

# Algunos Métodos de Estimación para Paracoro

P

## NOTACIÓN

SÍMBOLO	DESCRIPCIÓN	UNIDADES
$M$	Peso molecular	g/mol
$\mathbb{P}$	Paracoro	$\text{g}^{1/4} \cdot \text{cm}^3 / \text{mol} \cdot \text{s}^{1/2}$
$\tilde{V}$	Volumen molar de líquido	$\text{cm}^3 / \text{mol}$
$\rho$	Densidad	$\text{g} / \text{cm}^3$
$\sigma$	Tensión superficial	dina/cm

## INTRODUCCIÓN

El paracoro (en inglés: **parachor**) fue originalmente empleado por Sugden (1924) relacionando la tensión superficial con las densidades molares de líquido y vapor. La definición equivalente del paracoro es:

$$\mathbb{P} \equiv \frac{M\sigma^{1/4}}{(\rho_L - \rho_V)}$$

Ya que la densidad de vapor suele ser despreciable comparada con la densidad del líquido, el paracoro se simplifica generalmente a:

$$\mathbb{P} = \tilde{V}\sigma^{1/4}$$

donde el volumen molar del líquido ( $\tilde{V}$  en  $\text{cm}^3 / \text{mol}$ ) y la tensión superficial ( $\sigma$  en dina/cm) son medidos a la misma temperatura.

En rangos moderados de temperatura, el paracoro es esencialmente constante. La Tabla 1 muestra valores experimentales del paracoro para varias sustancias.

Tabla 1. Valores experimentales del paracoro ( $\text{g}^{1/4} \cdot \text{cm}^3 / \text{mol} \cdot \text{s}^{1/2}$ )

sustancia	$\mathbb{P}$	sustancia	$\mathbb{P}$	sustancia	$\mathbb{P}$
<b>H<sub>2</sub>O</b>	<b>52.7</b>	n-C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	270.4	etilbenceno	284.3
CH <sub>4</sub>	72.6	n-C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	310.8	o-xileno	417.6
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	110.5	n-C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	351.2	m-xileno	412.3
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	100.4	ciclopentano	205.0	p-xileno	411.5
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	150.8	ciclohexano	241.7	CH <sub>3</sub> -CO-CH <sub>3</sub>	161.2
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	190.3	benceno	206.1	CHCl <sub>3</sub>	183.4
n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	231.5	tolueno	245.9	CCl <sub>4</sub>	219.7

El paracoro del agua fue calculado con base en los datos a 20 °C. Los demás valores están reportados en Escobedo y Mansoori (1996) que a su vez cita a Sugden (1924).

## PARACORO

### MÉTODO DE CONTRIBUCIÓN DE GRUPOS

El paracoro se puede estimar sumando los incrementos correspondientes a cada parte de la molécula ( $\Delta\mathbb{P}$ ). Al dividir la molécula, se debe usar los grupos más grandes posibles.

$$\mathbb{P} = \sum \Delta\mathbb{P}$$

Tabla 2. Contribuciones de grupos para el paracoro

GRUPO	$\Delta\mathbb{P}$
C	9.0
H	15.5
CH <sub>3</sub> -	55.0
(-CH <sub>2</sub> -) <sub>n</sub> 1 ≤ n ≤ 12	40.0n
(-CH <sub>2</sub> -) <sub>n</sub> n ≥ 13	40.3n

GRUPO	$\Delta\mathbb{P}$
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - \end{array}$ 1-metil-etil	133.3
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH} - \end{array}$ 1-metil-propil	171.9
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH}_2 - \end{array}$ 2-metil-propil	173.3
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH} - \end{array}$ 1-metil-butil	211.7
$\begin{array}{c} \text{C}_2\text{H}_5 \\   \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH} - \end{array}$ 1-etil-propil	209.5
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$ 1,1-dimetil-etil	170.4
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{C} - \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$ 1,1-dimetil-propil	207.5
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \\   \quad   \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH} - \end{array}$ 1,2-dimetil-propil	207.9
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \\   \quad   \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{C} - \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$ 1,1,2-trimetil-propil	243.5
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> - fenil	189.6
Doble enlace terminal	19.1
Doble enlace en posición 2,3	17.7
Doble enlace en posición 3,4 y siguientes	16.3
Doble enlace en anillo	19.1
Triple enlace	40.6
Cierre de anillo de 3 átomos	12.0
Cierre de anillo de 4 átomos	6.0
Cierre de anillo de 5 átomos	3.0
Cierre de anillo de 6 átomos	0.8
-OH	29.8
-O-	20.0
-CHO	66.0
-COOH	73.8
-COO-	63.8
-CN	64.5
-NH <sub>2</sub>	42.5
-NH-	30.0
-NO <sub>2</sub>	74.0
-NO <sub>3</sub>	93.0
-CO(NH <sub>2</sub> )	91.7
-CO- en cetona de 3 carbonos	51.3
-CO- en cetona de 4 carbonos	49.0
-CO- en cetona de 5 carbonos	47.5

GRUPO	$\Delta P$
-CO- en cetona de 6 carbonos	46.3
-CO- en cetona de 7 carbonos	45.3
-CO- en cetona de 8 carbonos	44.1
O (diferente de los casos anteriores)	20.0
N (diferente de los casos anteriores)	17.5
S	49.1
P	40.5
F	26.1
Cl	55.2
Br	68.0
I	90.3
Si (en silanos)	43.3
Si (en otros casos)	30.3
B	13.2
Al	34.9

#### FUENTES CONSULTADAS

Escobedo y Mansoori (1996). "Surface Tension Prediction for Pure Fluids". AICHE Journal, 42(5).

Perry (2004). "Manual del Ingeniero Químico". 7ª edición, McGraw-Hill.

Reid, Prausnitz y Poling (1987). "The Properties of Gases and Liquids". 4ª edición, McGraw-Hill.

Sugden (1924). "The Variation of Surface Tension with Temperature and some Related Functions". J. Chem. Soc., 125(32).

#### LA LETRA PEQUEÑA

EL ÚNICO PROPÓSITO DE ESTE DOCUMENTO ES SERVIR COMO RECURSO DIDÁCTICO; SU USO DEBE SER EXCLUSIVAMENTE ACADÉMICO. PARTES DE ESTE DOCUMENTO PUEDEN ESTAR SUJETAS A RESTRICCIONES POR DERECHOS DE AUTOR EN ALGUNOS PAÍSES.

ALGUNOS DE LOS MÉTODOS HAN SIDO ADAPTADOS PARA EMPLEAR CONSISTENTEMENTE SIMBOLOGÍA Y/O SISTEMA DE UNIDADES, PARA FACILITAR LA APLICACIÓN DE LOS MÉTODOS, O PARA CONCILIAR EN LO POSIBLE DISCREPANCIAS ENTRE LAS DIVERSAS FUENTES CONSULTADAS.

NO SE DA NINGUNA GARANTÍA, EXPLÍCITA O IMPLÍCITA, SOBRE LA EXACTITUD DE LA INFORMACIÓN CONTENIDA EN ESTE DOCUMENTO, POR LO QUE NO SE RECOMIENDA SU USO EN LA PREPARACIÓN DE DISEÑOS FINALES DE EQUIPOS INDUSTRIALES, PROCESOS QUÍMICOS, O SISTEMAS DE VIAJE A TRAVÉS DEL TIEMPO. EN ESTOS CASOS, SE RECOMIENDA CONSULTAR LAS FUENTES BIBLIOGRÁFICAS ORIGINALES.