



**UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA**

**ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES DE LAS SUTANCIAS
PURAS Y DE LAS MEZCLAS MULTICOMPONENTE
PRESENTES EN LA OBTENCIÓN DE CETONAS ALÍLICAS:
CARVONA Y VERBENONA**

Autores

**David Esteban Cifuentes Sepulveda
Xilena Patricia Oviedo Bustamante**

**Universidad de Antioquia
Facultad de Ingeniería
Departamento de Ingeniería Química
Medellín, Colombia
2021**



Estimación de propiedades de las sustancias puras y de las mezclas multicomponente
presentes en la obtención de cetonas alílicas: carvona y verbenona.

David Esteban Cifuentes Sepúlveda

Xilena Patricia Oviedo Bustamante

Informe de proyecto de investigación como requisito para optar al título de:
Ingeniero Químico.

Asesora

PhD. Lina María González Rodríguez

Línea de Investigación:

Catalisis Ambiental

Grupo de Investigación:

Catalisis Ambiental UdeA

Universidad de Antioquia
Facultad de Ingeniería
Departamento de Ingeniería Química
Medellín, Colombia
2021.



Agradecimientos al Grupo Catálisis Ambiental por la financiación de este trabajo a través del proyecto: “P6. Aprovechamiento sostenible de aceites esenciales para su valoración económica”, financiado por la Universidad de Antioquia, Colciencias, Ministerio de Educación Nacional, Ministerio de Industria, Comercio y Turismo e ICETEX, Convocatoria Ecosistema Científico - Colombia Científica. Fondo Francisco José de Caldas, Contrato RC-FP44842- 212-2018. De igual manera un agradecimiento especial a las profesoras Lina María González Rodríguez y Aída Luz Villa Sierra.

180



TABLA DE CONTENIDOS

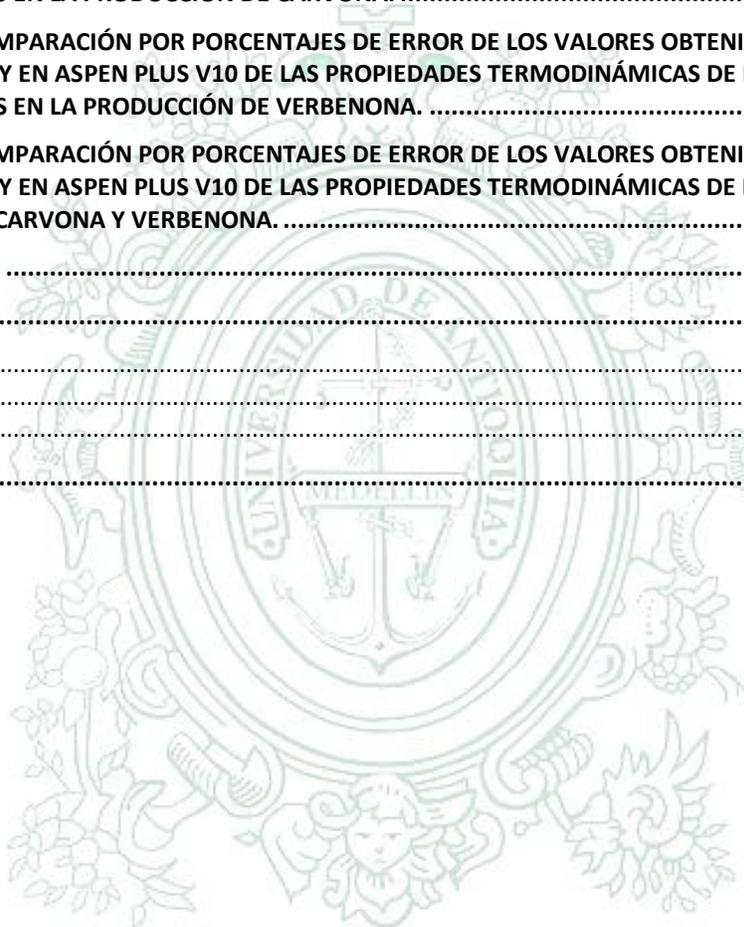
INDICE DE TABLAS	9
INDICE DE ILUSTRACIONES.....	12
INDICE DE GRÁFICAS.....	13
RESUMEN	14
1. INTRODUCCIÓN	15
2. OBJETIVOS	16
GENERAL.....	16
ESPECÍFICOS	16
3. MARCO TEÓRICO	17
<i>Figura 1.</i> Reacción del limoneno y sus productos principales.	17
<i>Figura 2.</i> Reacción del limoneno y sus subproductos.	18
<i>Figura 3.</i> Reacción del α -pineno y sus productos principales.	18
<i>Figura 4.</i> Reacción del α -pineno y sus subproductos.....	19
<i>Figura 5.</i> Proceso de producción de cetonas alílicas (Becerra, 2017).	19
3.1. DENSIDAD	20
3.2. VISCOSIDAD	20
3.3. TENSION SUPERFICIAL	21
3.4. PUNTO DE BURBUJA	21
3.5. TEMPERATURA DE EBULLICION	21
3.6. CAPACIDAD CALORIFICA	22
3.7. PROPIEDADES CRÍTICAS	22
3.7.1 TEMPERATURA CRÍTICA.....	22
3.7.2. PRESIÓN CRÍTICA	22
3.7.3. VOLUMEN CRÍTICO	22
4. METODOLOGÍA	23
4.1. ECUACIONES Y CORRELACIONES	23
4.2. SIMULACIÓN MEDIANTE ASPEN PLUS V10	23
5. PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS ENCONTRADAS EN LA LITERATURA	25
5.1. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE CARVONA.....	25
TABLA 1. PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS INVOLUCRADAS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE LIMONENO (CASTAÑEDA, 2019).	25
TABLA 2. PROPIEDADES LOS SUBPRODUCTOS IDENTIFICADOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE LIMONENO (CASTAÑEDA, 2019).	25
5.2. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE VERBENONA.....	26
TABLA 3. PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS INVOLUCRADAS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE α-PINENO (CASTAÑEDA, 2019).	26
TABLA 4. PROPIEDADES LOS SUBPRODUCTOS IDENTIFICADOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE α-PINENO (CASTAÑEDA, 2019).	26
6. RESULTADOS Y ANALISIS	27
6.1. ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS MEDIANTE ECUACIONES Y CORRELACIONES	27
6.1.1. DENSIDAD	27

TABLA 5.	DENSIDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS PRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE LIMONENO (CASTAÑEDA, 2019).	27
TABLA 6.	DENSIDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS SUBPRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE LIMONENO (CASTAÑEDA, 2019).	28
TABLA 7.	DENSIDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS PRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE β-PINENO (CASTAÑEDA, 2019).	28
TABLA 8.	DENSIDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS SUBPRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE β-PINENO (CASTAÑEDA, 2019).	28
6.1.2.	VISCOSIDAD	28
TABLA 9.	VISCOSIDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS PRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE LIMONENO (CASTAÑEDA, 2019).	29
TABLA 10.	VISCOSIDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS SUBPRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE LIMONENO (CASTAÑEDA, 2019).	29
TABLA 11.	VISCOSIDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS PRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE β-PINENO (CASTAÑEDA, 2019).	29
TABLA 12.	VISCOSIDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS SUBPRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE β-PINENO (CASTAÑEDA, 2019).	29
6.1.3.	TENSIÓN SUPERFICIAL	29
TABLA 13.	TENSIÓN SUPERFICIAL DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS PRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE LIMONENO (CASTAÑEDA, 2019).	30
TABLA 14.	TENSIÓN SUPERFICIAL DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS SUBPRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE LIMONENO (CASTAÑEDA, 2019).	30
TABLA 15.	TENSIÓN SUPERFICIAL DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS PRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE β-PINENO (CASTAÑEDA, 2019).	30
TABLA 16.	TENSIÓN SUPERFICIAL DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS SUBPRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE β-PINENO (CASTAÑEDA, 2019).	30
6.1.4.	CAPACIDAD CALORÍFICA	30
TABLA 17.	CAPACIDAD CALORÍFICA DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS PRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE LIMONENO (CASTAÑEDA, 2019).	31
TABLA 18.	CAPACIDAD CALORÍFICA DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS SUBPRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE LIMONENO (CASTAÑEDA, 2019).	31
TABLA 19.	CAPACIDAD CALORÍFICA DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS PRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE β-PINENO (CASTAÑEDA, 2019).	31
TABLA 20.	CAPACIDAD CALORÍFICA DE LAS SUSTANCIAS PURAS DE LOS SUBPRODUCTOS EN LA OXIDACIÓN ALÍLICA DE β-PINENO (CASTAÑEDA, 2019).	31
6.2.	ESTIMACIÓN DE LAS PROPIEDADES DE MEZCLA	32
TABLA 21.	LISTADO DE SUSTANCIAS PRESENTES EN LAS MEZCLAS DE REACCIÓN (BECERRA, 2018).	32
6.2.1.	DENSIDAD DE LA MEZCLA	32
TABLA 22.	DENSIDADES DE LAS MEZCLAS DE CARVONA Y VERBENONA.	33
6.2.2.	VISCOSIDAD DE LA MEZCLA	33
TABLA 23.	VISCOSIDADES DE LAS MEZCLAS DE CARVONA Y VERBENONA.	33

6.2.3. TENSIÓN SUPERFICIAL	33
TABLA 24. TENSIÓN SUPERFICIAL DE LAS MEZCLAS DE CARVONA Y VERBENONA.	33
6.2.4. CAPACIDAD CALORIFICA.....	33
TABLA 25. CAPACIDADES CALORÍFICAS DE LAS MEZCLAS DE CARVONA Y VERBENONA.	33
6.2.5. TEMPERATURA CRÍTICA.....	34
TABLA 26. TEMPERATURA CRÍTICA DE LAS MEZCLAS DE CARVONA Y VERBENONA.	34
6.2.6. PRESIÓN CRÍTICA	34
TABLA 27. TEMPERATURA CRÍTICA DE LAS MEZCLAS DE CARVONA Y VERBENONA.	34
6.2.7. VOLUMEN CRÍTICO	34
TABLA 28. TEMPERATURA CRÍTICA DE LAS MEZCLAS DE CARVONA Y VERBENONA.	34
6.3. MODELACIÓN DE PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS MEDIANTE ASPEN PLUS V10	35
6.3.1. SELECCIÓN DEL MODELO TERMODINÁMICO	35
6.3.2. CONSTRUCCIÓN DE LOS COMPUESTOS QUE NO ESTÁN PRESENTES EN LA BASE DE DATOS DE ASPEN PLUS V10.....	35
TABLA 29. SUSTANCIAS IDENTIFICADAS EN LA REACCIÓN DE LIMONENO QUE NO SE ENCUENTRAN EN LA BASES DE ASPEN PLUS V10.	36
TABLA 30. SUSTANCIAS IDENTIFICADAS EN LA REACCIÓN DE ALFA-PINENO QUE NO SE ENCUENTRAN EN LA BASES DE ASPEN PLUS V10.	38
<i>Figura 6. Ingreso de las estructuras no encontradas en las bases de datos de Aspen Plus V10.</i>	<i>40</i>
<i>Figura 7. Ingreso de las propiedades conocidas de la bibliografía en Aspen Plus V10.</i>	<i>41</i>
TABLA 31. PROPIEDADES ENCONTRADAS EN LA LITERATURA DE LOS COMPUESTOS INVOLUCRADOS EN LA OBTENCIÓN DE LA CARVONA PARA INGRESAR A ASPEN PLUS.	41
TABLA 32. PROPIEDADES ENCONTRADAS EN LA LITERATURA DE LOS COMPUESTOS INVOLUCRADOS EN LA OBTENCIÓN DE LA VERBENONA PARA INGRESAR A ASPEN PLUS.....	42
<i>Figura 8. Herramienta NIST del software Aspen Plus V10 para la estimación de las propiedades críticas de las sustancias presentes en la producción de carvona y verbenona.....</i>	<i>42</i>
<i>Figura 9. Ventana de la herramienta de análisis de sustancias puras del software de Aspen Plus V10 para la estimación de las propiedades termodinámicas presentes en la producción de carvona y verbenona. 43</i>	<i>43</i>
6.3.3. PROPIEDADES TERMODINAMICAS	43
6.3.3.1. DENSIDAD.....	43
TABLA 33. ESTIMACIÓN DE LA DENSIDAD DE LOS COMPUESTOS PUROS INVOLUCRADOS EN LA PRODUCCIÓN DE LA CARVONA Y VERBENONA A TRAVÉS DE ASPEN PLUS V10.	44
6.3.3.2. VISCOSIDAD.....	51
TABLA 34. ESTIMACIÓN DE LA VISCOSIDAD DE LOS COMPUESTOS PUROS INVOLUCRADOS EN LA PRODUCCIÓN DE LA CARVONA Y VERBENONA A TRAVÉS DE ASPEN PLUS V10.	51
6.3.3.3. TENSIÓN SUPERFICIAL.....	57
TABLA 35. ESTIMACIÓN DE LA TENSIÓN SUPERFICIAL DE LOS COMPUESTOS PUROS INVOLUCRADOS EN LA PRODUCCIÓN DE LA CARVONA Y VERBENONA A TRAVÉS DE ASPEN PLUS V10.....	58
6.3.3.4. CAPACIDAD CALORÍFICA.....	65
TABLA 36. ESTIMACIÓN DE LA CAPACIDAD CALORÍFICA DE LOS COMPUESTOS PUROS INVOLUCRADOS EN LA PRODUCCIÓN DE LA CARVONA Y VERBENONA A TRAVÉS DE ASPEN PLUS V10.....	65

6.3.3.5. PROPIEDADES TERMODINÁMICAS CRÍTICAS	71
TABLA 37. ESTIMACIÓN DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS CRÍTICAS DE LAS SUSTANCIAS PURAS PRESENTES EN EL PROCESO DE OBTENCIÓN DE LA CARVONA Y LA VERBENONA A TRAVÉS DEL SOFTWARE ASPEN PLUS V10.	72
6.4. MODELACIÓN DE LAS PROPIEDADES DE MEZCLA MEDIANTE ASPEN PLUS V10.....	73
6.4.1. CONSIDERACIONES.....	73
<i>Figura 10. Selección de las propiedades termodinámicas que se desean estimar en la mezcla presentes en la producción de carvona y verbenona.</i>	<i>73</i>
6.4.2. PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE MEZCLAS	74
6.4.2.1. DENSIDAD DE MEZCLA.....	74
TABLA 38. ESTIMACIÓN DE LA DENSIDAD DE MEZCLA INVOLUCRADA EN LA PRODUCCIÓN DE CARVONA Y VERBENONA.....	74
6.4.2.2. VISCOSIDAD DE MEZCLA.....	76
TABLA 39. ESTIMACIÓN DE LA VISCOSIDAD DE MEZCLA INVOLUCRADA EN LA PRODUCCIÓN DE CARVONA Y VERBENONA.....	76
6.4.2.3. TENSIÓN SUPERFICIAL.....	78
TABLA 40. ESTIMACIÓN DE LA TENSIÓN SUPERFICIAL DE MEZCLA INVOLUCRADA EN LA PRODUCCIÓN DE CARVONA Y VERBENONA.....	78
6.4.2.4. CAPACIDAD CALORÍFICA.....	80
TABLA 41. ESTIMACIÓN DE LA CAPACIDAD CALORÍFICA DE MEZCLA INVOLUCRADA EN LA PRODUCCIÓN DE CARVONA Y VERBENONA.	80
6.4.2.5. TEMPERATURA CRÍTICA DE MEZCLA	82
TABLA 42. ESTIMACIÓN DE LA TEMPERATURA CRÍTICA DE MEZCLA INVOLUCRADA EN LA PRODUCCIÓN DE CARVONA Y VERBENONA.....	82
6.4.2.6. PRESIÓN CRÍTICA DE MEZCLA.....	84
TABLA 43. ESTIMACIÓN DE LA PRESIÓN CRÍTICA DE MEZCLA INVOLUCRADA EN LA PRODUCCIÓN DE CARVONA Y VERBENONA	84
6.4.2.7. VOLUMEN CRÍTICO DE MEZCLA.....	86
TABLA 44. ESTIMACIÓN DEL VOLUMEN CRÍTICO DE MEZCLA INVOLUCRADA EN LA PRODUCCIÓN DE CARVONA Y VERBENONA	86
6.4.2.8. TEMPERATURA DE BURBUJA DE MEZCLA.....	88
TABLA 45. ESTIMACIÓN DE LA TEMPERATURA DE BURBUJA DE MEZCLA INVOLUCRADA EN LA PRODUCCIÓN DE CARVONA Y VERBENONA.	88
7. VALIDACIÓN DE LOS RESULTADOS.....	91
7.1. MODELACIÓN COMPUESTOS PUROS	91
TABLA 46. VALORES ESTIMADOS POR MEDIO DE LOS ALGORITMOS CONSTRUIDOS EN MATLAB_R2020A DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE LOS COMPUESTOS PUROS PRESENTES EN LA PRODUCCIÓN DE CARVONA.	91
TABLA 47. VALORES ESTIMADOS POR MEDIO DE LOS ALGORITMOS CONSTRUIDOS EN MATLAB_R2020A DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE LOS COMPUESTOS PUROS PRESENTES EN LA PRODUCCIÓN DE VERBENONA.	91
7.2. SIMULACIÓN COMPUESTOS PUROS.....	92

TABLA 48. VALORES ESTIMADOS POR MEDIO ASPEN PLUS V10 DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE LOS COMPUESTOS PUROS PRESENTES EN LA PRODUCCIÓN DE CARVONA.....	92
TABLA 49. VALORES ESTIMADOS POR MEDIO ASPEN PLUS V10 DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE LOS COMPUESTOS PUROS PRESENTES EN LA PRODUCCIÓN DE VERBENONA.....	93
7.3. PORCENTAJE DE ERROR ENTRE LA SIMULACIÓN Y LA MODELACIÓN PARA LOS COMPUESTOS PUROS.	93
TABLA 50. COMPARACIÓN POR PORCENTAJES DE ERROR DE LOS VALORES OBTENIDOS EN MATLAB_R2020A Y EN ASPEN PLUS V10 DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE LOS COMPUESTOS PUROS PRESENTES EN LA PRODUCCIÓN DE CARVONA.	93
TABLA 51. COMPARACIÓN POR PORCENTAJES DE ERROR DE LOS VALORES OBTENIDOS EN MATLAB_R2020A Y EN ASPEN PLUS V10 DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE LOS COMPUESTOS PUROS PRESENTES EN LA PRODUCCIÓN DE VERBENONA.	94
TABLA 52. COMPARACIÓN POR PORCENTAJES DE ERROR DE LOS VALORES OBTENIDOS EN MATLAB_R2020A Y EN ASPEN PLUS V10 DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE LAS MEZCLAS EN LA PRODUCCIÓN DE CARVONA Y VERBENONA.	95
8. CONCLUSIONES	96
9. ANEXOS	97
ANEXO 1:	97
ANEXO 2	100
ANEXO 3	101
10. REFERENCIAS.....	102



UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA
1803

INDICE DE TABLAS

Tabla 1. Propiedades de las sustancias puras involucradas en la oxidación alílica de limoneno (castañeda,2019).....	25
Tabla 2. Propiedades los subproductos identificados en la oxidación alílica de limoneno (castañeda,2019).....	25
Tabla 3. Propiedades de las sustancias puras involucradas en la oxidación alílica de α -pineno (castañeda,2019).....	26
Tabla 4. Propiedades los subproductos identificados en la oxidación alílica de α -pineno (castañeda,2019).....	26
Tabla 5. Densidades de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de limoneno (castañeda,2019).....	27
Tabla 6. Densidades de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de limoneno (castañeda,2019).....	28
Tabla 7. Densidades de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de α -pineno (castañeda,2019).....	28
Tabla 8. Densidades de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de α -pineno (castañeda,2019).....	28
Tabla 9. Viscosidades de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de limoneno (castañeda,2019).....	29
Tabla 10. Viscosidades de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de limoneno (castañeda,2019).....	29
Tabla 11. Viscosidades de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de α -pineno (castañeda,2019).....	29
Tabla 12. Viscosidades de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de α -pineno (castañeda,2019).....	29
Tabla 13. Tensión superficial de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de limoneno (castañeda,2019).....	30
Tabla 14. Tensión superficial de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de limoneno (castañeda,2019).....	30
Tabla 15. Tensión superficial de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de α -pineno (castañeda,2019).....	30
Tabla 16. Tensión superficial de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de α -pineno (castañeda,2019).....	30
Tabla 17. Capacidad calorífica de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de limoneno (castañeda,2019).....	31
Tabla 18. Capacidad calorífica de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de limoneno (castañeda,2019).....	31

Tabla 19. Capacidad calorífica de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de α -pineno (castañeda,2019).	31
Tabla 20. Capacidad calorífica de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de α -pineno (castañeda,2019).	31
Tabla 21. Listado de sustancias presentes en las mezclas de reacción (becerra, 2018).	32
Tabla 22. Densidades de las mezclas de carvona y verbenona.	33
Tabla 23. Viscosidades de las mezclas de carvona y verbenona.	33
Tabla 24. Tensión superficial de las mezclas de carvona y verbenona.	33
Tabla 25. Capacidades caloríficas de las mezclas de carvona y verbenona.	33
Tabla 26. Temperatura crítica de las mezclas de carvona y verbenona.	34
Tabla 27. Temperatura crítica de las mezclas de carvona y verbenona.	34
Tabla 28. Temperatura crítica de las mezclas de carvona y verbenona.	34
Tabla 29. Sustancias identificadas en la reacción de limoneno que no se encuentran en las bases de aspen plus v10.	36
Tabla 30. Sustancias identificadas en la reacción de alfa-pineno que no se encuentran en las bases de aspen plus v10.	38
Tabla 31. Propiedades encontradas en la literatura de los compuestos involucrados en la obtención de la carvona para ingresar a aspen plus.	41
Tabla 32. Propiedades encontradas en la literatura de los compuestos involucrados en la obtención de la verbenona para ingresar a aspen plus.	42
Tabla 33. Estimación de la densidad de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.	44
Tabla 34. Estimación de la viscosidad de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.	51
Tabla 35. Estimación de la tensión superficial de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.	58
Tabla 36. Estimación de la capacidad calorífica de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.	65
Tabla 37. Estimación de las propiedades termodinámicas críticas de las sustancias puras presentes en el proceso de obtención de la carvona y la verbenona a través del software aspen plus v10.	72
Tabla 38. Estimación de la densidad de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.	74
Tabla 39. Estimación de la viscosidad de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.	76
Tabla 40. Estimación de la tensión superficial de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.	78

Tabla 41. Estimación de la capacidad calorífica de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.	80
Tabla 42. Estimación de la temperatura crítica de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.	82
Tabla 43. Estimación de la presión crítica de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.	84
Tabla 44. Estimación del volumen crítico de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.	86
Tabla 45. Estimación de la temperatura de burbuja de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.	88
Tabla 46. Valores estimados por medio de los algoritmos construidos en matlab_r2020a de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de carvona.	91
Tabla 47. Valores estimados por medio de los algoritmos construidos en matlab_r2020a de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de verbenona.,,	91
Tabla 48. Valores estimados por medio aspen plus V10 de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de carvona.	92
Tabla 49. Valores estimados por medio aspen plus V10 de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de verbenona.	93
Tabla 50. Comparación por porcentajes de error de los valores obtenidos en matlab_r2020a y en aspen plus V10 de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de carvona.	93
Tabla 51. Comparación por porcentajes de error de los valores obtenidos en matlab_r2020a y en aspen plus V10 de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de verbenona.	94

INDICE DE ILUSTRACIONES

<i>Figura 1. Reacción del limoneno y sus productos principales.....</i>	<i>17</i>
<i>Figura 2. Reacción del limoneno y sus subproductos.</i>	<i>18</i>
<i>Figura 3. Reacción del α-pineno y sus productos principales.</i>	<i>18</i>
<i>Figura 4. Reacción del α-pineno y sus subproductos.....</i>	<i>19</i>
<i>Figura 5. Proceso de producción de cetonas alílicas (Becerra, 2017).....</i>	<i>19</i>
<i>Figura 6. Ingreso de las estructuras no encontradas en las bases de datos de Aspen Plus V10. 40</i>	
<i>Figura 7. Ingreso de las propiedades conocidas de la bibliografía en Aspen Plus V10. 41</i>	
<i>Figura 8. Herramienta NIST del software Aspen Plus V10 para la estimación de las propiedades críticas de las sustancias presentes en la producción de carvona y verbenona.</i>	<i>42</i>
<i>Figura 9. Ventana de la herramienta de análisis de sustancias puras del software de Aspen Plus V10 para la estimación de las propiedades termodinámicas presentes en la producción de carvona y verbenona.</i>	<i>43</i>
<i>Figura 10. Selección de las propiedades termodinámicas que se desean estimar en la mezcla presentes en la producción de carvona y verbenona.</i>	<i>73</i>

INDICE DE GRÁFICAS

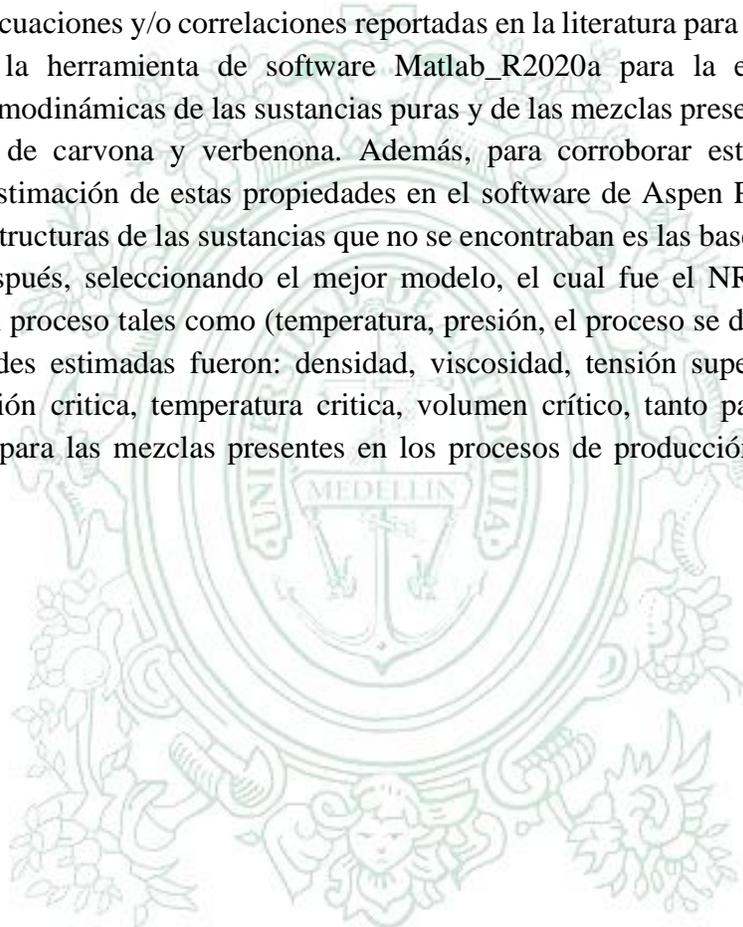
Gráfica 1.	Representación de los valores estimados de la densidad de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.....	50
Gráfica 2.	Representación de los valores estimados de la viscosidad de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.....	57
Gráfica 3.	Representación de los valores estimados de la tensión superficial de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.....	64
Gráfica 4.	representación de los valores estimados de la capacidad calorífica de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.....	71
Gráfica 5.	Representación de los valores estimados de la densidad de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.....	76
Gráfica 6.	Representación de los valores estimados de la viscosidad de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.....	78
Gráfica 7.	Representación de los valores estimados de la tensión superficial de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.....	80
Gráfica 8.	Representación de los valores estimados de la capacidad calorífica de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.....	82
Gráfica 9.	Representación de los valores estimados de la temperatura crítica de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.....	84
Gráfica 10.	Representación de los valores estimados de la presión crítica de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de aspen plus V10.....	86



UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA
1803

RESUMEN

El objeto de esta investigación es de ampliar los conocimientos de propiedades físicas, químicas, termodinámicas y de transporte de reactivos, productos, solvente utilizados en los procesos de producción de la carvona y verbenona y las mezclas que se presentan en estos, ya que en la literatura se encuentra muy poca información sobre estos procesos y algunas propiedades que se involucran en este proceso. Para el desarrollo de esta investigación se seleccionaron ecuaciones y/o correlaciones reportadas en la literatura para la construcción de algoritmos en la herramienta de software Matlab_R2020a para la estimación de las propiedades termodinámicas de las sustancias puras y de las mezclas presentes en el proceso de producción de carvona y verbenona. Además, para corroborar estos algoritmos, se procedió a la estimación de estas propiedades en el software de Aspen Plus V10. Primero buscando las estructuras de las sustancias que no se encontraban en las bases de datos de este software, y después, seleccionando el mejor modelo, el cual fue el NRTL, debido a las condiciones del proceso tales como (temperatura, presión, el proceso se da en fase líquida). Estas propiedades estimadas fueron: densidad, viscosidad, tensión superficial, capacidad calorífica, presión crítica, temperatura crítica, volumen crítico, tanto para las sustancias, como también para las mezclas presentes en los procesos de producción de la carvona y verbenona.



UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA
1803

1. INTRODUCCIÓN

Para el diseño de procesos es necesario tener datos confiables para realizar el dimensionamiento real de los equipos involucrados en ellos, diseño que debe realizarse basado en las condiciones de operación y en la naturaleza de las sustancias involucradas. Sin embargo, en ocasiones hay inconvenientes para poder obtener datos confiables de los procesos a diseñar, esto puede ser debido a la dificultad para obtener las propiedades necesarias. Este hecho se puede deber a que las condiciones de operación a utilizar no pueden ser recreadas en el laboratorio o a que en ocasiones las sustancias a trabajar son poco conocidas y se encuentran pocos datos en la literatura. Por lo anterior la simulación y la modelación mediante algoritmos genéticos se han convertido en herramientas básicas para el diseño de un proceso; sin embargo, la obtención de datos confiables para el dimensionamiento real de los equipos basado en las condiciones de operación debe estar soportada en datos de propiedades termodinámicas de las sustancias puras y de las mezclas involucradas en el proceso (Becerra, 2017). Esta información se encuentra generalmente disponible para un gran número de sustancias, pero existen sustancias que carecen de esta información, por lo que se hace necesario realizar experimentación, lo que resulta en ocasiones costoso y a veces complejo, con lo cual se recurre a obtener esta información mediante estimación por métodos o correlaciones empíricas (Smith, 1959).

El α -pineno es uno de los componentes principales del aceite de trementina, el cual es extraído de los pinos. El limoneno es el componente principal del aceite de naranja, el cual se extrae de las cáscaras de naranja. Estos aceites tienen un gran valor comercial debido a que el α -pineno y el limoneno se pueden oxidar a cetonas alifáticas como la verbenona y la carvona, los cuales son utilizados en la producción de químicos especializados. Actualmente se ha venido desarrollando en el Grupo Catálisis Ambiental el diseño del proceso de producción de estas cetonas. No obstante, la información en la literatura sobre las propiedades termodinámicas de algunas de las sustancias involucradas en el proceso es limitada y esto dificulta la simulación del proceso (Becerra, 2018).

Es así que el objetivo de este trabajo es estimar valores de las propiedades de transporte y termodinámicas de las mezclas de los compuestos involucrados en las unidades de reacción en la producción de la verbenona y la carvona a partir del α -pineno y limoneno, respectivamente, utilizando el sistema catalítico $\text{FePcCl}_{16}\text{-SiO}_2\text{/TBHP}$, identificando inicialmente los métodos y las propiedades reportadas.

