



---

---

**INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL**

**ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERÍA QUÍMICA E  
INDUSTRIAS EXTRACTIVAS**

**“PROPIEDADES VOLUMÉTRICAS DE LA MEZCLA BINARIA 2,5-  
DIMETILFURANO + OCTANO EN INTERVALOS AMPLIOS DE  
TEMPERATURA Y PRESIÓN”**

**TESIS**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
INGENIERO QUÍMICO PETROLERO**

**PRESENTA**

**ABRIL FERNANDA REYES TREJO**

**ASESOR: DR. OCTAVIO ELIZALDE SOLIS**

**CIUDAD DE MÉXICO**

**AGOSTO 2017**

# ÍNDICE

NOMENCLATURA	I
LISTA DE FIGURAS	IV
LISTA DE TABLAS	VIII
RESUMEN	IX
ABSTRACT	X
INTRODUCCIÓN	XI
<b>I. ANTECEDENTES</b>	<b>1</b>
1.1 Hidrocarburos como combustibles	1
1.1.1 Hidrocarburos presentes en el petróleo	2
1.1.2 Fracciones del petróleo	3
1.1.3 Número de octano	6
1.2 Características de los componentes utilizados	6
1.2.1 Características del octano	6
1.2.2 Características del 2,5-dimetilfurano	7
1.3 Propiedades $P, v, T$	8
1.3.1 Importancia de las propiedades $P, v, T$	8
1.3.2 Determinación del comportamiento $P, v, T$ de una sustancia pura	9
1.3.3 Determinación del comportamiento $P, v, T$ de un sistema binario	10
1.3.4 Modelos empíricos y semiempíricos para representar propiedades volumétricas	11
1.3.5 Propiedades volumétricas derivadas	11
1.4 Métodos comúnmente utilizados para la medición de densidades	12
1.4.1 Densímetro de inmersión	12
1.4.2 Picnómetro	13
1.4.3 Burnett isocórico	13
1.4.4 Densímetro de tubo vibrante	14
1.4.4.1 Principio de medición	15
<b>II. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL</b>	<b>17</b>
2.1 Equipo experimental	17
2.2 Preparación de los sistemas binarios	18
2.3 Procedimiento experimental para la medición de periodos de vibración	21
2.4 Calibración de los instrumentos	22
2.4.1 Calibración del densímetro: Modelo Continuo de Trayectorias Mecánicas Forzadas (FPMC)	22
2.4.2 Calibración de los termómetros de platino	25
2.4.3 Calibración del transductor de presión	26
2.5 Polinomios de calibración	26

2.5.1	Polinomio de calibración del densímetro	26
2.5.2	Polinomio de calibración de los termómetros de platino	27
2.5.3	Polinomio de calibración del transductor de presión	28
<b>III.</b>	<b>RESULTADOS EXPERIMENTALES</b>	<b>29</b>
3.1	Densidades experimentales	29
3.2	Comparación de los valores de densidad	34
3.3	Correlación de las densidades con un modelo semi-empírico	36
3.4	Volumen molar en exceso	38
3.5	Coefficiente de expansión térmica isobárico	40
3.6	Coefficiente de compresibilidad isotérmica	42
3.7	Coefficiente de presión térmica	44
3.8	Coefficiente de presión interna	46
	<b>CONCLUSIONES</b>	<b>49</b>
	<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>50</b>
Anexo A	Densidades de la mezcla octano + 2,5-dimetilfurano	54
Anexo B	Volúmenes molares de la mezcla octano + 2,5-dimetilfurano	61
Anexo C	Coefficiente de expansión térmica de la mezcla octano + 2,5-dimetilfurano	64
Anexo D	Coefficiente de compresibilidad isotérmica de la mezcla octano + 2,5-dimetilfurano	68
Anexo E	Coefficiente de presión térmica de la mezcla octano + 2,5-dimetilfurano	72
Anexo F	Coefficiente de presión interna de la mezcla octano + 2,5-dimetilfurano	76

# NOMENCLATURA

## ABREVIATURAS

C/H	Relación carbón-hidrógeno
DTV	Densímetro de tubo vibrante
DMF	2,5-dimetilfurano
FPMC	Calibración Mecánica de Trayectorias Forzadas
MON	Motor Octane Number
MTBE	Metil-terbutil-éter
PvT	Presión, volumen y temperatura
RON	Research Octane Number
TAME	Ter-amil-metil-éter

## VARIABLES

$a_0, a_1, a_2, b_0, b_1, b_2, C$	Parámetros de la ecuación de Tait
$a, b, c$	Parámetros del polinomio de calibración de los termómetros de platino
$A$	Amperaje
AARD	Desviación absoluta promedio
$\alpha_p$	Coefficiente de expansión térmica
$d_1, d_2, d_3$	Parámetros ajustados para el FPMC
$\partial$	Derivada parcial
$\sigma$	Desviación estándar
$\gamma_v$	Coefficiente de presión térmica
$k_T$	Coefficiente de compresibilidad

$K$	Rigidez transversal del tubo
$K_0$	Rigidez transversal del tubo a vacío y en función de T
$L$	Longitud del tubo
$L_0$	Longitud del tubo a vacío
$m$	Masa
$M_0$	Masa del tubo vacío
$Nd$	Número de datos
$P$	Presión
$P_i$	Presión interna
$\rho$	Densidad
$r$	Radio del tubo
$r_0$	Radio del tubo a vacío
$r_{e0}$	Radio externo del tubo a vacío
$r_i$	Radio interno del tubo.
$r_{i0}$	Radio interno del tubo a vacío
$q$	Número de parámetros de la ecuación de Tait
$T$	Temperatura
$\tau$	Periodo de vibración
$\tau_0$	Periodo de vibración del tubo a vacío en función de T
$u$	Incertidumbre combinada calculada
$v^E$	Volumen molar en exceso
$v_i$	Volumen interno del tubo
$W$	Peso molecular
$x$	Composición molar

## SUBÍNDICES

$C_8$	Octano
DMF	2,5-dimetilfurano
$m$	Mezcla
$T$	Total
$i$	Componente $i$
$abs$	Valor absoluto

## SUPERÍNDICES

$ref$	Valor de referencia
$exp$	Valor experimental
$calc$	Valor calculado

## LISTA DE FIGURAS

- Figura 1.1** Clasificación de los hidrocarburos.
- Figura 1.2** Tipos importantes de compuestos de hidrocarburos presentes en el petróleo.
- Figura 1.3** Estructura química del 2,5-dimetilfurano.
- Figura 1.4** Diagrama  $P, v, T$  de una sustancia pura que se comprime al congelarse.
- Figura 2.1** Diagrama esquemático del equipo experimental.
- Figura 2.2** Residuales del termómetro: ○ calentamiento; ● enfriamiento.
- Figura 3.1** Densidades experimentales de 2,5-dimetilfurano puro a diferentes temperaturas.
- Figura 3.2** Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.5033$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura 3.3** Densidades experimentales de octano puro a diferentes temperaturas.
- Figura 3.4** Desviaciones entre los valores de densidad del octano puro reportados en este trabajo y los publicados en la literatura: ▽ Ref. [31], ◇ Ref. [32], △ Ref. [33], ○ Ref. [34], ● Ref. [35], □ Ref. [36].
- Figura 3.5** Desviaciones entre los valores de densidad experimentales y los reportados en la literatura del 2,5-dimetilfurano: (rojo) Ref. [37], (azul) Ref. [38]; ○ 293 K, ▽ 313 K, □ 333 K.
- Figura 3.6** Volúmenes molares en exceso de la mezcla octano (1) + 2,5-dimetilfurano (2) respecto a la composición a diferentes presiones a 293.11 K.
- Figura 3.7** Volúmenes molares en exceso de la mezcla octano (1) + 2,5-dimetilfurano (2) respecto a la composición a diferentes presiones a 392.46 K.
- Figura 3.8** Coeficiente de expansión térmica isobárica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.1076$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura 3.9** Coeficiente de expansión térmica isobárica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.8846$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

- Figura 3.10** Coeficiente de compresibilidad isotérmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.1076$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura 3.11** Coeficiente de compresibilidad isotérmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.8846$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura 3.12** Coeficiente de presión térmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.1076$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura 3.13** Coeficiente de presión térmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.8846$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura 3.14** Coeficiente de presión interna de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.1076$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura 3.15** Coeficiente de presión interna de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.8846$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura A.1** Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.1076$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura A.2** Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.3038$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura A.3** Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.7001$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura A.4** Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.8846$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura B.1** Volúmenes molares en exceso de la mezcla octano (1) + 2,5-dimetilfurano (2) respecto a la composición a diferentes presiones a 313.73 K.
- Figura B.2** Volúmenes molares en exceso de la mezcla octano (1) + 2,5-dimetilfurano (2) respecto a la composición a diferentes presiones a 332.72 K.
- Figura B.3** Volúmenes molares en exceso de la mezcla octano (1) + 2,5-dimetilfurano (2) respecto a la composición a diferentes presiones a 352.64 K.
- Figura B.4** Volúmenes molares en exceso de la mezcla octano (1) + 2,5-dimetilfurano (2) respecto a la composición a diferentes presiones a 373.46 K.
- Figura C.1** Coeficiente de expansión térmica isobárica del 2,5-dimetilfurano puro respecto a la presión a diferentes temperaturas.

- Figura C.2** Coeficiente de expansión térmica isobárica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.3038$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura C.3** Coeficiente de expansión térmica isobárica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.5033$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura C.4** Coeficiente de expansión térmica isobárica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.7001$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura C.5** Coeficiente de expansión térmica isobárica del octano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura D.1** Coeficiente de compresibilidad isotérmica del 2,5-dimetilfurano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura D.2** Coeficiente de compresibilidad isotérmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.3038$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura D.3** Coeficiente de compresibilidad isotérmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.5033$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura D.4** Coeficiente de compresibilidad isotérmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.7001$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura D.5** Coeficiente de compresibilidad isotérmica del octano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura E.1** Coeficiente de presión térmica del 2,5-dimetilfurano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura E.2** Coeficiente de presión térmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.3038$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura E.3** Coeficiente de presión térmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.5033$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura E.4** Coeficiente de presión térmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.7001$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura E.5** Coeficiente de presión térmica del octano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas.

- Figura F.1** Coeficiente de presión interna del 2,5-dimetilfurano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas
- Figura F.2** Coeficiente de presión interna de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.3038$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura F.3** Coeficiente de presión interna de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.5033$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura F.4** Coeficiente de presión interna de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.7001$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.
- Figura F.5** Coeficiente de presión interna del octano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas.

## LISTA DE TABLAS

- Tabla 1.1** Características de las principales fracciones del petróleo.
- Tabla 1.2** Propiedades del 2,5-dimetilfurano como combustible comparadas con las propiedades de otros aditivos.
- Tabla 2.1** Pureza de las sustancias utilizadas.
- Tabla 2.2** Composiciones en fracción mol de las mezclas octano + 2,5-dimetilfurano.
- Tabla 2.3** Parámetros de calibración del polinomio correspondientes a cada termómetro utilizado.
- Tabla 3.1** Densidades experimentales de 2,5 dimetilfurano puro.
- Tabla 3.2** Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.5033$ .
- Tabla 3.3** Densidades experimentales de octano puro.
- Tabla 3.4** Parámetros y desviaciones de las mezclas octano + 2,5-dimetilfurano y de sus componentes puros, obtenidos utilizando la ecuación tipo Tait.
- Tabla A.1** Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.1076$ .
- Tabla A.2** Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.3038$ .
- Tabla A.3** Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.7001$ .
- Tabla A.4** Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.8846$ .

## RESUMEN

En este trabajo se determinaron experimentalmente las densidades del sistema binario conformado por 2,5-dimetilfurano y octano. Las mediciones fueron realizadas en el intervalo de temperatura de 293.11 K a 392.46 K con incrementos de 20 K; en cada isoterma, las presiones cubrieron el intervalo de 0.1 MPa a 70 MPa. El sistema se analizó en todo el intervalo de composiciones las cuales fueron  $x_{\text{octano}} = (0.0000, 0.1076, 0.3038, 0.5033, 0.7001, 0.8846, 1.0000)$ .

Las densidades del sistema binario se obtuvieron a través de densimetría de tubo vibrante, considerado un método indirecto. En este método se obtiene el periodo de oscilación de la mezcla a composición, presión y temperatura constante. El periodo de oscilación es convertido a densidad a través de un método de calibración; para este caso se utilizó la Calibración Mecánica de Trayectoria Forzada (FPMC, por sus siglas en inglés).

El equipo principal es un densímetro de tubo vibrante (DTV) de la marca Anton-Paar que contiene en su interior un tubo en forma de U donde se mide la propiedad de la mezcla; además se cuenta con una celda fabricada con Hastelloy C-276 para preparar y suministrar al DTV la mezcla a composición conocida.

Posteriormente, se calcularon los volúmenes molares en exceso de la mezcla a partir de los correspondientes valores de volumen molar de cada mezcla y de los compuestos puros.

Finalmente, las densidades experimentales del sistema binario se representaron a partir de una modificación a la ecuación semiempírica propuesta por Tait, con la cual se obtuvieron propiedades termodinámicas derivadas: coeficiente de expansión térmica isobárica, coeficiente de compresibilidad isotérmica, presión interna y coeficiente de presión térmica.

## ABSTRACT

In this work, experimental densities were determined for the binary system constituted by 2,5-dimethylfuran and octane. Measurements were performed in the temperature range of 293.11 – 392.46 K, each 20 K. Pressure conditions were in the range of 0.1 - 70 MPa for each isotherm. This system was studied in the whole range of composition; the fixed compositions were  $x_{\text{octane}} = (0.0000, 0.1076, 0.3038, 0.5033, 0.7001, 0.8846, 1.0000)$ .

Densities for this system were obtained by vibrating tube densimetry, considered as indirect method. The oscillating period of the sample is measured at constant composition, pressure and temperature. The oscillating period is changed to density through a calibration method. The Forced Path Mechanical Calibration method (FPMC) was used for this purpose.

The main equipment is a vibrating tube densimeter (VTD) supplied by Anton-Paar, which internally contains an internal U-shaped tube where the sample property is measured. Besides, a cell made of Hastelloy C-276 is used to prepare and feed to the DTV the sample at fixed composition.

Afterwards, excess molar volumes were calculated from the corresponding molar volume for each mixture and pure compounds.

Finally, experimental densities were represented using a modification of the semiempirical equation proposed by Tait. Thermodynamic derived properties were obtained from this equation: isobaric expansivity coefficient, isothermal compressibility coefficient, thermal pressure coefficient and internal pressure coefficient.

## INTRODUCCIÓN

El aumento en la demanda de combustibles debido al crecimiento de la población y al desarrollo industrial, aunado a la creciente preocupación por el deterioro ambiental causado por las emisiones de gases de efecto invernadero que se generan a partir de la quema de combustibles fósiles y su fabricación, ha dirigido la atención a la búsqueda de nuevas opciones que reemplacen total o parcialmente a los combustibles derivados del petróleo por nuevos combustibles derivados de fuentes renovables. Estos reciben el nombre de biocombustibles, ya que pueden ser obtenidos a partir de la biomasa; los biocombustibles pueden ser utilizados como mejoradores de las características de los combustibles fósiles y así hacer más eficiente su uso.

Una propuesta a esta demanda es el 2,5-dimetilfurano, compuesto obtenido a partir de la fructuosa, y que tiene propiedades fisicoquímicas, como alto número de octano RON (119), alto punto de ebullición (365.15 K) y baja solubilidad en agua, que lo convierten en una alternativa como aditivo de los combustibles fósiles o como combustible puro para el transporte [2].

Con el uso del 2,5-dimetilfurano se puede transformar una importante cantidad de biomasa en un combustible para el transporte. Al emplearlo como aditivo se podría mejorar la calidad de los combustibles fósiles utilizados actualmente, reduciendo de igual manera el impacto ambiental.

Desde que se destacó el potencial del 2,5-dimetilfurano como nuevo biocombustible y aditivo de combustible, se han realizado diversas investigaciones sobre el rendimiento de la combustión y las características del 2,5-dimetilfurano y mezclas de combustibles con este compuesto. [2]

La justificación de la presente tesis radica en la escasez de información sobre las propiedades volumétricas, a altas presiones y altas temperaturas, de la mezcla 2,5-dimetilfurano y octano, alciano que representa las características principales de las gasolinas utilizadas comercialmente. Las propiedades volumétricas permiten el análisis de otras propiedades termodinámicas derivadas de los sistemas, así como para el diseño y optimización de procesos y para el desarrollo de modelos de estado.

Por lo tanto, en este trabajo se obtuvieron las densidades de la mezcla binaria 2,5-dimetilfurano y octano en el intervalo de 293.15 K a 393.15 K y desde 0.1 MPa hasta 70 MPa. Además, se reportan las propiedades termodinámicas derivadas con la ecuación semiempírica tipo Tait.

En el capítulo uno, se describen los conceptos básicos relacionados con los hidrocarburos, su presencia en el petróleo crudo y su uso como combustibles. De igual forma se explican las principales características de las dos sustancias que conforman las mezclas estudiadas. Además, se menciona la importancia de las propiedades volumétricas, cómo se determinan y los modelos utilizados para representarlas.

En el segundo capítulo se muestran algunos de los métodos que se utilizan para la obtención de densidades de forma experimental. En este capítulo también se describen las características del equipo utilizado, su principio de medición, el procedimiento experimental desarrollado para la determinación de densidades y las calibraciones requeridas.

El capítulo tres concentra los resultados experimentales y su correlación. Asimismo, contiene los resultados de volumen molar y de las propiedades termodinámicas derivadas, así como su discusión.

# **CAPÍTULO I:**

## **ANTECEDENTES**

El uso más extendido a nivel mundial de los derivados del petróleo es como proveedores de energía. El primer estímulo para la explotación del crudo a gran escala fue su uso para el alumbrado; sin embargo, la explotación del petróleo se desarrollaría con lentitud hasta principios del siglo XX, en que el perfeccionamiento del motor de combustión interna que consume grandes cantidades de combustible, haría nacer a las grandes empresas petroleras, interesadas en desarrollar métodos adecuados para refinar el petróleo y obtener la mayor cantidad posible de gasolina [4].

El empleo actual de los motores de combustión interna para la transportación es tan común que ha aumentado notablemente la demanda y precio de los combustibles fósiles. Además de que su uso genera grandes cantidades de CO<sub>2</sub> causando graves daños ambientales. Por lo anterior, se han buscado nuevas alternativas de combustibles provenientes de compuestos orgánicos (denominados biocombustibles), cuya obtención y uso sea más amigable con el ambiente. El 2,5-dimetilfurano se presenta como una de esas nuevas alternativas y es de interés actual su estudio como combustible o como aditivo en combustibles fósiles [2].

El presente capítulo recopila información sobre las sustancias analizadas en este trabajo, además de contextualizar la importancia y uso de éstas en el entorno global.

### **1.1 HIDROCARBUROS COMO COMBUSTIBLES**

Los hidrocarburos son sustancias orgánicas formadas por átomos de hidrógeno y carbono de los que derivan todos los compuestos orgánicos.

Las propiedades físicas y químicas de cualquier tipo de hidrocarburo o molécula dependen, no sólo de la cantidad de átomos de carbono en la molécula, sino también de la naturaleza de los enlaces químicos entre ellos. Los átomos de carbono se unen fácilmente entre sí en diferentes formas y pueden constituir más compuestos químicos que ningún otro elemento porque tiene la capacidad de

formar enlaces carbono-carbono sencillos, dobles y triples, además se unen entre sí formando estructuras cíclicas [5,6].

En función de su estructura química, los hidrocarburos se pueden clasificar en dos clases diferentes, mostradas en la Figura 1.1.

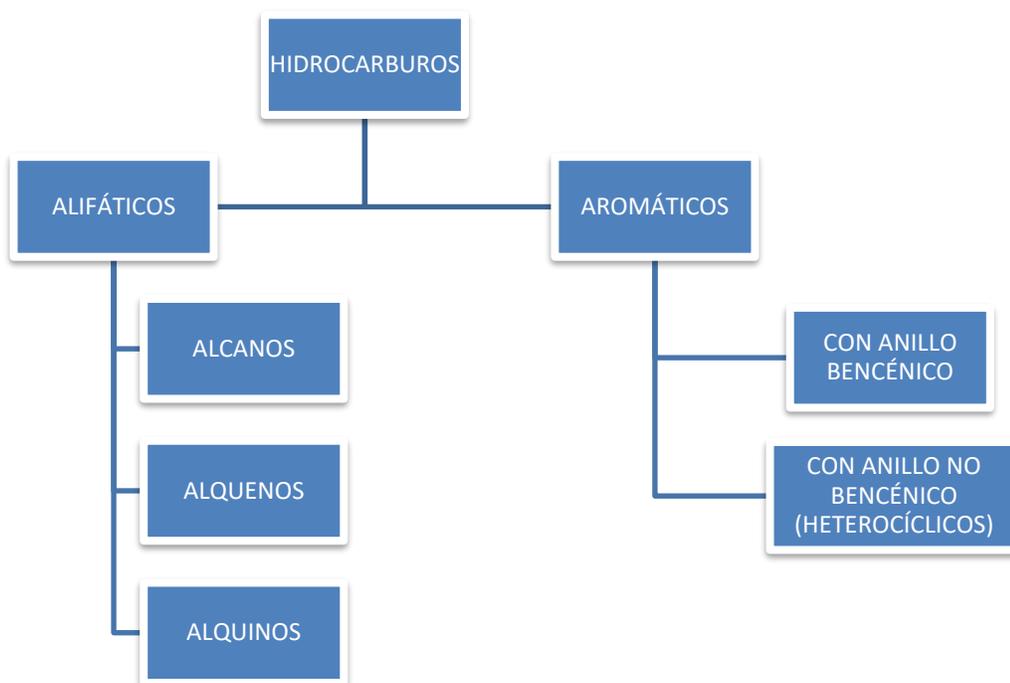


Figura 1.1 Clasificación de los hidrocarburos. [7]

### 1.1.1 HIDROCARBUROS PRESENTES EN EL PETRÓLEO

El petróleo crudo es esencialmente una mezcla de hidrocarburos, los cuales se clasifican en parafinas, olefinas, aromáticos y naftenos, sustancias que también se producen mediante el proceso de refinación y cuya estructura general se muestra en la Figura 1.2. De igual importancia son las olefinas, las cuales se producen en determinadas operaciones de refinación destinadas principalmente a la producción de gasolinas.

En la Figura 1.2 se puede observar la relación carbono-hidrógeno de estos compuestos, los componentes aromáticos tienen mayor proporción de carbono-hidrógeno (C/H) que los naftenos, los cuales, a su vez, tienen mayor proporción de C/H que las parafinas.

A mayor proporción C/H más denso será el crudo, por ende, el proceso de refinación que se requiere para producir gasolina será más costoso y complicado.

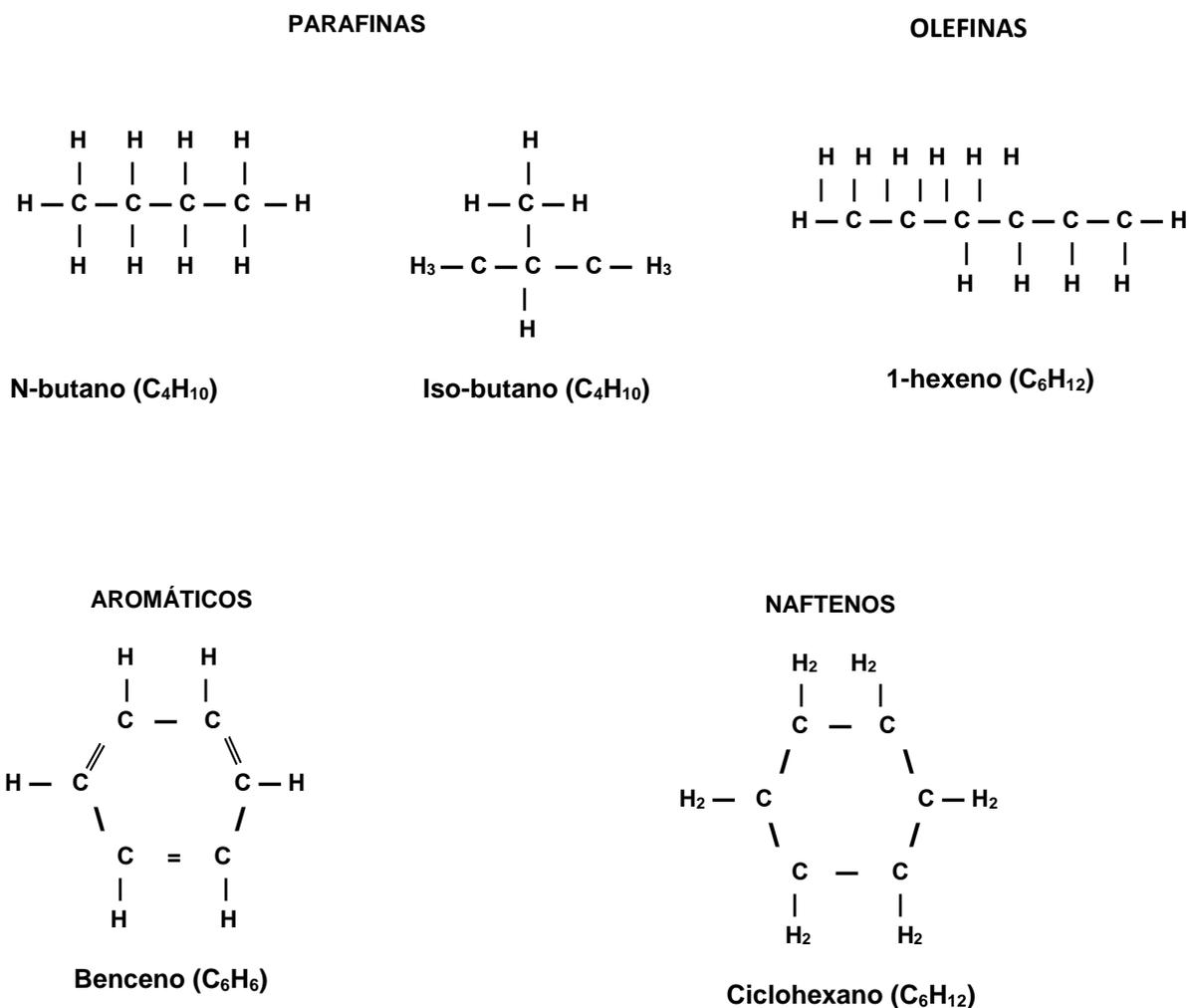


Figura 1.2 Tipos importantes de compuestos de hidrocarburos presentes en el petróleo. [5]

### 1.1.2 FRACCIONES DEL PETRÓLEO

Para aprovechar mejor los diversos elementos que lo componen, el petróleo se somete a un proceso de refinación, que consiste principalmente en separar las fracciones de hidrocarburos. El método más eficaz es la destilación, procedimiento que consiste en calentar el petróleo hasta su punto de ebullición, y a continuación se recogen y separan los distintos tipos de moléculas, comenzando por las más pequeñas o volátiles [6]. Durante la destilación, el petróleo crudo se convierte en fracciones donde cada una es una mezcla de un número limitado de hidrocarburos con un intervalo de ebullición específico.

