



---

---

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERIA QUÍMICA E

INDUSTRIAS EXTRACTIVAS

*Densidades de Sistemas Binarios Constituidos*

*por 2,5-Dimetilfurano y Alcanos*

TESIS

PARA OBTENER EL TITULO DE

INGENIERO QUÍMICO PETROLERO

PRESENTA

**JAIRO JAVIER MESSNER JIMÉNEZ**



ASESOR:

**DR. ABEL ZUÑIGA MORENO**

Mayo 2015

México, D.F.



SECRETARIA  
DE  
EDUCACION PUBLICA

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL  
ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERÍA QUÍMICA E INDUSTRIAS EXTRACTIVAS  
DEPARTAMENTO DE EVALUACIÓN Y SEGUIMIENTO ACADÉMICO



T-112-14

México, D. F., 18 de septiembre del 2014.

Al C. Pasante:  
JAIRO JAVIER MESSNER JIMÉNEZ

Boleta:  
2010320736

Carrera:  
IQP

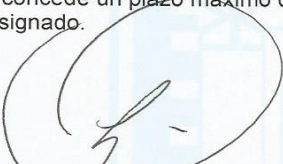
Generación:  
2009-2013

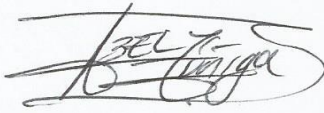
Mediante el presente se hace de su conocimiento que este Departamento acepta que el C. **Dr. Abel Zúñiga Moreno**, sea orientador en el tema que propone usted desarrollar como prueba escrita en la opción **Tesis Individual**, con el título y contenido siguiente:


***"Densidades de sistemas binarios constituidos por 2,5-dimetilfurano y alcanos"***.

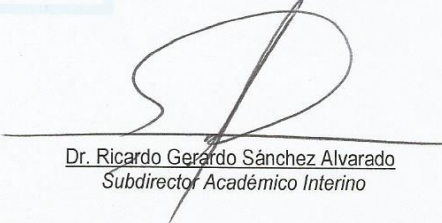
Resumen.  
Introducción.  
I.- Antecedentes.  
II.- Metodología experimental.  
III.- Resultados y discusión.  
Conclusiones y recomendaciones.  
Bibliografía.

Se concede un plazo máximo de un año, a partir de esta fecha, para presentarlo a revisión por el Jurado asignado.

  
Ing. Antonio Salvador Pérez Cárdenas  
Presidente de la Academia de  
Fisicoquímica.

  
Dr. Abel Zúñiga Moreno  
Director de Tesis  
Ced. Prof. 5175480

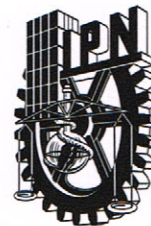
  
Lic. Guillermo Alberto de la Torre Arteaga  
Jefe del Departamento de Evaluación y  
Seguimiento Académico

  
Dr. Ricardo Gerardo Sánchez Alvarado  
Subdirector Académico Interino



SECRETARÍA  
DE  
EDUCACIÓN PÚBLICA

**INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL**  
ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERÍA QUÍMICA E INDUSTRIAS EXTRACTIVAS  
**DEPARTAMENTO DE EVALUACIÓN Y SEGUIMIENTO ACADÉMICO**



T-112-14

México, D. F., 12 de marzo del 2015.

Al C. Pasante:  
**JAIRO JAVIER MESSNER JIMÉNEZ**  
**PRESENTE**

Boleta:  
2010320736

Carrera:  
IQP

Generación:  
2009-2013

Los suscritos tenemos el agrado de informar a usted, que habiendo procedido a revisar el borrador de la modalidad de titulación correspondiente denominado:

**"Densidades de sistemas binarios constituidos por 2,5-dimetilfurano y alcanos "**

encontramos que el citado Trabajo de **Tesis Individual**, reúne los requisitos para autorizar el Examen Profesional y **PROCEDER A SU IMPRESIÓN** según el caso, debiendo tomar en consideración las indicaciones y correcciones que al respecto se le hicieron.

Atentamente

**JURADO**

Ing. Antonio Salvador Pérez Cárdenas  
**Presidente**

Dr. Abel Zúñiga Moreno  
**Secretario**

Dr. Octavio Elizalde Solís  
**1er. Vocal**

Dra. María Elena Manríquez Ramírez  
**2º Vocal**

Dr. Luis Enrique Camacho Camacho  
**3er. Vocal**

c.c.p.- Expediente  
GATA/rcr

# **RECONOCIMIENTOS**

A mi alma mater

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

A mi casa de estudios

ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERÍA QUÍMICA E INDUSTRIAS  
EXTRACTIVAS

A mis cátedras

TODO EL PERSONAL DOCENTE DEL INSTITUTO

Por cada uno de los apoyos brindados para mi formación académica y permitir realizar una de mis metas en la vida, el ser ingeniero.

## AGRADECIMIENTOS

**A mí madre:** Porque sin ella este sueño no se hubiera hecho realidad, a su papel de padre y madre a la vez, a sus veladas durante estos 5 años de estudio y a cada una de sus palabras de aliento en todo momento.

**A Cynthia G. Pérez Collado:** Por haber formado parte de mi vida y acompañarme en los momentos más difíciles de lo que ha sido este tiempo, a cada uno de sus consejos que me permitieron continuar y culminar con este sueño.

**A Fam. Jiménez:** Por el apoyo brindado por cada uno de ustedes en todo momento, por esas palabras de fuerza y motivaciones de seguir adelante.

**A mis tíos:** Por sus sabios consejos, por formar parte de mi formación, y por todos aquellos apoyos que me brindaron desde mi niñez hasta esta nueva etapa de vida que hoy comienzo.

**A mis padrinos:** Por ser como unos padres, por nunca dejarme sin luz. Por todo el cariño que me han brindado y por cada uno de los apoyos que he recibido.



**A mis Amigos:** Erick Jonathan, Wilbert, Claudia, Cynthia, Alíver, Josué, Edgar, Isaac, Alberto, Jarocho y Heríberto. Por cada uno de los momentos que compartieron conmigo a lo largo y ancho de la carrera, gracias por cada una de las risas y carcajadas que me dieron y por sus fieles y buenos deseos.

**Al Dr. Octavio Elízalde Solís:** Por ser mi maestro, por ayudar a formar parte de mi formación académica, por sus conocimientos transmitidos y por confiar en mí y brindarme el apoyo para la realización de esta tesis.

**Al Dr. Abel Zúñiga Moreno:** Por su incondicional apoyo para la realización de este trabajo, por el tiempo dedicado dentro y fuera de las instalaciones, por confiar en mí en contribuir a la investigación del IPN.

**AL INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL:** Por darme la oportunidad de formar parte de la comunidad y permitir realizar uno de mis sueños, el concluir una carrera profesional, a cada uno de los profesores que forman parte de esta magna casa de estudios.

**"Si queréis igualar a muchos, procura superar a todos en pureza de conducta y buenas formas"**

**- Lord Chesterfield-**

## ÍNDICE

RECONOCIMIENTOS	
AGRADECIMIENTOS	
LISTA DE FIGURAS	iii
LISTA DE TABLAS	vii
NOMENCLATURA	ix
RESUMEN	x
OBJETIVOS	xi
INTRODUCCIÓN	1
<b>CAPÍTULO I. ANTECEDENTES</b>	<b>4</b>
1.1 HIDROCARBUROS	5
1.1.1 Alcanos	6
1.1.2 Alquenos	7
1.1.3 Alquinos	7
1.1.4 Propiedades físicas y químicas de los alcanos	8
1.1.5 Usos de los alcanos	11
1.2 CARACTERÍSTICAS DE LAS SUBSTANCIAS BAJO ESTUDIO	12
1.2.1 Octano	12
1.2.2 Nonano	12
1.2.3 Decano	13
1.2.4 Dodecano	13
1.2.5 2,5-Dimetilfurano	13
1.2.5.1 <i>Importancia del DMF</i>	14
1.2.5.2 <i>Producción</i>	15
1.3 PRINCIPIOS DE MEDICIÓN	16
1.3.1 Métodos directos	16
1.3.1.1 <i>Pistón líquido</i>	16
1.3.1.2 <i>Pistón sólido</i>	17
1.3.1.3 <i>Pistón de fuelle</i>	17

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 1.1.</b>	Clasificación de los hidrocarburos	5
<b>Figura 1.2.</b>	Comportamiento de los puntos de ebullición de los alcanos conforme aumenta el número de átomos de carbono	9
<b>Figura 1.3.</b>	Comportamiento de los puntos de fusión de los alcanos conforme aumenta el número de átomos de carbono	10
<b>Figura 1.4.</b>	Comportamiento de las densidades de los alcanos conforme aumenta el número de átomos de carbono	10
<b>Figura 1.5.</b>	Estructura química del 2,5-dimetilfurano	14
<b>Figura 2.1.</b>	Vista frontal del DTV DMA 4500M de Anton Paar	21
<b>Figura 2.2.</b>	Foto de la celda de borosilicato	22
<b>Figura 2.3.</b>	Vista frontal de la balanza Metler Toledo.	24
<b>Figura 3.1.</b>	Densidades de los compuestos puros como función de la temperatura: octano, ●; nonano, ○; decano, ▼; dodecano, △; 2,5-DMF, ■. La línea representa la correlación de densidades como función de $T$ .	29
<b>Figura 3.2.</b>	Densidades del 2,5-DMF como función de la temperatura: este trabajo, ○; Mejía et al [15], ▽. La línea representa la correlación de densidades como función de $T$ .	29
<b>Figura 3.3.</b>	Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + octano (2) en función de la temperatura a las siguientes composiciones molares ( $x_1$ ): 0.0000, ●; 0.1009, ○; 0.2021, ▼; 0.2970, △; 0.4014, ■; 0.5022, □; 0.5980, ◆; 0.6975, ◇; 0.7996, ▲; 0.8886, ▽; 1.0000, ×.	32
<b>Figura 3.4.</b>	Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + octano (2) en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■.	32



- Figura 3.5.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2) en función de la temperatura a las siguientes composiciones molares ( $x_1$ ): 0.0000, ●; 0.1072, ○; 0.1971, ▼; 0.3024, △; 0.4001, ■; 0.4955, □; 0.5947, ◆; 0.6984, ◇; 0.7973, ▲; 0.8974, ▽; 1.0000, ×. 34
- Figura 3.6.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2) en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■. 34
- Figura 3.7.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + decano (2) en función de la temperatura a las siguientes composiciones molares ( $x_1$ ): 0.0000, ●; 0.1091, ○; 0.1836, ▼; 0.3000, △; 0.4075, ■; 0.5180, □; 0.5901, ◆; 0.7067, ◇; 0.8098, ▲; 0.9046, ▽; 1.0000, ×. 37
- Figura 3.8.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + decano (2) en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■; 318.15 K, □; 323.15 K, ◆; 328.15 K, ◇; y a 333.15 K, ▲. 37
- Figura 3.9.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2) en función de la temperatura a las siguientes composiciones molares ( $x_1$ ): 0.0000, ●; 0.1117, ○; 0.2059, ▼; 0.3007, △; 0.4306, ■; 0.4992, □; 0.5978, ◆; 0.7100, ◇; 0.8065, ▲; 0.8937, ▽; 1.0000, ×. 38
- Figura 3.10.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2) en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■; 318.15 K, □; 323.15 K, ◆; 328.15 K, ◇; y a 333.15 K, ▲. 38
- Figura 3.11** Comportamiento de las densidades de los sistemas 2,5-DMF (1) + alcano (2) en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ )

a 293.15 K, para los sistemas 2,5-DMF (1) +: octano, ●; nonano, ○; decano, ▼; dodecano, △. 39

**Figura 3.12.** Volúmenes molares en exceso en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 2,5-DMF (1) + octano (2), a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■. Las líneas que se muestran fueron calculadas con la ecuación de Redlich-Kister. 44

**Figura 3.13.** Volúmenes molares en exceso en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2), a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■. Las líneas que se muestran fueron calculadas con la ecuación de Redlich-Kister. 44

**Figura 3.14.** Volúmenes molares en exceso en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 2,5-DMF (1) + decano (2), a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■; 318.15 K, □; 323.15 K, ◆; 328.15 K, ◇; 333.15, ▲. Las líneas que se muestran fueron calculadas con la ecuación de Redlich-Kister. 45

**Figura 3.15.** Volúmenes molares en exceso en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2), a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■; 318.15 K, □; 323.15 K, ◆; 328.15 K, ◇; 333.15, ▲. Las líneas que se muestran fueron calculadas con la ecuación de Redlich-Kister. 45

**Figura 3.16.** Volúmenes molares en exceso en función de la fracción mol de DMF ( $x_1$ ) a 20 C para los diferentes sistemas estudiados en este trabajo:, a las siguientes temperaturas: 2,5-DMF (1) + octano (2), ○; DMF (1) + nonano (2), ▼; 2,5-DMF (1) + decano (2), □; 2,5-DMF (1) + dodecano (2), ◇. Las líneas

que se muestran fueron calculadas con la ecuación de Redlich-Kister. 47

**Figura 3.17** Volúmenes molares parciales en función de la fracción mol de 25-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 25-DMF (1) + octano (2): (a) volumen molar parcial del 25-DMF,  $\bar{V}_1$ ; (b) volumen molar parcial del octano,  $\bar{V}_2$ , a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■. 56

**Figura 3.18** Volúmenes molares parciales en función de la fracción mol de 25-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 25-DMF (1) + nonano (2): (a) volumen molar parcial del 25-DMF,  $\bar{V}_1$ ; (b) volumen molar parcial del nonano,  $\bar{V}_2$ , a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■. 56

**Figura 3.19** Volúmenes molares parciales en función de la fracción mol de 25-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 25-DMF (1) + decano (2): (a) volumen molar parcial del 25-DMF,  $\bar{V}_1$ ; (b) volumen molar parcial del decano,  $\bar{V}_2$ , a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■; 318.15 K, □; 323.15 K, ◆; 328.15 K, ◇; 333.15, ▲. 57

**Figura 3.19** Volúmenes molares parciales en función de la fracción mol de 25-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 25-DMF (1) + dodecano (2): (a) volumen molar parcial del 25-DMF,  $\bar{V}_1$ ; (b) volumen molar parcial del dodecano,  $\bar{V}_2$ , a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■; 318.15 K, □; 323.15 K, ◆; 328.15 K, ◇; 333.15, ▲. 57

## **LISTA DE TABLAS**

<b>Tabla 1.1.</b>	<i>Serie homóloga de los alcanos</i>	6
<b>Tabla 1.2.</b>	<i>Puntos de fusión y ebullición de alcanos</i>	7
<b>Tabla 2.1.</b>	<i>Propiedades de las sustancias utilizadas en la experimentación</i>	23
<b>Tabla 3.1.</b>	<i>Densidades experimentales y datos reportados en la literatura de los compuestos puros: 2,5-DMF, octano, nonano, decano y dodecano.</i>	30
<b>Tabla 3.2.</b>	<i>Densidades experimentales (<math>\rho</math>) del sistema binario 2,5-DMF (1) + octano (2).</i>	31
<b>Tabla 3.3.</b>	<i>Densidades experimentales (<math>\rho</math>) del sistema binario 2,5-DMF (1) + nonano (2).</i>	33
<b>Tabla 3.4.</b>	<i>Densidades experimentales (<math>\rho</math>) del sistema binario 2,5-DMF (1) + decano (2).</i>	36
<b>Tabla 3.5.</b>	<i>Densidades experimentales (<math>\rho</math>) del sistema binario 2,5-DMF (1) + dodecano (2).</i>	36
<b>Tabla 3.6.</b>	<i>Parámetros de la ecuación 3.1 para los sistemas: 2,5-DMF (1) + octano (2), + nonano (2), + decano (2), + dodecano (2), para los compuestos puros y las diferentes composiciones estudiadas de los sistemas binarios.</i>	40
<b>Tabla 3.7.</b>	<i>Volúmenes molares en exceso (<math>V^E</math>) de la mezcla binaria 2,5-DMF (1) + octano (2).</i>	42
<b>Tabla 3.8.</b>	<i>Volúmenes molares en exceso (<math>V^E</math>) de la mezcla binaria 2,5-DMF (1) + nonano (2).</i>	42
<b>Tabla 3.9.</b>	<i>Volúmenes molares en exceso (<math>V^E</math>) de la mezcla binaria 2,5-DMF (1) + decano (2).</i>	43
<b>Tabla 3.10.</b>	<i>Volúmenes molares en exceso (<math>V^E</math>) de la mezcla binaria 2,5-DMF (1) + dodecano (2).</i>	43

<b>Tabla 3.11.</b>	<i>Parámetros de la ecuación Redlich-Kister obtenidos para los sistemas: 2,5-DMF (1) + octano (2), + nonano (2), + decano (2), + dodecano (2), reportados a las diferentes temperaturas estudiadas de cada sistema.</i>	48
<b>Tabla 3.12.</b>	<i>Volúmenes molares parciales (<math>\bar{V}_1</math>) del sistema 2,5-DMF (1) + octano (2).</i>	52
<b>Tabla 3.13.</b>	<i>Volúmenes molares parciales (<math>\bar{V}_2</math>) del sistema 2,5-DMF (1) + octano (2).</i>	52
<b>Tabla 3.14.</b>	<i>Volúmenes molares parciales (<math>\bar{V}_1</math>) del sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2).</i>	53
<b>Tabla 3.15.</b>	<i>Volúmenes molares parciales (<math>\bar{V}_2</math>) del sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2).</i>	53
<b>Tabla 3.16.</b>	<i>Volúmenes molares parciales (<math>\bar{V}_1</math>) del sistema 2,5-DMF (1) + decano (2).</i>	54
<b>Tabla 3.17.</b>	<i>Volúmenes molares parciales (<math>\bar{V}_2</math>) del sistema 2,5-DMF (1) + decano (2).</i>	54
<b>Tabla 3.18.</b>	<i>Volúmenes molares parciales (<math>\bar{V}_1</math>) del sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2).</i>	55
<b>Tabla 3.19.</b>	<i>Volúmenes molares parciales (<math>\bar{V}_2</math>) del sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2).</i>	55

## NOMENCLATURA

$A_0, A_1, A_2$	Parámetros de la ecuación de Redlich–Kister
$B$	Parámetro característicos del tubo en U
$G$	Energía libre de Gibbs normal
$H$	Entalpía
$K$	Parámetro característicos del tubo en U
$k_0, k_1$	Parámetros de la correlación para la densidad
$M_1, M_2$	Masa molar del componente 1 y 2 respectivamente
$P$	Presión
$T$	Temperatura
$T_n$	Temperatura normal de ebullición
$v$	Volumen de líquido necesario para preparar disoluciones
$V$	Volumen molar
$V^E$	Volumen molar en exceso
$V^i$	Volumen molar ideal
$\bar{V}_1$	Volumen molar parcial del componente 1
$\bar{V}_2$	Volumen molar parcial del componente 2
$x$	Fracción mol del componente “1” en fase líquida

### *Letras Griegas*

$\rho$	Densidad
$\rho_1$	Densidad del compuesto 1 (2,5-DMF)
$\rho_2$	Densidad del compuesto 2 (alcano)
$\sigma$	Desviación estándar
$\tau$	Periodo de vibración

### *Abreviaturas*

$CO_2$	Dióxido de carbono
2,5-DMF	2,5 – dimetilfurano
DTV	Densímetro de tubo vibrante
HMF	Hidroximetifurfural
HPLC	Cromatografía de líquido de alta resolución. (High performance liquid chromatography, por sus siglas en ingles)
IUPAC	Unión Internacional de Química Pura y Aplicada
PM	Peso molecular
Pa	Pascal (unidad de medida de presión)



## **RESUMEN**

El presente trabajo tuvo como objetivo estudiar las propiedades volumétricas de sistemas compuestos por 2,5-dimetilfurano (2,5-DMF) y alcanos (octano, nonano, decano y dodecano). El 2,5-DMF es una sustancia que se puede obtener a partir de biomasa y que tiene la potencial aplicación de usarse como combustible o como aditivo de la gasolina. Debido a que es un compuesto que en años recientes ha captado la atención para aplicaciones energéticas, la información de sus propiedades termofísicas no se encuentran disponibles. Aquí se presentan resultados de las densidades obtenidas para componentes puros y mezclas binarias de los siguientes compuestos: 2,5-DMF, octano, nonano, decano y dodecano. Las densidades fueron determinadas en un intervalo de temperatura de 20 a 60 °C a presión atmosférica local (71 kPa), utilizando un densímetro de tubo vibrante. Se estudiaron cuatro sistemas binarios: 2,5-DMF (1) + octano (2), 2,5-DMF (1) + nonano (2), 2,5-DMF (1) + decano (2), 2,5-DMF (1) + dodecano (2).