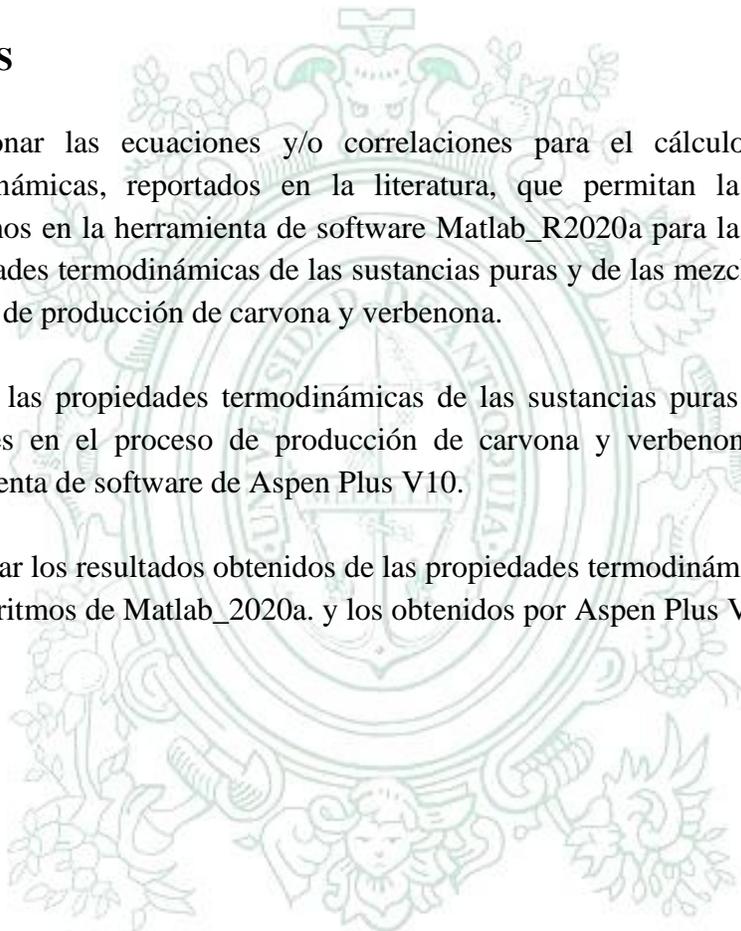
2. OBJETIVOS

GENERAL

Determinar las propiedades fisicoquímicas y de transporte a partir del modelado y la simulación de mezclas de los compuestos involucrados en la producción de verbenona y carvona a partir del α -pineno y limoneno, respectivamente, utilizando el sistema catalítico $\text{FePcCl}_{16}\text{-SiO}_2\text{/TBHP}$.

ESPECÍFICOS

- Seleccionar las ecuaciones y/o correlaciones para el cálculo de propiedades termodinámicas, reportados en la literatura, que permitan la construcción de algoritmos en la herramienta de software Matlab_R2020a para la estimación de las propiedades termodinámicas de las sustancias puras y de las mezclas presentes en el proceso de producción de carvona y verbenona.
- Estimar las propiedades termodinámicas de las sustancias puras y de las mezclas presentes en el proceso de producción de carvona y verbenona, a través de la herramienta de software de Aspen Plus V10.
- Comparar los resultados obtenidos de las propiedades termodinámicas obtenidos por los algoritmos de Matlab_2020a. y los obtenidos por Aspen Plus V10.



UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA
1803

3. MARCO TEÓRICO

Los monoterpenos son los principales componentes de los aceites esenciales de los vegetales y son los fitoquímicos inhibidores de crecimiento más abundantes que han sido identificados en las plantas superiores. Son conocidos por su potencial alelopático contra malezas y plantas de cultivo.

El limoneno y el α -pineno son monoterpenos que provienen de los aceites esenciales de la naranja y la trementina, respectivamente. La trementina se obtiene por exudación de árboles de pino (Coppen & Hone, 1995) o como un subproducto de la industria papelera (Coppen & Hone, 1995; Lindmark-Henriksson et al., 2003). De la oxidación de monoterpenos se obtienen epóxidos, aldehídos, cetonas, ésteres y éteres, los cuales son intermediarios en la preparación de cosméticos, productos farmacéuticos, agroquímicos, sabores y fragancias (Fdil et al., 1996; Crowell, 1997; Murphy et al., 2000; Allal et al., 2003; De Carvalho & Da Fonseca, 2006a). En la oxidación del limoneno y el α -pineno se presenta una competencia entre la oxidación del doble enlace y la oxidación en la posición alílica, debido a la presencia de los enlaces dobles de estas moléculas. El predominio de una reacción sobre la otra depende de la naturaleza de la olefina y de la estabilidad relativa de los radicales alílicos formados (Murphy et al., 2000).

Para la producción de la carvona se utiliza como reactivo el limoneno, el cual es solubilizado en acetona y se oxida con tert-butil hidroperóxido (TBHP) comercial al 70 % en agua a 40 °C durante 24 h de reacción. Donde se producen dos reacciones, una oxidación alílica y una epoxidación, dando como productos principales carveol, carvona y epóxido de limoneno, a su vez se da como subproductos 8,9-óxido de limoneno, 1,2-glicol de limoneno, isopiperitona, dióxido de limoneno, perialdehído e hidroxicarvona, tal como se observa en las figuras 1 y 2.

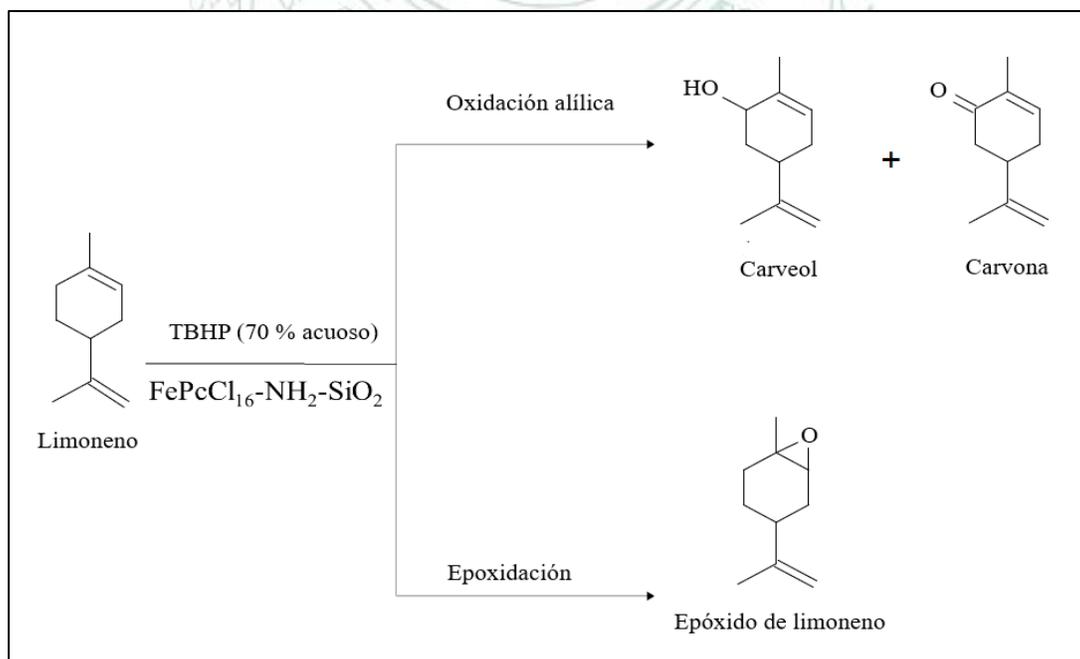


Figura 1. Reacción del limoneno y sus productos principales.

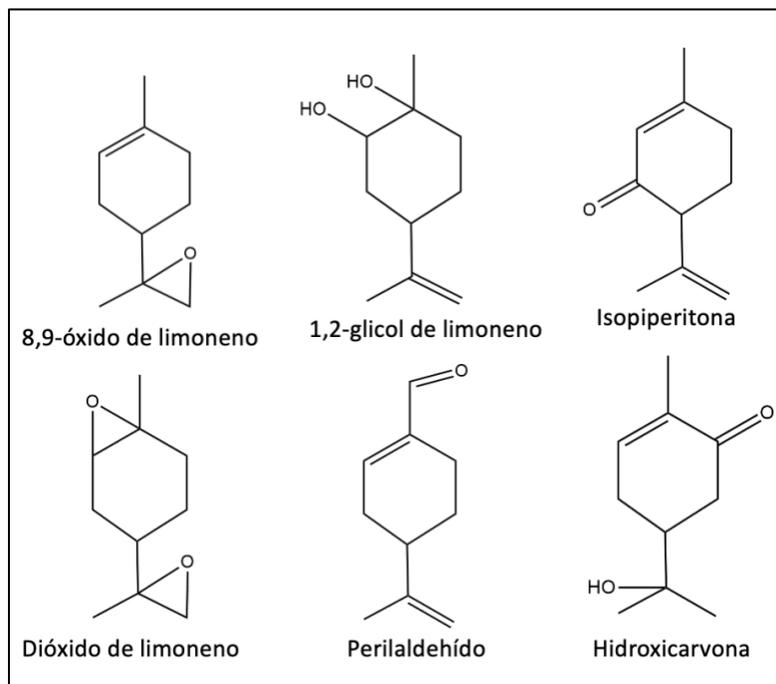


Figura 2. Reacción del limoneno y sus subproductos.

Para la producción de la verbenona se utiliza como reactivo el α -pineno, el cual es solubilizado en acetona y se oxida con tert-butil hidroperóxido (TBHP) comercial al 70 % en agua a 40 °C durante 24 h de reacción. Donde se producen dos reacciones, una oxidación alílica y una epoxidación, dando como productos principales epóxido de α -pineno, verbenol y verbenona, a su vez se da como subproductos pinocarvona, 2-hidroxi-3-pinanona, pinanediol y aldehído canfolénico tal como se observa en las figuras 3 y 4.

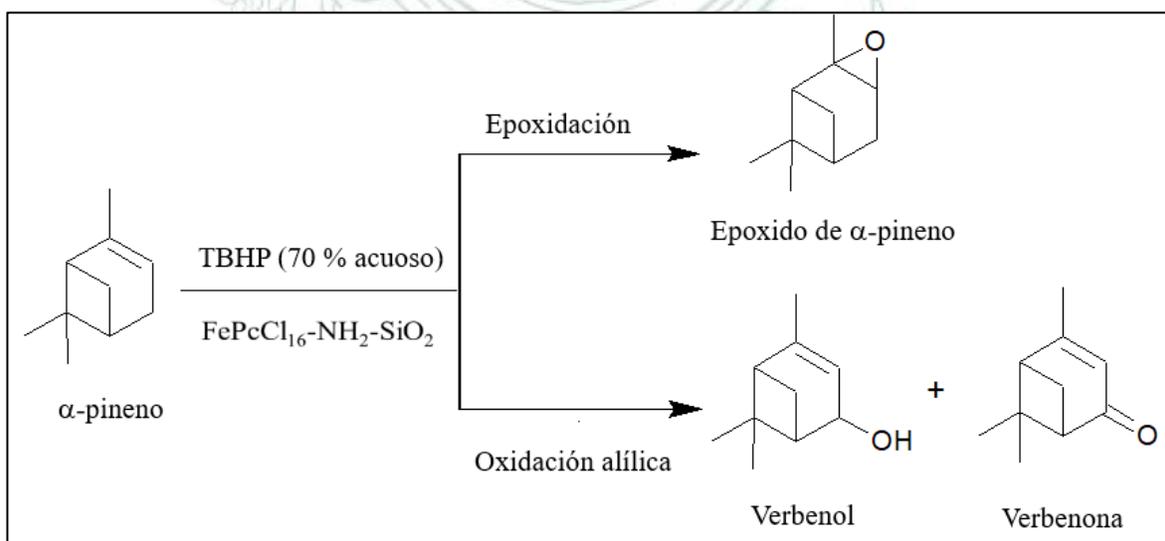


Figura 3. Reacción del α -pineno y sus productos principales.

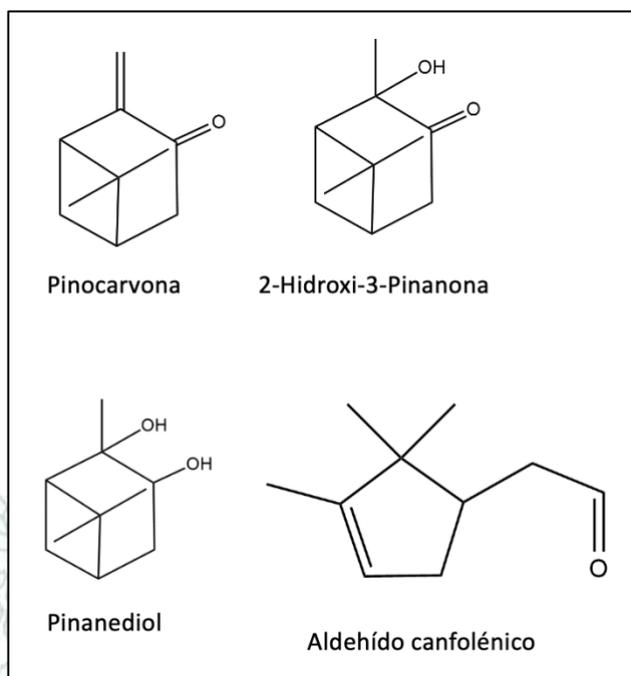


Figura 4. Reacción del α -pineno y sus subproductos.

Para la producción de verbenona y carvona se ha planteado el proceso presentado en la figura 5, en el cual, el monoterpeno (α -pineno o limoneno) solubilizado en acetona se oxida con tert-butil hidroperóxido (TBHP) comercial al 70 % en agua a 40 °C durante 24 h de reacción. La conversión de los terpenos es superior al 80 % y la selectividad a las cetonas está entre el 16 y el 23 % lo que hace necesario una serie de equipos para purificarlos (Becerra, 2018). El sistema de purificación consiste en un filtro para separar el catalizador, un separador tipo flash, con sus equipos auxiliares, para la recuperación de parte de la acetona, el agua y el *tert*-butanol. Finalmente, se pasa a una torre de destilación batch para obtener la cetona alílica.

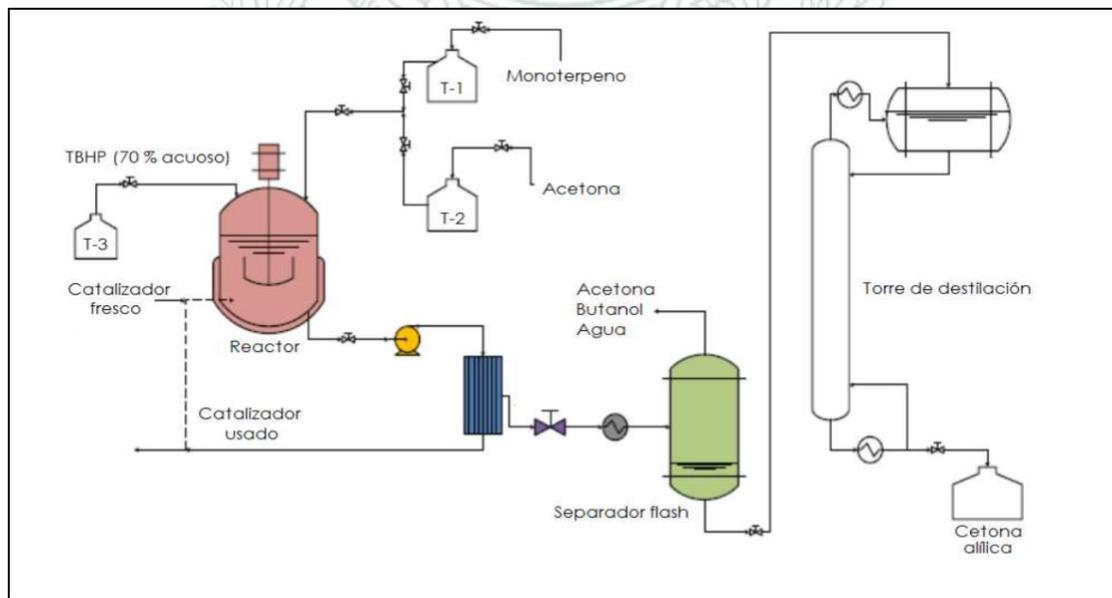


Figura 5. Proceso de producción de cetonas alílicas (Becerra, 2017).

Para el diseño de estas unidades de proceso se requieren las propiedades de las sustancias puras y de las mezclas presentes; cabe resaltar que a pesar de que existen numerosos informes y estudios de sistemas catalíticos heterogéneos sobre la oxidación de α -pineno y el limoneno, los estudios sobre estos compuestos y las propiedades de las mezclas son limitados, por lo que se hace necesario realizar un estudio en el cual se determinen las variables involucradas en este proceso.

En este estudio se pretende realizar una estimación de las siguientes propiedades termodinámicas: densidad, viscosidad, tensión superficial, capacidad calorífica, temperatura de ebullición, temperatura de punto de burbuja, presión crítica, temperatura crítica y volumen crítico (Tabla 1). Las propiedades se terminarán mediante algoritmos a través de Matlab_2020b y simulación a través de Aspen Plus V10, para los compuestos involucrados en la oxidación alílica de limoneno y α -pineno para la obtención de carvona y verbenona, respectivamente, usando el sistema catalítico $\text{FePcCl}_{16}/\text{NH}_2\text{-SiO}_2/\text{TBHP}$ (Tabla 1) (Becerra, 2018). Se utilizará la información de las propiedades estimadas experimentalmente para los compuestos puros involucrados en obtención de cetonas alílicas reportadas en el trabajo “Determinación de propiedades termodinámicas involucradas en el proceso de producción de las cetonas alílicas verbenona y carvona” (Herrera (2019)).

3.1. DENSIDAD

La densidad se define como la masa de una sustancia por unidad de volumen. La densidad se da en kg/m^3 en unidades del SI o también en el sistema anglosajón lb_m/ft^3 y g/cm^3 . Otras formas de densidad comúnmente utilizadas son la densidad molar (densidad dividida por el peso molecular) en kmol/m^3 , la densidad relativa (densidad relativa al agua a $15\text{ }^\circ\text{C}$) y la gravedad específica del término más antiguo (densidad relativa al agua a $60\text{ }^\circ\text{F}$). A menudo, la inversa de densidad, volumen específico y la inversa de densidad molar, volumen molar, se correlacionan y se utilizan para transmitir información equivalente. (Green & Perry, 2008)

3.2. VISCOSIDAD

La viscosidad se define como el esfuerzo cortante por unidad de área en cualquier punto de un fluido confinado, dividido por el gradiente de velocidad en la dirección perpendicular a la dirección del flujo. La viscosidad absoluta η es el esfuerzo cortante en un punto, dividido por el gradiente de velocidad en ese punto. La unidad de viscosidad SI es $\text{Pa}\cdot\text{s}$ [$1\text{ kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$], pero la unidad de peso cgs (P) [$1\text{g}/(\text{cm}\cdot\text{s})$] también se usa comúnmente. Debido a que muchos fluidos comunes tienen viscosidades del orden de 0.01 P, la unidad de centipoise (cP) también se usa con frecuencia ($1\text{cP}=1\text{mPa}\cdot\text{s}$). La viscosidad cinemática ν se define como la relación de la viscosidad absoluta a la densidad a la misma temperatura y presión. La unidad SI para ν es m^2/s , pero también suele dar en Stokes (St) ($1\text{ cm}^2/\text{s}$) o centistokes (cSt) ($0.01\text{ cm}^2/\text{s}$) (Green & Perry, 2008).

La viscosidad de un fluido es esa propiedad que determina la cantidad de su resistencia a una fuerza de corte. La viscosidad se debe principalmente a la interacción entre las moléculas de fluido. Las viscosidades de los líquidos disminuyen con los aumentos de temperatura, pero no se ven afectadas de manera apreciable por los cambios de presión. La viscosidad absoluta

de los gases aumenta con el aumento de la temperatura, pero no cambia apreciablemente por los cambios en la presión. Dado que el peso específico de los gases cambia con los cambios de presión (constante de temperatura), la viscosidad cinemática varía inversamente a la presión (Giles, Evett, & Cheng, 2014).

3.3. TENSIÓN SUPERFICIAL

Una molécula en el interior de un líquido está bajo fuerzas atractivas en todas las direcciones y la suma vectorial de estas fuerzas es cero. Pero una molécula en la superficie de un líquido es activada por una fuerza cohesiva interna neta que es perpendicular a la superficie. Por lo tanto, se requiere trabajo para mover las moléculas a la superficie contra esta fuerza opuesta, y las moléculas de la superficie tienen más energía que las interiores.

La tensión de la superficie σ (sigma) de un líquido es el trabajo que se debe hacer para traer suficientes moléculas desde el interior del líquido a la superficie para formar una nueva área de unidad de esa superficie (J/m^2 o $\text{ft} \cdot \text{lb/ft}^2$). De manera equivalente, las moléculas de superficie energizadas actúan como si compusieran una hoja estirada, y $\sigma = \Delta F / \Delta L$ donde ΔF es la fuerza elástica transversal a cualquier elemento de longitud ΔL en la superficie, da las unidades N/m o lb/ft . (Giles, Evett, & Cheng, 2014). La tensión superficial de un líquido, γ , es la fuerza por unidad de longitud sobre la superficie que se opone a la expansión del área de la superficie.

3.4. PUNTO DE BURBUJA

El punto de burbuja se define como la condición de componente de hidrocarburo en la cual el sistema es completamente líquido, con la excepción de una sola gota (infinitamente pequeña) de vapor presente. La cantidad de vapor se especifica, de forma conveniente, para que la composición del líquido sea la composición del sistema total. Esto significa que, si se quiere encontrar el punto de burbuja de una composición líquida, simplemente lo tomamos para una cantidad muy pequeña de vapor especificado (Erwin, 2002).

3.5. TEMPERATURA DE EBULLICIÓN

El punto de ebullición normal (temperatura de ebullición) de una sustancia es la temperatura a la cual la presión de vapor de la sustancia es igual a la presión atmosférica. En el punto de ebullición, una sustancia cambia su estado de líquido a gas. Una definición más estricta del punto de ebullición es la temperatura a la cual la fase líquida y vapor (gas) de una sustancia pueden existir en equilibrio. Cuando se aplica calor a un líquido, la temperatura del líquido aumenta hasta que la presión de vapor del líquido es igual a la presión de la atmósfera circundante (gases). En este punto no hay un aumento adicional en la temperatura y la energía térmica adicional suministrada se absorbe como calor latente de vaporización para transformar el líquido en gas. Esta transformación se produce no solo en la superficie del líquido (como en el caso de la evaporación, pero también en todo el volumen del líquido, donde se forman burbujas de gas. El punto de ebullición de un líquido disminuye si la presión de la atmósfera circundante (gases) disminuye. Por otro lado, si la presión de la atmósfera circundante (gases) aumenta, el punto de ebullición aumenta. Por esta razón, es habitual cuando el punto de ebullición de una sustancia incluye la presión a la que se observa, si esa

presión no es la estándar, es decir, 760 mm de mercurio o 1 atmósfera (STP, temperatura y presión estándar). El punto de ebullición de una solución suele ser más alto que el del disolvente puro y esta elevación del punto de ebullición es una de las propiedades colectivas comunes a todas las soluciones (Speight, 2017).

3.6. CAPACIDAD CALORÍFICA

La capacidad calorífica se define como la energía requerida para cambiar la temperatura de una masa unitaria (calor específico) o mol (capacidad de calor molar) del material en un grado a presión constante. Las unidades típicas son J/(kg·K) (Green & Southard, 2019).

Los valores de propiedades físicas, lo suficientemente precisos para muchas aplicaciones de ingeniería, pueden estimarse en ausencia de datos experimentales confiables. Uno de los propósitos de este trabajo es proporcionar una estimación de la capacidad calorífica de las mezclas con base a las capacidades caloríficas de una sustancia ya conocida y realizando luego un balance de energía.

3.7. PROPIEDADES CRÍTICAS

3.7.1 TEMPERATURA CRÍTICA

La temperatura crítica es la temperatura límite por encima de la cual un gas miscible no puede ser licuado por compresión. Por encima de esta temperatura no es posible condensar un gas aumentando la presión. A esta temperatura crítica, si además se tiene una presión crítica (la presión de vapor del líquido a esta temperatura), se está en el punto crítico de la sustancia. La temperatura crítica es característica de cada sustancia. Las sustancias a temperaturas superiores a la crítica tienen un estado de agregación tipo gas, que tiene un comportamiento muy parecido al de un gas ideal.

3.7.2. PRESIÓN CRÍTICA

La presión crítica es una característica de cualquier sustancia, que define el campo en el que esta puede transformarse en vapor en presencia del líquido correspondiente.

3.7.3. VOLUMEN CRÍTICO

Volumen que tiene una sustancia cuando está en su estado crítico. Es el volumen máximo que puede tener una sustancia pura en forma de gas en equilibrio con su líquido a su temperatura y presión críticas.

4. METODOLOGÍA

4.1. ECUACIONES Y CORRELACIONES

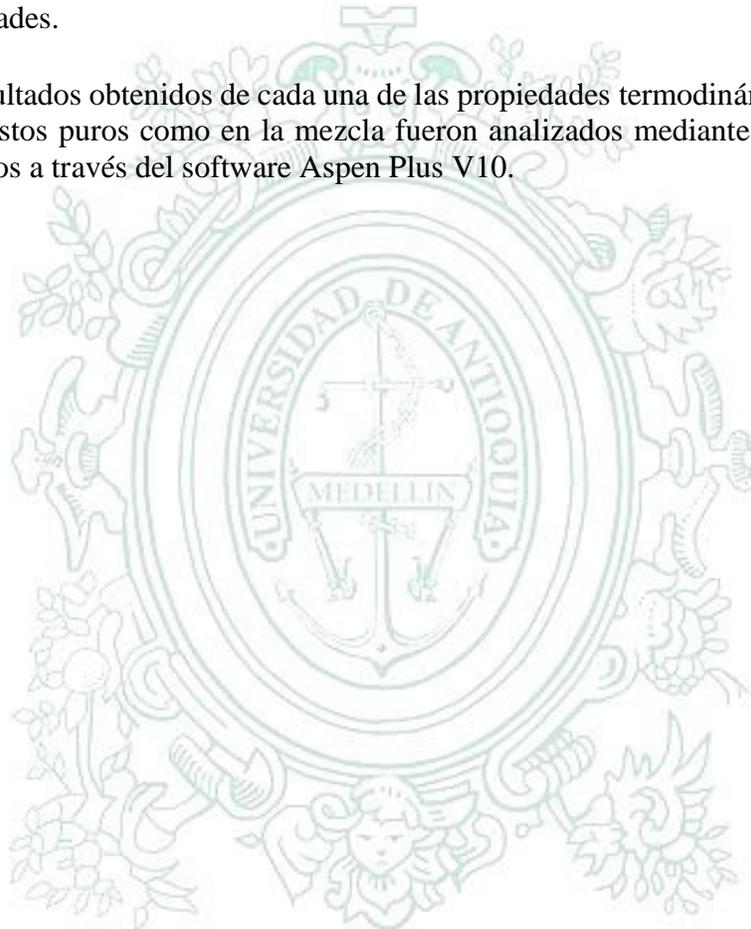
- Se realizó la identificación de cada una de las propiedades necesarias de las sustancias que se tienen en cada etapa del proceso de síntesis de cetonas alílicas.
- Se realizó una revisión bibliográfica de las propiedades de cada una de las sustancias puras involucradas en la producción de carvona y verbenona, para así identificar cuáles de estas se encontraban en la literatura, de forma tal de identificar las propiedades faltantes para el proceso de síntesis de la carvona y verbenona; donde se encontró que para todos los componentes puros involucrados en la producción de carvona y verbenona se habían determinado mediante correlaciones: la densidad, el peso molecular, el punto de ebullición normal, la temperatura crítica, la presión crítica y el volumen crítico. (Castañeda, 2019).
- Luego de la revisión bibliográfica de las propiedades de las sustancias puras se identificó que eran escasos los datos de viscosidad, tensión superficial y capacidad calorífica de cada una de las sustancias puras involucradas en la producción de carvona y verbenona. Por lo cual, se estableció que estas propiedades se estimarían para todas las sustancias involucradas en la producción de carvona y verbenona mediante las correlaciones más adecuadas para este tipo de cetonas alílicas.
- Se realizó una revisión bibliográfica de las propiedades de mezcla de cada una de las sustancias involucradas en la producción de carvona y verbenona, para así identificar cuáles de estas se encontraban en la literatura, de forma tal de identificar las propiedades faltantes para el proceso de síntesis de la carvona y verbenona; donde no se encontraron propiedades de mezcla de las sustancias involucradas en el proceso de síntesis de la carvona y verbenona.
- Luego de la revisión bibliográfica de las propiedades de mezcla de cada una de las sustancias involucradas en la síntesis de carvona y verbenona, se estableció que se determinarían mediante correlaciones: la densidad, viscosidad, tensión superficial, capacidad calorífica, temperatura crítica, presión crítica y volumen crítico.

4.2. SIMULACIÓN MEDIANTE ASPEN PLUS V10

- Se identificaron los compuestos se encuentran en la base de datos de la herramienta de software Aspen Plus v10 que se presentan en el proceso de producción de cetonas alílicas.
- Se realizó la búsqueda en la bibliografía las estructuras de las sustancias que no se encontraban en las bases del software de Aspen Plus V10 para ingresarlas como "Definidas por el usuario" con alguna otra propiedad como el peso molecular, y

utilizando el “NIST” (National Institute of Standards and Technology), que tiene incorporado este software que evaluó por medio de sus bases de datos las propiedades químicas y/o físicas por medio de métodos de contribución de grupos. Algunas propiedades fueron las siguientes: Propiedades críticas (Temperatura crítica, presión crítica, volumen crítico).

- Se realizó la búsqueda en la bibliografía del método termodinámico más adecuado que se utilizó en el software de Aspen Plus V10 para la estimación de las demás propiedades.
- Los resultados obtenidos de cada una de las propiedades termodinámicas tanto de los compuestos puros como en la mezcla fueron analizados mediante gráficos y tablas obtenidos a través del software Aspen Plus V10.



UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA
1803

5. PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS ENCONTRADAS EN LA LITERATURA

5.1. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE CARVONA

Tabla 1. Propiedades de las sustancias puras involucradas en la oxidación alílica de limoneno (Castañeda, 2019).

Propiedad	Unidades	Compuesto					
		Limoneno	Carvona	Carveol	Epóxido de Limoneno	TBHP	Acetona
Peso molecular	g/mol	136,237	150,221	152,237	152,23	90,22	58,08
T _{ebullición}	°C	177,45	230,5	231,46	113-114	115	56,29
Presión de vapor	mmHg @ 25°C	1,98	0,115	P.D.	P.D.	-	231
T _{fusión}	°C	-74,3	P.D.	P.D.	P.D.	-	-94,8
Estado de agregación a condiciones atmosféricas	--	liquido	liquido	liquido	liquido	liquido	liquido
T _{crítica}	°C	379,85	469,47	335,52	412,11	278,85	235,05
P _{crítica}	bar	28,2	28,596	29,345	29,441	43,4	47,01
V _{crítico}	m ³ /mol	0,484 ^c	0,489 ^c	0,503 ^c	0,496	0,284 ^c	0,21 ^c
Solubilidad		7,57	367	519,7	P.D.	-	-
Densidad	g/cc	0,8411	0,965	0,947-0,953	0,929	-	0,7845
Viscosidad	cP	0,923	2,44	P.D.	P.D.	-	0,32
Tensión superficial	dyn/cm	26	35,14	37,55	32,21	22,3	23,7

Tabla 2. Propiedades los subproductos identificados en la oxidación alílica de limoneno (Castañeda, 2019).