Los productos del proceso de destilación primaria del crudo son: gas licuado, gasolina, nafta ligera y pesada, combustóleos y crudo reducido; este último es alimentado a una torre de destilación al vacío cuya función es separarlo en gasóleo ligero y pesado, aceites lubricantes, asfalto y coque [8].

Las torres destiladoras son equipos constituidos por altos cilindros de acero, que pueden alcanzar hasta los 30 metros de altura, y que, para facilitar la separación de los diferentes componentes del petróleo, se encuentran divididas interiormente por platos perforados que se colocan a diferentes intervalos de distancia desde el fondo hasta la cima. Como consecuencia del gradiente térmico existente en el interior de la columna, cada bandeja tiene una temperatura más baja que la inferior.

Los vapores provenientes del petróleo crudo calentado se elevan por el interior de la columna a través de los platos. Cuando los vapores entran en contacto con un plato cuya temperatura es inferior a su punto de ebullición, se condensan. Los hidrocarburos más volátiles llegan hasta la parte más alta de la torre, mientras que los menos volátiles se condensan cerca de la base. [9]

Como la destilación no puede separar por completo los componentes del petróleo crudo, no se obtienen hidrocarburos puros como producto. [10]

Las fracciones del petróleo no son el producto final de una refinería, de hecho, son sometidas a procesos fisicoquímicos más específicos para obtener las características exigidas por los usuarios y por las regulaciones gubernamentales. Después de la destilación, las fracciones del petróleo son transformadas en productos del petróleo. [10]

La Tabla 1.1 muestra las principales fracciones del petróleo, sus usos más comunes y algunas de sus características.

Tabla 1.1 Características de las principales fracciones del petróleo. [11]

<b>FRACCIÓN DEL PETRÓLEO</b>	<b>USO</b>	<b>CARACTERÍSTICAS</b>
Gas licuado	Doméstico e industrial	Es el gas que resulta de la mezcla de propano y butano. Es la fracción más ligera del petróleo crudo.
Gasolinas	Industria automotriz	Nombre que se aplica de una manera amplia a los productos más ligeros obtenidos por la destilación del petróleo crudo. Tiene un punto inicial de ebullición entre 35 y 49°C y punto final o temperatura final de ebullición entre 221 y 225°C.
Turbosina	Combustible para aviones de retropropulsión	La fracción de turbosina tiene un límite de temperatura de ebullición de 200 a 300°C máximo.
Queroseno	Combustible para la cocción de alimentos, alumbrado, en motores, en equipos de refrigeración y como solvente para bitúmenes e insecticidas.	Combustible líquido constituido por la fracción del petróleo crudo que se destila entre los 150 y 300°C.
Diésel	Se emplea como combustible en las ramas automotriz e industrial.	Combustible líquido que se obtiene de la destilación atmosférica del petróleo crudo entre los 200 y 380 °C.
Parafinas	Se utilizan principalmente en la fabricación de parafinas cloradas, velas, veladoras, y papel encerado.	Material sólido blanco, translucido, inodoro y quebradizo.
Combustóleo	Combustible industrial, para generación de electricidad, en locomotoras y barcos; en las refinerías se utiliza en los calentadores a fuego directo.	Es una fracción pesada del petróleo crudo que se prepara por mezcla con otros residuales, como residuo catalítico, residuo de reductora y residuo de H-oil.
Asfaltos	Se utiliza para revestimientos y pavimentación, también como impermeabilizante y sellador.	Fracción pesada del petróleo crudo de color negro o café oscuro. Su consistencia puede variar de líquido a sólido.

### 1.1.3 NÚMERO DE OCTANO

El número de octano u octanaje es una medida de la calidad y capacidad antidetonante de los combustibles para evitar las detonaciones y explosiones en las máquinas de combustión interna, de tal manera que se libere o se produzca la máxima cantidad de energía útil.

Para determinar la calidad antidetonante de una gasolina, se efectúan corridas de prueba en un motor, de donde se obtienen dos parámetros diferentes:

- El Research Octane Number (Número de Octano de Investigación). Se representa como RON y se determina mediante una corrida de prueba en una máquina operada a una velocidad de 600 revoluciones por minuto y a una temperatura de entrada de aire de 51.7°C
- El Motor Octane Number (Número de Octano del Motor). Se representa como MON y se obtiene mediante una corrida de prueba en una máquina operada a una velocidad de 900 revoluciones por minuto y con una temperatura de entrada de aire de 149°C.

Para propósitos de comercialización y distribución de las gasolinas, los productores determinan el octanaje comercial, como el promedio de los números de octano de investigación (RON) y el octano del motor (MON). [12]

El uso de combustibles con bajo número de octano tiene como consecuencia la generación de detonaciones o explosiones en el interior de las máquinas de combustión interna, junto con un mal funcionamiento y bajo rendimiento del combustible, cuando el vehículo está en movimiento, aunado a una elevada emisión de contaminantes.

Por tanto, es de suma importancia el uso de sustancias que al ser adicionadas a las gasolinas mejoren su octanaje.

## 1.2 CARACTERÍSTICAS DE LOS COMPONENTES DE UTILIZADOS

### 1.2.1 CARACTERÍSTICAS DEL OCTANO

El octano es un alcano lineal de fórmula  $C_8H_{18}$ , su peso molecular es de 114.23 g/mol [7]. Entre sus propiedades se encuentran:

- Punto de ebullición: 125.7 °C
- Punto de fusión: -56.8 °C
- Solubilidad en agua: Insoluble
- Densidad relativa: 0.70

El octano y sus isómeros forman parte de diferentes tipos del petróleo crudo y se utilizan como combustibles.

El iso-octano, sustancia poco detonante, fue utilizado en la escala arbitraria del número de octano, seleccionado como el punto de referencia 100. [12]

### 1.2.2 CARACTERÍSTICAS DEL 2,5-DIMETILFURANO

El 2,5-dimetilfurano es un compuesto heterocíclico. Presenta una coloración amarilla clara con apariencia aceitosa. Su fórmula molecular es  $(\text{CH}_3)_2\text{C}_4\text{H}_2\text{O}$  y su estructura se muestra en la Figura 1.3.

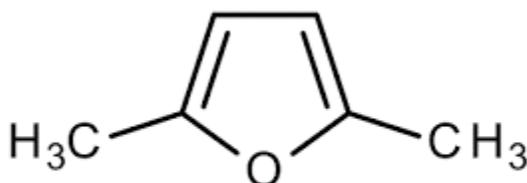


Figura 1.3 Estructura química del 2,5-dimetilfurano. [2]

El 2,5-dimetilfurano tiene mayor estabilidad química que el etanol, el cual también se considera y utiliza como biocombustible. Adicionalmente, el 2,5-dimetilfurano es insoluble en agua, por lo que no absorbe la humedad de la atmósfera lo cual facilita su transporte y almacenamiento. Se obtiene removiendo 5 de los 6 átomos presentes en la fructuosa, que se encuentra en las frutas y hortalizas.

Tabla 1.2 Propiedades del 2,5-dimetilfurano como combustible comparadas con las propiedades de otros aditivos. [3, 13, 14, 15]

PROPIEDADES	2,5-dimetilfurano	ETANOL	GASOLINA	Metil-terbutil-éter	Teramil-éter
Fórmula Molecular	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	C <sub>2</sub> -C <sub>14</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> O
Masa Molecular (kg/kmol)	96.13	46.07	100-105	88.15	102.18
Densidad a 20°C ( kg/m <sup>3</sup> )	889.7	790.7	744.6	740	765.9
Solubilidad en agua a 25 °C (mg/ml)	Insoluble ≤ 1.47	Alta solubilidad ≥100	insoluble	Soluble ≤ 42	Solubilidad escasa ≤ 10.71
Relación H/C	1.33	3.00	1.865	2	2.33
Relación O/C	0.17	0.5	0	0.17	0.17
Número de octano (RON)	119	110	95.8	117	108
Temperatura de autoignición (°C)	285.85	423	257	373.89	415

## 1.3 PROPIEDADES PvT

### 1.3.1 IMPORTANCIA DE LAS PROPIEDADES PvT

La termodinámica proporciona un gran número de ecuaciones que relacionan a las propiedades de las sustancias. A partir de datos obtenidos experimentalmente o de forma teórica, la termodinámica permite el desarrollo de un conjunto de

ecuaciones, con los cuales se pueden obtener propiedades derivadas las cuales son de utilidad para conocer el comportamiento de las sustancias a condiciones establecidas. Además, nos permiten obtener información que describe las propiedades observadas de una mezcla desde el punto de vista de las interacciones microscópicas.[16]

Los valores de las propiedades físicas de las sustancias y de sus mezclas son necesarios en la Ingeniería Química, ya que muchas de las aplicaciones de la termodinámica se relacionan con casos en los que el sistema experimenta transformaciones de estado. La predicción de las propiedades PvT tiene importancia fundamental en fines específicos, como son la medición de gases y el diseño de recipientes y tuberías. [17]

### **1.3.2 DETERMINACIÓN DEL COMPORTAMIENTO PvT DE UNA SUSTANCIA PURA**

Las propiedades PvT de una sustancia pura tienen una dependencia recíproca que se puede representar mediante un diagrama de tres dimensiones como el mostrado en la Figura 1.4.

Las regiones, sólida, líquida y gas, son fáciles de apreciar en este diagrama. Las regiones bifásicas son las que representan dos fases en el equilibrio, en este diagrama existen 3: líquido-vapor (L-V), sólido-líquido (S-L) y sólido- vapor (S-V). En las regiones bifásicas la presión y la temperatura no son independientes, esto quiere decir que a un valor de presión le corresponde un solo valor de temperatura de equilibrio y viceversa. [17]

La línea triple indica las condiciones en las que pueden coexistir en equilibrio las tres fases.

El punto crítico indica la mayor presión y la mayor temperatura en que pueden coexistir en equilibrio el líquido y el vapor.

El diagrama tridimensional PvT es útil para visualizar relaciones generales entre las tres fases de una sustancia pura. Sin embargo, es conveniente trabajar con proyecciones bidimensionales. [13]

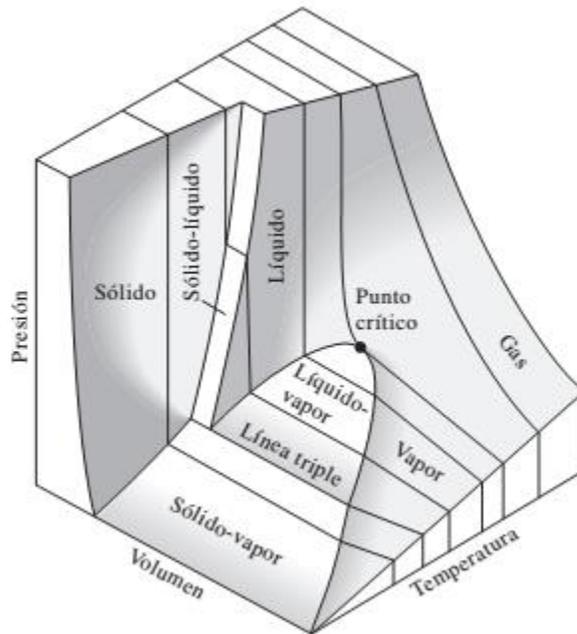


Figura 1.4 Diagrama PVT de una sustancia pura. [18]

### 1.3.3 DETERMINACIÓN DEL COMPORTAMIENTO PVT DE UN SISTEMA TERMODINÁMICO

Para describir el comportamiento de un sistema termodinámico se puede desarrollar una ecuación de estado, definida como una expresión algebraica que relaciona las variables de estado.

El comportamiento de los sistemas reales es generalmente bastante complicado para ser descrito fielmente por ecuaciones sencillas. Por lo tanto, las ecuaciones que se puede denominar más simples describen modelos de comportamiento que se adecuan de forma aproximada al comportamiento real dependiendo de la sustancia y de las condiciones.

En particular; las ecuaciones que se aplican a los sistemas PVT y que relacionan las variables de presión, temperatura y volumen se denominan Ecuaciones de Estado Térmicas.

Debido a que la presión y la temperatura son relativamente fáciles de medir de manera experimental, las ecuaciones de estado presentan comúnmente la forma:

$$dv = \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P dT + \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T dP \quad (1.1)$$

Donde  $v$  se refiere al volumen,  $T$  a la temperatura y  $P$  a la presión, las derivadas parciales tienen significado físico y son cantidades mensurables. A esta relación se le denomina ecuación de estado.

### 1.3.4 MODELOS EMPÍRICOS Y SEMIEMPÍRICOS PARA REPRESENTAR PROPIEDADES VOLUMÉTRICAS

La representación precisa de las propiedades volumétricas de las sustancias a diferentes condiciones suele ser compleja y requiere de modelos que las representen adecuadamente. Las ecuaciones empíricas y semiempíricas son una solución a esta problemática, cabe mencionar que se limitan a un ajuste en los parámetros que contienen. [19]

Las ecuaciones empíricas y semiempíricas ofrecen una buena precisión en la representación de la densidad, por tanto, arrojan menores errores en el cálculo de las propiedades termodinámicas derivadas.

### 1.3.5 PROPIEDADES VOLUMÉTRICAS DERIVADAS

Las propiedades termodinámicas como la energía interna, el coeficiente de presión térmico o la entropía no se pueden medir directamente en un sistema, por lo tanto, es esencial desarrollar algunas relaciones entre las propiedades termodinámicas más comunes y relativamente fáciles de medir. Así, las propiedades físicas que no es posible medir pueden expresarse, entonces, en términos de propiedades medibles.

Los cambios de presión, volumen y temperatura se pueden relacionar unos respecto a otros a través de derivadas parciales, las cuales son de utilidad porque pueden calcularse fácilmente. La relación de éstas propiedades da lugar a seis derivadas parciales:

$$\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P, \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T, \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v, \left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T, \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_v, \left(\frac{\partial T}{\partial v}\right)_P$$

De estas derivadas parciales, sólo dos son independientes:

$$\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P \quad \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T$$

Por lo cual, las cuatro derivadas restantes se pueden determinar a partir de éstas dos.

Estas derivadas parciales son conocidas como coeficientes térmicos, las propiedades que las conforman pueden ser medidas experimentalmente, y a partir de ellos se pueden calcular otras propiedades como el coeficiente de presión térmica y el coeficiente de presión interna.

Entre sus aplicaciones se encuentran el desarrollo de modelos termodinámicos (como ecuaciones de estado) [20], el conocimiento de la variación de una coordenada termodinámica en un proceso, el cálculo del trabajo en un proceso cuasi-estático [21] y el modelado, correlación y desarrollo de nuevos procesos. [22]

## **1.4 MÉTODOS COMÚNMENTE UTILIZADOS PARA LA MEDICIÓN DE DENSIDADES.**

En este capítulo se describen las técnicas comúnmente utilizadas para la determinación de densidades, la metodología experimental, el equipo utilizado y su calibración. La densidad se define como la masa por unidad de volumen de una sustancia a ciertas condiciones, que son presión y temperatura. La medición de la densidad de una sustancia a altas presiones es una tarea compleja, por lo cual se han desarrollado diversas técnicas que permitan obtener mediciones precisas en amplios intervalos de presión y temperatura. Algunas de las técnicas utilizadas para la obtención de densidades son descritas en este trabajo.

### **1.4.1 DENSÍMETRO DE INMERSIÓN**

También es conocido como hidrómetro, es un cuerpo de vidrio que se introduce a la mezcla y que utiliza el principio de flotación de Arquímedes para medir las densidades. Cuanto mayor sea la densidad de la muestra, menos se hundirá el hidrómetro. Este instrumento de medida se compone de un cilindro con un bulbo

pesado en uno de sus extremos permitiéndole flotar en posición vertical, la fuerza ejercida por el hidrómetro inmerso en el fluido de interés es exactamente igual al peso del fluido desplazado.

Esta técnica generalmente requiere de grandes volúmenes de muestra para llevarse a cabo, además la toma de la lectura depende del operario por lo que la precisión es limitada. Se recomienda su uso para el control rápido de valores de densidad aproximados, principalmente para el control de procesos. La incertidumbre combinada de este instrumento se encuentra en el orden de  $1.00 \text{ kg/m}^3$ . [23]

#### **1.4.2 PICNÓMETRO**

Este método es ampliamente utilizado para la medición de densidades de líquidos. Consiste en un recipiente metálico o de vidrio de masa y volumen interno conocidos. La masa del fluido de interés contenida en el picnómetro es medida en múltiples ocasiones con una balanza, para disminuir incertidumbres. Con lo que la densidad se obtiene a través de una relación directa de la masa del fluido contenido en el picnómetro entre el volumen interno del mismo. Si se requieren condiciones específicas de temperatura, el picnómetro puede colocarse dentro de una recámara con temperatura controlada y demás se puede utilizar un sistema de presurización si se requiere realizar mediciones a presiones altas.

La mayor problemática asociada al uso de picnómetros es que en ocasiones deben ser desplazados de la cámara que se encuentra en condiciones isotérmicas para realizar las mediciones de masa, además para mantener el instrumento a altas presiones se requiere de diversos instrumentos que mantengan la presión necesaria y que permitan realizar las mediciones de masa con el picnómetro conectado al equipo que utiliza. La incertidumbre sobre la densidad es del orden entre 0.1 y 1% dependiendo de los arreglos utilizados. [24]

#### **1.4.3 BURNETT ISOCÓRICO**

Este equipo fue propuesto por Burnett para la determinación de densidades de gases. A diferencia de los métodos anteriormente expuestos, esta técnica no requiere del conocimiento de la masa o el volumen de la muestra para determinar su densidad.

El principio de medición de este método está basado en expansiones sucesivas del gas de un recipiente de volumen definido a otro a temperatura estable. Como las variaciones se llevan a cabo a condiciones isotérmicas y además se determina la variación de la presión, se pueden determinar los cambios en la compresibilidad. En mediciones de densidad se obtienen valores de incertidumbre del orden  $\pm 0.15\%$ . Esto se obtiene con precisiones típicas sobre mediciones de presión de  $\pm 0.008$  bar y de temperatura de  $\pm 0.008$  °C. [24]

#### 1.4.4 DENSÍMETRO DE TUBO VIBRANTE

El densímetro de tubo vibrante es un instrumento que mide el periodo de oscilación de un tubo en forma de U, de material sólido e inerte, lleno de un fluido del cual se interesa conocer su densidad, a condiciones de temperatura y presión establecidas. Su principio de medición se encuentra ampliamente explicado en la sección 2.1.4.1.

Los densímetros de tubo vibrante están comercialmente disponibles, son instrumentos muy eficaces y permiten obtener rápidamente las mediciones de densidades precisas de sustancias en un amplio intervalo de presión y temperatura. Además, son ampliamente utilizados para llevar a cabo mediciones de alta presión de la densidad de los fluidos con fines industriales y científicos.

La densimetría de tubo vibrante es una técnica utilizada en el control de calidad en la producción de líquidos y gases industriales, o en el control de procesos. En investigación científica son utilizados para la obtención de propiedades  $PvT$  y en el desarrollo o validación de ecuaciones de estado, ya que proporcionan valores muy precisos de densidad.

Estos densímetros presentan las ventajas de requerir poco volumen de muestra, amplios intervalos de operación de temperatura y presión, alta precisión en la medida, fácil manejo, rapidez en la medida, visualización digital del período y escaso mantenimiento. Se ha comprobado que el densímetro de tubo vibrante puede proporcionar datos de calidad en zonas de difícil medición, como la región crítica de un fluido [24].

Debido a que el presente trabajo requiere de mediciones precisas de densidad a altas presiones y altas temperaturas, con un sistema que permita el control estricto de estas variables, además de las ventajas expuestas en los párrafos anteriores, la densimetría de tubo vibrante fue elegida como la técnica para realizar las mediciones de densidad necesarias para el desarrollo de esta Tesis.

#### **1.4.4.1 PRINCIPIO DE MEDICIÓN DEL DTV**

El tubo vibrante en forma de U es una técnica de medición indirecta que determina la densidad de líquidos y gases, basado en una medición electrónica del periodo de oscilación, a partir de la cual se calcula la densidad. Todo esto a una presión y temperatura establecidas.

Para comenzar con la experimentación, la muestra a analizar se coloca en el tubo del DTV donde es sometido a vibración. La frecuencia de oscilación del tubo es dependiente de la masa de la muestra. El tubo es metálico con forma de U, excitado por una fuerza electromagnética de forma armónica para dar lugar a una oscilación sin amortiguación. La dirección de la oscilación es perpendicular al plano del tubo para evitar posibles oscilaciones elípticas. Los extremos del tubo están anclados a un bloque de gran peso que minimiza la influencia de las vibraciones externas.

En su parte libre, el tubo en forma de U tiene montados un par de convertidores electromagnéticos que constan de dos bobinas y dos imanes localizados en la base del densímetro. La fuente de corriente se conecta a la bobina de entrada para que funcione como generador y el contador de frecuencia se conecta a la bobina de salida, que se convierte en el elemento de toma.

La bobina de entrada se activa con la fuente de energía, con lo que se aplica una fuerza al imán haciendo que el tubo vibre a causa del golpeteo generado por el movimiento de entrada y salida del imán en la bobina. La vibración transversal del tubo a su plano genera que el imán de la bobina de salida se mueva hacia afuera y adentro, generando una corriente con una frecuencia igual a la vibración del tubo en forma de U. El cambio de la vibración del tubo se genera por los cambios de masa del fluido que contiene.

El periodo de oscilación se puede convertir en la propiedad que se interesa obtener que es la densidad del fluido analizado, a través de modelos de calibración, que generalmente usan dos fluidos de referencia cuyas densidades son cercanas a las del fluido de interés, en el presente trabajo se utiliza un modelo que requiere el uso de un solo fluido de referencia y de mediciones al vacío.

La relación entre el periodo de vibración y la densidad se puede expresar matemáticamente con una ecuación general que permite desarrollar los diferentes modelos de calibración:

$$\tau^2 \propto \frac{V_i \rho + M_o}{K} \quad (1.2)$$

Donde:

$\rho$ : densidad

$K$ : rigidez transversal del tubo

$\tau$ : periodo de vibración

$V_i$ : volumen interno del tubo

$M_o$ : masa del tubo vacío

$M_o$ ,  $K$  y  $V_i$  son parámetros característicos del instrumento, de los cuales  $K$  y  $V_i$  dependen de la presión y la temperatura debido a las modificaciones mecánicas éste. De igual forma, la densidad es dependiente de la presión y la temperatura. Por lo tanto, se dice que el periodo de vibración  $\tau$  es una función de la presión y de la temperatura.

## CAPÍTULO 2

### METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

#### 2.1 EQUIPO EXPERIMENTAL

El equipo utilizado para obtener las densidades de las mezclas es un densímetro de tubo vibrante de la marca Anton-Paar modelo HPM, el cual mide la densidad de muestras a presiones de hasta 140 MPa y a temperaturas desde 263 hasta 473 K. La cantidad de muestra aproximada que puede contener la celda de medición es 2 mL. [15].

El modelo DMA HPM es comúnmente utilizado para:

- Análisis PvT
- Experimentos de recuperación mejorada de petróleo
- Validación de ecuaciones de estado

El intervalo de medición de densidad de este modelo se encuentra entre 0 kg/m<sup>3</sup> y 3000 kg/m<sup>3</sup>, con un error de medición de 1 kg/m<sup>3</sup> a 0.1 kg/m<sup>3</sup>.

La celda está elaborada con acero Hastelloy C-276, que es una aleación de níquel molibdeno y cromo, lo que le da una excelente resistencia a la corrosión en un amplio rango de ambientes severos.

La Figura 2.1 muestra el diagrama esquemático del equipo experimental donde: (EU) es la unidad de evaluación; (LC) la celda de carga; (P) la bomba de desplazamiento positivo; (PI) el indicador de presión; (PC) la computadora personal (PT) el transductor de presión; (RBI) el baño de recirculación; (T) el termómetro de platino; y (VTD) el densímetro de tubo vibrante.

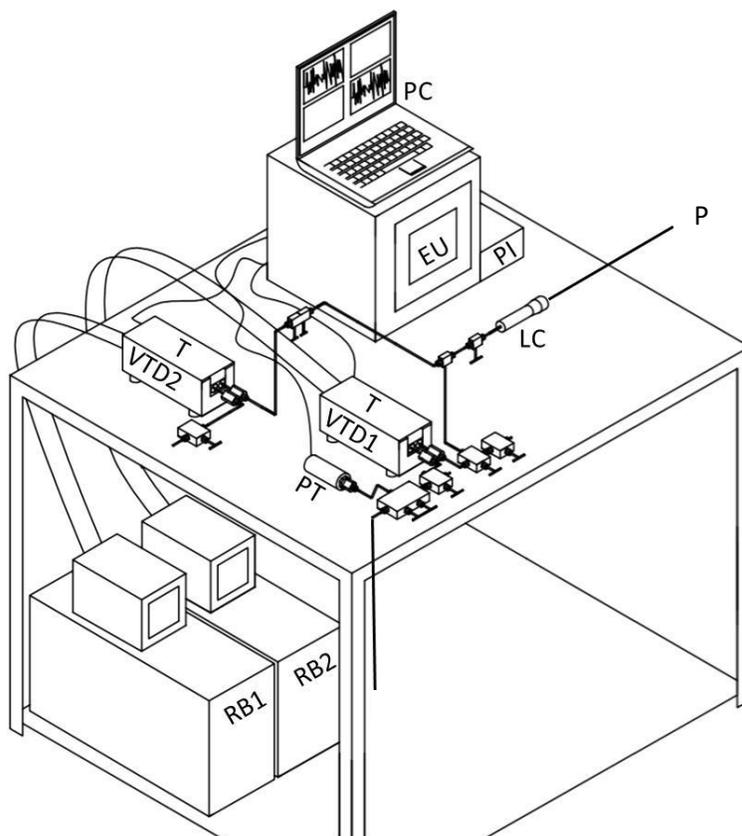


Figura 2.1 Diagrama esquemático del equipo experimental.

## 2.2 PREPARACIÓN DE LAS MEZCLAS BINARIAS

La mezcla binaria se prepara utilizando el método de pesadas sucesivas. La Tabla 2.1 presenta la pureza de las sustancias utilizadas para formar el sistema 2,5-dimetilfurano + octano.

Tabla 2.1 Pureza de las sustancias utilizadas [26,27].

