación sencilla:

$$\Delta G^{\circ}_{fT} = A + BT \quad [25]$$

Donde A y B se determinan en base a las contribuciones de grupo considerando la hipótesis que se haga del ΔC_p , por ejemplo si durante la reacción permanece constante la capacidad calorífica y si la entalpía y la entropía de reacción no dependen de la temperatura se puede desarrollar la ecuación [25] que aparece en la tabla 2, en la que se tienen dos intervalos de temperatura: de 300 a 600 K y de 600 a 1500 K. Al utilizar la ecuación [25] y los valores de la tabla 2, ΔG°_{fT} se puede estimar con una precisión aproximada de $\pm 5 \text{ Kcal/mol}$ (Perry, 1999).

La Tabla 2 que se encuentra en el Perry's Handbook es una síntesis de los trabajos de Rihani y Doraiswamy para la estimación de las constantes de la capacidad calorífica; Verma y Doraiswamy para la estimación del calor de formación y de Van Krevelen y Chermin para la estimación de la energía libre de formación, usando el método de contribuciones de grupo; por esta razón la mayoría de los investigadores recurren a esta tabla para la estimación de las propiedades termodinámicas de moléculas complejas, ya que es mucho mas sencillo de comprender que otros métodos mas precisos, como el de Benson.

Tabla 1. Contribuciones de grupos para radicales libres y moléculas neutras del Método de Benson (1969).

Radical	ΔH_f°	S°	C_p°						
			300	400	500	600	800	1000	1500
$[\cdot\text{C}-(\text{C})(\text{H})_2]$	35.82	30.7	5.99	7.24	8.29	9.13	10.44	11.47	13.14
$[\cdot\text{C}-(\text{C})_2(\text{H})]$	37.45	10.74	5.16	6.11	6.82	7.37	8.26	8.84	9.71
$[\cdot\text{C}-(\text{C})_3]$	38.00	-10.77	4.06	4.92	5.42	5.75	6.27	6.35	6.53
$[\text{C}-(\cdot\text{C})(\text{H})_3]$	-10.08	30.41	6.19	7.84	9.40	10.79	13.02	14.77	17.58
$[\text{C}-(\cdot\text{C})(\text{C})(\text{H})_2]$	-4.95	9.42	5.50	6.95	8.25	9.35	11.07	12.34	14.25
$[\text{C}-(\cdot\text{C})(\text{C})_2(\text{H})]$	-1.90	-12.07	4.54	6.00	7.17	8.05	9.31	10.05	11.17
$[\text{C}-(\cdot\text{C})(\text{C})_3]$	1.50	-35.10	4.37	6.13	7.36	8.12	8.77	8.76	8.12
$[\text{C}-(\text{O})(\text{C})(\text{H})_2]$	6.1	36.4	7.9	9.8	10.8	12.8	15.0	16.4	—
$[\text{C}-(\text{O})(\text{C})_2(\text{H})]$	7.8	14.7	7.7	9.5	10.6	12.1	13.7	14.5	—
$[\text{C}-(\text{O})(\text{C})_3]$	8.6	-7.5	7.2	9.1	9.8	11.1	12.1	12.3	—
$[\text{C}-(\text{S})(\text{C})(\text{H})_2]$	32.4	39.0	9.0	10.6	12.4	13.6	15.8	17.4	—
$[\text{C}-(\text{S})(\text{C})_2(\text{H})]$	35.5	17.8	8.5	10.0	11.6	12.3	13.8	14.6	—
$[\text{C}-(\text{S})(\text{C})_3]$	37.5	-5.3	8.2	9.8	11.3	11.8	12.2	12.3	—
$[\cdot\text{C}-(\text{H})_2(\text{C}_d)]$	23.2	27.65	5.39	7.14	8.49	9.43	11.04	12.17	14.04
$[\cdot\text{C}-(\text{H})(\text{C})(\text{C}_d)]$	25.5	7.02	4.58	6.12	7.19	8.00	9.11	9.78	10.72
$[\cdot\text{C}-(\text{C})_2(\text{C}_d)]$	24.8	-15.00	4.00	4.73	5.64	6.09	6.82	7.04	7.54
$[\text{C}_d-(\cdot\text{C})(\text{H})]$	8.59	7.97	4.16	5.03	5.81	6.50	7.65	8.45	9.62
$[\text{C}_d-(\cdot\text{C})(\text{C})]$	10.34	-12.30	4.10	4.71	5.09	5.36	5.90	6.18	6.40
$[\cdot\text{C}-(\text{C}_B)(\text{H})_2]$	23.0	26.85	6.49	7.84	9.10	9.98	11.34	12.42	14.14
$[\cdot\text{C}-(\text{C}_B)(\text{C})(\text{H})]$	24.7	6.36	5.30	6.87	7.85	8.52	9.38	9.84	10.12
$[\cdot\text{C}-(\text{C}_B)(\text{C})_2]$	25.5	-15.46	4.72	5.48	6.20	6.65	7.09	7.10	6.94
$[\text{C}_B-\cdot\text{C}]$	5.51	-7.69	2.67	3.14	3.68	4.15	4.96	5.44	5.98
$[\text{C}-(\cdot\text{CO})(\text{H})_3]$	-5.4	66.6	12.74	14.63	16.47	18.17	21.14	23.27	—
$[\text{C}-(\cdot\text{CO})(\text{C})(\text{H})_2]$	-0.3	45.8	12.7	14.5	15.8	16.8	19.2	20.7	—
$[\text{C}-(\cdot\text{CO})(\text{C})_2(\text{H})]$	2.6	(23.7)	(11.5)	(12.8)	(14.3)	(15.5)	(17.4)	(18.5)	—
$[\cdot\text{N}-(\text{H})(\text{C})]$	(55.3)	30.23	5.38	5.67	5.89	6.09	6.60	6.97	7.74
$[\cdot\text{N}-(\text{C})_2]$	(58.4)	10.24	3.72	4.13	4.38	4.53	4.86	4.95	4.91
$[\text{C}-(\cdot\text{N})(\text{C})(\text{H})_2]$	-6.6	9.8	5.25	6.90	8.28	9.39	11.09	12.34	—
$[\text{C}-(\cdot\text{N})(\text{C})_2(\text{H})]$	-5.2	-11.7	4.67	6.32	7.64	8.39	9.56	10.23	—
$[\text{C}-(\cdot\text{N})(\text{C})_3]$	(-3.2)	34.1	4.35	6.16	7.31	7.91	8.49	8.50	—
$[\cdot\text{C}-(\text{H})_2(\text{CN})]$	(58.2)	58.5	10.66	12.82	14.48	15.89	18.08	19.80	—
$[\cdot\text{C}-(\text{H})(\text{C})(\text{CN})]$	(56.8)	40.0	9.1	11.4	13.1	14.4	16.3	17.4	—
$[\cdot\text{C}-(\text{C})_2(\text{CN})]$	(56.1)	19.6	8.8	10.4	11.3	12.3	13.7	14.5	—
$[\cdot\text{N}-(\text{H})(\text{C}_B)]$	38.0	27.3	4.6	5.4	6.0	6.4	7.2	7.7	8.6
$[\cdot\text{N}-(\text{C})(\text{C}_B)]$	42.7	(6.5)	(3.9)	(4.2)	(4.7)	(5.0)	(5.6)	(5.8)	(5.9)
$[\text{C}_B-\cdot\text{N}]$	-0.5	-9.69	3.95	5.21	5.94	6.32	6.53	6.56	—
$[\text{C}-(\text{CO}_2\cdot)(\text{H})_3]$	-47.5	71.4	14.4	17.8	20.4	23.1	27.1	29.6	—
$[\text{C}-(\text{CO}_2\cdot)(\text{H})_2(\text{C})]$	-41.9	49.8	15.5	18.5	20.3	22.3	27.5	27.2	—
$[\text{C}-(\text{CO}_2\cdot)(\text{H})(\text{C})_2]$	-39.0	-12.1	(4.5)	(6.0)	(7.2)	(8.0)	(9.3)	(10.1)	(11.2)
$[\text{C}-(\text{N}_A)(\text{H})_3]$	-10.08	30.41	6.19	7.84	9.40	10.79	13.02	14.77	17.58
$[\text{C}-(\text{N}_A)(\text{C})(\text{H})_2]$	-5.5	9.42	5.50	6.95	8.25	9.35	11.07	12.34	14.25
$[\text{C}-(\text{N}_A)(\text{C})_2(\text{H})]$	-3.3	-12.07	4.54	6.00	7.17	8.05	9.31	10.05	11.17
$[\text{C}-(\text{N}_A)(\text{C})_3]$	-1.9	-35.10	4.37	6.13	7.36	8.12	8.77	8.76	8.12
$[\text{N}_A-\cdot\text{C}]$	32.5	8.0	4.0	4.4	4.7	4.8	5.1	5.3	5.2
$[\text{N}_A-(\text{N}_A\cdot)(\text{C})]$	74.2	36.1	7.8	8.2	8.4	8.6	8.9	9.0	9.0

Tabla 2. Contribuciones de grupos para moléculas neutras del Manual del Ingeniero Químico Perry(1999).

Group	Heat capacity constants					Gibbs energy constants			
	a	$b \times 10^2$	$c \times 10^4$	$d \times 10^6$	$\Delta H_f^\circ, 298 \text{ K}$	300-600 K		600-1500 K	
						A	$B \times 10^2$	A	$B \times 10^2$
-CH ₃	0.6087	2.1433	-0.0852	0.1135	10.25	-10.943	2.215	-12.310	2.436
-CH ₂ -	0.3945	2.1363	-0.1197	0.2596	-4.94	-5.193	2.430	-5.830	2.544
 -CH 	-3.5232	3.4158	-0.2816	0.8015	-1.29	-0.705	2.910	-0.705	2.910
 -C- 	-5.8307	4.4541	-0.4208	1.263	0.62	1.958	3.735	4.385	3.350
H C=CH ₂	0.2773	3.4580	-0.1918	0.4130	15.02	13.737	1.655	12.465	1.762
C-CH ₂	-0.4173	3.8857	-0.2783	0.7364	20.50	16.467	1.915	16.255	1.966
H H C=C (cis)	-3.1210	3.0860	-0.2359	0.5504	17.96	17.663	1.965	16.180	2.116
H H C=C (trans)	0.9377	2.9904	-0.1749	0.3918	17.83	17.187	1.915	15.815	2.062
C=C	-1.4714	3.3842	-0.2371	0.6063	-20.10	20.217	2.295	19.584	2.354
C=C	0.4736	3.5183	-0.3150	0.9205	30.46	25.135	2.573	25.135	2.573
H H C=C=CH ₂	2.2400	4.2896	-0.2566	0.5906	49.47	49.377	1.035	48.170	1.208
C=C=CH ₂	2.6308	4.1658	-0.2845	0.7277	51.30	51.084	1.474	51.084	1.474
H H C=C=C	-3.1249	6.6843	-0.5766	1.743	55.04	52.460	1.483	52.460	1.483
≡CH	27.10	27.048	-0.765	26.700	-0.704
≡C-	27.38	26.938	-0.525	26.555	-0.550
Conjugated alkene groups									
-CH ₂	(10.1)	5.437	0.675	4.500	0.832
H C	(12)	7.407	1.035	6.980	1.085
C	9.152	1.505	10.370	1.305
CH	-1.4572	1.9147	-0.1233	0.2985	3.27	3.047	0.615	2.505	0.706
C	-1.3883	1.5159	-0.069	0.2659	5.55	4.675	1.150	5.010	0.985
C	0.1219	1.2170	-0.0855	0.2122	4.48	3.513	0.568	3.998	0.485
Cycloparaffin-ring correction									
Three-membered	-3.5320	-0.0300	0.0747	-0.5514	24.13	23.458	-3.045	22.915	-2.966
Four-membered	-8.6550	1.0780	0.0425	0.0250	18.45	10.73	-2.65	10.60	-2.50
Five-membered									
Pentane	-12.2850	1.8609	-0.1037	0.2145	5.44	4.275	-2.350	2.665	-2.182
Pentene	-6.8813	0.7818	-0.0345	0.0591	-3.657	-2.395	-3.915	-2.250
Six-membered									
Hexane	-13.3923	2.1392	-0.0429	-0.1865	-0.76	-1.128	-1.635	-1.930	-1.504
Hexene	-8.0238	2.2239	-0.1915	0.5473	-9.102	-2.045	-8.810	-2.071
Branching in paraffins									
Side chain with two or more carbon atoms	0.80	1.31	0	1.31	0
Three adjacent -CH groups	-1.2	-2.13	0	2.12	0

*Units: Cp, kcal/(mol·K); ΔH_{f,298}^o, kcal/mol; ΔG_f^o, kcal/mol. To convert kilocalories per mole to British thermal units per pound-mole, multiply by 1800. To convert kilocalories per mole-kelvin to British thermal units per pound-mole-degree Fahrenheit, multiply by 1000.

CAPÍTULO III

MARCO METODOLÓGICO

En este capítulo se presenta la metodología que se desarrolló con el fin de cumplir los objetivos planteados en el presente Trabajo Especial de Grado.

3.1. Programa QBTherm[®]

La herramienta que se utilizó para el desarrollo de este estudio, fue un programa computacional denominado QBTherm[®], creado por Dr. Iván Machín, Tutor Industrial del presente Trabajo Especial de Grado. Este programa permite realizar los cálculos de propiedades termodinámicas de moléculas modelo de compuestos presentes en crudos pesados, extrapesados, residuales y sus radicales libres, y el mismo se basa en la aplicación del método de contribuciones de grupo. También permite calcular las propiedades termodinámicas para las reacciones químicas, en particular, el cambio de Energía Libre de Gibbs. Este programa posee actualmente una base de datos con las propiedades termodinámicas y características de más de 560 compuestos orgánicos e inorgánicos.

Las secuencias lógicas de cálculo se crearon en lenguaje Fortran, a las cuales se puede acceder mediante una interfase en Power Point. La base de datos ha sido ampliada progresivamente a medida que investigadores y tesis han utilizado el programa como herramienta para cálculos termodinámicos.

El programa QBTherm[®] ha sido modificado durante el desarrollo del presente Trabajo Especial de Grado con el fin de adaptarlo a las aplicaciones que se requirieron para lograr los objetivos planteados y mejorar su desempeño, así como ampliar su base de datos con las moléculas complejas que se estudiaron.

3.2. Procedimiento de cálculo de las propiedades termodinámicas.

En esta sección se explican las bases termodinámicas del cálculo de las propiedades que se requirieron para el estudio de las 256 reacciones elementales de la red propuesta para el proceso AQC[®] y los procedimientos de cálculo a través del uso de la herramienta QBTherm[®] para agilizar los cálculos y almacenar de manera adecuada la información obtenida.

3.2.1 Consideraciones para la simplificación del procedimiento de cálculo.

La mayoría de las reacciones del modelo cinético desarrollado por Carvajal (2007) implican la ruptura de un enlace carbono-hidrogeno (C-H) con generación del radical orgánico y el radical hidrógeno atómico, o un fragmento ligeramente mayor que el radical hidrógeno atómico.

Estas reacciones tienen la forma:



Donde:

$R - H$: es un hidrocarburo complejo o pesado

R^{\bullet} : es un radical libre de gran complejidad

H^{\bullet} : es el radical libre hidrógeno.

Obsérvese que los compuestos RH y R^{\bullet} son en fase sólida. Esto significa que los cálculos termodinámicos adquieren una gran complejidad respecto a los cálculos en fase gaseosa. Esto es debido a que den ser corregidos los valores en estado gaseoso para ser convertidos en estado líquido mediante el uso (o cálculo) de su calor de vaporización para luego convertirlos al estado sólido mediante el uso (o cálculo) de el calor de fusión. Estos parámetros (calor de fusión y vaporización) son de gran

complejidad, y debido al gran número de moléculas los cálculos son extremadamente complejos y poco prácticos de realizar en un tiempo razonable.

En este tipo particular de reacciones es posible hacer una simplificación de los cálculos termodinámicos, sin esto, serían en extremo complejos. Esta aproximación asume que tanto las especies $R-H$ y R^\bullet son muy parecidas en cuanto a su estructura y difieren en apenas un hidrógeno o, a lo sumo, en un fragmento ligeramente mayor al hidrógeno radicalar (por ejemplo $\bullet CH_3$, $\bullet C_2H_5$, etc.). En otras palabras, el calor de reacción para $R-H$ y R^\bullet en fase sólida es prácticamente igual a la fase gaseosa. Por lo tanto, el calor de la reacción [26] es por definición igual a:

$$\Delta H_{rs} = \Delta H_f H^\bullet(g) + \Delta H_f R^\bullet(s) - \Delta H_f RH(s) \quad [27]$$

Pero, bajo la aproximación usada en este trabajo se puede expresar como:

$$\Delta H_f(R^\bullet(s)) - \Delta H_f(RH(s)) \approx \Delta H_f(R^\bullet(g)) - \Delta H_f(RH(g)) \quad [28]$$

Donde:

ΔH_{rs} : Entalpía de reacción [26].

$\Delta H_f(H^\bullet(g))$: Entalpía de formación del radical hidrógeno en estado gaseoso.

$\Delta H_f(R^\bullet(s))$: Entalpía de formación del radical hidrocarburo en estado sólido.

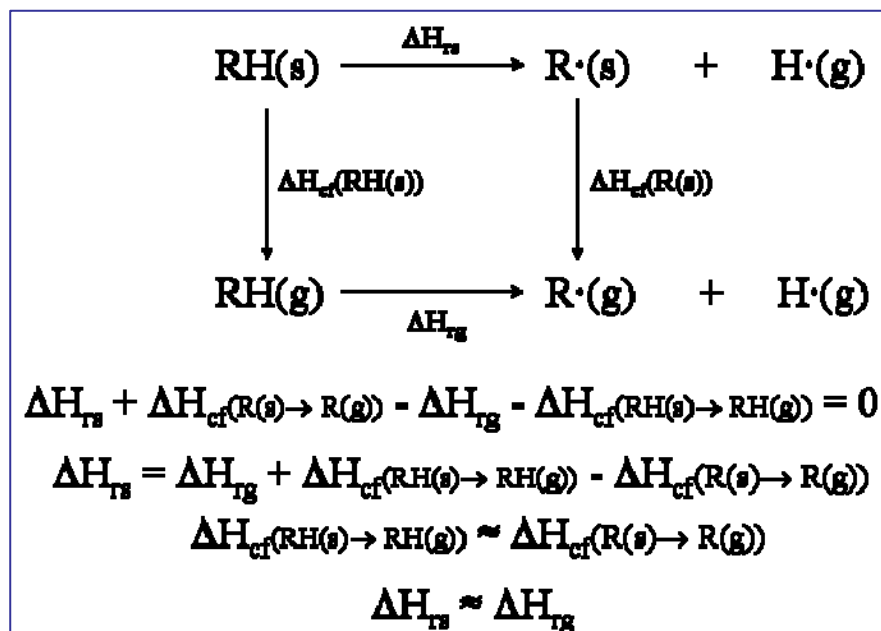
$\Delta H_f(RH(s))$: Entalpía de formación del hidrocarburo en estado sólido.

Esto significa que es suficiente con calcular los sistemas en fase gaseosa sin necesidad de evaluar los calores de fusión y evaporación de RH y R^\bullet , lo cual se puede entender mejor observando la Figura 9, donde se muestra un ciclo

termodinámico para el proceso de la reacción [26], que permite demostrar la factibilidad de esta aproximación.

La demostración $\Delta H_{rs} \approx \Delta H_{rg}$ permitió calcular las propiedades termodinámicas de las moléculas en estado gaseoso, ya que así se evaluó de manera más rápida que si se consideraran las moléculas en estado sólido o líquido, porque estos estados físicos de las moléculas requerirían procedimientos de cálculo mucho más complejos, lo cual no es práctico para el propósito de estudiar 256 reacciones elementales.

Figura 9. Demostración de que en sistemas donde se producen fragmentos radicales pequeños, la entalpía de reacción gaseosa es igual a la reacción en fase sólida.



En la figura:

ΔH_{cf} : Entalpía de cambio de fase.

ΔH_{rg} : Entalpía de reacción en estado gaseoso.

En las transformaciones isotérmicas reversibles, la variación de Entropía esta expresada por:

$$\Delta S_{sist} = \int dS = \int \frac{dQ}{T} = \frac{1}{T} \int dQ = \frac{Q}{T} \quad [29]$$

Donde:

ΔS_{sist} : Cambio de Entropía del sistema en estudio

dQ : Es el cambio calorífico del sistema

Q : Es el calor absorbido o liberado por el sistema.

El cambio de una fase a otra, por ejemplo de hielo a agua ($H_2O_{(s)} \Leftrightarrow H_2O_{(l)}$), puede realizarse de forma reversible y a temperatura constante. En estas condiciones se puede aplicar la ecuación [29]. Se asume también que los cambios de fase ocurren generalmente a presión constante. Puesto que en estas transiciones no se consume trabajo, salvo el que pueda realizarse contra la presión atmosférica, Q queda determinado por la entalpía del cambio de fase, y la entropía del sistema queda expresada como (Klotz, 1977):

$$\Delta S_{cf} = \frac{\Delta H_{cf}}{T} \quad [30]$$

Con la expresión de entropía dada por la ecuación [21] y si se consideran las mismas aproximaciones (aplicadas para el cálculo de la entalpía), en el cálculo de la entropía de la reacción [26], la entropía esta dada por la siguiente ecuación:

$$\Delta S_{rs} = S_f H^*(g) + S_f R^*(s) - S_f (RH(s)) \quad [31]$$

Bajo la aproximación propuesta en el presente trabajo, se puede usar:

$$S_f (R^*(s)) - S_f (RH(s)) \approx S_f (R^*(g)) - S_f (RH(g)) \quad [32]$$

Donde:

ΔS_{rs} : Entropía de reacción en el estado sólido.

$S_f(H^\bullet(g))$: Entropía de formación del radical hidrógeno en estado gaseoso.

$S_f(R^\bullet(s))$: Entropía de formación del radical hidrocarburo en estado sólido.

$S_f(RH(s))$: Entropía de formación del hidrocarburo en estado sólido.

La ecuación [32] indica que se pueden calcular las propiedades termodinámicas de los sistemas en fase gaseosa sin necesidad de evaluar la entropía de fusión y evaporación de RH y R^\bullet .

3.2.2. Codificación de las moléculas que se encuentran en el modelo cinético del proceso AQC[®].

Las moléculas neutras y las de radicales libres en estudio, se nombraron usando la misma nomenclatura utilizada por Carvajal (2007) en su Trabajo Especial de Grado. Esta nomenclatura consiste en asignar las letras Ss, Ar, Rr y As a las 143 moléculas neutras pertenecientes a los grupos de hidrocarburos Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos respectivamente, a cada una de estas moléculas se le asignará un número entero que representa la cantidad de moléculas perteneciente a cada grupo de hidrocarburos.

Los radicales libres presentes en las 256 reacciones han sido designados por Carvajal (2007) como I, seguidos por un número entero. Existe un total de 143 radicales libres, a los cuales se les asignó un código único para introducir sus datos en el programa. También se cuantificaron los carbonos e hidrógenos presentes en cada radical libre y la cantidad de heteroátomos, tales como oxígeno, azufre y nitrógeno.

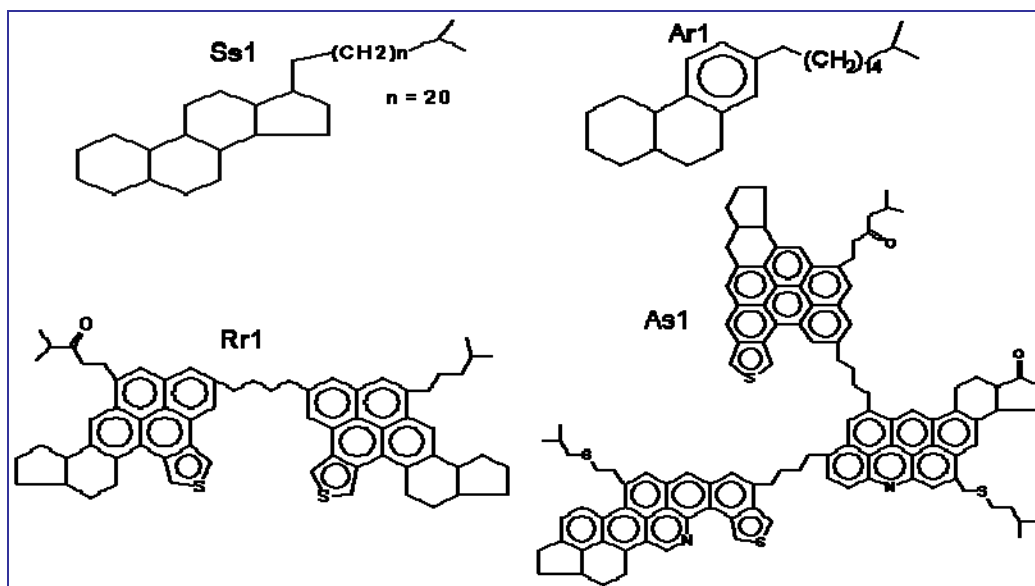
Se le asignó a cada molécula un código numérico único para poder identificarlas inequívocamente dentro del programa QBTherm[®], como se puede observar en la Tabla N° 3.

Tabla N° 3: Identificación de las primeras moléculas neutras de cada grupo SARA.

Código	Nomenclatura	C	H	N	O	S
564	Ss1	41	76			
582	Ar1	32	54			
600	Rr1	66	68		1	2
633	As1	115	106	2	2	4

En la figura 10 se presentan las estructuras de las primeras moléculas de cada grupo de hidrocarburos SARA con sus respectivos nombres, como aparecen en la tabla N° 3.

Figura 10. Estructura de las moléculas representativas de cada grupo de hidrocarburos SARA.



3.2.3. Cálculos de propiedades termodinámicas.

Realizar los cálculos termodinámicos para un total de 280 moléculas neutras y radicales libres, así como también la evaluación de la Energía Libre de Gibbs para

256 reacciones elementales, requirió de un largo trabajo que se facilitó con el uso del programa QBTherm[®]. A continuación se describe la estrategia que se aplicó para realizar estos cálculos con la ayuda del programa.

Por las razones antes expuestas, para la determinación de las propiedades termodinámicas de una molécula, como entalpía estándar de formación (ΔH_f°), energía libre estándar de formación (ΔG_f^0) y la capacidad calorífica, se consideró que la molécula en estudio está en el estado de gas ideal.

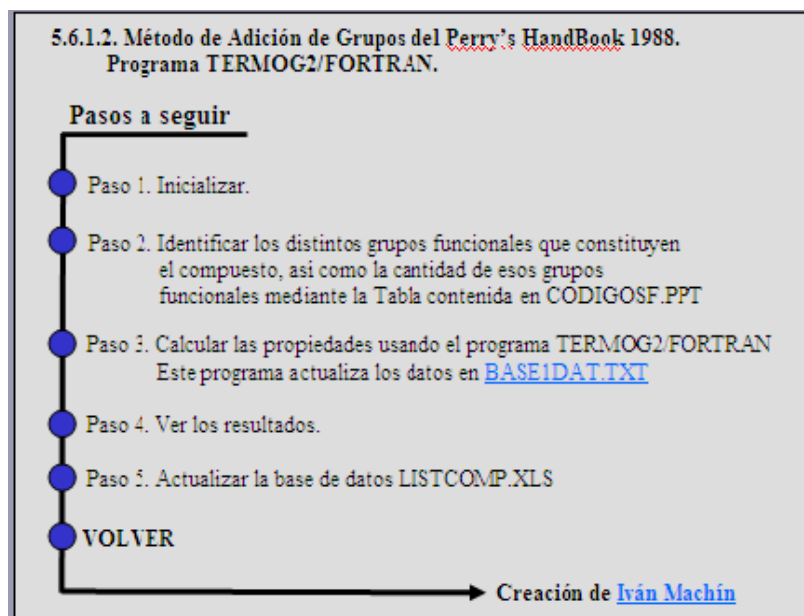
3.2.3.1. Propiedades termodinámicas de las moléculas neutras

El método de contribuciones de grupos que se encuentra en el Manual del Ingeniero Químico de Perry (1999), es el usado por el programa TERMOG2/FORTRAN (que se encuentra en QBTherm[®]), para los cálculos termodinámicos de las moléculas neutras.

En el caso de las moléculas neutras de cada uno de los grupos de hidrocarburos SARA, el cálculo termodinámico a través del programa QBTherm[®], se llevó a cabo de la siguiente forma:

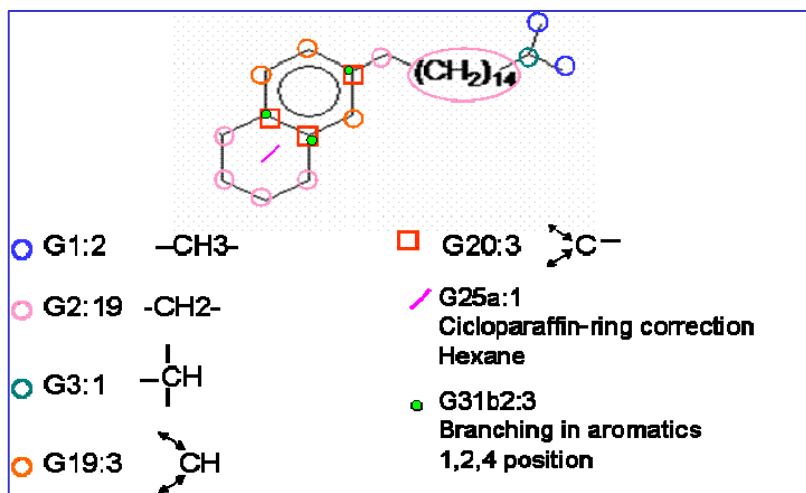
1. Se introdujo la fórmula molecular del compuesto en estudio en el programa QBTherm[®]. En la figura 11 se muestra la interfase del programa para el uso del método de contribuciones de grupo de Rihani-Doraiswamy presente en el Manual del Ingeniero Químico de Perry y los pasos a seguir.
2. Se identificaron los grupos funcionales de cada molécula así como la cantidad de veces que aparece dicho grupo en la molécula; se puede observar un ejemplo en la figura 12.

Figura 11. Interfase para usar el método de contribuciones de grupos del Manual del Ingeniero Químico Perry en el programa QBTherm®



3. La cantidad de cada uno de los grupos funcionales identificados para la molécula en el paso 2, se incluyeron en el programa mediante la tabla contenida en CODIGOSF.PPT, que se visualizan en la figura 13.

Figura 12. Ejemplo de la identificación de grupos funcionales de una molécula.



4. Si estos grupos no han sido correctamente elegidos, el programa da una señal de error, ya que la cantidad de cada uno de los elementos químicos que contenga la molécula en la fórmula condensada debe ser igual a la de cada uno de estos elementos colocados en los grupos funcionales que se encuentran en el programa QBTherm[®].

Figura 13. Identificación de los grupos que conforman la molécula en estudio, mediante el programa QBTherm[®].

$-\text{CH}_3$	<u>G1</u>	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{C}=\text{C} \\ \quad \\ \text{(trans)} \quad \text{H} \end{array}$	<u>G8</u>
$-\text{CH}_2-$	<u>G2</u>	$\begin{array}{c} \quad \quad \quad \text{H} \\ \quad \quad \quad \\ \quad \quad \quad \text{C}=\text{C} \\ \quad \quad \quad \end{array}$	<u>G9</u>
$\begin{array}{c} \\ -\text{CH} \\ \end{array}$	<u>G3</u>	$\begin{array}{c} \quad \quad \quad \quad \\ \quad \quad \quad \text{C}=\text{C} \\ \quad \quad \quad \quad \end{array}$	<u>G10</u>
$\begin{array}{c} \\ -\text{C} \\ \end{array}$	<u>G4</u>	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{C}=\text{C}=\text{CH}_2 \\ \end{array}$	<u>G11</u>
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{C}=\text{CH}_2 \\ \end{array}$	<u>G5</u>	$\begin{array}{c} \quad \quad \quad \quad \\ \quad \quad \quad \text{C}=\text{C}=\text{CH}_2 \\ \quad \quad \quad \quad \end{array}$	
$\begin{array}{c} \quad \quad \quad \\ \quad \quad \quad \text{C}=\text{CH}_2 \\ \quad \quad \quad \end{array}$	<u>G6</u>	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \quad \quad \text{H} \\ \quad \quad \quad \\ \text{C}=\text{C}=\text{C} \\ \quad \quad \quad \end{array}$	<u>G13</u>
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \quad \quad \text{H} \\ \quad \quad \quad \\ \text{C}=\text{C} \\ \quad \quad \quad \\ \text{(cis)} \end{array}$	<u>G7</u>	$\equiv \text{CH}$	<u>G14</u>
		$\equiv \text{C}-$	<u>G15</u>

5. Después de contabilizar los grupos funcionales que conforman la molécula, el programa QBTherm[®] calcula las propiedades termodinámicas: capacidad calorífica usando la ecuación [3]; entalpía de formación según la ecuación [4] y los valores de la energía libre de formación asociada a cada grupo funcional que se encuentran en la tabla N° 2 del marco teórico del presente trabajo, la entropía de formación se obtuvo de la ecuación [8] y los resultados de las propiedades termodinámicas de las moléculas neutras en estudio se almacenaron

automáticamente en el archivo BASE1DAT.TXT. Los resultados obtenidos se observan en el programa como se muestra en la figura 14.

Figura 14. Interfase visual que muestra los resultados obtenidos para las propiedades termodinámicas.

```

ThermoG2.out - Bloc de notas
Archivo Edición Formato Ver Ayuda
| RESULTADOS DEL PROGRAMA THERMOG2
PROGRAMA CREADO POR IVAN MACHIN
CALCULO DE LAS PROPIEDADES TERMODINAMICAS
DE UN COMPUESTO ORGANICO GASEOSO
COMPUESTO=C2H6
ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-20.50000
ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
56.71667
CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL
A= 1.217400
B= 4.2865999E-02
C= -1.7039998E-05
D= 2.2700000E-09
CP A 25°C
CP0= 12.54332
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL
A= 3.907592
B= 3.5296805E-02
C= -9.7958664E-06
D= -99307.68
CP A 25°C
CP0= 12.44339
%ERROR= 0.1485061
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy
2 G1
  
```

3.2.3.2. Desarrollo de un método que combina los métodos de contribuciones de grupo para moléculas neutras y el de Benson para radicales libres.

Con el objetivo de agilizar los cálculos de las propiedades termodinámicas de los radicales, se creó un método que permitiera combinar las ventajas del método que se encuentra en el Manual del Ingeniero Químico y las del método de Benson. El método de Benson es el único que se conoce para el cálculo de propiedades de radicales libres, sin embargo, su aplicación es más complicada que el método de

contribuciones de grupo que se encuentra en el Manual del Ingeniero Químico de Perry; como ambos métodos se basan en el mismo principio de contribuciones de grupo, se puede hacer una combinación de manera de calcular las propiedades de los grupos que se encuentran en la parte neutra de la molécula usando las propiedades tabuladas en método de contribuciones de grupo del Manual del Ingeniero Químico de Perry (Tabla N°2); la parte radicalar de la molécula se puede calcular usando las tablas de propiedades del método de Benson para radicales libres (Tabla N° 1).

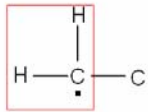
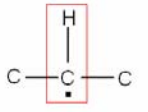
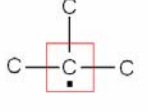
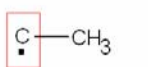
Este método combinado, se desarrolló en el programa QBTherm®, y se probó comparando con datos termodinámicos de radicales orgánicos conocidos y utilizando un programa de química computacional basado en mecánica cuántica denominado ALQUEMY2000 (Método PM3).

Los resultados obtenidos de las comparaciones entre los datos tabulados de una molécula conocida y los de la misma molécula calculados con el nuevo método combinado arrojaron una desviación de aproximadamente 10 %, lo que permite establecer el método combinado como metodología para el cálculo de las propiedades termodinámicas de los radicales orgánicos.

3.2.3.3. Propiedades termodinámicas de radicales libres.

Para los radicales libres, se utilizó el método de contribuciones de grupo de Benson (Tabla 1) conjuntamente con los datos de la tabla que se encuentra en el Manual de Ingeniero Químico de Perry (Tabla 2); esta metodología se explicó más detalladamente en la sección anterior. Se creó en el programa QBtherm® una base de datos para facilitar el cálculo de dichos radicales.

Figura 15. Identificación de los grupos que conforman el segmento radicalar de la molécula en estudio, mediante el programa QBTherm®.

Nomenclatura de Benson	Estructura del radical	Código de grupo (introducción de cantidad de grupo)
[·C-(C)(H)2]		R1
[·C-(C)2(H)]		R2
[·C-(C)3]		R3
[C-(C·)(H)3]		R4

En la figura 15 se observa la nomenclatura usada por Benson para describir los grupos representativos en un radical libre, en la columna estructura del radical se observa dicha nomenclatura expresada como una estructura química que permite entenderla mejor, usando recuadros en color rojo para señalar la parte perteneciente al radical de la molécula; la siguiente columna permite la introducción de la cantidad de grupos funcionales radicales de cada tipo que se encuentran en la molécula en estudio, lo cual se hace mediante el hipervínculo que lleva a los grupos funcionales de Benson para el programa QBTherm®.

3.2.3.3. Almacenar los datos de las moléculas neutras y radicales libres en la base de datos.


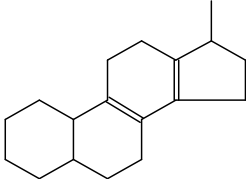
Se almacenaron en una hoja de Excel los datos de las moléculas anteriormente estudiadas junto con el código correspondiente, su fórmula molecular condensada, y estado físico como se visualiza en la tabla 4.

Tabla 4. Incorporación de los datos de la molécula neutras y radicalares en la hoja de Excel del programa QBTherm®.

Código	Formula Condensada	Estructura	Nombre IUPAC	Nombre Común	REF
564	C41H76(G)	Si	Ss1	IDEM	QB_Therm1
589	C31H46(G)	Si	Ar8	IDEM	QB_Therm1
615	C32H30S(G)	Si	Rr16	IDEM	QB_Therm1
638	C32H24S(G)	Si	As6	IDEM	QB_Therm1
734	·C32H31OS	Si	I34	IDEM	QB_Therm1

Para almacenar de forma completa toda la información referente a las moléculas orgánicas estudiadas en este Trabajo especial de Grado, se requiere la estructura de la molécula, la cual se dibuja usando el programa CHEMWIND®, y se agrega a un documento Word en el que se encuentran almacenadas estas estructuras, ordenadas en orden alfabético y que también poseen la información acerca de su código correspondiente, fórmula condensada y el nombre dado como se puede observar en la figura 16.

Figura 16. Estructura de cada moléculas neutras y radicales estudiadas con el programa QBTherm®.

CODIGO	FORMULA	NOMBRE	REF.
740	·C3H7 (G)	I40	
			
*			
CODIGO	FORMULA	NOMBRE	REF.
577	C18H26	Ss14	
			

3.2.3.4. Determinación de los cambios de Energía Libre de las reacciones en estudio.

Conocidas las propiedades termodinámicas de cada uno de los componentes, que participan en las diversas reacciones que conforman la red preliminar propuesta, se procede a la determinación de los cambios termodinámicos asociados a cada una de las 256 reacciones que se estudiaron en la presente Trabajo de Grado.

Se calcularon los cambios de las propiedades termodinámicas de las reacciones, a través de los cálculos de la entalpía de reacción (ΔH_r), entropía de reacción (ΔS_r), y la Energía Libre de Gibbs (ΔG_r), mediante el uso de las ecuaciones [10], [11] y [12] respectivamente las cuales se encuentran en el marco teórico de este Trabajo Especial de Grado. El cálculo de la energía libre de reacción permitió identificar la espontaneidad o no espontaneidad de cada una de dichas reacciones. La temperatura usada en los cálculos es 430°C, ya que es la temperatura a la cual se lleva a cabo el proceso de Aquaconversion[®].

3.3. Análisis de las reacciones que resulten ser no espontáneas.

Para las 256 reacciones elementales que se estudiaron, se tomaron en consideración aquellas que resultaron ser no espontáneas, y se dividieron en dos grupos, el grupo A esta conformada por reacciones que poseen una molécula neutra en los reactantes y que originan dos radicales; y las reacciones del grupo B, que están conformadas por reacciones donde una molécula radical reacciona para obtener como productos una molécula neutra mas otro radical, para las cuales se propusieron nuevas rupturas de enlaces de las moléculas de dichas reacciones. A los grupos A y B se les aplicó una metodología que permitió nuevas rupturas de moléculas para formar

nuevas reacciones, se tomaron reacciones de manera aleatoria que representara cada grupo tanto, del A como del B, para los Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos y se estudió su espontaneidad; calculando para ello sus propiedades termodinámicas como entropía, entalpía y capacidad calorífica. Se finalizó con el cálculo del ΔH_r , ΔS_r y el cambio de Energía Libre de Gibbs (ΔG_r), para estudiar factibilidad termodinámica de las nuevas reacciones. Sin embargo, este estudio no fue llevado a cabo para todas las reacciones no espontáneas resultantes ya que el número de ellas requiere de un trabajo muy extenso como se verá en el Capítulo IV del presente Trabajo Especial de Grado.

3.4. Depuración de la red de reacciones propuesta como mecanismo del proceso AQC[®].

Después de haber realizado los cálculos termodinámicos para cada una de las reacciones y conocida la factibilidad termodinámica de las mismas, se propuso la red de reacciones, que contiene sólo las reacciones espontáneas. Se expone la propuesta mediante tablas, donde se reportan los datos de entropía, entalpía y cambio de energía libre para cada reacción, este mecanismo simplificado se puede observar en la sección de los apéndices, presentes en este Trabajo Especial de Grado.

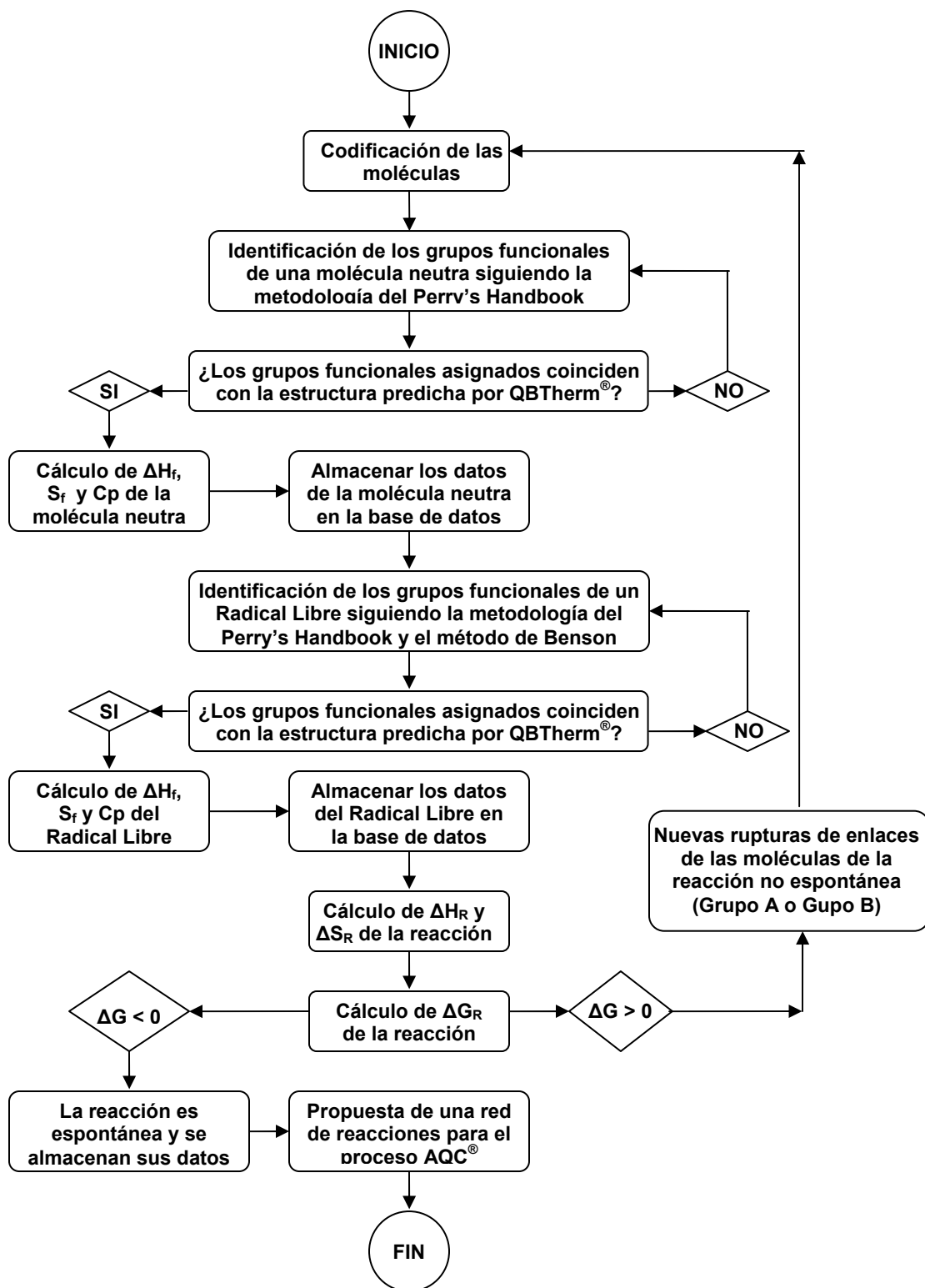
3.5. Conversión máxima posible del proceso AQC[®] mediante la red de reacciones planteada.

Para el cálculo de la conversión máxima se procedió a plantear una reacción global ideal, la cual esta conformada por las propiedades termodinámicas de cada uno de las moléculas que se encuentran como reactantes y como productos finales de la familia de hidrocarburos pertenecientes al grupo SARA y otros productos como H_2 ,

H_2S , CO , entre otros, del mecanismo de reacción de AQC[®] propuesto por Carvajal (2007). La ecuación global se balanceó estequiométricamente. Por ejemplo, para el caso del cálculo del calor de reacción, se sumaron todas las entalpías de formación de las moléculas asociadas con el reactante (moléculas representativas de la carga del proceso de AQC[®]), y luego, se sumaron los calores de formación de las moléculas neutras de los productos del proceso de AQC[®]. Finalmente, se restan estos dos valores (productos menos reactantes) para obtener el calor de reacción del proceso hipotético ideal neto del proceso de AQC[®] (bajo una aproximación térmica o tipo visbreaking). Este procedimiento se repite con las entropías de formación. Con el calor de reacción y entropía de reacción se calcula la Energía Libre de Gibbs de la reacción, con esto se calcula la constante de equilibrio (K_{eq}) a partir de la ecuación [16] (Capítulo II de este trabajo).

A continuación se presenta en la figura 17 un flujograma que resume la metodología utilizada para el logro de los objetivos planteados en esta Tesis de Grado. Teoría

Figura N° 17: Flujograma de la Metodología a seguir en el presente Trabajo Especial.



CAPITULO IV

ANÁLISIS DE RESULTADOS

En este capítulo se presentan y analizan los resultados obtenidos del estudio termodinámico realizado a la red de reacciones propuesta como mecanismo del proceso AQC[®]; estos resultados se exponen en tablas y están divididos en 8 secciones que se presentan a continuación. En las primeras secciones que van desde la 4.1 a la 4.4, se encuentran el análisis de las propiedades termodinámicas de Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos respectivamente; en la 4.5 y 4.6 se analizan las reacciones espontáneas y las no espontáneas, lo que conlleva a la depuración del mecanismo del proceso AQC[®] en la sección 4.7 y se estudia su conversión máxima en la sección 4.8.

4.1. Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas de compuestos saturados.

Como se explicó en el Capítulo III, las propiedades termodinámicas de las todas las moléculas neutras fueron calculadas utilizando el método de contribuciones de grupo, específicamente el que se encuentra en el Manual del Ingeniero Químico de Perry (1999) y utilizando la herramienta computacional QBTherm[®]. En la tabla N°5 se exponen los resultados obtenidos y de entalpía, entropía y Energía libre de Gibbs a 430°C, y de las reacciones que involucran moléculas de tipo saturadas.

TablaN°5: Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Saturadas.

		ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
Código	Reacción	Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
1	Ss1=I1+I2	73,84	64,8	28,0
2	I2=Ss2+H	40,1	15,9	29,5
3	I1+H=Ss3	-95,65	-43,0	-64,79
4	H+H=H2	-105,64	-26,73	-86,84
5	Ss1=I3+CH3	80,21	39,62	52,35

Tabla N°5 (Continuación)

		ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
Código	Reacción	Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
6	I3+H=Ss4	-92,88	-28,79	-72,63
7	CH3+H=CH4	-105,36	-32,24	-82,69
8	Ss5=I1+I4	73,82	64,45	28,50
9	I4=Ss6+H	40,43	31,66	18,17
10	Ss5=I5+CH3	80,20	39,60	52,36
11	I5+H=Ss7	-51,53	-28,79	-31,29
12	Ss3=I6	68,96	65,99	22,56
13	I6+H=I7	-95,67	-75,10	-42,86
14	I7=Ss8+H	42,43	30,44	21,03
15	Ss8=I8	74,21	82,01	16,54
16	I8+H=I9	-88,15	-57,16	-47,96
17	I9=Ss9+H	34,92	12,49	26,14
18	Ss9=I10	72,32	63,18	27,90
19	I10+H=I11	-92,88	-59,99	-50,69
20	I11=Ss10+H	37,92	271,11	-152,71
21	Ss10=I12+I13	73,83	64,46	28,50
22	I12+H=Ss12	-95,66	-43,90	-64,80
23	I13+H=Ss11	-95,66	113,83	-175,70
24	Ss3=I14+H	90,20	11,59	82,05
25	I14=Ss13+H	43,96	82,42	-13,99
26	Ss13=I15+H	68,95	19,35	55,35
27	I15=Ss14+H	69,36	83,50	10,65
28	Ss14=I16+H	48,92	59,89	6,81

Al observar las Energías Libres de Gibbs de cada reacción se tiene que sólo 14 de las 28 reacciones consideradas resultaron ser espontáneas a la temperatura de 430°C, es decir, que el 50% de las reacciones que involucran moléculas saturadas son espontáneas (Gráfico N° 1).

Este resultado se debe a que las reacciones planteadas son simples y no involucran más de dos reactivos o dos productos, lo que no sucede en la realidad; es decir, que pueden existir reacciones con formación de más de dos productos y reacciones con más de dos reactivos. Esta hipótesis corresponde al hecho de que varias de las reacciones planteadas son de craqueo de moléculas y se sabe que dichas reacciones son espontáneas de acuerdo con los datos experimentales de otros investigadores (Poutsma, 1990), y sin embargo el estudio termodinámico realizado muestra que no son espontáneas, como en el caso de las reacciones 1 y 8 (tabla N° 5), debido a que es necesario que exista un radical de tamaño pequeño, ya sea H^\bullet o CH_3^\bullet que promueva la ruptura de las moléculas, y dar origen a reacciones de craqueo espontáneas.



Gráfico N° 1: Porcentaje de reacciones espontáneas que involucran saturados.

4.2. Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Aromáticas.

En la tabla N° 6 se presentan las propiedades termodinámicas calculadas para las reacciones que involucran moléculas aromáticas. En este caso, las reacciones espontáneas corresponden a las de formación de moléculas neutras a partir de radicales libres de tamaño similar y que difieren sólo en un hidrógeno.

Tabla N°6: Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Aromáticas.

Código	Reacción	ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
29	I16=Ar14+H	33,54	-32,03	56,07
30	Ar14=I17+H	75,39	10,82	67,78
31	I17=Ar15+H	41,36	99,73	-28,76
32	Ar15=I18+H	76,22	21,30	61,25
33	I18=Ar16+H	46,03	2,07	44,57
34	Ar16=I19+H	77,48	21,08	62,65
35	I19=Ar17+H	54,37	31,21	32,43
36	Ar17=I20+H	67,45	-114,86	148,22
37	I20=Ar18+H	45,61	167,47	-72,14
38	Ar1=I21+I22	58,60	59,73	16,61
39	I22=Ss15+H	40,42	15,59	29,45
40	I21+H=Ar2	-81,54	-39,41	-53,83
41	Ar2=I23+H	77,57	21,11	62,73
42	I23=Ar3+H	54,27	31,18	32,34
43	Ar3=I24+H	76,82	10,65	69,34
44	I24=Ar4+H	30,34	70,98	-19,57
45	Ar4=I25+H	88,01	-84,21	147,23
46	I25=Ar5+H	49,97	112,79	-29,34
47	Ar5=I26+H	71,63	-36,10	97,02
48	I26=Ar6+H	34,15	11,69	25,93
49	Ar7=I21+I27	58,90	59,79	16,86
50	I27=Ss16+H	40,41	15,59	29,45
51	Ar8=I28+I29	71,43	63,93	26,48
52	I29=Ss17+H	40,41	15,59	29,45
53	I28+H=Ar9	-94,02	-43,53	-63,41
54	Ar9=I30+H	77,05	20,99	62,29
55	I30=Ar10+H	54,78	31,29	32,78
56	Ar10=I31+H	75,42	10,61	67,96

Tabla N°6 (Continuación)

Código	Reacción	ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
57	I31=Ar11+H	28,64	61,92	-14,90
58	Ar12=I28+I27	71,39	63,91	26,45
59	Ar13=I32+I33	77,05	53,71	39,29
60	I33=Ss18+H	40,41	15,59	29,45
61	I32+H=Ar11	-99,51	-33,29	-76,10

Se puede observar en estos resultados que los valores de las energías libres de 8 de las reacciones de compuestos Aromáticos son negativos, es decir, que de un total de 33 reacciones de este tipo, sólo el 24% son espontáneas según los criterios termodinámicos, como se puede observar en el gráfico N° 2.



Gráfico N° 2: Porcentaje de reacciones espontáneas que involucran aromáticos.

Al igual que los casos de reacciones de moléculas de tipo Saturadas, en este caso, las reacciones de craqueo de moléculas, resultaron ser no espontáneas, y en las reacciones subsiguientes, donde intervienen los productos formados en esa reacción anterior; como en el caso de la reacción 32 y las reacciones derivadas de ésta: 33, 34, 35 y 36 (Apéndice B) también son no espontáneas. Nuevamente se atribuye este comportamiento a que los valores termodinámicos obtenidos a través del método de Benson (1976) para radicales libres difieren de los obtenidos a

través del método que se encuentra en el Manual del Ingeniero Químico de Perry (1999) para moléculas neutras; pero también a que estas reacciones que poseen solamente un reactivo, lo cual no describe de manera correcta lo que sucede en realidad en el proceso. (Poutsma, 1990).

4.3. Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Resinas.

En la tabla N°7 se presentan los valores de propiedades termodinámicas obtenidos para las reacciones con Resinas. Puede observarse nuevamente una tendencia que indica que las reacciones de craqueo de las moléculas resultan ser no espontáneas, como en el caso específico de las reacciones 62, 79, 97 y 106, en las cuales una molécula neutra se descompone en dos radicales, sin embargo, en las reacciones 100 y 114 ocurre el mismo proceso pero son espontáneas según los valores de Energía Libre de Gibbs obtenidos; esto se debe a que la entropía es relativamente grande, lo que hace que el término $-T\Delta S_r$ de la ecuación [8] sea más grande y determina así la espontaneidad de las reacciones.

Tabla N°7: Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran Resinas.

Código	Reacción	ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
62	Rr1=I34+I35	68,82	61,62	25,49
63	I34+H=Rr2	-80,54	-39,19	-52,98
64	I35+H=Rr3	-102,57	-27,72	-83,08
65	Rr2=I36+I37	44,85	54,10	6,82
66	I36+H=Rr4	-80,97	-39,28	-53,35
67	Rr4=I38+H	77,00	20,98	62,25
68	I38=Rr5+H	54,85	31,31	32,83
69	Rr5=I39+H	76,25	10,52	68,85
70	I39=Rr6+H	27,12	58,39	-13,94
71	I37+H=C1	-81,82	-38,25	-54,92

Tabla N°7 (Continuación)

Código	Reacción	ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
72	C1=I40+I41	75,16	66,25	28,57
73	I41=CO+CH3	18,84	22,08	3,31
74	I40+H=C3H8	-110,02	-23,88	-93,23
75	Rr3=I42+H	87,01	2,49	85,26
76	I42=Rr7+H	53,94	34,10	29,96
77	Rr7=I43+H	77,16	7,73	71,72
78	I43=Rr8+H	26,90	64,80	-18,66
79	Rr8=I44+I45	60,34	57,11	20,18
80	I44+H=Rr9	-82,57	-36,64	-56,80
81	I45+H=C5H12	-95,34	57,80	-135,98
82	Rr1=I46+I47	70,24	58,94	28,80
83	I46+H=Rr10	-87,22	-26,21	-68,79
84	I47+H=Rr11	-92,84	-41,63	-63,57
85	Rr11=I37+I48	44,16	52,30	7,39
86	I48+H=Rr12	-80,27	-37,48	-53,92
87	Rr12=I49+H	76,30	19,18	62,82
88	I49=Rr13+H	55,54	33,11	32,26
89	Rr13=I50+H	75,56	8,72	69,42
90	I50=Rr14+H	28,52	63,81	-16,35
91	Rr10=I51+H	81,83	10,59	74,39
92	I51=Rr15+H	55,81	33,17	32,49
93	Rr15=I52+H	75,28	8,66	69,19
94	I52=Rr16+H	28,79	63,87	-16,12
95	Rr16=I53+I45	58,46	58,04	17,65
96	I53+H=Rr17	-80,69	-37,57	-54,27
97	Rr18=I54+I55	278,99	40,84	250,28
98	I55+H=Rr19	-319,85	-55,80	-280,62
99	I54+H=Rr20	-69,56	93,81	-135,53

Tabla N°7 (Continuación)

Código	Reacción	ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
100	Rr19=I37+I56	37,11	66,46	-9,62
101	I56+H=Rr21	-80,36	-68,71	-32,05
102	Rr21=I57+H	76,39	50,41	40,95
103	I57=Rr22+H	55,45	1,89	54,12
104	Rr22=I58+H	74,76	40,03	46,62
105	I58=Rr23+H	29,31	32,51	6,45
106	Rr20=I59+I60	43,01	18,21	30,21
107	I59+H=Rr24	-81,92	-42,95	-51,72
108	Rr24=I61+H	77,90	29,18	57,38
109	I61=Rr25+H	54,14	23,15	37,87
110	I60+H=SH1	-79,94	4,76	-83,29
111	SH1=I62+SH	65,79	16,07	54,48
112	I62+H=C4H10	-96,34	-44,06	-65,36
113	SH+H=H2S	-92,14	-28,76	-71,92
114	Rr26=I55+I63	296,79	431,65	-6,72
115	I63+H=Rr27	-80,42	-12,04	-71,95
116	Rr27=I64+I60	42,14	18,40	29,20
117	I64+H=Rr28	-81,04	-43,14	-50,71
118	Rr28=I65+H	77,07	27,95	57,41
119	I65=Rr29+H	52,98	94,93	-13,77
120	Rr30=I62+I66	-104,16	218,15	-257,55
121	I66+H=Rr31	-93,57	-74,64	-41,08
122	Rr31=I37+I67	44,89	85,32	-15,11
123	I67+H=Rr32	-80,99	-70,49	-31,43
124	Rr32=I68+H	77,02	48,70	42,77
125	I68=Rr33+H	54,82	3,59	52,31

De las reacciones que involucraron a la fracción Resinas, 48% resultaron ser espontáneas, es decir, 31 del total de 64 reacciones planteadas para este tipo en el mecanismo del proceso AQC[®], como se observa en el gráfico N° 3, lo cual sigue

la tendencia que se ha observado también en las reacciones con saturados y aromáticos (gráficas N°1 y N° 2), en las que no más del 50 % de las reacciones son espontáneas.



Gráfico N° 3: Porcentaje de reacciones espontáneas que involucran Resinas.

4.4. Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran Asfaltenos.

En esta sección se presentan los resultados termodinámicos obtenidos para las reacciones que involucran asfaltenos y se muestran a continuación en la tabla N°8.

Tabla N°8: Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran Asfaltenos.

Código	Reacción	ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
126	As1=I69+I70	50,38	-18,25	63,21
127	I69+H=As2	-79,41	-37,93	-52,75
128	I70+H=As3	-69,60	-10,00	-62,57
129	As3=I71+I72	68,06	45,61	35,99
130	I72+H=As4	-93,53	-74,64	-41,05
131	I71+H=As5	-93,05	248,77	-267,97
132	As2=I73+I74	72,70	61,39	29,53

Tabla N°8 (Continuación)

		ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
Código	Reacción	Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
133	I73+H=As6	-93,69	-43,46	-63,14
134	As6=I75+H	87,65	30,49	66,21
135	I75=As7+H	16,67	94,52	-49,79
136	I74+H=C2	-95,24	-43,80	-64,44
137	C2=I41+I62	61,94	103,34	-10,73
138	As4=I60+I76	51,60	56,59	11,81
139	I76+H=As8	-91,05	-75,52	-37,96
140	As8=I77+H	91,09	59,60	49,18
141	I77=As9+H	40,19	-5,85	44,30
142	As5=I78+I79	51,74	47,55	18,30
143	I78+H=As10	-92,98	-76,83	-38,96
140	As8=I77+H	91,09	59,60	49,18
144	As10=I80	53,99	98,86	-15,53
145	I80+H=I81	-92,44	-31,00	-70,64
146	I81=I82+CO	16,62	28,99	-3,77
147	I82+H=As11	-93,74	-74,68	-41,23
148	As11=I83+H	90,38	57,80	49,74
149	I83=As12+H	40,89	-7,28	46,00
150	I79+H=SH2	-79,88	4,77	-83,24
151	SH2=I45+SH	5,88	16,14	-5,47
152	As13=I84+I85	67,66	8,05	61,99
153	I84+H=As14	-93,12	-43,33	-62,64
154	I85+H=As15	-90,80	-42,83	-60,69
155	As15=I86+I87	68,40	47,04	35,32
156	I86+H=As16	-93,99	-74,26	-41,78
157	I87+H=As17	-93,47	-74,63	-41,00
158	As14=I88	58,78	123,09	-27,77
159	I88+H=I89	-92,89	-59,99	-50,70

Tabla N°8 (Continuación)

Código	Reacción	ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
160	I89=I90+CO	9,36	-5,20	13,02
161	I90+H=As18	-91,61	-43,78	-60,83
162	As18=I91+H	88,83	28,67	68,67
163	I91=As19+H	42,88	28,32	22,97
164	As19=I92+I93	-186,25	64,26	-231,44
165	I93+H=C6H14	-105,68	-53,31	-68,19
166	I92+H=As20	-93,87	-43,50	-63,28
167	As16=I79+I94	54,59	69,93	5,42
168	I94+H=As21	-93,36	-74,60	-40,90
169	As21=I95	54,36	96,64	-13,58
170	I95+H=I96	-92,87	-28,79	-72,63
171	I96=I97+CO	16,02	27,21	-3,11
172	I97+H=As22	-93,68	-74,67	-41,17
173	As22=I98+H	90,90	59,56	49,02
174	I98=As23+H	40,92	-11,63	49,10
175	As17=I99+H	91,91	26,68	73,15
176	I99=As24+H	39,82	28,93	19,47
177	As24=I100+I93	72,57	94,91	5,83
178	I100+H=As25	-94,30	-77,04	-40,13
179	As26=I101+I102	63,72	12,35	55,04
180	I101+H=As27	-92,77	-45,57	-60,72
181	I102+H=As28	-90,45	-42,75	-60,38
182	As28=I103+I104	412,34	56,39	372,69
183	I103+H=As29	-93,11	-74,53	-40,69
184	I104+H=As30	-92,27	-74,44	-39,92
185	As27=I105+I74	72,73	65,76	26,49
186	I105+H=As31	-93,70	-43,47	-63,14
187	As31=I106+H	90,70	25,71	72,62

Tabla N°8 (Continuación)

Código	Reacción	ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
188	I106=As32+H	39,13	94,52	-27,33
189	As29=I79+I107	54,77	40,44	26,32
190	I107+H=As33	-93,47	-74,62	-41,00
191	As33=I108	55,09	126,13	-33,58
192	I108+H=I109	-92,88	-28,79	-72,64
193	I109=I110+CO	16,26	-2,35	17,90
194	I110+H=As34	-93,77	-74,69	-41,25
195	As34=I111+H	90,99	59,58	49,09
196	I111=As35+H	40,85	-7,29	45,98
197	As30=I112+H	89,92	57,12	49,76
198	I112=As36+H	46,74	-19,59	60,51
199	As36=I113+I93	71,26	95,10	4,39
200	I113+H=As37	-93,55	-74,64	-41,06
201	As26=I114+I115	63,28	10,23	56,09
202	I114+H=As38	-90,37	-39,64	-62,50
203	I115+H=As39	-90,57	-42,78	-60,49
204	As39=I116+I104	67,34	46,89	34,37
205	I116+H=As40	-93,19	-74,57	-40,77
206	As38=I74+I117	71,33	59,36	29,59
207	I117+H=As41	-93,59	-43,44	-63,05
208	As41=I118+H	90,80	28,34	70,88
209	I118=As42+H	39,25	94,55	-27,24
210	As40=I119+I79	54,63	49,89	19,55
211	I119+H=As43	-93,59	-74,65	-41,10
212	As43=I120	54,59	96,68	-13,39
213	I120+H=I121	-92,87	-28,79	-72,63
214	I121=I122+CO	16,035	27,22	-3,10
215	I122+H=As44	-93,91	-74,72	-41,37

Tabla N°8 (Continuación)

Código	Reacción	ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
216	As44=I123+H	91,13	59,61	49,21
217	I123=As45+H	39,94	-7,39	45,13
218	As46=I124+I125	66,59	89,25	3,84
219	I124+H=As47	-93,28	-74,58	-40,84
220	I125+H=As48	-89,98	-42,65	-59,99
221	As48=I126+I127	68,95	53,07	31,64
222	I126+H=As49	-92,74	-74,46	-40,38
223	I127+H=As50	-92,97	-74,52	-40,57
224	As47=I93+I128	72,80	96,99	4,60
225	I128+H=As51	-93,73	-74,68	-41,22
226	As51=I129+H	90,96	59,57	49,06
227	I129=As52+H	37,72	61,46	-5,49
228	As49=I130+I60	54,15	49,79	19,14
229	I130+H=As53	-93,05	-74,53	-40,65
230	As53=As54+CO2	62,96	13,38	53,56
231	As54=I131+H	90,55	62,98	46,27
232	I131=As55+H	41,29	-10,68	48,80
233	As55=I132+H	86,67	78,62	31,39
234	I132=As56+H	22,21	-41,25	51,22
235	As50=I93+I133	71,12	95,07	4,28
236	I133+H=As57	-93,42	-74,61	-40,96
237	As57=I134+H	90,64	59,50	48,79
238	I134=As58+H	41,21	-7,21	46,28
239	As58=I135+H	87,96	45,79	55,76
240	I135=As59+H	16,10	26,74	-2,69
241	As46=I137+I138	-123,55	-334,74	111,83
242	I137+H=As60	-93,62	-72,34	-42,75
243	I138+H=As61	-90,09	-42,67	-60,08

Tabla N°8 (Continuación)

Código	Reacción	ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/mol	Cal/mol K	Kcal/mol
244	As61=I139+I104	66,86	49,91	31,77
245	I139+H=As62	-92,73	-77,58	-38,18
246	As60=I93+I140	71,76	92,90	6,44
247	I140+H=As63	-93,61	-74,66	-41,11
248	As63=I141+H	90,84	59,55	48,96
249	I141=As64+H	40,77	31,37	18,71
250	As62=I60+I142	53,35	45,36	21,45
251	I142+H=As65	-93,05	-74,53	-40,65
252	As65=As66+CO2	-3,90	24,43	-21,08
253	As66=I143+H	90,55	59,49	48,71
254	I143=As67+H	41,29	-7,19	46,35
255	As67=I144+H	87,89	45,77	55,69
256	I144=As68+H	16,19	26,76	-2,63

Las reacciones con asfaltenos son las que se encuentran en mayor proporción que corresponde a 130 reacciones de un total de 256, donde las 126 reacciones restantes corresponden a los Saturados, Aromáticos y Resinas en el modelo cinético planteado para el proceso AQC[®], la mayor cantidad de Asfaltenos se debe a que la composición típica de los crudos pesados y extrapesados, así como la de los residuos de vacío, muestra que este tipo de moléculas es la que se encuentra en mayor proporción (Algelt, 1994), por lo que se requieren muchas reacciones de craqueo para obtener moléculas de menor tamaño y menor peso molecular para disminuir la viscosidad del crudo.

En este tipo de reacciones se presenta el mismo comportamiento observado en las reacciones con saturados y aromáticos, en el cual las reacciones de craqueo de moléculas resultan ser no espontáneas según los resultados obtenidos de la Energía Libre de Gibbs. En resumen se tiene que 68 reacciones son espontáneas a la temperatura de operación de 430°C mientras que 63 reacciones no lo son, esto

se traduce en que el porcentaje de reacciones espontáneas es de 52% como se observa en el gráfico N° 4, lo cual es mucho mayor que los porcentajes obtenidos para las reacciones con Aromáticos que se encuentra en el gráfico N° 2.



Gráfico N° 4: Porcentaje de reacciones espontáneas que involucran Resinas.

4.5. Análisis comparativo de todas las reacciones espontáneas.

Las reacciones que resultaron ser espontáneas del modelo cinético estudiado fueron un total de 121, de un total de 256 reacciones, es decir un 47,3% según lo que se reporta en la Tabla N° 9. El gráfico N° 5 muestra los resultados reportados.

Tabla N°9: Reacciones Espontáneas y No Espontáneas de cada tipo de reacciones estudiadas.

Reacciones con	Espontáneas	No Espontáneas	% Espontáneas	% No Espontáneas
Saturados	14	14	50,0	50,0
Aromáticos	8	25	24,2	75,8
Resinas	31	33	48,4	51,6
Asfaltenos	68	63	52,7	47,3
Total	121	135	47,3	52,7

En este gráfico se observa que las reacciones con Asfaltenos son las que tienen mayor número de reacciones espontáneas, seguido por las resinas con 31

reacciones espontáneas, luego los Saturados con 14 y por último los Aromáticos que son los que poseen menos reacciones espontáneas con un total de 8.

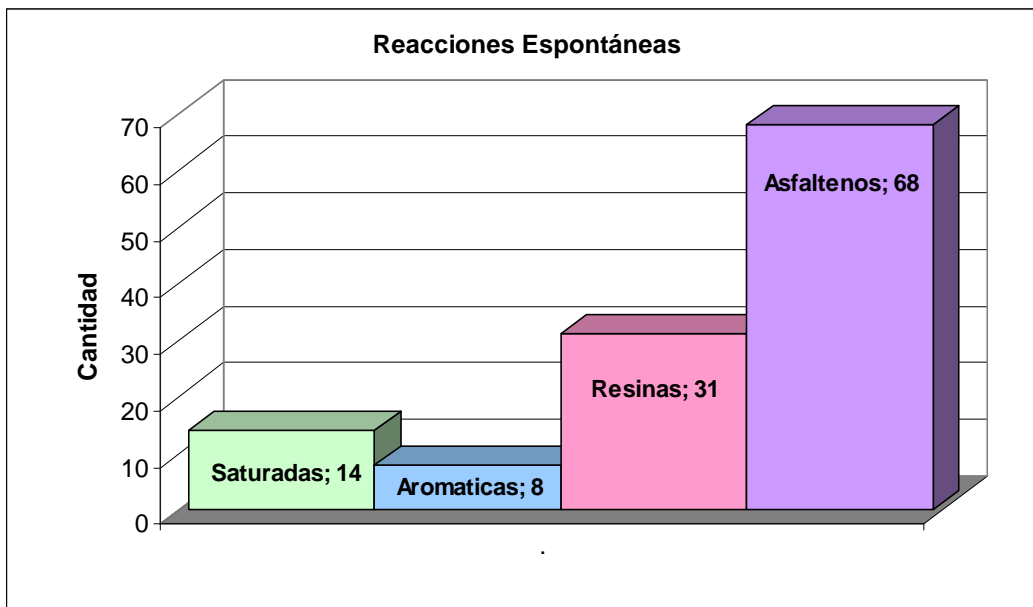


Gráfico N°5: Reacciones espontáneas con Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos.

En el gráfico N° 6 se observa que el porcentaje total de reacciones espontáneas en el mecanismo cinético planteado por Carvajal (2007) es de 47 %, es decir, que el 53% de las reacciones planteadas se deben descartar porque no se llevan a cabo según los valores de energía libre de Gibbs obtenidos.

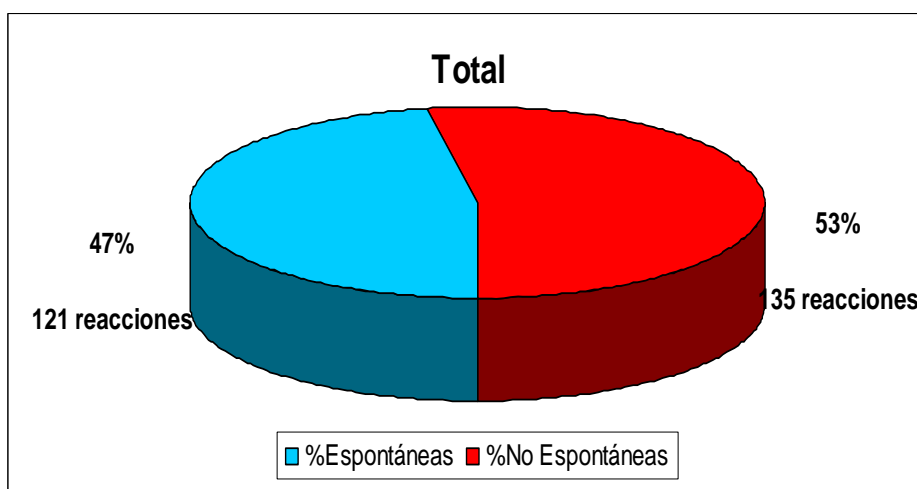


Gráfico N° 6: Porcentaje de reacciones espontáneas total.

Ese 47% de las reacciones espontáneas se puede subdividir entre las reacciones con Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos como se muestra a continuación en el gráfico N° 7, en la cual se presentan los porcentajes obtenidos de las reacciones de cada tipo que resultaron ser espontáneas.



Gráfico N° 7: Porcentaje de reacciones espontáneas total.

En el gráfico anterior, se observa en forma clara, como el mayor aporte está dado por el grupo de reacciones en las que participan las moléculas Asfaltenos con 55%, un 12% de reacciones espontáneas para Saturados, 7% Aromáticos y un 26% Resinas.

4.6. Depuración de la red de reacciones propuesta como mecanismo del proceso AQC[®]

La depuración de la red de reacciones propuesta para el proceso de AQC[®], consiste en seleccionar reacciones espontáneas, este mecanismo (se puede observar en el apéndice A), con la finalidad de optimizar el mecanismo cinético desarrollado por Carvajal (2007), que es el objetivo principal de este Trabajo Especial de Grado. Sin embargo existe otro tipo de reacciones no espontáneas cuyos valores de ΔG_r son menores a 10 Kcal/mol. Las reacciones que tienen $0 \text{ Kcal/mol} < \Delta G_r < 10 \text{ Kcal/mol}$ se pueden considerar como aquellas reacciones

que se encuentra en la zona de incertidumbre dada por el margen de error de $\pm 10\%$ que existe en los datos calculados mediante los métodos de contribuciones de grupo. En la tabla N° 10 se observan las cantidades de reacciones espontáneas que se tienen si se toman en cuenta las reacciones que tienen $0 \text{Kcal/mol} < \Delta G_r < 10 \text{Kcal/mol}$, estas reacciones se pueden dar pero en poca extensión.

Tabla N°10: Reacciones que poseen un Energía Libre de Gibbs menor que 10Kcal/mol.

Reacciones con	$\Delta G_r < 10 \text{Kcal/mol}$	$\Delta G > 10 \text{Kcal/mol}$	% Espontáneas	% No Espontáneas
Saturados	15	13	53,57	46,43
Aromáticos	8	25	24,24	75,76
Resinas	35	29	54,69	45,31
Asfaltenos	76	55	58,02	41,98
Total	134	122	52,34	47,66

La cantidad de reacciones que tienen $0 \text{Kcal/mol} < \Delta G_r < 10 \text{Kcal/mol}$ es de 13, de todo el mecanismo cinético estudiado, lo que constituye un aporte poco significativo al número de reacciones espontáneas. La diferencia entre la cantidad de reacciones con $\Delta G_r < 10 \text{Kcal/mol}$ y la cantidad de reacciones espontáneas con $\Delta G_r < 0 \text{Kcal/mol}$ del mecanismo del proceso AQC[®] planteado, se puede observar en el gráfico N° 8, en el que se comparan ambos grupos.

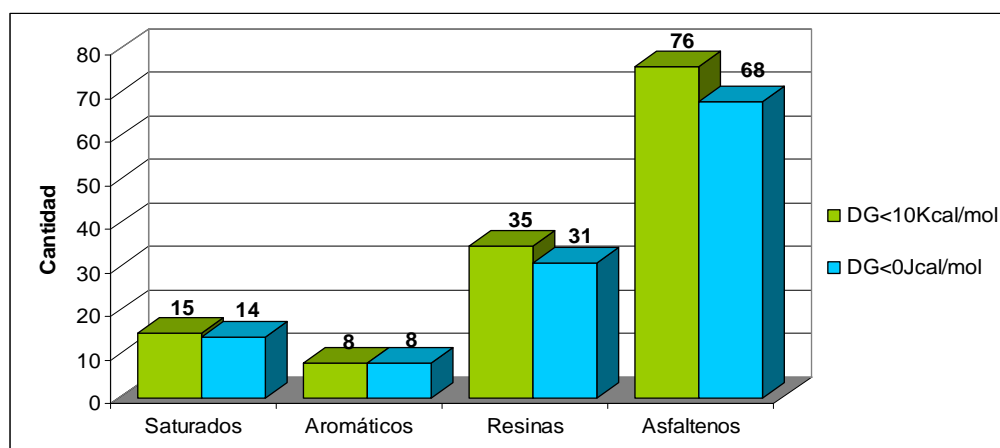


Gráfico N°8: Comparación entre las cantidades de reacciones con $\Delta G < 0$ y las reacciones con $\Delta G < 10 \text{Kcal/mol}$.

4.6. Análisis de las reacciones que resultaron ser No Espontáneas.

Después de haber realizado el estudio termodinámico a las 256 reacciones correspondientes a la red del mecanismo cinético planteado por Carvajal (2007), se obtuvieron 135 reacciones no espontáneas, es decir aproximadamente un 53% del total de reacciones (Gráfico N° 6), a las condiciones de trabajo, de 1 atm y 430°C, las energías libres de reacción son mayores que cero ($\Delta G > 0$), lo cual significa que el modelo cinético necesita incorporar las reacciones de adición sobre las moléculas neutras para poder hacerlas espontáneas.

En el gráfico N° 9 se muestra la distribución por tipo o grupo de compuesto de las reacciones que resultaron espontáneas y no espontáneas, allí se observa que el grupo de reacciones con Asfaltenos son las que presentan la mayor cantidad de reacciones no espontáneas, dado que son las que poseen mayor cantidad de reacciones.

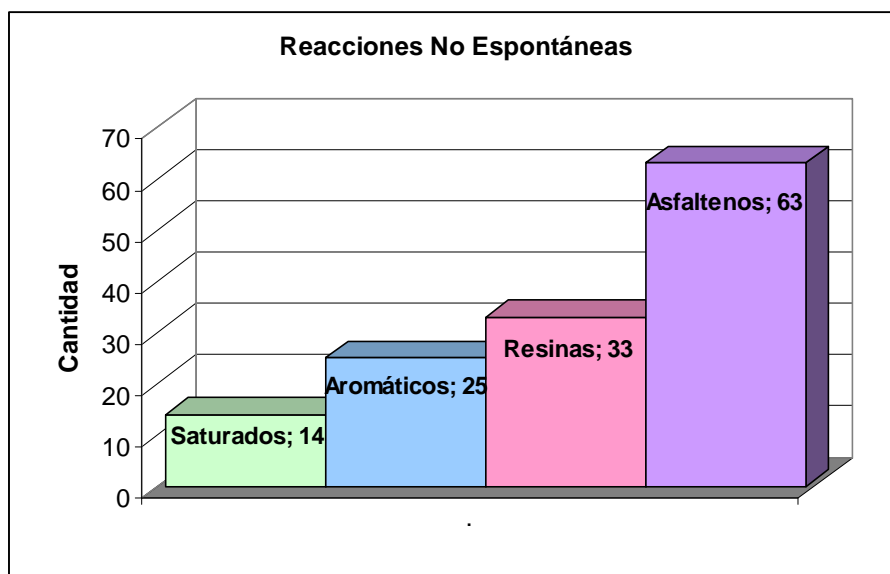
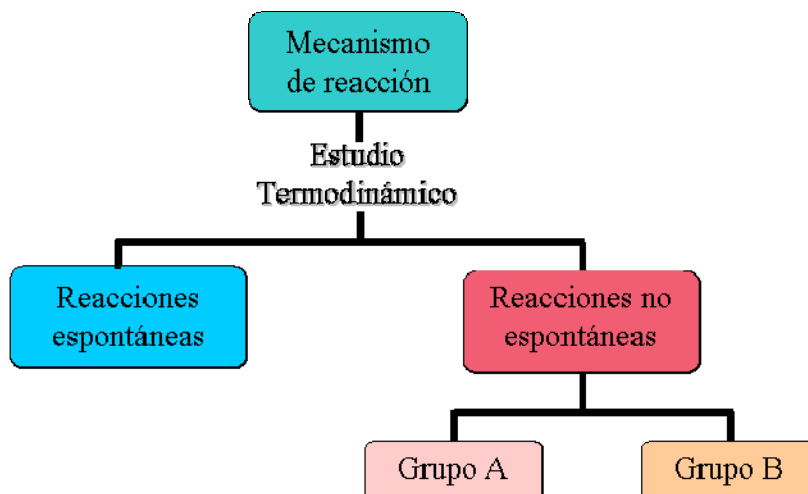


Gráfico N°9: Reacciones no espontáneas con Saturados, Aromáticas, Resinas y Asfaltenos.

Para el análisis detallado de las reacciones no espontáneas se puede considerar nuevas rupturas de las moléculas y estudiar las propiedades termodinámicas de las nuevas moléculas y las reacciones conformadas por éstas, para estimar su espontaneidad y de esta manera descartarla si resultan ser no espontáneas

nuevamente. Las reacciones no espontáneas de la red de reacciones del modelo cinético se pueden dividir en dos grupos, Grupo A y Grupo B, como se observa en el diagrama de la figura 18.

Figura 18: Diagrama de clasificación de las reacciones del mecanismo de AQC®.



1) Grupo A: Este grupo representa a aquellas reacciones donde una molécula neutra genera dos moléculas radicales, es decir, reacciones de craqueo; las cuales se pueden representar por una reacción general como la que se presenta a continuación:



Donde:

M : Molécula neutra

I_i : Radical i.

I_j : Radical j.

En el mecanismo cinético de la red de reacciones planteado originalmente se pueden citar varios ejemplos de reacciones que tienen la forma de la reacción [33] y que resultaron ser no espontáneas: las reacciones 1, 5 y 10, pertenecientes al grupo de los Saturados; las reacciones 30, 34 y 41 del grupo de los Aromáticos;

62, 67 y 82 del grupo de las Resinas y las reacciones de los Asfaltenos 126, 132 y 155, entre otras reacciones que se pueden observar en el Apéndice B.

En la tabla N° 11 se muestran las cantidades de reacciones que pertenecen al grupo A y los porcentajes correspondientes a cada tipo de reacción; se observa que del total de 135 reacciones no espontáneas, el 68% pertenece al grupo A, es decir, reacciones de craqueo no espontáneas. El total de reacciones no espontáneas pertenecientes al grupo A se muestran en el Apéndice E.

Tabla N° 11: Reacciones no espontáneas pertenecientes al grupo A.

Reacciones	Grupo A	%Grupo A
Saturados	7	58
Aromáticos	15	60
Resinas	22	76
Asfaltenos	39	70
TOTAL	83	68

Las nuevas rupturas de las moléculas pertenecientes a estas reacciones se modificaron agregándole otro reactivo, un radical hidrogeno atómico (H^\bullet), para completar la reacción de craqueo de la molécula neutra reactivo. Esta nueva reacción se puede representar por una reacción general [34] y se ejemplifica en la figura 19.



Donde:

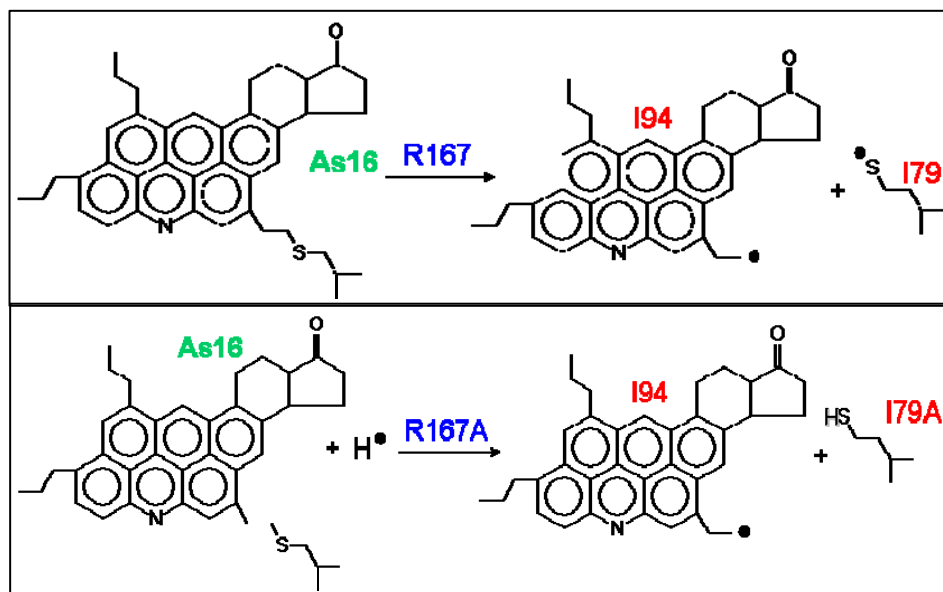
M : Molécula neutra

I_i : Radical i.

I_jH : Radical al que se le adicionó un H^\bullet .

H^\bullet : Radical Hidrogeno.

Figura N° 19: Reacción no espontánea R167 del mecanismo planteado para el proceso AQC® convertida una reacción espontánea, R167A.



En la figura N° 19 se tiene un ejemplo en el que la reacción 167 de craqueo, se modificó para obtener una reacción de tipo [34] (R167A) .

La reacción R167A es espontánea, y su $\Delta G_R = -77,8 \text{ Kcal/mol}$; esto es debido a que el radical hidrógeno atómico interacciona con la molécula adicionándole mas energía y permitiendo que la reacción se desplace hacia la derecha y ocurra de manera espontánea.

2) Grupo B: En este caso, el grupo B reúne todas aquellas reacciones donde una molécula radical produce una molécula neutra y un radical. Éstas se pueden representar a través de la reacción [35].



Donde:

M : Molécula neutra

I_i : Radical i.

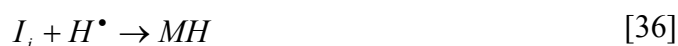
H^\bullet : Radical Hidrógeno atómico.

De un total de 135 reacciones no espontáneas, 32% pertenecen al grupo B, como se puede observar en la tabla N° 12. Un ejemplo de este tipo, es la reacción R254 (figura 20), que está conformada por un radical como reactivo, y una molécula neutra y un radical hidrógeno como productos. El total de reacciones no espontáneas pertenecientes al grupo B se muestran en el Apéndice E.

Tabla N° 12: Reacciones no espontáneas pertenecientes al grupo B.

Reacciones	Grupo B	%Grupo B
Saturados	5	42
Aromáticos	10	40
Resinas	7	24
Asfaltenos	17	30
TOTAL	39	32

Para que las reacciones del grupo B puedan ser termodinámicamente factibles, se le agrega un radical hidrógeno atómico (H^\bullet), para que reaccione con el radical presente originalmente en la reacción como se ve en la ecuación [36] y se visualiza en el ejemplo de a figura 21.



Donde:

I_i : Radical i.

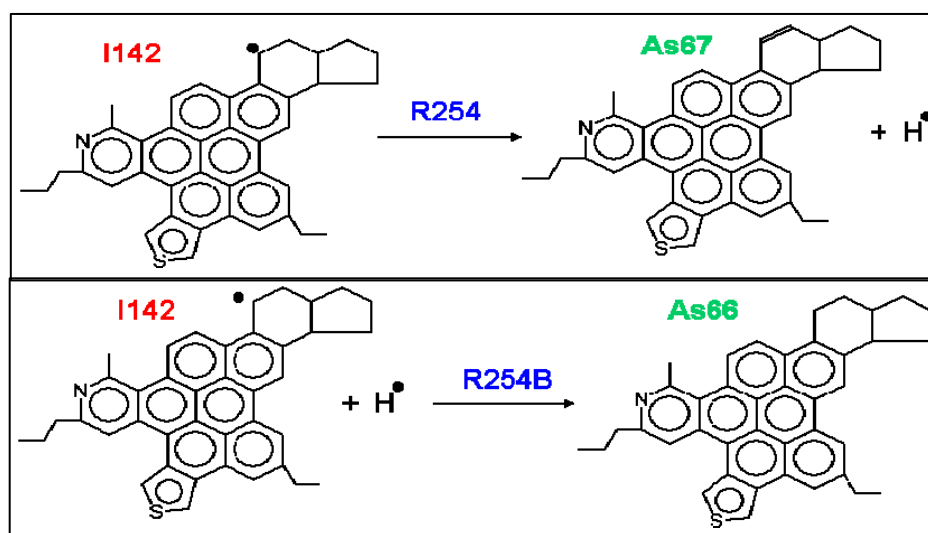
H^\bullet : Radical Hidrogeno atómico.

MH : Molécula a la que se le adicionó un H^\bullet .

Si se modifica la reacción R254 (figura 20) para que quede de la forma [36], se obtiene la reacción R254B. Para la nueva reacción, R254B, se obtuvo un

$\Delta G_R = -48,7 \text{ Kcal/mol}$ como se observa en la tabla N° 13, lo que significa que es una reacción espontánea.

Figura 20: Reacción no espontánea R254 del mecanismo planteado para el proceso AQC® convertida en una reacción espontánea R254B.



De esta forma, se obtiene una reacción termodinámicamente factible. Esta factibilidad termodinámica se debe a que, al reaccionar dos radicales libres y generar una molécula, la energía de los reactivos ahora es mayor que la de los productos, por lo tanto la reacción se ve energéticamente favorecida hacia la formación de productos, es decir, hacia los productos, por lo tanto la reacción resulta espontánea (Poustma, 1990).

En la tabla N° 13 se observan los datos de Entalpía, Entropía y Energía Libre de Gibbs de algunas reacciones pertenecientes a Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos que han sido transformadas en reacciones tipo [34] (grupo A) y [36] (grupo B) respectivamente donde se visualiza para todos los casos que la Energía Libre es menor que cero ($\Delta G < 0$) debido a la modificación de la reacción original a partir del criterio de que un radical al reaccionar con una molécula neutra o con otro radical originan reacciones espontáneas como consecuencia de la gran liberación de energía permitiendo que la reacción se desplace con mayor facilidad hacia la formación de productos.

Tabla N°13: Nuevas reacciones a partir de las reacciones no espontáneas del mecanismo.

Nomenclatura	Reacción	ΔH_r	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol	Cal/K Mol	Kcal/Mol
R1A	Ss1+H·=I1+I2A	-21,8	20,6	-36,3
R9B	I4+H·=I4A	-95,7	-43,9	-64,8
R38A	Ar1+H·=I21+I22A	-36,9	16,2	-48,3
R55B	I30+H·=Ar9	-77,1	-20,9	-62,29
R65A	Rr2+H·=I36+I37A	-26,7	14,2	-36,6
R109B	I61+H·=Rr24	-77,9	-29,2	-57,4
R167A	As16+H·=I94+I79A	-25,3	74,7	-77,8
R254B	I142+H·=As66	-90,6	-59,5	-48,7

En la tabla N° 14 se pueden comparar los cambios de energía libre de reacción al pasar de las reacciones originales a las nuevas, mediante los métodos planteados para los grupos A y B. Cabe destacar que los casos expuestos tanto en la tabla N° 13 como en la N° 14 son sólo algunos ejemplos de las reacciones del grupo A y B que se encuentran de cada tipo de reacción (con Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos) en el mecanismo de reacción planteado para el proceso AQC®.

Tabla N°14: Comparación entre las energías libres de las reacciones originales y las nuevas reacciones.

Reacción	ΔG_r	Reacción	ΔG_r
	Kcal/Mol		Kcal/Mol
R1	28,5	R1A	-36,3
R9	29,5	R9B	-64,8
R38	16,6	R38A	-48,3
R55	32,8	R55B	-62,29
R65	6,8	R65A	-36,6
R109	37,9	R109B	-57,4
R167	5,4	R167A	-77,8
R254	46,4	R254B	-48,7

Como se puede observar en la tabla anterior, las diferencias entre los valores de energía libre de las reacciones originales y modificadas, es considerable, y evidentemente las reacciones que antes eran no espontáneas ahora lo son. Este resultado plantea el reto de rediseñar nuevamente el mecanismo de reacción para tomar en cuenta estas nuevas reacciones, ya que como se observa en el gráfico N° 6, las cantidades de reacciones no espontáneas son muchas.

El total de reacciones no espontáneas pertenecientes al grupo A y B se encuentra en la tabla N° 15 así como los porcentajes de reacciones pertenecientes a cada grupo por cada tipo de reacción (con Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos).

Tabla N° 15 Reacciones no espontáneas separadas en los grupos A y B.

Reacciones	Grupo A	Grupo B	%Grupo A	%Grupo B
Saturados	7	5	58	42
Aromáticos	15	10	60	40
Resinas	22	7	76	24
Asfaltenos	39	17	70	30
TOTAL	83	39	68	32

Se deduce de la tabla N° 15 que la mayoría de las reacciones no espontáneas pertenecen al grupo A, es decir, las reacciones de craqueo; también que la mayoría de las reacciones no espontáneas tanto del grupo A como del B, pertenecen a las reacciones con Asfaltenos.

En el gráfico 10 se observan las distribuciones porcentuales de cada grupo, y en él se puede observar los aportes de cada tipo de reacción. Para ambos grupos el mayor aporte lo hacen las reacciones con Asfaltenos con 47% en el grupo A y 43% en el grupo B.

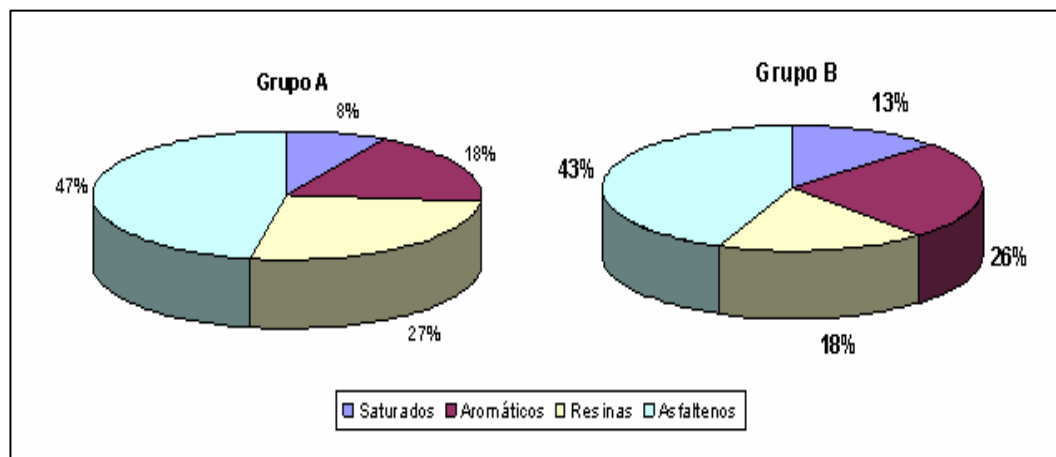
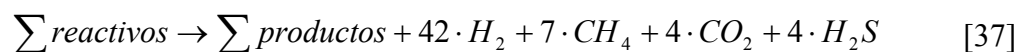


Gráfico N° 10: Comparación de los gráficos de distribución de los tipos de reacción en los grupos A y B.

4.8. Conversión máxima posible del proceso AQC[®] mediante la red de reacciones planteada

Con el fin de calcular la conversión máxima que se obtendría en el proceso AQC[®] descrito a través de la red de reacciones planteadas como mecanismo del proceso por Carvajal (2007) en su Trabajo Especial de Grado, se procedió a encontrar la reacción global derivada de dicho modelo detallado. Para lograr esto, se identificaron los reactivos del proceso, es decir los que se alimentan a éste, ya que, en muchas reacciones los reactivos son creados en una reacción sencilla previa; también se identificaron los productos obtenidos, los cuales son moléculas neutras orgánicas, CO, CO₂, H₂, entre otros.

La reacción global está conformada por los reactivos que entran al proceso como alimentación y los productos finales, y la conversión que se quiere obtener está basada en la obtención de dichos productos en general. La ecuación global está planteada de la siguiente forma:



En la tabla N° 16 se presentan los valores de entalpía, entropía y energía libre de formación de los reactivos y productos finales que se encuentran en la ecuación

global [37], derivada del mecanismo de reacción planteado como modelo del proceso AQC[®].

Se calcularon las entalpías y entropías de reacción usando las ecuaciones [10] y [11] y luego la Energía Libre de Gibbs de la reacción (ΔG_R) usando la ecuación [12]. Teniendo ΔG_R , se obtiene la constante de equilibrio (K_{eq}) mediante la ecuación [16], y posteriormente se puede obtener la composición de los productos que se puede obtener (z) a partir de 1 mol de los reactivos.

Tabla N° 16 Propiedades termodinámicas de los productos y reactivos del mecanismo de reacción planteado por Carvajal (2007).

Compuesto	Reactivos			Productos		
	ΔH_F	S_F	ΔG_F	ΔH_F	S_F	ΔG_F
	Kcal/mol	Cal/kmol	Kcal/mol	Kcal/mol	Cal/kmol	Kcal/mol
Saturados	-35,6	1177,2	-863,3	33,9	3267,7	-2263,8
Aromáticos	222,1	2138,7	-1281,8	251,9	675,0	-222,8
Resinas	916,8	2935,8	-1147,5	1179,0	2643,2	-679,6
Asfaltenos	1848,3	5391,2	-1942,5	2846,4	5395,8	-947,7
H2	-	-	-	108,8	1536,4	-971,6
CH4	-	-	-	-86,8	376,1	-351,3
CO2	-	-	-	-358,2	240,5	-527,3
H2S	-	-	-	-6,5	224,7	-164,5
Total	2951,6	11642,8	-5235,0	3968,4	14359,5	-6128,4

En la tabla N°17 se presentan los valores de las entalpías, entropías y energías libres de la reacción global.

Tabla N° 17 Entalpía, entropía y energía libre de la reacción global a partir del mecanismo de reacción planteado por Carvajal (2007).

ΔH_r (Kcal/mol)	1016,8
ΔS_r (Cal/kmol)	2716,7
ΔG_r (Kcal/mol)	-893,4

Como se observa en la tabla N° 17, la energía Libre de Gibbs da un valor muy grande negativo lo que indica que la constante de equilibrio da muy grande

(ecuación [16]) y que en consecuencia la conversión es 100% (ecuación [23]); lo que indica que, para la reacción global, la conversión de los reactivos en productos se lleva a cabo completamente.

La termodinámica indica que sí se puede llevar a cabo la conversión de estos reactivos en productos en la ecuación global [37], pero en la realidad esto no ocurre ya que según investigaciones previas del proceso AQC[®] (Machín, 2006), se obtiene un porcentaje de conversión moderado, de la fracción 500°C⁺ a 500°C⁻; esto es porque el factor tiempo sólo es considerado por la cinética.

CAPITULO V

5.1. CONCLUSIONES

Después de haber realizado un análisis exhaustivo de los resultados obtenidos en el estudio termodinámico del mecanismo planteado para modelo cinético del proceso AQC[®] por Carvajal 2007, usando los métodos de contribuciones de grupo, permitió determinar la espontaneidad de las 256 reacciones que conforman dicho mecanismo.

- Las reacciones que resultaron ser espontáneas fueron 121 que corresponde al 47,3% del total de 256 reacciones que conforman la red del modelo cinético. Las reacciones no espontáneas fueron 135, correspondiente al 52,7% del total de reacciones a las condiciones de operación fijadas en 1 atm y 430 °C.
- Las reacciones no espontáneas dentro de la red del modelo cinético se dividen en dos grandes grupos, los cuales se encuentran conformados por moléculas neutras que reaccionan para generar dos radicales y por radicales libres que reaccionan para generar una molécula neutra y un radical. Este tipo de reacciones requieren de un radical que propicie las rupturas de las moléculas (grupo A) o la hidrogenación de los radicales (grupo B).
- El presente trabajo ha generado una metodología alterna para la evaluación de las propiedades termodinámicas de radicales libres orgánicos. Esta metodología fue confrontada usando bases de datos y métodos de química computacional.
- El presente trabajo ha permitido a través del programa QBTherm[®], generar las propiedades termodinámicas de un conjunto de 240 compuestos

orgánicos y radicales libres que no están tabulados en Handbooks ni bases de datos.

- Las reacciones que involucran Asfaltenos, son las que tienen mayor proporción de reacciones espontáneas, debido a que estas se encuentran en gran cantidad dentro del mecanismo cinético, conteniendo un total de 131 reacciones, las cuales 68 son factibles termodinámicamente, es decir, un 52%.

- El desarrollo de este Trabajo Especial de Grado ha planteado por primera vez una reacción química modelo (global) derivada de un modelo cinético molecular del proceso de Aquaconversion[®] basada en sistemas moleculares típicos presentes en residuos de crudos venezolanos.

5.2. RECOMENDACIONES

Luego del alcance de todos los objetivos planteados en el presente Trabajo Especial de Grado y en base a las conclusiones y resultados obtenidos se proporcionan las siguientes recomendaciones que se deben tomar en cuenta para el desarrollo de futuros trabajos en esta área:

- Desarrollar un nuevo modelo cinético del proceso AQC[®], que involucre las reacciones no espontáneas pertenecientes a los grupo A y B identificados, convirtiéndolas en reacciones espontáneas.
- Se deben incorporar al modelo cinético, reacciones de ciclación, condensación y reversibles de las cadenas alquílicas largas.
- Considerar las reacciones con agua (reacciones de oxidación) que llevan a la formación de productos con grupos ácidos como el carboxílico (-COOH).
- Tomar como proveedor de hidrógeno al agua en las reacciones de la red del mecanismo de AQC[®].
- Incluir reacciones con metales que se encuentran en el proceso de AQC[®] como en el residuo (vanadio (V), níquel (Ni), zinc (Zn), hierro (Fe), cromo (Cr)).

5.3 BIBLIOGRAFÍA

- (1) Abrams, O. (2002). Fundamentos de Termodinámica Química. Universidad Central de Venezuela, Facultad de Ciencias. Caracas. 209 p.
- (2) Algelt, K. y Boduszynski M. (1994). Composition and Analysis of Heavy Petroleum Fractions. Marcel Dekker Inc. California. 495 p.
- (3) Aquino, Luis. (2005). Crudos, su impacto en el negocio de refinación. Curso de Refinación. PDVSA Intevep. Los Teques.
- (4) Battaner, E. Modelos Moleculares, 1: Estructuras orgánicas. Universidad de Salamanca. 9p. Disponible en: www.textoscientificos.com.
- (5) Benson, S. (1976). Thermochemical Kinetic. Segunda Edición. Editorial John Wiley & Sons. New York. 320 p.
- (6) Betancor, M. y Sawaya, K. (2006). Potencial de generación de Dioxinas y Furanos, en el proceso de reformación catalítica de naftas. Trabajo Especial de Grado. Universidad Central de Venezuela, Escuela de Ingeniería Química. Caracas.
- (7) Blanco, S. (2002). Mecanismo de reacciones en química. Editorial McGraw Hill. España. 228 p.
- (8) Brown, T., LeMay, H. y Bursten, B. (1998). Química: La Ciencia Central. Séptima Edición. Prentice Hall. México. 1096 p.
- (9) Carbognagi, L., Méndez, A. y Sánchez, V. (1999). Caracterización de crudos venezolanos. Orígenes, razones y necesidades. Departamento de Análisis y Evaluación, Gerencia General de Tecnología, PDVSA-Intevep. Acta Científica Venezolana, Vol. 50, Suplemento N° 1, 11-17.

- (10) Carvajal, J. (2007). Construcción de una Metodología para el Desarrollo de un Modelo Cinético Molecular del Proceso de Aquaconversion[®] bajo una Aproximación Térmica. Trabajo Especial de Grado. Universidad Central de Venezuela, Escuela de Química. Caracas.
- (11) Cremades I. (2006). Reología de los Asfaltos. Quinto Congreso de Ingeniería Química y Ambiental. Jalisco, Iteso. Mexico. 96 p.
- (12) De Bruijn, T. (Marzo, 2000). Final Report: Critical Review of Existing and Engineering Approaches to Moderate Upgrading of Extraheavy Crudes. National Center of Upgrading Tecnology. Canada.
- (13) Delgado, J. (2006). Asfáltenos: composición, agregación, precipitación. Cuadernos FIRP S369-A. Universidad de Los Andes, Escuela de Ingeniería Química. Mérida.
- (14) Giavarini, C. (1986). La Chimica e l'Industria. V.68, n.7/8, Agosto.
- (15) Gram, T. (1999). Química Orgánica. Segunda Edición. Limusa Wiley S.A. México.
- (16) Graterol, A. (2004). Modelo cinético detallado de todas las reacciones posibles para los hidrocarburos del C₁ al C₅. Trabajo Especial de Grado. Universidad Central de Venezuela, Facultad de Ciencias, Escuela de Química. Caracas.
- (17) Holland, C y Anthony, R. (1979). Fundamentals of Chemical Reaction Engineering. Prentice Hall. New Jersey. 541 p.
- (18) <http://es.encarta.msn.com/enciclopedia>. [Consulta:2007, Septiembre 12]
- (19) <http://www.hiru.com/es/kimika/kimika.html>. [Consulta:2007, Septiembre 13]

- (20) <http://www.textoscientificos.com/quimica/hidrocarburos>. [Consulta:2007, Septiembre 13]
- (21) <http://es.wikipedia.org/wiki/Visbreaking>. [Consulta:2007, Septiembre 11]
- (22) Joback, K. (1984). A unified approach to physical property estimation using multivariate statistical techniques. Trabajo de Grado de Maestría, Massachusetts Institute of Technology. UMI Dissertation Services. Impreso en 2001.
- (23) Klotz, I. (1977). Termodinámica Química Primera Edición. Editorial AC. Madrid, España. 485 p.
- (24) Lide, D. (1980). CRC Handbook of Chemistry and Physics. Edición 85.
- (25) Machín I.; Boletín de la propiedad Industrial, Número 462, Tomo 5, Resolución 103, pag. 4, 15 de Septiembre de 2007. Programa “QBTherm”.
- (26) Machin, I. y otros. (2006). Mecanismo de AQUACONVERSION[®]. Informe Técnico, PDVSA-Intevep, INT-11129. Caracas.
- (27) Patete, M. (2005). Desarrollo de un modelo cinético para la gasificación de coque usando una molécula modelo representativa de un coque Venezolano. Trabajo Especial de Grado. Universidad Central de Venezuela, Facultad de Ingeniería, Escuela de Ingeniería Química. Caracas.
- (28) PDVSA Intevep, Centro de Investigación y Apoyo Tecnológico. (2006). Servicios y Tecnologías en Refinación. Artes Gráficas PDVSA Intevep. Los Teques.
- (29) Pereira, P. (1999). Visión Tecnológica. Vol 50. N°1. PDVSA-Intevep. Caracas. La investigación y desarrollo en mejoramiento de crudos extrapesados en PDVSA-Intevep: Aquaconversion[®].

- (30) Perry, H. y Green, D. (1999). Perry's Chemical Engineers' Handbook. Séptima Edición. McGraw Hill. New York.
- (31) Poustma M.(1990).Free-Radical Thermolysis and Hydrogenolysis of model Hydrocarbons Relevant to Processing of Coal. Energy & Fuel, V-4, pag 113.
- (32) Skoog, D., West, D., Holler, F., y Crouch, R. (2001). Química Analítica. Séptima Edición. McGraw Hill. México. 795 p.
- (33) Smith, J. M. (1975). Ingeniería de la Cinética Química. Séptima Edición. Compañía Editorial Continental S.A. Mexico. 450p.
- (34) Smith, J., Van Ness, H. y Abbott, M. (2003). Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química. Sexta Edición. McGraw Hill Interamericana. México.837 p.
- (35) Sol, B., Romero, E., Carbognani, L., Sánchez, V. y Sucre, L. (Enero, 1985). An Alternative Technique for Hydrocarbon Class-Type (SARA) Separation. Departamento de Análisis y Evaluación INTEVEP S.A. Revista técnica Intevep 5 (1): 39-43.
- (36) Solano, K. (1995). Estudio cinético de reacciones catalíticas de hidrocarburos modelo con vapor de agua. Trabajo Especial de Grado. Universidad Central de Venezuela, Escuela de Ingeniería Química. Caracas.
- (37) Solomons, G. T. (1999). Química Orgánica. Segunda Edición. Editorial Limusa S.A. México.1492 p.
- (38) Speight J. (1980). The Chemistry and Technology of Petroleum. Marcel Dekker Inc. New York. 498 p.

- (39) Tissot y Welte. (1984). Petroleum Formation and occurrence. Segunda Edición. Springer Vetlay. New York. 699 p.
- (40) Wade, J. (1993). Química Orgánica. Segunda Edición. Prentice Hall. Mexico. 1312 p.
- (41) Wuithier, P. (1973). Refino y Tratamiento Químico del Petróleo crudo. Ediciones Cepsa, S.A. Madrid.