Propiedad	Método	Compuesto					
		8,9-óxido de limoneno	1,2-glicol de limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona	Dióxido de limoneno
Peso molecular	Definición (Anexo 1)	152.24	170.25	150.22	150.22	168.24	168.24
Tebullición	Joback (Anexo 1)	471.4	516.9	482.2	482.3	522	512
Pvapor (Pas) 25°C	Ambrose-alton/Constantinou-Gani (Anexo 1)	71.599	0.51126	36.356	23.079	0.26139	6.726
Tc (K)	Joback (Anexo 1)	690	703	694	685	701	732.538094
Pc (Bar)	Joback (Anexo 1)	31.3499	32.17328	28.5967	29.8279	30.6594	0.4724
Vc (m ³ /mol)	Joback (Anexo 1)	0.4883	0.5376	0.4915	0.4997	0.5116	0.4955
Conductividad térmica (W/m.K) 25°C	Sastri-1998 (Anexo 1)	0.12273	0.13341	0.13857	0.13967	0.15194	0.12701
Entalpia de vaporización (j/mol.K) 25°C	Definición (Anexo 1)	53438.4467	81985.3555	56620.5339	60416.3837	85858.9419	62832.9466
Densidad (Kg/m ³) 25°C	Rackett (Anexo 1)	991.67	1067.8	992.87	974.25	1138	1169.3

5.2. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE VERBENONA

Tabla 3. Propiedades de las sustancias puras involucradas en la oxidación alílica de α -pineno (Castañeda, 2019).

Propiedad	Unidades	Compuesto					
		α -pineno	Verbenona	Verbenol	Epóxido de α -pineno	TBHP	Acetona
Peso molecular	g/mol	136,237	150,221	152,237	152,23	90,22	58,08
T _{ebullición}	°C	156,14	227,5	220,98	102-103	115	56,29
Presión de vapor	mmHg @ 25°C	4,75	0,1159	P.D.	P.D.	-	231
T _{fusión}	°C	-62,5	6,5	62 - 68	P.D.	-	-94,8
Estado de agregación a condiciones atmosféricas	--	liquido	liquido	sólido	liquido	liquido	Liquido
T _{crítica}	°C	370,85	469,472	391,553	412,548	278,85	235,05
P _{crítica}	bar	27,6	30,024	30,829	30,933	43,4	47,01
V _{crítico}	m ³ /mol	0,49	0,496	0,51	0,502	0,284	0,21
Solubilidad		2,49	943,4	Insoluble	P.D.	-	-
Densidad	g/cc	0,858	0,9979	1,115	0,964	-	0,7845
Viscosidad	cP	1,293	1,98	P.D.	P.D.	-	0,32
Tensión superficial	dyn/cm	25,87	31,81	40,64	31,22	22,3	23,7

Tabla 4. Propiedades los subproductos identificados en la oxidación alílica de α -pineno (Castañeda, 2019).

Propiedad	Método	Compuesto			
		Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído canfolénico
MW	Definición (Anexo 1)	150.22	168.24	170.25	152.24
T _B (K)	Joback (Anexo 1)	508.5	513.4	516.7	468.5
P _{vapor} (Pas)-25°C	Ambrose-alton/ Constantinou-Gani (Anexo 1)	32.988	2.0865	1.0717	-
T _c (K)	Joback (Anexo 1)	696	720	717	666
P _c (Bar)	Joback (Anexo 1)	29.95869	39.9536	33.8808	27.965
V _c (m ³ /mol)	Joback (Anexo 1)	0.4571	0.4814	0.5097	0.5218
Conductividad térmica (W/m.K) 25°C	Sastri-1998 (Anexo 1)	0.12619	0.13386	0.12339	0.13239
Entalpia de vaporización (j/mol.K) 25°C	Definición (Anexo 1)	57094.334	71976.4503	77229.3821	56387.2444
Densidad (Kg/m ³) 25°C	Rackett (Anexo 1)	1072.7	1161.1	1116.3	940.35

6. RESULTADOS Y ANALISIS

6.1. ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS MEDIANTE ECUACIONES Y CORRELACIONES

6.1.1. DENSIDAD

Tal como se señala en el informe final de donde hemos basado este trabajo (Castañeda, 2019), ya que este informe realizó la estimación de la mayor parte de las propiedades de los compuestos presentes en las reacciones de síntesis de la carvona y la verbenona, enunciaremos la manera en cómo fue estimada la densidad de todos los productos y subproductos de los procesos de producción de carvona y verbenona.

Las reacciones de síntesis se llevan a cabo a 40°C, donde todos los compuestos se encuentran en fase líquida, con lo cual se buscó determinar la densidad de líquidos puros. Para la mayoría de líquidos si se tienen datos experimentales de densidad es posible ajustar dichos datos a la ecuación de Rackett, calculando los parámetros de regresión A, B y D, C usualmente se trabaja como la Tc. Entonces, al tener datos experimentales, se utiliza la siguiente ecuación:

$$\rho = \frac{A}{B \left[1 + \left(1 - \frac{T}{C} \right)^D \right]} \quad \text{Ecuación 1}$$

Pero debido a que en este proceso se carece de datos experimentales, existe una variación de la ecuación 1, la cual se puede utilizar para determinar la densidad de los compuestos puros partiendo de las propiedades críticas y de la temperatura reducida, tal como se muestra en la ecuación 2:

$$\frac{1}{\rho} = V = \left(\frac{RT_c}{P_c} \right) Z_c^q \quad \text{Ecuación 2}$$

Donde q viene dada por la siguiente ecuación:

$$q = 1,0 + (1,0 - T_r)^{2/7} \quad \text{Ecuación 3}$$

De lo anterior se obtuvo los valores de la densidad para los productos y subproductos para las reacciones de síntesis de carvona y verbenona (Castañeda, 2019):

- Proceso de producción de carvona:

Tabla 5. Densidades de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de limoneno (Castañeda, 2019).

Compuesto	Limoneno	Carveol	Carvona	Epóxido de Limoneno
Densidad (Kg/m ³)	841,1	965	953	929

Tabla 6. Densidades de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de limoneno (Castañeda, 2019).

Compuesto	8,9-óxido de limoneno	1,2-glicol de limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona	Dióxido de limoneno
Densidad (Kg/m ³)	991,67	1067,8	992,87	974,25	1138	1169,3

- Proceso de producción de verbenona:

Tabla 7. Densidades de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de α -pineno (Castañeda, 2019).

Compuesto	α -pineno	Verbenona	Verbenol	Epóxido de α -pineno
Densidad (Kg/m ³)	858	997,9	1115	1000,964

Tabla 8. Densidades de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de α -pineno (Castañeda, 2019).

Compuesto	Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído canfolénico
Densidad (Kg/m ³)	1072,7	1161,1	1116,3	940,35

6.1.2. VISCOSIDAD

Las reacciones para la producción de carvona y verbenona se realizan a 40°C, donde los compuestos involucrados se encuentran en fase líquida, pero son pocos los modelos que permitan predecir la viscosidad de un líquido puro a partir de otra información conocida, por lo que generalmente se necesitan datos experimentales, que se suelen correlacionar el logaritmo de la viscosidad con la inversa de la temperatura, ya que la viscosidad de un líquido disminuye al aumentar la temperatura. Dado que en este caso se posee poca información respecto a estos compuestos resulta complejo utilizar la mayoría de las ecuaciones o correlaciones, por ejemplo, el método de Van Velzen es un método de contribución de grupos bastante exacto para compuestos orgánicos, aunque no se debe emplear para temperaturas muy por encima del punto de ebullición ($T_r \approx 0.75$), pero en las tablas de contribución de grupos para el método de Van Velzen no se encuentra la información correspondiente para las cetonas alílicas, este se descarta, pero gracias a la información encontrada en la búsqueda bibliográfica en donde se tiene las propiedades críticas, la presión de vapor y la masa molecular de todos los compuestos presentes en la producción de carvona y verbenona se encontró que la ecuación más adecuada es la ecuación de Czerny, tanto porque se posee toda la información necesaria para calcular la viscosidad, al igual que es un método bastante exacto para este tipo de compuestos orgánicos en estado líquido. La ecuación de Czerny es:

$$\mu = 0,0172 * \frac{M^{0,5} * P_c^{0,87}}{T_c^{0,167} * P_v^{0,238}} \quad \text{Ecuación 4}$$

Donde:

μ = viscosidad del líquido (cP)

M = peso molecular

P_c = presión crítica (atm)

T_c = temperatura crítica (K)

P_v = presión de vapor del líquido (mmHg)

- Proceso de producción de carvona:

Tabla 9. Viscosidades de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de limoneno (Castañeda, 2019).

Compuesto	Limoneno	Carveol	Carvona	Epóxido de Limoneno
Viscosidad (cP)	0,74707266	12,584736	1,7727572	1,4683763

Tabla 10. Viscosidades de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de limoneno (Castañeda, 2019).

Compuesto	8,9-óxido de limoneno	1,2-glicol de limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona	Dióxido de limoneno
Viscosidad (cP)	1,227585828	211,6996	1,8922005	0,64373088	27,868101	1,679334

- Proceso de producción de verbenona:

Tabla 11. Viscosidades de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de α -pineno (Castañeda, 2019).

Compuesto	α -pineno	Verbenona	Verbenol	Epóxido de α -pineno
Viscosidad (cP)	0,7316691	12,322554	1,8691027	1,4381005

Tabla 12. Viscosidades de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de α -pineno (Castañeda, 2019).

Compuesto	Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído canfolénico
Viscosidad (cP)	1,293	1,98	2,0913795	0,67725853

6.1.3. TENSIÓN SUPERFICIAL

Debido a la falta de valores experimentales para los compuestos puros involucrados en la producción de carvona y verbenona, se encontró en la literatura que la tensión superficial de compuestos puros se puede estimar a partir de las propiedades críticas y el punto de ebullición de los compuestos mediante el método de estados correspondientes de Brock y Bird. Este método consiste en la siguiente ecuación:

$$\sigma = 1 \times 10^{-3} (0,132\alpha_c - 0,278) P_c^{2/3} T_c^{1/3} (1 - T_r)^{11/9} \quad \text{Ecuación 5}$$

Donde el parámetro α_c está dado por la siguiente ecuación:

$$\alpha_c = 0,9076 \left[1 + \frac{T_{br}}{1 - T_{br}} \ln \left(\frac{P_c}{1,013} \right) \right] \quad \text{Ecuación 6}$$

Donde:

σ = Tensión superficial (N/m)

P_c = presión crítica (bar)

T_c = temperatura crítica (K)

T_r = temperatura reducida ($T_r = T/T_c$)

T_{br} = temperatura de ebullición reducida ($T_{br} = T_b/T_c$)

- Proceso de producción de carvona:

Tabla 13. Tensión superficial de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de limoneno (Castañeda, 2019).

Compuesto	Limoneno	Carveol	Carvona	Epóxido de Limoneno
Tensión superficial (Dina/cm)	24,27383	34,8684	28,931136	19,150467

Tabla 14. Tensión superficial de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de limoneno (Castañeda, 2019).

Compuesto	8,9-óxido de limoneno	1,2-glicol de limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona	Dióxido de limoneno
Tensión superficial (Dina/cm)	25,000974	41,815592	27,443424	28,139475	36,773504	28,632654

- Proceso de producción de verbenona:

Tabla 15. Tensión superficial de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de α -pineno (Castañeda, 2019).

Compuesto	α -pineno	Verbenona	Verbenol	Epóxido de α -pineno
Tensión superficial (Dina/cm)	24,27383	33,0894	27,725672	18,738629

Tabla 16. Tensión superficial de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de α -pineno (Castañeda, 2019).

Compuesto	Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído canfolénico
Tensión superficial (Dina/cm)	25,258716	44,113152	31,44559	39,33475

6.1.4. CAPACIDAD CALORIFICA

Para determinar la capacidad calorífica de todos los compuestos puros que se encuentran involucrados en las reacciones de síntesis de carvona y verbenona se utilizó el método de Růzicka y Domalski, el cual es un método de contribución de grupo que es bastante exacto para compuestos orgánicos, el cual puede ser usado para desarrollar expresiones de capacidad calorífica, que pueden ser usadas para calcular la capacidad calorífica de líquidos puros desde el punto de fusión hasta el punto de ebullición. La ecuación que define el método de Růzicka y Domalski es la siguiente:

$$C_{pL} = R \left[A + B * \frac{T}{100} + D \left(\frac{T}{100} \right)^2 \right] \text{ Ecuación 7}$$

Donde R es la constante universal de los gases (8,314 J/mol.K) y T es la temperatura a la cual se requiere calcular la capacidad calorífica en unidades Kelvin. Los parámetros A, B y D son obtenidos mediante la ecuación 5, de la siguiente forma:

$$A = \sum_{i=1}^k n_i a_i \quad B = \sum_{i=1}^k n_i b_i \quad D = \sum_{i=1}^k n_i d_i \quad \text{Ecuación 8}$$

Donde n_i es el número de grupos de tipo i, k es el número total de los diferentes tipos de grupos presentes en el compuesto, y los parámetros a_i , b_i y d_i se encuentran enlistados en la tabla de anexos 1 de parámetros establecidos para el método de Růzicka y Domalski para 114 diferentes grupos y en la tabla de anexos 2 se encuentran 36 diferentes correcciones de deformación de anillos. Al igual que en la tabla de anexos 3 se encuentran 21 grupos más que pueden ser acomodados mediante el método de equivalencia de grupos. De esta forma fue posible determinar la capacidad calorífica de todos los productos y subproductos de las reacciones de síntesis de carvona y verbenona.

- Proceso de producción de carvona:

Tabla 17. Capacidad calorífica de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de limoneno (Castañeda, 2019).

Compuesto	Limoneno	Carveol	Carvona	Epóxido de Limoneno
Capacidad calorífica (J/mol.K)	253975,1	202530,72	214972,37	243524,12

Tabla 18. Capacidad calorífica de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de limoneno (Castañeda, 2019).

Compuesto	8,9-óxido de limoneno	1,2-glicol de limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona	Dióxido de limoneno
Capacidad calorífica (J/mol.K)	245511,56	160388,41	219557,24	226434,78	197203,2	239558,96

- Proceso de producción de verbenona:

Tabla 19. Capacidad calorífica de las sustancias puras de los productos en la oxidación alílica de α -pineno (Castañeda, 2019).

Compuesto	α -pineno	Verbenona	Verbenol	Epóxido de α -pineno
Capacidad calorífica (J/mol.K)	248738,5	202530,72	212756,16	246009,06

Tabla 20. Capacidad calorífica de las sustancias puras de los subproductos en la oxidación alílica de α -pineno (Castañeda, 2019).

Compuesto	Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído canfolénico
Capacidad calorífica (J/mol.K)	275574,2	229126,3	212836,1	219573,12

6.2. ESTIMACIÓN DE LAS PROPIEDADES DE MEZCLA

Tabla 21. Listado de sustancias presentes en las mezclas de reacción (Becerra, 2018).

Compuesto	Fracciones mol	
	Proceso producción de carvona	Proceso de producción de verbenona
a-pineno	--	0,001714795
verbenona	--	0,001440428
verbenol	--	0,000342959
Epóxido de a-pineno	--	8,23102E-05
Pinocarvona*	--	8,23102E-05
3-hidroxi-2-pinano*	--	8,23102E-05
Pinanediol*	--	8,23102E-05
Aldehído canfolénico*	--	8,23102E-05
limoneno	0,002226371	--
carvona	0,000633659	--
carveol	0,000291141	--
Epóxido de limoneno	0,000291141	--
8,9 oxido de limoneno*	0,000291141	--
1,2 glicol de limoneno*	0,000291141	--
Isopiperitona*	0,000291141	--
Perilaldehído*	0,000291141	--
Hidroxicarvona*	0,000291141	--
Dióxido de limoneno*	0,000291141	--
Acetona	0,924800055	0,925989437
Agua	0,047747084	0,047808492
Terbutanol	0,022263705	0,022292338

* Los valores de las fracciones de los compuestos fueron estimados.

6.2.1. DENSIDAD DE LA MEZCLA

La densidad para mezclas multicomponentes está definida por la siguiente ecuación:

$$\rho_{Mezcla} = \sum_{i=1}^n x_i \rho_i \quad \text{Ecuación 9}$$

Tabla 22. Densidades de las mezclas de carvona y verbenona.

Presión	Temperatura	Densidad producción de carvona	Densidad producción de verbenona
bar	C	kg/m ³	kg/m ³
0,84	40	814,42305	789,1128

6.2.2. VISCOSIDAD DE LA MEZCLA

La viscosidad para mezclas multicomponentes está definida por la siguiente ecuación:

$$\mu_{Mezcla} = \sum_{i=1}^n x_i \mu_i \quad \text{Ecuación 10}$$

Tabla 23. Viscosidades de las mezclas de carvona y verbenona.

Presión	Temperatura	Viscosidad de Mezcla en carvona	Viscosidad de mezcla en verbenona
bar	C	cP	cP
0,84	40	0,478199406	0,49598388

6.2.3. TENSIÓN SUPERFICIAL

La tensión superficial para mezclas multicomponentes está definida por la siguiente ecuación:

$$\sigma_{Mezcla} = \sum_{i=1}^n x_i \sigma_i \quad \text{Ecuación 11}$$

Tabla 24. Tensión superficial de las mezclas de carvona y verbenona.

Presión	Temperatura	Tensión S. producción de carvona	Tensión S. producción de verbenona
bar	C	dyne/cm	dyne/cm
0,84	40	28,9050476	27,8614404

6.2.4. CAPACIDAD CALORIFICA

$$Cp_{Mezcla} = \sum_{i=1}^n x_i Cp_i \quad \text{Ecuación 12}$$

Tabla 25. Capacidades caloríficas de las mezclas de carvona y verbenona.

Presión	Temperatura	Capacidad cal. producción de carvona	Capacidad cal. producción de carvona
bar	C	J/kmol-K	J/kmol-K
0,84	40	117969,1605	125788,2624

6.2.5. TEMPERATURA CRÍTICA

$$T_{C_{Mezcla}} = \sum_{i=1}^n x_i T_{C_i} \quad \text{Ecuación 13}$$

Tabla 26. Temperatura crítica de las mezclas de carvona y verbenona.

Presión	Temperatura	Temperatura crit. producción de carvona	Temperatura crit. producción de verbenona
bar	C	K	K
0,84	40	525,95076	529,338722

6.2.6. PRESIÓN CRÍTICA

$$P_{C_{Mezcla}} = \sum_{i=1}^n x_i P_{C_i} \quad \text{Ecuación 14}$$

Tabla 27. Temperatura crítica de las mezclas de carvona y verbenona.

Presión	Temperatura	Presión crit. producción de carvona	Presión crit. producción de verbenona
bar	C	bar	bar
0,84	40	53,942042	53,7423495

6.2.7. VOLUMEN CRÍTICO

$$V_{C_{Mezcla}} = \sum_{i=1}^n x_i V_{C_i} \quad \text{Ecuación 15}$$

Tabla 28. Temperatura crítica de las mezclas de carvona y verbenona.

Presión	Temperatura	Volumen crit. producción de carvona	Volumen crit. producción de verbenona
bar	C	cum/kmol	cum/kmol
0,84	40	0,204659	0,209797

6.3. MODELACIÓN DE PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS PURAS MEDIANTE ASPEN PLUS V10

6.3.1. SELECCIÓN DEL MODELO TERMODINÁMICO.

Para la selección del modelo termodinámico a emplear en aspen plus V10 para la estimación de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros y de la mezcla que se obtiene al final del proceso de obtención tanto de la carvona, como de la verbenona se encontró que la mejor opción era el modelo NRTL, debido a las siguientes consideraciones que presenta este modelo:

- Este modelo ofrece una buena aproximación, termodinámicamente consistente para predecir el comportamiento de mezclas multicomponentes a partir de la regresión de datos de equilibrio binario. La experiencia indica que puede usarse para extrapolar datos hacia otras zonas operativas con una buena confiabilidad. [9]
- Este modelo puede estimar el comportamiento de soluciones completamente miscibles y, a diferencia de otros modelos, también los sistemas que se separan en dos fases líquidas. Como sus parámetros g_{ij} - q_{ji} son parámetros dependientes de la temperatura hace que la misma sea flexible y aplicable a una variedad de casos. [9]
- El modelo NRTL es una extensión del modelo de Wilson y usa la mecánica estadística y la teoría de las celdas líquidas para representar la estructura líquida. Esto sumado al concepto de concentración local del modelo de Wilson lo hace muy útil para estimar equilibrios L-V, L-L y L-L-V. [9]
- Finalmente, y al contrario de otros modelos, NRTL puede emplearse en sistemas diluidos y en mezclas de hidrocarburos-alcoholes. [9]

6.3.2. CONSTRUCCIÓN DE LOS COMPUESTOS QUE NO ESTÁN PRESENTES EN LA BASE DE DATOS DE ASPEN PLUS V10

Las sustancias presentes en las bases de datos del software Aspen Plus V10 fueron las siguientes:

-Limoneno

-Alfa pineno.

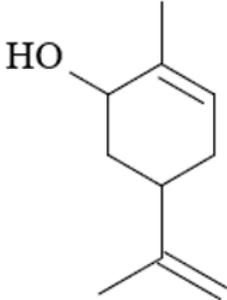
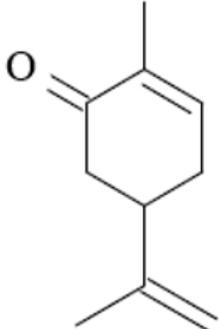
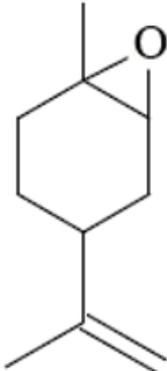
-Terbutanol.

-Acetona.

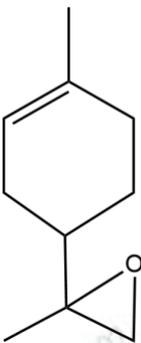
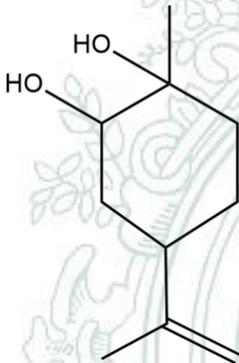
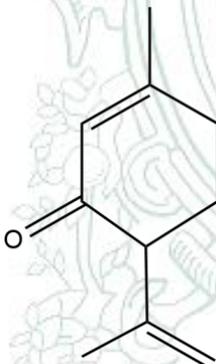
-Agua.

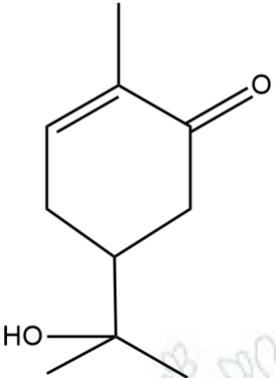
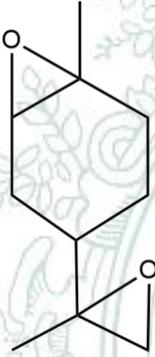
De las cuales estas no se necesitan hacer búsqueda de algunas de sus propiedades, puesto que ya están en sus bases de datos. Para las demás sustancias, se buscó en la bibliografía su estructura molecular, además de su peso molecular. Encontrando lo siguiente:

Tabla 29. Sustancias identificadas en la reacción de limoneno que no se encuentran en la bases de Aspen Plus V10.

Estructura	Nombre	Formula
	Carveol	$C_{10}H_{16}O$
	Carvona	$C_{10}H_{14}O$
	Epóxido de limoneno	$C_{10}H_{16}O$

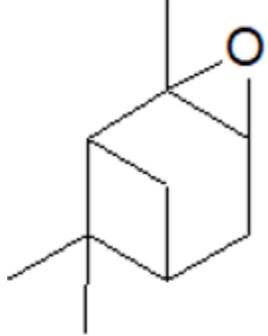
1803

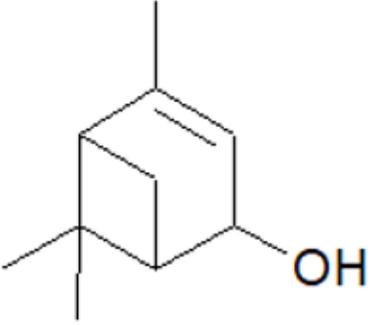
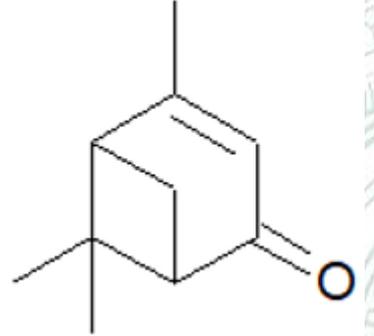
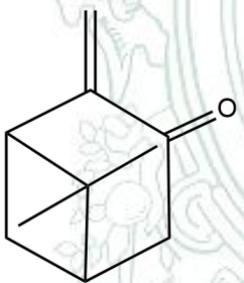
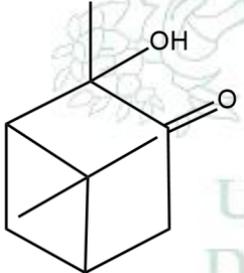
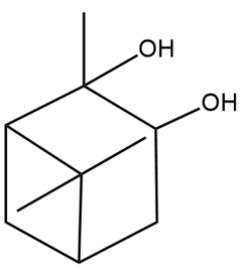
	8,9-óxido de limoneno	$C_{10}H_{16}O$
	1,2-glicol de limoneno	$C_{10}H_{18}O_2$
	Isopiperitona	$C_{10}H_{14}O$
	Perilaldehído	$C_{10}H_{14}O$

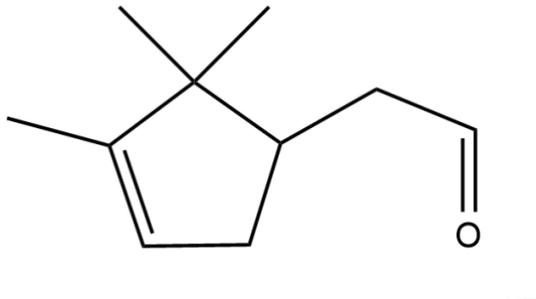
	Hidroxicarvona	$C_{10}H_{16}O_2$
	Dióxido de limoneno	$C_{10}H_{16}O_2$

Para el proceso de la producción de Verbenona, se trabajó de igual forma:

Tabla 30. Sustancias identificadas en la reacción de alfa-pineno que no se encuentran en la bases de Aspen Plus V10.

Estructura	Nombre	Formula
	Epóxido de alfa pineno	$C_{10}H_{16}O$

	Verberol	$C_{10}H_{16}O$
	Verbenona	$C_{10}H_{14}O$
	Pinocarvona	$C_{10}H_{14}O$
	2-Hidroxi-3-Pinanona	$C_{10}H_{16}O_2$
	Pinanediol	$C_{10}H_{18}O_2$

	Aldehído canfolénico	$C_{10}H_{16}O$
---	----------------------	-----------------

Con estas estructuras, se ingresa a Aspen Plus V10, en definido por el usuario, de la siguiente manera:

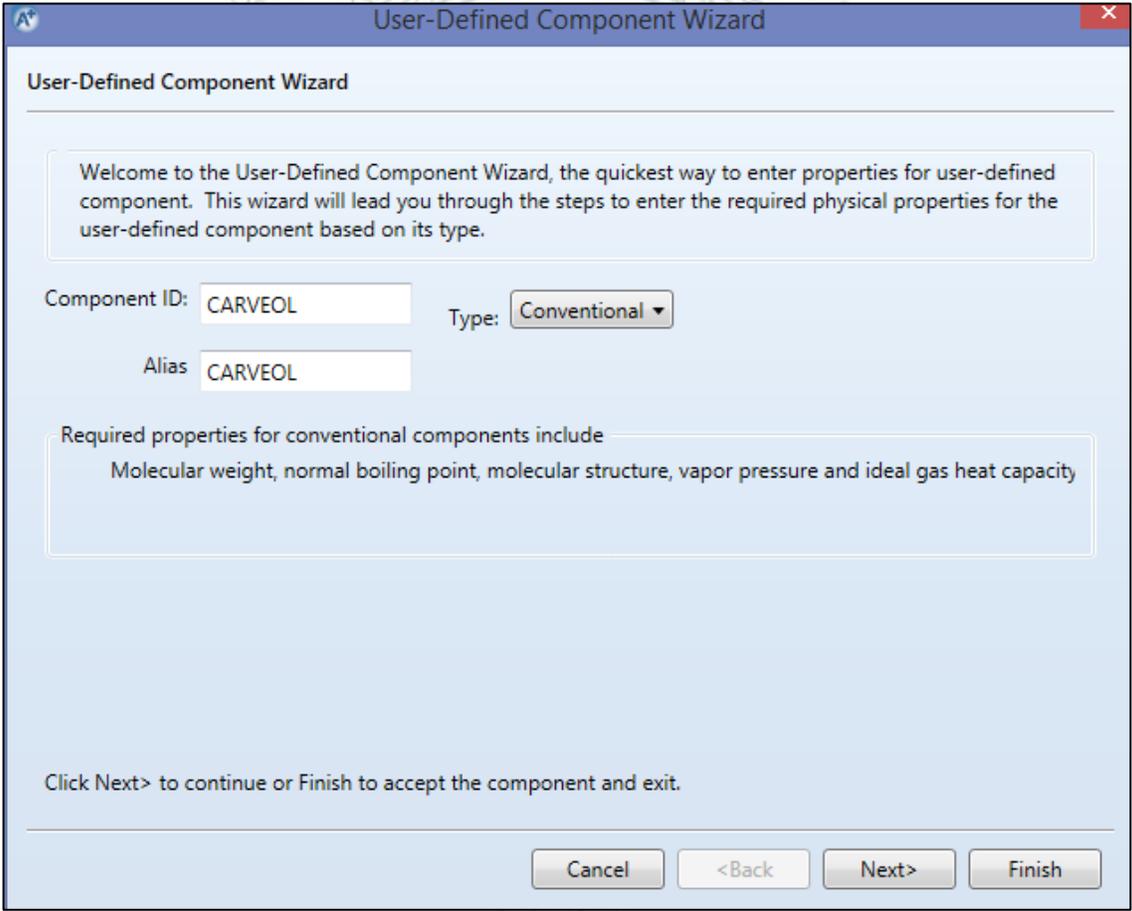


Figura 6. Ingreso de las estructuras no encontradas en las bases de datos de Aspen Plus V10.

Se le da en siguiente, para ingresar algunas propiedades que se puedan conocer de la sustancia, como se ve en la siguiente figura:

Figura 7. Ingreso de las propiedades conocidas de la bibliografía en Aspen Plus V10.

Las propiedades que se ingresaron a Aspen de los diferentes compuestos involucrados en la obtención de la carvona y verbenona se ven en las siguientes tablas:

Tabla 31. Propiedades encontradas en la literatura de los compuestos involucrados en la obtención de la carvona para ingresar a Aspen Plus.