Para el sistema 2,5-DMF (1) + octano (2) las composiciones estudiadas fueron:  $x_1 = 0.1009, 0.2021, 0.2970, 0.4014, 0.5022, 0.5980, 0.6975, 0.7996, 0.8886$ .

En el sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2) se estudiaron mezclas binarias con la siguiente composición:  $x_1 = 0.1072, 0.1971, 0.3024, 0.4001, 0.4955, 0.5947, 0.6984, 0.7973, 0.8974$ .

Para el sistema 2,5-DMF (1) + decano (2) se estudiaron las siguiente composiciones:  $x_1 = 0.1091, 0.1836, 0.3000, 0.4075, 0.5180, 0.5901, 0.7067, 0.8098, 0.9046$ .

Y por último, el sistema binario 2,5-DMF (1) + dodecano (2), fue estudiado para las siguientes fracciones molares:  $x_1 = 0.1117, 0.2059, 0.3007, 0.4306, 0.4942, 0.5978, 0.7100, 0.8065, 0.8937$ .

A partir de las densidades de los compuestos puros y de las mezclas binarias se determinaron los volúmenes molares en exceso de los sistemas binarios estudiados en este trabajo. Estos fueron correlacionados con la ecuación de Redlich-Kister para posteriormente determinar los volúmenes molares parciales.

## **OBJETIVOS**

### **OBJETIVO GENERAL:**

Determinar experimentalmente las densidades en fase líquida de componentes puros y mezclas binarias de 2,5-dimetilfurano y alcanos a presión atmosférica, en el intervalo de 20 a 60 °C.

### **OBJETIVOS PARTICULARES:**

- Determinar la densidad de compuestos puros (2,5-dimetilfurano, octano, nonano, decano y dodecano) a presión atmosférica de la Ciudad de México en un intervalo de temperatura de 20 a 60 °C.
- Determinar la densidad de mezclas binarias (2,5–dimetilfurano + octano, 2,5–dimetilfurano + nonano, 2,5–dimetilfurano + decano, 2,5–dimetilfurano + dodecano) a presión atmosférica de la Ciudad de México en un intervalo de temperatura de 20 a 60 °C.
- Calcular los volúmenes molares en exceso de los diferentes sistemas binarios estudiados y correlacionarlos con la ecuación de Redlich-Kister.
- Calcular los volúmenes molares parciales a partir de la ecuación de Redlich-Kister.

## **INTRODUCCIÓN**

Los combustibles fósiles, en específico, el petróleo crudo y el gas natural han sido por mucho tiempo las fuentes principales de energía. Debido a la gran demanda que éstos tienen, el impacto ambiental se ha incrementado de una manera exponencial, produciendo un exceso de CO<sub>2</sub> en la atmosfera que trae como consecuencias cambios climáticos drásticos y el principal causante del efecto invernadero [1,2].

El petróleo crudo al ser sometido a una serie de procesos químicos y físicos, se obtienen productos derivados como lo son: gas LP, gasolinas, naftas, queroseno, lubricantes, gasóleo ligero, gasóleo pesado y residuo [3]. De los productos derivados que se obtienen de la destilación, el más comercial es la gasolina, misma que al momento de la combustión invariablemente producirá CO<sub>2</sub>, en el mejor de los casos en que se lleve a cabo una combustión completa, y que a gran escala estas emisiones se convierten en un problema serio para el medio ambiente y para los seres humanos [2]. Es por ello que día a día se continúan estudiando posibles fuentes alternas generadoras de energía, y combustibles que reduzcan en gran medida el impacto ambiental. Hoy en día existen los biocombustibles, como el biodiesel y el etanol [4,5]. Se ha comprobado que el etanol puede usarse como combustible, sin embargo es menos eficiente que la gasolina [5]. Investigaciones recientes han demostrado que el 2,5-dimetilfurano (2,5-DMF), que es un producto de origen orgánico obtenido a partir de biomasa, puede suplir en los próximos años el uso de combustibles de origen fósil, por su eficiencia energética y bajo impacto ecológico [6]. Éste biocombustible resultaría más óptimo que el etanol y tan eficaz como la gasolina, el 2,5-DMF ( $T_n = 92 \text{ }^\circ\text{C}$ ) tiene una temperatura normal de ebullición más alta que el etanol ( $T_n = 78.37 \text{ }^\circ\text{C}$ ), lo cual puede disminuir la pérdida de combustible por evaporación y los riesgos de explosión por gases volátiles [7]. Los expertos mencionan que este biocombustible, hasta ahora poco investigado, produce 40 por ciento más energía que el etanol. Además, al ser insoluble en agua,

evita la absorción de humedad del ambiente y la disminución de su rendimiento en el motor [7,8].

Utilizar un motor con etanol resulta menos eficiente que cuando se usa gasolina. En cambio, con el 2,5-DMF, el consumo de combustible sería el mismo y el rendimiento igual, además al tratarse de un compuesto similar a la gasolina, no habría daños en el motor debido al cambio de combustible [7].

Este biocombustible se puede obtener de cualquier fuente vegetal que contenga azúcares de seis átomos de carbono [10]. Para esto, se utiliza material lignocelulósico (residuos que no sirven para la alimentación, como cáscaras o tallos) y amiláceo (excedentes que contengan almidón). Antes de obtener el biocombustible se prepara un compuesto conocido como 5-hidroximetilfurfural, que luego, en un proceso de conversión catalítica, se transforma en 2,5-DMF [9,10]. Se estima que aproximadamente en 10 años, este biocombustible será producido en masa [7-10]. En esta tesis, se estudiaron las densidades del 2,5-DMF y sus mezclas con alcanos, que se consideran que representan las características de una gasolina comercial. Existe poca información sobre las propiedades físicas del 2,5-DMF, por lo que este trabajo pretende aportar información sobre las densidades de mezclas 2,5-DMF + alcano, así como el cálculo de los volúmenes molares en exceso y los volúmenes molares parciales, las cuales proporcionan información sobre el tipo de interacciones presentes en las mezclas binarias. Además, las propiedades volumétricas son un tema fundamental sobre todo hoy en la actualidad, aunque no hay que omitir que siempre lo han sido. Sin embargo, en nuestros días los costos de transportación de fluidos se han ido elevando de manera gradual, por ello a medida que las Industrias crecen a un ritmo acelerado, se vuelven más importantes y específicos los fluidos que se manejan en ellas.

Como se sabe, el transporte de fluidos por medio de tuberías es mucho más económico y rápido que cualquier otro medio de transportación. Los fluidos que hoy en día son comunes de transportación por tuberías son: el petróleo, gases, agua y destilados, solo por mencionar algunos. Estos fluidos que son transportados tienen

diferentes propiedades que son distintivas como lo es: la densidad, viscosidad, volumen específico, peso específico, presión, etc.

Durante los dos últimos siglos los productos del petróleo han sido la base de la economía mundial, la mayoría de la energía que se consume en el mundo es generada por el petróleo y sus derivados. En las transacciones de compra-venta de este, se determina el precio en base a su calidad. En los acuerdos internacionales se pacta el volumen a condiciones base, las magnitudes de temperatura y presión a los que serán calculados estos volúmenes, valores previamente acordados entre las partes implicadas en la compra-venta, estas se apoyan en normas y recomendaciones de instituciones con gran experiencia en la medición de hidrocarburos. La densidad tiene una importancia relevante ya que con esta propiedad se pueden calcular los coeficientes de expansión térmica y compresibilidad del líquido. Propiedades que son útiles en áreas como el flujo de fluidos, y el diseño de equipos industriales.

Por lo anterior se requiere de datos de densidades experimentales precisas para el desarrollo y pruebas de modelos que describan el comportamiento ( $P\rho T$ ) de fluidos puros y mezclas para después usarlos en la representación y en el mejor de los casos, la predicción de propiedades termofísicas, que son de gran utilidad para el Ingeniero Químico, especialmente cuando se encaran problemas de diseño, simulación y optimización de equipos y plantas industriales.

El trabajo está dividido en tres capítulos. En el primer capítulo se presentan aspectos generales de las sustancias bajo estudio y los métodos que existen para medir propiedades volumétricas. En el segundo capítulo se describe el equipo experimental utilizado y la metodología seguida para lograr la medición de densidades de sistemas binarios 2,5-DMF + alcanos. En el tercer capítulo se presentan los resultados obtenidos incluyendo la discusión de los mismos. Posteriormente se presentan las conclusiones alcanzadas y las recomendaciones planteadas para trabajos futuros. Al final, se presenta la bibliografía consultada.

# **CAPÍTULO I.**

## **ANTECEDENTES**

La necesidad ilimitada de los seres humanos por fuentes de energía ha llevado a la explotación masiva de los recursos vegetales, minerales y los de origen fósil. Por ejemplo, para la generación de energía eléctrica se utilizan principalmente hidrocarburos y carbón mineral para su generación, y en menor medida recursos hídricos y energía nuclear. Para la transportación, ya sea de personas o mercancías se utilizan transportes terrestres, marítimos y aéreos, que utilizan gasolina, diésel o turbosina [1]. El uso de combustibles fósiles genera grandes cantidades de CO<sub>2</sub>, con impactos ya conocidos sobre el ambiente [2]. El uso de combustibles alternativos de origen orgánico (denominados biocombustibles) se está desarrollando en nuestros días; la utilización de biocombustibles como el biodiesel y el etanol han aumentado paulatinamente, y nuevos biocombustibles se encuentran en desarrollo [4,5]. Uno de estos es el 2,5-dimetilfurano, sin embargo a pesar de los buenos augurios de este potencial biocombustible, la información de las propiedades fisicoquímicas, toxicidad, estabilidad, etc., aún no han sido estudiadas ampliamente, por lo que este trabajo pretende contribuir con el estudio de las propiedades volumétricas del 2,5-DMF cuando este es mezclado con alcanos (octano, nonano, decano y dodecano).

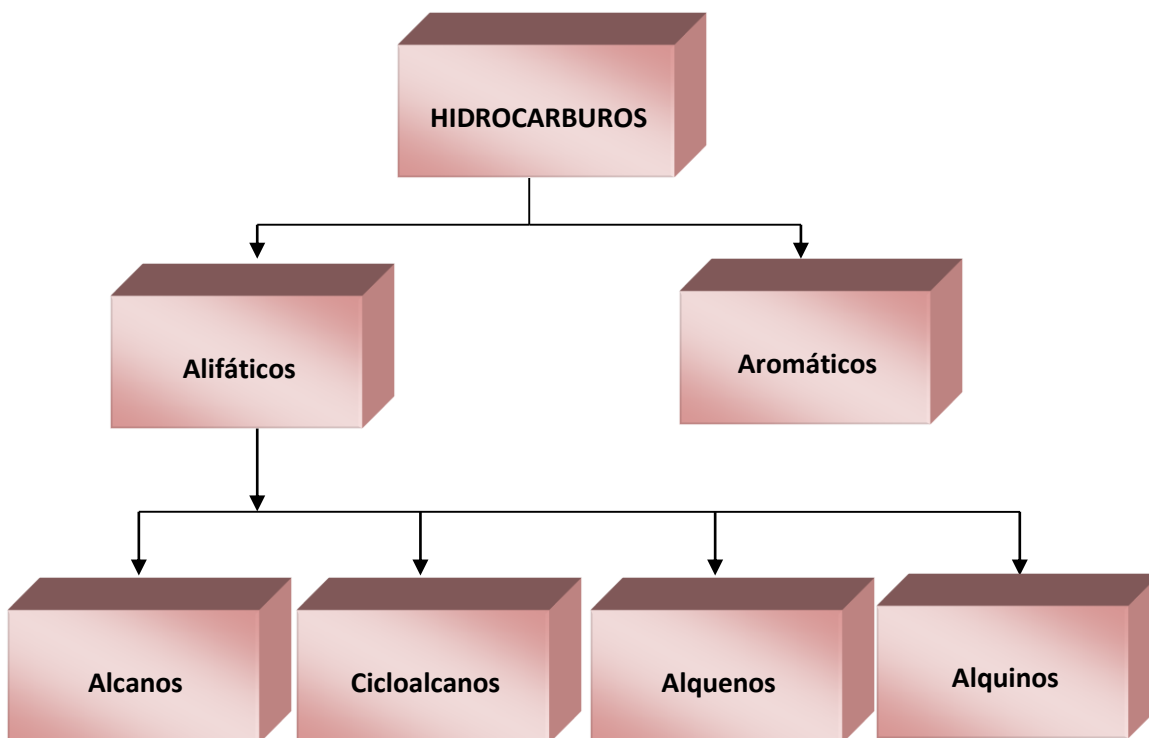
En el presente capítulo se presentan aspectos básicos sobre los alcanos, así como las características de las sustancias bajo estudio, enfatizando en el 2,5-DMF, y por último se presentan los métodos para medir propiedades volumétricas de fluidos con la finalidad de ubicar el método experimental utilizado en este trabajo.



## 1.1. HIDROCARBUROS

El carbono puede formar más compuestos que ningún otro elemento porque los átomos de carbono tienen la capacidad de formar enlaces carbono-carbono sencillo, doble o triple, y también de unirse entre sí para formar cadenas o estructuras cíclicas. [11,12]

Todos los compuestos orgánicos se derivan de un grupo de compuestos conocidos como hidrocarburos, debido a que están formados exclusivamente por átomos de carbono e hidrógeno. Los hidrocarburos se dividen en dos clases principales: alifáticos y aromáticos. En la Figura 1.1 se muestra una clasificación general de los hidrocarburos, indicando que los alcanos son hidrocarburos alifáticos. [11,12]



**Figura 1.1.** Clasificación de los hidrocarburos.

### 1.1.1. Alcanos

Los alcanos son hidrocarburos que tienen la fórmula general  $C_nH_{2n+2}$ , donde: n = número de átomos de carbono que existen en la molécula.

La principal característica de las moléculas de los alcanos, es que sólo presentan enlaces covalentes sencillos. Los alcanos se conocen como hidrocarburos saturados porque contienen el número máximo de átomos de hidrógeno que pueden unirse con la cantidad de átomos de carbono presentes [12]. En la Tabla 1.1 se presenta la serie homóloga de los alcanos [12]. La terminación sistemática de los alcanos es *ano*, indica que es un compuesto saturado y por lo tanto no tiene enlaces múltiples en su estructura. Los alcanos presentan propiedades que varían proporcionalmente al aumento del número de carbonos presentes en el compuesto como por ejemplo los puntos de fusión y ebullición que se presentan en la Tabla 1.2.

**Tabla 1.1. Serie homóloga de los alcanos.**

Fórmula molecular	Nombre	Fórmula semidesarrollada
<b>CH<sub>4</sub></b>	Metano	CH <sub>4</sub>
<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	Etano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>3</sub>
<b>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub></b>	Propano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
<b>C<sub>4</sub>H<sub>10</sub></b>	Butano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
<b>C<sub>5</sub>H<sub>12</sub></b>	Pentano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
<b>C<sub>6</sub>H<sub>14</sub></b>	Hexano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
<b>C<sub>7</sub>H<sub>16</sub></b>	Heptano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
<b>C<sub>8</sub>H<sub>18</sub></b>	Octano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
<b>C<sub>9</sub>H<sub>20</sub></b>	Nonano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
<b>C<sub>10</sub>H<sub>22</sub></b>	Decano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
<b>C<sub>11</sub>H<sub>24</sub></b>	Undecano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
<b>C<sub>12</sub>H<sub>26</sub></b>	Dodecano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>

Tabla 1.2. Puntos de fusión y ebullición de alcanos.

Compuesto	Fórmula molecular	Número de átomos de carbono	Punto de fusión (°C)	Punto de ebullición (°C)
Metano	CH <sub>4</sub>	1	-182.5	-161.6
Etano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>3</sub>	2	-183.3	-88.6
Propano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>	3	-189.7	-42.1
Butano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>	4	-138.3	-0.5
Pentano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -CH <sub>3</sub>	5	-129.8	36.1
Hexano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> -CH <sub>3</sub>	6	-95.3	68.7
Heptano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -CH <sub>3</sub>	7	-90.6	98.4
Octano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> -CH <sub>3</sub>	8	-56.8	125.7
Nonano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> -CH <sub>3</sub>	9	-53.5	150.8
Decado	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> -CH <sub>3</sub>	10	-29.7	174.0
Undecano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> -CH <sub>3</sub>	11	-25.6	195.8
Dodecano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>10</sub> -CH <sub>3</sub>	12	-9.6	216.3

### 1.1.2. Alquenos

Los alquenos, también conocidos como olefinas contienen por lo menos un doble enlace Carbono – Carbono. Los alquenos tienen la fórmula general:  $C_nH_{2n}$ . [12].

El más sencillo es C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> (etileno), este sobresale por que es una sustancia muy importante, es utilizado en grandes cantidades en la manufactura de polímeros orgánicos. El etileno se prepara industrialmente por el proceso de craqueo, la descomposición térmica de un hidrocarburo superior en moléculas más pequeñas.

Los alquenos se clasifican como hidrocarburos insaturados, compuestos con dobles enlaces carbono-carbono que les permite agregar átomos de hidrógeno. Los hidrocarburos insaturados por lo general presentan reacciones de adición, en las que una molécula se adiciona a otra para formar un solo producto. La hidrogenación es un ejemplo de este tipo de reacciones.

### 1.1.3. Alquinos

Los alquinos contienen un triple enlace carbono-carbono, que es el grupo funcional de esta familia de compuestos químicos. Se les nombra al igual que los alcanos normales, substituyendo la terminación ano por ino.

El más sencillo de estos compuestos es el etino, más conocido como acetileno ( $C_2H_2$ ). El acetileno es un gas incoloro con punto de ebullición de  $-84\text{ }^\circ\text{C}$ , tiene muchos usos importantes en la industria debido a su alto calor de combustión ( $\Delta H = -2599.2\text{ kJ}$ ). El acetileno se quema en “sopletes” y produce una flama caliente en extremo (aproximadamente de  $3,000\text{ }^\circ\text{C}$ ). Por ello, los sopletes de acetileno se utilizan para soldar metales. [12]

La energía libre estándar del acetileno es positiva ( $209.2\text{ kJ/mol}$ ), a diferencia de la de los alcanos. Esto significa que la molécula es inestable (respecto de sus elementos) y tiene tendencia a descomponerse. [12]

#### **1.1.4. PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS DE LOS ALCANOS**

Debido a que las sustancias bajo estudio incluyen alcanos, a continuación se presentan algunas propiedades físicas y químicas de estas sustancias.

##### **Propiedades físicas**

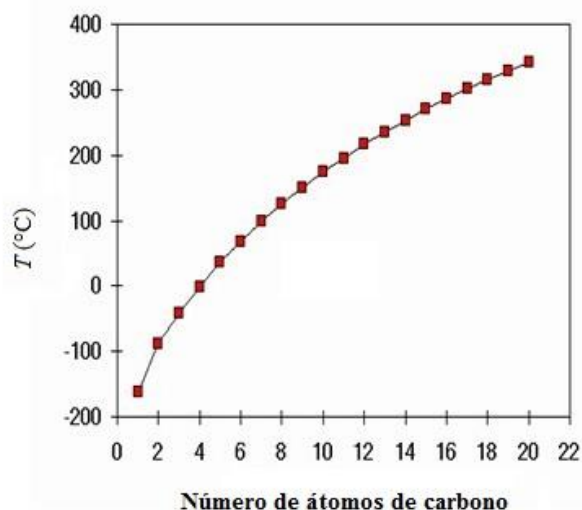
Las propiedades físicas de los alcanos guardan relación con el número de carbonos que están presentes en el mismo, por lo que sus propiedades físicas pueden ser calculadas a partir de correlaciones que involucran el número de carbonos del alcano. A continuación se presentan algunas de estas propiedades [12].

