

MANUALES DE ASPENONE. TERMODINÁMICA

Este documento describe como incorporar un componente que no se encuentra en las bases de datos de ASPEN y como estimar sus propiedades termodinámicas, de transporte o volumétricas.

DGAPA / PAPIME / PEI 103325

USO DEL
MÉTODO DE
JOBACK PARA LA
ESTIMACIÓN DE
PROPIEDADES
DE
COMPUESTOS

Método de Joback.

La descripción detallada de como generar un nuevo proyecto en Aspen Plus, seleccionar componentes, ecuaciones de estado, se detalla en el archivo ***Procedimiento de inicio.pdf***.

Si bien las bases de datos de ASPEN Plus contienen una cantidad enorme de compuestos y mezclas y que en estas bases de datos encontramos propiedades, volumétricas, termodinámicas y de transporte que nos permiten generar diagramas, estimar propiedades de mezcla y trabajar en simulaciones computacionales, no siempre es posible encontrar todos los componentes existentes.

Este documento describe cómo es posible incluir un componente que no se encontró en la base de datos. Para ello se emplea la subrutina de ASPEN Plus que permite dibujar la estructura química del componente y con ello a partir del método de Joback (un método de contribución de grupos) predecir las propiedades termodinámicas, de transporte y volumétricas para tres componentes que forman parte de fragancias o perfumes. Antes de abordar el ejemplo es requerido para este fin dar un contexto de en que consisten los métodos de contribución de grupos.

Los métodos de contribución de grupos es una forma de establecer relaciones (matemáticas) para calcular propiedades termodinámicas, volumétricas o de transporte de componentes puros a través de conocer la estructura molecular del componente en cuestión y de conocer la condición a la cual dicha molécula se encuentra sometida.

Estos métodos se basan en la idea de que las propiedades de una molécula se establecen generalmente a través de la contribución de sus elementos o partes representativas (grupos funcionales) y que las propiedades de estas partes además de ser aditivas se pueden ponderar a través de su abundancia en la molécula y su contribución en la propiedad correspondiente, además que se puede extrapolar el resultado de una molécula a un medio continuo formado por este grupo de moléculas.

En ocasiones para poder estimar una propiedad no es posible tener una correlación directa de contribución de grupos a dicha propiedad, por lo que es necesario calcular otra u otras propiedades indirectas, a las cuales si se les ha encontrado una correspondencia de valor con relación al grupo funcional del que se trate y que ella o ellas tengan una relación con la propiedad de interés.

El método de Joback consiste en tener por un lado una serie de correlaciones matemáticas para una serie de propiedades y por el otro lado una serie de tablas con valores de contribución a esas propiedades relacionadas con los grupos funcionales químicos.

En la siguiente tabla se muestran las ecuaciones para calcular distintos tipos de propiedades como las temperaturas de fusión y ebullición, las propiedades críticas, la energía libre de Gibbs de formación y las entalpías de formación, vaporización y mezclado, además de las constantes a, b, c, y d para el cálculo de la capacidad calorífica a presión constante (C_p) en función de la temperatura.

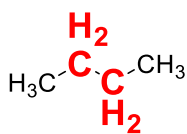
En estas ecuaciones hay una serie de sumatorias, estas se forman de calcular la ponderación de cada grupo funcional en la estructura de la molécula a analizar.

Más adelante tenemos una tabla con todos los valores de contribución para diferentes grupos funcionales con los cuales se puede armar el rompecabezas de la molécula.

Property	Function
T_{fp}	$T_{fp} = 122 + \sum_k N_k(tfpk)$
T_b	$T_b = 198 + \sum_k N_k(tbk)$
T_c	$T_c = T_b \left[0.584 + 0.965 \left\{ \sum_k N_k(tck) \right\} - \left\{ \sum_k N_k(tck) \right\}^2 \right]^{-1}$
P_c	$P_c = \left[0.113 + 0.0032N_{atoms} - \sum_k N_k(pck) \right]^{-2}$
V_c	$V_c = 17.5 + \sum_k N_k(vck)$
ΔH_f°	$\Delta H_f^\circ = 68.29 + \sum_k N_k(hfk)$
ΔG_f°	$\Delta G_f^\circ = 53.88 + \sum_k N_k(gfk)$
ΔH_v	$\Delta H_v = 15.30 + \sum_k N_k(hvk) \times 0.004184$
ΔH_m	$\Delta H_m = -0.88 + \sum_k N_k(hmk) \times 0.004184$
C_p°	$C_p^\circ = \left[\sum_k N_k(CpAk) - 37.93 \right]$ $+ \left[\sum_k N_k(CpBk) + 0.21 \right] T$ $+ \left[\sum_k N_k(CpCk) - 3.91\text{E}-04 \right] T^2$ $+ \left[\sum_k N_k(CpDk) + 2.06\text{E}-07 \right] T^3$

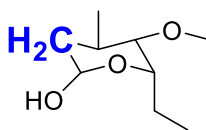
Propiedad	tfpk	tbk	tck	pck	vck	hfk	gfk	hvk	hmk	CpAk	CpBk	CpCk	CpDk	Mw
Unidades	K	K	K	bar	cm ³ /mol	KJ/mol	cal/mol	cal/mol	cal/mol	J/mol K	J/mol K	J/mol K	J/mol K	g/mol
Grupo k														
CH3 (1)	-5.10	23.58	0.0141	-0.0012	65	-76.45	-43.96	567	217	19.5	-8.08E-03	1.53E-04	-9.67E-08	15
CH2 (2)	11.27	22.88	0.0189	0	56	-20.64	8.42	532	619	-0.909	9.50E-02	-5.44E-05	1.19E-08	14
CH (3)	12.64	21.74	0.0164	0.002	41	29.89	58.36	404	179	-23	2.04E-01	-2.65E-04	1.20E-07	13
C (4)	46.43	18.25	0.0067	0.0043	27	82.23	116.02	152	-349	-66.2	4.27E-01	-6.41E-04	3.01E-07	12
=CH2 (1)	-4.32	18.18	0.0113	-0.0028	56	-9.63	3.77	412	-113	-23.6	-3.81E-02	1.72E-04	-1.03E-07	14
=CH (2)	8.73	24.96	0.0129	-0.0006	46	37.97	48.53	527	643	-8	1.05E-01	-9.63E-05	3.56E-08	13
=C (3)	11.14	24.14	0.0117	0.0011	38	83.99	92.36	511	732	-28.1	2.08E-01	-3.06E-04	1.46E-07	12
=C= (2)	17.78	26.15	0.0026	0.0028	36	142.14	136.7	636	1128	27.4	-5.57E-02	1.01E-04	-5.02E-08	12
≡CH (1)	-11.18	9.2	0.0027	-0.0008	46	79.3	77.71	276	555	24.5	-2.71E-02	1.11E-04	-6.78E-08	13
≡C- (2)	64.32	27.38	0.002	0.0016	37	115.51	109.82	789	992	7.87	2.01E-02	-8.33E-06	1.39E-09	12
CH2(ss) (2)	7.75	27.15	0.01	0.0025	48	-26.8	-3.68	573	117	-6.03	8.54E-02	-8.00E-06	-1.80E-08	14
CH(ss) (3)	19.88	21.78	0.0122	0.0004	38	8.67	40.99	464	775	8.67	1.62E-01	-1.60E-04	6.24E-08	13
C(ss) (4)	60.15	21.32	0.0042	0.0061	27	79.72	87.88	154	-328	-90.9	5.57E-01	-9.00E-04	4.69E-07	12
=CH(ds) (2)	8.13	26.73	0.0082	0.0011	41	2.09	11.3	608	263	-2.14	5.74E-02	-1.64E-06	-1.59E-08	13
=C(ds) (3)	37.02	31.01	0.0143	0.0008	32	46.43	54.05	731	572	-8.25	1.01E-01	-1.42E-04	6.78E-08	12
F (1)	-15.78	-0.03	0.0111	-0.0057	27	-251.92	-247.19	-160	334	26.5	-9.13E-02	1.91E-04	-1.03E-07	19
Cl (1)	13.55	38.13	0.0105	-0.0049	58	-71.55	-64.31	1083	601	33.3	-9.63E-02	1.87E-04	-9.96E-08	35.5
Br (1)	43.43	66.86	0.0133	0.0057	71	-29.48	-38.06	1573	861	28.6	-6.49E-02	1.36E-04	-7.45E-08	80
I (1)*	41.69	93.84	0.0068	-0.0034	97	21.06	5.74	2275	651	32.1	-6.41E-02	1.26E-04	-6.87E-08	127
OH (1)	44.45	92.88	0.0741	0.0112	28	-208.04	-189.2	4021	575	25.7	-6.91E-02	1.77E-04	-9.88E-08	17
ACOH (1)	82.83	76.34	0.024	0.0184	-25	-221.65	-197.37	2987	1073	-2.81	1.11E-01	-1.16E-04	4.94E-08	29
O (2)	22.23	22.42	0.0168	0.0015	18	-132.22	-105	576	284	25.5	-6.32E-02	1.11E-04	-5.48E-08	16
O(ss) (2)	23.05	31.22	0.0098	0.0048	13	-138.16	-98.22	1119	1405	12.2	-1.26E-02	6.03E-05	-3.86E-08	16
C=O (2)	61.2	76.75	0.038	0.0031	62	-133.22	-120.5	2144	1001	6.45	6.70E-02	-3.57E-05	2.86E-09	28
C=O (ss) (2)	75.97	94.97	0.0284	0.0028	55	-164.5	-126.27	1588	X	30.4	-8.29E-02	2.36E-04	-1.31E-07	28
CH=O (1)*	36.9	72.2	0.0379	0.003	82	-162.03	-143.48	2173	764	30.9	-3.36E-02	1.60E-04	-9.88E-08	29
COOH (1)	155.5	169.09	0.0791	0.0077	89	-426.72	-387.87	4669	2641	24.1	4.27E-02	8.04E-05	-6.87E-08	45
COO (2)	53.6	81.1	0.0481	0.0005	82	-337.92	-301.95	2302	1663	24.5	4.02E-02	4.02E-05	-4.52E-08	44
=O (1)*	2.08	-10.5	0.0143	0.0101	36	-247.61	-250.83	1412	866	6.82	1.96E-02	1.27E-05	-1.78E-08	12
NH2 (1)	66.89	73.23	0.0243	0.0109	38	-22.02	14.07	2578	840	26.9	-4.12E-02	1.64E-04	-9.76E-08	16
NH (2)	52.66	50.17	0.0295	0.0077	35	53.47	89.39	1538	1197	-1.21	7.62E-02	-4.86E-05	1.05E-08	15
NH (ss) (2)	101.51	52.82	0.013	0.0114	29	31.65	75.61	1656	1790	11.8	-2.30E-02	1.07E-04	-6.28E-08	15
N (3)	48.84	11.74	0.0169	0.0074	9	123.34	163.16	453	1124	-31.1	2.27E-01	-3.20E-04	1.46E-07	14
=N- (2)	X	74.6	0.0255	-0.0099	X	23.61	X	797	X	X	X	X	X	14
=N- (ds) (2)	68.4	57.55	0.0085	0.0076	34	55.52	79.93	1560	872	8.83	-3.84E-03	4.35E-05	-2.60E-08	14
=NH (1)*	X	X	X	X	X	93.7	119.66	2908	X	5.69	-4.12E-03	1.28E-04	-8.88E-08	15
CN (1)*	59.89	125.66	0.0496	-0.0101	91	88.43	89.22	3071	577	36.5	-7.33E-02	1.84E-04	-1.03E-07	26
NO2 (1)	127.24	152.54	0.0437	0.0064	91	-66.57	-16.83	4000	2313	25.9	-3.74E-03	1.29E-04	-8.88E-08	46
SH (1)	20.09	63.56	0.0031	0.0084	63	-17.33	-22.99	1645	564	35.3	-7.58E-02	1.85E-04	-1.03E-07	33
S (2)	34.4	68.78	0.0119	0.0049	54	41.87	33.12	1629	987	19.6	-5.61E-03	4.02E-05	-2.76E-08	32
S (ss) (2)	79.93	52.1	0.0019	0.0051	38	39.1	27.76	1430	372	16.7	4.81E-03	2.77E-05	-2.11E-08	32