Propiedades	Unidades	Limoneno	Carveol	Carvona	Epóxido de Limoneno
Peso Molecular	g/mol	136,237	152,237	150,221	152,23
Temperatura de ebullición	K	450,6	504,61	503,65	387,15

Propiedades	Unidades	8,9-óxido de limoneno	1,2-glicol de limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona	Dióxido de limoneno
Peso Molecular	g/mol	152.24	170.25	150.22	150.22	168.24	168.24
Temperatura de ebullición	K	471.4	516.9	482.2	482.3	522	512

Tabla 32. *Propiedades encontradas en la literatura de los compuestos involucrados en la obtención de la verbenona para ingresar a Aspen Plus.*

Propiedades	Unidades	Alfa-pineno	Verbenona	Verbenol	Epóxido de a-pineno
Peso Molecular	g/mol	136,237	150,221	152,237	152,23
Temperatura de ebullición	K	429,29	500,65	494,13	376,15

Propiedades	Unidades	Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído canfolénico
Peso Molecular	g/mol	150,22	168,24	170,25	152,24
Temperatura de ebullición	K	508,5	513,4	516,7	468,5

Se le da a siguiente después de ingresar los datos conocidos, para llegar a la opción de NIST TDE, para la estimación de los valores críticos de las sustancias:

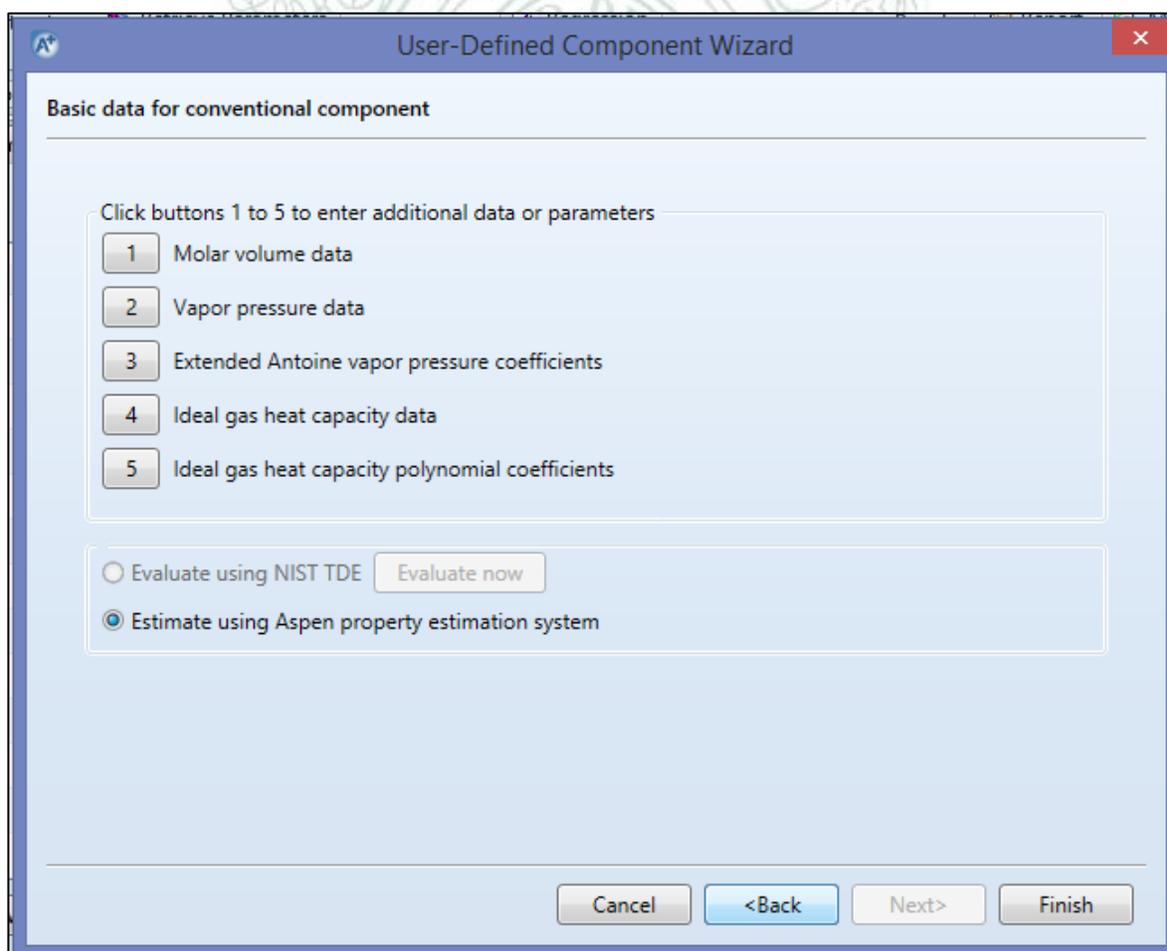


Figura 8. *Herramienta NIST del software Aspen Plus V10 para la estimación de las propiedades críticas de las sustancias presentes en la producción de carvona y verbenona.*

Para las demás propiedades termodinámicas de las sustancias puras, se determinaron por medio del análisis de sustancias puras en el software de Aspen plus V10, con las condiciones de presión y temperatura mencionados anteriormente, como se ve en la siguiente figura:

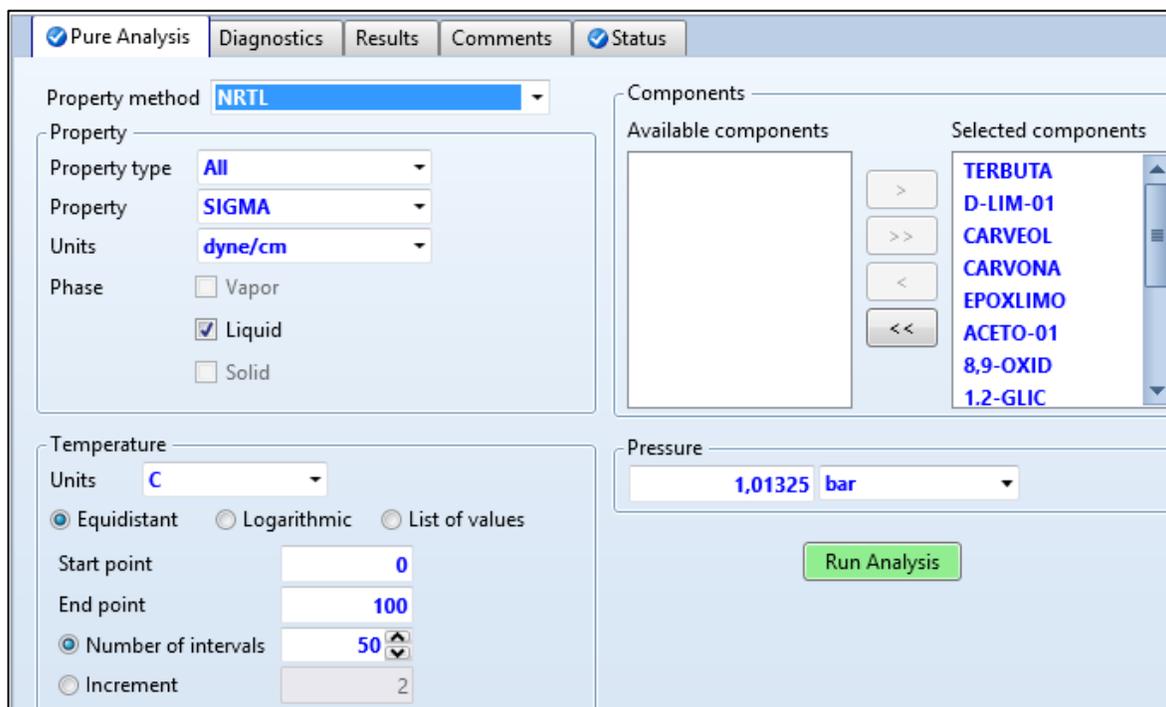


Figura 9. Ventana de la herramienta de análisis de sustancias puras del software de Aspen Plus V10 para la estimación de las propiedades termodinámicas presentes en la producción de carvona y verbenona.

Los resultados obtenidos se pueden ver a continuación.

6.3.3. PROPIEDADES TERMODINAMICAS

6.3.3.1. DENSIDAD

A continuación, en la tabla 33. se encuentran tabuladas las densidades de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona, los cuales fueron estimadas mediante el software Aspen Plus V10, variando la temperatura y dejando la presión constante, la cual es la presión de Medellín (0,84 bar).

Se puede observar que los compuestos similares obtuvieron densidades similares, tales son los casos de los terpenos (α -pineno, limoneno), terpenoides (carvona y verbenona), alcoholes (carveol y verbenol), los dioles (1,2-glicol de limoneno y pinanediol). Esto puede deberse a que los que tienen similares valores tienen la misma fórmula, pero con diferente estructura y que tienen casi los mismos grupos funcionales.

Tabla 33. *Estimación de la densidad de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.*

Temperatura	Presión	Limoneno	Carveol	Carvona	Terbutanol	Epóxido de limoneno
C	bar	kg/cum	kg/cum	kg/cum	kg/cum	kg/cum
0	0,84	857,956	1286,32	944,483	810,456	1139,55
2	0,84	856,521	1284,02	943,041	808,332	1137,05
4	0,84	855,082	1281,71	941,596	806,2	1134,53
6	0,84	853,641	1279,4	940,149	804,061	1132,01
8	0,84	852,196	1277,09	938,699	801,913	1129,48
10	0,84	850,748	1274,77	937,247	799,757	1126,94
12	0,84	849,297	1272,45	935,792	797,593	1124,39
14	0,84	847,844	1270,13	934,335	795,421	1121,84
16	0,84	846,387	1267,8	932,876	793,24	1119,28
18	0,84	844,926	1265,47	931,414	791,051	1116,72
20	0,84	843,463	1263,13	929,949	788,853	1114,14
22	0,84	841,997	1260,79	928,482	786,646	1111,56
24	0,84	840,527	1258,44	927,012	784,431	1108,97
26	0,84	839,054	1256,09	925,54	782,206	1106,38
28	0,84	837,577	1253,74	924,065	779,972	1103,77
30	0,84	836,098	1251,38	922,588	777,728	1101,16
32	0,84	834,615	1249,02	921,107	775,475	1098,54
34	0,84	833,128	1246,65	919,625	773,213	1095,91
36	0,84	831,638	1244,28	918,139	770,94	1093,27
38	0,84	830,145	1241,91	916,651	768,658	1090,63
40	0,84	828,648	1239,53	915,16	766,365	1087,97
42	0,84	827,148	1237,15	913,666	764,062	1085,31
44	0,84	825,644	1234,76	912,17	761,748	1082,64
46	0,84	824,136	1232,36	910,67	759,424	1079,96
48	0,84	822,625	1229,97	909,168	757,089	1077,27
50	0,84	821,11	1227,56	907,663	754,742	1074,57
52	0,84	819,591	1225,16	906,155	752,385	1071,87
54	0,84	818,069	1222,74	904,645	750,016	1069,15
56	0,84	816,543	1220,33	903,131	747,635	1066,42
58	0,84	815,013	1217,91	901,615	745,242	1063,69
60	0,84	813,479	1215,48	900,095	742,838	1060,94
62	0,84	811,942	1213,05	898,572	740,421	1058,19
64	0,84	810,4	1210,61	897,047	737,991	1055,42
66	0,84	808,855	1208,17	895,518	735,548	1052,65
68	0,84	807,305	1205,73	893,987	733,093	1049,86
70	0,84	805,752	1203,27	892,452	730,624	1047,07
72	0,84	804,194	1200,82	890,914	728,141	1044,26
74	0,84	802,632	1198,36	889,373	725,645	1041,45

76	0,84	801,066	1195,89	887,829	723,134	1038,62
78	0,84	799,496	1193,42	886,282	720,609	1035,78
80	0,84	797,921	1190,94	884,731	718,069	1032,93
82	0,84	796,342	1188,46	883,177	715,514	1030,07
84	0,84	794,759	1185,97	881,62	712,944	1027,2
86	0,84	793,171	1183,48	880,06	710,358	1024,31
88	0,84	791,579	1180,98	878,496	707,756	1021,41
90	0,84	789,982	1178,47	876,929	705,138	1018,51
92	0,84	788,381	1175,96	875,358	702,502	1015,59
94	0,84	786,775	1173,44	873,784	699,85	1012,65
96	0,84	785,165	1170,92	872,207	697,18	1009,71
98	0,84	783,55	1168,39	870,626	694,492	1006,75
100	0,84	781,93	1165,86	869,041	691,785	1003,78

Acetona	8,9-Oxido de limoneno	1,2-Glicol de Limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona
kg/cum	kg/cum	kg/cum	kg/cum	kg/cum	kg/cum
814,429	943,227	2285,2	977,299	1056,29	1580,53
812,246	941,601	2280,44	975,709	1054,54	1577,72
810,056	939,972	2275,68	974,116	1052,78	1574,91
807,858	938,34	2270,92	972,521	1051,03	1572,09
805,652	936,705	2266,14	970,922	1049,26	1569,26
803,439	935,067	2261,36	969,321	1047,5	1566,43
801,218	933,425	2256,57	967,717	1045,73	1563,6
798,989	931,78	2251,77	966,109	1043,96	1560,76
796,752	930,132	2246,97	964,499	1042,18	1557,92
794,506	928,481	2242,16	962,886	1040,4	1555,07
792,253	926,826	2237,34	961,27	1038,62	1552,22
789,99	925,168	2232,51	959,651	1036,84	1549,36
787,72	923,507	2227,68	958,028	1035,05	1546,5
785,44	921,842	2222,84	956,403	1033,26	1543,64
783,152	920,174	2217,99	954,774	1031,46	1540,77
780,855	918,502	2213,13	953,143	1029,66	1537,89
778,548	916,827	2208,26	951,508	1027,86	1535,01
776,233	915,148	2203,39	949,869	1026,06	1532,13
773,908	913,466	2198,5	948,228	1024,25	1529,24
771,573	911,78	2193,61	946,583	1022,43	1526,34
769,229	910,091	2188,72	944,936	1020,62	1523,44
766,874	908,398	2183,81	943,284	1018,8	1520,54
764,51	906,701	2178,89	941,63	1016,97	1517,63
762,136	905,001	2173,97	939,972	1015,14	1514,71

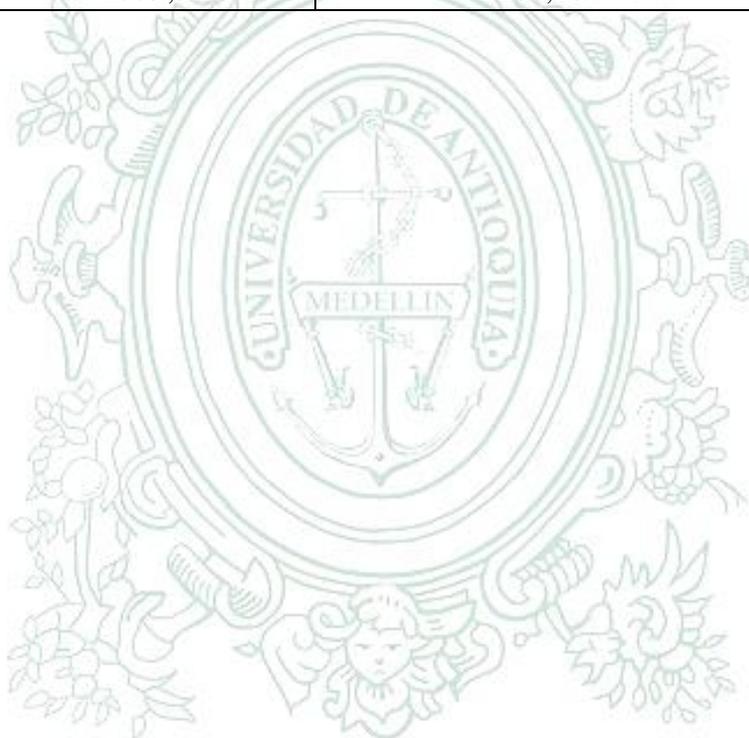
759,751	903,297	2169,03	938,31	1013,31	1511,79
757,355	901,589	2164,09	936,646	1011,48	1508,87
754,949	899,877	2159,14	934,977	1009,64	1505,94
752,531	898,161	2154,18	933,305	1007,8	1503
750,103	896,442	2149,21	931,63	1005,95	1500,06
747,663	894,718	2144,24	929,951	1004,1	1497,11
745,212	892,991	2139,25	928,269	1002,24	1494,16
742,748	891,259	2134,25	926,583	1000,39	1491,2
740,273	889,524	2129,25	924,893	998,523	1488,24
737,786	887,784	2124,23	923,2	996,656	1485,27
735,286	886,041	2119,21	921,502	994,785	1482,29
732,773	884,293	2114,18	919,801	992,91	1479,31
730,247	882,541	2109,13	918,097	991,031	1476,33
727,708	880,784	2104,08	916,388	989,147	1473,33
725,156	879,024	2099,02	914,676	987,26	1470,34
722,59	877,259	2093,94	912,959	985,368	1467,33
720,009	875,49	2088,86	911,239	983,471	1464,32
717,415	873,716	2083,76	909,515	981,571	1461,31
714,806	871,938	2078,66	907,787	979,665	1458,28
712,181	870,155	2073,55	906,054	977,756	1455,26
709,542	868,368	2068,42	904,318	975,841	1452,22
706,887	866,576	2063,29	902,577	973,923	1449,18
704,215	864,779	2058,14	900,833	971,999	1446,13
701,528	862,978	2052,98	899,084	970,071	1443,08
698,824	861,172	2047,81	897,33	968,139	1440,02
696,102	859,361	2042,63	895,573	966,201	1436,95
693,363	857,545	2037,44	893,811	964,259	1433,88

Dióxido de Limoneno	Agua	α -pineno	Epóxido de α -pineno	Verbenol	Verbenona
kg/cum	kg/cum	kg/cum	kg/cum	kg/cum	kg/cum
1079,36	1002,71	876,14	1114,74	1383,8	1000,11
1077,68	1002,15	874,632	1112,67	1381,25	998,575
1076	1001,57	873,122	1110,59	1378,69	997,034
1074,31	1000,98	871,609	1108,51	1376,12	995,49
1072,63	1000,38	870,092	1106,42	1373,56	993,944
1070,94	999,764	868,572	1104,32	1370,98	992,395
1069,25	999,133	867,049	1102,23	1368,41	990,844
1067,55	998,489	865,523	1100,12	1365,82	989,29
1065,85	997,831	863,993	1098,02	1363,24	987,733
1064,15	997,159	862,46	1095,91	1360,65	986,173
1062,45	996,473	860,923	1093,79	1358,05	984,611

1060,74	995,772	859,383	1091,67	1355,45	983,046
1059,03	995,057	857,84	1089,54	1352,85	981,479
1057,32	994,328	856,293	1087,41	1350,24	979,908
1055,6	993,585	854,743	1085,27	1347,62	978,335
1053,88	992,827	853,189	1083,13	1345	976,759
1052,16	992,054	851,632	1080,98	1342,38	975,18
1050,44	991,267	850,07	1078,83	1339,75	973,599
1048,71	990,465	848,506	1076,67	1337,11	972,014
1046,98	989,649	846,937	1074,51	1334,47	970,426
1045,24	988,818	845,365	1072,34	1331,83	968,836
1043,51	987,972	843,789	1070,17	1329,18	967,243
1041,77	987,111	842,21	1067,99	1326,52	965,646
1040,02	986,235	840,626	1065,81	1323,86	964,047
1038,28	985,345	839,039	1063,62	1321,2	962,445
1036,53	984,439	837,448	1061,42	1318,53	960,839
1034,77	983,518	835,852	1059,22	1315,85	959,231
1033,02	982,582	834,253	1057,01	1313,17	957,619
1031,26	981,63	832,65	1054,8	1310,48	956,004
1029,49	980,663	831,043	1052,58	1307,79	954,386
1027,73	979,681	829,431	1050,35	1305,09	952,765
1025,96	978,683	827,816	1048,12	1302,38	951,141
1024,18	977,67	826,196	1045,88	1299,67	949,514
1022,4	976,641	824,572	1043,64	1296,96	947,883
1020,62	975,596	822,944	1041,39	1294,24	946,249
1018,84	974,536	821,311	1039,13	1291,51	944,612
1017,05	973,46	819,674	1036,87	1288,78	942,971
1015,26	972,367	818,033	1034,6	1286,04	941,327
1013,47	971,259	816,387	1032,33	1283,29	939,679
1011,67	970,134	814,736	1030,04	1280,54	938,028
1009,87	968,994	813,081	1027,75	1277,78	936,374
1008,06	967,837	811,422	1025,46	1275,02	934,716
1006,25	966,664	809,757	1023,15	1272,25	933,055
1004,44	965,474	808,088	1020,85	1269,47	931,39
1002,62	964,268	806,414	1018,53	1266,69	929,721
1000,8	963,045	804,736	1016,2	1263,9	928,049
998,972	961,805	803,052	1013,87	1261,1	926,373
997,143	960,549	801,364	1011,53	1258,3	924,694
995,309	959,276	799,67	1009,19	1255,49	923,011
993,472	957,986	797,971	1006,84	1252,67	921,324
991,631	956,678	796,268	1004,47	1249,85	919,633

Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído Canfolénico
kg/cum	kg/cum	kg/cum	kg/cum
980,851	1699,02	2446,3	539,829
979,38	1695,96	2441,2	539,48
977,907	1692,9	2436,08	539,131
976,431	1689,83	2430,96	538,781
974,952	1686,76	2425,83	538,432
973,472	1683,68	2420,69	538,082
971,988	1680,59	2415,54	537,732
970,503	1677,51	2410,39	537,382
969,015	1674,41	2405,23	537,032
967,524	1671,31	2400,06	536,681
966,031	1668,21	2394,88	536,33
964,535	1665,1	2389,7	535,979
963,037	1661,99	2384,5	535,628
961,536	1658,87	2379,3	535,277
960,033	1655,74	2374,09	534,925
958,527	1652,61	2368,87	534,573
957,018	1649,48	2363,64	534,221
955,507	1646,34	2358,4	533,869
953,993	1643,19	2353,16	533,517
952,476	1640,04	2347,9	533,164
950,957	1636,88	2342,64	532,811
949,435	1633,72	2337,37	532,458
947,91	1630,55	2332,09	532,105
946,382	1627,38	2326,8	531,751
944,852	1624,2	2321,5	531,397
943,318	1621,01	2316,19	531,044
941,782	1617,82	2310,87	530,689
940,243	1614,62	2305,55	530,335
938,702	1611,42	2300,21	529,98
937,157	1608,21	2294,86	529,626
935,609	1604,99	2289,51	529,271
934,058	1601,77	2284,14	528,915
932,505	1598,54	2278,76	528,56
930,948	1595,3	2273,38	528,204
929,388	1592,06	2267,98	527,848
927,826	1588,82	2262,58	527,492
926,26	1585,56	2257,16	527,136
924,691	1582,3	2251,73	526,779
923,119	1579,03	2246,29	526,422

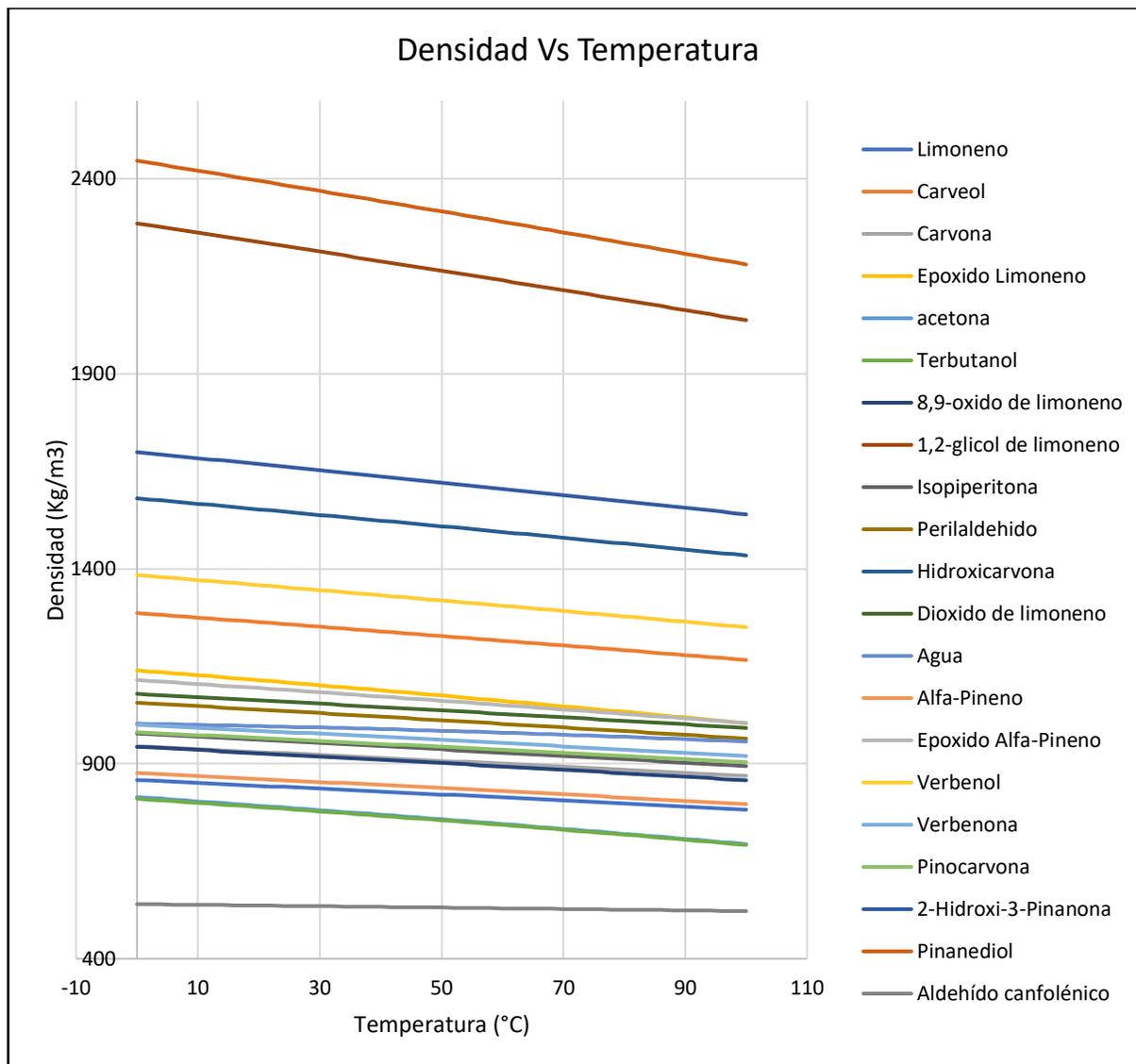
921,543	1575,76	2240,85	526,065
919,965	1572,48	2235,39	525,708
918,383	1569,19	2229,92	525,35
916,798	1565,9	2224,43	524,993
915,21	1562,6	2218,94	524,635
913,619	1559,29	2213,44	524,277
912,024	1555,98	2207,92	523,918
910,426	1552,66	2202,4	523,56
908,824	1549,33	2196,86	523,201
907,219	1545,99	2191,31	522,842
905,611	1542,65	2185,75	522,482
903,999	1539,3	2180,18	522,123



UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

1803

De una mejor forma, estos valores de la tabla 33, se pueden observar mediante la siguiente gráfica:



Gráfica 1. Representación de los valores estimados de la densidad de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

Donde el menor valor de la densidad es el del compuesto aldehído canfolénico, y el mayor valor son el pinanediol y 1,2-glicol de limoneno. La mayoría está casi en mismo rango entre los 800 Kg/m³ y los 1200 Kg/m³. Además, se puede observar un comportamiento casi lineal de la densidad para cada uno de los compuestos, aunque tiende a la disminución de esta conforme aumenta la temperatura. Estos comportamientos se mantienen con las demás propiedades (excepto para la viscosidad), como se puede ver más adelante.

6.3.3.2. VISCOSIDAD

Nuevamente como se procedió con la densidad, en la tabla 34, se presentan tabuladas la viscosidad en unidades de cP de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona, los cuales fueron estimadas mediante el software Aspen Plus V10, variando la temperatura y dejando la presión constante, la cual es la presión de Medellín (0,84 bar).