Nombre	Marca	Pureza	Fórmula	Peso Molecular (g/mol)
2,5-dimetilfurano	Sigma-Aldrich	99.6%	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O	96.13
n-octano	Sigma-Aldrich	99%	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	114.24

Inicialmente se estiman los volúmenes de cada componente que contendrá la mezcla para poder formar las fracciones mol deseadas, utilizando las siguientes ecuaciones:

$$v_T = v_{DMF} + v_{C_8} \quad (2.1)$$

$$v_{DMF} = \frac{\frac{x_{DMF}M_{DMF}V_T}{\rho_{DMF}}}{\frac{x_{DMF}M_{DMF}}{\rho_{DMF}} + \frac{x_{C_8}M_{C_8}}{\rho_{C_8}}} \quad (2.2)$$

$$v_{C_8} = \frac{\frac{x_{C_8}M_{C_8}V_T}{\rho_{C_8}}}{\frac{x_{C_8}M_{C_8}}{\rho_{C_8}} + \frac{x_{DMF}M_{DMF}}{\rho_{DMF}}} \quad (2.3)$$

Donde  $v_{C_8}$  y  $v_{DMF}$  son los volúmenes estimados de hidrocarburo y 2,5-dimetilfurano respectivamente, requeridos para preparar cierta composición molar ( $x_{C_8}$ ,  $x_{DMF}$ ), completando un volumen total ( $v_T$ ). Las densidades de los compuestos están representadas por  $\rho_{DMF}$ ,  $\rho_{C_8}$  y sus pesos moleculares por  $M_{DMF}$  y  $M_{C_8}$ ; para estas estimaciones iniciales ambas propiedades fueron recabadas de información disponible en la literatura [26,27]. Los subíndices  $C_8$  y  $DMF$  corresponden al octano y al 2,5-dimetilfurano respectivamente.

A continuación, se enciende la balanza y se realiza una serie de siete mediciones sucesivas de la masa de la celda vacía, de las cuales se calculará su promedio ( $m_1$ ), posteriormente se agrega el volumen estimado del alcano y se obtiene la masa de la celda más el alcano ( $m_2$ ), para después agregar el volumen estimado de 2,5-dimetilfurano y medir la masa de la celda más la mezcla de ambos componentes ( $m_3$ ).

La masa de cada componente en la celda se obtiene a partir de las siguientes diferencias de masa:

$$m_{C_8} = m_2 - m_1 \quad (2.4)$$

$$m_{DMF} = m_3 - m_2 \quad (2.5)$$

La fracción mol se obtienen con las siguientes ecuaciones:

$$x_{C_8} = \frac{\frac{m_{C_8}}{M_{C_8}}}{\frac{m_{C_8}}{M_{C_8}} + \frac{m_{DMF}}{M_{DMF}}} \quad (2.6)$$

$$x_{DMF} = 1 - x_{C_8} \quad (2.7)$$

Las composiciones molares preparadas en este trabajo se muestran en la Tabla 2.2.

Tabla 2.2 Composiciones en fracción mol de las mezclas octano + 2,5-dimetilfurano.

<b>MEZCLA</b>	$x_{C_8}$	$x_{DMF}$
<b>1</b>	0.1076	0.8924
<b>2</b>	0.3038	0.6962
<b>3</b>	0.5033	0.4967
<b>4</b>	0.7001	0.2999
<b>5</b>	0.8846	0.1154

La incertidumbre de la composición de los sistemas binarios se calculó a partir de la desviación de los datos obtenidos en la balanza. Las ecuaciones utilizadas para el cálculo de la varianza de cada composición son las siguientes:

$$\sigma^2_{x_1} = \left( \frac{\frac{m_2}{PM_1 * PM_2}}{\left( \frac{m_1}{PM_1} + \frac{m_2}{PM_2} \right)^2} \right)^2 * \sigma^2_{m_1} + \left( \frac{\frac{-m_1}{\left( \frac{m_1}{PM_1} + \frac{m_2}{PM_2} \right)^2 * PM_1 * PM_2}}{\left( \frac{m_1}{PM_1} + \frac{m_2}{PM_2} \right)^2} \right)^2 * \sigma^2_{m_2} \\ + \left( \frac{\frac{-m_1 * m_2}{PM_2}}{\left( \frac{m_1}{PM_1} + \frac{m_2}{PM_2} \right)^2} \right)^2 * \sigma^2_{PM_1} + \left( \frac{\frac{m_1 * m_2}{PM_1 * PM_2^2}}{\left( \frac{m_1}{PM_1} + \frac{m_2}{PM_2} \right)^2} \right)^2 * \sigma^2_{PM_2} \quad (2.8)$$

$$\sigma^2_{x_2} = \left( \frac{\frac{-m_2}{\left( \frac{m_1}{PM_1} + \frac{m_2}{PM_2} \right)^2 * PM_1 * PM_2}}{\left( \frac{m_1}{PM_1} + \frac{m_2}{PM_2} \right)^2} \right)^2 * \sigma^2_{m_1} + \left( \frac{\frac{m_1}{PM_1 * PM_2}}{\left( \frac{m_1}{PM_1} + \frac{m_2}{PM_2} \right)^2} \right)^2 * \sigma^2_{m_2} \\ + \left( \frac{\frac{m_1 * m_2}{PM_1 * PM_2^2}}{\left( \frac{m_1}{PM_1} + \frac{m_2}{PM_2} \right)^2} \right)^2 * \sigma^2_{PM_1} + \left( \frac{\frac{-m_1 * m_2}{PM_2}}{\left( \frac{m_1}{PM_1} + \frac{m_2}{PM_2} \right)^2} \right)^2 * \sigma^2_{PM_2} \quad (2.9)$$

La incertidumbre calculada para la composición fue del orden menor a  $6 * 10^{-4}$  en fracción mol.

### 2.3 PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL PARA LA MEDICIÓN DE LOS PERIODOS DE VIBRACIÓN

- 1.- Se limpia la celda y las tuberías del densímetro con un solvente, para asegurar que los posibles residuos de mediciones pasadas sean eliminados. Después se seca con nitrógeno a presión.
- 2.- Se llena la celda con el fluido puro o la mezcla.
- 3.- Se ajusta la temperatura del baño de recirculación a 393.15 K.
- 4.- Cuando la temperatura ajustada se mantiene constante en el sistema, se abre la válvula de alimentación al DTV y se comienza a fijar la presión en los valores que se desean evaluar, siendo en este experimento desde 0.1 MPa hasta 70 MPa.

5.- Una vez que el valor de la temperatura y el de cada presión a evaluar se mantienen estables (condición de equilibrio), se graban los valores arrojados de temperatura, presión y periodo de oscilación de la mezcla.

6.- Posteriormente se incrementa la presión hasta el siguiente punto que se desea medir, realizando la misma actividad para cada intervalo de presión previsto en el plan de estudio.

6.- Al alcanzar la presión máxima del sistema, se procede a despresurizar y la temperatura se ajusta al nuevo valor a evaluar. En este experimento el intervalo de temperaturas es 393.15 K a 293.15 K, disminuyendo el valor 20 K por medición.

7.- Lo anterior se realiza para medir las propiedades de 5 composiciones diferentes de la mezcla y para los compuestos puros.

## 2.4 CALIBRACIÓN DE LOS INSTRUMENTOS

### 2.4.1 CALIBRACIÓN DEL DENSÍMETRO: CALIBRACIÓN MECÁNICA DE TRAYECTORIA FORZADA (FPMC)

El densímetro de tubo vibrante es un método de obtención de densidad indirecto, por lo cual, es necesario adquirir datos de presión, temperatura y periodo de vibración a lo largo de la experimentación.

Los modelos de calibración permiten transformar el periodo de vibración a densidad. En este trabajo el modelo utilizado es el continuo de trayectorias mecánicas forzadas propuesto por Bouchot [28], este modelo sólo utiliza un fluido de referencia, a diferencia de los modelos clásicos que utilizan dos, además emplea mediciones del periodo de vibración a condiciones de vacío.

El modelo FPMC considera al tubo en forma de U como una viga con condiciones de frontera. El nombre de este modelo reside en que las funciones que definen la mecánica y las propiedades del material con el que está fabricado el tubo son caminos forzados.

Para poder utilizar este modelo de calibración se necesita una ecuación que establezca al periodo como función de la presión y la temperatura, por lo cual se reescribe la ecuación (2.1) de la siguiente forma:

$$\tau^2(T, P) \propto \frac{V_i(T, P)\rho(T, P) + M_o}{K(T, P)} \quad (2.10)$$

La ecuación anterior requiere ser expresada de forma tal que permita realizar mediciones del periodo de vibración en condiciones de vacío:

$$\lim_{p \rightarrow 0} [\tau^2(T, P)] = \tau_0^2(T) = \lim_{p \rightarrow 0} \left[ \frac{V_i(T, P)\rho(T, P) + M_0}{K(T, P)} \right] = k \left( \frac{M_0}{K_0(T)} \right) \quad (2.11)$$

donde  $k$  es una constante de proporcionalidad y  $K_0$  es la rigidez al vacío.

Sustituyendo la constante de proporcionalidad,  $k$ , de la ecuación (2.11) en la ecuación (2.10) y despejando la densidad se obtiene:

$$\rho(T, P) = \frac{M_0}{V_i(T, P)} \left[ \frac{K(T, P) \tau^2(T, P)}{K_0(T) \tau_0^2(T)} - 1 \right] \quad (2.12)$$

donde:

- $K$  Rigidez transversal del tubo a las condiciones de P y T
- $K_0$  Rigidez transversal del tubo a vacío y en función de T
- $M_0$  Masa del tubo vacío
- $V_i$  Volumen interno del tubo
- $\tau_0$  Periodo de vibración del tubo a vacío en función de T
- $\tau$  Periodo de vibración del tubo en función de P y T

El volumen interno  $V_i$  se considera en el FPMC como:

$$V_i(T, P) = \pi r_i^2(T, P)L(T, P) \quad (2.13)$$

donde  $r_i(T, P)$  es el radio interno del tubo.

De acuerdo a Bouchot [28], se deben introducir algunas correcciones a la ecuación anterior debido a la variación de la longitud del tubo y los radios interno y externo.

$$\frac{K}{K_0} = \left(\frac{I}{I_0}\right) \left(\frac{L_0}{L}\right)^3 \quad (2.14)$$

Donde:

$$\frac{I}{I_0} = \frac{\Delta r^4}{\Delta r_0^4} = \frac{r_e^4 - r_i^4}{r_{e0}^4 - r_{i0}^4} \quad (2.15)$$

y

$$\frac{L_0}{L} = \exp \left[ -3P \left( \gamma_1 + \frac{\gamma_2 * P^2}{2} \right) \right] \quad (2.16)$$

Sustituyendo las ecuaciones anteriores y realizando un arreglo algebraico [28], se obtiene el modelo de calibración del FPMC:

$$\rho(P, T) = \left( \frac{M_0}{L_0 \pi r_i^2(T, P)} \right) \left[ \left( \frac{\Delta r^4(T, P)}{\Delta r_0^4(T, P = 0)} \right) \left( \frac{\tau^2(T, P)}{\tau_0^2(T, P = 0)} \right) \exp \left( -3P \left( \gamma_1 + \frac{\gamma_2 * P}{2} \right) \right) - 1 \right] \quad (2.17)$$

El modelo de calibración FPMC requiere que el periodo de vibración a condiciones de vacío sea estimado a la misma temperatura que el periodo de vibración con fluido dentro del tubo. Para esto se utiliza una correlación del periodo de vibración a vacío con la temperatura [29]:

$$\tau_0 = d_1 + d_2 T + d_3 T^2 \quad (2.18)$$

Para conocer el periodo de vibración a vacío a la temperatura del fluido que se encuentra dentro del tubo se ocupa la siguiente ecuación:

$$\tau_0 = (d_2 + 2d_3 T_0)(T - T_0) + \tau_{00} \quad (2.19)$$

donde  $\tau_{00}$  es un período de referencia y  $T_0$  es la temperatura que corresponde al valor de  $\tau_{00}$ .

En resumen, la metodología para calibrar el densímetro de tubo vibrante es la siguiente [29]:

1. Se realizan las mediciones del periodo de vibración a vacío a diferentes temperaturas dentro del intervalo en el que se desean analizar las mezclas para ajustar los parámetros de la ecuación 2.17.
2. Se realizan las mediciones del fluido de referencia en el intervalo de presión y temperatura en el que las mezclas se evaluarán.
3. Se calculan los periodos de vibración al vacío con las ecuaciones 2.17 o 2.19, a las mismas condiciones de temperatura en las que se midió el fluido de referencia.
4. Se utiliza el modelo de calibración FPMC de la ecuación 2.17 ocupando las mediciones del fluido de referencia del paso 2 y los periodos de vibración al vacío del paso 3.
5. Se realizan las mediciones del fluido de interés como se explica en la sección 2.8 del presente trabajo.
6. Se calculan los periodos de vibración a vacío con la ecuación 2.18 a las mismas condiciones de temperatura en que se midió el fluido de interés.
7. Se calculan las densidades de las mediciones del paso 5 con la ecuación 2.17 utilizando los datos del periodo a vacío calculados en el paso 6.

#### **2.4.2 CALIBRACIÓN DE LOS TERMÓMETROS DE PLATINO (PATRÓN SECUNDARIO)**

Se calibraron los dos termómetros de platino de 2 mm de diámetro, los cuales fueron conectados a un multiplexor 15862588 DAQ-STAQ. La calibración es de tipo secundaria y se llevó a cabo utilizando un termómetro estándar de resistencia de platino (Fluke 5628,  $25.5 \Omega (\pm 0.5 \Omega)$ ) conectado a un sistema de adquisición de datos de temperatura (Fluke Super-DAQ 1586A). El termómetro estándar tiene una incertidumbre de  $\pm 6$  mK en el intervalo de calibración seleccionado [29]. Para la calibración de los termómetros se utilizó un baño recirculador con una solución al 60 % MEG-agua para bajas temperaturas y MEG (monoetilenglicol) de alta pureza a temperaturas elevadas. Se aseguró que los termómetros se encontraran

sumergidos al 42.3% de su longitud como mínimo de acuerdo a lo recomendado por el fabricante. La calibración se realizó de 263.15 hasta 423.15 K [30].

El procedimiento consiste en colocar los termómetros a calibrar junto al termómetro patrón en un baño recirculador a 263.15 K durante un periodo mayor a 2 horas para que el sistema se estabilice. Cuando el sistema se encuentra estable se toman los datos de las variables medidas de cada una de las resistencias y posteriormente se incrementa 20 K, esperando nuevamente a que el sistema se estabilice y midiendo los valores de las variables. Se aumenta la temperatura 20 K, repitiendo el procedimiento en cada intervalo, hasta alcanzar la temperatura máxima que se requiere medir. A continuación, se repite el experimento, pero con decrementos de temperatura a intervalos de 20 K, hasta alcanzar la temperatura inicial de calibración. Finalmente se genera el respectivo polinomio que ajuste con los datos obtenidos experimentalmente.

### 2.4.3 CALIBRACIÓN DEL TRANSDUCTOR DE PRESIÓN

El transductor de presión utilizado durante la experimentación fue un Stellar GT1650 y se calibró con un manómetro BetaGauge PIR-PRO de 10000 psi, mediante un comparador de presión hidráulico. Con los datos de calibración del manómetro BetaGauge PIR-PRO obtenidos a partir de las mediciones de presión incluidas en su certificado, se obtuvo su ecuación de calibración:

$$P = -9.7296 * 10^{-8} P_{abs}^2 + 1.0002 P_{abs} - 1.9644 * 10^{-2} \quad (2.20)$$

donde  $P_{abs}$  es la lectura indicada en la pantalla del manómetro. En la tesis [29] se calibró el transductor de presión por regresión simple para la propagación del error.

## 2.5 POLINOMIOS DE CALIBRACIÓN

A continuación, se presentan los polinomios de calibración obtenidos a partir de la metodología explicada en la sección 2.9.

### 2.5.1 POLINOMIO DE CALIBRACIÓN DE DENSÍMETRO

El modelo de calibración utilizado fue el FPMC, cuyo polinomio de calibración es la ecuación (2.17).

$$\rho(P, T) = \left( \frac{M_0}{L_0 \pi r_i^2(T, P)} \right) \left[ \left( \frac{\Delta r^4(T, P)}{\Delta r_0^4(T, P = 0)} \right) \left( \frac{\tau^2(T, P)}{\tau_0^2(T, P = 0)} \right) \exp \left( -3P \left( \gamma_1 + \frac{\gamma_2 * P}{2} \right) \right) - 1 \right] \quad (2.17)$$

Para calcular los periodos de vibración al vacío y utilizarlos en el polinomio de calibración se utilizan las siguientes ecuaciones:

$$\tau_0 = d_1 + d_2 T + d_3 T^2 \quad (2.18)$$

Los parámetros ajustados para el FPMC son  $d_1$ ,  $d_2$ ,  $d_3$  a condiciones de vacío que se obtienen a partir de la ecuación (2.18) y los parámetros  $M_0/L_0$ ,  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  del polinomio de calibración, éstos últimos son ajustados a cada isoterma para disminuir el error en el cálculo de densidades.

## 2.5.2 POLINOMIO DE CALIBRACIÓN DE TERMÓMETROS DE PLATINO

El polinomio de calibración utilizado para relacionar la temperatura de referencia respecto a la temperatura obtenida experimentalmente con los termómetros es el siguiente:

$$T_{ref} = aT_{exp}^2 + bT_{exp} + c \quad (2.21)$$

Donde  $T_{ref}$  es la temperatura que se obtiene del polinomio en función de la temperatura experimental del termómetro, y a, b, c, son los parámetros del polinomio correspondiente a cada termómetro.

Tabla 2.3 Parámetros de calibración del polinomio correspondientes a cada termómetro utilizado.

Termómetro	a / K <sup>-1</sup>	B	c / K
Canal 105	3.92874E-06	1.018767	0.02379645
Canal 107	-2.15803E-06	1.018998	-0.02195972

Una vez que se han calculado los parámetros del polinomio correspondiente a cada termómetro, se procede a obtener el valor de temperatura que se obtiene del polinomio para cada dato experimental. Con este valor calculado y el valor conocido de la temperatura de referencia se calcula el error residual, representado en la Figura 2.2.

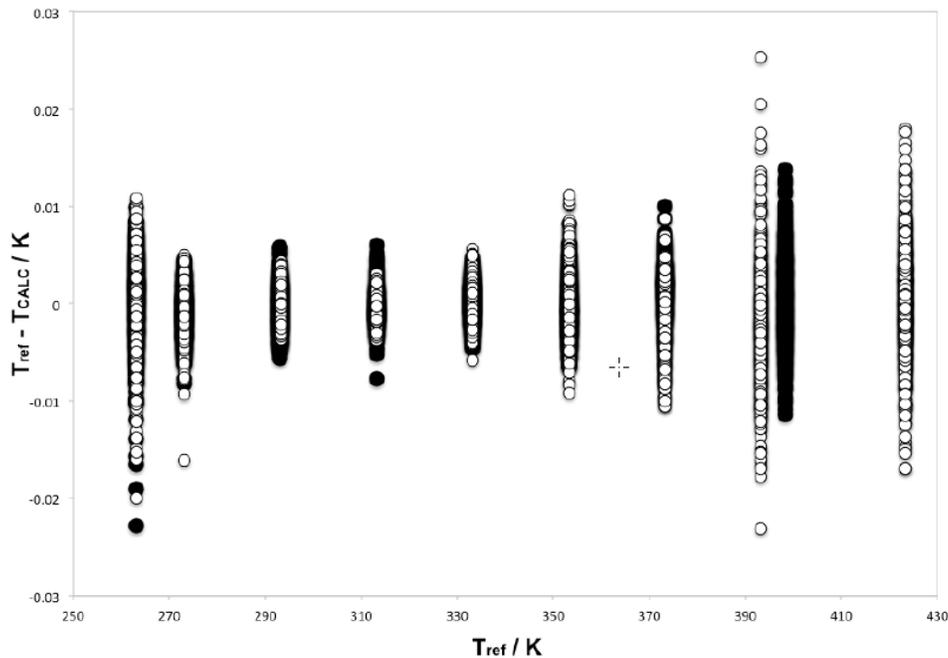


Figura 2.2 Residuales del termómetro: ○ calentamiento; ● enfriamiento.

### 2.5.3 POLINOMIO DE CALIBRACIÓN DE TRANSDUCTOR DE PRESIÓN.

El polinomio de calibración utilizado para el transductor de presión corresponde a una regresión simple y es el siguiente:

$$P[\text{bar}] = (0.08558 \pm 0.2355 * 10^{-9})\mu A - (340.4937 \pm 0) \quad (2.22)$$

donde  $\mu A$  es el amperaje del transductor de presión Stellar GT1650 multiplicado por un factor de  $10^{-6}$ .

La incertidumbre combinada calculada es  $u(P) = 0.13$  bar.

## CAPÍTULO 3

### RESULTADOS EXPERIMENTALES

#### 3.1 DENSIDADES EXPERIMENTALES

Las densidades del sistema binario octano (1) – 2,5-dimetilfurano (2) se analizaron en las siguientes composiciones:  $x_1 = 0.0000$ ,  $x_1 = 0.1076$ ,  $x_1 = 0.3038$ ,  $x_1 = 0.5033$ ,  $x_1 = 0.7001$ ,  $x_1 = 0.8846$ ,  $x_1 = 1.0000$ . Las densidades fueron medidas en un intervalo de temperatura que va de los 293.11 K hasta los 392.46 K en intervalos de 20 K. Las presiones van desde 0.1 MPa hasta los 70 MPa. En las Tablas 3.1 a 3.8 se encuentran los valores experimentales de densidad para cada composición y para los compuestos puros. En las Figuras 3.1 a 3.3 se muestra el comportamiento de la densidad respecto a la presión a temperatura y composición constante, para el 2,5-dimetilfurano puro, la composición  $x_1 = 0.5033$  y para el octano puro respectivamente. Las gráficas del resto de composiciones medidas se encuentran en el anexo A.

Tabla 3.1 Densidades experimentales de 2,5-dimetilfurano puro.

$T = 293.11 \text{ K}$		$T = 313.73 \text{ K}$		$T = 332.72 \text{ K}$		$T = 352.64 \text{ K}$		$T = 373.46 \text{ K}$		$T = 392.46 \text{ K}$	
$P$ (MPa)	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )										
0.41	900.830	0.41	878.890	0.45	857.150	0.43	834.260	0.86	811.100	0.86	786.040
2.66	902.830	2.66	881.200	2.56	859.770	2.56	837.280	2.52	813.840	2.53	789.380
5.20	905.050	5.20	883.730	5.26	862.840	5.27	840.940	5.01	817.820	5.01	794.090
		7.53	885.960	7.62	865.580	7.62	843.980	7.07	820.950	7.07	797.800
10.28	909.340	10.28	888.630	10.08	868.130	10.08	847.080	9.96	825.220	9.96	802.740
20.18	917.220	20.18	897.540	20.03	878.250	20.03	858.580	20.30	838.930	20.30	818.390
29.93	924.420	29.93	905.590	30.14	887.520	30.14	868.980	30.15	850.370	30.15	831.150
40.00	931.360	40.00	913.280	40.02	895.880	40.02	878.200	40.23	860.800	40.23	842.670
49.74	937.660	49.73	920.220	49.78	903.590	49.78	886.520	50.18	870.150	50.18	852.890
60.17	944.040	60.17	927.210	60.10	911.070	60.10	894.670	60.07	878.650	60.07	862.140
69.54	949.460	69.54	933.140	70.02	917.870	70.01	901.930	69.65	886.260	69.64	870.420

Tabla 3.2 Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.5033$ .

$T = 293.11 \text{ K}$		$T = 313.73 \text{ K}$		$T = 332.72 \text{ K}$		$T = 352.64 \text{ K}$		$T = 373.46 \text{ K}$		$T = 392.46 \text{ K}$	
$P$ (MPa)	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )										
0.34	776.3	0.34	757.19	0.31	739.23	0.31	719.87	0.16	697.52	0.16	678.22
2.86	778.58	2.86	759.82	2.75	742.13	2.75	723.3	2.67	701.74	2.67	683.18
5.48	780.88	5.47	762.46	5.13	744.85	5.13	726.48	4.97	705.39	4.97	687.47
7.29	782.44	7.28	764.23	7.56	747.53	7.56	729.58	7.35	709.03	7.34	691.59
10.27	784.92	10.26	767.06	9.96	750.12	9.96	732.54	9.76	712.56	9.76	695.56
20.24	792.75	20.24	775.83	19.70	759.83	19.70	743.52	19.76	725.57	19.76	710.11
30.16	799.92	30.16	783.79	29.71	768.74	29.71	753.43	29.92	736.88	29.92	722.57
40.22	806.64	40.18	791.17	39.87	776.92	39.87	762.45	39.95	746.81	39.95	733.29
50.27	812.88	50.27	798.02	49.89	784.36	49.89	770.52	49.85	755.59	49.85	742.7
60.11	818.66	60.11	804.27	59.90	791.23	59.90	777.95	60.01	763.83	60.01	751.49
69.78	823.97	69.78	810.09	69.78	797.58	69.78	784.76	69.88	771.19	69.88	759.34

Tabla 3.3 Densidades experimentales de octano puro.

<i>T</i> = 293.11 K		<i>T</i> = 313.73 K		<i>T</i> = 332.72 K		<i>T</i> = 352.64 K		<i>T</i> = 373.46 K		<i>T</i> = 392.46 K	
<i>P</i> (MPa)	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )										
0.32	703.16	0.31	686.53	0.16	670.33	0.16	653.44	0.35	634.41	0.35	617.5
2.53	705.07	2.53	688.71	2.47	672.86	2.47	656.54	2.52	637.85	2.52	621.48
4.91	707.08	4.91	690.99	5.03	675.62	5.03	659.77	5.03	641.57	5.03	625.78
7.50	709.20	7.50	693.38	7.42	678.16	7.42	662.65	7.51	645.08	7.51	629.75
10.12	711.26	10.12	695.73	9.90	680.66	9.90	665.51	9.94	648.37	9.94	633.42
19.98	718.64	19.97	703.96	20.60	690.65	20.60	676.68	20.07	660.51	20.08	646.91
30.29	725.62	30.29	711.64	30.42	698.77	30.42	685.65	30.12	670.81	30.12	658.17
40.27	731.90	40.27	718.47	40.15	706.05	40.15	693.61	40.05	679.68	40.06	667.87
50.24	737.73	50.24	724.81	50.08	712.81	50.08	701	50.07	687.87	50.07	676.62
59.66	742.90	59.66	730.42	60.02	719.10	60.02	707.76	60.09	695.29	60.09	684.55
69.65	748.08	69.65	735.99	69.94	725.00	69.94	714.07	69.85	701.89	69.85	691.62

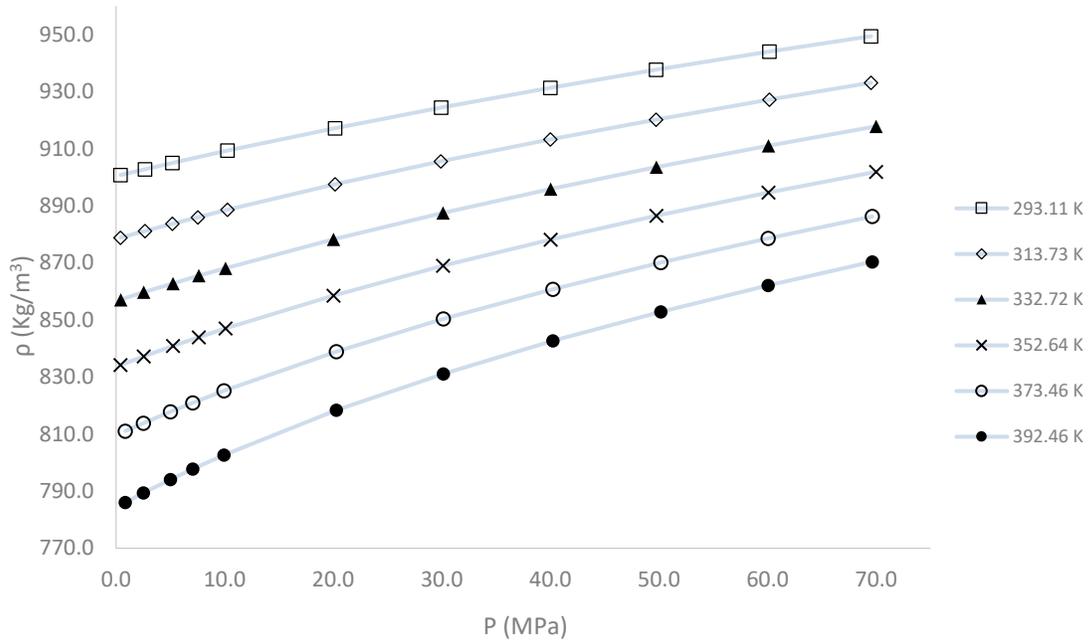


Figura 3.1 Densidades experimentales de 2,5-dimetilfurano puro a diferentes temperaturas.