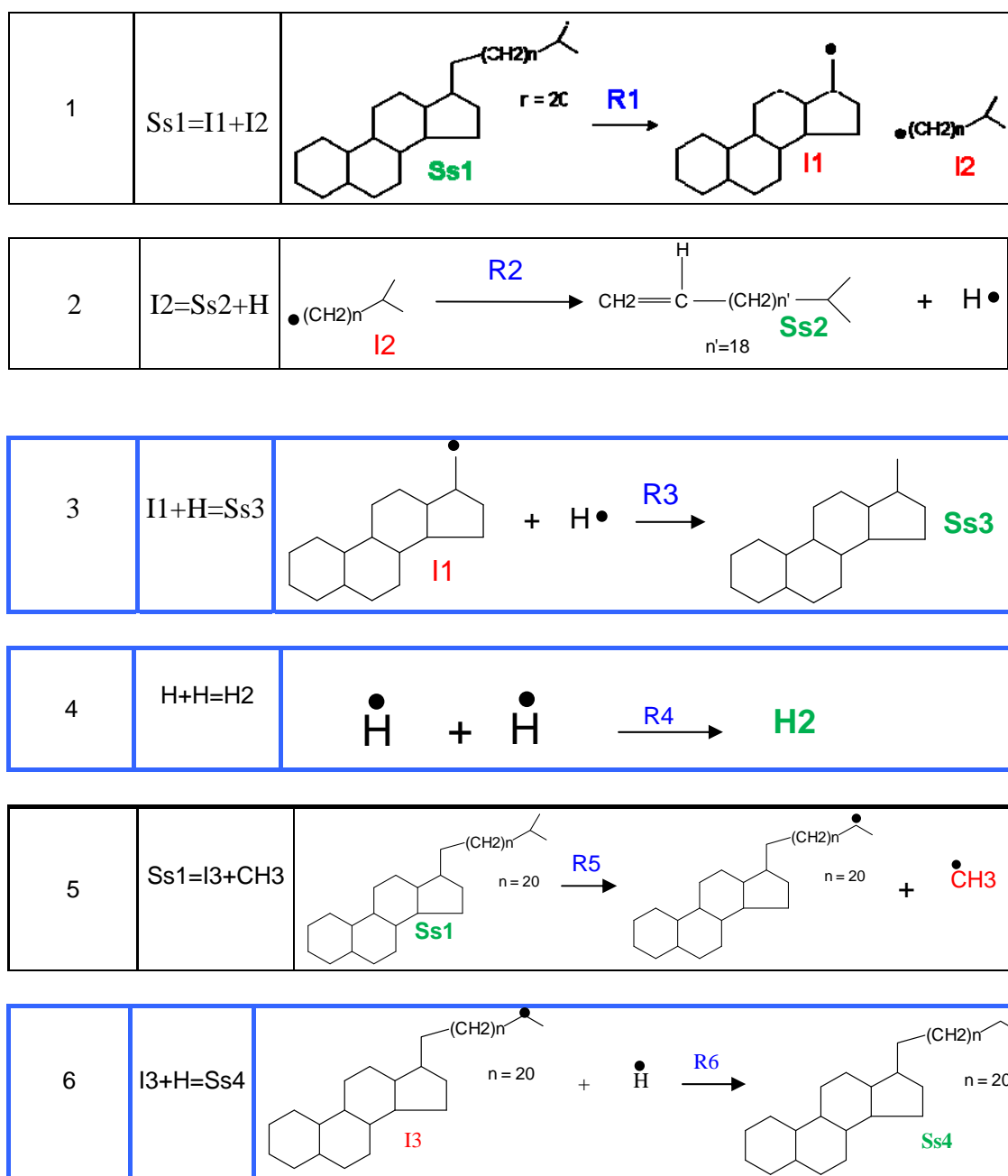
APÉNDICES

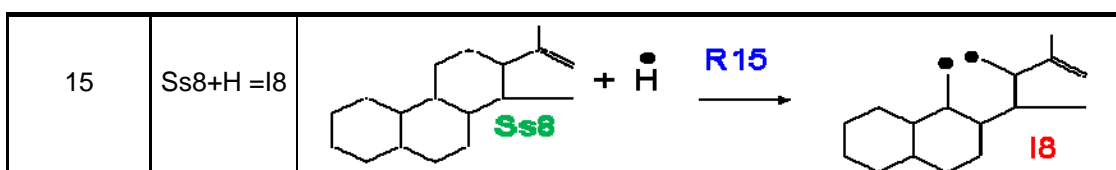
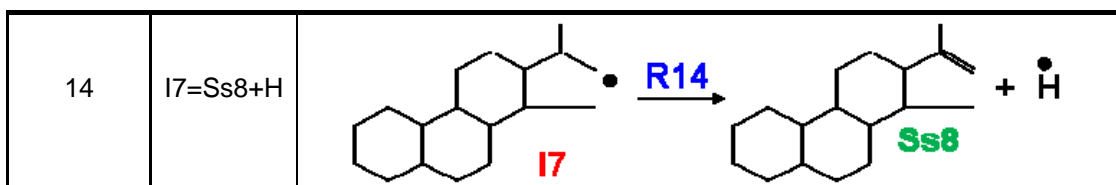
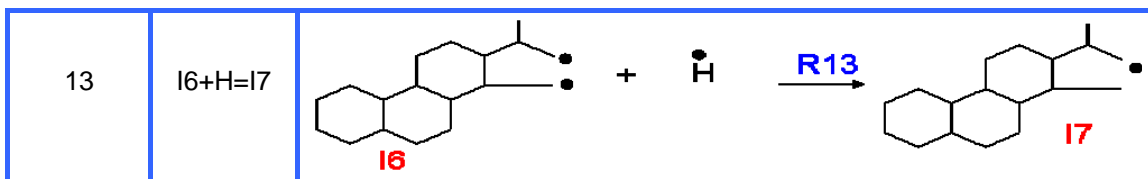
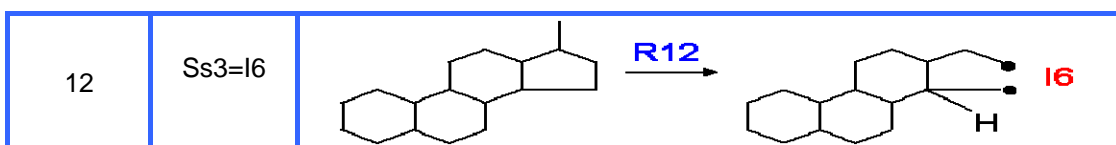
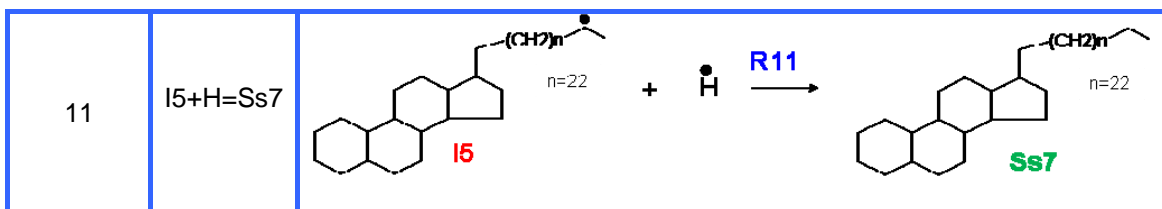
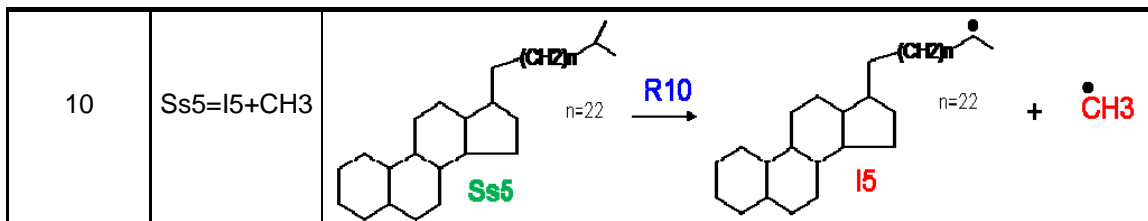
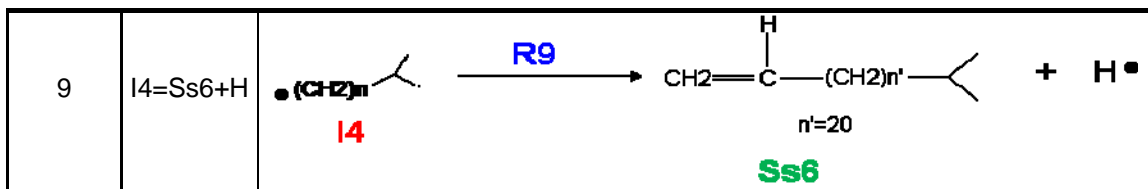
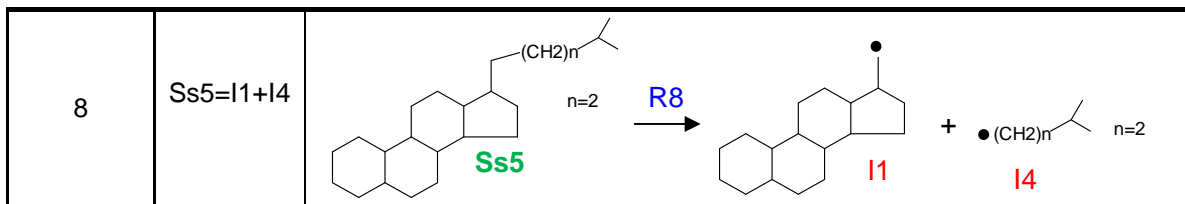
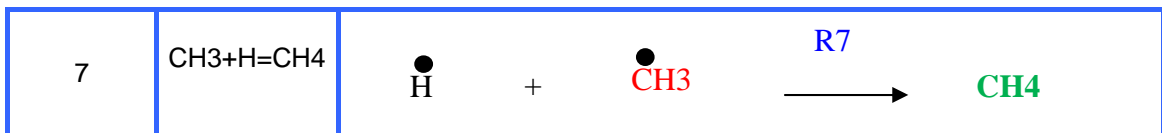
APENDICE A

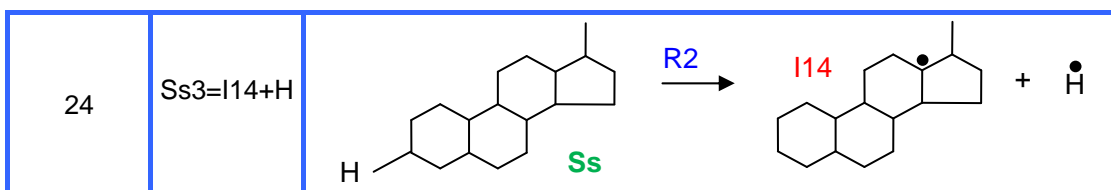
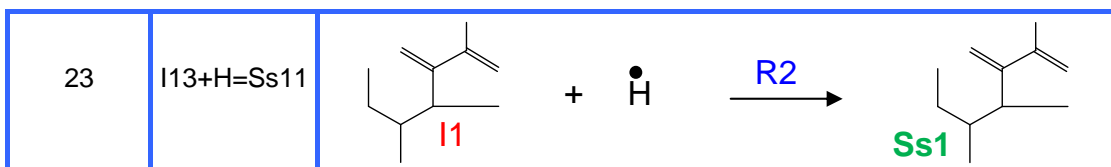
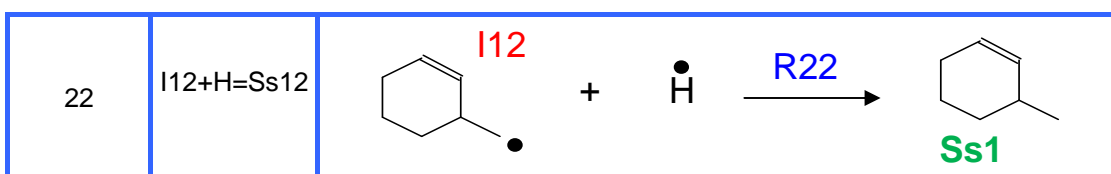
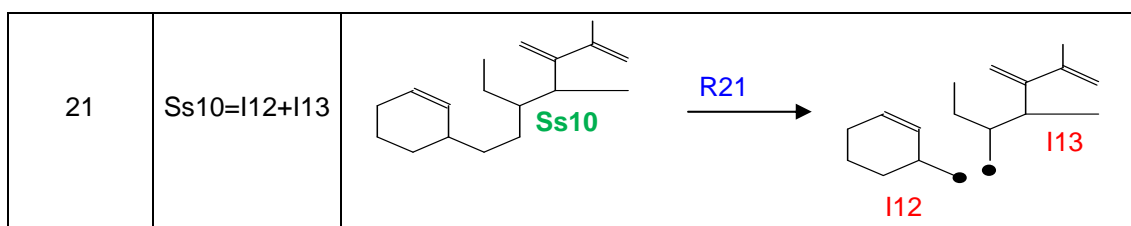
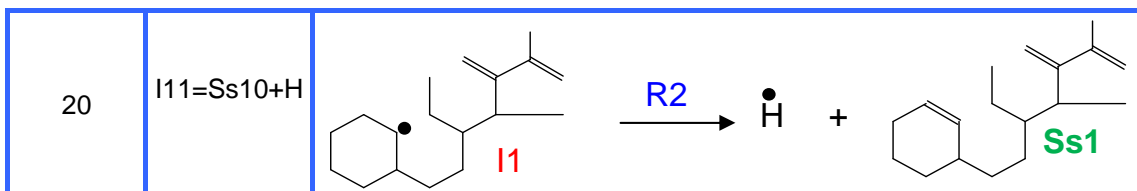
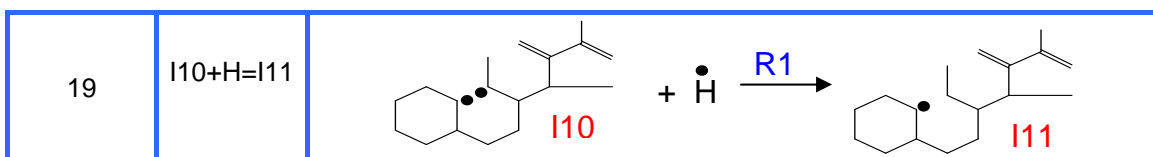
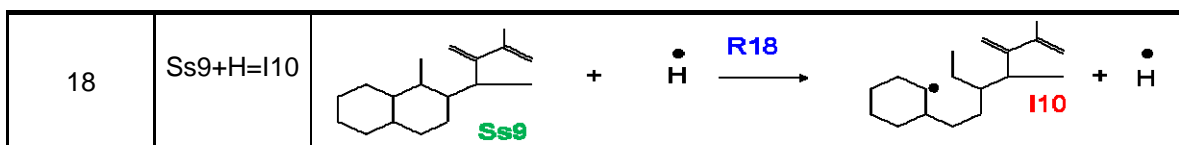
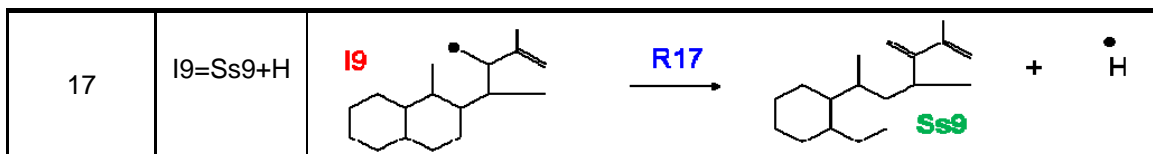
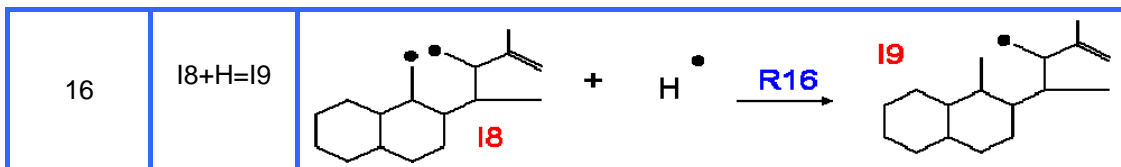
Red de reacciones inicialmente propuesta y depurada como mecanismo del proceso AQC[®].

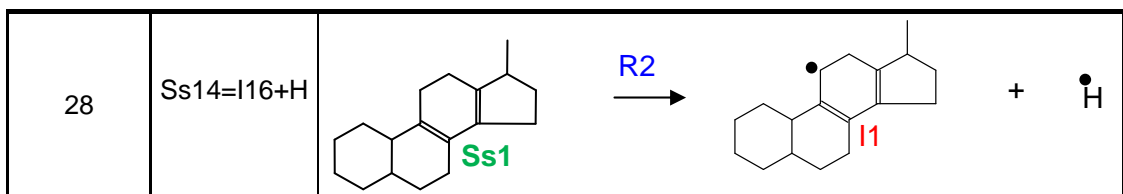
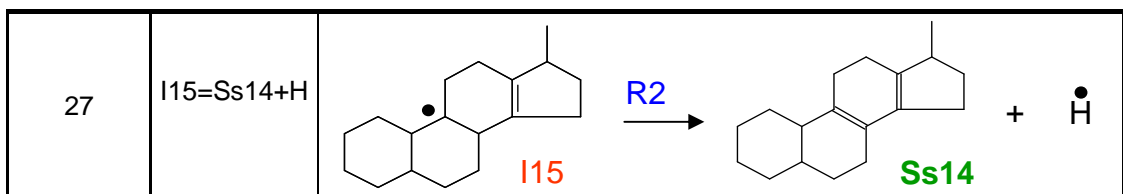
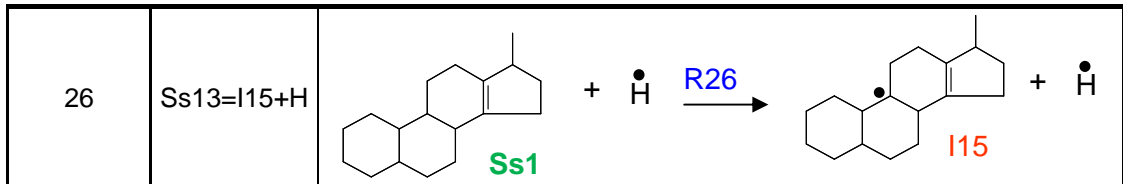
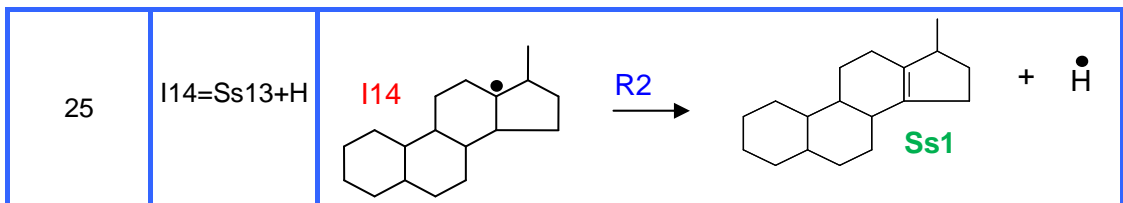
A continuación se presentan el mecanismo de reacción del proceso AQC[®] planteado por Carvajal (2007). Las reacciones que se encuentran en un marco azul son las reacciones que resultaron espontáneas después del estudio termodinámico realizado en el presente Trabajo Especial de Grado.

Reacciones con Saturados.

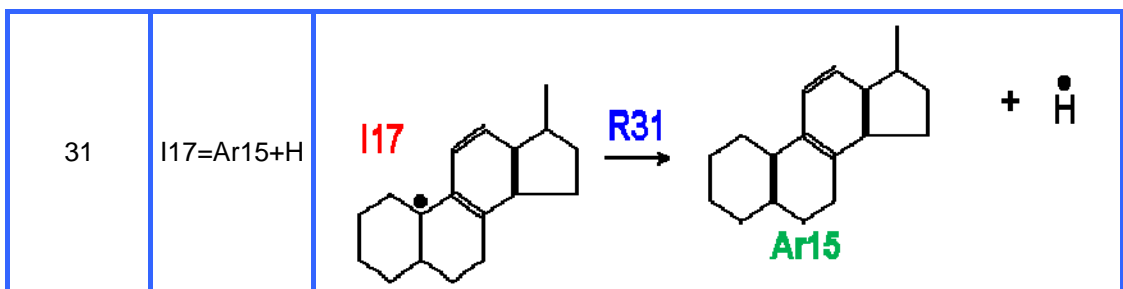
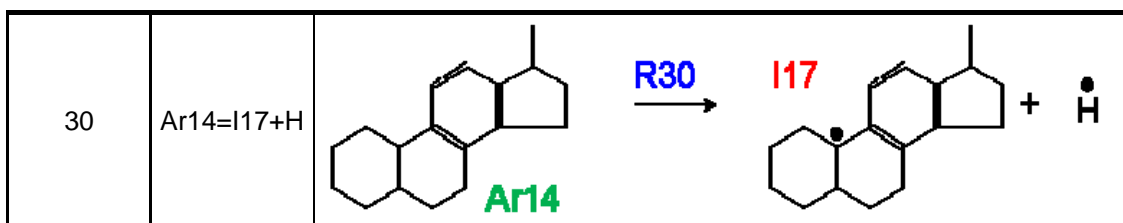
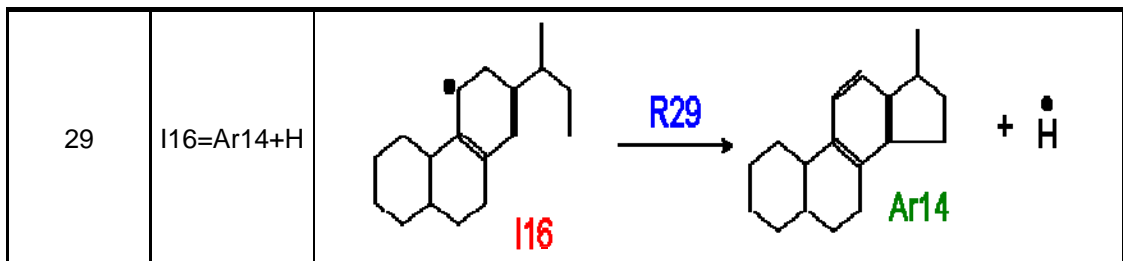


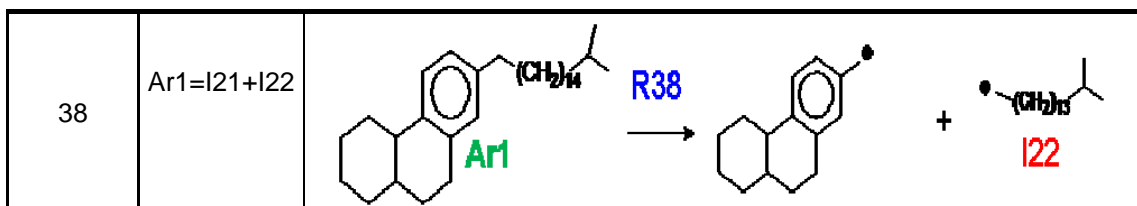
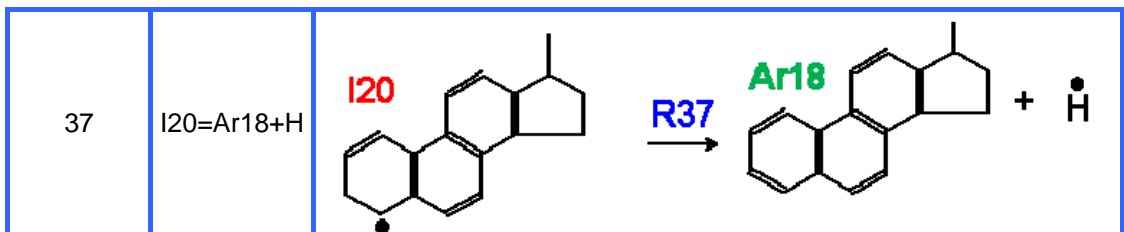
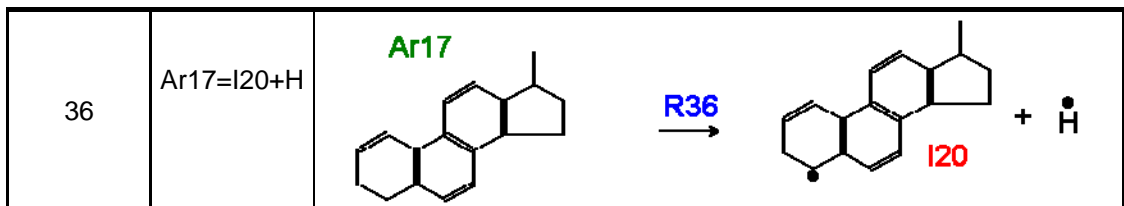
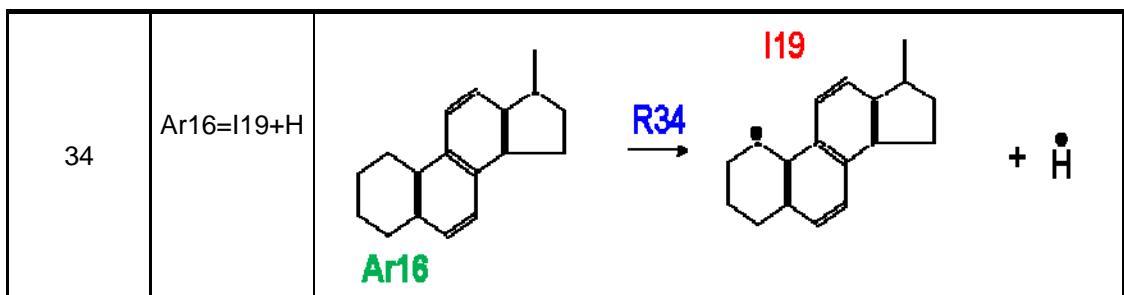
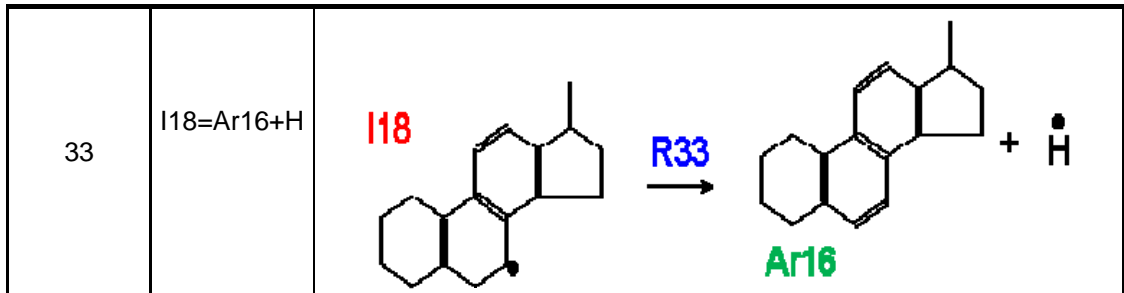
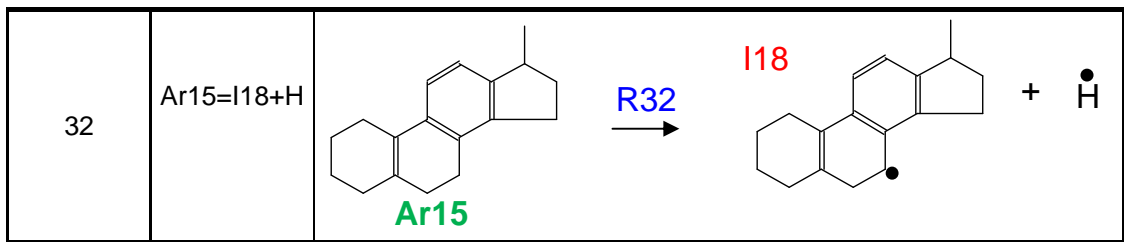


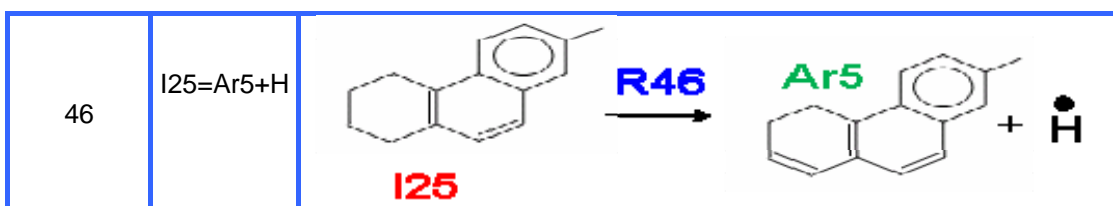
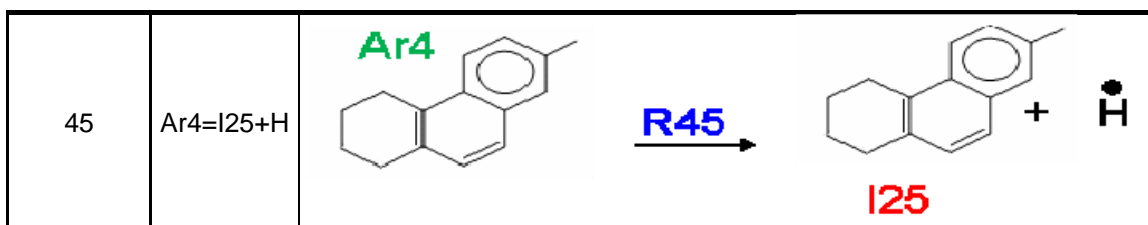
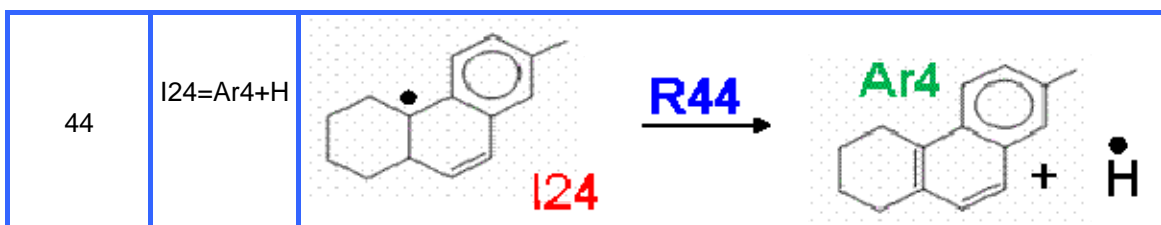
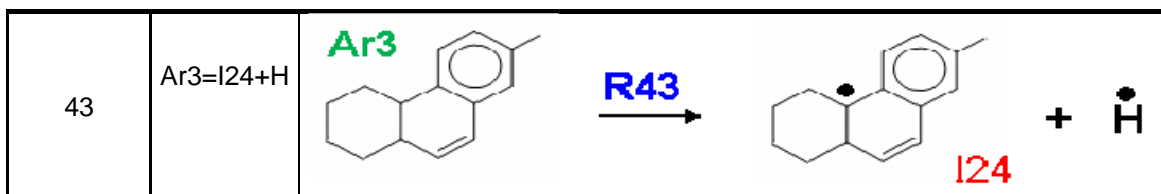
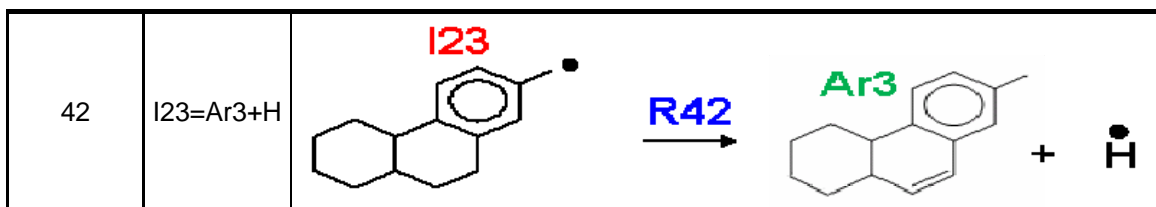
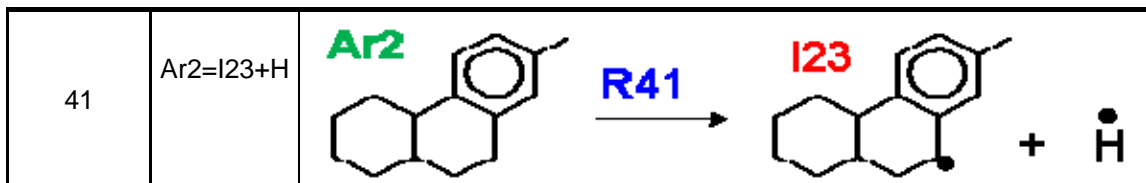
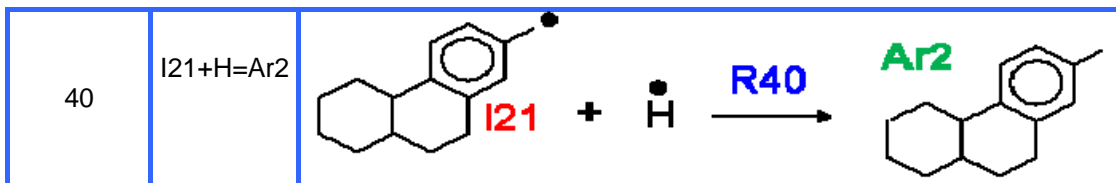
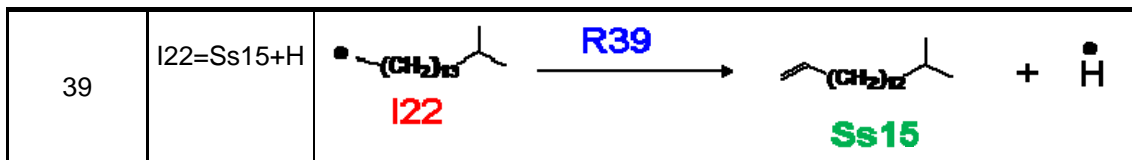


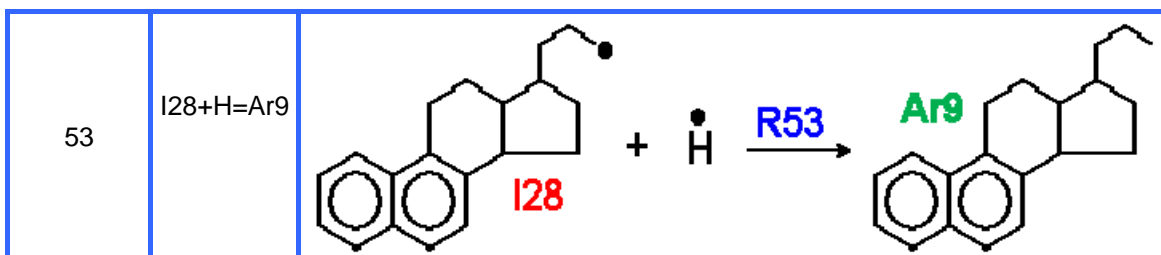
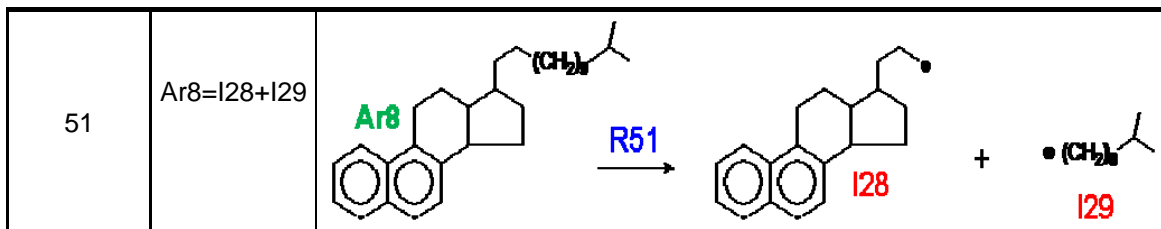
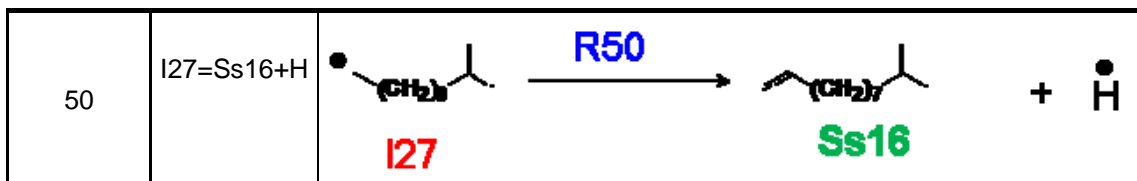
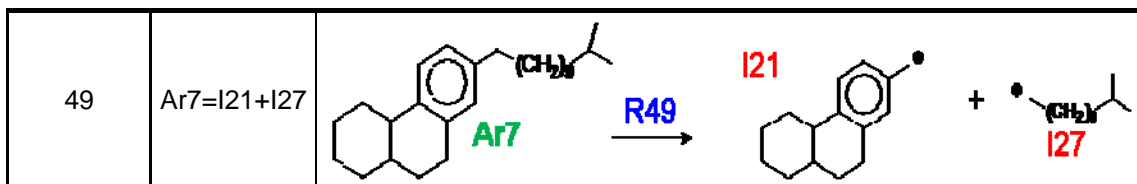
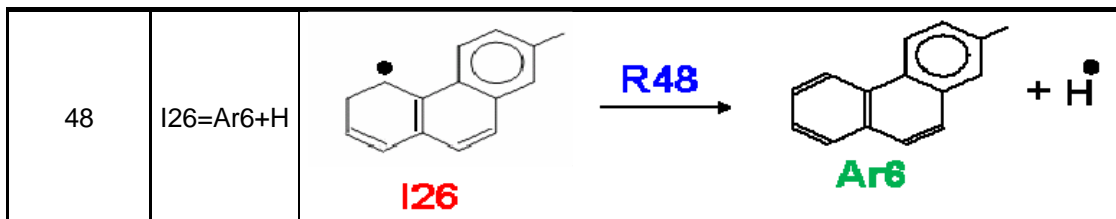
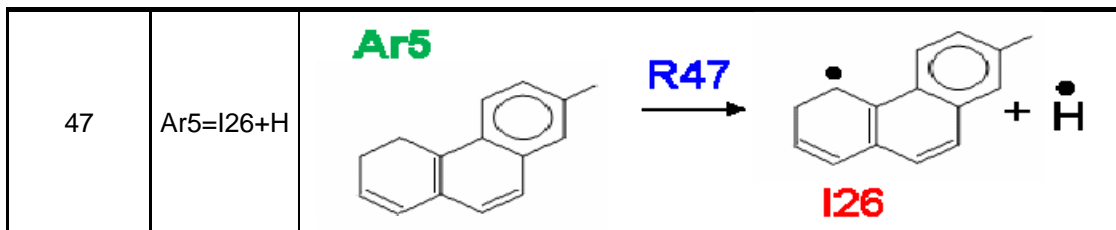


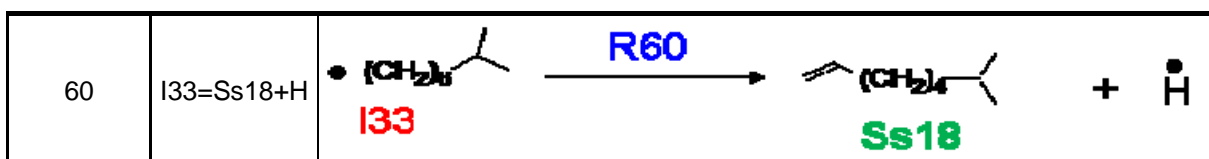
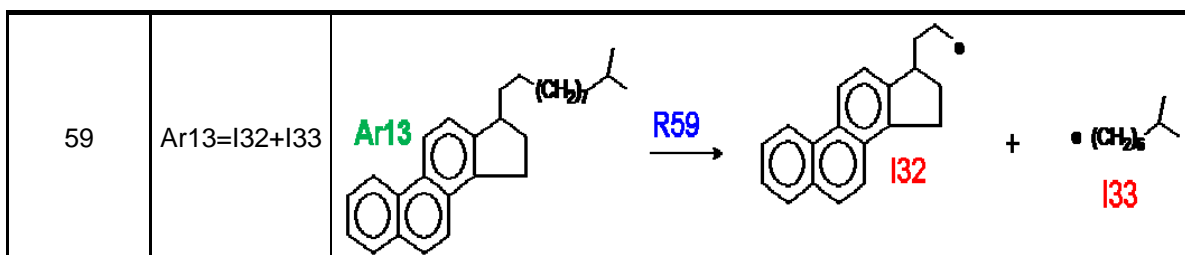
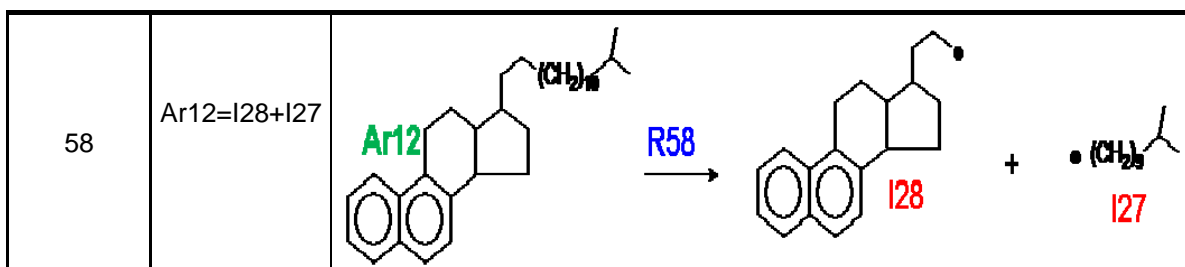
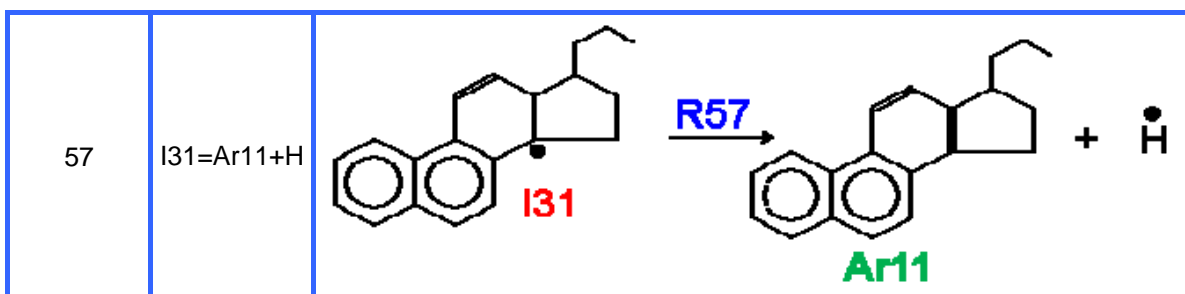
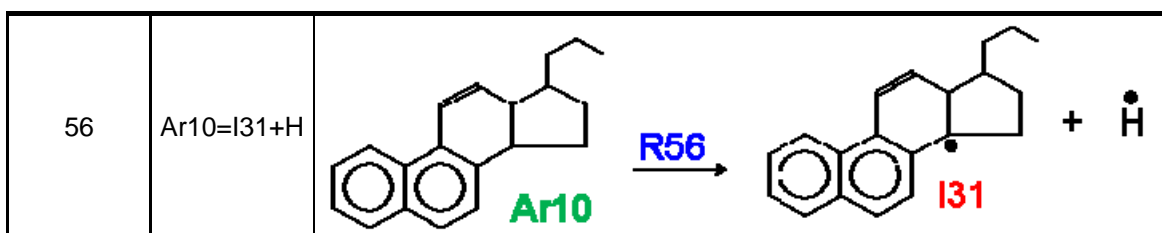
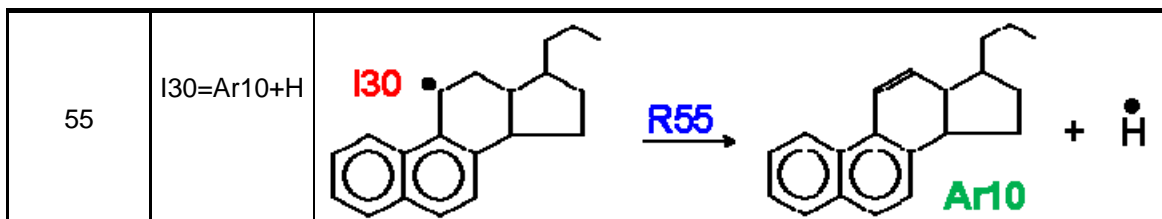
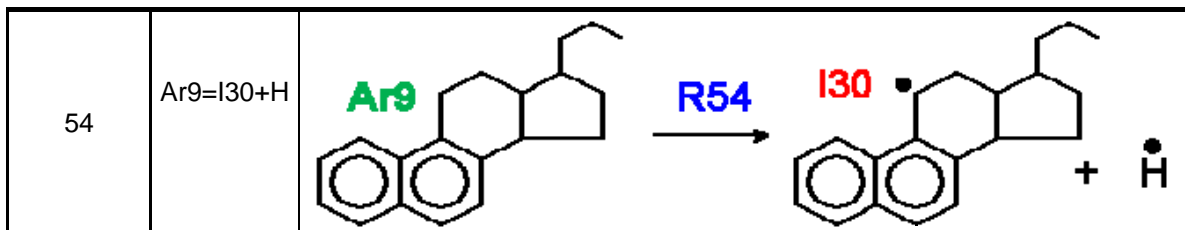
Reacciones con Aromáticos

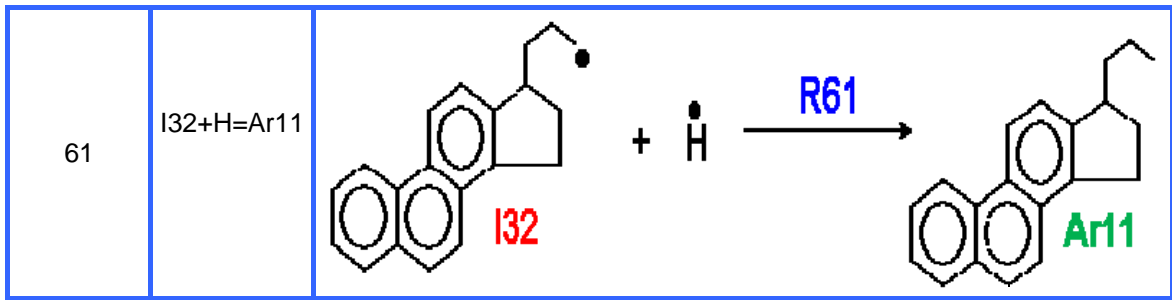




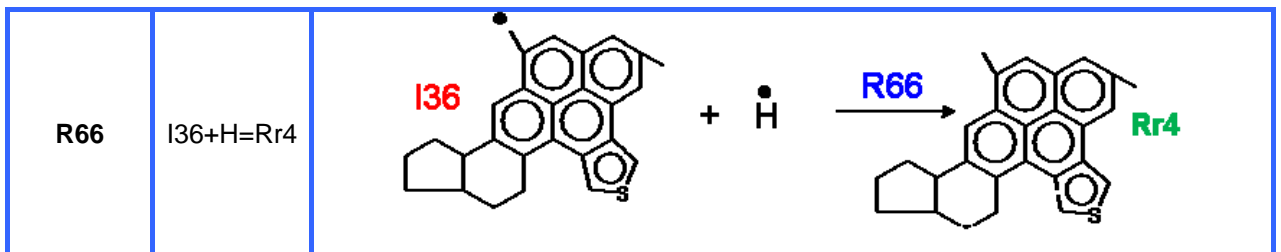
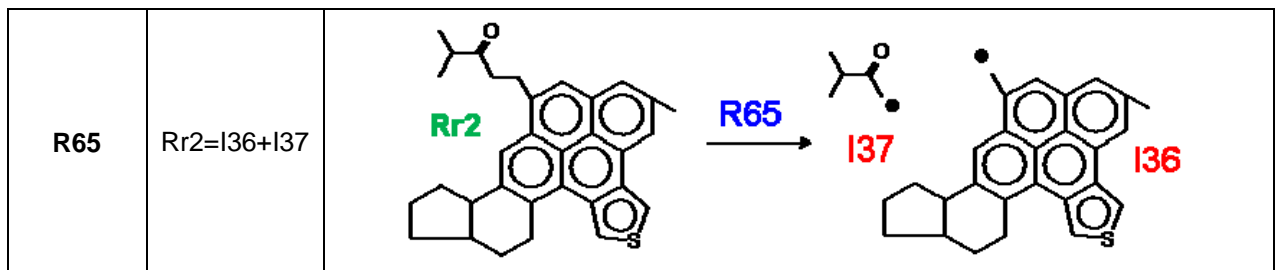
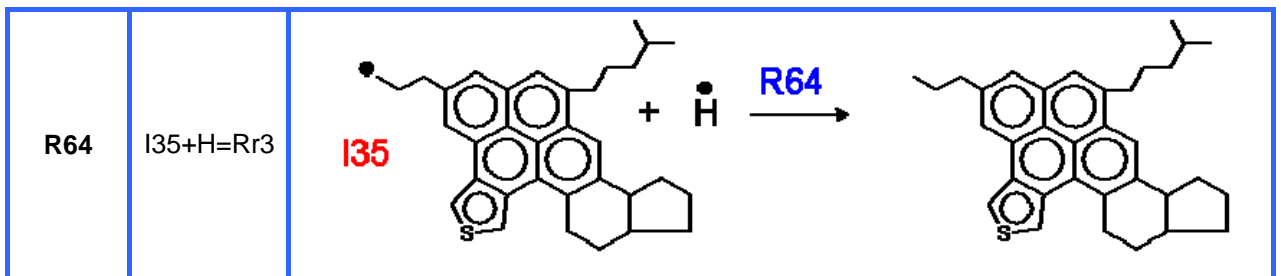
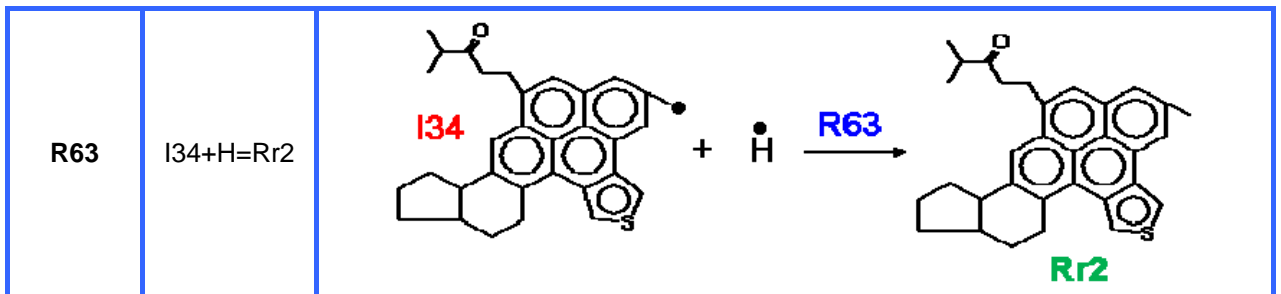
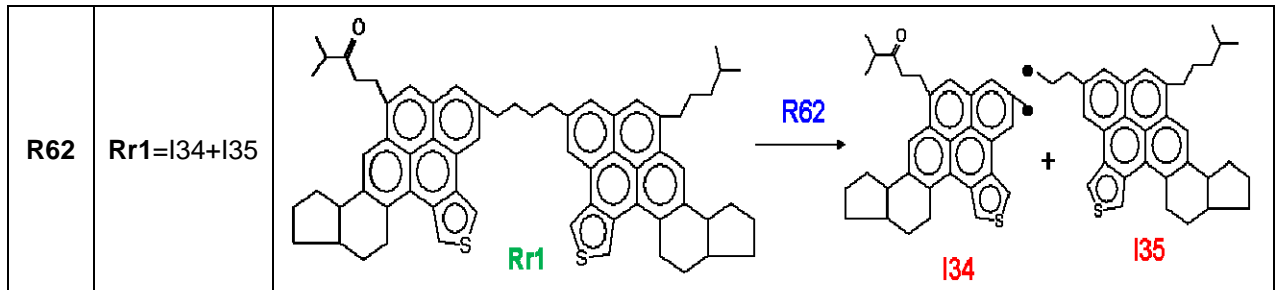


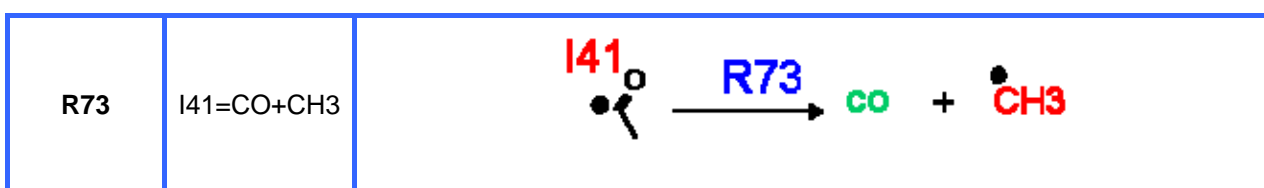
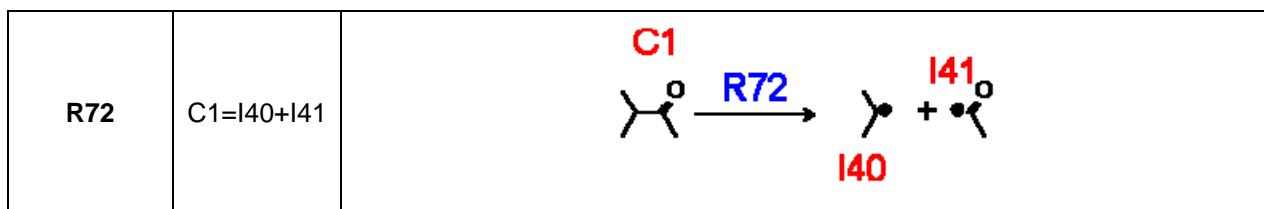
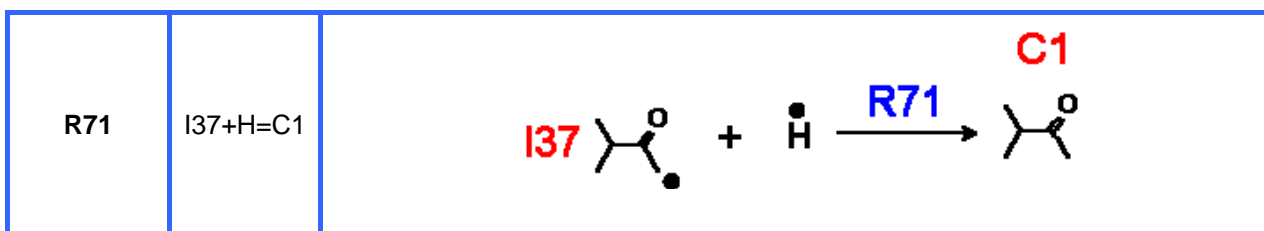
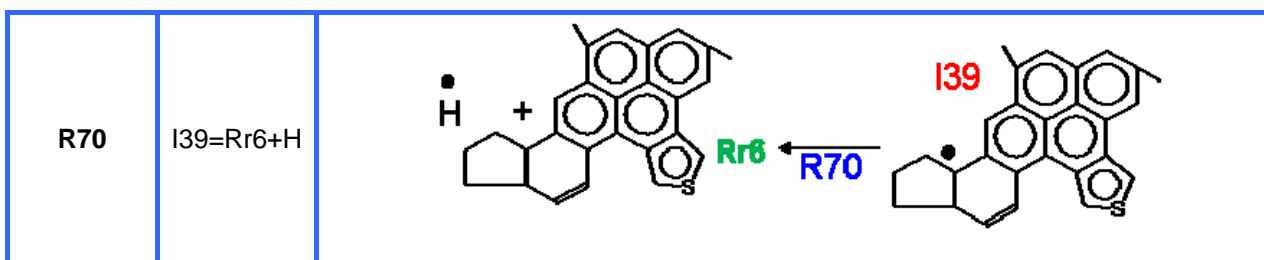
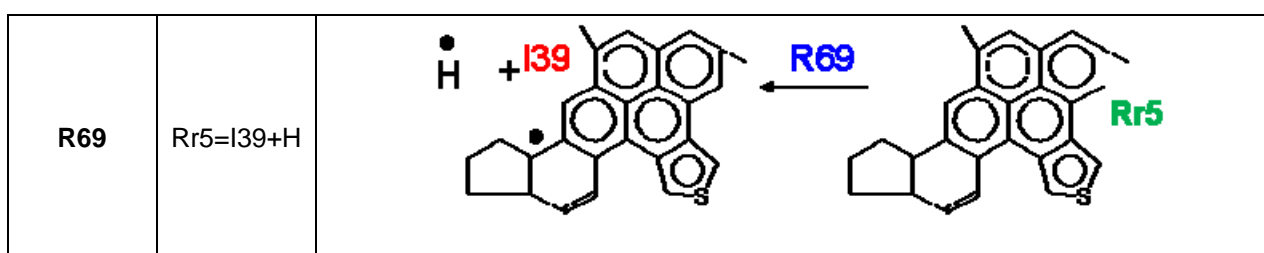
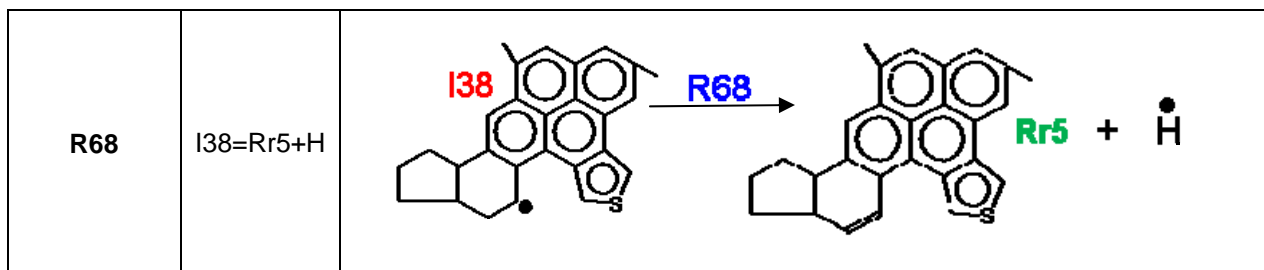
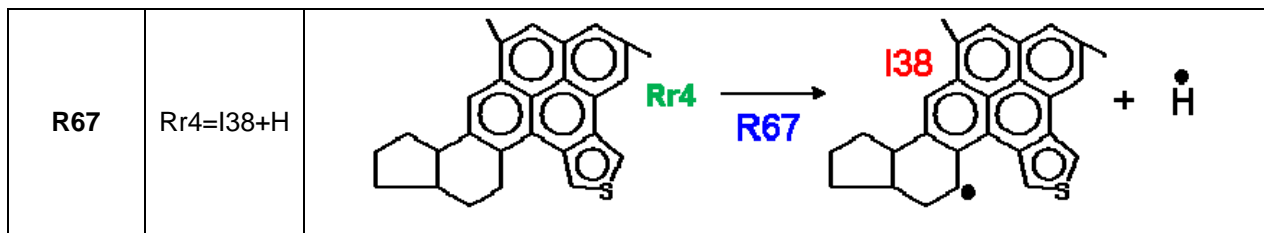


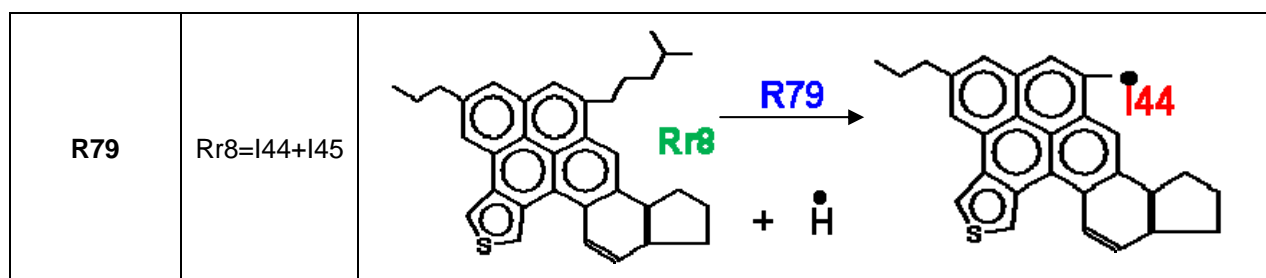
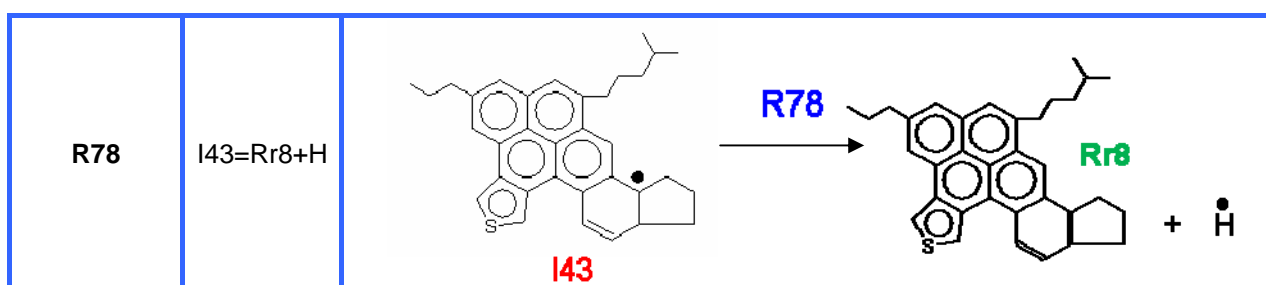
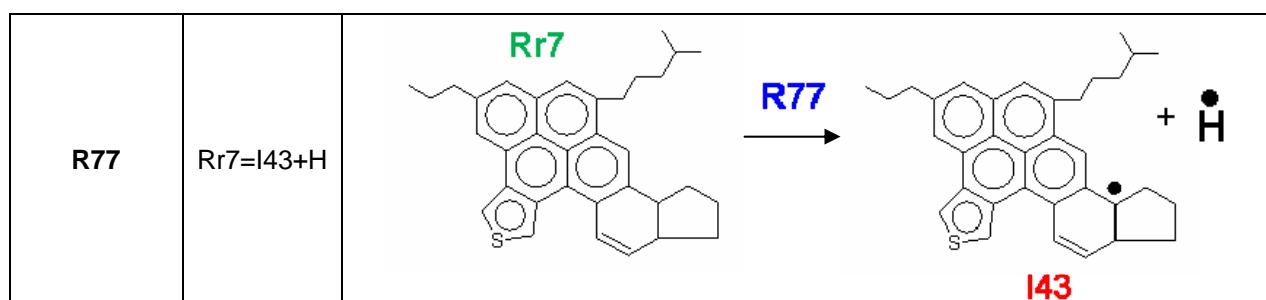
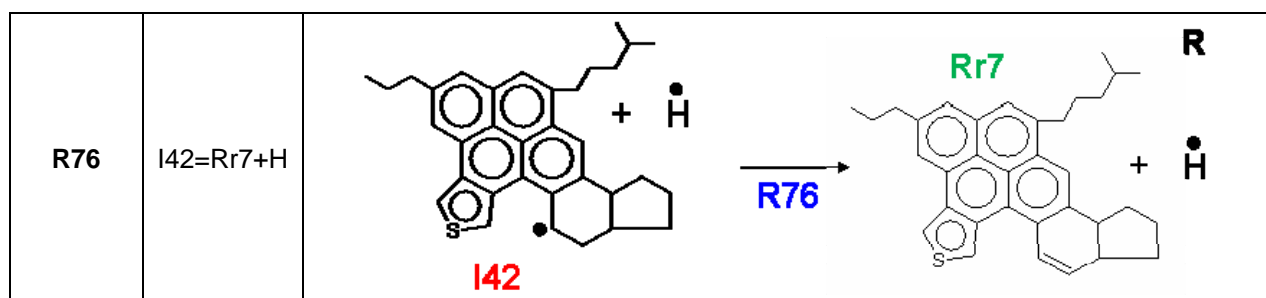
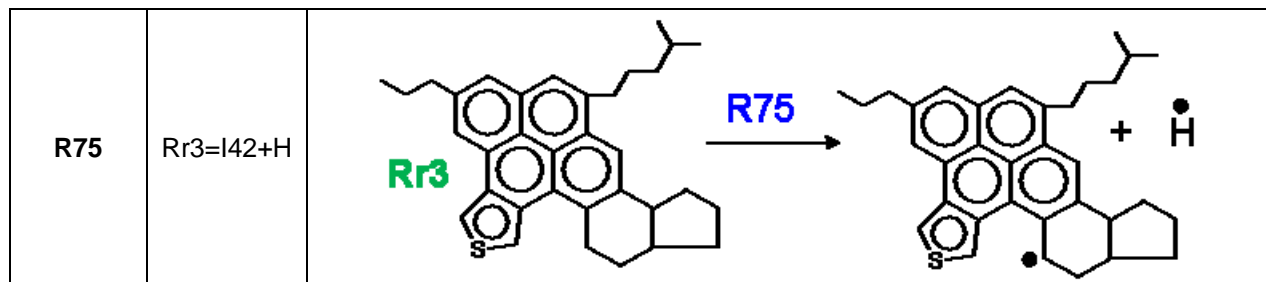
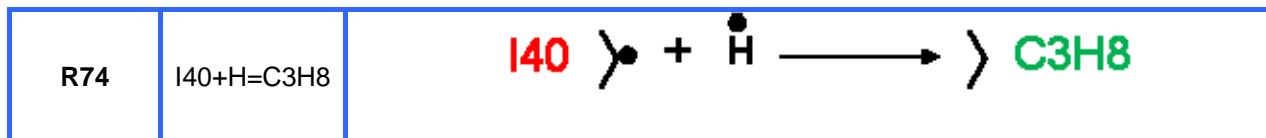


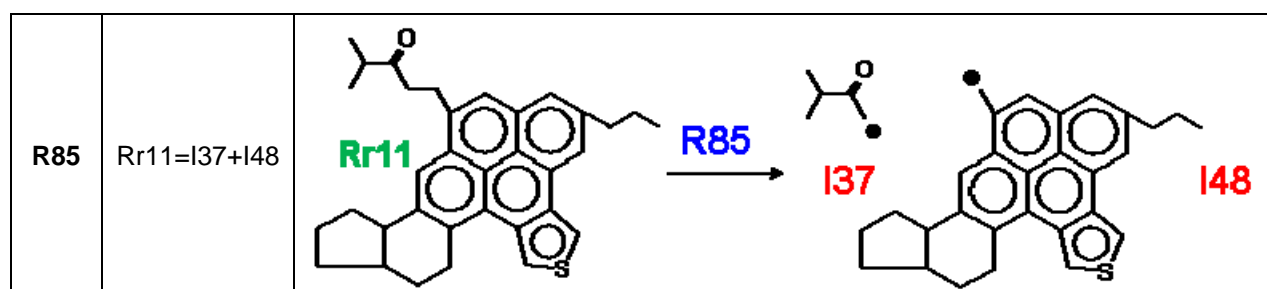
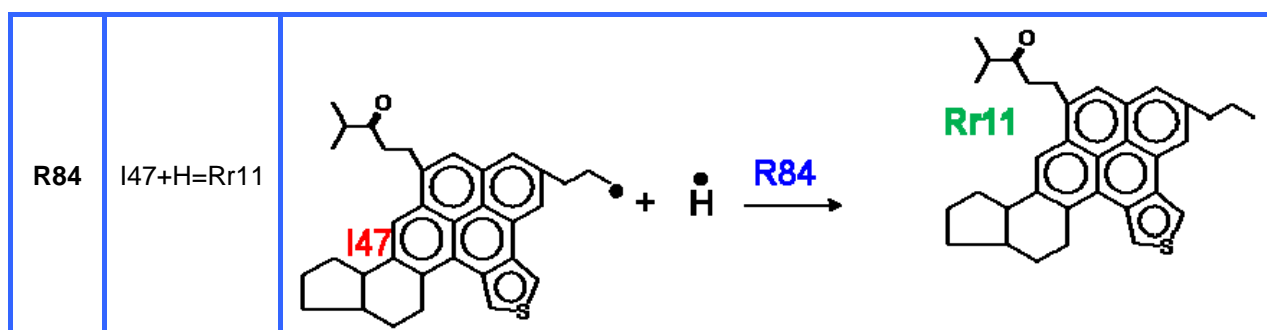
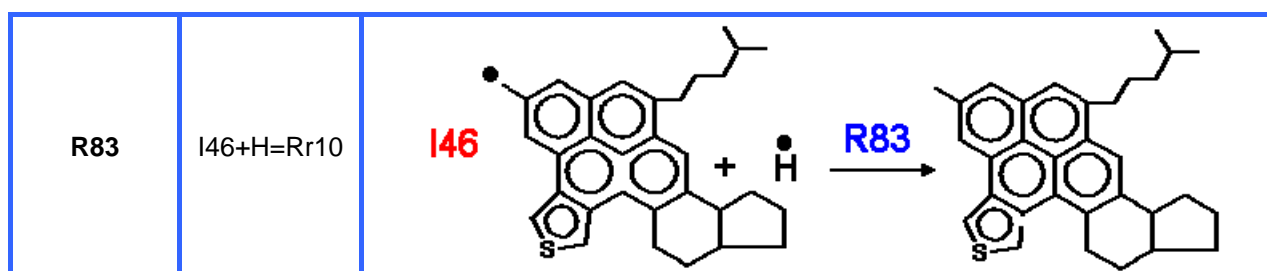
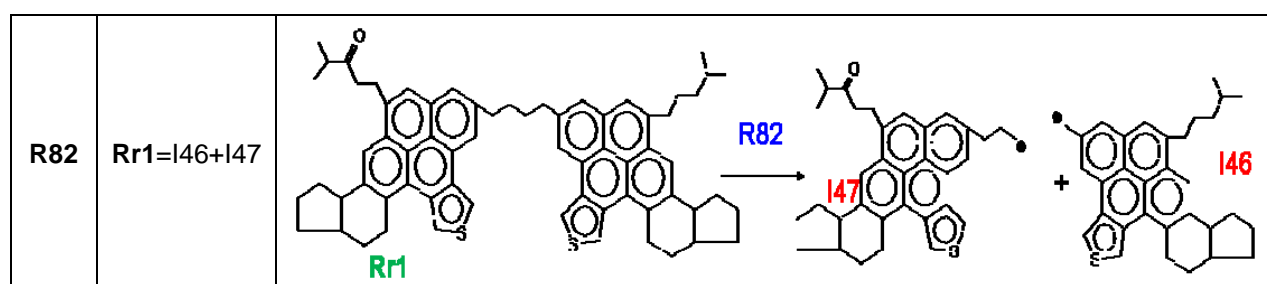
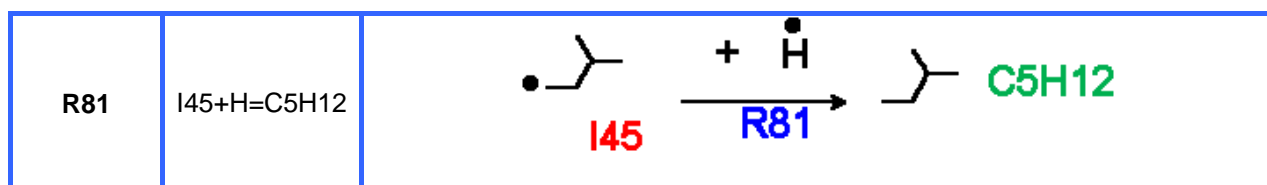
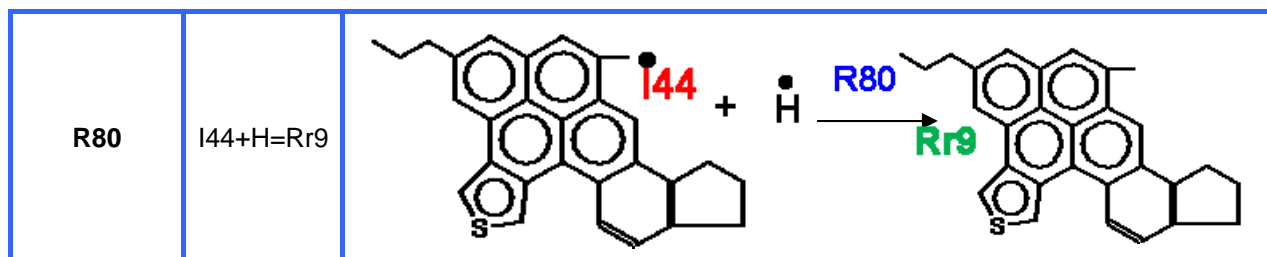


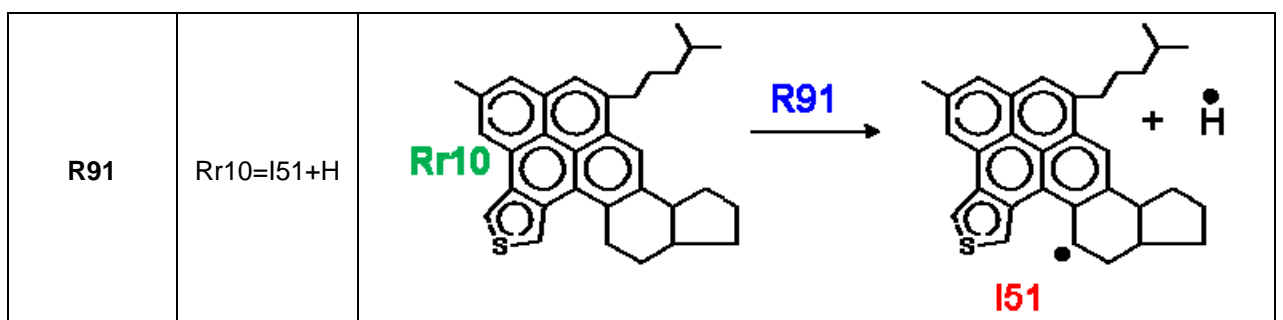
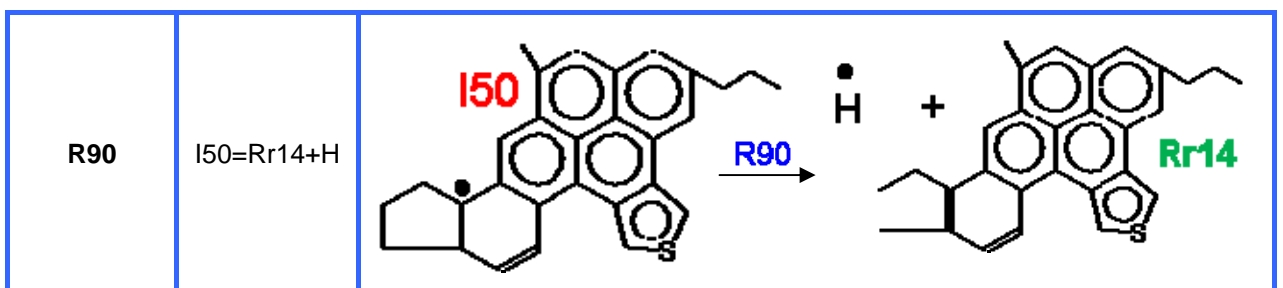
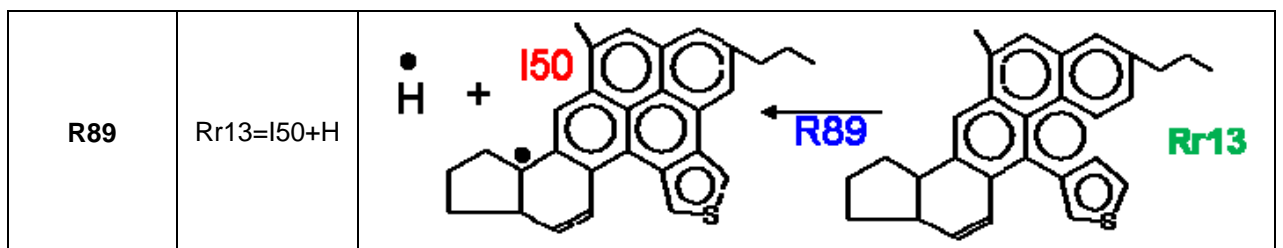
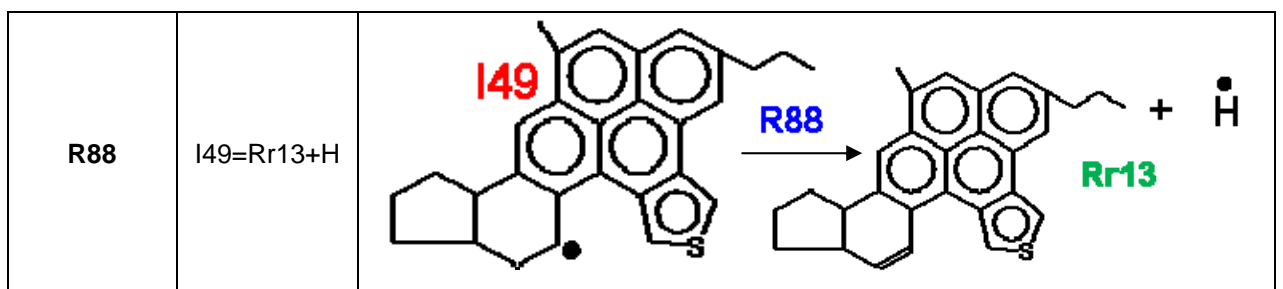
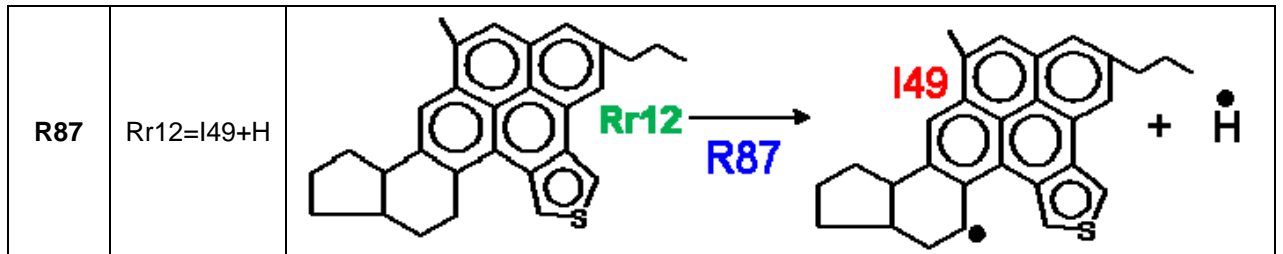
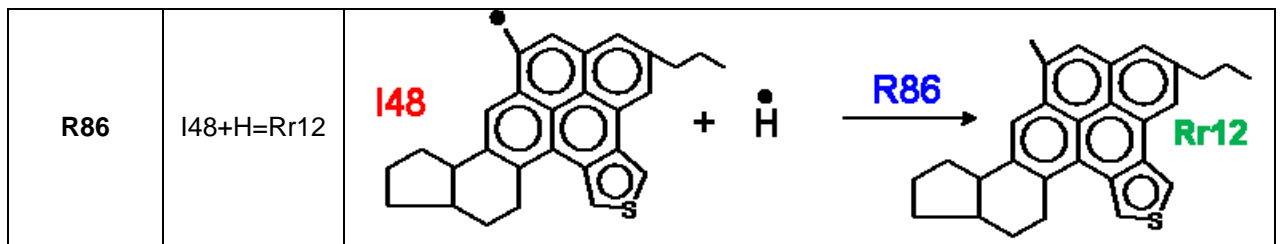
Reacciones con Resinas

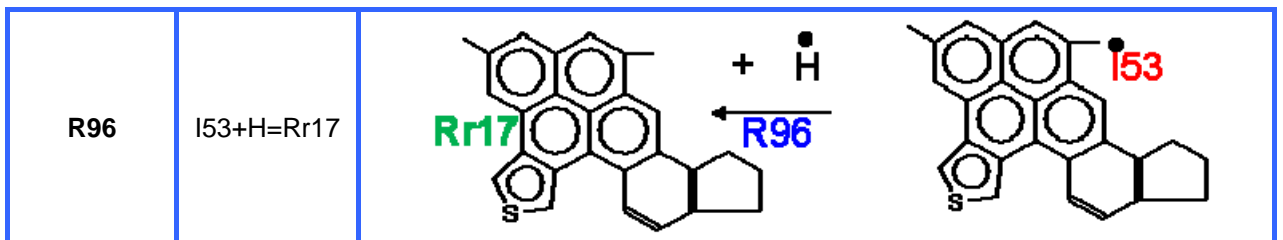
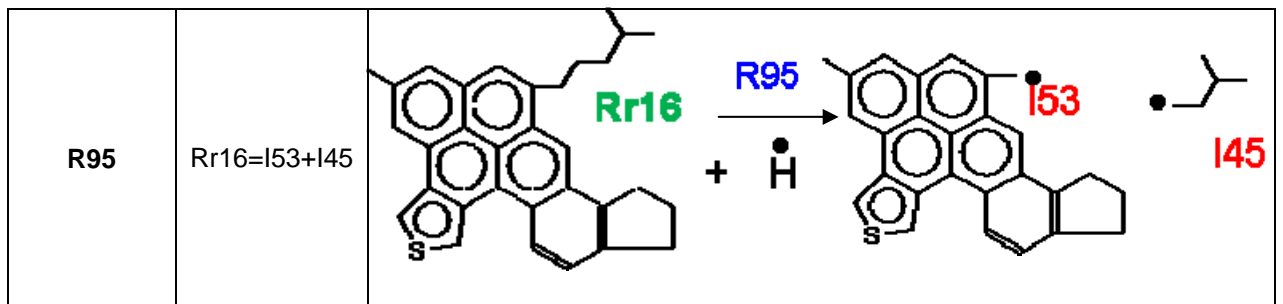
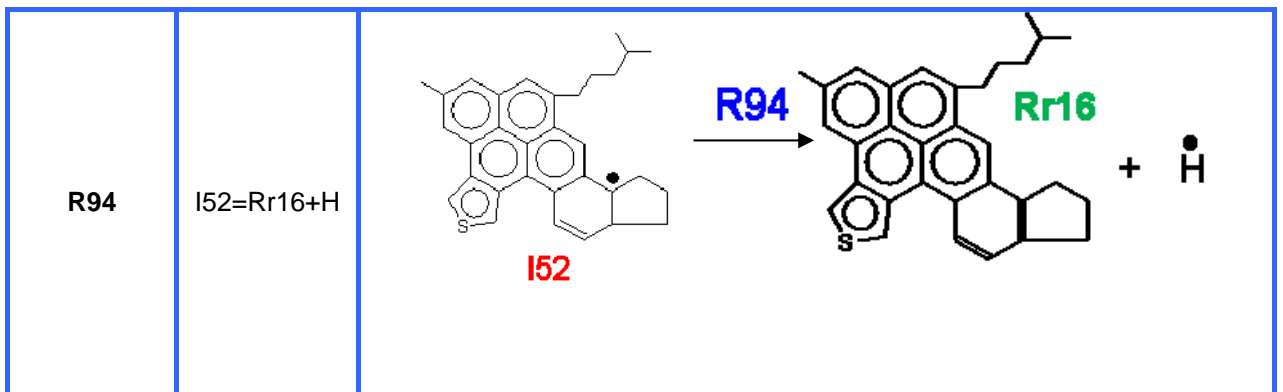
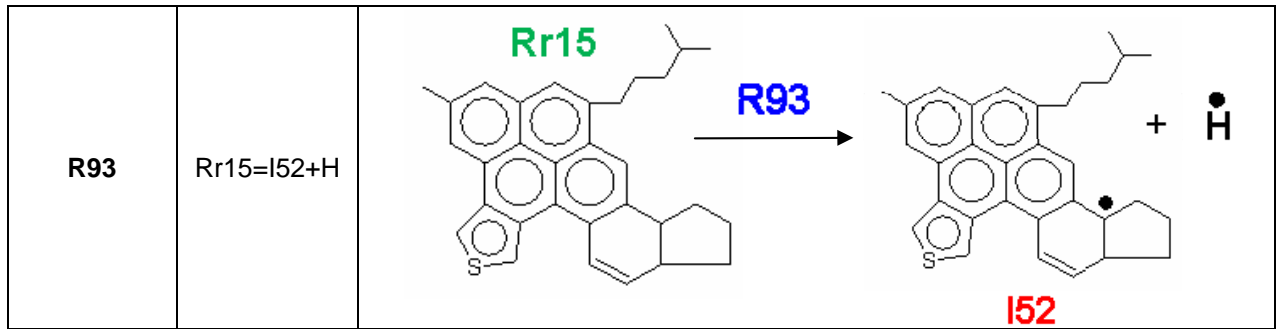
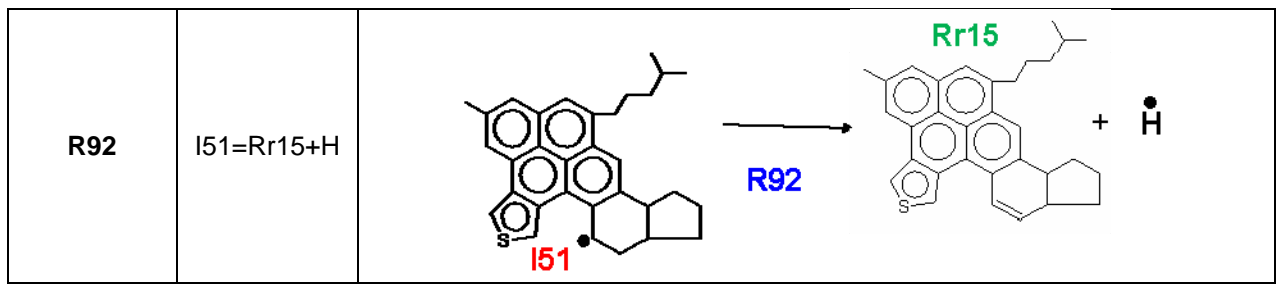


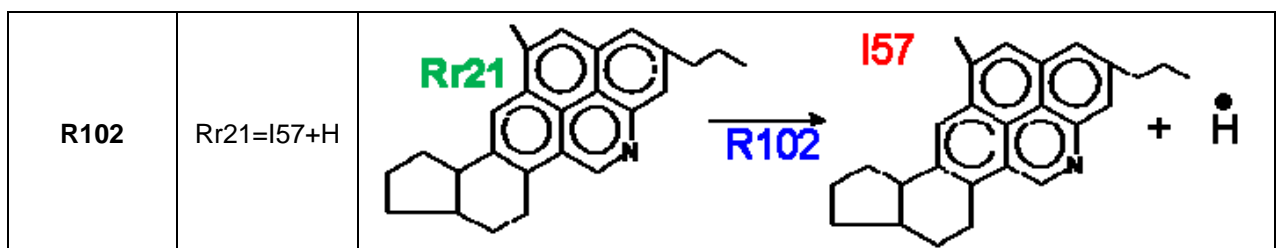
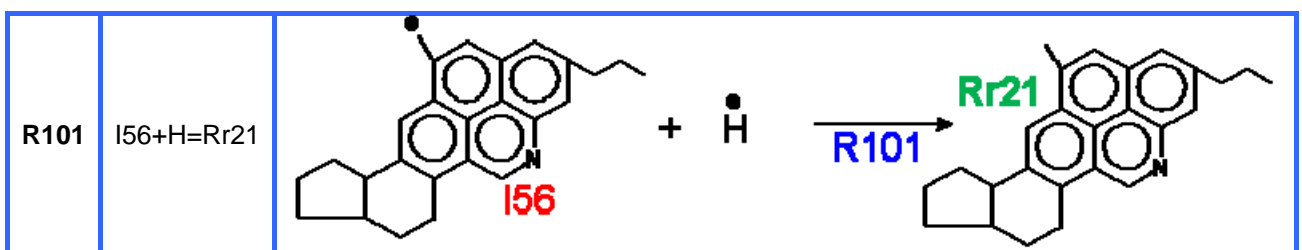
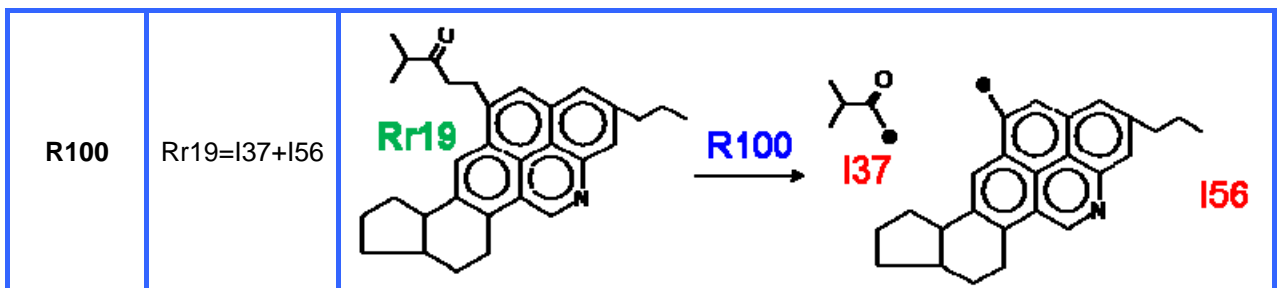
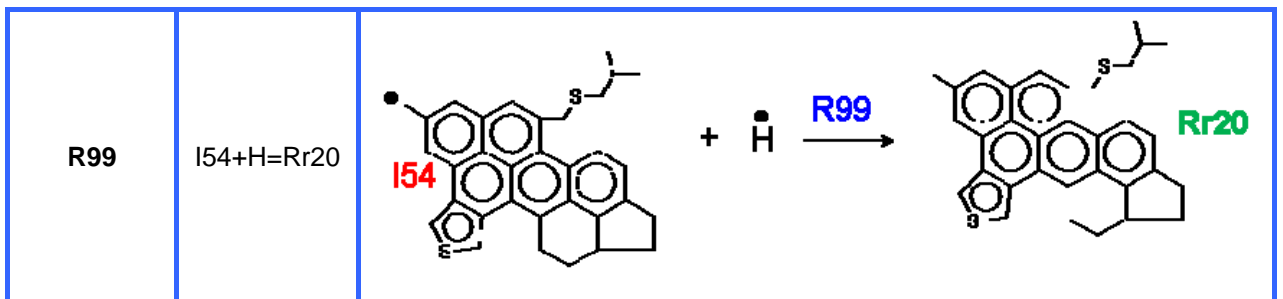
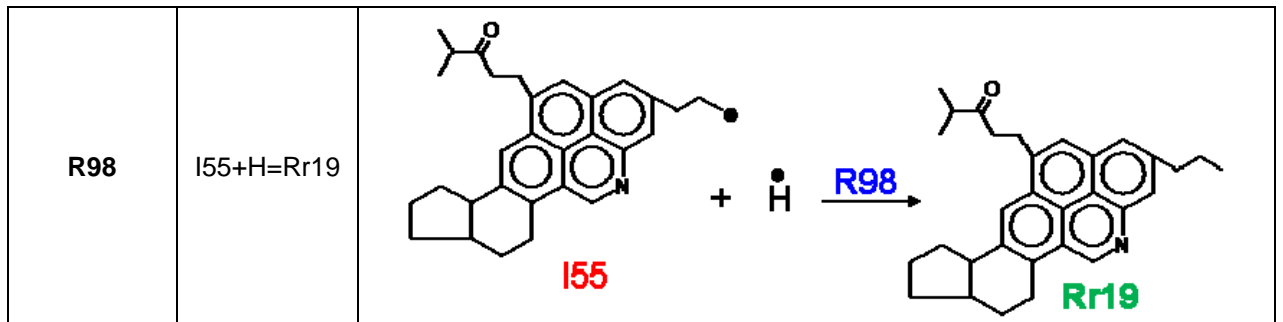
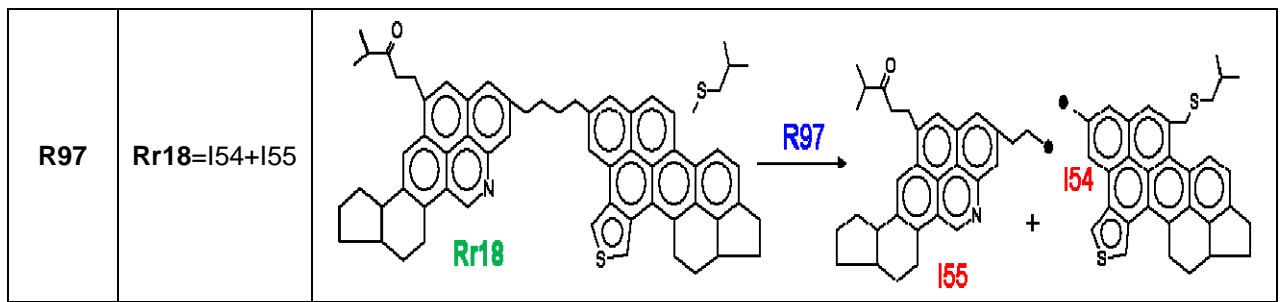


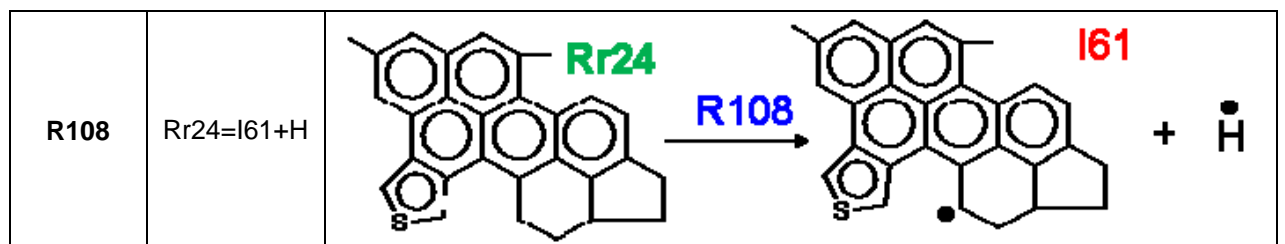
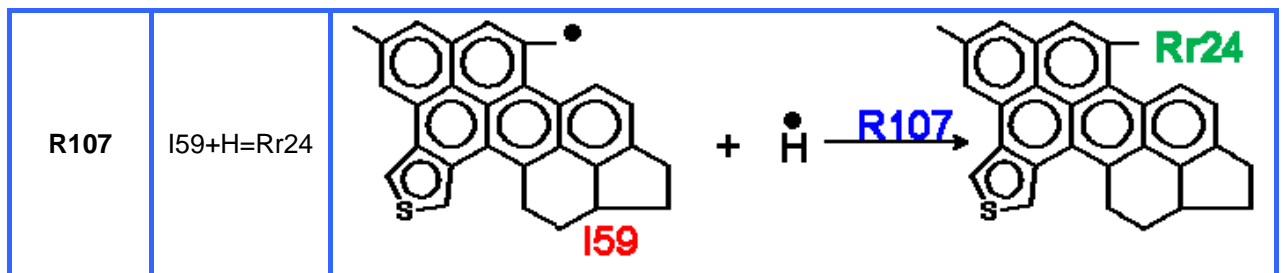
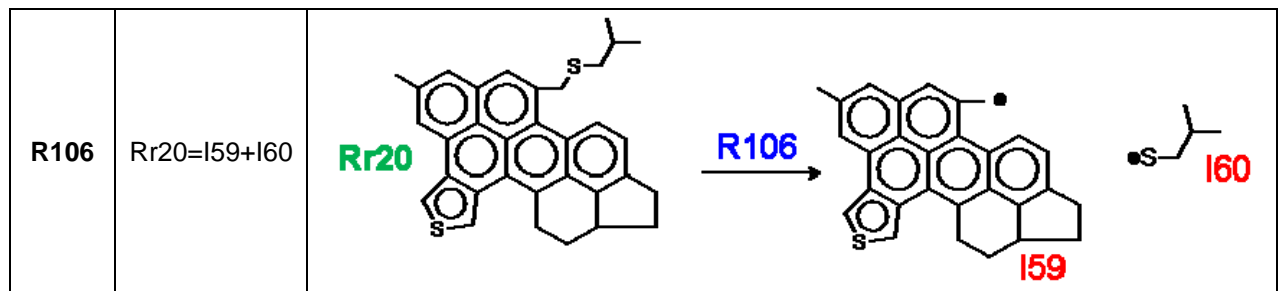
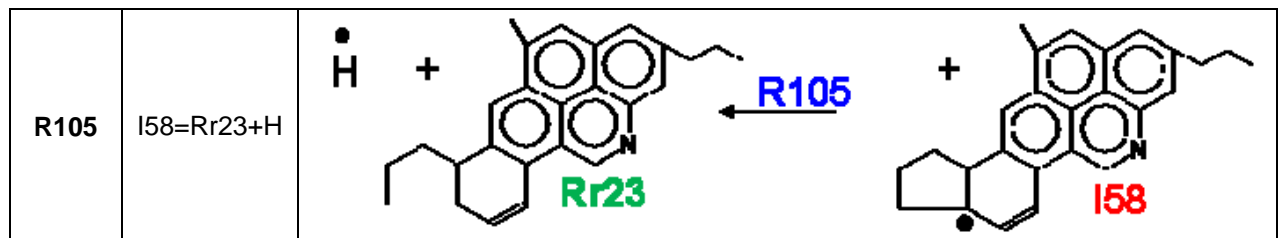
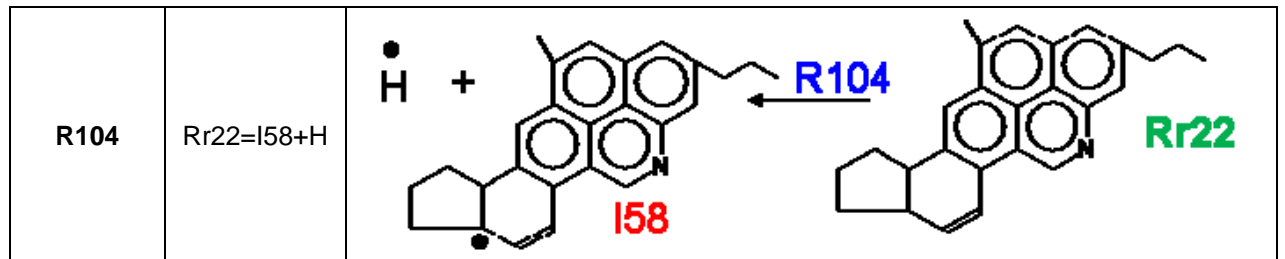
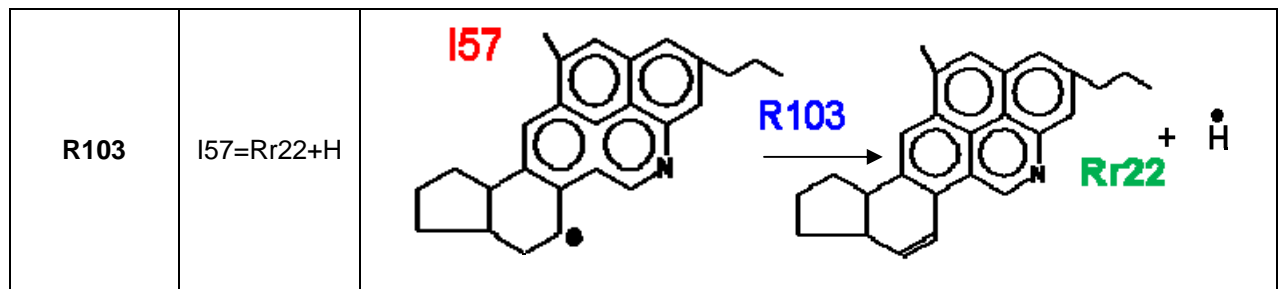


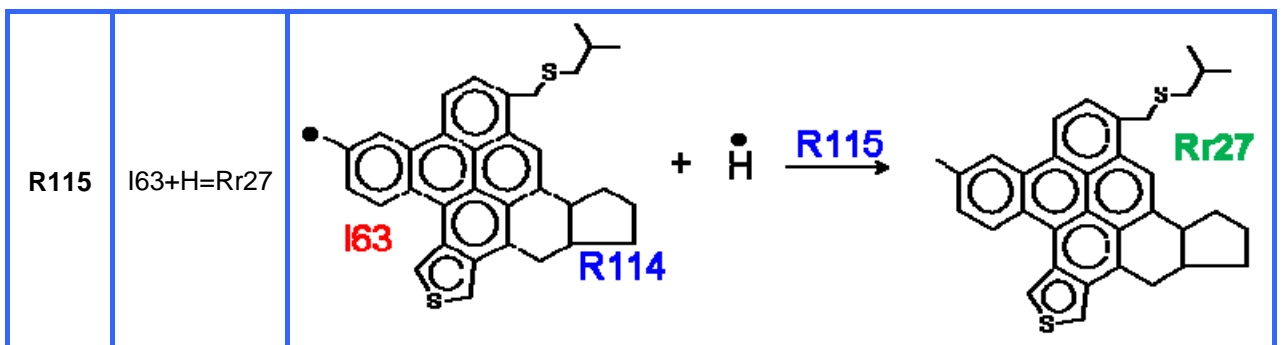
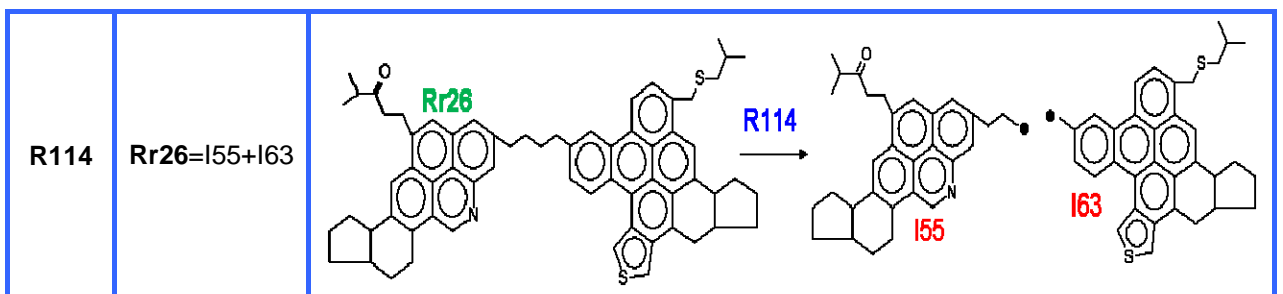
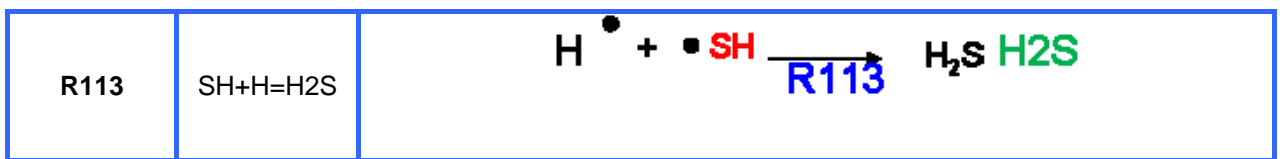
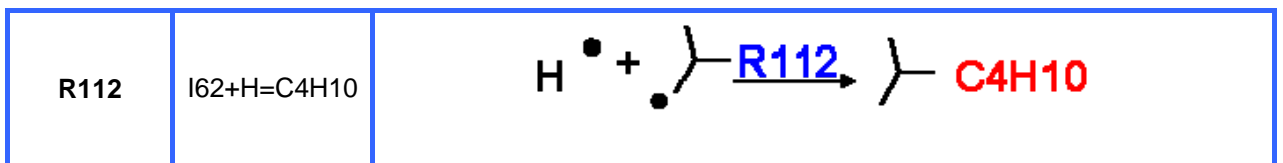
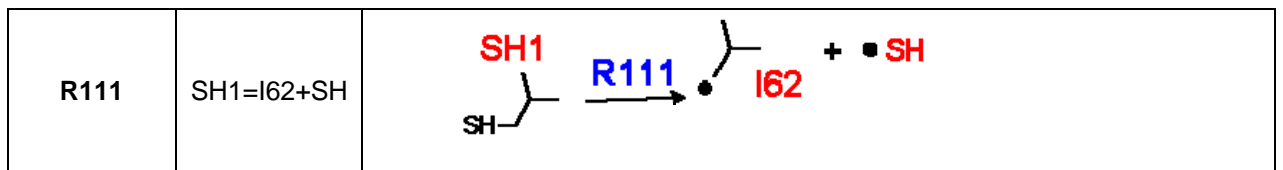
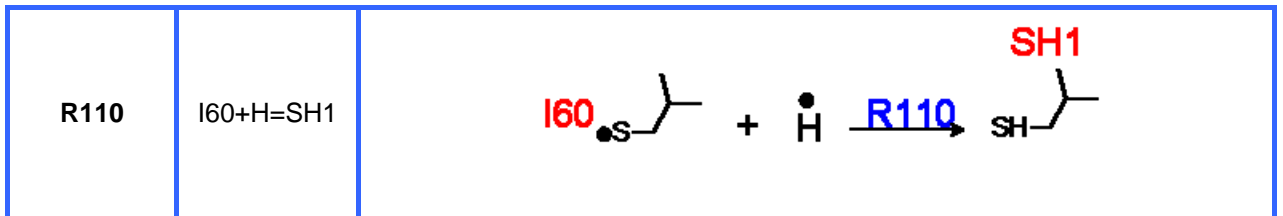
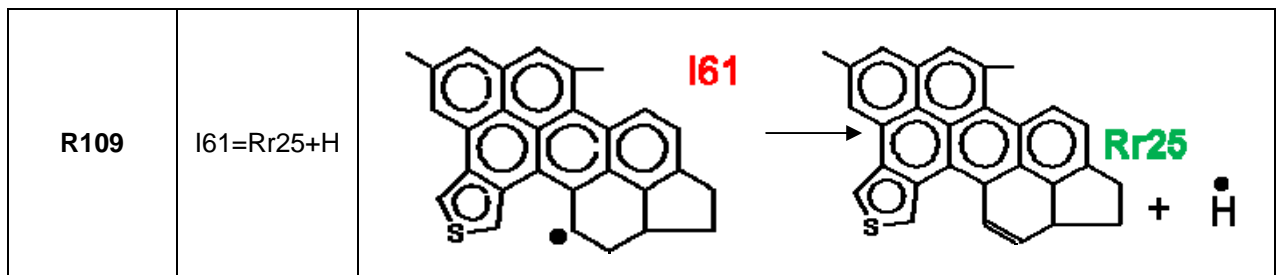


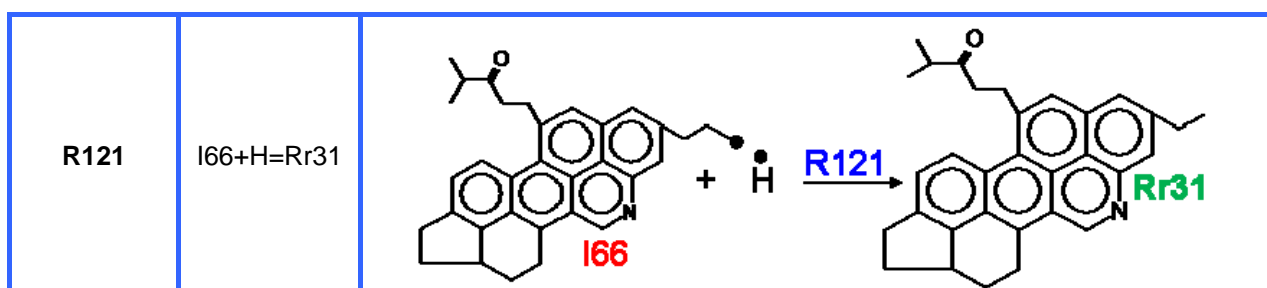
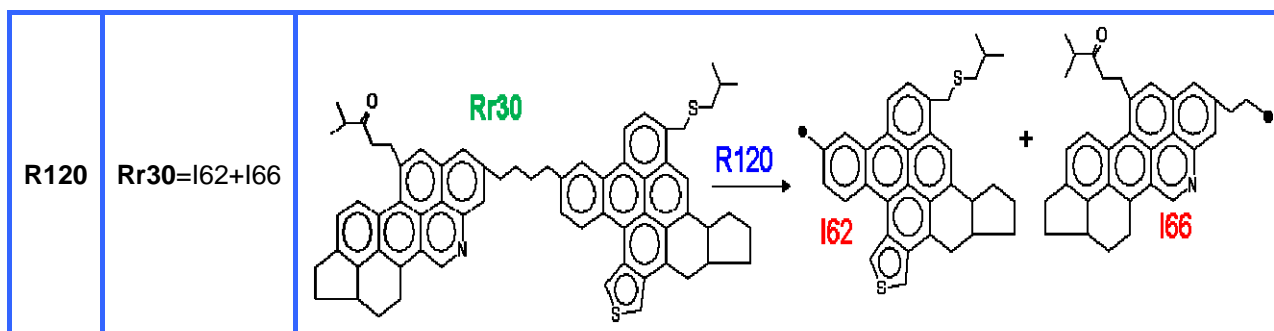
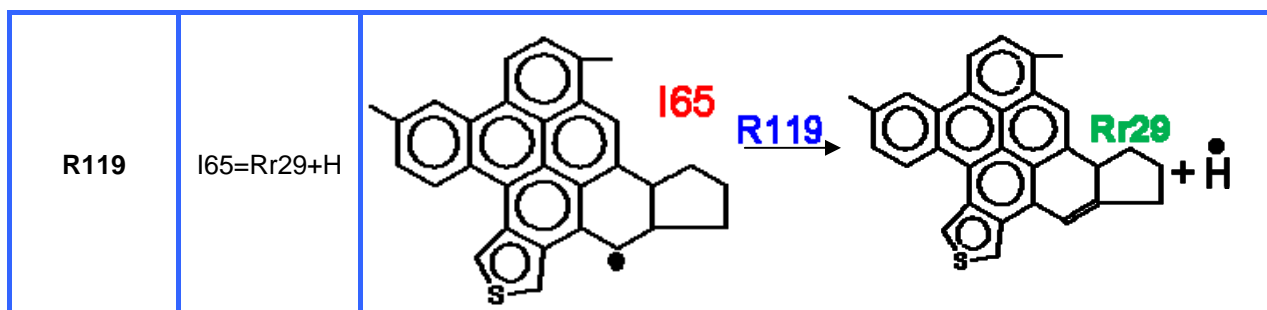
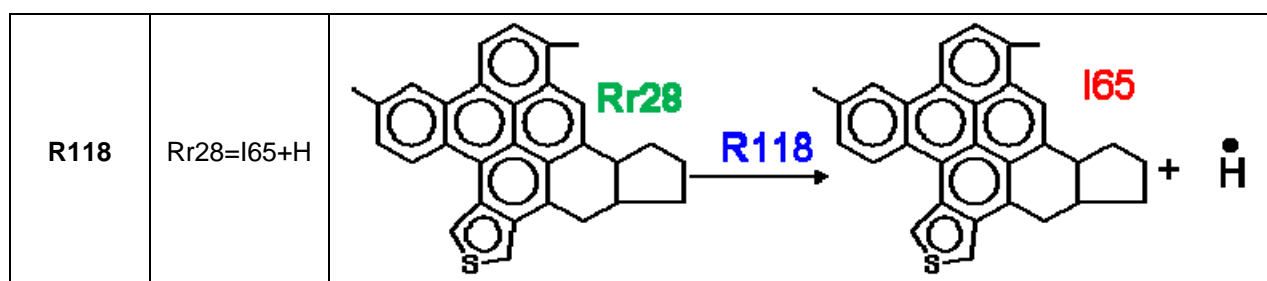
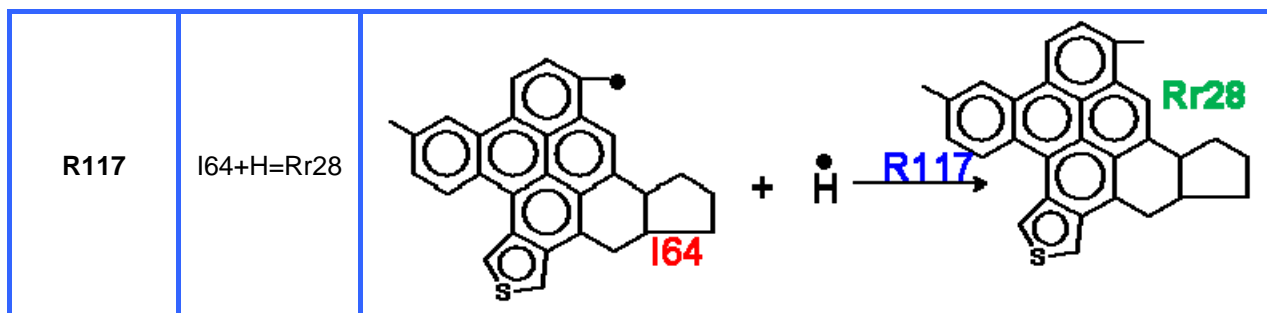
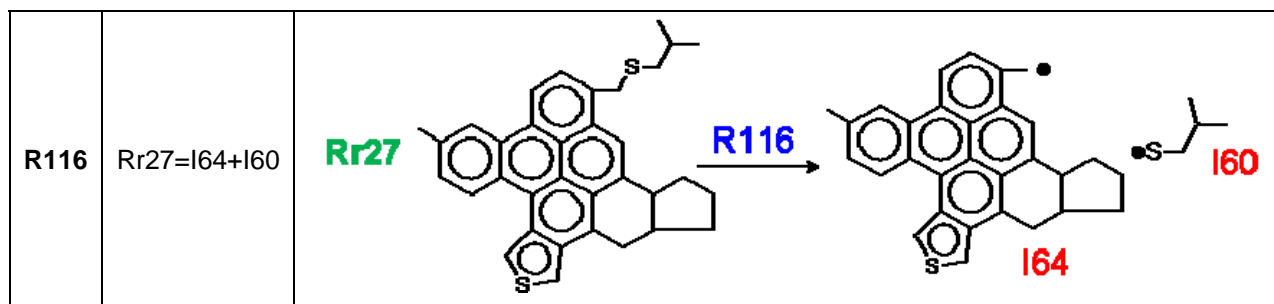