En esta tabla hay que distinguir que hay grupos CH₂ (2), =CH₂ (1) o CH₂ (ss) (2). Cada uno de ellos corresponde a una categoría diferente como se ve en las siguientes ilustraciones hechas en ChemDraw.



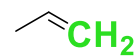
Alifático cadena lineal

CH₂ (2)



Alifático en un compuesto cíclico

CH₂ (ss) (2)



Vinílico en un doble enlace

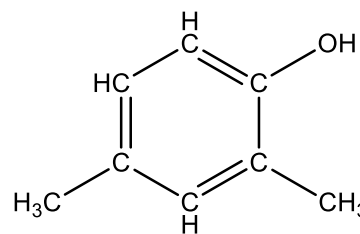
=CH₂ (1)

A continuación, mostramos un ejemplo resuelto extraído de una de las referencias mencionadas, “The Properties of Gases and Liquids”.

Example 2-10 Estimate T_{fp} and T_b for 2,4-dimethylphenol by using Joback's group method.

solution 2,4-dimethylphenol contains two $-\text{CH}_3$, three $=\text{CH}(\text{ds})$, three $=\text{C}(\text{ds})$, and one $-\text{OH}$ (phenol). From Appendix Table C-1

Group k	N_k	$N_k(\text{tfpk})$	$N_k(\text{tbk})$
$-\text{CH}_3$	2	-10.20	47.16
$=\text{CH}(\text{ds})$	3	24.39	80.19
$=\text{C}(\text{ds})$	3	111.06	93.03
$-\text{ACOH}$ (phenol)	1	82.83	76.34
$\sum_{k=1}^5 N_k F_k$		208.08	296.72



2,4-dimethylphenol

The estimates are:

$$T_{fp} = 122 + \sum_k N_k(\text{tfpk}) = 330.08 \text{ K}$$

$$T_b = 198 + \sum_k N_k(\text{tbk}) = 494.72 \text{ K}$$

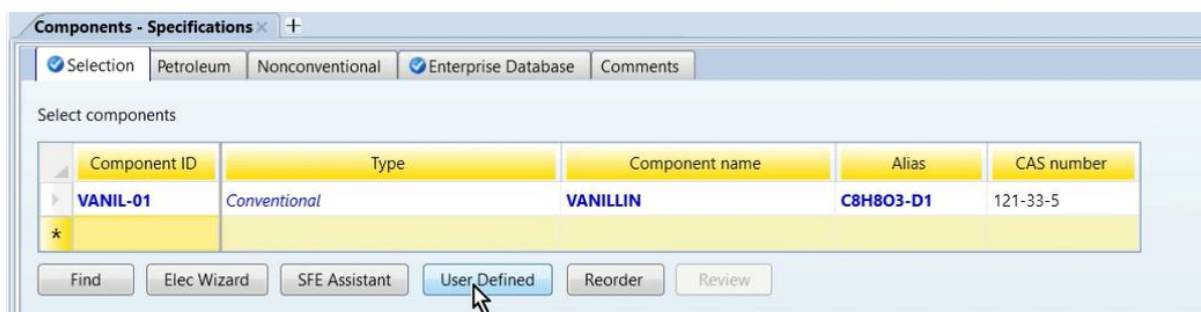
Appendix A values for these properties are $T_{fp} = 297.68 \text{ K}$ and $T_b = 484.09 \text{ K}$. Thus the differences are

$$T_{fp} \text{ Difference} = 297.68 - 330.08 = -32.40 \text{ K or } -10.9\%$$

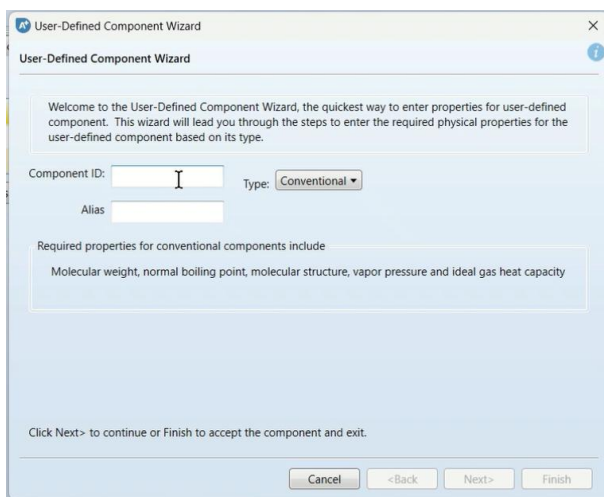
$$T_b \text{ Difference} = 484.09 - 494.72 = -10.63 \text{ K or } -2.2\%$$

El ejemplo desarrollado en ASPEN Plus emplea tres componentes vainillina presente en las bases de datos, la jasmona que no se encuentra en la base de datos, pero tiene ciertas similitudes en propiedades con la vainillina y el eucaliptol que no se encuentra en las bases de datos, pero además tiene una estructura más compleja. Estos componentes son empleados en la industria de la perfumería. En este ejemplo las propiedades obtenidas fueron las que se grafican más adelante.

Para agregar un componente que no está en la base de datos o adicionarlo con las propiedades que uno desea calcular, se debe ir al menú de adición de componentes y poner "User Define".



Esto despliega una ventana emergente "User Define Component Wizard".



User-Defined Component Wizard

Welcome to the User-Defined Component Wizard, the quickest way to enter properties for user-defined component. This wizard will lead you through the steps to enter the required physical properties for the user-defined component based on its type.

Component ID: Type: **Conventional**

Alias

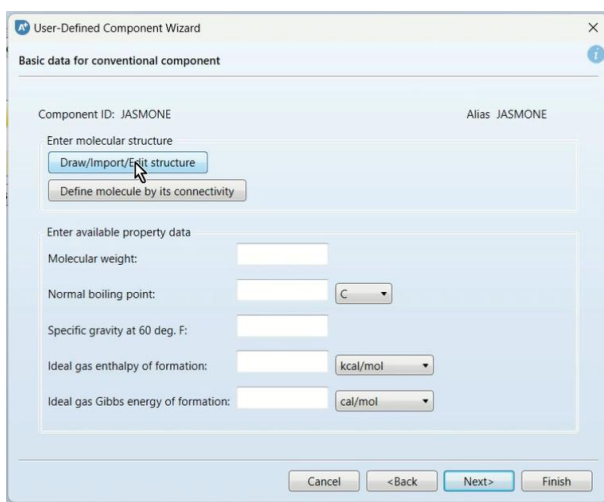
Required properties for conventional components include

Molecular weight, normal boiling point, molecular structure, vapor pressure and ideal gas heat capacity

Click Next> to continue or Finish to accept the component and exit.

Cancel <Back Next> Finish

Aquí hay que nombrar al componente y ponerle una identificación. Se le da botón siguiente.