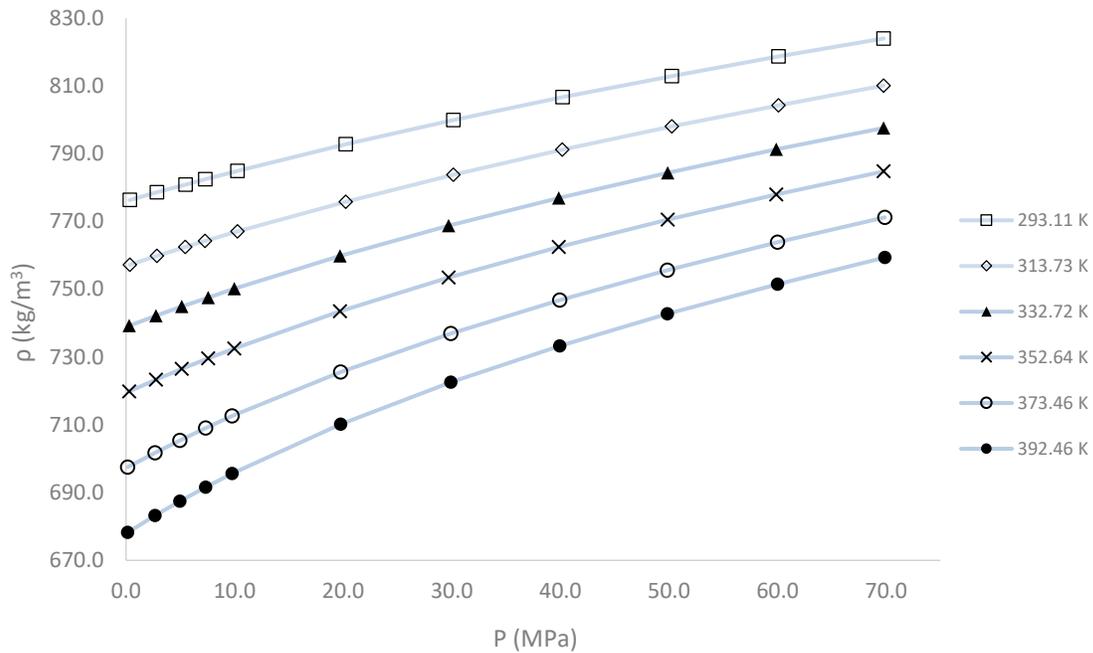


Figura 3.2 Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.5033$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

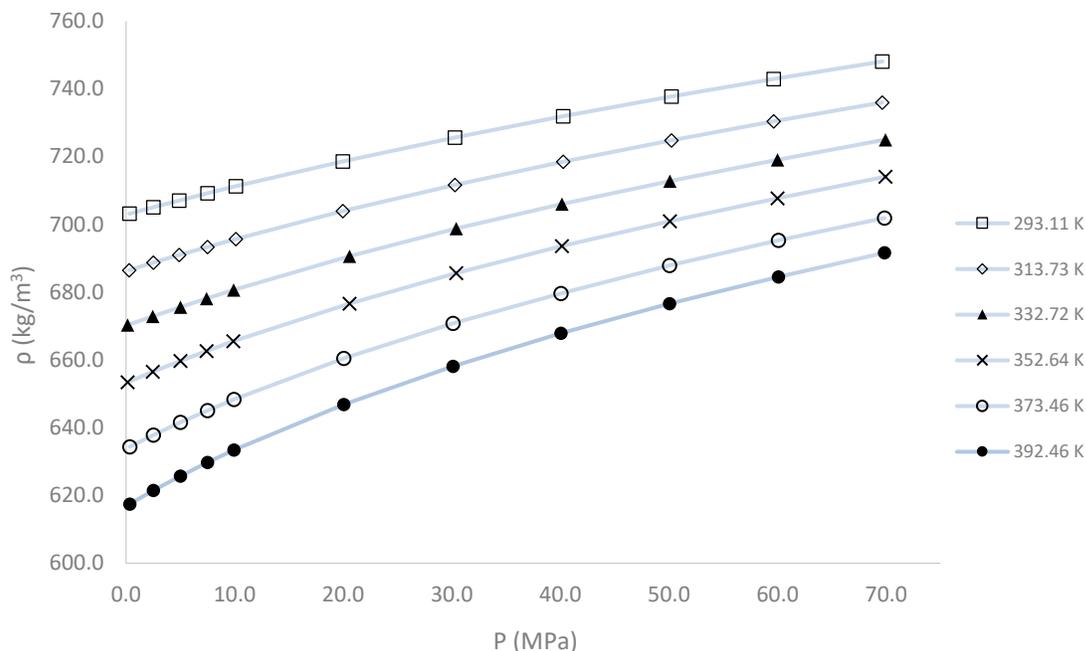


Figura 3.3 Densidades experimentales de octano puro a diferentes temperaturas.

La estimación de la incertidumbre en el cálculo de densidades fue  $u(\rho) = 0.7$  en  $kg/m^3$ .

Como se puede observar en las Figuras 3.1 a 3.3, la densidad de las muestras aumenta cuando la presión se incrementa, a temperatura y composición constantes. A mayor presión, la densidad tiene valores más parecidos entre sí que a bajas presiones.

Por otra parte, al aumentar la temperatura de la muestra, a presión y composición constante, su densidad disminuye.

Al comparar las Figuras 3.1 y 3.3, se observa que la densidad del octano puro es menor a la del 2,5-dimetilfurano. Por lo tanto, al aumentar la composición de octano de las mezclas, su densidad disminuye, a presión y temperatura constante.

### 3.2 COMPARACIÓN DE LOS VALORES DE DENSIDAD

Las densidades del octano puro fueron comparadas con valores reportados en literatura que se encuentran aproximadamente a las mismas condiciones de presión y temperatura. En la Figura 3.4 se presenta la comparación entre las densidades obtenidas en este trabajo y los datos reportados por diversos autores; la línea punteada corresponde a la incertidumbre de densidad calculada en este trabajo y cada viñeta indica la referencia bibliográfica de la que se obtuvieron los valores de densidad.

Se puede observar que las densidades reportadas a 373.12 K por Dymond et al. [31], a 373.15 K por Caudwell et al. [32] y las obtenidas por Sanmammed et al. [33] a 293 K y 313 K se mantienen dentro del intervalo de incertidumbre que se obtuvo en este trabajo. Por otra parte, los valores reportados por Lugo et al. [34] tuvieron concordancia con los datos experimentales a 293 K, 313 K y 333 K; sin embargo, en los datos reportados a 353 K se obtuvieron desviaciones de densidad de alrededor del 0.15%. Los datos reportados por Abdussalam et al. [35] son congruentes con las densidades experimentales en todo el intervalo de temperatura, a excepción de algunas densidades cuya desviación no es mayor al 0.4% a 60 MPa para las temperaturas de 353 K y 393 K. Finalmente, entre los datos obtenidos en este trabajo y los reportados por Goodwin et al. [36] se obtuvieron ligeras desviaciones que se hacen más notables cuando la presión aumenta.

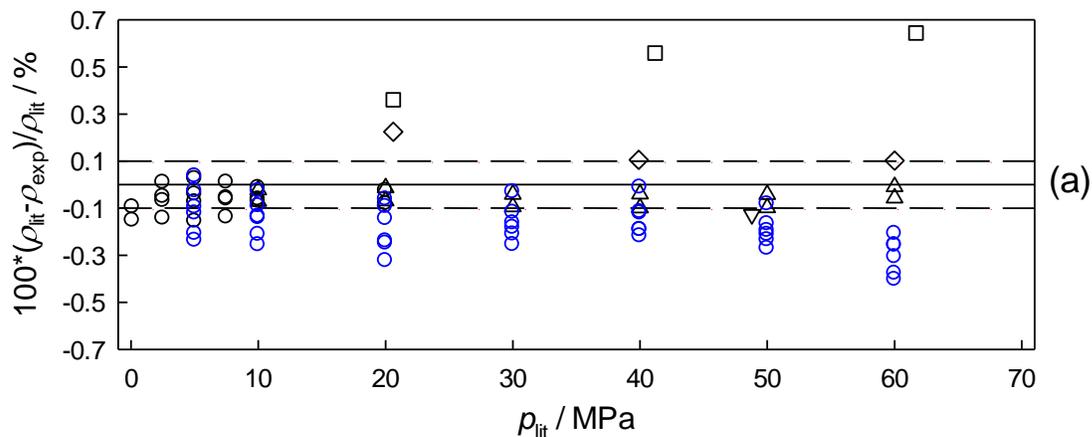


Figura 3.4 Desviaciones entre los valores de densidad del octano puro reportados en este trabajo y los publicados en la literatura:  $\nabla$  Ref. [31],  $\diamond$  Ref. [32],  $\triangle$  Ref. [33],  $\circ$  Ref. [34],  $\circ$  Ref. [35],  $\square$  Ref. [36].

Las densidades del 2,5-dimetilfurano también fueron comparados con información disponible en literatura para verificar que su precisión. Las únicas referencias son Jezak et al. [37] y Lomba et al. [38]; ambos trabajos reportan densidades de este componente a diferentes condiciones de temperatura y presión. Para fines de comparación, la única temperatura similar a las mediciones de este trabajo corresponde a 333 K. La Figura 3.5 muestra las desviaciones entre las densidades obtenidas experimentalmente en este trabajo y las obtenidas por los autores, las líneas punteadas indican la incertidumbre calculada en este trabajo, cada color corresponde a una referencia bibliográfica diferente, las barras de error indican la incertidumbre calculada por los autores y las viñetas corresponden a las temperaturas reportadas.

Los datos obtenidos en este trabajo concuerdan con los reportados en la referencia [37]. Por el contrario, hay notables desviaciones entre las densidades experimentales obtenidas en esta Tesis y las reportadas por Lomba et al. [38], en la cual sus valores de densidad son mayores pero la desviación no excede el 0.2%.

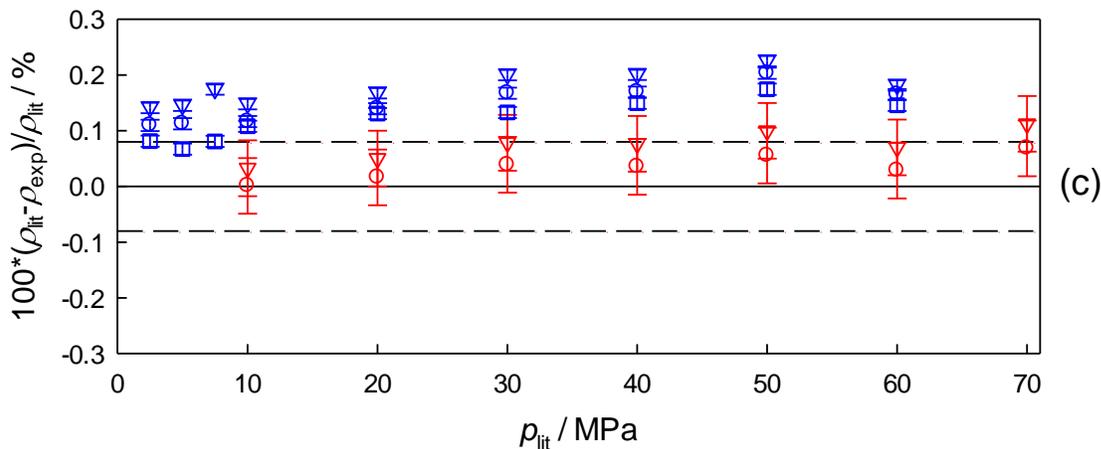


Figura 3.5 Desviaciones entre los valores de densidad experimentales y los reportados en la literatura del 2,5-dimetilfurano: (rojo) Ref. [37], (azul) Ref. [38]; ○ 293 K, ▽ 313 K, □ 333 K.

### 3.3 CORRELACIÓN DE LAS DENSIDADES CON UN MODELO SEMI-EMPÍRICO

Las densidades experimentales se correlacionan con una ecuación semi-empírica tipo Tait de 7 parámetros:

$$\rho = \frac{a_0 + a_1T + a_2T^2}{\left[1 - C \ln\left(\frac{b_0 + b_1T + b_2T^2 + p}{b_0 + b_1T + b_2T^2 + p_{ref}}\right)\right]} \quad (3.1)$$

Donde  $\rho$  es la densidad de la mezcla,  $a_0$ ,  $a_1$ ,  $a_2$  son parámetros utilizados para realizar un ajuste a la densidad a una presión de referencia  $p_{ref}$ ,  $b_0$ ,  $b_1$ ,  $b_2$  y  $C$  son parámetros obtenidos al correlacionar las densidades,  $T$  es la temperatura, y  $p$  es la presión.

En la Tabla 3.9 se muestran los valores obtenidos de los parámetros para cada composición. De igual forma, se incluyen las variables estadísticas que permiten evaluar la correlación de cada mezcla.

La desviación absoluta promedio se calculó con la siguiente fórmula:

$$AARD/\% = \left(\frac{100}{Nd}\right) \sum_{i=1}^{Nd} \frac{|\rho_i^{exp} - \rho_i^{calc}|}{\rho_i^{exp}} \quad (3.2)$$

La desviación estándar:

$$\sigma = \sqrt{\sum_{i=1}^{Nd} \frac{\rho_i^{exp} - \rho_i^{calc}}{Nd - m}} \quad (3.4)$$

donde  $Nd$  representa el número total de datos utilizados,  $\rho$  el valor de la densidad,  $i$  es cada dato de densidad y los superíndices  $exp$  y  $calc$  hacen referencia al valor experimental y calculado, respectivamente.

Tabla 3.4 Parámetros y desviaciones de las mezclas octano + 2,5-dimetilfurano y de sus componentes puros, obtenidos utilizando la ecuación tipo Tait.

$x_1$	0	0.1076	0.3038	0.5033	0.7001	0.8846	1
$a_0/$ ( $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ )	1151.262	1103.266	1050.167	1000.123	956.460	932.649	906.810
$a_1/$ ( $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{T}^{-1}$ )	-0.6388	-0.5874	-0.6279	-0.6101	-0.5957	-0.6408	0.5801
$a_2/$ ( $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{T}^{-2} \cdot 10^{-4}$ )	-6.36	-6.365	-4.716	-4.232	-3.573	-2.316	-2.965
$b_0/$ (MPa)	449.6779	420.8325	383.0783	400.1557	364.8276	355.7696	353.6723
$b_1/$ (MPa $\cdot \text{T}^{-1}$ )	-1.7281	-1.601	-1.4482	-1.5469	-1.3909	-1.3686	-1.3512
$b_2/$ (MPa $\cdot \text{T}^{-2} \cdot 10^{-3}$ )	1.702	1.558	1.400	1.539	1.365	1.362	1.333
<b>C</b>	0.0899	0.0909	0.0902	0.0920	0.0907	0.0893	0.0899
<b>AARD /</b> <b>%</b>	1.97E-02	1.09E-02	1.43E-02	2.16E-02	1.7E-02	1.05E-02	1.37E-02
$\sigma$ ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )	0.224	0.118	0.144	0.210	0.153	0.103	0.126

### 3.4 VOLUMEN MOLAR EN EXCESO

El volumen molar en exceso es la desviación del comportamiento real del volumen de la mezcla respecto al comportamiento ideal de este. No hay cambio de volumen al mezclar dos líquidos para formar una solución termodinámicamente ideal a temperatura y presión constantes, pero puede ocurrir un cambio de volumen cuando dos líquidos reales se mezclan. [39] El volumen molar en exceso puede ser positivo demostrando que se tuvo una expansión, o negativo si es el caso de una compresión.

El cambio de volumen en la formación de mezclas líquidas binarias, a presión y temperatura constantes es un indicador de las no idealidades presentes en las mezclas reales. El volumen molar en exceso será entonces la diferencia entre el comportamiento real del volumen de la mezcla y el comportamiento ideal, expresado en las siguientes ecuaciones.

$$V^E = V_{REAL} - V_{IDEAL} \quad (3.6)$$

$$V_{REAL} = \frac{x_{C_8}W_{C_8} + x_{DMF}W_{DMF}}{\rho_m} \quad (3.7)$$

$$V_{IDEAL} = \frac{x_{C_8}W_{C_8}}{\rho_{C_8}} + \frac{x_{DMF}W_{DMF}}{\rho_{DMF}} \quad (3.8)$$

donde  $x$  corresponde a la composición por componente de la mezcla,  $W$  es el peso molecular de cada compuesto y  $\rho$  es la densidad. Los sufijos  $C_8$ ,  $DMF$ , y  $m$  representan octano, 2,5-dimetilfurano y mezcla respectivamente. Sustituyendo las fórmulas (3.7) y (3.8) en la (3.6), se obtiene la siguiente ecuación para el cálculo del volumen molar en exceso:

$$V^E = \frac{x_{C_8}W_{C_8} + x_{DMF}W_{DMF}}{\rho_m} - \left( \frac{x_{C_8}W_{C_8}}{\rho_{C_8}} + \frac{x_{DMF}W_{DMF}}{\rho_{DMF}} \right) \quad (3.9)$$

En las Figuras 3.6 y 3.7 se encuentran graficados los volúmenes molares calculados de mezcla octano + 2,5-dimetilfurano a 293.11 K y 392.46 K respectivamente. Las gráficas de volumen molar en exceso del resto de las

temperaturas se encuentran en el anexo B. Se puede observar que el volumen molar en exceso de las mezclas es positivo en todas las composiciones, en los intervalos de presión y temperatura analizados, lo que significa que, a esas condiciones, la mezcla analizada se expande. Las gráficas presentan forma de campana, con el valor más alto de volumen molar cuando se tienen concentraciones iguales. A mayores presiones, el valor del volumen molar en exceso disminuye cuando la concentración y temperatura se mantienen constantes, debido a que al comprimirse la mezcla resulta un mejor acomodo de sus moléculas. Cuando la temperatura aumenta, el volumen molar en exceso aumenta también, a presión y concentración constantes.

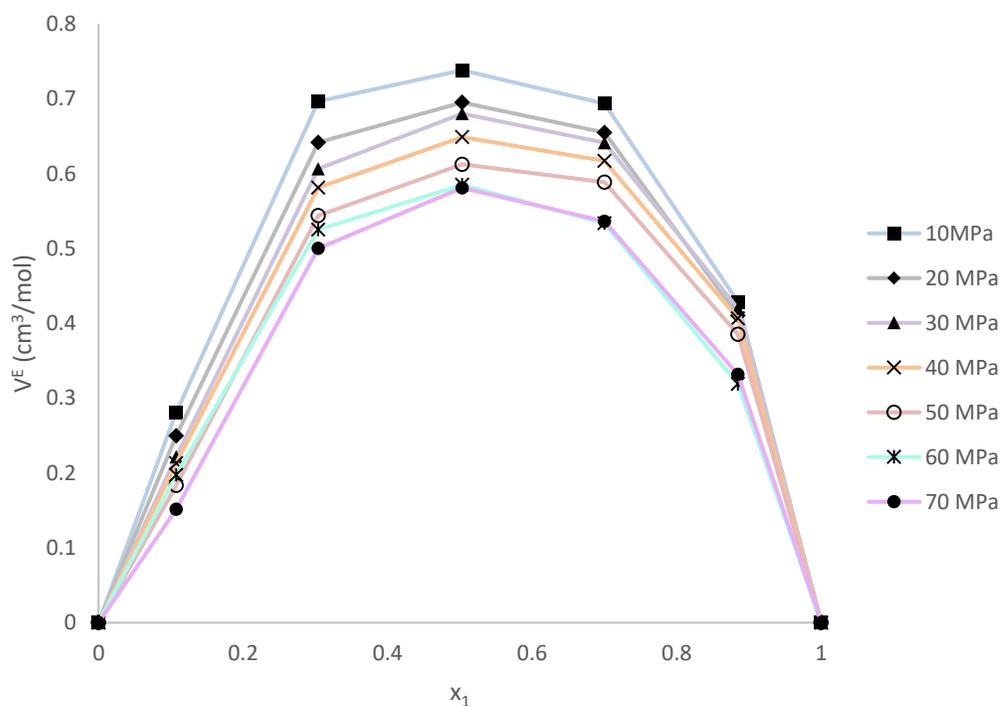


Figura 3.6 Volúmenes molares en exceso de la mezcla octano (1) + 2,5-dimetilfurano (2) respecto a la composición a diferentes presiones a 293.11 K.

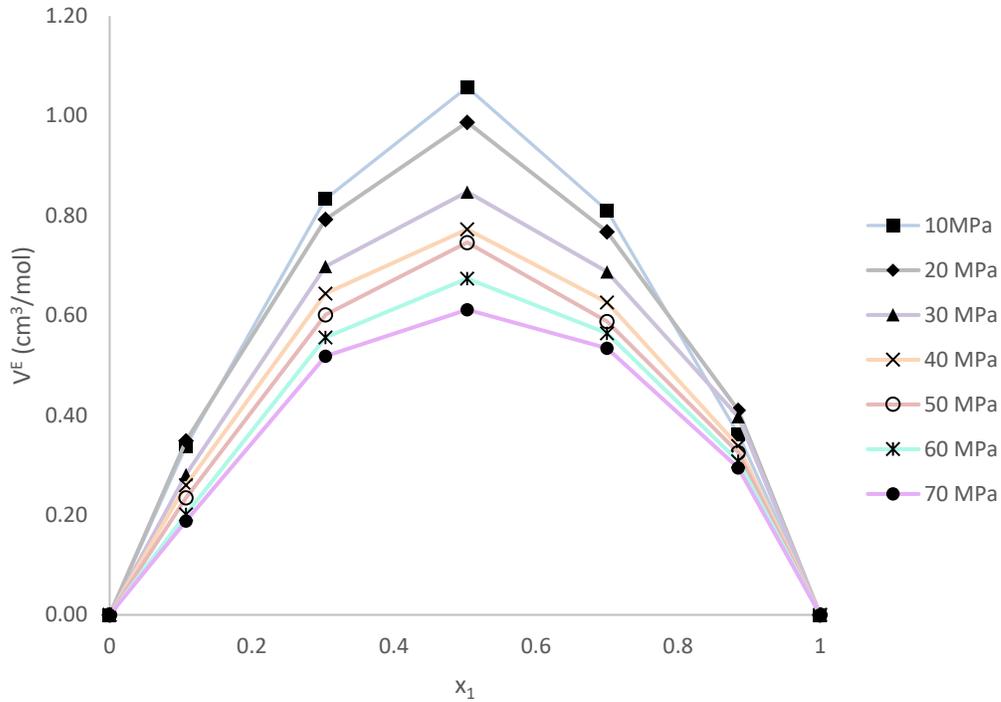


Figura 3.7 Volúmenes molares en exceso de la mezcla octano (1) + 2,5-dimetilfurano (2) respecto a la composición a diferentes presiones a 392.46 K.

### 3.5 COEFICIENTE DE EXPANSIÓN TÉRMICA ISOBÁRICO

El coeficiente de expansión térmica isobárica expresa la razón de cambio del volumen, respecto a un cambio en la temperatura, cuando la presión se mantiene constante.

La expansión isobárica se expresa como:

$$\alpha_P = \frac{1}{\rho_m} \left( \frac{\partial \rho_m}{\partial T} \right)_P \quad (3.10)$$

El valor de  $\alpha$  es diferente para cada sustancia y es función de la temperatura. Su valor es generalmente positivo, con algunas excepciones en las que es negativo en un pequeño intervalo de temperatura. Entre estas excepciones, la más notable es el agua entre 0 y 4 °C. En este pequeño intervalo de temperatura, el volumen específico del agua disminuye al aumentar la temperatura.

Al sustituir la ecuación tipo Tait en la ecuación de expansión térmica isobárica y derivando se obtiene:

$$\alpha_P = -\frac{a_1 + 2a_2T}{a_0 + a_1 + a_2T^2} + \frac{C(b_1 + 2b_2T)(10 - P)}{(b_0 + b_1T + b_2T^2 + 10)(b_0 + b_1T + b_2T^2 + P) \left(1 - C \ln \left(\frac{b_0 + b_1T + b_2T^2 + P}{b_0 + b_1T + b_2T^2 + 10}\right)\right)} \quad (3.11)$$

En las Figuras 3.8 y 3.9 se ilustran los valores de los coeficientes de dilatación térmica isobárica calculados para las mezclas a composición  $x_1 = 0.1076$  y  $x_1 = 0.8846$  respectivamente, a diferentes presiones y temperaturas. Las gráficas de  $\alpha$  correspondientes al resto de las composiciones se encuentran en el anexo C. Se puede observar que al aumentar la presión el valor de  $\alpha$  disminuye. De igual manera, a presiones altas, los valores de los coeficientes de expansión de una mezcla de composición constante son más parecidos entre sí, sin importar la diferencia de temperaturas. El valor del coeficiente de expansión térmica aumenta si la temperatura incrementa. Al aumentar la concentración de octano en la mezcla, disminuye el valor de  $\alpha$ , a presión y temperatura constantes.