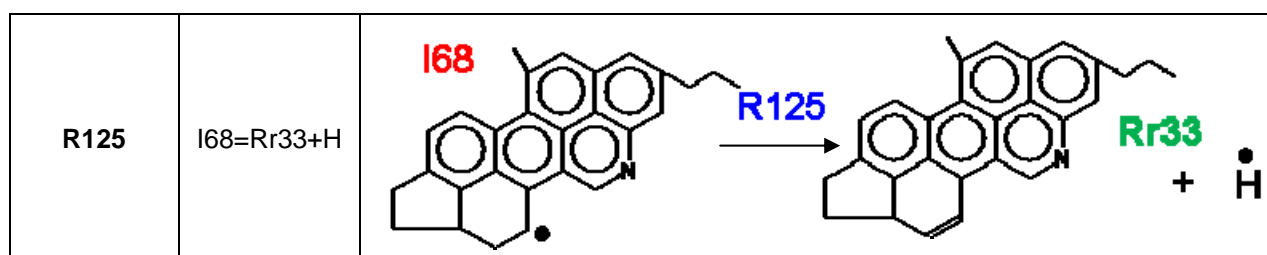
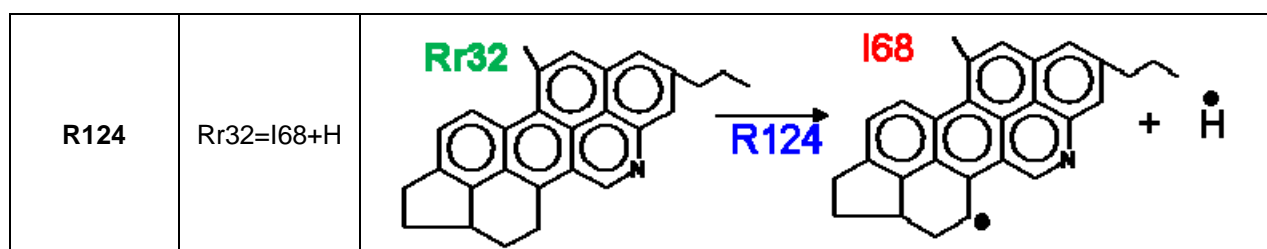
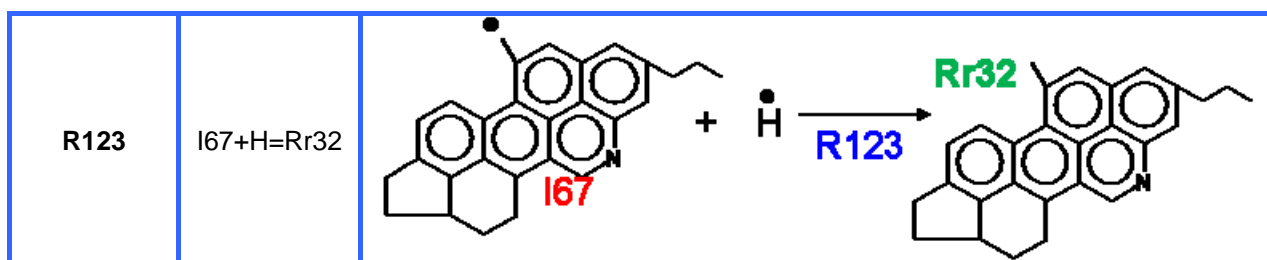
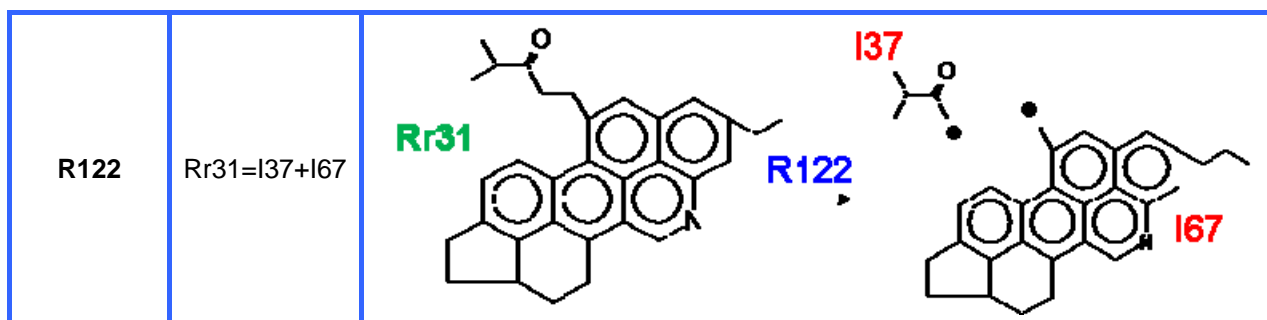




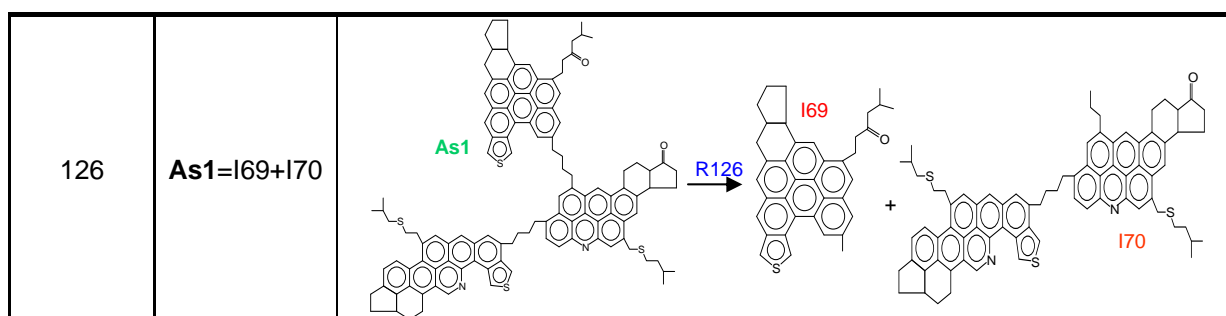


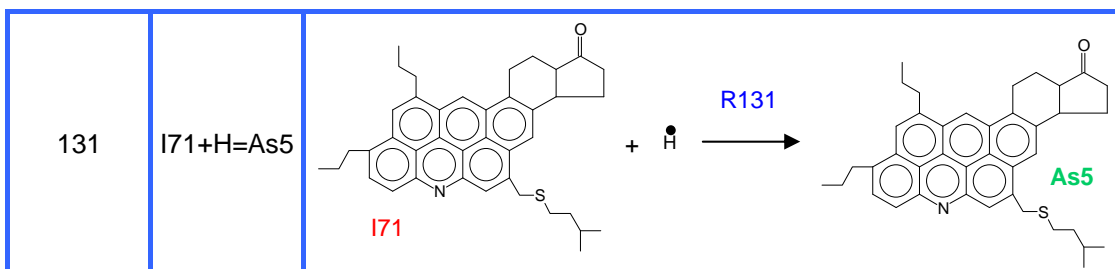
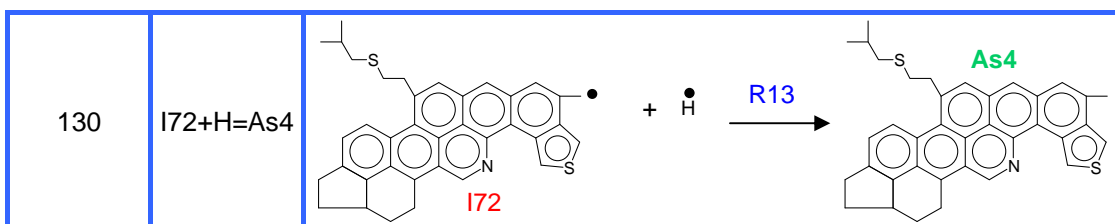
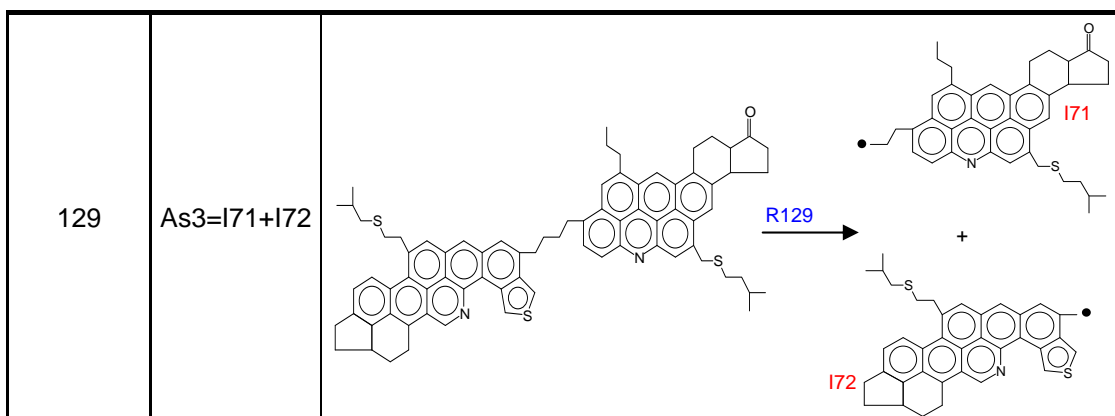
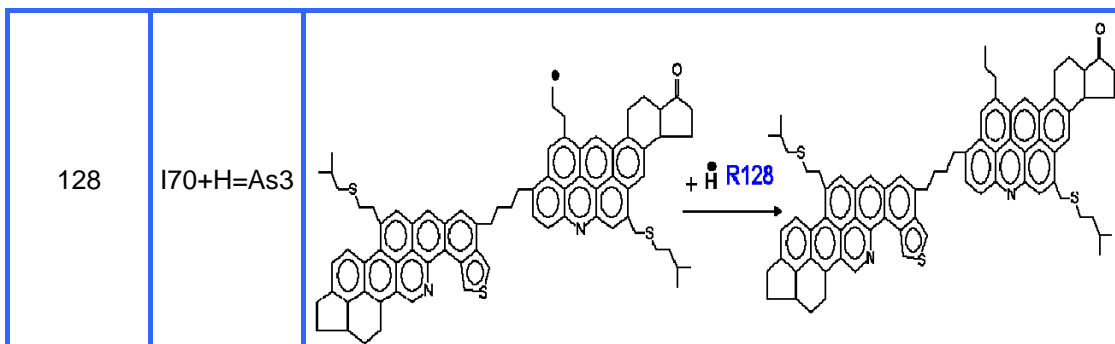
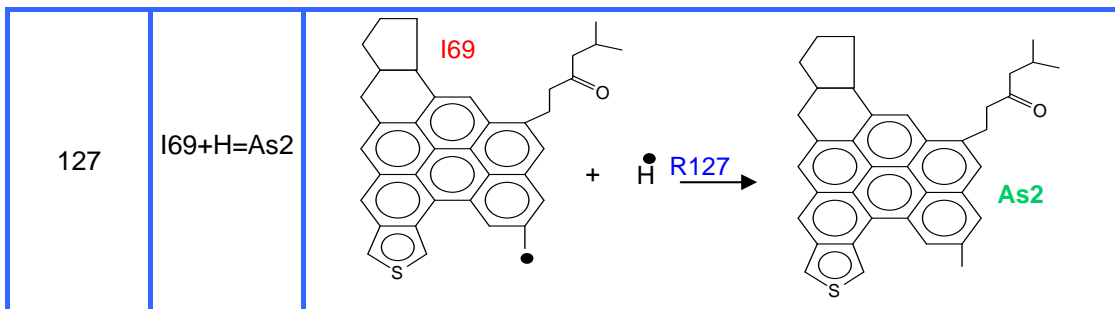


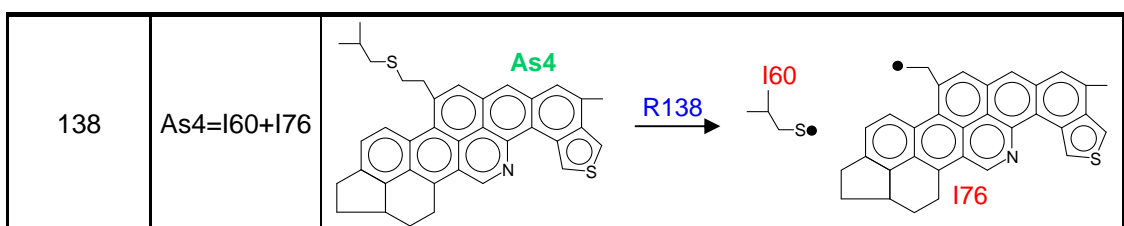
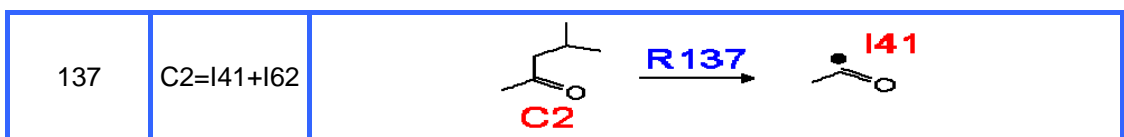
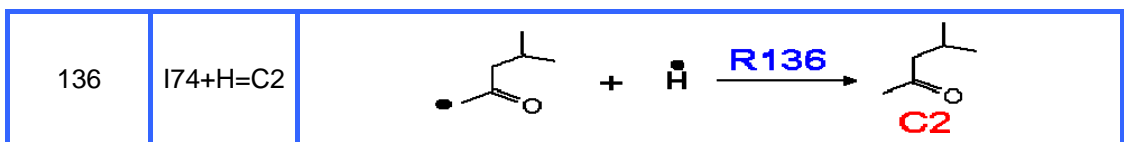
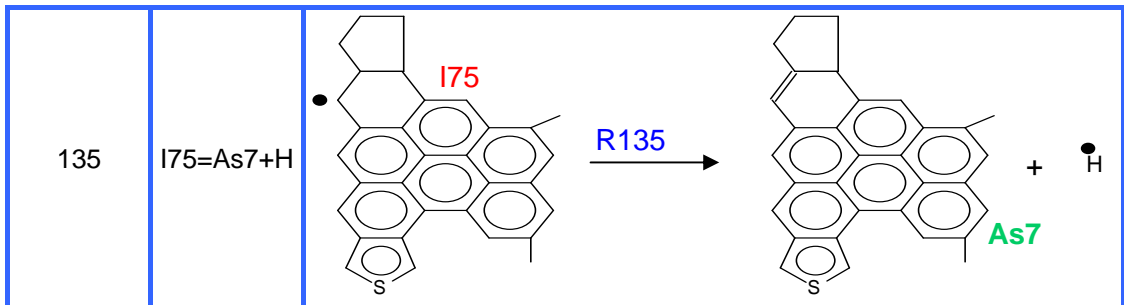
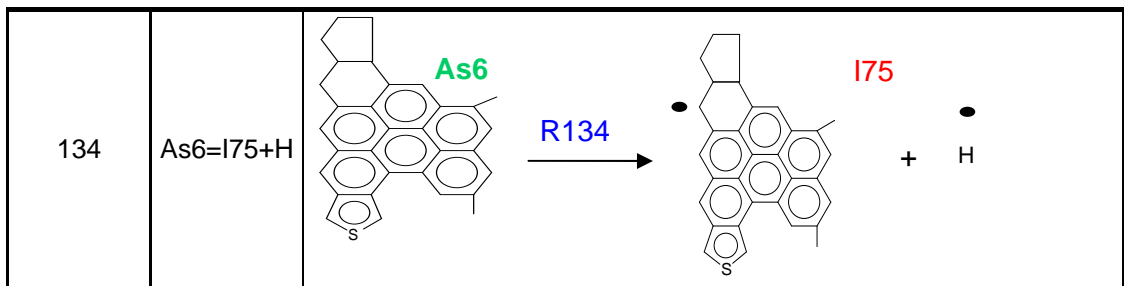
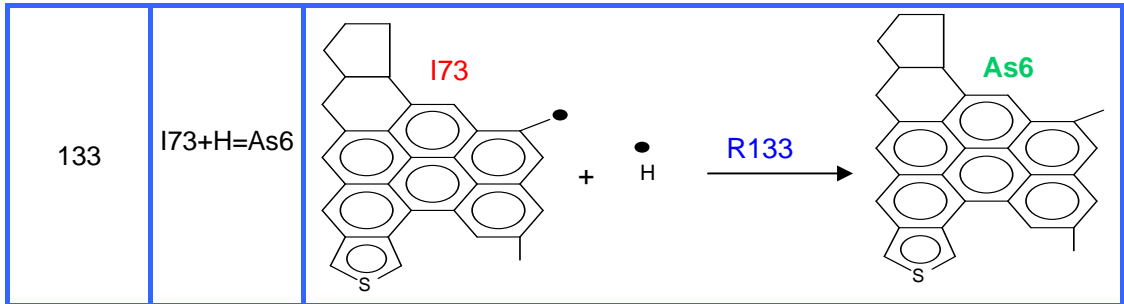
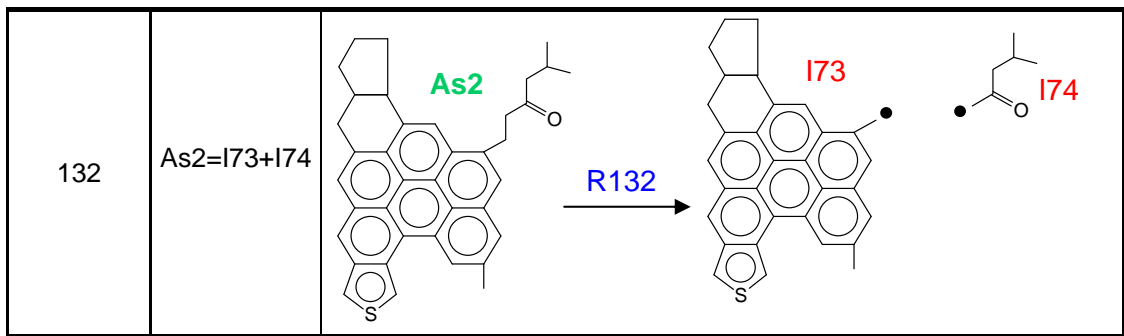


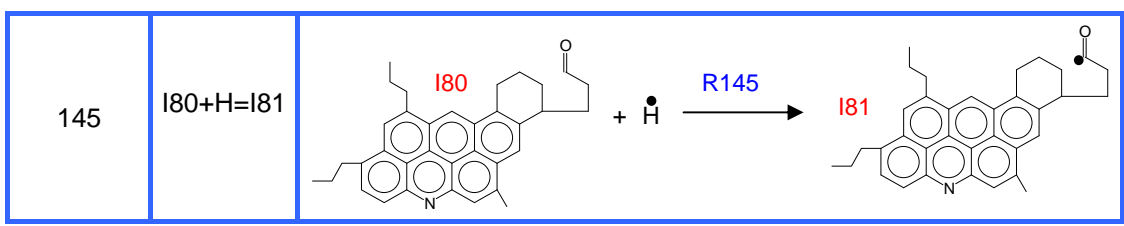
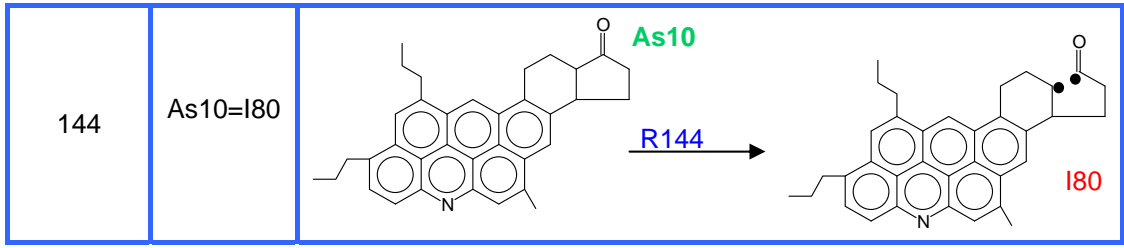
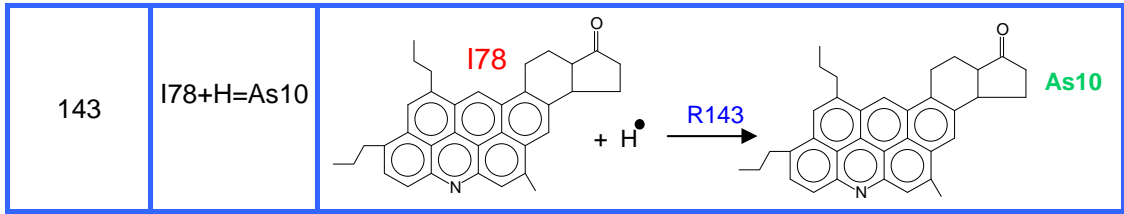
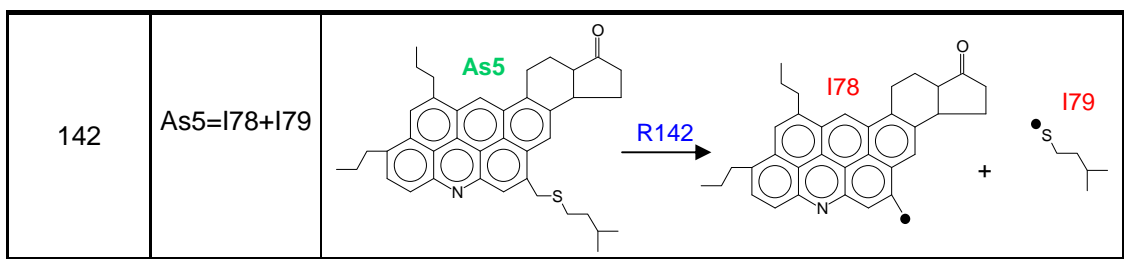
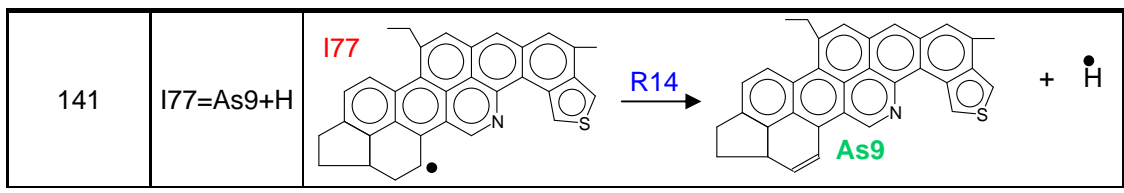
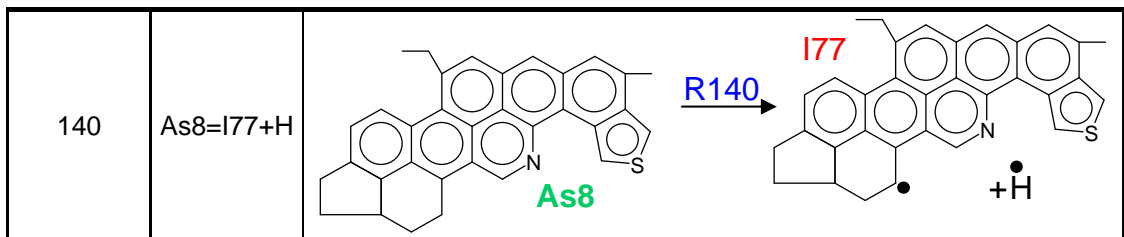
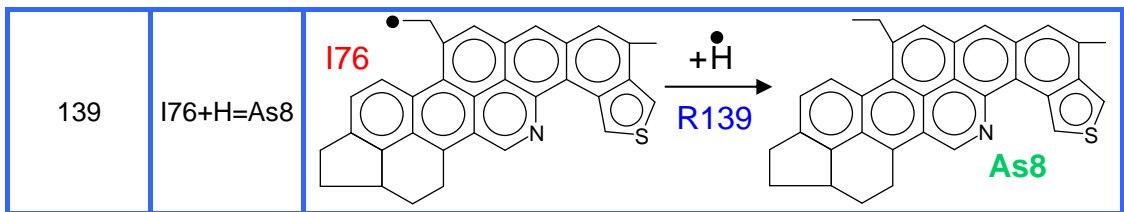


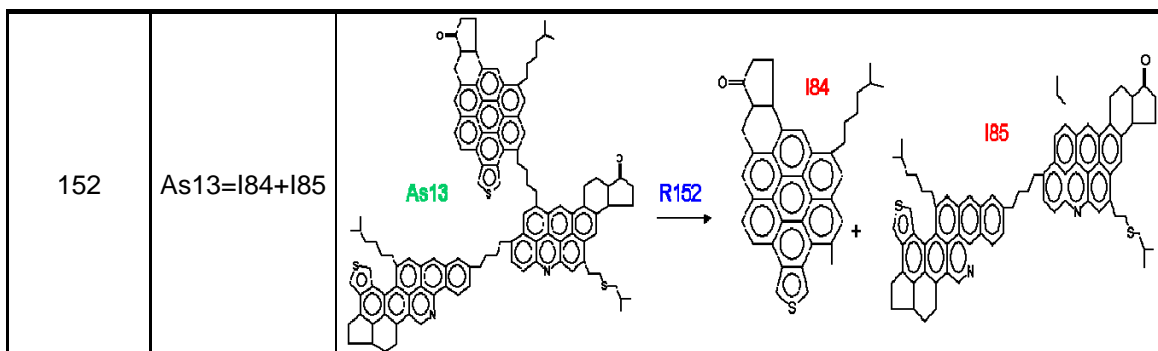
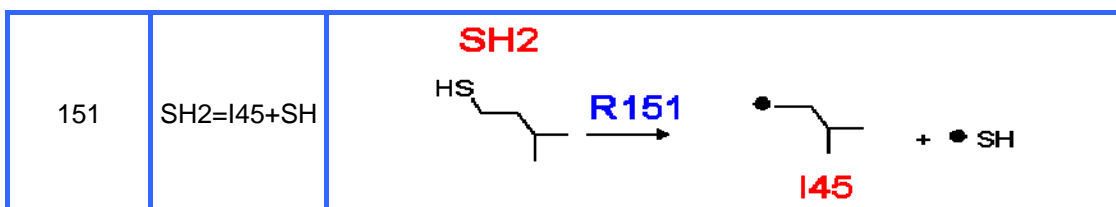
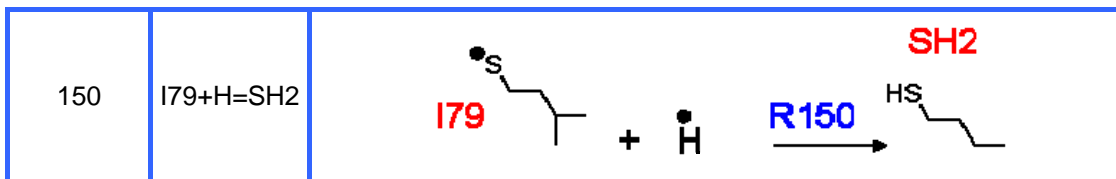
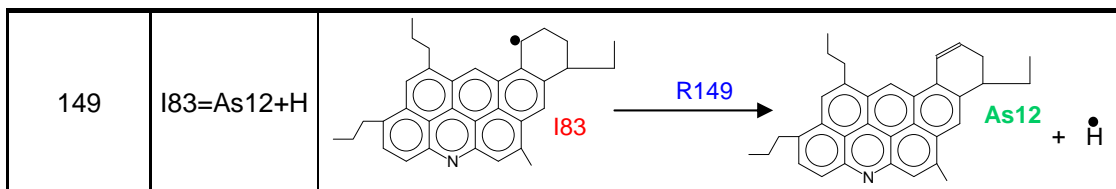
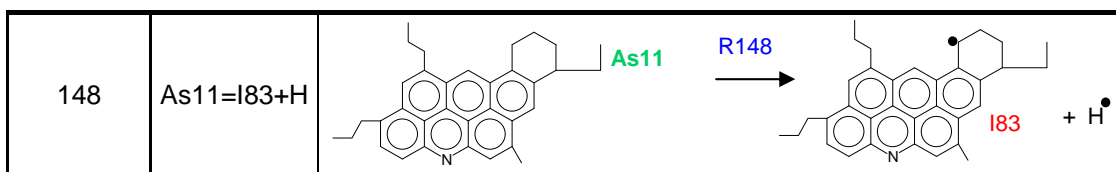
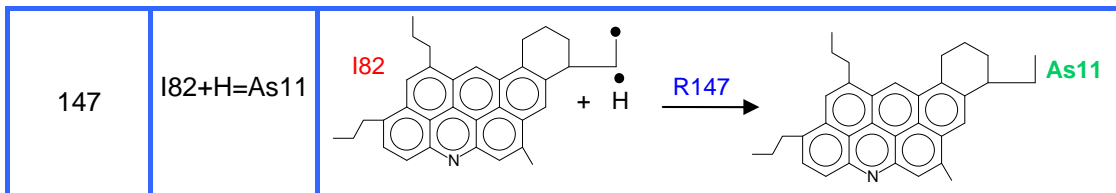
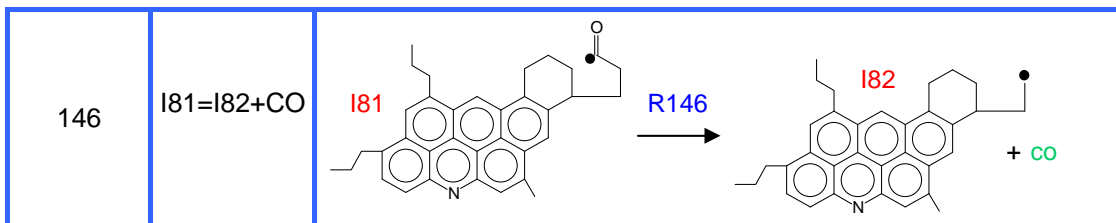
Reacciones con Asfaltenos

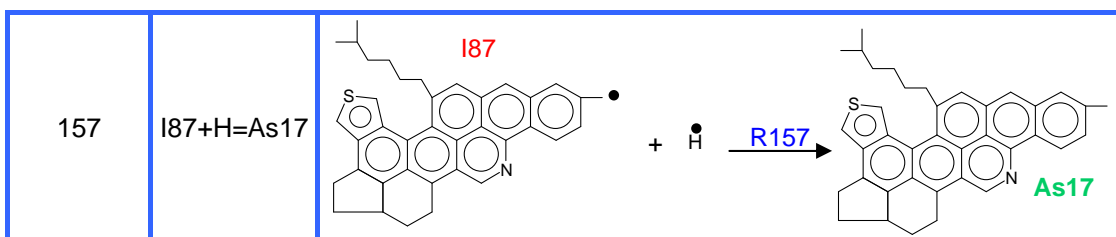
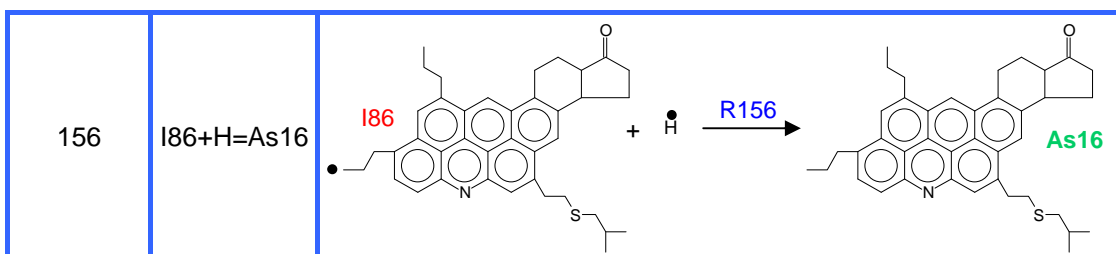
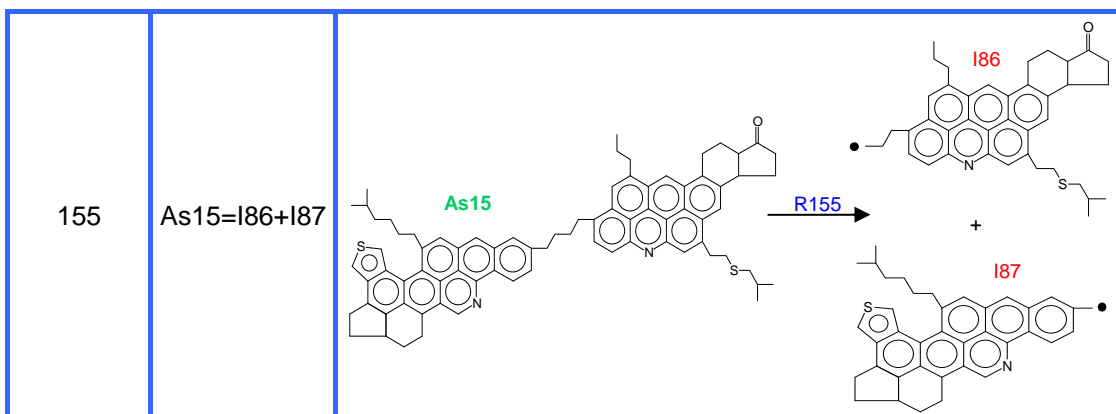
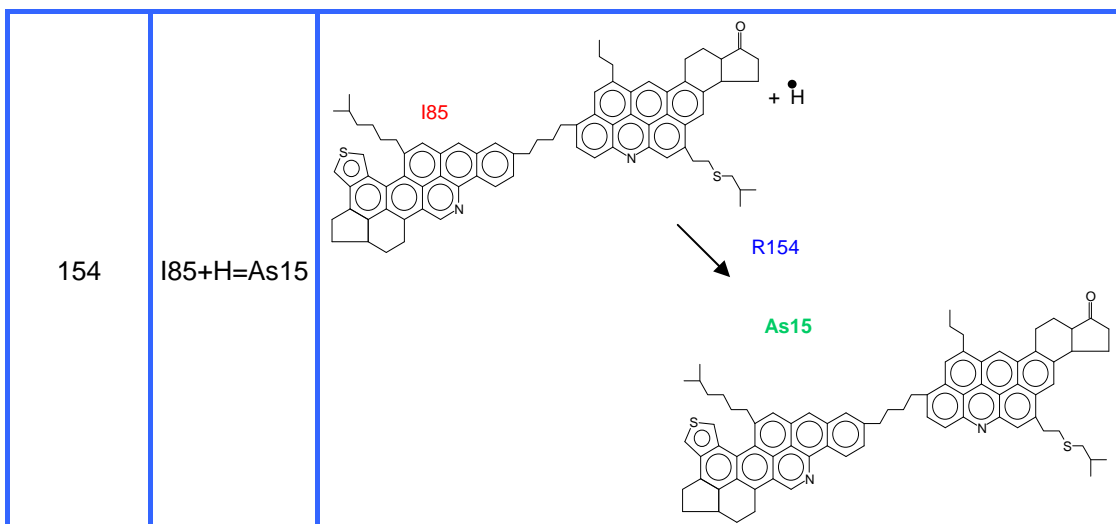
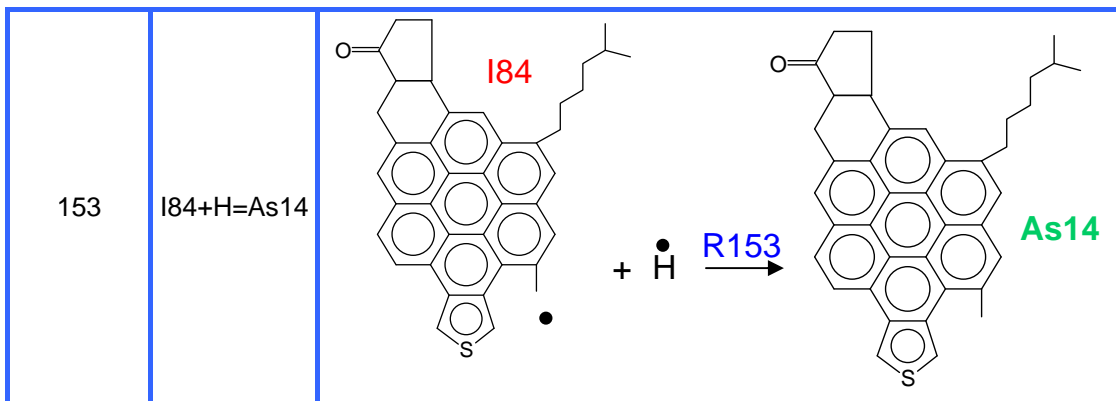


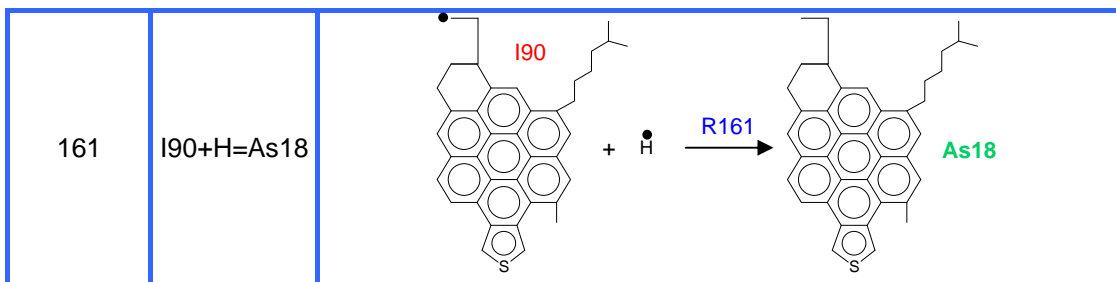
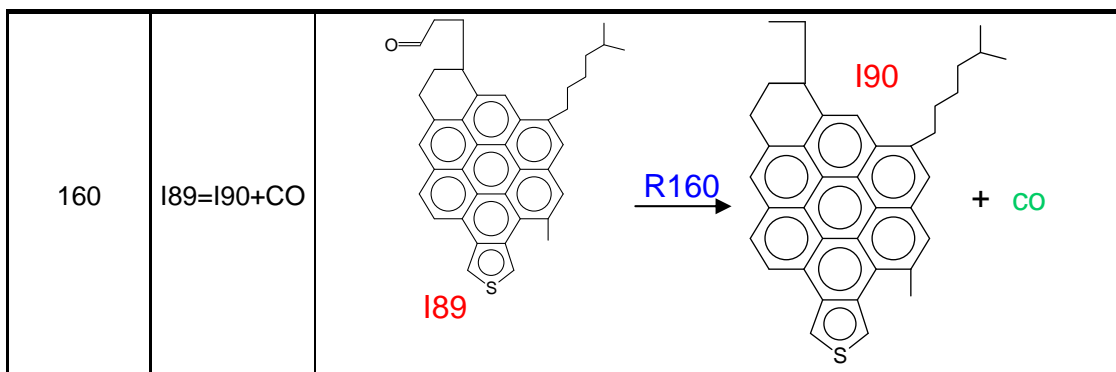
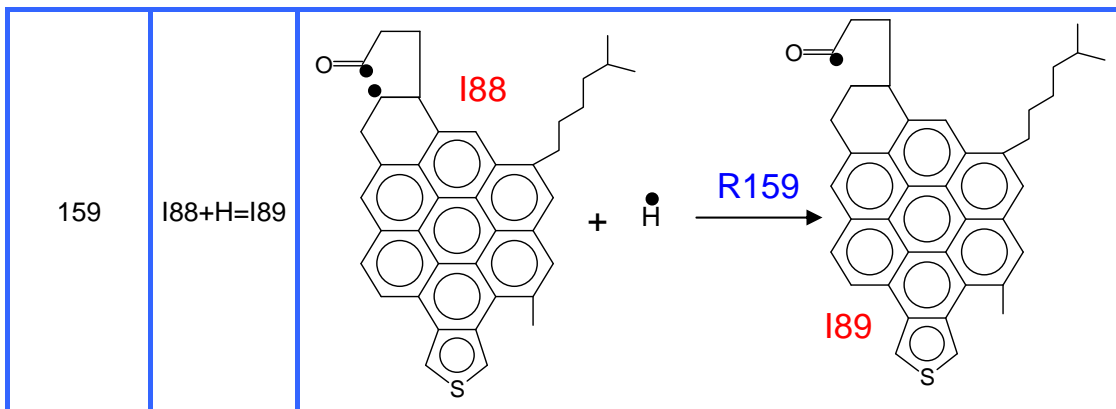
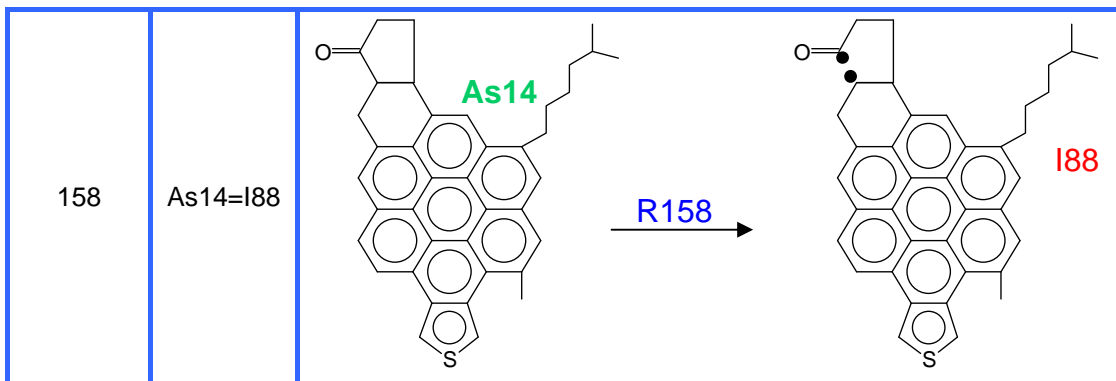


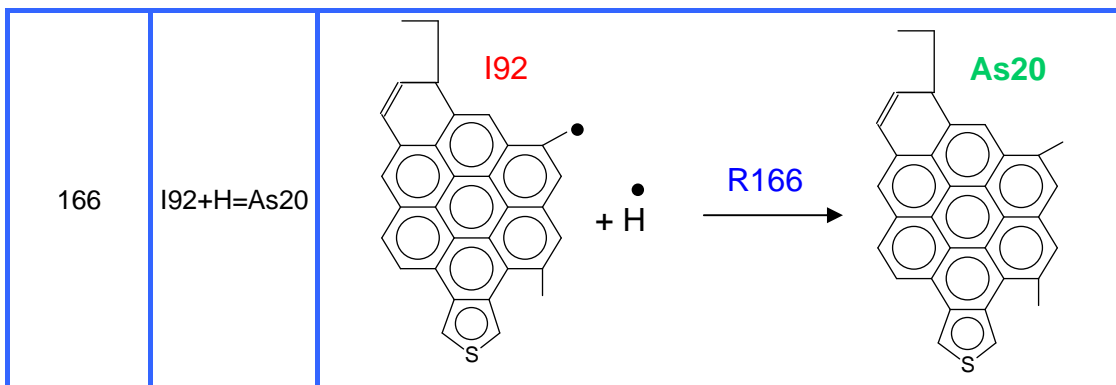
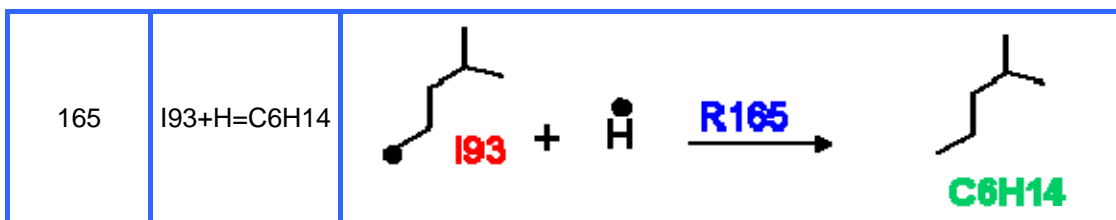
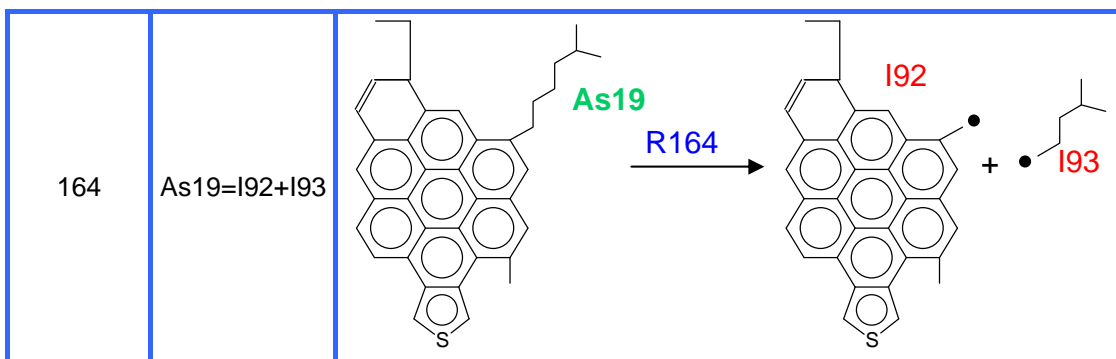
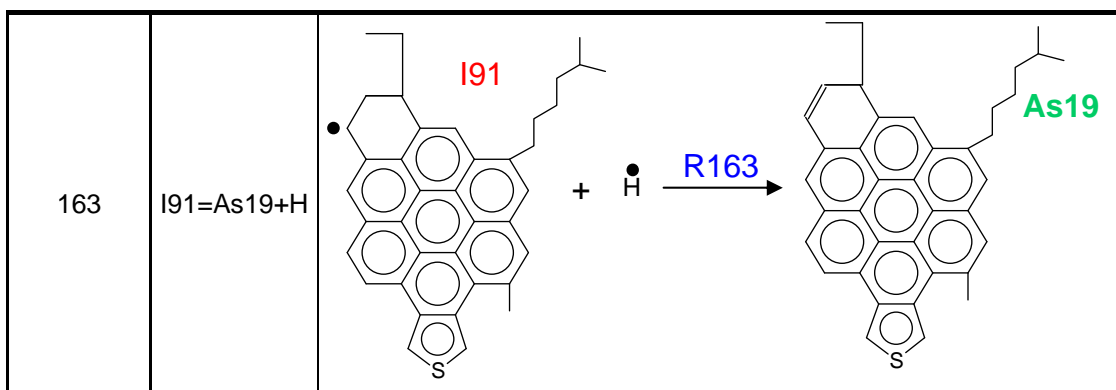
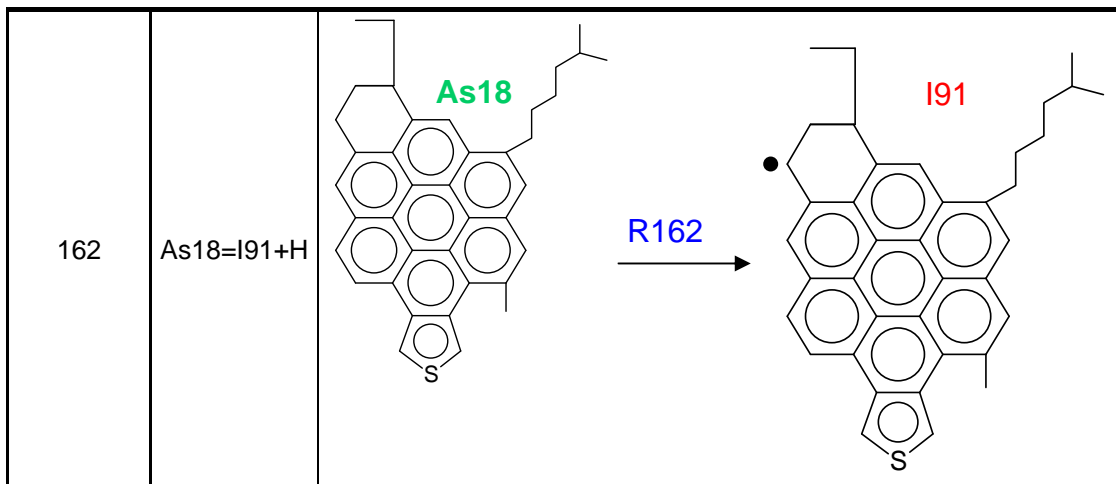


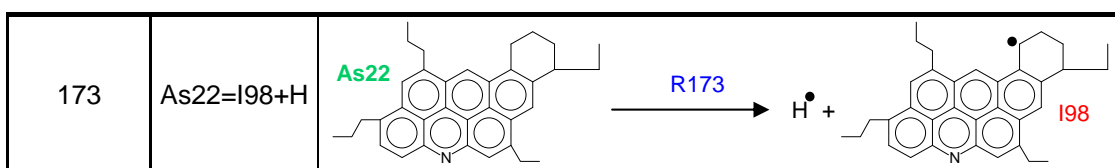
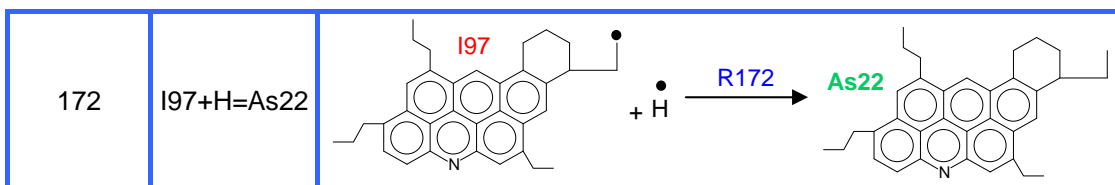
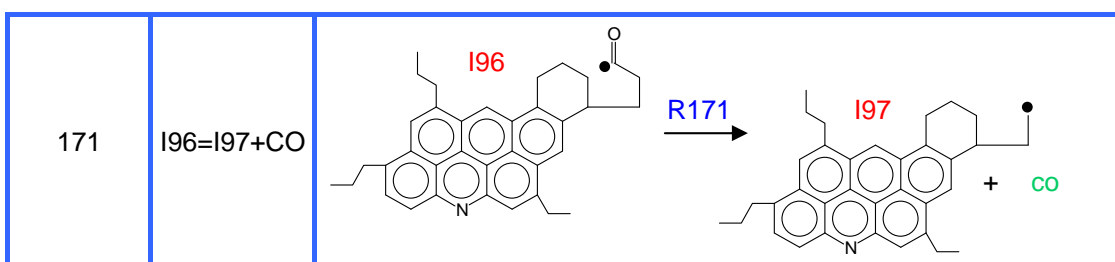
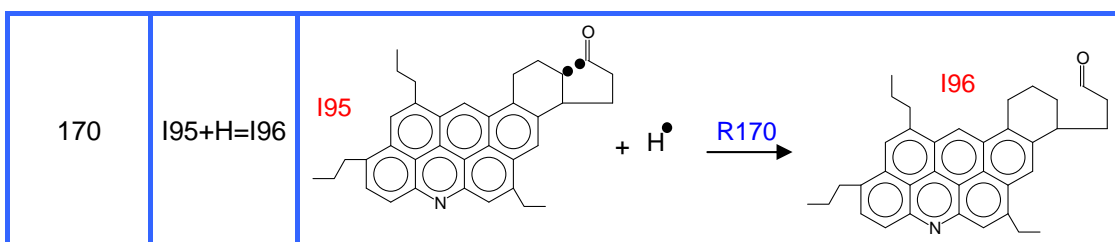
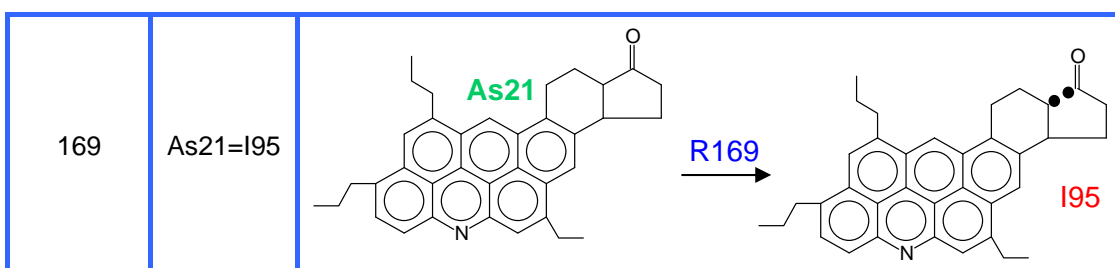
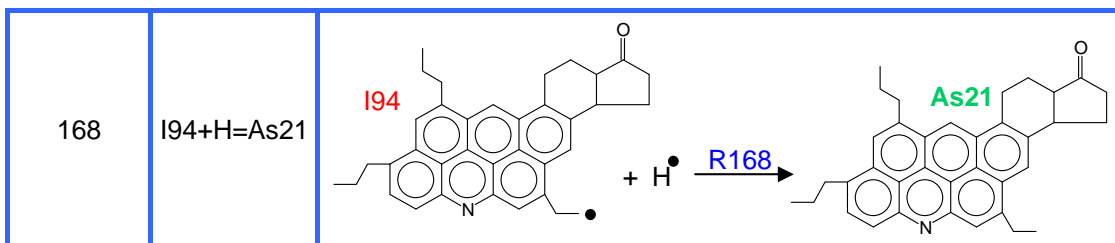
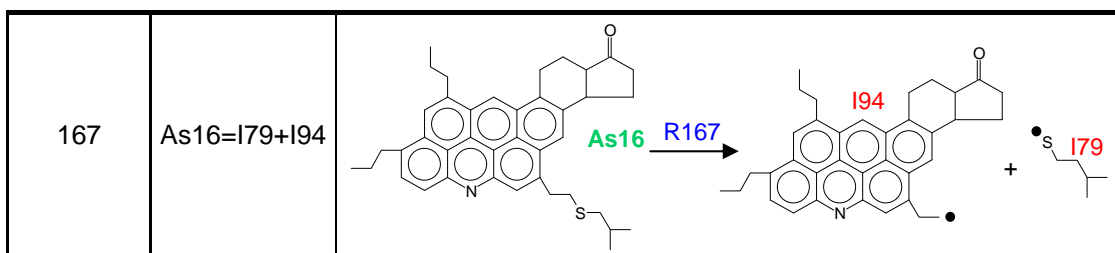


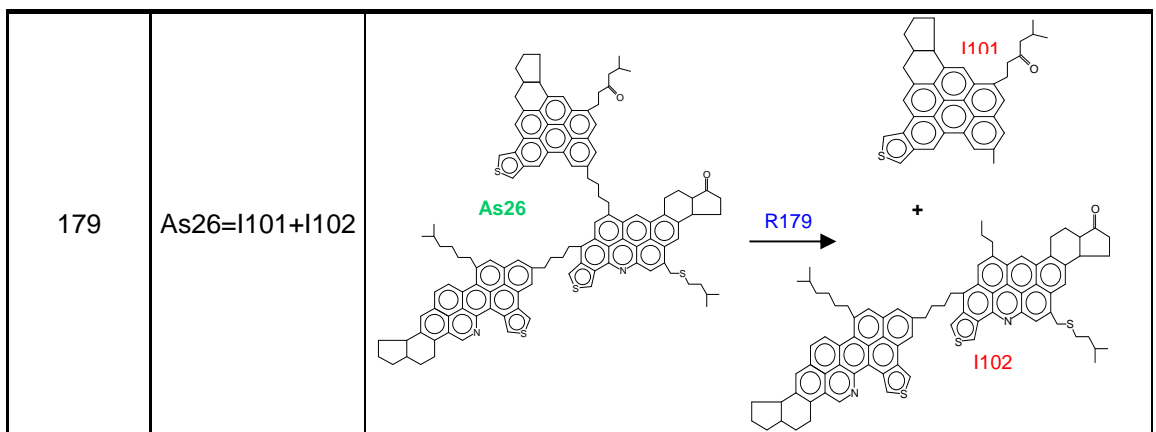
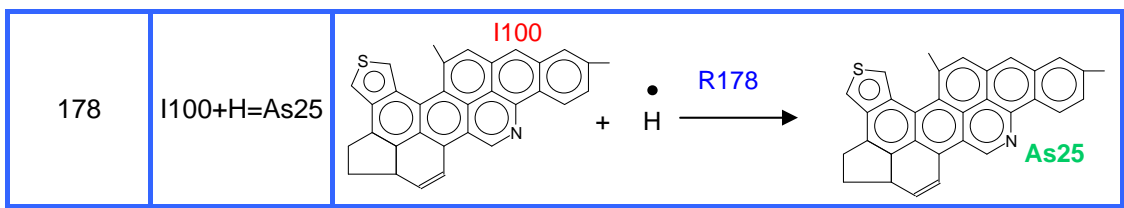
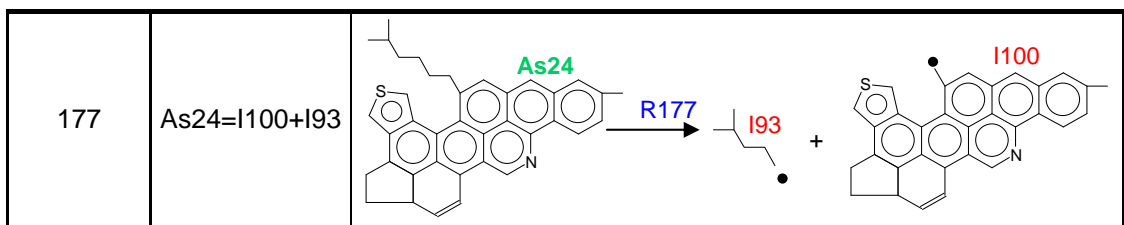
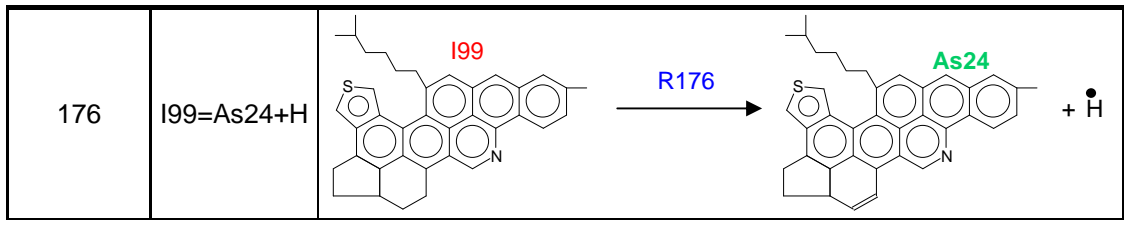
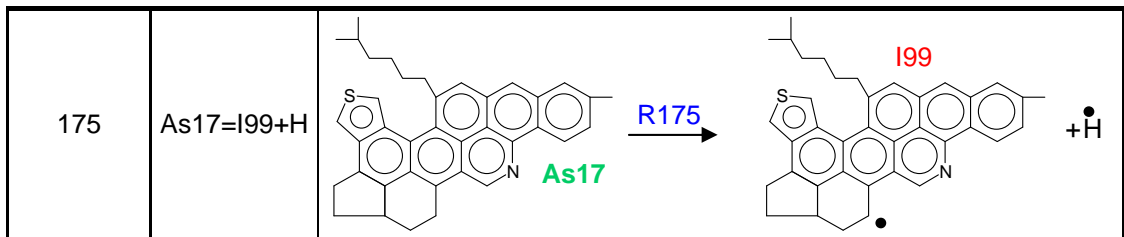
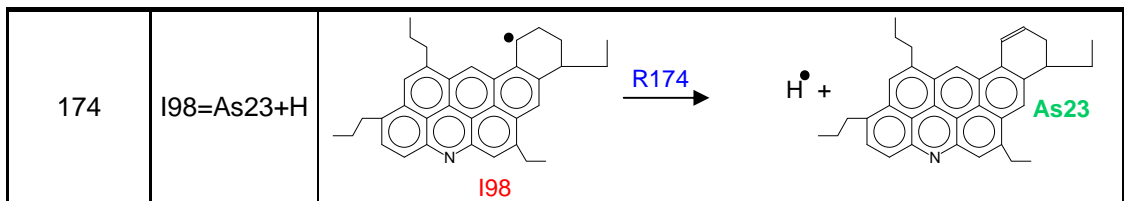


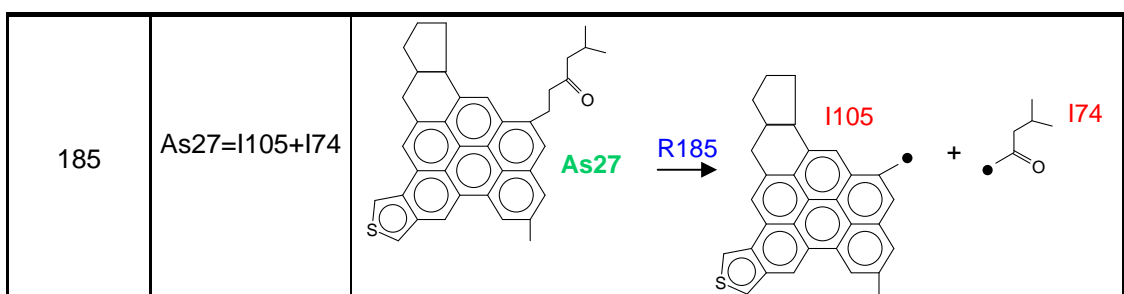
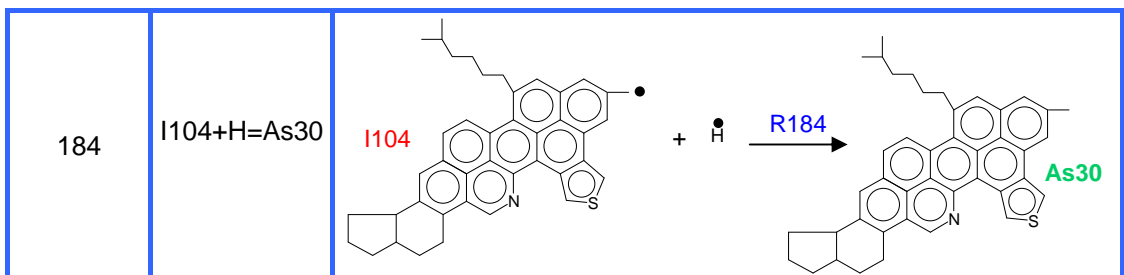
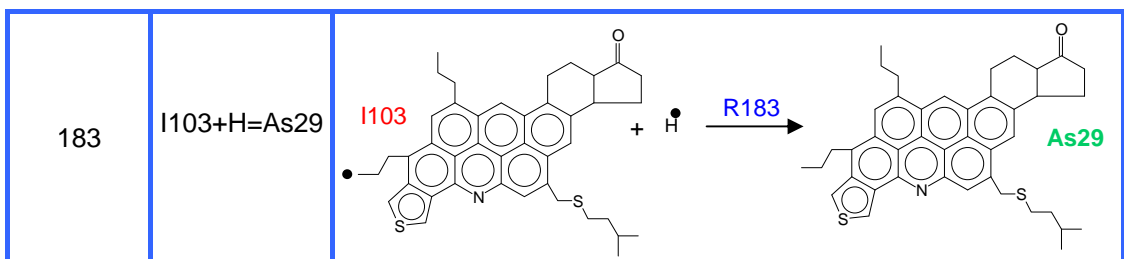
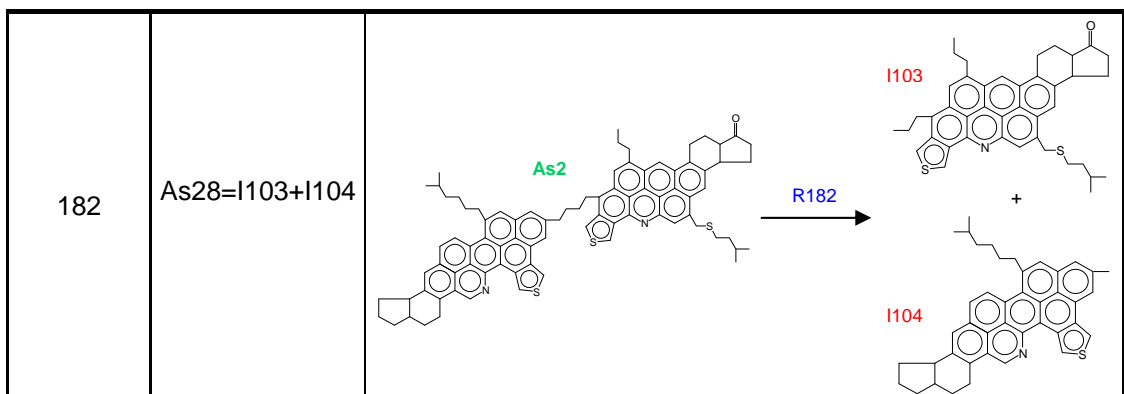
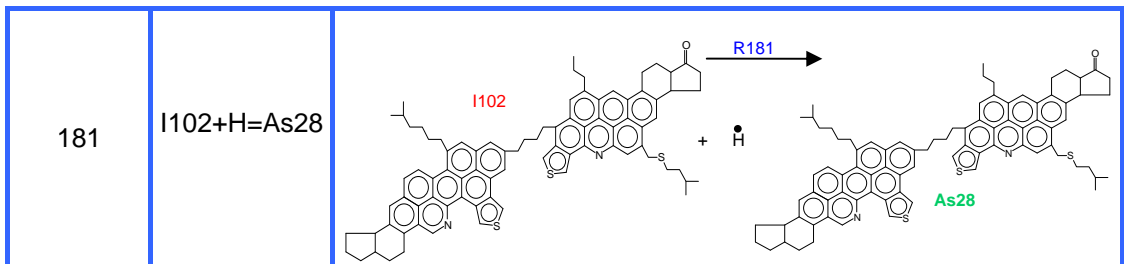
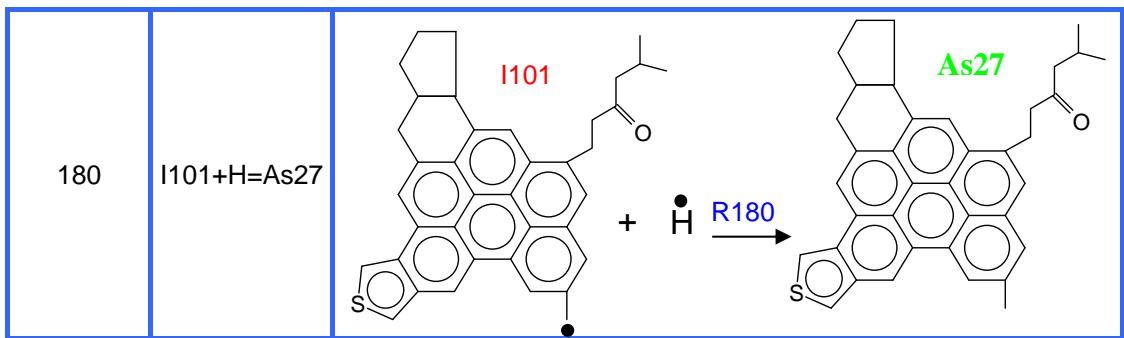


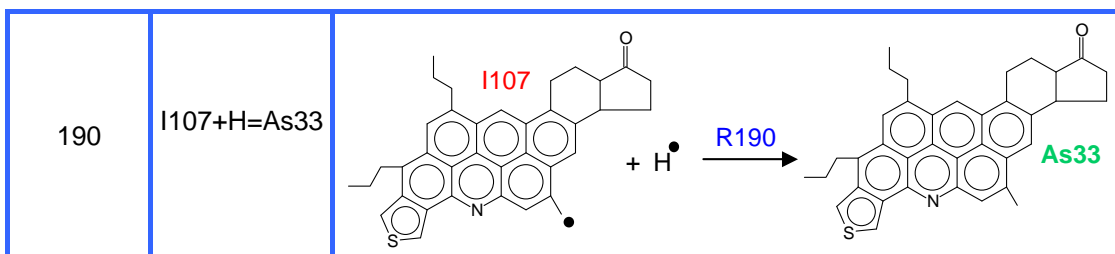
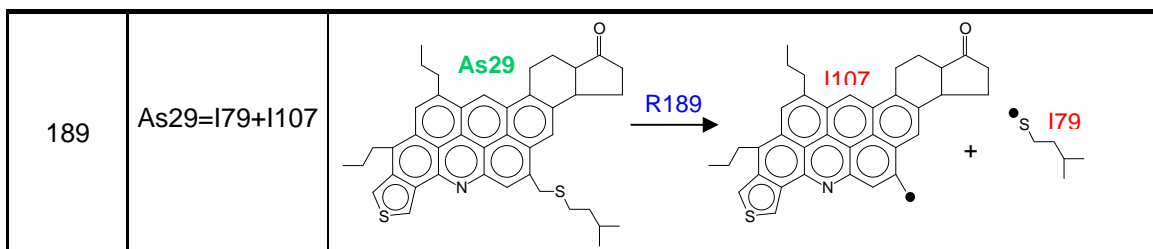
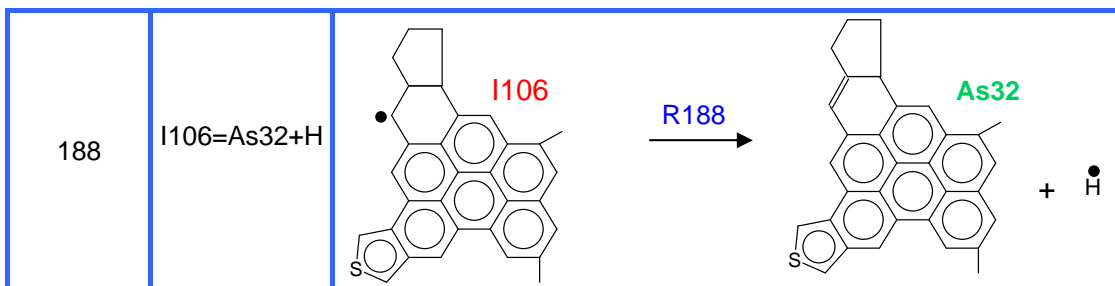
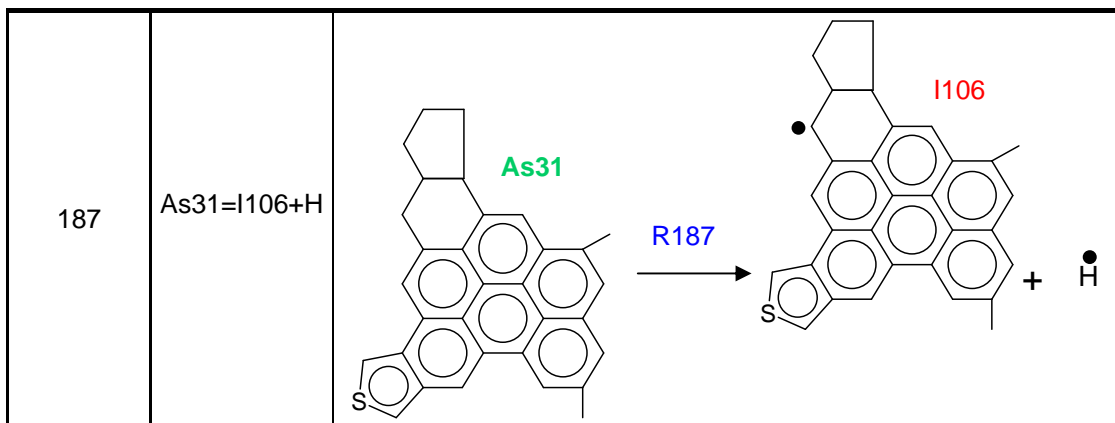
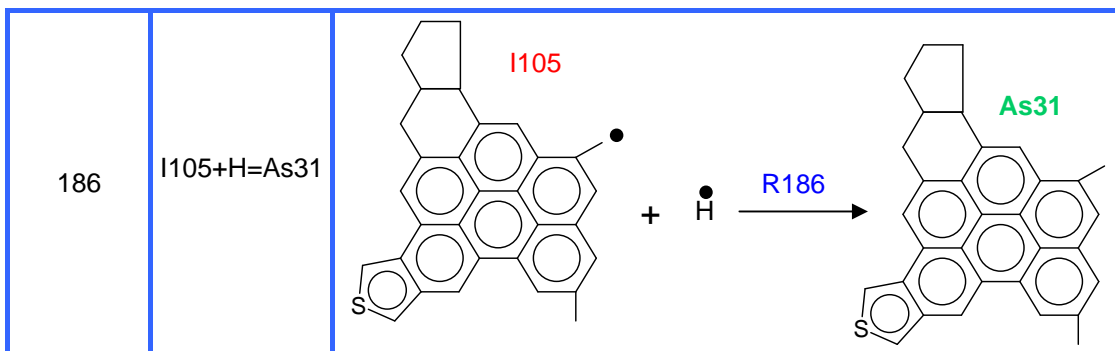


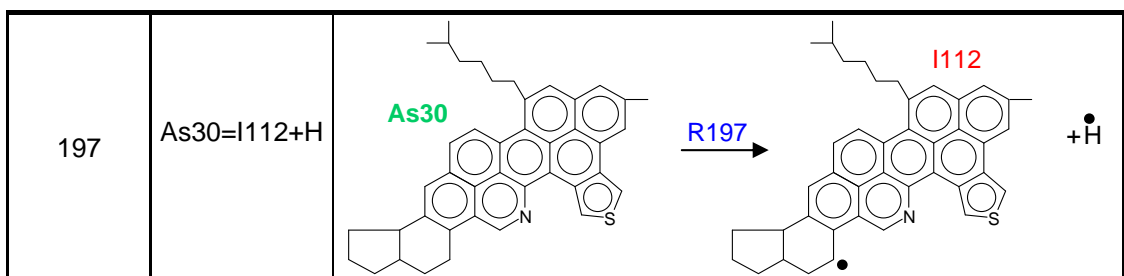
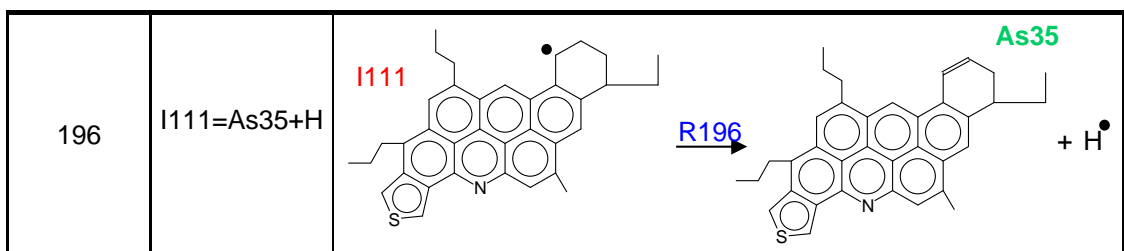
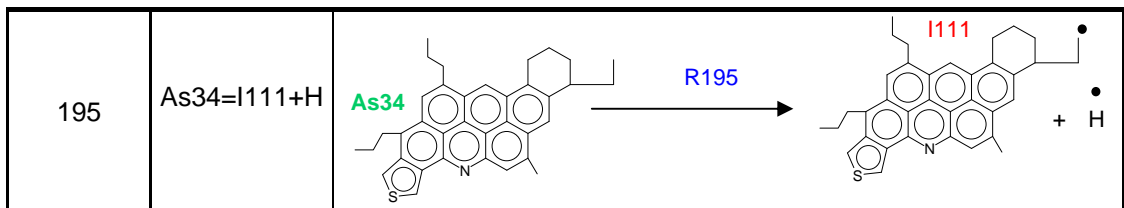
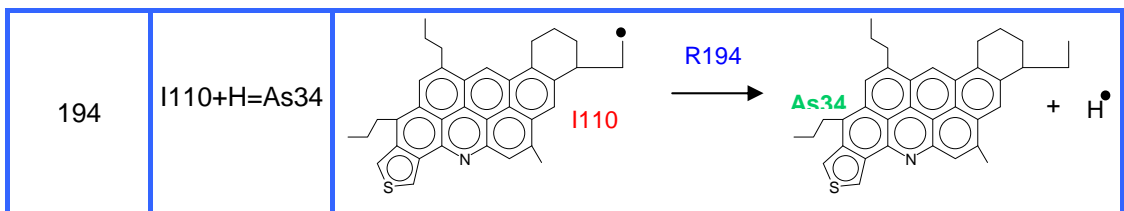
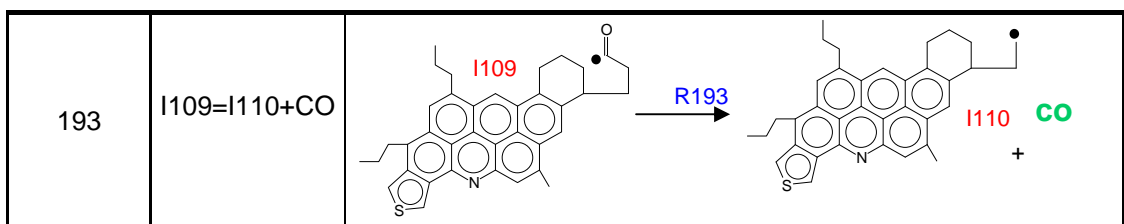
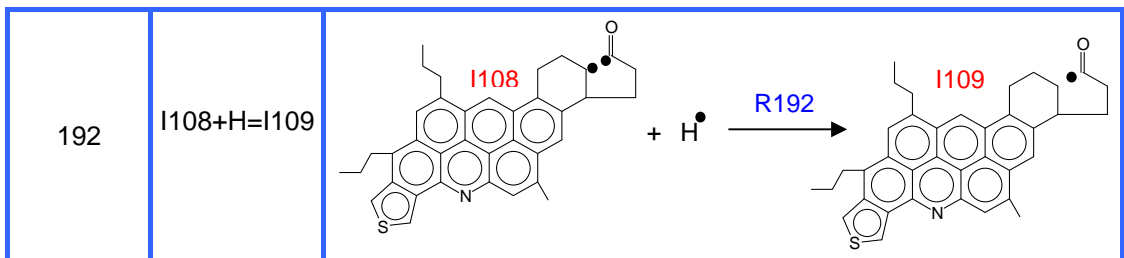
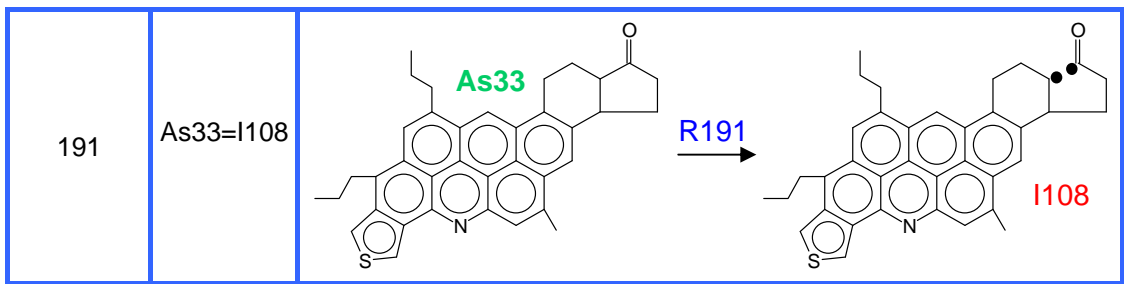


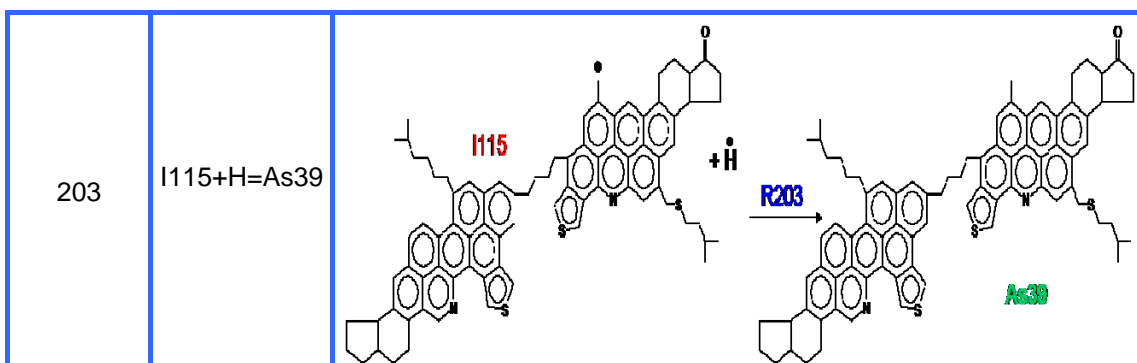
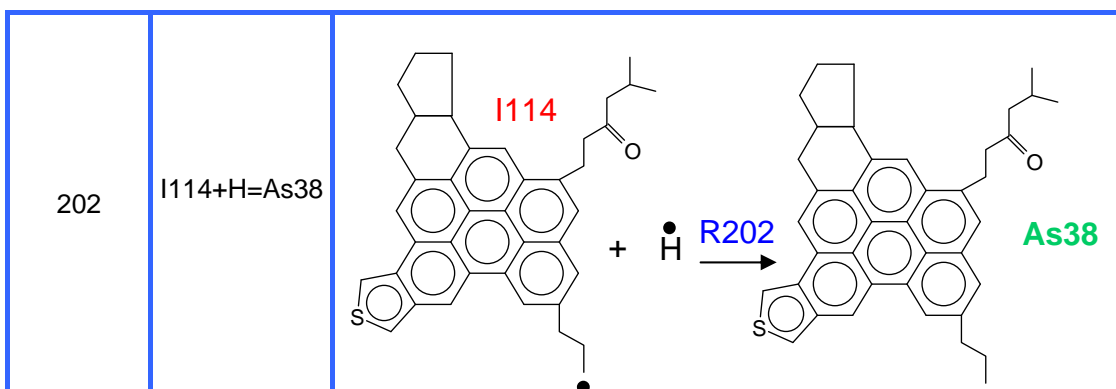
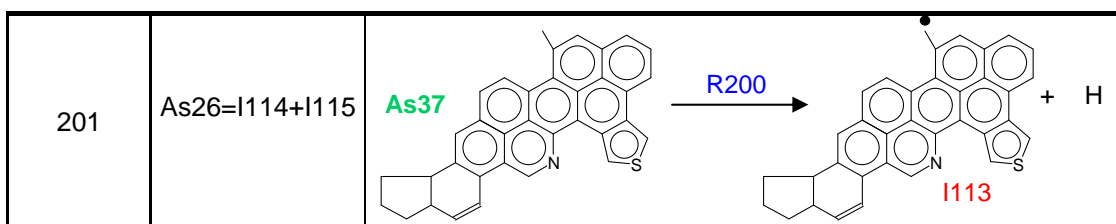
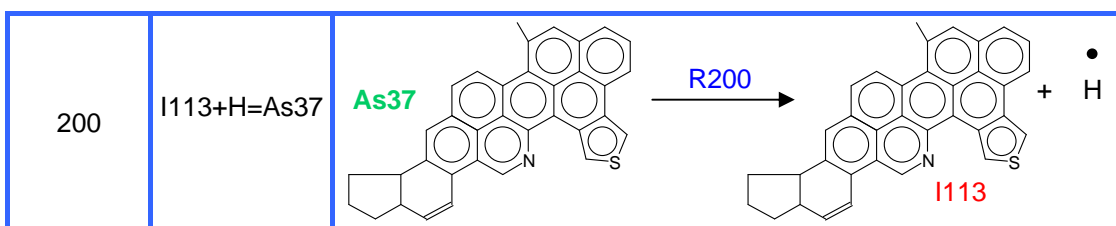
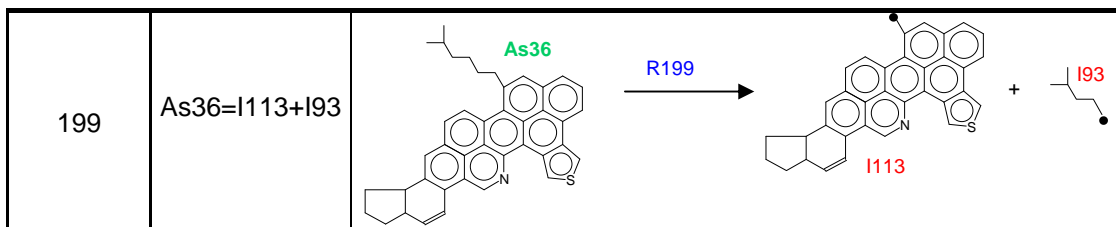
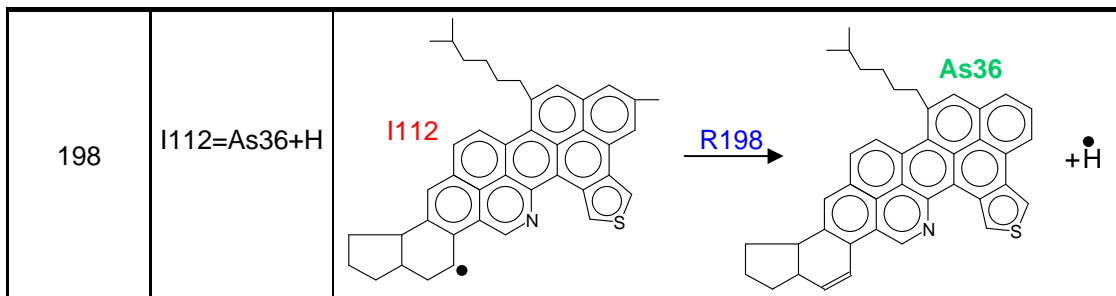


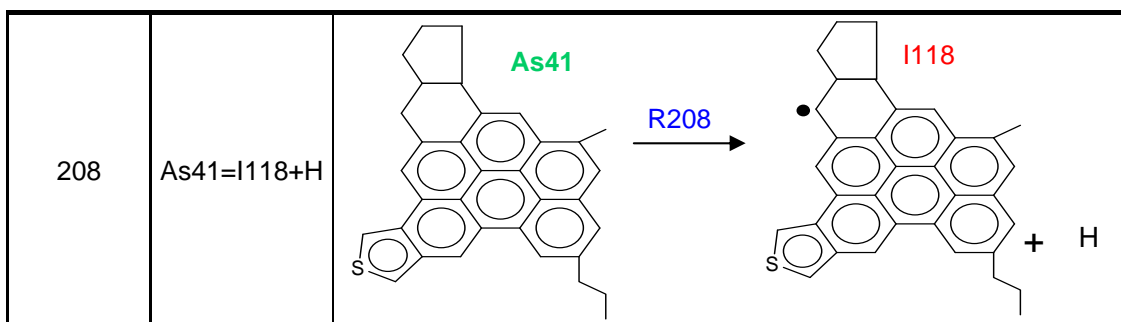
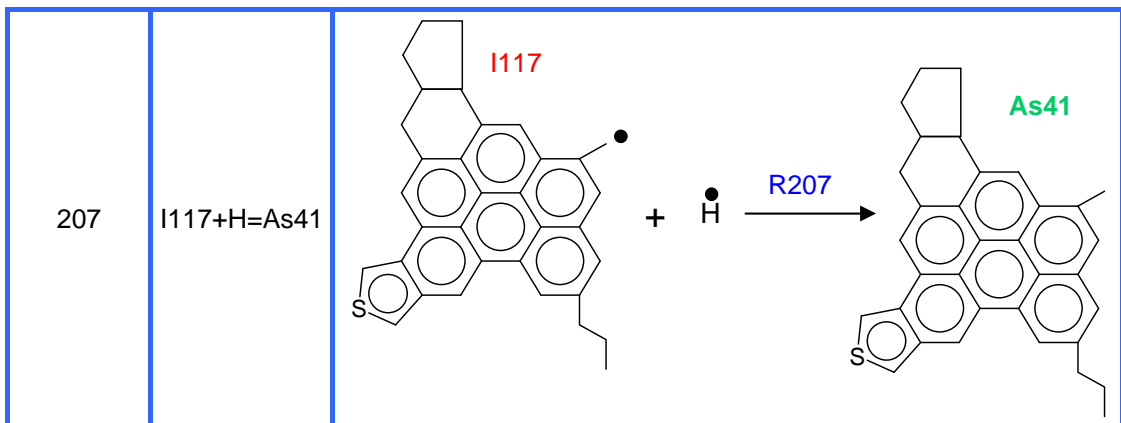
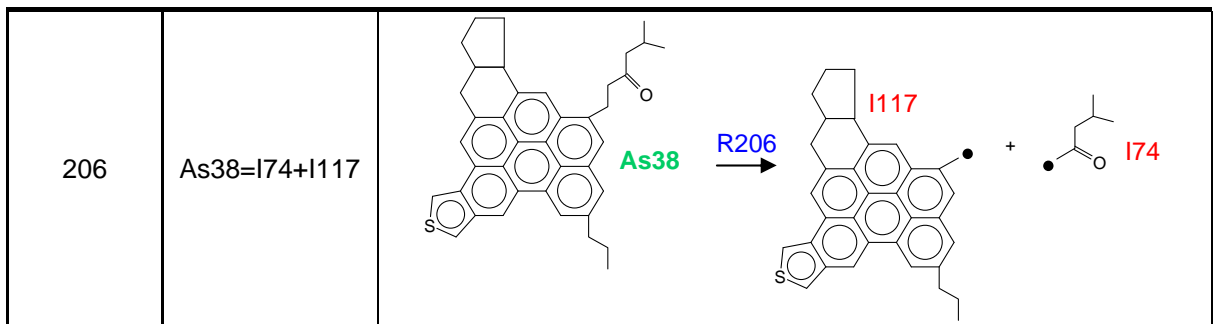
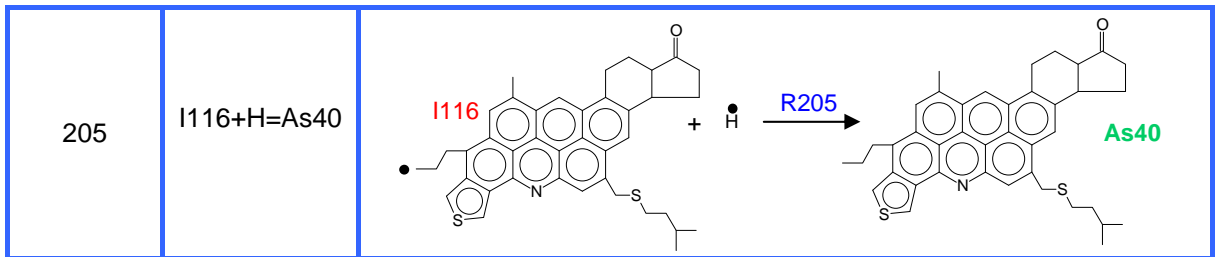
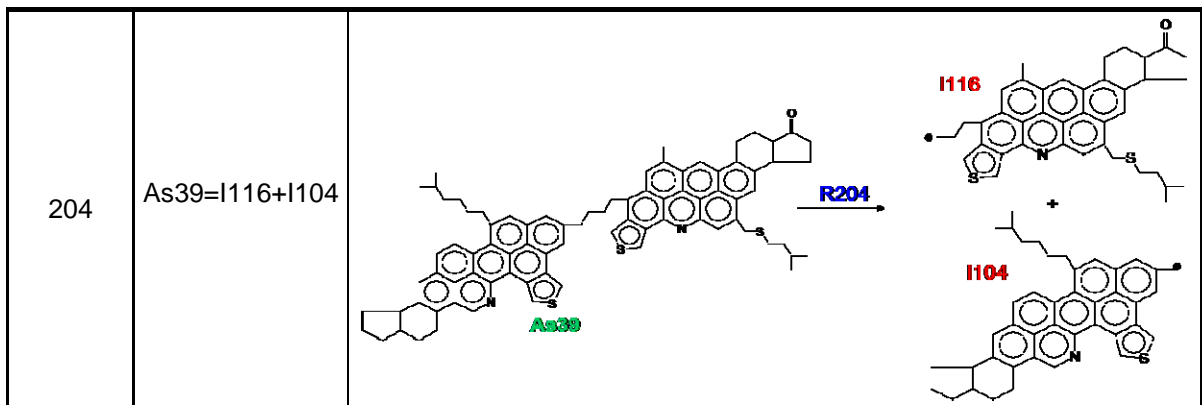


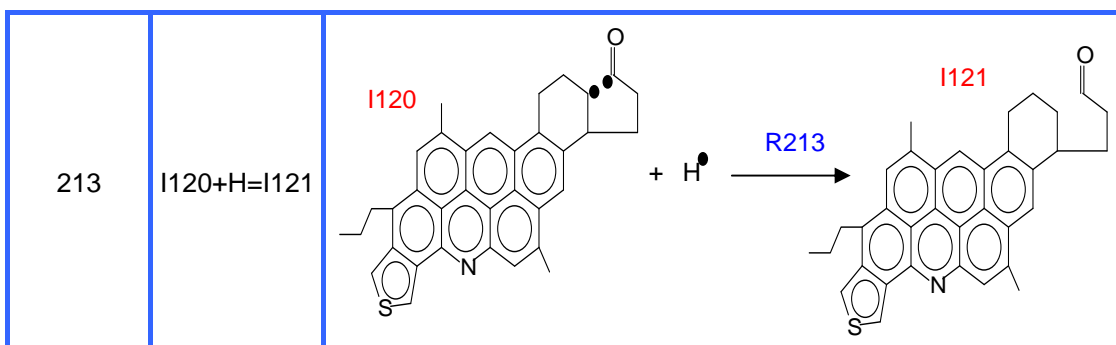
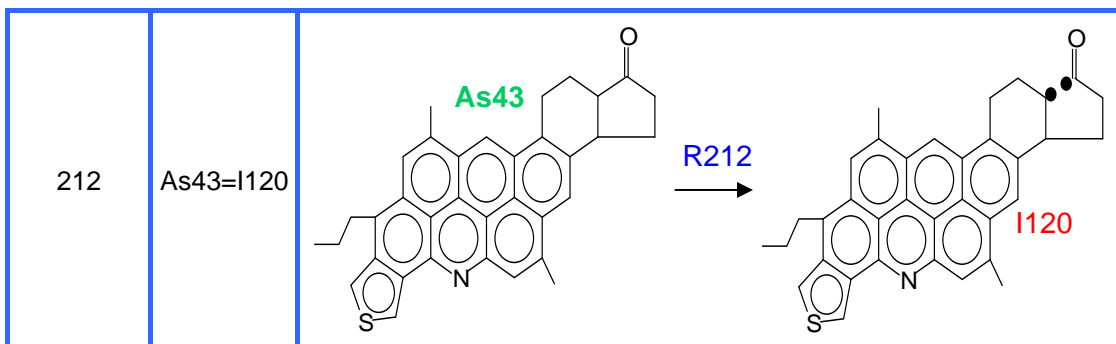
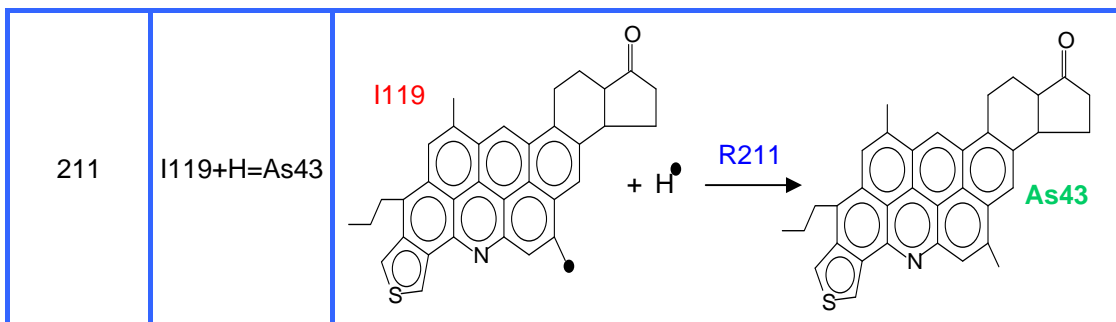
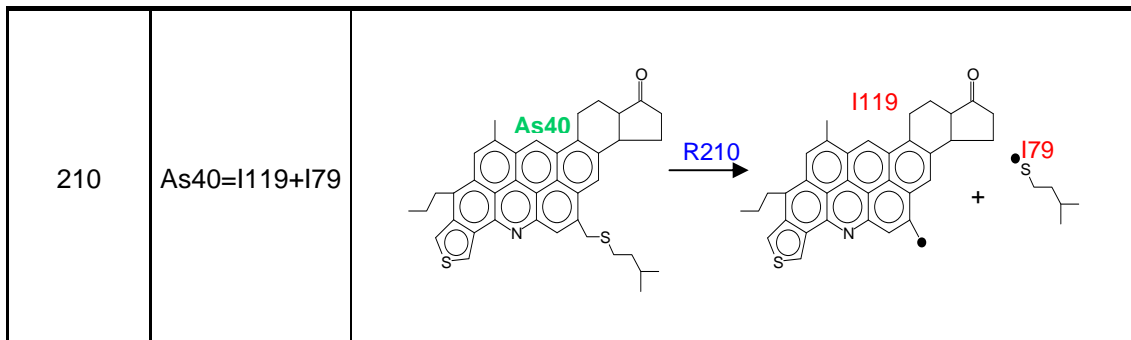
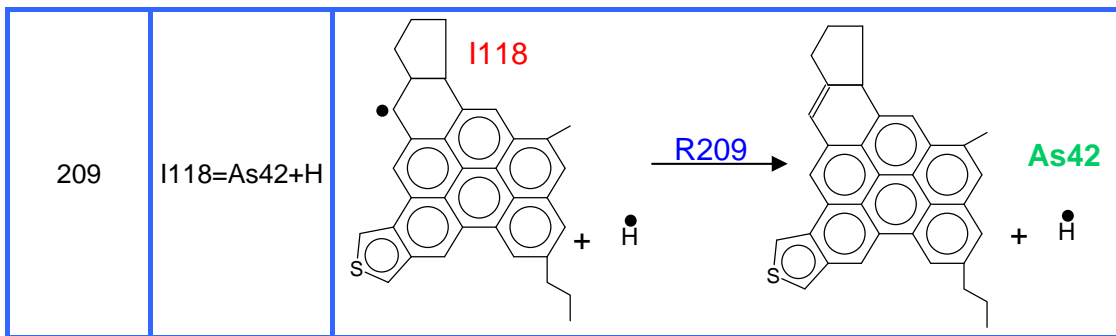


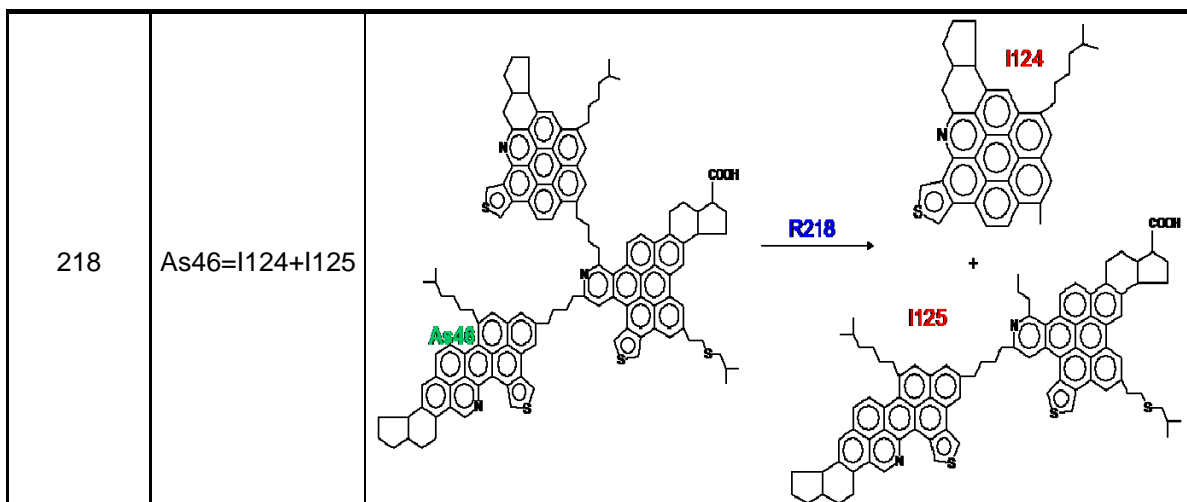
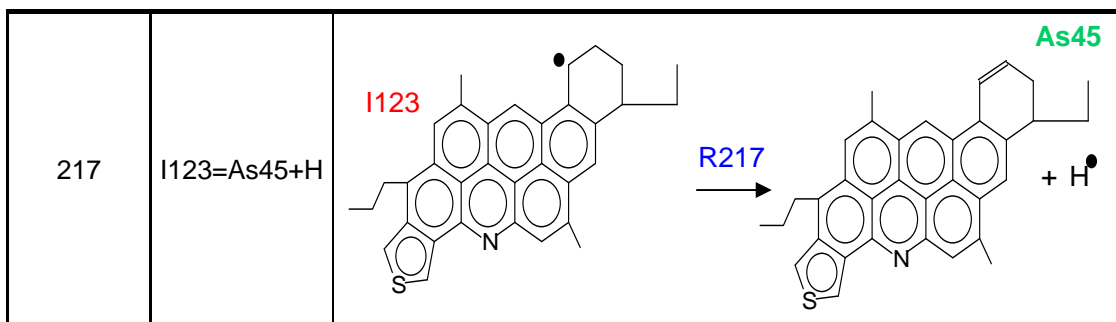
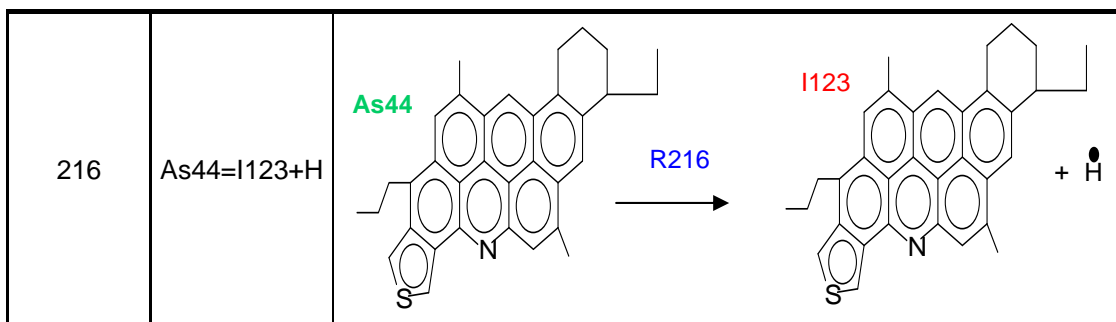
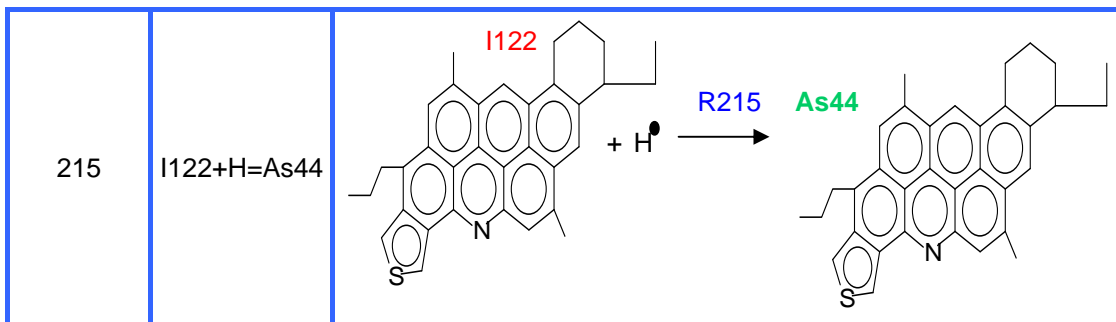
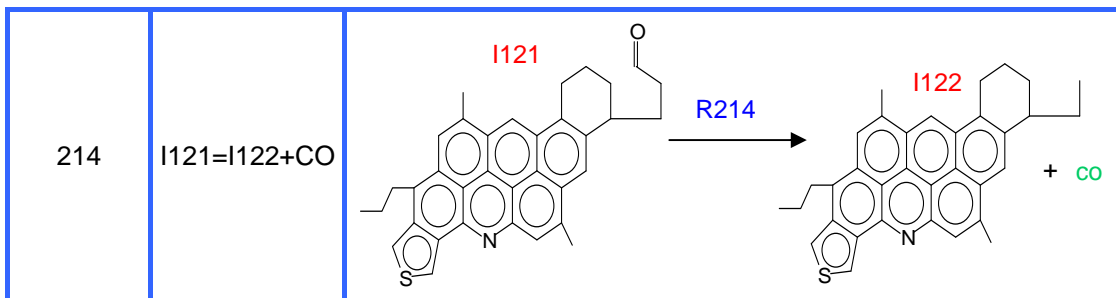


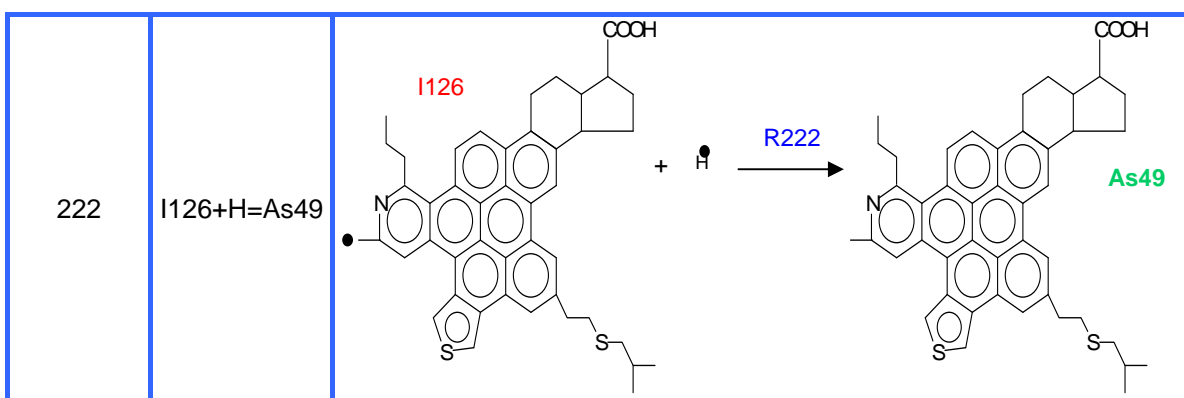
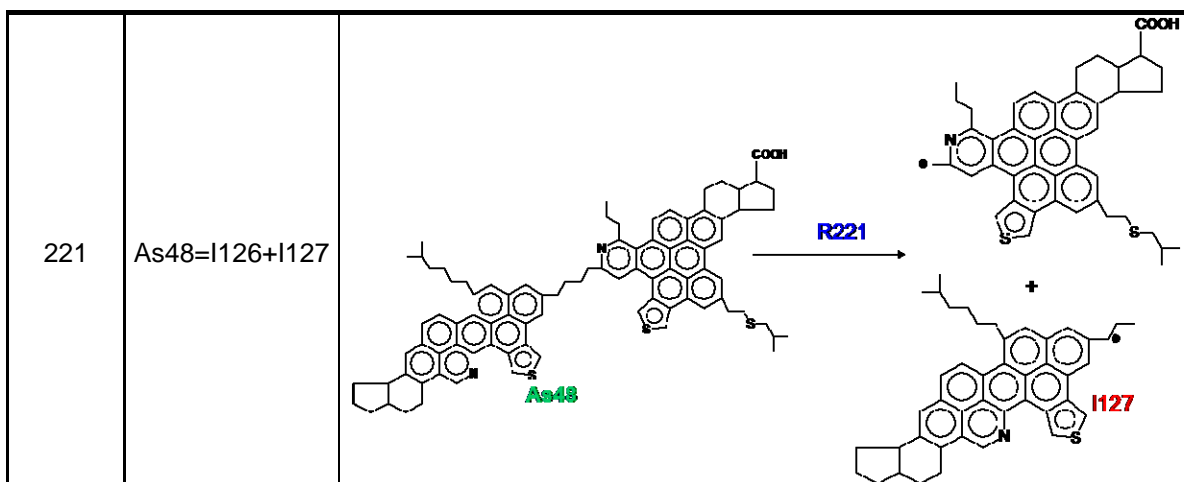
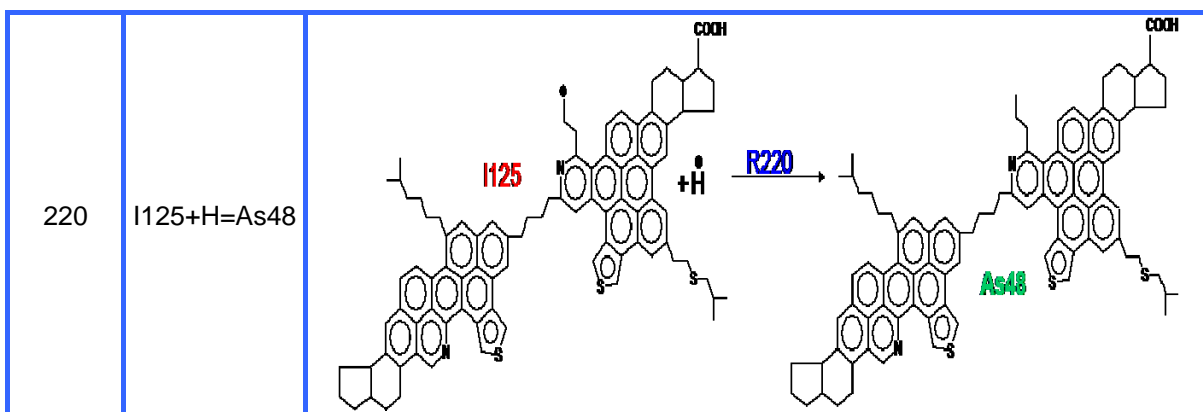
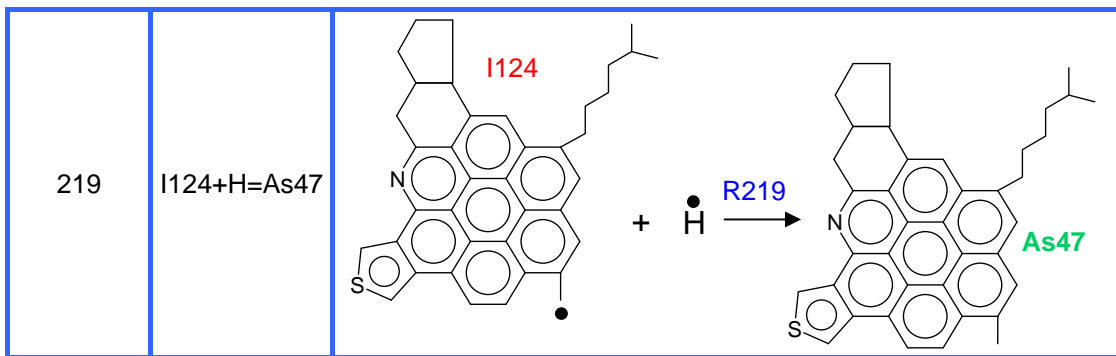