Tabla 34. *Estimación de la viscosidad de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.*

Temperatura	Presión	Limoneno	Carveol	Carvona	Terbutanol	Epóxido de limoneno
C	bar	cP	cP	cP	cP	cP
0	0,84	1,32982	52,5717	4,11217	23,6345	3,25177
2	0,84	1,2891	48,5767	3,93856	20,4911	3,11333
4	0,84	1,25019	44,9365	3,77462	17,8025	2,98265
6	0,84	1,21299	41,6155	3,61972	15,4978	2,85921
8	0,84	1,1774	38,5821	3,47324	13,5182	2,74253
10	0,84	1,14334	35,808	3,33463	11,8141	2,63215
12	0,84	1,11073	33,2682	3,20339	10,3445	2,52768
14	0,84	1,07948	30,9402	3,07903	9,0744	2,42872
16	0,84	1,04953	28,8041	2,96112	7,9747	2,33493
18	0,84	1,02081	26,8418	2,84926	7,02072	2,24598
20	0,84	0,993246	25,0372	2,74306	6,19162	2,16155
22	0,84	0,966791	23,376	2,64218	5,46973	2,08139
24	0,84	0,941385	21,8452	2,5463	4,84498	2,00521
26	0,84	0,916975	20,4332	2,4551	4,31161	1,93279
28	0,84	0,893511	19,1294	2,36832	3,85427	1,86389
30	0,84	0,870947	17,9244	2,2857	3,46023	1,79831
32	0,84	0,849239	16,8096	2,20698	3,11918	1,73585
34	0,84	0,828346	15,7773	2,13194	2,82267	1,67634
36	0,84	0,808229	14,8206	2,06038	2,56382	1,61959
38	0,84	0,788851	13,9331	1,9921	2,3369	1,56546
40	0,84	0,770178	13,1091	1,92691	2,13722	1,51379
42	0,84	0,752177	12,3433	1,86463	1,96083	1,46446
44	0,84	0,734817	11,6311	1,80512	1,80446	1,41732
46	0,84	0,718069	10,9682	1,74822	1,66536	1,37226
48	0,84	0,701906	10,3506	1,69379	1,5412	1,32917
50	0,84	0,686301	9,77482	1,64169	1,43002	1,28795
52	0,84	0,67123	9,23755	1,59181	1,33016	1,24848
54	0,84	0,656669	8,73585	1,54403	1,24019	1,21068
56	0,84	0,642596	8,26701	1,49824	1,1589	1,17447
58	0,84	0,62899	7,82854	1,45433	1,08525	1,13976
60	0,84	0,615832	7,41818	1,41221	1,01833	1,10647

62	0,84	0,603101	7,03385	1,3718	0,957379	1,07454
64	0,84	0,590782	6,67365	1,333	0,901715	1,04389
66	0,84	0,578856	6,33581	1,29574	0,850759	1,01446
68	0,84	0,567307	6,01875	1,25993	0,804	0,986188
70	0,84	0,55612	5,72097	1,22552	0,760994	0,959021
72	0,84	0,54528	5,44112	1,19243	0,721352	0,932906
74	0,84	0,534774	5,17796	1,1606	0,68473	0,90779
76	0,84	0,524587	4,93032	1,12996	0,650829	0,883626
78	0,84	0,514708	4,69715	1,10048	0,619381	0,860371
80	0,84	0,505125	4,47746	1,07208	0,590152	0,83798
82	0,84	0,495826	4,27035	1,04472	0,562932	0,816414
84	0,84	0,4868	4,07498	1,01836	0,537537	0,795636
86	0,84	0,478037	3,89057	0,992942	0,5138	0,775609
88	0,84	0,469526	3,71642	0,968431	0,491574	0,7563
90	0,84	0,461259	3,55185	0,944785	0,470729	0,737676
92	0,84	0,453226	3,39626	0,921967	0,451145	0,719708
94	0,84	0,445419	3,24907	0,899939	0,432716	0,702366
96	0,84	0,43783	3,10975	0,878667	0,415348	0,685622
98	0,84	0,43045	2,97781	0,85812	0,398955	0,669453
100	0,84	0,423272	2,85279	0,838266	0,383459	0,653831

Acetona	8,9-Oxido de limoneno	1,2-Glicol de Limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído
cP	cP	cP	cP	cP
0,398738	2,72897	1940,91	4,25064	1,01287
0,389716	2,61522	1712,96	4,07118	0,989372
0,381037	2,50775	1514,5	3,90173	0,96675
0,372682	2,40614	1341,4	3,74161	0,944957
0,364637	2,31001	1190,14	3,59019	0,923956
0,356886	2,21899	1057,72	3,44692	0,903708
0,349415	2,13277	941,593	3,31126	0,884179
0,342212	2,05102	839,574	3,18271	0,865335
0,335263	1,97348	749,797	3,06083	0,847145
0,328558	1,89987	670,661	2,9452	0,82958
0,322084	1,82996	600,791	2,83543	0,812611
0,315832	1,76352	539,003	2,73115	0,796212
0,309791	1,70033	484,277	2,63204	0,780358
0,303952	1,64021	435,73	2,53777	0,765026
0,298307	1,58297	392,601	2,44807	0,750193
0,292846	1,52845	354,227	2,36266	0,735837
0,287563	1,47648	320,035	2,28129	0,721939
0,282449	1,42692	289,526	2,20373	0,708479

0,277497	1,37964	262,266	2,12976	0,695439
0,272701	1,33449	237,874	2,05918	0,682803
0,268055	1,29138	216,02	1,99179	0,670553
0,263551	1,25018	196,414	1,92742	0,658674
0,259184	1,21079	178,801	1,86591	0,647152
0,254949	1,17311	162,96	1,80709	0,635972
0,250841	1,13705	148,694	1,75082	0,62512
0,246854	1,10252	135,831	1,69698	0,614585
0,242984	1,06945	124,219	1,64541	0,604354
0,239226	1,03776	113,724	1,59602	0,594415
0,235576	1,00737	104,227	1,54869	0,584757
0,232028	0,978225	95,6237	1,5033	0,57537
0,228575	0,950259	87,8215	1,45977	0,566243
0,225214	0,923411	80,7379	1,41799	0,557368
0,221941	0,897627	74,2998	1,37789	0,548735
0,218754	0,872855	68,442	1,33937	0,540335
0,215649	0,849045	63,1069	1,30236	0,532159
0,212623	0,82615	58,2427	1,26679	0,524201
0,209675	0,804128	53,8034	1,23258	0,516452
0,2068	0,782936	49,7479	1,19968	0,508904
0,203997	0,762537	46,0394	1,16801	0,501552
0,201264	0,742892	42,645	1,13753	0,494388
0,198597	0,723967	39,5351	1,10818	0,487405
0,195995	0,705729	36,6833	1,0799	0,480598
0,193456	0,688148	34,0657	1,05265	0,473961
0,190977	0,671192	31,6611	1,02638	0,467488
0,188557	0,654836	29,45	1,00104	0,461173
0,186194	0,639052	27,4152	0,976599	0,455012
0,183886	0,623815	25,541	0,953012	0,449
0,181631	0,609101	23,8133	0,930243	0,443131
0,179428	0,594889	22,2193	0,908255	0,437401
0,177275	0,581155	20,7475	0,887016	0,431806
0,175171	0,567882	19,3875	0,866493	0,426341

Hidroxicarvona	Dióxido de Limoneno	Agua	α -pineno	Epóxido de α -pineno
cP	cP	cP	cP	cP
143,274	4,22843	1,70208	2,50559	4,44965
131,068	4,0237	1,60975	2,39215	4,2011
120,056	3,83162	1,52413	2,28592	3,96972
110,108	3,65127	1,44462	2,18635	3,75413
101,109	3,4818	1,37072	2,09294	3,55308

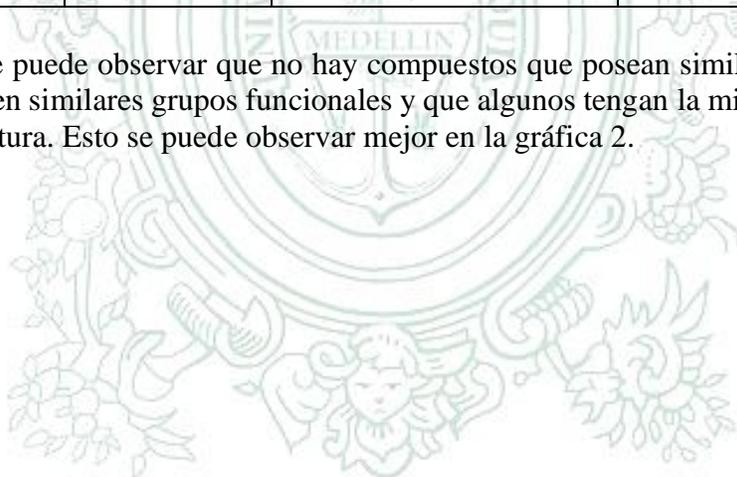
92,9568	3,32243	1,30194	2,00522	3,3654
85,5629	3,17243	1,23786	1,92277	3,19007
78,8481	3,03115	1,17811	1,8452	3,02613
72,7425	2,898	1,12232	1,77216	2,8727
67,184	2,7724	1,07018	1,70333	2,72901
62,1176	2,65385	1,02141	1,63842	2,59432
57,4943	2,54187	0,975735	1,57714	2,46797
53,2705	2,43603	0,932928	1,51926	2,34935
49,4075	2,33593	0,892769	1,46453	2,23791
45,8704	2,24119	0,85506	1,41276	2,13312
42,6283	2,15147	0,819619	1,36373	2,03454
39,6534	2,06644	0,786281	1,31728	1,94171
36,9209	1,98582	0,754894	1,27324	1,85424
34,4085	1,90933	0,725321	1,23145	1,77178
32,0961	1,83671	0,697432	1,19177	1,69396
29,9657	1,76772	0,671112	1,15407	1,6205
28,0011	1,70216	0,646253	1,11823	1,5511
26,1877	1,63981	0,622755	1,08413	1,48548
24,5123	1,58048	0,600528	1,05167	1,42342
22,963	1,524	0,579488	1,02076	1,36467
21,529	1,47019	0,559556	0,991292	1,30903
20,2006	1,41892	0,540662	0,963193	1,2563
18,9689	1,37003	0,522739	0,936381	1,2063
17,826	1,32338	0,505726	0,910785	1,15886
16,7644	1,27886	0,489565	0,886334	1,11383
15,7778	1,23634	0,474205	0,862966	1,07106
14,8599	1,19573	0,459597	0,840621	1,03041
14,0054	1,1569	0,445694	0,819243	0,99176
13,2093	1,11977	0,432456	0,79878	0,95499
12,4669	1,08425	0,419842	0,779184	0,91999
11,7743	1,05024	0,407817	0,760407	0,886659
11,1274	1,01768	0,396346	0,742409	0,854901
10,523	0,98649	0,385398	0,725149	0,824627
9,95775	0,956594	0,374944	0,708588	0,795754
9,4288	0,92793	0,364955	0,692692	0,768204
8,93347	0,900434	0,355405	0,677428	0,741903
8,46931	0,87405	0,346272	0,662763	0,716784
8,03406	0,848721	0,337532	0,648669	0,692783
7,62566	0,824397	0,329164	0,635118	0,669839
7,24221	0,801027	0,321149	0,622084	0,647897
6,88194	0,778566	0,313468	0,609543	0,626904

6,54326	0,756971	0,306103	0,59747	0,606809
6,22466	0,736201	0,299039	0,585845	0,587568
5,92478	0,716216	0,29226	0,574647	0,569135
5,64235	0,696981	0,285751	0,563855	0,55147
5,3762	0,67846	0,2795	0,553453	0,534533

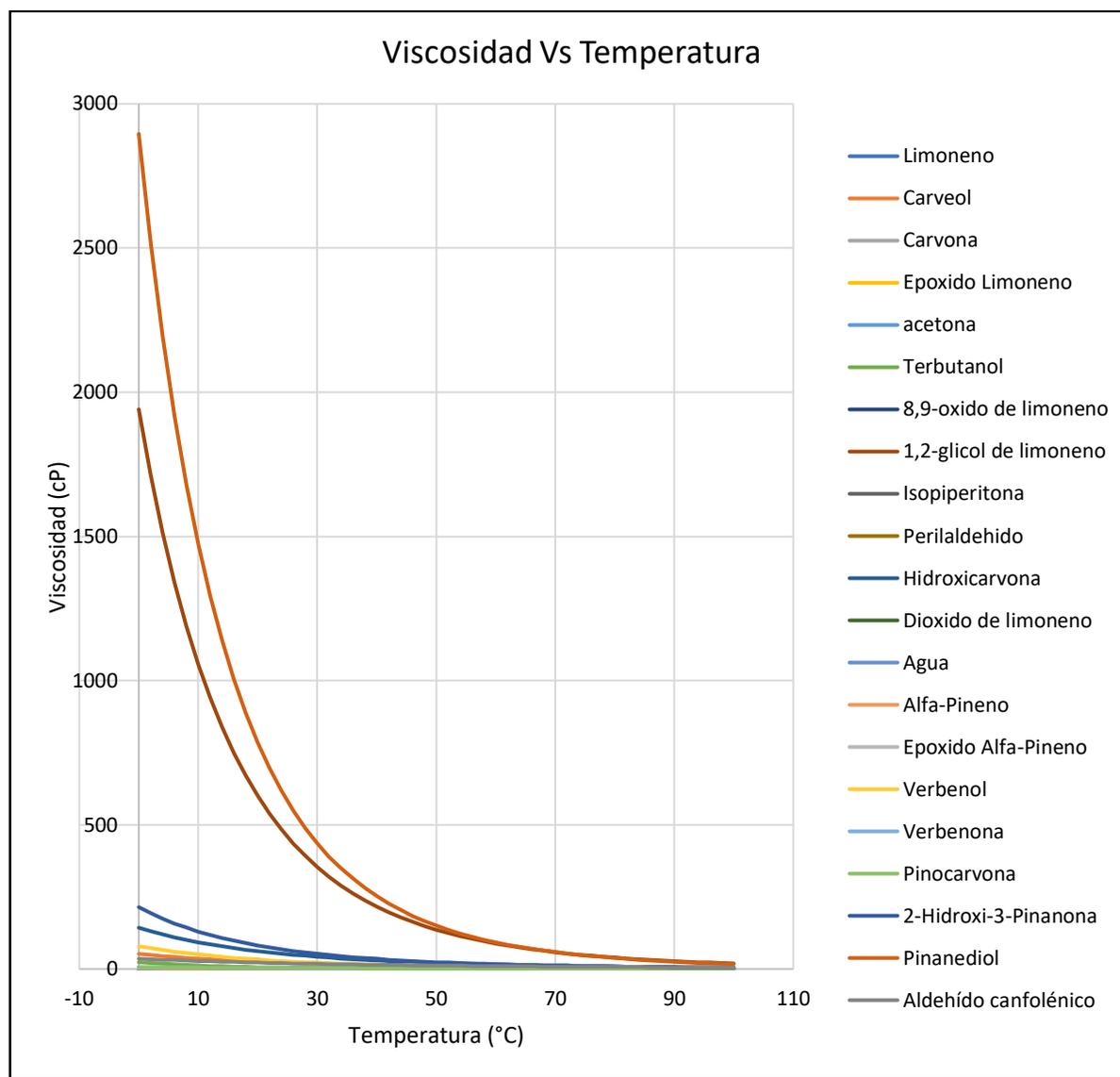
Verbenol cP	Verbenona cP	Pinocarvona cP	2-Hidroxi-3-Pinanona cP	Pinanediol cP	Aldehído Canfolénico cP
78,7798	6,06836	5,9538	214,614	2895,7	35,7916
71,7833	5,73152	5,62333	193,607	2520,15	34,0099
65,496	5,41785	5,31557	174,916	2197,7	32,3407
59,838	5,12547	5,02872	158,26	1920,28	30,7756
54,739	4,8527	4,76109	143,394	1681,1	29,307
50,1376	4,598	4,5112	130,105	1474,48	27,9276
45,9795	4,35996	4,27766	118,209	1295,64	26,6313
42,2172	4,13731	4,05921	107,544	1140,54	25,4119
38,8086	3,92887	3,85471	97,9696	1005,78	24,2641
35,7164	3,73359	3,66311	89,3619	888,473	23,1828
32,9079	3,55048	3,48346	81,6128	786,18	22,1635
30,3539	3,37866	3,31488	74,6274	696,818	21,2019
28,0286	3,2173	3,15656	68,3221	618,617	20,2942
25,909	3,06564	3,00777	62,6234	550,068	19,4367
23,9748	2,92302	2,86784	57,4665	489,878	18,6261
22,2076	2,78878	2,73613	52,7941	436,942	17,8594
20,5914	2,66234	2,61208	48,5555	390,311	17,1336
19,1116	2,54318	2,49517	44,7059	349,169	16,4462
17,7553	2,43078	2,3849	41,2055	312,814	15,7948
16,5108	2,32471	2,28082	38,0191	280,641	15,1771
15,3678	2,22453	2,18254	35,1151	252,126	14,5909
14,317	2,12986	2,08965	32,4656	226,817	14,0344
13,3499	2,04033	2,00182	30,0458	204,321	13,5058
12,4591	1,95563	1,91871	27,8334	184,297	13,0033
11,6378	1,87542	1,84002	25,8084	166,449	12,5254
10,8797	1,79944	1,76548	23,9531	150,519	12,0707
10,1795	1,72742	1,69481	22,2517	136,283	11,6378
9,53207	1,65911	1,62779	20,6897	123,543	11,2254
8,93297	1,59428	1,56419	19,2544	112,127	10,8324
8,37808	1,53272	1,50379	17,9342	101,886	10,4576
7,86372	1,47424	1,44641	16,7188	92,6862	10,1001
7,38652	1,41865	1,39187	15,5988	84,4126	9,75882
6,94343	1,36577	1,33999	14,5658	76,963	9,43295

6,53168	1,31546	1,29062	13,6123	70,2473	9,12161
6,14876	1,26755	1,24362	12,7312	64,1862	8,82402
5,79236	1,22192	1,19885	11,9165	58,7099	8,53944
5,4604	1,17843	1,15619	11,1625	53,7563	8,26717
5,15096	1,13697	1,11551	10,464	49,2707	8,00658
4,86231	1,09741	1,0767	9,81653	45,2045	7,75705
4,59285	1,05966	1,03966	9,21582	41,5145	7,518
4,34113	1,02361	1,00429	8,65806	38,1626	7,2889
4,10581	0,989175	0,970502	8,13977	35,1146	7,06925
3,88566	0,956264	0,938212	7,65781	32,3401	6,85857
3,67958	0,924796	0,907339	7,20928	29,8122	6,65641
3,48654	0,894696	0,877806	6,79156	27,5067	6,46235
3,30558	0,86589	0,849545	6,40225	25,402	6,27599
3,13584	0,838313	0,822488	6,03916	23,4788	6,09696
2,97653	0,8119	0,796573	5,70029	21,7198	5,92491
2,82691	0,786592	0,771743	5,3838	20,1096	5,7595
2,68631	0,762333	0,747942	5,08802	18,6342	5,60041
2,55409	0,73907	0,725118	4,81139	17,2811	5,44735

En este caso, se puede observar que no hay compuestos que posean similares viscosidades, aunque presenten similares grupos funcionales y que algunos tengan la misma fórmula, pero diferente estructura. Esto se puede observar mejor en la gráfica 2.



UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA
1803



Gráfica 2. Representación de los valores estimados de la viscosidad de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

También, se puede observar que tanto el 1,2-glicol de limoneno como también el pinanediol presentan las mayores viscosidades y con mucha diferencia del resto.

6.3.3.3. TENSION SUPERFICIAL

Nuevamente como se procedió con la densidad en la tabla 35, se presentan tabuladas la tensión superficial en unidades de dina/cm de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona, los cuales fueron estimadas mediante el software Aspen Plus V10, variando la temperatura y dejando la presión constante, la cual es la presión de Medellín (0,84 bar).

Tabla 35. *Estimación de la tensión superficial de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.*

Temperatura	Presión	Limoneno	Carveol	Carvona	Terbutanol	Epóxido de limoneno
C	bar	dyne/cm	dyne/cm	dyne/cm	dyne/cm	dyne/cm
0	0,84	29,3742	39,7388	33,3871	22,669	24,3429
2	0,84	29,1806	39,5309	33,2246	22,4575	24,1553
4	0,84	28,9872	39,3229	33,0621	22,246	23,9678
6	0,84	28,794	39,115	32,8995	22,0345	23,7802
8	0,84	28,6011	38,9071	32,737	21,823	23,5927
10	0,84	28,4085	38,6991	32,5745	21,6114	23,4051
12	0,84	28,2162	38,4912	32,412	21,3999	23,2176
14	0,84	28,0241	38,2832	32,2494	21,1884	23,03
16	0,84	27,8322	38,0753	32,0869	20,9769	22,8425
18	0,84	27,6407	37,8673	31,9244	20,7654	22,6549
20	0,84	27,4494	37,6594	31,7619	20,5538	22,4674
22	0,84	27,2584	37,4515	31,5994	20,3423	22,2798
24	0,84	27,0676	37,2435	31,4368	20,1308	22,0923
26	0,84	26,8771	37,0356	31,2743	19,9197	21,9047
28	0,84	26,6869	36,8276	31,1118	19,7112	21,7172
30	0,84	26,497	36,6197	30,9493	19,5059	21,5296
32	0,84	26,3073	36,4117	30,7867	19,3036	21,3421
34	0,84	26,1179	36,2038	30,6242	19,1045	21,1545
36	0,84	25,9288	35,9958	30,4617	18,9084	20,967
38	0,84	25,74	35,7879	30,2992	18,7154	20,7794
40	0,84	25,5514	35,58	30,1366	18,5255	20,5919
42	0,84	25,3632	35,372	29,9741	18,3387	20,4043
44	0,84	25,1752	35,1641	29,8116	18,155	20,2168
46	0,84	24,9875	34,9561	29,6491	17,9743	20,0292
48	0,84	24,8	34,7482	29,4866	17,7968	19,8417
50	0,84	24,6129	34,5402	29,324	17,6223	19,6541
52	0,84	24,4261	34,3323	29,1615	17,4509	19,4666
54	0,84	24,2395	34,1244	28,999	17,2826	19,279
56	0,84	24,0532	33,9164	28,8365	17,1174	19,0915
58	0,84	23,8672	33,7085	28,6739	16,9553	18,9039
60	0,84	23,6816	33,5005	28,5114	16,7963	18,7164
62	0,84	23,4962	33,2926	28,3489	16,6404	18,5288
64	0,84	23,3111	33,0846	28,1864	16,4875	18,3413
66	0,84	23,1263	32,8767	28,0238	16,3378	18,1537
68	0,84	22,9417	32,6688	27,8613	16,1911	17,9662
70	0,84	22,7575	32,4608	27,6988	16,0475	17,7786
72	0,84	22,5736	32,2529	27,5363	15,907	17,5911
74	0,84	22,39	32,0449	27,3738	15,7696	17,4035

76	0,84	22,2067	31,837	27,2112	15,6353	17,216
78	0,84	22,0237	31,629	27,0487	15,5041	17,0285
80	0,84	21,841	31,4211	26,8862	15,376	16,8409
82	0,84	21,6587	31,2131	26,7237	15,2509	16,6534
84	0,84	21,4766	31,0052	26,5611	15,129	16,4658
86	0,84	21,2948	30,7973	26,3986	15,0101	16,2783
88	0,84	21,1134	30,5893	26,2361	14,8943	16,0907
90	0,84	20,9322	30,3814	26,0736	14,7816	15,9032
92	0,84	20,7514	30,1734	25,911	14,672	15,7156
94	0,84	20,5709	29,9655	25,7485	14,5655	15,5281
96	0,84	20,3907	29,7575	25,586	14,462	15,3405
98	0,84	20,2109	29,5496	25,4235	14,3617	15,153
100	0,84	20,0313	29,3417	25,261	14,2644	14,9654

Acetona	8,9-Oxido de limoneno	1,2-Glicol de Limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona
dyne/cm	dyne/cm	dyne/cm	dyne/cm	dyne/cm	dyne/cm
26,1452	28,9963	51,4767	31,9331	33,8295	44,4305
25,8953	28,8352	51,2004	31,7658	33,6509	44,2075
25,6456	28,6741	50,9241	31,5985	33,4723	43,9845
25,3962	28,513	50,6478	31,4312	33,2937	43,7616
25,1471	28,3519	50,3716	31,2638	33,1151	43,5386
24,8983	28,1908	50,0953	31,0965	32,9365	43,3157
24,6497	28,0296	49,819	30,9292	32,7579	43,0927
24,4014	27,8685	49,5428	30,7619	32,5793	42,8697
24,1534	27,7074	49,2665	30,5946	32,4007	42,6468
23,9057	27,5463	48,9902	30,4273	32,2221	42,4238
23,6582	27,3852	48,7139	30,26	32,0435	42,2008
23,411	27,2241	48,4377	30,0927	31,8649	41,9779
23,1642	27,063	48,1614	29,9254	31,6863	41,7549
22,9176	26,9019	47,8851	29,7581	31,5077	41,532
22,6713	26,7408	47,6089	29,5908	31,3291	41,309
22,4253	26,5797	47,3326	29,4235	31,1505	41,086
22,1796	26,4186	47,0563	29,2561	30,9719	40,8631
21,9342	26,2575	46,78	29,0888	30,7933	40,6401
21,6891	26,0964	46,5038	28,9215	30,6147	40,4171
21,4443	25,9353	46,2275	28,7542	30,4361	40,1942
21,1998	25,7742	45,9512	28,5869	30,2575	39,9712
20,9556	25,613	45,675	28,4196	30,0789	39,7483
20,7118	25,4519	45,3987	28,2523	29,9003	39,5253
20,4682	25,2908	45,1224	28,085	29,7217	39,3023
20,225	25,1297	44,8461	27,9177	29,5431	39,0794

19,9821	24,9686	44,5699	27,7504	29,3646	38,8564
19,7395	24,8075	44,2936	27,5831	29,186	38,6334
19,4972	24,6464	44,0173	27,4158	29,0074	38,4105
19,2553	24,4853	43,741	27,2485	28,8288	38,1875
19,0137	24,3242	43,4648	27,0811	28,6502	37,9646
18,7725	24,1631	43,1885	26,9138	28,4716	37,7416
18,5316	24,002	42,9122	26,7465	28,293	37,5186
18,291	23,8409	42,636	26,5792	28,1144	37,2957
18,0508	23,6798	42,3597	26,4119	27,9358	37,0727
17,8109	23,5187	42,0834	26,2446	27,7572	36,8497
17,5714	23,3575	41,8071	26,0773	27,5786	36,6268
17,3323	23,1964	41,5309	25,91	27,4	36,4038
17,0935	23,0353	41,2546	25,7427	27,2214	36,1809
16,8551	22,8742	40,9783	25,5754	27,0428	35,9579
16,6171	22,7131	40,7021	25,4081	26,8642	35,7349
16,3794	22,552	40,4258	25,2408	26,6856	35,512
16,1421	22,3909	40,1495	25,0735	26,507	35,289
15,9052	22,2298	39,8732	24,9061	26,3284	35,066
15,6687	22,0687	39,597	24,7388	26,1498	34,8431
15,4326	21,9076	39,3207	24,5715	25,9712	34,6201
15,1968	21,7465	39,0444	24,4042	25,7926	34,3972
14,9615	21,5854	38,7681	24,2369	25,614	34,1742
14,7266	21,4243	38,4919	24,0696	25,4354	33,9512
14,4921	21,2632	38,2156	23,9023	25,2568	33,7283
14,258	21,1021	37,9393	23,735	25,0782	33,5053
14,0244	20,9409	37,6631	23,5677	24,8996	33,2823

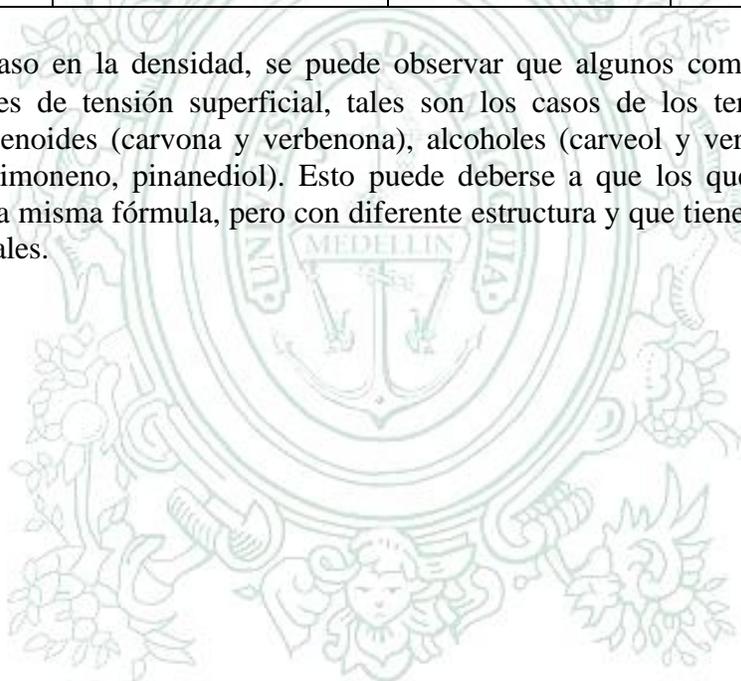
Dioxido de Limoneno dyne/cm	Agua dyne/cm	α -pineno dyne/cm	Epoxido de α -pineno dyne/cm	Verbenol dyne/cm
34,0946	77,6573	28,1495	29,0563	40,6158
33,9292	77,2516	27,9497	28,8741	40,396
33,7639	76,8474	27,7503	28,6919	40,1763
33,5985	76,4445	27,5513	28,5097	39,9566
33,4332	76,043	27,3525	28,3275	39,7369
33,2679	75,6428	27,1541	28,1453	39,5171
33,1025	75,2438	26,9561	27,9631	39,2974
32,9372	74,8459	26,7584	27,7809	39,0777
32,7718	74,4492	26,5611	27,5987	38,858
32,6065	74,0536	26,3641	27,4165	38,6382
32,4412	73,6591	26,1675	27,2343	38,4185
32,2758	73,2655	25,9712	27,0521	38,1988

32,1105	72,8729	25,7753	26,8699	37,9791
31,9451	72,4812	25,5797	26,6877	37,7594
31,7798	72,0904	25,3845	26,5054	37,5396
31,6145	71,7004	25,1897	26,3232	37,3199
31,4491	71,3111	24,9952	26,141	37,1002
31,2838	70,9226	24,8011	25,9588	36,8805
31,1184	70,5348	24,6073	25,7766	36,6607
30,9531	70,1476	24,414	25,5944	36,441
30,7878	69,7611	24,2209	25,4122	36,2213
30,6224	69,3751	24,0283	25,23	36,0016
30,4571	68,9896	23,836	25,0478	35,7818
30,2917	68,6046	23,6441	24,8656	35,5621
30,1264	68,22	23,4526	24,6834	35,3424
29,9611	67,8359	23,2614	24,5012	35,1227
29,7957	67,452	23,0707	24,319	34,9029
29,6304	67,0685	22,8803	24,1368	34,6832
29,465	66,6853	22,6903	23,9546	34,4635
29,2997	66,3023	22,5006	23,7724	34,2438
29,1344	65,9196	22,3114	23,5902	34,024
28,969	65,5369	22,1225	23,408	33,8043
28,8037	65,1544	21,934	23,2258	33,5846
28,6383	64,772	21,7459	23,0436	33,3649
28,473	64,3896	21,5582	22,8614	33,1451
28,3077	64,0073	21,3709	22,6792	32,9254
28,1423	63,6249	21,184	22,4969	32,7057
27,977	63,2424	20,9975	22,3147	32,486
27,8116	62,8598	20,8114	22,1325	32,2662
27,6463	62,4771	20,6257	21,9503	32,0465
27,481	62,0943	20,4404	21,7681	31,8268
27,3156	61,7112	20,2555	21,5859	31,6071
27,1503	61,3278	20,071	21,4037	31,3873
26,9849	60,9442	19,8869	21,2215	31,1676
26,8196	60,5603	19,7032	21,0393	30,9479
26,6543	60,176	19,5199	20,8571	30,7282
26,4889	59,7913	19,337	20,6749	30,5084
26,3236	59,4063	19,1546	20,4927	30,2887
26,1583	59,0208	18,9726	20,3105	30,069
25,9929	58,6348	18,7909	20,1283	29,8493
25,8276	58,2482	18,6098	19,9461	29,6295

Verbenona	Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído Canfolénico
dyne/cm	dyne/cm	dyne/cm	dyne/cm	dyne/cm
34,6555	35,0214	46,0432	53,9007	57,3315
34,4857	34,8544	45,8078	53,6119	57,2262
34,316	34,6875	45,5724	53,323	57,121
34,1462	34,5205	45,337	53,0342	57,0157
33,9764	34,3536	45,1016	52,7453	56,9104
33,8067	34,1866	44,8662	52,4565	56,8051
33,6369	34,0197	44,6308	52,1676	56,6999
33,4671	33,8528	44,3955	51,8788	56,5946
33,2974	33,6858	44,1601	51,5899	56,4893
33,1276	33,5189	43,9247	51,3011	56,3841
32,9578	33,3519	43,6893	51,0123	56,2788
32,7881	33,185	43,4539	50,7234	56,1735
32,6183	33,018	43,2185	50,4346	56,0682
32,4485	32,8511	42,9831	50,1457	55,963
32,2787	32,6842	42,7477	49,8569	55,8577
32,109	32,5172	42,5123	49,568	55,7524
31,9392	32,3503	42,2769	49,2792	55,6472
31,7694	32,1833	42,0415	48,9903	55,5419
31,5997	32,0164	41,8061	48,7015	55,4366
31,4299	31,8494	41,5707	48,4127	55,3314
31,2601	31,6825	41,3353	48,1238	55,2261
31,0904	31,5156	41,0999	47,835	55,1208
30,9206	31,3486	40,8646	47,5461	55,0155
30,7508	31,1817	40,6292	47,2573	54,9103
30,5811	31,0147	40,3938	46,9684	54,805
30,4113	30,8478	40,1584	46,6796	54,6997
30,2415	30,6808	39,923	46,3907	54,5945
30,0718	30,5139	39,6876	46,1019	54,4892
29,902	30,347	39,4522	45,813	54,3839
29,7322	30,18	39,2168	45,5242	54,2786
29,5625	30,0131	38,9814	45,2354	54,1734
29,3927	29,8461	38,746	44,9465	54,0681
29,2229	29,6792	38,5106	44,6577	53,9628
29,0532	29,5122	38,2752	44,3688	53,8576
28,8834	29,3453	38,0398	44,08	53,7523
28,7136	29,1784	37,8044	43,7911	53,647
28,5438	29,0114	37,569	43,5023	53,5417
28,3741	28,8445	37,3337	43,2134	53,4365