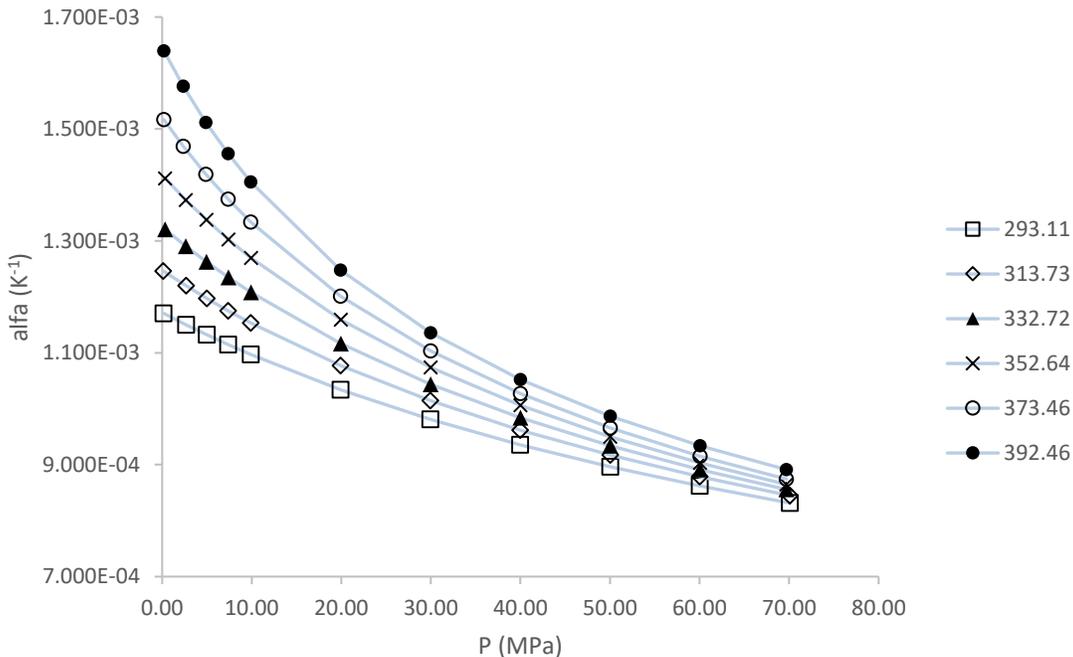


Figura 3.8 Coeficiente de expansión térmica isobárico de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.1076$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

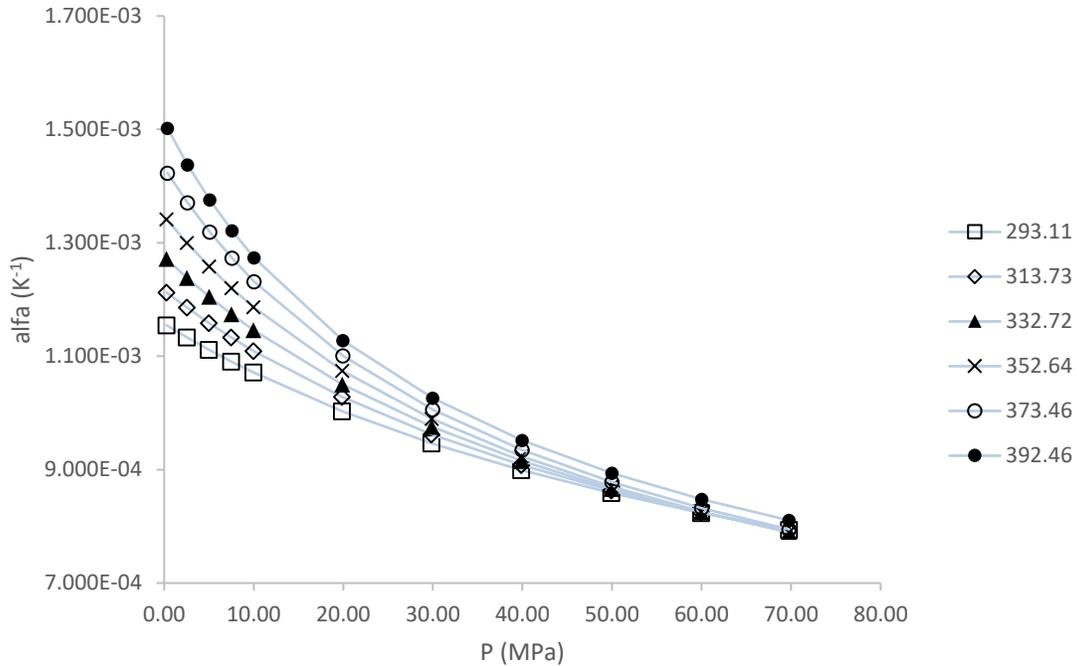


Figura 3.9 Coeficiente de expansión térmica isobárico de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.8846$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

### 3.6 COEFICIENTE DE COMPRESIBILIDAD ISOTÉRMICA

El coeficiente de compresibilidad isotérmica expresa la razón de cambio del volumen, respecto a la presión, cuando la temperatura se mantiene constante.

La compresibilidad isotérmica se expresa como:

$$k_T = \frac{1}{\rho_m} \left( \frac{\partial \rho_m}{\partial P} \right)_T \quad (3.12)$$

En todos los sistemas, gases, líquidos y sólidos, el volumen disminuye al aumentar la presión, por lo que este coeficiente es siempre positivo. Para sólidos y líquidos el coeficiente de compresibilidad isotérmica es muy pequeño, su valor se encuentra entre  $10^{-5}$  y  $10^{-3} \text{ MPa}^{-1}$ , lo que indica que aumentar la presión 1 MPa provocaría una disminución del volumen de 0.001 a 0.0001%. [21]

Al sustituir la ecuación tipo Tait en la expresión anterior y derivando, se obtiene:

$$k_T = \left( \frac{C}{\left(1 - C \ln \left( \frac{b_0 + b_1 T + b_2 T^2 + P}{b_0 + b_1 T + b_2 T^2 + 10} \right)\right) (b_0 + b_1 T + b_2 T^2 + P)} \right) \quad (3.13)$$

En las Figuras 3.10 y 3.11 se ilustran los valores de los coeficientes de compresibilidad isotérmica calculados para las mezclas a composición  $x_1 = 0.1076$  y  $x_1 = 0.8846$  respectivamente. Las Figuras correspondientes al coeficiente de compresibilidad isotérmica del resto de composiciones se encuentran en el anexo D. Se puede observar un comportamiento similar que el del coeficiente de expansión térmica isobárica, ya que el coeficiente de compresibilidad isotérmica aumenta a medida que la presión disminuye cuando la composición y la temperatura se mantienen constantes. Además, cuando el coeficiente de compresibilidad isotérmica se calcula a mayores presiones, los valores obtenidos son más parecidos entre sí. Al aumentar la concentración de octano en la mezcla, el valor de la compresibilidad isotérmica aumenta, a presión y temperatura constante.

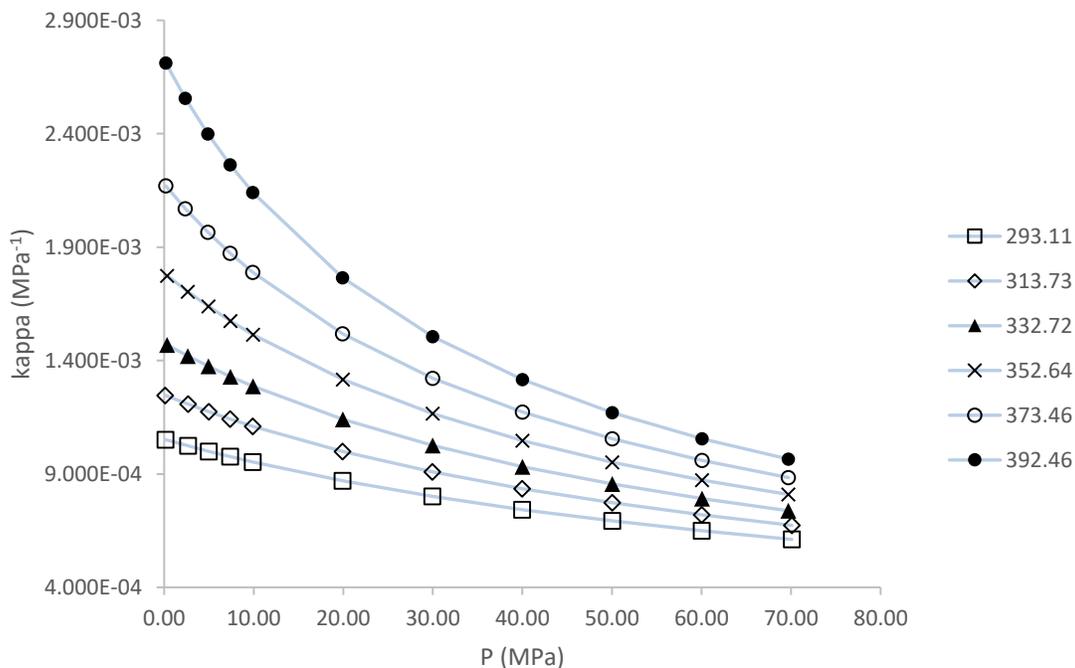


Figura 3.10 Coeficiente de compresibilidad isotérmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.1076$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

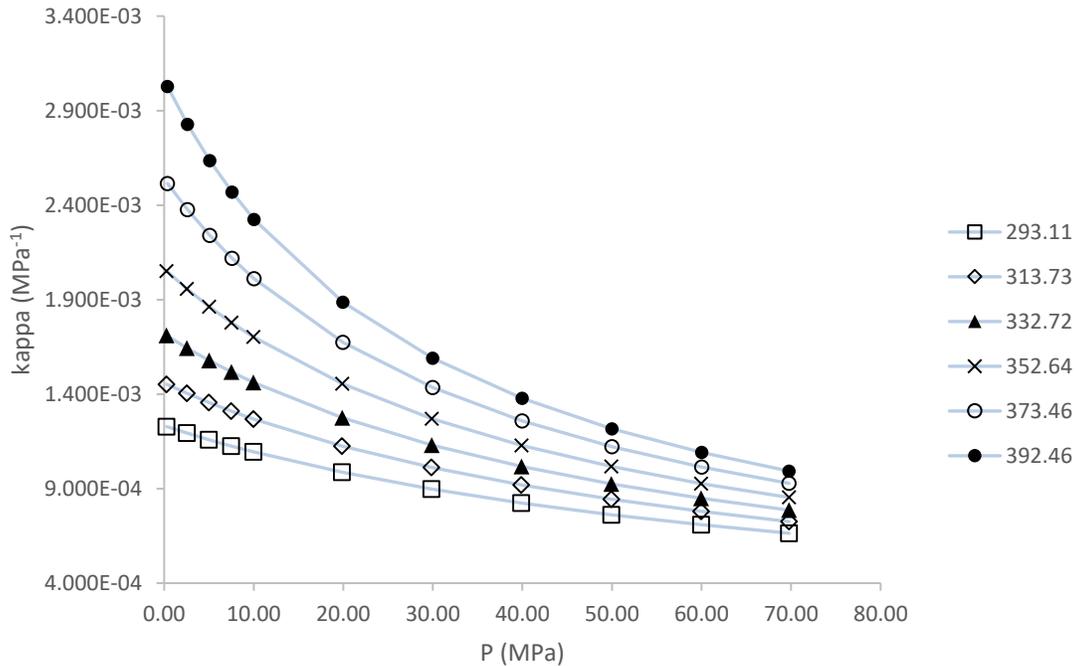


Figura 3.11 Coeficiente de compresibilidad isotérmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.8846$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

### 3.7 COEFICIENTE DE PRESIÓN TÉRMICA

El coeficiente de presión térmica indica la relación entre el coeficiente de expansión térmica isobárica ( $\alpha_p$ ) y el coeficiente de compresibilidad isotérmica ( $k_T$ ).

El coeficiente de presión térmica se expresa como:

$$\gamma_v = \frac{\alpha_p}{k_T} \quad (3.14)$$

En las Figuras 3.12 y 3.13 se ilustran los valores de presión térmica calculados para las composiciones  $x_1 = 0.1076$  y  $x_1 = 0.8846$  respectivamente, a diferentes presiones y temperaturas, denotando que cuando se trata de una isoterma a

composición constante, el comportamiento de la presión interna es prácticamente lineal, aumentando su valor cuando hay aumento de presión. A presión y temperatura constantes, el coeficiente de presión térmica disminuye si la concentración de octano en la mezcla aumenta. El coeficiente de presión térmica aumenta cuando disminuye la temperatura a una misma presión y composición. Las Figuras del coeficiente de presión térmica de las composiciones faltantes se pueden encontrar en el anexo E.

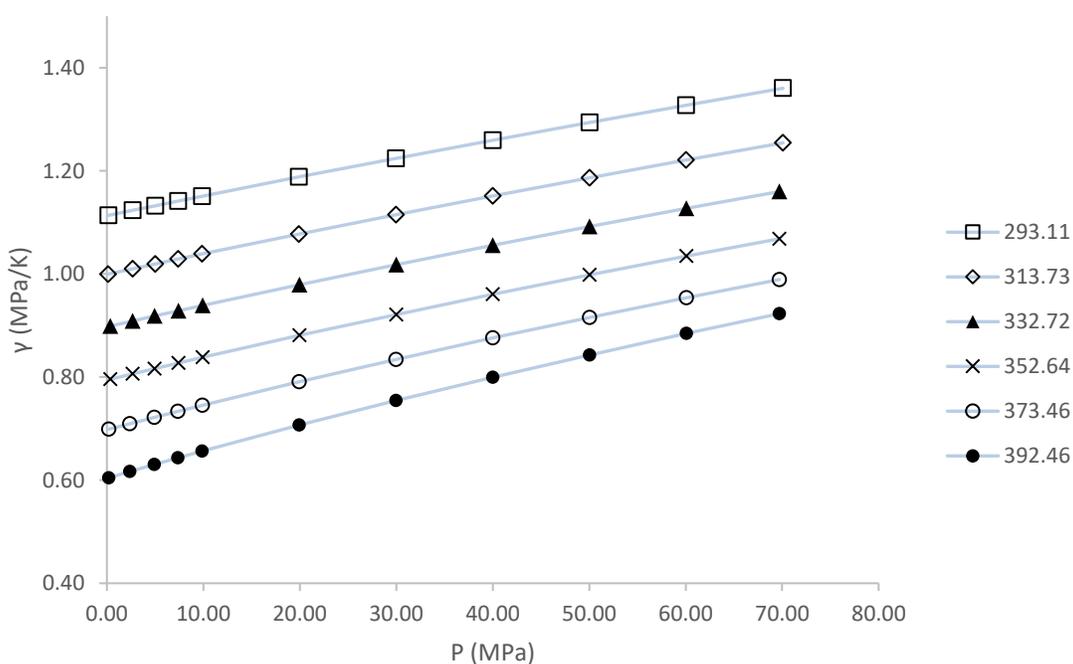


Figura 3.12 Coeficiente de presión térmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.1076$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

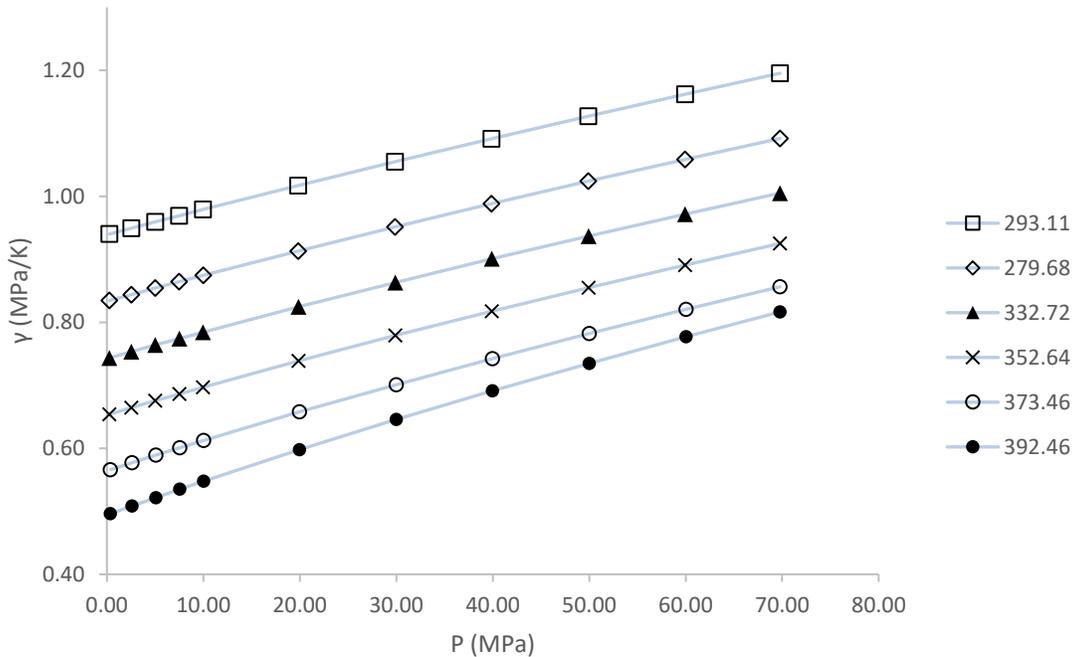


Figura 3.13 Coeficiente de presión térmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.8846$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

### 3.8 COEFICIENTE DE PRESIÓN INTERNA

La presión interna expresa la relación de la temperatura, el coeficiente de presión térmica y la presión:

$$P_i = T\gamma_v - P \quad (3.15)$$

La presión interna representa el cambio de la energía interna de una muestra cuando se expande o comprime isotérmicamente, proporcionando así una base útil para la comprensión de la naturaleza de las interacciones intermoleculares. [40]

En las Figuras 3.14 a 3.15 se ilustran los valores de presión interna calculadas para las composiciones  $x_1 = 0.1076$  y  $x_1 = 0.8846$ , a diferentes presiones y temperaturas. Se puede observar que, a menor temperatura en una misma presión y composición, los valores de presión interna aumentan. El comportamiento de la presión interna respecto a las isothermas es que a mayor presión se obtienen mayores valores de presión interna. De igual forma, entre menor temperatura se maneje, los valores de presión interna son más parecidos entre sí, aunque se aumente la presión. Al aumentar la concentración de octano en la mezcla, los valores de presión interna disminuyen, pareciéndose más entre sí cuando la presencia del 2,5-dimetilfurano es escasa, todo esto a presión y temperatura constantes. Las Figuras del coeficiente de presión interna de las composiciones faltantes se pueden encontrar en el anexo F.

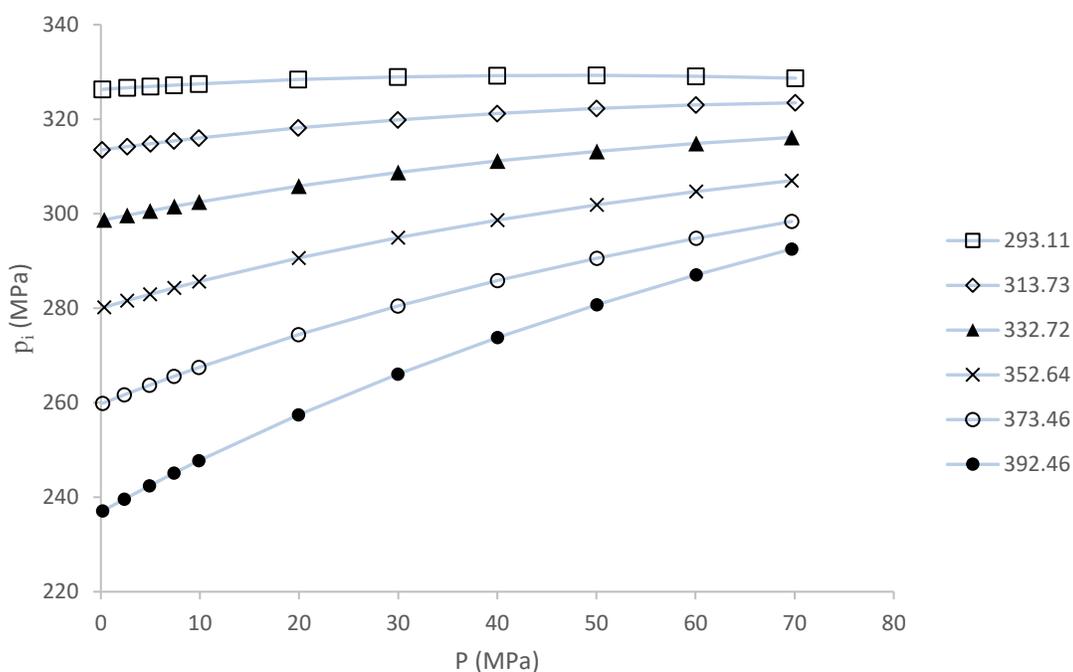


Figura 3.14 Coeficiente de presión interna de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.1076$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

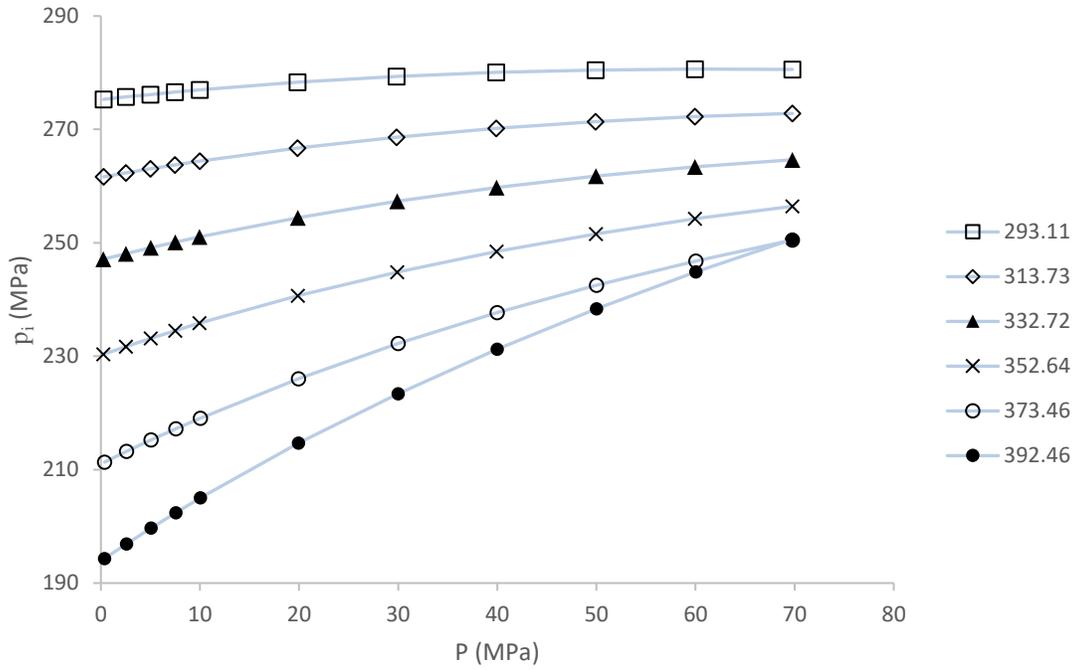


Figura 3.15 Coeficiente de presión interna de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.8846$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

## CONCLUSIONES

Se determinaron experimentalmente las densidades de la mezcla octano + 2,5-dimetilfurano y se realizó el cálculo de sus propiedades derivadas, a las composiciones  $x_{\text{octano}} = (0.0000, 0.1076, 0.3038, 0.5033, 0.7001, 0.8846, 1.0000)$ , en el intervalo de temperatura de 293.11 K a 392.46 K y en el intervalo de presión de 0.1 MPa a 70 MPa, utilizando un densímetro de tubo vibrante de la marca Anton Paar modelo DMA HPM.

Los valores de densidad obtenidos en este trabajo aumentan con incrementos de presión, debido a la compresión de mezcla. Al aumentar la presencia de octano en la mezcla, la densidad disminuye ya que el octano tiene una densidad menor que la del 2,5-dimetilfurano. Los aumentos de temperatura a presión y composición constantes tienen como consecuencia la disminución de la densidad, la cual es provocada por la expansión de la mezcla.

Se corroboró que las mediciones de densidades son precisas y confiables comparando las densidades experimentales de los compuestos puros con valores presentes en la literatura. La incertidumbre reportada es de  $\pm 0.7 \text{ kg/m}^3$ .

La desviación existente entre las densidades experimentales y las calculadas con la ecuación semiempírica tipo Tait se encuentra dentro del valor de incertidumbre experimental, por lo cual se afirma que este modelo representa de forma adecuada las densidades.

Los volúmenes molares de la mezcla tienen valores positivos debido a que esa es la naturaleza del acomodo de las moléculas de una mezcla que está constituida por un compuesto polar (2,5-dimetilfurano) y un no polar (octano). Los volúmenes molares son más cercanos a la idealidad a medida que la presión aumenta, ya que al comprimirse la mezcla resulta un mejor acomodo de sus moléculas.

El incremento de presión en el sistema ocasiona que los valores de expansión térmica isobárica y los de compresión isotérmica disminuyan. Por el contrario, los valores del coeficiente de presión térmica y presión interna aumentan al incrementar la presión.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] P. Castillo, A. Mendoza, P. Caballero, Análisis de las propiedades fisicoquímicas de gasolina y diésel mexicanos reformulados con etanol, *Ingeniería, Investigación y tecnología*, 13 (2012), 293-306.
- [2] J. Lopes da Silva, M. Aznar, Thermophysical properties of 2,5-dimethylfuran and liquid–liquid equilibria of ternary systems water + 2,5-dimethylfuran + alcohols (1-butanol or 2-butanol or 1-hexanol), *Elsevier Fuel*, 136 (2014), 316-325.
- [3] National Institute of Standards and Technology. <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>, consultado en diciembre 2016.
- [4] D. Yerning, *Historia del petróleo*, Editorial Vergara, 1992.
- [5] The International Council on Clean Transportation, *An introduction to petroleum refining and the production of ultra low sulfur gasoline and diesel fuel*, 2011.
- [6] I. Asimov, *How did we find out about oil*, Walker & Company, 1980.
- [7] R. Chang, *W. College*, 7ª edición, Editorial McGraw-Hill, México, 2002.
- [8] R. Torres, J. Castro, *Análisis y simulación de procesos de simulación del petróleo*, Dirección de Publicaciones del Instituto Politécnico Nacional, México, 2002.
- [9] Instituto Argentino del Petróleo y el Gas, *El abecé del Petróleo y del Gas en el mundo y en la Argentina*, (1996), 94-99.
- [10] M. R. Riazi, *Characterization and Properties of Petroleum Fractions*, International Standards Worldwide, 1ª edición, 2005.
- [11] Términos usados en la industria petrolera, Base de datos Institucional, PEMEX, <http://www.ri.pemex.com/files/content/Glosario>, consultado en agosto 2017.
- [12] J. Barroso, ¿Qué es Octanaje?, [www.ref.pemex.com/octanaje](http://www.ref.pemex.com/octanaje), consultado en noviembre 2016.
- [13] D. Lide, *Handbook of chemistry and Physics*, CRC Press, 88ª edición.
- [14] Asian Clean Fuel Association, *MTBE & Engine Performance*, <http://www.acfa.org.sg>, Consultado en noviembre 2016
- [15] A. Migallón-Bermejo, *Obtención Catalítica de MTBE*, Tesis de Doctorado, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, 1993.