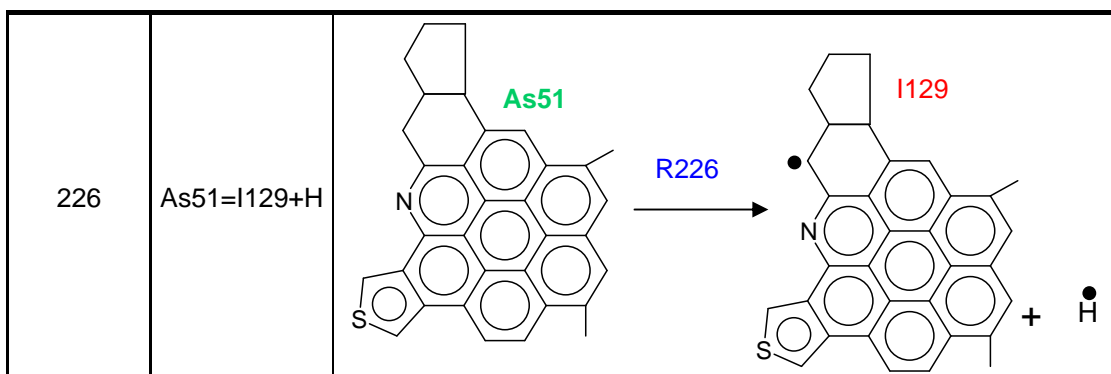
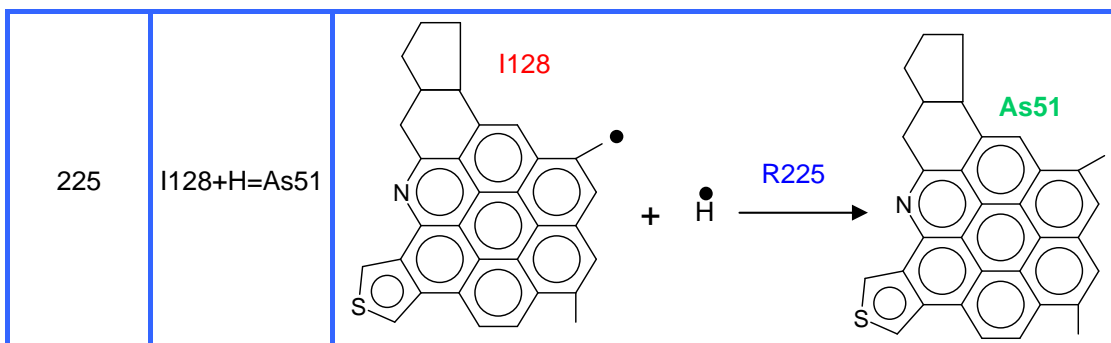
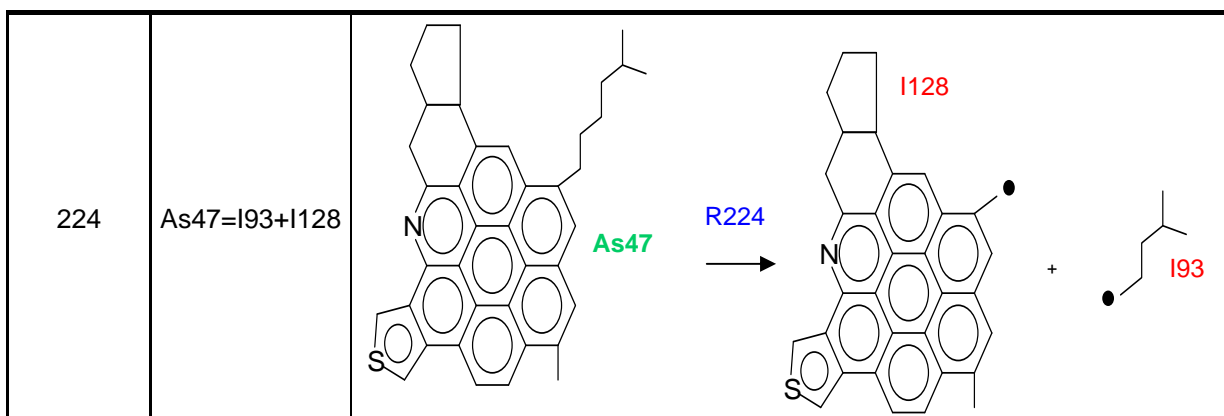
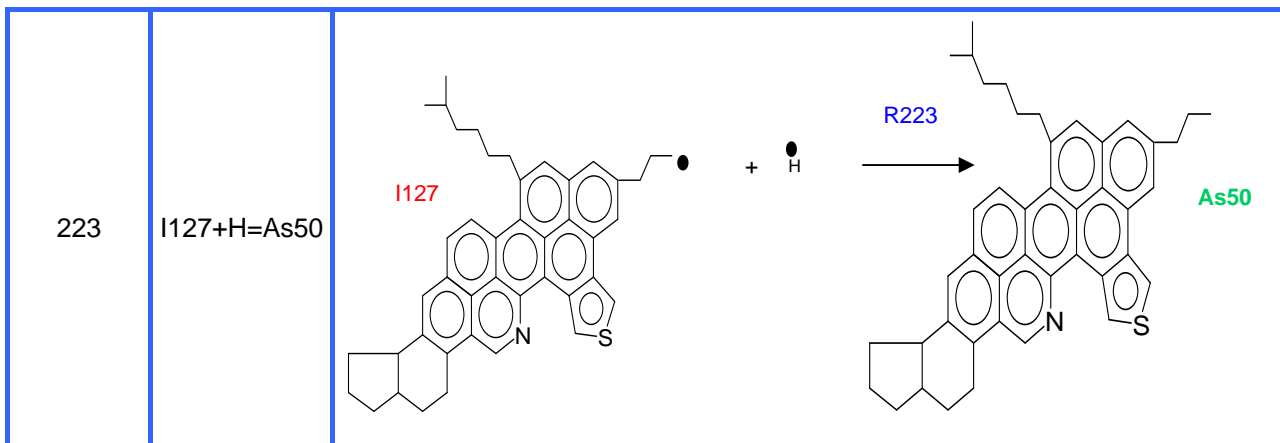


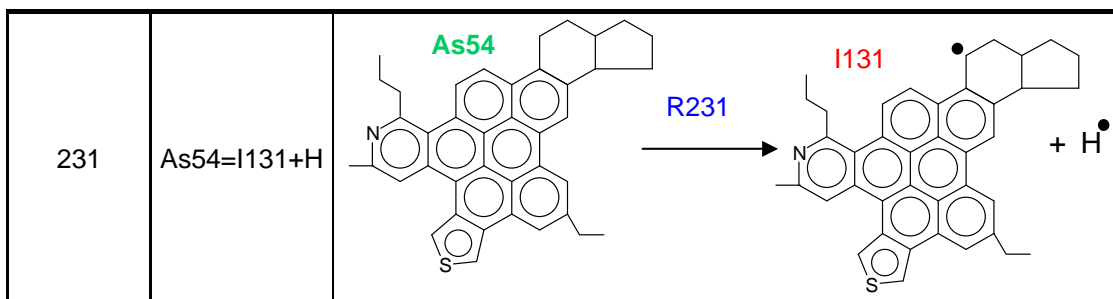
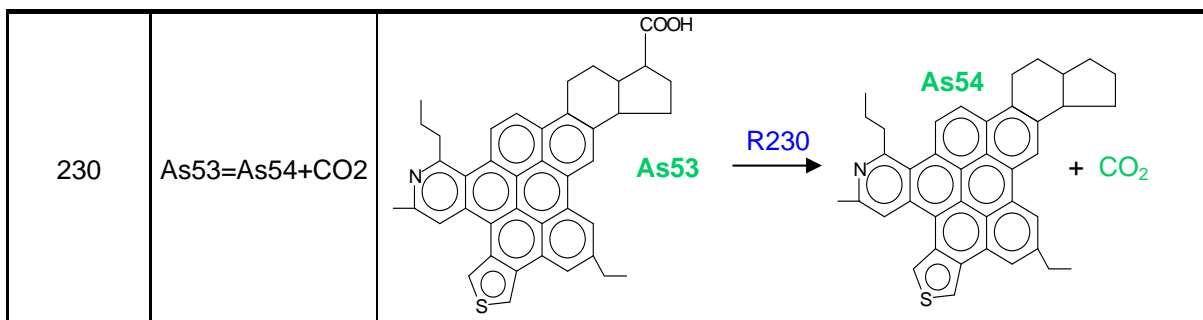
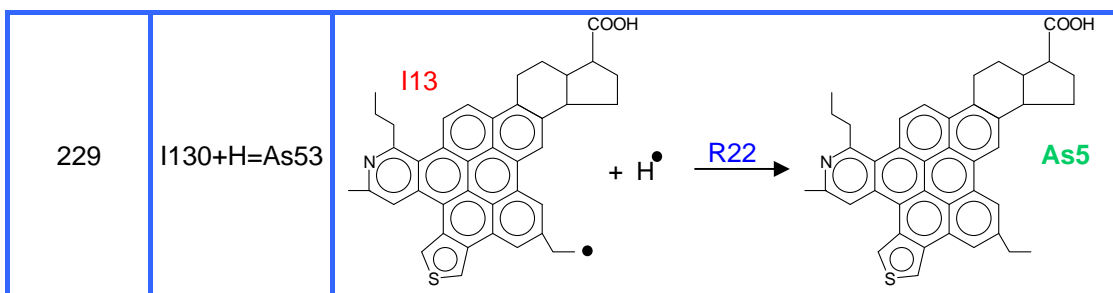
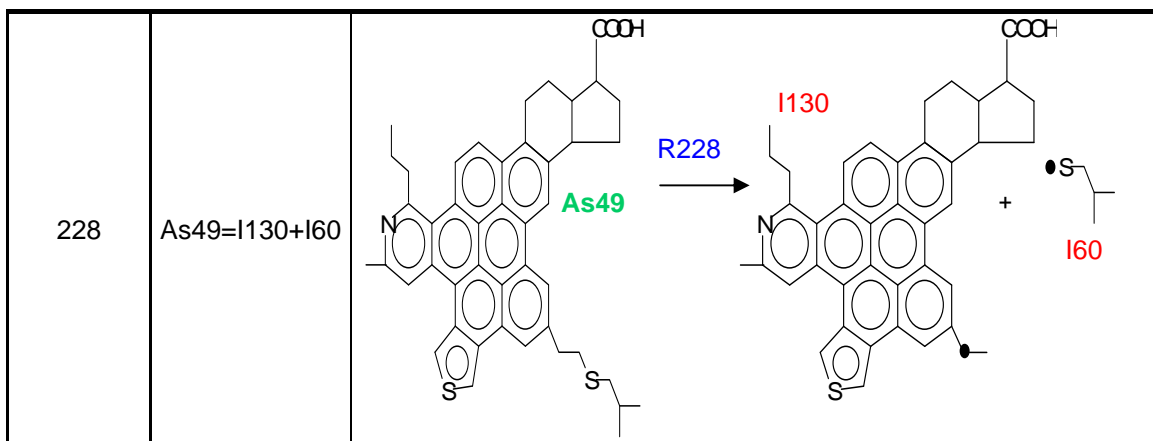
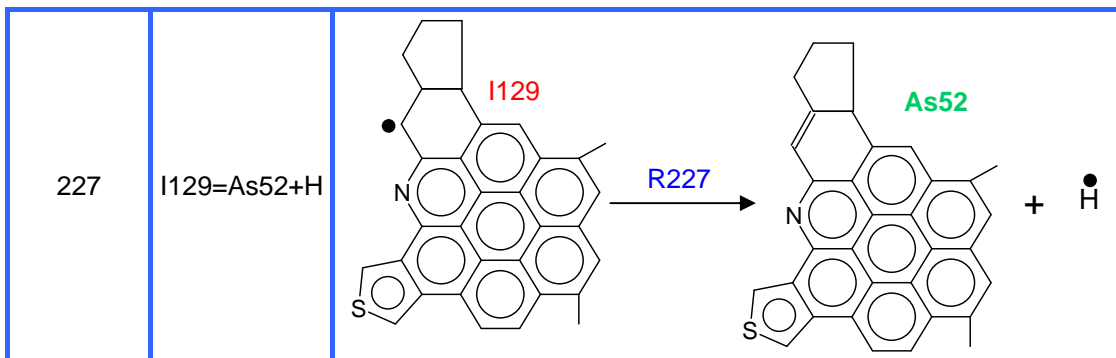


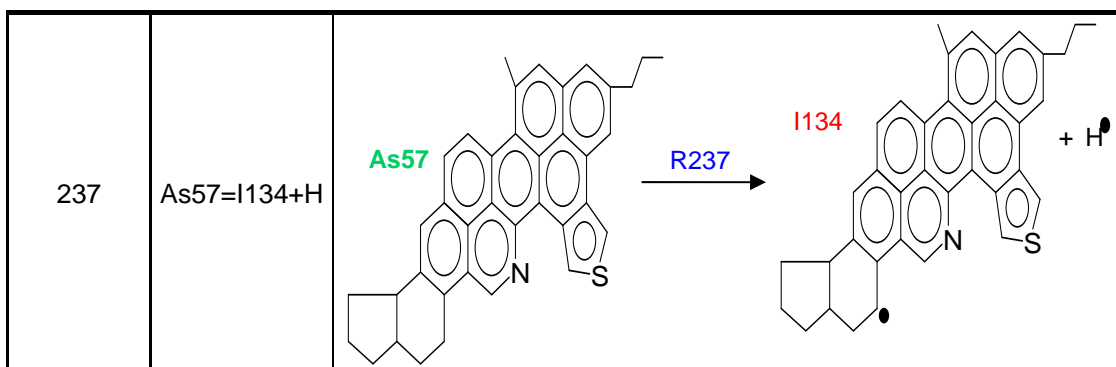
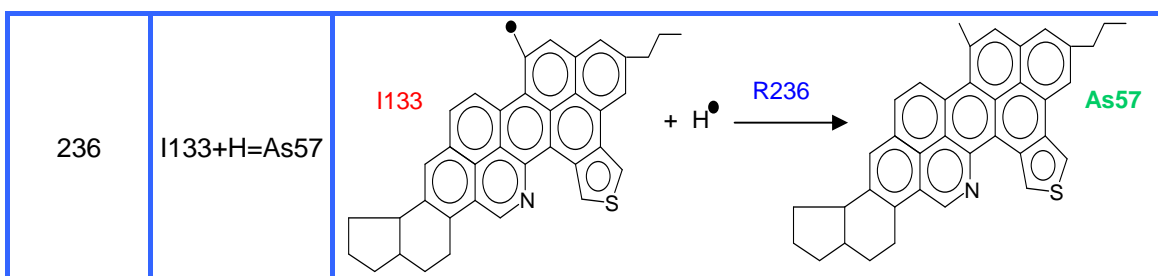
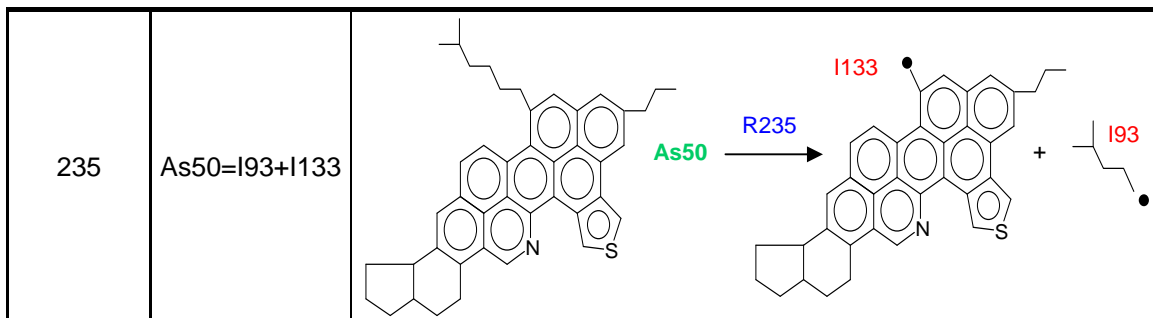
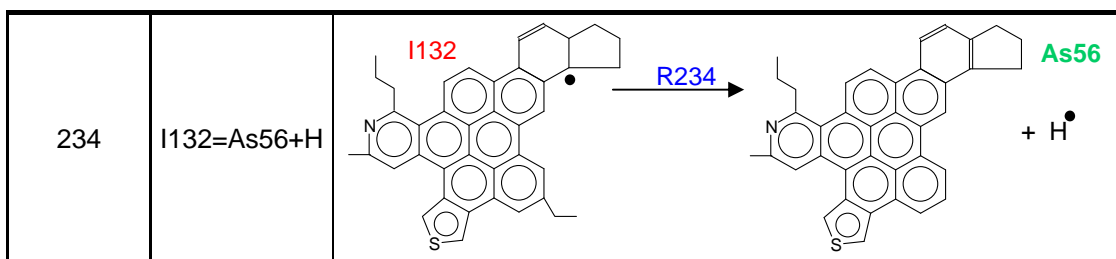
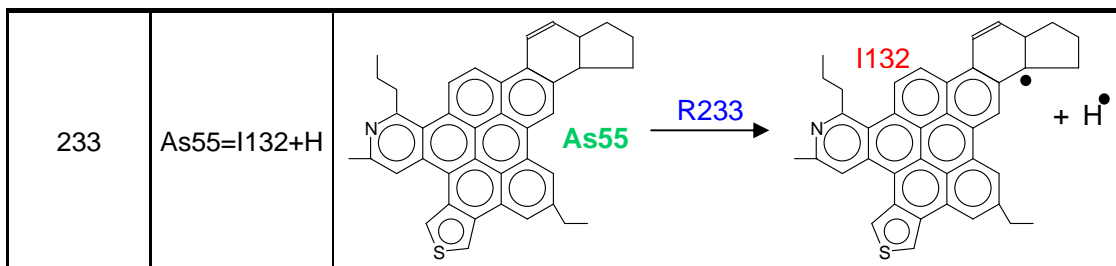
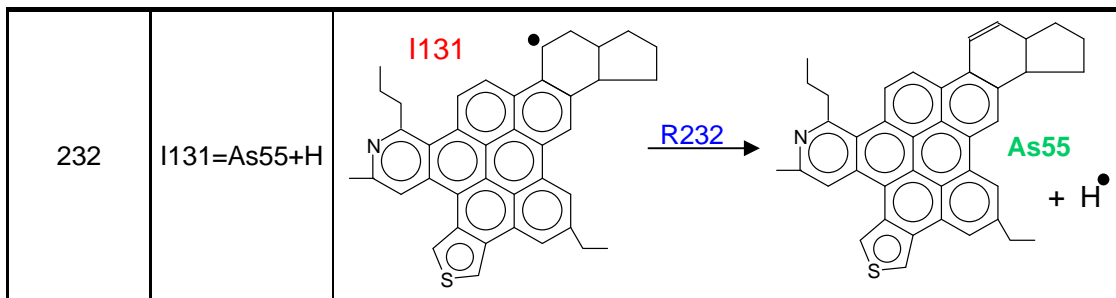


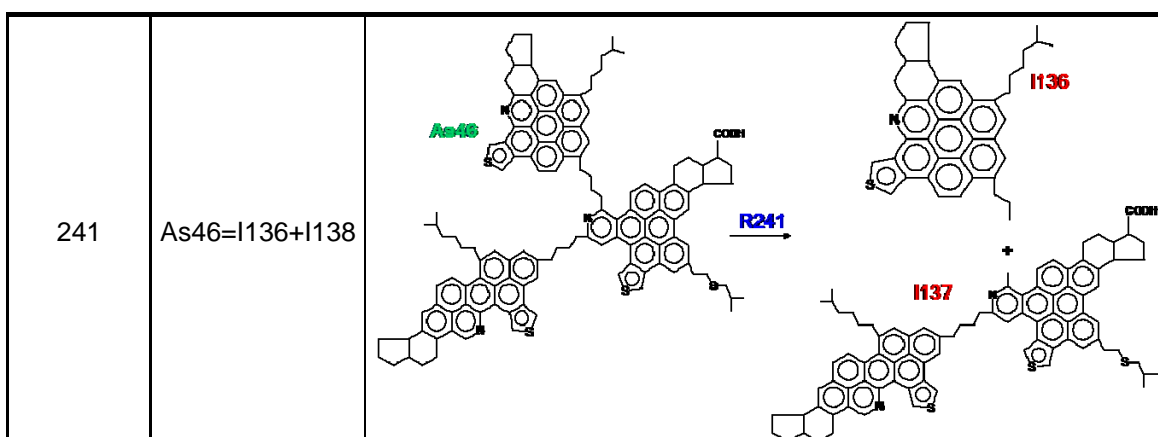
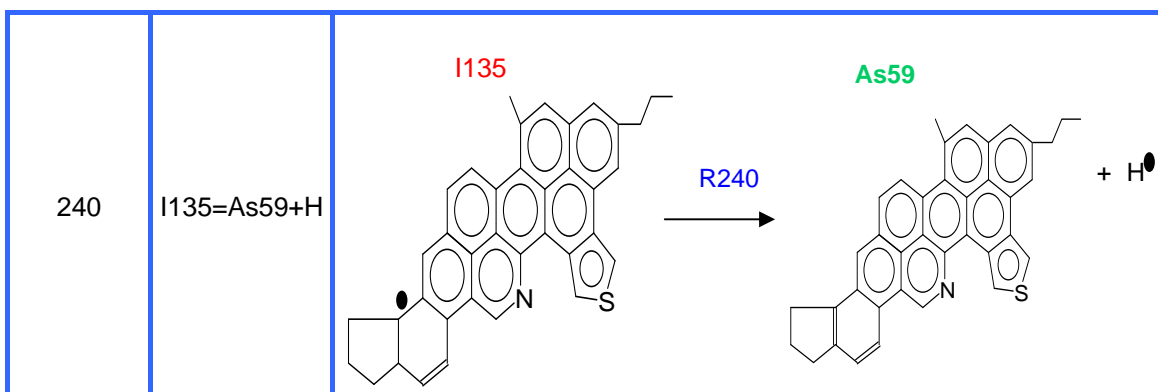
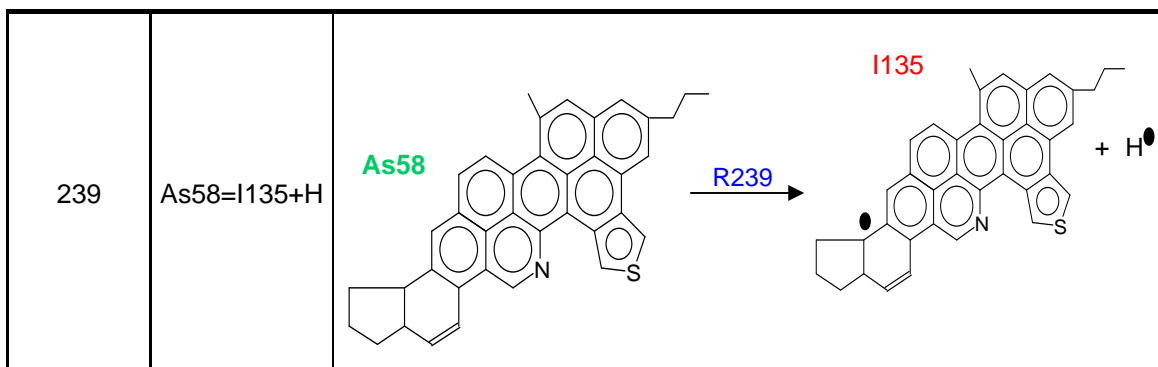
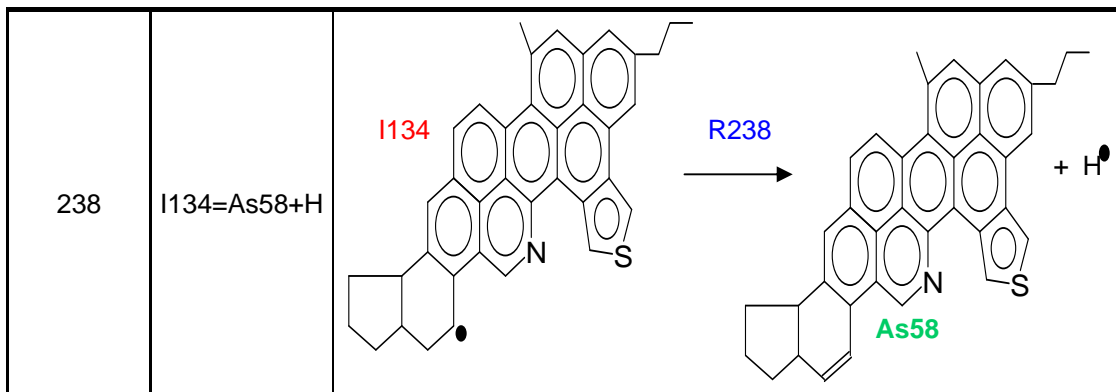


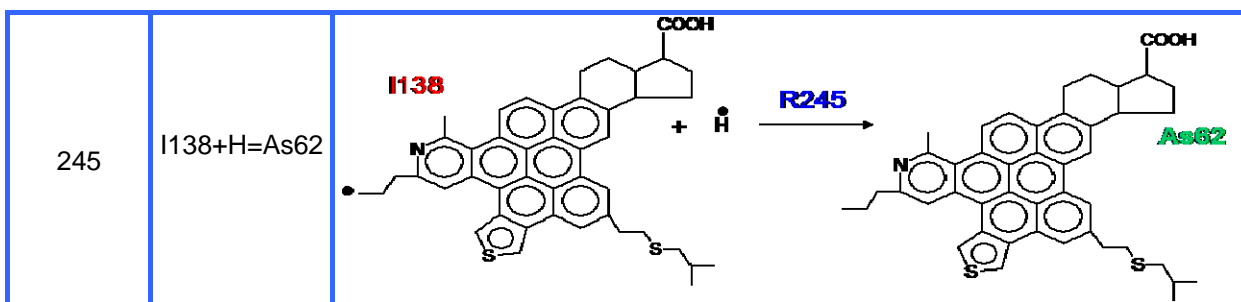
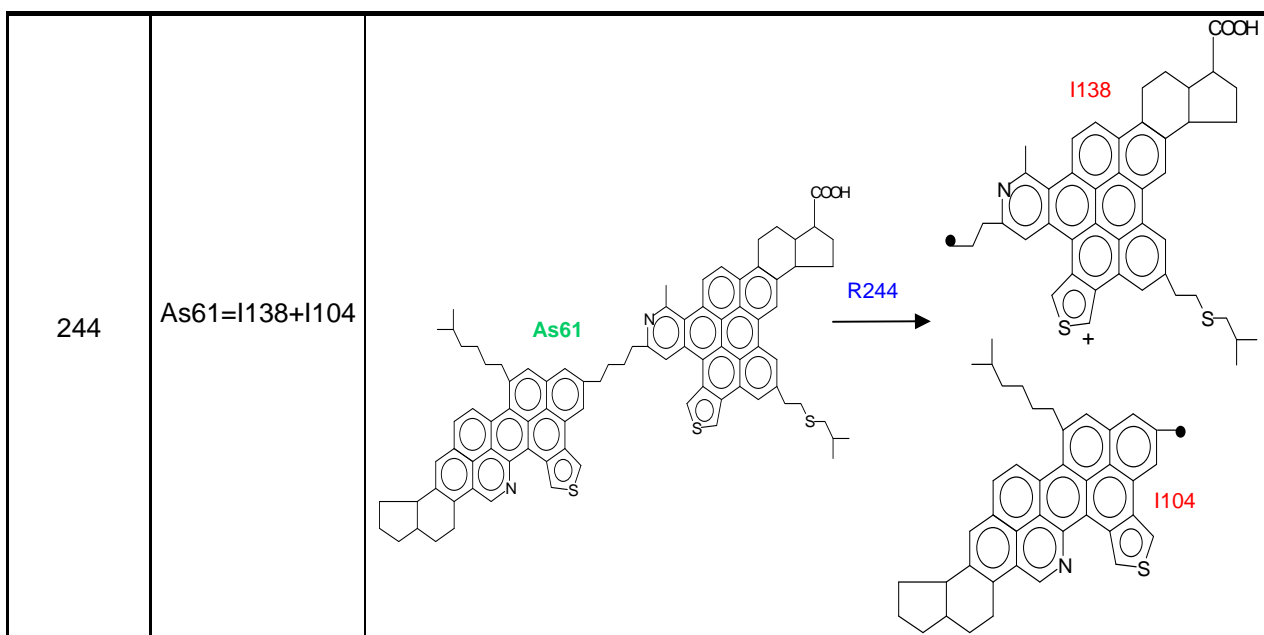
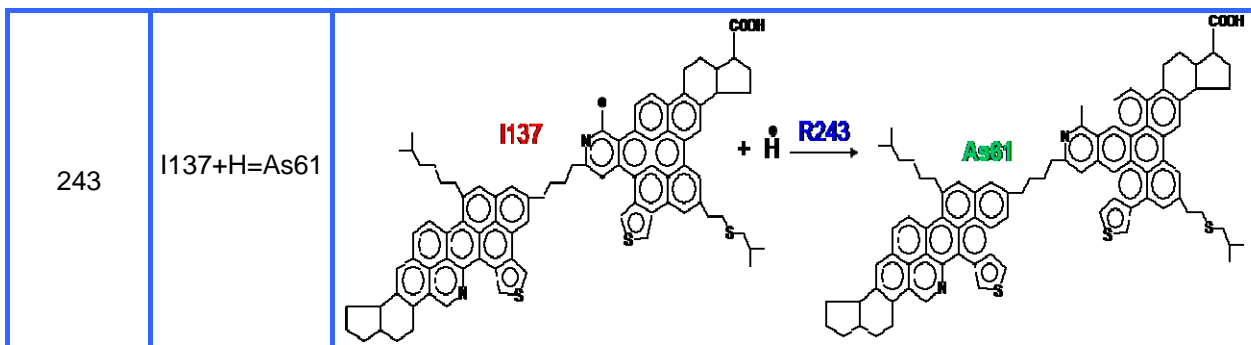
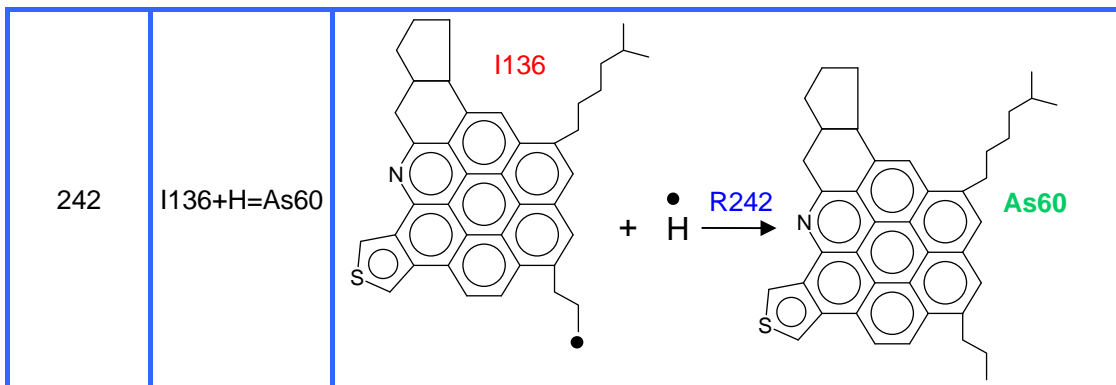


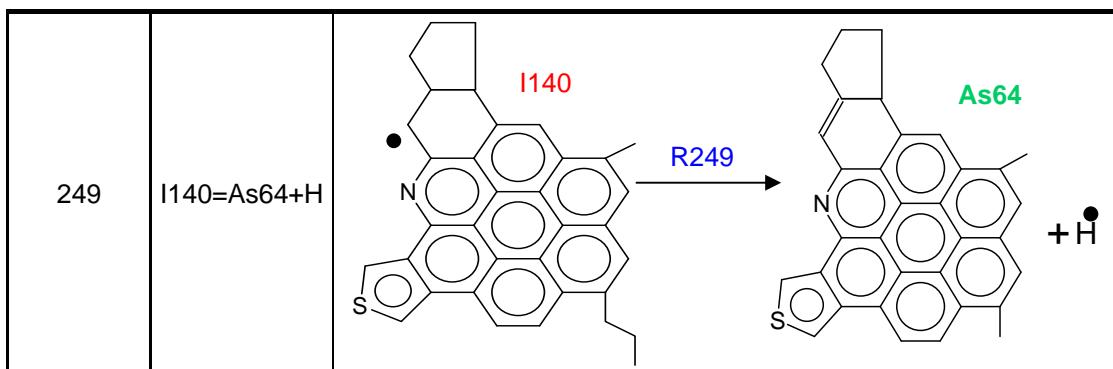
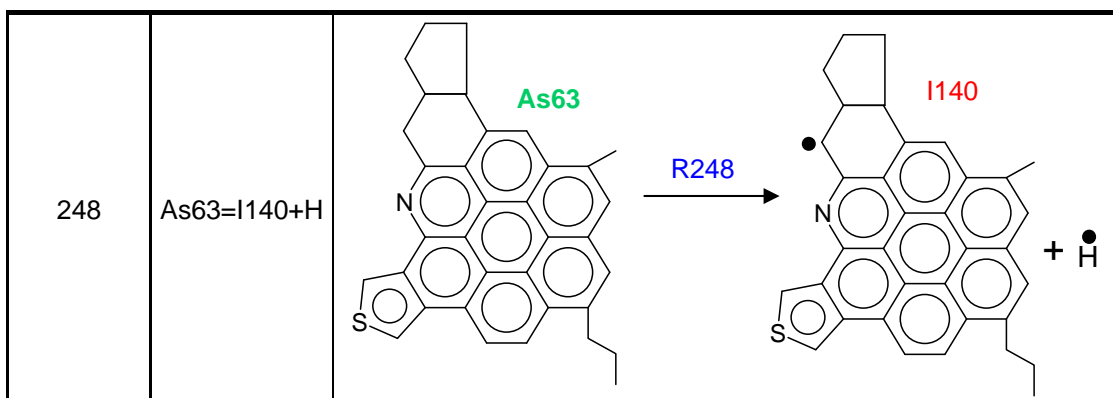
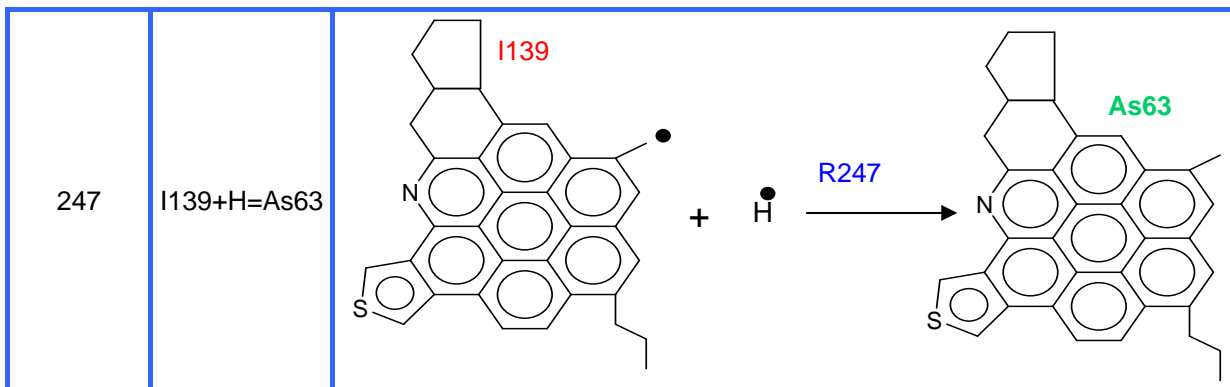
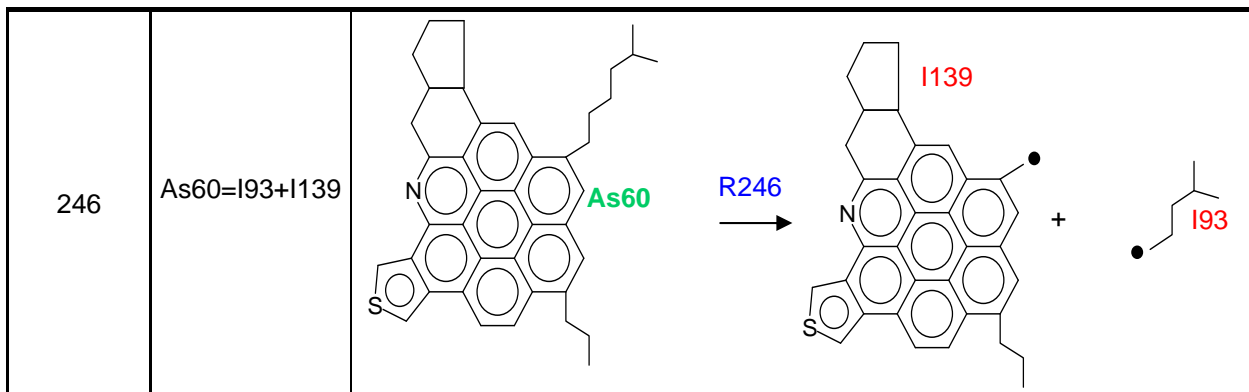


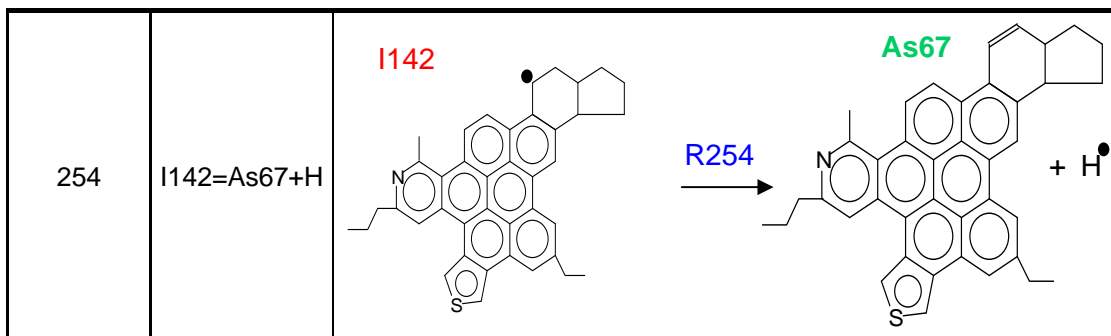
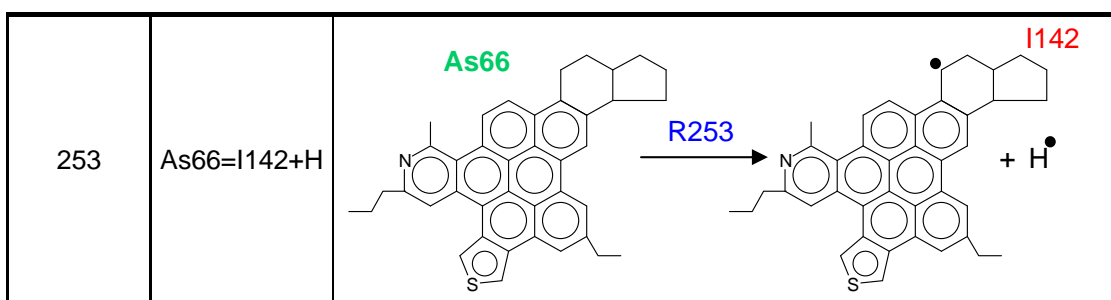
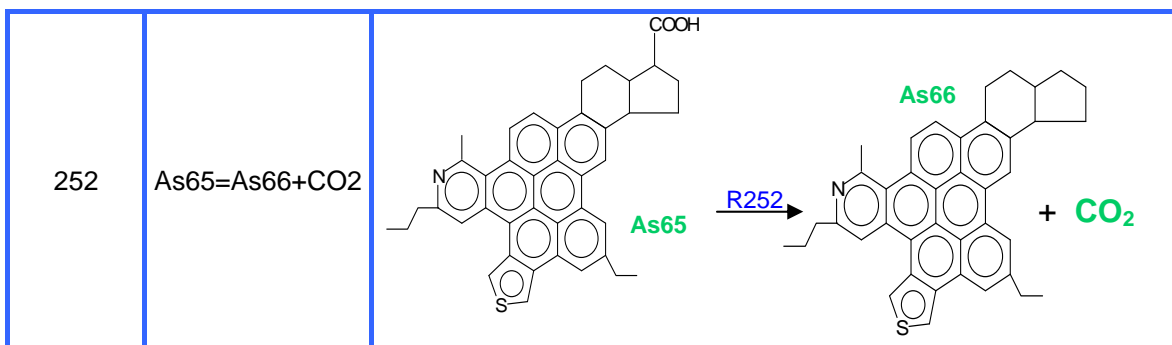
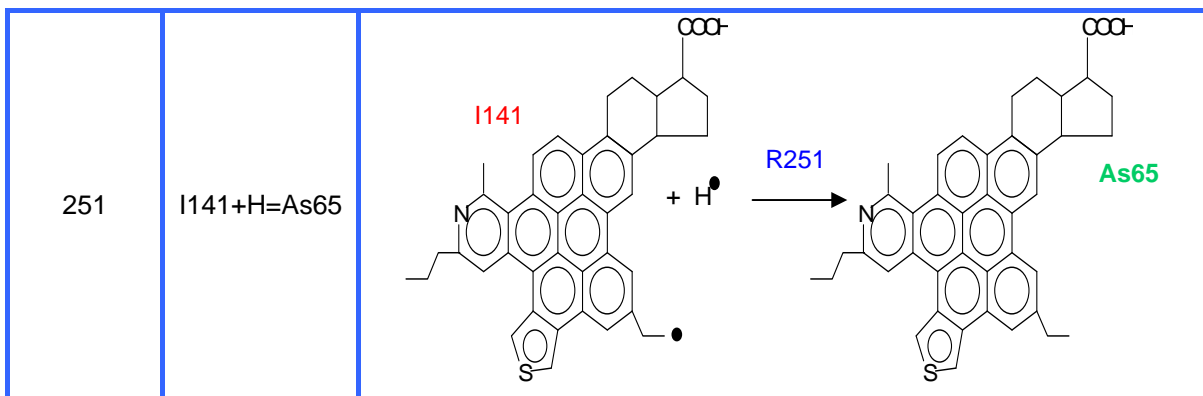
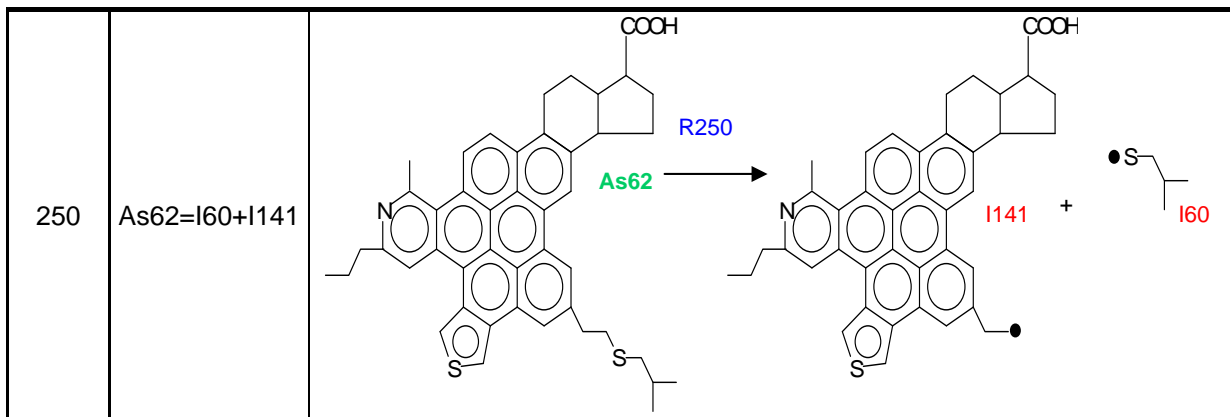


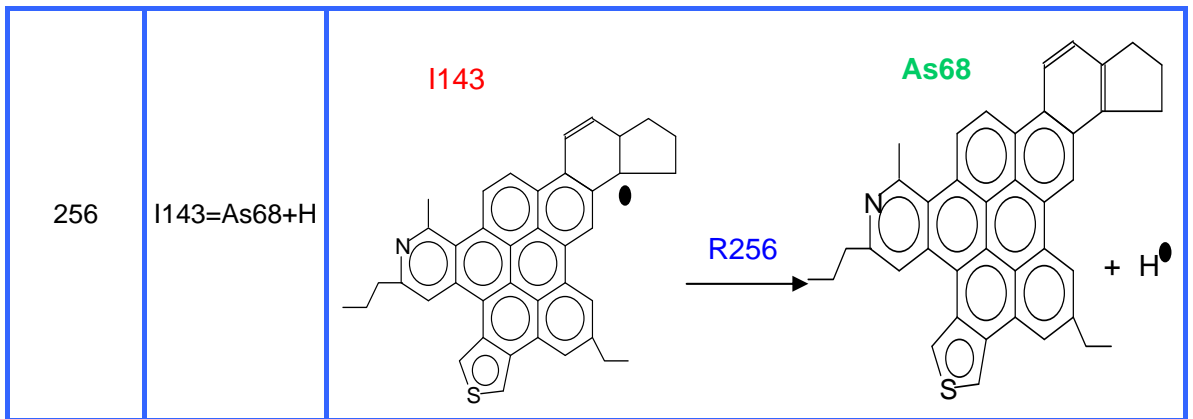
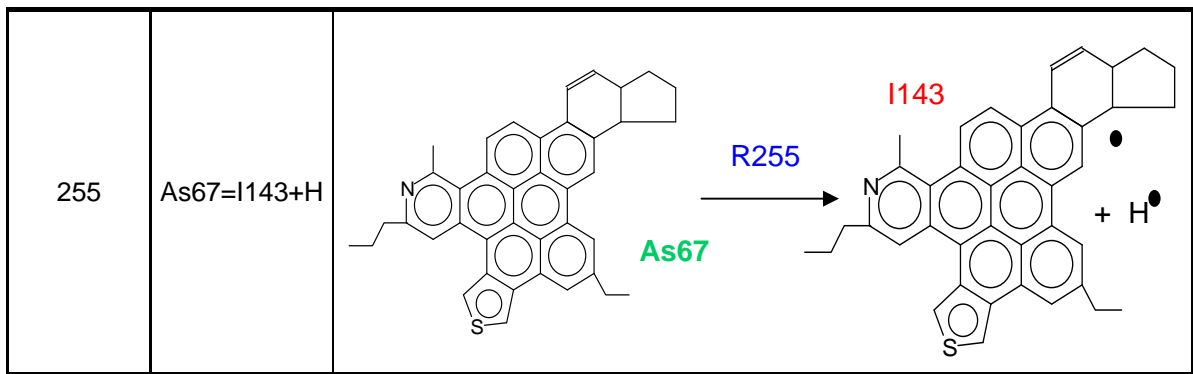












APENDICE B

Propiedades termodinámicas de las reacciones.

Tabla N°18: Propiedades termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Saturadas.

N° de Reacción	Reacción	$\Delta H_f(R1)$	$\Delta H_f(R2)$	$\Delta H_f(P1)$	$\Delta H_f(P2)$	ΔH_r	$S_f(R1)$	$S_f(R2)$	$S_f(P1)$	$S_f(P2)$	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol						Cal/K Mol				
1	Ss1=I1+I2	-16,94	-	45,72	11,18	73,84	572,60	-	221,64	415,44	64,48	28,0
2	I2=Ss2+H	11,18	-	-2,53	54,11	40,41	415,44	-	399,38	31,66	15,59	29,45
3	I1+H=Ss3	45,72	54,11	4,17	-	-95,65	221,64	31,66	209,40	-	-43,90	-64,79
4	H+H=H2	54,11	54,11	2,59	-	-105,64	31,66	31,66	36,58	-	-26,73	-86,84
5	Ss1=I3+CH3	-16,94	-	24,42	38,85	80,21	572,60	0,00	557,91	54,32	39,62	52,35
6	I3+H=Ss4	24,42	54,11	-14,35	-	-92,88	557,91	31,66	560,77	-	-28,79	-72,63
7	CH3+H=CH4	38,85	54,11	-12,40	-	-105,36	54,32	31,66	53,73	-	-32,24	-82,69
8	Ss5=I1+I4	-18,61	-	45,72	9,49	73,82	604,57	-	221,64	447,39	64,45	28,50
9	I4=Ss6+H	9,49	-	-4,20	54,11	40,43	431,32	-	431,32	31,66	31,66	18,17
10	Ss5=I5+CH3	-18,61	-	22,74	38,85	80,20	604,57	-	589,85	54,32	39,60	52,36
11	I5+H=Ss7	-18,61	54,11	-16,03	-	-51,53	589,85	31,66	592,71	-	-28,79	-31,29
12	Ss3=I6	4,17	-	73,14	-	-68,96	209,40	-	275,39	-	22,56	-107,88
13	I6+H=I7	73,14	54,11	31,59	-	-95,67	275,39	31,66	231,94	-	-75,10	-42,86
14	I7=Ss8+H	31,59	-	19,90	54,11	42,43	231,94	-	230,72	31,66	30,44	21,03
15	Ss8=I8	19,90	-	94,11	-	74,20	230,72	-	312,74	-	82,01	16,54
16	I8+H=I9	94,11	54,11	60,07	-	-88,15	312,74	31,66	287,23	-	-57,16	-47,96
17	I9=Ss9+H	60,07	-	40,88	54,11	34,92	287,23	-	268,07	31,66	12,49	26,14
18	Ss9=I10	40,88	-	113,20	-	72,32	268,07	-	331,25	-	63,18	27,90
19	I10+H=I11	113,20	54,11	74,44	-	-92,88	331,25	31,66	302,91	-	-60,00	-50,69
20	I11=Ss10+H	74,44	-	58,25	54,11	37,92	74,44	-	313,90	31,66	271,11	-152,71
21	Ss10=I12+I13	58,25	-	56,31	75,77	73,83	313,90	-	144,87	233,49	64,46	28,50
22	I12+H=Ss12	56,31	54,11	14,76	-	-95,66	144,87	31,66	132,63	-	-43,90	-64,80
23	I13+H=Ss11	75,77	54,11	34,22	-	-95,66	75,77	31,66	221,25	-	113,83	-175,70
24	Ss3=I14+H	134,62	-	40,26	54,11	-40,24	209,40	-	189,33	31,66	11,59	-48,39
25	I14=Ss13+H	40,26	-	30,11	54,11	43,96	189,33	-	240,10	31,66	82,42	-13,99
26	Ss13=I15+H	30,11	-	44,95	54,11	68,95	240,10	-	227,79	31,66	19,35	55,35
27	I15=Ss14+H	44,95	-	60,20	54,11	69,37	227,79	-	279,63	31,66	83,50	10,65
28	Ss14=I16+H	60,20	-	55,01	54,11	48,92	279,63	-	307,88	31,66	59,90	6,81

Tabla N° 19: Propiedades termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Aromáticas.

N° de Reacción	Reacción	$\Delta H_f(R1)$	$\Delta H_f(R2)$	$\Delta H_f(P1)$	$\Delta H_f(P2)$	ΔH_r	$S_f(R1)$	$S_f(R2)$	$S_f(P1)$	$S_f(P2)$	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol					Cal/K Mol					Kcal/Mol
29	I16=Ar14+H	55,01	-	34,44	54,11	33,54	307,88	-	244,19	31,66	-32,04	56,07
30	Ar14=I17+H	34,44	-	55,71	54,11	75,39	244,19	-	223,35	31,66	10,82	67,78
31	I17=Ar15+H	55,71	-	42,96	54,11	41,36	223,35	-	291,42	31,66	99,73	-28,76
32	Ar15=I18+H	42,96	-	65,07	54,11	76,23	291,42	-	281,07	31,66	21,3	61,25
33	I18=Ar16+H	65,07	-	56,99	54,11	46,03	281,07	-	251,49	31,66	2,08	44,57
34	Ar16=I19+H	56,99	-	80,35	54,11	77,48	251,49	-	240,92	31,66	21,09	62,65
35	I19=Ar17+H	80,35	-	80,61	54,11	54,37	240,92	-	240,47	31,66	31,21	32,43
36	Ar17=I20+H	80,61	-	93,95	54,11	67,46	240,47	-	93,95	31,66	-114,87	148,22
37	I20=Ar18+H	93,95	-	85,45	54,11	45,61	93,95	-	229,77	31,66	167,47	-72,14
38	Ar1=I21+I22	17,7	-	60,07	16,23	58,6	465,31	-	205,42	319,6	59,73	16,61
39	I22=Ss15+H	16,23	-	2,53	54,11	40,42	319,61	-	303,55	31,66	15,59	29,45
40	I21+H=Ar2	60,07	54,11	32,65	-	-81,54	205,42	31,66	197,67	-	-39,41	-53,83
41	Ar2=I23+H	32,65	-	56,11	54,11	77,58	197,67	-	187,12	31,66	21,11	62,73
42	I23=Ar3+H	56,11	-	56,26	54,11	54,27	187,12	-	186,65	31,66	31,18	32,34
43	Ar3=I24+H	56,26	-	78,98	54,11	76,83	186,65	-	165,65	31,66	10,65	69,34
44	I24=Ar4+H	78,98	-	55,2	54,11	30,34	165,65	-	204,97	31,66	70,98	-19,57
45	Ar4=I25+H	55,2	-	89,1	54,11	88,01	204,97	-	89,1	31,66	-84,21	147,23

Tabla N°19: (Continuación).

N° de Reacción	Reacción	$\Delta H_f(R1)$	$\Delta H_f(R2)$	$\Delta H_f(P1)$	$\Delta H_f(P2)$	ΔH_r	$S_f(R1)$	$S_f(R2)$	$S_f(P1)$	$S_f(P2)$	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol					Cal/K Mol					Kcal/Mol
46	I25=Ar5+H	89,1	-	84,96	54,11	49,97	89,1	-	170,24	31,66	112,8	-29,34
47	Ar5=I26+H	84,96	-	102,48	54,11	71,64	170,24	-	102,48	31,66	-36,1	97,02
48	I26=Ar6+H	102,48	-	82,52	54,11	34,15	102,48	-	82,52	31,66	11,7	25,93
49	Ar7=I21+I27	21,61	-	60,07	20,43	58,9	385,39	-	205,42	239,76	59,79	16,86
50	I27=Ss16+H	20,43	-	6,74	54,11	40,42	239,76	-	223,69	31,66	15,59	29,45
51	Ar8=I28+I29	54,18	-	104,34	21,27	71,44	435,26	-	275,41	223,79	63,93	26,48
52	I29=Ss17+H	21,27	-	7,58	54,11	40,42	223,79	-	207,72	31,66	15,59	29,45
53	I28+H=Ar9	104,34	54,11	64,43	-	-94,03	275,41	31,66	263,53	-	-43,54	-63,41
54	Ar9=I30+H	64,43	-	87,37	54,11	77,06	263,53	-	252,87	31,66	21	62,29
55	I30=Ar10+H	87,37	-	88,05	54,11	54,79	252,87	-	252,51	31,66	31,3	32,78
56	Ar10=I31+H	88,05	-	109,36	54,11	75,43	252,51	-	231,47	31,66	10,62	67,96
57	I31=Ar11+H	109,36	-	83,89	54,11	28,64	231,47	-	261,73	31,66	61,92	-14,9
58	Ar12=I28+I27	53,38	-	104,34	20,43	71,39	451,25	-	275,41	239,76	63,92	26,45
59	Ar13=I32+I33	75,19	-	129,29	22,96	77,06	401,5	-	263,37	191,84	53,71	39,29
60	I33=Ss18+H	22,96	-	9,26	54,11	40,42	191,84	-	175,78	31,66	15,59	29,45
61	I32+H=Ar11	129,29	54,11	83,89	-	-99,51	263,37	31,66	261,73	-	-33,29	-76,1

Tabla N°20: Propiedades termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Resinas.

Código	REACCIONES	$\Delta H_f(R1)$	$\Delta H_f(R2)$	$\Delta H_f(P1)$	$\Delta H_f(P2)$	ΔH_r	$S_f(R1)$	$S_f(R2)$	$S_f(P1)$	$S_f(P2)$	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol					Cal/K Mol					
62	Rr1=I34+I35	209,91	-	120,12	158,61	68,82	776,67	-	386,65	451,64	61,62	25,49
63	I34+H=Rr2	120,12	54,11	93,69	-	-80,54	386,65	31,66	379,12	-	-39,19	-52,98
64	I35+H=Rr3	158,61	54,11	110,16	-	-102,57	451,64	31,66	455,58	-	-27,72	-83,08
65	Rr2=I36+I37	93,69	-	153,24	-14,69	44,86	379,12	-	339,71	93,51	54,10	6,82
66	I36+H=Rr4	153,24	54,11	126,38	-	-80,97	339,71	31,66	332,09	-	-39,28	-53,35
67	Rr4=I38+H	126,38	-	149,27	54,11	77,01	332,09	-	321,41	31,66	20,98	62,25
68	I38=Rr5+H	149,27	-	150,01	54,11	54,85	321,41	-	321,07	31,66	31,31	32,83
69	Rr5=I39+H	150,01	-	172,14	54,11	76,25	321,07	-	299,94	31,66	10,53	68,85
70	I39=Rr6+H	172,14	-	145,15	54,11	27,12	299,94	-	326,67	31,66	58,39	-13,94
71	I37+H=C1	-14,69	54,11	-42,39	-	-81,82	93,51	31,66	86,91	0,00	-38,25	-54,92
72	C1=I40+I41	-42,39	-	36,19	-3,43	75,16	86,91	-	67,55	85,61	66,25	28,57
73	I41=CO+CH3	-3,43	-	-23,44	38,85	18,83	85,61	-	53,36	54,32	22,08	3,31
74	I40+H=C3H8	36,19	54,11	-19,72	-	-110,02	67,55	31,66	75,33	-	-23,88	-93,23
75	Rr3=I42+H	110,16	-	143,06	54,11	87,01	455,58	-	426,42	31,66	2,49	85,26
76	I42=Rr7+H	143,06	-	142,88	54,11	53,94	426,42	-	428,87	31,66	34,10	29,96
77	Rr7=I43+H	142,88	-	165,93	54,11	77,16	428,87	-	404,94	31,66	7,73	71,72
78	I43=Rr8+H	165,93	-	138,72	54,11	26,91	404,94	-	438,09	31,66	64,80	-18,66
79	Rr8=I44+I45	138,72	-	172,73	26,33	60,34	438,09	-	367,25	127,96	57,11	20,18
80	I44+H=Rr9	172,73	54,11	144,28	-	-82,57	367,25	31,66	362,26	-	-36,64	-56,80
81	I45+H=C5H12	26,33	54,11	-14,90	-	-95,34	26,33	31,66	115,79	-	57,80	-135,98
82	Rr1=I46+I47	209,91	-	148,71	131,44	70,24	776,67	-	412,77	422,84	58,94	28,80
83	I46+H=Rr10	148,71	54,11	115,60	-	-87,22	412,77	31,66	418,22	-	-26,21	-68,79
84	I47+H=Rr11	131,44	54,11	92,71	-	-92,84	422,84	31,66	412,87	-	-41,63	-63,57

Tabla N°20: (Continuación) .

Código	REACCIONES	$\Delta H_f(R1)$	$\Delta H_f(R2)$	$\Delta H_f(P1)$	$\Delta H_f(P2)$	ΔH_r	$S_f(R1)$	$S_f(R2)$	$S_f(P1)$	$S_f(P2)$	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol					Cal/K Mol					Kcal/Mol
85	Rr11=I37+I48	92,71	-	-14,69	151,56	44,16	412,87	-	93,51	371,66	52,30	7,39
86	I48+H=Rr12	151,56	54,11	125,40	-	-80,27	371,66	31,66	365,83	-	-37,48	-53,92
87	Rr12=I49+H	125,40	-	147,59	54,11	76,30	365,83	-	353,36	31,66	19,18	62,82
88	I49=Rr13+H	147,59	-	149,02	54,11	55,54	353,36	-	354,82	31,66	33,11	32,26
89	Rr13=I50+H	149,02	-	170,45	54,11	75,55	354,82	-	331,88	31,66	8,72	69,42
90	I50=Rr14+H	170,45	-	144,86	54,11	28,52	331,88	-	364,04	31,66	63,81	-16,35
91	Rr10=I51+H	115,60	-	143,32	54,11	81,84	418,22	-	397,16	31,66	10,59	74,39
92	I51=Rr15+H	143,32	-	145,02	54,11	55,81	397,16	-	398,67	31,66	33,17	32,49
93	Rr15=I52+H	145,02	-	166,19	54,11	75,28	398,67	-	375,68	31,66	8,66	69,19
94	I52=Rr16+H	166,19	-	140,86	54,11	28,79	375,68	-	407,90	31,66	63,87	-16,12
95	Rr16=I53+I45	140,86	-	173,00	26,33	58,46	407,90	-	337,99	127,96	58,05	17,65
96	I53+H=Rr17	173,00	54,11	146,43	-	-80,69	337,99	31,66	332,07	-	-37,57	-54,27
97	Rr18=I54+I55	226,35	-	169,11	336,24	278,99	712,62	-	417,22	336,24	40,84	250,28
98	I55+H=Rr19	336,24	54,11	70,50	-	-319,85	336,24	31,66	312,10	-	-55,79	-280,62
99	I54+H=Rr20	169,11	54,11	153,66	-	-69,56	332,07	31,66	457,54	-	93,81	-135,53
100	Rr19=I37+I56	70,50	-	-14,69	122,30	37,11	312,10	-	93,51	285,06	66,46	-9,62
101	I56+H=Rr21	122,30	54,11	96,05	-	-80,36	285,06	31,66	248,00	-	-68,71	-32,05
102	Rr21=I57+H	96,05	-	118,33	54,11	76,39	248,00	-	266,75	31,66	50,41	40,95
103	I57=Rr22+H	118,33	-	119,67	54,11	55,45	266,75	-	236,99	31,66	1,89	54,12
104	Rr22=I58+H	119,67	-	140,31	54,11	74,76	236,99	-	245,36	31,66	40,03	46,62
105	I58=Rr23+H	140,31	-	115,51	54,11	29,31	245,36	-	246,21	31,66	32,51	6,45
106	Rr20=I59+I60	153,66	-	173,06	23,62	43,01	457,54	-	362,97	112,78	18,21	30,21
107	I59+H=Rr24	173,06	54,11	145,25	-	-81,92	362,97	31,66	351,67	-	-42,95	-51,72

Tabla N°20: (Continuación) .

Código	REACCIONES	$\Delta H_f(R1)$	$\Delta H_f(R2)$	$\Delta H_f(P1)$	$\Delta H_f(P2)$	ΔH_r	$S_f(R1)$	$S_f(R2)$	$S_f(P1)$	$S_f(P2)$	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol					Cal/K Mol					
108	Rr24=I61+H	145,25	-	169,04	54,11	77,90	351,67	-	349,20	31,66	29,18	57,38
109	I61=Rr25+H	169,04	-	169,07	54,11	54,14	349,20	-	340,69	31,66	23,15	37,87
110	I60+H=SH1	23,62	54,11	-2,21	-	-79,94	112,78	31,66	149,20	-	4,76	-83,29
111	SH1=I62+SH	-2,21	-	27,17	36,41	65,79	149,20	-	111,99	53,28	16,07	54,48
112	I62+H=C4H10	27,17	54,11	-	-	-81,28	111,99	31,66	-	-	-143,64	19,72
113	SH+H=H2S	36,41	54,11	-1,62	-	-92,14	53,28	31,66	56,18	-	-28,76	-71,92
114	Rr26=I55+I63	227,19	-	336,24	187,74	296,79	227,19	-	187,68	471,16	431,65	-6,72
115	I63+H=Rr27	187,74	54,11	161,44	-	-80,42	471,16	31,66	459,11	31,66	-12,05	-71,95
116	Rr27=I64+I60	161,44	-	179,97	23,62	42,14	459,11	-	364,72	112,78	18,40	29,20
117	I64+H=Rr28	179,97	54,11	153,04	-	-81,04	364,72	31,66	353,24	-	-43,14	-50,71
118	Rr28=I65+H	153,04	-	175,99	54,11	77,07	353,24	-	349,54	31,66	27,95	57,41
119	I65=Rr29+H	175,99	-	174,86	54,11	52,98	349,54	-	412,82	31,66	94,93	-13,77
120	Rr30=I62+I66	253,32	-	27,17	122,00	-104,16	253,32	-	111,99	359,49	218,15	-257,55
121	I66+H=Rr31	122,00	54,11	82,55	-	-93,57	359,49	31,66	316,50	-	-74,64	-41,08
122	Rr31=I37+I67	82,55	-	-14,69	142,12	44,88	316,50	-	93,51	308,31	85,32	-15,11
123	I67+H=Rr32	142,12	54,11	115,24	-	-81,00	308,31	31,66	269,47	-	-70,50	-31,43
124	Rr32=I68+H	115,24	-	138,14	54,11	77,02	269,47	-	286,52	31,66	48,71	42,77
125	I68=Rr33+H	138,14	-	138,86	54,11	54,83	286,52	-	258,45	31,66	3,59	52,31

Tabla N°21: Propiedades Termodinámicas de las reacciones que involucran moléculas Asfaltenos

Código	REACCIONES	$\Delta H_r(R1)$	$\Delta H_r(R2)$	$\Delta H_r(P1)$	$\Delta H_r(P2)$	ΔH_r	$S_r(R1)$	$S_r(R2)$	$S_r(P1)$	$S_r(P2)$	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol					Cal/K Mol					Kcal/Mol
126	As1=I69+I70	449,04	-	159,78	339,63	50,38	1326,13	-	428,40	879,48	-18,25	63,21
127	I69+H=As2	159,78	54,11	134,49	-	-79,41	428,40	31,66	422,13	-	-37,93	-52,75
128	I70+H=As3	339,63	31,66	301,68	-	-69,60	879,48	31,66	901,13	-	-10,00	-62,57
129	As3=I71+I72	301,68	-	151,30	218,45	68,06	901,13	-	471,11	475,64	45,61	35,99
130	I72+H=As4	218,45	54,11	179,03	-	-93,53	475,64	31,66	432,66	-	-74,64	-41,05
131	I71+H=As5	151,30	54,11	112,36	-	-93,05	151,30	31,66	431,72	-	248,77	-267,97
132	As2=I73+I74	134,49	-	208,87	-1,69	72,70	422,13	-	368,40	115,12	61,40	29,53
133	I73+H=As6	208,87	54,11	169,29	-	-93,70	368,40	31,66	356,60	-	-43,46	-63,14
134	As6=I75+H	169,29	-	202,83	54,11	87,65	356,60	-	355,43	31,66	30,49	66,21
135	I75=As7+H	202,83	-	187,85	31,66	16,67	355,43	-	418,30	31,66	94,52	-49,79
136	I74+H=C2	-1,69	54,11	-42,81	-	-95,24	115,12	31,66	102,98	-	-43,80	-64,44
137	C2=I41+I62	-42,81	-	-8,04	27,17	61,94	102,98	-	94,34	111,99	103,34	-10,73
138	As4=I60+I76	179,03	-	23,62	207,01	51,60	432,66	-	112,78	376,47	56,59	11,81
139	I76+H=As8	207,01	54,11	170,07	-	-91,05	376,47	31,66	332,61	-	-75,52	-37,96
140	As8=I77+H	170,07	-	207,05	54,11	91,09	332,61	-	360,56	31,66	59,60	49,18
141	I77=As9+H	207,05	-	193,12	54,11	40,19	360,56	-	323,05	31,66	-5,85	44,30
142	As5=I78+I79	112,36	-	141,32	22,77	51,74	431,72	-	350,52	128,75	47,55	18,30
143	I78+H=As10	141,32	54,11	102,45	-	-92,99	350,52	31,66	305,34	-	-76,83	-38,96
144	As10=I80	102,45	-	156,44	-	53,99	305,34	-	404,20	-	98,86	-15,53
145	I80+H=I81	156,44	54,11	118,11	-	-92,44	404,20	31,66	404,85	-	-31,01	-70,64
146	I81=I82+CO	118,11	-	158,17	-23,44	16,62	404,85	-	380,48	53,37	28,99	-3,77
147	I82+H=As11	158,17	54,11	118,54	-	-93,74	380,48	31,66	337,45	-	-74,68	-41,23

Tabla N° 21: (Continuación).

Código	REACCIONES	$\Delta H_f(R1)$	$\Delta H_f(R2)$	$\Delta H_f(P1)$	$\Delta H_f(P2)$	ΔH_r	$S_f(R1)$	$S_f(R2)$	$S_f(P1)$	$S_f(P2)$	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol					Cal/K Mol					
148	As11=I83+H	118,54	-	154,81	54,11	90,38	337,45	-	363,60	31,66	57,80	49,74
149	I83=As12+H	154,81	-	141,58	54,11	40,89	363,60	-	324,66	31,66	-7,28	46,01
150	I79+H=SH2	22,77	54,11	-2,99	-	-79,88	128,75	31,66	165,18	-	4,77	-83,24
151	SH2=I45+SH	-2,99	-	26,33	-23,44	5,88	165,18	-	127,96	53,37	16,14	-5,47
152	As13=I84+I85	442,44	-	187,59	322,51	67,66	1315,9	-	440,86	883,09	8,06	61,99
153	I84+H=As14	187,59	54,11	148,59	-	-93,12	440,86	31,66	429,17	-	-43,34	-62,64
154	I85+H=As15	322,51	54,11	285,82	-	-90,80	883,09	31,66	871,92	-	-42,83	-60,69
155	As15=I86+I87	285,82	-	150,72	203,50	68,40	871,92	-	472,82	446,15	47,04	35,32
156	I86+H=As16	150,72	54,11	110,84	-	-93,99	472,82	31,66	430,21	-	-74,26	-41,78
157	I87+H=As17	203,50	54,11	164,13	-	-93,48	446,15	31,66	403,18	-	-74,63	-41,00
158	As14=I88	148,59	-	207,38	-	58,78	429,17	-	552,27	-	123,10	-27,77
159	I88+H=I89	207,38	54,11	168,61	-	-92,89	552,27	31,66	523,93	-	-60,00	-50,70
160	I89=I90+CO	168,61	-	201,41	-23,44	9,36	523,93	-	465,35	53,37	-5,20	13,02
161	I90+H=As18	201,41	54,11	163,91	0,00	-91,61	465,35	31,66	453,23	-	-43,78	-60,83
162	As18=I91+H	163,91	-	198,62	54,11	88,83	453,23	-	450,25	31,66	28,67	68,67
163	I91=As19+H	198,62	-	187,39	54,11	42,88	450,25	-	446,91	31,66	28,32	22,97
164	As19=I92+I93	446,91	-	235,18	25,48	-186,25	446,91	-	367,25	143,93	64,26	-231,44
165	I93+H=C6H14	25,48	54,11	-26,08	-	-105,68	143,93	31,66	122,27	-	-53,31	-68,20
166	I92+H=As20	235,18	54,11	195,43	-	-93,87	367,25	31,66	355,40	-	-43,50	-63,28
167	As16=I79+I94	110,84	-	22,77	142,66	54,59	430,21	-	128,75	371,38	69,93	5,42
168	I94+H=As21	142,66	54,11	103,41	-	-93,36	371,38	31,66	328,44	-	-74,60	-40,91
169	As21=I95	103,41	-	157,77	-	54,36	328,44	-	425,07	-	96,64	-13,59
170	I95+H=I96	157,77	54,11	119,01	-	-92,87	425,07	31,66	427,94	-	-28,79	-72,63
171	I96=I97+CO	119,01	0,00	158,48	-23,44	16,03	427,94	0,00	401,79	53,37	27,22	-3,11
172	I97+H=As22	158,48	54,11	118,92	-	-93,68	401,79	31,66	358,77	-	-74,67	-41,18
173	As22=I98+H	118,92	-	155,70	54,11	90,90	358,77	-	386,68	31,66	59,57	49,02
174	I98=As23+H	155,70	-	142,51	54,11	40,92	386,68	-	343,39	31,66	-11,63	49,10

Tabla N°21: (Continuación).

Código	REACCIONES	$\Delta H_f(R1)$	$\Delta H_f(R2)$	$\Delta H_f(P1)$	$\Delta H_f(P2)$	ΔH_r	$S_f(R1)$	$S_f(R2)$	$S_f(P1)$	$S_f(P2)$	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol					Cal/K Mol					Kcal/Mol
175	As17=I99+H	164,13	-	201,93	54,11	91,91	403,18	-	398,20	31,66	26,68	73,15
176	I99=As24+H	201,93	-	187,63	54,11	39,82	398,20	-	395,48	31,66	28,93	19,47
177	As24=I100+I93	187,63	-	234,72	25,48	72,57	395,48	-	346,46	143,93	94,91	5,83
178	I100+H=As25	234,72	54,11	194,54	-	-94,30	346,46	31,66	301,08	-	-77,04	-40,13
179	As26=I101+I102	476,51	-	171,20	369,03	63,72	1368,54	-	435,66	945,22	12,35	55,04
180	I101+H=As27	171,20	54,11	132,55	-	-92,77	435,66	31,66	421,74	-	-45,57	-60,72
181	I102+H=As28	369,03	54,11	332,70	-	-90,45	945,22	31,66	934,12	-	-42,75	-60,38
182	As28=I103+I104	332,70	-	523,20	221,84	412,34	934,12	-	523,20	467,32	56,40	372,69
183	I103+H=As29	176,97	54,11	137,97	-	-93,11	523,20	31,66	480,32	-	-74,54	-40,70
184	I104+H=As30	221,84	54,11	183,68	-	-92,27	467,32	31,66	424,54	-	-74,44	-39,93
185	As27=I105+I74	132,55	-	206,97	-1,69	72,73	421,74	-	372,38	115,12	65,76	26,49
186	I105+H=As31	206,97	54,11	167,38	-	-93,70	372,38	31,66	360,57	-	-43,47	-63,14
187	As31=I106+H	167,38	-	203,97	54,11	90,70	360,57	-	354,63	31,66	25,71	72,62
188	I106=As32+H	203,97	-	188,99	54,11	39,13	354,63	-	417,50	31,66	94,52	-27,33
189	As29=I79+I107	137,97	-	22,77	169,97	54,77	480,32	-	128,75	392,01	40,45	26,33
190	I107+H=As33	169,97	54,11	130,61	-	-93,47	392,01	31,66	349,04	-	-74,63	-41,00
191	As33=I108	130,61	-	185,71	-	55,10	349,04	-	475,17	-	126,13	-33,59
192	I108+H=I109	185,71	54,11	146,94	-	-92,88	475,17	31,66	478,03	-	-28,79	-72,64
193	I109=I110+CO	146,94	-	186,64	-23,44	16,26	478,03	-	422,31	53,37	-2,35	17,91
194	I110+H=As34	186,64	54,11	146,98	-	-93,77	422,31	31,66	379,27	-	-74,69	-41,25
195	As34=I111+H	146,98	-	183,87	54,11	91,00	379,27	-	407,20	31,66	59,59	49,10

Tabla N°21: (Continuación).

Código	REACCIONES	$\Delta H_f(R1)$	$\Delta H_f(R2)$	$\Delta H_f(P1)$	$\Delta H_f(P2)$	ΔH_r	$S_f(R1)$	$S_f(R2)$	$S_f(P1)$	$S_f(P2)$	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol					Cal/K Mol					
196	I11=As35+H	183,87	-	170,60	54,11	40,85	407,20	-	368,26	31,66	-7,29	45,98
197	As30=I112+H	183,68	-	219,50	54,11	89,93	424,54	-	450,00	31,66	57,12	49,76
198	I112=As36+H	219,50	-	212,13	54,11	46,74	450,00	-	398,76	31,66	-19,59	60,51
199	As36=I113+I93	212,13	-	257,91	25,48	71,27	398,76	-	349,93	143,93	95,10	4,40
200	I113+H=As37	257,91	54,11	218,47	-	-93,55	349,93	31,66	306,95	-	-74,64	-41,07
201	As26=I114+I115	476,51	-	169,10	370,69	63,29	1368,54	-	465,49	913,28	10,23	56,09
202	I114+H=As38	169,10	54,11	132,84	-	-90,38	465,49	31,66	457,51	-	-39,64	-62,50
203	I115+H=As39	370,69	54,11	334,24	-	-90,57	913,28	31,66	902,16	-	-42,78	-60,49
204	As39=I116+I104	334,24	-	179,74	221,84	67,34	902,16	-	481,73	467,32	46,89	34,37
205	I116+H=As40	179,74	54,11	140,65	-	-93,20	481,73	31,66	438,82	-	-74,57	-40,77
206	As38=I74+I117	132,84	-	-1,69	205,85	71,33	457,51	-	115,12	401,74	59,36	29,59
207	I117+H=As41	205,85	54,11	166,37	-	-93,59	401,74	31,66	389,96	-	-43,44	-63,05
208	As41=I118+H	166,37	-	203,06	54,11	90,80	389,96	-	386,64	31,66	28,34	70,88
209	I118=As42+H	203,06	-	188,20	54,11	39,25	386,64	-	449,53	31,66	94,55	-27,24
210	As40=I119+I79	140,65	-	172,51	22,77	54,63	438,82	-	359,97	128,75	49,90	19,55
211	I119+H=As43	172,51	54,11	133,03	-	-93,59	359,97	31,66	316,97	0-	-74,65	-41,10
212	As43=I120	133,03	-	187,62	-	54,59	316,97	-	413,65	-	96,68	-13,39
213	I120+H=I121	187,62	54,11	148,86	-	-92,87	413,65	31,66	416,52	-	-28,79	-72,63
214	I121=I122+CO	148,86	-	188,34	-23,44	16,04	416,52	-	390,37	53,37	27,22	-3,10
215	I122+H=As44	188,34	54,11	148,54	-	-93,91	390,37	31,66	347,30	-	-74,72	-41,37
216	As44=I123+H	148,54	-	185,56	54,11	91,13	347,30	-	375,26	31,66	59,61	49,21
217	I123=As45+H	185,56	-	171,38	54,11	39,94	375,26	-	336,22	31,66	-7,39	45,13
218	As46=I124+I125	480,35	-	212,06	334,88	66,59	1380,61	-	420,36	1050	89,25	3,84
219	I124+H=As47	212,06	54,11	172,90	-	-93,28	420,36	31,66	377,43	-	-74,58	-40,84
220	I125+H=As48	334,88	54,11	299,01	-	-89,98	1049,50	31,66	1038,51	-	-42,65	-59,99
221	As48=I126+I127	299,01	-	145,63	222,34	68,95	1038,51	-	590,37	501,21	53,07	31,64

Tabla N°21: (Continuación).

Código	REACCIONES	$\Delta H_f(R1)$	$\Delta H_f(R2)$	$\Delta H_f(P1)$	$\Delta H_f(P2)$	ΔH_r	$S_f(R1)$	$S_f(R2)$	$S_f(P1)$	$S_f(P2)$	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol					Cal/K Mol					
222	I126+H=As49	145,63	54,11	107,01	-	-92,73	590,37	31,66	547,57	-	-74,46	-40,38
223	I127+H=As50	222,34	54,11	183,49	-	-92,97	501,21	31,66	458,35	-	-74,52	-40,57
224	As47=I93+I128	172,90	-	25,48	220,22	72,80	377,43	-	143,93	330,49	96,99	4,61
225	I128+H=As51	220,22	54,11	180,59	-	-93,73	330,49	31,66	287,46	-	-74,68	-41,22
226	As51=I129+H	180,60	-	217,44	54,11	90,96	287,46	-	315,38	31,66	59,58	49,07
227	I129=As52+H	217,44	-	201,05	54,11	37,73	315,38	-	345,19	31,66	61,47	-5,49
228	As49=I130+I60	107,01	-	137,55	23,62	54,15	547,57	-	484,58	112,78	49,79	19,14
229	I130+H=As53	137,55	54,11	98,61	-	-93,06	484,58	31,66	441,70	-	-74,53	-40,65
230	As53=As54+CO2	98,61	-	185,01	-23,44	62,96	441,70	-	401,71	53,37	13,38	53,56
231	As54=I131+H	185,01	-	221,45	54,11	90,55	401,71	-	433,03	31,66	62,98	46,27
232	I131=As55+H	221,45	-	208,62	54,11	41,29	433,03	-	390,69	31,66	-10,68	48,80
233	As55=I132+H	208,62	-	241,18	54,11	86,67	390,69	-	437,65	31,66	78,62	31,39
234	I132=As56+H	241,18	-	209,28	54,11	22,21	437,65	-	364,75	31,66	-41,25	51,22
235	As50=I93+I133	183,49	-	25,48	229,13	71,13	458,35	-	143,93	409,50	95,07	4,28
236	I133+H=As57	229,13	54,11	189,82	-	-93,42	409,50	31,66	366,54	-	-74,61	-40,96
237	As57=I134+H	189,82	-	226,35	54,11	90,64	366,54	-	394,39	31,66	59,51	48,80
238	I134=As58+H	226,35	-	213,44	54,11	41,21	394,39	-	355,52	31,66	-7,21	46,28
239	As58=I135+H	213,44	-	247,28	54,11	87,96	355,52	-	369,66	31,66	45,79	55,76
240	I135=As59+H	247,28	-	209,28	54,11	16,11	369,66	-	364,75	31,66	26,74	-2,70
241	As46=I137+I138	480,35	-	210,39	337,36	67,48	1380,61	-	452,30	1022	93,67	1,54
242	I137+H=As60	210,39	54,11	170,89	-	-93,62	452,30	31,66	411,61	-	-72,34	-42,75

Tabla N°21: (Continuación).

Código	REACCIONES	$\Delta H_f(R1)$	$\Delta H_f(R2)$	$\Delta H_f(P1)$	$\Delta H_f(P2)$	ΔH_r	$S_f(R1)$	$S_f(R2)$	$S_f(P1)$	$S_f(P2)$	ΔS_r	ΔG_r
		Kcal/Mol					Cal/K Mol					
243	I138+H=As61	337,37	54,11	301,39	-	-90,10	1021,99	31,66	1010,97	-	-42,67	-60,09
244	As61=I139+I104	301,39	-	146,41	221,84	66,87	1010,97	-	593,56	467,32	49,91	31,77
245	I139+H=As62	146,41	54,11	107,79	-	-92,73	593,56	31,66	547,63	-	-77,58	-38,18
246	As60=I93+I140	170,89	-	25,48	217,17	71,76	411,61	-	143,93	360,59	92,90	6,44
247	I140+H=As63	217,17	54,11	177,68	-	-93,61	360,59	31,66	317,59	-	-74,66	-41,12
248	As63=I141+H	177,68	-	214,40	54,11	90,84	317,59	-	345,48	31,66	59,55	48,96
249	I141=As64+H	214,40	-	201,05	54,11	40,77	345,48	-	345,19	31,66	31,37	18,71
250	As62=I60+I142	107,79	-	23,62	137,53	53,35	547,63	-	112,78	480,22	45,37	21,45
251	I142+H=As65	137,53	54,11	98,59	-	-93,06	480,22	31,66	437,34	-	-74,53	-40,65
252	As65=As66+CO2	98,59	-	184,23	-89,55	-3,91	437,34	-	401,64	60,13	24,43	-21,08
253	As66=I143+H	184,23	-	220,67	54,11	90,55	401,64	-	429,48	31,66	59,49	48,72
254	I143=As67+H	220,67	-	207,84	54,11	41,29	429,48	-	390,62	31,66	-7,20	46,35
255	As67=I144+H	207,84	-	241,62	54,11	87,89	390,62	-	404,75	31,66	45,78	55,70
256	I144=As68+H	241,62	-	203,69	54,11	16,19	404,75	-	399,85	31,66	26,76	-2,63

APENDICE C

Propiedades termodinámicas de las moléculas neutras.

Tabla N°22: Propiedades Termodinámicas de las moléculas Saturadas.

Componente	ΔH_f° (Kcal/mol)	S_f° Cal/K Mol	C_p°				$\Delta H_f(T)$ (Kcal/mol)	$S_f(T)$ Cal/K Mol	$G_f(T)$ Kcal/Mol
			a	b	c	d			
Ss1	-180,50	314,22	123,12	0,55	-1,64E-04	-7877051	-16,94	572,60	-419,57
Ss2	-95,69	244,25	86,23	0,28	-7,84E-05	-3359596	-2,53	399,38	-283,35
Ss3	-65,22	108,24	33,23	0,27	-8,59E-05	-4378233	4,18	209,40	-143,06
Ss4	-173,90	309,07	117,73	0,54	-1,61E-04	-7517366	-14,35	560,77	-408,65
Ss5	-190,38	332,47	130,78	0,57	-1,71E-04	-8161367	-18,61	604,57	-443,72
Ss6	-105,57	262,51	93,85	0,30	-8,53E-05	-3640398	-4,20	431,32	-307,48
Ss7	-183,78	327,33	125,40	0,56	-1,68E-04	-7801994	-16,03	592,71	-432,80
Ss8	-50,14	126,21	39,36	0,26	-8,24E-05	-4002854	19,90	230,72	-142,33
Ss9	-27,76	161,17	51,92	0,23	-7,17E-05	-3847390	40,88	268,07	-147,61
Ss10	-5,30	208,88	67,56	0,18	-5,42E-05	-3509494	58,25	313,90	-162,47
Ss11	-7,52	151,05	45,25	0,12	-3,32E-05	-2082540	34,22	221,25	-121,35
Ss12	-8,40	96,29	18,84	0,08	-2,38E-05	-1265793	14,76	132,63	-78,50
Ss13	-37,62	140,10	35,08	0,26	-8,17E-05	-3921293	30,11	240,10	-138,71
Ss14	-3,82	181,78	43,29	0,23	-7,05E-05	-3679494	60,20	279,63	-136,43
Ss15	-66,05	189,48	63,16	0,21	-5,79E-05	-2501489	2,53	303,55	-210,91
Ss16	-41,35	143,84	43,98	0,14	-4,08E-05	-1789740	6,74	223,69	-150,55
Ss17	-36,41	134,71	40,15	0,13	-3,74E-05	-1648274	7,58	207,72	-138,48
Ss18	-26,53	116,45	32,46	0,11	-3,06E-05	-1362012	9,26	175,78	-114,34

Tabla N°23: Propiedades Termodinámicas de las moléculas Aromáticas.

Componente	ΔH_f° (Kcal/mol)	S_f° Cal/K Mol	C_p°				$\Delta H_f(T)$ (Kcal/mol)	$S_f(T)$ Cal/K Mol	$G_f(T)$ Kcal/Mol
			a	b	c	d			
Ar1	-102,17	270,85	84,62	0,40	-1,10E-04	-4229756	17,70	465,31	-309,49
Ar2	-16,53	119,65	24,54	0,19	-4,76E-05	-2120796	32,65	197,67	-106,34
Ar3	11,31	116,69	21,00	0,18	-4,62E-05	-2134646	56,26	186,65	-74,98
Ar4	12,19	133	30,66	0,15	-3,40E-05	-1719615	55,20	204,97	-88,92
Ar5	46,17	106,33	27,13	0,14	-3,26E-05	-1734063	84,96	170,24	-34,75
Ar6	42,89	118,82	33,04	0,13	-3,56E-05	-1715639	82,52	183,48	-46,49
Ar7	-77,47	225,21	67,25	0,34	-9,19E-05	-3661047	21,61	385,39	-249,38
Ar8	-53,20	260,66	85,34	0,35	-9,76E-05	-4533012	54,18	435,26	-251,87
Ar9	2,80	164,23	46,17	0,21	-5,70E-05	-3110950	64,43	263,53	-120,87
Ar10	30,64	161,27	42,65	0,20	-5,56E-05	-3125482	88,05	252,51	-89,51
Ar11	26,46	167,52	46,43	0,19	-5,01E-05	-2534080	83,89	261,73	-100,15
Ar12	-58,14	269,79	88,91	0,36	-1,01E-04	-4652772	53,38	451,25	-263,91
Ar13	-19,66	245,69	78,73	0,30	-8,33E-05	-3733730	75,19	401,50	-207,13
Ar14	-24,22	150,33	30,99	0,22	-5,47E-05	-2712022	34,44	244,19	-137,26
Ar15	-11,88	199,73	39,83	0,19	-4,30E-05	-2520536	42,96	291,42	-161,95
Ar16	4,50	163,68	37,10	0,19	-4,11E-05	-2310604	56,99	251,49	-119,84
Ar17	32,34	160,72	33,57	0,17	-3,97E-05	-2324706	80,61	240,47	-88,48
Ar18	36,34	149,27	39,50	0,16	-4,27E-05	-2307607	85,45	229,77	-76,11

Tabla N°24: Propiedades Termodinámicas de las moléculas Resinas.

Componente	ΔH_f° (Kcal/mol)	S_f° Cal/K Mol	C_p°				$\Delta H_f(T)$ (Kcal/mol)	$S_f(T)$ Cal/K Mol	$G_f(T)$ Kcal/Mol
			a	b	c	d			
Rr1	20,04	405,31	140,57	0,72	-2,08E-05	-8150692	209,91	776,67	-336,21
Rr2	-5,72	218,19	76,15	0,33	-9,20E-05	-4046797	93,69	379,12	-172,89
Rr3	11,58	262,10	80,23	0,36	-1,01E-05	-4190827	110,16	455,58	-210,18
Rr4	47,18	204,93	54,91	0,27	-7,52E-05	-3220802	126,38	332,09	-107,12
Rr5	75,02	201,97	51,34	0,26	-7,39E-05	-3232468	150,01	321,07	-75,75
Rr6	70,14	204,60	55,13	0,25	-6,83E-05	-2641543	145,15	326,67	-84,55
Rr7	38,78	261,89	76,65	0,35	-9,97E-05	-4202329	142,88	428,87	-158,68
Rr8	34,60	268,14	80,46	0,34	-9,42E-05	-3611963	138,72	438,09	-169,33
Rr9	60,96	226,48	62,09	0,27	-7,57E-05	-2869660	144,28	362,26	-110,45
Rr10	15,38	255,40	76,87	0,33	-9,17E-05	-3897134	115,60	418,22	-178,47
Rr11	-15,02	238,23	83,08	0,35	-9,94E-05	-4273190	92,71	412,87	-197,60
Rr12	37,88	224,97	61,85	0,30	-8,26E-05	-3447529	125,40	365,83	-131,83
Rr13	65,72	222,01	58,31	0,28	-8,12E-05	-3461258	149,02	354,82	-100,47
Rr14	61,54	228,26	62,09	0,27	-7,57E-05	-2869660	144,86	364,04	-111,12
Rr15	49,24	245,41	69,72	0,32	-9,24E-05	-3975888	145,02	398,67	-135,31
Rr16	45,06	251,66	73,51	0,31	-8,68E-05	-3384564	140,86	407,90	-145,95

Tabla N°24: (Continuación).

Componente	ΔH_f°	S_f°	C_p°				$\Delta H_f(T)$	$S_f(T)$	$G_f(T)$
	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	a	b	c	d	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	Kcal/Mol
Rr17	71,42	210	55,13	0,25	-6,83E-05	-2641543	146,43	332,07	-87,07
Rr18	29,31	389,15	158,28	0,64	-1,73E-04	-7978230	226,35	712,62	-274,72
Rr19	-35,99	132,47	78,09	0,33	-8,79E-05	-410520	70,50	312,10	-148,95
Rr20	54,68	295,14	77,13	0,32	-8,71E-05	-3743846	153,66	457,54	-168,06
Rr21	16,91	119,20	56,83	0,27	-7,11E-05	-3277366	96,05	248	-78,33
Rr22	44,75	116,24	53,33	0,26	-6,97E-05	-3293574	119,67	236,99	-46,97
Rr23	40,57	122,49	57,12	0,25	-6,42E-05	-2702313	115,51	246,21	-57,62
Rr24	64,93	220,61	58,13	0,27	-7,17E-05	-3120439	145,25	351,67	-102,03
Rr25	92,97	217,69	54,62	0,26	-7,04E-05	-3135676	169,07	340,69	-70,49
Rr26	27,80	385,88	158,40	0,65	-1,80E-04	-8320130	227,19	710,81	-272,62
Rr27	58,01	291,72	79,91	0,34	-9,60E-05	-4179611	161,44	459,11	-161,38
Rr28	68,26	217,19	60,89	0,29	-8,07E-05	-3554972	153,04	353,24	-95,35
Rr29	92,73	281,30	57,13	0,28	-7,88E-05	-3354466	174,86	412,82	-115,42
Rr30	50,71	403,29	164,29	0,66	-1,78E-04	-8314480	253,32	735,66	-263,95
Rr31	-17,92	150,03	81,32	0,33	-8,45E-05	-4005414	82,55	316,50	-140
Rr32	34,98	136,76	60,10	0,27	-6,76E-05	-3180046	115,24	269,47	-74,24
Rr33	62,82	133,80	56,54	0,26	-6,63E-05	-3192641	138,86	258,45	-42,87

Tabla N°25: Propiedades Termodinámicas de las moléculas Asfaltenos.

Componente	ΔH_f° (Kcal/mol)	S_f° Cal/K Mol	C_p°				$\Delta H_r(T)$ (Kcal/mol)	$S_r(T)$ Cal/K Mol	$G_r(T)$ Kcal/Mol
			a	b	c	d			
As1	97,88	752,41	286,16	1,13	-3,15E-04	-14061242	449,04	1326,13	-483,43
As2	21,63	238,07	89,97	0,37	-1,01E-04	-4702256	134,49	422,13	-162,34
As3	62,89	507,87	194,87	0,77	-2,07E-04	-9204238	301,68	901,13	-331,95
As4	66,24	248,15	86,37	0,37	-1,01E-04	-4082094	179,03	432,66	-125,20
As5	-14,91	221,47	105,56	0,41	-1,09E-04	-4999802	112,36	431,72	-191,20
As6	80,81	213,16	65,31	0,30	-8,08E-05	-3765079	169,29	356,60	-81,45
As7	101,49	279,71	62,38	0,29	-8,23E-05	-3538312	187,85	418,30	-106,28
As8	75,42	179,75	68,20	0,32	-8,87E-05	-3432277	170,07	332,61	-63,80
As9	102,17	178,56	65,51	0,30	-9,08E-05	-3420882	193,12	323,05	-34,03
As10	-2,02	133,29	82,98	0,34	-9,00E-05	-4255838	102,45	305,34	-112,25
As11	14,94	165,38	82,39	0,34	-8,68E-05	-3665379	118,54	337,45	-118,74
As12	42,20	160,64	78,82	0,32	-8,54E-05	-3677311	141,58	324,66	-86,70
As13	84,16	731,08	295,13	1,14	-3,23E-04	-14267915	442,44	1315,89	-482,83
As14	31	238,34	96,15	0,38	-1,08E-04	-4866225	148,59	429,17	-153,18
As15	44,39	476,13	195,23	0,78	-2,14E-04	-9306646	285,82	871,92	-327,27
As16	-16,43	219,96	105,56	0,41	-1,09E-04	-4999802	110,84	430,21	-191,66
As17	48,68	216,14	86,55	0,38	-1,07E-04	-4174044	164,13	403,18	-119,36
As18	47,18	262,38	95,48	0,37	-1,05E-04	-4271057	163,91	453,23	-154,78
As19	74,88	264,12	91,94	0,36	-1,04E-04	-4284886	187,39	446,91	-126,86
As20	107,88	213,63	70,14	0,28	-8,15E-05	-3431164	195,43	355,40	-54,47
As21	-5,22	149,53	86,45	0,36	-9,37E-05	-4369530	103,41	328,44	-127,53
As22	11,16	179,84	85,86	0,35	-9,05E-05	-3779352	118,92	358,77	-133,35
As23	38,98	172,52	82,35	0,34	-8,91E-05	-3794512	142,51	343,39	-98,95
As24	76,40	216,50	83,01	0,37	-1,06E-04	-4187412	187,63	395,48	-90,45

Tabla N°25: (Continuación) .

Componente	ΔH_f° (Kcal/mol)	S_f° Cal/K Mol	C_p°				$\Delta H_r(T)$ (Kcal/mol)	$S_r(T)$ Cal/K Mol	$G_r(T)$ Kcal/Mol
			a	b	c	d			
As25	108,26	163,13	61,17	0,29	-8,37E-05	-3331449	194,54	301,08	-17,17
As26	101,32	760,30	302,69	1,20	-3,48E-04	-14761924	476,51	1368,54	-485,78
As27	19,18	237,99	90,84	0,37	-1,05E-04	-4678673	132,55	421,74	-164
As28	69,58	508,15	208,68	0,85	-2,46E-04	-9947907	332,70	934,12	-324,13
As29	1,89	258,80	107,75	0,44	-1,25E-04	-4921827	137,97	480,32	-199,76
As30	55,39	218,57	98,03	0,42	-1,23E-04	-4906438	183,68	424,54	-114,83
As31	78,38	217,44	66,15	0,30	-8,42E-05	-3739710	167,38	360,57	-86,15
As32	102,63	278,91	62,38	0,29	-8,23E-05	-3538312	188,99	417,50	-104,58
As33	17,32	165,72	85,15	0,37	-1,06E-04	-4177042	130,61	349,04	-114,82
As34	34,56	195,93	84,51	0,37	-1,02E-04	-3583685	146,98	379,27	-119,70
As35	62,40	192,97	80,98	0,35	-1,01E-04	-3597792	170,60	368,26	-88,34
As36	91,70	207,97	92,90	0,39	-1,22E-04	-4887331	212,13	398,76	-68,26
As37	123,00	157,18	71,03	0,31	-9,94E-05	-4029424	218,47	306,95	2,64
As38	11,16	260,04	97,86	0,39	-1,12E-04	-4910584	132,84	457,51	-188,86
As39	79,46	489,89	201,90	0,82	-2,38E-04	-9730060	334,24	902,16	-300,12
As40	12,87	231,02	100,72	0,41	-1,17E-04	-4689398	140,65	438,82	-167,91
As41	69,06	233,12	73,13	0,32	-9,16E-05	-3969066	166,37	389,96	-107,82
As42	93,53	297,23	69,35	0,32	-8,97E-05	-3767624	188,20	449,53	-127,89
As43	28,06	147,36	78,21	0,35	-9,83E-05	-3949876	133,03	316,97	-89,85
As44	44,44	177,68	77,58	0,34	-9,51E-05	-3357427	148,54	347,30	-95,66
As45	71,50	174,65	74,06	0,33	-9,37E-05	-3371768	171,38	336,22	-65,03
As46	84,16	739,59	320,80	1,26	-3,71E-04	-15511795	480,35	1380,61	-490,43
As47	54,27	187,00	90,39	0,39	-1,14E-04	-4531026	172,90	377,43	-92,49
As48	20,19	586,42	227,52	0,89	-2,59E-04	-10861601	299,01	1038,51	-431,22

Tabla N°25: (Continuación).

Componente	ΔH_f° (Kcal/mol)	S_f° Cal/K Mol	C_p°				$\Delta H_f(T)$ (Kcal/mol)	$S_f(T)$ Cal/K Mol	$G_f(T)$ Kcal/Mol
			a	b	c	d			
As49	-36,50	313,65	119,40	0,45	-1,31E-04	-5593484	107,01	547,57	-278,01
As50	46,87	238,68	104,95	0,44	-1,31E-04	-5131964	183,49	458,35	-138,80
As51	86,93	138,06	68,58	0,31	-9,19E-05	-3676877	180,60	287,46	-21,53
As52	110,04	200,33	64,87	0,30	-9,00E-05	-3478898	201,05	345,19	-41,67
As53	-26,25	239,12	100,38	0,40	-1,15E-04	-4968406	98,61	441,70	-211,97
As54	65,56	209,09	88,25	0,40	-1,13E-04	-4426866	185,01	401,71	-97,45
As55	93,40	206,13	84,75	0,38	-1,11E-04	-4443126	208,62	390,69	-66,09
As56	101,83	191,18	83,44	0,34	-1,02E-04	-3703086	209,28	364,75	-47,20
As57	78,17	187,89	83,17	0,37	-1,09E-04	-4279379	189,82	366,54	-67,91
As58	106,01	184,93	79,60	0,35	-1,07E-04	-4291648	213,44	355,52	-36,54
As59	101,83	191,18	83,44	0,34	-1,02E-04	-3703086	209,28	364,75	-47,20
As60	43,95	207,47	97,35	0,41	-1,22E-04	-4759482	170,89	411,61	-118,54
As61	30,87	572,59	220,52	0,86	-2,52E-04	-10630435	301,39	1010,97	-409,48
As62	-35,72	313,72	119,40	0,45	-1,31E-04	-5593484	107,79	547,63	-277,28
As63	75,69	154,47	75,51	0,34	-9,93E-05	-3902987	177,68	317,59	-45,63
As64	110,04	200,33	64,87	0,30	-9,00E-05	-3478898	201,05	345,19	-41,67
As65	-26,27	234,76	100,38	0,40	-1,15E-04	-4968406	98,59	437,34	-208,93
As66	64,78	209,02	88,25	0,40	-1,13E-04	-4426866	184,23	401,64	-98,18
As67	92,62	206,07	84,75	0,38	-1,11E-04	-4443126	207,84	390,62	-66,82
As68	88,44	212,32	88,52	0,37	-1,06E-04	-3850313	203,69	399,85	-77,47

APENDICE D

Propiedades termodinámicas de los radicales.

Tabla N° 26: Propiedades Termodinámicas de los radicales libres presentes en los Saturados.

Componente	ΔH_f° (Kcal/mol)	S_f° Cal/K Mol	C_p°				$\Delta H_f(T)$ (Kcal/mol)	$S_f(T)$ Cal/K Mol	$G_f(T)$ Kcal/Mol
			a	b	c	d			
I1	-19,15	127,56	31,65	0,25	-8,11E-05	-4318028	45,72	221,64	-110,13
I2	-79,83	263,75	84,77	0,27	-7,63E-05	-3272396	11,18	415,44	-280,94
I3	-131,51	312,06	114,97	0,53	-1,58E-04	-7374676	24,42	557,91	-367,88
I4	-89,71	282,01	92,47	0,29	-8,31E-05	-3558768	9,49	447,39	-305,09
I5	-141,39	330,31	122,59	0,55	-1,65E-04	-7656090	22,74	589,85	-392,01
I6	9,96	182	36	0,24	-7,58E-05	-3975732	73,14	275,39	-120,50
I7	-36,11	131,47	37,64	0,25	-8,05E-05	-4039669	31,59	231,94	-131,50
I8	32,34	216,96	48,57	0,21	-6,51E-05	-3821380	94,11	312,74	-125,79
I9	-13,73	166,44	50,20	0,23	-6,98E-05	-38,85	60,07	287,23	-141,89
I10	50,88	230,38	55,73	0,19	-5,77E-05	-3070712	113,20	331,25	-119,72
I11	8,49	196,19	58,47	0,21	-6,11E-05	-3211817	74,44	302,91	-138,55
I12	37,67	115,61	17,22	0,06	-1,90E-05	-1203048	56,31	144,87	-45,56
I13	38,55	170,36	43,65	0,10	-2,84E-05	-2020724	75,77	233,49	-88,41
I14	-25,93	93,84	26,42	0,27	-8,41E-05	-3940484	40,26	189,33	-92,87
I15	-19,59	133,45	28,19	0,25	-8,00E-05	-3477994	44,95	227,79	-115,22
I16	-3,59	215,35	50,32	0,19	-5,81E-05	-3673457	55,01	307,88	-161,48

Tabla N°27: Propiedades Termodinámicas de los radicales libres presentes en los Aromáticos.

Componente	ΔH_f°	S_f°	C_p°				$\Delta H_f(T)$	$S_f(T)$	$G_f(T)$
	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	a	b	c	d	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	Kcal/Mol
I17	1,43	134,96	33,41	0,20	-4,67E-05	-2957244	55,71	223,35	-101,34
I18	16,62	198,56	41,51	0,17	-3,37E-05	-3016563	65,07	281,07	-132,56
I19	34,14	162,28	38,12	0,16	-3,23E-05	-2753920	80,35	240,92	-89,05
I20	50,56	167,17	35,44	0,15	-3,05E-05	-2796268	93,95	240,77	-75,35
I21	16,72	135,12	29,29	0,16	-3,79E-05	-2598543	60,07	205,42	-84,37
I22	-50,19	208,98	61,73	0,20	-5,58E-05	-2416851	16,23	319,61	-208,51
I23	13,11	118,26	24,94	0,17	-3,93E-05	-2516002	56,11	187,12	-75,46
I24	38,10	101,09	21,61	0,16	-3,95E-05	-2235732	78,98	165,65	-37,50
I25	54,09	165,36	29,62	0,12	-2,66E-05	-2294826	89,10	223,94	-68,36
I26	69,67	128,65	26,29	0,12	-2,52E-05	-2031224	102,48	183,45	-26,51
I27	-25,49	163,34	42,54	0,14	-3,87E-05	-1704710	20,43	239,76	-148,15
I28	48,87	183,55	54,56	0,18	-4,50E-05	-3838121	104,34	275,41	-89,31
I29	-20,55	154,21	38,71	0,13	-3,53E-05	-1562634	21,27	223,79	-136,08
I30	32,44	162,83	49,76	0,18	-4,63E-05	-3757445	87,37	252,87	-90,43
I31	56,73	146,13	46	0,18	-4,66E-05	-3477744	109,36	231,47	-53,40
I32	77,97	178,03	49,59	0,16	-4,13E-05	-3198187	129,29	263,37	-55,90
I33	-10,67	135,95	31,03	0,10	-2,84E-05	-1276953	22,96	191,84	-111,93

Tabla N°28: Propiedades Termodinámicas de los radicales libres presentes en las Resinas.

Componente	ΔH_f°	S_f°	C_p°				$\Delta H_f(T)$	$S_f(T)$	$G_f(T)$
	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	a	b	c	d	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	Kcal/Mol
I34	27,53	233,66	87,03	0,29	-7,79E-05	-5009394	120,12	386,65	-151,76
I35	57,01	284,16	92,02	0,32	-8,66E-05	-5186892	158,61	451,64	-158,96
I36	80,43	220,40	63,14	0,24	-6,30E-05	-3973262	153,24	339,71	-85,63
I37	-30,07	67,99	15,74	0,05	-1,29E-05	-812459,90	-14,69	93,51	-80,44
I38	76,82	203,53	58,80	0,24	-6,43E-05	-3891812	149,27	321,41	-76,73
I39	101,81	186,37	55,49	0,24	-6,46E-05	-3612656	172,14	299,94	-38,76
I40	16,95	68,83	5,30	0,03	-9,57E-05	-124047	36,19	67,55	-11,31
I41	-15,65	80,73	9,02	0,02	-4,78E-05	-62289,43	-3,43	85,61	-63,63
I42	42	260,77	87,25	0,33	-8,79E-05	-5109236	143,06	426,42	-156,78
I43	66,99	243,60	83,91	0,32	-8,82E-05	-4828046	165,93	404,94	-118,81
I44	95,63	239,26	69,25	0,24	-6,42E-05	-3536669	172,73	367,25	-85,50
I45	9,09	99,44	15,68	0,05	-1,47E-05	-707487,10	26,33	127,96	-63,65
I46	55,49	259,37	83,89	0,30	-7,98E-05	-4903766	148,71	412,77	-141,53
I47	30,47	255,77	95,17	0,31	-8,47E-05	-5293258	131,44	422,84	-165,88
I48	70,55	238,66	70,80	0,26	-6,98E-05	-4257014	151,56	371,66	-109,77
I49	66,94	221,79	66,49	0,27	-7,12E-05	-4177798	147,59	353,36	-100,87
I50	91,93	204,62	63,18	0,26	-7,14E-05	-3898826	170,45	331,88	-62,91

Tabla N°28: (Continuación).

Componente	ΔH_f°	S_f°	C_p°				$\Delta H_f(T)$	$S_f(T)$	$G_f(T)$
	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	a	b	c	d	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	Kcal/Mol
I51	50,46	245,19	79,55	0,30	-8,11E-05	-4822088	143,32	397,16	-135,94
I52	75,45	228,02	76,25	0,30	-8,14E-05	-4543761	166,19	375,68	-97,97
I53	104,09	223,69	61,56	0,22	-5,74E-05	-3250990	173	337,99	-64,66
I54	79,35	266,44	82,18	0,29	-6,97E-05	-4666934	169,11	417,22	-124,26
I55	95	181,21	89,63	0,29	-7,36E-05	-5081761	187,68	336,24	-48,75
I56	49,58	164,10	65,25	0,24	-5,87E-05	-4045044	122,30	285,06	-78,14
I57	45,97	147,24	60,92	0,24	-6,01E-05	-3963938	118,33	266,75	-69,23
I58	70,26	130,53	57,20	0,23	-6,03E-05	-3686976	140,31	245,36	-32,21
I59	99,08	239,74	66,07	0,24	-5,97E-05	-3849488	173,06	362,97	-82,16
I60	5,67	82,76	17,43	0,05	-1,47E-05	-707879,40	23,62	112,78	-55,69
I61	95,41	227,40	61,70	0,24	-6,11E-05	-3766075	169,04	349,20	-76,50
I62	14,03	90,31	11,84	0,04	-1,13E-05	-564673,40	27,17	111,99	-51,58
I63	91,20	311,71	91,17	0,30	-8,16E-05	-5172026	187,74	471,16	-143,55
I64	101,75	236,55	70,15	0,25	-6,77E-05	-4389644	179,97	364,72	-76,49
I65	98,14	222,80	65,86	0,26	-6,90E-05	-4311224	175,99	349,54	-69,79
I66	28,15	200,55	92,55	0,29	-7,04E-05	-4957088	122	359,49	-130,78
I67	68,23	183,44	68,17	0,24	-5,55E-05	-3920745	142,12	308,31	-74,67
I68	64,62	163,09	63,90	0,24	-5,68E-05	-3843656	138,14	286,52	-63,32

Tabla N°29: Propiedades Termodinámicas de los radicales libres presentes en los Asfaltenos.

Componente	ΔH_f°	S_f°	C_p°				$\Delta H_f(T)$	$S_f(T)$	$G_f(T)$
	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	a	b	c	d	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	Kcal/Mol
I69	53,57	252,65	103,76	0,32	-8,91E-05	-5801428	159,78	428,40	-141,45
I70	108,96	490,97	228,84	0,69	-1,80E-04	-11437501	339,63	879,48	-278,78
I71	31,16	268,51	119,92	0,36	-9,26E-05	-6199301	151,30	471,11	-179,96
I72	112,31	298,67	97,80	0,33	-8,65E-05	-5050082	218,45	475,64	-116
I73	126,88	232,48	75,73	0,26	-6,74E-05	-4653466	208,87	368,40	-50,17
I74	-22,39	80,17	22,64	0,06	-1,63E-05	-954078,10	-1,69	115,12	-82,64
I75	119,41	218,58	75,38	0,27	-7,21E-05	-4543725	202,83	355,43	-47,09
I76	118,67	231,08	77,53	0,28	-7,61E-05	-4234980	207,01	376,47	-57,70
I77	117,81	213,94	76,38	0,29	-7,74E-05	-4154625	207,05	360,56	-46,48
I78	43,61	186,03	95,06	0,30	-7,53E-05	-5274462	141,32	350,52	-105,14
I79	0,73	91,88	21,26	0,06	-1,82E-05	-850136,20	22,77	128,75	-67,76
I80	56,22	233,14	100	0,30	-7,35E-05	-4529944	156,44	404,20	-127,78
I81	14,27	227,94	102,79	0,31	-7,69E-05	-4674456	118,11	404,85	-166,56
I82	61,01	215,90	92,51	0,30	-7,35E-05	-4530217	158,17	380,48	-109,37
I83	56,75	197,79	91,35	0,30	-7,49E-05	-4448692	154,81	363,60	-100,85
I84	77,07	257,66	110,13	0,33	-9,22E-05	-6035213	187,59	440,86	-122,39
I85	90,46	495,45	223,39	0,71	-1,87E-04	-11596424	322,51	883,09	-298,44
I86	30,58	270,22	119,92	0,36	-9,26E-05	-6199301	150,72	472,82	-181,74
I87	94,75	266,66	98,32	0,34	-9,28E-05	-5168018	203,50	446,15	-110,21
I88	95,82	367,38	105,60	0,34	-9,38E-05	-5406964	207,38	552,27	-180,95
I89	53,43	333,19	108,41	0,35	-9,71E-05	-5552626	168,61	523,93	-199,79

Tabla N°29: (Continuación).