User-Defined Component Wizard

Basic data for conventional component

Component ID: JASMONE Alias JASMONE

Enter molecular structure

Draw/Import/Edit structure

Define molecule by its connectivity

Enter available property data

Molecular weight:

Normal boiling point: C

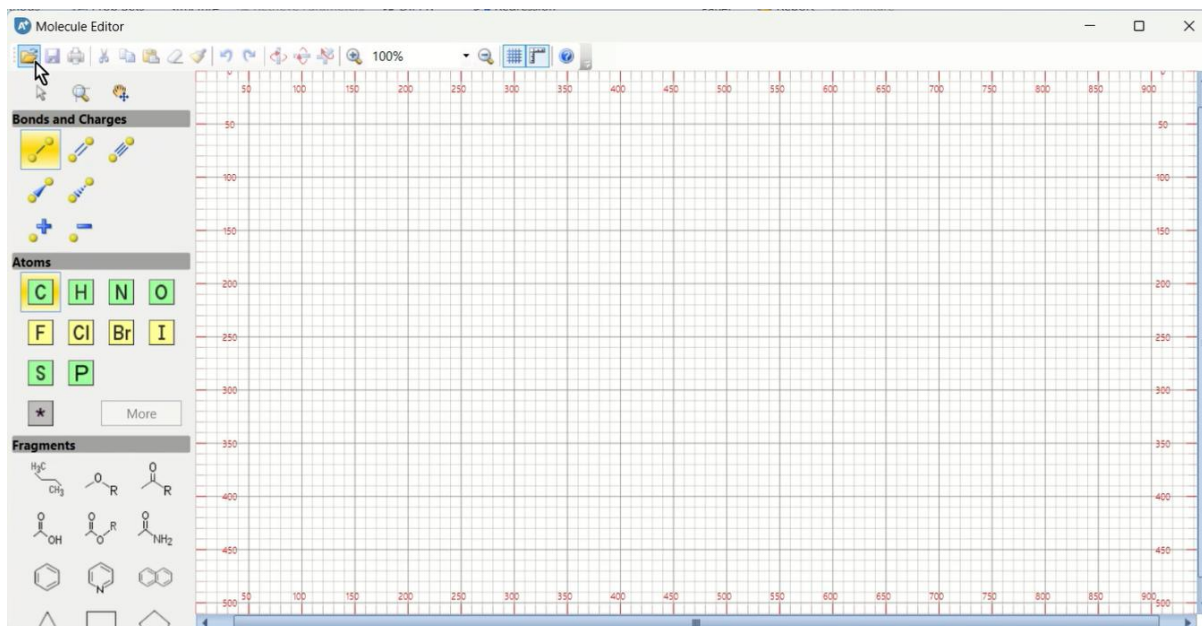
Specific gravity at 60 deg. F:

Ideal gas enthalpy of formation: kcal/mol

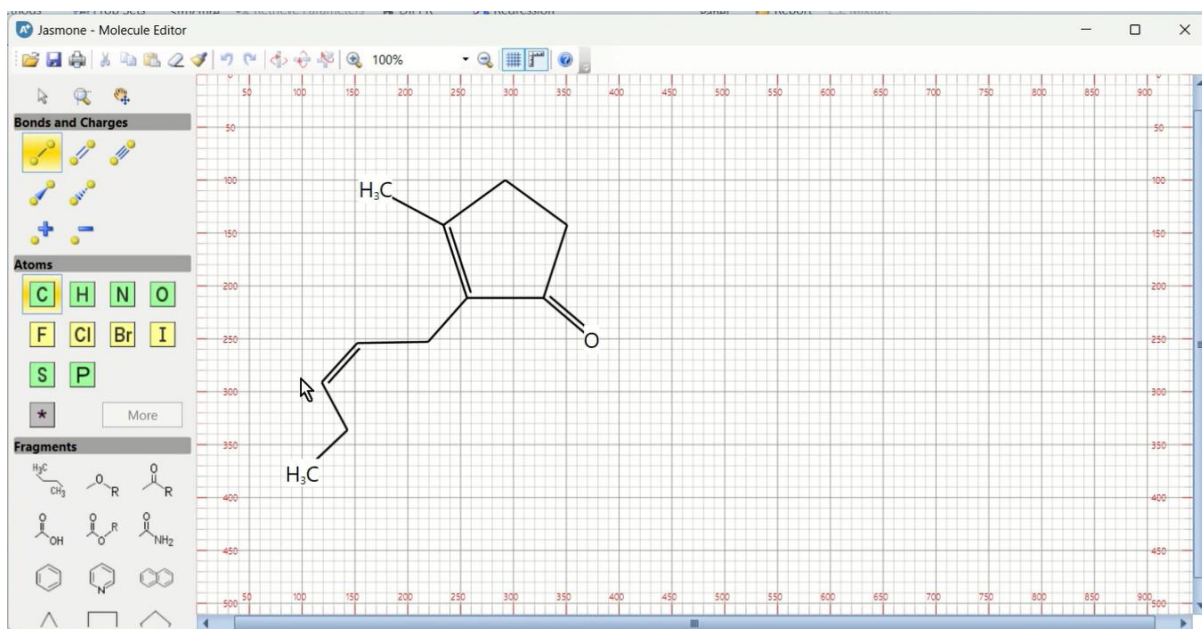
Ideal gas Gibbs energy of formation: cal/mol

Cancel <Back Next> Finish

Después la siguiente ventana pide agregar los datos que se conozcan del compuesto. Es posible poner solo unos datos. Pero aquí damos click al botón “Draw/Import/Edit structure” y nos mandará una ventana emergente con el dibujador de moléculas de ASPEN.



En el “Molecule Editor” dibujamos la estructura química empleando el tipo de átomo y el tipo de enlace a usar, o se puede importar una estructura previamente hecha con otro paquete.



Se cierra la ventana y lo que se observará en la ventana emergente de adición de componentes será la leyenda “Structure available”

User-Defined Component Wizard

Basic data for conventional component

Component ID: JASMONE Alias JASMONE

Enter molecular structure

Draw/Import/Edit structure Structure is available

Define molecule by its connectivity

Enter available property data

Molecular weight:

Normal boiling point: C

Specific gravity at 60 deg. F:

Ideal gas enthalpy of formation: kcal/mol

Ideal gas Gibbs energy of formation: cal/mol

Cancel <Back Next> Finish

En esa misma ventana damos click al botón “Define molecule by its connectivity”, aparecerá otra ventana emergente.

Molecular Structure - JASMONE

General Structure and Functional Group Formula Comments

Define molecule by its connectivity

Atom 1 Number	Atom 1 Type	Atom 2 Number	Atom 2 Type	Bond type

Atom number - atom type summary

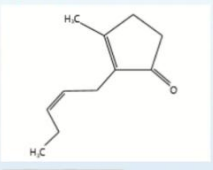
Atom number	Atom type

En esta ventana deberá aparecer el nombre que le dimos al compuesto al inicio y la estructura que dibujamos. Si no fuera el caso podemos dar nuevamente Draw/Import/Edit. Damos click en el botón “Calculate Bonds”.