- [16] E. Goharshadi, M. Abareshi, R. Jalal, Prediction of volumetric and thermodynamic properties of two aromatic-alcohol mixtures using GMA equation of state, *Fluid Phase Equilibria*, 268 (2008), 61-67.
- [17] M.M Abbott., H. Van Ness, *Teoría y problemas de termodinámica*, McGraw-Hill, 1975.
- [18] *Psicrometria-imi131.mx*, consultado el 15 de marzo de 2017.
- [19] S. González-Arias, J. Ramírez-Cruz, *Propiedades Termodinámicas Derivadas para el sistema (dodecano + heptano + CO<sub>2</sub>) a altas presiones*, Tesis de Licenciatura, Instituto Politécnico Nacional, 2013.
- [20] R. Quevedo-Nolasco, L. Cruz-Hernández, L. Galicia-Luna, O. Elizalde-Solis, Volumetric Properties for the Binary Systems Hexane + Octane and Hexane + Decane at High Temperatures and Pressures, *Journal of Chemical and Engineering Data*, 56 (2011), 4226–4234.
- [21] L. de la Cruz-Hernández, *Determinación de densidades de líquido comprimido del sistema binario hexano+octano de 313 a 363 K y presiones hasta 25 MPa*, Tesis de Licenciatura, Instituto Politécnico Nacional, 2013.
- [22] D. Valter, P. Darja, Temperature and pressure dependence of volumetric properties for binary mixtures of n-heptane and n-octane, *Acta chimica slovenica*, número 54 (2007) 538-544.
- [23] Y. Valdivia Medina, F. Chao-Mujica, R. Careaga-López, A. Angueira-Sanabria, Método de Cuckow para la calibración de los densímetros de inmersión en el laboratorio de densidad del Instituto Nacional de Investigaciones en Metrología, *Boletín científico Técnico INIMET*, 2 (2015) 20-31.
- [24] J. Macías-Pérez, *Determinación experimental de las densidades hasta altas presiones de las mezclas gaseosas N<sub>2</sub> +CO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>+C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>*, Tesis de Maestría, Instituto Politécnico Nacional, 2010.
- [25] *Instrumentación Anton Paar*, [www.anton-paar.com/mx](http://www.anton-paar.com/mx), consultado en enero 2017.
- [26] *Octane certificate of analysis*, Sigma Aldrich, 2012.
- [27] *2,5 -Dimethylfuran certificate of analysis*, Sigma Aldrich, 2012.
- [28] C. Bouchot, D. Richon, An enhanced method to calibrate vibrating tube densimeters, *Fluid Phase Equilibria*, 191 (2001) 189–208
- [29] F. Gómez Ramos, *Optimización del tiempo de calibración y sistematización del método FPMC para densímetros de tubo vibrante*, Tesis de Maestría, IPN, 2017.

- [30] R. García-Morales, M. Vázquez-Luna, F. Verónico-Sánchez, H. Meza-Melendres, Reporte de calibración de termómetros de resistencia de platino (PRT).
- [31] J. Dymond, J. Robertson, J. Isdale, Transport Properties of Nonelectrolyte Liquid Mixtures—III. Viscosity Coefficients for n-Octane, n-Dodecane, and Equimolar Mixtures of n-Octane + n-Dodecane and n-Hexane + n-Dodecane from 25 to 100°C at Pressures Up to the Freezing Pressure or 500 MPa, *Int. J. Thermophys.* 2 (1981) 133–154.
- [32] D. R. Caudwell, J. P. Martin Trusler, V. Vesovic, W. A. Wakeham, Viscosity and Density of Five Hydrocarbon Liquids at Pressures up to 200 MPa and Temperatures up to 473 K, *J. Chem. Eng.*, 54 (2009) 359–366.
- [33] Y. A. Sanmamed, A. Dopazo-Paz, D. González-Salgado, J. Troncoso, L. Romani, An accurate calibration method for high pressure vibrating tube densimeters in the density interval (700 to 1600) kg·m<sup>-3</sup>, *J. Chem. Thermodyn.* 41 (2009) 1060–1068.
- [34] L. Lugo, M. J. P. Comuñas, E. R. López, J. Fernández, ( $\rho$ ,  $V_m$ ,  $T$ ,  $x$ ) measurements of dimethyl carbonate + octane binary mixtures I. Experimental results, isothermal compressibilities, isobaric expansivities and internal pressures, *Fluid Phase Equilib.* 186 (2001) 235–255.
- [35] A. A. Abdussalam, G. R. Ivaniš, I. R. Radović, M. Lj. Kijevčanin, Densities and derived thermodynamic properties for the (n-heptane + n-octane), (n-heptane + ethanol) and (n-octane + ethanol) systems at high pressures, *J. Chem. Thermodyn.* 100 (2016) 89–99.
- [36] A. R. H. Goodwin, E. P. Donzier, O. Vancauwenberghe, A. D. Fitt, K. A. Ronaldson, W. A. Wakeham, M. Manrique de Lara, F. Marty, B. Mercier, A Vibrating Edge Supported Plate, Fabricated by the Methods of Micro Electro Mechanical System for the Simultaneous Measurement of Density and Viscosity: Results for Methylbenzene and Octane at Temperatures between (323 and 423) K, and Pressures in the Range (0.1 to 68) MPa, *J. Chem. Eng. Data* 51 (2006) 190–208.
- [37] Jeřak S, Dzida M, Zorębski M. High pressure physicochemical properties of 2-methylfuran and 2,5-dimethylfuran – second generation biofuels, *Fuel*, 184 (2016) 334–343.
- [38] Lomba L, Aznar I, Gascón I, Lafuente C, Ginera B. Thermophysical study of the furan family. *Thermochimica Acta* 617 (2015) 54–64.

- [39] P. Sibiya, Excess molar volumes, partial molar volumes and isentropic compressibility of binary systems (ionic liquid + alkanol), Tesis de Maestría, Durban University of Technology, 2008.
- [40] I. Gorica et al., Modeling of density and calculations of derived volumetric properties for n-hexane, toluene and dichloromethane at pressures 0.1–60 MPa and temperatures 288.15–413.15 K, Journal of the Serbian Chemical Society, 80 (2015)1423-1433
- [41] Biofuels, Alternative Feedstocks and Conversion Processes, Pandey, Larroche, Ricke, Dussap, Gnansounou, 2011.
- [42] C. Bouchot, J. Sánchez-Ochoa, y J. Castro-Quilantán, Propagation of uncertainties in high pressure density measurements through calibration models of a vibrating tube densimeter, Instituto Politécnico Nacional, 2010.
- [43] M. Groover, Fundamentos de Manufactura Moderna, Pearson, 1997.
- [44] H. Zamora, L. Galicia, O. Elizalde-Solis, P. Hernández-Rosales, E. Méndez-Lango, Derived thermodynamic properties for the (ethanol + decane) and (carbon dioxide+ ethanol + decane) systems at high pressures, J. Chem. Thermodynamics, 55 (2012) 130-137.

## **ANEXO A**

### **DENSIDADES DE LA MEZCLA OCTANO + 2,5-DIMETILFURANO**

Tabla A.1 Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )}  
a  $x_1 = 0.1076$ .

<b><math>T = 293.11</math> K</b>		<b><math>T = 313.73</math> K</b>		<b><math>T = 332.72</math> K</b>		<b><math>T = 352.64</math> K</b>		<b><math>T = 373.46</math> K</b>		<b><math>T = 392.46</math> K</b>	
<b><math>P</math> (MPa)</b>	<b><math>\rho</math> (kg/m<sup>3</sup>)</b>	<b><math>P</math> (MPa)</b>	<b><math>\rho</math> (kg/m<sup>3</sup>)</b>	<b><math>P</math> (MPa)</b>	<b><math>\rho</math> (kg/m<sup>3</sup>)</b>	<b><math>P</math> (MPa)</b>	<b><math>\rho</math> (kg/m<sup>3</sup>)</b>	<b><math>P</math> (MPa)</b>	<b><math>\rho</math> (kg/m<sup>3</sup>)</b>	<b><math>P</math> (MPa)</b>	<b><math>\rho</math> (kg/m<sup>3</sup>)</b>
0.16	867.92	0.14	846.41	0.35	826.37	0.35	804.21	0.19	781.46	0.19	756.64
2.67	870.21	2.67	849.06	2.66	829.14	2.66	807.50	2.37	785.11	2.37	761.07
5.00	872.29	5.01	851.45	4.97	831.88	4.97	810.63	4.91	789.20	4.91	765.92
7.39	874.34	7.39	853.80	7.43	834.67	7.43	813.84	7.38	792.99	7.38	770.37
9.89	876.46	9.89	856.20	9.94	837.40	9.94	817.01	9.89	796.67	9.89	774.64
19.92	884.52	19.92	865.28	19.97	847.61	19.97	828.62	19.94	810.00	19.94	789.85
29.96	891.93	29.96	873.57	30.00	856.81	30.00	838.94	29.98	821.52	29.98	802.79
40.00	898.84	40.00	881.22	40.03	865.28	40.02	848.21	40.02	831.80	40.02	814.14
50.03	905.32	50.03	888.32	50.04	873.04	50.04	856.71	50.06	841.08	50.06	824.29
60.05	911.38	60.05	894.93	60.09	880.17	60.09	864.53	60.09	849.58	60.09	833.56
70.09	917.17	70.09	901.22	69.72	886.69	69.72	871.51	69.71	857.14	69.71	841.74

Tabla A.2 Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )}  
a  $x_1 = 0.3038$ .

<b><math>T = 293.11</math> K</b>		<b><math>T = 313.73</math> K</b>		<b><math>T = 332.72</math> K</b>		<b><math>T = 352.64</math> K</b>		<b><math>T = 373.46</math> K</b>		<b><math>T = 392.46</math> K</b>	
<b><math>P</math> (MPa)</b>	<b><math>\rho</math> (kg/m<sup>3</sup>)</b>										
0.14	817.06	0.14	796.85	0.31	778.28	0.30	757.43	0.34	733.97	0.34	713.37
2.41	819.13	2.41	799.27	2.49	780.93	2.49	760.55	2.57	737.79	2.57	717.88
4.85	821.35	4.85	801.76	4.89	783.71	4.90	763.82	5.01	741.75	5.01	722.5
7.34	823.54	7.34	804.25	7.40	786.49	7.40	767.09	7.51	745.64	7.51	726.97
9.84	825.67	9.84	806.7	9.92	789.2	9.92	770.23	10.02	749.23	10.02	731.18
19.87	833.72	19.87	815.79	19.95	799.34	19.96	781.74	20.06	762.5	20.06	746.09
29.91	841.09	29.91	824	29.98	808.44	29.98	791.9	30.08	773.96	30.08	758.72
39.94	847.93	39.94	831.54	40.03	816.71	40.03	801.01	40.11	784.09	40.11	769.76
49.98	854.31	49.98	838.53	50.06	824.29	50.06	809.3	50.13	793.35	50.13	779.6
60.01	860.3	60.01	845.07	60.09	831.35	60.09	816.95	60.14	801.72	60.14	788.56
69.77	865.82	69.77	851.05	69.85	837.71	69.85	823.87	69.88	809.2	69.88	796.56

Tabla A.3 Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )}  
a  $x_1 = 0.7001$ .

<b>T = 293.11 K</b>		<b>T = 313.73 K</b>		<b>T = 332.72 K</b>		<b>T = 352.64 K</b>		<b>T = 373.46 K</b>		<b>T = 392.46 K</b>	
<b>P (MPa)</b>	<b><math>\rho</math> (kg/m<sup>3</sup>)</b>										
0.24	742.91	0.25	724.93	0.27	708.11	0.27	689.68	0.34	669.27	0.34	650.84
2.50	744.95	2.50	727.24	2.52	710.74	2.52	692.79	2.56	673	2.56	655.15
4.96	747.08	4.96	729.72	4.99	713.53	4.99	696.02	5.02	676.8	5.02	659.59
7.43	749.18	7.43	732.06	7.44	716.18	7.44	699.08	7.43	680.32	7.43	663.65
9.88	751.21	9.88	734.37	9.86	718.72	9.86	702	9.89	683.82	9.89	667.58
19.79	758.89	19.79	742.97	19.85	728.41	19.85	712.96	19.89	696.5	19.89	681.64
29.79	765.99	29.79	750.85	29.87	737.09	29.87	722.58	29.92	707.36	29.92	693.53
39.80	772.53	39.80	757.99	39.88	744.92	39.88	731.18	39.93	716.92	39.93	703.85
49.81	778.61	49.81	764.59	49.89	752.1	49.89	739	49.94	725.51	49.94	713.06
59.82	784.32	59.82	770.77	59.91	758.75	59.91	746.18	59.95	733.2	59.95	721.36
69.55	789.54	69.55	776.4	69.65	764.78	69.65	752.67	69.69	740.18	69.69	728.81

Tabla A.4 Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )}  
a  $x_1 = 0.8846$ .

$T = 293.11 \text{ K}$		$T = 313.73 \text{ K}$		$T = 332.72 \text{ K}$		$T = 352.64 \text{ K}$		$T = 373.46 \text{ K}$		$T = 392.46 \text{ K}$	
$P$ (MPa)	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )										
0.28	716.700	0.28	699.400	0.27	683.230	0.27	665.810	0.38	646.250	0.38	629.190
2.53	718.710	2.53	701.720	2.55	685.830	2.55	668.880	2.61	649.780	2.61	633.350
5.01	720.830	5.01	704.110	5.04	688.620	5.04	672.070	5.09	653.580	5.09	637.660
7.50	722.890	7.50	706.460	7.52	691.270	7.52	675.110	7.58	657.130	7.58	641.760
9.99	724.910	9.99	708.770	9.96	693.780	9.97	677.980	10.05	660.420	10.05	645.570
19.85	732.400	19.85	717.140	19.88	703.180	19.88	688.570	19.96	672.520	19.96	659.010
29.86	739.340	29.86	724.810	29.90	711.620	29.90	697.950	30.00	683.250	30.00	670.410
39.89	745.720	39.89	731.810	39.93	719.280	39.93	706.350	39.99	692.490	39.99	680.460
49.92	751.680	49.92	738.310	49.95	726.330	49.95	713.940	50.01	700.800	50.02	689.360
59.95	757.260	59.95	744.350	59.96	732.860	59.96	720.930	60.04	708.400	60.04	697.450
69.78	762.390	69.78	749.910	69.77	738.770	69.77	727.270	69.78	715.240	69.78	704.660

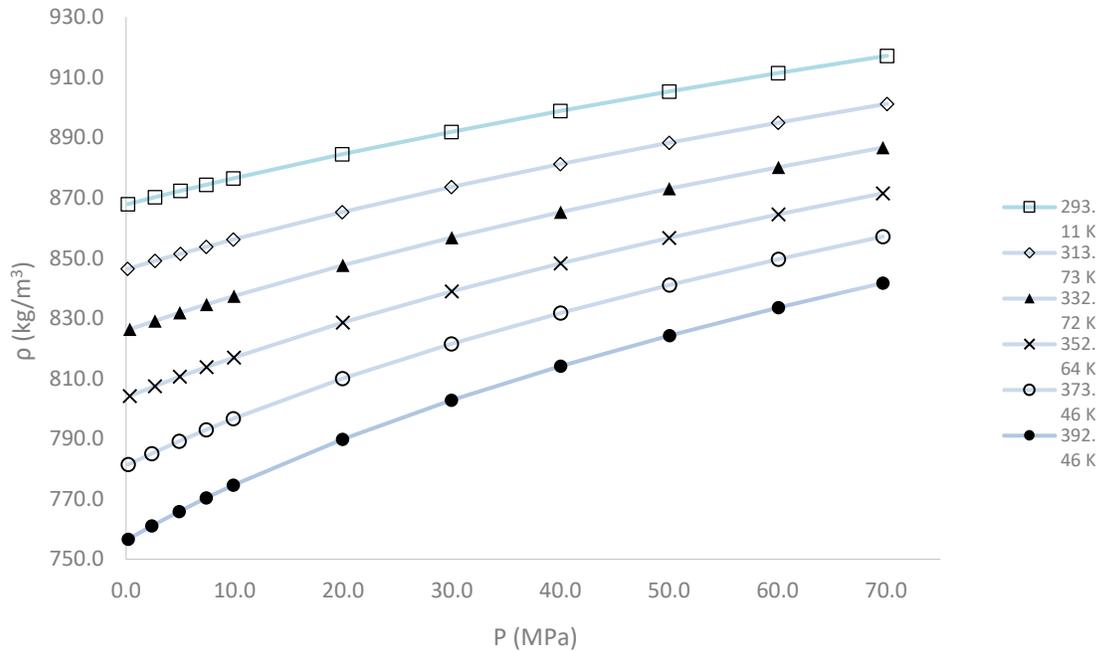


Figura A.1 Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.1076$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

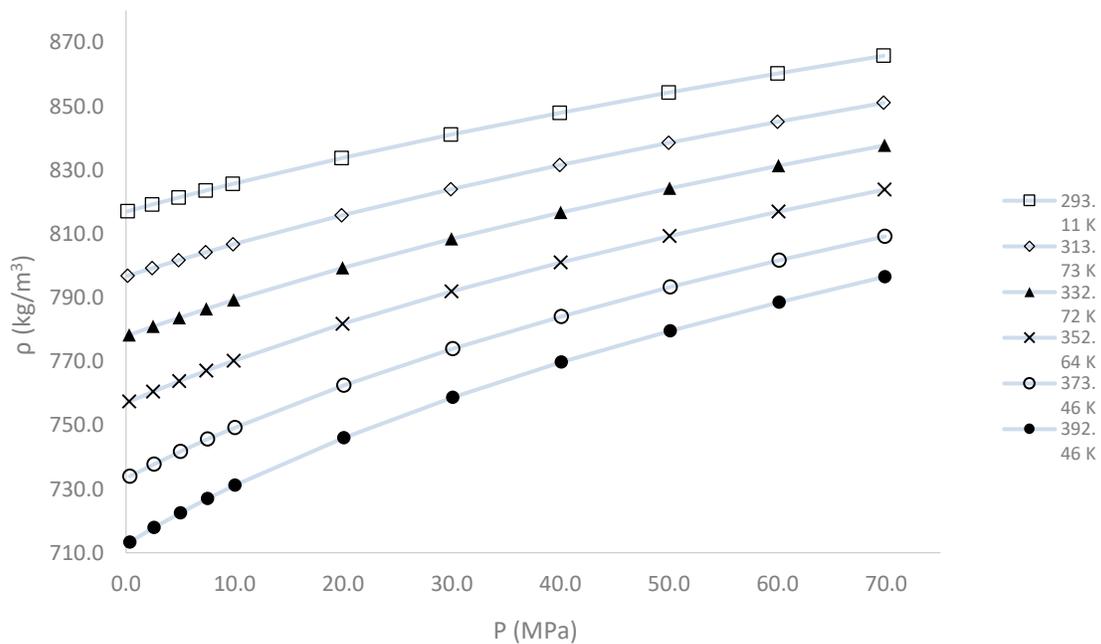


Figura A.2 Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.3038$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

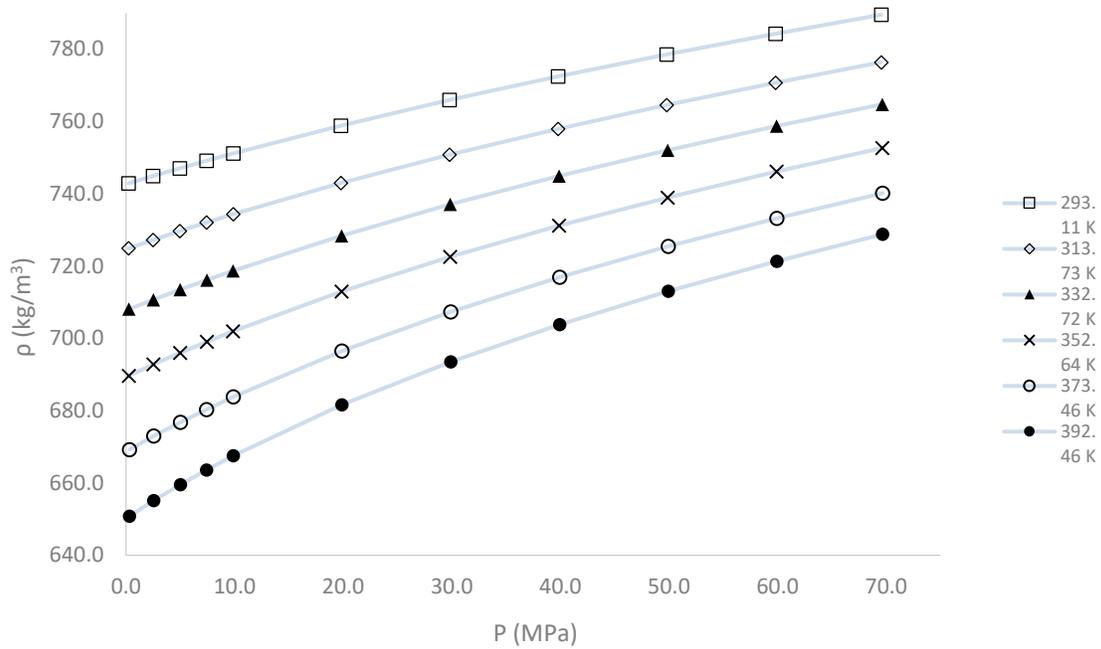


Figura A.3 Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.7001$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

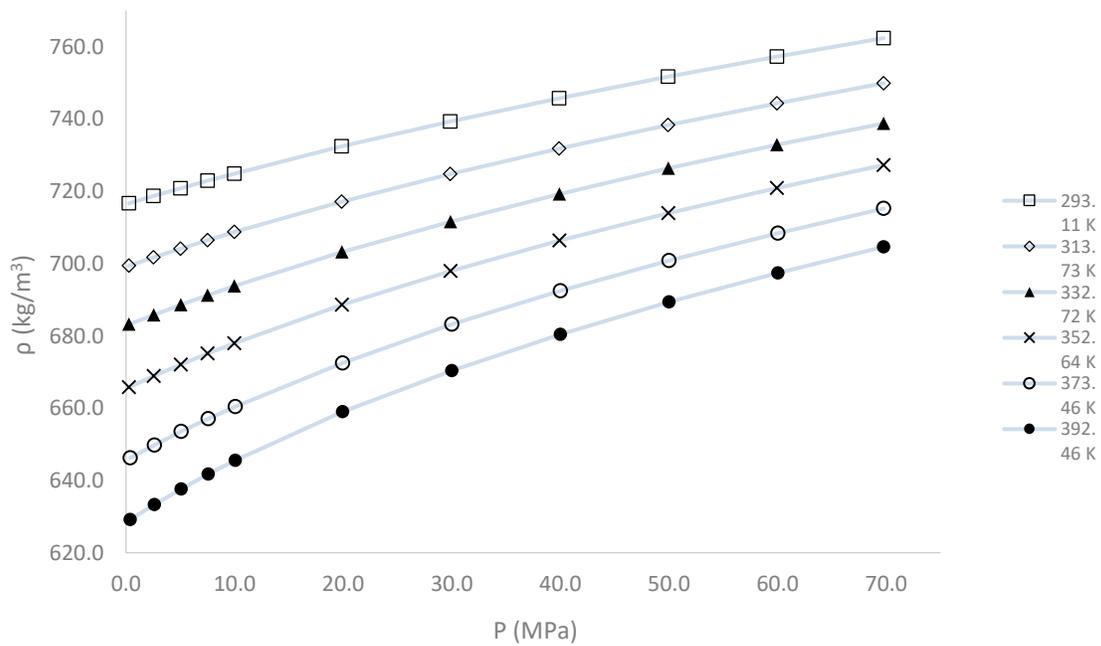


Figura A.4 Densidades experimentales de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.8846$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

**ANEXO B**

**VOLÚMENES MOLARES DE LA MEZCLA OCTANO + 2,5-  
DIMETILFURANO**

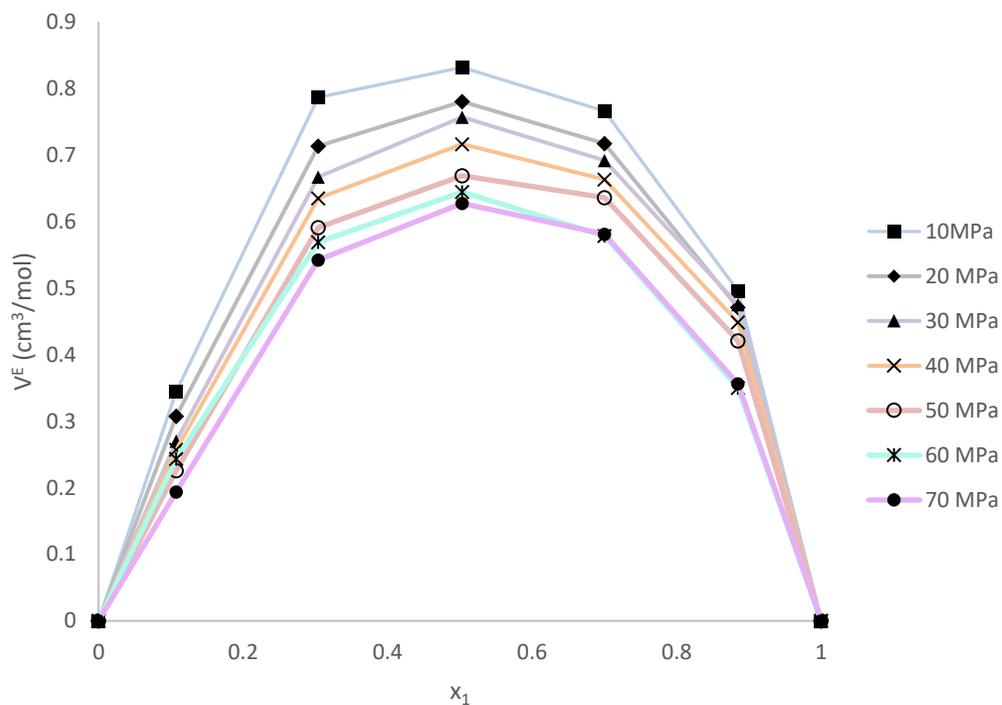


Figura B.1 Volúmenes molares en exceso de la mezcla octano (1) + 2,5-dimetilfurano (2) respecto a la composición a diferentes presiones a 313.73 K.

