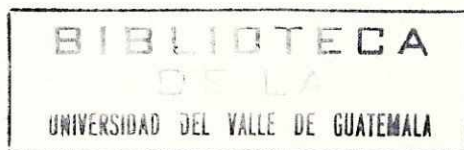


IMPLEMENTACIÓN DE PROGRAMAS QUE CALCULAN LAS
CAPACIDADES CALORÍFICAS C_p Y C_v . SU COCIENTE γ
Y LOS CAMBIOS DE ENTALPÍA Y DE ENERGÍA INTERNA

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ciencias y Humanidades

Departamento de Ingeniería Química



IMPLEMENTACIÓN DE PROGRAMAS QUE CALCULAN LAS
CAPACIDADES CALORÍFICAS C_p Y C_v . SU COCIENTE Y
Y LOS CAMBIOS DE ENTALPÍA Y DE ENERGÍA INTERNA

EDGAR GUSTAVO PELLECEER GUZMÁN

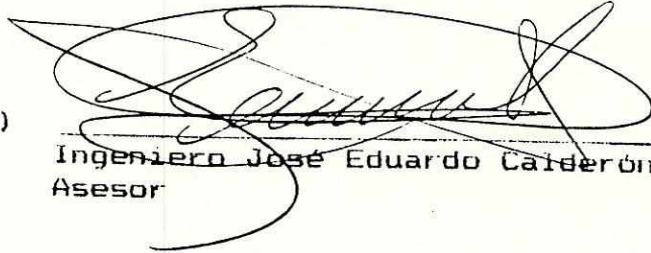
Trabajo de investigación presentado para optar
al grado académico de
Licenciado en Ingeniería Química

Guatemala

1995

Vo. Bo.:

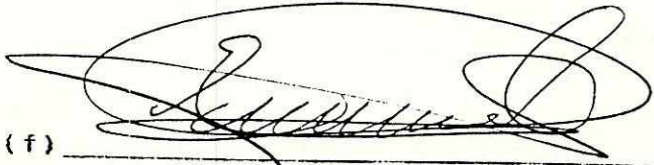
(f)



Ingeniero José Eduardo Calderón
Asesor

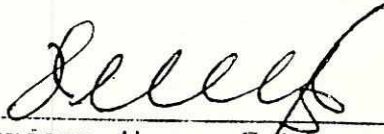
Tribunal:

(f)




Ingeniero José Eduardo Calderón

(f)



Ingeniero Henry Cukier

(f)



Ingeniero Federico Salazar

Fecha de aprobación: 13 de Julio de 1995.

CONTENIDO

	páginas
RESUMEN	ix
I. INTRODUCCIÓN	1
II. ANTECEDENTES	5
A. Capacidad Calorífica	5
B. Ecuaciones para calcular Capacidades Caloríficas	9
C. Ecuaciones que involucren a C_p y a C_v	10
D. Capacidad Calorífica Media	12
E. Cociente entre C_p y C_v (γ)	13
F. Implementación de los programas	14
G. Cómo usar los programas	21
III. JUSTIFICACIÓN	25
IV. OBJETIVOS	29
A. Objetivos generales	29
B. Objetivos específicos	29
V. PROBLEMA A RESOLVER	31
VI. METODOLOGÍA	33
A. Pasos a seguir en el desarrollo del trabajo	33
1. Transformar las unidades de los datos recopilados a unidades del Sistema Internacional	33
2. Cálculo de masas moleculares	33
3. Nomenclatura de los compuestos	33
4. Clasificación de compuestos	33
5. Ordenamiento de compuestos en forma alfabética	34

	páginas
6. Ordenamiento de las constantes en vectores	34
7. Alimentación de las constantes al paquete	34
8. Definición de las ecuaciones necesarias	35
9. Especificación de las unidades	35
10. Formateo de gráficas y respuestas	35
11. Revisión del funcionamiento de los programas	35
12. Elaboración de instrucciones para el usuario	35
13. Implementación de las instrucciones a cada programa	36
14. Revisión exhaustiva de los programas	37
B. Materiales	37
1. Paquetes de computación utilizados	37
2. Equipo auxiliar	37
VII. RESULTADOS	39
VIII. DISCUSIÓN DE RESULTADOS	53
IX. CONCLUSIONES	57
X. RECOMENDACIONES	59
XI. BIBLIOGRAFÍA	61
APÉNDICES	63
A. Apéndice I gases inorgánicos	64
B. Apéndice II gases orgánicos	66
C. Apéndice III líquidos inorgánicos	68
D. Apéndice IV. líquidos orgánicos	70
E. Apéndice V. sólidos orgánicos	72