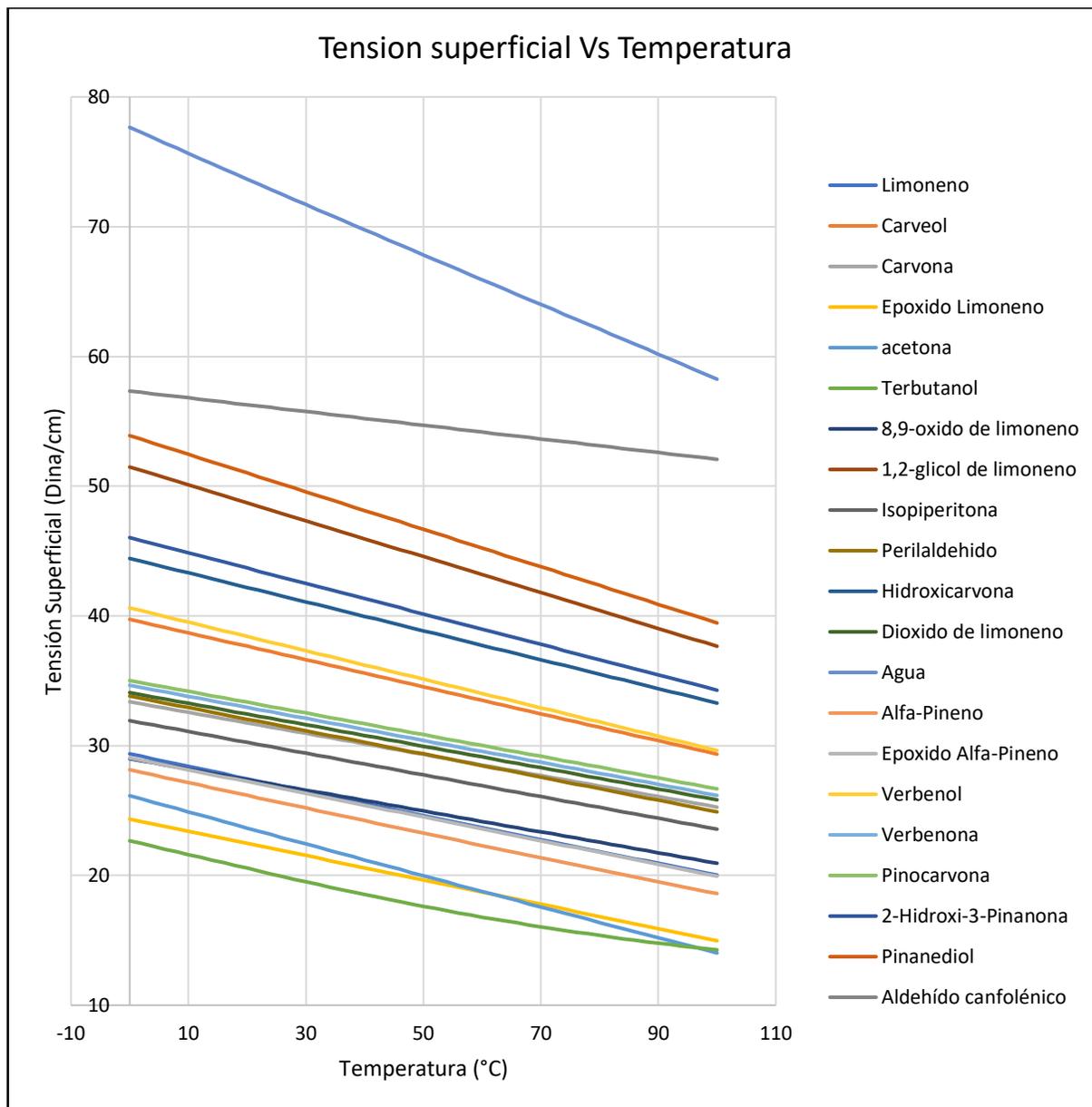
28,2043	28,6775	37,0983	42,9246	53,3312
28,0345	28,5106	36,8629	42,6358	53,2259
27,8648	28,3436	36,6275	42,3469	53,1207
27,695	28,1767	36,3921	42,0581	53,0154
27,5252	28,0098	36,1567	41,7692	52,9101
27,3555	27,8428	35,9213	41,4804	52,8048
27,1857	27,6759	35,6859	41,1915	52,6996
27,0159	27,5089	35,4505	40,9027	52,5943
26,8462	27,342	35,2151	40,6138	52,489
26,6764	27,175	34,9797	40,325	52,3838
26,5066	27,0081	34,7443	40,0362	52,2785
26,3369	26,8412	34,5089	39,7473	52,1732
26,1671	26,6742	34,2735	39,4585	52,068

Al igual que paso en la densidad, se puede observar que algunos compuestos presentan similares valores de tensión superficial, tales son los casos de los terpenos (α -pineno, limoneno), terpenoides (carvona y verbenona), alcoholes (carveol y verbenol), los dioles (1,2-glicol de limoneno, pinanediol). Esto puede deberse a que los que tienen similares valores tienen la misma fórmula, pero con diferente estructura y que tienen casi los mismos grupos funcionales.



UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA
1803

En la gráfica 3. Se puede observar mejor el comportamiento de la tensión superficial de cada uno de los compuestos con respecto a la temperatura:



Gráfica 3. Representación de los valores estimados de la tensión superficial de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

Donde el menor valor de la tensión superficial es el del compuesto terbutanol, y el mayor valor es la del agua. La mayoría está casi en mismo rango entre los 25 dina/cm y los 40 dina/cm. Además, se puede observar un comportamiento casi lineal de la tensión superficial para cada uno de los compuestos, aunque tiende a la disminución de esta conforme aumenta la temperatura, y a diferencia de la densidad, se puede observar un poco más esa disminución.

6.3.3.4. CAPACIDAD CALORÍFICA

Como se procedió con las demás, en la tabla 36, se presentan tabuladas la capacidad calorífica en unidades de J/Kmol.K de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona, los cuales fueron estimadas mediante el software Aspen Plus V10, variando la temperatura y dejando la presión constante, la cual es la presión de Medellín (0,84 bar).

Tabla 36. Estimación de la capacidad calorífica de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

Temperatura	Presión	Limoneno	Carveol	Carvona	Terbutanol	Epóxido de limoneno
C	bar	J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K
0	0,84	237093	168985	190368	213939	210760
2	0,84	238292	171040	192165	214420	212748
4	0,84	239499	173104	193970	214906	214745
6	0,84	240712	175179	195782	215397	216752
8	0,84	241932	177122	197428	215893	218730
10	0,84	243158	178962	198948	216393	220682
12	0,84	244389	180804	200467	216897	222634
14	0,84	245626	182647	201985	217406	224585
16	0,84	246869	184490	203503	217918	226537
18	0,84	248116	186334	205020	218435	228488
20	0,84	249368	188180	206537	218955	230440
22	0,84	250624	190026	208053	219479	232391
24	0,84	251884	191874	209569	220007	234343
26	0,84	253148	193722	211084	220736	236295
28	0,84	254415	195572	212600	223455	238247
30	0,84	255686	197423	214114	226140	240200
32	0,84	256959	199275	215629	228791	242153
34	0,84	258235	201128	217143	231409	244107
36	0,84	259513	202983	218656	233992	246061
38	0,84	260794	204839	220170	236541	248017
40	0,84	262077	206696	221683	239054	249972
42	0,84	263361	208555	223195	241532	251929
44	0,84	264646	210416	224708	243974	253887
46	0,84	265933	212278	226220	246380	255846
48	0,84	267221	214141	227732	248750	257806
50	0,84	268510	216006	229244	251083	259767
52	0,84	269799	217873	230756	253380	261729
54	0,84	271088	219742	232267	255640	263693
56	0,84	272378	221612	233779	257864	265659
58	0,84	273668	223484	235290	260050	267626
60	0,84	274958	225358	236801	262200	269595

62	0,84	276247	227234	238312	264312	271566
64	0,84	277536	229112	239823	266387	273538
66	0,84	278824	230992	241334	268426	275513
68	0,84	280111	232874	242845	270427	277490
70	0,84	281398	234758	244356	272392	279469
72	0,84	282683	236644	245867	274320	281451
74	0,84	283967	238533	247378	276211	283436
76	0,84	285250	240424	248889	278066	285423
78	0,84	286531	242317	250401	279884	287413
80	0,84	287811	244213	251912	281667	289406
82	0,84	289089	246111	253424	283414	291402
84	0,84	290366	248012	254935	285125	293402
86	0,84	291640	249915	256447	286801	295405
88	0,84	292913	251821	257959	288443	297412
90	0,84	294184	253730	259472	290050	299422
92	0,84	295452	255641	260985	291623	301437
94	0,84	296718	257556	262498	293162	303455
96	0,84	297982	259473	264011	294669	305478
98	0,84	299244	261393	265525	296143	307506
100	0,84	300504	263317	267039	297585	309538

Acetona	8,9-Oxido de limoneno	1,2-Glicol de Limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona
J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K
115027	213740	132909	192268	195613	166587
115475	215848	135232	194091	197525	168769
115934	217966	137570	195921	199446	170961
116405	220092	139925	197759	201374	173165
116887	222034	142133	199432	203125	175184
117381	223834	144230	200978	204739	177062
117888	225633	146331	202523	206353	178942
118406	227431	148436	204069	207964	180824
118936	229227	150546	205614	209575	182706
119478	231022	152661	207159	211184	184591
120032	232815	154780	208704	212793	186477
120598	234607	156905	210248	214400	188365
121177	236398	159034	211793	216006	190254
121768	238188	161169	213337	217610	192146
122371	239976	163309	214881	219214	194039
122986	241763	165454	216426	220817	195934
123615	243550	167604	217970	222418	197831
124255	245335	169760	219514	224019	199729

124909	247119	171922	221058	225619	201630
125576	248902	174090	222602	227218	203533
126256	250684	176263	224146	228816	205438
126948	252465	178442	225691	230413	207345
127655	254245	180628	227235	232009	209254
128375	256024	182819	228780	233604	211165
129108	257803	185017	230324	235199	213079
129856	259580	187222	231869	236793	214995
130618	261357	189432	233414	238386	216913
131393	263133	191650	234959	239979	218834
132184	264909	193874	236504	241571	220757
132989	266684	196106	238050	243162	222682
133809	268458	198344	239596	244753	224610
134645	270232	200589	241142	246343	226541
135496	272005	202842	242689	247933	228475
136363	273778	205102	244236	249522	230411
137246	275550	207369	245783	251112	232350
138145	277322	209644	247331	252700	234292
139061	279094	211927	248879	254289	236236
139994	280866	214218	250428	255877	238184
140945	282637	216517	251978	257465	240134
141913	284408	218824	253527	259052	242088
142900	286179	221139	255078	260640	244045
143905	287949	223463	256629	262227	246004
144929	289720	225795	258181	263815	247968
145973	291491	228136	259733	265402	249934
147037	293262	230486	261287	266989	251904
148121	295033	232844	262841	268577	253877
149227	296804	235212	264396	270165	255853
150354	298576	237589	265951	271752	257834
151503	300347	239976	267508	273340	259817
152675	302119	242372	269065	274929	261805
153871	303892	244778	270624	276517	263796

Dióxido de Limoneno	Agua	α -pineno	Epóxido de α -pineno	Verbenol
J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K
207654	72869,5	203112	186878	165044
209738	72956,5	204558	188912	167124
211831	73047,4	206015	190960	169216
213932	73141,7	207482	193020	171319
215954	73239,5	208959	195092	173430

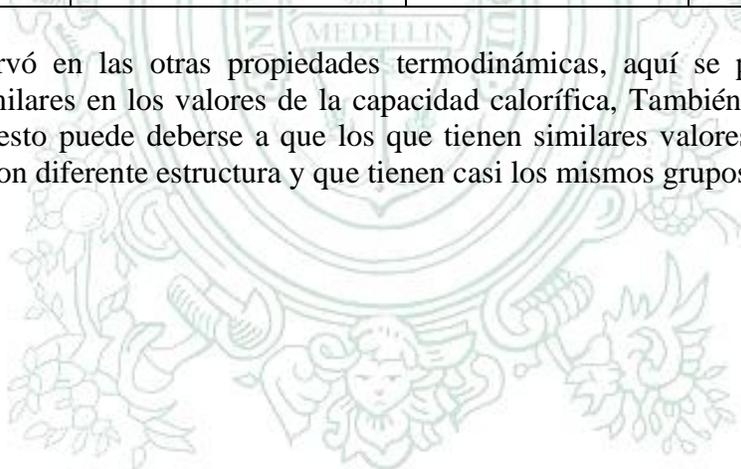
217910	73340,9	210445	197162	175540
219864	73445,9	211940	199229	177648
221817	73554,4	213445	201294	179754
223767	73666,6	214957	203357	181858
225715	73782,4	216478	205417	183960
227661	73901,9	218006	207475	186060
229605	74025	219542	209530	188158
231547	74152	221085	211583	190254
233487	74282,6	222634	213634	192348
235425	74417,1	224190	215683	194441
237362	74555,4	225751	217729	196532
239296	74697,5	227319	219773	198622
241228	74843,6	228892	221816	200710
243159	74993,5	230470	223856	202797
245088	75147,4	232053	225894	204882
247015	75305,3	233640	227930	206966
248940	75467,2	235232	229965	209049
250863	75633,1	236828	231997	211131
252785	75803,2	238427	234028	213211
254705	75977,3	240030	236057	215291
256624	76155,6	241636	238084	217369
258540	76338,1	243245	240109	219447
260456	76524,9	244857	242133	221524
262369	76715,9	246472	244156	223600
264281	76911,2	248089	246177	225676
266192	77110,8	249708	248196	227751
268101	77314,9	251329	250215	229826
270008	77523,4	252951	252231	231900
271914	77736,3	254575	254247	233974
273819	77953,8	256201	256261	236047
275722	78175,8	257828	258275	238121
277624	78402,4	259455	260287	240194
279525	78633,7	261084	262298	242267
281424	78869,7	262713	264308	244341
283322	79110,4	264343	266317	246414
285219	79356	265974	268326	248488
287115	79606,3	267605	270334	250562
289010	79861,6	269236	272341	252637
290903	80121,8	270867	274347	254712
292795	80387	272498	276353	256787
294687	80657,3	274129	278359	258864

296577	80932,7	275759	280364	260941
298466	81213,3	277390	282369	263019
300355	81499,1	279020	284374	265098
302242	81790,1	280650	286379	267178
304129	82086,6	282279	288383	269259

Verbenona	Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído Canfolénico
J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K	J/kmol-K
185943	186079	160105	114100	178559
187695	187824	162327	116351	180289
189453	189577	164562	118619	182024
191219	191336	166809	120903	183766
192990	193101	169067	123203	185324
194758	194862	171322	125506	186741
196521	196620	173574	127814	188155
198281	198374	175822	130124	189565
200038	200124	178067	132439	190972
201790	201870	180309	134757	192376
203539	203613	182547	137079	193777
205284	205352	184782	139405	195174
207026	207087	187014	141735	196568
208764	208818	189243	144069	197959
210498	210546	191469	146408	199346
212229	212270	193692	148751	200731
213957	213991	195913	151098	202112
215681	215708	198130	153450	203490
217402	217421	200345	155807	204864
219119	219132	202557	158168	206236
220833	220838	204767	160534	207604
222544	222542	206974	162906	208969
224251	224242	209179	165283	210331
225956	225938	211382	167664	211689
227657	227632	213582	170052	213045
229355	229322	215781	172445	214397
231050	231009	217977	174843	215747
232742	232693	220171	177247	217093
234431	234374	222364	179657	218436
236117	236051	224554	182073	219775
237800	237726	226743	184496	221112
239480	239398	228930	186924	222446
241157	241066	231116	189359	223776

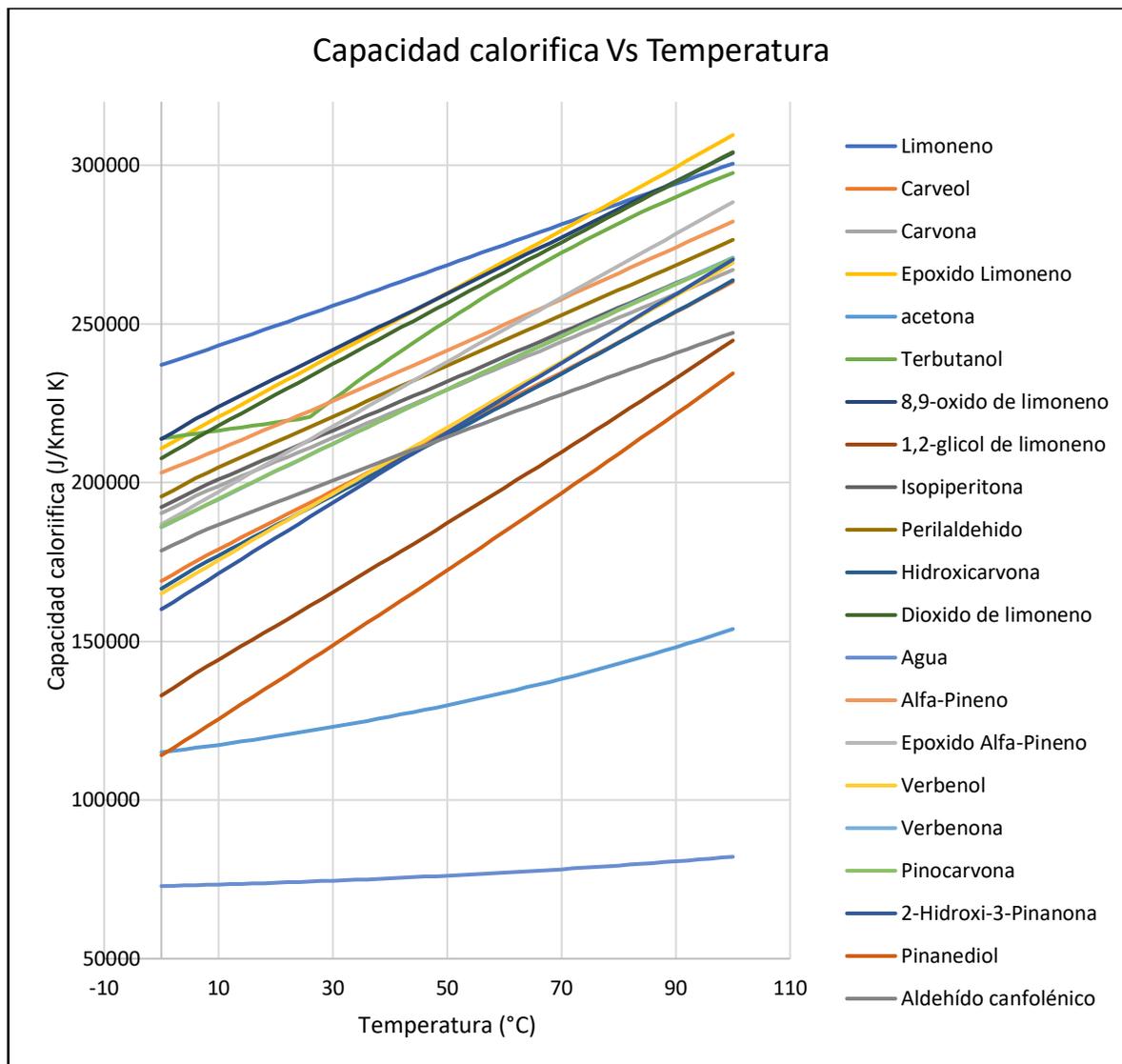
242832	242732	233300	191800	225103
244504	244395	235483	194248	226428
246173	246055	237665	196703	227749
247839	247712	239845	199165	229067
249503	249367	242024	201633	230382
251165	251019	244203	204109	231694
252823	252668	246380	206592	233003
254480	254314	248556	209083	234309
256134	255958	250732	211581	235611
257785	257599	252907	214087	236911
259434	259238	255082	216601	238208
261081	260875	257256	219123	239502
262726	262509	259429	221653	240792
264368	264140	261603	224191	242080
266009	265770	263776	226737	243365
267647	267397	265949	229293	244646
269283	269021	268122	231857	245925
270917	270644	270295	234429	247201

Como se observó en las otras propiedades termodinámicas, aquí se presentan algunos compuestos similares en los valores de la capacidad calorífica, También, como se analizó anteriormente, esto puede deberse a que los que tienen similares valores tienen la misma fórmula, pero con diferente estructura y que tienen casi los mismos grupos funcionales.



UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA
1803

En la gráfica 4. Se puede observar mejor el comportamiento de la capacidad calorífica de cada uno de los compuestos con respecto a la temperatura:



Gráfica 4. Representación de los valores estimados de la capacidad calorífica de los compuestos puros involucrados en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

Donde el menor valor de la capacidad calorífica es el del agua, y hay varios compuestos que tienen el mayor valor, tales como el epóxido de limoneno y el limoneno. La mayoría está casi en mismo rango entre los 150000 J/Kmol.K y los 250000 J/Kmol.K. Además, se puede observar un comportamiento casi lineal de la capacidad calorífica para cada uno de los compuestos, aunque, diferente a las otras propiedades, tiende al incremento de esta conforme aumenta la temperatura.

6.3.3.5. PROPIEDADES TERMODINÁMICAS CRÍTICAS

Muchas relaciones termodinámicas hacen uso de las propiedades críticas de cada sustancia, es por esto que el conocimiento de dichas propiedades es de vital importancia en la

modelación de un sistema, y que, además, en la literatura casi no se encuentra información sobre estas. [10] Es por esto que se realizó una estimación de las propiedades críticas para las sustancias involucradas en la producción de la carvona y verbenona a través del software Aspen Plus V10. Pero esta vez utilizando el NIST, ya que en el análisis de sustancias puras no se encuentra disponible esta opción. Estas propiedades se encuentran tabuladas en la tabla 37.

Tabla 37. Estimación de las propiedades termodinámicas críticas de las sustancias puras presentes en el proceso de obtención de la carvona y la verbenona a través del software Aspen Plus V10.

Propiedades	Unidades	Limoneno	Carveol	Carvona	Epóxido de Limoneno	Terbutanol	Acetona
$T_{critica}$	K	653	693	694	686	506,04	508,0655
$P_{critica}$	N/m ²	2827170,3	2934516,8	2859675,7	2944078,1	3977358,4	4704730,8
$V_{critico}$	m ³ /kmol	0,4698	0,5223	0,4913	0,5003	0,27489	0,21519

Propiedades	Unidades	8,9-óxido de limoneno	1,2-glicol de limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona	Dióxido de limoneno
$T_{critica}$	K	652	703	694	685	701	713
$P_{critica}$	N/m ²	2534751,5	2562892,3	2859675,7	2982794,3	3065946	2749784,2
$V_{critico}$	m ³ /kmol	0,5348	0,561	0,4913	0,4997	0,5191	0,5289

Propiedades	Unidades	α -pineno	Verbenona	Verbenol	Epóxido de α -pineno	Terbutanol	Acetona
$T_{critica}$	K	644	734	705	628	506,04	508,0655
$P_{critica}$	N/m ²	276000	3002439,4	3082993,2	3093290	3977358,4	4704730,8
$V_{critico}$	m ³ /kmol	0,49	0,4602	0,4882	0,4502	0,27489	0,21519

Propiedades	Unidades	Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído canfolénico
$T_{critica}$	K	734	720	717	661
$P_{critica}$	N/m ²	2995869,5	3295366,3	3388080,2	2796513,6
$V_{critico}$	m ³ /kmol	0,4569	0,4811	0,5101	0,5249

6.4. MODELACIÓN DE LAS PROPIEDADES DE MEZCLA MEDIANTE ASPEN PLUS V10

6.4.1. CONSIDERACIONES

Para la estimación de las propiedades termodinámicas de las mezclas presentes en la producción de la carvona y la verbenona, es necesario conocer las fracciones de cada uno las sustancias como se ve en la tabla 21.

También es necesario seleccionar las propiedades termodinámicas que se quieren estimar con sus respectivas unidades en “properties sets” en el software de Aspen Plus V10 como se ve en la figura #.

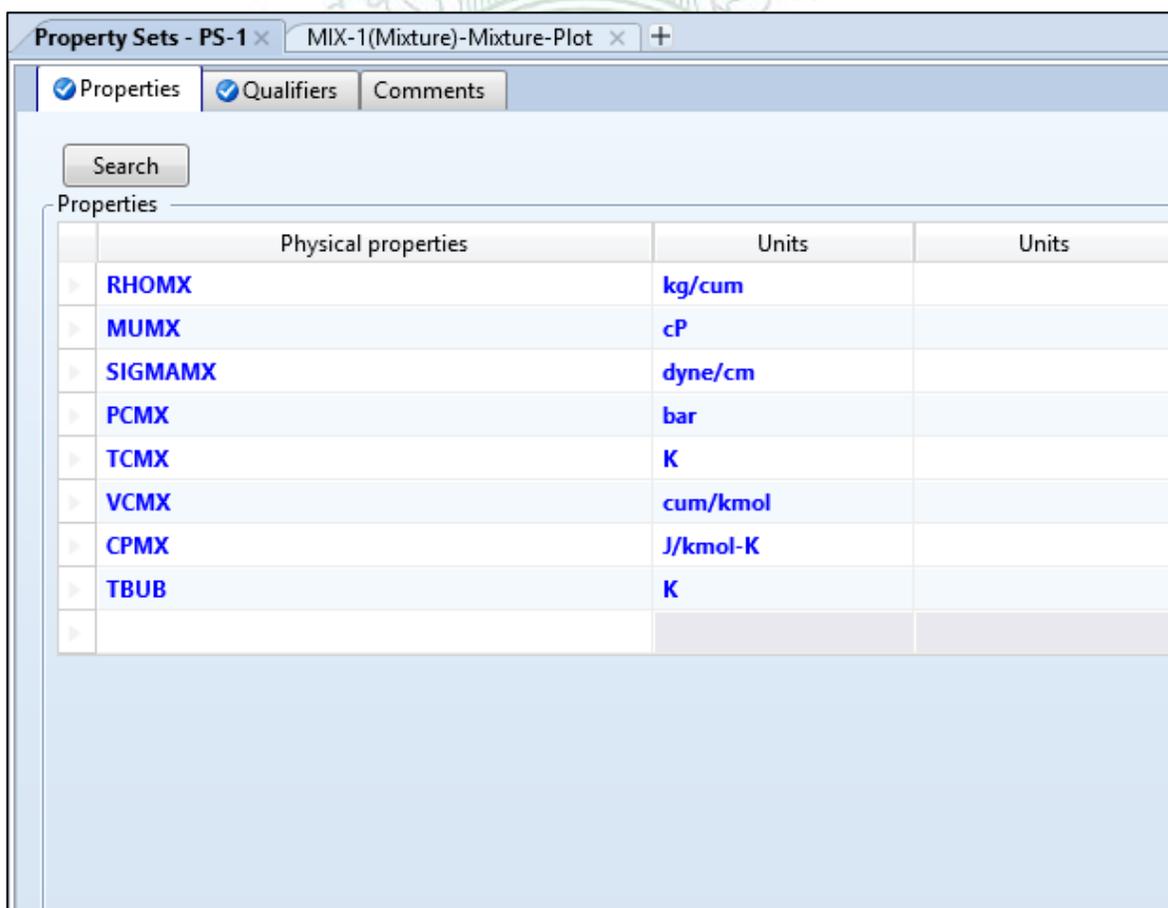


Figura 10. Selección de las propiedades termodinámicas que se desean estimar en la mezcla presentes en la producción de carvona y verbenona.

Por último, se ingresan las condiciones de presión y temperatura para llevar a cabo la estimación de estas propiedades seleccionadas, las cuales, se va a variar la temperatura y la presión va a ser constante. Esta presión es de 0,84 bar (presión atmosférica de Medellín). Los resultados se ven a continuación.

6.4.2. PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE MEZCLAS**6.4.2.1. DENSIDAD DE MEZCLA**

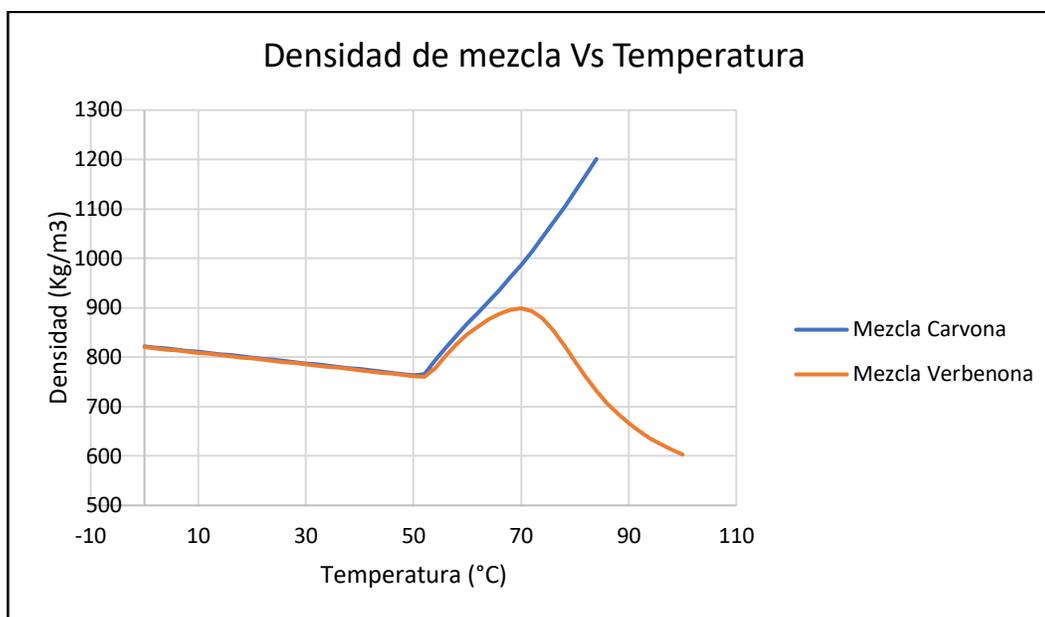
A continuación, en la tabla 38. se encuentran tabuladas las densidades de mezcla involucrada en la producción de la carvona y verbenona, los cuales fueron estimadas mediante el software Aspen Plus V10, variando la temperatura y dejando la presión constante, la cual es la presión de Medellín (0,84 bar).

Tabla 38. Estimación de la densidad de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.