Componente	ΔH_f°	S_f°	C_p°				$\Delta H_f(T)$	$S_f(T)$	$G_f(T)$
	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	a	b	c	d	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	Kcal/Mol
I90	91,45	282,07	107,63	0,33	-9,04E-05	-5294476	201,41	465,35	-125,80
I91	87,77	265,73	106,51	0,34	-9,17E-05	-5216132	198,62	450,25	-117,97
I92	153,95	232,95	79,51	0,25	-6,88E-05	-4236042	235,18	367,25	-23,05
I93	4,15	108,56	19,52	0,06	-1,82E-05	-850264,80	25,48	143,93	-75,72
I94	40,85	200,05	98,92	0,31	-7,87E-05	-5418434	142,66	371,38	-118,48
I95	53,46	247,17	103,89	0,31	-7,69E-05	-4675785	157,77	425,07	-141,12
I96	11,07	244,18	106,60	0,32	-8,04E-05	-4815188	119,01	427,94	-181,89
I97	57,23	230,36	96,37	0,31	-7,69E-05	-4674034	158,48	401,79	-124,03
I98	53,55	214,03	95,22	0,32	-7,83E-05	-4593144	155,70	386,68	-116,19
I99	91,07	214,11	103,25	0,34	-9,27E-05	-5053845	201,93	398,20	-78,06
I100	154,71	215,97	70,22	0,26	-7,12E-05	-4111274	234,72	346,46	-8,89
I101	64,81	259,52	104,27	0,32	-8,91E-05	-5803622	171,20	435,66	-135,13
I102	115,65	527,47	239,03	0,78	-2,18E-04	-12408082	369,03	945,22	-295,61
I103	47,96	309,33	121,75	0,39	-1,09E-04	-6094730	176,97	523,20	-190,92
I104	100,64	269	112,16	0,37	-1,07E-04	-6086702	221,84	467,32	-106,76
I105	124,45	236,76	76,52	0,26	-7,08E-05	-4623930	206,97	372,38	-54,87
I106	120,55	217,78	75,38	0,27	-7,21E-05	-4543725	203,97	354,63	-45,39
I107	63,39	216,25	96,95	0,33	-9,12E-05	-5173226	169,97	392,01	-105,67
I108	78,10	297,71	92,44	0,34	-9,27E-05	-4546393	185,71	475,17	-148,41
I109	35,71	294,73	95,22	0,35	-9,61E-05	-4689962	146,94	478,03	-189,19
I110	80,63	246,46	94,50	0,33	-8,93E-05	-4435504	186,64	422,31	-110,31
I111	76,95	230,12	93,28	0,33	-9,07E-05	-4350481	183,87	407,20	-102,46
I112	97,40	250,45	111,01	0,38	-1,09E-04	-6006188	219,50	450	-96,92
I113	169,07	207,71	82,35	0,28	-8,53E-05	-4987996	257,91	349,93	11,85
I114	54,51	275,66	111,96	0,35	-9,59E-05	-6088946	169,10	465,49	-158,21
I115	125,53	509,21	231,46	0,75	-2,11E-04	-12130034	370,69	913,28	-271,48

Tabla N°29: (Continuación).

Componente	ΔH_f°	S_f°	C_p°				$\Delta H_f(T)$	$S_f(T)$	$G_f(T)$
	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	a	b	c	d	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	Kcal/Mol
I116	58,94	281,55	114,20	0,37	-1,02E-04	-5817962	179,74	481,73	-158,99
I117	115,13	252,43	84,19	0,28	-7,76E-05	-4908114	205,85	401,74	-76,63
I118	111,45	236,10	83,07	0,29	-7,90E-05	-4829856	203,06	386,64	-68,80
I119	74,13	197,89	89,27	0,31	-8,43E-05	-4888366	172,51	359,97	-80,60
I120	86,74	245,01	94,24	0,31	-8,25E-05	-4146335	187,62	413,65	-103,24
I121	44,35	242,02	96,98	0,32	-8,59E-05	-4286935	148,86	416,52	-144,01
I122	90,51	228,20	86,71	0,31	-8,25E-05	-4143000	188,34	390,37	-86,15
I123	86,83	211,87	85,55	0,31	-8,39E-05	-4062202	185,56	375,26	-78,31
I124	100,34	237,53	103,36	0,35	-9,88E-05	-5619448	212,06	420,36	-83,51
I125	66,26	605,73	260,71	0,81	-2,29E-04	-13546996	334,88	1049,50	-403,08
I126	9,57	364,18	135,72	0,41	-1,13E-04	-6947006	145,63	590,37	-269,49
I127	92,94	289,20	119,84	0,40	-1,14E-04	-6372102	222,34	501,21	-130,09
I128	133	188,59	78,78	0,27	-7,86E-05	-4546634	220,22	330,49	-12,17
I129	129,32	172,25	77,58	0,28	-8,00E-05	-4463140	217,44	315,38	-4,32
I130	19,82	289,65	114,73	0,36	-9,89E-05	-6166460	137,55	484,58	-203,18
I131	107,95	246,77	99,75	0,36	-9,91E-05	-5409550	221,45	433,03	-83,04
I132	132,69	262,64	86,05	0,36	-1,01E-04	-5159407	241,18	437,65	-66,56
I133	124,24	238,42	95,27	0,33	-9,39E-05	-5300214	229,13	409,50	-58,81
I134	120,56	222,08	94,13	0,33	-9,53E-05	-5220185	226,35	394,39	-50,97
I135	145,30	205,22	86,54	0,33	-9,55E-05	-4939117	247,28	369,66	-12,64
I136	90,46	255,79	110,96	0,37	-1,06E-04	-5899266	210,39	452,30	-107,64
I137	76,94	591,90	253,01	0,79	-2,22E-04	-13260974	337,37	1021,99	-381,24
I138	10,35	367,36	135,72	0,41	-1,13E-04	-6947006	146,41	593,56	-270,95
I139	121,76	205,00	86,46	0,30	-8,55E-05	-4832258	217,17	360,59	-36,37
I140	118,08	188,66	85,26	0,30	-8,69E-05	-4748604	214,40	345,48	-28,53
I141	19,80	285,29	114,73	0,36	-9,89E-05	-6166460	137,53	480,22	-200,14
I142	107,17	243,22	99,75	0,36	-9,91E-05	-5409550	220,67	429,48	-81,32
I143	131,91	226,36	92,12	0,35	-9,94E-05	-5125167	241,62	404,75	-42,98

Tabla N°30: Propiedades Termodinámicas de otros tipos de moléculas.

Componente	ΔH_f°	S_f°	C_p°				$\Delta H_f(T)$	$S_f(T)$	$G_f(T)$
	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	a	b	c	d	(Kcal/mol)	Cal/K Mol	Kcal/Mol
H2	0,00	31,21	4,04	0,00	0,00	0,00	2,59	36,58	-23,13
CH4	-17,90	44,49	2,86	0,02	-4,58E-06	30193,45	-12,40	53,73	-50,18
CO2	-94,05	51,09	10,13	0,00	-6,95E-07	-212500	-89,55	60,13	-131,83
CO	-26,42	47,24	6,14	0,00	-3,53E-07	26500	-23,44	53,37	-60,97
C3H8	-24,82	64,51	12,60	0,00	0,00	0,00	-19,72	75,33	-72,68
C5H12	-36,98	80,12	15,32	0,07	-2,10E-05	-613819,30	-14,90	115,79	-96,31
C4H10	-32,18	70,58	17,01	0,05	-1,31E-05	-784112,50	-15,06	99,58	-85,07
H2S	-4,93	49,16	8,18	0,00	0,00	0,00	-1,62	56,18	-41,12
C6H14	-39,90	93	34,10	0,00	0,00	0,00	-26,08	122,27	-112,06
H.	52,10	27,39	4,97	0,00	0,00	0,00	54,11	31,66	31,86
CH3.	35,10	46,38	9,25	0,00	0,00	0,00	38,85	54,32	0,65
C1	-63,52	51,72	20,43	0,06	-1,77E-05	-874577,40	-42,39	86,91	-103,51
C2	-68,46	60,85	21,67	0,08	-2,29E-05	-812080,80	-42,81	102,98	-115,22
SH2	-27,07	124,64	23,94	0,07	-1,94E-05	-846101,50	-2,99	165,18	-119,14
HS.	33,30	46,76	6,87	0,00	-1,22E-07	47300	36,41	53,28	-1,06
SH1	-22,13	115,51	20,47	0,06	-1,57E-05	-732349,60	-2,21	149,20	-107,12

APENDICE E
Reacciones No espontáneas

Tabla N° 31: Reacciones No espontáneas pertenecientes a los Saturados.

N° Reacción	Reacción Original	ΔG_r	Grupo A	Grupo B
1	Ss1=I1+I2	28,50	X	
2	I2=Ss2+H	29,45		X
5	Ss1=I3+CH3	52,35	X	
8	Ss5=I1+I4	28,50	X	
9	I4=Ss6+H	29,46		X
10	Ss5=I5+CH3	52,36	X	
12	Ss3=I6	22,56		X
14	I7=Ss8+H	21,03		X
17	I9=Ss9+H	26,14		X
21	Ss10=I12+I13	28,50	X	
24	Ss3=I14+H	82,05	X	
26	Ss13=I15+H	55,35	X	
TOTAL			7	5

Tabla N°32: Reacciones No Espontáneas pertenecientes a los Aromáticos.

N° Reacción	Reacción Original	ΔG_r	Grupo A	Grupo B
29	I16=Ar14+H	56,07		X
30	Ar14=I17+H	67,78	X	
32	Ar15=I18+H	61,25	X	
33	I18=Ar16+H	44,57		X
34	Ar16=I19+H	62,65	X	
35	I19=Ar17+H	32,43		X
36	Ar17=I20+H	148,22	X	
38	Ar1=I21+I22	16,61	X	
39	I22=Ss15+H	29,45		X
41	Ar2=I23+H	62,73	X	
42	I23=Ar3+H	32,34		X
43	Ar3=I24+H	69,34	X	
45	Ar4=I25+H	147,23	X	
47	Ar5=I26+H	97,02	X	
48	I26=Ar6+H	25,93		X
49	Ar7=I21+I27	16,86	X	
50	I27=Ss16+H	29,45		X
51	Ar8=I28+I29	26,48	X	
52	I29=Ss17+H	29,45		X
54	Ar9=I30+H	62,29	X	
55	I30=Ar10+H	32,78		X
56	Ar10=I31+H	67,96	X	
58	Ar12=I28+I27	26,45	X	
59	Ar13=I32+I33	39,29	X	
60	I33=Ss18+H	29,45		X
TOTAL			15	10

Tabla N°33: Reacciones No Espontáneas pertenecientes a los Resinas.

N° Reaccion	Reaccion Original	ΔG_r	Grupo A	Grupo B
62	Rr1=I34+I35	25,49	X	
67	Rr4=I38+H	62,25	X	
68	I38=Rr5+H	32,83		X
69	Rr5=I39+H	68,85	X	
72	C1=I40+I41	28,57	X	
75	Rr3=I42+H	85,26	X	
76	I42=Rr7+H	29,96		X
77	Rr7=I43+H	71,72	X	
79	Rr8=I44+I45	20,18	X	
82	Rr1=I46+I47	28,80	X	
87	Rr12=I49+H	62,82	X	
88	I49=Rr13+H	32,26		X
89	Rr13=I50+H	69,42	X	
91	Rr10=I51+H	74,39	X	
92	I51=Rr15+H	32,49		X
93	Rr15=I52+H	69,19	X	
95	Rr16=I53+I45	17,65	X	
97	Rr18=I54+I55	250,28	X	
102	Rr21=I57+H	40,95	X	
103	I57=Rr22+H	54,12		X
104	Rr22=I58+H	46,62	X	
106	Rr20=I59+I60	30,21	X	
108	Rr24=I61+H	57,38	X	
109	I61=Rr25+H	37,87		X
111	SH1=I62+SH	54,48	X	
116	Rr27=I64+I60	29,20	X	
118	Rr28=I65+H	57,41	X	
124	Rr32=I68+H	42,77	X	
125	I68=Rr33+H	52,31		X
TOTAL			22	7

Tabla N°34: Reacciones No Espontáneas pertenecientes a los Asfaltenos.

N° Reaccion	Reaccion Original	ΔG_r	Grupo A	Grupo B
126	As1=I69+I70	63,21	X	
129	As3=I71+I72	35,99	X	
132	As2=I73+I74	29,53	X	
134	As6=I75+H	66,21	X	
138	As4=I60+I76	11,81	X	
140	As8=I77+H	49,18	X	
141	I77=As9+H	44,30		X
142	As5=I78+I79	18,30	X	
144	As10=I80+H	16,33	X	
148	As11=I83+H	49,74	X	
149	I83=As12+H	46,01		X
152	As13=I84+I85	61,99	X	
155	As15=I86+I87	35,32	X	
160	I89=I90+CO	13,02		X
162	As18=I91+H	68,67	X	
163	I91=As19+H	22,97		X
173	As22=I98+H	49,02	X	
174	I98=As23+H	49,10		X
175	As17=I99+H	73,15	X	
176	I99=As24+H	19,47		X
179	As26=I101+I102	55,04	X	
182	As28=I103+I104	372,69	X	
185	As27=I105+I74	26,49	X	
187	As31=I106+H	72,62		X
189	As29=I79+I107	26,33	X	
193	I109=I110+CO	17,91		X
195	As34=I111+H	49,10	X	
196	I111=As35+H	45,98		X
197	As30=I112+H	49,76	X	

Tabla N°34 : (Continuación).

N° Reaccion	Reaccion Original	ΔG_r	Grupo A	Grupo B
198	I112=As36+H	60,51		X
201	As26=I114+I115	56,09	X	
204	As39=I116+I104	34,37	X	
206	As38=I74+I117	29,59	X	
208	As41=I118+H	70,88	X	
210	As40=I119+I79	19,55	X	
216	As44=I123+H	49,21	X	
217	I123=As45+H	45,13		X
221	As48=I126+I127	31,64	X	
226	As51=I129+H	49,07	X	
228	As49=I130+I60	19,14	X	
230	As53=As54+CO2	53,56		X
231	As54=I131+H	46,27	X	
232	I131=As55+H	48,80		X
233	As55=I132+H	31,39	X	
234	I132=As56+H	51,22		X
237	As57=I134+H	48,80	X	
238	I134=As58+H	46,28		X
239	As58=I135+H	55,76	X	
241	As46=I136+I137	1,54	X	
244	As61=I138+I104	3,77	X	
248	As63=I140+H	48,96	X	
249	I140=As64+H	18,71		X
250	As62=I60+I142	21,45	X	
253	As66=I142+H	48,72	X	
254	I142=As67+H	46,35		X
255	As67=I143+H	55,70	X	
TOTAL			39	17

APENDICE F

Pesos moleculares de las moléculas neutras.

Tabla N° 35 : Pesos Moleculares de las moléculas Saturadas.

Código	Compuestos Neutros	C	H	N	O	S	PM
564	Ss1	41	76	0	0	0	568
565	Ss2	23	46	0	0	0	322
566	Ss3	18	30	0	0	0	246
567	Ss4	40	74	0	0	0	554
568	Ss5	43	80	0	0	0	596
569	Ss6	25	50	0	0	0	350
570	Ss7	42	78	0	0	0	582
571	Ss8	18	30	0	0	0	246
572	Ss9	18	30	0	0	0	246
573	Ss10	18	30	0	0	0	246
574	Ss11	11	20	0	0	0	152
575	Ss12	7	12	0	0	0	96
576	Ss13	18	28	0	0	0	244
577	Ss14	18	26	0	0	0	242
578	Ss15	17	34	0	0	0	238
579	Ss16	12	24	0	0	0	168
580	Ss17	11	22	0	0	0	154
581	Ss18	9	18	0	0	0	126

Tabla N°36 : Pesos Moleculares de las moléculas Aromáticas.

Código	Compuestos Neutros	C	H	N	O	S	PM
582	Ar1	32	54	0	0	0	438
583	Ar2	15	20	0	0	0	200
584	Ar3	15	18	0	0	0	198
585	Ar4	15	16	0	0	0	196
586	Ar5	15	14	0	0	0	194
587	Ar6	15	12	0	0	0	192
588	Ar7	27	44	0	0	0	368
589	Ar8	31	46	0	0	0	418
590	Ar9	20	24	0	0	0	264
591	Ar10	20	22	0	0	0	262
592	Ar11	20	20	0	0	0	260
593	Ar12	32	48	0	0	0	432
594	Ar13	30	40	0	0	0	400
595	Ar14	18	24	0	0	0	240
596	Ar15	18	22	0	0	0	238
597	Ar16	18	20	0	0	0	236
598	Ar17	18	18	0	0	0	234
599	Ar18	18	16	0	0	0	232

Tabla N°37 : Pesos Moleculares de las moléculas Resinas.

Código	Compuestos Neutros	C	H	N	O	S	PM
600	Rr1	66	68	0	1	2	940
601	Rr2	32	32	0	1	1	464
602	Rr3	34	38	0	0	1	478
603	Rr4	27	24	0	0	1	380
604	Rr5	27	22	0	0	1	378
605	Rr6	27	20	0	0	1	376
606	Rr7	34	36	0	0	1	476
607	Rr8	34	34	0	0	1	474
608	Rr9	29	24	0	0	1	404
609	Rr10	32	34	0	0	1	450
610	Rr11	34	36	0	1	1	492
611	Rr12	29	28	0	0	1	408
612	Rr13	29	26	0	0	1	406
613	Rr14	29	24	0	0	1	404
614	Rr15	32	32	0	0	1	448
615	Rr16	32	30	0	0	1	446

Tabla N°37 : (Continuación) .

Código	Compuestos Neutros	C	H	N	O	S	PM
616	Rr17	27	20	0	0	1	376
617	Rr18	63	63	1	1	2	913
618	Rr19	31	35	1	1	0	437
619	Rr20	32	30	0	0	2	478
620	Rr21	26	27	1	0	0	353
621	Rr22	26	25	1	0	0	351
622	Rr23	26	23	1	0	0	349
623	Rr24	28	22	0	0	1	390
624	Rr25	28	20	0	0	1	388
625	Rr26	64	65	1	1	2	927
626	Rr27	34	32	0	0	2	504
627	Rr28	30	24	0	0	1	416
628	Rr29	30	22	0	0	1	414
629	Rr30	67	63	1	1	2	961
630	Rr31	33	33	1	1	0	459
631	Rr32	28	25	1	0	0	375
632	Rr33	28	23	1	0	0	373

Tabla N°38 : Pesos Moleculares de las moléculas presentes en los Asfaltenos.

Código	Compuestos Neutros	C	H	N	O	S	PM
633	As1	115	106	2	2	4	1674
634	As2	38	34	0	1	1	538
635	As3	77	74	2	1	3	1138
636	As4	37	33	1	0	2	555
637	As5	40	43	1	1	1	585
638	As6	32	24	0	0	1	440
639	As7	32	22	0	0	1	438
640	As8	33	25	1	0	1	467
641	As9	33	23	1	0	1	465
642	As10	35	33	1	1	0	483
643	As11	34	35	1	0	0	457
644	As12	34	33	1	0	0	455
645	As13	118	108	2	2	3	1680
646	As14	40	34	0	1	1	562
647	As15	78	76	2	1	2	1120
648	As16	40	43	1	1	1	585
649	As17	38	35	1	0	1	537
650	As18	39	36	0	0	1	536
651	As19	39	34	0	0	1	534
652	As20	33	22	0	0	1	450
653	As21	36	35	1	1	0	497
654	As22	35	37	1	0	0	471

Tabla N°38 :(Continuación).

Código	Compuestos Neutros	C	H	N	O	S	PM
655	As23	35	35	1	0	0	469
656	As24	38	33	1	0	1	535
657	As25	32	21	1	0	1	451
658	As26	122	112	2	2	4	1764
659	As27	38	34	0	1	1	538
660	As28	84	80	2	1	3	1228
661	As29	42	43	1	1	2	641
662	As30	42	39	1	0	1	589
663	As31	32	24	0	0	1	440
664	As32	32	22	0	0	1	438
665	As33	37	33	1	1	1	539
666	As34	36	35	1	0	1	513
667	As35	36	33	1	0	1	511
668	As36	41	35	1	0	1	573
669	As37	35	23	1	0	1	489
670	As38	40	38	0	1	1	566
671	As39	82	76	2	1	3	1200
672	As40	40	39	1	1	2	613
673	As41	34	28	0	0	1	468
674	As42	34	26	0	0	1	466
675	As43	35	29	1	1	1	511
676	As44	34	31	1	0	1	485

Tabla N°38 :(Continuación).

Código	Compuestos Neutros	C	H	N	O	S	PM
677	As45	34	29	1	0	1	483
678	As46	128	117	3	2	4	1855
679	As47	39	35	1	0	1	549
680	As48	89	84	2	2	3	1308
681	As49	45	43	1	2	2	693
682	As50	44	43	1	0	1	617
683	As51	33	23	1	0	1	465
684	As52	33	21	1	0	1	463
685	As53	41	35	1	2	1	605
686	As54	40	35	1	0	1	561
687	As55	40	33	1	0	1	559
688	As56	38	27	1	0	1	529
689	As57	38	31	1	0	1	533
690	As58	38	29	1	0	1	531
691	As59	38	27	1	0	1	529
692	As60	41	39	1	0	1	577
693	As61	87	80	2	2	3	1280
694	As62	45	43	1	2	2	693
695	As63	35	27	1	0	1	493
696	As64	33	21	1	0	1	463
697	As65	41	35	1	2	1	605
698	As66	40	35	1	0	1	561
699	As67	40	33	1	0	1	559
700	As68	40	31	1	0	1	557

APENDICE G

Pesos moleculares de los radicales libres.

Tabla N°39 : Pesos Moleculares de las Radicales presentes en los Saturados.

Código	Radicales Libres	C	H	N	O	S	PM
701	I1	18	29	0	0	0	245
702	I2	23	47	0	0	0	323
703	I3	40	73	0	0	0	553
704	I4	25	51	0	0	0	351
705	I5	42	77	0	0	0	581
706	I6	18	30	0	0	0	246
707	I7	18	31	0	0	0	247
708	I8	18	30	0	0	0	246
709	I9	18	31	0	0	0	247
710	I10	18	30	0	0	0	246
711	I11	18	31	0	0	0	247
712	I12	7	11	0	0	0	95
713	I13	11	19	0	0	0	151
714	I14	18	29	0	0	0	245
715	I15	18	27	0	0	0	243
716	I16	18	25	0	0	0	241

Tabla N°40 : Pesos Moleculares de las Radicales presentes en los Aromáticos.

Código	Radicales Libres	C	H	N	O	S	PM
717	I17	18	23	0	0	0	239
718	I18	18	21	0	0	0	237
719	I19	18	19	0	0	0	235
720	I20	18	17	0	0	0	233
721	I21	15	19	0	0	0	199
722	I22	17	35	0	0	0	239
723	I23	15	19	0	0	0	199
724	I24	15	17	0	0	0	197
725	I25	15	15	0	0	0	195
726	I26	15	13	0	0	0	193
727	I27	12	25	0	0	0	169
728	I28	20	23	0	0	0	263
729	I29	11	23	0	0	0	155
730	I30	20	23	0	0	0	263
731	I31	20	21	0	0	0	261
732	I32	20	19	0	0	0	259
733	I33	9	19	0	0	0	127

Tabla N° 41 : Pesos Moleculares de las Radicales presentes en las Resinas.

Código	Radicales Libres	C	H	N	O	S	PM
734	I34	32	31	0	1	1	463
735	I35	34	37	0	0	1	477
736	I36	27	23	0	0	1	379
737	I37	5	9	0	1	0	85
738	I38	27	23	0	0	1	379
739	I39	27	21	0	0	1	377
740	I40	3	7	0	0	0	43
741	I41	2	3	0	1	0	43
742	I42	34	37	0	0	1	477
743	I43	34	35	0	0	1	475
744	I44	29	23	0	0	1	403
745	I45	5	11	0	0	0	71
746	I46	32	33	0	0	1	449
747	I47	34	35	0	1	1	491
748	I48	29	27	0	0	1	407
749	I49	29	27	0	0	1	407

Tabla N°41 :(Continuación) .

Código	Radicales Libres	C	H	N	O	S	PM
750	I50	29	25	0	0	1	405
751	I51	32	33	0	0	1	449
752	I52	32	31	0	0	1	447
753	I53	27	19	0	0	1	375
754	I54	33	29	0	0	1	457
755	I55	31	34	1	1	0	436
756	I56	26	26	0	0	1	370
757	I57	26	26	1	0	0	352
758	I58	26	24	1	0	0	350
759	I59	29	21	0	0	1	401
760	I60	4	9	0	0	1	89
761	I61	29	21	0	0	1	401
762	I62	4	9	0	0	0	57
763	I63	34	31	0	0	2	503
764	I64	30	23	0	0	1	415
765	I65	30	23	0	0	1	415
766	I66	33	32	1	1	0	458
767	I67	28	24	1	0	0	374
768	I68	28	24	1	0	0	374

Tabla N°42 : Pesos Moleculares de las Radicales presentes en los Asfaltenos.

Código	Radicales Libres	C	H	N	O	S	PM
769	I69	38	33	0	1	1	537
770	I70	77	73	2	1	3	1137
771	I71	40	42	1	1	1	584
772	I72	37	32	1	0	1	522
773	I73	32	23	0	0	1	439
774	I74	6	11	0	1	0	99
775	I75	32	23	0	0	1	439
776	I76	33	24	1	0	1	466
777	I77	33	24	1	0	1	466
778	I78	35	32	1	1	0	482
779	I79	5	11	0	0	1	103
780	I80	35	33	1	1	0	483
781	I81	35	34	1	1	0	484
782	I82	34	34	1	0	0	456
783	I83	34	34	1	0	0	456
784	I84	40	33	0	1	1	561
785	I85	78	75	2	1	2	1119
786	I86	40	42	1	1	1	584
787	I87	38	34	1	0	1	536
788	I88	40	34	0	1	1	562
789	I89	40	35	0	1	1	563
790	I90	39	35	0	0	1	535
791	I91	39	35	0	0	1	535
792	I92	33	21	0	0	1	449

Tabla N°42 :(Continuación)

Código	Radicales Libres	C	H	N	O	S	PM
793	I93	6	13	0	0	0	85
794	I94	36	34	1	1	0	496
795	I95	36	35	1	1	0	497
796	I96	36	36	1	1	0	498
797	I97	35	36	1	0	0	470
798	I98	35	36	1	0	0	470
799	I99	38	34	1	0	1	536
800	I100	32	20	1	0	1	450
801	I101	38	33	0	1	1	537
802	I102	84	79	2	1	3	1227
803	I103	42	42	1	1	2	640
804	I104	42	38	1	0	1	588
805	I105	32	23	0	0	1	439
806	I106	32	23	0	0	1	439
807	I107	37	32	1	1	1	538
808	I108	37	33	1	1	1	539
809	I109	37	34	1	1	1	540
810	I110	36	34	1	0	1	512
811	I111	36	34	1	0	1	512
812	I112	42	38	1	0	1	588
813	I113	35	22	1	0	1	488
814	I114	40	37	0	1	1	565
815	I115	82	75	2	1	3	1199
816	I116	40	38	1	1	2	612
817	I117	34	27	0	0	1	467
818	I118	34	27	0	0	1	467

Tabla N°42 :(Continuación) .

Código	Radicales Libres	C	H	N	O	S	PM
819	I119	35	28	1	1	1	510
820	I120	35	29	1	1	1	511
821	I121	35	30	1	1	1	512
822	I122	34	30	1	0	1	484
823	I123	34	30	1	0	1	484
824	I124	39	34	1	0	1	548
825	I125	89	83	2	2	3	1307
826	I126	45	42	1	2	2	692
827	I127	44	42	1	0	1	616
828	I128	33	22	1	0	1	464
829	I129	33	22	1	0	1	464
830	I130	41	34	1	2	1	604
831	I131	40	34	1	0	1	560
832	I132	38	30	1	0	1	532
833	I133	38	30	1	0	1	532
834	I134	38	30	1	0	1	532
835	I135	38	28	1	0	1	530
836	I136	41	38	1	0	1	576
837	I137	87	79	2	2	3	1279
838	I138	45	42	1	2	2	692
839	I139	35	26	1	0	1	492
840	I140	35	26	1	0	1	492
841	I141	41	34	1	2	1	604
842	I142	40	34	1	0	1	560
843	I143	40	32	1	0	1	558

Tabla N°43 : Pesos Moleculares de otras moléculas.

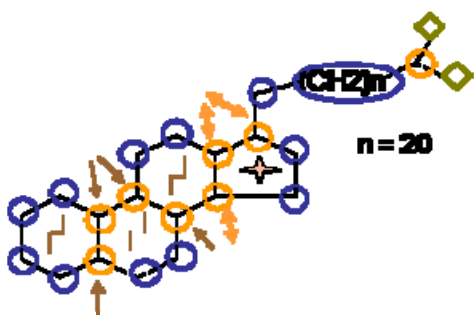
Compuestos Neutros	C	H	N	O	S	PM
H ₂	0	2	0	0	0	2
CH ₄	1	4	0	0	0	16
CO	1	0	0	1	0	28
C ₃ H ₈	3	8	0	0	0	44
C ₅ H ₁₂	5	12	0	0	0	72
C ₄ H ₁₀	4	10	0	0	0	58
H ₂ S	0	2	0	0	1	34
C ₆ H ₁₄	6	14	0	0	0	86
CO ₂	6	14	0	0	0	86
C ₁	5	10	0	1	0	86
C ₂	6	12	0	1	0	100
•SH	0	1	0	0	1	33
SH ₁	4	10	0	0	1	90
SH ₂	5	12	0	0	1	104

APENDICE H

Método de contribuciones de grupos para el cálculo de propiedades termodinámicas de moléculas neutras.

Saturados

Saturado Ss1 Código: 564



G1:2
G2: 31
G3: 8
G24a: 1
G25a: 3
G29a:1
G29b2: 1
G30b2: 2

COMPUESTO=C41H76

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-180.5000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
314.2171

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -67.20060

B= 1.061168

C= -6.3662999E-04

D= 1.4341600E-07

CP A 25°C

CP0= 196.3954

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 123.1185

B= 0.5489582

C= -1.6424130E-04

D= -7877051.

CP A 25°C

CP0= 183.5781

%ERROR= 0.5224211

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

31 G2

8 G3

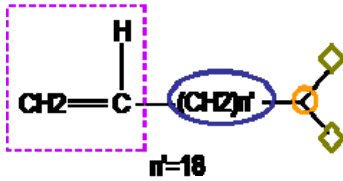
1 G24a

3 G25a

1 G29a

1 G29b2
2 G30b2

Saturado Ss2 Codigo: 565



G1: 2
G2: 18
G3: 1
G5: 1

COMPUESTO=C₂₃H₄₆

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-95.69000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
244.2540

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 5.072499

B= 0.4961380

C= -2.7983999E-04

D= 6.1143005E-08

CP A 25°C

CP0= 129.7406

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 86.23067

B= 0.2777348

C= -7.8432007E-05

D= -3359596.

CP A 25°C

CP0= 124.2717

%ERROR= 0.3811215

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

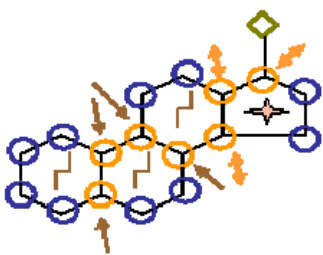
2 G1

18 G2

1 G3

1 G5

Saturado Ss3 Codigo: 566



G1:1
G2: 10
G3: 7
G24a: 1 ↕
G25a: 3 ↕
G29a:1 ↕
G29b2: 1 ↕
G30b2: 2 ↓

COMPUESTO=C18H30

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-65.22001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
108.2449

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -72.57060

B= 0.5569540

C= -3.4857998E-04

D= 7.9750002E-08

CP A 25°C

CP0= 64.61243

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 33.23053

B= 0.2721799

C= -8.5919448E-05

D= -4378233.

CP A 25°C

CP0= 57.49068

%ERROR= 0.7164513

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

10 G2

7 G3

1 G24a

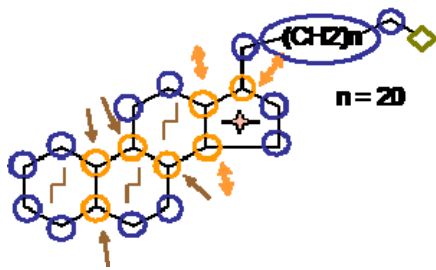
3 G25a

1 G29a

1 G29b2

2 G30b2

Saturados Ss4 Codigo: 567



G1: 1
G2: 32
G3: 7
G24a: 1
G25a: 3
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 2

COMPUESTO=C40H74

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-173.9000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
309.0735

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -63.89160

B= 1.026940

C= -6.1191997E-04

D= 1.3686200E-07

CP A 25°C

CP0= 191.5222

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 117.7324

B= 0.5381351

C= -1.6111824E-04

D= -7517366.

CP A 25°C

CP0= 179.2890

%ERROR= 0.5116673

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

32 G2

7 G3

1 G24a

3 G25a

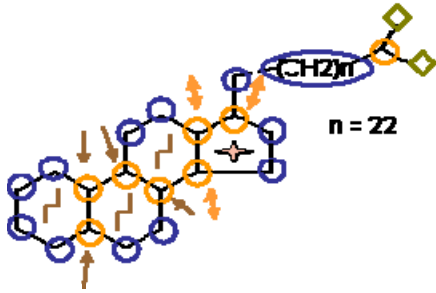
1 G29a

1 G29b2

2 G30b2

Saturados Ss5

Codigo: 568



G1:2
G2: 33
G3: 8
G24a: 1
G25a: 3 ↓
G29a: 1 ↓
G29b2: 1 ↓
G30b2: 2 ↓

COMPUESTO=C43H80

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-190.3800

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
332.4742

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -66.41160

B= 1.103894

C= -6.6056999E-04

D= 1.4860801E-07

CP A 25°C

CP0= 207.9327

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 130.7840

B= 0.5731642

C= -1.7108965E-04

D= -8161367.

CP A 25°C

CP0= 194.6535

%ERROR= 0.5147892

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

33 G2

8 G3

1 G24a

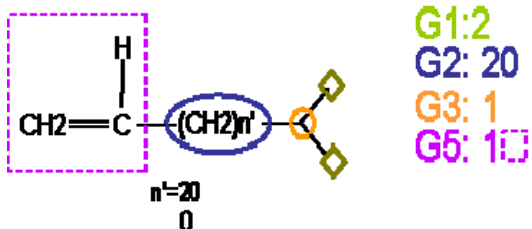
3 G25a

1 G29a

1 G29b2

2 G30b2

Saturados Ss6 Codigo: 569



COMPUESTO=C25H50

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-105.5700

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
262.5110

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 5.861500
B= 0.5388640
C= -3.0377999E-04
D= 6.6335005E-08
CP A 25°C
CP0= 141.2779

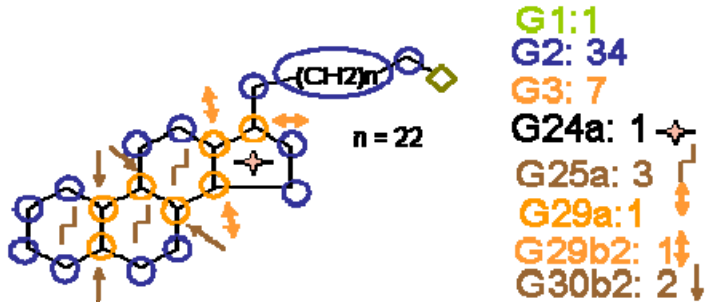
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 93.84627
B= 0.3020243
C= -8.5315580E-05
D= -3640398.
CP A 25°C
CP0= 135.3584
%ERROR= 0.3799228

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
20 G2
1 G3
1 G5

Saturados Ss7 Codigo: 570



COMPUESTO=C42H78

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-183.7800

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
327.3305

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -63.10260

B= 1.069666

C= -6.3585996E-04

D= 1.4205401E-07

CP A 25°C

CP0= 203.0595

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 125.4028

B= 0.5623339

C= -1.6796407E-04

D= -7801994.

CP A 25°C

CP0= 190.3638

%ERROR= 0.5043902

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

34 G2

7 G3

1 G24a

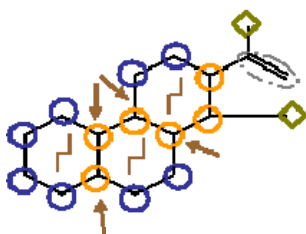
3 G25a

1 G29a

1 G29b2

2 G30b2

Saturados Ss8 Codigo: 571



G1: 2
G2: 8
G3: 6
G6: 1
G25a: 3
G30b2: 2

COMPUESTO=C18H30

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-50.14000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
126.2096

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -57.36000

B= 0.5217510

C= -3.2245996E-04

D= 7.2897002E-08

CP A 25°C

CP0= 71.46753

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 39.36244

B= 0.2614255

C= -8.2360450E-05

D= -4002854.

CP A 25°C

CP0= 64.95535

%ERROR= 0.6423338

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

8 G2

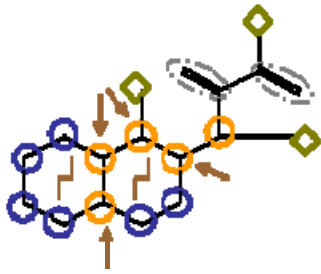
6 G3

1 G6

3 G25a

3 G30b2

Saturados Ss9 Codigo: 572



G1: 3
G2: 6
G3: 5
G6: 2
G25a: 2
G30b2: 2

COMPUESTO=C18H30

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-27.76000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
161.1749

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -41.04210

B= 0.4837650

C= -3.0242000E-04

D= 7.0054000E-08

CP A 25°C

CP0= 78.16597

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 51.91836

B= 0.2335742

C= -7.1676433E-05

D= -3847390.

CP A 25°C

CP0= 71.90600

%ERROR= 0.6140535

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

6 G2

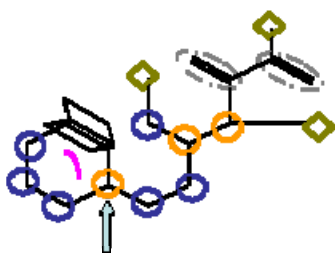
5 G3

2 G6

2 G25a

2 G30b2

Saturados Ss10 Código 573



G1: 3
G2: 6
G3: 3
G6: 2
G7: 1
G25b: 1
G30a: 1

COMPUESTO=C18H30

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-5.300003

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
208.8786

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -17.21340

B= 0.4113430

C= -2.6455999E-04

D= 6.3849001E-08

CP A 25°C

CP0= 83.60310

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 67.55592

B= 0.1832397

C= -5.4223179E-05

D= -3509494.

CP A 25°C

CP0= 77.88896

%ERROR= 0.5872058

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

6 G2

3 G3

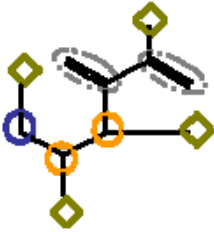
2 G6

1 G7

1 G25b

1 G30a

Saturados Ss11 Código 574



G1: 4
G2: 1
G3: 2
G6: 2 ↻

COMPUESTO=C11H20

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-7.519997

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
151.0472

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -5.051700

B= 0.2531250

C= -1.5802999E-04

D= 3.7894001E-08

CP A 25°C

CP0= 57.37402

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 45.25317

B= 0.1177564

C= -3.3200467E-05

D= -2082540.

CP A 25°C

CP0= 53.98355

%ERROR= 0.5226645

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

1 G2

2 G3

2 G6

Saturados Ss12

Código 575



G1: 1
G2: 3
G3: 1
G7: 1
G25b: 1
G30a: 1 ↑

COMPUESTO=C7H12

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-8.400002

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
96.29093

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -11.73330

B= 0.1583580

C= -9.9629993E-05

D= 2.3033000E-08

CP A 25°C

CP0= 27.23514

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 18.84286

B= 7.6078154E-02

C= -2.3755614E-05

D= -1265793.

CP A 25°C

CP0= 25.17439

%ERROR= 0.6004304

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

3 G2

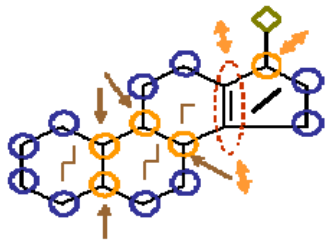
1 G3

1 G7

1 G25b

1 G30a

Saturados Ss13 Codigo 576



G1: 1
G2: 10
G3: 5
G10: 1
G24b: 1
G25a: 3
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 2

COMPUESTO=C18H28

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-37.62000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
140.0995

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -59.64690
B= 0.5130301
C= -3.1684001E-04
D= 7.1371005E-08
CP A 25°C
CP0= 67.03960

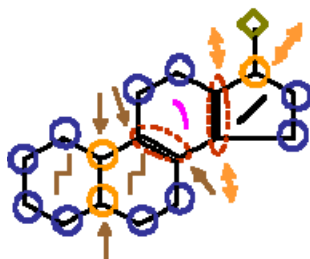
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 35.08314
B= 0.2580997
C= -8.1743645E-05
D= -3921293.
CP A 25°C
CP0= 60.65681
%ERROR= 0.6546961

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1
10 G2
5 G3
1 G10
1 G24b
3 G25a
1 G29a
1 G29b2
2 G30b2

Saturados Ss14 Codigo 577



G1: 1
G2: 10
G3: 3
G10: 2
G24b: 1
G25a: 2
G25b: 1
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 2

COMPUESTO=C18H26

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-3.820002

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
181.7772

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -45.61590
B= 0.4663230
C= -2.9117998E-04
D= 6.7002006E-08
CP A 25°C
CP0= 69.31011

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 43.28992
B= 0.2270406
C= -7.0492941E-05
D= -3679494.
CP A 25°C
CP0= 63.32353
%ERROR= 0.6362883

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1
10 G2
3 G3
2 G10
1 G24b
2 G25a
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
2 G30b2

Saturados Ss15 Código 578



COMPUESTO=C17H34

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-66.05000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
189.4825

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 2.705500
B= 0.3679600
C= -2.0801999E-04
D= 4.5567003E-08
CP A 25°C
CP0= 95.12885

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 63.15686

B= 0.2052473
C= -5.7942216E-05
D= -2501489.
CP A 25°C
CP0= 91.06035
%ERROR= 0.3857226

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
12 G2
1 G3
1 G5

Saturados Ss16 Codigo 579



COMPUESTO=C12H24

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-41.35000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
143.8397

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 0.7329999
B= 0.2611450
C= -1.4817000E-04
D= 3.2587000E-08
CP A 25°C
CP0= 66.28571

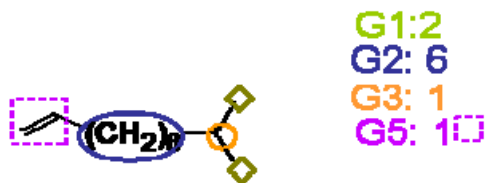
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 43.97593
B= 0.1447631
C= -4.0834821E-05
D= -1789740.
CP A 25°C
CP0= 63.37353
%ERROR= 0.3933490

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
7 G2
1 G3
1 G5

Saturados Ss17 Codigo 580



COMPUESTO=C11H22

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-36.41000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
134.7112

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 0.3384999

B= 0.2397820

C= -1.3620000E-04

D= 2.9991000E-08

CP A 25°C

CP0= 60.51709

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 40.15257

B= 0.1326446

C= -3.7404174E-05

D= -1648274.

CP A 25°C

CP0= 57.83343

%ERROR= 0.3957945

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

6 G2

1 G3

1 G5

Saturados Ss18 Código 581



COMPUESTO=C9H18

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-26.53000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
116.4540

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -0.4505001

B= 0.1970560

C= -1.1225999E-04

D= 2.4799000E-08

CP A 25°C

CP0= 48.97983

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 32.45766

B= 0.1084886

C= -3.0577179E-05

D= -1362012.

CP A 25°C

CP0= 46.76359

%ERROR= 0.4020630

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

4 G2

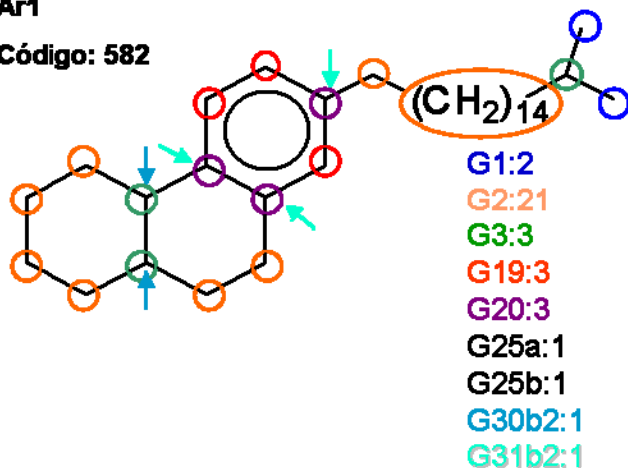
1 G3

1 G5

AROMÁTICOS

Ar1

Código: 582



COMPUESTO=C32H54

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-102.1700

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
270.8531

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.87780

B= 0.7260909

C= -4.1832001E-04

D= 9.6489003E-08

CP A 25°C

CP0= 151.9776

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 84.61528

B= 0.4040971

C= -1.1028559E-04

D= -4229756.

CP A 25°C

CP0= 147.7108

%ERROR= 0.4976729

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

21 G2

3 G3

3 G19

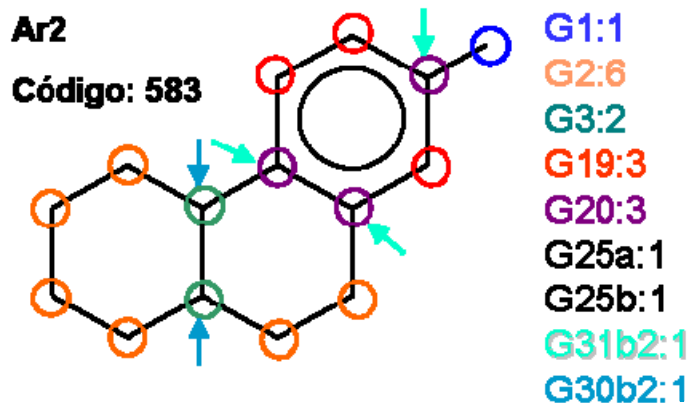
3 G20

1 G25a

1 G25b

1 G30b2

1 G31b2



COMPUESTO=C15H20

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-16.53000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
119.6524

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.88080

B= 0.3500550

C= -2.0208998E-04

D= 4.8398999E-08

CP A 25°C

CP0= 54.80638

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 24.53540

B= 0.1885661

C= -4.7589707E-05

D= -2120796.

CP A 25°C

CP0= 52.66822

%ERROR= 0.6030430

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

6 G2

2 G3

3 G19

3 G20

1 G25a

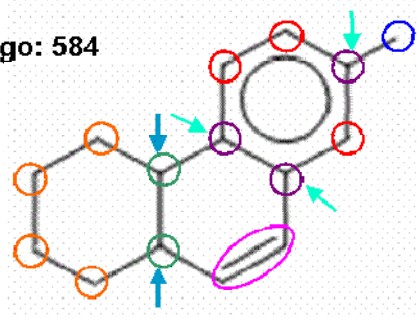
1 G25b

1 G30b2

1 G31b2

Ar3

Código: 584



G1:1

G2:4

G3:2

G7:1

G19:3

G20:3

G25a:1

G25b:1

G31b2:1

G30b2:1

COMPUESTO=C15H18

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
11.31000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
116.6934

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -36.79080

B= 0.3381890

C= -2.0173998E-04

D= 4.8711001E-08

CP A 25°C

CP0= 47.39791

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 20.99826

B= 0.1756543

C= -4.6241697E-05

D= -2134646.

CP A 25°C

CP0= 45.24547

%ERROR= 0.6772990

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

4 G2

2 G3

1 G7

3 G19

3 G20

1 G25a

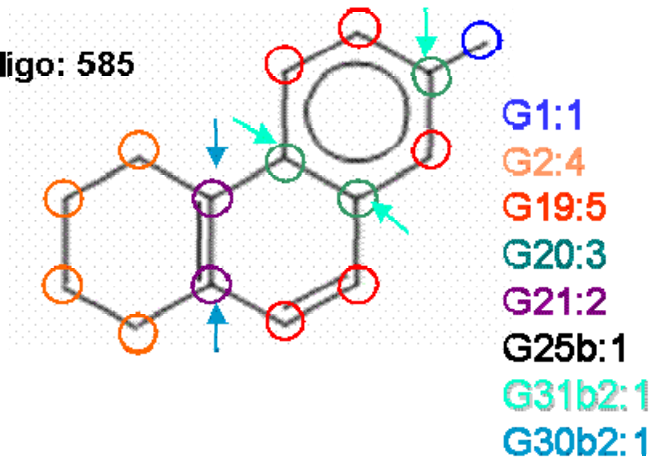
1 G25b

1 G30b2

1 G31b2

Ar4

Código: 585



COMPUESTO=C15H16

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
12.19000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
133.0017

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -15.90170

B= 0.2802550

C= -1.5929999E-04

D= 3.9256001E-08

CP A 25°C

CP0= 54.53604

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 30.65887

B= 0.1492893

C= -3.3993565E-05

D= -1719615.

CP A 25°C

CP0= 52.80299

%ERROR= 0.5351550

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

4 G2

5 G19

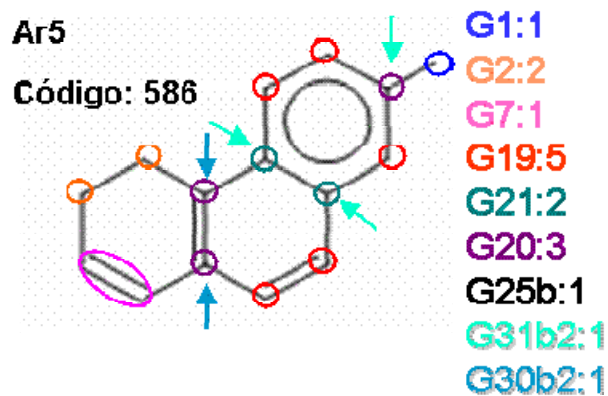
3 G20

2 G21

1 G25b

1 G30b2

1 G31b2



COMPUESTO=C15H14

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
40.02999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
130.0427

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -19.81170

B= 0.2683890

C= -1.5894999E-04

D= 3.9568000E-08

CP A 25°C

CP0= 47.12757

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 27.13144

B= 0.1363607

C= -3.2638207E-05

D= -1734063.

CP A 25°C

CP0= 45.37883

%ERROR= 0.6079391

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

2 G2

1 G7

5 G19

3 G20

2 G21

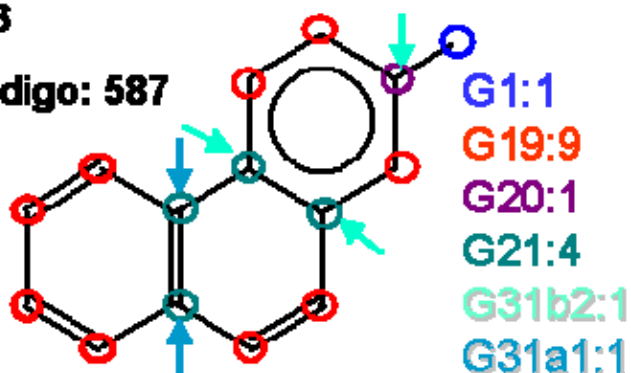
1 G25b

1 G30b2

1 G31b2

Ar6

Código: 587



COMPUESTO=C15H12

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
42.89000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
118.8248

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -13.40680

B= 0.2575950

C= -1.6058999E-04

D= 3.9147000E-08

CP A 25°C

CP0= 50.15729

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 33.03763

B= 0.1269697

C= -3.5621269E-05

D= -1715639.

CP A 25°C

CP0= 48.42720

%ERROR= 0.6129744

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

9 G19

1 G20

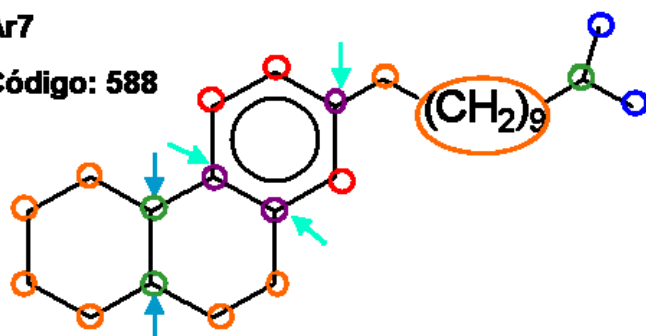
4 G21

1 G30b2

1 G31b2

Ar7

Código: 588



G1:2
G2:16
G3:3
G19:3
G20:3
G25a:1
G25b:1
G30b2:1
G31b2:1

COMPUESTO=C27H44

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-77.47000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
225.2102

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.85030

B= 0.6192760

C= -3.5847002E-04

D= 8.3509001E-08

CP A 25°C

CP0= 123.1345

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 67.24673

B= 0.3405860

C= -9.1867711E-05

D= -3661047.

CP A 25°C

CP0= 119.4413

%ERROR= 0.5202328

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

16 G2

3 G3

3 G19

3 G20

1 G25a

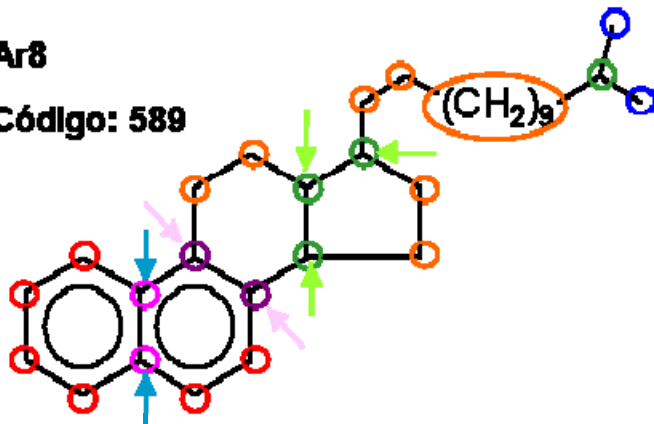
1 G25b

1 G30b2

1 G31b2

Ar8

Código: 589



G1:2	G24a:1
G2:15	G25b:1
G3:4	G29a:1
G19:6	G29b2:1
G20:2	G30b2:1
G21:2	G31a1:1

COMPUESTO=C31H46

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-53.20000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
260.6604

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -37.40020

B= 0.6959100

C= -4.2792995E-04

D= 1.0347800E-07

CP A 25°C

CP0= 134.7877

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 85.33504

B= 0.3506819

C= -9.7622345E-05

D= -4533012.

CP A 25°C

CP0= 130.2191

%ERROR= 0.5976039

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

15 G2

4 G3

6 G19

2 G20

2 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

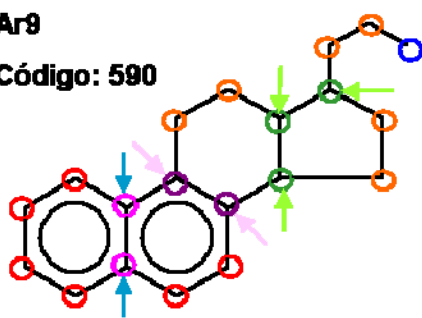
1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

Ar9

Código: 590



G1:1

G2:6

G3:3

G19:6

G20:2

G21:2

G24a:1

G25b:1

G29a:1

G29b2:1

G30b2:1

G31a1:1

COMPUESTO=C₂₀H₂₄

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
2.800001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
164.2310

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -38.03620

B= 0.4480520

C= -2.8352000E-04

D= 7.0963999E-08

CP A 25°C

CP0= 72.22823

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 46.17111

B= 0.2112342

C= -5.6970792E-05

D= -3110950.

CP A 25°C

CP0= 69.08985

%ERROR= 0.7113762

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

6 G2

3 G3

6 G19

2 G20

2 G21

1 G24a

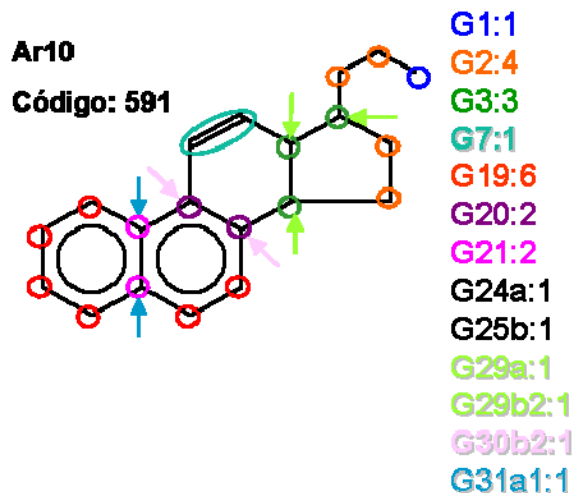
1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1



COMPUESTO=C₂₀H₂₂

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
30.64000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
161.2720

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -41.94621

B= 0.4361860

C= -2.8316997E-04

D= 7.1275998E-08

CP A 25°C

CP0= 64.81976

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 42.64613

B= 0.1983002

C= -5.5612720E-05

D= -3125482.

CP A 25°C

CP0= 61.66586

%ERROR= 0.7792225

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

4 G2

3 G3

1 G7

6 G19

2 G20

2 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

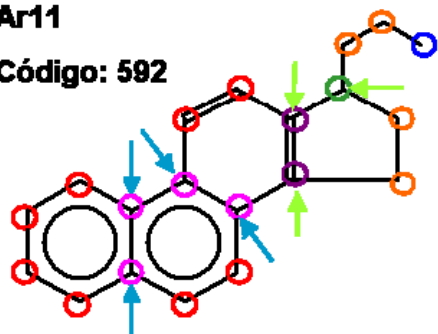
1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

Ar11

Código: 592



G1:1
G2:4
G3:1
G19:8
G20:2
G21:4
G24b:1
G29a:1
G29b2:1
G31a1:2

COMPUESTO=C₂₀H₂₀

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
26.46000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
167.5224

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -22.16440

B= 0.3810350

C= -2.3465000E-04

D= 5.7811004E-08

CP A 25°C

CP0= 72.11455

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 46.43138

B= 0.1881172

C= -5.0093753E-05

D= -2534080.

CP A 25°C

CP0= 69.55858

%ERROR= 0.6155782

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

4 G2

1 G3

8 G19

2 G20

4 G21

1 G24b

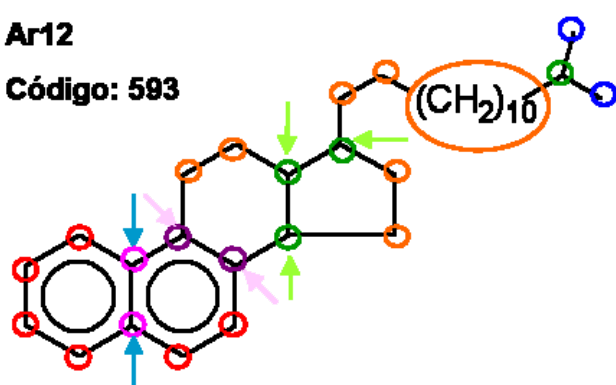
1 G29a

1 G29b2

2 G31a1

Ar12

Código: 593



G1:2
G2:16
G3:4
G19:6
G20:2
G21:2
G24a:1
G25b:1
G29a:1
G29b2:1
G30b2:1
G31a1:1

COMPUESTO=C32H48

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-58.14000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
269.7890

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -37.00570

B= 0.7172730

C= -4.3989997E-04

D= 1.0607400E-07

CP A 25°C

CP0= 140.5564

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 88.90921

B= 0.3632060

C= -1.0122722E-04

D= -4652772.

CP A 25°C

CP0= 135.8596

%ERROR= 0.5902194

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

16 G2

4 G3

6 G19

2 G20

2 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

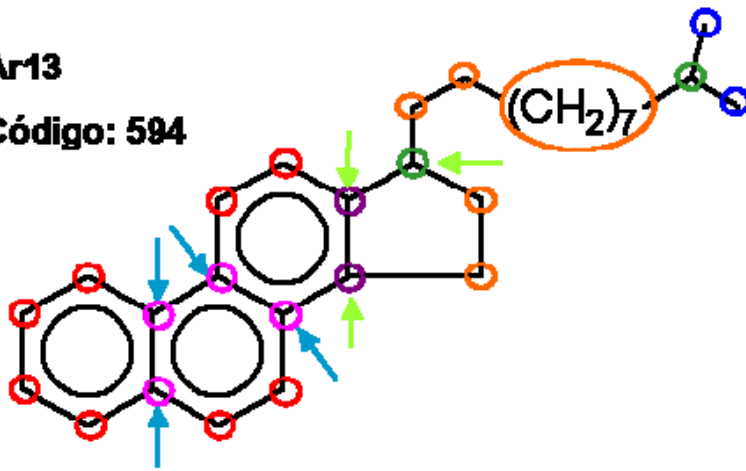
1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

Ar13

Código: 594



G1:2
G2:11
G3:2
G19:8
G20:2
G21:4
G24b:1
G29a:1
G29b2:1
G31a1:2

COMPUESTO=C29H38

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-19.66000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
245.6946

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -22.31740

B= 0.5861670

C= -3.5511999E-04

D= 8.5133003E-08

CP A 25°C

CP0= 123.1368

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 78.73142

B= 0.3020139

C= -8.3313964E-05

D= -3733730.

CP A 25°C

CP0= 119.3685

%ERROR= 0.5536960

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

11 G2

2 G3

8 G19

2 G20

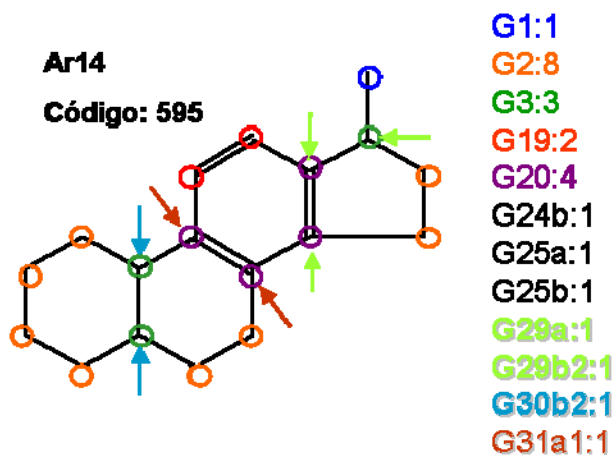
4 G21

1 G24b

1 G29a

1 G29b2

2 G31a1



COMPUESTO=C18H24

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-24.22000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
150.3278

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -42.42740

B= 0.4307690

C= -2.5220998E-04

D= 6.1871006E-08

CP A 25°C

CP0= 65.22638

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 30.98552

B= 0.2243031

C= -5.4692606E-05

D= -2712022.

CP A 25°C

CP0= 62.49098

%ERROR= 0.6392929

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

8 G2

3 G3

2 G19

4 G20

1 G24b

1 G25a

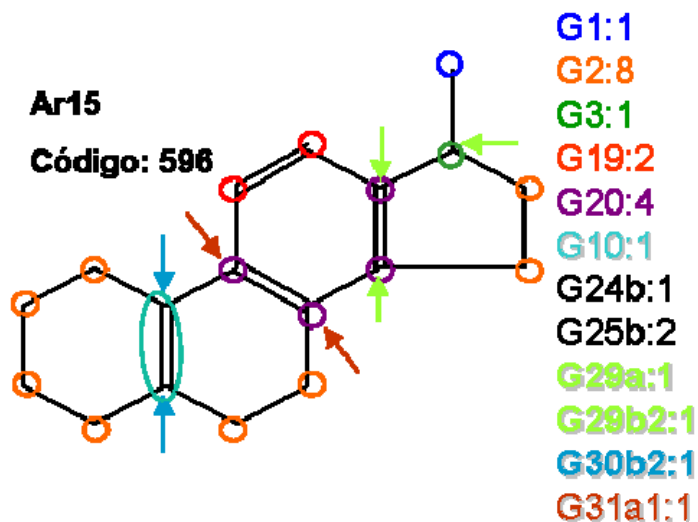
1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1



COMPUESTO=C18H22

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 -11.88000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 199.7260

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -28.39640

B= 0.3840620

C= -2.2654996E-04

D= 5.7502000E-08

CP A 25°C

CP0= 67.49689

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 39.83347

B= 0.1921733

C= -4.2979002E-05

D= -2520536.

CP A 25°C

CP0= 64.95479

%ERROR= 0.6130596

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

8 G2

1 G3

1 G10

2 G19

4 G20

1 G24b

2 G25b

1 G29a

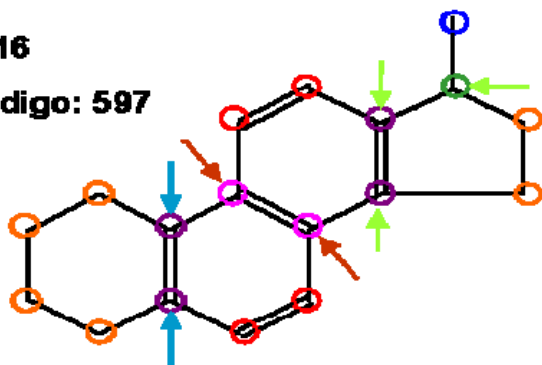
1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

Ar16

Código: 597



G1:1
G2:6
G3:1
G19:4
G20:4
G21:2
G24b:1
G25b:1
G29a:1
G29b2:1
G30b2:1
G31a1:1

COMPUESTO=C18H20

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
4.500000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
163.6771

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -25.44830

B= 0.3609690

C= -2.0941999E-04

D= 5.2728005E-08

CP A 25°C

CP0= 64.95604

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 37.10468

B= 0.1850345

C= -4.1100269E-05

D= -2310604.

CP A 25°C

CP0= 62.62620

%ERROR= 0.5862243

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

6 G2

1 G3

4 G19

4 G20

2 G21

1 G24b

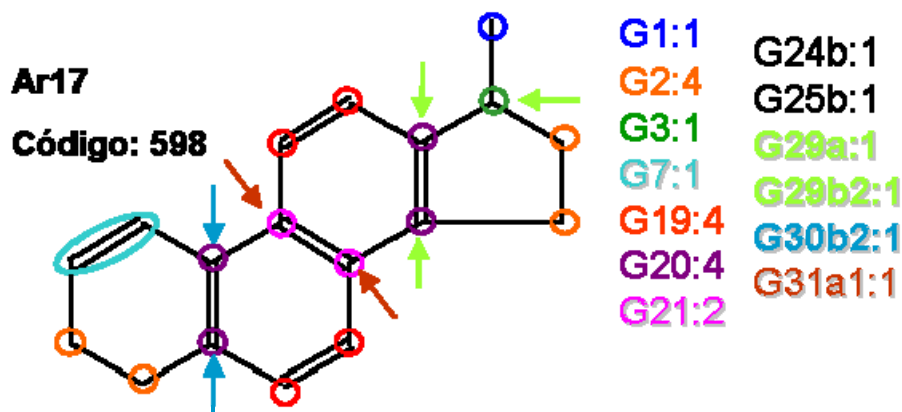
1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1



COMPUESTO=C18H18

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 32.34000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 160.7181

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.35830

B= 0.3491030

C= -2.0906999E-04

D= 5.3040004E-08

CP A 25°C

CP0= 57.54757

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 33.57241

B= 0.1721136

C= -3.9748000E-05

D= -2324706.

CP A 25°C

CP0= 55.20312

%ERROR= 0.6495199

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

4 G2

1 G3

1 G7

4 G19

4 G20

2 G21

1 G24b

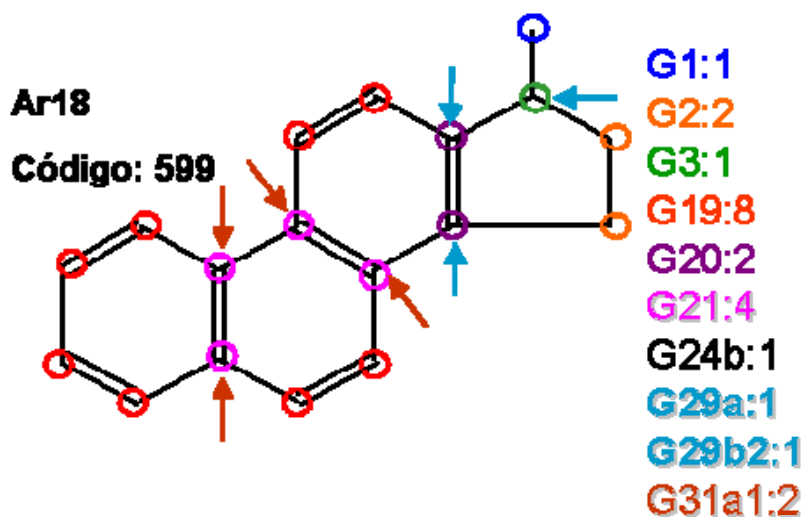
1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1



COMPUESTO=C18H16

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
36.34000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
149.2653

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -22.95340

B= 0.3383090

C= -2.1071000E-04

D= 5.2619004E-08

CP A 25°C

CP0= 60.57729

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 39.50032

B= 0.1626845

C= -4.2714379E-05

D= -2307607.

CP A 25°C

CP0= 58.24842

%ERROR= 0.6532977

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

2 G2

1 G3

8 G19

2 G20

4 G21

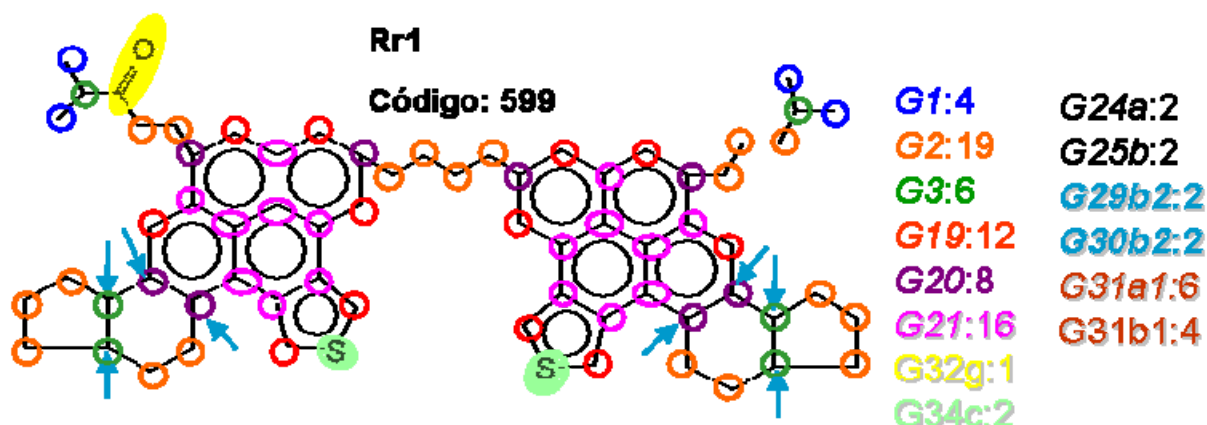
1 G24b

1 G29a

1 G29b2

2 G31a1

RESINAS



COMPUESTO=C66H68

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
20.04000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
405.3051

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -80.03950

B= 1.342496

C= -8.0148992E-04

D= 1.8589000E-07

CP A 25°C

CP0= 253.9053

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 140.5682

B= 0.7221038

C= -2.0802300E-04

D= -8150692.

CP A 25°C

CP0= 245.6809

%ERROR= 0.5598563

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

19 G2

6 G3

12 G19

8 G20

16 G21

2 G24a

2 G25b

2 G29b2

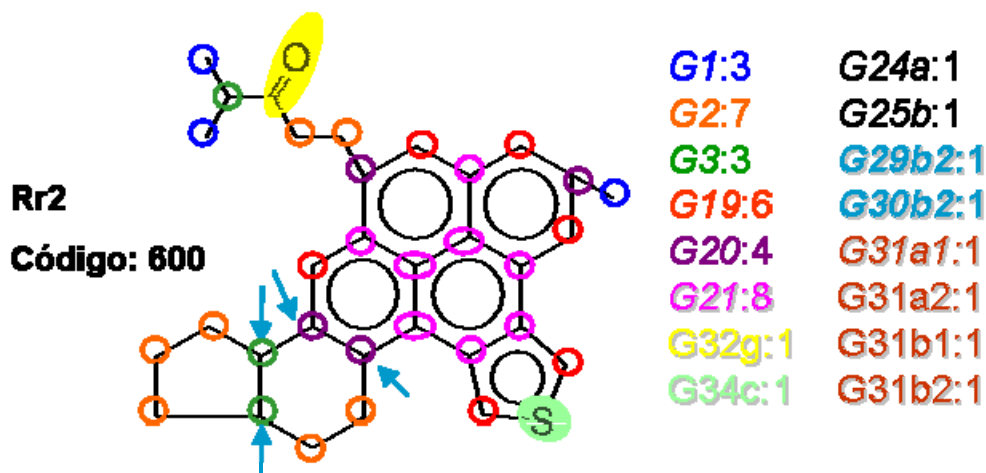
2 G30b2

6 G31a1

4 G31b1

1 G32g

2 G34c



COMPUESTO=C₃₂H₃₂SO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-5.720004

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
218.1942

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.38550

B= 0.6360810

C= -3.8667995E-04

D= 9.2293000E-08

CP A 25°C

CP0= 124.3348

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 76.14526

B= 0.3280597

C= -9.2027571E-05

D= -4046797.

CP A 25°C

CP0= 120.2515

%ERROR= 0.5781814

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

7 G2

3 G3

6 G19

4 G20

8 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

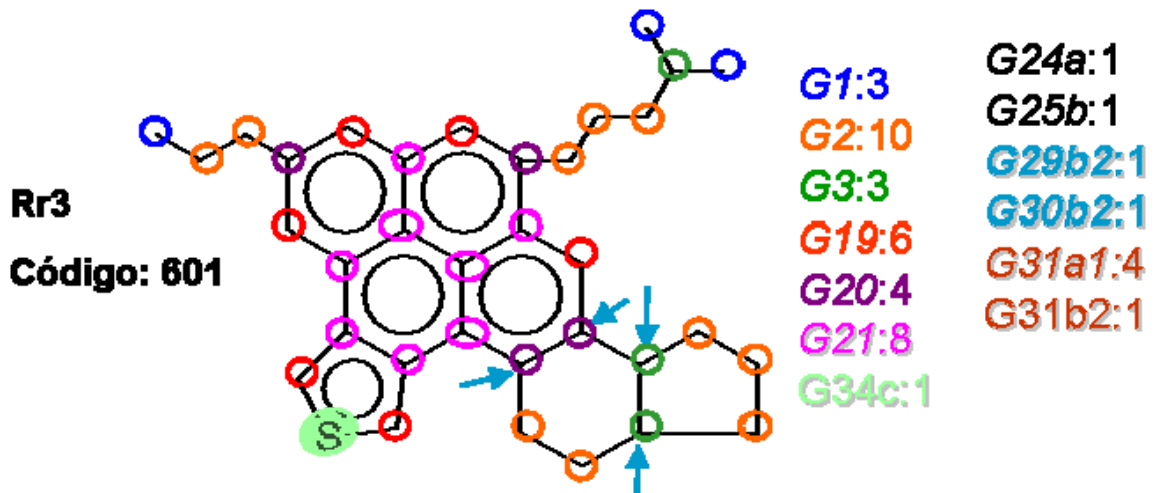
1 G31a2

1 G31b1

1 G31b2

1 G32g

1 G34c



COMPUESTO=C34H38S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
11.58000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
262.0954

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.20360

B= 0.6794070

C= -4.0622996E-04

D= 9.5587005E-08

CP A 25°C

CP0= 135.7838

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 80.23025

B= 0.3604027

C= -1.0106571E-04

D= -4190827.

CP A 25°C

CP0= 131.5558

%ERROR= 0.5500239

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

10 G2

3 G3

6 G19

4 G20

8 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

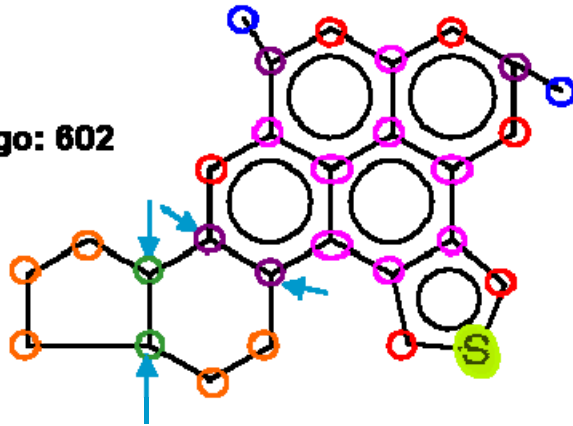
4 G31a1

1 G31b2

1 G34c

Rr4

Código: 602



G1: 2	G24a: 1
G2: 5	G25b: 1
G3: 2	G29b2: 1
G19: 6	G30b2: 1
G20: 4	G31a1: 1
G21: 8	G31a2: 1
G34c: 1	G31b1: 1
	G31b2: 1

COMPUESTO=C27H24S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
47.18000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
204.9306

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.26160

B= 0.5170010

C= -3.0969997E-04

D= 7.3457002E-08

CP A 25°C

CP0= 96.29882

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 54.91356

B= 0.2718463

C= -7.5184165E-05

D= -3220802.

CP A 25°C

CP0= 93.04897

%ERROR= 0.5775245

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

5 G2

2 G3

6 G19

4 G20

8 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a2

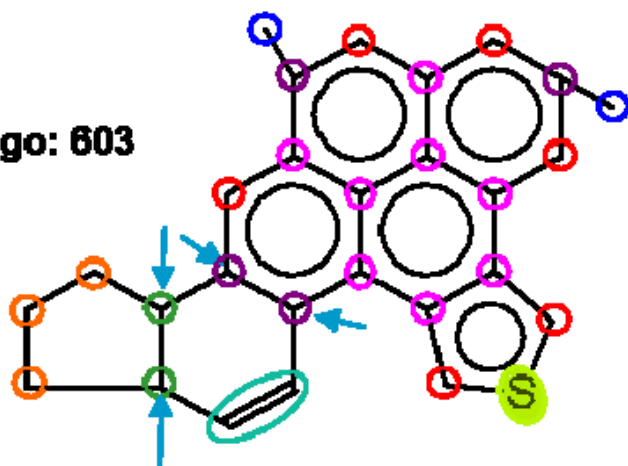
1 G31b1

1 G31b2

1 G34c

Rr5

Código: 603



G1: 2	G24a: 1
G2: 3	G25b: 1
G3: 2	G29b2: 1
G7: 1	G30b2: 1
G19: 6	G31a1: 1
G20: 4	G31a2: 1
G21: 8	G31b1: 1
G34c: 1	G31b2: 1

COMPUESTO=C₂₇H₂₂S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
75.02000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
201.9717

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -36.17160

B= 0.5051350

C= -3.0934997E-04

D= 7.3769002E-08

CP A 25°C

CP0= 88.89037

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 51.34032

B= 0.2589984

C= -7.3864285E-05

D= -3232468.

CP A 25°C

CP0= 85.63123

%ERROR= 0.6199872

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

3 G2

2 G3

1 G7

6 G19

4 G20

8 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a2

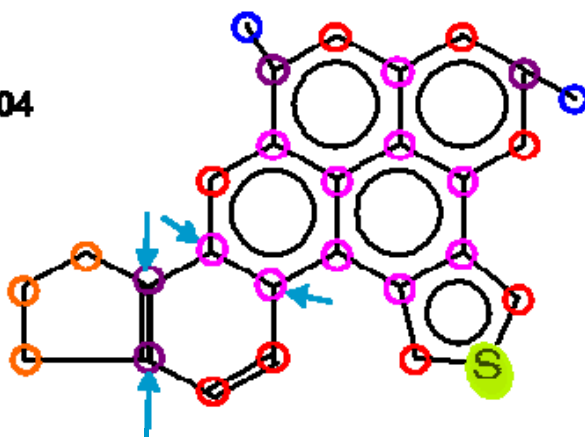
1 G31b1

1 G31b2

1 G34c

Rr6

Código: 604



G1: 2

G2: 3

G19: 8

G20: 4

G21: 10

G34c: 1

G24b: 1

G29b2: 1

G31a1: 2

G31a2: 1

G31b1: 1

G31b2: 1

COMPUESTO=C27H20S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
70.14000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
204.5997

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.38980

B= 0.4499840

C= -2.6082998E-04

D= 6.0303996E-08

CP A 25°C

CP0= 96.18513

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 55.13325

B= 0.2488021

C= -6.8339636E-05

D= -2641543.

CP A 25°C

CP0= 93.52282

%ERROR= 0.4971145

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

3 G2

8 G19

4 G20

10 G21

1 G24b

2 G31a1

1 G31a2

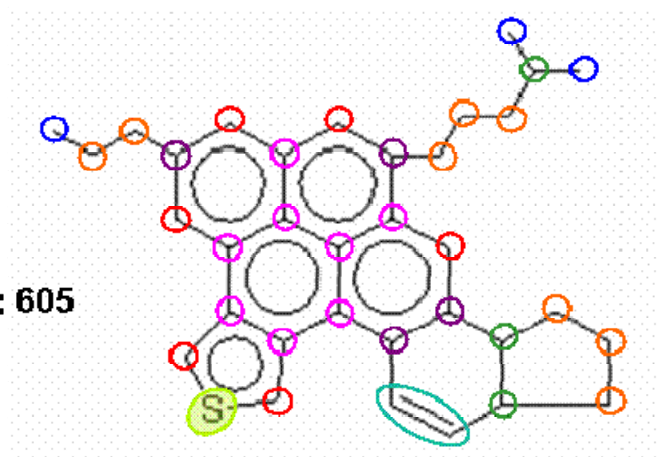
1 G31b1

1 G31b2

1 G34c

Rr7

Código: 605



G1: 3	G24a: 1
G2: 8	G25b: 1
G3: 3	G29b2: 1
G7: 1	G30b2: 1
G19: 6	G31a1: 1
G20: 4	G31a2: 1
G21: 8	G31b1: 1
G34c: 1	G31b2: 1

COMPUESTO=C34H36S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
38.77999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
261.8867

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -37.11360

B= 0.6675410

C= -4.0587995E-04

D= 9.5899004E-08

CP A 25°C

CP0= 128.3754

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 76.65363

B= 0.3475614

C= -9.9749013E-05

D= -4202329.

CP A 25°C

CP0= 124.1382

%ERROR= 0.5791074

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

8 G2

3 G3

1 G7

6 G19

4 G20

8 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

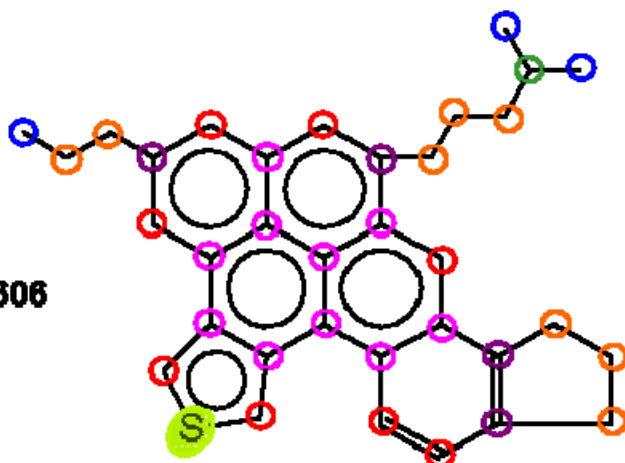
1 G31a2

1 G31b1

1 G31b2

1 G34c

Rr8
Código: 606



G1: 3	G25b: 1
G2: 8	G29b2: 1
G3: 1	G31a1: 2
G19: 8	G31a2: 1
G20: 4	G31b1: 1
G21: 10	G31b2: 1
G34c: 1	

COMPUESTO=C34H34S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
34.59999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
268.1371

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -17.33180

B= 0.6123900

C= -3.5736000E-04

D= 8.2433992E-08

CP A 25°C

CP0= 135.6701

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 80.45600

B= 0.3373483

C= -9.4216884E-05

D= -3611963.

CP A 25°C

CP0= 132.0286

%ERROR= 0.4911892

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

8 G2

1 G3

8 G19

4 G20

10 G21

1 G24b

1 G29b2

2 G31a1

1 G31a2

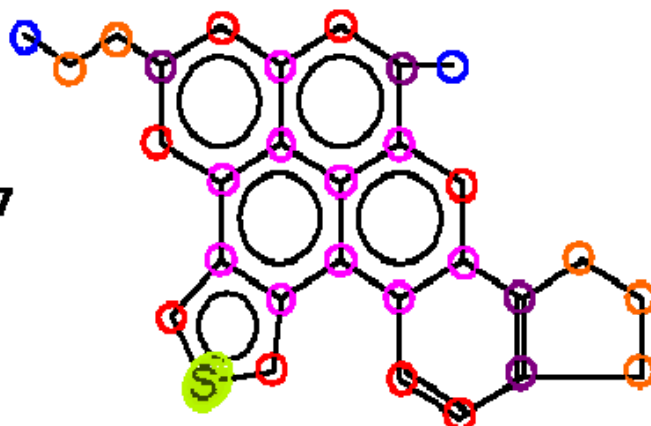
1 G31b1

1 G31b2

1 G34c

Rr9

Código: 607



G1: 2	G24b: 1
G2: 5	G29b2: 1
G19: 8	G31a1: 2
G20: 4	G31a2: 1
G21: 10	G31b1: 1
G34c: 1	G31b2: 1

COMPUESTO=C29H24S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
60.96000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
226.4791

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -15.60080

B= 0.4927100

C= -2.8476998E-04

D= 6.5495996E-08

CP A 25°C

CP0= 107.7224

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 62.09244

B= 0.2741845

C= -7.5696596E-05

D= -2869660.

CP A 25°C

CP0= 104.8296

%ERROR= 0.4865384

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

5 G2

8 G19

4 G20

10 G21

1 G24b

1 G29b2

2 G31a1

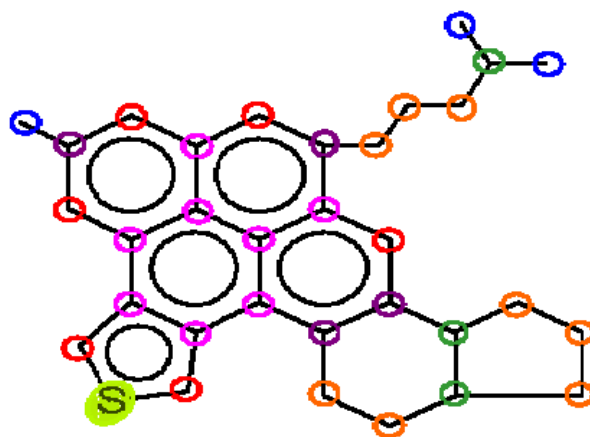
1 G31a2

1 G31b1

1 G31b2

1 G34c

Rr10
Código: 608



G1: 3 **G24a: 1**
G2: 8 **G25b: 1**
G3: 3 **G29b2: 1**
G19: 6 **G30b2: 1**
G20: 4 **G31a1: 1**
G21: 8 **G31a2: 1**
G34c: 1 **G31b1: 1**
 G31b2: 1

COMPUESTO=C32H34S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
15.37999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
255.3968

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -28.58890

B= 0.6258900

C= -3.7536997E-04

D= 8.8841006E-08

CP A 25°C

CP0= 127.0069

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 76.87212

B= 0.3293428

C= -9.1718161E-05

D= -3897134.

CP A 25°C

CP0= 123.0720

%ERROR= 0.5504624

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

8 G2

3 G3

6 G19

4 G20

8 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

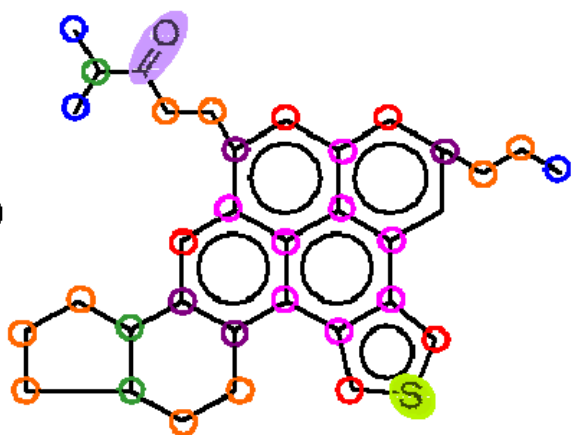
1 G31a2

1 G31b1

1 G31b2

1 G34c

Rr11
Código: 609



G1: 3	G24a: 1
G2: 9	G25b: 1
G3: 3	G29b2: 1
G19: 5	G30b2: 1
G20: 4	G31a1: 4
G21: 8	G31a2: 1
G32g: 1	
G34c: 1	

COMPUESTO=C34H36SO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 -15.02000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 238.2289

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.59650

B= 0.6788070

C= -4.1061995E-04

D= 9.7485000E-08

CP A 25°C

CP0= 135.8721

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 83.07555

B= 0.3534934

C= -9.9407313E-05

D= -4273190.

CP A 25°C

CP0= 131.5620

%ERROR= 0.5635829

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

9 G2

3 G3

6 G19

4 G20

8 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

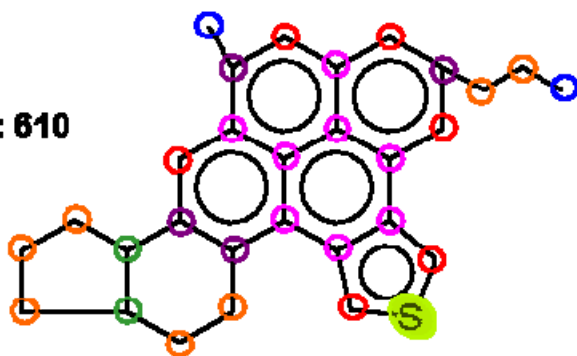
4 G31a1

1 G31a2

1 G32g

1 G34c

Rr12
Código: 610



G1: 2
G2: 7
G3: 2
G19: 6
G20: 4
G21: 8
G34c: 1
G24a: 1
G25b: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31a1: 4
G31a2: 1

COMPUESTO=C29H28S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
37.88000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
224.9654

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.47260

B= 0.5597270

C= -3.3363997E-04

D= 7.8649002E-08

CP A 25°C

CP0= 107.8361

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 61.84883

B= 0.2972718

C= -8.2560458E-05

D= -3447529.

CP A 25°C

CP0= 104.3586

%ERROR= 0.5595463

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

7 G2

2 G3

6 G19

4 G20

8 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

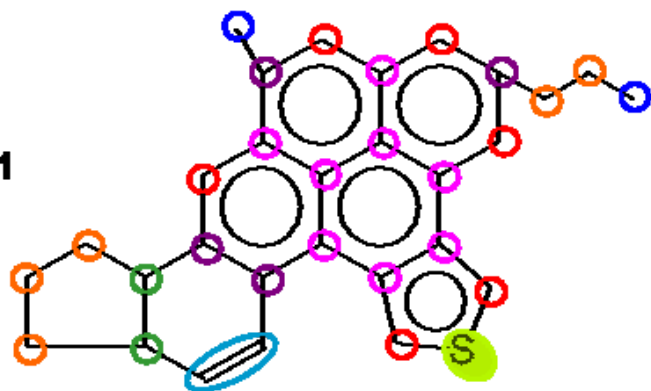
1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

1 G34c

Rr13
Código: 611



G1: 2 **G24a: 1**
G2: 5 **G25b: 1**
G3: 2 **G29b2: 1**
G7: 1 **G30b2: 1**
G19: 6 **G31a1: 4**
G20: 4 **G31a2: 1**
G21: 8
G34c: 1

COMPUESTO=C₂₉H₂₆S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
65.72000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
222.0064

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.38260

B= 0.5478610

C= -3.3328997E-04

D= 7.8961001E-08

CP A 25°C

CP0= 100.4276

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 58.31033

B= 0.2843619

C= -8.1213067E-05

D= -3461258.

CP A 25°C

CP0= 96.93635

%ERROR= 0.5967412

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

5 G2

2 G3

1 G7

6 G19

4 G20

8 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

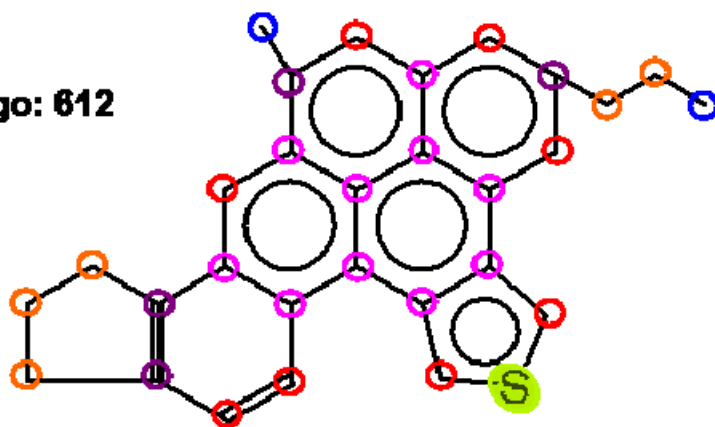
1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

1 G34c

Rr14
Código: 612



G1: 2
G2: 5
G19: 8
G20: 4
G21: 10
G34c: 1
G24b: 1
G29b2: 1
G31a1: 5
G31a2: 1

COMPUESTO=C₂₉H₂₄S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
61.54000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
228.2568

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -15.60080

B= 0.4927100

C= -2.8476998E-04

D= 6.5495996E-08

CP A 25°C

CP0= 107.7224

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 62.09244

B= 0.2741845

C= -7.5696596E-05

D= -2869660.

CP A 25°C

CP0= 104.8296

%ERROR= 0.4865384

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

5 G2

8 G19

4 G20

10 G21

1 G24b

1 G29b2

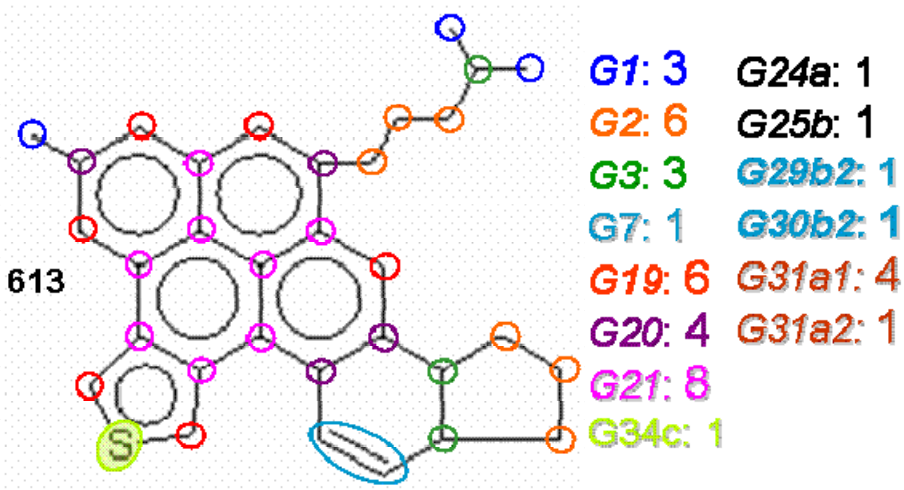
5 G31a1

1 G31a2

1 G34c

Rr15

Código: 613



COMPUESTO=C32H32S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
49.23999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
245.4072

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -37.90260

B= 0.6248150

C= -3.8193996E-04

D= 9.0707005E-08

CP A 25°C

CP0= 116.8381

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 69.72322

B= 0.3221271

C= -9.2368762E-05

D= -3975888.

CP A 25°C

CP0= 112.8280

%ERROR= 0.5958129

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

6 G2

3 G3

1 G7

6 G19

4 G20

8 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

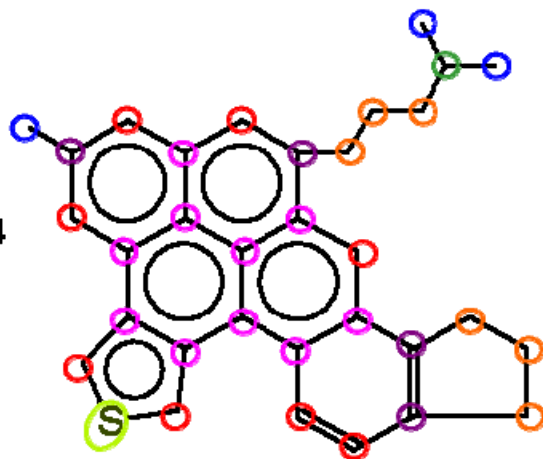
1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

1 G34c

Rr16
Código: 614



G1: 3 **G24b: 1**
G2: 6 **G29b2: 1**
G3: 1 **G31a1: 5**
G19: 8 **G31a2: 1**
G20: 4
G21: 10
G34c: 1

COMPUESTO=C32H30S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
45.06000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
251.6577

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -18.12080

B= 0.5696640

C= -3.3342000E-04

D= 7.7241992E-08

CP A 25°C

CP0= 124.1329

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 73.51073

B= 0.3119390

C= -8.6847227E-05

D= -3384564.

CP A 25°C

CP0= 120.7208

%ERROR= 0.4999353

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

6 G2

1 G3

8 G19

4 G20

10 G21

1 G24b

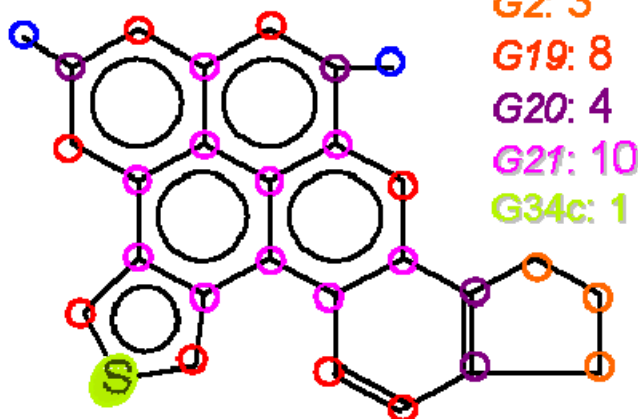
1 G29b2

5 G31a1

1 G31a2

1 G34c

Rr17
Código: 615



G1: 2 **G24b: 1**
G2: 3 **G29b2: 1**
G19: 8 **G31a1: 5**
G20: 4 **G31a2: 1**
G21: 10
G34c: 1

COMPUESTO=C₂₇H₂₀S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
71.42001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
209.9997

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.38980

B= 0.4499840

C= -2.6082998E-04

D= 6.0303996E-08

CP A 25°C

CP0= 96.18513

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 55.13325

B= 0.2488021

C= -6.8339636E-05

D= -2641543.

CP A 25°C

CP0= 93.52282

%ERROR= 0.4971145

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

3 G2

8 G19

4 G20

10 G21

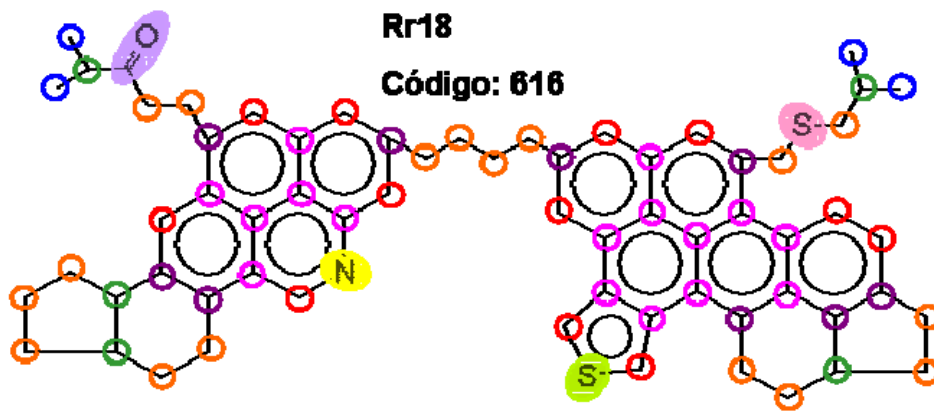
1 G24b

1 G29b2

5 G31a1

1 G31a2

1 G34c



G1: 4	G24a: 1
G2: 17	G24b: 1
G3: 5	G25b: 2
G19: 12	G29a: 1
G20: 9	G29b2: 1
G21: 16	G30b2: 3
G32g: 1	G31a1: 6
G33j: 1	G31a2: 2
G34b: 1	G31b2: 1
G34c: 1	

COMPUESTO=C64H63NOS2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
29.30999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
389.1484

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -57.67889

B= 1.247696

C= -7.5354998E-04

D= 1.8198999E-07

CP A 25°C

CP0= 252.1594

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 158.2758

B= 0.6403638

C= -1.7255388E-04

D= -7978230.

CP A 25°C

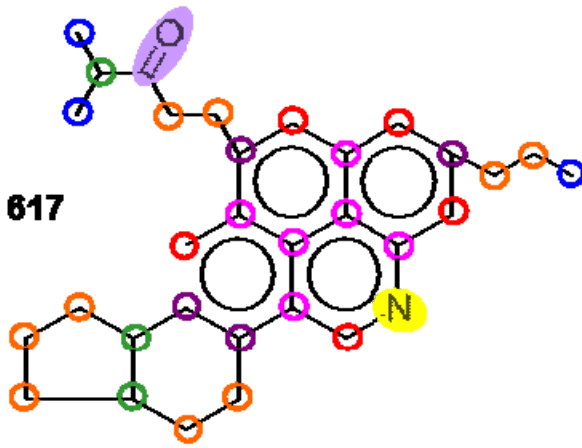
CP0= 244.1109

%ERROR= 0.5664319

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1
17 G2
5 G3
12 G19
9 G20
16 G21
1 G24a
1 G24b
2 G25b
1 G29a
1 G29b2
3 G30b2
6 G31a1
2 G31a2
1 G31b2
1 G32g
1 G33j
1 G34b
1 G34c

Rr19
Código: 617



G1: 3 **G24a: 1**
G2: 9 **G25b: 1**
G3: 3 **G29b2: 1**
G19: 5 **G30b2: 1**
G20: 4 **G31a1: 3**
G21: 6 **G31a2: 1**
G32g: 1
G33j: 1

COMPUESTO=C₃₁H₃₅NO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-35.99000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
132.4665

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.01970

B= 0.6390570

C= -3.8678999E-04

D= 9.3618006E-08

CP A 25°C

CP0= 125.6133

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 78.08845

B= 0.3266048

C= -8.7903543E-05

D= -4105201.

CP A 25°C

CP0= 121.4705

%ERROR= 0.5784514

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

9 G2

3 G3

5 G19

4 G20

6 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

3 G31a1

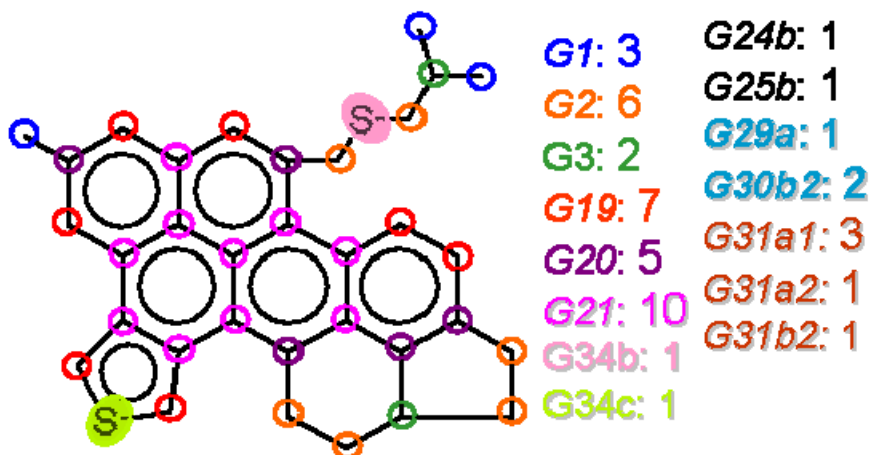
1 G31a2

1 G32g

1 G33j

Rr20

Código: 618



COMPUESTO=C33H30S2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
54.68000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
295.1415

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -24.23080

B= 0.6087790

C= -3.5985999E-04

D= 8.5449997E-08

CP A 25°C

CP0= 127.5522

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 77.12971

B= 0.3236837

C= -8.7093569E-05

D= -3743846.

CP A 25°C

CP0= 123.7778

%ERROR= 0.5293775

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

6 G2

2 G3

7 G19

5 G20

10 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

2 G30b2

3 G31a1

1 G31a2

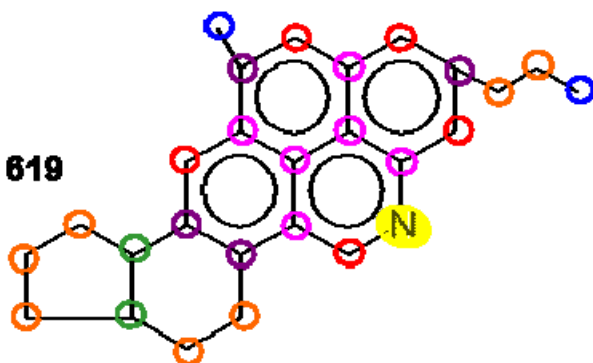
1 G31b2

1 G34b

1 G34c

Rr21

Código: 619



G1: 2
G2: 7
G3: 2
G19: 5
G20: 4
G21: 6
G33j: 1

G24a: 1
G25b: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31a1: 3
G31a2: 1

COMPUESTO=C26H27N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
16.90999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
119.2029

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.89580

B= 0.5199770

C= -3.0980998E-04

D= 7.4782001E-08

CP A 25°C

CP0= 97.57727

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 56.82709

B= 0.2704434

C= -7.1082795E-05

D= -3277366.

CP A 25°C

CP0= 94.27249

%ERROR= 0.5778236

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

7 G2

2 G3

5 G19

4 G20

6 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

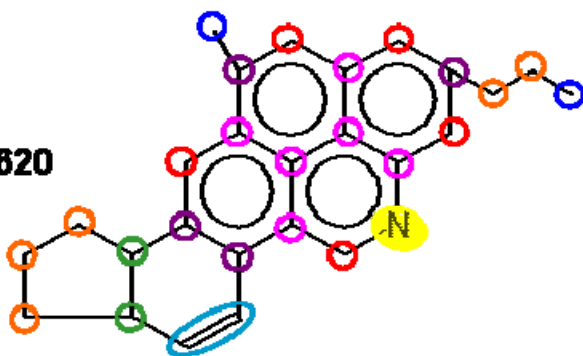
3 G31a1

1 G31a2

1 G33j

Rr22

Código: 620



G1: 2	G24a: 1
G2: 5	G25b: 1
G3: 2	G29b2: 1
G7: 1	G30b2: 1
G19: 5	G31a1: 3
G20: 4	G31a2: 1
G21: 6	
G33j: 1	

COMPUESTO=C26H25N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
44.75000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
116.2440

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.80580

B= 0.5081111

C= -3.0945998E-04

D= 7.5094000E-08

CP A 25°C

CP0= 90.16881

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 53.32912

B= 0.2574622

C= -6.9704111E-05

D= -3293574.

CP A 25°C

CP0= 86.84442

%ERROR= 0.6199262

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

5 G2

2 G3

1 G7

5 G19

4 G20

6 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

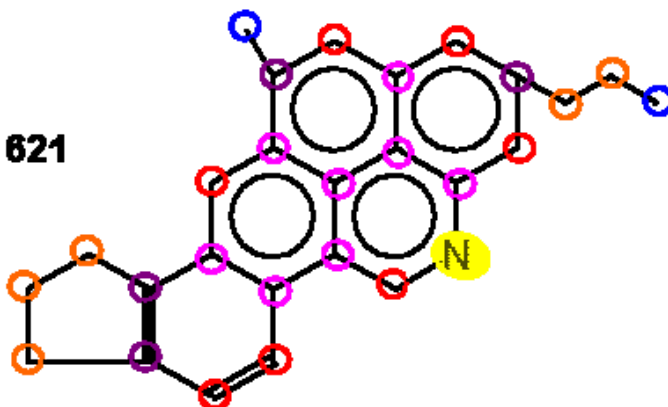
3 G31a1

1 G31a2

1 G33j

Rr23

Código: 621



G1: 2 **G24b: 1**
G2: 5 **G29b2: 1**
G19: 7 **G31a1: 4**
G20: 4 **G31a2: 1**
G21: 8
G33j: 1

COMPUESTO=C₂₆H₂₃N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
40.57000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
122.4943

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.02400

B= 0.4529600

C= -2.6094000E-04

D= 6.1629002E-08

CP A 25°C

CP0= 97.46357

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 57.11625

B= 0.2472767

C= -6.4184416E-05

D= -2702313.

CP A 25°C

CP0= 94.73676

%ERROR= 0.4991151

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

5 G2

7 G19

4 G20

8 G21

1 G24b

1 G29b2

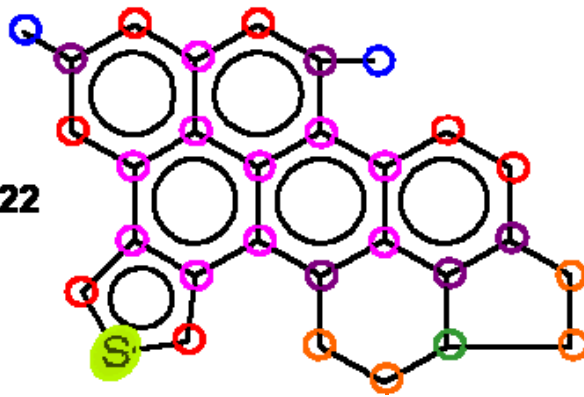
4 G31a1

1 G31a2

1 G33j

Rr24

Código: 822



G1: 2

G2: 4

G3: 1

G19: 7

G20: 5

G21: 10

G34c: 1

G24b: 1

G25b: 1

G29a: 1

G30b2: 2

G31a1: 3

G31a2: 1

G31b2: 1

COMPUESTO=C₂₉H₂₂N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
64.93000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
220.6124

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -26.33090

B= 0.5093350

C= -2.9897998E-04

D= 7.1179997E-08

CP A 25°C

CP0= 100.8365

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 58.13285

B= 0.2717965

C= -7.1741400E-05

D= -3120439.

CP A 25°C

CP0= 97.68848

%ERROR= 0.5420578

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

4 G2

1 G3

7 G19

5 G20

10 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

2 G30b2

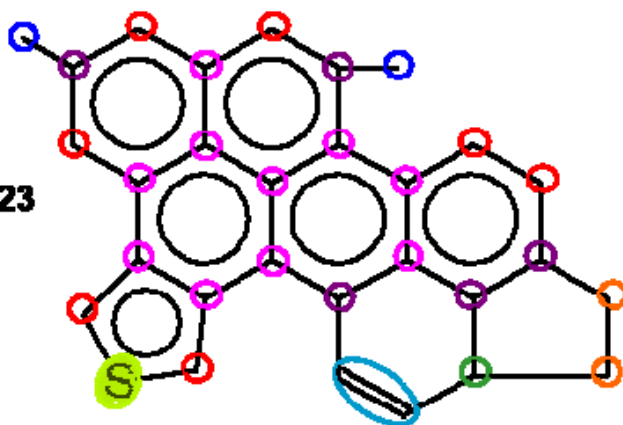
3 G31a1

1 G31a2

1 G31b2

1 G34c

Rr25
Código: 623



G1: 2 **G24b: 1**
G2: 2 **G25b: 1**
G3: 1 **G29a: 1**
G7: 1 **G30b2: 2**
G19: 7 **G31a1: 3**
G20: 5 **G31a2: 1**
G21: 10 **G31b2: 1**
G34c: 1

COMPUESTO=C₂₉H₂₀S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
92.97000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
217.6869

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -30.24090

B= 0.4974690

C= -2.9862998E-04

D= 7.1491996E-08

CP A 25°C

CP0= 93.42803

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 54.62000

B= 0.2588405

C= -7.0373389E-05

D= -3135676.