##### ***Punto de ebullición***

Bajo condiciones normales, los alcanos desde el  $CH_4$  hasta el  $C_4H_{10}$  son gases; desde el  $C_5H_{12}$  hasta  $C_{17}H_{36}$  son líquidos; y los posteriores a  $C_{18}H_{38}$  son sólidos. El punto de ebullición está relacionado con el peso molecular de la sustancia. Se incrementa entre  $20$  y  $30\text{ }^\circ\text{C}$  por cada átomo de carbono agregado a la cadena [12]. En la Figura 1.2 se presentan los puntos de ebullición de los alcanos como función del número de carbonos del alcano.

Un alcano de cadena lineal tendrá un mayor punto de ebullición que un alcano de cadena ramificada, debido a la mayor área de la superficie en contacto, con lo que hay mayores fuerzas de van der Waals, entre moléculas adyacentes.

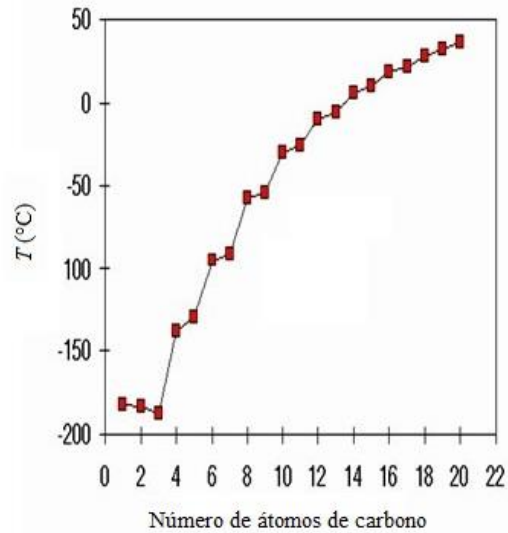
Por otra parte, los cicloalcanos tienden a tener mayores puntos de ebullición que sus contrapartes lineales, debido a las conformaciones fijas de las moléculas, que proporcionan planos para el contacto intermolecular.



**Figura 1.2.** Comportamiento de los puntos de ebullición de los alcanos conforme aumenta el número de átomos de carbono.

### ***Punto de fusión***

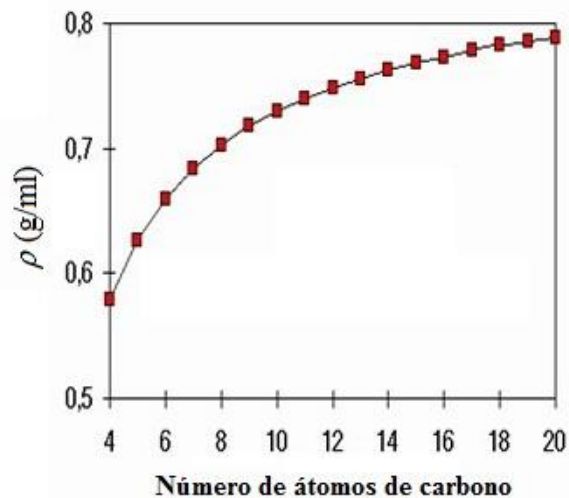
Sigue una tendencia similar al punto de ebullición. A mayor peso molecular, mayor es el punto de fusión. Los alcanos de longitud impar tienen puntos de fusión ligeramente menores, comparados con los alcanos de longitud par. Esto es debido a que los alcanos de longitud par se ordenan bien en la fase sólida, formando una estructura bien organizada, que requiere mayor energía para romperse [12]. Esto puede ser observado en la Figura 1.3.



**Figura 1.3.** Comportamiento de los puntos de fusión de los alcanos conforme aumenta el número de átomos de carbono.

### Densidad

La densidad aumenta con el número de átomos de carbono presentes en el alcano pero siempre es inferior a la del agua, por lo que los alcanos flotan en la superficie de la misma [13]. En la Figura 1.4 se presentan las densidades de los alcanos del butano al eicosano a una temperatura de 20 °C.



**Figura 1.4.** Comportamiento de las densidades de los alcanos conforme aumenta el número de átomos de carbono.



## **Propiedades Químicas**

Tienen una baja reactividad debido a que sus enlaces son estables, y no se rompen con facilidad. Reaccionan con los halógenos y con el oxígeno en una combustión [13].

### **1.1.5. Usos de los alcanos**

Los cuatro primeros alcanos son usados principalmente para propósitos de calefacción y cocina. El metano y el etano son los principales componentes del gas natural. El propano y el butano pueden ser líquidos a presiones moderadamente bajas y son conocidos como gases licuados. Estos dos alcanos son usados también como propelentes en pulverizadores [13].

Desde el pentano hasta el octano los alcanos son líquidos razonablemente volátiles. Se usan como combustibles en motores de combustión interna. Además de su uso como combustibles, los alcanos medios son buenos solventes para las sustancias no polares. Los hidrocarburos de 9 a 16 átomos de carbono son líquidos de alta viscosidad y forman parte del diesel y del combustible de aviones.

Los alcanos a partir del hexadecano en adelante constituyen los componentes más importantes de los aceites lubricantes. Los alcanos con una longitud de cadena de aproximadamente 35 o más átomos de carbono se encuentran en el bitumen o asfalto y tienen poco valor [13].

A continuación se describen las características de los alcanos y el 2,5-DMF con los que se experimentaron y permitieron la realización de esta tesis.

## 1.2. CARACTERISTICAS DE LAS SUBSTANCIAS BAJO ESTUDIO

### 1.2.1. Octano

También llamado n-octano, es un alcano formado por 8 átomos de carbono y 18 átomos de hidrógeno, su fórmula química es:  $C_8H_{18}$ . Algunas propiedades son [14]:

- Líquido
- Olor característico
- Punto de ebullición:  $125.7^{\circ}C$
- Punto de fusión:  $-56.8^{\circ}C$
- Densidad relativa: 0.70
- Solubilidad en agua: Insoluble
- Presión de vapor 1.47 kPa a  $20^{\circ}C$

El isómero de más importancia es el 2,2,4-trimetilpentano, llamado isooctano porque fue seleccionado como punto de referencia 100 para la escala del octanaje, en la que el heptano tiene el punto de referencia 0.

El octano y sus isómeros forman parte de varios tipos de crudo y son obtenidos mediante destilación fraccionada y se utilizan como combustible y como componente de las naftas.

### 1.2.2. Nonano

Es un alcano, hidrocarburo saturado o parafina de cadena lineal. Su fórmula molecular es  $C_9H_{20}$ , su equivalente estructural en forma de anillo es el ciclononano  $C_9H_{18}$ . Se encuentra en estado líquido, es poco volátil, arde con facilidad, es poco soluble en agua y soluble en disolventes orgánicos como: alcohol y acetona. La forma más fácil de obtener este alcano es por destilación fraccionada de petróleo o gas natural. Algunas propiedades son [14]:

- Líquido
- Punto de ebullición:  $150.85^{\circ}C$
- Punto de fusión:  $-53.15^{\circ}C$
- Densidad:  $0.7180\text{ g/cm}^3$
- Solubilidad en agua: poco soluble

### 1.2.3. Decano

El decano (o n-decano) es un alcano cuya fórmula molecular es  $C_{10}H_{22}$ , es uno de los componentes de la gasolina. Tiene 75 isómeros y todos son líquidos inflamables. Como otros alcanos, es un compuesto no polar, y por lo tanto, no se disuelve en agua [14]. Algunas propiedades del decano son:

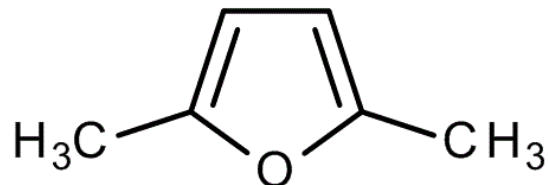
- Líquido
- Punto de ebullición: 174 °C
- Punto de fusión: -28 °C
- Densidad: 0.730 g/cm<sup>3</sup>
- Solubilidad en agua: insoluble

### 1.2.4. Dodecano

También llamado n-dodecano es un hidrocarburo que pertenece a la familia de los alcanos. Su fórmula química es  $C_{12}H_{26}$ . Con una masa molar de 170.33 g/mol, densidad a 20 °C de 0.75 g/cm<sup>3</sup>, el n-dodecano es incoloro y tiene un olor similar a la del combustible. Su punto de fusión es -9.6 °C y punto de ebullición de 216.2 °C a una presión de 101.3 kPa [12,14], es prácticamente insoluble en agua, y es soluble en sustancias como el etanol y acetona. El dodecano tiene cadena de carbono normal, alifático saturado y homogéneo.

### 1.2.5. 2,5-DIMETILFURANO

Es un compuesto heterocíclico cuya fórmula es  $C_6H_8O$ . Los compuestos heterocíclicos son compuestos orgánicos cíclicos en los que al menos uno de los componentes del ciclo es de un elemento diferente al carbono. Su estructura química se muestra en la Figura 1.5 [9,10].



**Figura 1.5.** Estructura química del 2,5-dimetilfurano [13].

#### **1.2.5.1. IMPORTANCIA DEL 2,5-DMF**

El 2,5-DMF considerado como el próximo biocombustible que puede sustituir a la gasolina, debido a los resultados que se han obtenido en diferentes investigaciones, como el de tener una densidad energética 40 % más alta que el etanol, lo cual hace que sea comparada con las gasolinas actuales [8]. Es también químicamente estable y al ser soluble en agua, no produce contaminación atmosférica [9,10]. La evaporación del 2,5-DMF durante el proceso de producción requiere aproximadamente un tercio menos de energía de la necesaria para hacer evaporar al etanol, aunque tiene un punto de ebullición mayor que el del etanol (78 °C) [16]. Recientemente, se reportó la densidad del 2,5-DMF en el intervalo de 20 a 90 °C, y son los únicos datos que han encontrado en la búsqueda bibliográfica [15].

#### **1.2.5.2. PRODUCCIÓN**

La posibilidad de producir rápida y eficazmente 2,5-DMF a partir de fructosa o glucosa puede favorecer que el 2,5-DMF sea utilizado como biocombustible una vez que se hayan realizado pruebas de seguridad [10]. Actualmente el bioetanol y el biodiesel son los principales biocombustibles líquidos [4,5].

La síntesis del 2,5-DMF se lleva a cabo en dos etapas, la primera de ellas fue lograda hace ya algún tiempo. Esto consistió en mejorar el proceso de generación de un importante producto químico intermedio, el hidroximetilfurfural (HMF), a partir

del azúcar. La fructosa se convierte inicialmente en HMF utilizando un catalizador ácido en presencia de un disolvente con un punto de ebullición bajo, que extrae el HMF del agua y lo aparta de ésta. La adición de cloruro sódico (NaCl) mejora de manera drástica su extracción a partir de agua en fase reactiva y ayuda a eliminar impurezas [8,9].

A partir del HMF se forma el 2,5-DMF sobre un catalizador a base de cobre. La conversión implica quitar dos átomos de hidrógeno del compuesto disminuyendo de esta forma el valor de su punto de ebullición. Así, se adecua para su uso como combustible para transportes [8]. La sal, importante para la producción del HMF, es sin embargo un obstáculo para la creación de 2,5-DMF debido a los cloruros que contaminan el catalizador de cobre. Por esto, se ha utilizado un catalizador de cobre-rutenio más resistente a dichos cloruros y con un rendimiento mayor [10].

Estas fueron algunas características de las sustancias que estarán bajo estudio. A continuación se mencionan de forma general algunos métodos que existen para la determinación de la densidad, haciendo énfasis en el utilizado para este trabajo.

### **1.3. PRINCIPIOS DE MEDICIÓN**

Los principios generales de medición para la determinación de propiedades volumétricas se dividen en los siguientes tres.

1. Mediciones a temperatura constante.
2. Mediciones a presión constante.
3. Mediciones a volumen constante

Los métodos a temperatura constante consisten en la compresión de una cantidad conocida del fluido, realizando mediciones de la variación del volumen ocupado por el fluido, o de la variación de la masa del fluido cerrado en un volumen constante, determinándose así la curva isotérmica [16]. En el caso de mediciones a presión constante, la variación de temperatura del fluido ocurre a medida que el volumen o

la masa cambian para mantener la presión constante, aquí se determinan las curvas isobáricas. Los métodos a volumen constante consisten de mediciones de presiones y temperaturas de una cantidad de fluido mantenida en un volumen constante, en este caso se determinan las curvas isocóricas [16].

Por otro lado, los métodos para medir propiedades volumétricas se dividen de manera general en métodos directos e indirectos.

### **1.3.1. Métodos directos**

En los métodos directos, una de las variables  $P$ ,  $\rho$  ó  $T$  es medida como una función de las otras dos, usualmente un volumen de una cantidad conocida de líquido es medido como función de la temperatura y de la presión [16,17].

Las celdas son partes básicas de aparatos para medición directa de las propiedades  $PvT$  de fluidos y mezclas de fluidos. Dos partes básicas pueden distinguirse en una celda: un contenedor, cuyo volumen determina la magnitud de los cambios de volumen observados del fluido bajo investigación, y un medidor de volumen [16]. Existen tres tipos básicos de medidores de volumen: de pistón líquido, de pistón sólido y de fuelle.

#### **1.3.1.1. Pistón líquido**

Los medidores de volumen de pistón líquido no requieren partes mecánicas complejas y sellos. El líquido más comúnmente usado es el mercurio, sin embargo este presenta las siguientes desventajas [16]:

- Formación de una capa de líquido experimental entre el mercurio y la pared del medidor de volumen.
- El mercurio es peligroso.
- No pueden usarse a bajas temperaturas y altas presiones debido a la solidificación del pistón.



### **1.3.1.2. Pistón sólido**

Para medidores de volumen de pistón sólido, los intervalos de presión y temperatura están limitados por la resistencia del medidor de volumen y la calidad del sello usado, se requiere que la determinación de la presión dentro de la celda y se puede operar a temperaturas hasta de 900 °C y presiones de hasta 7 kbar [16].

### **1.3.1.3. Pistón de fuelle**

Estos medidores de volumen no contienen ningún otro líquido que el experimental y separan el líquido experimental del líquido hidráulico. Se utiliza para fluidos hasta 10 kbar de presión y 400 °C en temperatura [16].

## **1.3.2. Métodos indirectos**

Estos métodos están basados en las relaciones que existen entre algunas de las propiedades de los líquidos como lo son: índice de refracción, periodo de vibración, velocidad del sonido, y la capacidad calorífica con la densidad del líquido [17]. Algunos de estos métodos se describen a continuación.

### **1.3.2.1. Métodos de flotación**

Este tipo de métodos operan basados en el principio de Arquímedes. Se mide una fuerza de flotación que actúa sobre un cuerpo sólido sumergido o flotando en el líquido experimental, esta fuerza es función de la densidad del líquido experimental y de la densidad y del volumen del cuerpo [17].

### **1.3.2.2. Métodos basados en el índice de refracción**

El índice de refracción, depende directamente del número de moléculas presentes, por lo que es posible investigar el comportamiento  $P\rho T$  midiendo esa propiedad [17].

### 1.3.2.3. **Densímetro de tubo vibrante (DTV)**

El método del tubo vibrante ofrece rapidez y exactitud en la determinación de las densidades de fluidos, pero para que esto responda a la exactitud deberán ser calibrados previamente con fluidos de referencia de semejante densidad a los fluidos a medir [17].

Un densímetro de tubo vibrante para fluidos comprende:

- Un tubo en forma de U adaptado para contener líquido de la prueba.
- Medios eléctricos para hacer vibrar el tubo en el campo magnético de un imán permanente.
- Medios eléctricos para detectar la frecuencia de resonancia del tubo.

El principio de funcionamiento del densímetro de tubo vibrante está basado en el mecanismo de oscilación de un tubo en forma de U de vidrio o metal llenado con el fluido experimental como función de la presión a una temperatura determinada. Conociendo las características mecánicas del tubo, los periodos se pueden convertir a densidades. La relación que existe entre el periodo de vibración ( $\tau$ ) y la densidad ( $\rho$ ) se representa con la siguiente ecuación [17]:

$$\tau^2 = \left(\frac{1}{K}\right)\rho + B \quad (1.1)$$

Donde  $K$  y  $B$  son parámetros característicos del tubo en U del densímetro.  $B$  se asume sea independiente a la presión y temperatura,  $K$  es dependiente de la presión y se determina midiendo los periodos de vibración de dos compuestos de densidades conocidas, y se determina usando la siguiente ecuación:

$$K_{(\tau,P)} = \frac{\rho_1 - \rho_2}{\tau_1 - \tau_2} \quad (1.2)$$

Donde  $\rho_1$  y  $\rho_2$  son las densidades de los líquidos de referencia bajo las mismas condiciones de presión y temperatura. Los fluidos de referencia se deben escoger de tal manera que sus densidades estén entre el límite superior e inferior de la densidad del fluido en estudio. Para densidades bajas, el fluido comúnmente usado

en el nitrógeno, y más recientemente las condiciones de vacío. Para el límite superior se han utilizado diferentes fluidos, entre ellos el agua, tolueno, propano y butano [17] debido a que las densidades de estos compuestos han sido ampliamente estudiadas con muy buena precisión.

Debido a la novedad que presenta el 2,5-DMF como potencial biocombustible, no existen datos experimentales sobre sus propiedades termofísicas. Con este trabajo se pretende aportar nueva información sobre la densidad de sistemas binarios formados por 2,5-DMF y alcanos (octano, nonano, decano y dodecano). Por otro lado, para obtener los datos experimentales, se utilizó de un densímetro de tubo vibrante, que es un método indirecto y se realizaron mediciones a presión constante, variando la temperatura.

En el siguiente capítulo se presentan los detalles del equipo experimental para la medición de densidades, así como de la metodología experimental implementada para obtener datos experimentales confiables.

## CAPÍTULO II.

# METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

En este capítulo se presenta la metodología y la descripción del equipo experimental utilizado para la obtención de los resultados experimentales.

### 2.1. DESCRIPCIÓN DEL DENSÍMETRO

Para la determinación de las densidades se utilizó un densímetro de tubo vibrante fabricado por Anton Paar Modelo 4500 M. La celda de medición consta de un tubo en forma de “U”, el tubo está fabricado en borosilicato [18]. El densímetro induce sobre este tubo una vibración transversal controlada electrónicamente, la cual produce una resonancia del tubo que se detecta y con esto se determina su periodo de vibración, a partir de la cual se puede obtener la densidad [18]. La celda en U se llena con 1 mL de muestra, y para obtener la densidad es necesario realizar una calibración previa utilizando dos fluidos de referencia (agua y aire seco) [18].

#### 2.1.1. Características del densímetro

El densímetro DMA 4500 M, tiene intervalos de medición en densidad de 0 a 3 g/cm<sup>3</sup>, y se puede variar la temperatura de 0 a 90 °C. Tiene una precisión en la medición de densidad de  $\pm 0.0001$  g/cm<sup>3</sup>, y en la temperatura de  $\pm 0.01$  K. Las mediciones del periodo de vibración se pueden realizar en 30 segundos y las dimensiones del densímetro son 482 x 340 x 231 mm [18]. En la Figura 2.1 se presenta una imagen del densímetro utilizado en este trabajo.

El densímetro cuenta con una celda de medición construida de borosilicato que permite observar la celda de medición en tiempo real, en el momento del llenado y durante la medición para asegurarse de que la muestra no presente problemas como la presencia de burbujas de aire o que no cubra el volumen de la celda de manera uniforme, en la Figura 2.2 se presenta la celda en forma de U. El equipo

también permite obtener resultados como los grados °API y los grados BRIX. La inyección de la muestra se realiza utilizando una jeringa de 10 ml, esta se puede observar en la Figura 2.1 del lado derecho. Del lado izquierdo de la Figura 2.1 se puede observar el cartucho de secado, que se utiliza para secar la celda de borosilicato y generar aire seco.

El uso de este tipo de densímetro proporciona las siguientes ventajas:

- Resultados rápidos y fiables con máxima precisión ( $\pm 0.0001 \text{ g/cm}^3$ )
- Requiere poco volumen de muestra.
- Contiene métodos de medición predeterminados para distintas aplicaciones.
- Detecta errores de llenado y burbujas de gas en la muestra en tiempo real.
- Muestra tomas en tiempo real del tubo en U oscilatorio y de la muestra completa.
- El llenado de la celda es sencillo y rápido.