Molecular Structure - JASMONE

General Structure and Functional Group Formula Comments

Graphical Structure



Draw/Import/Edit

Calculate Bonds

Functional Group

Method

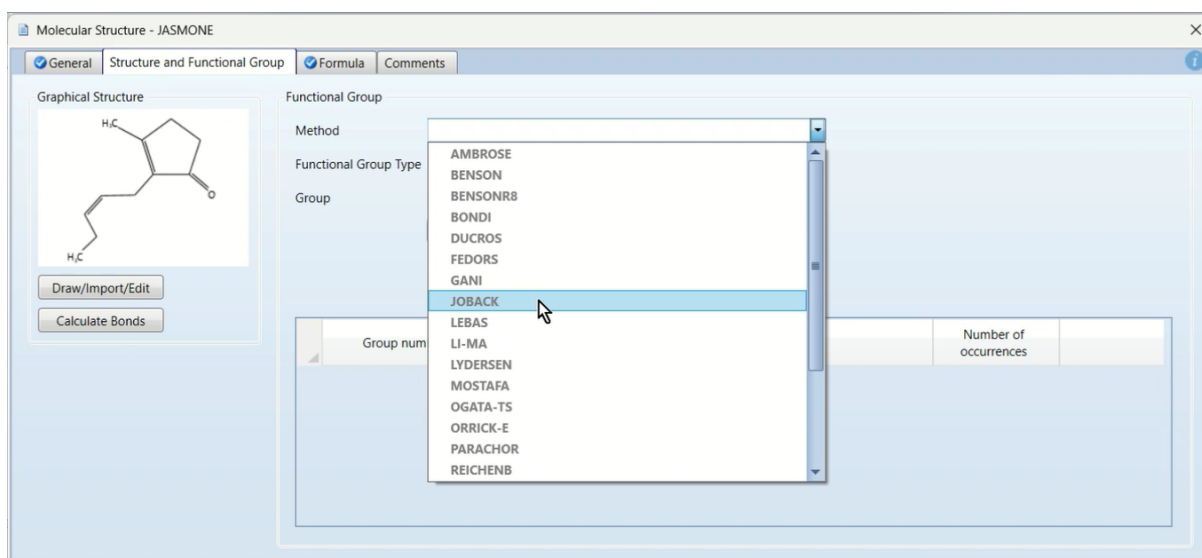
Functional Group Type

Group

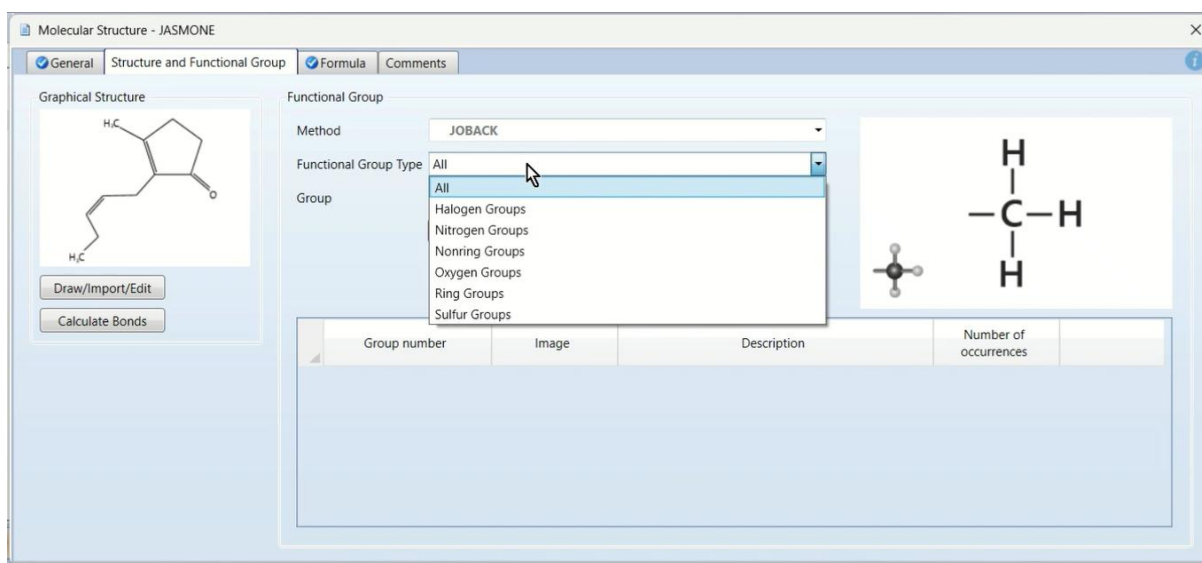
Add

Group number	Image	Description	Number of occurrences

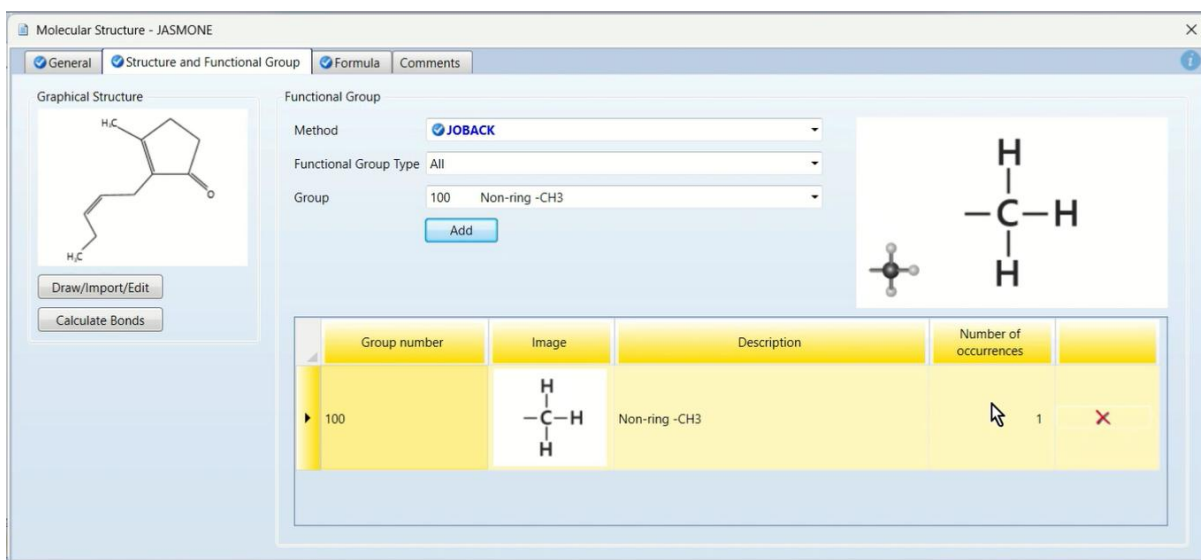
Observaremos que la pestaña “General” y “Formula” son palomeadas en azul y se observa una lista desplegable con distintos métodos para el cálculo de propiedades, como el de Ambrose, Benson, Parachor, y el que es motivo de este ejercicio el método de Joback. Lo seleccionamos.



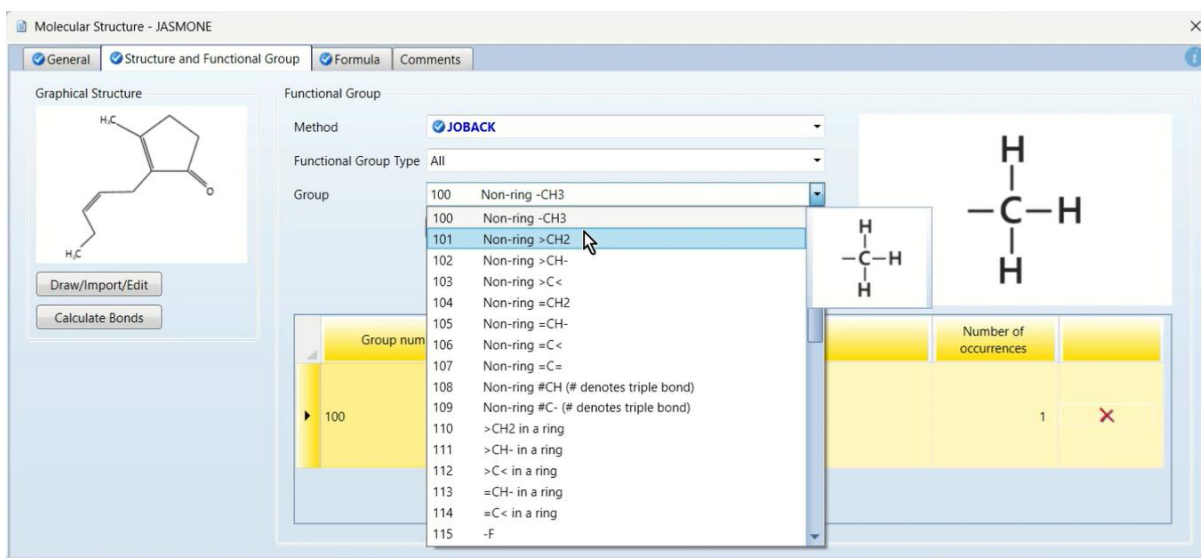
La ventana nos despliega más partes del menú. Lo primero es que nos pregunta que grupos queremos desplegar para el cálculo de propiedades. En este caso determinamos que todos “All”.



Ahora bien vemos una lista desplegable con los grupos de contribución, estos es las partes del rompecabezas que formará la estructura molecular del compuesto. En este caso la jasmona tiene dos grupos -CH_3 . Se selecciona el grupo de contribución y se le da click al botón “Add”. Esto añade a ese grupo a una tabla en la cual deberemos poner el número de veces que ese grupo aparece en la molécula.



Se repite esta operación hasta completar la tabla.



Al terminar se vuelve a dar click en “Calculate bonds” y se cerrará esta ventana emergente. Se regresa a la ventana “User Define Component Wizard” y se terminan de llenar los datos disponibles.

Component ID: JASMONE Alias: JASMONE

Enter molecular structure
 Draw/Import/Edit structure Structure form was opened
 Define molecule by its connectivity

Enter available property data
 Molecular weight: 164.246
 Normal boiling point: C
 Specific gravity at 60 deg. F.: 0.94
 Ideal gas enthalpy of formation: kcal/mol
 Ideal gas Gibbs energy of formation: cal/mol

Cancel <Back Next> Finish

Al dar click a “Next” aparece esta nueva carátula de la ventana:

The dialog box is titled "User-Defined Component Wizard". It contains a section "Basic data for conventional component" with five numbered buttons: 1 Molar volume data, 2 Vapor pressure data, 3 Extended Antoine vapor pressure coefficients, 4 Ideal gas heat capacity data, and 5 Ideal gas heat capacity polynomial coefficients. Below these buttons are two radio buttons: "Evaluate using NIST TDE" (selected) and "Estimate using Aspen property estimation system". An "Evaluate now" button is next to the first radio button. At the bottom are "Cancel", "<Back", "Next>", and "Finish" buttons.

Seleccionamos la casilla “Evaluate using NIST TDE” y damos click al botón “Evaluate now”. Al terminar nos habilitará el botón de “Finish” y se observará en el fondo que ha calculado las propiedades de este componente.

The screenshot shows the "User-Defined Component Wizard" dialog box with the "Evaluate using NIST TDE" option selected. A small "Save User-Input Properties Data" dialog box is also visible. In the background, a table of properties for the component "JASMONE" is displayed. The table has columns for Units, Uncertainty, and values. The properties listed include Acentric Factor, Critical density, Critical pressure, Critical temperature, Density, Enthalpy of vaporization, Heat capacity, Molecular weight, Normal boiling point, Solubility parameter, Specific gravity, Standard liquid molar volume, Thermal conductivity, Vapor pressure, Viscosity, and Viscosity (Liquid vs. Gas).