Presión	Temperatura	Densidad producción de carvona	Densidad producción de verbenona
bar	C	kg/cum	kg/cum
0,84	0	822,07	820,044
0,84	2	819,827	817,802
0,84	4	817,576	815,553
0,84	6	815,317	813,296
0,84	8	813,05	811,031
0,84	10	810,776	808,758
0,84	12	808,494	806,477
0,84	14	806,204	804,188
0,84	16	803,905	801,891
0,84	18	801,599	799,586
0,84	20	799,284	797,272
0,84	22	796,96	794,95
0,84	24	794,628	792,619
0,84	26	792,287	790,279
0,84	28	789,937	787,93
0,84	30	787,578	785,572
0,84	32	785,209	783,205
0,84	34	782,832	780,828
0,84	36	780,444	778,442
0,84	38	778,048	776,046
0,84	40	775,641	773,64
0,84	42	773,224	771,225
0,84	44	770,797	768,799
0,84	46	768,36	766,362
0,84	48	765,913	763,915
0,84	50	763,454	761,458
0,84	52	766,012	759,864
0,84	54	793,187	777,209
0,84	56	819,52	802,75
0,84	58	843,736	825,928
0,84	60	866,856	845,784

0,84	62	889,652	862,612
0,84	64	912,676	876,734
0,84	66	936,351	888,116
0,84	68	961,016	896,027
0,84	70	986,924	898,696
0,84	72	1014,22	893,452
0,84	74	1042,92	878,213
0,84	76	1072,92	853,589
0,84	78	1104,02	823,053
0,84	80	1135,95	790,792
0,84	82	1168,43	759,824
0,84	84	1201,18	731,653
0,84	86		706,74
0,84	88		685,006
0,84	90		666,149
0,84	92		649,804
0,84	94		635,614
0,84	96		623,262
0,84	98		612,47
0,84	100		603,005

Se puede observar de la tabla 38, la densidad de la mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona, esta empieza a disminuir conforme aumenta la temperatura, pero llega a cierto punto donde la densidad se incrementa de “golpe”, más exactamente entre 54°C y 56°C. Esto puede deberse a que la mezcla es un 93% en mol de acetona como se ve en la tabla #, por lo tanto, esta mezcla tendría las condiciones de este compuesto, y como este ebulle a 58°C como se ve en la tabla #, esta podría pasando de un estado líquido a un estado gaseoso, por lo cual se ve reflejado en el incremento de la densidad de mezcla. Esto se puede observar para las demás propiedades, como se observará más adelante. Este comportamiento se puede ver más fácilmente en la gráfica 5.



Gráfica 5. Representación de los valores estimados de la densidad de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

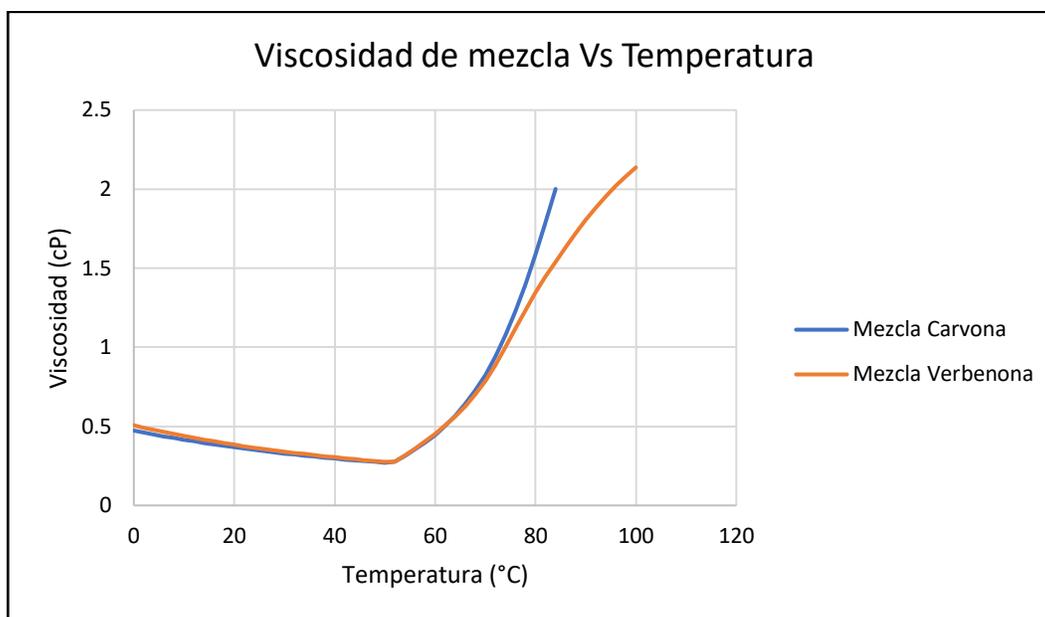
6.4.2.2. VISCOSIDAD DE MEZCLA

Nuevamente, procediendo de la misma forma de lo anterior, en la tabla 39. se encuentran tabuladas las densidades de mezcla involucradas en la producción de la carvona y verbenona, los cuales fueron estimadas mediante el software Aspen Plus V10, variando la temperatura y dejando la presión constante, la cual es la presión de Medellín (0,84 bar).

Tabla 39. Estimación de la viscosidad de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.

Presión bar	Temperatura C	Viscosidad de Mezcla en carvona cP	Viscosidad de mezcla en verbenona cP
0,84	0	0,473934	0,506106
0,84	2	0,461196	0,491401
0,84	4	0,448997	0,477344
0,84	6	0,437306	0,463899
0,84	8	0,426099	0,451032
0,84	10	0,415348	0,438711
0,84	12	0,40503	0,426907
0,84	14	0,395123	0,415592
0,84	16	0,385605	0,404741
0,84	18	0,376458	0,39433
0,84	20	0,367663	0,384335
0,84	22	0,359202	0,374737
0,84	24	0,351067	0,365531
0,84	26	0,343257	0,356733

0,84	28	0,335755	0,34832
0,84	30	0,328546	0,340267
0,84	32	0,321614	0,332555
0,84	34	0,314944	0,325164
0,84	36	0,308524	0,318076
0,84	38	0,30234	0,311273
0,84	40	0,296381	0,30474
0,84	42	0,290636	0,298461
0,84	44	0,285095	0,292425
0,84	46	0,279747	0,286616
0,84	48	0,274584	0,281025
0,84	50	0,269597	0,275638
0,84	52	0,277443	0,27632
0,84	54	0,315419	0,319634
0,84	56	0,35416	0,361307
0,84	58	0,397099	0,406425
0,84	60	0,445749	0,454616
0,84	62	0,501516	0,506168
0,84	64	0,565863	0,562334
0,84	66	0,640393	0,625425
0,84	68	0,726882	0,698793
0,84	70	0,827206	0,785966
0,84	72	0,943159	0,888161
0,84	74	1,07621	1,00169
0,84	76	1,22723	1,11923
0,84	78	1,39637	1,23431
0,84	80	1,58293	1,34379
0,84	82	1,78537	1,44708
0,84	84	2,00137	1,54449
0,84	86		1,63647
0,84	88		1,7233
0,84	90		1,80509
0,84	92		1,88185
0,84	94		1,95354
0,84	96		2,0201
0,84	98		2,0815
0,84	100		2,1377



Gráfica 6. Representación de los valores estimados de la viscosidad de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

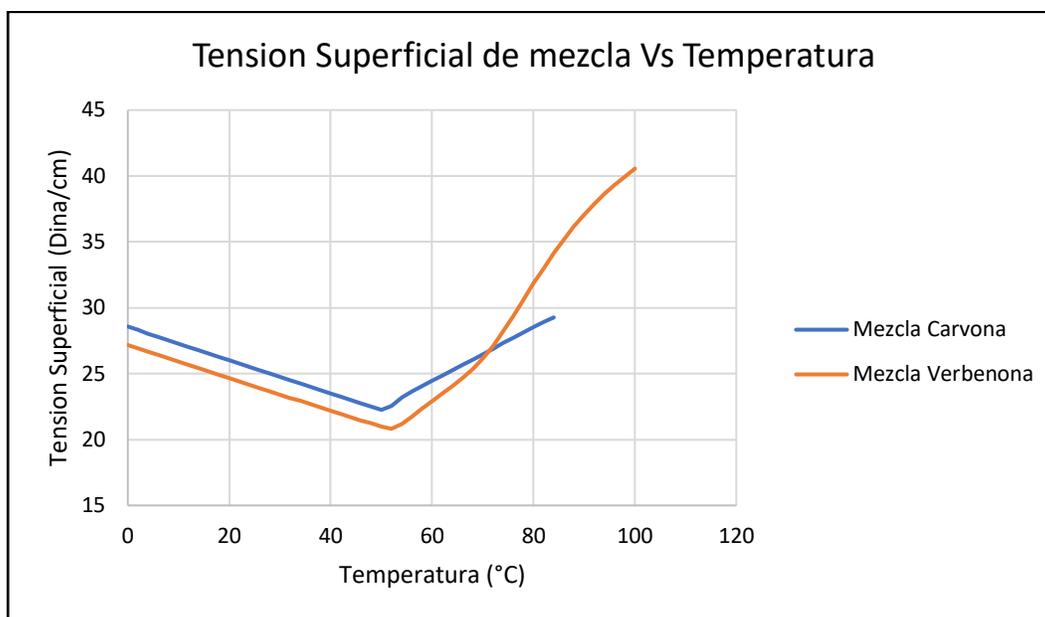
6.4.2.3. TENSIÓN SUPERFICIAL

Nuevamente como se procedió con la densidad de mezcla, en la tabla 40, se presentan tabuladas la tensión superficial en unidades de dina/cm de la mezcla involucrada en la producción de la carvona y verbenona, los cuales fueron estimadas mediante el software Aspen Plus V10, variando la temperatura y dejando la presión constante, la cual es la presión de Medellín (0,84 bar).

Tabla 40. Estimación de la Tensión superficial de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona

Presión bar	Temperatura C	Tensión S. producción de carvona dyne/cm	Tensión S. producción de verbenona dyne/cm
0,84	0	28,5623	27,1554
0,84	2	28,3061	26,9041
0,84	4	28,0502	26,6531
0,84	6	27,7947	26,4023
0,84	8	27,5394	26,1518
0,84	10	27,2845	25,9016
0,84	12	27,0299	25,6517
0,84	14	26,7756	25,4021
0,84	16	26,5216	25,1527
0,84	18	26,2679	24,9036
0,84	20	26,0145	24,6549
0,84	22	25,7614	24,4064
0,84	24	25,5087	24,1582
0,84	26	25,2562	23,9103

0,84	28	25,0042	23,6628
0,84	30	24,7525	23,4157
0,84	32	24,5012	23,1691
0,84	34	24,2503	22,923
0,84	36	23,9998	22,6773
0,84	38	23,7496	22,432
0,84	40	23,4999	22,1872
0,84	42	23,2505	21,9428
0,84	44	23,0015	21,6989
0,84	46	22,7529	21,4554
0,84	48	22,5046	21,2124
0,84	50	22,2568	20,9698
0,84	52	22,5396	20,8164
0,84	54	23,1947	21,209
0,84	56	23,6356	21,7519
0,84	58	24,0465	22,3361
0,84	60	24,4469	22,9147
0,84	62	24,8445	23,4838
0,84	64	25,2433	24,0584
0,84	66	25,6456	24,6661
0,84	68	26,0529	25,346
0,84	70	26,4656	26,1423
0,84	72	26,883	27,0863
0,84	74	27,3022	28,1748
0,84	76	27,7193	29,3671
0,84	78	28,1292	30,6052
0,84	80	28,5267	31,8359
0,84	82	28,9072	33,0224
0,84	84	29,2667	34,1437
0,84	86		35,1907
0,84	88		36,1612
0,84	90		37,0568
0,84	92		37,8812
0,84	94		38,6386
0,84	96		39,3339
0,84	98		39,9718
0,84	100		40,5567



Gráfica 7. Representación de los valores estimados de la tensión superficial de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

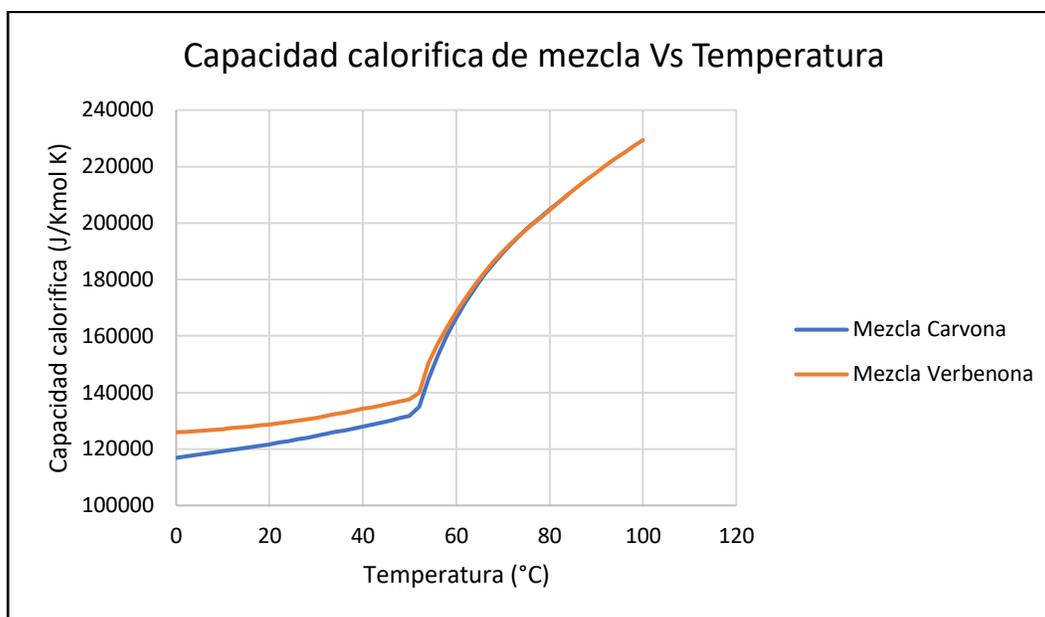
6.4.2.4. CAPACIDAD CALORÍFICA.

Nuevamente como se procedió con la densidad de mezcla, en la tabla 41, se presentan tabuladas la capacidad calorífica en unidades de J/Kmol.K de la mezcla involucrada en la producción de la carvona y verbenona, los cuales fueron estimadas mediante el software Aspen Plus V10, variando la temperatura y dejando la presión constante, la cual es la presión de Medellín (0,84 bar).

Tabla 41. Estimación de la capacidad calorífica de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.

Presión bar	Temperatura C	Capacidad cal. producción de carvona J/kmol-K	Capacidad cal. producción de carvona J/kmol-K
0,84	0	116859	125952
0,84	2	117292	126129
0,84	4	117736	126330
0,84	6	118191	126554
0,84	8	118657	126802
0,84	10	119133	127071
0,84	12	119621	127362
0,84	14	120121	127674
0,84	16	120632	128007
0,84	18	121154	128360
0,84	20	121688	128732
0,84	22	122233	129124
0,84	24	122789	129535

0,84	26	123362	129974
0,84	28	123991	130526
0,84	30	124631	131094
0,84	32	125281	131679
0,84	34	125944	132280
0,84	36	126617	132896
0,84	38	127302	133528
0,84	40	127998	134175
0,84	42	128706	134838
0,84	44	129425	135515
0,84	46	130157	136208
0,84	48	130900	136916
0,84	50	131656	137639
0,84	52	135071	139864
0,84	54	144914	150439
0,84	56	153112	157305
0,84	58	160247	163215
0,84	60	166523	168585
0,84	62	172095	173545
0,84	64	177090	178147
0,84	66	181608	182406
0,84	68	185727	186317
0,84	70	189508	189877
0,84	72	193001	193120
0,84	74	196249	196141
0,84	76	199293	199049
0,84	78	202171	201908
0,84	80	204915	204731
0,84	82	207557	207505
0,84	84	210122	210216
0,84	86		212855
0,84	88		215420
0,84	90		217911
0,84	92		220331
0,84	94		222683
0,84	96		224972
0,84	98		227200
0,84	100		229373



Gráfica 8. Representación de los valores estimados de la capacidad calorífica de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

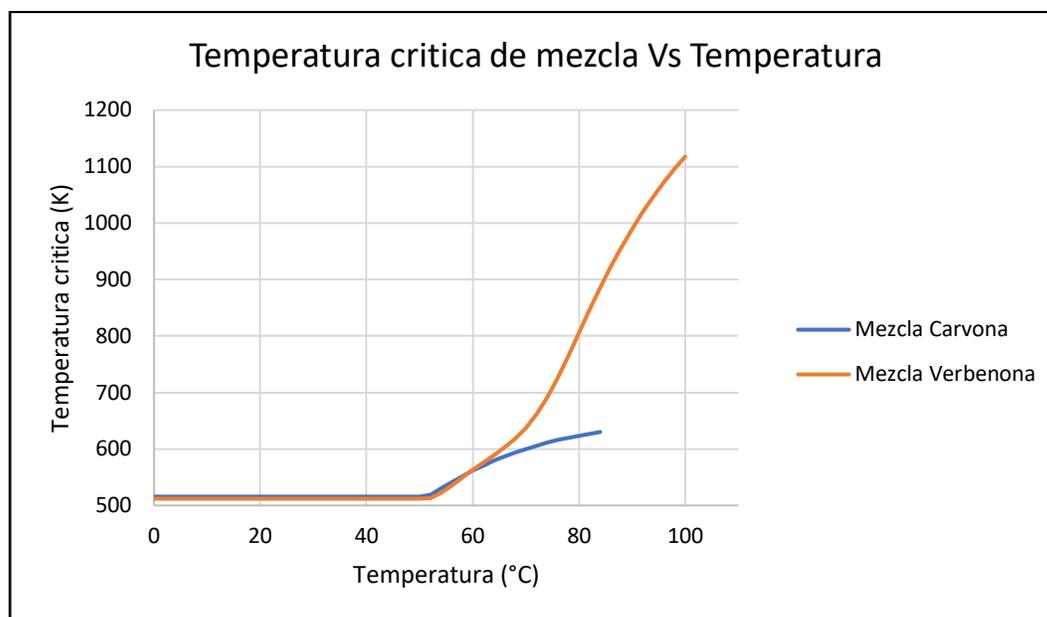
6.4.2.5. TEMPERATURA CRÍTICA DE MEZCLA

Nuevamente como se procedió con la densidad de mezcla, en la tabla 42, se presentan tabuladas la temperatura crítica en unidades de K de la mezcla involucrada en la producción de la carvona y verbenona, los cuales fueron estimadas mediante el software Aspen Plus V10, variando la temperatura y dejando la presión constante, la cual es la presión de Medellín (0,84 bar).

Tabla 42. Estimación de la Temperatura crítica de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.

Presión	Temperatura	Temperatura crit. producción de carvona	Temperatura crit. producción de verbenona
bar	C	K	K
0,84	0	515,638	511,933
0,84	2	515,638	511,933
0,84	4	515,638	511,933
0,84	6	515,638	511,933
0,84	8	515,638	511,933
0,84	10	515,638	511,933
0,84	12	515,638	511,933
0,84	14	515,638	511,933
0,84	16	515,638	511,933
0,84	18	515,638	511,933
0,84	20	515,638	511,933
0,84	22	515,638	511,933
0,84	24	515,638	511,933

0,84	26	515,638	511,933
0,84	28	515,638	511,933
0,84	30	515,638	511,933
0,84	32	515,638	511,933
0,84	34	515,638	511,933
0,84	36	515,638	511,933
0,84	38	515,638	511,933
0,84	40	515,638	511,933
0,84	42	515,638	511,933
0,84	44	515,638	511,933
0,84	46	515,638	511,933
0,84	48	515,638	511,933
0,84	50	515,638	511,933
0,84	52	518,513	512,501
0,84	54	530,173	521,884
0,84	56	541,499	535,552
0,84	58	552,046	549,396
0,84	60	561,838	562,854
0,84	62	570,905	576,007
0,84	64	579,265	589,221
0,84	66	586,933	603,143
0,84	68	593,929	618,806
0,84	70	600,28	637,687
0,84	72	606,021	661,44
0,84	74	611,193	691,121
0,84	76	615,844	726,398
0,84	78	620,018	765,558
0,84	80	623,761	806,368
0,84	82	627,116	846,95
0,84	84	630,124	886,083
0,84	86		923,11
0,84	88		957,749
0,84	90		989,937
0,84	92		1019,74
0,84	94		1047,26
0,84	96		1072,67
0,84	98		1096,1
0,84	100		1117,74



Gráfica 9. Representación de los valores estimados de la temperatura crítica de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

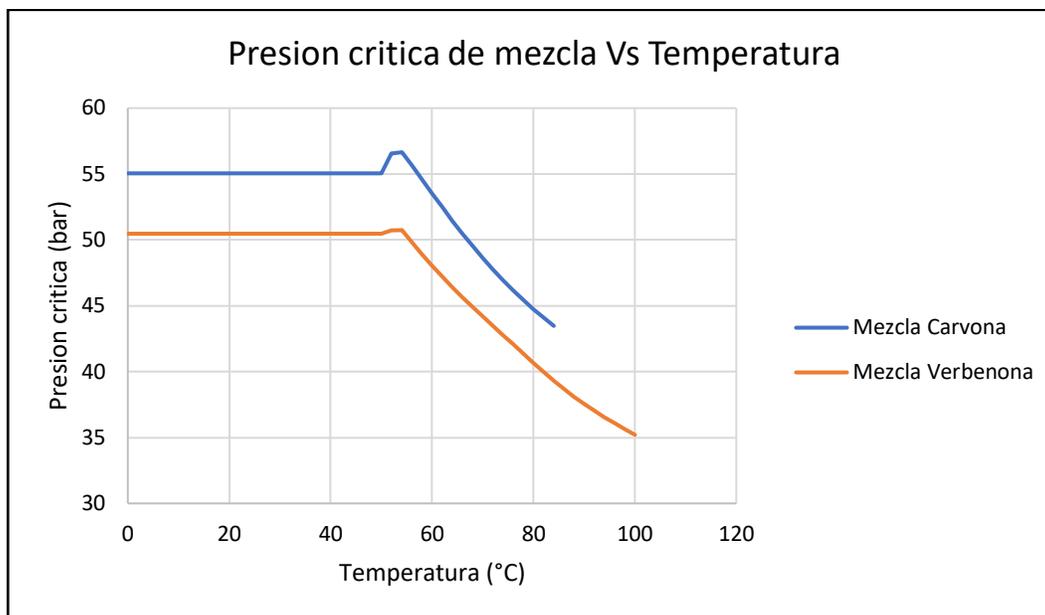
6.4.2.6. PRESION CRÍTICA DE MEZCLA

Nuevamente como se procedió con la densidad de mezcla, en la tabla 43, se presentan tabuladas la presión crítica en unidades de bar de la mezcla involucrada en la producción de la carvona y verbenona, los cuales fueron estimadas mediante el software Aspen Plus V10, variando la temperatura y dejando la presión constante, la cual es la presión de Medellín (0,84 bar).

Tabla 43. Estimación de la Presión crítica de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona

Presión bar	Temperatura C	Presión crit. producción de carvona bar	Presión crit. producción de verbenona bar
0,84	0	55,0429	50,4623
0,84	2	55,0429	50,4623
0,84	4	55,0429	50,4623
0,84	6	55,0429	50,4623
0,84	8	55,0429	50,4623
0,84	10	55,0429	50,4623
0,84	12	55,0429	50,4623
0,84	14	55,0429	50,4623
0,84	16	55,0429	50,4623
0,84	18	55,0429	50,4623
0,84	20	55,0429	50,4623
0,84	22	55,0429	50,4623
0,84	24	55,0429	50,4623

0,84	26	55,0429	50,4623
0,84	28	55,0429	50,4623
0,84	30	55,0429	50,4623
0,84	32	55,0429	50,4623
0,84	34	55,0429	50,4623
0,84	36	55,0429	50,4623
0,84	38	55,0429	50,4623
0,84	40	55,0429	50,4623
0,84	42	55,0429	50,4623
0,84	44	55,0429	50,4623
0,84	46	55,0429	50,4623
0,84	48	55,0429	50,4623
0,84	50	55,0429	50,4623
0,84	52	56,545	50,7139
0,84	54	56,6482	50,7418
0,84	56	55,6566	49,8355
0,84	58	54,5902	48,9229
0,84	60	53,5226	48,0446
0,84	62	52,473	47,2023
0,84	64	51,451	46,3953
0,84	66	50,4629	45,6228
0,84	68	49,5134	44,8825
0,84	70	48,6061	44,1684
0,84	72	47,743	43,4691
0,84	74	46,925	42,7708
0,84	76	46,1517	42,0661
0,84	78	45,4218	41,3585
0,84	80	44,7334	40,6587
0,84	82	44,0843	39,9777
0,84	84	43,4721	39,3231
0,84	86		38,6992
0,84	88		38,1078
0,84	90		37,5491
0,84	92		37,0225
0,84	94		36,5267
0,84	96		36,0604
0,84	98		35,622
0,84	100		35,21



Gráfica 10. Representación de los valores estimados de la presión crítica de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

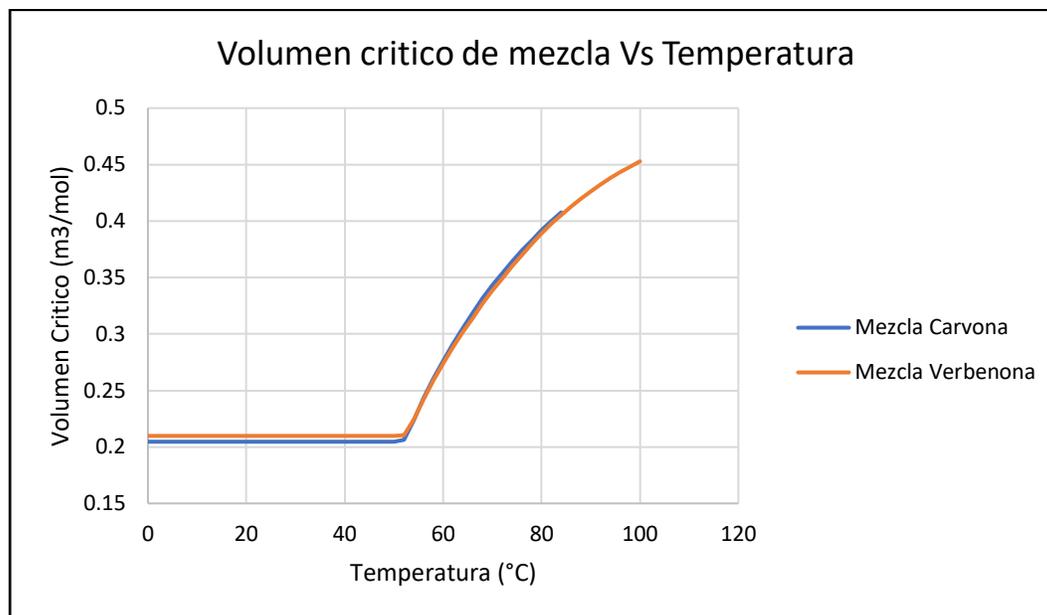
6.4.2.7. VOLUMEN CRÍTICO DE MEZCLA

Nuevamente como se procedió con la densidad de mezcla, en la tabla 44, se presentan tabuladas el volumen crítico en unidades de m^3/mol de la mezcla involucrada en la producción de la carvona y verbenona, los cuales fueron estimadas mediante el software Aspen Plus V10, variando la temperatura y dejando la presión constante, la cual es la presión de Medellín (0,84 bar).

Tabla 44. Estimación del volumen crítico de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona

Presión bar	Temperatura C	Volumen crit. producción de carvona cum/kmol	Volumen crit. producción de verbenona cum/kmol
0,84	0	0,204659	0,209797
0,84	2	0,204659	0,209797
0,84	4	0,204659	0,209797
0,84	6	0,204659	0,209797
0,84	8	0,204659	0,209797
0,84	10	0,204659	0,209797
0,84	12	0,204659	0,209797
0,84	14	0,204659	0,209797
0,84	16	0,204659	0,209797
0,84	18	0,204659	0,209797
0,84	20	0,204659	0,209797
0,84	22	0,204659	0,209797
0,84	24	0,204659	0,209797

0,84	26	0,204659	0,209797
0,84	28	0,204659	0,209797
0,84	30	0,204659	0,209797
0,84	32	0,204659	0,209797
0,84	34	0,204659	0,209797
0,84	36	0,204659	0,209797
0,84	38	0,204659	0,209797
0,84	40	0,204659	0,209797
0,84	42	0,204659	0,209797
0,84	44	0,204659	0,209797
0,84	46	0,204659	0,209797
0,84	48	0,204659	0,209797
0,84	50	0,204659	0,209797
0,84	52	0,206537	0,210567
0,84	54	0,224152	0,224231
0,84	56	0,242668	0,24166
0,84	58	0,260026	0,258321
0,84	60	0,276227	0,273857
0,84	62	0,29136	0,288316
0,84	64	0,305514	0,301818
0,84	66	0,318767	0,314511
0,84	68	0,331195	0,326548
0,84	70	0,342866	0,338073
0,84	72	0,353844	0,349177
0,84	74	0,364182	0,359866
0,84	76	0,373926	0,370082
0,84	78	0,383118	0,379761
0,84	80	0,391791	0,388869
0,84	82	0,399976	0,397402
0,84	84	0,407701	0,405377
0,84	86		0,412824
0,84	88		0,419776
0,84	90		0,426266
0,84	92		0,432329
0,84	94		0,437995
0,84	96		0,443294
0,84	98		0,448252
0,84	100		0,452894



Grafica 11. Representación de los valores estimados del volumen crítico de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

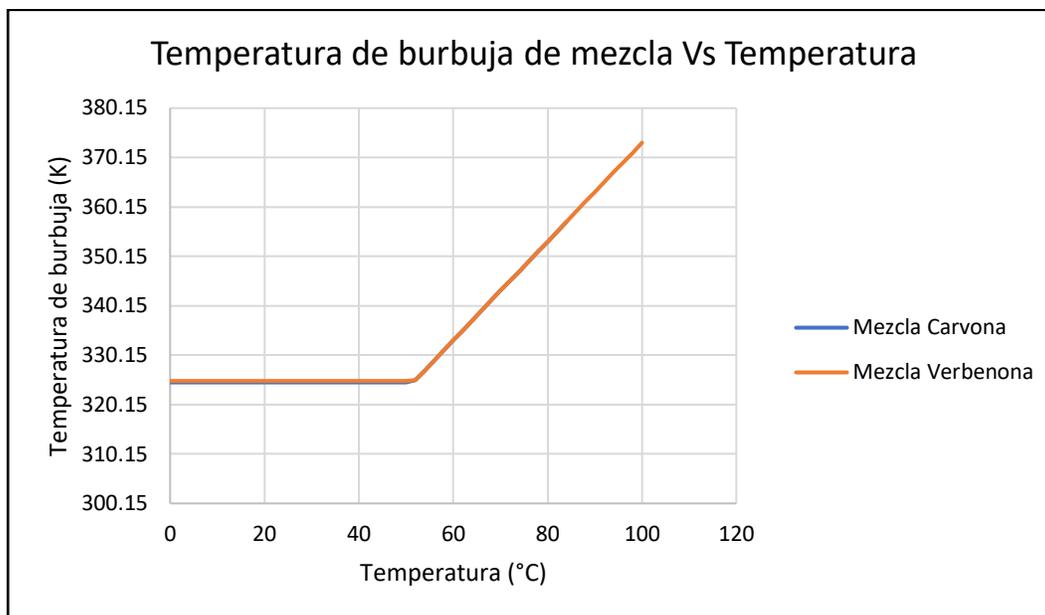
6.4.2.8. TEMPERATURA DE BURBUJA DE MEZCLA

Nuevamente como se procedió con la densidad de mezcla, en la tabla 45, se presentan tabuladas la temperatura de burbuja en unidades de K de la mezcla involucrada en la producción de la carvona y verbenona, los cuales fueron estimadas mediante el software Aspen Plus V10, variando la temperatura y dejando la presión constante, la cual es la presión de Medellín (0,84 bar).

Tabla 45. Estimación de la temperatura de burbuja de mezcla involucrada en la producción de carvona y verbenona.