**Figura 2.1.** Vista frontal del DTV DMA 4500M de Anton Paar.



**Figura 2.2.** Foto de la celda de borosilicato.

## 2.2. METODOLOGÍA

En la obtención de los resultados de este trabajo se implementó la siguiente metodología para asegurar datos satisfactorios y confiables.

1. Calibración del DTV usando como fluidos de referencia agua y aire.
2. Validación del equipo realizando mediciones de fluidos puros y comparaciones con datos previamente reportados.
3. Preparación de sistemas binarios por el método de pesadas sucesivas.
4. Medición de densidades de sistemas binarios.
5. Tratamiento de datos: correlación de las densidades, cálculo de volúmenes molares en exceso y su correlación, así como el cálculo de volúmenes molares parciales.
6. Discusión de los resultados en función de la temperatura y la composición, diferencias entre los sistemas estudiados y propuestas de posibles mecanismos de interacción molecular presentes en los sistemas binarios.

Algunos de estos apartados se describen a continuación para proporcionar mayor información sobre el desarrollo experimental.

### 2.2.1. Sustancias químicas empleadas

Las sustancias que se utilizaron en el desarrollo de este trabajo fueron: 2,5-dimetilfurano, octano, nonano, decano, dodecano, de la marca Sigma-Aldrich con purezas certificadas mayores del 99% en masa, de acuerdo al proveedor. No se realizó ninguna purificación adicional a los reactivos. Las propiedades de estos compuestos se resumen en la Tabla 2.1. Para la calibración se utilizó agua de alta

pureza (grado cromatográfico, HPLC) y aire seco generado con el cartucho de secado mencionado en la sección 2.1.1.

**Tabla 2.1. Propiedades de las sustancias utilizadas en la experimentación.**

Propiedad	2,5-DMF	octano	nonano	decano	dodecano
Formula	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O	CH <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>
Masa molecular	96.13	114.23	128.26	142.28	170.33
Estado de agregación	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
Punto de ebullición (K)	336.0	398.7	424.0	447.35	489.35
Punto de fusión	NR	216.0	220.0	243.45	263.55
Temperatura crítica (K)	NR	568.7	594.6	617.7	658.00
Presión de vapor* (kPa)	NR	1.47	1.24	0.17	1.33
Densidad* (g/cm <sup>3</sup> )	0.903	0.7030	0.7180	0.7300	0.7500
Pureza	≥ 98.5 %	≥ 99 %	≥ 99 %	≥ 99 %	≥ 99 %

\* Los valores reportados son a 20 °C , NR: no reportado

### 2.2.2. Preparación de los sistemas binarios

Cada sistema binario fue preparado utilizando el método de pesadas sucesivas, utilizando una balanza marca Metler Toledo modelo AP102 (ver Figura 2.3) con una capacidad de 120 g y una resolución de ±0.0001 g. La balanza se enciende y se deja estabilizar por 30 min antes de su utilización, con el objetivo de obtener mejores resultados.

Las mezclas se preparan el mismo día de la experimentación para evitar el cambio de composición debido la posible evaporación de los componentes de la mezcla. Las muestras fueron preparadas y almacenadas en frasco de vidrio color ámbar sellados herméticamente con películas de parafina.



**Figura 2.3.** Vista frontal de la balanza Metler Toledo.

Para la preparación de los sistemas se estimaron los volúmenes de cada componente para obtener cierta fracción molar, para ello se usaron las siguientes ecuaciones.

$$v_1 = \frac{\frac{x_1 M_1 V_T}{\rho_1}}{\frac{x_1 M_1}{\rho_1} + \frac{x_2 M_2}{\rho_2}} \quad (2.1)$$

$$v_2 = \frac{\frac{x_2 M_2 V_T}{\rho_2}}{\frac{x_1 M_1}{\rho_1} + \frac{x_2 M_2}{\rho_2}} \quad (2.2)$$

Donde  $v_1$  y  $v_2$  son los volúmenes que se necesitan para preparar la disolución con cierta composición molar ( $x_1$  y  $x_2$ ) para un cierto volumen total ( $V_T$ ), donde el  $V_T$  en el presente trabajo fue de 7 mL. Las densidades se representan de la siguiente manera: ( $\rho_1$ ) haciendo referencia al componente 1 y ( $\rho_2$ ) al componente 2 respectivamente. Cabe mencionar que el 2,5–DMF fue nombrado componente 1 para todos los sistemas binarios, en consecuencia el componente 2 se refiere a los



diferentes alcanos. La composición de las mezclas binarias se determina por medio de las masas de cada sustancia que son agregadas en el proceso de preparación de las soluciones. Las masas son determinadas con la balanza por el método de pesadas sucesivas.

### **2.3. MEDICIÓN DE DENSIDADES**

Como se mencionó anteriormente, las mediciones para obtener las densidades, se realizaron utilizando un densímetro de tubo vibrante (DTV) DMA 4500 M. Este tipo de medición es de tipo indirecta. El modelo del densímetro para presiones atmosféricas utiliza celdas fabricadas con borosilicato, ya que este material tiene buenas propiedades ópticas, pero también mecánicas (baja dilatación).

#### **2.3.1. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL**

El procedimiento que se utilizó para la determinación de las densidades, se describe a continuación:

- Calibración del densímetro utilizando agua y aire como fluidos de referencia. El equipo realiza los ajustes necesarios y una vez calibrado el aparato arroja directamente datos de densidad.
- Medición de los compuestos puros como comprobación del DTV.
- Se realizaron comparaciones con datos reportados previamente, estos resultados se discuten en el siguiente capítulo.

Una vez realizada la prueba anterior, se realizaron las mediciones experimentales, llevando a cabo la siguiente secuencia:

1. Preparación de la disoluciones de los sistemas binarios: 2,5-DMF + octano, 2,5-DMF + nonano, 2,5-DMF + decano, 2,5-DMF + dodecano. Se realizaron nueve composiciones diferentes para cada sistema binario distribuidas de manera uniforme en el intervalo de la fracción mol.

2. Antes de introducir cualquier mezcla, primeramente se lavó el DTV utilizando acetona y etanol para evitar cualquier contaminación de las soluciones. Se utilizó aire para secar el tubo en U. Para verificar que no había cambios siempre se checaba como referencia la densidad del aire a 20 °C ( $\rho = 0.0093 \text{ g/cm}^3$ ).
3. Se introdujo mediante una jeringa una cantidad de la muestra a medir, aproximadamente 3.5 ml, verificando que la muestra líquida salga por el otro extremo del tubo en U. Aunque la celda requiere de solo 1 ml de muestra, el excedente sirve para las mediciones a mayor temperatura donde la densidad disminuye y por lo tanto es necesario inyectar más muestra.
4. Se establece la primera temperatura a medir (20 °C), y se espera 5 min para que se estabilice el equipo. Cabe mencionar que este paso se realizó para los diferentes intervalos. La reproducibilidad de la temperatura es de  $\pm 0.01$  °C.
5. Medición de los periodos de oscilación y la densidad de la celda conteniendo la disolución a temperaturas de 20 a 60 °C, con incrementos de 5 °C. Para cada medición se realizan 5 mediciones y el resultado es el promedio de estas mediciones. De no haber problemas, la reproducibilidad de la densidad es de  $\pm 0.0001 \text{ g/cm}^3$ . Si esto no se cumple, generalmente se debe a la presencia de burbujas de aire dentro de la celda de medición. De presentarse esto se reinyecta la muestra, y si no se corrige el error se desecha la muestra.
6. Al final de cada medición, el equipo de medición (DTV) se limpia, utilizando el procedimiento descrito en el punto 2.

Para los sistemas 2,5-DMF + octano y 2,5-DMF+nonano solo se realizaron mediciones en el intervalo de 20 a 40 °C ya que a temperaturas mayores de 40 °C los dos sistemas presentaban la presencia de burbujas generadas por la

vaporización de la mezcla, esto es debido a que el octano y el nonano son más volátiles que el decano y el dodecano,

La incertidumbre de las mediciones es para temperatura,  $T = \pm 0.01$  °C, para densidad,  $\rho = \pm 0.0001$  g/cm<sup>3</sup>, y en fracción mol,  $x_1 = \pm 0.0001$ .

## CAPÍTULO III.

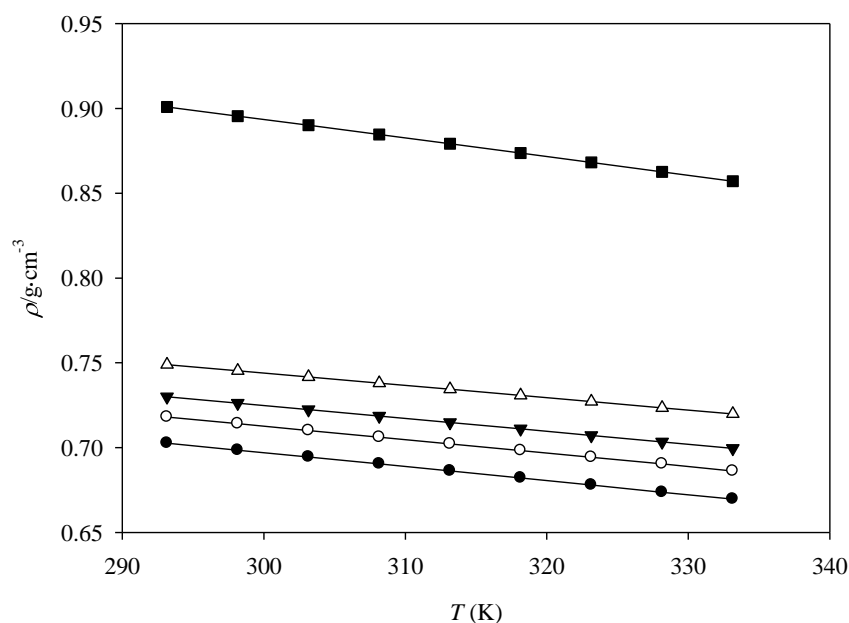
# RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En el presente capítulo se presentan los resultados obtenidos, divididos en tres secciones, en la primera se presenta los resultados obtenidos para los compuestos puros y algunas comparaciones con datos seleccionados de la literatura. La segunda sección está dedicada a las densidades obtenidas para sistemas binarios. Por último, se presentan los volúmenes molares en exceso y las propiedades molares parciales calculadas a partir de los datos experimentales.

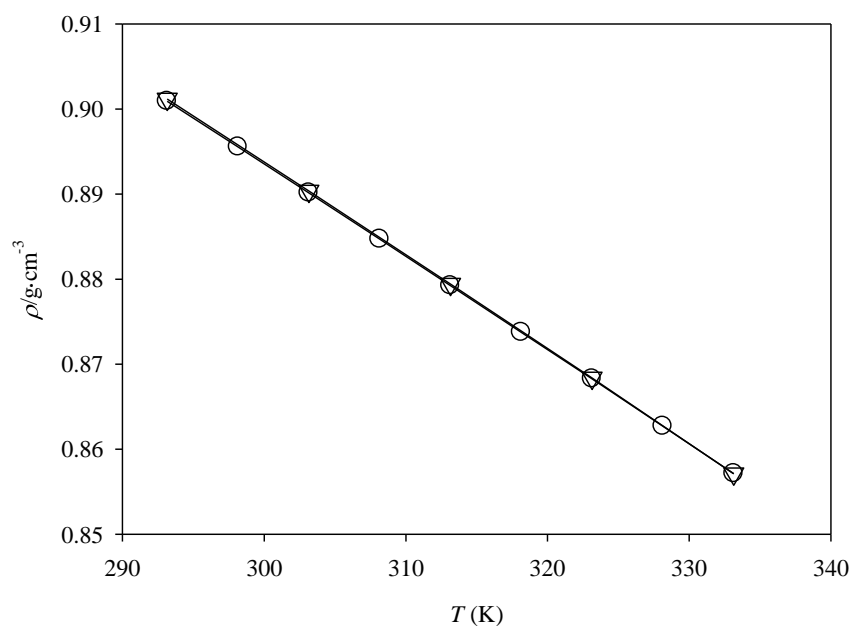
### 3.1. DENSIDADES DE LOS COMPUESTOS PUROS

Se determinaron densidades experimentales de 2,5-DMF, octano, nonano, decano y dodecano. Las mediciones de densidad se realizaron en un intervalo de 20 a 60 °C en intervalos de 5 °C. En la Tabla 3.1 se reportan las densidades de los compuestos puros a diferentes temperaturas, junto con algunos datos seleccionados en la literatura. La densidad de la 2,5-DMF es mayor que la de los alcanos reportados. La densidad de los alcanos va aumentando conforme la molécula del alcano se va haciendo más grande, es decir las densidades de los compuestos puros va aumentando en el siguiente orden:  $\rho_{\text{octano}} > \rho_{\text{nonano}} > \rho_{\text{decano}} > \rho_{\text{dodecano}} > \rho_{\text{2,5-DMF}}$ . El efecto de la temperatura sobre la densidad es la disminución de esta propiedad conforme aumenta la temperatura. Estos efectos se pueden observar gráficamente en la Figura 3.1.

Los datos medidos en este trabajo son congruentes con los reportados previamente en la literatura como se puede observar en la Tabla 3.1, además en la Figura 3.2 se muestra una comparación para los datos de densidad medidos en este trabajo con los medidos por Mejía et al [15], ambas líneas se traslapan confirmando la buena concordancia entre ambos conjuntos de datos.



**Figura 3.1.** Densidades de los compuestos puros como función de la temperatura: octano, ●; nonano, ○; decano, ▼; dodecano, △; 25-DMF, ■. La línea representa la correlación de densidades como función de  $T$ .



**Figura 3.2.** Densidades del 25-DMF como función de la temperatura: este trabajo, ○; Mejía et al [15], ▽. La línea representa la correlación de densidades como función de  $T$ .

**Tabla 3.1. Densidades experimentales y datos reportados en la literatura de los compuestos puros: octano, nonano, decano, dodecano y 25-DMF,**

<i>T</i> (K)	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )				
<b>octano</b>	este trabajo	Baragi et al [19]	González et al [20]	Landaverde et al [21]	Cisneros et al [22]
293.15	0.7026		0.7026	0.70261	0.70256
298.15	0.6985	0.6986	0.6985	0.69857	0.69852
303.15	0.6945	0.6946	0.6945	0.69452	0.69447
308.15	0.6904	0.6905		0.69044	0.6904
313.15	0.6863			0.68635	0.6863
318.15	0.6821				
323.15	0.6780				
328.15	0.6737				
333.15	0.6697				
<b>nonano</b>	este trabajo	Rivas et al [23]	Baragi et al [19]	Zúñiga et al [24]	Cisneros et al [22]
293.15	0.7180	0.71776		0.71797	0.71794
298.15	0.7141	0.71377	0.7148		0.71405
303.15	0.7101	0.70989	0.7109	0.71013	0.71014
308.15	0.7062	0.70620	0.7070		0.70622
313.15	0.7022			0.70223	0.70228
318.15	0.6983	0.69814			
323.15	0.6943			0.69426	
328.15	0.6904	0.69014			
333.15	0.6862			0.68620	
<b>decano</b>	este trabajo	Baragi et al [19]	Quiemada et al [25]	Zúñiga et al [24]	Cisneros et al [22]
293.15	0.7300		0.72882	0.72990	0.72991
298.15	0.7262	0.7266			0.72614
303.15	0.7225	0.7229	0.72237	0.72231	0.72234
308.15	0.7187	0.7191			0.71855
313.15	0.7149		0.71488	0.71469	0.71472
318.15	0.7111				
323.15	0.7072		0.70712	0.70703	
328.15	0.7034				
333.15	0.6995		0.69941	0.69929	
<b>dodecano</b>	este trabajo	Rivas et al [23]	Baragi et al [19]	Zhang et al [26]	Aminabhavi et al [27]
293.15	0.7489	0.74880		0.748595	
298.15	0.7453	0.74519	0.7463	0.744980	0.7461
303.15	0.7417	0.74157	0.7427	0.741351	
308.15	0.7381	0.73793	0.7390		0.7386
313.15	0.7345				
318.15	0.7308	0.73070			0.7114
323.15	0.7272				
328.15	0.7235	0.72332			
333.15	0.7199				
<b>25-DMF</b>	este trabajo	Mejia et al [15]			
293.15	0.9009	0.90118			
298.15	0.8955				
303.15	0.8901	0.89037			
308.15	0.8847				
313.15	0.8792	0.87943			
318.15	0.8737				
323.15	0.8683	0.86836			
328.15	0.8627				
333.15	0.8571	0.85710			

## 3.2. DENSIDADES DE SISTEMAS BINARIOS

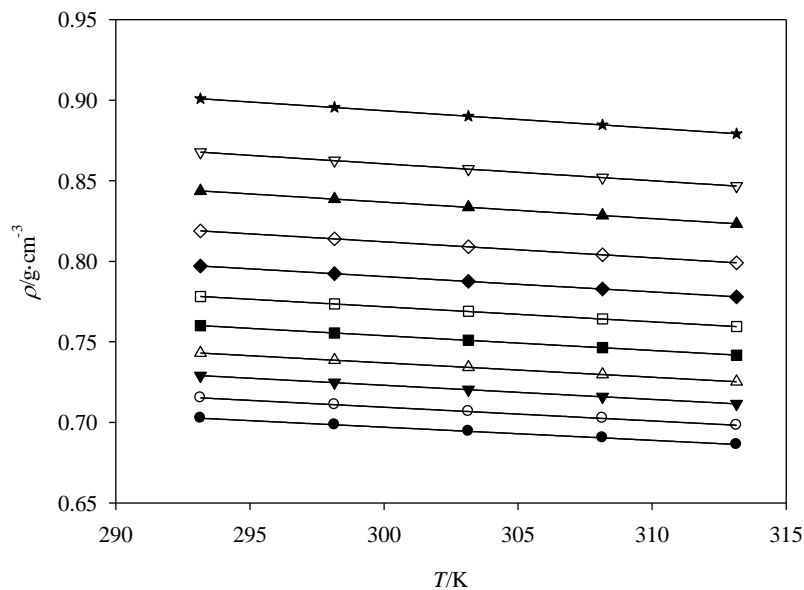
### 3.2.1. Sistema 2,5-DMF (1) + octano (2)

La determinación de la densidad fue aplicada para cuatro sistemas diferentes, siendo el primero 2,5-DMF (1) + octano (2), con las siguientes fracciones molares:  $x_1 = 0.1009, 0.2021, 0.2970, 0.4014, 0.5022, 0.5980, 0.6975, 0.7996, \text{ y } 0.8886$ . En la Tabla 3.2 se muestran los resultados de las densidades para este sistema. Las densidades como función de la temperatura se grafican en la Figura 3.3. Se observa el comportamiento típico para un líquido del efecto de la temperatura sobre la densidad, que consiste en la disminución de la densidad conforme la densidad aumenta. Efectos similares se presentan para los demás sistemas, para el sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2) los resultados se muestran en la Figura 3.5, para el sistema 2,5-DMF (1) + decano (2) en la Figura 3.7 y para el sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2) en la Figura 3.9.