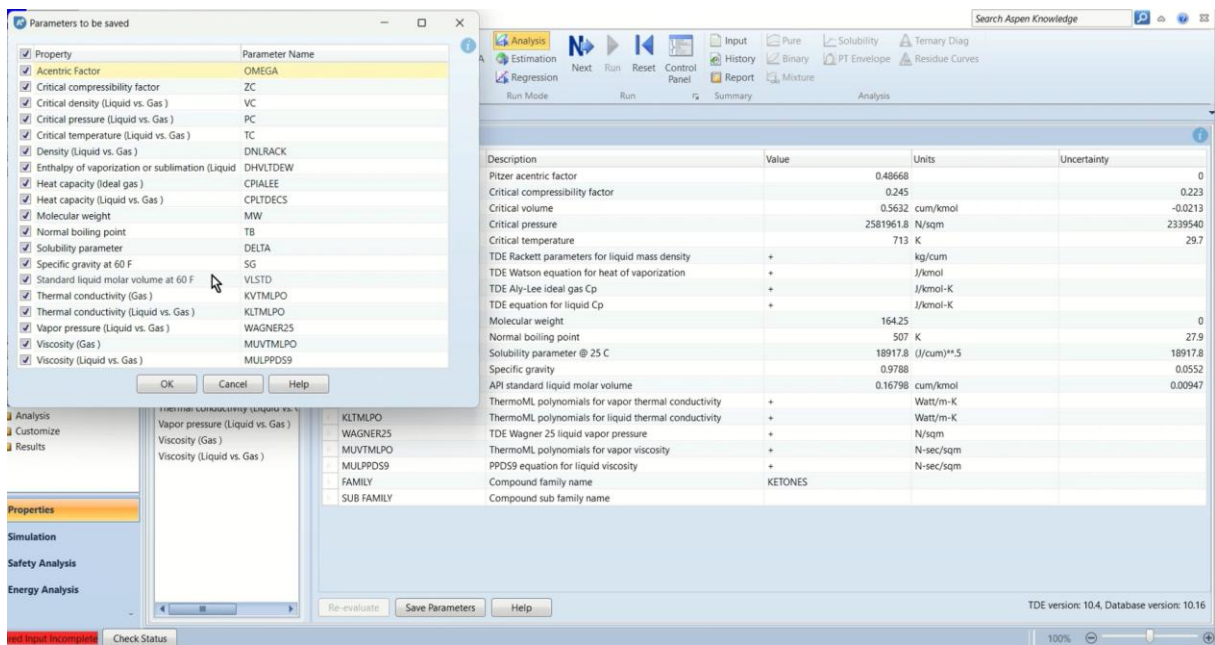
Units	Uncertainty
0.48668	0
0.245	0.223
0.5632 cum/kmol	-0.0213
2581961.8 N/sqm	2339540
713 K	29.7
kg/cum	
J/kmol	
J/kmol-K	
J/kmol-K	
164.25	0
507 K	27.9
18917.8 (J/cum)**.5	18917.8
0.9788	0.0552
0.16798 cum/kmol	0.00947
Watt/m-K	
Watt/m-K	
N/sqm	
N-sec/sqm	
N-sec/sqm	

Una vez finalizada la rutina se deberán ver diferentes propiedades y tablas para cada propiedad.

The screenshot shows the "Properties" window with a detailed table of properties for the component "JASMONE". The table has columns for Name, Description, Value, Units, and Uncertainty. The properties listed include Acentric Factor, Critical density, Critical pressure, Critical temperature, Density, Enthalpy of vaporization, Heat capacity, Molecular weight, Normal boiling point, Solubility parameter, Specific gravity, Standard liquid molar volume, Thermal conductivity, Vapor pressure, Viscosity, and Viscosity (Liquid vs. Gas).

Name	Description	Value	Units	Uncertainty
OMEGA	Pitzer acentric factor	0.48668		0
ZC	Critical compressibility factor	0.245		0.223
VC	Critical volume	0.5632	cum/kmol	-0.0213
PC	Critical pressure	2581961.8	N/sqm	2339540
TC	Critical temperature	713	K	29.7
DNLRACK	TDE Rackett parameters for liquid mass density	+	kg/cum	
DHVLDEW	TDE Watson equation for heat of vaporization	+	J/kmol	
CPALIE	TDE Aly-Lee ideal gas Cp	+	J/kmol-K	
CPLOECS	TDE equation for liquid Cp	+	J/kmol-K	
MW	Molecular weight	164.25		0
TB	Normal boiling point	507	K	27.9
DELTA	Solubility parameter @ 25 C	18917.8	(J/cum)**.5	18917.8
SG	Specific gravity	0.9788		0.0552
VLSTD	API standard liquid molar volume	0.16798	cum/kmol	0.00947
KVTMLPO	ThermoML polynomials for vapor thermal conductivity	+	Watt/m-K	
KLTMLPO	ThermoML polynomials for liquid thermal conductivity	+	Watt/m-K	
WAGNER25	TDE Wagner 25 liquid vapor pressure	+	N/sqm	
MUVTMLPO	ThermoML polynomials for vapor viscosity	+	N-sec/sqm	
MULPDS9	PPDS9 equation for liquid viscosity	+	N-sec/sqm	
FAMILY	Compound family name	KETONES		
SUB FAMILY	Compound sub family name			

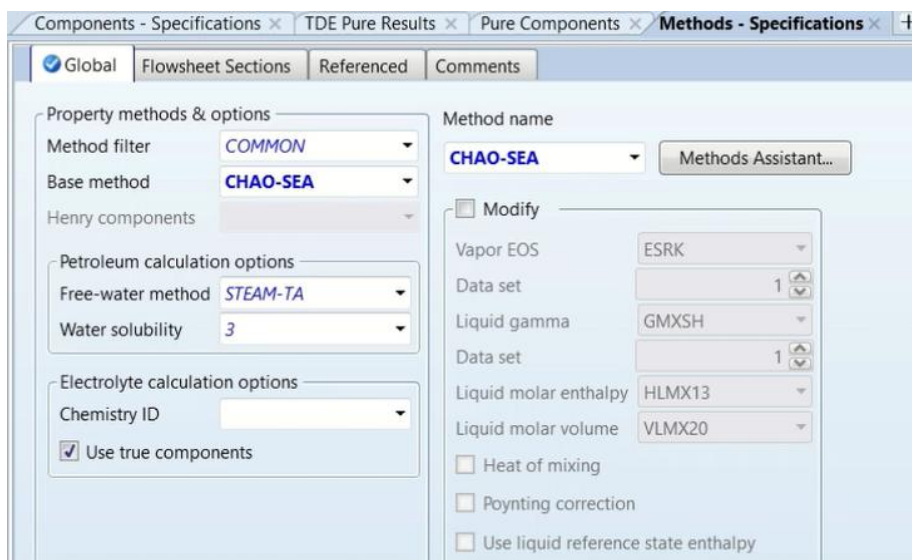
Si damos click en “Save parameters” aparecerá una ventana que nos permitirá elegir que propiedades queremos conservar.



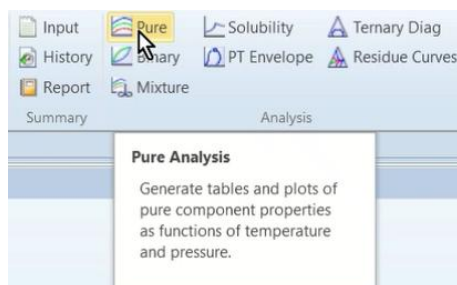
Nos aparecerá otra tabla como sigue:

Components - Specifications × TDE Pure Results × Pure Components × +				
New Copy Paste Export Edit Input View Results Reconcile				
Name	Type	Status	Description	Delete
CPIALE-1	T-DEPENDENT	Input Complete	Heat capacity (Ideal gas)	×
CPLTDE-1	T-DEPENDENT	Input Complete	Heat capacity (Liquid vs. Gas)	×
DHVLTDE-1	T-DEPENDENT	Input Complete	Enthalpy of vaporization or sublimatio...	×
DNLRAC-1	T-DEPENDENT	Input Complete	Density (Liquid vs. Gas)	×
KLTMLP-1	T-DEPENDENT	Input Complete	Thermal conductivity (Liquid vs. Gas)	×
KVTMLP-1	T-DEPENDENT	Input Complete	Thermal conductivity (Gas)	×
MULPPD-1	T-DEPENDENT	Input Complete	Viscosity (Liquid vs. Gas)	×
MUVTML-1	T-DEPENDENT	Input Complete	Viscosity (Gas)	×
TDE-1	SCALAR	Input Complete		×
USRDEF	SCALAR	Input Complete		×
WAGNER25-1	T-DEPENDENT	Input Complete	Vapor pressure (Liquid vs. Gas)	×

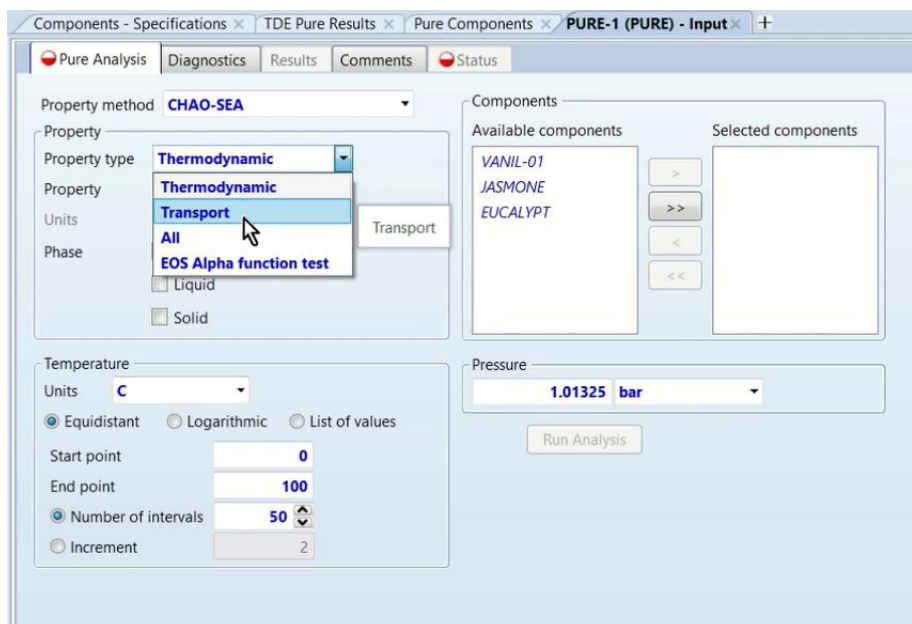
Para este ejercicio se hizo lo mismo con el eucaliptol. Se empleó una ecuación de estado Chao-Seader.