Presión bar	Temperatura C	Temp. de burbuja producción de carvona K	Temp. de burbuja producción verbenona K
0,84	0	324,646	324,933
0,84	2	324,646	324,933
0,84	4	324,646	324,933
0,84	6	324,646	324,933
0,84	8	324,646	324,933
0,84	10	324,646	324,933
0,84	12	324,646	324,933
0,84	14	324,646	324,933
0,84	16	324,646	324,933
0,84	18	324,646	324,933
0,84	20	324,646	324,933
0,84	22	324,646	324,933
0,84	24	324,646	324,933

0,84	26	324,646	324,933
0,84	28	324,646	324,933
0,84	30	324,646	324,933
0,84	32	324,646	324,933
0,84	34	324,646	324,933
0,84	36	324,646	324,933
0,84	38	324,646	324,933
0,84	40	324,646	324,933
0,84	42	324,646	324,933
0,84	44	324,646	324,933
0,84	46	324,646	324,933
0,84	48	324,646	324,933
0,84	50	324,646	324,933
0,84	52	325,15	325,15
0,84	54	327,15	327,15
0,84	56	329,15	329,15
0,84	58	331,15	331,15
0,84	60	333,15	333,15
0,84	62	335,15	335,15
0,84	64	337,15	337,15
0,84	66	339,15	339,15
0,84	68	341,15	341,15
0,84	70	343,15	343,15
0,84	72	345,15	345,15
0,84	74	347,15	347,15
0,84	76	349,15	349,15
0,84	78	351,15	351,15
0,84	80	353,15	353,15
0,84	82	355,15	355,15
0,84	84	357,15	357,15
0,84	86		359,15
0,84	88		361,15
0,84	90		363,15
0,84	92		365,15
0,84	94		367,15
0,84	96		369,15
0,84	98		371,15
0,84	100		373,15



Grafica 12. Representación de los valores estimados de la temperatura de burbuja de mezcla presente en la producción de la carvona y verbenona a través de Aspen Plus V10.

De las 8 propiedades analizadas, se puede observar el siguiente comportamiento o patrón: la densidad, la viscosidad y la tensión superficial con el aumento de la temperatura, estos empiezan a disminuir, aunque no es un cambio tan drástico, como lo que ocurre a las 54-56°C, que estos valores aumentan de golpe. Esto se puede observar en las gráficas 5, 6 y 7.

La temperatura crítica, el volumen crítico y la temperatura de burbuja se mantienen constantes al aumentar la temperatura, pero aproximadamente entre el rango de 54-56°C, que estos valores aumentan de golpe. Esto se puede observar en las gráficas 9, 11 y 12.

La presión crítica se mantienen constantes al aumentar la temperatura, pero aproximadamente entre el rango de 54-56°C, que a diferencia de las otras propiedades estos valores disminuyen. Esto se puede observar en la gráfica 10.

La capacidad calorífica es la única que aumenta de valor conforme aumenta la temperatura, pero entre el rango de 54-56°C, este aumento pasa de ser lineal a ser exponencial como se observa en la gráfica 8.

Este comportamiento de estas propiedades termodinámicas de mezclas presentes en la producción de la carvona y la verbenona puede deberse a que la mezcla es un 93% en mol de acetona como se ve en la tabla 21, por lo tanto, esta mezcla tendría las condiciones de este compuesto, y como este ebulle a 58°C como se ve en la tabla 31, esta podría pasando de un estado líquido a un estado gaseoso, por lo cual se ve reflejado en el incremento de estas propiedades de mezcla.

7. VALIDACIÓN DE LOS RESULTADOS

7.1. MODELACIÓN COMPUESTOS PUROS

Tabla 46. Valores estimados por medio de los algoritmos construidos en Matlab_R2020a de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de carvona.

Propiedad	Unidades	Limoneno	Carveol	Carvona	Epóxido de Limoneno
Densidad	Kg/m ³	841,1	965	953	929
Viscosidad	cP	0,74707266	12,584736	1,7727572	1,4683763
Tensión superficial	Dina/cm	24,27383	34,8684	28,931136	19,150467
T _{crítica}	K	653	742,62	608,67	685,26
P _{crítica}	N/m ²	2572724,973	2787790,96	2745288,672	2796874,195
V _{crítico}	m ³ /kmol	0,436914	0,490962	0,456909	0,475285
Capacidad calorífica	J/(kmol K)	253975,1	202530,72	214972,37	243524,12

Propiedad	Unidades	8,9-óxido de limoneno	1,2-glicol de limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona	Dióxido de limoneno
Densidad	Kg/m ³	991,67	1067,8	992,87	974,25	1138	1169,3
Viscosidad	cP	1,227585828	211,6996	1,8922005	0,64373088	27,868101	1,679334
Tensión superficial	Dina/cm	25,000974	41,815592	27,443424	28,139475	36,773504	28,632654
T _{crítica}	K	690	703	694	685	701	698,74
P _{crítica}	N/m ²	2484056,47	2357860,916	2745288,672	2863482,528	3004627,08	2612294,99
V _{crítico}	m ³ /kmol	0,518756	0,53295	0,471648	0,474715	0,477572	0,47601
Capacidad calorífica	J/(kmol K)	245511,56	160388,41	219557,24	226434,78	197203,2	239558,96

Tabla 47. Valores estimados por medio de los algoritmos construidos en Matlab_R2020a de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de verbenona.

Propiedad	Unidades	α -pineno	Verbenona	Verbenol	Epóxido de α -pineno
Densidad	Kg/m ³	828,648	1239,53	915,16	1087,97
Viscosidad	cP	0,7316691	12,322554	1,8691027	1,4381005
Tensión superficial	Dina/cm	24,27383	33,0894	27,725672	18,738629
T _{crítica}	K	653	693	694	686
P _{crítica}	N/m ²	2685811,785	2729100,624	2773885,429	2885196,538
V _{crítico}	m ³ /kmol	0,39933	0,464847	0,466735	0,435261
Capacidad calorífica	J/(kmol K)	248738,5	202530,72	212756,16	246009,06

Propiedad	Unidades	Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído canfolénico
Densidad	Kg/m ³	1072,7	1161,1	1116,3	940,35
Viscosidad	cP	1,293	1,98	2,0913795	0,67725853
Tensión superficial	Dina/cm	25,258716	44,113152	31,44559	39,33475
T _{crítica}	K	644	742,622	664,703	685,698
P _{crítica}	N/m ²	2788226,65	3331759,99	3002659,485	2833654,585
V _{crítico}	m ³ /kmol	0,524104	0,7293	0,54043	0,474715
Capacidad calorífica	J/(kmol K)	275574,2	229126,3	212836,1	219573,12

7.2. SIMULACIÓN COMPUESTOS PUROS

Tabla 48. Valores estimados por medio Aspen Plus V10 de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de carvona.

Propiedad	Unidades	Limoneno	Carveol	Carvona	Epóxido de Limoneno
Densidad	Kg/m ³	828,648	1239,53	915,16	1087,97
Viscosidad	cP	0,770178	13,1091	1,92691	1,51379
Tensión superficial	Dina/cm	25,5514	35,58	30,1366	20,5919
T _{crítica}	K	653	693	694	686
P _{crítica}	N/m ²	2827170,3	2934516,8	2859675,7	2944078,1
V _{crítico}	m ³ /kmol	0,4698	0,5223	0,4913	0,5003
Capacidad calorífica	J/(kmol K)	261830	206664	221621	248494

Propiedad	Unidades	8,9-óxido de limoneno	1,2-glicol de limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona	Dióxido de limoneno
Densidad	Kg/m ³	898,218	2188,72	944,936	1020,62	1523,44	1032,89
Viscosidad	cP	1,29138	216,02	1,99179	0,670553	29,9657	1,76772
Tensión superficial	Dina/cm	25,7742	45,9512	28,5869	30,2575	39,9712	30,7878
T _{crítica}	K	652	703	694	685	701	713
P _{crítica}	N/m ²	2534751,5	2562892,3	2859675,7	2982794,3	3065946	2749784,2
V _{crítico}	m ³ /kmol	0,5348	0,561	0,4913	0,4997	0,5191	0,5289
Capacidad calorífica	J/(kmol K)	250522	176251	224038	228722	205420	246968

Tabla 49. Valores estimados por medio Aspen Plus V10 de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de Verbenona.

Propiedad	Unidades	α -pineno	Verbenona	Verbenol	Epóxido de α -pineno
Densidad	Kg/m ³	845,365	984,611	1358,05	978,836
Viscosidad	cP	1,15407	2,22453	15,3678	1,29778
Tensión superficial	Dina/cm	24,2209	31,2601	36,2213	25,4122
T _{crítica}	K	586	734	705	628
P _{crítica}	N/m ²	2827170,3	3002439,4	3082993,2	3093290
V _{crítico}	m ³ /kmol	0,4698	0,4602	0,4882	0,4502
Capacidad calorífica	J/(kmol K)	233175	220772	206927	227481
Propiedad	Unidades	Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído canfolénico
Densidad	Kg/m ³	966,031	1668,21	2394,88	536,33
Viscosidad	cP	2,18254	35,1151	252,126	14,5909
Tensión superficial	Dina/cm	31,6825	41,3353	48,1238	55,2261
T _{crítica}	K	734	720	717	661
P _{crítica}	N/m ²	2995869,5	3295366,3	3388080,2	2796513,6
V _{crítico}	m ³ /kmol	0,4569	0,4811	0,5101	0,5249
Capacidad calorífica	J/(kmol K)	220787	204748	160523	207601

7.3. PORCENTAJE DE ERROR ENTRE LA SIMULACIÓN Y LA MODELACIÓN PARA LOS COMPUESTOS PUROS

Tabla 50. Comparación por porcentajes de error de los valores obtenidos en Matlab_R2020a y en Aspen Plus V10 de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de carvona.

Propiedad	Unidades	Limoneno	Carveol	Carvona	Epóxido de Limoneno
Densidad	Kg/m ³	1%	28%	4%	17%
Viscosidad	cP	3%	4%	9%	3%
Tensión superficial	Dina/cm	5%	2%	4%	8%
T _{crítica}	K	0%	7%	14%	0%
P _{crítica}	N/m ²	10%	5%	4%	5%
V _{crítico}	m ³ /kmol	8%	6%	8%	5%
Capacidad calorífica	J/(kmol K)	3%	2%	3%	2%

Propiedad	Unidades	8,9-óxido de limoneno	1,2-glicol de limoneno	Isopiperitona	Perilaldehído	Hidroxicarvona	Dióxido de limoneno
Densidad	Kg/m ³	9%	105%	5%	5%	34%	12%
Viscosidad	cP	5%	2%	5%	4%	8%	5%
Tensión superficial	Dina/cm	3%	10%	4%	8%	9%	8%
T _{crítica}	K	6%	0%	0%	0%	0%	2%
P _{crítica}	N/m ²	2%	9%	4%	4%	2%	5%
V _{crítico}	m ³ /kmol	3%	5%	4%	5%	9%	11%
Capacidad calorífica	J/(kmol K)	2%	10%	2%	1%	4%	3%

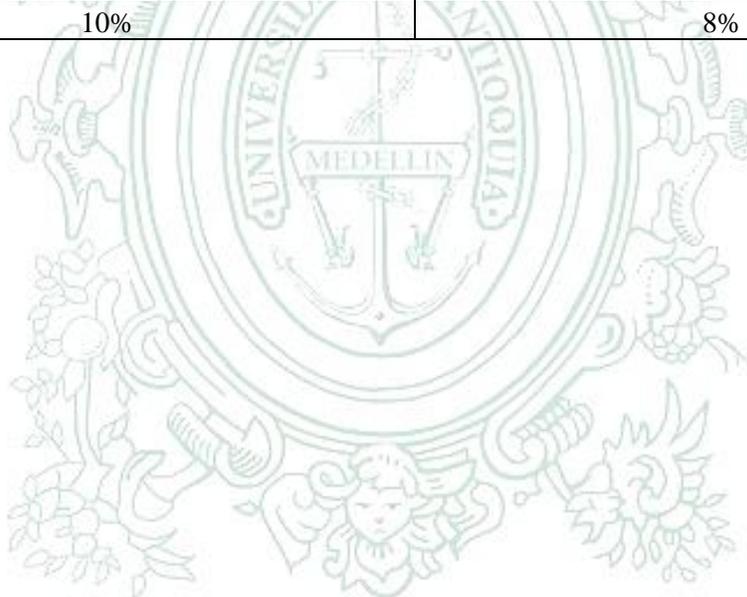
Tabla 51. Comparación por porcentajes de error de los valores obtenidos en Matlab_R2020a y en Aspen Plus V10 de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de verbenona.

Propiedad	Unidades	□-pineno	Verbenona	Verbenol	Epóxido de α -pineno
Densidad	Kg/m ³	2%	21%	48%	10%
Viscosidad	cP	58%	82%	722%	10%
Tensión superficial	Dina/cm	0%	6%	31%	36%
T _{crítica}	K	10%	6%	2%	8%
P _{crítica}	N/m ²	5%	10%	11%	7%
V _{crítico}	m ³ /kmol	18%	1%	5%	3%
Capacidad calorífica	J/(kmol K)	6%	9%	3%	8%
Propiedad	Unidades	Pinocarvona	2-Hidroxi-3-Pinanona	Pinanediol	Aldehído canfolénico
Densidad	Kg/m ³	10%	44%	115%	43%
Viscosidad	cP	69%	1673%	11955%	2054%
Tensión superficial	Dina/cm	25%	6%	53%	40%
T _{crítica}	K	14%	3%	8%	4%
P _{crítica}	N/m ²	7%	1%	13%	1%
V _{crítico}	m ³ /kmol	13%	34%	6%	11%
Capacidad calorífica	J/(kmol K)	20%	11%	25%	5%

Las diferencias más grandes que se presentan en los valores obtenidos de las propiedades termodinámicas de los compuestos puros presentes en la producción de carvona y verbenona, se debe más que todo a los distintos métodos de estimación. Para la construcción de los algoritmos en Matlab_R2020a, se basó más que todo en la contribución de grupos, mientras que en Aspen Plus V10, se utilizó un modelo basado en los coeficientes de actividad.

Tabla 52. Comparación por porcentajes de error de los valores obtenidos en Matlab_R2020a y en Aspen Plus V10 de las propiedades termodinámicas de las mezclas en la producción de carvona y verbenona.

Densidad produccion de carvona	Densidad produccion de verbenona
5%	2%
Viscosidad de Mezcla en carvona	Viscosidad de mezcla en verbenona
61%	63%
Tensión S. produccion de carvona	Tensión S. produccion de verbenona
23%	26%
Capacidad cal. produccion de carvona	Capacidad cal. produccion de carvona
8%	6%
Temperatura crit. produccion de carvona	Temperatura crit. produccion de verbenona
2%	3%
Presion crit. produccion de carvona	Presion crit. produccion de verbenona
2%	6%
Volumen crit. produccion de carvona	Volumen crit. produccion de verbenona
10%	8%



UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA
1803

8. CONCLUSIONES

- Las correlaciones y ecuaciones utilizadas para la determinación de las propiedades resultaron acertadas para el tipo de sustancias y compuestos presentes en la producción de Carvona y Verbenona. Existen algunos porcentajes de error elevados al realizar la validación, esto debido principalmente a que Aspen solo arrojaba resultados con el modelo NRTL, el cual se basa en los coeficientes de actividad, mientras que los algoritmos construidos en Matlab fueron desarrollados a través de contribuciones de grupo, lo cual pudo producir inconvenientes al momento de realizar la simulación.
- Para sustancias y compuestos como los presentes en la producción de Carvona y Verbenona resulta adecuado el método de contribución de grupo, ya que de todas las correlaciones usadas, las que trabajaban con contribuciones de grupo eran las que arrojaban mejores resultados.
- En las propiedades de mezclas analizadas en aspen se puede observar que el patrón que siguen es muy parecido al de la acetona, y esto se debe a que se encuentra con 93 % en mol de la mezcla.
- Realizar escalamiento de las reacciones a nivel de laboratorio, que permitan obtener un volumen adecuado para determinar propiedades de las mezclas de reacción. Ya que con estos datos experimentales podremos definir los mejores modelos matemáticos que minimicen la función error.
- Comparar el comportamiento de las propiedades cuando es una mezcla simulada con la mezcla real del producto de reacción por medio de análisis experimentales.
- En todas las propiedades de mezcla para ambos procesos, exceptuando a la viscosidad, se observó que los resultados experimentales obtenidos en comparación con los arrojados por el software Aspen plus presentan poca variación.
- De los métodos usados para el cálculo de propiedades críticas, el que tiene más similitud con lo reportado en la literatura y lo estimado con el software aspen plus es el método de Joback.
- Las propiedades de los compuestos involucrados son poco estudiadas y esto se evidencia en la búsqueda bibliográfica.

9. ANEXOS

Anexo 1:

TABLE 6-5 Group Contribution Parameters for the Rùzicka-Domalski Method, Eq. (6-6.3)

	a_i	b_i	d_i	T range, K
Hydrocarbon Groups				
C—(3H,C)	3.8452	-0.33997	0.19489	80–490
C—(2H,2C)	2.7972	-0.054967	0.10679	80–490
C—(H,3C)	-0.42867	0.93805	0.0029498	85–385
C—(4C)	-2.9353	1.4255	-0.085271	145–395
=C—(2H)	4.1763	-0.47392	0.099928	90–355
=C—(H,C)	4.0749	-1.0735	0.21413	90–355
=C—(2C)	1.9570	-0.31938	0.11911	140–315
=C—(H,=C)	3.6968	-1.6037	0.55022	130–305
=C—(C,=C)	1.0679	-0.50952	0.33607	130–305
C—(2H,C,=C)	2.0268	0.20137	0.11624	90–355
C—(H,2C,=C)	-0.87558	0.82109	0.18415	110–300
C—(3C,=C)	-4.8006	2.6004	-0.040688	165–295
C—(2H,2=C)	1.4973	-0.46017	0.52861	130–300
Ct—(H)	9.1633	-4.6695	1.1400	150–275
Ct—(C)	1.4822	1.0770	-0.19489	150–285
=C=	3.0880	-0.62917	0.25779	140–315
Ct—(Cb)	12.377	-7.5742	1.3760	230–550
Cb—(H)	2.2609	-0.25000	0.12592	180–670
Cb—(C)	1.5070	-0.13366	0.011799	180–670
Cb—(=C)	-5.7020	5.8271	-1.2013	230–550
Cb—(Cb)	5.8685	-0.86054	-0.063611	295–670
C—(2H,C,Cb)	1.4142	0.56919	0.0053465	180–470
C—(H,2C,Cb)	-0.10495	1.0141	-0.071918	180–670
C—(3C,Cb)	1.2367	-1.3997	0.41385	220–295
C—(2H,2Cb)	-18.583	11.344	-1.4108	300–420
C—(H,3Cb)	-46.611	24.987	-3.0249	375–595
Cp—(Cp,2Cb)	-3.5572	2.8308	-0.39125	250–510
Cp—(2Cp,Cb)	-11.635	6.4068	-0.78182	370–510
Cp—(3Cp)	26.164	-11.353	1.2756	385–480
Halogen Groups				
C—(C,3F)	15.42300	-9.24640	2.86470	125–345
C—(2C,2F)	-8.95270	10.55000	-1.99860	125–345
C—(C,3Cl)	8.54300	2.69660	-0.42564	245–310
C—(H,C,2Cl)	10.88000	-0.35391	0.08488	180–355
C—(2H,C,Cl)	9.66630	-1.86010	0.41360	140–360
C—(H,2C,Cl)	-2.06000	5.32810	-0.82721	275–360
C—(2H,C,Br)	6.39440	-0.10298	0.19403	168–360
C—(H,2C,Br)	10.78400	-2.47540	0.33288	190–420
C—(2H,C,I)	0.03762	5.62040	-0.92054	245–340
C—(C,2Cl,F)	13.53200	-3.27940	0.80145	240–420
C—(C,Cl,2F)	7.22950	0.41759	0.15892	180–420
C—(C,Br,2F)	8.79560	-0.19165	0.24596	165–415
=C—(H,Cl)	7.15640	-0.84442	0.27199	120–300
=C—(2F)	7.66460	-2.07500	0.82003	120–240
=C—(2Cl)	9.32490	-1.24780	0.44241	155–300
=C—(Cl,F)	7.82040	-0.69005	0.19165	120–240
Cb—(F)	3.07940	0.46959	-0.00557	210–365
Cb—(Cl)	4.54790	0.22250	-0.00979	230–460
Cb—(Br)	2.28570	2.25730	-0.40942	245–370

TABLE 6-5 Group Contribution Parameters for the Růzicka-Domalski Method, Eq. (6-6.3)
(Continued)

	a_i	b_i	d_i	T range, K
Cb—(I)	2.90330	2.97630	-0.62960	250–320
C—(Cb,3F)	7.44770	0.92230	0.39346	210–365
C—(2H,Cb,Cl)	16.75200	-6.79380	1.25200	245–345
Nitrogen Groups				
C—(2H,C,N)	2.45550	1.04310	-0.24054	190–375
C—(H,2C,N)	2.63220	-2.01350	0.45109	240–370
C—(3C,N)	1.96300	-1.72350	0.31086	255–375
N—(2H,C)	8.27580	-0.18365	0.03527	185–455
N—(H,2C)	-0.10987	0.73024	0.89325	170–400
N—(3C)	4.59420	-2.21340	0.55316	160–360
N—(H,C,Cb)	0.49631	3.46170	-0.57161	240–380
N—(2C,Cb)	-0.23640	16.26000	-2.52580	285–390
Cb—(N)	-0.78169	1.50590	-0.25287	240–455
N—(2H,N)	6.80500	-0.72563	0.15634	215–465
N—(H,C,N)	1.14110	3.59810	-0.69350	205–300
N—(2C,N)	-1.05700	4.00380	-0.71494	205–300
N—(H,Cb,N)	-0.74531	3.62580	-0.53306	295–385
C—(2H,C,CN)	11.97600	-2.48860	0.52358	185–345
C—(3C,CN)	2.57740	3.52180	-0.58466	295–345
=C—(H,CN)	9.07890	-0.86929	0.32986	195–345
Cb—(CN)	1.93890	3.02690	-0.47276	265–480
C—(2H,C,NO2)	18.52000	-5.45680	1.05080	190–300
O—(C,NO2)	-2.01810	10.50500	-1.83980	180–350
Cb—(NO2)	15.27700	-4.40490	0.71161	280–415
N—(H,2Cb) (pyrrole)	-7.36620	6.36220	-0.68137	255–450
Nb—(2Cb)	0.84237	1.25560	-0.20336	210–395
Oxygen Groups				
O—(H,C)	12.95200	-10.14500	2.62610	155–505
O—(H,C) (diol)	5.23020	-1.51240	0.54075	195–475
O—(H,Cb)	-7.97680	8.10450	-0.87263	285–400
C—(2H,C,O)	1.45960	1.46570	-0.27140	135–505
C—(2H,Cb,O)	-35.12700	28.40900	-4.95930	260–460
C—(H,2C,O) (alcohol)	2.22090	-1.43500	0.69508	185–460
C—(H,2C,O) (ether,ester)	0.98790	0.39403	-0.01612	130–170
C—(3C,O) (alcohol)	-44.69000	31.76900	-4.87910	200–355
C—(3C,O) (ether, ester)	-3.31820	2.63170	-0.44354	170–310
O—(2C)	5.03120	-1.57180	0.37860	130–350
O—(C,Cb)	-22.52400	13.11500	-1.44210	320–350
O—(2Cb)	-4.57880	0.94150	0.31655	300–535
C—(2H,2O)	1.08520	1.54020	-0.31693	170–310
C—(2C,2O)	-12.95500	9.10270	-1.53670	275–335
Cb—(O)	-1.06860	3.52210	-0.79259	285–530
C—(2H,C,CO)	6.67820	-2.44730	0.47121	180–465
C—(H,2C,CO)	3.92380	-2.12100	0.49646	185–375
C—(3C,CO)	-2.26810	1.75580	-0.25674	225–360
CO—(H,C)	-3.82680	7.67190	-1.27110	180–430
CO—(H,=C)	-8.00240	3.63790	-0.15377	220–430
CO—(2C)	5.43750	0.72091	-0.18312	185–380
CO—(C,=C)	41.50700	-32.63200	6.03260	275–355

TABLE 6-5 Group Contribution Parameters for the Růzicka-Domalski Method, Eq. (6-6.3)
(Continued)

	a_i	b_i	d_i	T range, K
CO—(C,Cb)	-47.21100	24.36800	-2.82740	300–465
CO—(H,O)	13.11800	16.12000	-5.12730	280–340
CO—(C,O)	29.24600	3.42610	-2.89620	180–445
CO—(=C,O)	41.61500	-12.78900	0.53631	195–350
CO—(O,CO)	23.99000	6.25730	-3.24270	320–345
O—(C,CO)	-21.43400	-4.01640	3.05310	175–440
O—(H,CO)	-27.58700	-0.16485	2.74830	230–500
=C—(H,CO)	-9.01080	15.14800	-3.04360	195–355
=C—(C,CO)	-12.81800	15.99700	-3.05670	195–430
Cb—(CO)	12.15100	-1.67050	-0.12758	175–500
CO—(Cb,O)	16.58600	5.44910	-2.68490	175–500
Sulfur Groups				
C—(2H,C,S)	1.54560	0.88228	-0.08349	130–390
C—(H,2C,S)	-1.64300	2.30700	-0.31234	150–390
C—(3C,S)	-5.38250	4.50230	-0.72356	190–365
Cb—(S)	-4.45070	4.43240	-0.75674	260–375
S—(H,C)	10.99400	-3.21130	0.47368	130–380
S—(2C)	9.23060	-3.00870	0.45625	165–390
S—(C,S)	6.65900	-1.35570	0.17938	170–350
S—(2Cb) (thiophene)	3.84610	0.36718	-0.06131	205–345



UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

1803

Anexo 2

TABLE 6-6 Ring Strain Contributions (rsc) for the Růzicka-Domalski Method, Eq. (6-6.3)

	a_i	b_i	d_i	T Range, K
Hydrocarbons				
cyclopropane	4.4297	-4.3392	1.0222	155–240
cyclobutane	1.2313	-2.8988	0.75099	140–300
cyclopentane (unsub)	-0.33642	-2.8663	0.70123	180–300
cyclopentane (sub)	0.21983	-1.5118	0.23172	135–365
cyclohexane	-2.0097	-0.72656	0.14758	145–485
cycloheptane	-11.460	4.9507	-0.74754	270–300
cyclooctane	-4.1696	0.52991	-0.018423	295–320
spiropentane	5.9700	-3.7965	0.74612	175–310
cyclopentene	0.21433	-2.5214	0.63136	140–300
cyclohexene	-1.2086	-1.5041	0.42863	160–320
cycloheptene	-5.6817	1.5073	-0.19810	220–300
cyclooctene	-14.885	7.4878	-1.0879	260–330
cyclohexadiene	-8.9683	6.4959	-1.5272	170–300
cyclooctadiene	-7.2890	3.1119	-0.43040	205–320
cycloheptatriene	-8.7885	8.2530	-2.4573	200–310
cyclooctatetraene	-12.914	13.583	-4.0230	275–330
indan	-6.1414	3.5709	-0.48620	170–395
1H-indene	-3.6501	2.4707	-0.60531	280–375
tetrahydronaphthalene	-6.3861	2.6257	-0.19578	250–320
decahydronaphthalene	-6.8984	0.66846	-0.070012	235–485
hexahydroindan	-3.9271	-0.29239	0.048561	210–425
dodecahydrofluorene	-19.687	8.8265	-1.4031	315–485
tetradecahydrophenanthrene	-0.67632	-1.4753	-0.13087	315–485
hexadecahydropyrene	61.213	-30.927	3.2269	310–485
Nitrogen Compounds				
ethyleneimine	15.281	-2.3360	-0.13720	195–330
pyrrolidine	12.703	1.3109	-1.18130	170–400
piperidine	25.681	-7.0966	0.14304	265–370
Oxygen Compounds				
ethylene oxide	6.8459	-5.8759	1.2408	135–325
trimethylene oxide	-7.0148	7.3764	-2.1901	185–300
1,3-dioxolane	-2.3985	-0.48585	0.10253	175–300
furan	9.6704	-2.8138	0.11376	190–305
tetrahydrofuran	3.2842	-5.8260	1.2681	160–320
tetrahydropyran	-13.017	3.7416	-0.15622	295–325
Sulfur Compounds				
thiacyclobutane	-0.73127	-1.3426	0.40114	200–320
thiacyclopentane	-3.2899	0.38399	0.089358	170–390
thiacyclohexane	-12.766	5.2886	-0.59558	295–340

Anexo 3

TABLE 6-7 List of Equivalent Groups for the Růzicka-Domalski Method for C_{pL} (= placed between each equivalent group)

$C-(3H,C)=C-(3H,=C)=C-(3H,Ct)=C-(3H,Cb)$
 $C-(2H,C,Ct)=C-(2H,C,=C)$
 $Cb-(Ct)=Cb-(=C)$
 $=C-(H,Cb)=C-(H,=C)$
 $=C-(C,Cb)=C-(C,=C)$
 $C-(3H,C)=C-(3H,N)=C-(3H,O)=C-(3H,CO)=C-(3H,S)$
 $N-(2H,Cb)=N-(2H,C)$
 $S-(H,Cb)=S-(H,C)$
 $O-(H,Cb) \text{ (diol)}=O-(H,C) \text{ (diol)}$
 $CO-(H,Cb)=CO-(H,=C)$
 $C-(2H,=C,Cl)=C-(2H,C,Cl)$
 $C-(2H,Cb,N)=C-(2H,C,N)$
 $N-(C,2Cb)=N-(3C)$
 $C-(2H,=C,O)=C-(2H,Cb,O)$
 $S-(Cb,S)=S-(2C)$
 $S-(2Cb)=S-(2C)$



UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

1803

10. REFERENCIAS

Zábranský, M., & Růžička, V. (2004). Estimation of the Heat Capacities of Organic Liquids as a Function of Temperature Using Group Additivity: An Amendment. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 33(4), 1071-1081. <https://doi.org/10.1063/1.1797811>.

Rodríguez A. Jorge. ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICA Capitulo VIII.

Yinghua, L., Peisheng, M., & Ping, L. (2002). Estimation of liquid viscosity of pure compounds at different temperatures by a corresponding-states group-contribution method. *Fluid Phase Equilibria*, 198(1), 123-130. [https://doi.org/10.1016/s0378-3812\(01\)00760-9](https://doi.org/10.1016/s0378-3812(01)00760-9).

Becerra, J. (2017). Process design for ketone production from α -pinene and limonene over FePcCl₁₆-NH₂-SiO₂. Universidad de Antioquia, pp.75-101.

Becerra J. (2018). Thermodynamic Analysis of α -Pinene and Limonene Allylic Oxidation over a FePcCl₁₆-NH₂-SiO₂ Catalyst. *Chem. Eng. Technol.*

Cengel, Y. A., & Boles, M. A. (2001). *Thermodynamics: An engineering approach*. Boston: McGraw-Hill.

Moran, M. J., & Shapiro, H. N. (1998). *Fundamentals of engineering thermodynamics: SI version*. Chichester: John Wiley.

Smith, J. M., & Van, N. H. C. (1959). *Introduction to chemical engineering thermodynamics*. New York: McGraw-Hill.

Godoy Sandra, Rodríguez Néstor, Scenna Nicolás. (2008). *Propiedades Termodinámicas de Equilibrio. Determinación de estado de equilibrio de fases*. Universidad Tecnológica Nacional

Herrera Agamez, J. C. (2019). Determinación de propiedades termodinámicas involucradas en el proceso de producción de las cetonas alílicas verbenona y carvona. universidad de Antioquia. <http://bibliotecadigital.udea.edu.co>.

Grajales Lopera, D. L. (2016). Technical feasibility of carvone production from limonene or carveol using the catalytic system FePcCl₁₆-SBA15/TBHP. Universidad de Antioquia.