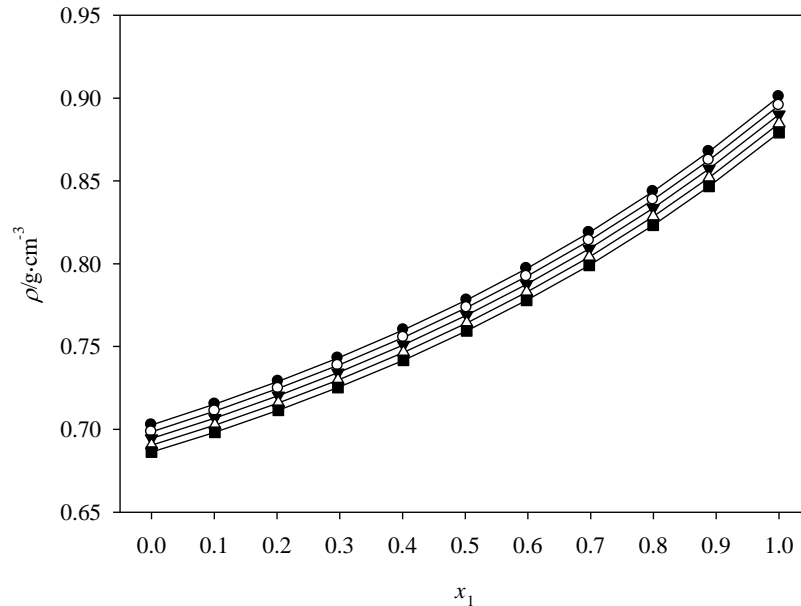
**Tabla 3.2. Densidades experimentales ( $\rho$ ) del sistema binario 2,5-DMF (1) + octano (2).**

$x_1$	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )				
	$T = 293.15$ K	$T = 298.15$ K	$T = 303.15$ K	$T = 308.15$ K	$T = 313.15$ K
0.1009	0.7152	0.7110	0.7068	0.7025	0.6982
0.2021	0.7290	0.7247	0.7203	0.7159	0.7115
0.2970	0.7430	0.7386	0.7342	0.7297	0.7252
0.4014	0.7600	0.7555	0.7510	0.7464	0.7417
0.5022	0.7781	0.7735	0.7689	0.7642	0.7594
0.5980	0.7971	0.7924	0.7876	0.7828	0.7779
0.6975	0.8189	0.8140	0.8091	0.8041	0.7991
0.7996	0.8437	0.8387	0.8336	0.8285	0.8233
0.8886	0.8677	0.8626	0.8573	0.8520	0.8467

Los resultados experimentales de densidad en función de la fracción mol para el sistema 2,5-DMF (1) + octano (2) se muestran en la Figura 3.4, se observa en ella, que la densidad del 2,5-DMF aumenta conforme se incrementa la fracción mol del 2,5-DMF, es decir, la densidad incrementa conforme aumenta la masa molar. Para el caso de los otros tres sistemas, el comportamiento que se obtuvo es similar a este sistema. Para el sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2) los resultados se muestran en la Figura 3.6, para el sistema 2,5-DMF (1) + decano (2) en la Figura 3.8 y para el sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2) en la Figura 3.10.



**Figura 3.3.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + octano (2) en función de la temperatura a las siguientes composiciones molares ( $x_1$ ): 0.0000, ●; 0.1009, ○; 0.2021, ▼; 0.2970, △; 0.4014, ■; 0.5022, □; 0.5980, ◆; 0.6975, ◇; 0.7996, ▲; 0.8886, ∇; 1.0000, ×.



**Figura 3.4.** Comportamiento de las densidades del sistema 25-DMF (1) + octano (2) en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■.



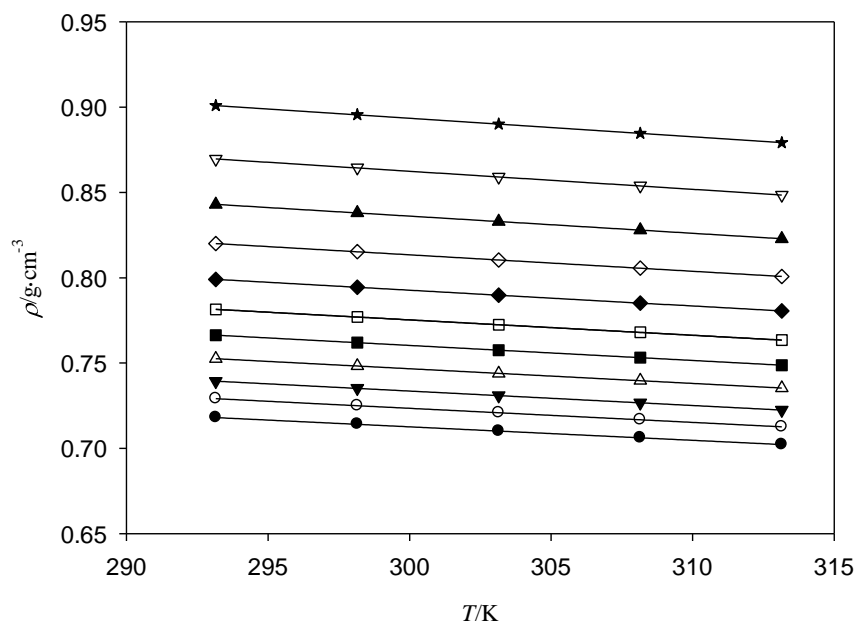
### 3.2.2. Sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2)

El sistema binario constituido por 2,5-DMF (1) + Nonano (2), fue estudiado a las siguientes fracciones molares:  $x_1 = 0.1072, 0.1971, 0.3024, 0.4001, 0.4955, 0.5947, 0.6984, 0.7973,$  y  $0.8974$ . En la Tabla 3.3 se muestran los resultados de las densidades para este sistema.

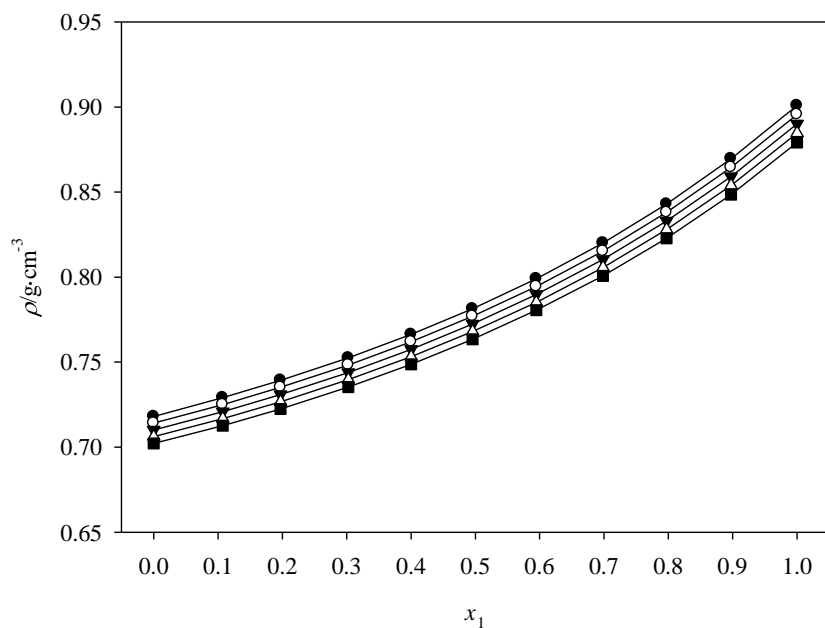
**Tabla 3.3. Densidades experimentales ( $\rho$ ) del sistema binario 2,5-DMF (1) + nonano (2).**

$x_1$	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )				
	$T = 293.15$ K	$T = 298.15$ K	$T = 303.15$ K	$T = 308.15$ K	$T = 313.15$ K
0.1072	0.7291	0.7250	0.7208	0.7168	0.7126
0.1971	0.7393	0.7352	0.7309	0.7267	0.7224
0.3024	0.7525	0.7483	0.7439	0.7397	0.7353
0.4001	0.7663	0.7620	0.7575	0.7532	0.7487
0.4955	0.7814	0.7770	0.7724	0.7680	0.7634
0.5947	0.7991	0.7945	0.7898	0.7852	0.7805
0.6984	0.8201	0.8153	0.8104	0.8057	0.8008
0.7973	0.8430	0.8381	0.8330	0.8280	0.8229
0.8974	0.8696	0.8645	0.8591	0.8539	0.8485

El comportamiento de las densidades es similar al encontrado en el sistema 2,5-DMF + octano, con la diferencia que los valores de las densidades son más grandes debido a la contribución del nonano, que un compuesto más denso que el octano. Los resultados para este sistema se presentan en las Figuras 3.5 y 3.6.



**Figura 3.5.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2) en función de la temperatura a las siguientes composiciones molares ( $x_1$ ): 0.0000, ●; 0.1072, ○; 0.1971, ▼; 0.3024, △; 0.4001, ■; 0.4955, □; 0.5947, ◆; 0.6984, ◇; 0.7973, ▲; 0.8974, ▽; 1.0000, ×.



**Figura 3.6.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2) en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■.

### 3.2.3. Sistema 2,5-DMF (1) + decano (2)

Para el sistema binario constituido por 2,5-DMF (1) + decano (2), se midieron las siguientes fracciones molares:  $x_1 = 0.1091, 0.1836, 0.3000, 0.4075, 0.5180, 0.5901, 0.7067, 0.8098, 0.9046$ . En la Tabla 3.4 se muestran los resultados de las densidades para este sistema. Las densidades como función de la temperatura y la fracción mol del 2,5-DMF se muestran en las Figuras 3.7 y 3.8, respectivamente.

### 3.2.4. Sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2)

El sistema binario 2,5-DMF (1) + dodecano (2), fue estudiado para las siguientes fracciones molares de:  $x_1 = 0.1117, 0.2059, 0.3007, 0.4306, 0.4942, 0.5978, 0.7100, 0.8065, 0.8937$ . En la Tabla 3.5 se muestran los resultados de las densidades para este sistema. Los resultados se encuentran graficados en la Figuras 3.9 y 3.10.

Los sistemas 2,5-DMF + decano y 2,5-DMF + dodecano fueron estudiados en un intervalo de temperatura de 20 a 60 °C debido a que los puntos de ebullición son más altos que los de octano y nonano, por lo tanto no existen problemas de estabilidad en las mediciones de densidad, ocasionado por la aparición de puntos de burbuja en el sistema binario.

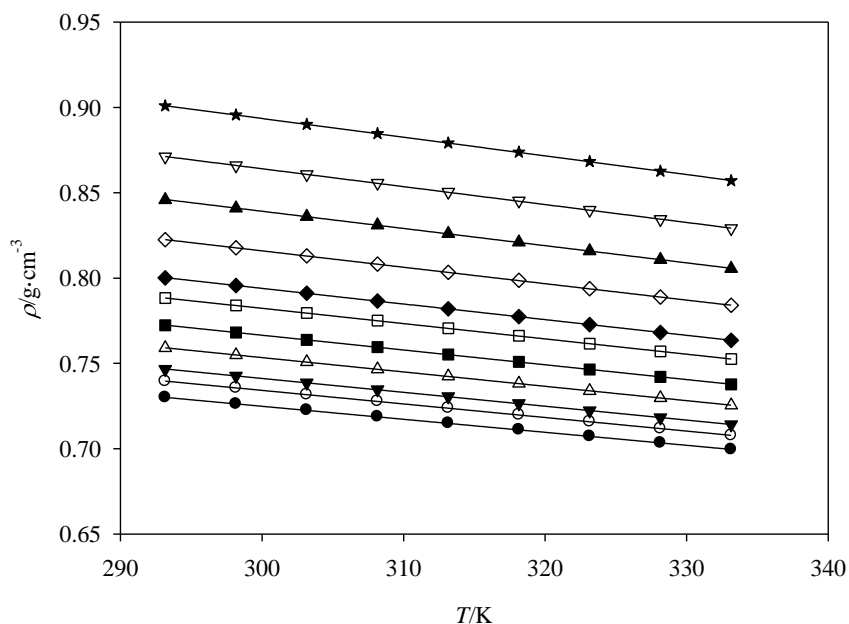
En la Figura 3.11 se muestran las densidades de los cuatro sistemas estudiados en este trabajo como función de la fracción mol del 2,5-DMF a 20 °C. Se puede observar como en la parte rica en 2,5-DMF (lado derecho de la gráfica) el valor de las densidades es dominado por la presencia del 2,5-DMF debido a que las curvas convergen a una sola curva. Por otro lado, en la parte rica del alcano (lado izquierdo de la gráfica) se observa que existe una diferencia de las densidades que es ocasionado a la diferencia de densidades de los alcanos estudiados.

**Tabla 3.4. Densidades experimentales ( $\rho$ ) del sistema binario 2,5-DMF (1) + decano (2).**

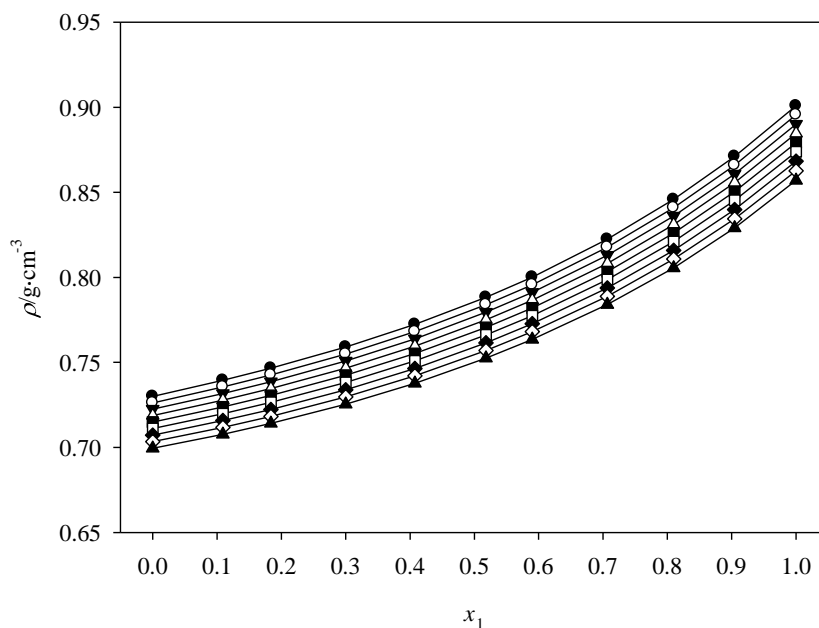
$x_1$	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )								
	T= 293.15 K	T= 298.15 K	T= 303.15 K	T= 308.15 K	T= 313.15 K	T= 318.15 K	T= 323.15 K	T= 328.15 K	T= 333.15 K
0.1091	0.7395	0.7356	0.7317	0.7278	0.7238	0.7198	0.7158	0.7118	0.7077
0.1836	0.7466	0.7426	0.7386	0.7346	0.7306	0.7265	0.7223	0.7182	0.7141
0.3000	0.7590	0.7549	0.7508	0.7466	0.7424	0.7382	0.7339	0.7297	0.7254
0.4075	0.7723	0.7681	0.7638	0.7595	0.7552	0.7509	0.7464	0.7421	0.7377
0.5180	0.7883	0.7839	0.7795	0.7750	0.7705	0.7661	0.7615	0.7570	0.7525
0.5901	0.8002	0.7957	0.7912	0.7866	0.7820	0.7774	0.7727	0.7681	0.7635
0.7067	0.8225	0.8178	0.8130	0.8082	0.8034	0.7987	0.7938	0.7889	0.7840
0.8098	0.8459	0.8410	0.8361	0.8311	0.8261	0.8211	0.8159	0.8108	0.8056
0.9046	0.8711	0.8660	0.8608	0.8557	0.8505	0.8453	0.8399	0.8345	0.8291

**Tabla 3.5. Densidades experimentales ( $\rho$ ) del sistema binario 2,5-DMF (1) + dodecano (2).**

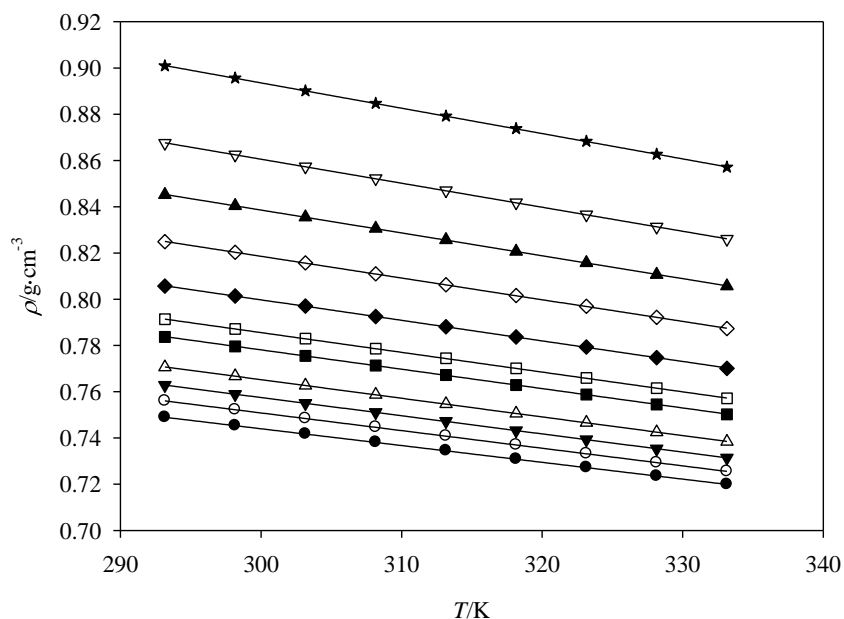
$x_1$	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )								
	T= 293.15 K	T= 298.15 K	T= 303.15 K	T= 308.15 K	T= 313.15 K	T= 318.15 K	T= 323.15 K	T= 328.15 K	T= 333.15 K
0.1117	0.7560	0.7522	0.7484	0.7446	0.7408	0.7370	0.7332	0.7293	0.7255
0.2059	0.7628	0.7589	0.7550	0.7511	0.7472	0.7432	0.7393	0.7353	0.7314
0.3007	0.7706	0.7667	0.7627	0.7587	0.7547	0.7506	0.7466	0.7425	0.7384
0.4306	0.7837	0.7796	0.7755	0.7713	0.7672	0.7629	0.7588	0.7545	0.7502
0.4942	0.7913	0.7871	0.7829	0.7786	0.7744	0.7701	0.7659	0.7615	0.7571
0.5978	0.8057	0.8014	0.7970	0.7925	0.7881	0.7837	0.7793	0.7747	0.7701
0.7100	0.8249	0.8203	0.8157	0.8110	0.8063	0.8016	0.7969	0.7921	0.7873
0.8065	0.8452	0.8404	0.8355	0.8306	0.8257	0.8207	0.8158	0.8107	0.8057
0.8937	0.8675	0.8625	0.8573	0.8522	0.8470	0.8418	0.8366	0.8313	0.8260



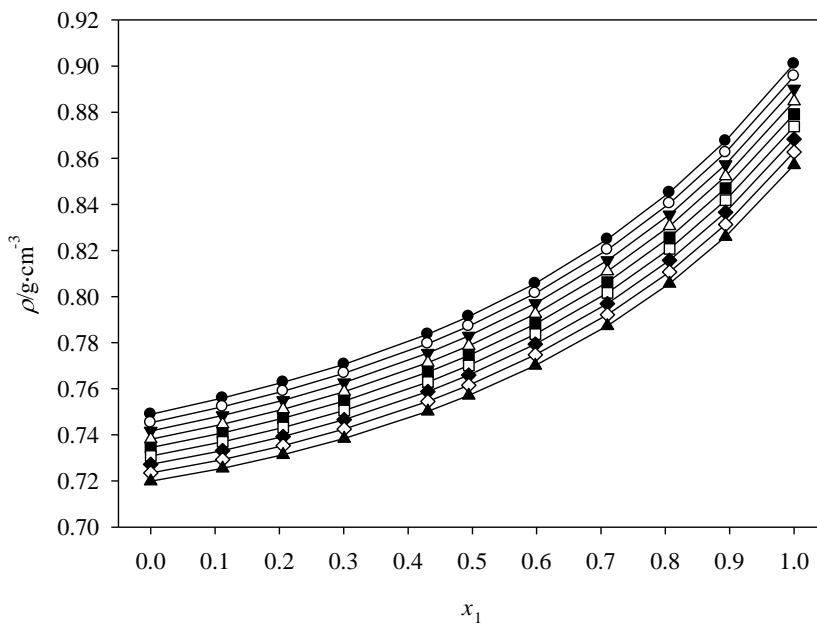
**Figura 3.7.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + decano (2) en función de la temperatura a las siguientes composiciones molares ( $x_1$ ): 0.0000, ●; 0.1091, ○; 0.1836, ▼; 0.3000, △; 0.4075, ■; 0.5180, □; 0.5901, ◆; 0.7067, ◇; 0.8098, ▲; 0.9046, ∇; 1.0000, ×.