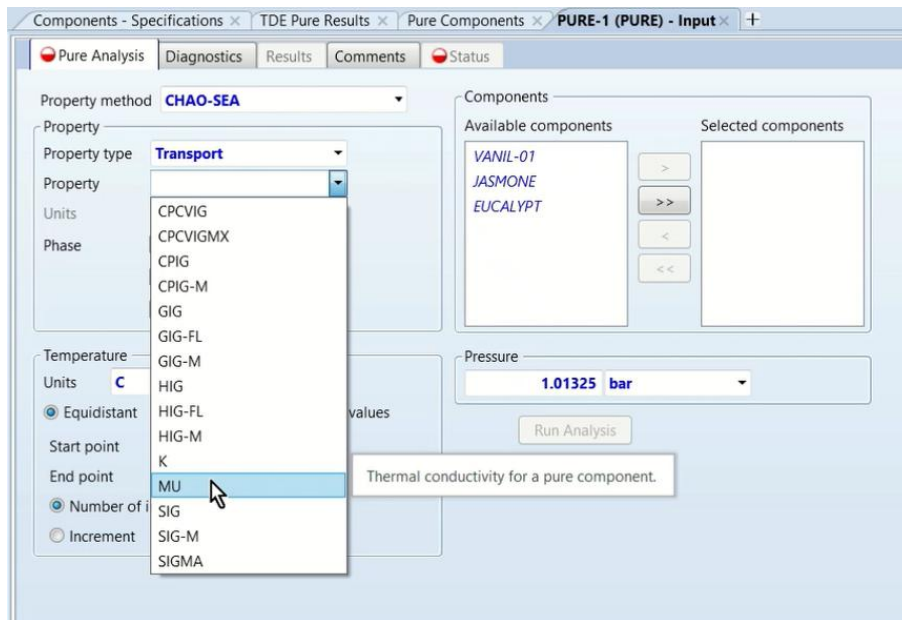
Después se empleó el cálculo de propiedades de componentes puros.



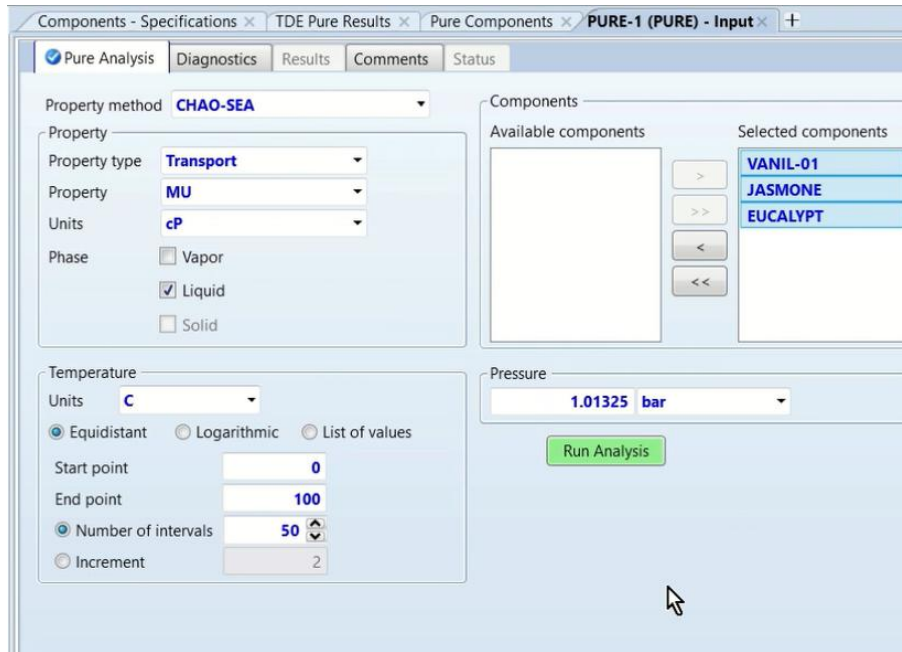
Al desplegarse la pantalla para este cálculo, en el menú desplegable seleccionamos propiedades de transporte.



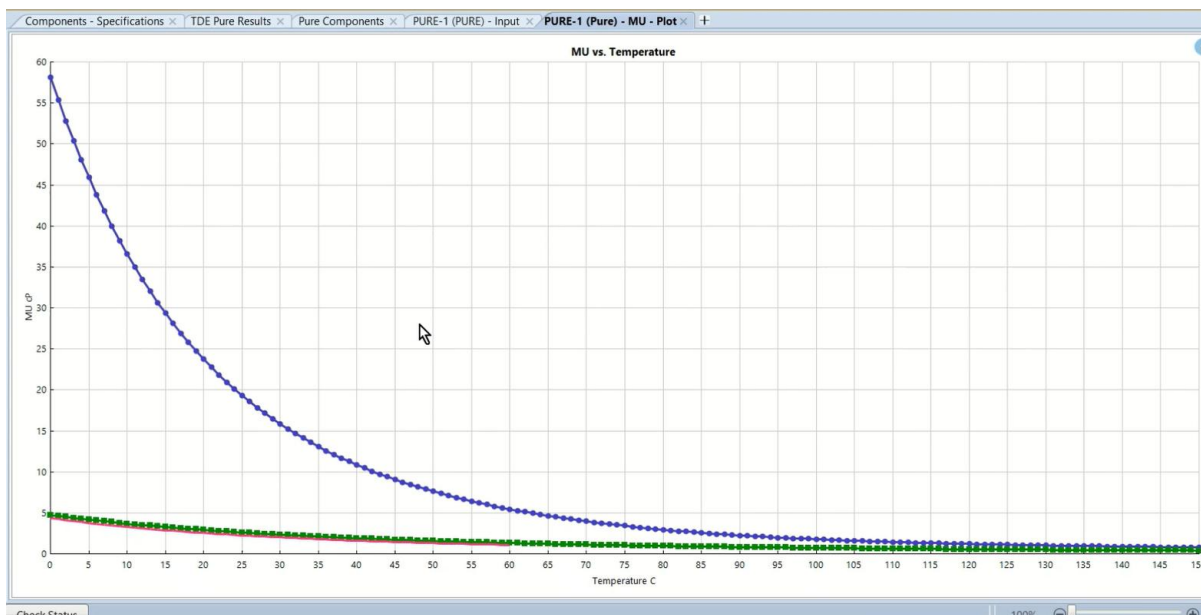
Seleccionamos la propiedad que queremos calcular.



Y terminamos de llenar las casillas de este menú y damos click al botón de “Run analysis”.



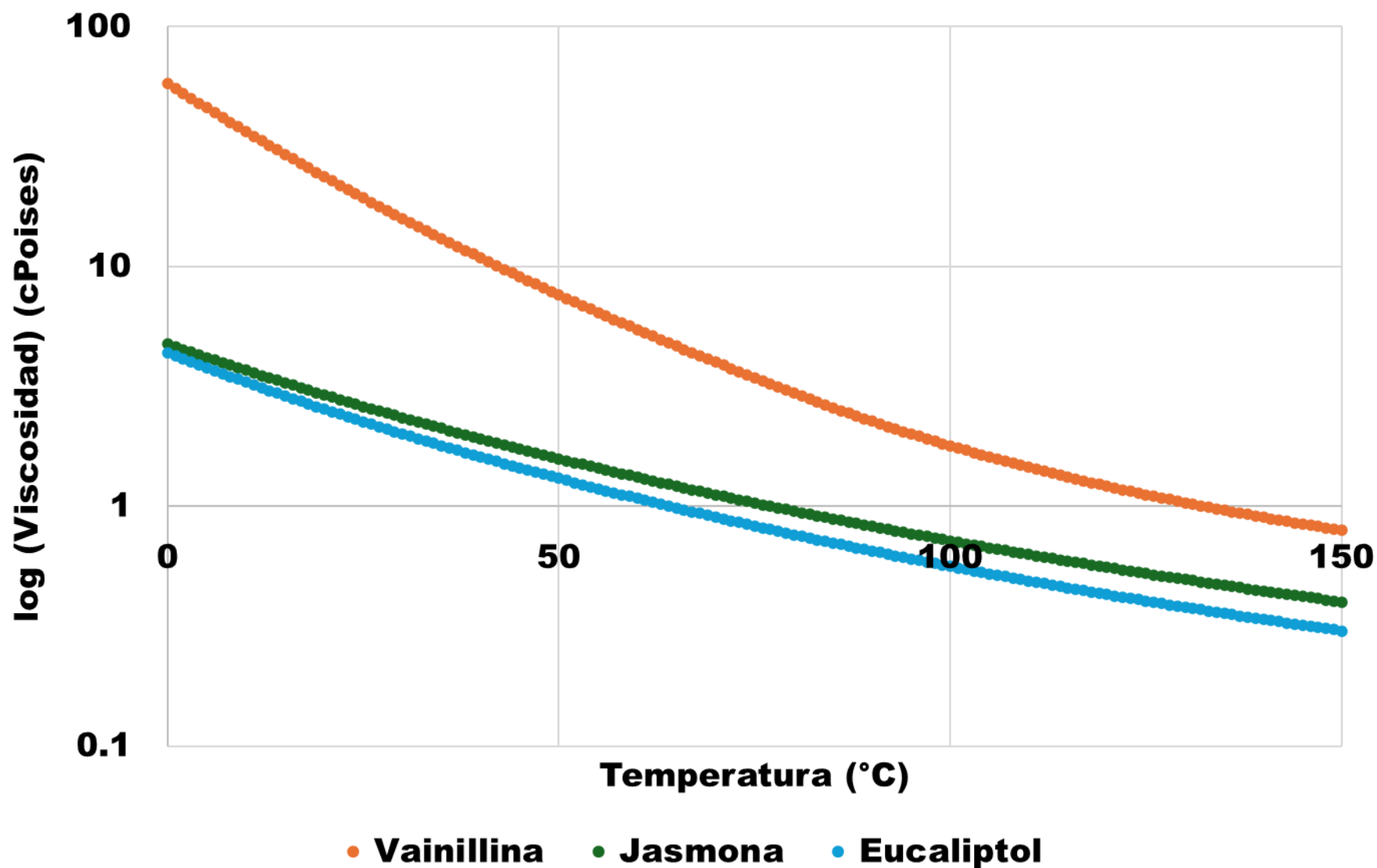
Se desplegará la gráfica de las propiedades correspondientes.