CP A 25°C

CP0= 90.26301

%ERROR= 0.5809987

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

2 G2

1 G3

1 G7

7 G19

5 G20

10 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

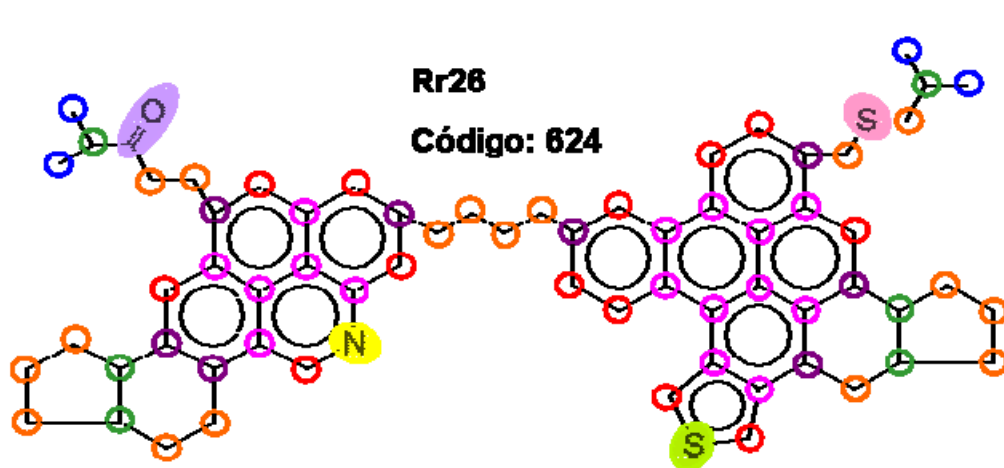
1 G30b2

3 G31a1

1 G31a2

1 G31b2

1 G34c



G1: 4	G24a: 2
G2: 17	G25b: 2
G3: 6	G29b2: 2
G19: 13	G30a: 1
G20: 8	G30b2: 2
G21: 15	G31a1: 6
G32g: 1	G31a2: 1
G33j: 1	G31a3: 1
G34b: 1	G31b2: 1
G34c: 1	

COMPUESTO=C64H65OS2N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
27.80001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
385.8847

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -66.79660
B= 1.284463
C= -7.8550994E-04
D= 1.8976300E-07
CP A 25°C
CP0= 251.3687

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

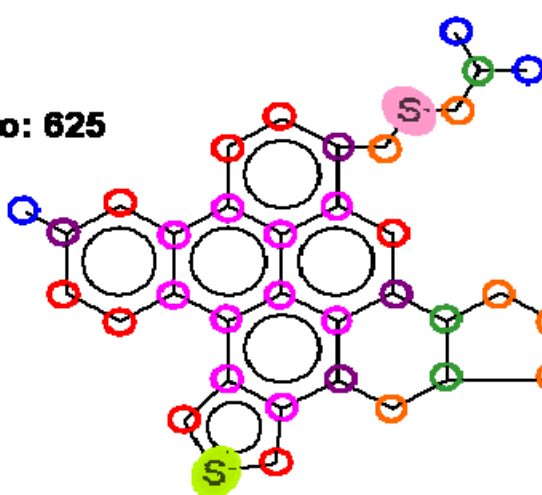
A= 158.4002
B= 0.6511586
C= -1.7968462E-04
D= -8320130.
CP A 25°C
CP0= 242.9737
%ERROR= 0.5886645

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1
17 G2
6 G3
13 G19
8 G20
15 G21
2 G24a
2 G25b
2 G29b2
1 G30a
2 G30b2
6 G31a1
1 G31a2
1 G31a3
1 G31b2
1 G32g
1 G33j
1 G34b
1 G34c

Rr27

Código: 625



G1: 3

G2: 6

G3: 3

G19: 8

G20: 4

G21: 10

G34b: 1

G34c: 1

G24a: 1

G25b: 1

G29b2: 1

G30a: 1

G30b2: 1

G31a1: 4

G31b2: 1

COMPUESTO=C34H32S2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
58.00999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
291.7186

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.22660

B= 0.6577160

C= -4.0037002E-04

D= 9.5345001E-08

CP A 25°C

CP0= 129.8081

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 79.90966

B= 0.3395378

C= -9.5986550E-05

D= -4179611.

CP A 25°C

CP0= 125.5920

%ERROR= 0.5752237

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

6 G2

3 G3

8 G19

4 G20

10 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

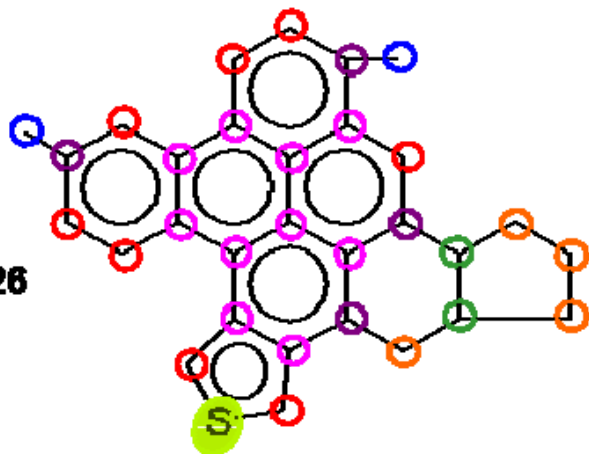
4 G31a1

1 G31b2

1 G34b

1 G34c

Rr28
Código: 626



G1: 2	G24a: 1
G2: 4	G25b: 1
G3: 2	G29b2: 1
G19: 8	G30a: 1
G20: 4	G30b2: 1
G21: 10	G31a1: 4
G34c: 1	G31b2: 1

COMPUESTO=C30H24S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
68.25999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
217.1895

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.32670

B= 0.5582720

C= -3.3948998E-04

D= 8.1074994E-08

CP A 25°C

CP0= 103.0924

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 60.89254

B= 0.2876863

C= -8.0650039E-05

D= -3554972.

CP A 25°C

CP0= 99.50554

%ERROR= 0.5975817

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

4 G2

2 G3

8 G19

4 G20

10 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

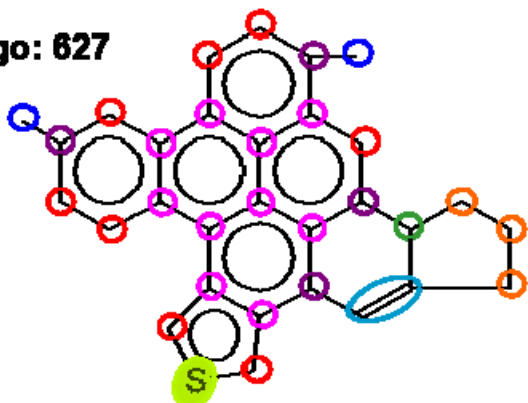
4 G31a1

1 G31b2

1 G34c

Rr29

Código: 627



G1: 2

G2: 3

G3: 1

G9: 1

G19: 8

G20: 4

G21: 10

G34c: 1

G24a: 1

G25b: 1

G29b2: 1

G30a: 1

G30b2: 1

G31a1: 4

G31b2: 1

COMPUESTO=C30H22S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
92.73001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
281.3035

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.66940

B= 0.5365930

C= -3.2306998E-04

D= 7.6527002E-08

CP A 25°C

CP0= 99.62523

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 57.13328

B= 0.2812208

C= -7.8765632E-05

D= -3354466.

CP A 25°C

CP0= 96.24168

%ERROR= 0.5826115

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

3 G2

1 G3

1 G9

8 G19

4 G20

10 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

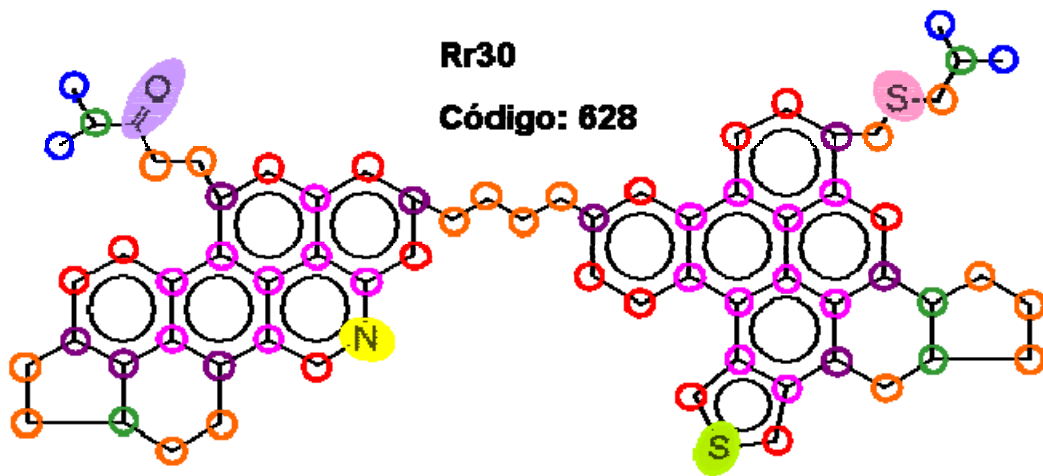
1 G30a

1 G30b2

4 G31a1

1 G31b2

1 G34c



G1: 4	G24a: 1
G2: 16	G24b: 1
G3: 5	G25b: 2
G19: 14	G29a: 1
G20: 9	G29b2: 2
G21: 18	G30a: 1
G32g: 1	G30b2: 2
G33j: 1	G31a1: 1
G34b: 1	G31a2: 1
G34c: 1	G31b2: 1

COMPUESTO=C67H63NOS2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
50.71000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
403.2856

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -60.74400

B= 1.288967

C= -7.8334002E-04

D= 1.8960800E-07

CP A 25°C

CP0= 258.9530

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 164.2888

B= 0.6561441

C= -1.7799351E-04

D= -8314480.

CP A 25°C

CP0= 250.5626

%ERROR= 0.5750473

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

16 G2

5 G3

14 G19

9 G20

18 G21

1 G24a

1 G24b

2 G25b

1 G29a

2 G29b2

1 G30a

2 G30b2

6 G31a1

1 G31a2

2 G31b2

1 G32g

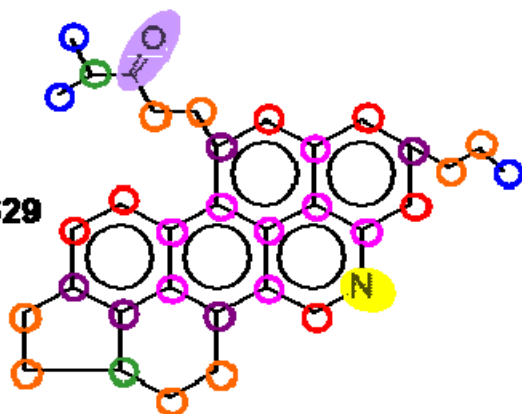
1 G33j

1 G34b

1 G34c

Rr31

Código: 629



G1: 3

G2: 8

G3: 2

G19: 6

G20: 5

G21: 8

G32g: 1

G33j: 1

G24b: 1

G25b: 1

G29a: 1

G29b2: 1

G30b2: 1

G31a1: 2

G31a2: 1

G31b2: 1

COMPUESTO=C33H33NO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-17.92001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
150.0265

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -27.08900

B= 0.6313910

C= -3.7606998E-04

D= 9.1341008E-08

CP A 25°C

CP0= 130.1509

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 81.31857

B= 0.3265346

C= -8.4451291E-05

D= -4005414.

CP A 25°C

CP0= 126.1091

%ERROR= 0.5504596

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

8 G2

2 G3

6 G19

5 G20

8 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

2 G31a1

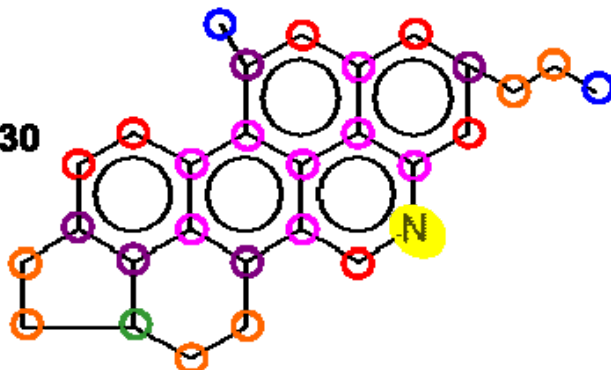
1 G31a2

1 G31b2

1 G32g

1 G33j

Rr32
Código: 630



G1: 2
G2: 6
G3: 1
G19: 6
G20: 5
G21: 8
G33j: 1
G24b: 1
G25b: 1
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31a1: 2
G31a2: 1
G31b2: 1

COMPUESTO=C28H25N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
34.98000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
136.7629

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -25.96510

B= 0.5123110

C= -2.9909000E-04

D= 7.2505003E-08

CP A 25°C

CP0= 102.1149

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 60.09713

B= 0.2703033

C= -6.7600056E-05

D= -3180046.

CP A 25°C

CP0= 98.90516

%ERROR= 0.5431753

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

6 G2

1 G3

6 G19

5 G20

8 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

2 G31a1

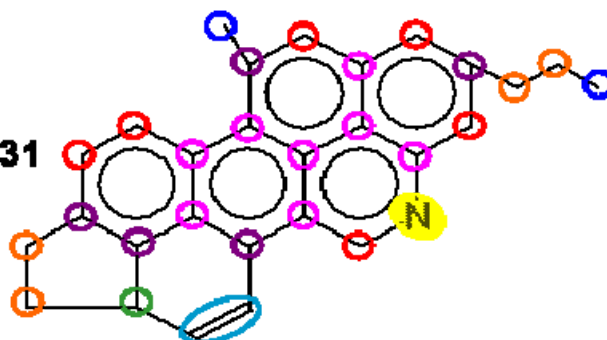
1 G31a2

1 G31b2

1 G33j

Rr33

Código: 631



G1: 2	G24b: 1
G2: 4	G25b: 1
G3: 1	G29a: 1
G7: 1	G29b2: 1
G19: 6	G30b2: 1
G20: 5	G31a1: 2
G21: 8	G31a2: 1
G33j: 1	G31b2: 1

COMPUESTO=C28H23N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
62.82000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
133.8039

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.87510

B= 0.5004450

C= -2.9873999E-04

D= 7.2817009E-08

CP A 25°C

CP0= 94.70647

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 56.53959

B= 0.2574274

C= -6.6267734E-05

D= -3192641.

CP A 25°C

CP0= 91.48540

%ERROR= 0.5812748

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

4 G2

1 G3

1 G7

6 G19

5 G20

8 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

2 G31a1

1 G31a2

1 G31b2

1 G33j

COMPUESTO=C5H12

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-36.98000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
80.11748

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -1.302600

B= 0.1198200

C= -6.5689994E-05

D= 1.4016000E-08

CP A 25°C

CP0= 28.95380

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 15.31865

B= 7.3065013E-02

C= -2.0952813E-05

D= -613819.3

CP A 25°C

CP0= 28.33530

%ERROR= 0.3984551

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

1 G2

1 G3

FICHA DEL COMPUESTO

DEBE SER INTRODUCIDA EN EL ARCHIVO LISTCOMP.XLS

844

C5H12

No

(G)

C5H12

IDEM

QBTHERM

COMPUESTO=C4H10S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-22.13000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
115.5125

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 0.6483999

B= 0.1117340

C= -6.9059999E-05

D= 1.6701000E-08

CP A 25°C
CP0= 28.26555

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 20.46940
B= 5.5994559E-02
C= -1.5740414E-05
D= -732349.6

CP A 25°C
CP0= 27.52645
%ERROR= 0.5150575

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
1 G2
1 G3
1 G34a

FICHA DEL COMPUESTO

DEBE SER INTRODUCIDA EN EL ARCHIVO LISTCOMP.XLS

845
C4H10S
No
(G)
SH1
IDEM
QBTHERM

COMPUESTO=C5H12S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-27.07000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
124.6411

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 1.042900
B= 0.1330970
C= -8.1029997E-05
D= 1.9297000E-08

CP A 25°C
CP0= 34.03417

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 23.94387
B= 6.8694770E-02
C= -1.9422876E-05

D= -846101.5
CP A 25°C
CP0= 33.18050
%ERROR= 0.4938742

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
2 G2
1 G3
1 G34a

COMPUESTO=C5H10O

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-63.52000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
51.72308

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -0.6955001
B= 0.1192200
C= -7.0080001E-05
D= 1.5914001E-08
CP A 25°C
CP0= 29.04207

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 18.19249
B= 6.6105030E-02
C= -1.9271927E-05
D= -697878.8
CP A 25°C
CP0= 28.33782
%ERROR= 0.4640739

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
1 G3
1 G32g

FICHA DEL COMPUESTO

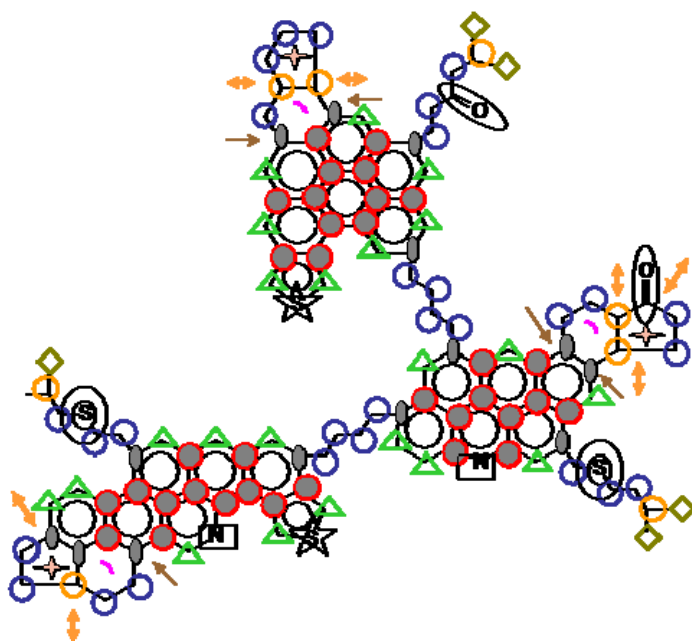
DEBE SER INTRODUCIDA EN EL ARCHIVO LISTCOMP.XLS

856
C5H10O
No
(G)
I36A
IDEM
QBTHERM

ASFALTENOS

As1 Codigo: 633

PM: 1674



G1: 6	G31a2: 2
G2: 29	G31b1: 4
G3: 8	G31b2: 1
G19: 22	G32g: 2 0
G20: 14	G33j: 2 □
G21: 34 ●	G34b: 2 ⊙
G24a: 3 ✦	G34c: 2 ☆
G25b: 3	
G29a: 1 ↓	
G29b2: 3 †	
G30b2: 3 ↓	
G31a1: 10	

COMPUESTO=C115H106N2O2S4

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
97.88003

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
752.4138

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -94.43099
B= 2.197960
C= -1.3387500E-03
D= 3.2070997E-07
CP A 25°C
CP0= 450.3846

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 286.1590
B= 1.127652
C= -3.1487754E-04
D= -1.4061242E+07
CP A 25°C
CP0= 436.1970

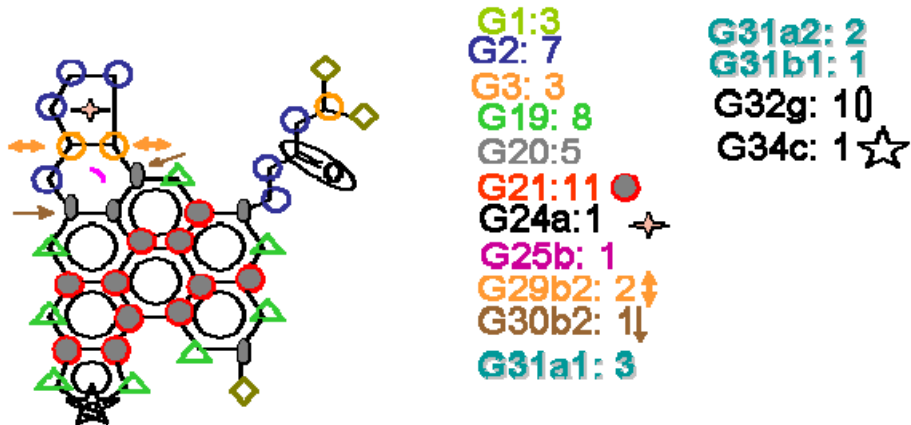
%ERROR= 0.5660996

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

6 G1
29 G2
8 G3
22 G19
14 G20
34 G21
3 G24a
3 G25b
1 G29a
3 G29b2
1 G30a
1 G30b2
10 G31a1
2 G31a2
4 G31b1
1 G31b2
2 G32g
2 G33j
2 G34b
2 G34c

As2

Codigo:634 C38H34OS PM:538



COMPUESTO=C38H34OS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
21.62999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
238.0653

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL
A= -37.32250
B= 0.7260440

C= -4.4388996E-04
D= 1.0728800E-07
CP A 25°C
CP0= 142.5321

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 89.97081
B= 0.3680358
C= -1.0139016E-04
D= -4702256.
CP A 25°C
CP0= 137.7901
%ERROR= 0.5874969

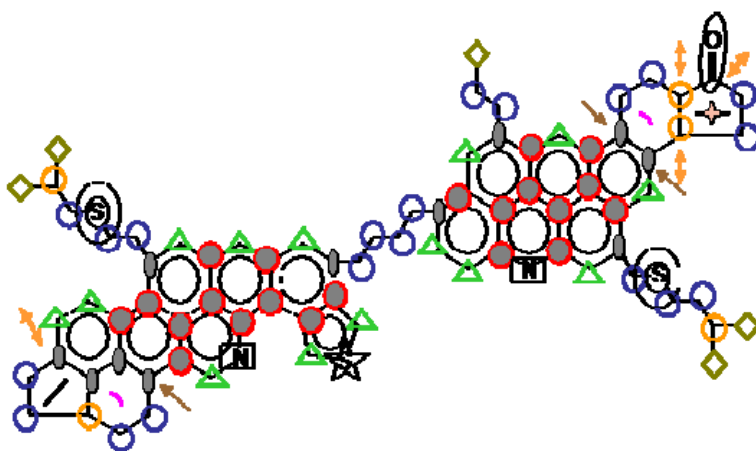
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
7 G2
3 G3
8 G19
5 G20
11 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30a
1 G30b2
3 G31a1
2 G31a2
1 G31b1
1 G32g
1 G34c

As3

Codigo:635

PM: 1138



G2: 20
G3: 5
G19: 14
G20: 11
G21: 21 ●
G24a: 1 ✦
G24b: 1 ✦
G25b: 2
G29a: 2 ↓
G29b2: 2 ↓
G30b2: 2 ↓
G31a1: 10
G31a2: 1
G31b1: 2
G32g: 2 0
G33j: 2 □
G34b: 2 ⊙
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C77H74N2O1S3

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
62.89000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
507.8689

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -54.29680

B= 1.467243

C= -8.7774004E-04

D= 2.1002000E-07

CP A 25°C

CP0= 310.7027

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 194.8733

B= 0.7664506

C= -2.0729442E-04

D= -9204238.

CP A 25°C

CP0= 301.4210

%ERROR= 0.5393141

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

5 G1

20 G2

5 G3

14 G19

11 G20

21 G21

1 G24a

1 G24b

2 G25b

2 G29a

2 G29b2

2 G30b2

10 G31a1

1 G31a2

2 G31b1

1 G32g

2 G33j

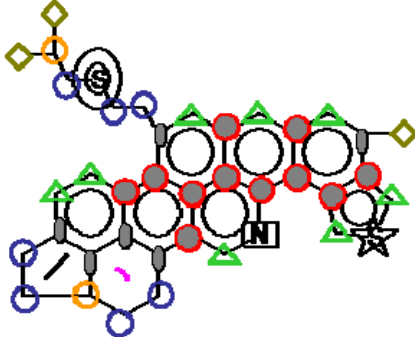
2 G34b

1 G34c

As 4

Codigo : 636

PM:555



G1:3
G2: 7
G3: 2
G19: 8
G20:6
G21:11 ●
G24b:1 /
G25b: 1
G29a: 1 ↓
G29b2: 1 ↓
G30b2: 1 ↓
G31a1: 4

G31a2: 1
G31b1: 1
G33j:1 □
G34b: 1 ⊙
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C37H33NS2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
66.24000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
248.1469

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -24.11410

B= 0.6800540

C= -3.9789997E-04

D= 9.3093000E-08

CP A 25°C

CP0= 145.7406

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 86.36999

B= 0.3693556

C= -1.0069028E-04

D= -4082094.

CP A 25°C

CP0= 141.6214

%ERROR= 0.5085821

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

7 G2

2 G3

8 G19

6 G20

11 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

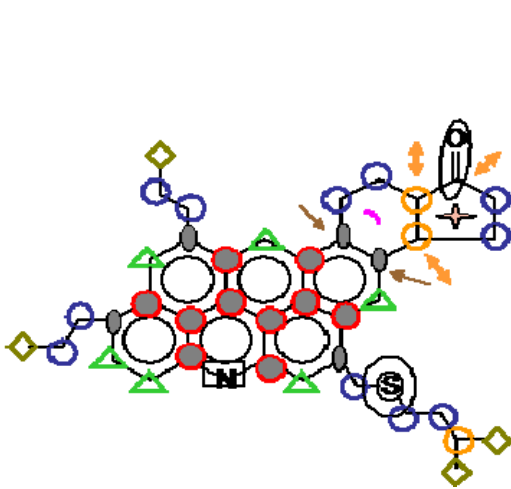
4 G31a1

1 G31a2
 1 G31b1
 1 G33j
 1 G34b
 1 G34c

As5

Código: 637

PM:585



G1:4
 G2: 11
 G3: 3
 G19: 6
 G20:5
 G21:10 ●
 G24a:1 ✦
 G25b: 1
 G29a: 1 ↓
 G29b2: 1 †
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 5

G31b1: 1
 G32g: 1 0
 G33j:1 □
 G34b: 1 ⊙

COMPUESTO=C40H43NOS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 -14.91000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 221.4720

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.75430
 B= 0.7873290
 C= -4.7293998E-04
 D= 1.1400500E-07
 CP A 25°C
 CP0= 165.9681

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 105.5597
 B= 0.4068176
 C= -1.0895835E-04
 D= -4999802.
 CP A 25°C
 CP0= 160.9218
 %ERROR= 0.5474989

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

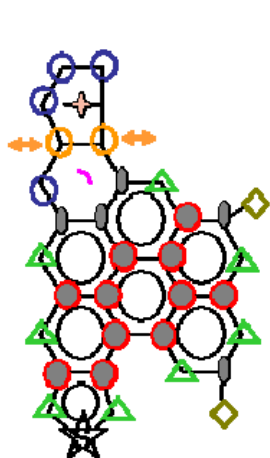
4 G1
 11 G2
 3 G3
 6 G19

5 G20
 10 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29a
 1 G29b2
 1 G30b2
 5 G31a1
 1 G31b1
 1 G32g
 1 G33j
 1 G34b

As6

Codigo: 638

PM:440



G1:2
 G2: 4
 G3: 2
 G19: 8
 G20:5
 G21:11 ●
 G24a:1 ✦
 G25b: 1
 G29b2: 1 †
 G30b2: 1 †
 G30a: 1 †
 G31a1: 1
 G31a2: 1
 G31b1: 3
 G31b2: 1
 G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C32H24S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 80.81001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 213.1577

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -36.59310
 B= 0.5856010
 C= -3.5493996E-04
 D= 8.5855994E-08
 CP A 25°C
 CP0= 108.7275

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 65.30745
 B= 0.2990464
 C= -8.0830876E-05
 D= -3765079.
 CP A 25°C

CP0= 104.9278
%ERROR= 0.5984111

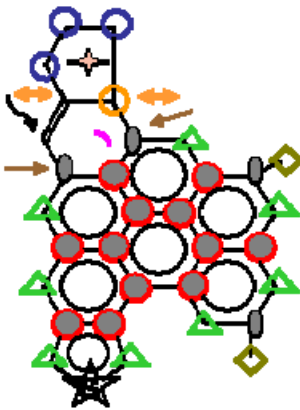
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
4 G2
2 G3
8 G19
5 G20
11 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30a
1 G30b2
1 G31a1
1 G31a2
3 G31b1
1 G34c

As7

Codigo: 639

PM: 438



G1:2
G2: 3
G3: 1
G9:1 ↘
G19: 8
G20:4
G21:12 ●
G24a: 1 ✦
G25b: 1
G29b2: 1 †
G30a: 1 †
G30b2: 1 ↓
G31a1: 1

G31a2: 1
G31b1: 1
G31b2: 2
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C32H22S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
101.4900

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
279.7108

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.42560

B= 0.5609330

C= -3.4016997E-04

D= 8.0771002E-08

CP A 25°C

CP0= 105.7184

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 62.37694

B= 0.2914611

C= -8.2344457E-05

D= -3538312.

CP A 25°C

CP0= 102.1522

%ERROR= 0.5853752

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

3 G2

1 G3

1 G9

8 G19

4 G20

12 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a2

1 G31b1

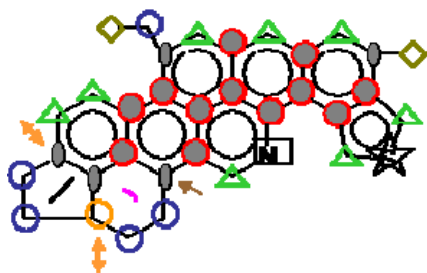
2 G31b2

1 G34c

As8

Codigo:640

PM:479



G1:2
G2: 5
G3: 1
G19: 8
G20:5
G21:12 ●
G24b:1 /
G25b: 1
G29a: 1 ↓
G29b2: 1 ↑
G30b2: 1 ↓
G31a1: 4

G31a2: 1
G31b1: 1
G33j: 1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C33H25NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
75.42001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
179.7464

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -24.70400

B= 0.5776210

C= -3.3866998E-04

D= 7.8286000E-08

CP A 25°C

CP0= 119.4830

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 68.19770

B= 0.3163577

C= -8.8740773E-05

D= -3432277.

CP A 25°C

CP0= 116.0201

%ERROR= 0.5157840

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

5 G2

1 G3

8 G19

5 G20

12 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

1 G31b1

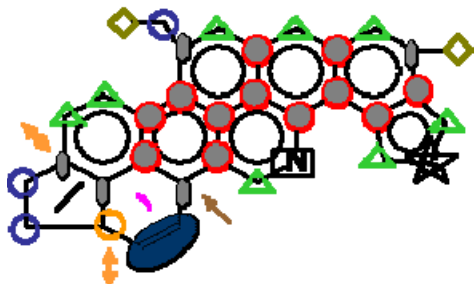
1 G33j

1 G34c

As9

Codigo: 641

PM: 477



G1:2
G2: 3
G3: 1
G7: 1
G19: 8
G20:4
G21:13
G24b:1
G25b: 1
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31a1: 2

G31b1: 2
G31b2: 1
G33j: 1
G34c: 2

COMPUESTO=C33H23NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
102.1700

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
178.5558

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -27.10380

B= 0.5627660

C= -3.3996996E-04

D= 7.8060999E-08

CP A 25°C

CP0= 112.5327

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 65.50561

B= 0.3022982

C= -9.0778631E-05

D= -3420882.

CP A 25°C

CP0= 109.0832

%ERROR= 0.5485007

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

3 G2

1 G3

1 G7

8 G19

4 G20

13 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

2 G31a1

2 G31b1

1 G31b2

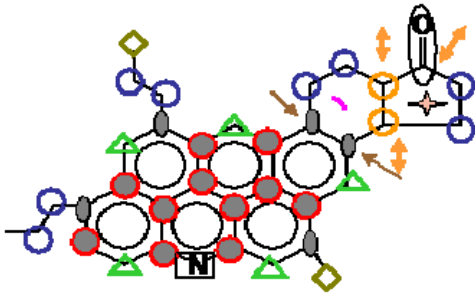
1 G33j

1 G34c

As10

Codigo:642

PM: 483



G1:3
G2: 8
G3: 2
G19: 6
G20:5
G21:10 ●
G24a:1 ✦
G25b: 1
G29a: 1↓
G29b2: 1↑
G30b2: 1 ↓
G31a1: 1

G31a3: 1
G31b1: 1
G31b2: 2
G32g: 1 0
G33j:1 □

COMPUESTO=C35H33NO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-2.020008

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
133.2865

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.24890

B= 0.6665220

C= -4.0008998E-04

D= 9.7139001E-08

CP A 25°C

CP0= 133.4838

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 82.97584

B= 0.3424285

C= -9.0010901E-05

D= -4255838.

CP A 25°C

CP0= 129.1938

%ERROR= 0.5660393

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

8 G2

2 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

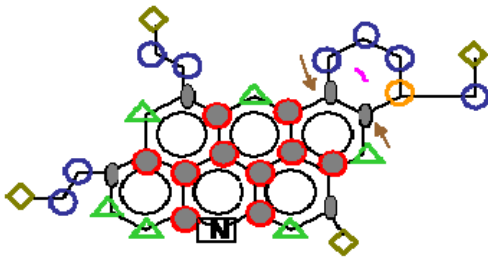
1 G31a1

1 G31a3
 1 G31b1
 2 G31b2
 1 G32g
 1 G33j

As11

Codigo:643

PM: 457



G1:4
 G2: 8
 G3: 1
 G19: 6
 G20:5
 G21:10 ●
 G25b: 1
 G30a: 1 ↑
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 4

G31a3: 1
 G31b2: 1
 G33j: 1 □

COMPUESTO=C34H35N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 14.93999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 165.3756

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.83360
 B= 0.6144250
 C= -3.5371998E-04
 D= 8.3620002E-08
 CP A 25°C
 CP0= 137.1301

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 82.38574
 B= 0.3353818
 C= -8.6771106E-05
 D= -3665379.
 CP A 25°C
 CP0= 133.4330
 %ERROR= 0.4884864

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

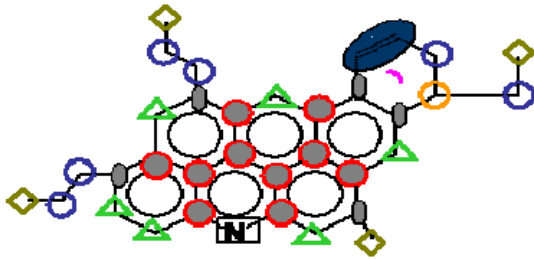
4 G1
 8 G2
 1 G3
 6 G19
 5 G20
 10 G21
 1 G25b

1 G30a
 1 G30b2
 4 G31a1
 1 G31a3
 1 G31b2
 1 G33j

As12

Codigo:644

PM: 455



G1:4
 G2: 6
 G3: 8
 G19: 6
 G20:5
 G21:10 ●
 G7:1 ●
 G25b: 1
 G30a: 1 ↑
 G29b2: 3↑
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 1

G31a3: 1
 G31b1: 1
 G31b2: 2
 G33j:1 □

COMPUESTO=C34H33N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 42.20000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 160.6390

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL
 A= -20.74360
 B= 0.6025590
 C= -3.5336998E-04
 D= 8.3932001E-08
 CP A 25°C
 CP0= 129.7216

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL
 A= 78.81664
 B= 0.3225267
 C= -8.5448097E-05
 D= -3677311.
 CP A 25°C
 CP0= 126.0146
 %ERROR= 0.5149211

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

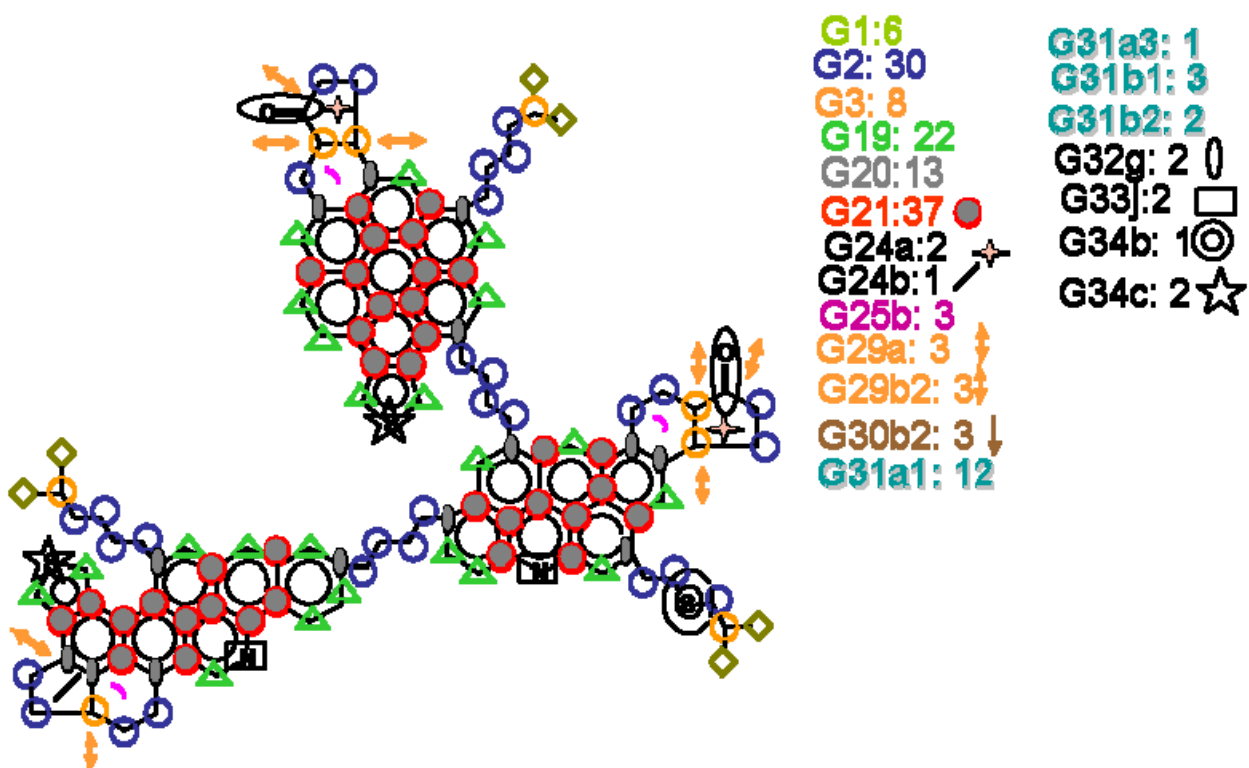
4 G1
 6 G2
 1 G3

1 G7
 6 G19
 5 G20
 10 G21
 1 G25b
 1 G30a
 1 G30b2
 1 G31a1
 1 G31a3
 1 G31b1
 2 G31b2
 1 G33j

As13

Codigo:645

PM: 1680



COMPUESTO=C118H108N2O2S3

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 84.16001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 731.0756

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL
 A= -91.10440

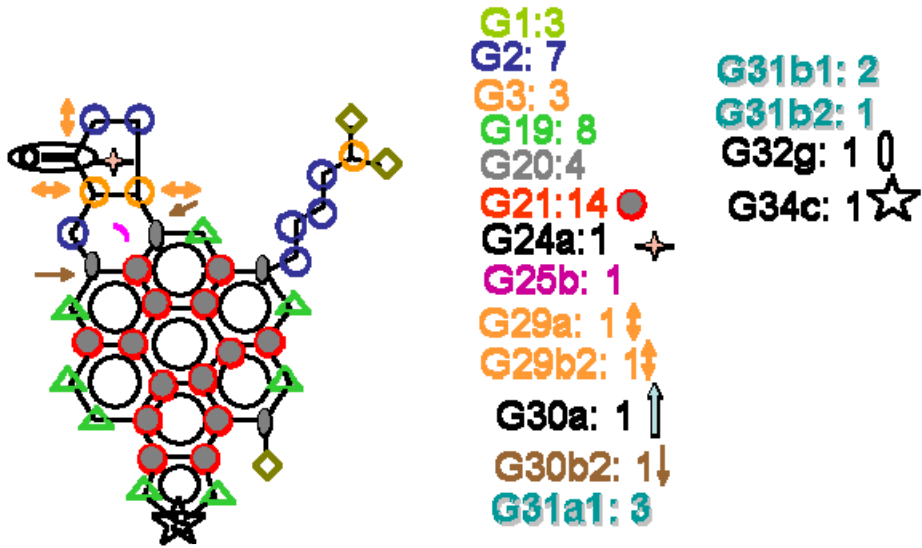
B= 2.228756
C= -1.3622899E-03
D= 3.2553100E-07
CP A 25°C
CP0= 460.9284

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 295.1320
B= 1.142488
C= -3.2308162E-04
D= -1.4267915E+07
CP A 25°C
CP0= 446.5389
%ERROR= 0.5651315

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

6 G1
30 G2
8 G3
22 G19
13 G20
37 G21
2 G24a
1 G24b
3 G25b
3 G29a
3 G29b2
1 G30a
3 G30b2
12 G31a1
1 G31a3
3 G31b1
2 G31b2
2 G32g
2 G33j
1 G34b
2 G34c



COMPUESTO=C40H34OS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
30.99999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
238.3417

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.56850
 B= 0.7473950
 C= -4.6263999E-04
 D= 1.1099500E-07
 CP A 25°C
 CP0= 149.0834

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 96.14687
 B= 0.3769759
 C= -1.0828844E-04
 D= -4866225.
 CP A 25°C
 CP0= 144.1738
 %ERROR= 0.5907013

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

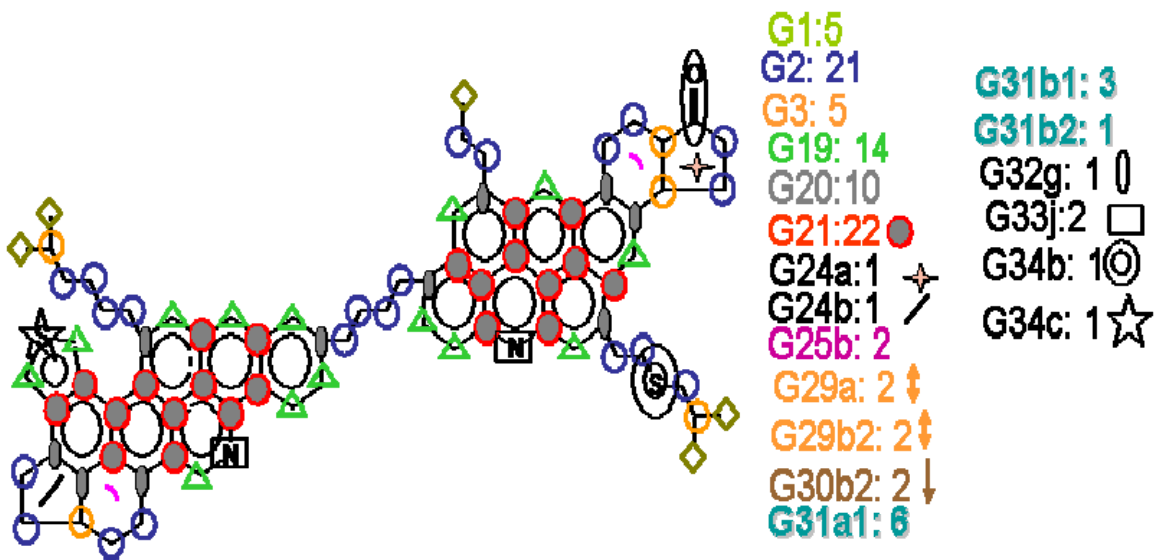
3 G1
 7 G2
 3 G3
 8 G19
 4 G20
 14 G21
 1 G24a

1 G25b
 1 G29a
 1 G29b2
 1 G30a
 1 G30b2
 3 G31a1
 2 G31b1
 1 G31b2
 1 G32g
 1 G34c

As15

Codigo:647

PM: 1120



COMPUESTO=C78H76N2OS2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 44.39000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 476.1288

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -56.61769
 B= 1.484490
 C= -8.9109997E-04
 D= 2.1215101E-07
 CP A 25°C
 CP0= 312.3929

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 195.2320

B= 0.7763172
 C= -2.1373204E-04
 D= -9306646.
 CP A 25°C
 CP0= 302.9972
 %ERROR= 0.5423200

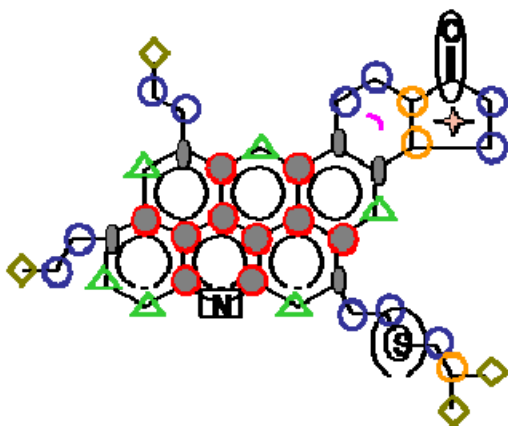
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

- 5 G1
- 21 G2
- 5 G3
- 14 G19
- 10 G20
- 22 G21
- 1 G24a
- 1 G24b
- 2 G25b
- 2 G29a
- 2 G29b2
- 2 G30b2
- 6 G31a1
- 1 G31a3
- 3 G31b1
- 1 G31b2
- 1 G32g
- 2 G33j
- 1 G34b
- 1 G34c

As16

Codigo:648

PM:585



G1: 4
 G2: 11
 G3: 3
 G19: 6
 G20: 5
 G21: 10 ●
 G24a: 1 ✦
 G25b: 1
 G29a: 1 ↓
 G29b2: 1 ↑
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 2

G31b1: 2
 G31b2: 1
 G32g: 1 0
 G33j: 1 □
 G34b: 1 ⊙

COMPUESTO=C40H43NOS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 -16.43000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
219.9627

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.75430

B= 0.7873290

C= -4.7293998E-04

D= 1.1400500E-07

CP A 25°C

CP0= 165.9681

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 105.5597

B= 0.4068176

C= -1.0895835E-04

D= -4999802.

CP A 25°C

CP0= 160.9218

%ERROR= 0.5474989

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

11 G2

3 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

2 G31b1

1 G31b2

1 G32g

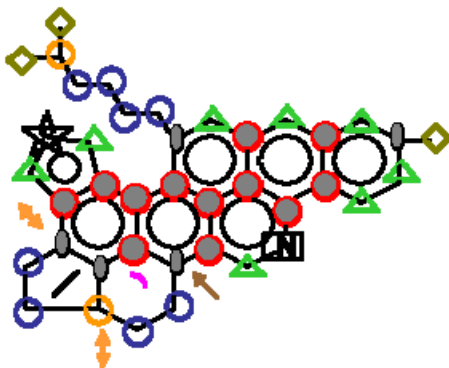
1 G33j

1 G34b

As17

Codigo: 649

PM:537



G1:3
G2: 8
G3: 2
G19: 8
G20:5
G21:12 ●
G24b:1 /
G25b: 1
G29a: 1 ↓
G29b2: 3 †
G30b2: 1 ↓
G31a1: 1
G31a3: 1

G31b1: 2
G31b2: 1
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C38H35NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
48.67999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
216.1385

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -26.43500

B= 0.6973010

C= -4.1125997E-04

D= 9.5224003E-08

CP A 25°C

CP0= 147.4308

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 86.55299

B= 0.3795355

C= -1.0726694E-04

D= -4174044.

CP A 25°C

CP0= 143.2206

%ERROR= 0.5146924

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

8 G2

2 G3

8 G19

5 G20

12 G21

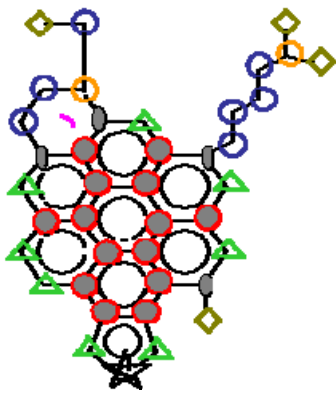
1 G24b

1 G25b
 1 G29a
 1 G29b2
 1 G30b2
 1 G31a1
 1 G31a3
 2 G31b1
 1 G31b2
 1 G33j
 1 G34c

As18

Codigo: 650

PM: 536



G1: 4
 G2: 7
 G3: 2
 G19: 8
 G20: 4
 G21: 14 ●
 G25b: 1
 G30b2: 2 ↓
 G31a1: 3

G31b1: 2
 G31b2: 1
 G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C39H36S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 47.17999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 262.3812

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -20.15320
 B= 0.6952980
 C= -4.1626999E-04
 D= 9.7475997E-08
 CP A 25°C
 CP0= 152.7297

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 95.47816
 B= 0.3700687
 C= -1.0511033E-04
 D= -4271057.
 CP A 25°C
 CP0= 148.4236
 %ERROR= 0.5198430

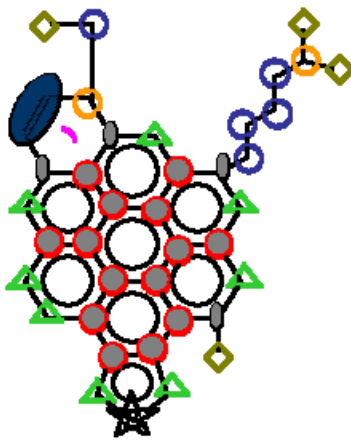
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1
 7 G2
 2 G3
 8 G19
 4 G20
 14 G21
 1 G25b
 2 G30b2
 3 G31a1
 2 G31b1
 1 G31b2
 1 G34c

As19

Codigo: 651

PM: 534



G1: 4
 G2: 5
 G3: 2
 G19: 8
 G20: 4
 G21: 14 ●
 G7: 1 ●
 G25b: 1
 G30b2: 2 ↓
 G31a1: 2

G31a2: 1
 G31b1: 3
 G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C39H34S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 74.88000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 264.1178

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -24.06320
 B= 0.6834320
 C= -4.1591999E-04
 D= 9.7787996E-08
 CP A 25°C
 CP0= 145.3212

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 91.94125
 B= 0.3571562
 C= -1.0376188E-04
 D= -4284886.

CP A 25°C
CP0= 141.0011
%ERROR= 0.5454327

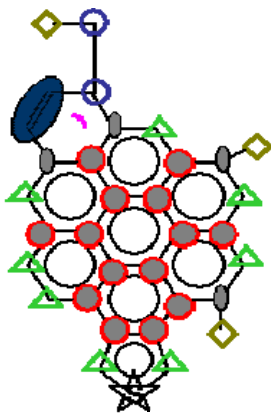
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1
5 G2
2 G3
1 G7
8 G19
4 G20
14 G21
1 G25b
2 G30b2
1 G31a1
1 G31a2
3 G31b1
1 G34c

As20

Codigo: 652

PM:440



G1:3
G2: 1
G3: 1
G19: 8
G20:4
G21:14 ●
G25b: 1
G30b2: 1↓
G7:1 ●
G31a1: 3

G31b1: 3
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C33H22S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
107.8800

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
213.6332

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -22.72670

B= 0.5423890

C= -3.3135997E-04

D= 7.8253997E-08

CP A 25°C

CP0= 111.6049

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 70.14186

B= 0.2812239

C= -8.1529070E-05

D= -3431164.

CP A 25°C

CP0= 108.1427

%ERROR= 0.5613954

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

1 G2

1 G3

1 G7

8 G19

4 G20

14 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

3 G31a1

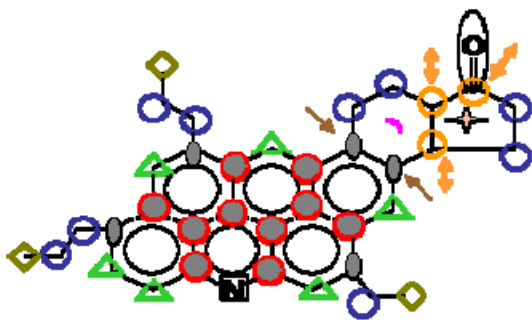
3 G31b1

1 G34c

As21

Codigo:653

PM: 497



G1:3
G2: 9
G3: 2
G19: 6
G20:5
G21:10 ●
G24a:1 ✦
G25b: 1
G29a: 1 †
G29b2: 1 †
G30b2: 1 ↓
G31a1: 4

G31b1: 1
G32g: 1 |
G33j: 1 |

COMPUESTO=C36H35NO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=

-5.220003

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=

149.5255

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.85440

B= 0.6878850

C= -4.1205998E-04
D= 9.9734997E-08
CP A 25°C
CP0= 139.2524

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 86.44959
B= 0.3551296
C= -9.3693605E-05
D= -4369530.
CP A 25°C
CP0= 134.8480
%ERROR= 0.5594322

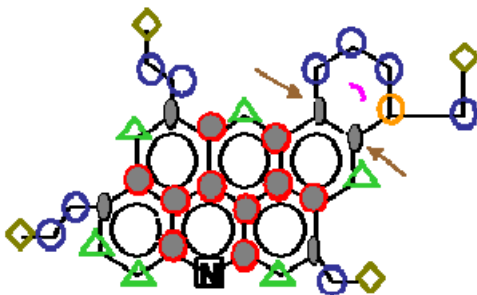
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
9 G2
2 G3
6 G19
5 G20
10 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
4 G31a1
1 G31a2
1 G31b1
1 G32g
1 G33j

As22

Codigo: 654

PM: 471



G1:4

G2: 9

G3: 1

G19: 6

G20:5

G21:10 ●

G25b: 1

G30a: 1 ↑

G30b2: 1 ↓

G31a1: 4

G31b1: 1

G33j:1 □

COMPUESTO=C35H37N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
11.16000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
179.8371

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.43910

B= 0.6357880

C= -3.6569001E-04

D= 8.6215998E-08

CP A 25°C

CP0= 142.8987

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 85.86320

B= 0.3480776

C= -9.0451882E-05

D= -3779352.

CP A 25°C

CP0= 139.0864

%ERROR= 0.4847968

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

9 G2

1 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

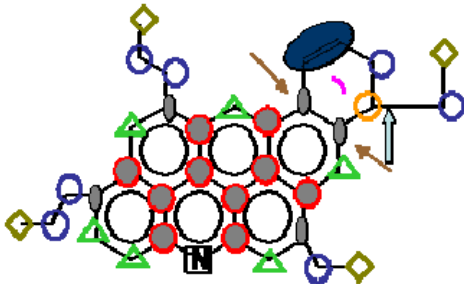
1 G31b1

1 G33j

As23

Codigo:655

PM:469



G2: 7
G3: 1
G19: 6
G20: 5
G21: 10 ●
G25b: 1
G30a: 1 ↑
G30b2: 1 ↓
G31a1: 2

G31b1: 2
G31b2: 1
G33j: 1 □

COMPUESTO=C35H35N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
38.97999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
172.5179

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -20.34910

B= 0.6239220

C= -3.6534001E-04

D= 8.6527997E-08

CP A 25°C

CP0= 135.4902

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 82.34864

B= 0.3351251

C= -8.9085646E-05

D= -3794512.

CP A 25°C

CP0= 131.6610

%ERROR= 0.5102090

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

7 G2

1 G3

1 G7

6 G19

5 G20

10 G21

1 G25b

1 G30a

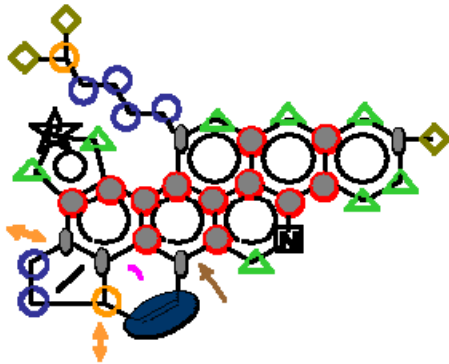
1 G30b2

2 G31a1



2 G31b1

1 G31b2

1 G33j



G1:3
 G2: 6
 G3: 2
 G7:1 
 G19: 8
 G20:5
 G21:12 
 G24b:1 
 G25b: 1
 G29a: 1
 G29b2: 1 
 G30b2: 1 
 G31a1: 3
 G31a2: 1

G31b1: 1
 G31b2: 1
 G33j:1 
 G34c: 1 

COMPUESTO=C38H33NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
76.40001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
216.5000

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -30.34500
 B= 0.6854351
 C= -4.1090997E-04
 D= 9.5536002E-08
 CP A 25°C
 CP0= 140.0223

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 83.00823
 B= 0.3666368
 C= -1.0592449E-04
 D= -4187412.
 CP A 25°C
 CP0= 135.7990
 %ERROR= 0.5403835

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

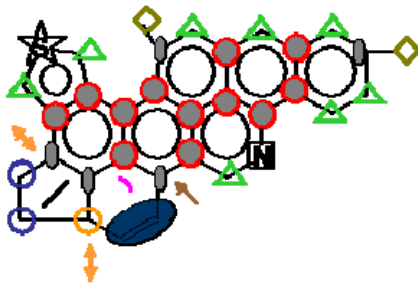
3 G1
 6 G2
 2 G3
 1 G7
 8 G19
 5 G20

12 G21
 1 G24b
 1 G25b
 1 G29a
 1 G29b2
 1 G30b2
 3 G31a1
 1 G31a2
 1 G31b1
 1 G31b2
 1 G33j
 1 G34c

As25

Codigo: 657

PM:442



G1:2
 G2: 2
 G3: 1
 G7:1
 G19: 8
 G20:5
 G21:12
 G24b:1
 G25b: 1
 G29a: 1↓
 G29b2: 1↑
 G30b2: 1↓
 G31a1: 4
 G31a2: 1

G31b1: 2
 G31b2: 1
 G33j:1 □
 G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C32H21NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 108.2600

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 163.1309

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.00850

B= 0.5443920

C= -3.2634998E-04

D= 7.6002003E-08

CP A 25°C

CP0= 106.3059

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 61.17107
 B= 0.2907722
 C= -8.3721869E-05
 D= -3331449.
 CP A 25°C
 CP0= 102.9456
 %ERROR= 0.5551525

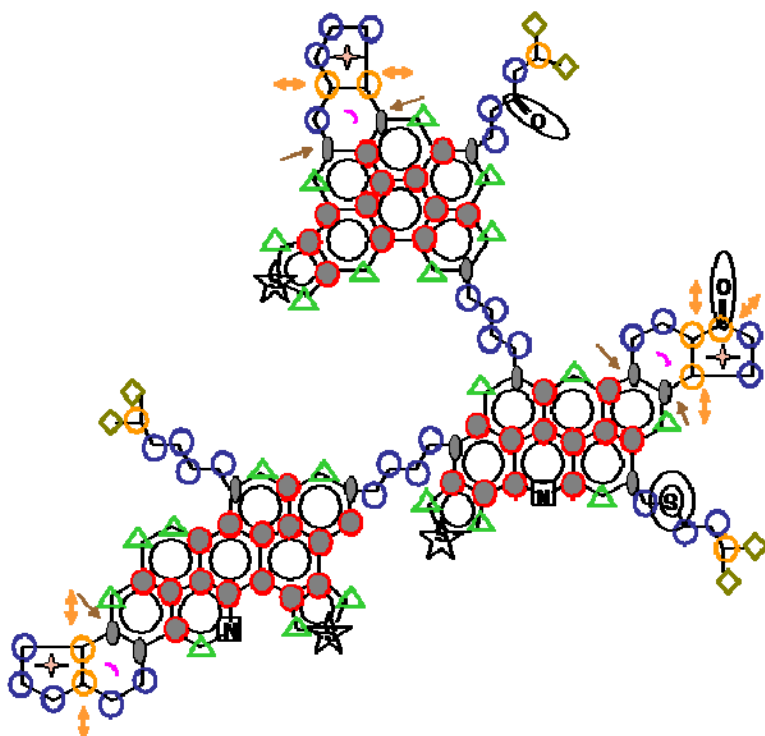
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

- 2 G1
- 2 G2
- 1 G3
- 1 G7
- 8 G19
- 5 G20
- 12 G21
- 1 G24b
- 1 G25b
- 1 G29a
- 1 G29b2
- 1 G30b2
- 4 G31a1
- 1 G31b1
- 1 G31b2
- 1 G33j
- 1 G34c

As26

Codigo:658

PM: 1764



- G1:6
- G2: 31
- G3: 9
- G19: 23
- G20:13
- G21:38 ●
- G24a:3 ✦
- G25b: 3
- G29a: 1 †
- G29b2: 3 ‡
- G30a: 1 †
- G30b2: 3 ‡
- G31a1: 11
- G31a2: 2
- G31b1: 5
- G31b2: 1
- G32g: 1 ◊
- G33j:2 ◻
- G34c: 3 ☆
- G34b: 1 ⊙

COMPUESTO=C122H112N2O2S4

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
101.3200

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
760.3038

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -96.88970

B= 2.326084

C= -1.4229100E-03

D= 3.3672200E-07

CP A 25°C

CP0= 479.0693

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 302.6867

B= 1.202357

C= -3.4792389E-04

D= -1.4761924E+07

CP A 25°C

CP0= 464.1782

%ERROR= 0.5631157

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

6 G1

31 G2

9 G3

23 G19

13 G20

38 G21

3 G24a

3 G25b

1 G29a

3 G29b2

1 G30a

3 G30b2

11 G31a1

2 G31a2

5 G31b1

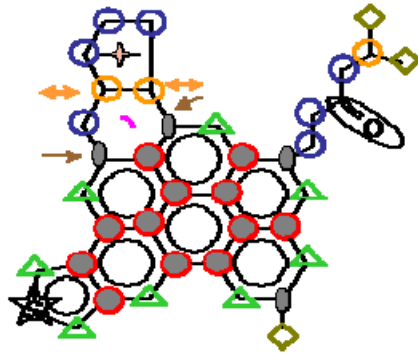
1 G31b2

2 G32g

2 G33j

1 G34b

3 G34c



G1: 3
 G2: 7
 G3: 3
 G19: 8
 G20: 4
 G21: 12 ●
 G24a: 1 ✦
 G25b: 1
 G29b2: 1 †
 G30a: 1 †
 G30b2: 1 †
 G31a1: 1
 G31a2: 1

G31b1: 1
 G31b2: 2
 G32g: 1 0
 G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C38H34OS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 19.18000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 237.9890

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.81230
 B= 0.7230550
 C= -4.4553998E-04
 D= 1.0675100E-07
 CP A 25°C
 CP0= 142.9902

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 90.84319
 B= 0.3668399
 C= -1.0475496E-04
 D= -4678673.
 CP A 25°C
 CP0= 138.2721
 %ERROR= 0.5886078

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

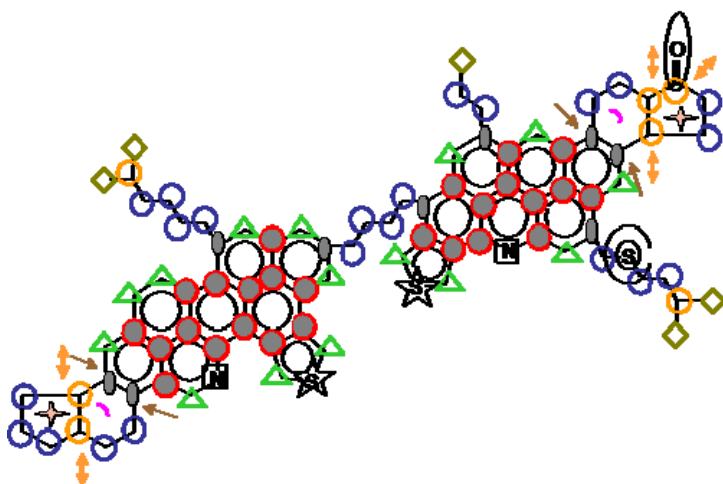
3 G1
 7 G2
 3 G3
 8 G19
 4 G20
 12 G21

1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30a
 1 G30b2
 1 G31a1
 1 G31a2
 1 G31b1
 2 G31b2
 1 G32g
 1 G34c

As28

Codigo: 660

PM: 1228



G1:5
 G2: 22
 G3: 6
 G19: 15
 G20:9
 G21:26 ●
 G24a:2 ✦
 G25b: 2
 G29a: 1 ↓
 G29b2: 2 †
 G30b2: 2 ↓
 G31a1: 7
 G31a2: 1

G31b1: 4
 G31b2: 1 □
 G33j:2 □
 G34c: 1 ☆
 G34b: 1 ©

COMPUESTO=C84H80N2OS3

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 69.57999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 508.1492

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -60.64900
 B= 1.603169
 C= -9.7046979E-04
 D= 2.2704900E-07
 CP A 25°C
 CP0= 337.0851

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 208.6812
 B= 0.8456300

C= -2.4569585E-04
D= -9947907.
CP A 25°C
CP0= 327.0568
%ERROR= 0.5422884

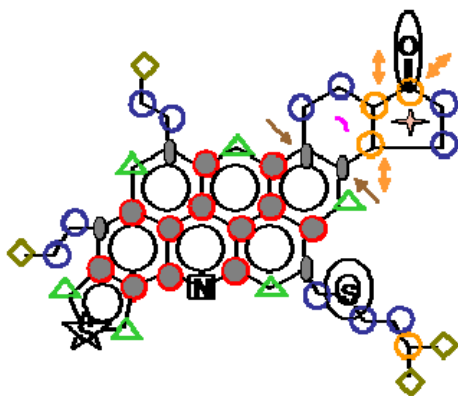
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

5 G1
22 G2
6 G3
15 G19
9 G20
26 G21
2 G24a
2 G25b
1 G29a
2 G29b2
2 G30b2
7 G31a1
1 G31a2
4 G31b1
1 G31b2
1 G32g
2 G33j
1 G34b
2 G34c

As29

Codigo: 661

PM: 641



G1:4
G2: 11
G3: 3
G19: 6
G20:5
G21:12 ●
G24a:1 ✦
G25b: 1
G29a: 1 ↓
G29b2: 1 ↓
G30b2: 1 ↓
G31a2: 3

G31b1: 3
G32g: 1 ○
G33j: 1 □
G34c: 1 ☆
G34b: 1 ⊙

COMPUESTO=C42H43NOS2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
1.889998

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=

258.8040

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -25.42810

B= 0.8113680

C= -4.8272993E-04

D= 1.1216800E-07

CP A 25°C

CP0= 176.5426

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 107.7490

B= 0.4369105

C= -1.2457886E-04

D= -4921827.

CP A 25°C

CP0= 171.5719

%ERROR= 0.5148222

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

11 G2

3 G3

6 G19

5 G20

12 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

3 G31a2

3 G31b1

1 G32g

1 G33j

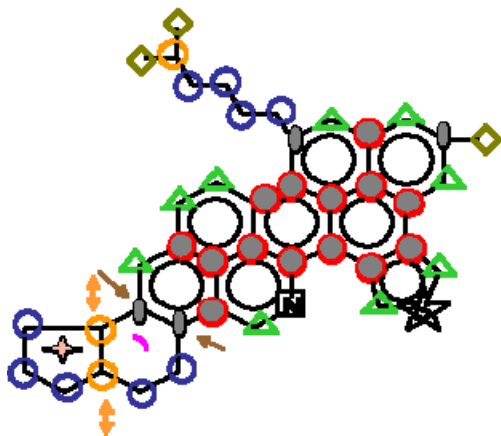
1 G34b

1 G34c

As30

Codigo: 662

PM: 529



G1:3
G2:9
G3: 3
G19: 9
G20:4
G21:14 ●
G24a:1 ✦
G25b: 1
G29b2: 1 †
G30b2: 1 ↓
G31a1: 4

G31b1: 1
G31b2: 1
G33j: 1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C42H39NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
55.39000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
218.5746

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.79250

B= 0.7919410

C= -4.8084001E-04

D= 1.1195900E-07

CP A 25°C

CP0= 161.5485

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 98.03330

B= 0.4183636

C= -1.2343671E-04

D= -4906438.

CP A 25°C

CP0= 156.6011

%ERROR= 0.5525463

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

9 G2

3 G3

9 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

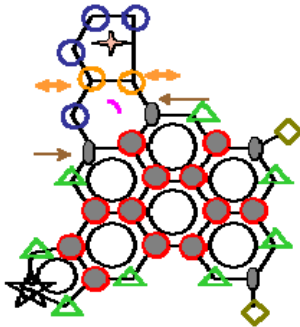
4 G31a1

1 G31a2
1 G31b1
1 G31b2
1 G33j
1 G34c

As31

Codigo:663

PM:440



G1:2
G2: 4
G3: 2
G19: 8
G20:4
G21:12 ●
G24a:1 ✦
G25b: 1
G29b2: 1 †
G30a: 1 †
G30b2: 1 †
G31a1: 1
G31a2: 1

G31b1: 2
G31b2: 1
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C32H24S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
78.38000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
217.4417

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.08290
B= 0.5826120
C= -3.5658997E-04
D= 8.5318995E-08
CP A 25°C
CP0= 109.1856

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 66.15007
B= 0.2979032
C= -8.4218962E-05
D= -3739710.
CP A 25°C
CP0= 105.4138
%ERROR= 0.5996286

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

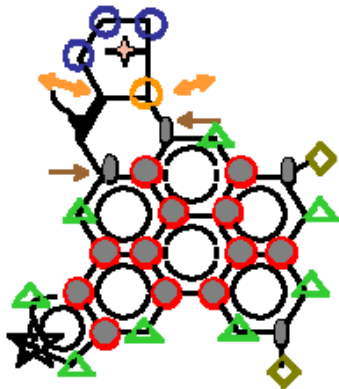
2 G1
4 G2
2 G3

8 G19
 4 G20
 12 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30a
 1 G30b2
 1 G31a1
 1 G31a2
 2 G31b1
 1 G31b2
 1 G34c

As32

Codigo: 664

PM: 438



G1:2
 G2: 3
 G3: 1
 G9:1 ↘
 G19: 8
 G20:4
 G21:12 ●
 G24a:1 ✦
 G25b: 1
 G29b2: 1 ↕
 G30b2: 1 ↓
 G30a: 1 ↑
 G31a1: 5

G31b2: 1
 G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C32H22S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 102.6300

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 278.9059

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.42560
 B= 0.5609330
 C= -3.4016997E-04
 D= 8.0771002E-08
 CP A 25°C
 CP0= 105.7184

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 62.37694
 B= 0.2914611
 C= -8.2344457E-05

D= -3538312.
 CP A 25°C
 CP0= 102.1522
 %ERROR= 0.5853752

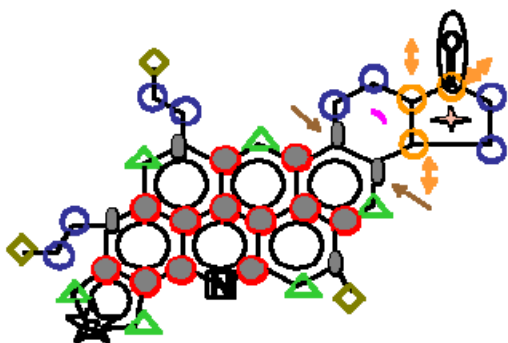
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

- 2 G1
- 3 G2
- 1 G3
- 1 G9
- 8 G19
- 4 G20
- 12 G21
- 1 G24a
- 1 G25b
- 1 G29b2
- 1 G30a
- 1 G30b2
- 5 G31a1
- 1 G31b2
- 1 G34c

As33

Codigo: 665

PM:539



G1:3
 G2: 8
 G3: 2
 G19: 6
 G20:5
 G21:12 ●
 G24a:1 ✦
 G25b: 1
 G29a: 1 †
 G29b2: 1 †
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 1

G31b1: 3
 G31b2: 1
 G33j: 1 □
 G34c: 1 ☆
 G32g: 1 0

COMPUESTO=C37H33NOS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 17.31999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 165.7215

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL
 A= -27.92270

B= 0.6905610
C= -4.0987995E-04
D= 9.5301999E-08
CP A 25°C
CP0= 144.0583

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 85.15073
B= 0.3725478
C= -1.0564345E-04
D= -4177042.
CP A 25°C
CP0= 139.8455
%ERROR= 0.5255731

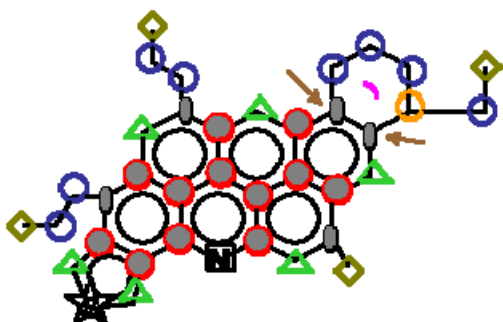
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
8 G2
2 G3
6 G19
5 G20
12 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
1 G31a1
3 G31b1
1 G31b2
1 G32g
1 G33j
1 G34c

As34

Codigo:666

PM:513



G1: 4
G2: 8
G3: 1
G19: 6
G20: 5
G21: 12 ●
G25b: 1
G30a: 1 ↑
G30b2: 1 ↓

G31b1: 4
G31b2: 1
G33j: 1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C36H35NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=

34.55999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
195.9325

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -12.50740
B= 0.6384640
C= -3.6350996E-04
D= 8.1783000E-08
CP A 25°C
CP0= 147.7045

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 84.51263
B= 0.3655858
C= -1.0244096E-04
D= -3583685.
CP A 25°C
CP0= 144.0913
%ERROR= 0.4520655

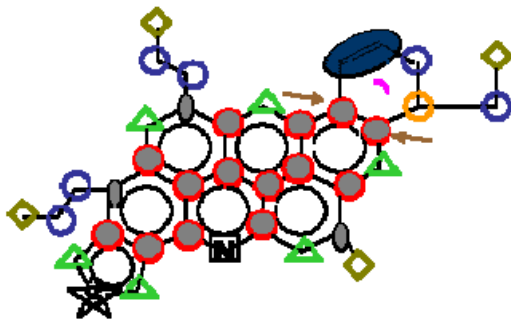
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1
8 G2
1 G3
6 G19
5 G20
12 G21
1 G25b
1 G30a
1 G30b2
4 G31b1
1 G31b2
1 G33j
1 G34c

As35

Codigo:667

PM: 511



G1:4
G2: 6
G3: 1
G19: 6
G20:5
G21:12 ●
G24b:1 /
G25b: 1
G7:1 ●
G30a: 1 ↑
G30b2: 1 ↓

G31b1: 4
G31b2: 1 □
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C36H33NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
62.40000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
192.9735

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.41740

B= 0.6265980

C= -3.6315995E-04

D= 8.2094999E-08

CP A 25°C

CP0= 140.2961

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 80.98040

B= 0.3526649

C= -1.0108875E-04

D= -3597792.

CP A 25°C

CP0= 136.6682

%ERROR= 0.4754120

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

6 G2

1 G3

1 G7

6 G19

5 G20

12 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

4 G31b1

1 G31b2

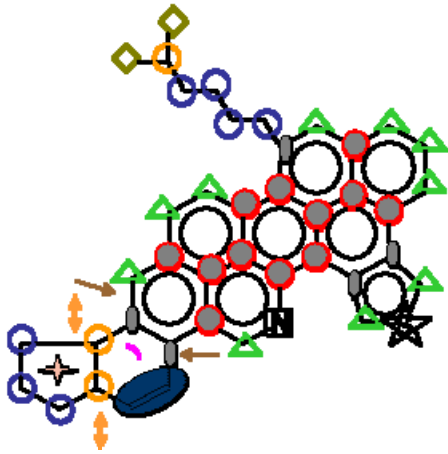
1 G33j

1 G34c

As36

Codigo: 668

PM: 587



G1:2
G2: 7
G3: 3
G19: 10
G20:3
G21:14 ●
G24a:1 ✦
G25b: 1
G29b2: 1 ↓
G30b2: 1 ↓
G31a1: 5
G31a2: 1

G7:1 ●
G31b1: 1
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C41H35NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
91.70000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
207.9698

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -39.38010
B= 0.7626300
C= -4.7740000E-04
D= 1.1146200E-07
CP A 25°C
CP0= 148.5145

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 92.90004
B= 0.3906337
C= -1.2154933E-04
D= -4887331.
CP A 25°C
CP0= 143.5829
%ERROR= 0.5978979

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

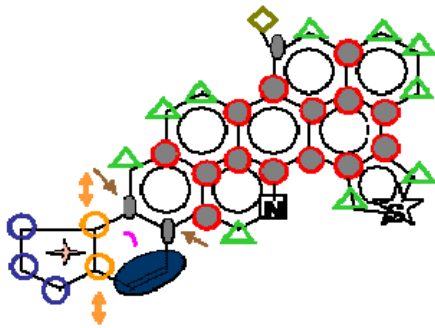
2 G1
7 G2
3 G3
1 G7
10 G19
3 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2

1 G30b2
5 G31a1
1 G31a2
1 G31b1
1 G33j
1 G34c

As37

Codigo: 669

PM: 587



G1:1
G2: 3
G3: 2
G19: 10
G20:3
G21:14 ●
G24a: 1 ✦
G25b: 1
G29b2: 1 ↓
G30b2: 1 ↓
G31a1: 5
G31a2: 1

G7:1 ●
G31b1: 1
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C35H23NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
123.0000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
157.1832

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -38.04360
B= 0.6215870
C= -3.9283998E-04
D= 9.1928001E-08
CP A 25°C
CP0= 114.7981

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 71.03196
B= 0.3148219
C= -9.9369288E-05
D= -4029424.
CP A 25°C
CP0= 110.7341
%ERROR= 0.6271412

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

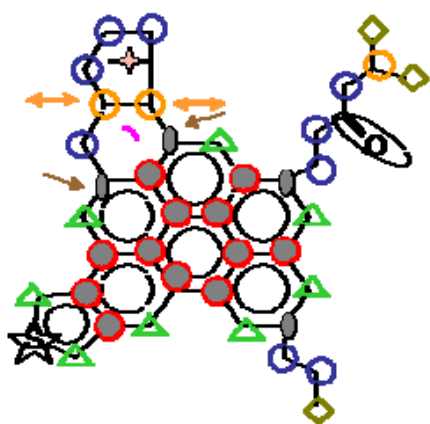
1 G1

3 G2
 2 G3
 1 G7
 10 G19
 3 G20
 14 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30b2
 5 G31a1
 1 G31a2
 1 G31b1
 1 G33j
 1 G34c

As38

Codigo; 670

PM: 566



G1:3
 G2: 9
 G3: 3
 G19: 8
 G20:4
 G21:12 ●
 G24a:1 +
 G25b: 1
 G29b2: 1 †
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 2

G31b1: 2
 G32g: 1 0
 G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C40H38OS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 11.16000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 260.0362

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.02330

B= 0.7657810

C= -4.6947997E-04

D= 1.1194300E-07

CP A 25°C

CP0= 154.5275

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 97.86431

B= 0.3921136

C= -1.1206437E-04
 D= -4910584.
 CP A 25°C
 CP0= 149.5699
 %ERROR= 0.5752165

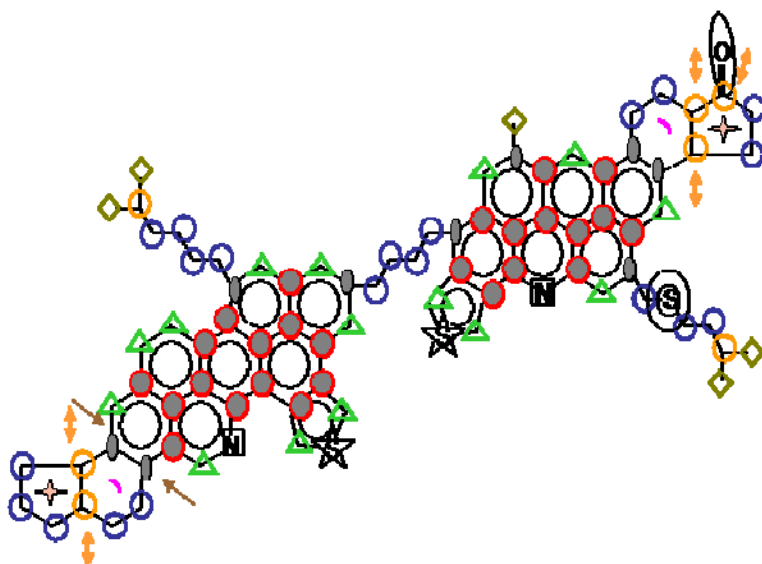
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

- 3 G1
- 9 G2
- 3 G3
- 8 G19
- 4 G20
- 12 G21
- 1 G24a
- 1 G25b
- 1 G29b2
- 1 G30a
- 1 G30b2
- 2 G31a1
- 1 G31a2
- 2 G31b1
- 1 G32g
- 1 G34c

As39

Codigo: 671

PM: 1200



- G1: 5
- G2: 20
- G3: 6
- G19: 15
- G20: 9
- G21: 26 ●
- G24a: 2 ✦
- G25b: 2
- G29a: 1 ↓
- G29b2: 2 †
- G30b2: 2 ↓
- G31a1: 7
- G31a2: 1
- G31b1: 4
- G31b2: 1
- G33j: 2 □
- G34c: 2 ☆
- G32g: 1 ∅
- G34b: 1 ⊙

COMPUESTO=C82H76N2OS3

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 79.45999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 489.8920

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

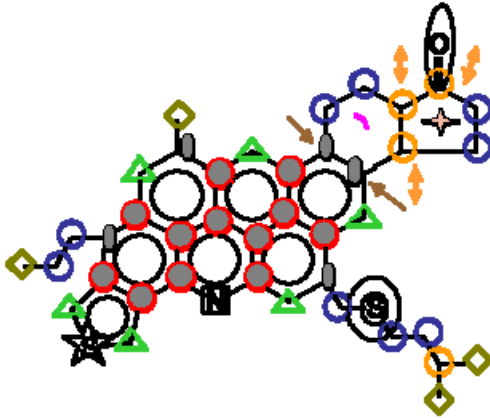
A= -61.43800
B= 1.560443
C= -9.4652997E-04
D= 2.2185701E-07
CP A 25°C
CP0= 325.5478

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 201.8957
B= 0.8199375
C= -2.3820119E-04
D= -9730060.
CP A 25°C
CP0= 315.7279
%ERROR= 0.5475224

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

5 G1
20 G2
6 G3
15 G19
9 G20
26 G21
2 G24a
2 G25b
1 G29a
2 G29b2
2 G30b2
7 G31a1
1 G31a2
4 G31b1
1 G31b2
1 G32g
2 G33j
1 G34b
2 G34c



G2: 9
G3: 3
G19: 6
G20:5
G21:12 ●
G24a:1+
G25b: 1
G29a: 1 ↓
G29b2: 1 ↓
G30b2: 1 ↓

G31b1: 4
G31b2: 1
G33j:1 □
G34c: 1 ☆
G34b: 1 ⊙
G32g: 1 0

COMPUESTO=C40H39NOS2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
12.87000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
231.0214

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -26.21711
 B= 0.7686420
 C= -4.5878996E-04
 D= 1.0697600E-07
 CP A 25°C
 CP0= 165.0053

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 100.7196
 B= 0.4116509
 C= -1.1727558E-04
 D= -4689398.
 CP A 25°C
 CP0= 160.2753
 %ERROR= 0.5227192

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

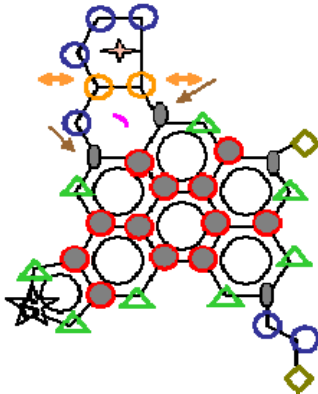
4 G1
 9 G2
 3 G3
 6 G19
 5 G20
 12 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29a
 1 G29b2
 1 G30b2
 4 G31b1

1 G31b2
1 G32g
1 G33j
1 G34b
1 G34c

As41

Codigo: 673

PM: 468



G2: 6
G3: 2
G19: 8
G20: 4
G21: 12 ●
G24a: 1 ✚
G25b: 1
G29b2: 1 †
G30a: 1 †
G30b2: 1 ↓
G31a1: 2

G31b1: 2
G31b2: 1 ☆
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C34H28S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
69.06000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
233.1161

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.29390
B= 0.6253380
C= -3.8052996E-04
D= 9.0510994E-08
CP A 25°C
CP0= 120.7229

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 73.12848
B= 0.3232531
C= -9.1562069E-05
D= -3969066.
CP A 25°C
CP0= 116.7174
%ERROR= 0.5817102

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

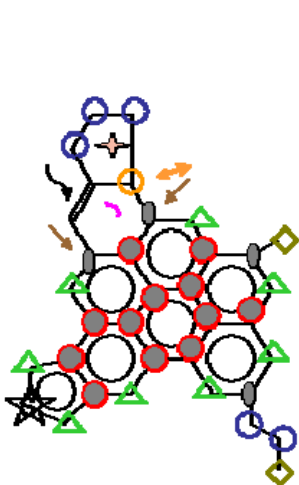
2 G1
6 G2
2 G3
8 G19

4 G20
 12 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30a
 1 G30b2
 2 G31a1
 2 G31b1
 1 G31b2
 1 G34c

As42

Codigo: 674

PM: 466



G1:2
 G2: 5
 G3: 1
 G9: 1
 G19: 8
 G20:4
 G21:12 ●
 G24a: 1 ✦
 G25b: 1
 G29b2: 1 †
 G30a: 1 †
 G30b2: 1 †
 G31a1: 2
 G31b1: 2
 G31b2: 1
 G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C34H26S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 93.53000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 297.2299

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.63660
 B= 0.6036590
 C= -3.6410996E-04
 D= 8.5962995E-08
 CP A 25°C
 CP0= 117.2557

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 69.35481
 B= 0.3168119
 C= -8.9688023E-05
 D= -3767624.
 CP A 25°C
 CP0= 113.4560

%ERROR= 0.5681949

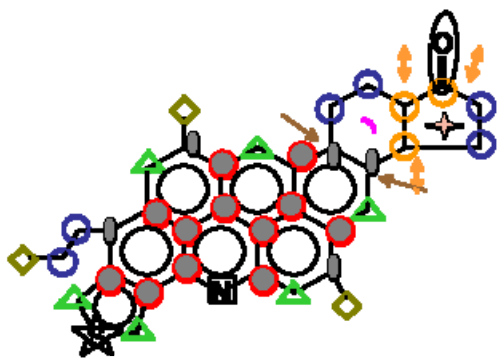
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
5 G2
1 G3
1 G9
8 G19
4 G20
12 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30a
1 G30b2
2 G31a1
2 G31b1
1 G31b2
1 G34c

As43

Codigo: 675

PM: 521



G1:3
G2: 6
G3: 2
G19: 6
G20:5
G21:12 ●
G24a:1 ✦
G25b: 1
G29a: 1 †
G29b2: 2 †
G30b2: 1 ↓

G31b1: 4
G31b2: 1
G33j: 1 □
G34c: 1 ☆
G32g: 1 0

COMPUESTO=C35H29NOS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
28.06000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
147.3638

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -28.71170
B= 0.6478350
C= -3.8593996E-04
D= 9.0109999E-08
CP A 25°C

CP0= 132.5210

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 78.20932

B= 0.3471321

C= -9.8271135E-05

D= -3949876.

CP A 25°C

CP0= 128.5372

%ERROR= 0.5363786

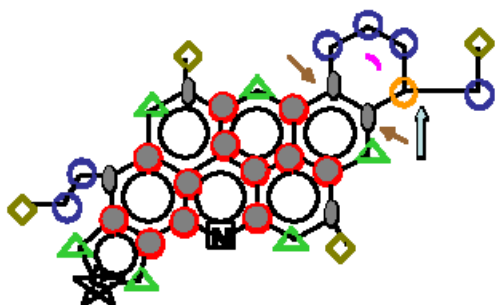
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
6 G2
2 G3
6 G19
5 G20
12 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
4 G31b1
1 G31b2
1 G32g
1 G33j
1 G34c

As44

Codigo: 676

PM: 476



G1:4
G2: 6
G3: 1
G19: 6
G20:5
G21:12 ●
G25b: 1
G30a: 1 ↑
G30b2: 1 ↓

G31b1: 4
G31b2: 1
G33j: 1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C34H31NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=

44.43999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=

177.6753

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -13.29640
B= 0.5957380
C= -3.3956999E-04
D= 7.6591000E-08
CP A 25°C
CP0= 136.1673

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 77.58488
B= 0.3401474
C= -9.5059149E-05
D= -3357427.
CP A 25°C
CP0= 132.7806
%ERROR= 0.4570601

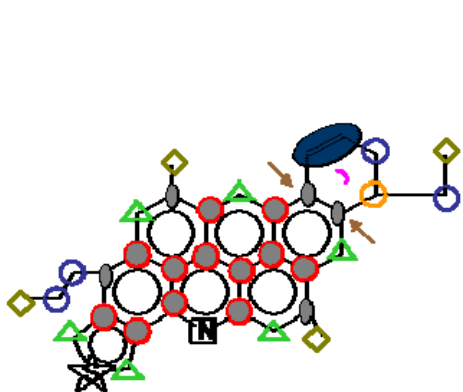
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1
6 G2
1 G3
6 G19
5 G20
12 G21
1 G25b
1 G30a
1 G30b2
4 G31b1
1 G31b2
1 G33j
1 G34c

As45

Codigo:677

PM: 483



G1:4
G2: 4
G3: 1
G19: 6
G20:5
G21:12 ●
G25b: 1
G30a: 1 ↑
G30b2: 1 ↓
G31a1: 3
G7:1 ●
G31b1: 2
G31b2: 1
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C34H29NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
71.49999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
174.6492

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -17.20640

B= 0.5838720

C= -3.3921999E-04

D= 7.6903000E-08

CP A 25°C

CP0= 128.7588

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 74.05634

B= 0.3272200

C= -9.3704068E-05

D= -3371768.

CP A 25°C

CP0= 125.3569

%ERROR= 0.4826275

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

4 G2

1 G3

1 G7

6 G19

5 G20

12 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

3 G31a1

2 G31b1

1 G31b2

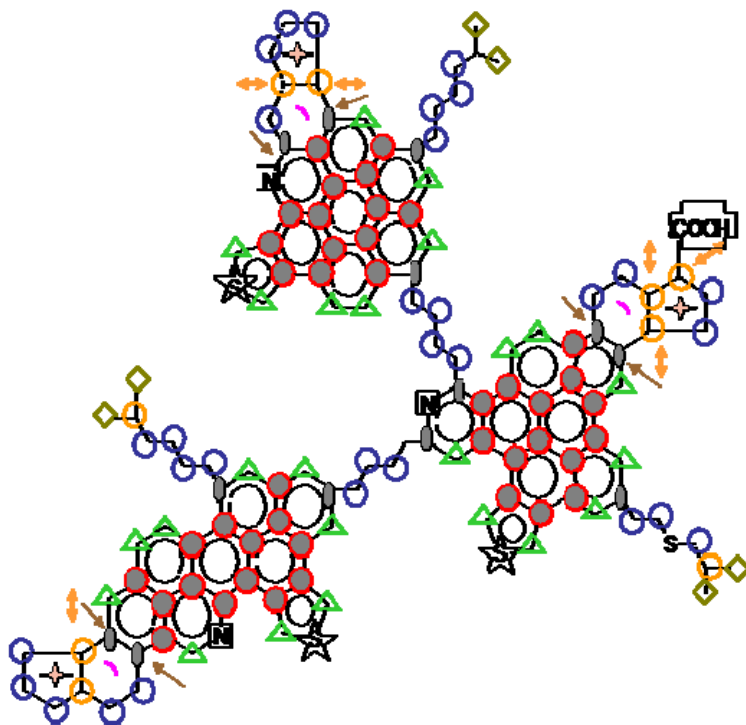
1 G33j

1 G34c

As46

Codigo: 678

PM: 1855



G1:6	
G2:32	
G3:10	
G19:24	
G20:13	
G21:42 ●	
G24a:3 ✦	
G25b:3	
G29a:1 ↓	
G29b2:3 †	
G30a:1 ↑	
G30b2:3 ↓	
G31a1:14	
G31a2:3	
G31b1:3	
G31b2:1	
G33j:3 □	
G34c:3 ☆	
G34b:1 ⊙	
G32H:1 □	

COMPUESTO=C128H117N3O2S4

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
84.16000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
739.5884

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -99.13989

B= 2.445974

C= -1.5007101E-03

D= 3.5398500E-07

CP A 25°C

CP0= 506.1059

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 320.8041

B= 1.264847

C= -3.7070579E-04

D= -1.5511795E+07

CP A 25°C

CP0= 490.4662

%ERROR= 0.5628210

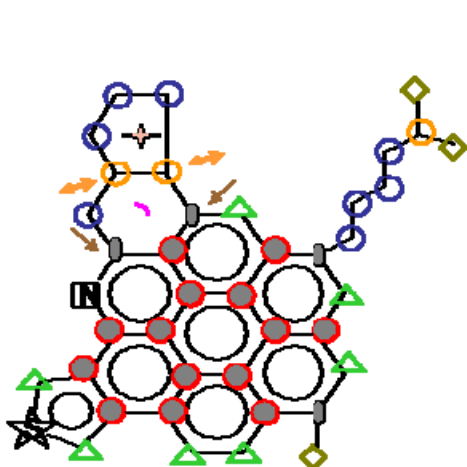
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

6 G1
 32 G2
 10 G3
 24 G19
 13 G20
 42 G21
 3 G24a
 3 G25b
 1 G29a
 3 G29b2
 1 G30a
 3 G30b2
 14 G31a1
 3 G31a2
 3 G31b1
 1 G31b2
 1 G32h
 3 G33j
 1 G34b
 3 G34c

As47

Codigo: 679

PM:549



G1:3
G2: 8
G3: 3
G19: 7
G20:4
G21:14 ●
G24a:1 ↗
G25b: 1
G29b2: 1 †
G30a: 1 ↑
G30b2: 1 ↓
G31a1: 3

G31b1: 2
G31b2: 1
G33j: 1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C39H35NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 54.26999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 187.0024

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.27260

B= 0.7322840

C= -4.4420999E-04

D= 1.0339300E-07

CP A 25°C

CP0= 149.3108

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 90.39098

B= 0.3872879

C= -1.1415093E-04

D= -4531026.

CP A 25°C

CP0= 144.7422

%ERROR= 0.5517282

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

8 G2

3 G3

7 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

3 G31a1

2 G31b1

1 G31b2

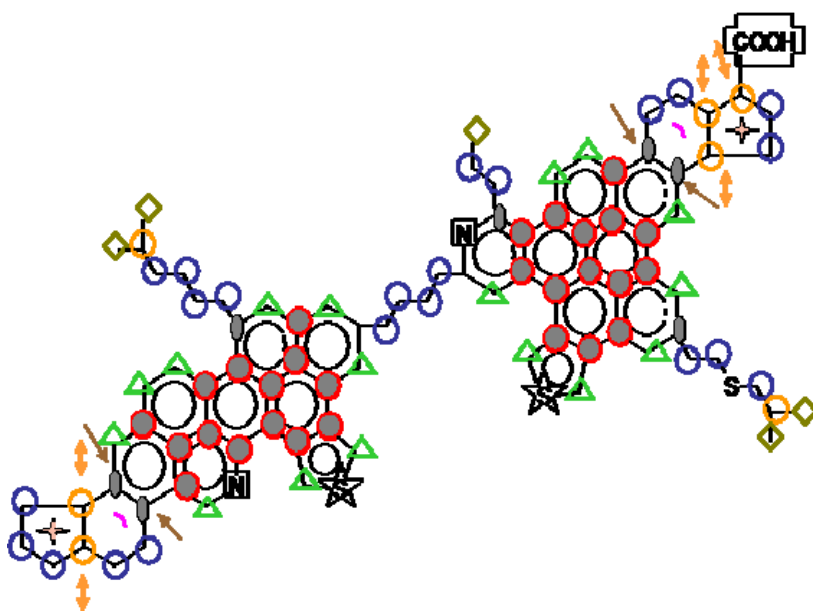
1 G33j

1 G34c

As 48

Codigo: 680

PM: 1308



G1:5

G2: 22

G3: 7

G19:17

G20:9

G21:28 ●

G24a:2 ✦

G25b: 2

G29a: 1 ↓

G29b2: 2 ↓

G30b2: 2 ↓

G31a1: 10

G31a2: 2

G31b1: 2

G31b2: 1

G33j: 2 □

G34c: 2 ☆

G32H: 1 ✦

COMPUESTO=C89H84N2O2S3

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
20.18999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
586.4172

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -66.43890

B= 1.713830

C= -1.0496000E-03

D= 2.4767002E-07

CP A 25°C

CP0= 357.8011

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 227.5202

B= 0.8871946

C= -2.5887103E-04

D= -1.0861601E+07

CP A 25°C

CP0= 346.8386

%ERROR= 0.5586041

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

5 G1

22 G2

7 G3

17 G19

9 G20

28 G21

2 G24a

2 G25b

1 G29a

2 G29b2

2 G30b2

10 G31a1

2 G31a2

2 G31b1

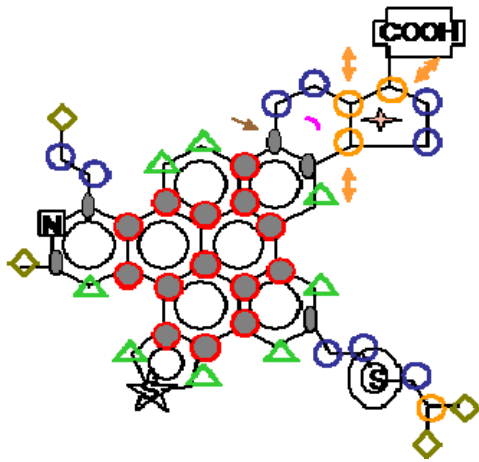
1 G31b2

1 G32h

2 G33j

1 G34b

2 G34c



G1: 4
 G2: 9
 G3: 4
 G19: 8
 G20: 5
 G21: 14 ●
 G24a: 1 ✦
 G25b: 1
 G29a: 1 ↓
 G29b2: 1 †
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 5
 G31a2: 2

G31b1: 1
 G32H: 1 ☐
 G33j: 1 ☐
 G34c: 1 ☆
 G34b: 1 ⊙

COMPUESTO=C₄₅H₄₃N₂O₂S₂

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-36.50000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
313.6495

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.00700
 B= 0.8793030
 C= -5.3791999E-04
 D= 1.2759699E-07
 CP A 25°C
 CP0= 185.7214

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 119.4001
 B= 0.4534952
 C= -1.3057368E-04
 D= -5593484.
 CP A 25°C
 CP0= 180.0790
 %ERROR= 0.5559757

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

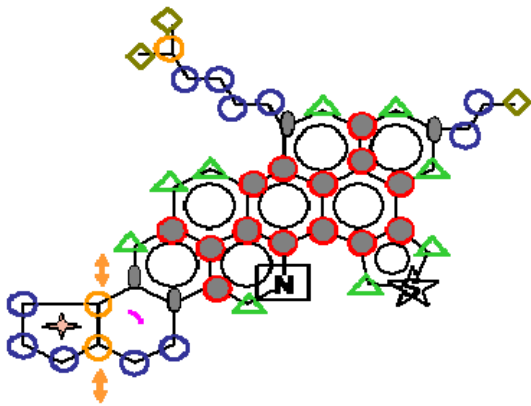
4 G1
 9 G2
 4 G3
 8 G19
 5 G20
 14 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29a

1 G29b2
 1 G30b2
 5 G31a1
 2 G31a2
 1 G31b1
 1 G32h
 1 G33j
 1 G34b
 1 G34c

As50

Codigo:682

PM: 612



G1:3
 G2: 11
 G3: 3
 G19: 9
 G20:4
 G21:14 ●
 G24a:1 ⊕
 G25b: 1
 G29b2: 1 †
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 4
 G31a2: 1

G31b1: 2
 G33j:1 □
 G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C44H43NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 46.87000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 238.6764

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.00350
 B= 0.8346670
 C= -5.0477998E-04
 D= 1.1715100E-07
 CP A 25°C
 CP0= 173.0858

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 104.9482
 B= 0.4438257
 C= -1.3082931E-04
 D= -5131964.
 CP A 25°C
 CP0= 167.9133

%ERROR= 0.5424289

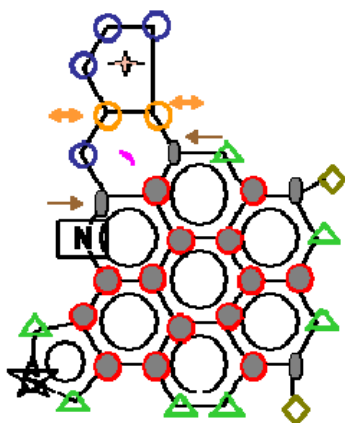
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
11 G2
3 G3
9 G19
4 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
4 G31a1
1 G31a2
2 G31b1
1 G33j
1 G34c

As51

Codigo: 683

PM:465



G1:2

G2: 4

G3: 2

G19: 7

G20:4

G21:14 ●

G24a:1 †

G25b: 1

G29b2: 1 †

G30a: 1 †

G30b2: 1 †

G31a1: 3

G31b1: 3

G33j: 1 □

G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C33H23NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
86.93000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
138.0607

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -30.93610

B= 0.5912410

C= -3.5964997E-04

D= 8.3859000E-08

CP A 25°C

CP0= 115.5944

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 68.58418

B= 0.3113690

C= -9.1924136E-05

D= -3676877.

CP A 25°C

CP0= 111.8847

%ERROR= 0.5685676

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

4 G2

2 G3

7 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

3 G31a1

3 G31b1

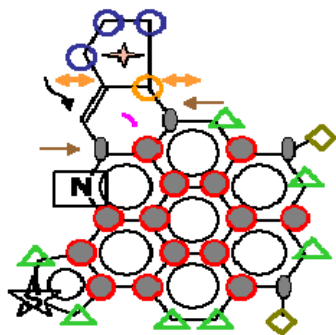
1 G33j

1 G34c

As52

Codigo:684

PM:463



G1:2
G2: 3
G3: 1
G9: 1
G19: 7
G20:4
G21:14
G24a:1
G25b: 1
G29b2: 1
G30a: 1
G30b2: 1
G31a1: 3

G31b1: 2
G31b1: 1
G33j: 1
G34c: 1

COMPUESTO=C33H21NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
110.0400

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
200.3298

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.27880
 B= 0.5695620
 C= -3.4322997E-04
 D= 7.9311000E-08
 CP A 25°C
 CP0= 112.1273

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 64.86739
 B= 0.3048280
 C= -9.0006251E-05
 D= -3478898.
 CP A 25°C
 CP0= 108.6153
 %ERROR= 0.5541079

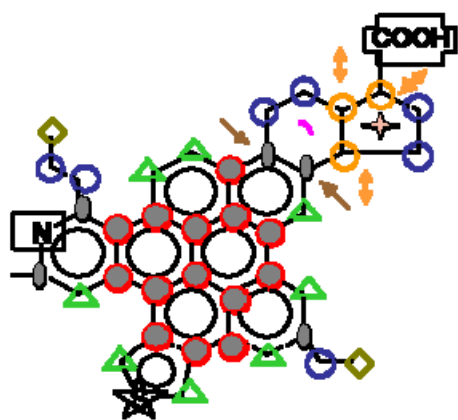
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
 3 G2
 1 G3
 1 G9
 7 G19
 4 G20
 14 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30a
 1 G30b2
 3 G31a1
 2 G31b1
 1 G31b2
 1 G33j
 1 G34c

As53

Codigo: 685

PM : 605



G1:3
 G2: 7
 G3: 3
 G19: 8
 G20:5
 G21:14 ●
 G24a:1 ✦
 G25b: 1
 G29a: 1 ↓
 G29b2: 1 ↑
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 5
 G31a2: 2

G31b1: 1
 G33j:1 □
 G34c: 1 ☆
 G32H:1 ⊕

COMPUESTO=C41H35NO2S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-26.25001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
239.1204

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.10710

B= 0.7798591

C= -4.7703998E-04

D= 1.1332700E-07

CP A 25°C

CP0= 159.0057

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 100.3762

B= 0.4016546

C= -1.1524168E-04

D= -4968406.

CP A 25°C

CP0= 153.9936

%ERROR= 0.5680325

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

7 G2

3 G3

8 G19

5 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

5 G31a1

2 G31a2

1 G31b1

1 G32h

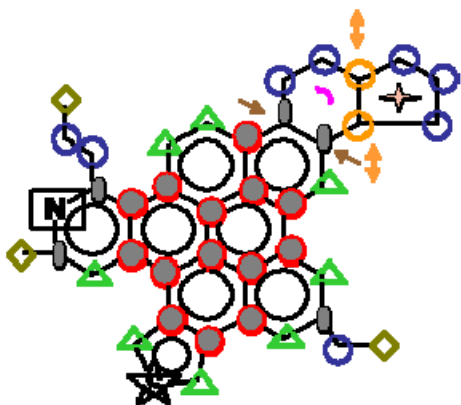
1 G33j

1 G34c

As54

Codigo: 686

PM:561



G1:3
G2: 8
G3: 2
G19: 8
G20:5
G21:14 ●
G24a:1 ✦
G25b: 1
G29b2: 1 †
G30b2: 1 ↓
G31a1: 2
G31a2: 2

G31b1: 3
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C40H35NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
65.56000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
209.0916

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.59490
B= 0.7324320
C= -4.3527997E-04
D= 1.0102200E-07
CP A 25°C
CP0= 150.7636

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 88.25179
B= 0.3953539
C= -1.1279252E-04
D= -4426866.
CP A 25°C
CP0= 146.3003
%ERROR= 0.5298889

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

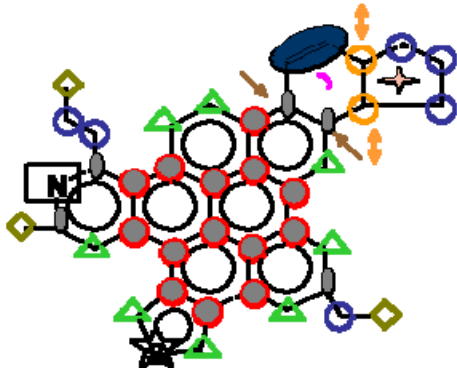
3 G1
8 G2
2 G3
8 G19
5 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2

1 G30b2
2 G31a1
2 G31a2
3 G31b1
1 G33j
1 G34c

As55

Codigo:687

PM:559



G1:3
G2: 6
G3: 2
G19: 8
G20:5
G21:14 ●
G24a:1 ✦
G25b: 1
G29b2: 1 ↓
G30b2: 1 ↓
G31a1: 2
G31a2: 2

G7:1 ●
G31b1: 3
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C40H33NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
93.40000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
206.1326

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.50490
B= 0.7205660
C= -4.3492997E-04
D= 1.0133400E-07
CP A 25°C
CP0= 143.3552

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 84.75311
B= 0.3823763
C= -1.1141622E-04
D= -4443126.
CP A 25°C
CP0= 138.8718
%ERROR= 0.5556170

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

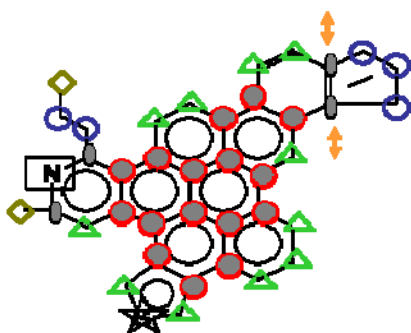
3 G1
6 G2

2 G3
 1 G7
 8 G19
 5 G20
 14 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30b2
 2 G31a1
 2 G31a2
 3 G31b1
 1 G33j
 1 G34c

As56

Codigo: 688

PM: 557



G1:2
 G2: 5
 G3: 3
 G19: 11
 G20:4
 G21:16 ●
 G24b:1 /
 G29b2: 1↕
 G31a1: 5
 G31a2: 1

G31b1: 2
 G33j: 1 □
 G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C38H27NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 101.8300

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 191.1813

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.79520
 B= 0.6266070
 C= -3.7134998E-04
 D= 8.4463998E-08
 CP A 25°C
 CP0= 139.2557

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 83.43735
 B= 0.3447265
 C= -1.0169748E-04
 D= -3703086.

CP A 25°C
CP0= 135.5197
%ERROR= 0.4968832

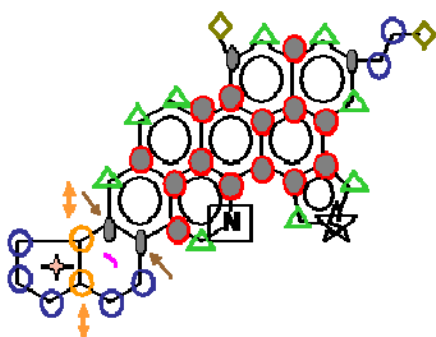
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
5 G2
11 G19
4 G20
16 G21
1 G24b
1 G29b2
5 G31a1
1 G31a2
2 G31b1
1 G33j
1 G34c

As57

Codigo: 689

PM:533



G1:2
G2: 7
G3: 2
G19: 9
G20:4
G21:14 ●
G24a:1 ✦
G25b: 1
G29b2: 1 †
G30b2: 1 ↓
G31a1: 4
G31a2: 1

G31b1: 2
G33j: 1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C38H31NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
78.17000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
187.8899

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.66700
B= 0.6936240
C= -4.2021999E-04
D= 9.7616997E-08
CP A 25°C
CP0= 139.3694

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 83.16883

B= 0.3678566
C= -1.0857978E-04
D= -4279379.
CP A 25°C
CP0= 135.0527
%ERROR= 0.5544970

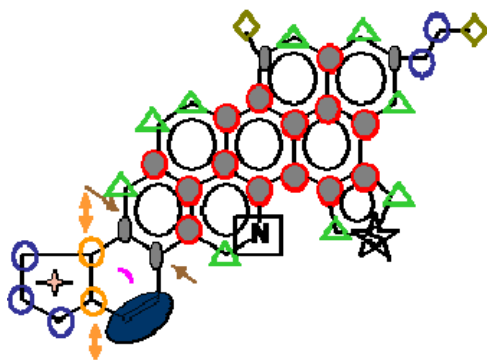
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
7 G2
2 G3
9 G19
4 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
4 G31a1
1 G31a2
2 G31b1
1 G33j
1 G34c

As58

Codigo: 690

PM: 531



G1:2
G2: 5
G3: 2
G19: 9
G20:4
G21:14 ●
G24a:1 ✦
G25b: 1
G29b2: 1 †
G30b2: 1 ↓
G31a1: 4
G31a2: 1

G7:1 ●
G31b1: 2
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C38H29NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
106.0100

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
184.9309

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -36.57700

B= 0.6817580

C= -4.1986999E-04

D= 9.7928996E-08

CP A 25°C

CP0= 131.9609

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 79.60484

B= 0.3549933

C= -1.0725347E-04

D= -4291648.

CP A 25°C

CP0= 127.6334

%ERROR= 0.5834563

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

5 G2

2 G3

1 G7

9 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

2 G31b1

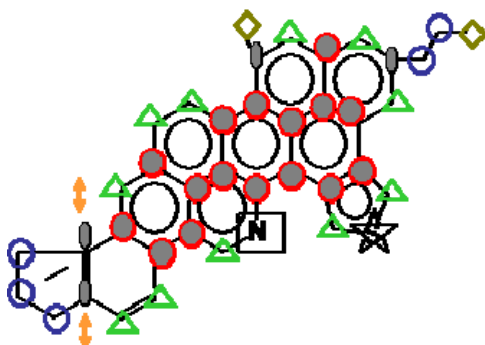
1 G33j

1 G34c

As59

Codigo:691

PM:529



G1:2
G2: 5
G19: 11
G20:4
G21:16 ●
G24b:1 /
G29b2: 1↓
G31a1: 5
G31a2: 1

G31b1: 2
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C38H27NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
101.8300

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
191.1813

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.79520

B= 0.6266070

C= -3.7134998E-04

D= 8.4463998E-08

CP A 25°C

CP0= 139.2557

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 83.43735

B= 0.3447265

C= -1.0169748E-04

D= -3703086.