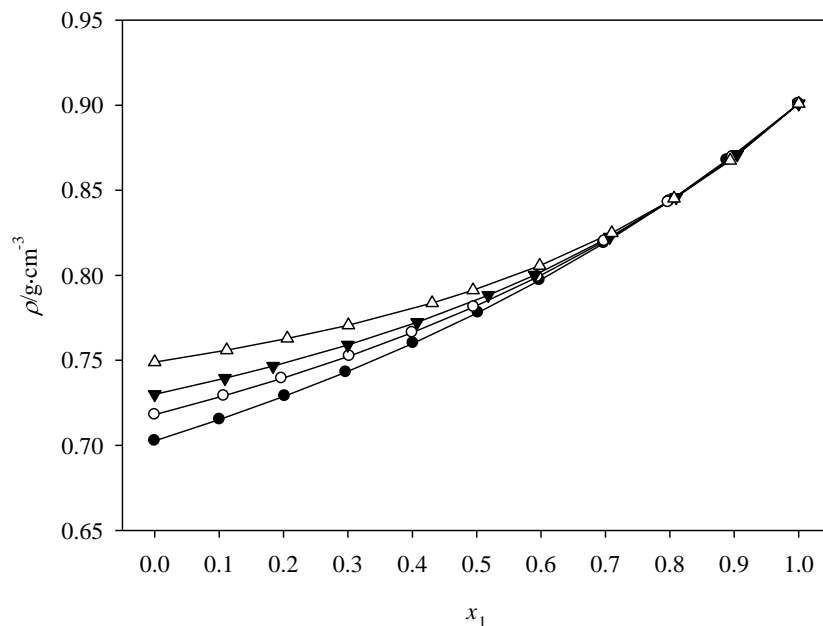
**Figura 3.8.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5DMF (1) + decano (2) en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■; 318.15 K, □; 323.15 K, ◆; 328.15 K, ◇; y a 333.15 K, ▲.



**Figura 3.9.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2) en función de la temperatura a las siguientes composiciones molares ( $x_1$ ): 0.0000, ●; 0.1117, ○; 0.2059, ▼; 0.3007, △; 0.4306, ■; 0.4992, □; 0.5978, ◆; 0.7100, ◇; 0.8065, ▲; 0.8937, ▽; 1.0000, ×.



**Figura 3.10.** Comportamiento de las densidades del sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2) en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■; 318.15 K, □; 323.15 K, ◆; 328.15 K, ◇; y a 333.15 K, ▲.



**Figura 3.11.** Comportamiento de las densidades de los sistemas 2,5-DMF (1) + alcano (2) en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) a 293.15 K, para los sistemas 25-DMF (1) +: octano, ●; nonano, ○; decano, ▼; dodecano, △.

### 3.2.5. Correlación de las densidades en función de la temperatura

La correlación de las densidades en función de la temperatura se llevó a cabo mediante un polinomio de primer grado [28].

Los parámetros  $k_1$  y  $k_0$  son parámetros ajustables y  $T$  es la temperatura en K.

$$\rho / (\text{g} \cdot \text{cm}^3) = k_1 T + k_0 \quad (3.1)$$

En la Tabla 3.6 se presentan los parámetros de la correlación de densidades (ecuación 3.1) para los compuestos binarios y las mezcla binarias. La desviación estándar ( $\sigma$ ) de las diferentes correlaciones también es reportada. Este valor es menor a la incertidumbre reportada en las mediciones de densidad ( $\pm 0.0001 \text{ g/cm}^3$ )

**Tabla 3.6. Parámetros de la ecuación 3.1 para los sistemas: 2,5-DMF (1) + octano (2), + nonano (2), + decano (2), + dodecano (2), para los compuestos puros y las diferentes composiciones estudiadas de los sistemas binarios.**

<b>Sistema</b>	$x_1$	$k_0$	$k_1 \times 10^{-4}$	$\sigma \times 10^{-5}$
<b>Octano</b>	0.0000	0.9410	-8.14	3.16
<b>Nonano</b>	0.0000	0.9496	-7.90	3.16
<b>Decano</b>	0.0000	0.9535	-7.62	10.00
<b>Dodecano</b>	0.0000	0.9617	-7.26	4.11
<b>2,5-DMF</b>	1.0000	1.2190	-10.9	6.06
<b>2,5-DMF (1) + octano (2)</b>	0.1009	0.9640	-8.50	4.83
	0.2021	0.9860	-8.76	3.65
	0.2970	1.0040	-8.90	4.83
	0.4014	1.0280	-9.14	7.96
	0.5022	1.0520	-9.34	7.96
	0.5980	1.0790	-9.60	6.32
	0.6975	1.1090	-9.90	4.83
	0.7996	1.1430	-10.2	6.32
	0.8886	1.1760	-10.5	7.30
	0.1072	0.9707	-8.24	5.16
<b>2,5-DMF (1) + nonano (2)</b>	0.1971	0.9874	-8.46	6.06
	0.3024	1.0046	-8.60	6.32
	0.4001	1.0243	-8.80	6.32
	0.4955	1.0453	-9.00	6.32
	0.5947	1.0717	-9.30	3.16
	0.6984	1.1027	-9.64	5.16
	0.7973	1.1380	-10.1	6.06
	0.8974	1.1792	-10.6	8.94
	0.1091	0.9726	-7.95	9.32
	<b>2,5-DMF (1) + decano (2)</b>	0.1836	0.9850	-8.13
0.3000		1.0056	-8.41	8.75
0.4075		1.0263	-8.66	7.75
0.5180		1.0511	-8.96	9.95
0.5901		1.0698	-9.19	9.56
0.7067		1.1046	-9.62	9.86
0.8098		1.1414	-10.1	12.23
0.9046		1.1788	-10.5	12.53
0.1117		0.9795	-7.62	3.25
<b>2,5-DMF (1) + dodecano (2)</b>		0.2059	0.9932	-7.86
	0.3007	1.0069	-8.06	7.63
	0.4306	1.0292	-8.37	9.42
	0.4942	1.0416	-8.54	8.90
	0.5978	1.0664	-8.89	9.69
	0.7100	1.1006	-9.40	9.26
	0.8065	1.1350	-9.88	9.95
	0.8937	1.1720	-10.4	9.86



### 3.3. VOLUMENES MOLARES EN EXCESO

El volumen molar en exceso es una propiedad que se define como la diferencia entre el valor real de la propiedad de una solución y el valor que tendría como solución ideal a la misma temperatura, presión y composición. La expresión matemática que define este concepto se muestra a continuación [29].

$$V^E = V - V^{id} \quad (3.2)$$

El volumen molar en exceso sirve para conocer las desviaciones del comportamiento con respecto a la idealidad, lo que permite deducir las interacciones moleculares.

Esta propiedad se calculó relacionando la ecuación (3.2) en términos de la densidad, quedando de la siguiente manera:

$$V^E = \left( \frac{x_1 M_1 + (1-x_1) M_2}{\rho} - \left( \frac{x_1 M_1}{\rho_1} + \frac{(1-x_1) M_2}{\rho_2} \right) \right) \quad (3.3)$$

Donde  $x_1$  y  $x_2$  son las fracciones molares,  $M_1$  y  $M_2$  son las masas molares de los compuestos puros,  $\rho$  es la densidad de la mezcla,  $\rho_1$  y  $\rho_2$  son las densidades de los compuestos puros que forman la mezcla.

A la primera parte de la ecuación se le considera como volumen real de la mezcla, y a la segunda parte de la ecuación (la parte ubicada dentro del paréntesis) se le denomina volumen ideal de la mezcla.

Los resultados obtenidos de los volúmenes en exceso para cada sistema, se encuentran enlistados en las Tablas 3.7 a 3.10.

**Tabla 3.7. Volúmenes molares en exceso ( $V^E$ ) de la mezcla binaria 2,5-DMF (1) + octano (2).**

$x_1$	$V^E$ (cm <sup>3</sup> /mol)				
	$T = 293.15$ K	$T = 298.15$ K	$T = 303.15$ K	$T = 308.15$ K	$T = 313.15$ K
<b>0.1009</b>	0.2202	0.2268	0.2525	0.2812	0.3093
<b>0.2021</b>	0.3872	0.3981	0.4445	0.4754	0.5045
<b>0.2970</b>	0.5201	0.5344	0.5585	0.5904	0.6193
<b>0.4014</b>	0.5902	0.6038	0.6221	0.6506	0.6942
<b>0.5022</b>	0.6039	0.6153	0.6266	0.6503	0.6865
<b>0.5980</b>	0.5607	0.5689	0.5890	0.6072	0.6355
<b>0.6975</b>	0.4678	0.4856	0.4940	0.5196	0.5371
<b>0.7996</b>	0.3355	0.3442	0.3528	0.3666	0.3855
<b>0.8886</b>	0.1817	0.1830	0.1922	0.2097	0.2167

**Tabla 3.8. Volúmenes molares en exceso ( $V^E$ ) de la mezcla binaria 2,5-DMF (1) + nonano (2).**

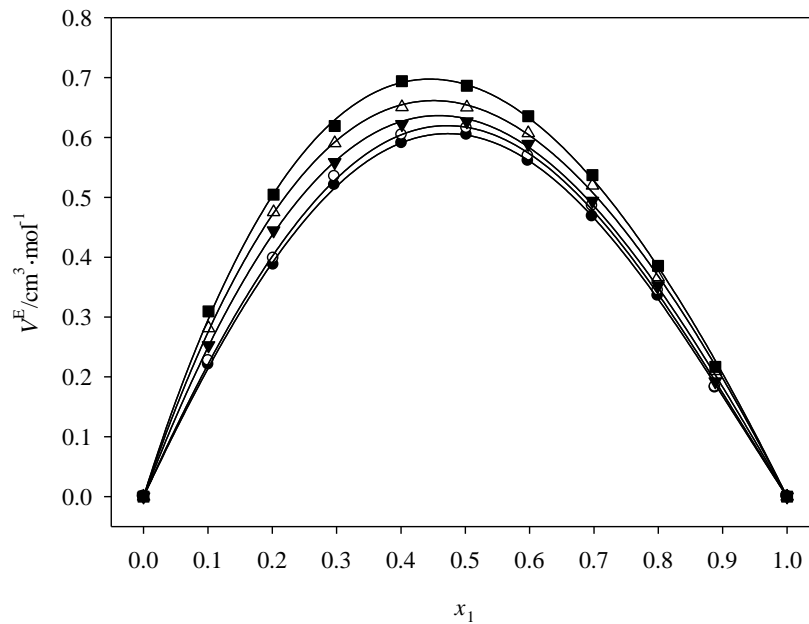
$x_1$	$V^E$ (cm <sup>3</sup> /mol)				
	$T = 293.15$ K	$T = 298.15$ K	$T = 303.15$ K	$T = 308.15$ K	$T = 313.15$ K
<b>0.1072</b>	0.2673	0.2967	0.3255	0.3306	0.3603
<b>0.1971</b>	0.4649	0.4769	0.5095	0.5428	0.5769
<b>0.3024</b>	0.6502	0.6628	0.6935	0.7031	0.7348
<b>0.4001</b>	0.7444	0.7563	0.7837	0.7914	0.8197
<b>0.4955</b>	0.7737	0.7827	0.8047	0.8081	0.8307
<b>0.5947</b>	0.7362	0.7561	0.7691	0.7825	0.7960
<b>0.6984</b>	0.6349	0.6593	0.6757	0.6762	0.6931
<b>0.7973</b>	0.4742	0.4848	0.5008	0.5171	0.5337
<b>0.8974</b>	0.2515	0.2592	0.2831	0.2940	0.3189

**Tabla 3.9. Volúmenes molares en exceso ( $V^E$ ) de la mezcla binaria 2,5-DMF (1) + decano (2).**

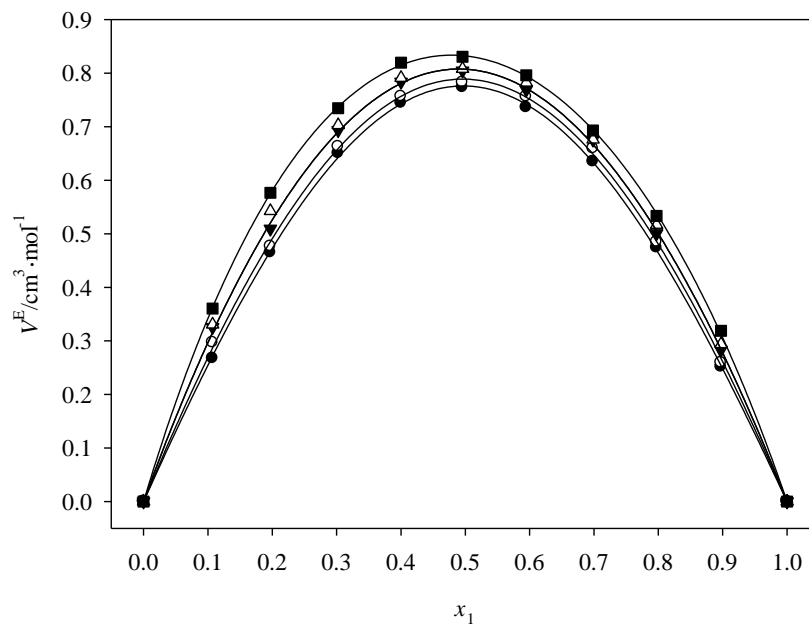
$x_1$	$V^E$ (cm <sup>3</sup> /mol)								
	$T = 293.15$ K	$T = 298.15$ K	$T = 303.15$ K	$T = 308.15$ K	$T = 313.15$ K	$T = 318.15$ K	$T = 323.15$ K	$T = 328.15$ K	$T = 333.15$ K
<b>0.1091</b>	0.3100	0.3165	0.3447	0.3503	0.3808	0.4133	0.4197	0.4505	0.4834
<b>0.1836</b>	0.5108	0.5276	0.5625	0.5779	0.5913	0.6326	0.6748	0.7130	0.7283
<b>0.3000</b>	0.7716	0.7873	0.8151	0.8508	0.8835	0.9206	0.9585	0.9894	1.0249
<b>0.4075</b>	0.9151	0.9277	0.9680	0.9977	1.0229	1.0536	1.1073	1.1290	1.1565
<b>0.5180</b>	0.9470	0.9712	0.9964	1.0349	1.0676	1.0874	1.1279	1.1559	1.1703
<b>0.5901</b>	0.9149	0.9373	0.9570	0.9915	1.0194	1.0553	1.0919	1.1140	1.1246
<b>0.7067</b>	0.7586	0.7795	0.8082	0.8381	0.8598	0.8736	0.9051	0.9365	0.9601
<b>0.8098</b>	0.5388	0.5561	0.5592	0.5822	0.5956	0.6195	0.6596	0.6797	0.7108
<b>0.9046</b>	0.2901	0.3013	0.3069	0.3073	0.3103	0.3248	0.3538	0.3746	0.3930

**Tabla 3.10. Volúmenes molares en exceso ( $V^E$ ) de la mezcla binaria 2,5-DMF (1) + dodecano (2).**

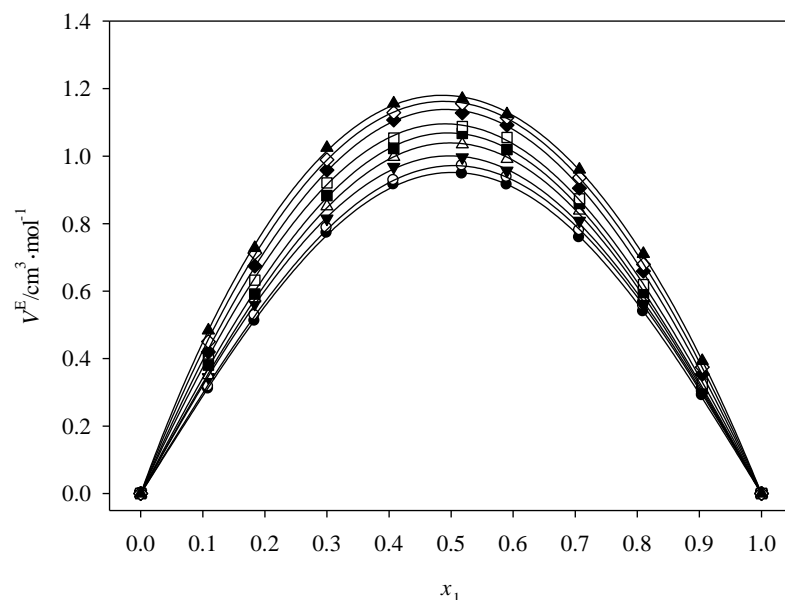
$x_1$	$V^E$ (cm <sup>3</sup> /mol)								
	$T = 293.15$ K	$T = 298.15$ K	$T = 303.15$ K	$T = 308.15$ K	$T = 313.15$ K	$T = 318.15$ K	$T = 323.15$ K	$T = 328.15$ K	$T = 333.15$ K
<b>0.1117</b>	0.3869	0.4233	0.4577	0.4941	0.5297	0.5391	0.5759	0.6134	0.6501
<b>0.2059</b>	0.6863	0.7284	0.7664	0.8076	0.8469	0.8923	0.9331	0.9748	1.0145
<b>0.3007</b>	0.9463	0.9652	1.0026	1.0443	1.0830	1.1300	1.1702	1.2112	1.2759
<b>0.4306</b>	1.1202	1.1514	1.1726	1.2227	1.2447	1.3019	1.3249	1.3727	1.4401
<b>0.4942</b>	1.1394	1.1730	1.1951	1.2457	1.2687	1.3047	1.3285	1.3758	1.4406
<b>0.5978</b>	1.0878	1.1074	1.1325	1.1855	1.2117	1.2329	1.2599	1.3083	1.3709
<b>0.7100</b>	0.9027	0.9356	0.9518	0.9948	1.0298	1.0651	1.1013	1.1383	1.1855
<b>0.8065</b>	0.6566	0.6814	0.7029	0.7347	0.7570	0.8001	0.8234	0.8641	0.8949
<b>0.8937</b>	0.3660	0.3800	0.4009	0.4188	0.4404	0.4704	0.4930	0.5161	0.5431



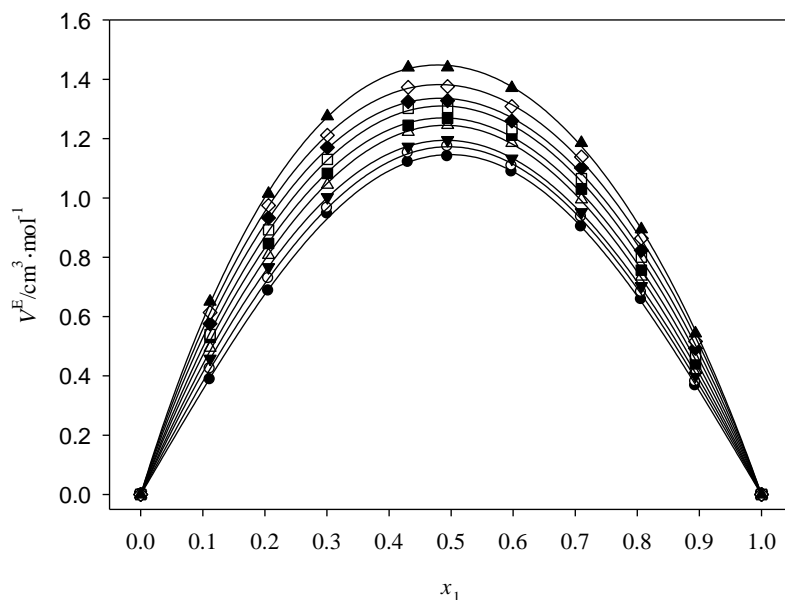
**Figura 3.12.** Volúmenes molares en exceso en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 2,5-DMF (1) + octano (2), a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■. Las líneas que se muestran fueron calculadas con la ecuación de Redlich-Kister.



**Figura 3.13.** Volúmenes molares en exceso en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2), a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■. Las líneas que se muestran fueron calculadas con la ecuación de Redlich-Kister.