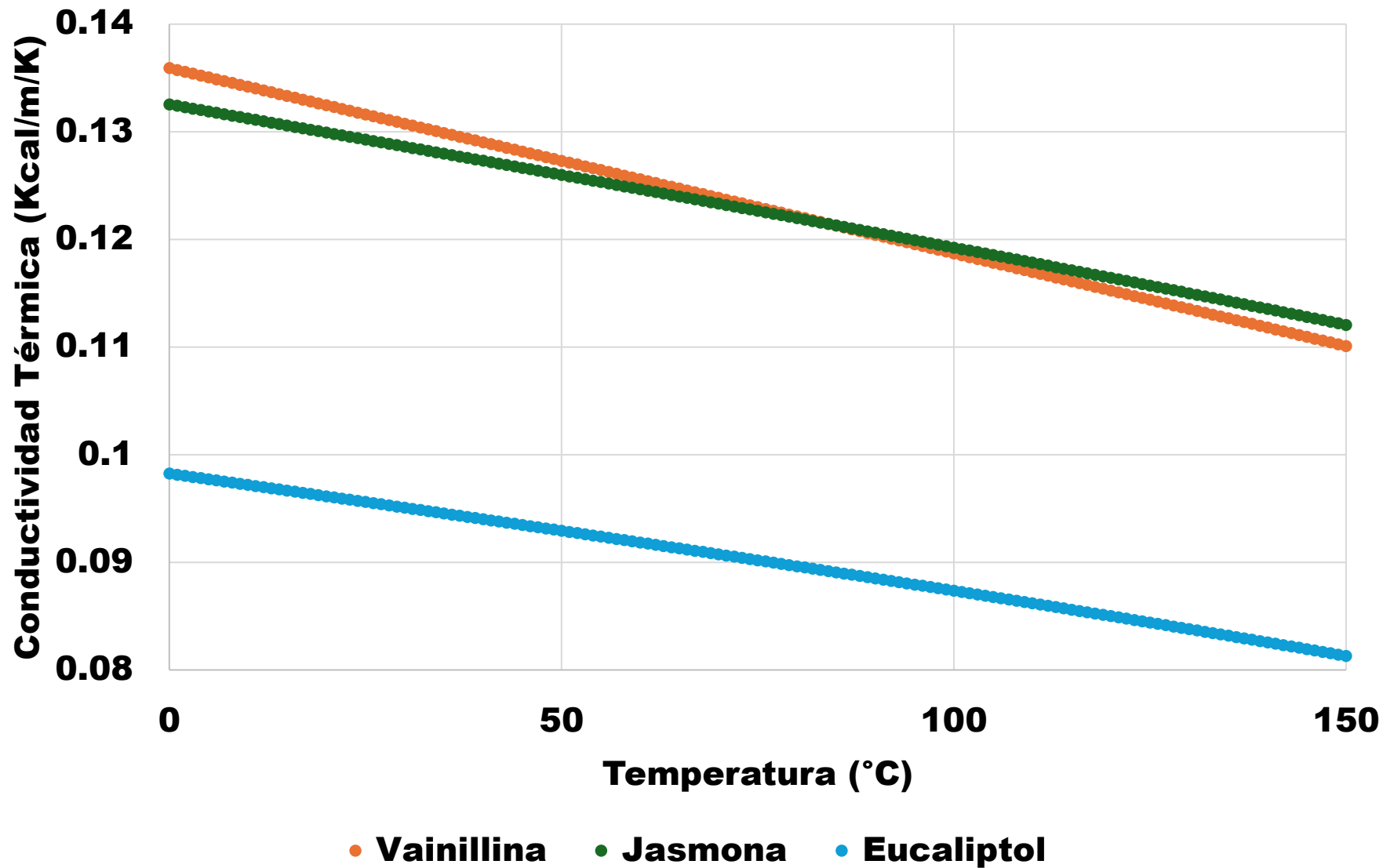
Si nos regresamos a la pestaña “PURE-1 (PURE) – Input” en la pestaña de “Results” veremos los datos tabulados de la propiedad para los componentes seleccionados. Estos se pueden copiar a Excel y graficar como se muestra a continuación.

Pure component properties analysis results					
TEMP	PRES	LIQUID MU VANIL-01	LIQUID MU JASMONE	LIQUID MU EUCALYPT	
C	bar	cP	cP	cP	
0	1.01325	58.1102	4.7542	4.35435	
1	1.01325	55.3927	4.63121	4.23013	
2	1.01325	52.8206	4.5		
3	1.01325	50.3854	4.39		
4	1.01325	48.0787	4.28		
5	1.01325	45.8932	4.17847	3.77644	
6	1.01325	43.8216	4.07433	3.67291	
7	1.01325	41.8573	3.97354	3.57301	
8	1.01325	39.9941	3.87596	3.47659	
9	1.01325	38.2261	3.78148	3.3835	
10	1.01325	36.548	3.68997	3.29361	
11	1.01325	34.9546	3.60133	3.20679	
12	1.01325	33.4412	3.51545	3.12291	
13	1.01325	32.0031	3.43222	3.04185	
14	1.01325	30.6363	3.35155	2.96351	
15	1.01325	29.3367	3.27334	2.88777	
16	1.01325	28.1007	3.19751	2.81453	
17	1.01325	26.9247	3.12397	2.74369	
18	1.01325	25.8056	3.05263	2.67516	