CP A 25°C

CP0= 135.5197

%ERROR= 0.4968832

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

5 G2

11 G19

4 G20

16 G21

1 G24b

1 G29b2

5 G31a1

1 G31a2

2 G31b1

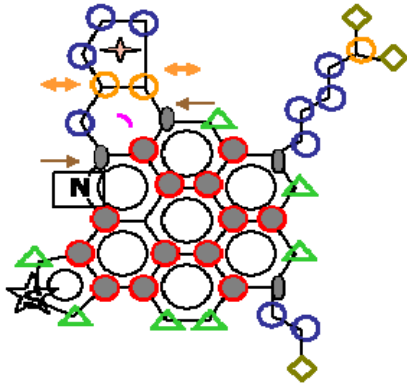
1 G33j

1 G34c

As60

Codigo:692

PM:565



G1:3
G2: 10
G3: 3
G19: 7
G20:4
G21:14 ●
G24a:1 ✚
G25b: 1
G29b2: 1 ↑
G30a: 1 ↑
G30b2: 1 ↓
G31a1: 3
G31b1: 2

G31b2: 1
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C41H39NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
43.95000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
207.4732

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.48360
B= 0.7750100
C= -4.6814998E-04
D= 1.0858500E-07
CP A 25°C
CP0= 160.8481

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 97.35492
B= 0.4126625
C= -1.2150469E-04
D= -4759482.
CP A 25°C
CP0= 156.0478
%ERROR= 0.5410397

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

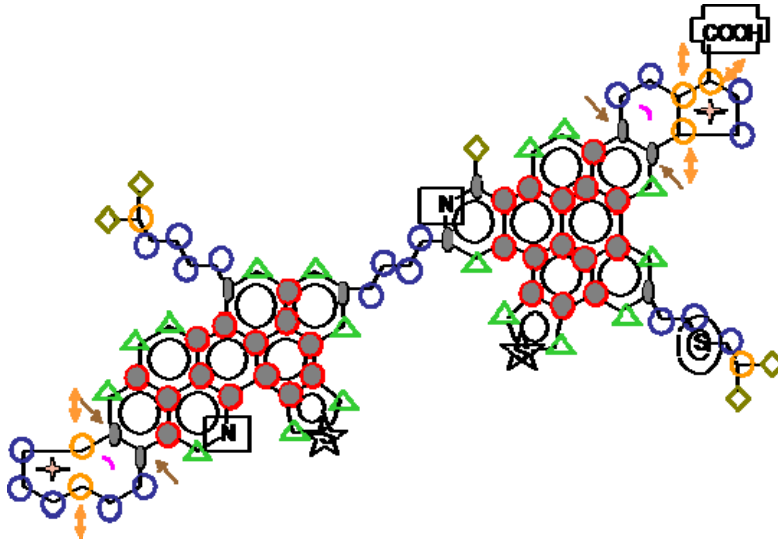
3 G1
10 G2
3 G3
7 G19
4 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30a
1 G30b2

3 G31a1
 2 G31b1
 1 G33j
 1 G34c

As61

Codigo: 693

PM:1280



G1:5
 G2: 20
 G3: 7
 G19: 17
 G20:9
 G21:28 ●
 G24a:2 ✦
 G25b: 2
 G29a: 1 †
 G29b2: 2 †
 G30b2: 2 †
 G31a1: 9
 G31a2: 3

G31b1: 3
 G33j:2 □
 G34c: 2 ☆
 G32H:1 ⊕
 G34b: 1 ⊙

COMPUESTO=C87H80N2O2S3

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 30.86999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 572.5872

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -67.22790
 B= 1.671104
 C= -1.0256600E-03
 D= 2.4247802E-07
 CP A 25°C
 CP0= 346.2639

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 220.5158
 B= 0.8618867
 C= -2.5154499E-04
 D= -1.0630435E+07
 CP A 25°C
 CP0= 335.5404
 %ERROR= 0.5637586

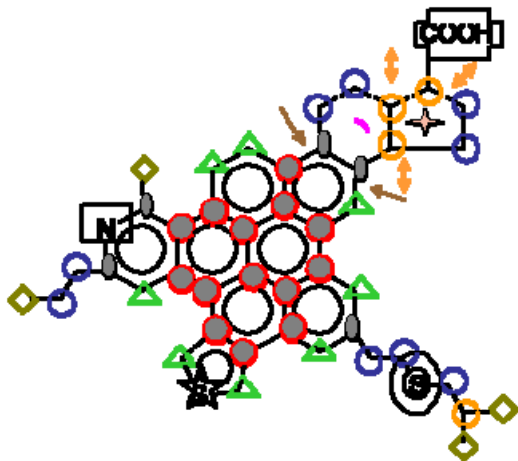
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy
 5 G1

20 G2
 7 G3
 17 G19
 9 G20
 28 G21
 2 G24a
 2 G25b
 1 G29a
 2 G29b2
 2 G30b2
 9 G31a1
 3 G31a2
 3 G31b1
 1 G32h
 2 G33j
 1 G34b
 2 G34c

As62

Codigo: 694

PM: 693



G1: 4
 G2: 9
 G3: 4
 G19: 8
 G20: 5
 G21: 14 ●
 G24a: 1 ✦
 G25b: 1
 G29a: 1 ⇕
 G29b2: 1 ⇕
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 2
 G31a2: 2
 G31b1: 3
 G33j: 1 □
 G34c: 1 ☆
 G34b: 1 ⊙
 G32H: 1 ⊕

COMPUESTO=C45H43NO2S2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 -35.71999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 313.7166

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.00700
 B= 0.8793030
 C= -5.3791999E-04
 D= 1.2759699E-07
 CP A 25°C
 CP0= 185.7214

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 119.4001
 B= 0.4534952
 C= -1.3057368E-04
 D= -5593484.
 CP A 25°C
 CP0= 180.0790
 %ERROR= 0.5559757

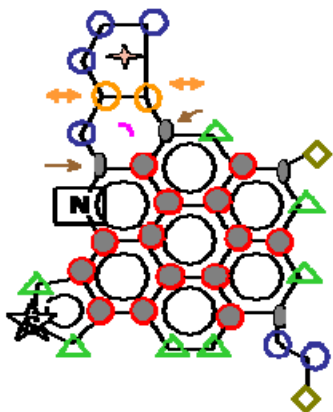
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

- 4 G1
- 9 G2
- 4 G3
- 8 G19
- 5 G20
- 14 G21
- 1 G24a
- 1 G25b
- 1 G29a
- 1 G29b2
- 1 G30b2
- 2 G31a1
- 2 G31a2
- 3 G31b1
- 1 G32h
- 1 G33j
- 1 G34b
- 1 G34c

As63

Codigo: 695

PM:493



G1:2
 G2: 6
 G3: 2
 G19: 7
 G20:4
 G21:14 ●
 G24a:1 ✦
 G25b: 1
 G29b2: 1 ↓
 G30a: 1 ↑
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 3
 G31b1: 2

G31b2: 1
 G33j:1 □
 G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C35H27NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
75.69000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
154.4731

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -30.14710

B= 0.6339670

C= -3.8358997E-04

D= 8.9050999E-08

CP A 25°C

CP0= 127.1317

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 75.50900

B= 0.3368134

C= -9.9308883E-05

D= -3902987.

CP A 25°C

CP0= 123.1957

%ERROR= 0.5536621

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

6 G2

2 G3

7 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

3 G31a1

2 G31b1

1 G31b2

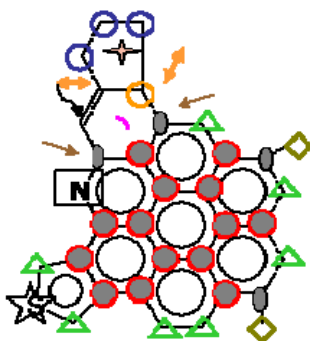
1 G33j

1 G34c

As64

Codigo: 696

PM:491



G1:2
G2: 3
G3: 1
G19: 7
G20:4
G21:14 ●
G24a:1 ✕
G25b: 1
G29b2: 1↕
G30a: 1 ↑
G30b2: 1 ↓
G31a1: 3
G31b1: 2

G9:1 ↙
G31b2: 1
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C33H21NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
110.0400

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
200.3298

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.27880
B= 0.5695620
C= -3.4322997E-04
D= 7.9311000E-08
CP A 25°C
CP0= 112.1273

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 64.86739
B= 0.3048280
C= -9.0006251E-05
D= -3478898.
CP A 25°C
CP0= 108.6153
%ERROR= 0.5541079

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

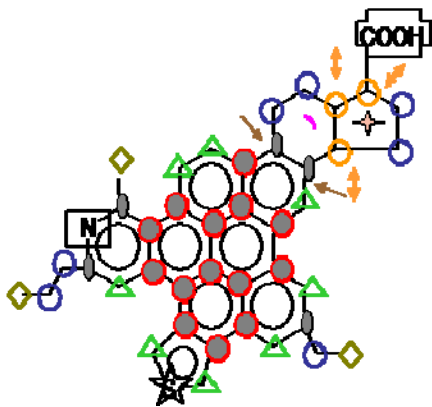
2 G1
3 G2
1 G3
1 G9
7 G19
4 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2

1 G30a
 1 G30b2
 3 G31a1
 2 G31b1
 1 G31b2
 1 G33j
 1 G34c

As65

Codigo: 697

PM: 605



G1:3
 G2: 7
 G3: 3
 G19: 8
 G20:5
 G21:14 ●
 G24a:1 ✦
 G25b: 1
 G29a: 1 ↓
 G29b2: 1 ↓
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 3
 G31a2: 1
 G31b1: 2
 G31b2: 1
 G33j: 1 □
 G34c: 1 ☆
 G32H: 1 ⊕

COMPUESTO=C₄₁H₃₅N₂O₂S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 -26.27001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 234.7602

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.10710
 B= 0.7798591
 C= -4.7703998E-04
 D= 1.1332700E-07
 CP A 25°C
 CP0= 159.0057

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 100.3762
 B= 0.4016546
 C= -1.1524168E-04
 D= -4968406.
 CP A 25°C
 CP0= 153.9936
 %ERROR= 0.5680325

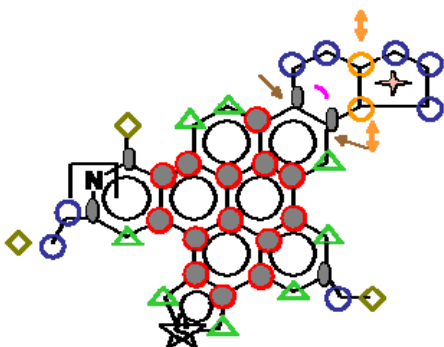
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy
 3 G1

7 G2
 3 G3
 8 G19
 5 G20
 14 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29a
 1 G29b2
 1 G30b2
 3 G31a1
 1 G31a2
 2 G31b1
 1 G31b2
 1 G32h
 1 G33j
 1 G34c

As66

Codigo: 698

PM: 561



G1:3
 G2: 8
 G3: 2
 G19: 8
 G20:5
 G21:14 ●
 G24a:1 ✕
 G25b: 1
 G29b2: 1 ⇕
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 5
 G31a2: 2

G31b1: 1
 G33j:1 □
 G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C40H35NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 64.77999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 209.0245

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.59490
 B= 0.7324320
 C= -4.3527997E-04
 D= 1.0102200E-07
 CP A 25°C
 CP0= 150.7636

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 88.25179
 B= 0.3953539
 C= -1.1279252E-04
 D= -4426866.

CP A 25°C
CP0= 146.3003
%ERROR= 0.5298889

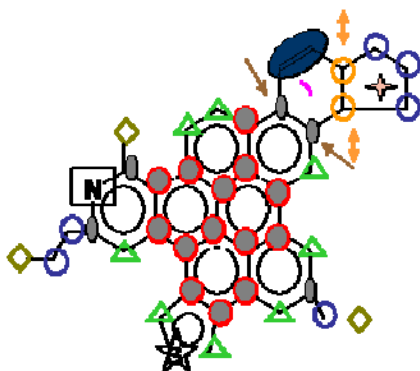
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
8 G2
2 G3
8 G19
5 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
5 G31a1
2 G31a2
1 G31b1
1 G33j
1 G34c

As67

Codigo: 699

PM:559



G1:3
G2: 6
G3: 2
G19: 8
G20:5
G21:14 ●
G24a:1 ✦
G25b: 1
G29b2: 1 ↓
G30b2: 1 ↓
G31a1: 5
G31a2: 2

G31b1: 1
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C40H33NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
92.62000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
206.0655

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.50490

B= 0.7205660

C= -4.3492997E-04
D= 1.0133400E-07
CP A 25°C
CP0= 143.3552

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 84.75311
B= 0.3823763
C= -1.1141622E-04
D= -4443126.
CP A 25°C
CP0= 138.8718
%ERROR= 0.5556170

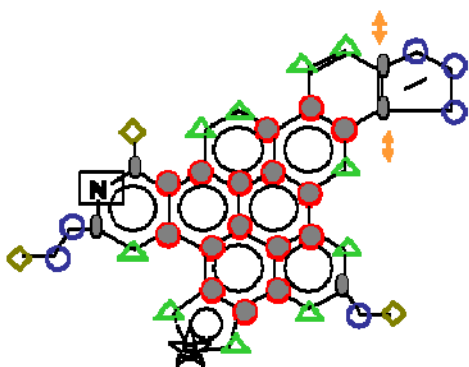
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
6 G2
2 G3
1 G7
8 G19
5 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
5 G31a1
2 G31a2
1 G31b1
1 G33j
1 G34c

As68

Codigo: 700

PM: 557



G1:3
G2: 6
G19: 10
G20:5
G21:16 ●
G24b:1 /
G29b2: 1 †
G31a1: 6
G31a2: 2

G31b1: 1
G33j:1 □
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C40H31NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
88.44001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=

212.3159

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -15.72310

B= 0.6654150

C= -3.8640999E-04

D= 8.7868997E-08

CP A 25°C

CP0= 150.6499

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 88.51626

B= 0.3722309

C= -1.0591345E-04

D= -3850313.

CP A 25°C

CP0= 146.7681

%ERROR= 0.4759641

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

6 G2

10 G19

5 G20

16 G21

1 G24b

1 G29b2

6 G31a1

2 G31a2

1 G31b1

1 G33j

1 G34c

MOLECULAS NEUTRAS ÚLTIMAS

Codigo: 844

C1

C5H10S



COMPUESTO=C5H10O

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-63.52000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
51.72308

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -0.6955001

B= 0.1192200

C= -7.0080001E-05

D= 1.5914001E-08

CP A 25°C

CP0= 29.04207

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 20.43057

B= 6.2370405E-02

C= -1.7656430E-05

D= -874577.4

CP A 25°C

CP0= 27.61827

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

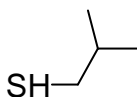
1 G3

1 G32g

Codigo: 845

SH1

C4H10S



COMPUESTO=C4H10S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-22.13000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
115.5125

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 0.6483999

B= 0.1117340

C= -6.9059999E-05

D= 1.6701000E-08

CP A 25°C

CP0= 28.26555

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 20.46940

B= 5.5994559E-02

C= -1.5740414E-05

D= -732349.6

CP A 25°C

CP0= 27.52645

%ERROR= 0.5150575

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

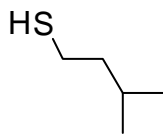
2 G1

1 G2

1 G3

1 G34a

Codigo: 846 SH2 C5H12S



COMPUESTO=C5H12S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-27.07000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
124.6411

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 1.042900

B= 0.1330970

C= -8.1029997E-05

D= 1.9297000E-08

CP A 25°C

CP0= 34.03417

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 23.94387

B= 6.8694770E-02

C= -1.9422876E-05

D= -846101.5

CP A 25°C

CP0= 33.18050

%ERROR= 0.4938742

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

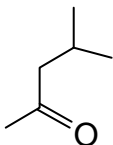
2 G1

2 G2

1 G3

1 G34a

Codigo: 847 C2 C6H12O



COMPUESTO=C6H12O

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=

-68.46000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=

60.85164

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -0.3010001

B= 0.1405830

C= -8.2049992E-05

D= 1.8510001E-08

CP A 25°C

CP0= 34.81070

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 21.67401

B= 7.8793243E-02

C= -2.2949247E-05

D= -812080.8

CP A 25°C

CP0= 33.99073

%ERROR= 0.4522085

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

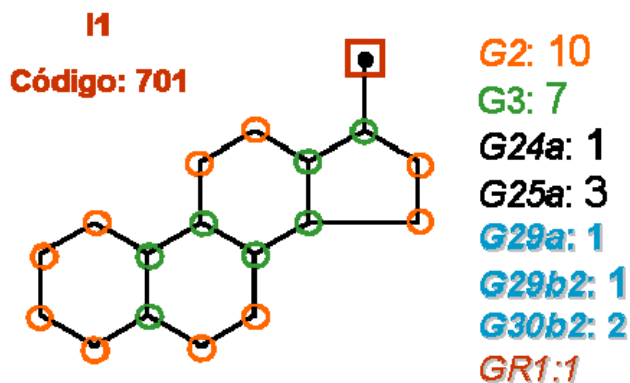
1 G2

1 G3 1 G32g

APÉNDICE I

Aplicación del Método de contribuciones de grupo para el cálculo de las propiedades termodinámicas de los radicales libres.

RADICALES SATURADOS



COMPUESTO=C18H29

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-19.15000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
127.5627

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

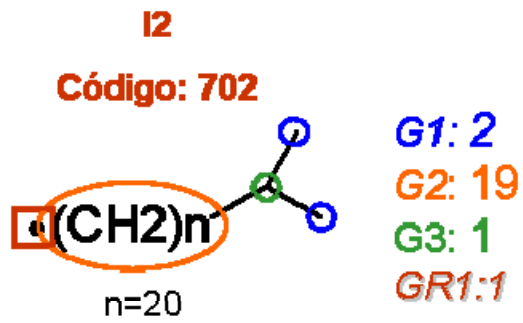
A= -72.68020
B= 0.5357550
C= -3.4006184E-04
D= 7.8615003E-08
CP A 25°C
CP0= 58.90948

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 31.64644
B= 0.2549804
C= -8.1116588E-05
D= -4318028.
CP A 25°C
CP0= 51.88278

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

10 G2
7 G3
1 G24a
3 G25a
1 G29a
1 G29b2
2 G30b2
1 GR1



COMPUESTO=C23H47

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-79.83000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
263.7493

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 5.688800

B= 0.4831550

C= -2.7263185E-04

D= 5.9609000E-08

CP A 25°C

CP0= 127.0861

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 84.76836

B= 0.2703029

C= -7.6307275E-05

D= -3272396.

CP A 25°C

CP0= 121.7634

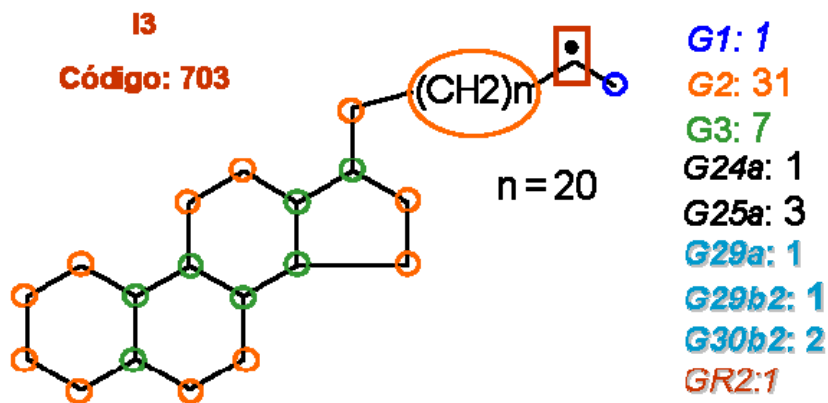
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

19 G2

1 G3

1 GR1



COMPUESTO=C40H73

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-131.5100

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
312.0569

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -63.20970

B= 1.005754

C= -5.9995143E-04

D= 1.3426600E-07

CP A 25°C

CP0= 186.8826

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 114.9674

B= 0.5262246

C= -1.5770245E-04

D= -7374676.

CP A 25°C

CP0= 174.8817

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

31 G2

7 G3

1 G24a

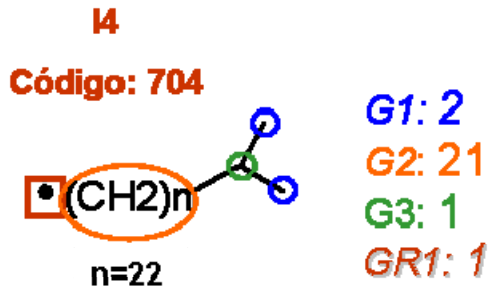
3 G25a

1 G29a

1 G29b2

2 G30b2

1 GR2



COMPUESTO=C25H51

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 -89.71000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 282.0065

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

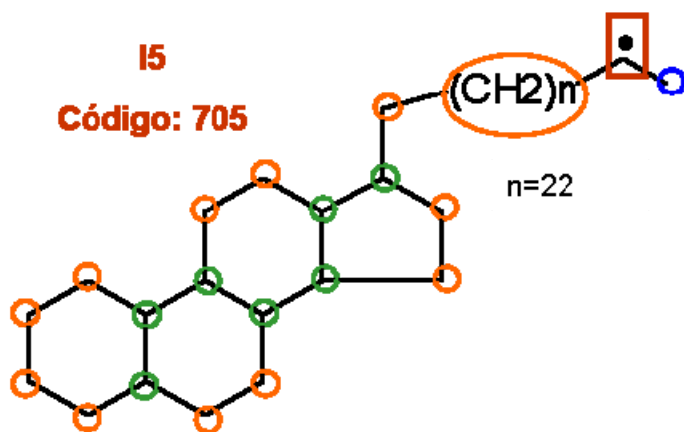
A= 6.477800
 B= 0.5258810
 C= -2.9657184E-04
 D= 6.4801000E-08
 CP A 25°C
 CP0= 138.6234

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 92.46532
 B= 0.2944552
 C= -8.3132727E-05
 D= -3558768.
 CP A 25°C
 CP0= 132.8331

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
 21 G2
 1 G3
 1 GR1



G1: 1
G2: 33
G3: 7
G24a: 1
G25a: 3
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 2
GR2:1

COMPUESTO=C42H77

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 -141.3900

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 330.3139

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -62.42070

B= 1.048480

C= -6.2389142E-04

D= 1.3945801E-07

CP A 25°C

CP0= 198.4199

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 122.5916

B= 0.5505000

C= -1.6458014E-04

D= -7656090.

CP A 25°C

CP0= 185.9664

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

33 G2

7 G3

1 G24a

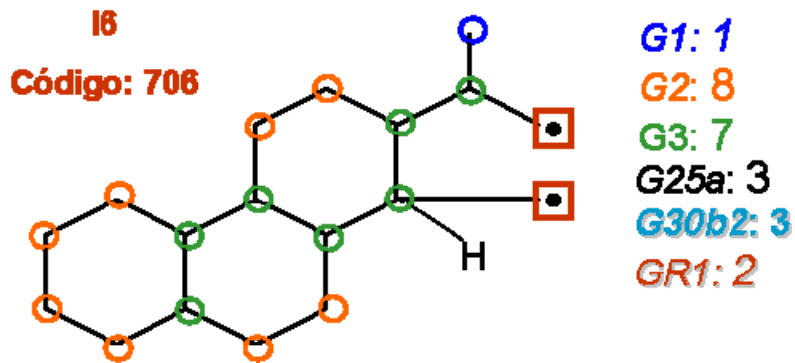
3 G25a

1 G29a

1 G29b2

2 G30b2

1 GR2



COMPUESTO=C18H30

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
9.960003

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
181.9964

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -60.07640

B= 0.4960870

C= -3.1427376E-04

D= 7.2413002E-08

CP A 25°C

CP0= 61.81427

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 35.99589

B= 0.2375032

C= -7.5774013E-05

D= -3975732.

CP A 25°C

CP0= 55.34696

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

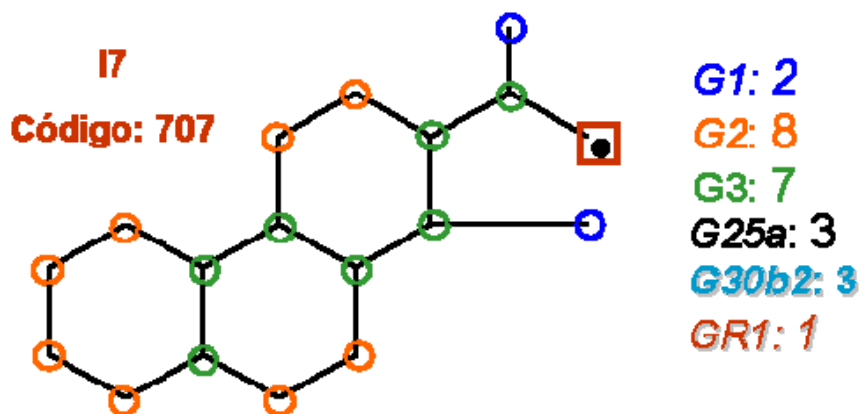
8 G2

7 G3

3 G25a

3 G30b2

2 GR1



COMPUESTO=C18H31

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-36.11000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
131.4707

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -59.96680

B= 0.5172860

C= -3.2279186E-04

D= 7.3548001E-08

CP A 25°C

CP0= 67.51723

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 37.63568

B= 0.2546073

C= -8.0535829E-05

D= -4039669.

CP A 25°C

CP0= 60.94379

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

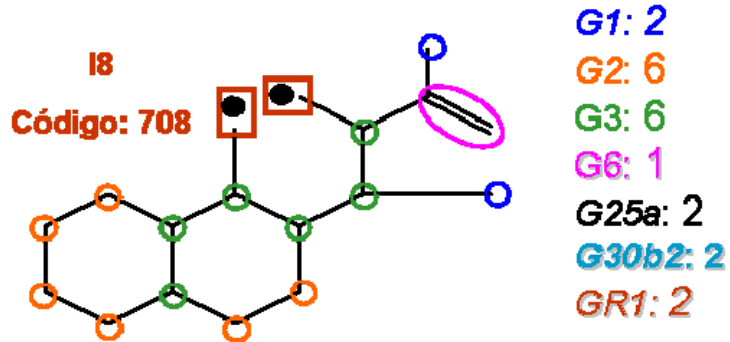
8 G2

7 G3

3 G25a

3 G30b2

1 GR1



COMPUESTO=C18H30

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
32.34000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
216.9617

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -43.75850

B= 0.4581010

C= -2.9423373E-04

D= 6.9570000E-08

CP A 25°C

CP0= 68.51273

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 48.56721

B= 0.2096269

C= -6.5079672E-05

D= -3821380.

CP A 25°C

CP0= 62.29399

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

6 G2

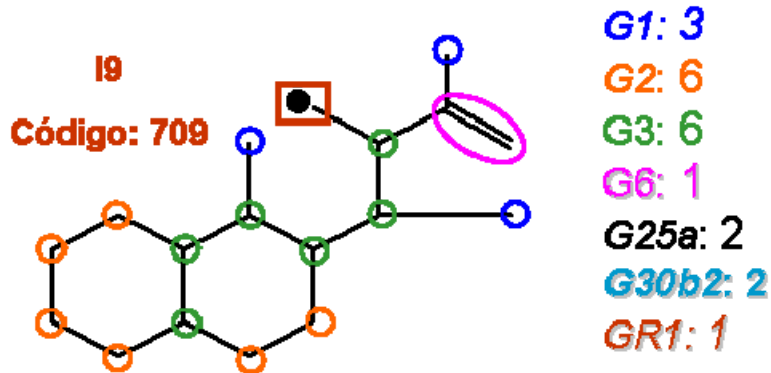
6 G3

1 G6

2 G25a

2 G30b2

2 GR1



COMPUESTO=C18H31

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-13.73000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
166.4361

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -43.64890

B= 0.4793000

C= -3.0275184E-04

D= 7.0704999E-08

CP A 25°C

CP0= 74.21569

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 50.20097

B= 0.2267416

C= -6.9846079E-05

D= -3884924.

CP A 25°C

CP0= 67.89194

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

6 G2

6 G3

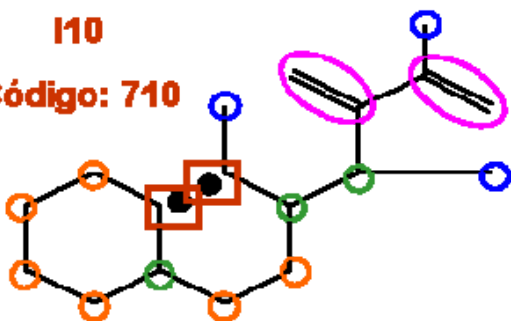
1 G6

2 G25a

2 G30b2

1 GR1

I10
Código: 710



G1: 3
G2: 6
G3: 3
G6: 2
G25a: 1
G30a: 1
GR2: 2

COMPUESTO=C18H30

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
50.88000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
230.3811

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -18.45060

B= 0.3944110

C= -2.4181296E-04

D= 5.5889000E-08

CP A 25°C

CP0= 79.12871

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 55.73166

B= 0.1947778

C= -5.7712739E-05

D= -3070712.

CP A 25°C

CP0= 74.13062

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

6 G2

3 G3

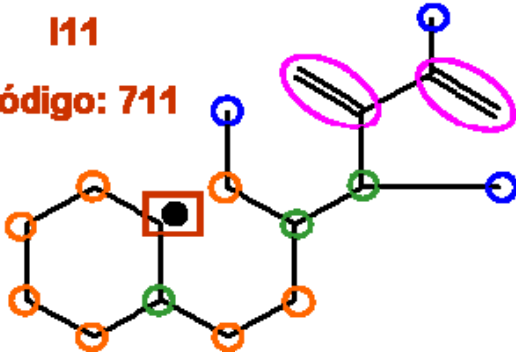
2 G6

1 G25a

1 G30a

2 GR2

I11
Código: 711



G1: 3
G2: 7
G3: 3
G6: 2
G25a: 1
G30a: 2
GR2: 1

COMPUESTO=C18H31

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
8.489996

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
196.1897

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -19.13250

B= 0.4155970

C= -2.5378147E-04

D= 5.8485004E-08

CP A 25°C

CP0= 83.76830

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 58.47202

B= 0.2067318

C= -6.1147715E-05

D= -3211817.

CP A 25°C

CP0= 78.54237

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

7 G2

3 G3

2 G6

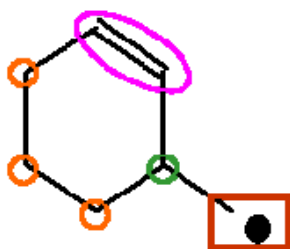
1 G25a

1 G30a

1 GR2

I12

Código: 712



G2: 3

G3: 1

G7: 1

G25b: 1

G30a: 1

GR1: 1

COMPUESTO=C7H11

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
37.67000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
115.6086

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -11.84290

B= 0.1371590

C= -9.1111870E-05

D= 2.1898000E-08

CP A 25°C

CP0= 21.53218

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 17.22108

B= 5.8942989E-02

C= -1.8980352E-05

D= -1203048.

CP A 25°C

CP0= 19.57409

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G2

1 G3

1 G7

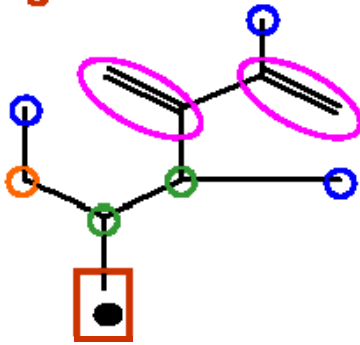
1 G25b

1 G30a

1 GR1

I13

Código: 713



G1: 3
G2: 1
G3: 2
G6: 2
GR1: 1

COMPUESTO=C11H19

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
38.55000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
170.3649

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -5.161300

B= 0.2319260

C= -1.4951186E-04

D= 3.6759001E-08

CP A 25°C

CP0= 51.67106

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 43.64526

B= 0.1005975

C= -2.8415017E-05

D= -2020724.

CP A 25°C

CP0= 48.38050

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

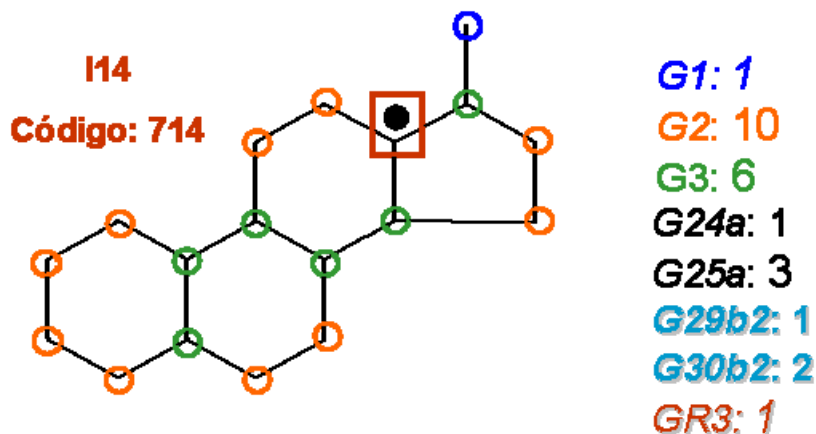
3 G1

1 G2

2 G3

2 G6

1 GR1



COMPUESTO=C18H29

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 -25.93000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 93.84087

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -68.78150

B= 0.5229680

C= -3.2042165E-04

D= 7.1735002E-08

CP A 25°C

CP0= 60.55926

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 26.42055

B= 0.2667554

C= -8.4133513E-05

D= -3940484.

CP A 25°C

CP0= 54.14656

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

10 G2

6 G3

1 G24a

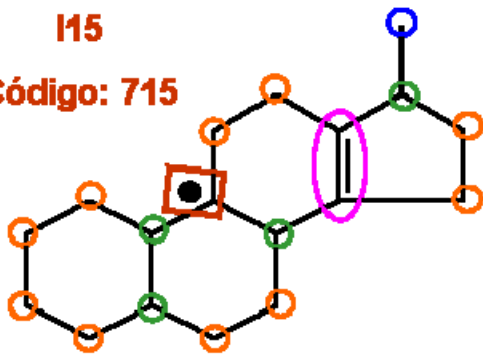
3 G25a

1 G29b2

2 G30b2

1 GR3

I15
Código: 715



G1: 1
G2: 10
G3: 4
G10: 1
G24b: 1
G25a: 3
G29b2: 1
G30b2: 2
GR3: 1

COMPUESTO=C18H27

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-19.59000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
133.4496

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -55.85780

B= 0.4790440

C= -2.8868165E-04

D= 6.3356005E-08

CP A 25°C

CP0= 62.98643

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 28.18996

B= 0.2528180

C= -8.0019192E-05

D= -3477994.

CP A 25°C

CP0= 57.32904

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

10 G2

4 G3

1 G10

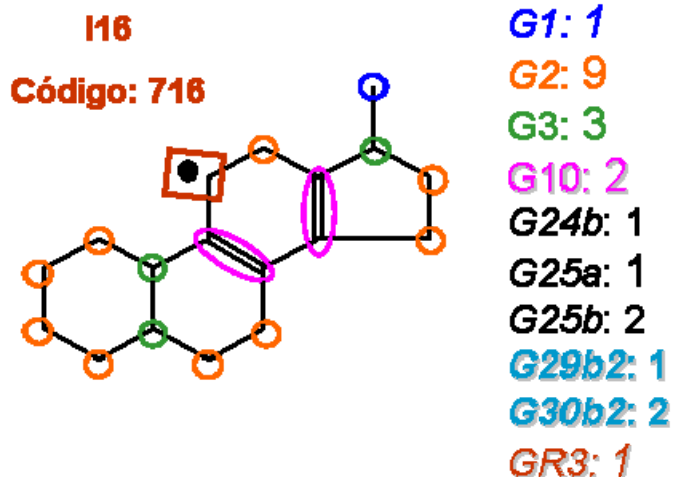
1 G24b

3 G25a

1 G29b2

1 G30b2

1 GR3



COMPUESTO=C18H25

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 -3.589996

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 215.3451

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -38.42300

B= 0.4315630

C= -2.7837144E-04

D= 6.6862007E-08

CP A 25°C

CP0= 67.27419

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 50.32164

B= 0.1927385

C= -5.8127440E-05

D= -3673457.

CP A 25°C

CP0= 61.29519

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

9 G2

3 G3

2 G10

1 G24b

1 G25a

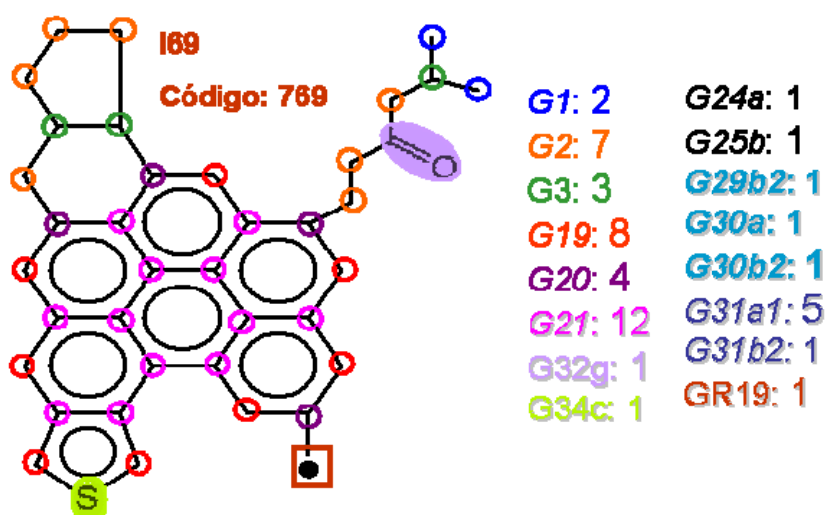
2 G25b

1 G29b2

2 G30b2

1 GR2

RADICALES ASFALTENOS



COMPUESTO=C38H33SO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
53.57000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
252.6517

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -36.39981

B= 0.7019010

C= -4.3702236E-04

D= 1.0561600E-07

CP A 25°C

CP0= 136.8228

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 103.7637

B= 0.3246835

C= -8.9136600E-05

D= -5801428.

CP A 25°C

CP0= 127.3817

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

7 G2

3 G3

8 G19

4 G20

12 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

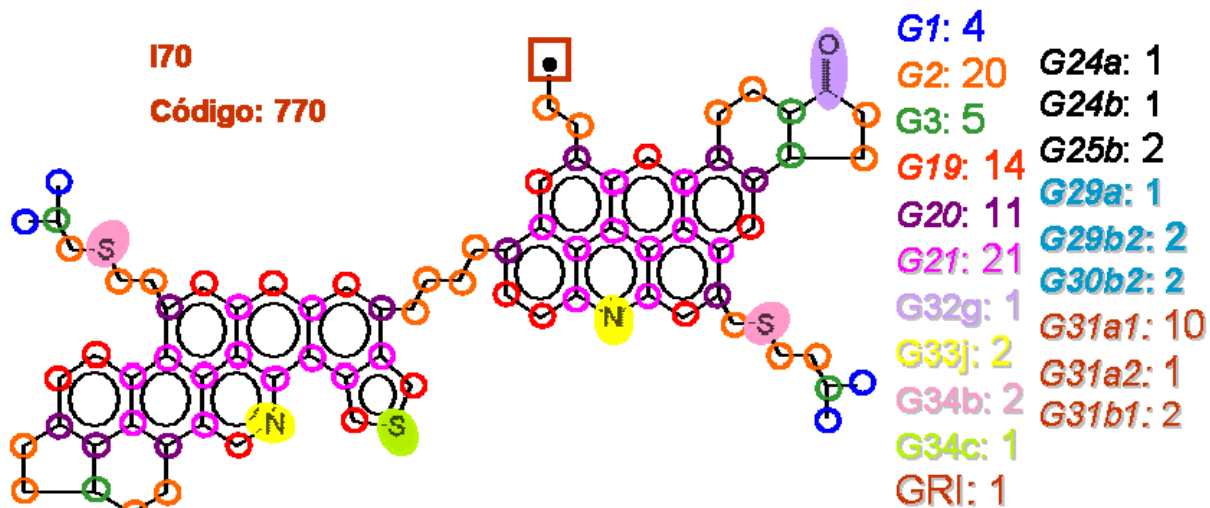
5 G31a1

1 G31b2

1 G32g

1 G34c

1 GR19



COMPUESTO=C77H73OS3N2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
108.9600

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
490.9709

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -47.52510

B= 1.438226

C= -8.6577196E-04

D= 2.0829401E-07

CP A 25°C

CP0= 309.8412

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 228.8448

B= 0.6943830

C= -1.7971967E-04

D= -1.1437501E+07

CP A 25°C

CP0= 291.2339

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

20 G2

5 G3

14 G19

11 G20

21 G21

1 G24a

1 G24b

1 G25b

2 G29a

2 G29b2

2 G30b2

10 G31a1

1 G31a2

2 G31b1

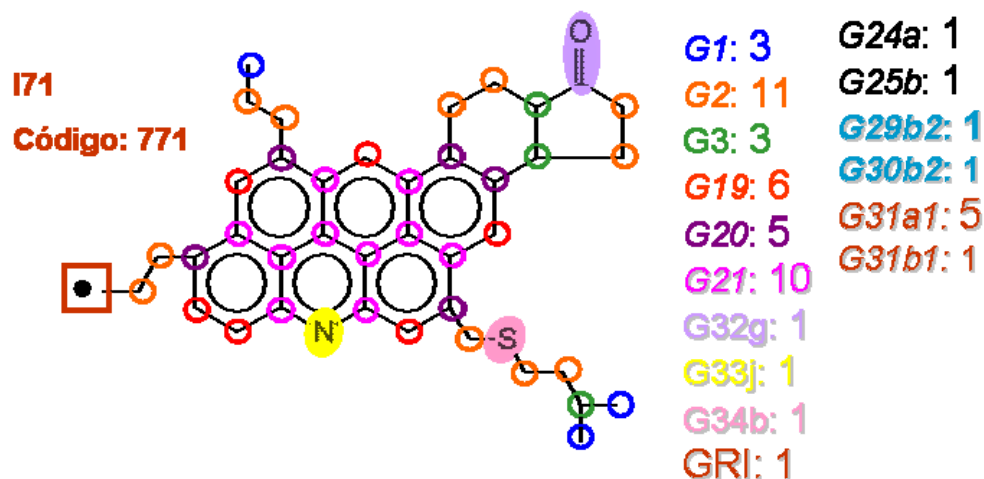
1 G32g

2 G33j

2 G34b

1 G34c

1 GRI



COMPUESTO=C40H42OSN

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
31.16000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
268.5095

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.86390

B= 0.7661300

C= -4.6442184E-04

D= 1.1287000E-07

CP A 25°C

CP0= 160.2652

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 119.9181

B= 0.3630178

C= -9.2647948E-05

D= -6199301.

CP A 25°C

CP0= 150.1775

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

11 G2

3 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

5 G31a1

1 G31b1

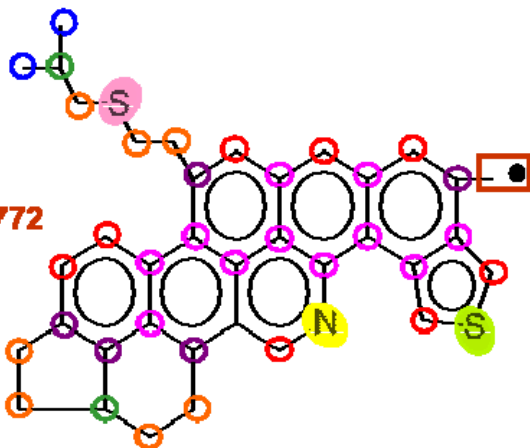
1 G32g

1 G33j

1 G34b

1 GR1

I72
Código: 772



G1: 2 **G24b: 1**
G2: 7 **G25b: 1**
G3: 2 **G29a: 1**
G19: 8 **G29b2: 1**
G20: 6 **G30b2: 1**
G21: 11 **G31a1: 4**
G33j: 1 **G31a2: 1**
G34b: 1 **G31b1: 1**
G34c: 1
GRI: 1

COMPUESTO=C37H32S2N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 112.3100

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 298.6725

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -24.22370

B= 0.6588550

C= -3.8938184E-04

D= 9.1958000E-08

CP A 25°C

CP0= 140.0377

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 97.79816

B= 0.3304452

C= -8.6495063E-05

D= -5050082.

CP A 25°C

CP0= 131.8210

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

7 G2

2 G3

8 G19

6 G20

11 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

1 G31b1

1 G33j

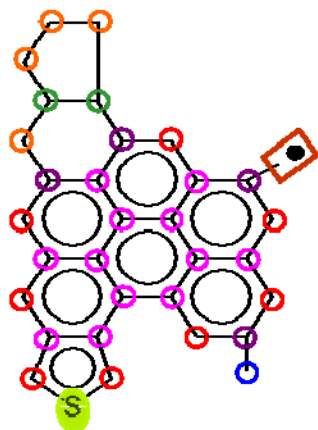
1 G34b

1 G34c

1 GR1

I73

Código: 773



G1: 1	G24a: 1
G2: 4	G25b: 1
G3: 2	G29b2: 1
G19: 8	G30a: 1
G20: 5	G30b2: 1
G21: 11	G31a1: 1
G34c: 1	G31a2: 1
GRI: 1	G31b1: 3

COMPUESTO=C32H23S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
126.8800

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
232.4754

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -36.70270

B= 0.5644020

C= -3.4642182E-04

D= 8.4720995E-08

CP A 25°C

CP0= 103.0245

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 75.72786

B= 0.2618182

C= -6.7363733E-05

D= -4653466.

CP A 25°C

CP0= 95.45192

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

4 G2

2 G3

8 G19

5 G20

11 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a2

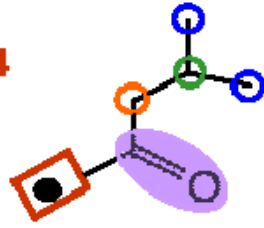
3 G31b1

1 G34c

1 GR1

I74

Código: 774



G1: 2

G2: 1

G3: 1

G32g: 1

GRI: 1

COMPUESTO=C6H11O

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-22.39000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
80.16931

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -0.4106000

B= 0.1193840

C= -7.3531875E-05

D= 1.7375001E-08

CP A 25°C

CP0= 29.10774

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 22.64308

B= 5.7335649E-02

C= -1.6304270E-05

D= -954078.1

CP A 25°C

CP0= 27.55552

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

1 G2

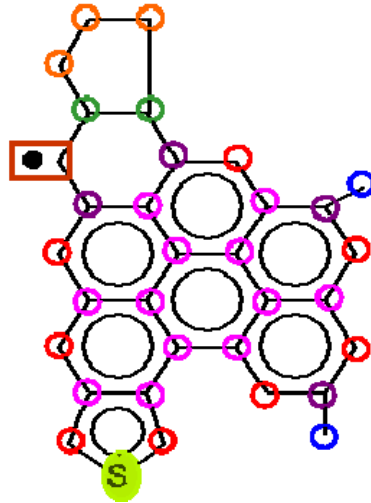
1 G3

1 G32g

1 GR1

I75

Código: 775



G1: 1	G24a: 1
G2: 3	G25b: 1
G3: 2	G29b2: 1
G19: 8	G30a: 1
G20: 4	G30b2: 1
G21: 12	G31a1: 1
G34c: 1	G31a2: 1
GR2: 1	G31b1: 1
	G31b2: 2

COMPUESTO=C32H23S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
119.4100

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
218.5803

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.40100

B= 0.5614260

C= -3.4462145E-04

D= 8.2722998E-08

CP A 25°C

CP0= 104.5461

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 75.37830

B= 0.2659777

C= -7.2144241E-05

D= -4543725.

CP A 25°C

CP0= 97.15210

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

3 G2

2 G3

8 G19

4 G20

12 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a2

1 G31b1

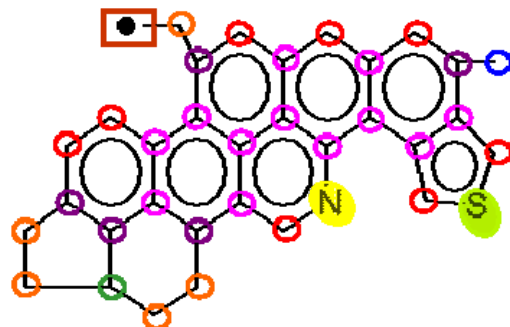
2 G31b2

1 G34c

1 GR2

I76

Código: 776



G1: 1 G24b: 1
G2: 5 G25b: 1
G3: 1 G29a: 1
G19: 8 G29b2: 1
G20: 5 G30b2: 1
G21: 12 G31a1: 4
G33j: 1 G31a2: 1
G34c: 1 G31b1: 1
GRI: 1

COMPUESTO=C33H24NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
118.6700

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
231.0771

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -24.81360

B= 0.5564220

C= -3.3015184E-04

D= 7.7151000E-08

CP A 25°C

CP0= 113.7801

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 77.53117

B= 0.2809426

C= -7.6057222E-05

D= -4234980.

CP A 25°C

CP0= 106.8921

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

5 G2

1 G3

8 G19

5 G20

12 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a2

1 G31b1

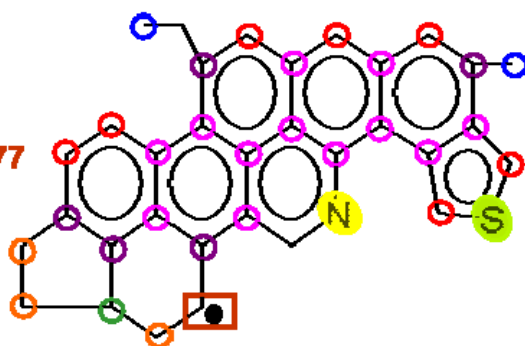
1 G33j

1 G34c

1 GR1

177

Código: 777



G1: 2 G24b: 1
G2: 4 G25b: 1
G3: 1 G29a: 1
G19: 8 G29b2: 1
G20: 5 G30b2: 1
G21: 12 G31a1: 4
G33j: 1 G31a2: 1
G34c: 1 G31b1: 1
GR2: 1

COMPUESTO=C33H24NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
117.8100

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
213.9379

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -24.02210

B= 0.5564350

C= -3.2670147E-04

D= 7.5690004E-08

CP A 25°C

CP0= 114.8435

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 76.38187

B= 0.2861774

C= -7.7420889E-05

D= -4154625.

CP A 25°C

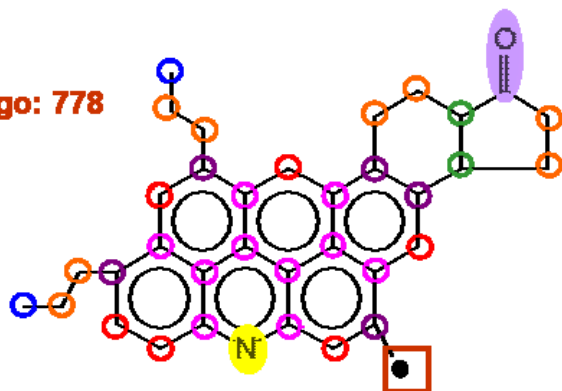
CP0= 108.0863

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
4 G2
1 G3
8 G19
5 G20
12 G21
1 G24b
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
4 G31a1
1 G31a2
1 G31b1
1 G33j
1 G34c
1 GR2

I78

Código: 778



G1: 2

G2: 8

G3: 2

G19: 6

G20: 5

G21: 10

G32g: 1

G33j: 1

GRI: 1

G24a: 1

G25b: 1

G29a: 1

G29b2: 1

G30b2: 1

G31a1: 1

G31a3: 1

G31b1: 1

G31b2: 2

COMPUESTO=C35H32NO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
43.61000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
186.0258

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.35850

B= 0.6453230

C= -3.9157184E-04

D= 9.6004001E-08

CP A 25°C

CP0= 127.7808

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 95.06436

B= 0.3024088

C= -7.5335076E-05

D= -5274462.

CP A 25°C

CP0= 119.1961

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

8 G2

2 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a3

1 G31b1

1 G31b2

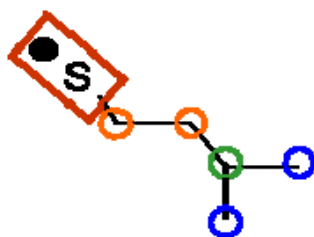
1 G32g

1 G33j

1 GRI

I79

Código: 779



G1: 2

G2: 2

G3: 1

GR11: 1

COMPUESTO=C5H11S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
0.7299995

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
91.88370

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 0.7230999

B= 0.1200130

C= -6.9141373E-05

D= 1.5476999E-08

CP A 25°C

CP0= 30.76896

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 21.26249

B= 6.4735904E-02

C= -1.8162316E-05

D= -850136.2

CP A 25°C

CP0= 29.38544

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

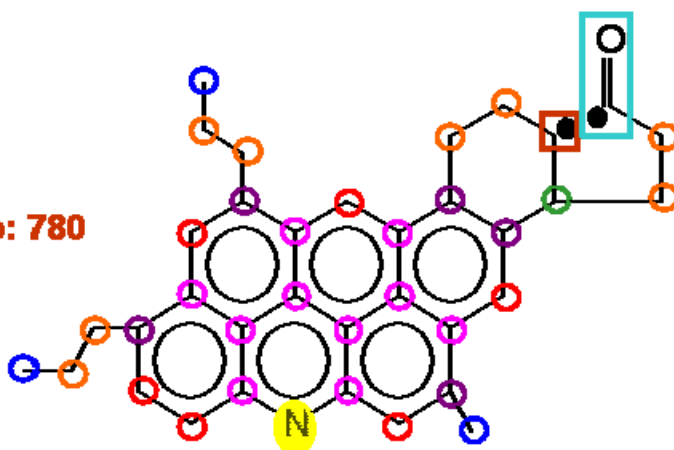
2 G2

1 G3

1 GR11

180

Código: 780



G1: 3

G2: 8

G3: 1

G19: 6

G20: 5

G21: 10

G33j: 1

GR2: 1

GR23: 1

G25b: 1

G30a: 1

G30b2: 1

G31a1: 1

G31a3: 1

G31b1: 1

G31b2: 2

COMPUESTO=C35H33NO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
56.21999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
233.1413

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -9.455297

B= 0.5933600

C= -3.4520120E-04

D= 8.2485002E-08

CP A 25°C

CP0= 138.9550

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 99.99872

B= 0.2987766

C= -7.3513896E-05

D= -4529944.

CP A 25°C

CP0= 131.5848

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

8 G2

1 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a3

1 G31b1

1 G31b2

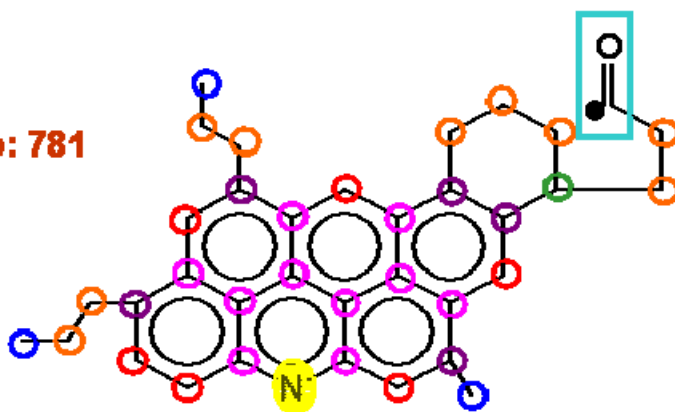
1 G33j

1 GR2

1 GR23

I81

Código: 781



G1: 3

G2: 9

G3: 1

G19: 6

G20: 5

G21: 10

G33j: 1

GR23: 1

G25b: 1

G30a: 1

G30b2: 1

G31a1: 1

G31a3: 1

G31b1: 1

G31b2: 2

COMPUESTO=C35H34NO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
14.27000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
227.9442

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -10.13720

B= 0.6145460

C= -3.5716972E-04

D= 8.5080998E-08

CP A 25°C

CP0= 143.5946

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 102.7883

B= 0.3106477

C= -7.6913726E-05

D= -4674456.

CP A 25°C

CP0= 135.9859

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

9 G2

1 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a3

1 G31b1

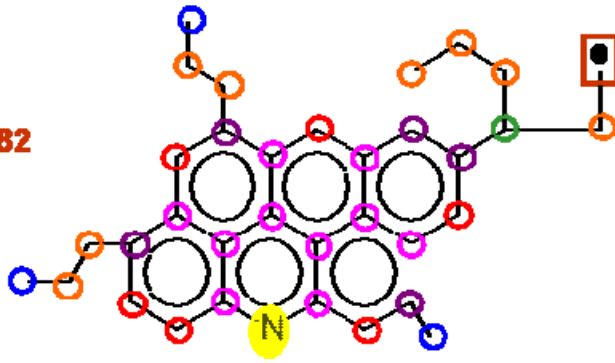
2 G31b2

1 G33j

1 GR23

I82

Código: 782



G1: 3 G25b: 1
G2: 8 G30a: 1
G3: 1 G30b2: 1
G19: 6 G31a1: 4
G20: 5 G31a3: 1
G21: 10 G31b2: 2
G33j: 1
GR1: 1

COMPUESTO=C34H34N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
61.00999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
215.9013

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.94320

B= 0.5932260

C= -3.4520187E-04

D= 8.2485002E-08

CP A 25°C

CP0= 131.4271

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 92.51390

B= 0.2986383

C= -7.3513096E-05

D= -4530217.

CP A 25°C

CP0= 124.0557

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

8 G2

1 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

4 G31a1

1 G31a3

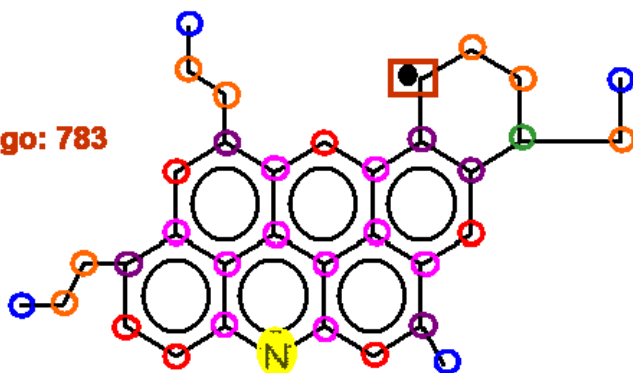
1 G31b2

1 G33j

1 GR1

I83

Código: 783



G1: 4

G2: 7

G3: 1

G19: 6

G20: 5

G21: 10

G33j: 1

GR2: 1

G25b: 1

G30a: 1

G30b2: 1

G31a1: 1

G31a3: 1

G31b1: 1

G31b2: 2

COMPUESTO=C34H34N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
56.75000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
197.7895

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.15170

B= 0.5932390

C= -3.4175150E-04

D= 8.1023998E-08

CP A 25°C

CP0= 132.4905

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 91.34675

B= 0.3039038

C= -7.4890042E-05

D= -4448692.

CP A 25°C

CP0= 125.2532

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

7 G2

1 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a3

1 G31b1

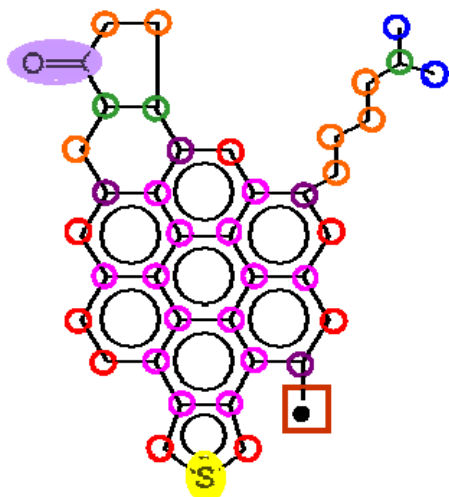
2 G31b2

1 G33j

1 GR2

I84

Código: 784



G1: 2	G24a: 1
G2: 7	G25b: 1
G3: 3	G29a: 1
G19: 8	G29b2: 1
G20: 4	G30a: 1
G21: 14	G30b2: 1
G32g: 1	G31a1: 3
G34c: 1	G31b1: 2
GRI: 1	G31b2: 1

COMPUESTO=C40H33OS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
77.07000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
257.6593

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.67810

B= 0.7261959

C= -4.5412185E-04

D= 1.0986000E-07

CP A 25°C

CP0= 143.3804

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 110.1283

B= 0.3338017

C= -9.2248505E-05

D= -6035213.

CP A 25°C

CP0= 133.5583

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

7 G2

3 G3

8 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

3 G31a1

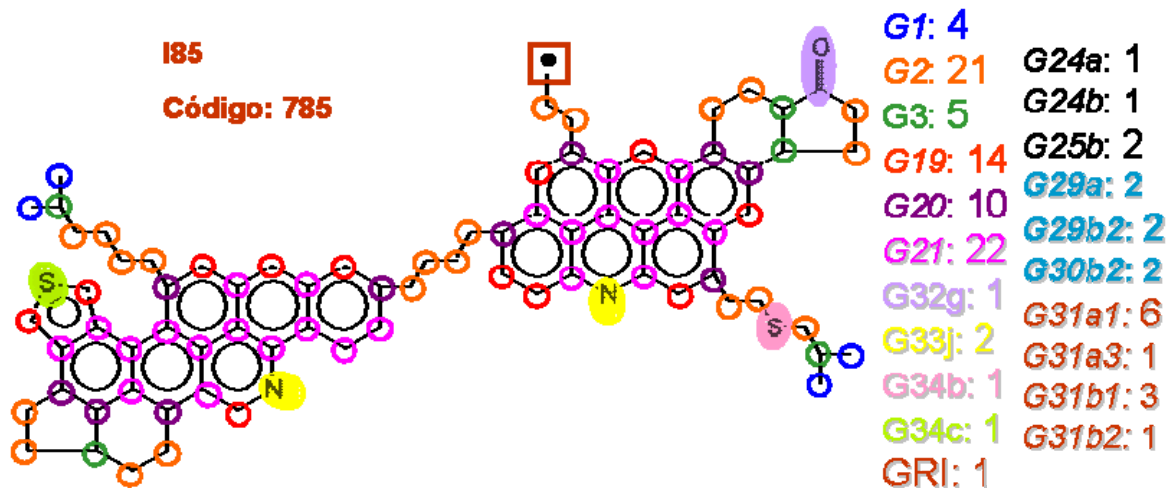
2 G31b1

1 G31b2

1 G32g

1 G34c

1 GR1



COMPUESTO=C78H75N2OS2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
90.46001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
495.4466

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -56.72729

B= 1.463291

C= -8.8258187E-04

D= 2.1101600E-07

CP A 25°C

CP0= 306.6899

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 223.3939

B= 0.7094899

C= -1.8746276E-04

D= -1.1596424E+07

CP A 25°C

CP0= 287.8109

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

21 G2

5 G3

14 G19

10 G20

22 G21

1 G24a

1 G24b

2 G25b

2 G29a

2 G29b2

2 G30b2

6 G31a1

1 G31a3

3 G31b1

1 G31b2

1 G32g

2 G33j

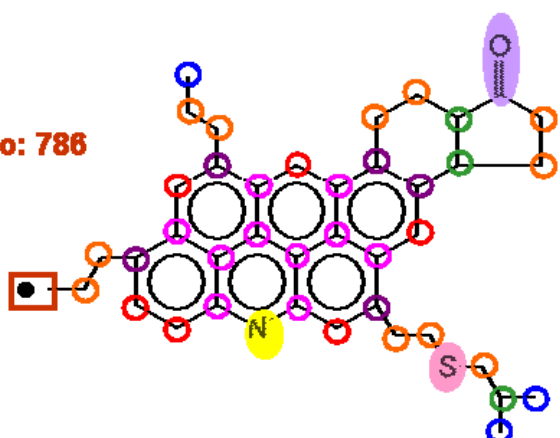
1 G34b

1 G34c

1 GR1

186

Código: 786



G1: 3

G2: 11

G3: 3

G19: 6

G20: 5

G21: 10

G32g: 1

G33j: 1

G34b: 1

GRI: 1

G24a: 1

G25b: 1

G29a: 1

G29b2: 1

G30b2: 1

G31a1: 2

G31b1: 2

G31b2: 1

COMPUESTO=C40H42NOS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
30.58000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
270.2201

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.86390

B= 0.7661300

C= -4.6442184E-04

D= 1.1287000E-07

CP A 25°C

CP0= 160.2652

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 119.9181

B= 0.3630178

C= -9.2647948E-05

D= -6199301.

CP A 25°C

CP0= 150.1775

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

11 G2

3 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

2 G31a1

2 G31b1

1 G31b2

1 G32g

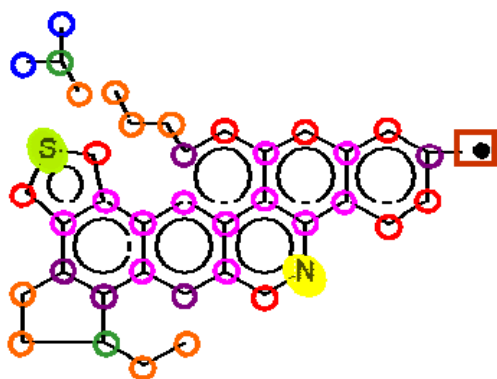
1 G33j

1 G34b

1 GRI

187

Código: 787



G1: 2	G24b: 1
G2: 8	G25b: 1
G3: 2	G29a: 1
G19: 8	G29b2: 1
G20: 5	G30b2: 1
G21: 12	G31a1: 1
G33j: 1	G31a3: 1
G34c: 1	G31b1: 2
GR1: 1	G31b2: 1

COMPUESTO=C38H34NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
94.75000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
266.6642

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -26.54460

B= 0.6761020

C= -4.0274183E-04

D= 9.4089003E-08

CP A 25°C

CP0= 141.7278

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 98.31898

B= 0.3400572

C= -9.2825321E-05

D= -5168018.

CP A 25°C

CP0= 133.3182

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

8 G2

2 G3

8 G19

5 G20

12 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a3

2 G31b1

1 G31b2

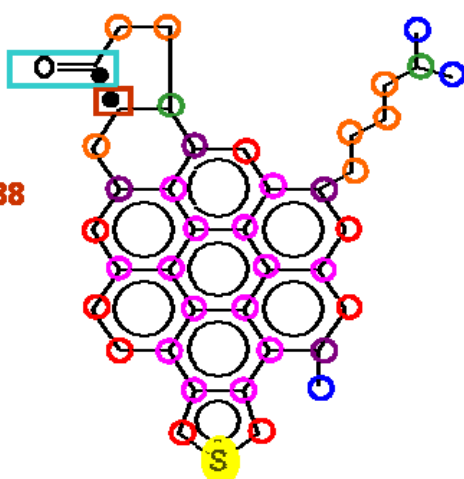
1 G33j

1 G34c

1 GR1

188

Código: 788



G1: 3
G2: 7
G3: 2
G19: 8
G20: 4
G21: 14
G34c: 1
GR2: 1
GR23: 1
G24a: 1
G25b: 1
G29a: 1
G29b2: 1
G30a: 1
G30b2: 1
G31a1: 3
G31b1: 2
G31b2: 1

COMPUESTO=C₄₀H₃₄O₂S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
95.81999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
367.3816

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -25.05990

B= 0.6928420

C= -4.1812117E-04

D= 9.8485998E-08

CP A 25°C

CP0= 146.9530

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 105.5998

B= 0.3411606

C= -9.3750932E-05

D= -5406964.

CP A 25°C

CP0= 138.1578

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

7 G2

2 G3

8 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

3 G31a1

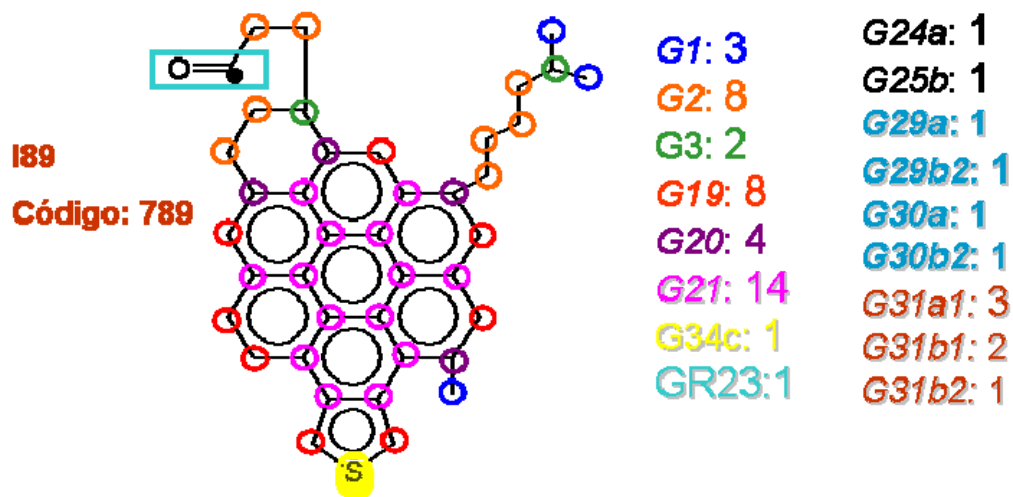
2 G31b1

1 G31b2

1 G34c

1 GR2

1 GR23



COMPUESTO=C40H35OS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
53.42999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
333.1902

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

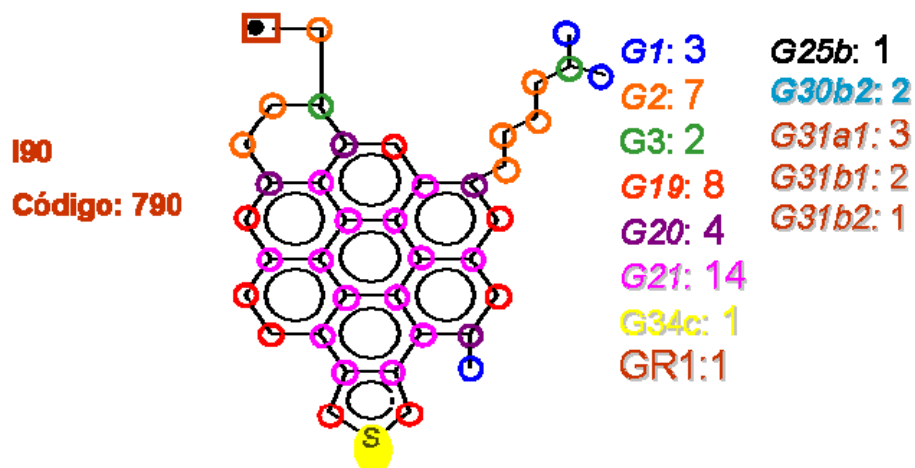
A= -25.74180
B= 0.7140279
C= -4.3008968E-04
D= 1.0108200E-07
CP A 25°C
CP0= 151.5925

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 108.4087
B= 0.3529966
C= -9.7134929E-05
D= -5552626.
CP A 25°C
CP0= 142.5561

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
8 G2
2 G3
8 G19
4 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30a
1 G30b2
3 G31a1
2 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GR23



COMPUESTO=C39H35S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
91.45000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
282.0678

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -20.26280
B= 0.6740990
C= -4.0775185E-04
D= 9.6340997E-08
CP A 25°C
CP0= 147.0267

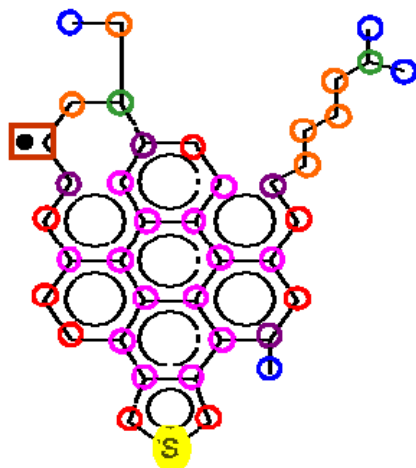
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 107.6304
B= 0.3299408
C= -9.0387352E-05
D= -5294476.
CP A 25°C
CP0= 138.4076

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
7 G2
2 G3
8 G19
4 G20
14 G21
1 G25b
2 G30b2
3 G31a1
1 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GR1

I91
Código: 791



G1: 4 **G25b: 1**
G2: 7 **G30b2: 2**
G3: 2 **G31a1: 3**
G19: 8 **G31b1: 2**
G20: 4 **G31b2: 1**
G21: 14
G34c: 1
GR1:1

COMPUESTO=C39H35S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
87.77000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
265.7335

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -19.47130
B= 0.6741120
C= -4.0430148E-04
D= 9.4880001E-08
CP A 25°C
CP0= 148.0901

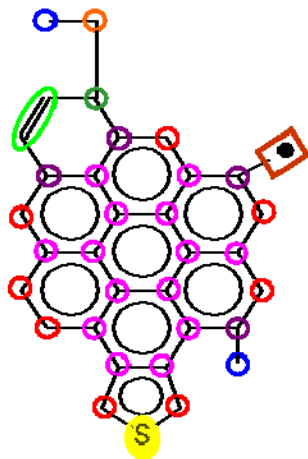
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 106.5119
B= 0.3351222
C= -9.1727925E-05
D= -5216132.
CP A 25°C
CP0= 139.5961

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1
6 G2
2 G3
8 G19
4 G20
14 G21
1 G25b
2 G30b2
3 G31a1
1 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GR2

I92
Código: 792



G1: 2
G2: 1
G3: 1
G7: 1
G19: 8
G20: 4
G21: 14
G34c: 1
GR1:1
G25b: 1
G30a: 1
G30b2: 1
G31a1: 3
G31b1: 3

COMPUESTO=C33H21S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
153.9500

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
232.9508

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -22.83630
B= 0.5211900
C= -3.2284184E-04
D= 7.7118997E-08
CP A 25°C
CP0= 105.9019

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

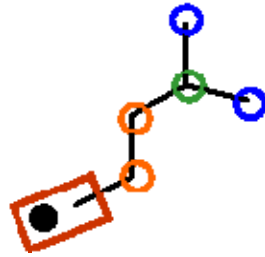
A= 79.50813
B= 0.2457527
C= -6.8821617E-05
D= -4236042.
CP A 25°C
CP0= 99.00848

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
1 G2
1 G3
1 G7
8 G19
4 G20
14 G21
1 G25b
1 G30a
1 G30b2
3 G31a1
3 G31b1
1 G34c
1 GR1

I93

Código: 793



G1: 2

G2: 2

G3: 1

GRI: 1

COMPUESTO=C6H13

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
4.149998

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
108.5637

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -1.017700

B= 0.1199840

C= -6.9141875E-05

D= 1.5476999E-08

CP A 25°C

CP0= 29.01947

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 19.52368

B= 6.4703427E-02

C= -1.8161310E-05

D= -850264.8

CP A 25°C

CP0= 27.63560

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

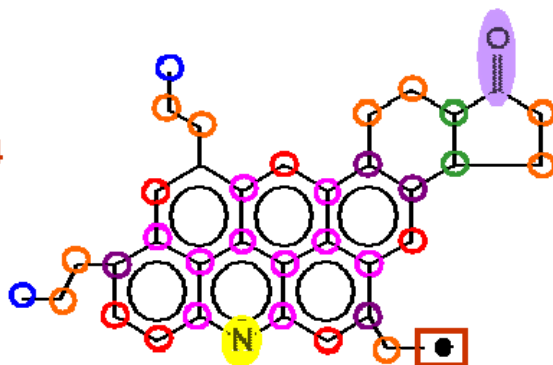
2 G2

1 G3

1 GR1

184

Código: 794



G1: 2
G2: 9
G3: 2
G19: 6
G20: 5
G21: 10
G32g: 1
G33j: 1
GR1: 1
G24a: 1
G25b: 1
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 2
G31a1: 4
G31a2: 1
G31b1: 1

COMPUESTO=C₃₆H₃₄NO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
40.85000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
200.0512

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.96400

B= 0.6666860

C= -4.0354184E-04

D= 9.8599998E-08

CP A 25°C

CP0= 133.5495

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 98.92447

B= 0.3144652

C= -7.8739329E-05

D= -5418434.

CP A 25°C

CP0= 124.7286

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

9 G2

2 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

1 G31b1

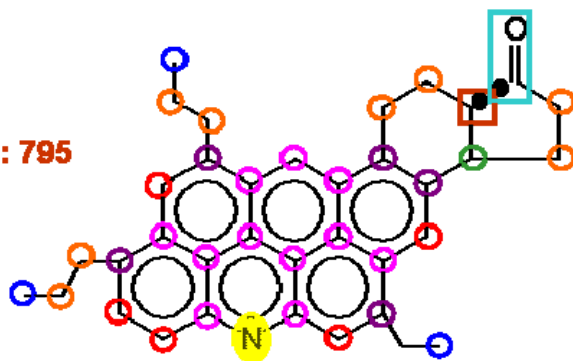
1 G32g

1 G33j

1 GR1

I95

Código: 795



G1: 3
G2: 9
G3: 1
G19: 6
G20: 5
G21: 10
G33j: 1
GR2: 1
GR23: 1
G25b: 1
G30a: 1
G30b2: 1
G31a1: 1
G31a2: 1
G31b1: 1

COMPUESTO=C₃₆H₃₅NO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
53.46000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
247.1667

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -9.060801
B= 0.6147230
C= -3.5717120E-04
D= 8.5080998E-08
CP A 25°C
CP0= 144.7236

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

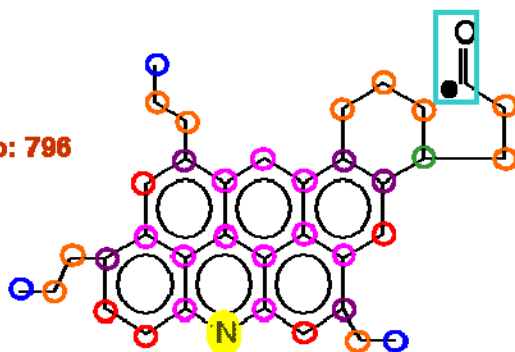
A= 103.8853
B= 0.3107888
C= -7.6899567E-05
D= -4675785.
CP A 25°C
CP0= 137.1113

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
9 G2
1 G3
6 G19
5 G20
10 G21
1 G25b
1 G30a
1 G30b2
4 G31a1
1 G31a2
1 G31b1
1 G33j
1 GR2
1 GR23

196

Código: 796



G1: 3
G2: 10
G3: 1
G19: 6
G20: 5
G21: 10
G33j: 1
GR23: 1
G25b: 1
G30a: 1
G30b2: 1
G31a1: 4
G31a2: 1
G31b1: 1

COMPUESTO=C₃₆H₃₆NO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
11.07000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
244.1833

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -9.742699

B= 0.6359090

C= -3.6913971E-04

D= 8.7677002E-08

CP A 25°C

CP0= 149.3632

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 106.6019

B= 0.3227820

C= -8.0350896E-05

D= -4815188.

CP A 25°C

CP0= 141.5286

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

10 G2

1 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

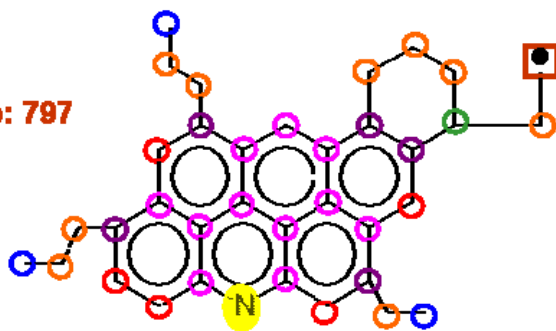
1 G31b1

1 G33j

1 GR23

I97

Código: 797



G1: 3	G25b: 1
G2: 9	G30a: 1
G3: 1	G30b2: 1
G19: 6	G31a1: 4
G20: 5	G31a2: 1
G21: 10	G31b1: 1
G33j: 1	
GR1: 1	

COMPUESTO=C35H36N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
57.23000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
230.3627

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.54870
B= 0.6145890
C= -3.5717187E-04
D= 8.5080998E-08
CP A 25°C
CP0= 137.1957

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

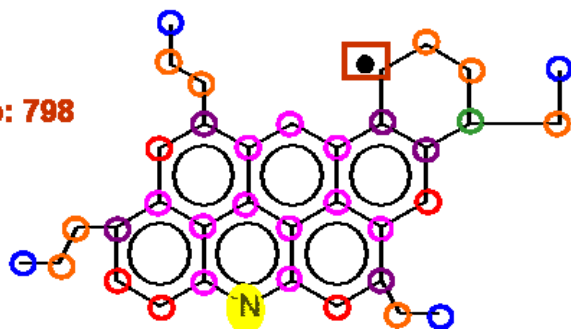
A= 96.37247
B= 0.3106965
C= -7.6917793E-05
D= -4674034.
CP A 25°C
CP0= 129.5889

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
9 G2
1 G3
6 G19
5 G20
10 G21
1 G25b
1 G30a
1 G30b2
4 G31a1
1 G31a2
1 G31b1
1 G33j
1 GR1

I98

Código: 798



G1: 4 **G25b: 1**
G2: 8 **G30a: 1**
G3: 1 **G30b2: 1**
G19: 6 **G31a1: 4**
G20: 5 **G31a2: 1**
G21: 10 **G31b1: 1**
G33j: 1
GR2: 1

COMPUESTO=C35H36N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
53.55000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
214.0285

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -15.75720

B= 0.6146020

C= -3.5372147E-04

D= 8.3620002E-08

CP A 25°C

CP0= 138.2591

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 95.21528

B= 0.3159445

C= -7.8287048E-05

D= -4593144.

CP A 25°C

CP0= 130.7847

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

8 G2

1 G3

6 G19

5 G20

10 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

4 G31a1

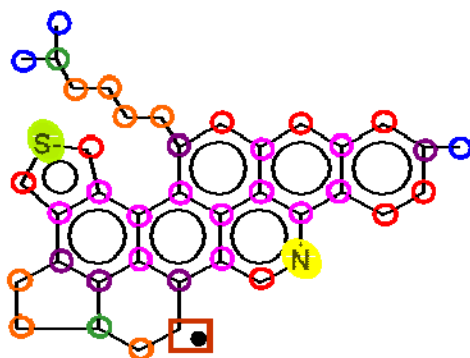
1 G31a2

1 G31b1

1 G33j

1 GR2

I99
Código: 799



G1: 3	G24b: 1
G2: 7	G25b: 1
G3: 2	G29a: 1
G19: 8	G29b2: 1
G20: 5	G30b2: 1
G21: 12	G31a1: 1
G33j: 1	G31a3: 1
G34c: 1	G31b1: 2
GR2: 1	G31b2: 1

COMPUESTO=C38H34NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
91.06999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
214.1143

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -18.87180

B= 0.6682971

C= -3.9584146E-04

D= 9.2036998E-08

CP A 25°C

CP0= 147.6326

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 103.2465

B= 0.3396187

C= -9.2700015E-05

D= -5053845.

CP A 25°C

CP0= 139.4106

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

7 G2

2 G3

8 G19

5 G20

12 G21

1 G24b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a3

2 G31b1

1 G31b2

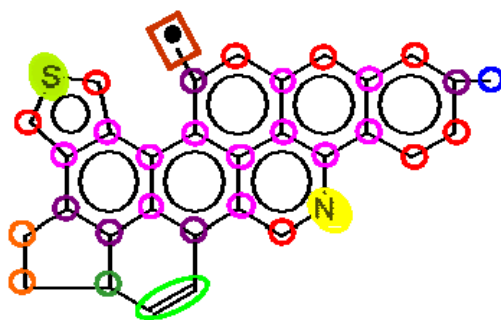
1 G33j

1 G34c

1 GR2

I100

Código: 800



G1: 1
G2: 2
G3: 1
G7: 1
G19: 8
G20: 5
G21: 12
G33j: 1
G34c: 1
GR1: 1
G24b: 1
G25b: 1
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31a1: 4
G31a2: 1
G31b1: 1
G31b2: 1

COMPUESTO=C32H20NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
154.7100

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
215.9708

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.11810

B= 0.5231930

C= -3.1783184E-04

D= 7.4867003E-08

CP A 25°C

CP0= 100.6030

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 70.22208

B= 0.2558254

C= -7.1240662E-05

D= -4111274.

CP A 25°C

CP0= 93.91411

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

2 G2

1 G3

1 G7

8 G19

5 G20

12 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

1 G31b1

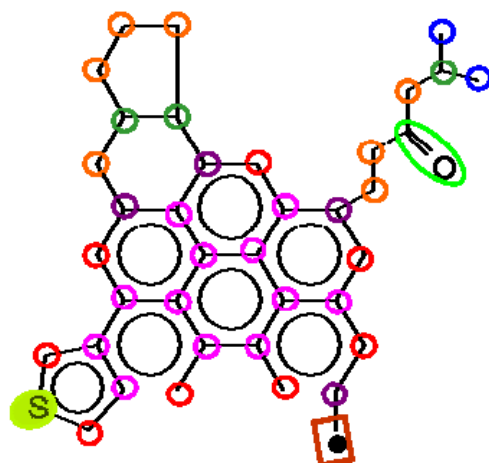
1 G31b2

1 G33j

1 G34c

1 GR1

I101
Código: 801



G1: 2	G24a: 1
G2: 7	G25b: 1
G3: 3	G29b2: 1
G19: 8	G30b2: 1
G20: 4	G31a1: 1
G21: 12	G31a2: 1
G32g: 1	G31b1: 1
G34c: 1	G31b2: 2
GR1: 1	

COMPUESTO=C38H33OS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 64.81000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 259.5204

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

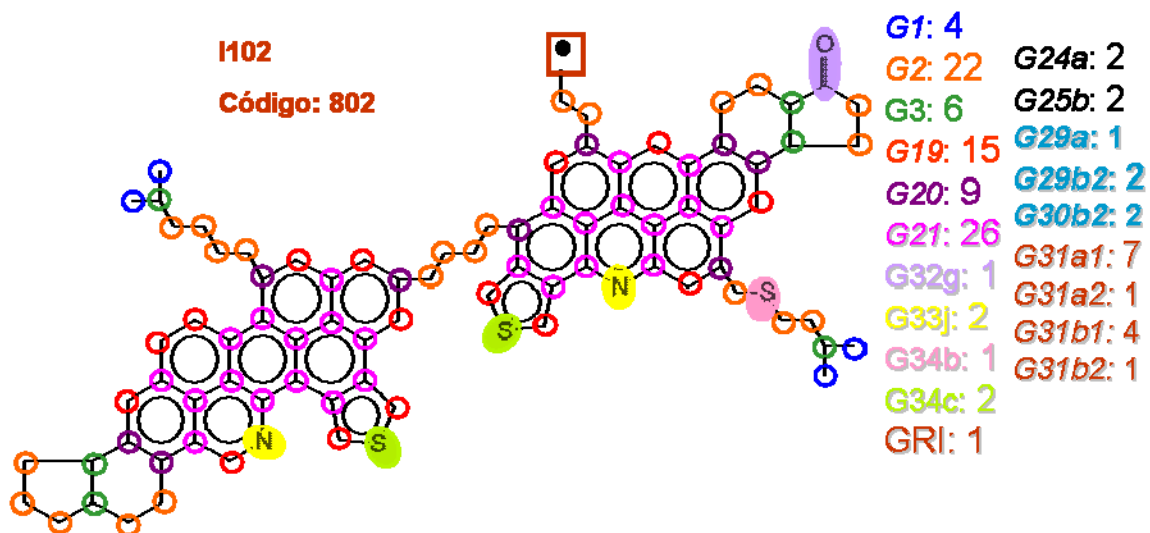
A= -35.92191
 B= 0.7018560
 C= -4.3702184E-04
 D= 1.0561600E-07
 CP A 25°C
 CP0= 137.2873

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 104.2748
 B= 0.3245809
 C= -8.9111090E-05
 D= -5803622.
 CP A 25°C
 CP0= 127.8398

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
 7 G2
 3 G3
 8 G19
 4 G20
 12 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30a
 1 G30b2
 1 G31a1
 1 G31a2
 1 G31b1
 1 G31b2
 1 G32g
 1 G34c
 1 GR1



COMPUESTO=C84H79N2OS3

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
115.6500

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
527.4669

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -60.75860

B= 1.581970

C= -9.6195180E-04

D= 2.2591401E-07

CP A 25°C

CP0= 331.3821

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 239.0322

B= 0.7751349

C= -2.1783680E-04

D= -1.2408082E+07

CP A 25°C

CP0= 311.1906

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

22 G2

6 G3

15 G19

9 G20

26 G21

2 G24a

2 G25b

1 G29a

2 G29b2

2 G30b2

7 G31a1

1 G31a2

4 G31b1

1 G31b2

1 G32g

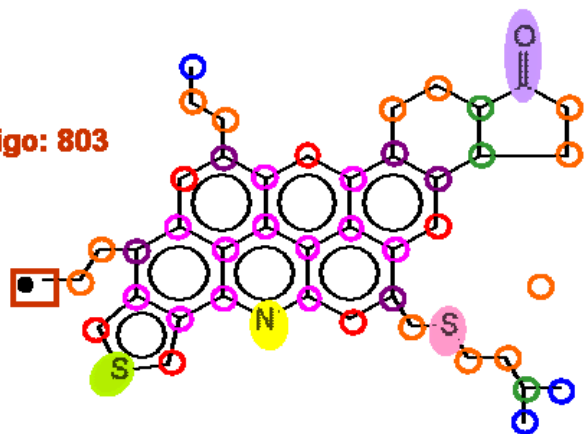
2 G33j

1 G34b

2 G34c

1 GR1

I103
Código: 803



G1: 3
G2: 11
G3: 3
G19: 6
G20: 5
G21: 12
G32g: 1
G33j: 1
G34b: 1
G34c: 2
GRI: 1
G24a: 1
G25b: 1
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31a2: 3
G31b1: 3

COMPUESTO=C42H42NOS2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
47.96000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
309.3296

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -25.53770
B= 0.7901690
C= -4.7421182E-04
D= 1.1103300E-07
CP A 25°C
CP0= 170.8396

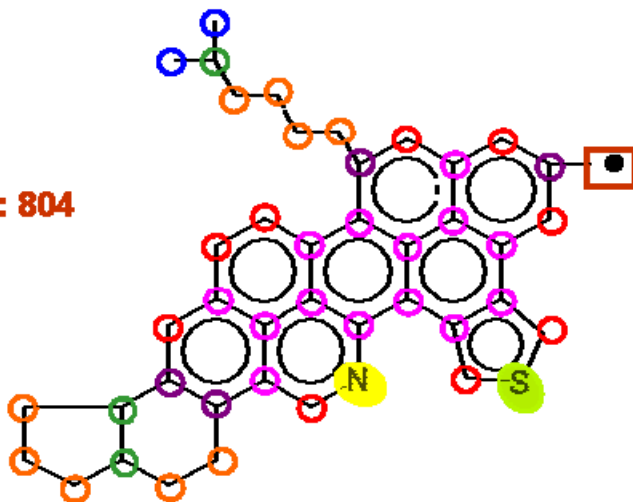
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 121.7512
B= 0.3937128
C= -1.0852976E-04
D= -6094730.
CP A 25°C
CP0= 160.9269

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
11 G2
3 G3
6 G19
5 G20
12 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
3 G31a2
3 G31b1
1 G32g
1 G33j
1 G34b
1 G34c
1 GR1

I104
Código: 804



G1: 2
G2: 9
G3: 3
G19: 9
G20: 4
G21: 14
G33j: 1
G34c: 1
GRI: 1

G24a: 1
G25b: 1
G29a: 1
G30b2: 1
G31a1: 4
G31b1: 1
G31b2: 1

COMPUESTO=C42H38NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
100.6400

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
268.9997

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.90210
B= 0.7707420
C= -4.7232184E-04
D= 1.1082400E-07
CP A 25°C
CP0= 155.8456

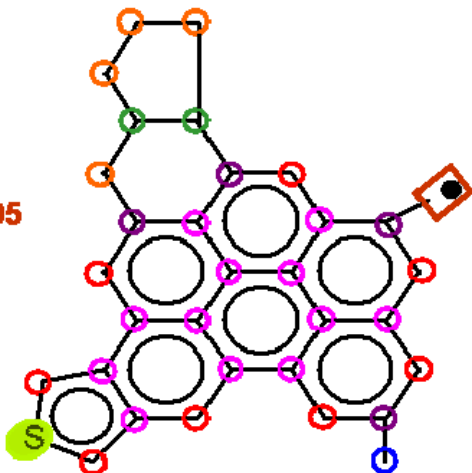
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 112.1620
B= 0.3749417
C= -1.0728908E-04
D= -6086702.
CP A 25°C
CP0= 145.9417

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
9 G2
3 G3
9 G19
4 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
4 G31a1
1 G31b1
1 G33j
1 G34c
1 GR1

I105
Código: 805



G1: 1 **G24a: 1**
G2: 4 **G25b: 1**
G3: 2 **G29a: 1**
G19: 8 **G29b2: 1**
G20: 4 **G30a: 1**
G21: 12 **G30b2: 1**
G34c: 1 **G31a1: 1**
GRI: 1 **G31a2: 1**
 G31b1: 2
 G31b2: 1

COMPUESTO=C32H23S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
124.4500

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
236.7593

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.19250
B= 0.5614130
C= -3.4807183E-04
D= 8.4183995E-08
CP A 25°C
CP0= 103.4827

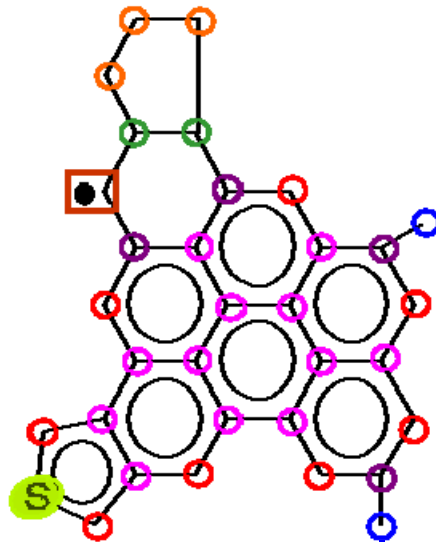
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 76.52470
B= 0.2607487
C= -7.0783404E-05
D= -4623930.
CP A 25°C
CP0= 95.95818

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1
4 G2
2 G3
8 G19
4 G20
12 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30a
1 G30b2
1 G31a1
1 G31a2
2 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GR1

I106
Código: 806



G1: 2 **G24a: 1**
G2: 3 **G25b: 1**
G3: 2 **G29b2: 1**
G19: 8 **G30a: 1**
G20: 4 **G30b2: 1**
G21: 12 **G31a1: 5**
G34c: 1 **G31b2: 1**
GR2: 1

COMPUESTO=C32H23S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
120.5500

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
217.7754

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.40100
B= 0.5614260
C= -3.4462145E-04
D= 8.2722998E-08
CP A 25°C
CP0= 104.5461

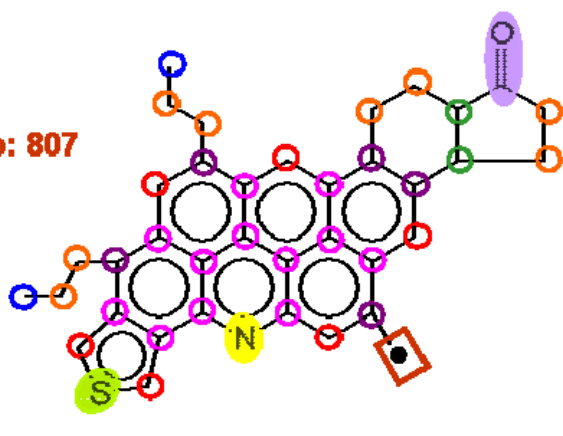
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 75.37830
B= 0.2659777
C= -7.2144241E-05
D= -4543725.
CP A 25°C
CP0= 97.15210

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
3 G2
2 G3
8 G19
4 G20
12 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30a
1 G30b2
5 G31a1
1 G31b2
1 G34c
1 GR2

I107
Código: 807



G1: 2
G2: 8
G3: 2
G19: 6
G20: 5
G21: 12
G32g: 1
G33j: 1
G34c: 2
GRI: 1
G24a: 1
G25b: 1
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31a1: 1
G31b1: 3
G31b2: 1

COMPUESTO=C37H32NOS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
63.39000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
216.2472

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -28.03230

B= 0.6693620

C= -4.0136182E-04

D= 9.4167000E-08

CP A 25°C

CP0= 138.3553

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 96.94682

B= 0.3330197

C= -9.1180867E-05

D= -5173226.

CP A 25°C

CP0= 129.9354

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

8 G2

2 G3

6 G19

5 G20

12 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

3 G31b1

1 G31b2

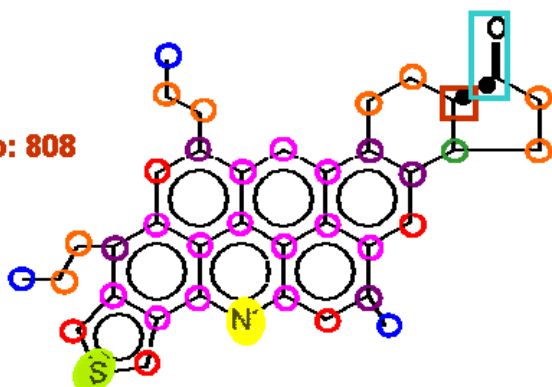
1 G32g

1 G33j

1 G34c

1 GR1

H08
Código: 808



G1: 3
G2: 8
G3: 1
G19: 6
G20: 5
G21: 12
G33j: 1
G34c: 1
GR2: 1
GR23: 1

G25a: 1
G25b: 1
G29a: 1
G29b2: 1
G30a: 1
G30b2: 1
G31a1: 1
G31b1: 1

COMPUESTO=C37H33NOS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 78.09999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 297.7130

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -17.41410
 B= 0.6360080
 C= -3.6536116E-04
 D= 8.2793001E-08
 CP A 25°C
 CP0= 141.9278

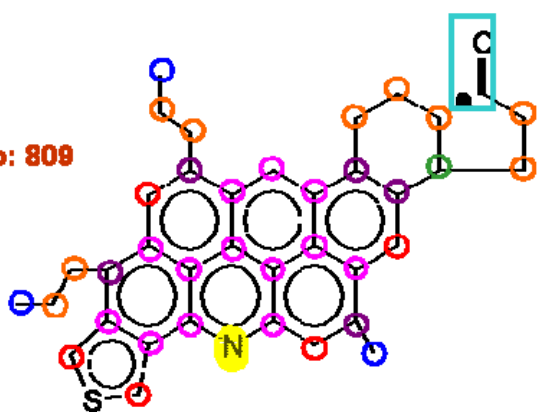
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 92.44095
 B= 0.3403385
 C= -9.2665628E-05
 D= -4546393.
 CP A 25°C
 CP0= 134.5312

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
 8 G2
 1 G3
 6 G19
 5 G20
 12 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29a
 1 G29b2
 1 G30b2
 1 G31a1
 1 G31b1
 1 G33j
 1 G34c
 1 GR2
 1 GR23

I109
Código: 809



G1: 3 G25a: 1
 G2: 9 G25b: 1
 G3: 1 G29a: 1
 G19: 6 G29b2: 1
 G20: 5 G30a: 1
 G21: 12 G30b2: 1
 G33j: 1 G31a1: 1
 G34c: 1 G31b1: 1
 GR23: 1

COMPUESTO=C37H34NOS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
35.71000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
294.7295

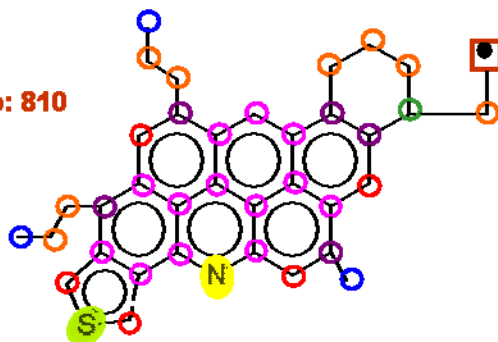
CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL
 A= -18.09600
 B= 0.6571940
 C= -3.7732968E-04
 D= 8.5388997E-08
 CP A 25°C
 CP0= 146.5674

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL
 A= 95.21850
 B= 0.3522284
 C= -9.6072930E-05
 D= -4689962.
 CP A 25°C
 CP0= 138.9358

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

- 3 G1
- 9 G2
- 1 G3
- 6 G19
- 5 G20
- 12 G21
- 1 G24a
- 1 G25b
- 1 G29a
- 1 G29b2
- 1 G30b2
- 1 G31a1
- 1 G31b1
- 1 G33j
- 1 G34c
- 1 GR23

I110
Código: 810



G1: 3
G2: 8
G3: 1
G19: 6
G20: 5
G21: 12
G33j: 1
G34c: 1
GR1: 1
G25b: 1
G30a: 1
G30b2: 1
G31b1: 4
G31b2: 1

COMPUESTO=C36H34NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
80.62999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
246.4581

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -12.61700
B= 0.6172650
C= -3.5499185E-04
D= 8.0648000E-08
CP A 25°C
CP0= 142.0016

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

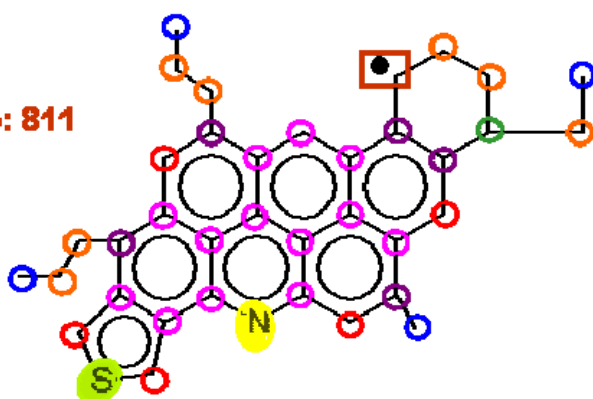
A= 94.49516
B= 0.3290789
C= -8.9285284E-05
D= -4435504.
CP A 25°C
CP0= 134.7763

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
8 G2
1 G3
6 G19
5 G20
12 G21
1 G25b
1 G30a
1 G30b2
4 G31b1
1 G31b2
1 G33j
1 G34c
1 GR1

I111

Código: 811



G1: 4

G2: 7

G3: 1

G19: 6

G20: 5

G21: 12

G33j: 1

G34c: 1

GR2: 1

G25b: 1

G30a: 1

G30b2: 1

G31b1: 4

G31b2: 1

COMPUESTO=C36H34NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
76.95000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
230.1239

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -11.82550

B= 0.6172780

C= -3.5154147E-04

D= 7.9186997E-08

CP A 25°C

CP0= 143.0650

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 93.27558

B= 0.3344342

C= -9.0700843E-05

D= -4350481.

CP A 25°C

CP0= 135.9840

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

7 G2

1 G3

6 G19

5 G20

12 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

4 G31b1

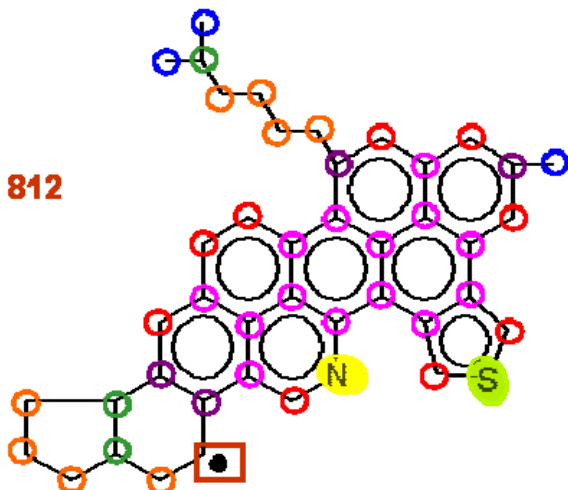
1 G31b2

1 G33j

1 G34c

1 GR2

I112
Código: 812



G1: 3	G24a: 1
G2: 8	G25b: 1
G3: 3	G29b2: 1
G19: 9	G30b2: 1
G20: 4	G31a1: 4
G21: 14	G31b1: 1
G33j: 2	G31b2: 1
G34c: 2	
GR2: 1	

COMPUESTO=C42H38NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
97.39999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
250.4517

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.11060
B= 0.7707550
C= -4.6887147E-04
D= 1.0936300E-07
CP A 25°C
CP0= 156.9089

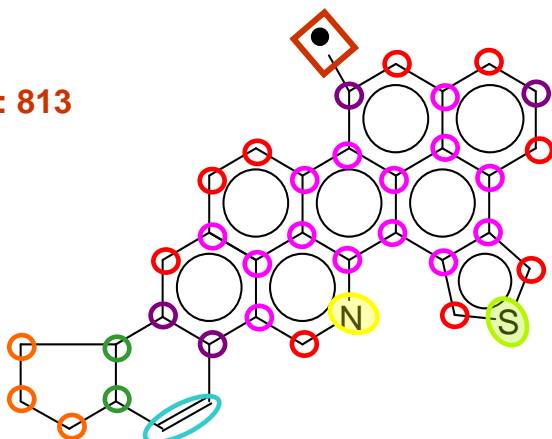
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 111.0095
B= 0.3801826
C= -1.0865554E-04
D= -6006188.
CP A 25°C
CP0= 147.1360

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
8 G2
3 G3
9 G19
4 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
4 G31a1
1 G31b1
1 G31b2
1 G33j
1 G34c
1 GR2

I113
Código: 813



G2: 8 G24a: 1
G3: 2 G25b: 1
G7: 1 G29b2: 1
G19: 10 G30b2: 1
G20: 3 G31a1: 5
G21: 14 G31a2: 1
G33j: 1 G31b1: 1
G34c: 1
GR1: 1

COMPUESTO=C35H22NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
169.0700

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
207.7089

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -38.15320
B= 0.6003880
C= -3.8432184E-04
D= 9.0793002E-08
CP A 25°C
CP0= 109.0951

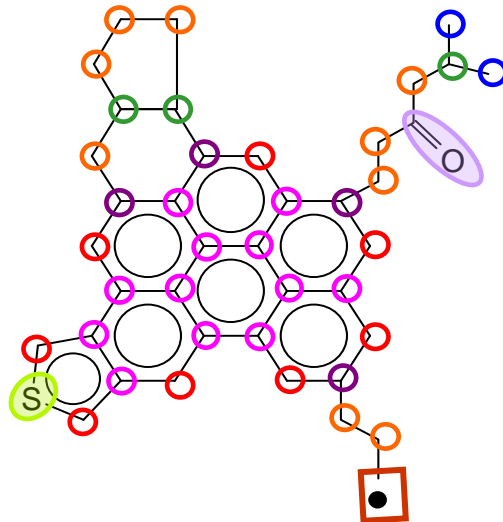
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 82.35074
B= 0.2760912
C= -8.5251959E-05
D= -4987996.
CP A 25°C
CP0= 100.9769

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G2
2 G3
1 G7
10 G19
3 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
5 G31a1
1 G31a2
1 G31b1
1 G33j
1 G34c
1 GR1

I114
Código: 814



G1: 3 G24a: 1
G2: 9 G25b: 1
G3: 3 G29b2: 1
G19: 8 G30a: 1
G20: 4 G30b2: 1
G21: 12 G31a1: 2
G32g: 1 G31a2: 1
G34c: 2 G31b2: 1
GRI: 1

COMPUESTO=C40H37OS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
54.51000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
275.6645

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

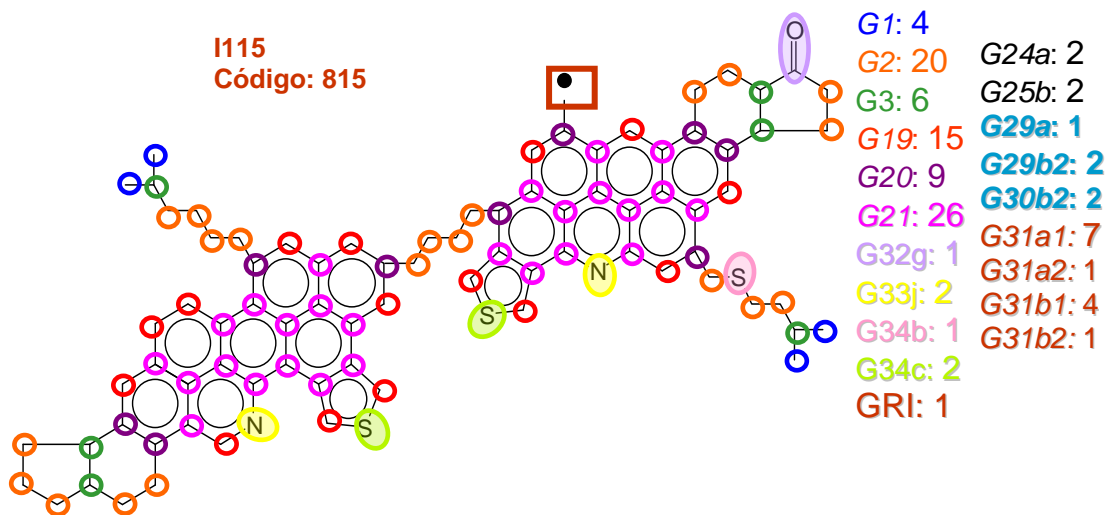
A= -35.13290
B= 0.7445820
C= -4.6096183E-04
D= 1.1080800E-07
CP A 25°C
CP0= 148.8246

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 111.9561
B= 0.3487600
C= -9.5947944E-05
D= -6088946.
CP A 25°C
CP0= 138.9126

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
9 G2
3 G3
8 G19
4 G20
12 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30a
1 G30b2
2 G31a1
1 G31a2
2 G31b2
1 G32g
1 G34c
1 GR1



COMPUESTO=C82H75N2OS3

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
125.5300

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
509.2097

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -61.54760

B= 1.539244

C= -9.3801186E-04

D= 2.2072199E-07

CP A 25°C

CP0= 319.8448

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 231.4618

B= 0.7507634

C= -2.1091629E-04

D= -1.2130034E+07

CP A 25°C

CP0= 300.0969

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

20 G2

6 G3

15 G19

9 G20

26 G21

2 G24a

2 G25b

1 G29a

2 G29b2

2 G30b2

7 G31a1

1 G31a2

4 G31b1

1 G31b2

1 G32g

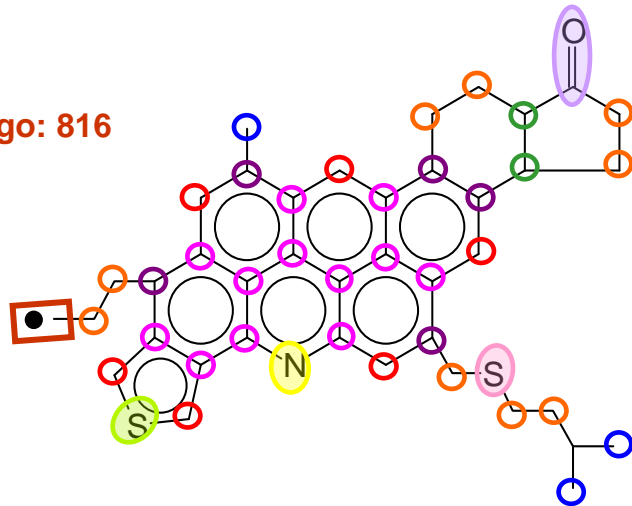
2 G33j

1 G34b

2 G34c

1 GR1

I116
Código: 816



G1: 3
G2: 9
G3: 3
G19: 6
G20: 5
G21: 12
G32g: 1
G33j: 1
G34b: 1
G34c: 1
GRI: 1
G24a: 1
G25b: 1
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31b1: 4
G31b2: 1

COMPUESTO=C40H38NOS2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
58.94000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
281.5471

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -26.32670

B= 0.7474430

C= -4.5027182E-04

D= 1.0584100E-07

CP A 25°C

CP0= 159.3024

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 114.1976

B= 0.3693157

C= -1.0159932E-04

D= -5817962.