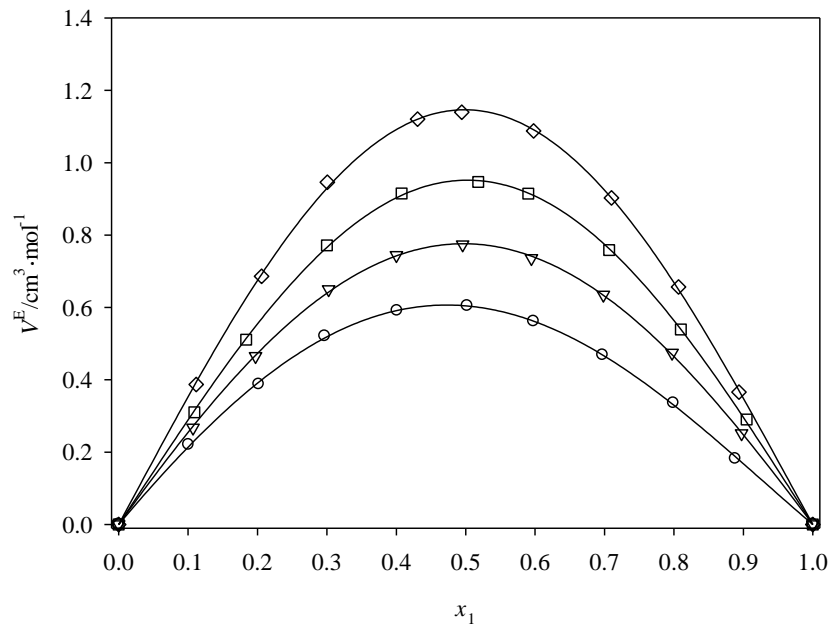


**Figura 3.14.** Volúmenes molares en exceso en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 2,5-DMF (1) + decano (2), a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■; 318.15 K, □; 323.15 K, ◆; 328.15 K, ◇; 333.15, ▲. Las líneas que se muestran fueron calculadas con la ecuación de Redlich-Kister.



**Figura 3.15.** Volúmenes molares en exceso en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2), a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■; 318.15 K, □; 323.15 K, ◆; 328.15 K, ◇; 333.15, ▲. Las líneas que se muestran fueron calculadas con la ecuación de Redlich-Kister.

Los volúmenes molares en exceso para los cuatro sistemas tienen un comportamiento similar, en los gráficos de las Figuras 3.12 a la 3.15 se muestran los comportamientos de los volúmenes molares en exceso como función de la fracción mol. Los volúmenes molares en exceso pueden proporcionar información cualitativa de las interacciones presentes en una mezcla binaria. En los alcanos las fuerzas de dispersión son las que predominan [29]. Por lo que los valores positivos de los volúmenes molares en exceso se deben a presencia de estas fuerzas y a los espacios que se forman entre las moléculas del 2,5-DMF y el alcano debido a la geometría de las moléculas. Esta contribución aumenta conforme la cadena del alcano aumenta, incrementándose los espacios entre la molécula del alcano y el 2,5-DMF debido a que las moléculas más grandes de alcanos no llenan los espacios formados por las moléculas del 2,5-DMF, por lo tanto el valor de los volúmenes molares en exceso aumenta conforme aumenta la cadena del alcano presente en la mezcla, como se puede observar en la Figura 3.16. Para el sistema 2,5-DMF (1) + octano (2) existe un máximo a la composición molar de 0.4 y en los otros tres sistemas tienen su punto máximo aproximadamente cuando las composiciones molares son 0.5, en estas composiciones el comportamiento de la mezcla binaria se aleja de la idealidad. Esto se puede observar en la Figura 3.16. Mientras más grande sea el tamaño de la molécula del alcano con el que se forme la mezcla binaria, menos ideal se comportara la mezcla, esto se debe a la estructura química de los componentes y principalmente al tamaño de la cadena del alcano.



**Figura 3.16.** Volúmenes molares en exceso en función de la fracción mol de DMF ( $x_1$ ) a 20 °C para los diferentes sistemas estudiados en este trabajo:, a las siguientes temperaturas: 2,5-DMF (1) + octano (2), ○; DMF (1) + nonano (2), ▽; 2,5-DMF (1) + decano (2), □; 2,5-DMF (1) + dodecano (2), ◇. Las líneas que se muestran fueron calculadas con la ecuación de Redlich-Kister.

### 3.3.1. Ecuación de Redlich-Kister

Los volúmenes molares en exceso obtenidos como resultado de las experimentaciones, fueron correlacionados utilizando la ecuación de Redlich-Kister [30].

La siguiente ecuación permite calcular el volumen molar en exceso, aplicando la expansión matemática de Redlich-Kister.

$$V^E = x_1(1-x_1) \sum_{i=0}^{i=n} A_i(2x_1 - 1)^i \quad (3.4)$$

Donde  $x_1$  es la fracción mol del 2,5-DMF,  $A_i$  representa los parámetros ajustables y  $n$  es el grado del polinomio, en este trabajo se utilizó una expansión donde  $n = 2$ . Dada las condiciones anteriores, la ecuación de Redlich-Kister utilizada es la siguiente.

$$V^E = x_1(1-x_1)[A_0 + A_1(2x_1-1) + A_2(2x_1-1)^2] \quad (3.5)$$

Los valores obtenidos de los parámetros, mediante la ecuación (3.5) se reportan en la Tabla (3.11).

**Tabla 3.11. Parámetros de la ecuación Redlich-Kister obtenidos para los sistemas: 2,5-DMF (1) + octano (2), + nonano (2), + decano (2), + dodecano (2), reportados a las diferentes temperaturas estudiadas de cada sistema.**

T (K)	A <sub>0</sub>	A <sub>1</sub>	A <sub>2</sub>	σ
<b>2,5-DMF (1) + octano (2)</b>				
293.15	2.417	-0.3179	-0.4635	0.0041
298.15	2.470	-0.3310	-0.4430	0.0062
303.15	2.527	-0.4589	-0.1972	0.0064
308.15	2.620	-0.5326	0.0030	0.0060
313.15	2.755	-0.6221	0.0359	0.0071
<b>2,5-DMF (1) + nonano (2)</b>				
293.15	3.1046	-0.0472	-0.4908	0.0044
298.15	3.1557	-0.0546	-0.3293	0.0070
303.15	3.2299	-0.1340	-0.0609	0.0066
308.15	3.2299	-0.1340	-0.0609	0.0066
313.15	3.3293	-0.2509	0.4223	0.0035
<b>2,5-DMF (1) + decano (2)</b>				
293.15	3.8072	0.0479	-0.8707	0.0046
298.15	3.8878	0.0768	-0.8207	0.0041
303.15	4.0036	-0.0391	-0.7468	0.0060
308.15	4.1566	-0.0350	-0.8559	0.0051
313.15	4.2748	-0.0931	-0.8381	0.0070
318.15	4.3807	-0.1928	-0.6009	0.0065
323.15	4.5516	-0.1869	-0.4777	0.0052
328.15	4.6464	-0.2347	-0.2016	0.0036
333.15	4.7173	-0.2616	0.0888	0.0058
<b>2,5-DMF (1) + dodecano (2)</b>				
293.15	4.5854	-0.0311	-1.0757	0.0071
298.15	4.6908	-0.0873	-0.8298	0.0060
303.15	4.7763	-0.1767	-0.5326	0.0042
308.15	4.9778	-0.2142	-0.4409	0.0073
313.15	5.0760	-0.2742	-0.1210	0.0092
318.15	5.2369	-0.2942	0.0676	0.0080
323.15	5.3384	-0.3559	0.4003	0.0090
328.15	5.5217	-0.3834	0.5846	0.0081
333.15	5.7838	-0.4427	0.5912	0.0072



### 3.3.2. Volúmenes molares parciales

El volumen molar de una solución depende, además de la temperatura y la presión, de la composición de la misma. Excepto que la solución sea ideal, los volúmenes no son aditivos y la contribución de un mol de cada componente a la mezcla es lo que se llama volumen molar parcial.

En una mezcla de dos líquidos (a) y (b) a temperatura y presión constantes, se tienen  $n_1$  moles del líquido (a) de volumen molar  $V_1$  y  $n_2$  moles del líquido (b) de volumen molar  $V_2$ , para una mezcla ideal, el volumen total antes de la mezcla será:

$$V = n_1V_1 + n_2V_2$$

Luego de la mezcla, en general, el volumen no es el anterior, debido a dos motivos:

- Las diferencias entre las fuerzas de interacción en la mezcla respecto de los componentes puros.
- Las diferencias en el empaquetamiento de las moléculas en la mezcla respecto de los líquidos puros, causado por distintos tamaños y formas de las moléculas que se mezclan [29].

En la siguiente ecuación se representa el volumen molar parcial [29], que se define como la variación del volumen molar de la mezcla con respecto al número de mole de un componente, manteniendo constante la temperatura, presión y número de moles del otro componente.

$$\bar{V}_i = \left( \frac{\partial nV}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j} \quad (3.6)$$

Para el cálculo del volumen molar parcial de cada especie, se utilizan las ecuaciones siguientes [29]:

$$\bar{V}_1 = V + x_2 \left( \frac{\partial V}{\partial x_2} \right)_{T,P,x_1} \quad (3.7)$$

$$\bar{V}_2 = V - x_1 \left( \frac{\partial V}{\partial x_1} \right)_{T,P,x_2} \quad (3.8)$$

De la ecuación del volumen molar en exceso, se despeja el volumen molar de la mezcla, quedando de la siguiente manera:

$$V = V^E + V^{id} \quad (3.9)$$

Sabemos que el volumen molar ideal está definido por:

$$V^{id} = x_1 V_1 + x_2 V_2 \quad (3.10)$$

Sustituyendo la Ecuación (3.10) y la ecuación de Redlich-Kister en la Ecuación 3.9, se obtiene:

$$V = (x_1 - x_1^2) [A_0 + A_1(2x_1 - 1) + A_2(2x_1 - 1)^2] + x_1 V_1 + x_2 V_2 \quad (3.11)$$

Para las fracciones molares se sabe que:  $x_1 + x_2 = 1$ , expresando la ecuación anterior en términos de  $x_1$  obtenemos la siguiente ecuación:

$$V = (x_1 - x_1^2) [A_0 + A_1(2x_1 - 1) + A_2(2x_1 - 1)^2] + x_1 V_1 + (1 - x_1) V_2 \quad (3.12)$$

Derivando la ecuación anterior con respecto a  $x_1$ , obtenemos:

$$\left( \frac{\partial V}{\partial x_1} \right)_{T,P,x_2} = (1 - 2x_1) (A_0 + A_1(2x_1 - 1) + A_2(2x_1 - 1)^2) + (x_1 - x_2^2) (2A_1 + 4A_2(2x_1 - 1)) + (V_1 - V_2) \quad (3.13)$$

Por lo tanto los volúmenes molares parciales en términos de la ecuación de Redlich-Kister, quedan expresados de la siguiente manera:

$$\bar{V}_1 = V + (1 - x_1) \left[ \frac{(1 - 2x_1) (A_0 + A_1(2x_1 - 1) + A_2(2x_1 - 1)^2)}{(x_1 - x_2^2) (2A_1 + 4A_2(2x_1 - 1)) + (V_1 - V_2)} \right] \quad (3.14)$$

$$\bar{V}_2 = V - x_1 \left[ \begin{array}{l} (1 - 2x_1)(A_0 + A_1(2x_1 - 1) + A_2(2x_1 - 1)^2) \\ + (x_1 - x_2^2)(2A_1 + 4A_2(2x_1 - 1)) + (V_1 - V_2) \end{array} \right] \quad (3.15)$$

Los volúmenes molares parciales de los cuatro sistemas estudiados, se reportan en las Tablas 3.12 a la 3.19, cabe mencionar que estos volúmenes fueron calculados utilizando las ecuaciones (3.14) y (3.15) respectivamente, y los valores de las constantes  $A_0$ ,  $A_1$ ,  $A_2$  que están reportadas en la Tabla 3.11. Los volúmenes molares parciales se encuentran graficados en las Figuras 3.17 a la 3.20. Los volúmenes molares parciales en todos los compuestos presentan pendientes contrarias para ambos compuestos de la mezcla binaria, que es congruente con la ecuación de Gibbs-Duhem para cambios a  $T$  y  $P$  constantes [29].

$$\sum_i x_i d\bar{V}_i = 0 \quad (3.16)$$

**Tabla 3.12. Volúmenes molares parciales ( $\bar{V}_1$ ) del sistema 2,5-DMF (1) + octano (2).**

$x_1$	$\bar{V}_1$ (cm <sup>3</sup> /mol)				
	$T = 293.15$ K	$T = 298.15$ K	$T = 303.15$ K	$T = 308.15$ K	$T = 313.15$ K
0.0000	108.97	109.69	110.78	111.81	112.75
0.1009	108.63	109.32	110.18	111.03	111.88
0.2021	108.24	108.91	109.65	110.39	111.17
0.2970	107.88	108.54	109.21	109.90	110.64
0.4014	107.52	108.16	108.81	109.48	110.19
0.5022	107.22	107.86	108.51	109.17	109.86
0.5980	107.00	107.64	108.29	108.96	109.64
0.6975	106.84	107.48	108.14	108.81	109.49
0.7996	106.75	107.38	108.05	108.71	109.39
0.8886	106.71	107.34	108.01	108.67	109.35
1.0000	106.70	107.33	108.00	108.66	109.33

**Tabla 3.13. Volúmenes molares parciales ( $\bar{V}_2$ ) del sistema 2,5-DMF (1) + octano (2).**

$x_1$	$\bar{V}_2$ (cm <sup>3</sup> /mol)				
	$T = 293.15$ K	$T = 298.15$ K	$T = 303.15$ K	$T = 308.15$ K	$T = 313.15$ K
0.0000	162.58	163.53	164.48	165.45	166.44
0.1009	162.62	163.57	164.51	165.49	166.48
0.2021	162.71	163.67	164.61	165.59	166.59
0.2970	162.84	163.80	164.75	165.73	166.74
0.4014	163.01	163.97	164.92	165.91	166.93
0.5022	163.19	164.16	165.11	166.11	167.13
0.5980	163.37	164.34	165.31	166.32	167.35
0.6975	163.57	164.55	165.53	166.56	167.60
0.7996	163.78	164.77	165.77	166.84	167.88
0.8886	163.97	164.96	166.01	167.12	168.17
1.0000	164.22	165.23	166.35	167.54	168.61

**Tabla 3.14. Volúmenes molares parciales ( $\bar{V}_1$ ) del sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2).**

$x_1$	$\bar{V}_1$ (cm <sup>3</sup> /mol)				
	$T = 293.15$ K	$T = 298.15$ K	$T = 303.15$ K	$T = 308.15$ K	$T = 313.15$ K
0.0000	109.36	110.21	111.30	111.96	113.34
0.1072	109.12	109.76	110.61	111.27	112.25
0.1971	108.80	109.35	110.09	110.75	111.55
0.3024	108.26	108.88	109.56	110.22	110.91
0.4001	107.83	108.47	109.13	109.79	110.46
0.4955	107.48	108.12	108.78	109.44	110.12
0.5947	107.18	107.82	108.49	109.15	109.84
0.6984	106.94	107.59	108.26	108.92	109.62
0.7973	106.80	107.44	108.11	108.77	109.47
0.8974	106.72	107.36	108.02	108.68	109.37
1.0000	106.70	107.33	108.00	108.66	109.33

**Tabla 3.15. Volúmenes molares parciales ( $\bar{V}_2$ ) del sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2).**

$x_1$	$\bar{V}_2$ (cm <sup>3</sup> /mol)				
	$T = 293.15$ K	$T = 298.15$ K	$T = 303.15$ K	$T = 308.15$ K	$T = 313.15$ K
0.0000	178.63	179.60	180.62	181.61	182.65
0.1072	178.67	179.64	180.66	181.65	182.69
0.1971	178.76	179.74	180.75	181.75	182.78
0.3024	178.94	179.91	180.92	181.92	182.96
0.4001	179.17	180.12	181.14	182.14	183.18
0.4955	179.39	180.38	181.41	182.41	183.47
0.5947	179.69	180.69	181.74	182.73	183.82
0.6984	180.03	181.06	182.14	183.14	184.28
0.7973	180.39	181.46	182.57	183.57	184.79
0.8974	180.78	181.89	183.07	184.07	185.41
1.0000	181.19	182.38	183.65	184.65	186.15

**Tabla 3.16. Volúmenes molares parciales ( $\bar{V}_1$ ) del sistema 2,5-DMF (1) + decano (2).**

$x_1$	$\bar{V}_1$ (cm <sup>3</sup> /mol)								
	T = 293.15 K	T = 298.15 K	T = 303.15 K	T = 308.15 K	T = 313.15 K	T = 318.15 K	T = 323.15 K	T = 328.15 K	T = 333.15 K
<b>0.0000</b>	109.59	110.32	111.29	111.99	112.86	113.98	114.97	116.11	117.22
<b>0.1091</b>	109.40	110.10	110.93	111.67	112.48	113.36	114.24	115.15	116.05
<b>0.1836</b>	109.13	109.82	110.59	111.34	112.11	112.90	113.72	114.54	115.35
<b>0.3000</b>	108.61	109.28	109.98	110.72	111.45	112.16	112.94	113.69	114.44
<b>0.4075</b>	108.08	108.75	109.42	110.14	110.85	111.53	112.28	113.01	113.75
<b>0.5180</b>	107.59	108.25	108.91	109.60	110.30	110.97	111.71	112.45	113.19
<b>0.5901</b>	107.32	107.97	108.63	109.31	110.00	110.68	111.41	112.14	112.89
<b>0.7067</b>	106.98	107.63	108.29	108.95	109.63	110.32	111.04	111.78	112.52
<b>0.8098</b>	106.80	107.44	108.10	108.76	109.44	110.12	110.83	111.56	112.31
<b>0.9046</b>	106.72	107.35	108.02	108.68	109.36	110.03	110.74	111.46	112.19
<b>1.0000</b>	106.70	107.33	108.00	108.66	109.33	110.01	110.71	111.43	112.15

**Tabla 3.17. Volúmenes molares parciales ( $\bar{V}_2$ ) del sistema 2,5-DMF (1) + decano (2).**

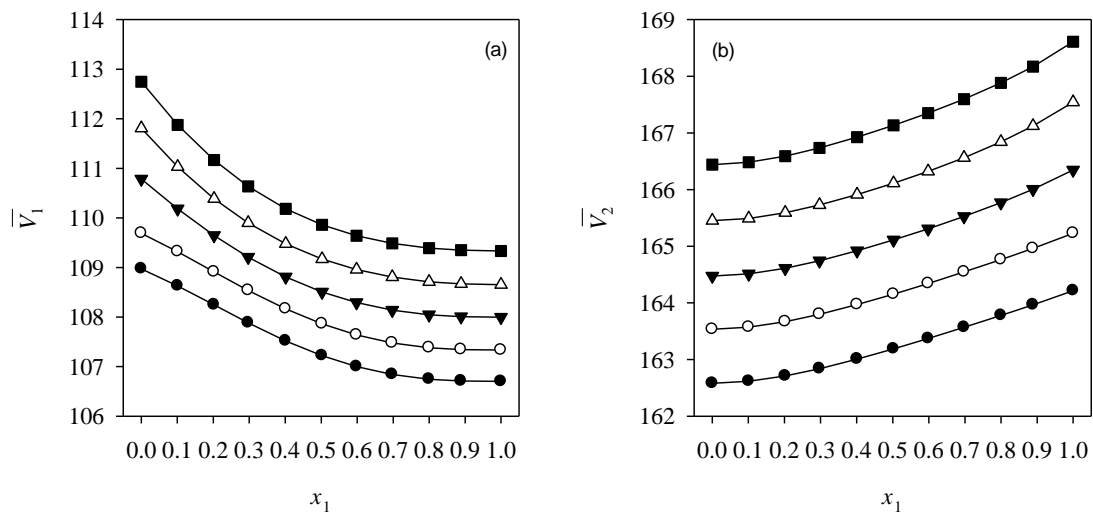
$x_1$	$\bar{V}_2$ (cm <sup>3</sup> /mol)								
	T = 293.15 K	T = 298.15 K	T = 303.15 K	T = 308.15 K	T = 313.15 K	T = 318.15 K	T = 323.15 K	T = 328.15 K	T = 333.15 K
<b>0.0000</b>	194.91	195.93	196.93	197.97	199.02	200.09	201.19	202.28	203.40
<b>0.1091</b>	194.96	195.98	196.99	198.03	199.08	200.15	201.25	202.34	203.47
<b>0.1836</b>	195.05	196.07	197.08	198.13	199.19	200.26	201.36	202.45	203.58
<b>0.3000</b>	195.28	196.30	197.32	198.38	199.45	200.52	201.63	202.72	203.85
<b>0.4075</b>	195.56	196.59	197.62	198.69	199.77	200.85	201.97	203.07	204.20
<b>0.5180</b>	195.92	196.96	198.00	199.08	200.16	201.25	202.40	203.52	204.67
<b>0.5901</b>	196.18	197.24	198.27	199.36	200.45	201.55	202.72	203.86	205.02
<b>0.7067</b>	196.64	197.72	198.76	199.86	200.95	202.09	203.30	204.48	205.69
<b>0.8098</b>	197.08	198.19	199.23	200.33	201.43	202.61	203.88	205.11	206.39
<b>0.9046</b>	197.48	198.62	199.68	200.78	201.89	203.12	204.45	205.76	207.12
<b>1.0000</b>	197.89	199.07	200.15	201.24	202.37	203.67	205.08	206.49	207.95