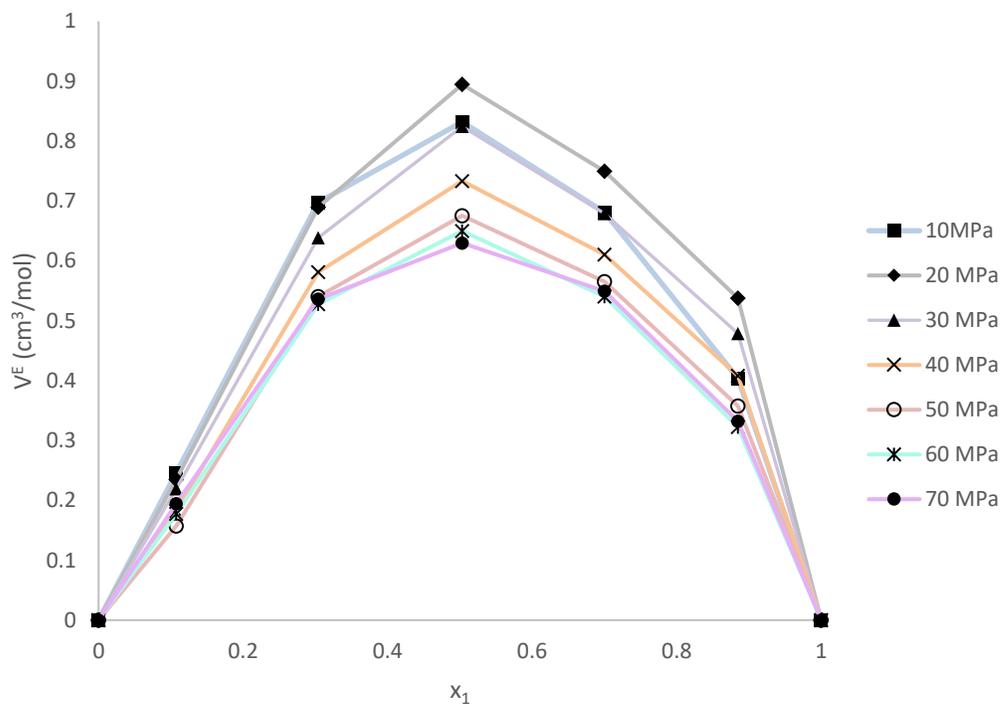


Figura B.2 Volúmenes molares en exceso de la mezcla octano (1) + 2,5-dimetilfurano (2) respecto a la composición a diferentes presiones a 332.72 K.

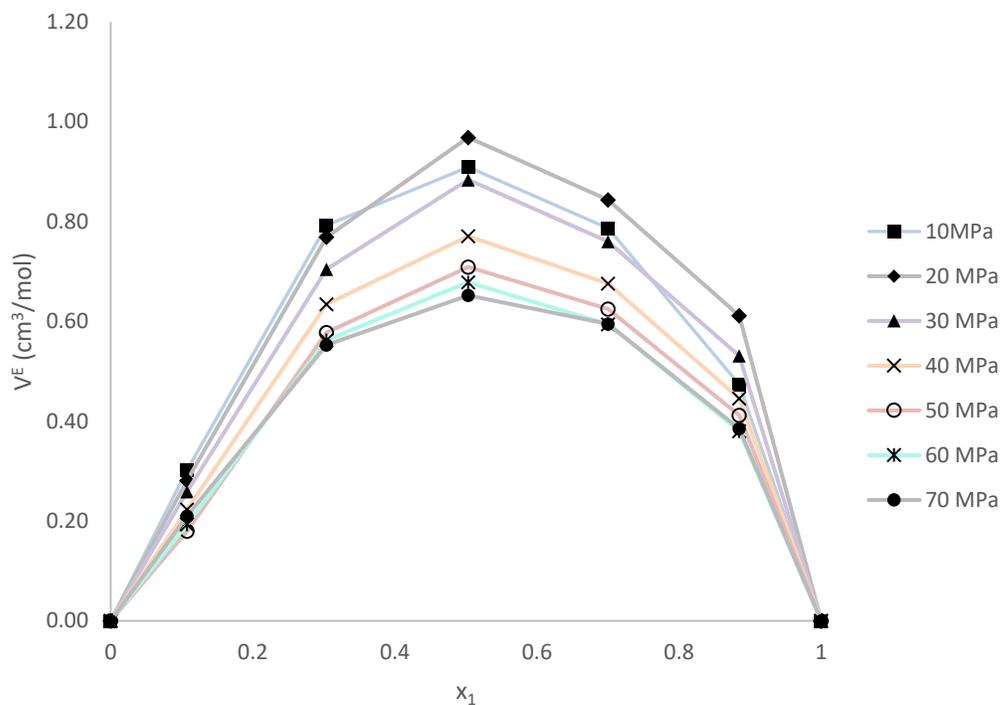


Figura B.3 Volúmenes molares en exceso de la mezcla octano (1) + 2,5-dimetilfurano (2) respecto a la composición a diferentes presiones a 352.64 K.

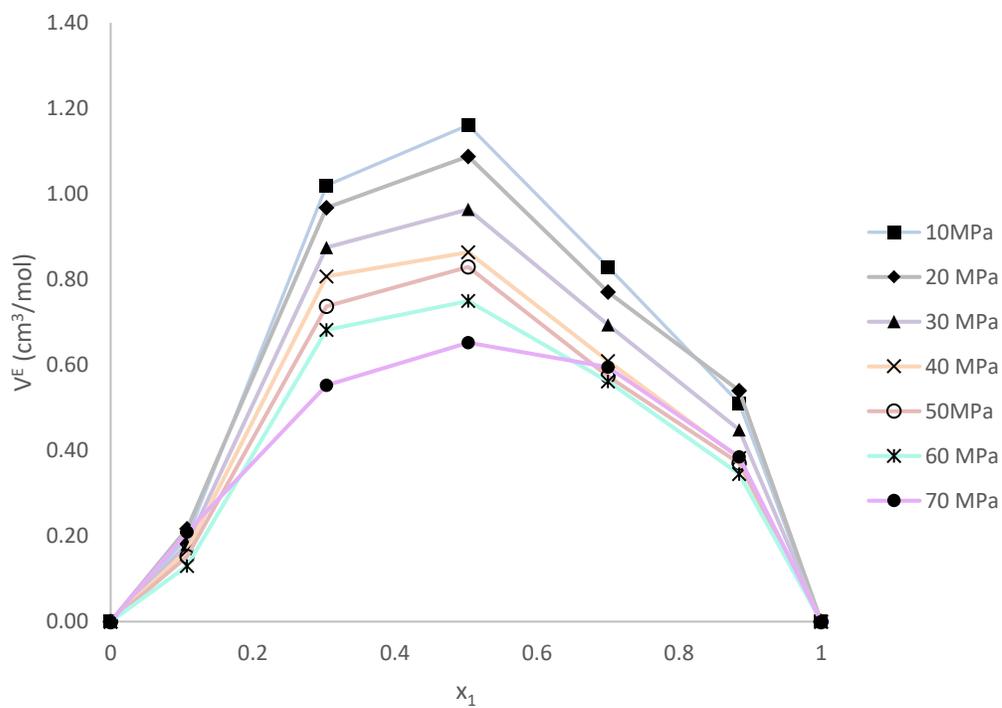


Figura B.4 Volúmenes molares en exceso de la mezcla octano (1) + 2,5-dimetilfurano (2) respecto a la composición a diferentes presiones a 373.46 K.

## **ANEXO C**

### **COEFICIENTE DE EXPANSIÓN TÉRMICA DE LA MEZCLA OCTANO + 2,5-DIMETILFURANO**

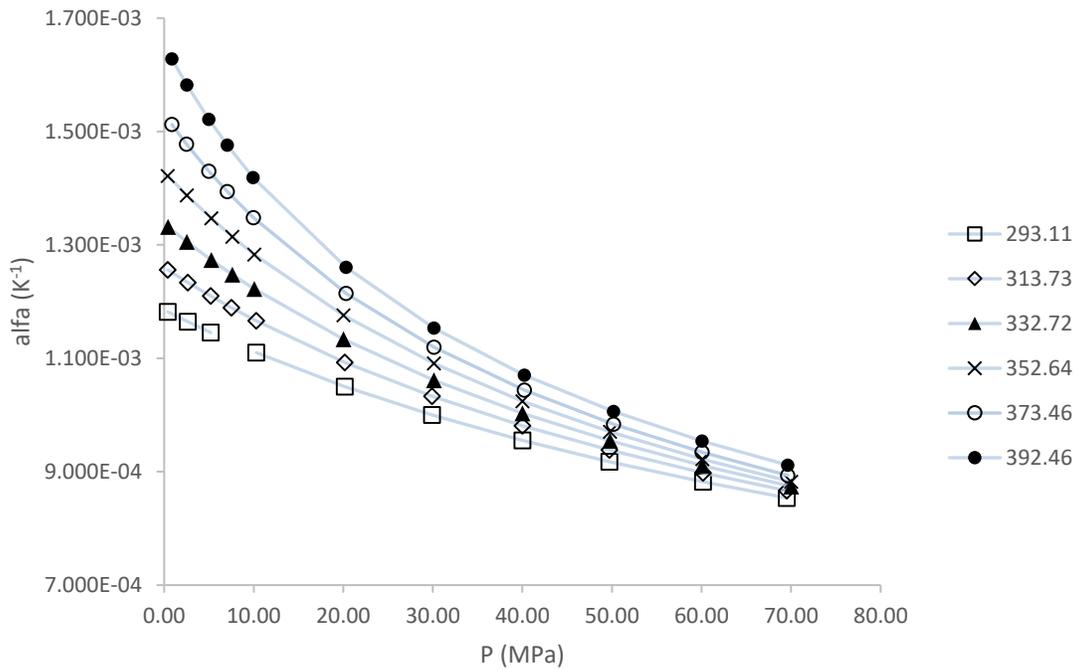


Figura C.1 Coeficiente de expansión térmica isobárica del 2,5-dimetilfurano puro respecto a la presión a diferentes temperaturas.

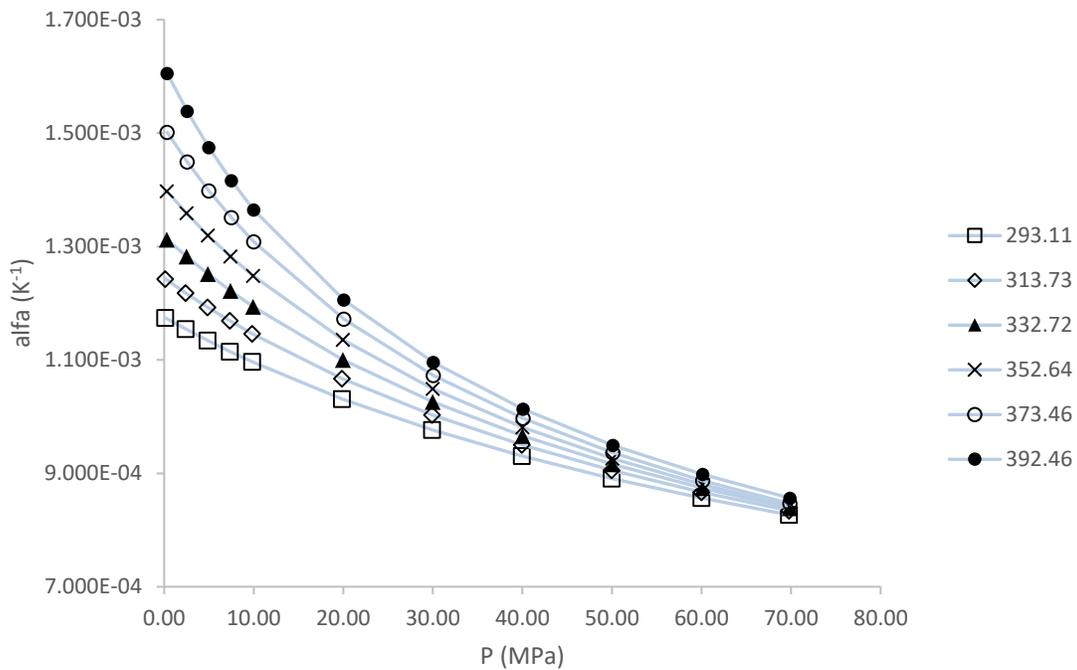


Figura C.2 Coeficiente de expansión térmica isobárica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.3038$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

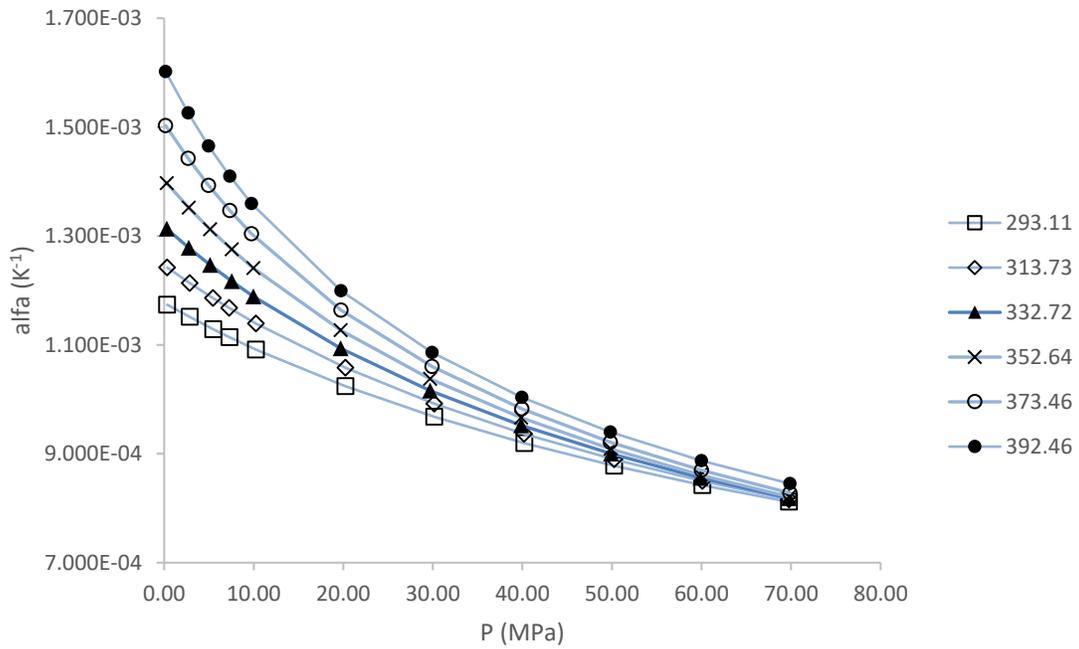


Figura C.3 Coeficiente de expansión térmica isobárica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.5033$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

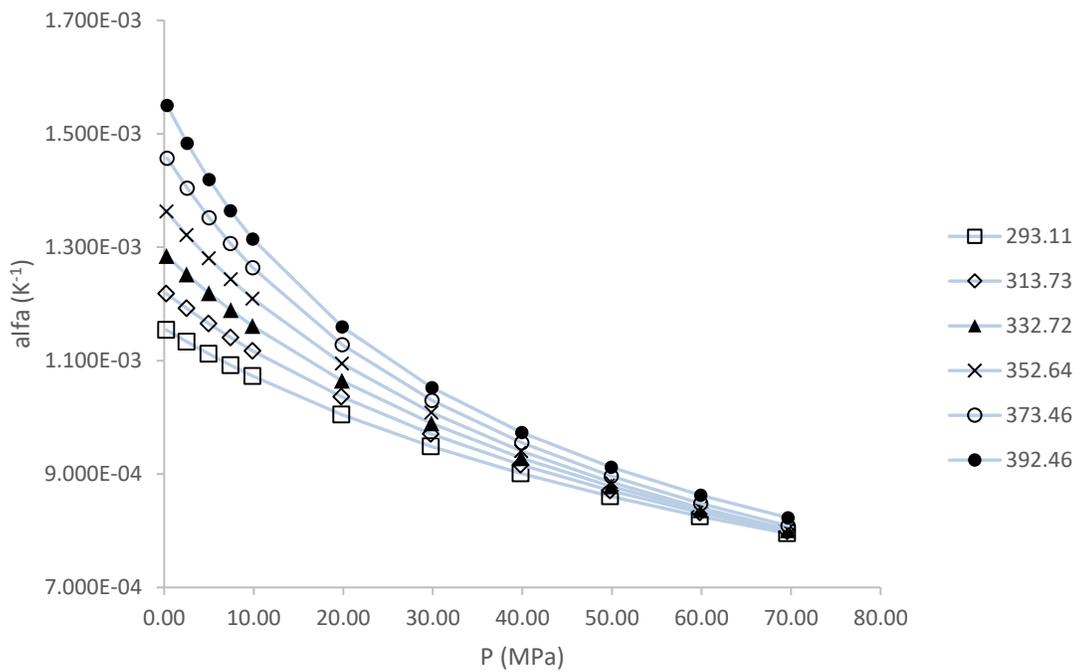


Figura C.4 Coeficiente de expansión térmica isobárica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.7001$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

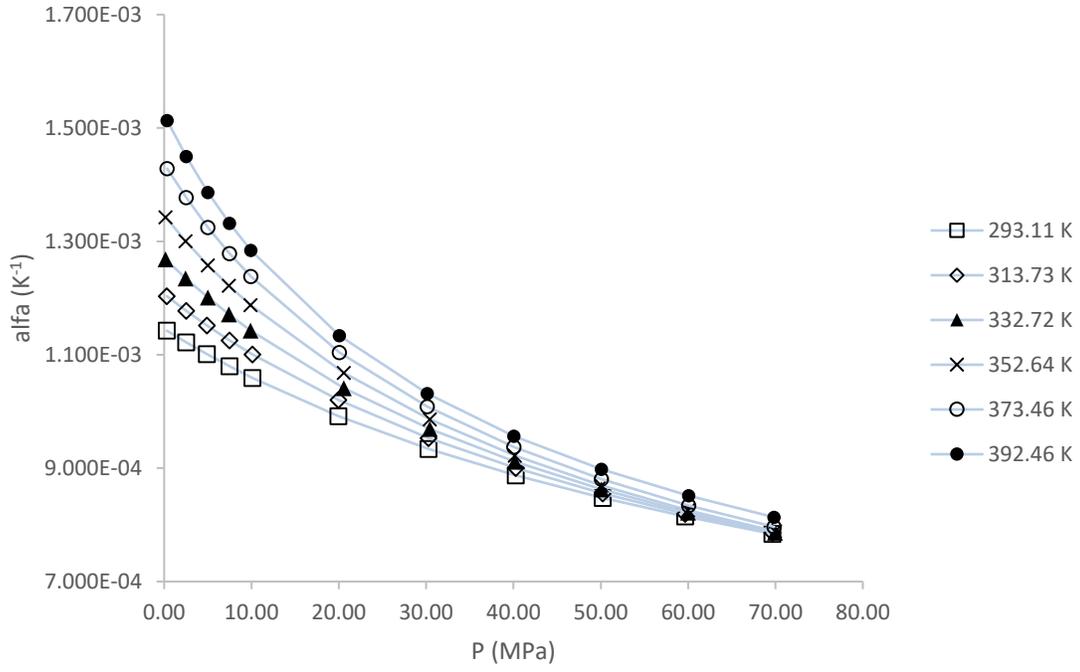


Figura C.5 Coeficiente de expansión térmica isobárica del octano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas.

## **ANEXO D**

### **COEFICIENTE DE COMPRESIBILIDAD ISOTÉRMICA DE LA MEZCLA OCTANO + 2,5-DIMETILFURANO**

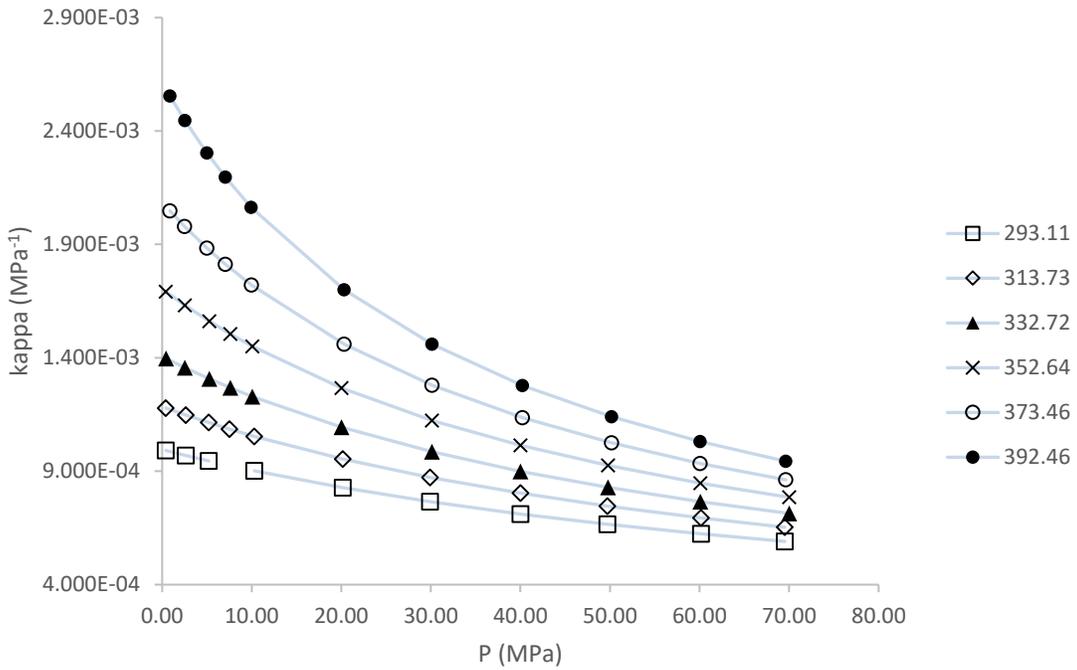


Figura D.1 Coeficiente de compresibilidad isotérmica del 2,5-dimetilfurano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas.

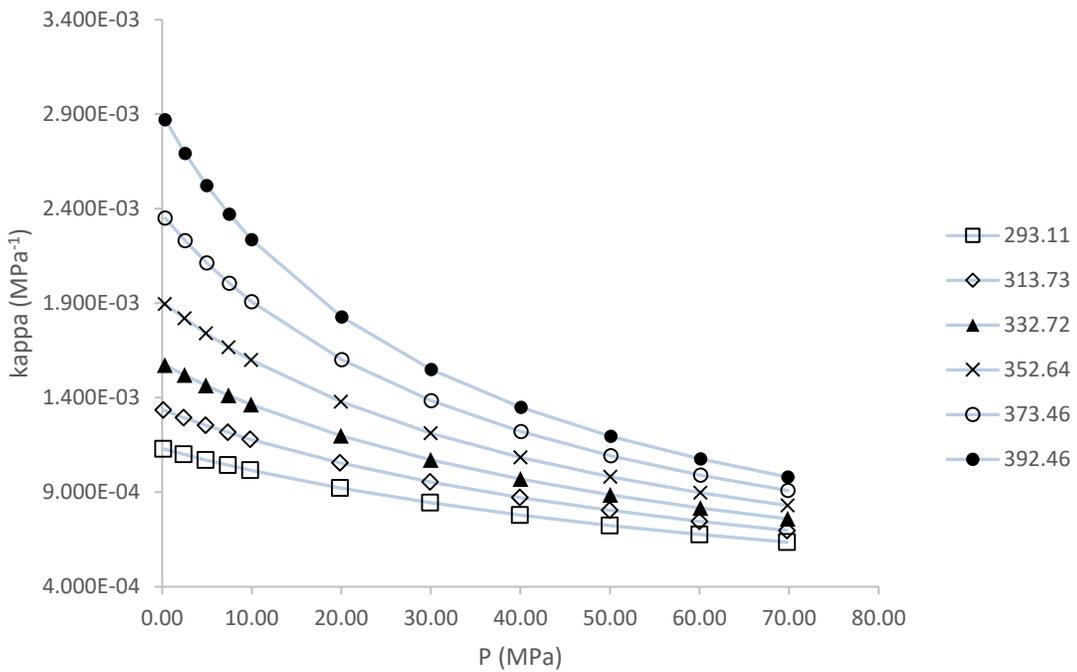


Figura D.2 Coeficiente de compresibilidad isotérmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.3038$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

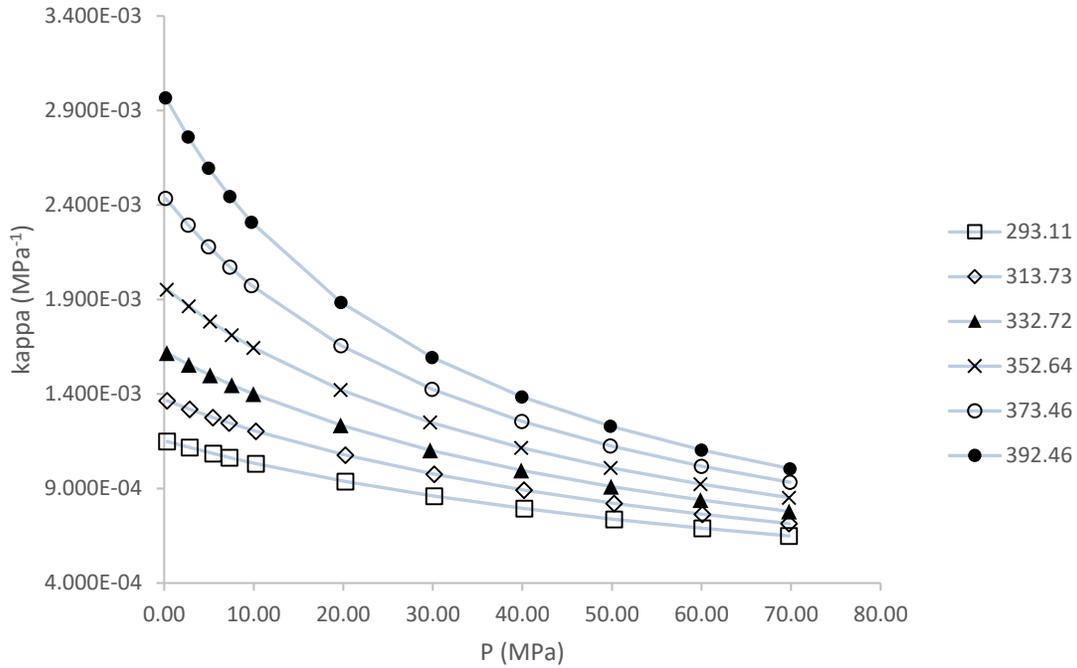


Figura D.3 Coeficiente de compresibilidad isotérmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.5033$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

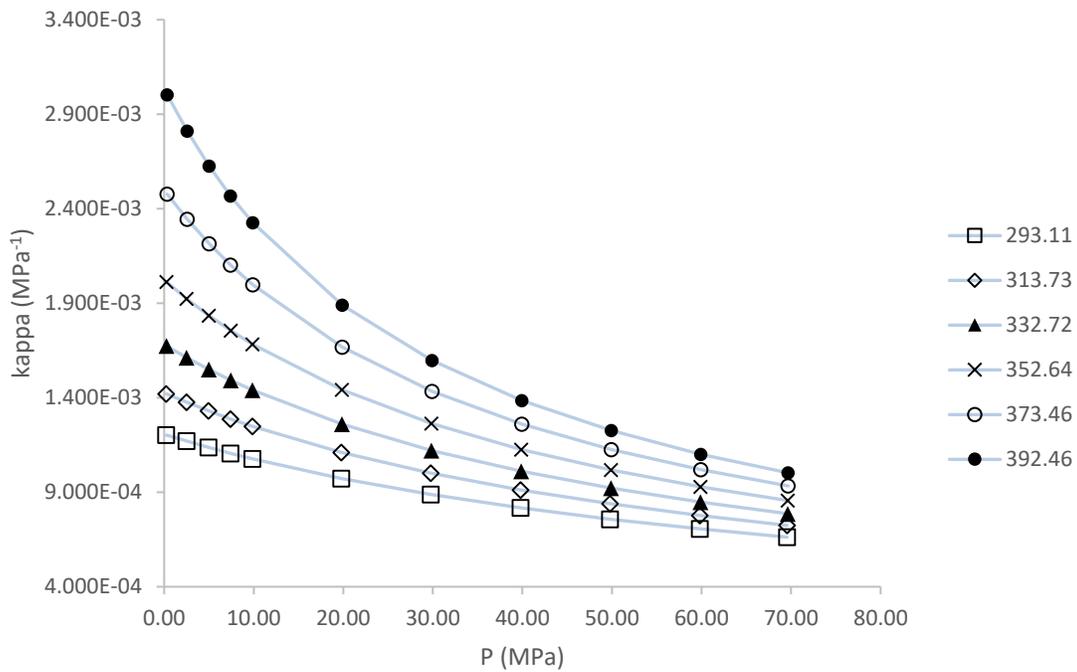


Figura D.4 Coeficiente de compresibilidad isotérmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.7001$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

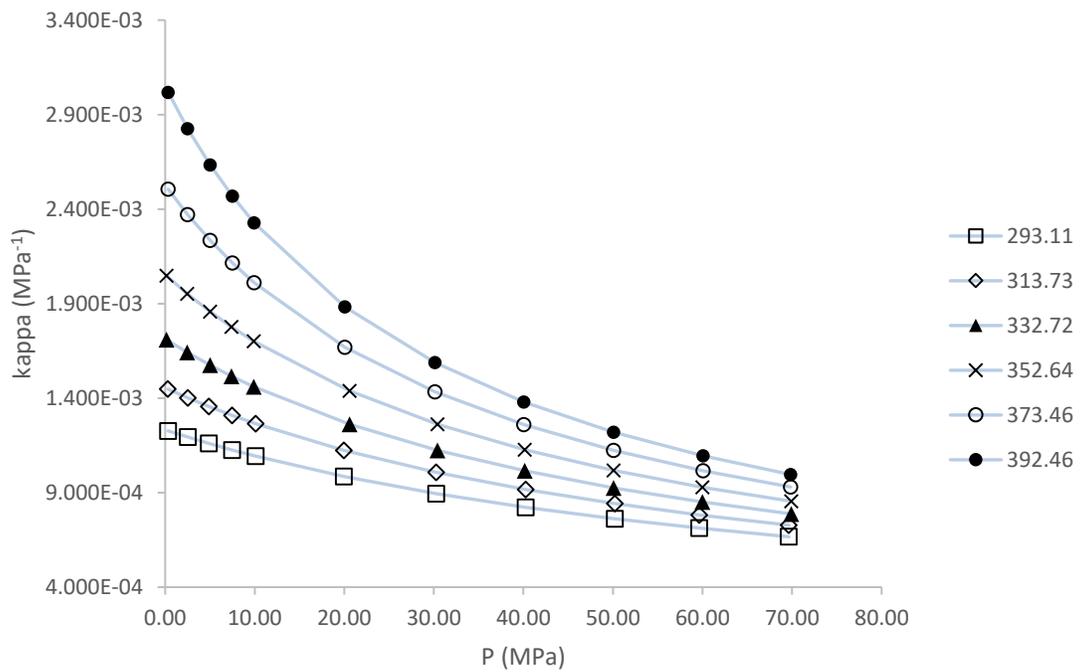


Figura D.5 Coeficiente de compresibilidad isotérmica del octano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas.