Predicción de Propiedades de Transporte Viscosidad. Método de Joback

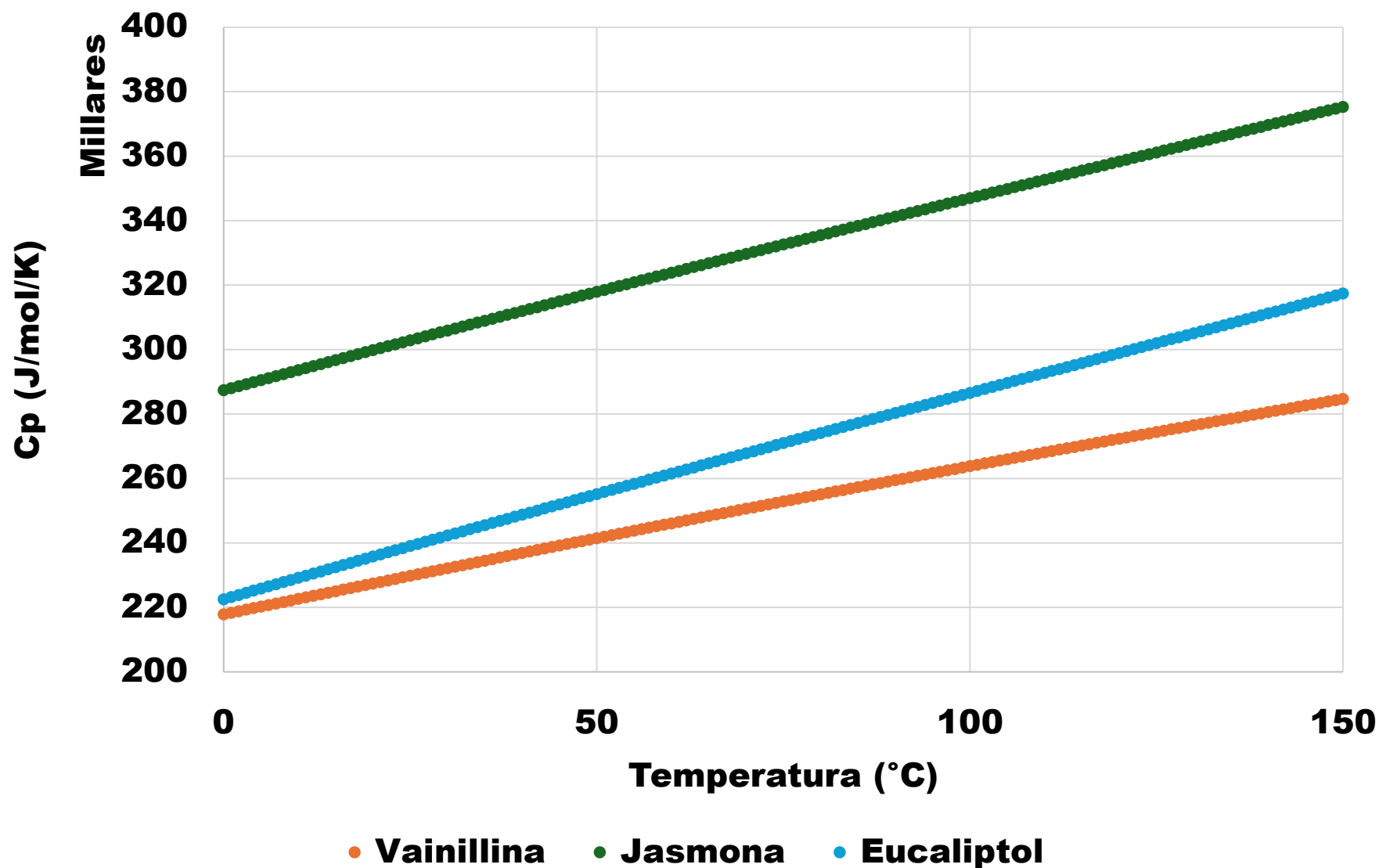


Predicción de Propiedades de Transporte Conductividad Térmica. Método de Joback

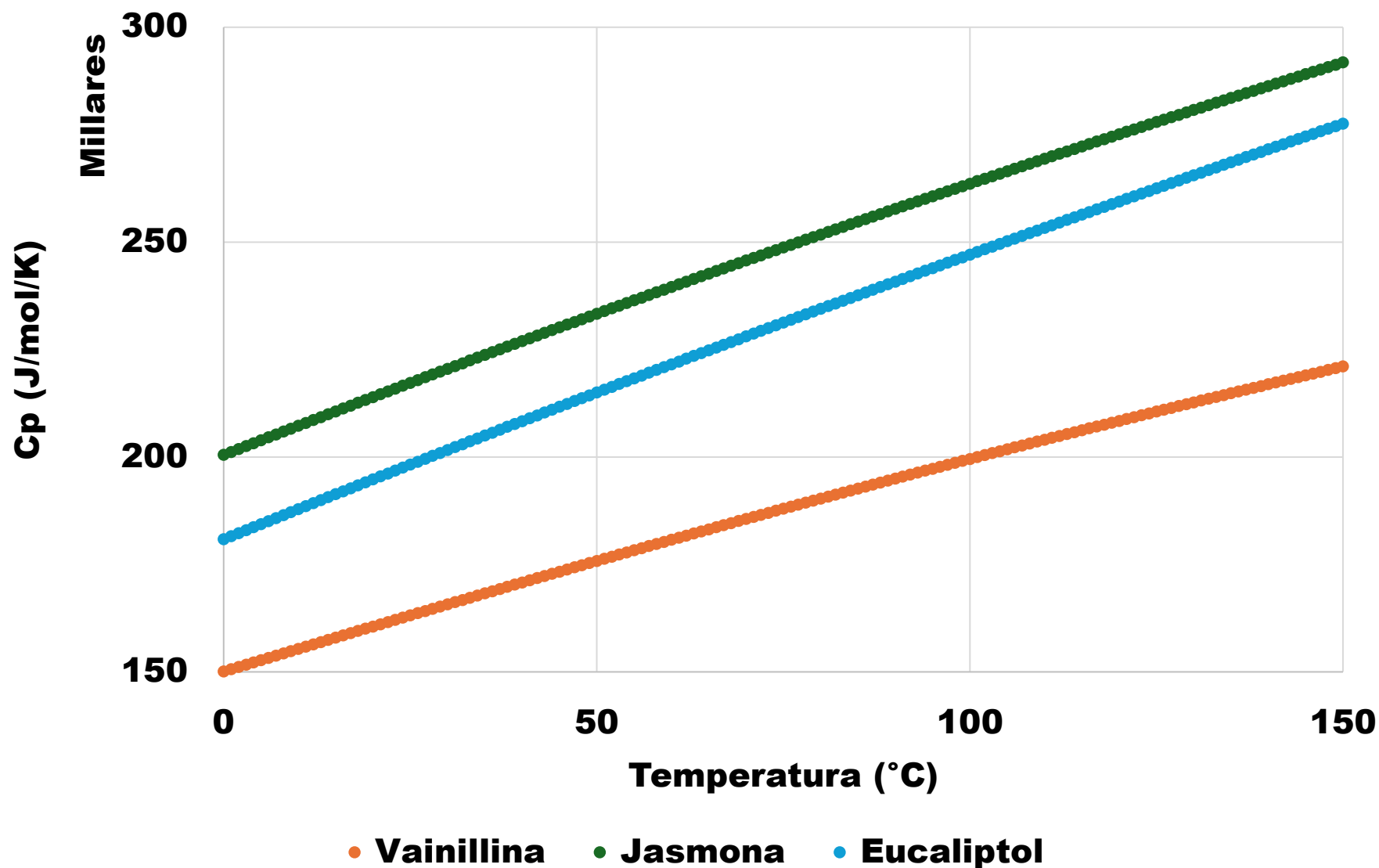


Predicción de Propiedades de Termodinámicas

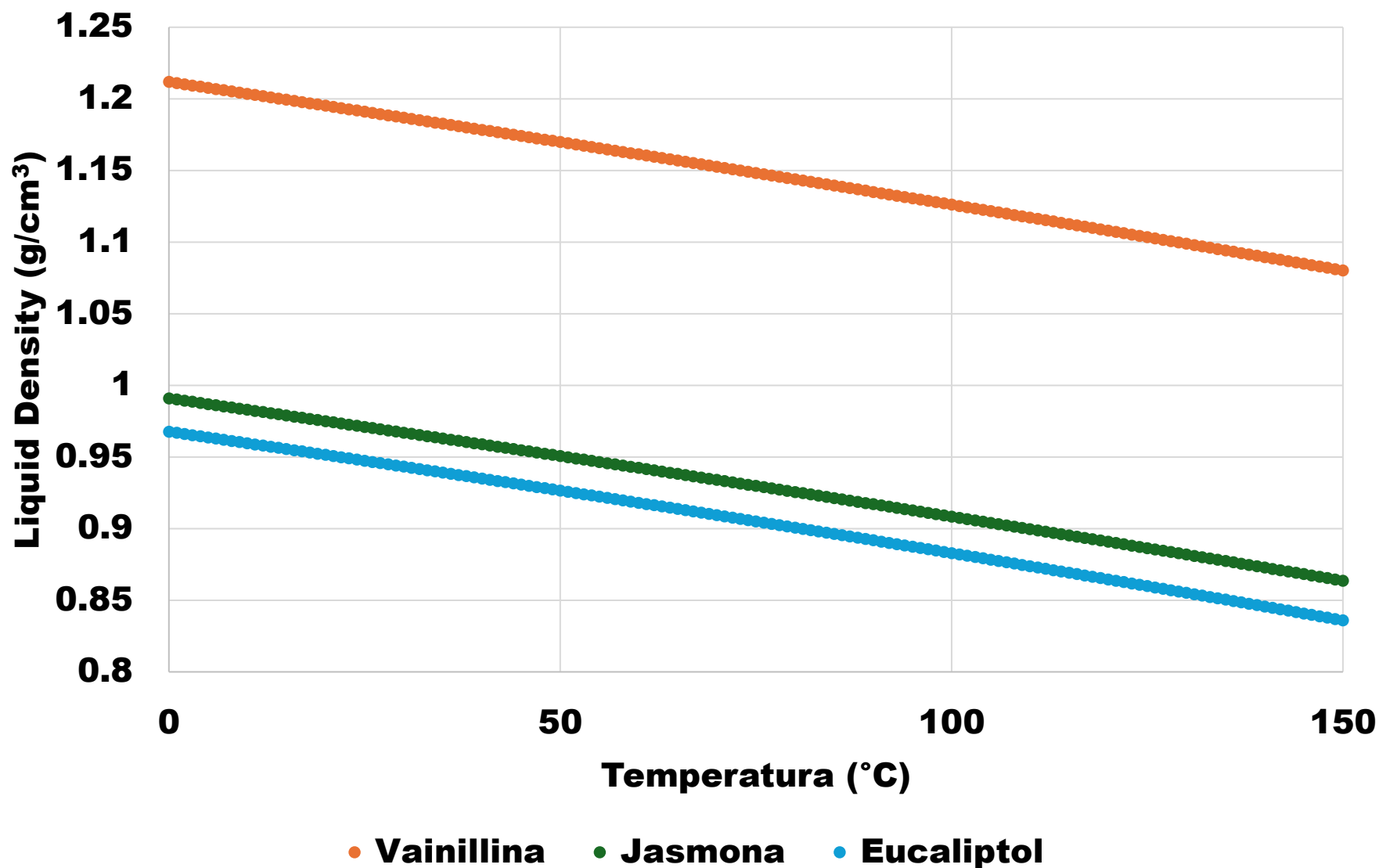
Capacidad Calorífica. Método de Joback



Predicción de Propiedades de Termodinámicas Capacidad Calorífica. Método de Joback



Predicción de Propiedades de Volumétricas Densidad del Líquido. Método de Joback



Referencias:

1. Segovia-Hernández, J. G., & Gómez-Castro, F. I. (2017). *Stochastic process optimization using Aspen Plus®*.
2. Schefflan, R. (2016). *Teach yourself the basics of Aspen Plus*. John Wiley & Sons.
3. Sandler, S. I. (2015). *Using Aspen Plus in thermodynamics instruction: A Step-by-Step Guide*. John Wiley & Sons.
4. Al-Malah, K. I. M. (2016). *Aspen Plus: Chemical Engineering Applications*. John Wiley & Sons.
5. Haydary, J. (2019). *Chemical Process design and simulation: Aspen Plus and Aspen HySys applications*. John Wiley & Sons.
6. Luyben, W. L. (2013). *Distillation design and control using Aspen simulation*. John Wiley & Sons.
7. Medeiros, M. (2024). *Equilibrio de Fases y Químico* (2nd ed.). Facultad de Química, UNAM.
8. Gorak, A., & Sorensen, E. (2014). *Distillation: Fundamentals and Principles*. Academic Press.
9. Poling, B. E., Prausnitz, J. M., Oconnell, J. P. (2001). *The Properties of Gases And Liquids* (5th ed). McGraw-Hill.

Agradecimientos:

PROGRAMA DE APOYO A PROYECTOS PARA INNOVAR Y MEJORAR LA EDUCACIÓN 2023.

DGAPA / PAPIME / PE103523

INCORPORACION DE TIC'S PARA LA ENSEÑANZA Y EVALUACION DEL DESEMPEÑO DE LOS ALUMNOS EN ASIGNATURAS COMPARTIDAS DE DOS CARRERAS DE LA FACULTAD DE QUIMICA.