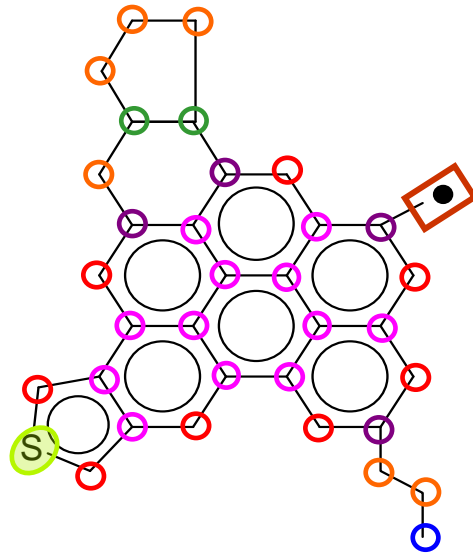
CP A 25°C

CP0= 149.8288

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
9 G2
3 G3
6 G19
5 G20
12 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
4 G31b1
1 G31b2
1 G32g
1 G33j
1 G34b
1 G34c
1 GR1

I117
Código: 817



G1: 1	G24a: 1
G2: 6	G25b: 1
G3: 2	G29b2: 1
G19: 8	G30a: 1
G20: 4	G30b2: 1
G21: 12	G31a1: 2
G34c: 2	G31b1: 2
GRI: 1	G31b2: 1

COMPUESTO=C34H27S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
115.1300

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
252.4338

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.40350
B= 0.6041390
C= -3.7201183E-04
D= 8.9375995E-08
CP A 25°C
CP0= 115.0199

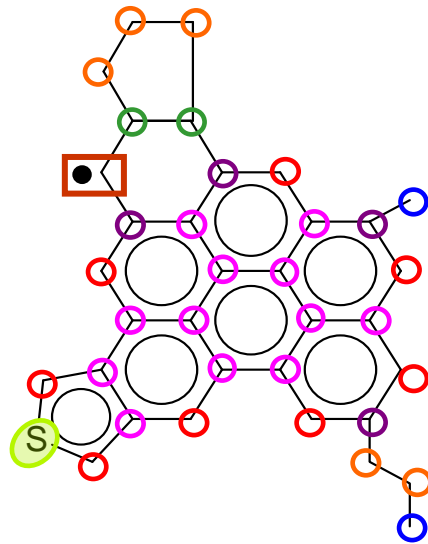
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 84.18951
B= 0.2849548
C= -7.7631485E-05
D= -4908114.
CP A 25°C
CP0= 107.0344

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1
6 G2
2 G3
8 G19
4 G20
12 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30a
1 G30b2
2 G31a1
2 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GRI

I118
Código: 818



G1: 2	G24a: 1
G2: 5	G25b: 1
G3: 2	G29b2: 1
G19: 8	G30a: 1
G20: 4	G30b2: 1
G21: 12	G31a1: 2
G34c: 2	G31b1: 2
GR2: 1	G31b2: 1

COMPUESTO=C34H27S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
111.4500

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
236.0996

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.61200
B= 0.6041520
C= -3.6856145E-04
D= 8.7914991E-08
CP A 25°C
CP0= 116.0833

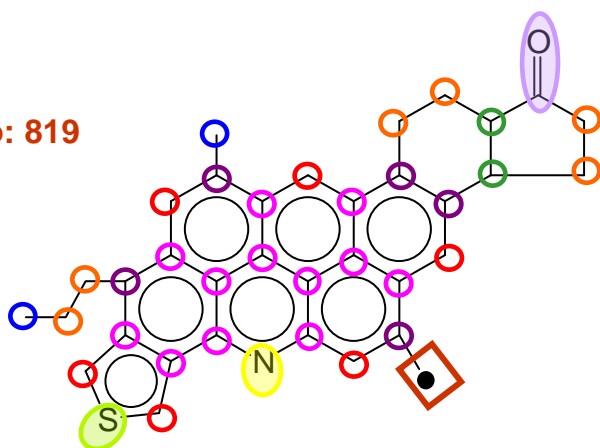
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 83.07099
B= 0.2901377
C= -7.8973106E-05
D= -4829856.
CP A 25°C
CP0= 108.2222

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
5 G2
2 G3
8 G19
4 G20
12 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30a
1 G30b2
2 G31a1
2 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GR2

I119
Código: 819



G1: 2
G2: 6
G3: 2
G19: 6
G20: 5
G21: 12
G32g: 1
G33j: 1
G34c: 1
GRI: 1
G24a: 1
G25b: 1
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31b1: 4
G31b2: 1

COMPUESTO=C35H28NOS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
74.13000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
197.8895

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -28.82130
B= 0.6266360
C= -3.7742182E-04
D= 8.8974993E-08
CP A 25°C
CP0= 126.8180

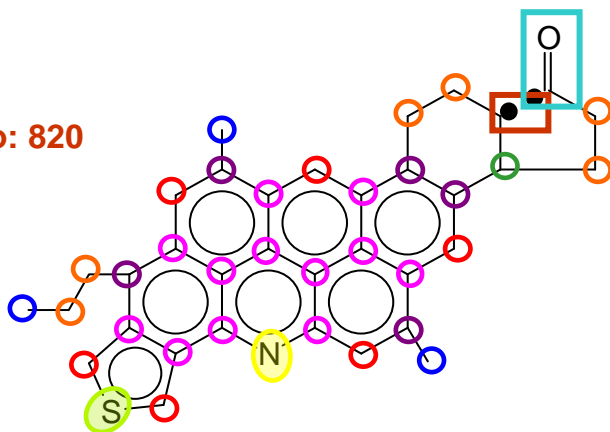
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 89.27459
B= 0.3088231
C= -8.4335836E-05
D= -4888366.
CP A 25°C
CP0= 118.8620

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
6 G2
2 G3
6 G19
5 G20
12 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
4 G31b1
1 G31b2
1 G32g
1 G33j
1 G34c
1 GR1

I120
Código: 820



G1: 3
G2: 6
G3: 1
G19: 6
G20: 5
G21: 12
G33j: 1
G34c: 1
GR2: 1
GR23: 1
G25b: 1
G30a: 1
G30b2: 1
G31b1: 4
G31b2: 1

COMPUESTO=C35H29NOS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
86.74000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
245.0050

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -5.918100
B= 0.5746730
C= -3.3105118E-04
D= 7.5456001E-08
CP A 25°C
CP0= 137.9922

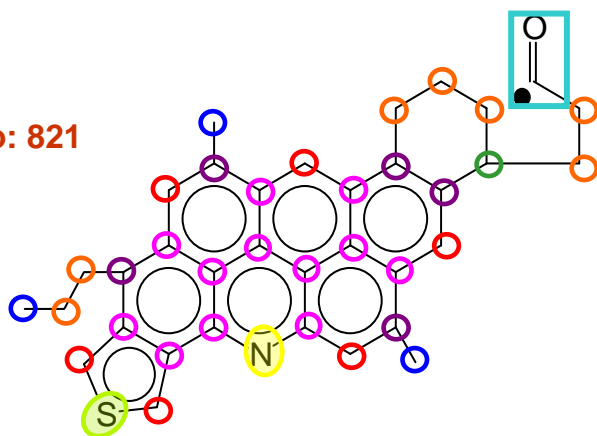
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 94.24394
B= 0.3051332
C= -8.2490558E-05
D= -4146335.
CP A 25°C
CP0= 131.2426

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
6 G2
1 G3
6 G19
5 G20
12 G21
1 G25b
1 G30a
1 G30b2
4 G31b1
1 G31b2
1 G33j
1 G34c
1 GR2
1 GR23

I121
Código: 821



G1: 3
G2: 7
G3: 1
G19: 6
G20: 5
G21: 12
G33j: 1
G34c: 1
GR23: 1
G25b: 1
G30a: 1
G30b2: 1
G31b1: 4
G31b2: 1

COMPUESTO=C35H30NOS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
44.34999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
242.0215

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -6.599999
B= 0.5958590
C= -3.4301970E-04
D= 7.8051997E-08
CP A 25°C
CP0= 142.6318

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

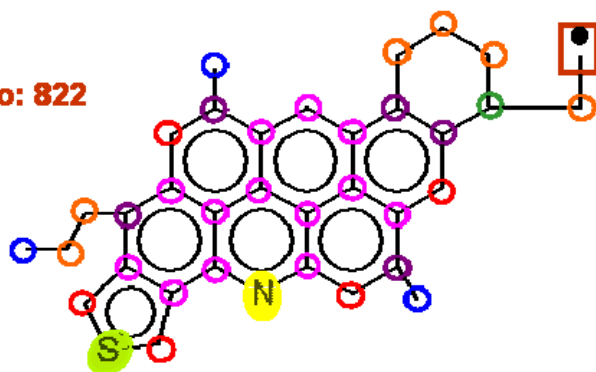
A= 96.97728
B= 0.3170984
C= -8.5930078E-05
D= -4286935.
CP A 25°C
CP0= 135.6560

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
7 G2
1 G3
6 G19
5 G20
12 G21
1 G25b
1 G30a
1 G30b2
4 G31b1
1 G31b2
1 G33j
1 G34c
1 GR23

I122

Código: 822



G1: 3

G2: 6

G3: 1

G19: 6

G20: 5

G21: 12

G33j: 1

G34c: 1

GR1: 1

G25b: 1

G30a: 1

G30b2: 1

G31b1: 4

G31b2: 1

COMPUESTO=C₃₄H₃₀NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
90.50999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
228.2009

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -13.40600

B= 0.5745390

C= -3.3105185E-04

D= 7.5456001E-08

CP A 25°C

CP0= 130.4643

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 86.70567

B= 0.3050861

C= -8.2528808E-05

D= -4143000.

CP A 25°C

CP0= 123.7244

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

6 G2

1 G3

6 G19

5 G20

12 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

4 G31b1

1 G31b2

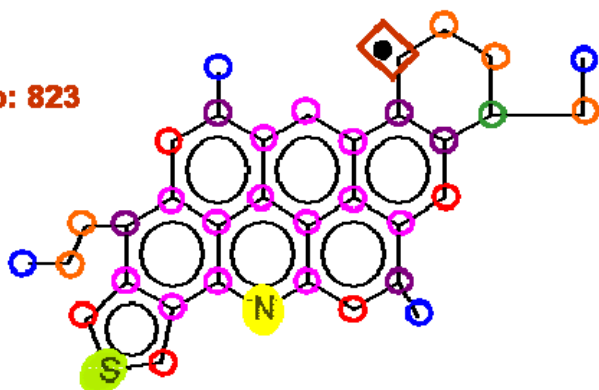
1 G33j

1 G34c

1 GR1

I123

Código: 823



G1: 4
G2: 5
G3: 1
G19: 6
G20: 5
G21: 12
G33j: 1
G34c: 1
GR2: 1
G25b: 1
G30a: 1
G30b2: 1
G31b1: 4
G31b2: 1

COMPUESTO=C34H30NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
86.83000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
211.8667

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -12.61450

B= 0.5745521

C= -3.2760148E-04

D= 7.3994997E-08

CP A 25°C

CP0= 131.5277

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 85.54974

B= 0.3103322

C= -8.3897379E-05

D= -4062202.

CP A 25°C

CP0= 124.9199

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

5 G2

1 G3

6 G19

5 G20

12 G21

1 G25b

1 G30a

1 G30b2

4 G31b1

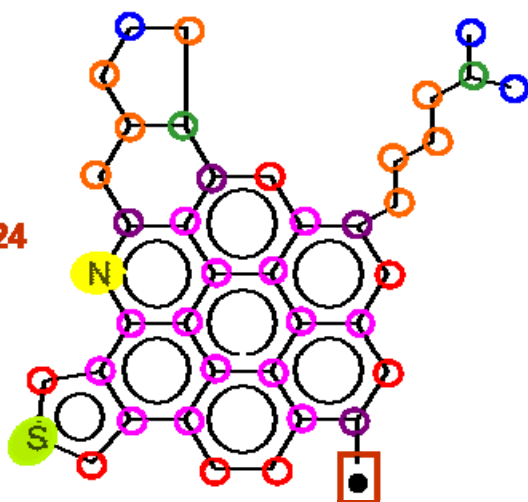
1 G31b2

1 G33j

1 G34c

1 GR2

I124
Código: 824



G1: 2	G24a: 1
G2: 8	G25b: 1
G3: 3	G29b2: 1
G19: 7	G30a: 1
G20: 4	G30b2: 1
G21: 14	G31a1: 3
G33j: 1	G31b1: 2
G34c: 1	G31b2: 1
GR1:1	

COMPUESTO=C39H34NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 100.3400

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 237.5281

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

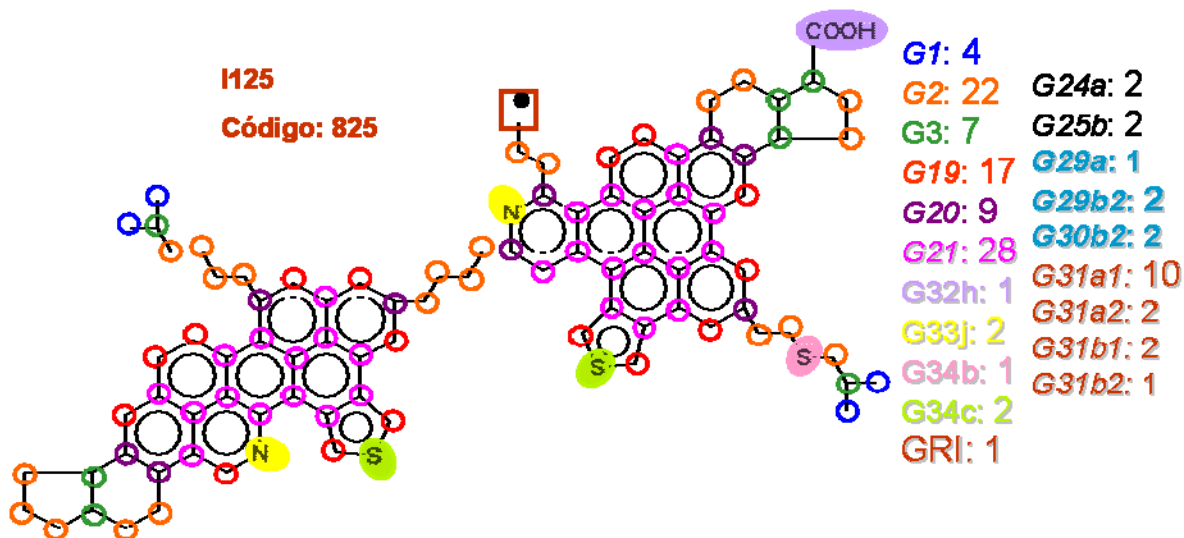
A= -32.38220
 B= 0.7110850
 C= -4.3569185E-04
 D= 1.0225800E-07
 CP A 25°C
 CP0= 143.6079

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 103.3622
 B= 0.3457966
 C= -9.8839002E-05
 D= -5619448.
 CP A 25°C
 CP0= 134.4597

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
 8 G2
 3 G3
 7 G19
 4 G20
 14 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30a
 1 G30b2
 3 G31a1
 2 G31b1
 1 G31b2
 1 G33j
 1 G34c
 1 GR1



COMPUESTO=C89H83N2O2S3

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
66.25999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
605.7347

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -66.54848

B= 1.692631

C= -1.0410817E-03

D= 2.4653502E-07

CP A 25°C

CP0= 352.0981

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 260.7054

B= 0.8119757

C= -2.2896899E-04

D= -1.3546996E+07

CP A 25°C

CP0= 330.0462

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

22 G2

7 G3

17 G19

9 G20

28 G21

2 G24a

2 G25b

1 G29a

2 G29b2

2 G30b2

10 G31a1

2 G31a2

2 G31b1

1 G31b2

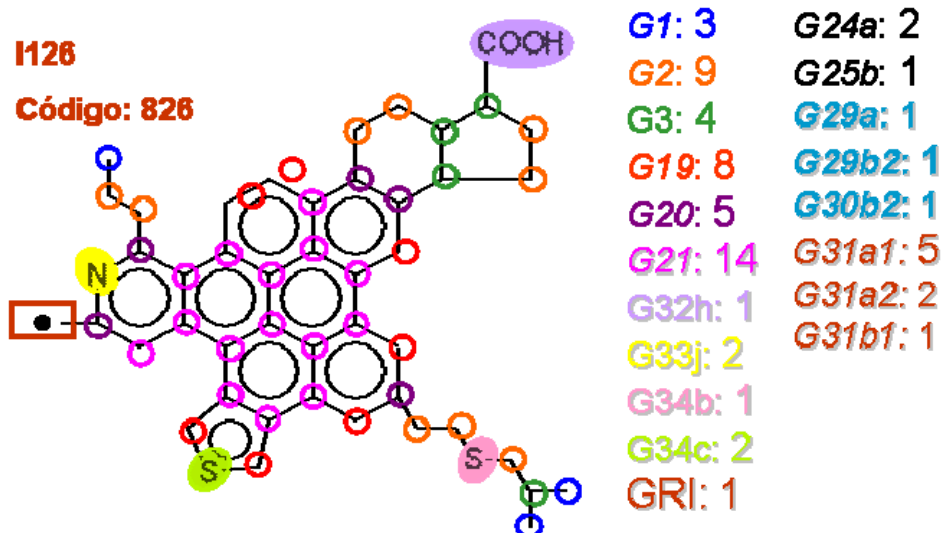
1 G32h

2 G33j

1 G34b

2 G34c

1 GRI



COMPUESTO=C45H42NO2S2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 9.570004

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 364.1752

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.11660

B= 0.8581041

C= -5.2940182E-04

D= 1.2646200E-07

CP A 25°C

CP0= 180.0185

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 135.7209

B= 0.4064160

C= -1.1284407E-04

D= -6947006.

CP A 25°C

CP0= 168.7129

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

9 G2

4 G3

8 G19

5 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

5 G31a1

2 G31a2

1 G31b1

1 G32h

1 G33j

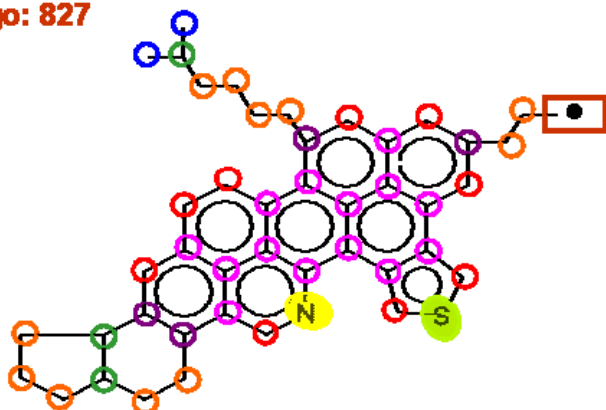
1 G34b

1 G34c

1 GR1

I127

Código: 827



G1: 2

G2: 11

G3: 3

G19: 9

G20: 4

G21: 14

G33j: 1

G34c: 1

GRI: 1

G24a: 1

G25b: 1

G29b2: 1

G30b2: 1

G31a1: 4

G31a2: 1

G31b1: 2

COMPUESTO=C44H42NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
92.93999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
289.2021

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.11310

B= 0.8134680

C= -4.9626181E-04

D= 1.1601600E-07

CP A 25°C

CP0= 167.3828

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 119.8446

B= 0.3991179

C= -1.1412446E-04

D= -6372102.

CP A 25°C

CP0= 157.0142

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

11 G2

3 G3

9 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

2 G31b1

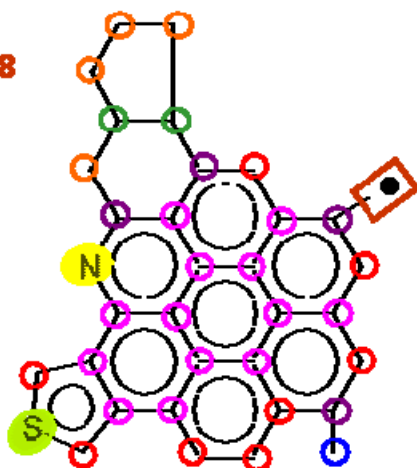
1 G33j

1 G34c

1 GR1

I128

Código: 828



G1: 1

G2: 4

G3: 2

G19: 7

G20: 4

G21: 14

G33j: 1

G34c: 1

GRI: 1

G24a: 1

G25b: 1

G29b2: 1

G30a: 1

G30b2: 1

G31a1: 3

G31b1: 3

COMPUESTO=C33H22NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
133.0000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
188.5863

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.04570

B= 0.5700420

C= -3.5113184E-04

D= 8.2724000E-08

CP A 25°C

CP0= 109.8915

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 78.77708

B= 0.2745183

C= -7.8620556E-05

D= -4546634.

CP A 25°C

CP0= 102.4888

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

4 G2

2 G3

7 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

3 G31a1

3 G31b1

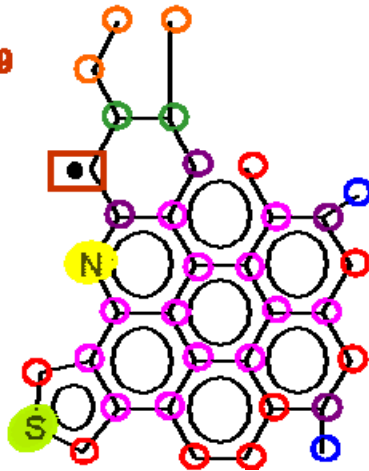
1 G33j

1 G34c

1 GR1

I129

Código: 829



G1: 2

G2: 3

G3: 2

G19: 7

G20: 4

G21: 14

G33j: 1

G34c: 1

GR2: 1

G24a: 1

G25b: 1

G29b2: 1

G30a: 1

G30b2: 1

G31a1: 3

G31b1: 3

COMPUESTO=C33H22NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
129.3200

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
172.2522

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -30.25420

B= 0.5700551

C= -3.4768146E-04

D= 8.1263003E-08

CP A 25°C

CP0= 110.9549

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 77.58153

B= 0.2798315

C= -8.0017708E-05

D= -4463140.

CP A 25°C

CP0= 103.6925

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

3 G2

2 G3

7 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

3 G31a1

3 G31b1

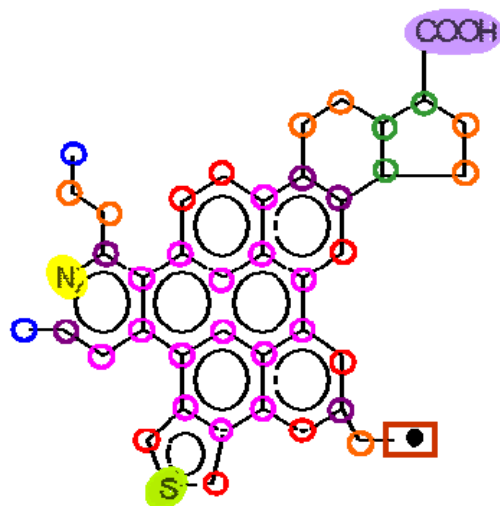
1 G33j

1 G34c

1 GR2

H30

Código: 830



G1: 2
G2: 7
G3: 3
G19: 8
G20: 5
G21: 14
G32h: 1
G33j: 1
G34c: 1
GRI: 1
G24a: 1
G25b: 1
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31a1: 5
G31a2: 2
G31b1: 1

COMPUESTO=C41H34NO2S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
19.82000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
289.6461

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.21670

B= 0.7586600

C= -4.6852184E-04

D= 1.1219200E-07

CP A 25°C

CP0= 153.3028

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 114.7308

B= 0.3578582

C= -9.8933582E-05

D= -6166460.

CP A 25°C

CP0= 143.2625

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

7 G2

3 G3

8 G19

5 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

5 G31a1

2 G31a2

1 G31b1

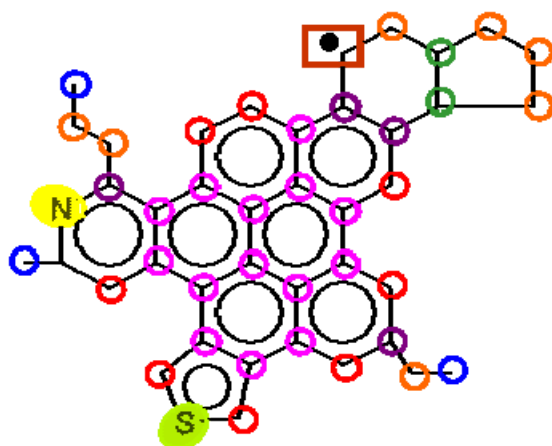
1 G32h

1 G33j

1 G34c

1 GR1

I131
Código: 831



G1: 3
G2: 7
G3: 2
G19: 8
G20: 5
G21: 14
G33j: 1
G34c: 1
GR2: 1

G24a: 1
G25b: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31a1: 2
G31a2: 2
G31b1: 3

COMPUESTO=C40H34NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
107.9500

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
246.7713

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -30.91300
B= 0.7112461
C= -4.2331146E-04
D= 9.8426000E-08
CP A 25°C
CP0= 146.1241

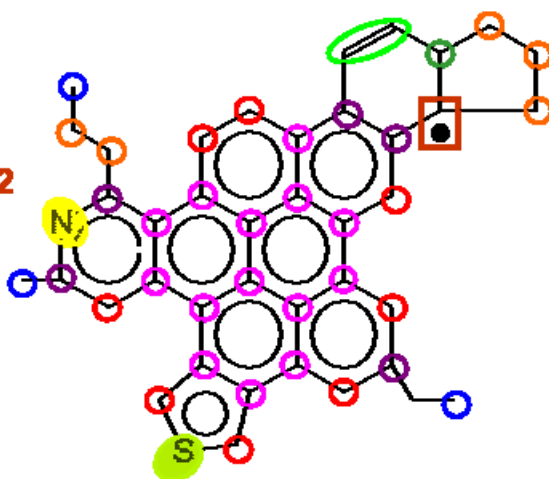
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 99.75446
B= 0.3596297
C= -9.9074721E-05
D= -5409550.
CP A 25°C
CP0= 137.3166

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
7 G2
2 G3
8 G19
5 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
2 G31a1
2 G31a2
3 G31b1
1 G33j
1 G34c
1 GR2

I132
Código: 832



G1: 3 **G24a: 1**
G2: 6 **G25b: 2**
G3: 1 **G29b2: 1**
G7: 1 **G30b2: 1**
G19: 8 **G31a1: 2**
G20: 5 **G31a2: 2**
G21: 14 **G31b1: 3**
G33j: 1
G34c: 1
GR3:1

COMPUESTO=C40H32NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 132.6900

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 262.6404

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -38.59710
 B= 0.6943981
 C= -4.1022163E-04
 D= 9.3909996E-08
 CP A 25°C
 CP0= 134.4606

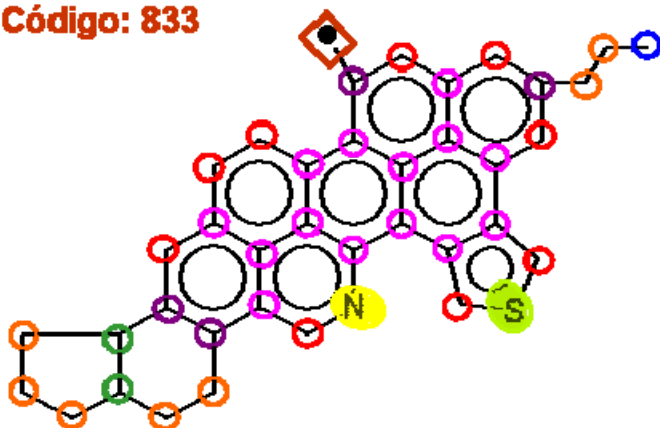
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 86.04574
 B= 0.3589652
 C= -1.0088349E-04
 D= -5159407.
 CP A 25°C
 CP0= 126.0630

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
 6 G2
 1 G3
 1 G7
 8 G19
 5 G20
 14 G21
 1 G24a
 2 G25b
 1 G29b2
 1 G30b2
 2 G31a1
 2 G31a2
 3 G31b1
 1 G33j
 1 G34c
 1 GR3

I133
Código: 833



G1: 1 **G24a: 1**
G2: 7 **G25b: 1**
G3: 2 **G29b2: 1**
G19: 9 **G30b2: 1**
G20: 4 **G31a1: 4**
G21: 14 **G31a2: 1**
G33j: 1
G34c: 1
GRI: 1

COMPUESTO=C38H30NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
124.2400

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
238.4156

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.77660

B= 0.6724250

C= -4.1170185E-04

D= 9.6481998E-08

CP A 25°C

CP0= 133.6665

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 95.27200

B= 0.3278193

C= -9.3897688E-05

D= -5300214.

CP A 25°C

CP0= 125.0401

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1

7 G2

2 G3

9 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

2 G31b1

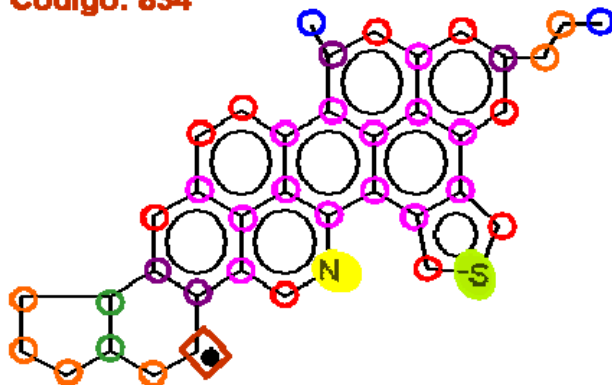
1 G33j

1 G34c

1 GR1

I134

Código: 834



G1: 1 **G24a: 1**
G2: 6 **G25b: 1**
G3: 2 **G29b2: 1**
G19: 9 **G30b2: 1**
G20: 4 **G31a1: 4**
G21: 14 **G31a2: 1**
G33j: 1 **G31b1: 2**
G34c: 1
GR2: 1

COMPUESTO=C38H30NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
120.5600

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
222.0814

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.98510

B= 0.6724380

C= -4.0825148E-04

D= 9.5021001E-08

CP A 25°C

CP0= 134.7298

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 94.12796

B= 0.3330449

C= -9.5257361E-05

D= -5220185.

CP A 25°C

CP0= 126.2335

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

6 G2

2 G3

9 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

4 G31a1

1 G31a2

2 G31b1

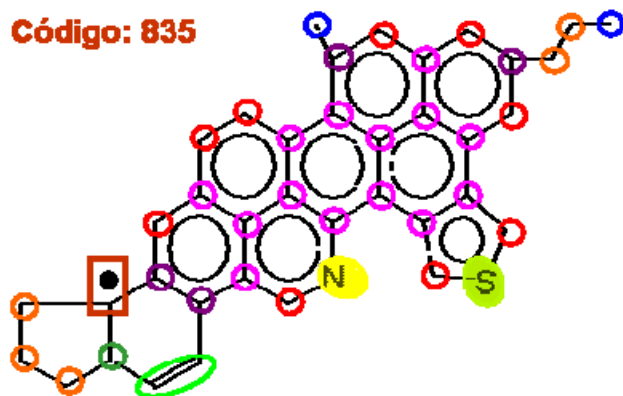
1 G33j

1 G34c

1 GR2

I135

Código: 835



G1: 2
G2: 5
G3: 1
G7: 1
G19: 9
G20: 4
G21: 14
G33j: 1
G34c: 1
GR3: 1
G24a: 1
G25b: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31a1: 4
G31a2: 1
G31b1: 2

COMPUESTO=C38H28NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
145.3000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
205.2230

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.78790
B= 0.6477720
C= -3.9171163E-04
D= 8.9913996E-08
CP A 25°C
CP0= 127.9078

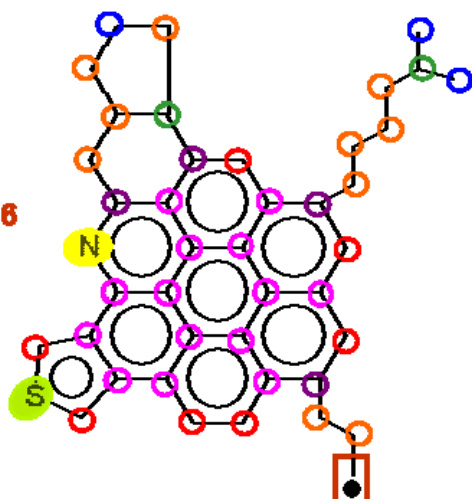
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 86.54057
B= 0.3266301
C= -9.5543808E-05
D= -4939117.
CP A 25°C
CP0= 119.8699

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
5 G2
1 G3
1 G7
9 G19
4 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
4 G31a1
1 G31a2
2 G31b1
1 G33j
1 G34c
1 GR3

I136
Código: 836



G1: 2 **G24a: 1**
G2: 10 **G25b: 1**
G3: 3 **G29b2: 1**
G19: 7 **G30a: 1**
G20: 4 **G30b2: 1**
G21: 14 **G31a1: 3**
G33j: 1 **G31b1: 2**
G34c: 1 **G31b2: 1**
GR1:1

COMPUESTO=C41H38NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 90.45999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 255.7852

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

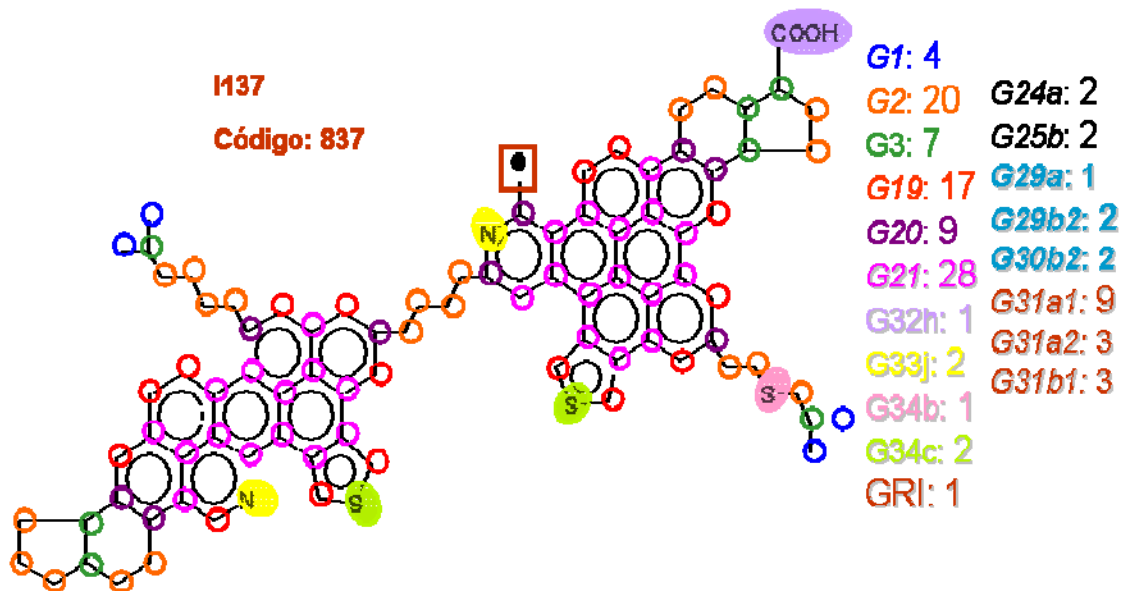
A= -31.59320
 B= 0.7538110
 C= -4.5963185E-04
 D= 1.0745000E-07
 CP A 25°C
 CP0= 155.1451

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 110.9613
 B= 0.3701161
 C= -1.0573620E-04
 D= -5899266.
 CP A 25°C
 CP0= 145.5488

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
 10 G2
 3 G3
 7 G19
 4 G20
 14 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30a
 1 G30b2
 3 G31a1
 2 G31b1
 1 G31b2
 1 G33j
 1 G34c
 1 GR1



COMPUESTO=C87H79N2O2S3

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
76.93999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
591.9048

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -67.33749

B= 1.649905

C= -1.0171417E-03

D= 2.4134303E-07

CP A 25°C

CP0= 340.5609

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 253.0111

B= 0.7878219

C= -2.2214398E-04

D= -1.3260974E+07

CP A 25°C

CP0= 318.9747

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

20 G2

7 G3

17 G19

9 G20

28 G21

2 G24a

2 G25b

1 G29a

2 G29b2

2 G30b2

9 G31a1

3 G31a2

3 G31b1

1 G32h

2 G33j

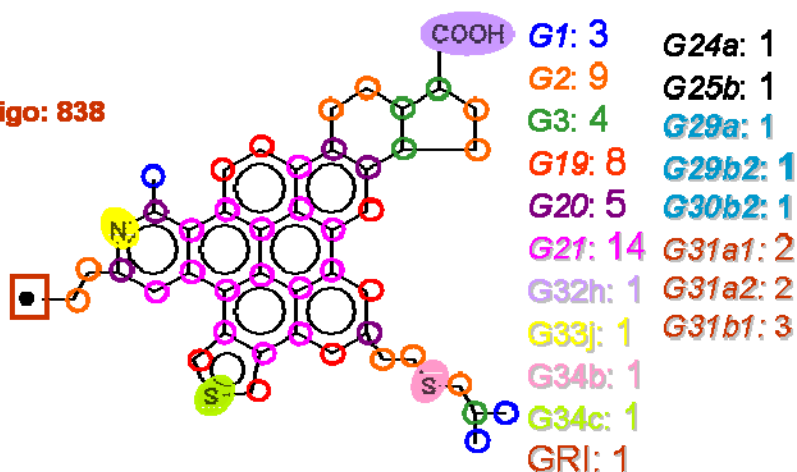
1 G34b

2 G34c

1 GR1

I138

Código: 838



COMPUESTO=C45H42NO2S2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
10.35000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
367.3615

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.11660

B= 0.8581041

C= -5.2940182E-04

D= 1.2646200E-07

CP A 25°C

CP0= 180.0185

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 135.7209

B= 0.4064160

C= -1.1284407E-04

D= -6947006.

CP A 25°C

CP0= 168.7129

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1

9 G2

4 G3

8 G19

5 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

2 G31a1

2 G31a2

3 G31b1

1 G32h

1 G33j

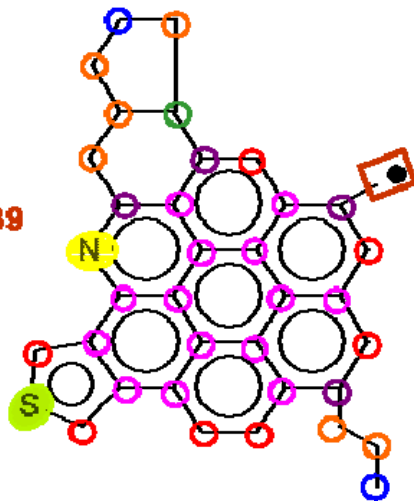
1 G34b

1 G34c

1 GR1

I139

Código: 839



G1: 1
G2: 6
G3: 2
G19: 7
G20: 4
G21: 14
G33j: 1
G34c: 1
GR1:1
G24a: 1
G25b: 1
G29b2: 1
G30a: 1
G30b2: 1
G31a1: 3
G31b1: 2
G31b2: 1

COMPUESTO=C35H26NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
121.7600

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
204.9988

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -30.25670
B= 0.6127680
C= -3.7507183E-04
D= 8.7916000E-08
CP A 25°C
CP0= 121.4287

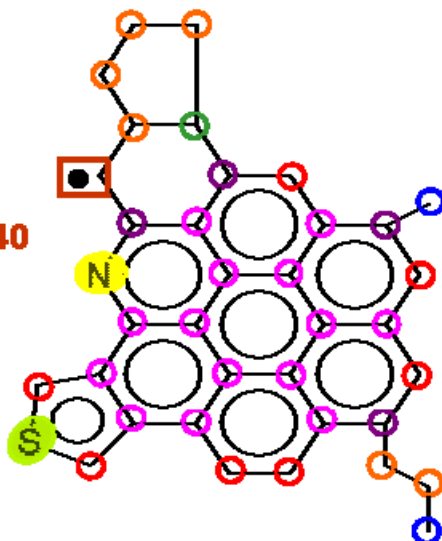
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 86.46333
B= 0.2986881
C= -8.5453270E-05
D= -4832258.
CP A 25°C
CP0= 113.5608

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

1 G1
6 G2
2 G3
7 G19
4 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30a
1 G30b2
3 G31a1
2 G31b1
1 G31b2
1 G33j
1 G34c
1 GR1

I140
Código: 840



G1: 2	G24a: 1
G2: 5	G25b: 1
G3: 2	G29b2: 1
G19: 7	G30a: 1
G20: 4	G30b2: 1
G21: 14	G31a1: 3
G33j: 1	G31b1: 2
G34c: 1	G31b2: 1
GR2:1	

COMPUESTO=C35H26NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 118.0800

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 188.6646

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.46520
 B= 0.6127810
 C= -3.7162146E-04
 D= 8.6454996E-08
 CP A 25°C
 CP0= 122.4921

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

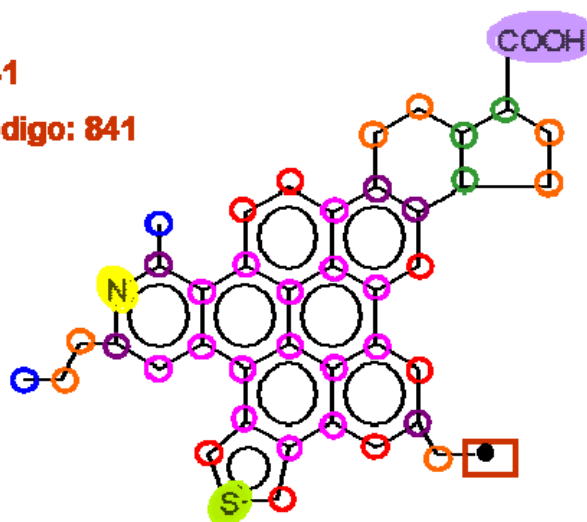
A= 85.26465
 B= 0.3040077
 C= -8.6853433E-05
 D= -4748604.
 CP A 25°C
 CP0= 114.7648

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
 5 G2
 2 G3
 7 G19
 4 G20
 14 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30a
 1 G30b2
 3 G31a1
 2 G31b1
 1 G31b2
 1 G33j
 1 G34c
 1 GR2

I141

Código: 841



G1: 2 G24a: 1
G2: 7 G25b: 1
G3: 3 G29a: 1
G19: 8 G29b2: 1
G20: 5 G30b2: 1
G21: 14 G31a1: 3
G32h: 1 G31a2: 1
G33j: 1 G31b1: 2
G34c: 1 G31b2: 1
GRI: 1

COMPUESTO=C41H34NO2S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
19.80000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
285.2859

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.21670

B= 0.7586600

C= -4.6852184E-04

D= 1.1219200E-07

CP A 25°C

CP0= 153.3028

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 114.7308

B= 0.3578582

C= -9.8933582E-05

D= -6166460.

CP A 25°C

CP0= 143.2625

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

7 G2

3 G3

8 G19

5 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

3 G31a1

1 G31a2

2 G31b1

1 G31b2

1 G32h

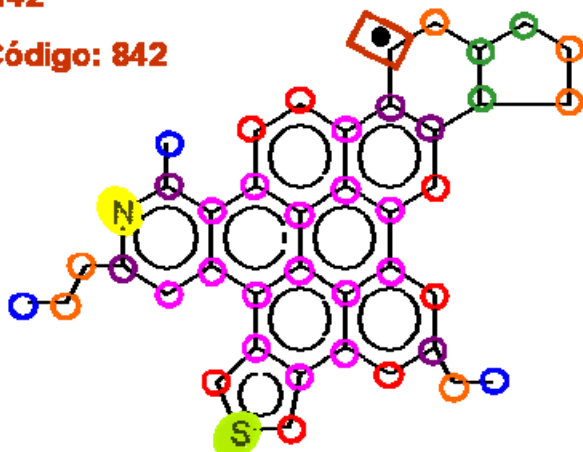
1 G33j

1 G34c

1 GR1

I142

Código: 842



G1: 3 **G24a: 1**
G2: 7 **G25b: 1**
G3: 2 **G29b2: 1**
G19: 8 **G30b2: 1**
G20: 5 **G31a1: 5**
G21: 14 **G31a2: 2**
G32h: 1 **G31b1: 1**
G33j: 1
G34c: 1
GR2: 1

COMPUESTO=C40H34NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
107.1700

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
243.2160

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -30.91300
B= 0.7112461
C= -4.2331146E-04
D= 9.8426000E-08
CP A 25°C
CP0= 146.1241

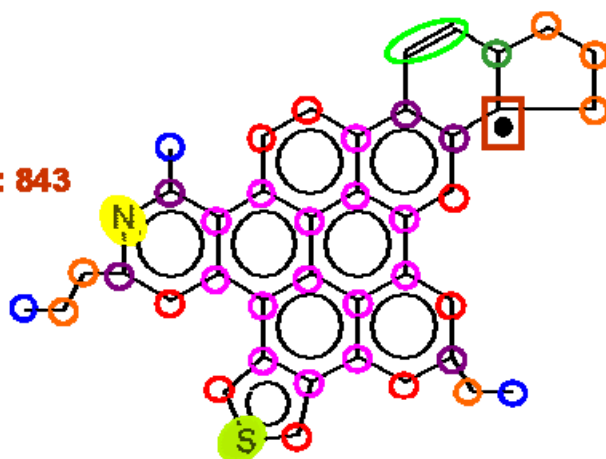
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 99.75446
B= 0.3596297
C= -9.9074721E-05
D= -5409550.
CP A 25°C
CP0= 137.3166

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
7 G2
2 G3
8 G19
5 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
5 G31a1
2 G31a2
1 G31b1
1 G33j
1 G34c
1 GR2

I143
Código: 843



G1: 3
G2: 6
G3: 1
G7: 1
G19: 8
G20: 5
G21: 14
G33j: 1
G34c: 1
GR3: 1
G24a: 1
G25b: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31a1: 5
G31a2: 2
G31b1: 1

COMPUESTO=C40H32NS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
131.9100

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
226.3576

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.71580
B= 0.6865801
C= -4.0677164E-04
D= 9.3318995E-08
CP A 25°C
CP0= 139.3020

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 92.11693
B= 0.3533014
C= -9.9398538E-05
D= -5125167.
CP A 25°C
CP0= 130.9627

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

3 G1
6 G2
1 G3
1 G7
8 G19
5 G20
14 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
5 G31a1
2 G31a2
1 G31b1
1 G33j
1 G34c
1 GR3

COMPUESTO=C28H49

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-68.55000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
218.8483

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -68.73520

B= 0.7493851

C= -4.5976182E-04

D= 1.0457500E-07

CP A 25°C

CP0= 116.5958

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 70.06776

B= 0.3758496

C= -1.1528945E-04

D= -5745638.

CP A 25°C

CP0= 107.2437

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

20 G2

7 G3

1 G24a

3 G25a

1 G29a

1 G29b2

2 G30b2

1 GR1

COMPUESTO=C13H27

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-30.43000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
172.4637

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 1.743800

B= 0.2695250

C= -1.5293187E-04

D= 3.3649002E-08

CP A 25°C

CP0= 69.39986

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 46.37812

B= 0.1493813

C= -4.2112162E-05

D= -1846896.

CP A 25°C

CP0= 66.39613

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

9 G2

1 G3

1 GR1

FICHA DEL COMPUESTO

DEBE SER INTRODUCIDA EN EL ARCHIVO LISTCOMP.XLS

847

C13H27

No

G

I2'

IDEM

COMPUESTO=C15H31

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-40.31001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
190.7208

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 2.532800

B= 0.3122510

C= -1.7687186E-04

D= 3.8841002E-08

CP A 25°C

CP0= 80.93711

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 54.10519

B= 0.1734820

C= -4.8915401E-05

D= -2135289.

CP A 25°C

CP0= 77.45981

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

11 G2

1 G3

1 GR1

FICHA DEL COMPUESTO

DEBE SER INTRODUCIDA EN EL ARCHIVO LISTCOMP.XLS

848

C15H31

No

G

I4'

IDEM

COMPUESTO=C76H71OS3N2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
113.9000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
514.5698

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -54.80090

B= 1.424681

C= -8.5725193E-04

D= 2.0628900E-07

CP A 25°C

CP0= 299.2311

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 219.0084

B= 0.6878292

C= -1.7773149E-04

D= -1.1334181E+07

CP A 25°C

CP0= 280.7824

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

19 G2

5 G3

14 G19

11 G20

21 G21

1 G24a

1 G24b

2 G25b

1 G29a

2 G29b2

2 G30b2

10 G31a1

1 G31a2

2 G31b1

1 G32g

2 G33j

2 G34b

1 G34c

1 GR1

FICHA DEL COMPUESTO

DEBE SER INTRODUCIDA EN EL ARCHIVO LISTCOMP.XLS

850

C76H71OS3N2

No

G

I70'

IDEM

COMPUESTO=C39H35SO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
61.45000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
265.6303

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.52740

B= 0.7232190

C= -4.4899184E-04

D= 1.0821200E-07

CP A 25°C

CP0= 143.0559

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 108.1355

B= 0.3366358

C= -9.2514521E-05

D= -5947582.

CP A 25°C

CP0= 133.3726

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

8 G2

3 G3

8 G19

4 G20

12 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

5 G31a1

1 G31b2

1 G32g

1 G34c

1 GR1

FICHA DEL COMPUESTO

DEBE SER INTRODUCIDA EN EL ARCHIVO LISTCOMP.XLS

C39H35SO

No

G

I69'

IDEM

COMPUESTO=C41H35OS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
72.13000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
266.7879

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.28360

B= 0.7475590

C= -4.6609185E-04

D= 1.1245600E-07

CP A 25°C

CP0= 149.1491

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 113.9155

B= 0.3459836

C= -9.5706942E-05

D= -6174368.

CP A 25°C

CP0= 139.1047

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

8 G2

3 G3

8 G19

4 G20

14 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30a

1 G30b2

3 G31a1

2 G31b1

1 G31b2

1 G32g

1 G34c

1 GR1

FICHA DEL COMPUESTO

DEBE SER INTRODUCIDA EN EL ARCHIVO LISTCOMP.XLS

851

C41H35OS

No

G

I84'

IDEM

COMPUESTO=C77H73N2OS2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
95.40001

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
486.3181

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -57.12179

B= 1.441928

C= -8.7061187E-04

D= 2.0842000E-07

CP A 25°C

CP0= 300.9213

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 219.5701

B= 0.6973687

C= -1.8402969E-04

D= -1.1454738E+07

CP A 25°C

CP0= 282.2723

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

20 G2

5 G3

14 G19

10 G20

22 G21

1 G24a

1 G24b

2 G25b

2 G29a

2 G29b2

2 G30b2

6 G31a1

1 G31a3

3 G31b1

1 G31b2

1 G32g

2 G33j

1 G34b

1 G34c

1 GR1

FICHA DEL COMPUESTO

DEBE SER INTRODUCIDA EN EL ARCHIVO LISTCOMP.XLS

852

C77H73N2OS2

No

G

I85'

IDEM

COMPUESTO=C39H35OS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
60.31000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
263.3160

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.52740

B= 0.7232190

C= -4.4899184E-04

D= 1.0821200E-07

CP A 25°C

CP0= 143.0559

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 108.1355

B= 0.3366358

C= -9.2514521E-05

D= -5947582.

CP A 25°C

CP0= 133.3726

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1

8 G2

3 G3

8 G19

4 G20

12 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a2

1 G31b1

2 G31b2

1 G32g

1 G34c

1 GR1

FICHA DEL COMPUESTO

DEBE SER INTRODUCIDA EN EL ARCHIVO LISTCOMP.XLS

853

C39H35OS

No

G

I101'

IDEM

COMPUESTO=C83H77N2OS3

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
120.5900

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
518.3383

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -61.15310

B= 1.560607

C= -9.4998186E-04

D= 2.2331800E-07

CP A 25°C

CP0= 325.6134

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 235.2422

B= 0.7629573

C= -2.1438001E-04

D= -1.2268724E+07

CP A 25°C

CP0= 305.6448

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

4 G1

21 G2

6 G3

15 G19

9 G20

26 G21

2 G24a

2 G25b

1 G29a

2 G29b2

2 G30b2

7 G31a1

1 G31a2

4 G31b1

1 G31b2

1 G32g

2 G33j

1 G34b

2 G34c

1 GR1

FICHA DEL COMPUESTO

DEBE SER INTRODUCIDA EN EL ARCHIVO LISTCOMP.XLS

854

C83H77N2OS3

No

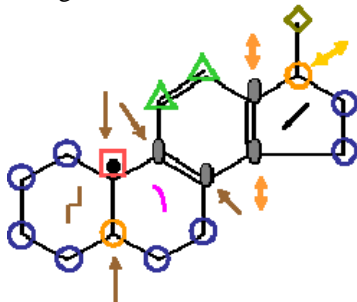
G

I102'

IDEM

RADICALES AROMÁTICOS

Codigo: 717 C18H23 Radical I17



G1: 1
 G2: 8
 G3: 2
 G19: 2
 G20: 4
 G24b: 1
 G25a: 1
 G25b: 1
 G29a: 1
 G29b2: 1
 G30b2: 2

COMPUESTO=C18H23

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 1.630003

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 134.9902

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -38.04260

B= 0.3967760

C= -2.2405131E-04

D= 5.3856002E-08

CP A 25°C

CP0= 61.76686

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 33.41462

B= 0.2044504

C= -4.6667636E-05

D= -2957244.

CP A 25°C

CP0= 56.95575

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1

8 G2

2 G3

2 G19

4 G20

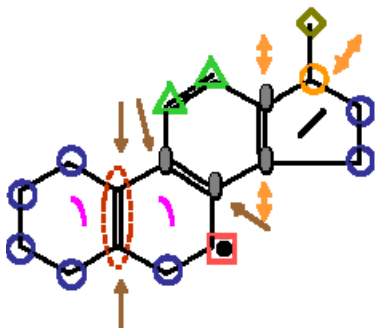
1 G24b

1 G25a
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
1 GR21

Codigo:718

C18H21

Radical I18



G1: 1
G2: 7
G3: 1
G19: 2
G20: 4
G24b: 1
G10: 1
G25b: 2
G29a: 1
G29b2: 1
G30b2: 2

COMPUESTO=C18H21

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
16.62000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
198.5642

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.36610
B= 0.3630670
C= -2.1458390E-04
D= 5.4906003E-08
CP A 25°C
CP0= 59.26244

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 41.50915
B= 0.1669491
C= -3.3723518E-05
D= -3016563.
CP A 25°C
CP0= 54.35262

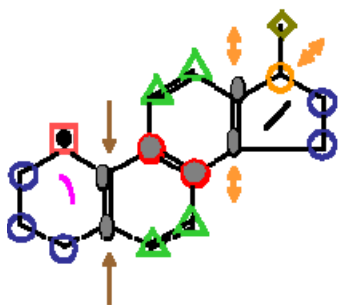
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1
7 G2
1 G3

1 G10
 2 G19
 4 G20
 1 G24b
 2 G25b
 1 G29a
 1 G29b2
 2 G30b2
 1 GR20

Codigo: 719

C18H19 Radical I19



G1: 1
 G2: 5
 G3: 1
 G19: 4
 G20: 4
 G21: 2 ●
 G24b: 1
 G25b: 1
 G29a: 1 †
 G29b2: 1 †
 G30b2: 1 †
 G31a1: 1 †
 GR20: 1

COMPUESTO=C18H19

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 34.14000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 162.2805

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -28.41800

B= 0.3399740

C= -1.9745392E-04

D= 5.0132005E-08

CP A 25°C

CP0= 56.72158

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 38.11506

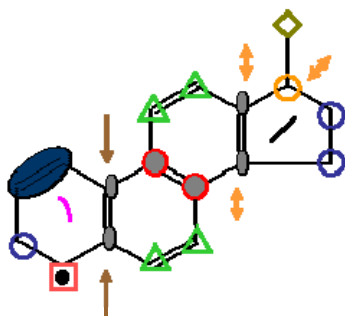
B= 0.1609186

C= -3.2323675E-05
 D= -2753920.
 CP A 25°C
 CP0= 52.23957

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

- 1 G1
- 5 G2
- 1 G3
- 4 G19
- 4 G20
- 2 G21
- 1 G24b
- 1 G25b
- 1 G29a
- 1 G29b2
- 1 G30b2
- 1 G31a1
- 1 GR20

Codigo: 720 C18H17 Radical I20



- G1: 1
- G2: 3
- G3: 1
- G19: 4
- G20: 4
- G21: 2 ●
- G24b: 1
- G25b: 1
- G7: 1 ●
- G29a: 1 ↓
- G29b2: 1 ↓
- G30b2: 1 ↓
- G31a1: 1

COMPUESTO=C18H17

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 50.56000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 167.1712

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.12140
 B= 0.3355420
 C= -1.9817390E-04

D= 5.0910003E-08
CP A 25°C
CP0= 51.65339

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 35.43875
B= 0.1537167
C= -3.0484696E-05
D= -2796268.
CP A 25°C
CP0= 47.10310

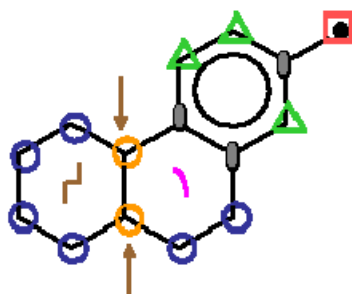
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1
3 G2
1 G3
4 G19
4 G20
2 G21
1 G24b
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
1 G31a1
1 GR20

Codigo: 721

C15H19

Radical I21



G2: 5
G3: 2
G19: 3
G20: 3
G25a: 1
G25b: 1
G30b2: 1
G31b2: 1

COMPUESTO=C15H19

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
16.72000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
135.1201

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.46830
B= 0.3289010
C= -1.9357237E-04
D= 4.7263999E-08
CP A 25°C
CP0= 48.63889

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 29.29128

B= 0.1600327

C= -3.7864720E-05

D= -2598543.

CP A 25°C

CP0= 44.40699

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

6 G2

2 G3

3 G19

3 G20

1 G25a

1 G25b

1 G30b2

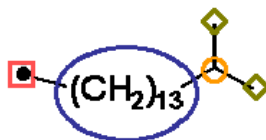
1 G31b2

1 GR19

Codigo: 722

C17H35

Radical I22



G1: 2
G2: 13
G3: 1
GR1: 1

COMPUESTO=C17H35

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=

-50.19000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=

208.9779

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 3.321800

B= 0.3549770

C= -2.0081186E-04

D= 4.4033001E-08

CP A 25°C

CP0= 92.47437

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 61.73097

B= 0.1977551

C= -5.5792319E-05

D= -2416851.

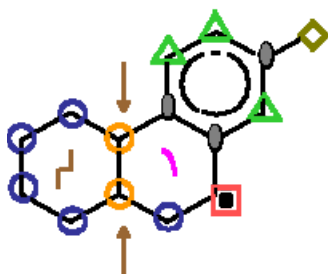
CP A 25°C

CP0= 88.54389

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
13 G2
1 G3
1 GR1

Codigo: 723 C15H19 Radical I23



G1: 1
G2: 5
G3: 2
G19: 3
G20: 3
G25a: 1
G25b: 1

G30b2: 1 ↓
G31b2: 1

COMPUESTO=C15H19

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
13.11000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
118.2558

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.85050
B= 0.3290600
C= -1.9012392E-04
D= 4.5802999E-08
CP A 25°C
CP0= 46.57192

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 24.93579
B= 0.1654689
C= -3.9254061E-05
D= -2516002.
CP A 25°C
CP0= 42.47733

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

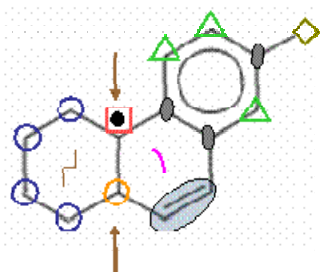
1 G1
5 G2
2 G3
3 G19
3 G20
1 G25a
1 G25b

1 G30b2
1 G31b2
1 GR20

Codigo: 724

C15H17

Radical I24



G1:1
G2: 4
G3: 1
G19: 3
G20: 3
G25a: 1 ↗
G25b: 1
G7: 1 ●
G30b2: 1 ↓
G31b2: 1

COMPUESTO=C15H17

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
38.10000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
101.0875

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.40600
B= 0.3041960
C= -1.7358131E-04
D= 4.0696001E-08
CP A 25°C
CP0= 43.93838

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

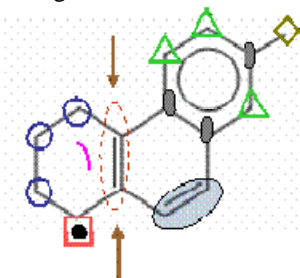
A= 21.60679
B= 0.1588378
C= -3.9530085E-05
D= -2235732.
CP A 25°C
CP0= 40.29961

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1
4 G2
1 G3
1 G7
3 G19
3 G20
1 G25a
1 G25b

1 G30b2
1 G31b2
1 GR21

Codigo: 725 C15H15 Radical I25



G1: 1
G2: 3
G19: 3
G20: 3
G25b: 2
G10: 1
G7: 1
G30b2: 1 ↓

G31b2: 1
GR15: 1

COMPUESTO=C15H15

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
54.09000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
165.3551

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -25.80310
B= 0.2704440
C= -1.6411309E-04
D= 4.1745999E-08
CP A 25°C
CP0= 41.34761

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

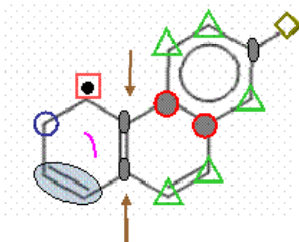
A= 29.62477
B= 0.1212982
C= -2.6587106E-05
D= -2294826.
CP A 25°C
CP0= 37.61094

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1
3 G2
1 G7
1 G10
3 G19
3 G20
2 G25b
1 G30b2
1 G31b2

1 GR15

Codigo: 726 C15H13 Radical I26



G1:1

G2: 1

G19: 5

G20: 3

G21: 2 ●

G25b: 1

G7: 1 ●

G30b2: 1 ↓

G31b2: 1

GR20: 1

COMPUESTO=C15H13

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
69.67000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
128.6462

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -22.78140

B= 0.2473940

C= -1.4698392E-04

D= 3.6972001E-08

CP A 25°C

CP0= 38.89311

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 26.29007

B= 0.1153350

C= -2.5198404E-05

D= -2031224.

CP A 25°C

CP0= 35.58712

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1

1 G2

1 G7

5 G19

3 G20

2 G21

1 G25b

1 G30b2

1 G31b2

1 GR20

Codigo: 727 C12H25 Radical I27



G1:2
G2: 8
G3: 1
GR1: 1

COMPUESTO=C12H25

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-25.49000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
163.3351

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 1.349300
B= 0.2481620
C= -1.4096187E-04
D= 3.1053002E-08
CP A 25°C
CP0= 63.63123

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

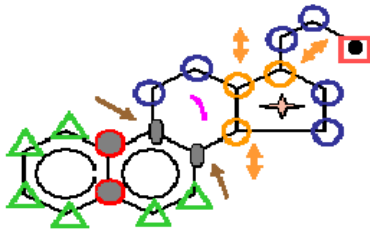
A= 42.54467
B= 0.1372794
C= -3.8688464E-05
D= -1704710.
CP A 25°C
CP0= 60.85838

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
8 G2
1 G3
1 GR1

Codigo: 728

C20H23 Radical I28



G2: 6
G3: 3
G19: 6
G20: 2
G21: 2 ●
G24a: 1 ✦
G25b: 1

G29a: 1 ⇕
G29b2: 1 ⇕
G30b2: 1 ↓
G31a1: 1
GR1: 1

COMPUESTO=C20H23

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=

48.87000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
183.5487

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -38.14580

B= 0.4268530

C= -2.7500186E-04

D= 6.9828999E-08

CP A 25°C

CP0= 66.52528

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 54.56140

B= 0.1773890

C= -4.4966720E-05

D= -3838121.

CP A 25°C

CP0= 60.27602

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

6 G2

3 G3

6 G19

2 G20

2 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29a

1 G29b2

1 G30b2

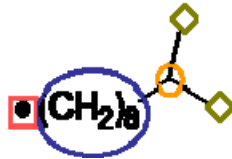
1 G31a1

1 GR1

Codigo: 729

C11H23

Radical I29



G1:2
G2: 8
G3: 1
GR1: 1

COMPUESTO=C11H23

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-20.55000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
154.2065

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 0.9547999

B= 0.2267990

C= -1.2899187E-04

D= 2.8457000E-08

CP A 25°C

CP0= 57.86260

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 38.71304

B= 0.1251742

C= -3.5263194E-05

D= -1562634.

CP A 25°C

CP0= 55.32033

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1

7 G2

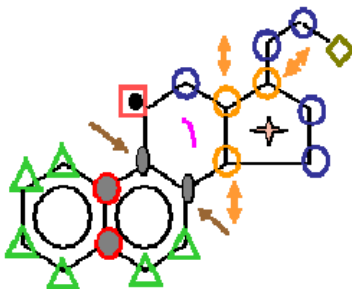
1 G3

1 GR1

Codigo: 730

C20H23

Radical I30



G1: 1
G2: 5
G3: 3
G19: 6
G20: 2
G21: 2 ●
G24a: 1 ⊕
G25b: 1

G29a: 1 †
G29b2: 1 †
G30b2: 1 †
G31a1: 1
GR20: 1

COMPUESTO=C20H23

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=

32.44000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=

162.8345

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -41.00590

B= 0.4270570

C= -2.7155393E-04

D= 6.8368003E-08

CP A 25°C

CP0= 63.99378

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 49.75597
 B= 0.1828221
 C= -4.6335907E-05
 D= -3757445.
 CP A 25°C
 CP0= 57.87633

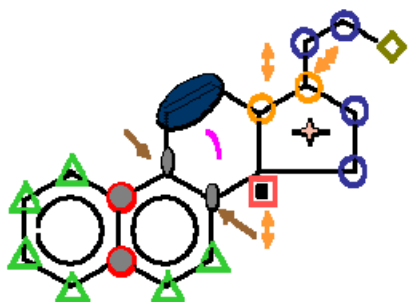
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1
 5 G2
 3 G3
 6 G19
 2 G20
 2 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29a
 1 G29b2
 1 G30b2
 1 G31a1
 1 GR20

Codigo: 731

C20H21

Radical I31



G1: 1
G2: 4
G3: 2
G19: 6
G20: 2
G21: 2 ●
G24a: 1 ✦
G25b: 1
G7: 1 ●

G29a: 1 ↓
G29b2: 1 ↓
G30b2: 1 ↓
G31a1: 1
GR21: 1

COMPUESTO=C20H21

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 57.43000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 145.6661

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -37.56140
 B= 0.4021930
 C= -2.5501131E-04
 D= 6.3261005E-08
 CP A 25°C
 CP0= 61.36025

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

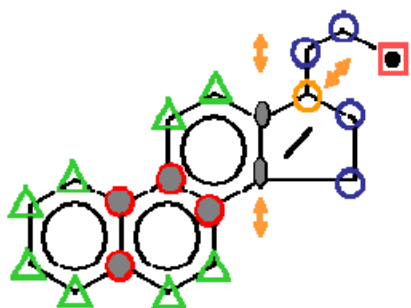
A= 46.42881

B= 0.1761885
C= -4.6610992E-05
D= -3477336.
CP A 25°C
CP0= 55.69796

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1
4 G2
2 G3
1 G7
6 G19
2 G20
2 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
1 G31a1
1 GR21

Codigo: 732 C20H19 Radical I32



G2: 4
G3: 1
G19: 8
G20: 2
G21: 4 ●
G24b: 1

G29a: 1 ↓
G29b2: 1 ↓
G31a1: 2
GR1: 1

COMPUESTO=C20H19

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
77.97000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
178.0319

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -27.67770
B= 0.3706270
C= -2.3305188E-04
D= 5.8230000E-08
CP A 25°C
CP0= 63.65126

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 49.59444
B= 0.1626618
C= -4.1253290E-05
D= -3198187.
CP A 25°C
CP0= 58.44714

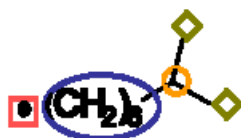
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

4 G2
1 G3
8 G19
2 G20
4 G21
1 G24a
1 G29a
1 G29b2
2 G31a1
1 GR1

Codigo: 733

C9H19

Radical I33



G1:2
G2: 6
G3: 1
GR1: 1

COMPUESTO=C9H19

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-10.67000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
135.9494

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 0.1657999
B= 0.1840730
C= -1.0505188E-04
D= 2.3265001E-08
CP A 25°C
CP0= 46.32535

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

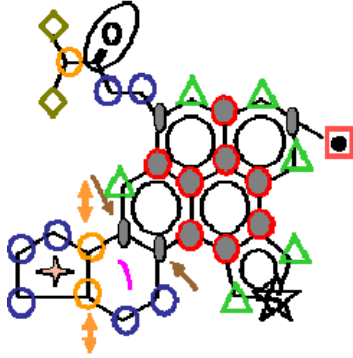
A= 31.02653
B= 0.1010041
C= -2.8430197E-05
D= -1276953.
CP A 25°C
CP0= 44.24865

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
5 G2
1 G3
1 GR1

RADICALES RESINAS

Codigo: 734 C32H31OS Radical I34



<p>G1: 2</p> <p>G2: 7</p> <p>G3: 3</p> <p>G19: 6</p> <p>G20: 4</p> <p>G21: 8 ●</p> <p>G24a: 1 ✦</p> <p>G25b: 1</p>	<p>G29b2: 1 †</p> <p>G30b2: 1 †</p> <p>G31b1: 1</p> <p>G31b2: 1</p> <p>G31a2: 1</p> <p>G31a1: 1</p> <p>G32g: 1 0</p> <p>G34c: 1 ☆</p> <p>GR19: 1</p>
--	--

COMPUESTO=C32H31OS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
27.53000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
233.6619

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.97300
B= 0.6149269
C= -3.7816234E-04
D= 9.1158000E-08
CP A 25°C
CP0= 118.1673

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 87.03427
B= 0.2892952
C= -7.7877143E-05
D= -5009394.
CP A 25°C
CP0= 110.0121

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

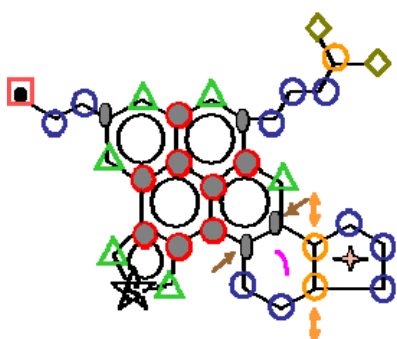
2 G1
7 G2
3 G3
6 G19
4 G20
8 G21
1 G24a

1 G25b
 1 G29b2
 1 G30b2
 1 G31a1
 1 G31a2
 1 G31b1
 1 G31b2
 1 G32g
 1 G34c
 1 GR19

Codigo: 735

C34H37S

Radical I35



G1: 2
 G2: 10
 G3: 3
 G19: 6
 G20: 4
 G21: 8 ●
 G24a: 1 ✦
 G25b: 1
 G29b2: 1 ↓
 G30b2: 1 ↓
 G31b1: 1
 G31b2: 1
 G31a2: 1
 G31a1: 1
 G34c: 1 ☆
 GR1: 1

COMPUESTO=C34H37S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 57.00999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 284.1634

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.31320
 B= 0.6582080
 C= -3.9771182E-04
 D= 9.4452005E-08
 CP A 25°C
 CP0= 130.0809

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 92.01524
 B= 0.3208964
 C= -8.6612643E-05
 D= -5186892.
 CP A 25°C
 CP0= 121.6416

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

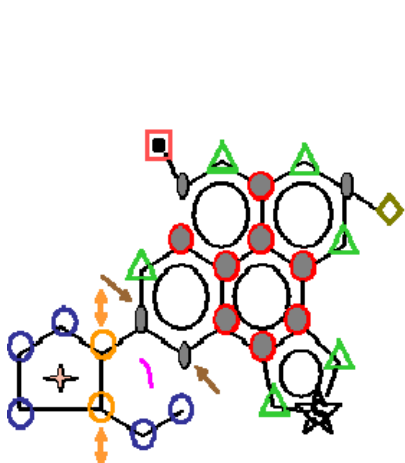
2 G1
 10 G2

3 G3
 6 G19
 4 G20
 8 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30b2
 1 G31a1
 1 G31a2
 1 G31b1
 1 G31b2
 1 G34c
 1 GR1

Codigo: 736

C27H23S

Radical I36



G1:1
 G3: 2
 G19: 6
 G20: 4
 G21: 8 ●
 G24a: 1 ✦
 G25b: 1
 G29b2: 1 †

G30b2: 1 ↓
 G31b1: 1
 G31a1: 1
 G31b2: 1
 G31a2: 1
 G34c: 1 ☆
 GR19: 1

COMPUESTO=C27H23S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 80.42999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 220.3983

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.84910
 B= 0.4958470
 C= -3.0118236E-04
 D= 7.2322003E-08
 CP A 25°C
 CP0= 90.13135

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 63.14005
 B= 0.2375241
 C= -6.2954852E-05
 D= -3973262.

CP A 25°C
CP0= 83.66466

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1
5 G2
2 G3
6 G19
4 G20
8 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
1 G31a1
1 G31a2
1 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GR19

Codigo: 737 C5H9O Radical I37



G1: 2
G3: 1
G32g: 10
GR14: 1

COMPUESTO=C5H9O

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-30.07000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
67.99075

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -3.882700
B= 9.8138995E-02
C= -6.1563209E-05
D= 1.4779000E-08
CP A 25°C
CP0= 20.29657

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

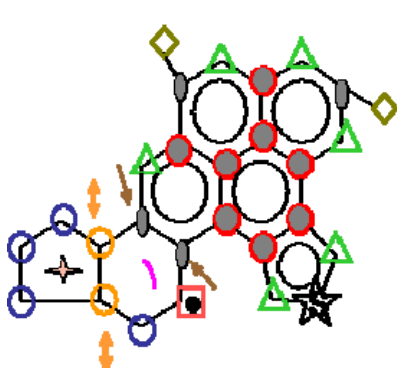
A= 15.74049
B= 4.5337368E-02
C= -1.2875695E-05
D= -812459.9

CP A 25°C
CP0= 18.97355

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
1 G3
1 G32g
1 GR14

Codigo: 738 C27H23S Radical I38



G1: 2
G2: 4
G3: 2
G19: 6
G20: 4
G21: 8 ●
G24a: 1 †
G25b: 1
G29b2: 1 †
G30b2: 1 †
G31a1: 1
G31a2: 1
G31b1: 1
G31b2: 1
G34c: 1 ☆
GR20: 1

COMPUESTO=C27H23S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
76.81999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
203.5341

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.23130
B= 0.4960060
C= -2.9773390E-04
D= 7.0860999E-08
CP A 25°C
CP0= 88.06436

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 58.80025
B= 0.2429341
C= -6.4333202E-05
D= -3891812.
CP A 25°C
CP0= 81.73160

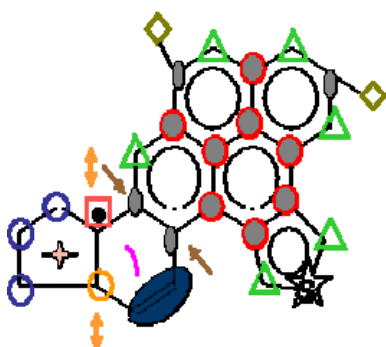
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

- 2 G1
- 4 G2
- 2 G3
- 6 G19
- 4 G20
- 8 G21
- 1 G24a
- 1 G25b
- 1 G29b2
- 1 G30b2
- 1 G31a1
- 1 G31a2
- 1 G31b1
- 1 G31b2
- 1 G34c
- 1 GR20

Codigo: 739

C27H21S

Radical I39



- | | |
|-----------|------------|
| G1: 2 | G29b2: 1 ↓ |
| G2: 3 | G30b2: 1 ↓ |
| G3: 1 | G31a1: 1 |
| G19: 6 | G31a2: 1 |
| G20: 4 | G31b1: 1 |
| G21: 8 ● | G31b2: 1 |
| G24a: 1 ✦ | G34c: 1 ☆ |
| G25b: 1 | GR21: 1 |
| G7: 1 ● | |

COMPUESTO=C27H21S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
101.8100

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
186.3658

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.78679

B= 0.4711420

C= -2.8119131E-04

D= 6.5754001E-08

CP A 25°C

CP0= 85.43084

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 55.48777

B= 0.2362748

C= -6.4597138E-05

D= -3612656.
CP A 25°C
CP0= 79.55053

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
3 G2
1 G3
1 G7
6 G19
4 G20
8 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
1 G31a1
1 G31a2
1 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GR21

Codigo: 740 C3H7 Radical I40



COMPUESTO=C3H7

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
16.95000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
68.82867

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 2.293800
B= 4.3042999E-02
C= -1.7041479E-05
D= 2.2700000E-09
CP A 25°C
CP0= 13.67236

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 5.296693
B= 3.4952015E-02
C= -9.5715031E-06
D= -124047.0
CP A 25°C
CP0= 13.47134

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy

2 G1
1 GR2

Codigo: 741 C2H3O Radical I41



G1:1
G32g: 10
GR23: 1

COMPUESTO=C2H3O

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
-15.65000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
80.72633

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 7.519300
B= 2.1623999E-02
C= -8.5197198E-06
D= 1.1350000E-09
CP A 25°C
CP0= 13.23923

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 9.024746
B= 1.7571619E-02
C= -4.7817539E-06
D= -62289.43
CP A 25°C
CP0= 13.13794

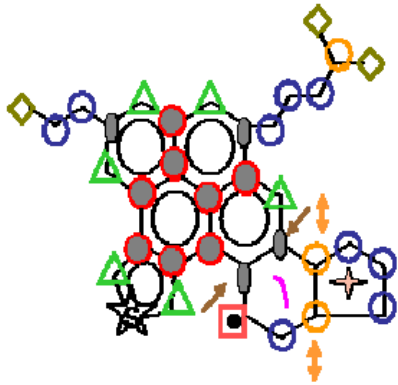
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1
1 GR23

Codigo: 742

C34H37S

Radical I42



G1: 3	G29b2: 1↑
G2: 9	G30b2: 1↓
G3: 3	G31b1: 2
G19: 6	G31b2: 1
G20: 4	G31a1: 1
G21: 8●	G34c: 1★
G24a: 1+	GR20: 1
G25b: 1	

COMPUESTO=C34H37S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
42.00000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
260.7659

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -36.17330

B= 0.6584120

C= -3.9426389E-04

D= 9.2991002E-08

CP A 25°C

CP0= 127.5494

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 87.25456

B= 0.3262535

C= -8.7949411E-05

D= -5109236.

CP A 25°C

CP0= 119.2329

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

3 G1

9 G2

3 G3

6 G19

4 G20

8 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

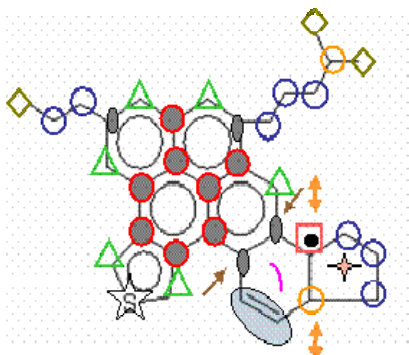
2 G31b1

1 G31b2

1 G34c
1 GR20

Codigo: 743 C34H35S

Radical I43



G1: 3
G2: 8
G3: 2
G19: 6
G20: 4
G21: 8 ●
G24a: 1 ✦
G25b: 1
G7: 1 ●

G29b2: 1 †
G30b2: 1 †
G31b1: 2
G31b2: 1
G31a1: 1
G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C34H35S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
66.98999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
243.5976

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.72880
B= 0.6335480
C= -3.7772130E-04
D= 8.7884004E-08
CP A 25°C
CP0= 124.9158

CP(QB THERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

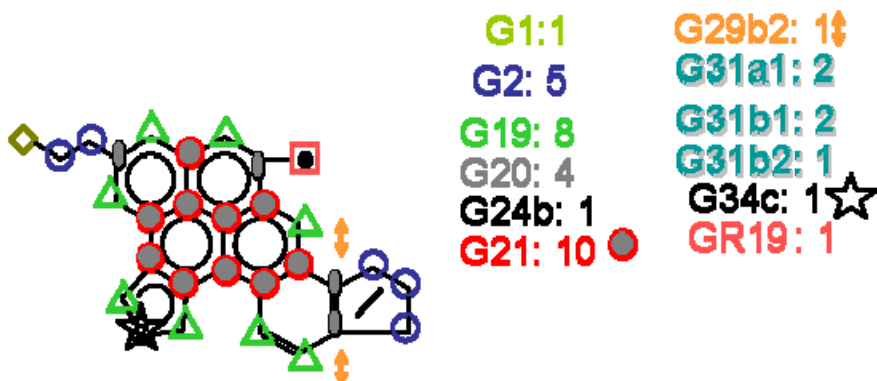
A= 83.91096
B= 0.3196483
C= -8.8236826E-05
D= -4828046.
CP A 25°C
CP0= 117.0577

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

3 G1
8 G2
2 G3
1 G7
6 G19
4 G20
8 G21
1 G24a
1 G25b

1 G29b2
1 G30b2
1 G31a1
2 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GR21

Codigo:744 C29H23S Radical I44



COMPUESTO=C29H23S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
95.63000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
239.2637

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.18830
B= 0.4715560
C= -2.7625237E-04
D= 6.4360997E-08
CP A 25°C
CP0= 101.5549

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 69.24596
B= 0.2416493
C= -6.4240019E-05
D= -3536669.
CP A 25°C
CP0= 95.79768

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1
5 G2
8 G19
4 G20
10 G21

1 G24b
1 G29b2
2 G31a1
2 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GR19

Codigo: 745 C5H11 Radical I45



G1:1
G2: 1
G3: 1
GR1: 1

COMPUESTO=C5H11

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
9.090000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
99.43512

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -1.412200
B= 9.8620996E-02
C= -5.7171874E-05
D= 1.2881000E-08
CP A 25°C
CP0= 23.25084

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 15.68129
B= 5.2617010E-02
C= -1.4744248E-05
D= -707487.1
CP A 25°C
CP0= 22.09956

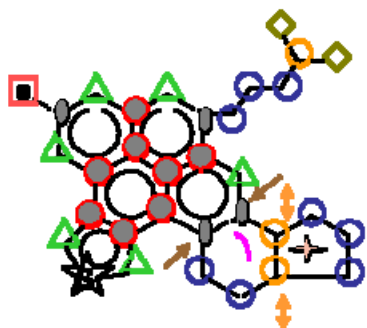
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
1 G2
1 G3
1 GR1

Codigo: 746

C32H33S

Radical I46



G1:2
G2: 8
G3: 3
G19: 6
G20: 4
G21: 8 ●
G24a: 1 ✦
G25b: 1
G29b2: 1 †
G30b2: 1 †
G31b1: 2
G31b2: 1
G31a1: 1
G34c: 1 ☆
GR19: 1

COMPUESTO=C32H33S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
55.49000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
259.3730

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.58010

B= 0.6155270

C= -3.7377235E-04

D= 8.9260006E-08

CP A 25°C

CP0= 118.0791

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 83.88908

B= 0.2967058

C= -7.9752048E-05

D= -4903766.

CP A 25°C

CP0= 110.0979

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1

8 G2

3 G3

6 G19

4 G20

8 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

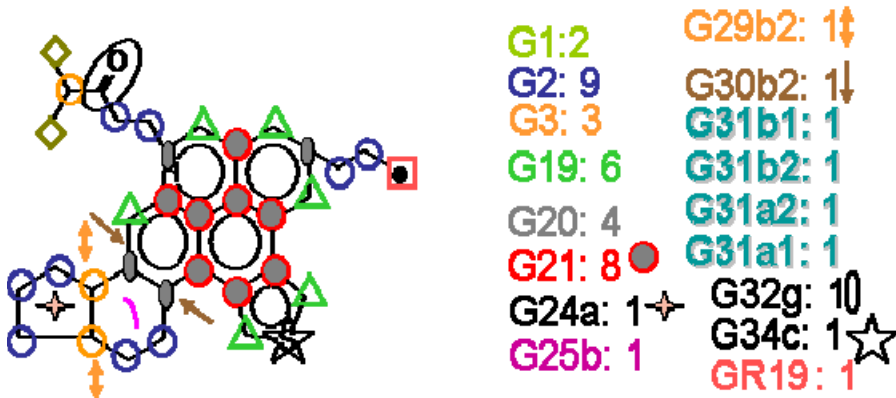
1 G31a1

2 G31b1

1 G31b2

1 G34c
1 GR19

Codigo: 747 C34H35OS Radical I47



COMPUESTO=C34H35OS

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
30.47000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
255.7690

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.70610
B= 0.6576080
C= -4.0210181E-04
D= 9.6350000E-08
CP A 25°C
CP0= 130.1691

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

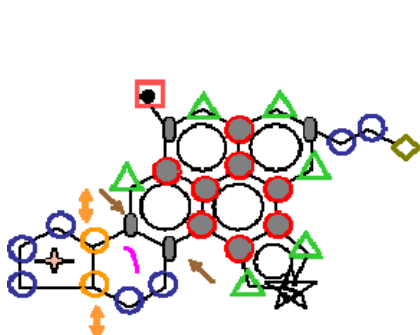
A= 95.17184
B= 0.3134661
C= -8.4729247E-05
D= -5293258.
CP A 25°C
CP0= 121.5538

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
9 G2
3 G3
6 G19
4 G20
8 G21
1 G24a

1 G25b
 1 G29b2
 1 G30b2
 1 G31a1
 1 G31a2
 1 G31b1
 1 G31b2
 1 G32g
 1 G34c
 1 GR1

Codigo: 748 C29H28S Radical I48



G1: 1	G29b2: 1↓
G2: 7	G30b2: 1↓
G3: 2	G31b1: 1
G19: 6	G31b2: 1
G20: 4	G31a2: 1
G21: 8 ●	G31a1: 1
G24a: 1 ✦	G34c: 1 ☆
G25b: 1	GR19: 1

COMPUESTO=C29H27S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 70.54999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 238.6554

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.06010
 B= 0.5385730
 C= -3.2512235E-04
 D= 7.7514002E-08
 CP A 25°C
 CP0= 101.6686

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

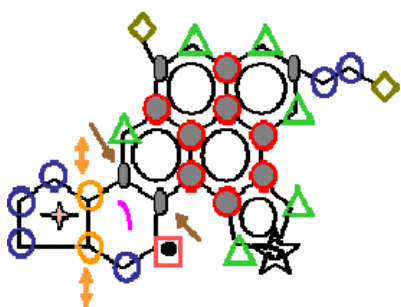
A= 70.79748
 B= 0.2617442
 C= -6.9809423E-05
 D= -4257014.
 CP A 25°C
 CP0= 94.74194

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1

7 G2
 2 G3
 6 G19
 4 G20
 8 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30b2
 1 G31a1
 1 G31a2
 1 G31b1
 1 G31b2
 1 G34c
 1 GR19

Codigo: 749 C29H27S Radical I49



G1: 2	G29b2: 1↑
G2: 6	G30b2: 1↓
G3: 2	G31b1: 1
G19: 6	G31b2: 1
G20: 4	G31a2: 1
G21: 8 ●	G31a1: 1
G24a: 1 +	G34c: 1 ☆
G25b: 1	GR20: 1

COMPUESTO=C29H27S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 66.94000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 221.7912

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.44230
 B= 0.5387320
 C= -3.2167390E-04
 D= 7.6052999E-08
 CP A 25°C
 CP0= 99.60162

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

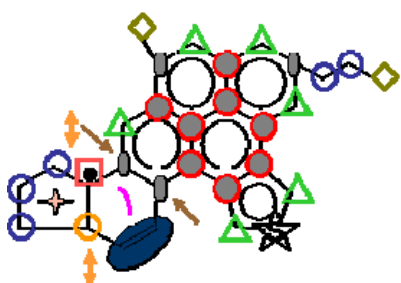
A= 66.49184
 B= 0.2670947
 C= -7.1161870E-05
 D= -4177798.
 CP A 25°C

CP0= 92.80247

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
6 G2
2 G3
6 G19
4 G20
8 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
1 G31a1
1 G31a2
1 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GR20

Codigo: 750 C29H25S Radical I50



G1: 2
G2: 5
G3: 1
G19: 6
G20: 4
G21: 8 ●
G24a: 1 ★
G25b: 1
G7: 1 ●
G29b2: 1 †
G30b2: 1 †
G31a1: 1
G31a2: 1
G31b1: 1
G31b2: 1
G34c: 1 ★
GR21: 1

COMPUESTO=C29H25S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
91.92999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
204.6229

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -30.99780

B= 0.5138680

C= -3.0513131E-04

D= 7.0946001E-08

CP A 25°C

CP0= 96.96809

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

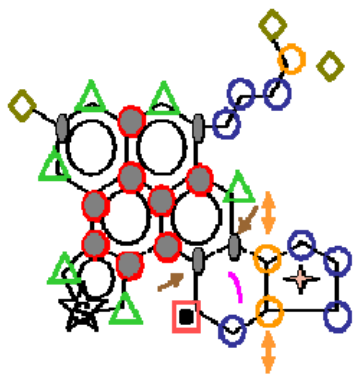
A= 63.18218

B= 0.2604307
 C= -7.1423790E-05
 D= -3898826.
 CP A 25°C
 CP0= 90.62093

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

- 2 G1
- 5 G2
- 1 G3
- 1 G7
- 6 G19
- 4 G20
- 8 G21
- 1 G24a
- 1 G25b
- 1 G29b2
- 1 G30b2
- 1 G31a1
- 1 G31a2
- 1 G31b1
- 1 G31b2
- 1 G34c
- 1 GR21

Codigo: 751 C32H33S Radical I51



G1: 3	G29b2: 1↓
G2: 7	G30b2: 1↓
G3: 3	G31a1: 1
G19: 6	G31a2: 1
G20: 4	G31b1: 1
G21: 8 ●	G31b2: 1
G24a: 1 ⚡	G34c: 1 ☆
G25b: 1	GR20: 1

COMPUESTO=C32H33S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 50.46000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 245.1920

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -36.96230
 B= 0.6156860
 C= -3.7032389E-04

D= 8.7799002E-08
CP A 25°C
CP0= 116.0121

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 79.54659
B= 0.3021197
C= -8.1131839E-05
D= -4822088.
CP A 25°C
CP0= 108.1658

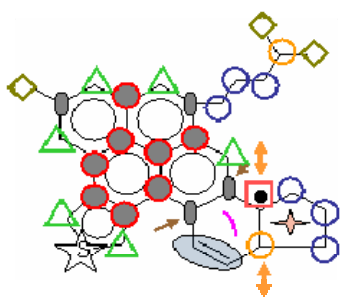
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

3 G1
7 G2
3 G3
6 G19
4 G20
8 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
1 G31a1
1 G31a2
1 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GR20

Codigo: 752

C32H31S

Radical I52



G1: 3
G2: 6
G3: 2
G19: 6
G20: 4
G21: 8 ●
G24a: 1 ✦
G25b: 1
G7: 1 ●

G29b2: 1 ↓
G30b2: 1 ↓
G31a1: 1
G31a2: 1
G31b1: 1
G31b2: 1
G34c: 1 ☆
GR20: 1

COMPUESTO=C32H31S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
75.45000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
228.0237

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.51780
B= 0.5908220
C= -3.5378130E-04
D= 8.2692004E-08
CP A 25°C
CP0= 113.3786

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 76.24640
B= 0.2954396
C= -8.1386897E-05
D= -4543761.
CP A 25°C
CP0= 105.9822

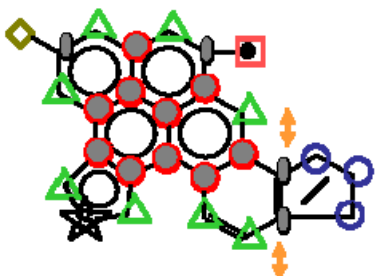
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

3 G1
6 G2
2 G3
1 G7
6 G19
4 G20
8 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
1 G31a1
1 G31a2
1 G31b1
1 G31b2
1 G34c
1 GR21

Codigo: 753

C27H19S

Radical I53



G1: 1
G2: 3
G19: 8
G20: 4
G21: 9 ●
G24b: 1
G29b2: 1 †
G31a1: 2
G31a2: 1
G31b1: 1
G31b2: 1
G34c: 1 ☆
GR19: 1

COMPUESTO=C27H19S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
104.0900

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
223.6897

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -16.97730

B= 0.4288300

C= -2.5231237E-04

D= 5.9169000E-08

CP A 25°C

CP0= 90.01765

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 61.55890

B= 0.2174809

C= -5.7408019E-05

D= -3250990.

CP A 25°C

CP0= 84.72585

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1

3 G2

8 G19

4 G20

10 G21

1 G24b

1 G29b2

2 G31a1

1 G31a2

1 G31b1

1 G31b2

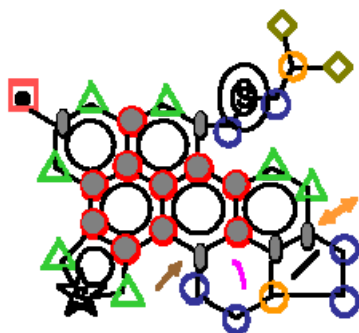
1 G34c

1 GR19

Codigo: 754

C33H29S

Radical I54



G1: 2
G2: 6
G3: 2
G19: 7
G20: 5
G21: 10 ●
G24b: 1
G25b: 1
G34b: 1 ⊙
G29a: 1 †
G29b2: 2 †
G30b2: 1 †
G31a1: 1
G31a2: 1
G31b1: 1
G31b2: 1
G34c: 1 ☆
GR19: 1

COMPUESTO=C33H29S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
77.58000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
268.9448

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.04390

B= 0.5864980

C= -3.5108236E-04

D= 8.4386997E-08

CP A 25°C

CP0= 116.8481

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 82.93999

B= 0.2851131

C= -7.3127085E-05

D= -4634896.

CP A 25°C

CP0= 109.3060

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1

6 G2

2 G3

7 G19

5 G20

10 G21

1 G24b

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

1 G31a1

1 G31a2

1 G31b1

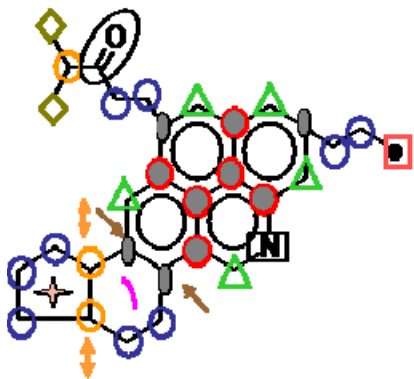
1 G31b2

1 G34c

1 GR19

Codigo: 755 C31H34NO

Radical I55



G1: 2	G29b2: 1↕
G2: 9	G30b2: 1↓
G3: 3	G31b1: 1
G19: 5	G31b2: 1
G20: 4	G31a2: 1
G21: 6 ●	G32g: 10
G24a: 1 ↗	G33j: 1 □
G25b: 1	GR1: 1

COMPUESTO=C31H34NO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
9.499998

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
181.2145

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.12930
B= 0.6178580
C= -3.7827186E-04
D= 9.2483006E-08
CP A 25°C
CP0= 119.9103

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 89.63093
B= 0.2875027
C= -7.3625866E-05
D= -5081761.
CP A 25°C
CP0= 111.6381

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

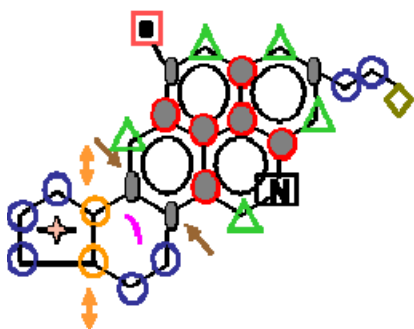
2 G1
9 G2
3 G3
5 G19
4 G20
6 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
1 G31a2
1 G31b1
1 G31b2
1 G32g

1 G33j
1 GR1

Codigo: 756

C26H26N

Radical I56



G1: 1
G2: 7
G3: 2
G19: 5
G20: 4
G21: 6
G24a: 1
G25b: 1
G29b2: 1
G30b2: 1
G31b1: 1
G31b2: 1
G31a2: 1
G33j: 1
GR19: 1

COMPUESTO=C26H26N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
49.57999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
164.1010

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -32.48330
B= 0.4988230
C= -3.0129237E-04
D= 7.3647001E-08
CP A 25°C
CP0= 91.40978

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

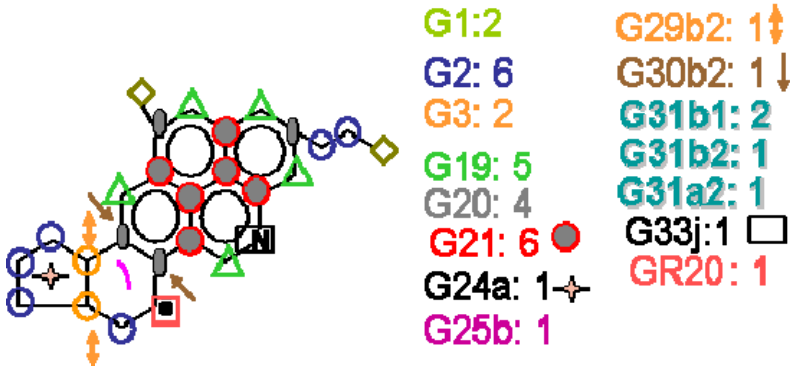
A= 65.24886
B= 0.2357946
C= -5.8712209E-05
D= -4045044.
CP A 25°C
CP0= 84.82748

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1
7 G2
2 G3

5 G19
 4 G20
 6 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30b2
 1 G31a2
 1 G31b1
 1 G31b2
 1 G33j
 1 GR19

Codigo: 757 C26H26N Radical I57



COMPUESTO=C26H26N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 45.97000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 147.2367

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -34.86550
 B= 0.4989820
 C= -2.9784392E-04
 D= 7.2186005E-08
 CP A 25°C
 CP0= 89.34282

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

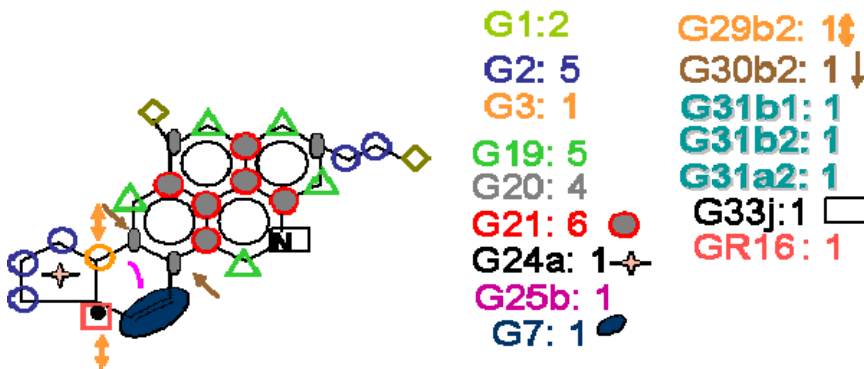
A= 60.91642
 B= 0.2411898
 C= -6.0083410E-05
 D= -3963938.
 CP A 25°C
 CP0= 82.89410

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
 6 G2

2 G3
 5 G19
 4 G20
 6 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30b2
 1 G31a2
 1 G31b1
 1 G31b2
 1 G33j
 1 GR20

Codigo: 758 C26H24N Radical I58



COMPUESTO=C26H24N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 70.25999

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 130.5284

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -31.85590
 B= 0.4740960
 C= -2.8130083E-04
 D= 6.7079007E-08
 CP A 25°C
 CP0= 86.26787

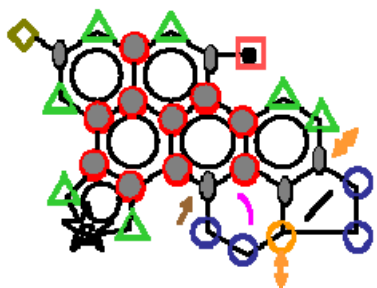
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 57.20039
 B= 0.2344563
 C= -6.0324881E-05
 D= -3686976.
 CP A 25°C
 CP0= 80.26469

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
 5 G2
 1 G3
 1 G7
 5 G19
 4 G20
 6 G21
 1 G24a
 1 G25b
 1 G29b2
 1 G30b2
 1 G31a2
 1 G31b1
 1 G31b2
 1 G33j
 1 GR16

Codigo: 759 C29H21S Radical I59



G1: 1
 G2: 4
 G3: 1
 G19: 7
 G20: 5
 G21: 10 ●
 G24b: 1
 G25b: 1

G29a: 1 †
 G29b2: 1 †
 G30b2: 1 †
 G31a1: 3
 G31a2: 1
 G31b2: 1
 G34c: 1 ☆
 GR19: 1

COMPUESTO=C29H21S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 99.08000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 239.7359

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -26.91840
 B= 0.4881810
 C= -2.9046237E-04
 D= 7.0044997E-08
 CP A 25°C
 CP0= 94.66901

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 66.06692
 B= 0.2379612
 C= -5.9722839E-05
 D= -3849488.
 CP A 25°C

CP0= 88.40155

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1
4 G2
1 G3
7 G19
5 G20
10 G21
1 G24b
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
3 G31a1
1 G31a2
1 G31b2
1 G34c
1 GR19

Codigo: 760 C4H9S

Radical I60



G1: 2
G2: 1
G3: 1
GR11: 1

COMPUESTO=C4H9S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
5.670002

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
82.75513

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= 0.3286000
B= 9.8649994E-02
C= -5.7171372E-05
D= 1.2881000E-08
CP A 25°C
CP0= 25.00033

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 17.42817
B= 5.2635290E-02
C= -1.4739042E-05
D= -707879.4
CP A 25°C
CP0= 23.84794

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
1 G2

1 G3
1 GR11

Codigo: 761 C29H21S Radical I61



G1: 2
G2: 3
G3: 1
G19: 7
G20: 5
G21: 9 ●
G24b: 1
G25b: 1

G29a: 1 †
G29b2: 1 †
G30b2: 1 †
G31a1: 3
G31a2: 2
G34c: 1 ☆
GR20: 1

COMPUESTO=C29H21S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
95.41000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
227.3996

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -29.30060
B= 0.4883400
C= -2.8701391E-04
D= 6.8584001E-08
CP A 25°C
CP0= 92.60204

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

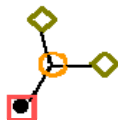
A= 61.69965
B= 0.2434164
C= -6.1119965E-05
D= -3766075.
CP A 25°C
CP0= 86.47488

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
3 G2
1 G3
7 G19
5 G20
10 G21
1 G24b
1 G25b
1 G29a
1 G29b2
1 G30b2
3 G31a1

2 G31a2
1 G34c
1 GR20

Codigo: 762 C4H9 Radical I62



G1:2
G3: 1

COMPUESTO=C4H9

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
14.03000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
90.30658

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -1.806700
B= 7.7257998E-02
C= -4.5201876E-05
D= 1.0285000E-08
CP A 25°C
CP0= 17.48221

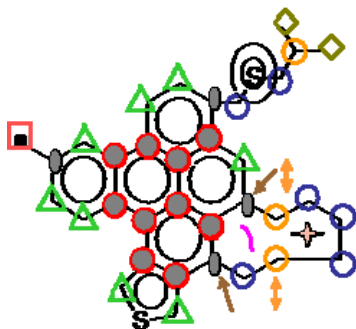
CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 11.83858
B= 4.0530827E-02
C= -1.1327191E-05
D= -564673.4
CP A 25°C
CP0= 16.56368

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
1 G3
1 GR1

Codigo: 763 C34H31S2 Radical I63



G1: 2	G29b2: 1↓
G2: 6	G30b2: 1↓
G3: 3	G30a: 1
G19: 8	G31a2: 1
G20: 4	G31a1: 4
G21: 10●	G34c: 1★
G24a: 1✦	G34b: 1◎
G25b: 1	GR19: 1

COMPUESTO=C34H31S2

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
91.20000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
311.7143

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -33.81410
B= 0.6365620
C= -3.9185240E-04
D= 9.4209994E-08
CP A 25°C
CP0= 123.6407

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 91.16952
B= 0.3001554
C= -8.1567930E-05
D= -5172026.
CP A 25°C
CP0= 115.2277

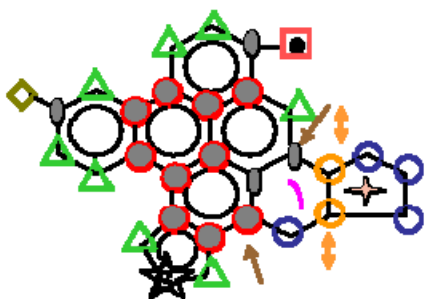
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
6 G2
3 G3
8 G19
4 G20
10 G21
1 G24a
1 G25b
1 G29b2
1 G30a
1 G30b2
4 G31a1
1 G31a2
1 G34b
1 G34c
1 GR19

Codigo: 764

C30H23S

Radical I64



G1:1

G2: 4

G3: 2

G19: 8

G20: 4

G21: 10 ●

G24a: 1 ✦

G25b: 1

G29b2: 1 ↓↑

G30b2: 1 ↓

G31a1: 2

G31a2: 2

G31b1: 1

G34c: 1 ☆

COMPUESTO=C30H23S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
101.7500

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
236.5480

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -35.91420

B= 0.5371180

C= -3.3097234E-04

D= 7.9939994E-08

CP A 25°C

CP0= 96.92496

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 70.15421

B= 0.2516387

C= -6.7674337E-05

D= -4389644.

CP A 25°C

CP0= 89.78352

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1

4 G2

2 G3

8 G19

4 G20

10 G21

1 G24a

1 G25b

1 G29b2

1 G30b2

2 G31a1

2 G31a2

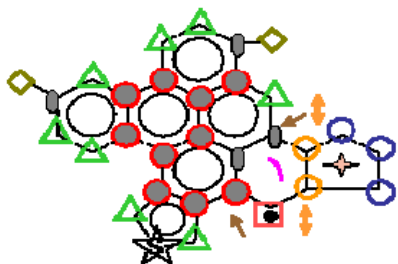
1 G31b1

1 G34c
1 GR19

Codigo: 765

C30H23S

Radical I65



G1: 2
G2: 3
G3: 2
G19: 8
G20: 4
G21: 10 ●
G24a: 1 ✦
G25b: 1

G29b2: 1 ↓
G30a: 1
G30b2: 1 ↓
G31a1: 2
G31a2: 2
G31b1: 1
G34c: 1 ☆
GR20: 1

COMPUESTO=C30H23S

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
98.14000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
222.8029

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -38.29640
B= 0.5372770
C= -3.2752389E-04
D= 7.8478998E-08
CP A 25°C
CP0= 94.85799

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 65.85968
B= 0.2569711
C= -6.9019312E-05
D= -4311224.
CP A 25°C
CP0= 87.84145

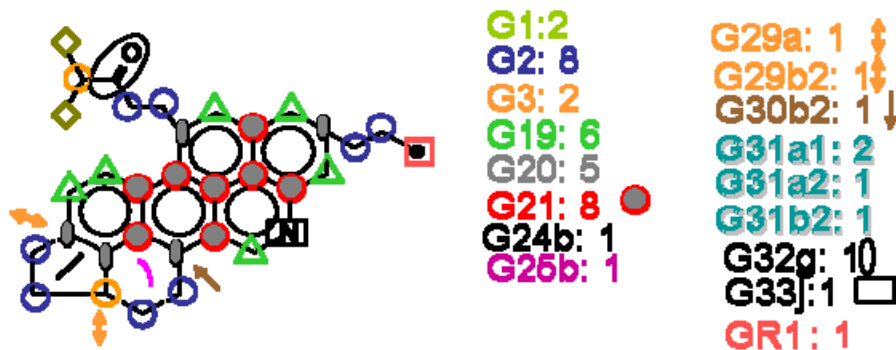
ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
3 G2
2 G3
8 G19
4 G20
10 G21
1 G24a
1 G25b

1 G29b2
 1 G30a
 1 G30b2
 2 G31a1
 2 G31a2
 1 G31b1
 1 G34c
 1 GR20

Codigo: 766 C33H32NO

Radical I66



COMPUESTO=C33H32NO

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 28.15000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 200.5522

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -27.19860
 B= 0.6101920
 C= -3.6755184E-04
 D= 9.0206008E-08
 CP A 25°C
 CP0= 124.4480

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

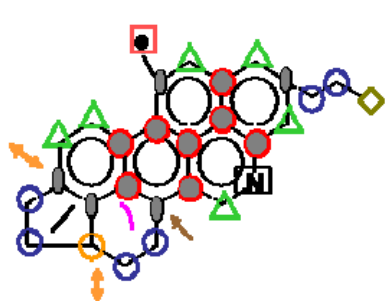
A= 92.54559
 B= 0.2879594
 C= -7.0401802E-05
 D= -4957088.
 CP A 25°C
 CP0= 116.3780

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
 8 G2
 2 G3
 6 G19
 5 G20
 8 G21

1 G24b
 1 G25b
 1 G29a
 1 G29b2
 1 G30b2
 2 G31a1
 1 G31a2
 1 G31b2
 1 G32g
 1 G33j
 1 GR1

Codigo: 767 C28H24N Radical I67



G1: 1	G29a: 1 ↓
G2: 6	G29b2: 1 ↓
G3: 1	G30b2: 1 ↓
G19: 6	G31a1: 2
G20: 5	G31a2: 1
G21: 8 ●	G31b2: 1
G24b: 1	G33j: 1 ⊐
G25b: 1	GR19: 1

COMPUESTO=C28H24N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 68.23000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 183.4386

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL

A= -26.55260
 B= 0.4911570
 C= -2.9057238E-04
 D= 7.1370003E-08
 CP A 25°C
 CP0= 95.94745

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

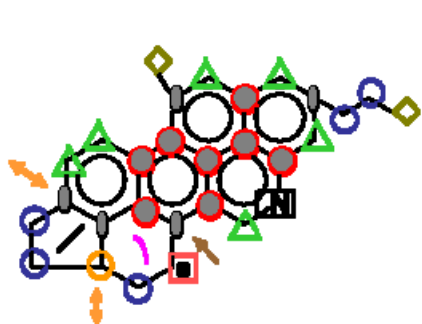
A= 68.16951
 B= 0.2362407
 C= -5.5483444E-05
 D= -3920745.
 CP A 25°C
 CP0= 89.56641

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

1 G1
 6 G2
 1 G3

6 G19
 5 G20
 8 G21
 1 G24b
 1 G25b
 1 G29a
 1 G29b2
 1 G30b2
 2 G31a1
 1 G31a2
 1 G31b2
 1 G33j
 1 GR19

Codigo: 768 C28H24N Radical I68



G1: 2
 G2: 5
 G3: 1
 G19: 6
 G20: 5
 G21: 8 ●
 G24b: 1
 G25b: 1

G29a: 1 †
 G29b2: 1 †
 G30b2: 1 ↓
 G31a1: 2
 G31a2: 1
 G31b2: 1
 G33j: 1 □

COMPUESTO=C28H24N

ENTALPIA DE FORMACION ESTANDAR (KCAL/MOL)=
 64.62000

ENTROPIA DE FORMACION ESTANDAR (CAL/K.MOL)=
 163.0862

CP(PERRY)=A+B*T+C*(T**2)+D*(T**3) EN CAL/K.MOL
 A= -28.93480
 B= 0.4913160

C= -2.8712393E-04
D= 6.9909007E-08
CP A 25°C
CP0= 93.88048

CP(QBTHERM)=A+B*T+C*(T**2)+D*(1/T**2) EN CAL/K.MOL

A= 63.89523
B= 0.2415379
C= -5.6813133E-05
D= -3843656.
CP A 25°C
CP0= 87.62053

ESTRUCTURA DEL COMPUESTO TIPO Rihani-Doraiswamy y Benson

2 G1
5 G2
1 G3
6 G19
5 G20
8 G21
1 G24b
1 G25b
1 G29b2
1 G30b2
2 G31a1
1 G31a2
1 G31b2
1 G33j
1 GR20