**ANEXO E**  
**COEFICIENTE DE PRESIÓN TÉRMICA**

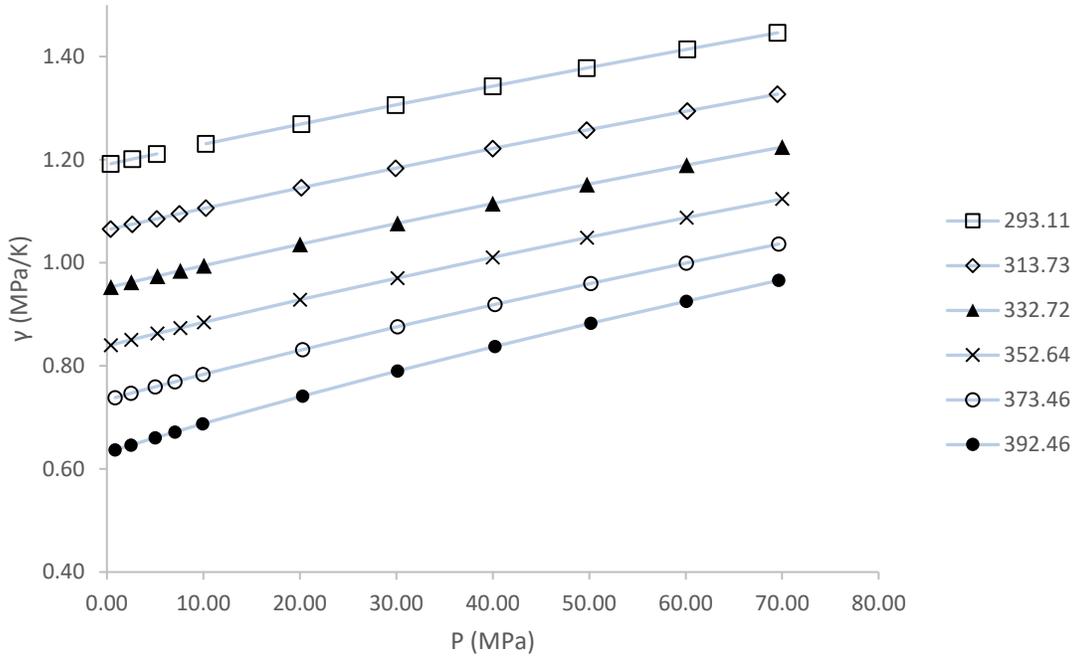


Figura E.1 Coeficiente de presión térmica del 2,5-dimetilfurano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas.

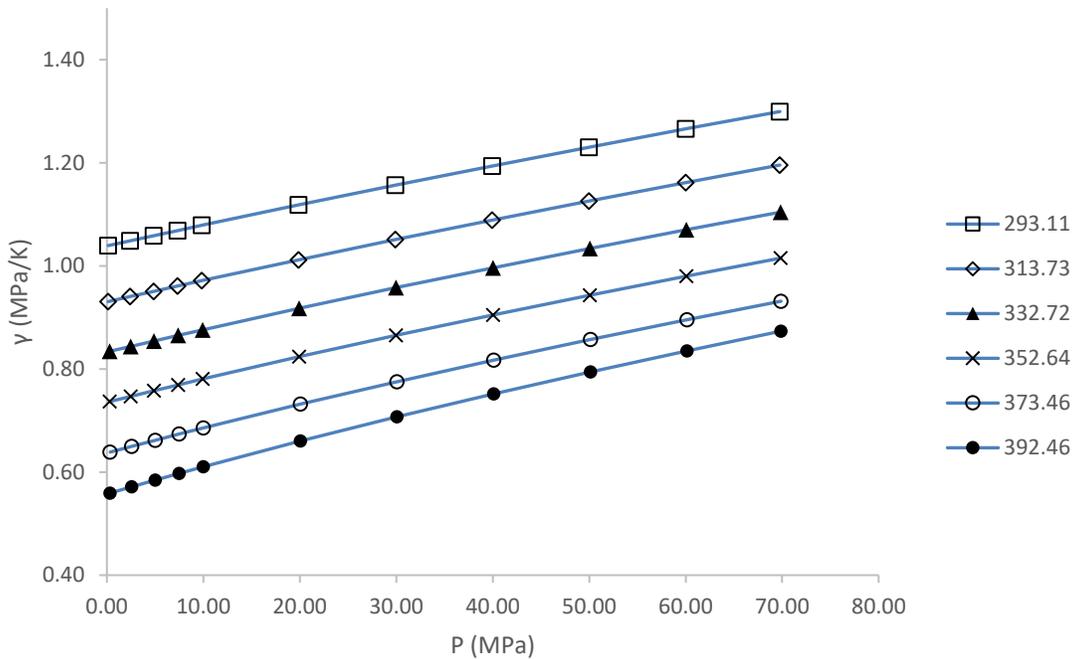


Figura E.2 Coeficiente de presión térmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.3038$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

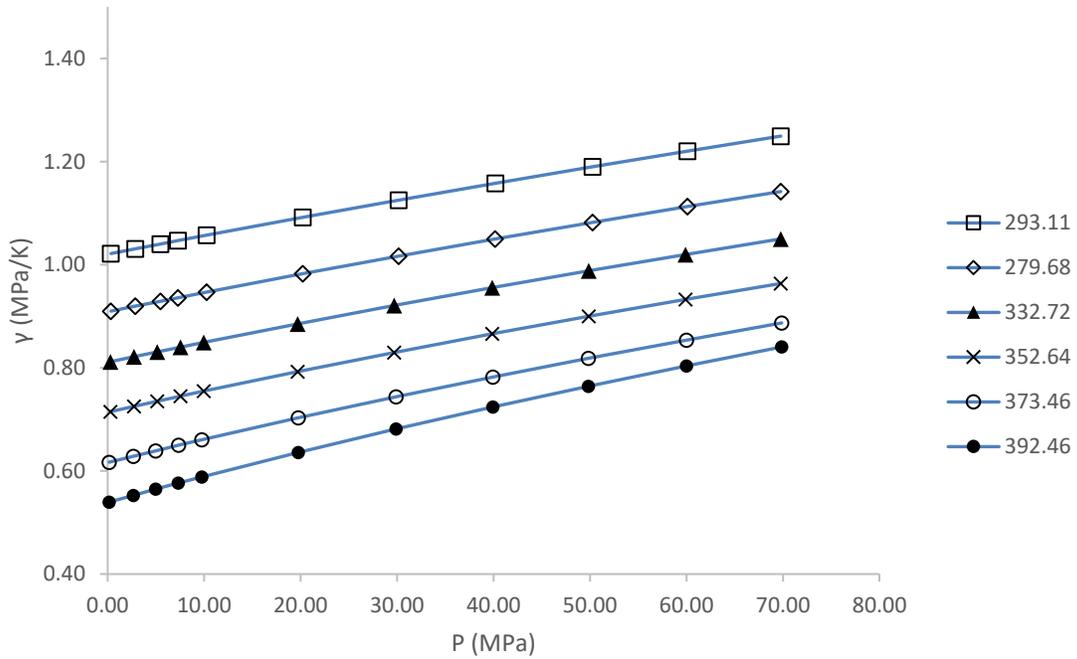


Figura E.3 Coeficiente de presión térmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.5033$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

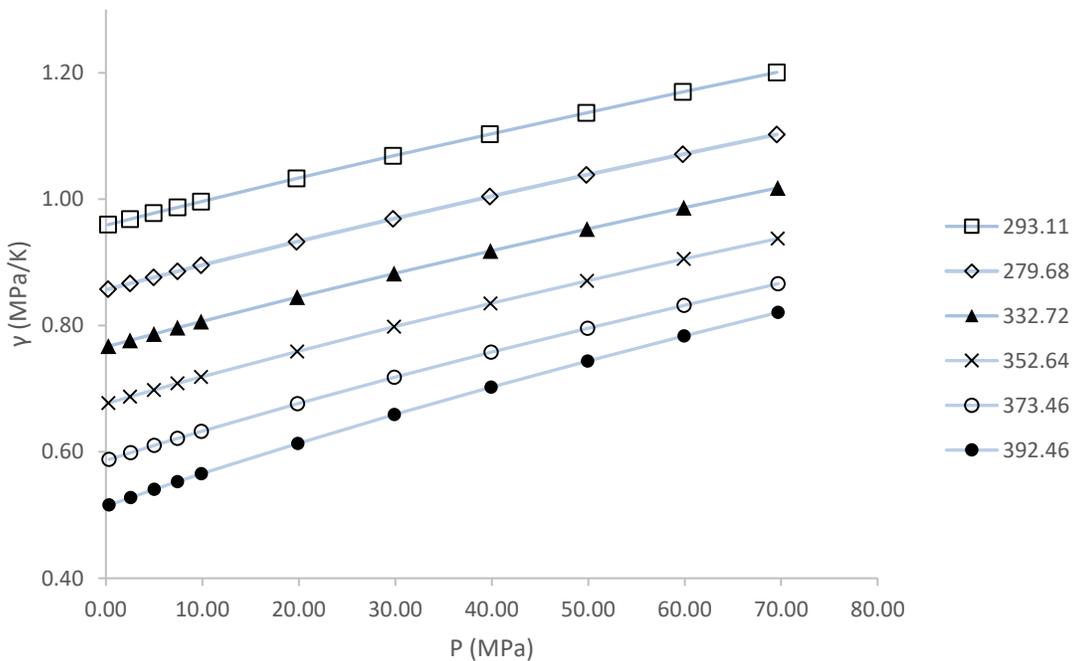


Figura E.4 Coeficiente de presión térmica de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.7001$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

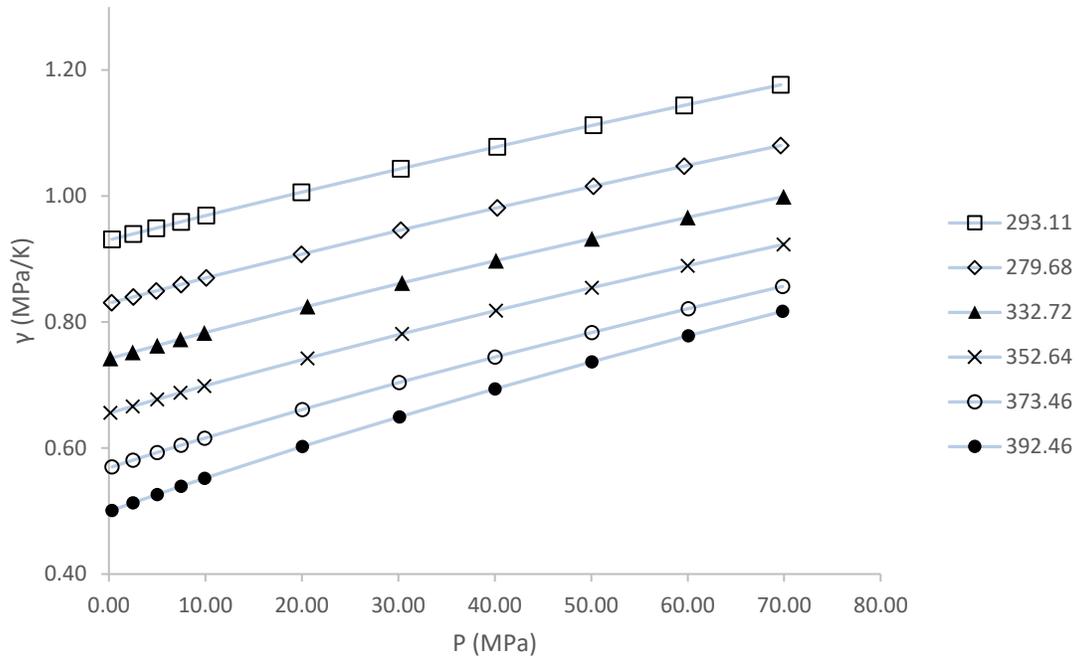


Figura E.5 Coeficiente de presión térmica del octano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas.

**ANEXO F**  
**COEFICIENTE DE PRESIÓN INTERNA**

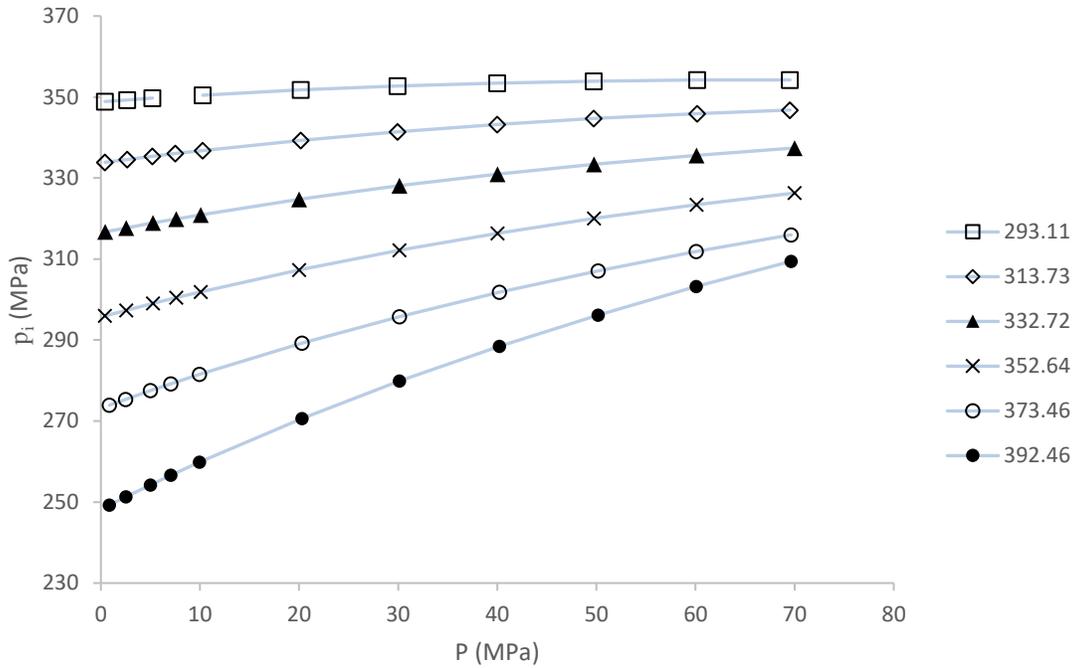


Figura F.1 Coeficiente de presión interna del 2,5-dimetilfurano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas

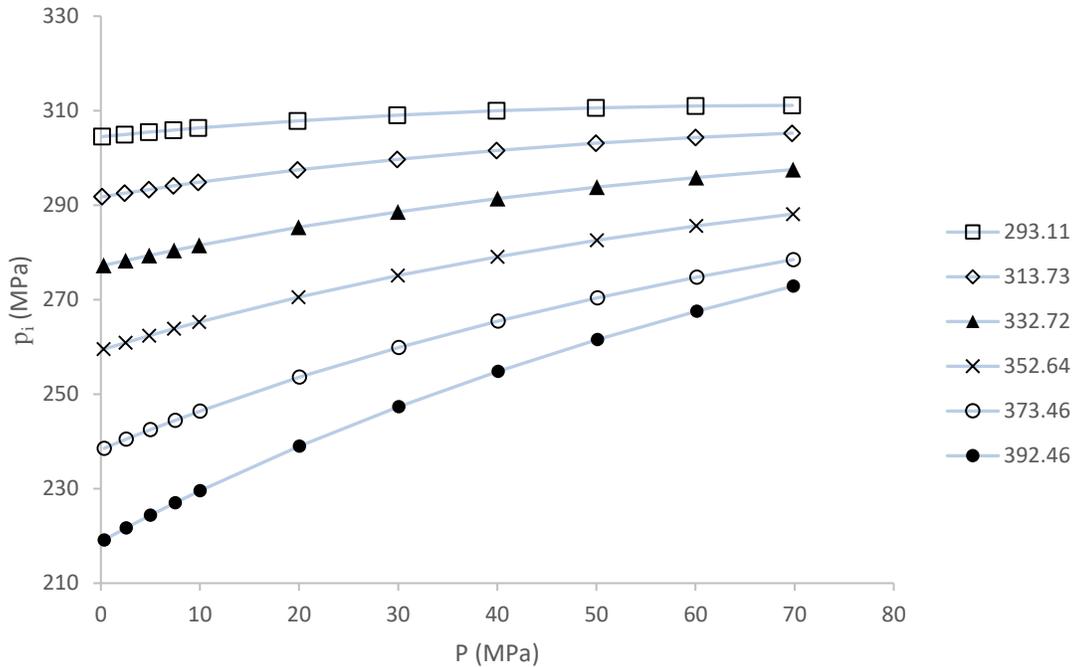


Figura F.2 Coeficiente de presión interna de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.3038$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

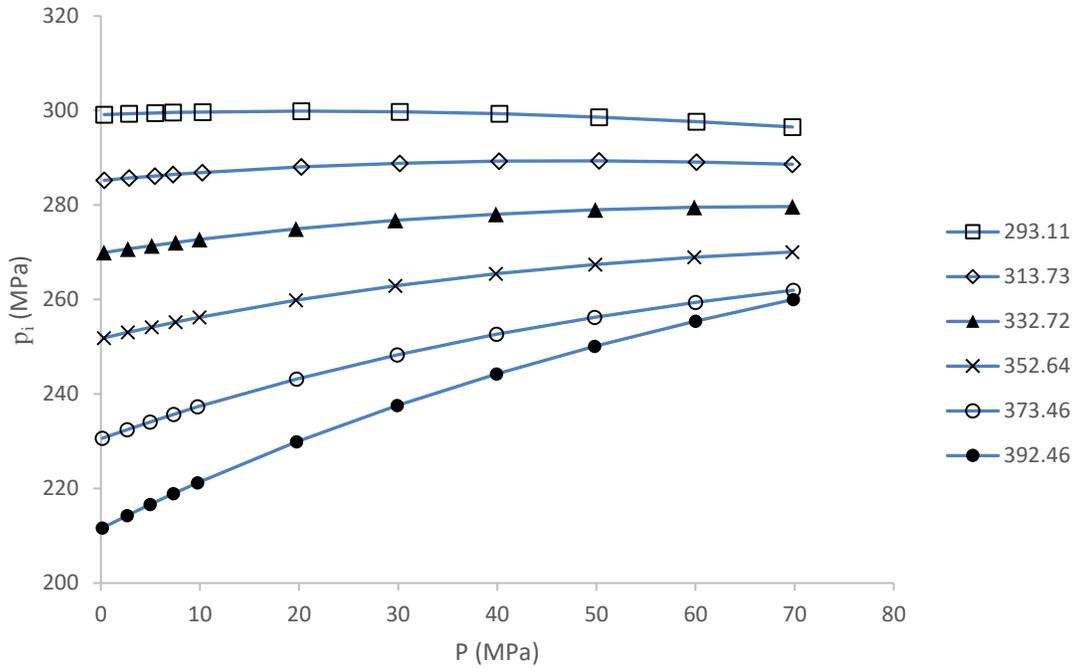


Figura F.3 Coeficiente de presión interna de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.5033$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

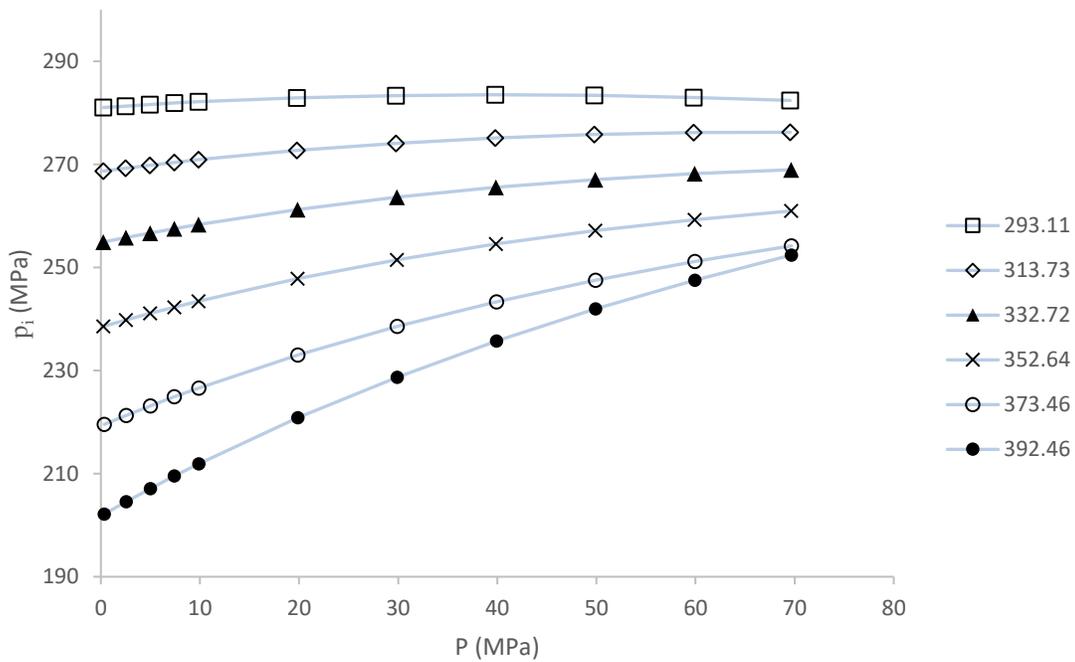


Figura F.4 Coeficiente de presión interna de la mezcla {octano ( $x_1$ ) + 2,5-dimetilfurano ( $x_2$ )} a  $x_1 = 0.7001$ , respecto a la presión a diferentes temperaturas.

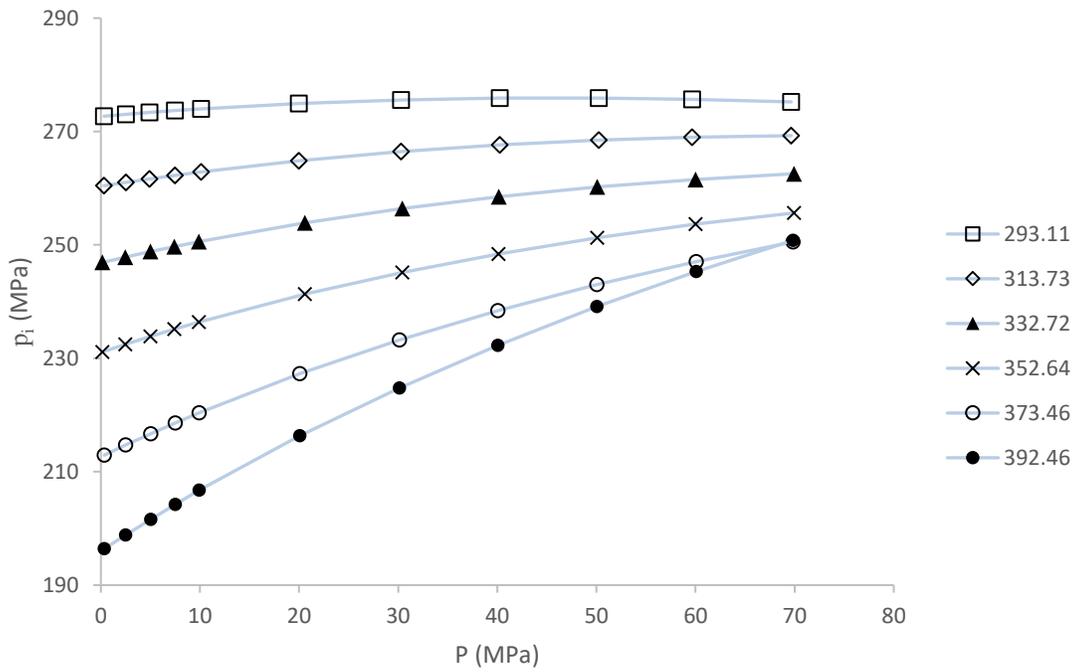


Figura F.5 Coeficiente de presión interna del octano puro, respecto a la presión a diferentes temperaturas.