**Tabla 3.18. Volúmenes molares parciales ( $\bar{V}_1$ ) del sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2).**

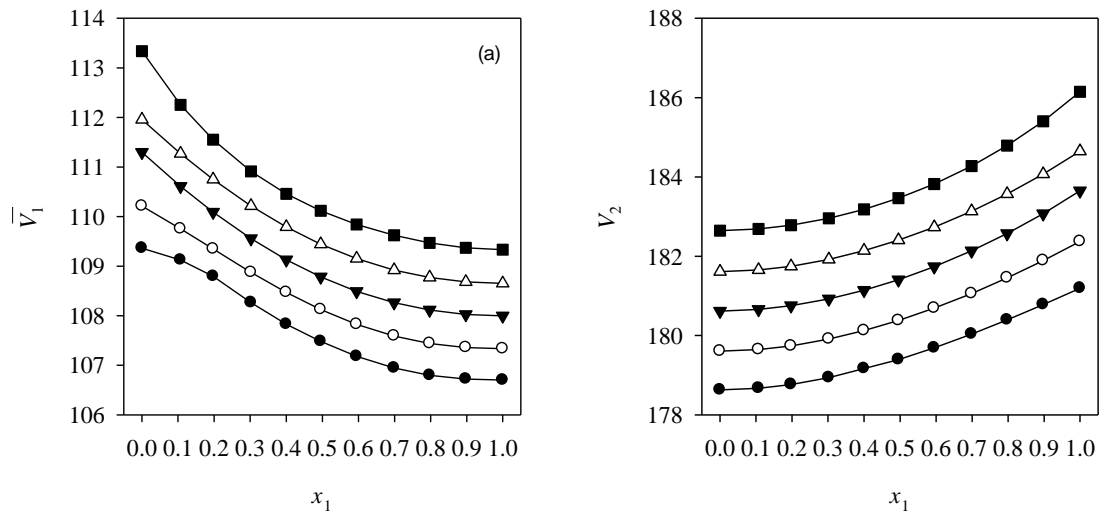
$x_1$	$\bar{V}_1$ (cm <sup>3</sup> /mol)								
	T = 293.15 K	T = 298.15 K	T = 303.15 K	T = 308.15 K	T = 313.15 K	T = 318.15 K	T = 323.15 K	T = 328.15 K	T = 333.15 K
0.0000	110.24	111.28	112.42	113.41	114.56	115.61	116.80	117.92	118.97
0.1117	110.16	110.79	111.66	112.53	113.42	114.29	115.21	116.15	117.11
0.2059	109.70	110.25	110.99	111.79	112.56	113.35	114.14	114.99	115.89
0.3007	109.13	109.65	110.34	111.09	111.79	112.54	113.27	114.06	114.92
0.4306	108.29	108.86	109.52	110.23	110.92	111.64	112.34	113.11	113.91
0.4942	107.97	108.51	109.18	109.88	110.57	111.28	111.98	112.74	113.52
0.5978	107.50	108.04	108.71	109.39	110.09	110.79	111.51	112.26	113.02
0.7100	107.14	107.66	108.34	109.01	109.71	110.41	111.13	111.87	112.61
0.8065	106.91	107.46	108.13	108.80	109.50	110.19	110.90	111.63	112.36
0.8937	106.73	107.36	108.03	108.69	109.38	110.06	110.77	111.49	112.22
1.0000	106.70	107.33	108.00	108.66	109.33	110.01	110.71	111.43	112.15

**Tabla 3.19. Volúmenes molares parciales ( $\bar{V}_2$ ) del sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2).**

$x_1$	$\bar{V}_2$ (cm <sup>3</sup> /mol)								
	T = 293.15 K	T = 298.15 K	T = 303.15 K	T = 308.15 K	T = 313.15 K	T = 318.15 K	T = 323.15 K	T = 328.15 K	T = 333.15 K
0.0000	227.45	228.55	229.65	230.77	231.91	233.08	234.23	235.43	236.61
0.1117	227.52	228.61	229.72	230.85	231.98	233.15	234.31	235.51	236.69
0.2059	227.67	228.77	229.88	231.01	232.14	233.32	234.47	235.68	236.87
0.3007	227.90	229.01	230.12	231.26	232.39	233.58	234.73	235.94	237.15
0.4306	228.33	229.44	230.56	231.72	232.87	234.07	235.23	236.46	237.69
0.4942	228.57	229.69	230.82	231.99	233.15	234.36	235.54	236.78	238.02
0.5978	229.01	230.15	231.30	232.50	233.68	234.92	236.12	237.40	238.66
0.7100	229.52	230.71	231.89	233.12	234.35	235.64	236.89	238.21	239.50
0.8065	229.98	231.22	232.45	233.72	235.01	236.35	237.67	239.04	240.36
0.8937	230.41	231.70	233.00	234.31	235.67	237.08	238.48	239.92	241.26
1.0000	230.93	232.32	233.72	235.10	236.59	238.09	239.62	241.15	242.54

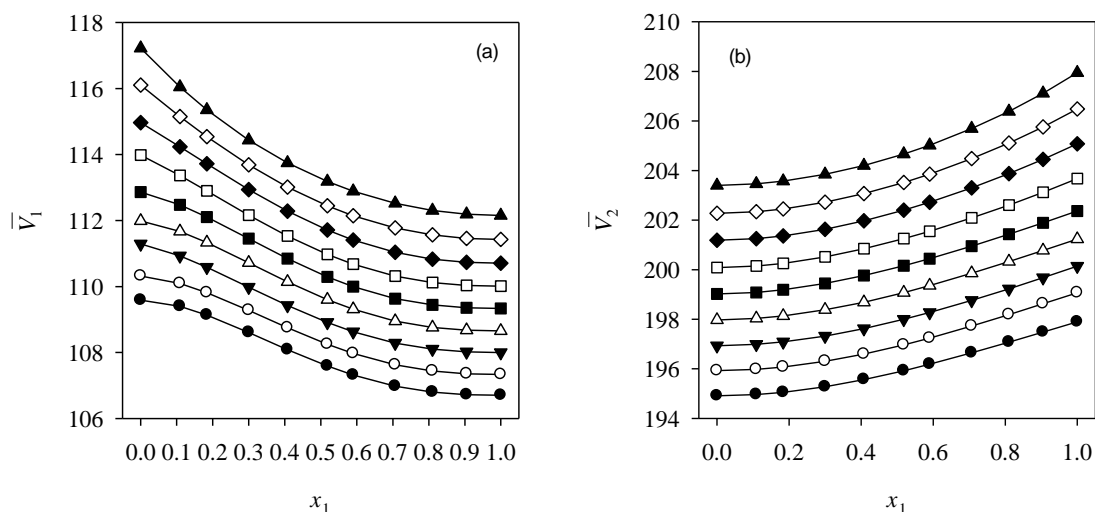


**Figura 3.17.** Volúmenes molares parciales en función de la fracción mol de 25-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 2,5-DMF (1) + octano (2): (a) volumen molar parcial del 25-DMF,  $\bar{V}_1$ ; (b) volumen molar parcial del octano,  $\bar{V}_2$ , a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■.

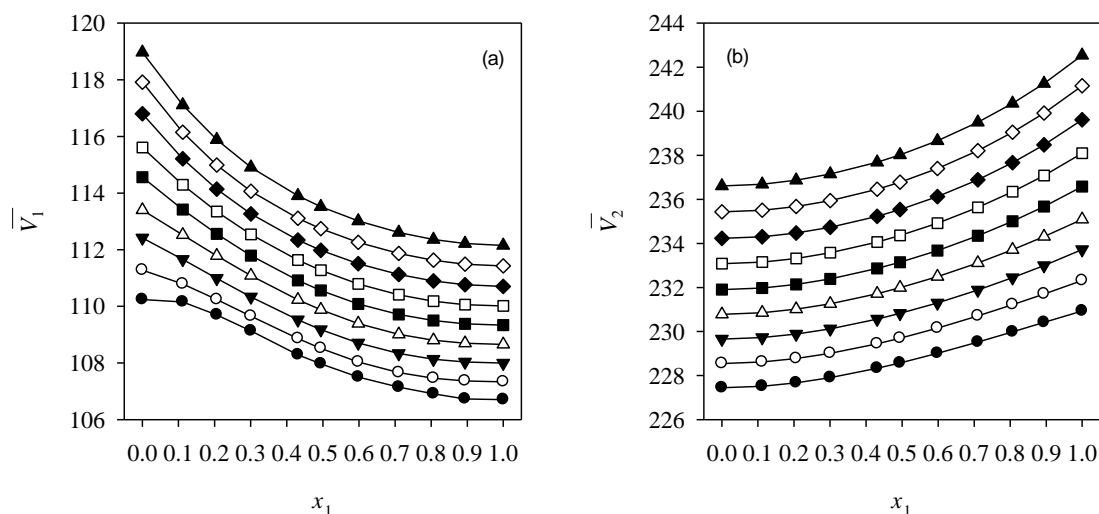


**Figura 3.18.** Volúmenes molares parciales en función de la fracción mol de 25-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 2,5-DMF (1) + nonano (2): (a) volumen molar parcial del 25-DMF,  $\bar{V}_1$ ; (b) volumen molar parcial del nonano,  $\bar{V}_2$ , a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■.





**Figura 3.19.** Volúmenes molares parciales en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 2,5-DMF (1) + decano (2): (a) volumen molar parcial del 2,5-DMF,  $\bar{V}_1$ ; (b) volumen molar parcial del decano,  $\bar{V}_2$ , a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■; 318.15 K, □; 323.15 K, ◆; 328.15 K, ◇; 333.15 K, ▲.



**Figura 3.20.** Volúmenes molares parciales en función de la fracción mol de 2,5-DMF ( $x_1$ ) para el sistema 2,5-DMF (1) + dodecano (2): (a) volumen molar parcial del 2,5-DMF,  $\bar{V}_1$ ; (b) volumen molar parcial del dodecano,  $\bar{V}_2$ , a las siguientes temperaturas: 293.15 K, ●; 298.15 K, ○; 303.15 K, ▼; 308.15 K, △; 313.15 K, ■; 318.15 K, □; 323.15 K, ◆; 328.15 K, ◇; 333.15 K, ▲.

## CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Derivado del trabajo realizado, a continuación se presentan las conclusiones, así como algunas sugerencias para continuar con este tipo de investigaciones:

Se midieron propiedades volumétricas, utilizando un densímetro de tubo vibrante a condiciones normales de presión de la Ciudad de México en un intervalo de temperatura de 20 – 40 °C para la mezcla 2,5-DMF(1) + octano (2) y 2,5-DMF (1) + nonano (2), mientras que para la mezcla 2,5-DMF (1) + decano (2) y 2,5-DMF (1) + nonano (2) el intervalo de temperatura fue de 20 – 60 °C.

Para comprobar la calibración del DTV y el procedimiento experimental utilizados, se midieron las densidades de los compuestos puros bajo estudio (octano, nonano, decano, dodecano y 2,5-DMF), y se compararon con datos previamente medidos. En general, los datos medidos en este trabajo son congruentes con los reportados en la literatura, las diferencias entre los valores se encuentran dentro de la incertidumbre experimental de los datos medidos en este trabajo.

La densidad de los compuestos puros y de cada una de las mezclas estudiadas, disminuyen conforme se incrementa la temperatura. La densidad de los compuestos puros se comporta de la siguiente manera:  $\rho_{2,5\text{-DMF}} > \rho_{\text{dodecano}} > \rho_{\text{decano}} > \rho_{\text{nonano}} > \rho_{\text{octano}}$ . Para los sistemas binarios, la densidad tiende a incrementarse conforme el contenido de 2,5-MDF aumenta en la mezcla binaria, esto significa que la densidad aumenta por la influencia del aumento de la cantidad de 2,5-DMF en la mezcla, que es un compuesto más denso que los alcanos.

Los volúmenes molares en exceso fueron calculados con la finalidad de conocer la desviación del comportamiento con respecto a la idealidad. Los resultados muestran que las desviaciones son positivas para todos los casos, mostrando un comportamiento parabólico, mismos que fueron correlacionados utilizando una expansión tipo Redlich-Kister.

Se correlacionaron los efectos de la temperatura sobre la densidad (modelo lineal empírico) y el efecto de la composición sobre los volúmenes molares en exceso (ecuación de Redlich-Kister). Modelos que son útiles para realizar cálculos de propiedades volumétricas para los sistemas estudiados en este trabajo.

Los valores positivos de los volúmenes molares en exceso se atribuyen a las fuerzas de dispersión que poseen los alcanos y a la generación de espacios vacíos debido al acomodamiento de las moléculas de alcanos con las moléculas de 2,5-DMF.

Como recomendación, se propone el estudio de propiedades volumétricas de otras mezclas binarias, que pueden incluir al 2,5-Dimetilfurano para continuar con las investigaciones de este compuesto, a las mismas condiciones presión y temperatura para conocer el comportamiento de este compuesto al mezclarlo con otros compuestos, así también se propone el estudio de la viscosidad, debido al efecto que esta propiedad tiene en el transporte de fluidos.

## **BIBLIOGRAFIA**

1. Globalization, Transport and the Environment, Organisation for economic co-operation and development, OECD publishing, Francia, 2010, 274 pp.
2. Cunningham, W.P., Cunningham, M.A. Principles of environmental science, 4 ed. Ed. McGraw-Hill, Estados Unidos de América, 2008, 410 pp.
3. Henley, E.J., Seader, J.D. Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química. Ed. Reverté, 1988, España, 814 pp.
4. Demirbas, A. Biodiesel, A Realistic Fuel Alternative for Diesel Engines, Springer, Estados Unidos de América 2008, 208 pp.
5. Manzetti, S., Andersen, O. A review of emission products from bioethanol and its blends with gasoline. Background for new guidelines for emission control. *Fuel* (2015) 140, 293-301.
6. Zhang, Q., Yao, M., Luo, J., Chen, H., Xiangyu Zhang b Diesel engine combustion and emissions of 2,5-dimethylfuran-diesel blends with 2-ethylhexyl nitrate addition. *Fuel* (2013) 111, 887–891.
7. Rothamer, D.S., Jennings, J.H. Study of the knocking propensity of 2,5-dimethylfuran–gasoline and ethanol–gasoline blends. *Fuel* (2012) 98, 203–212.
8. Wang, C., Xu H., Daniel R., Ghafourian A., Herreros J.M., Shuai S., Ma, X. Combustion characteristics and emissions of 2-methylfuran compared to 2,5-dimethylfuran, gasoline and ethanol in a DISI engine. *Fuel* (2013) 103, 200–211.
9. Datye, A.K., Xiong, H., Wang T., Shanks B.H. Tuning the Location of Niobia/Carbon Composites in a Biphasic Reaction: Dehydration of D-Glucose to 5-Hydroxymethylfurfural. *Catal. Lett.* (2013) 143, 509–516.
10. [http://www.tendencias21.net/Consiguen-un-combustible-de-alto-rendimiento-a-partir-del-azucar\\_a1649.html](http://www.tendencias21.net/Consiguen-un-combustible-de-alto-rendimiento-a-partir-del-azucar_a1649.html). Consultado Abril 2015.
11. R. Chang, Química. Ed. Mc.Graw Hill, 6<sup>ta</sup>. Ed. Cap. 24, 945-962.

12. Flora Acuña Arias, Química Orgánica, Ed. Universidad Estatal a Distancia, San José Costa Rica 2006; pag. 31
13. Garritz Ruiz, A., Chamizo Guerrero J.A. Tú y la Química, Ed. Pearson, Educación de México 2001.
14. <http://www.sigmaaldrich.com/sigma-aldrich/home.html>. Consultado en abril de 2015.
15. Mejía, A., Segura, H., Cartes M., Coutinho J.A.P. Vapor–Liquid Equilibrium, Densities, and Interfacial Tensions of the System Hexane + 2,5-Dimethylfuran. *J. Chem. Eng. Data* (2012) 57, 2681–2688.
16. Whalley, The compression of liquids. Experimental Thermodynamics, Vol. II Chapter 9, 421-500, Butterworths.
17. Zúñiga Moreno, A. Propiedades Volumétricas de Fluidos Puros y Mezclas por el Método de Tubo Vibrante, hasta 250 bar y 90 °C. Tesis de Maestría, SEPI-ESIQIE-IPN, México, D. F., 1999, 142 pp.
18. Manual de Operación, Densímetro: Modelo DMA 4500 M, Anton-Paar Austria, 200 pp.
19. Baragi J.G., Aralaguppi, M.I., Kariduraganavar, M.Y., Kulkarni, S.S., Kittur, A.S., Aminabhavi T.M. Excess properties of the binary mixtures of methylcyclohexane + alkanes (C6 to C12) at T = 298.15 K to T = 308.15 K. *J. Chem. Thermodynamics* (2006) 38, 75–83.
20. González, B., Domínguez, A., Tojo, J.: Viscosities, densities and speeds of sound of the binary systems: 2-propanol with octane, or decane, or dodecane at T = (293.15, 298.15, and 303.15) K. *J. Chem. Thermodyn.* (2003) 35, 939–953.
21. Landaverde-Cortes, D.C., Estrada-Baltazar, A., Iglesias-Silva, G.A.: Densities and viscosities of mtbe + heptane or octane at p = 0.1 MPa from (273.15 to 363.15) K. *J. Chem. Eng. Data* (2007) 52, 1226–1232.
22. Cisneros-Pérez E., Reza-San Germán C.M., Manríquez-Ramírez M.E., Zúñiga-Moreno A. Densities and excess molar volumes of alkane (heptane, octane, nonane, or decane) + thiophene from T = 293.15 to 313.15 K. *J. Sol. Chem.* (2012) 41, 1054-1066.

23. Rivas, M.A., Iglesias, T.P., Pereira, S.M., Banerji N. On the permittivity and density measurements of binary systems of {triglyme + (n-nonane or n-dodecane)} at various temperatures. *J. Chem. Thermodynamics* (2005) 37, 61–71
24. Zúñiga-Moreno A., Reza-San Germán C.M., Rojas-Valencia O.G., Juárez-Camacho E.P. Volumetric properties for the binary mixture nonane + decane at temperature from T= 283.15 to 353.15 K and p = 0.7 atm. *J. Sol. Chem.* (2011) 40, 621-631.
25. Queimada, A.J., Marrucho, I.M., Coutinho, J.A.P., Stenby, E.H.: Viscosity and Liquid Density of Asymmetric n-Alkane Mixtures: Measurement and Modeling. *Int. J. Thermophys.* (2005) 26, 47–61.
26. Zhang L., Guo Y., Xiao, J., Gong, X. Density, Refractive Index, Viscosity, and Surface Tension of Binary Mixtures of exo-Tetrahydrodicyclopentadiene with Some n-Alkanes from (293.15 to 313.15) K. *J. Chem. Eng. Data* (2011) 56, 4268–4273.
27. Aminabhavi, T.M., Gopalkrishna B. Densities, Viscosities, Refractive Indices, and Speeds of Sound of the Binary Mixtures of Bis(2-methoxyethyl) Ether with Nonane, Decane, Dodecane, Tetradecane, and Hexadecane at 298.15, 308.15, and 318.15 K. *J. Chem. Eng. Data* (1994) 39, 529-534.
28. García Hernández A. Densidades de los sistemas binarios heptano + octano y heptano + Nonano a temperaturas de 10 a 80 °C y presión atmosférica. Tesis de Licenciatura, ESIQIE, Instituto Politécnico Nacional, México, D.F., Octubre de 2012.
29. Smith, J.M., Van Ness, H.C., Abbot, M.M. Introducción a la termodinámica en ingeniería química. Ed. Mc Graw-Hill, 7ª ED, 2007; México.
30. Redlich, O., Kister, A.T. Algebraic representation of thermodynamic properties and the classification of solutions. *Ind. Eng. Chem.* (1948) 40, 345–348.