	páginas
F. Apéndice VI elementos sólidos	74
G. Apéndice VII óxidos y anhídridos	76
H. Apéndice VIII sólidos A-B	78
I. Apéndice IX sólidos C	80
J. Apéndice X sólidos D-P	82
K. Apéndice XI sólidos S	84
L. Apéndice XII sólidos S-Y	86
M. Apéndice XIII calor	88
1. Instrucciones para el uso de los programas	88

RESUMEN

El presente trabajo describe la manera de implementar 12 programas para computadora. Los programas se realizaron en el paquete Math Cad® y se utilizan para calcular Calores Específicos (o Capacidades Caloríficas) de una amplia variedad de sustancias. Entre las sustancias incluidas están compuestos orgánicos e inorgánicos en los tres estados de la materia (gas, líquido y sólido). Además es posible calcular los cambios de Entalpía y de Energía Interna.

Para realizar este trabajo primero se recopiló toda la información disponible acerca de las capacidades Caloríficas a Presión Constante (C_p) como función de la temperatura. Partiendo de dicha información, se utilizaron ecuaciones cúbicas para calcular las Capacidades Caloríficas a Volumen Constante (C_v). Para obtener los Calores Específicos Medios (C_{pm} y C_{vm}), se usaron ecuaciones de la forma:

$$C_{pm} = \frac{\int_{T_1}^{T_2} C_p dT}{T_2 - T_1}$$

Por último, para cambios de Entalpía (ΔH) y de Energía Interna (ΔU) se emplearon ecuaciones lineales, por ejemplo:

$$\Delta H = C_{pm}(T_2 - T_1)$$

La información recabada se alimentó, junto con las ecuaciones necesarias, al paquete Math Cad®. Se crearon instrucciones amplias y claras para hacer que cada programa fuera comprensible y su uso fuera sencillo. Una vez alimentada toda la información (constantes y ecuaciones), se implementaron instrucciones de uso a cada programa. Al final de este

procedimiento se estudiaron cuidadosamente los programas.

Se revisaron todas las constantes, las ecuaciones, las instrucciones de uso, los resultados numéricos y el funcionamiento de los programas. Durante el proceso de revisión fueron corregidos los errores detectados. Se efectuaron varias revisiones de los programas para asegurar que éstos ya no tuvieran errores.

I. INTRODUCCIÓN

El presente trabajo consiste en implementar doce programas para computadora que calculan:

1. Capacidades caloríficas (calores específicos) a presión constante (C_p).
2. Capacidades caloríficas (calores específicos) a volumen constante (C_v).
3. El cociente entre C_p y C_v ($C_p/C_v = \gamma$).
4. Capacidades caloríficas (calores específicos) medias a presión o volumen constante (C_{pm} o C_{vm}).
5. Cambios de Entalpía (ΔH).
6. Cambios de Energía Interna (ΔU).

Los programas se realizaron en el paquete Math Cad[®], versión 2.50. Se crearon dos programas que calculan las capacidades caloríficas de gases. El primero es $C_{pgasorg.med}$ y contiene los gases orgánicos. El segundo es $C_{pgasin.med}$ e incluye los gases inorgánicos. Otros dos programas calculan el C_p para los líquidos: $C_{pliqin.med}$ para los líquidos inorgánicos y $C_{pliqorg.med}$ para líquidos orgánicos. También se cuenta con ocho programas que calculan los calores específicos para sólidos. Estos están distribuidos así:

1. $C_{psolorg.med}$ sólidos orgánicos.
2. $Elemente.med$ elementos orgánicos.
3. $Oxidos.med$ incluye óxidos, anhídridos, silicatos y aluminatos.
4. $Sol_A-B.med$ sólidos cuyos nombres están en orden alfabético de la A a la B.
5. $Sol_C.med$ sólidos cuyo nombre empieza con C.
6. $Sol_D-P.med$ sólidos cuyos nombres están en orden alfabético desde la D hasta la P.
7. $Sol_S.med$ sólidos cuyo nombre empieza con S, desde selenuros hasta sulfatos.
8. $Sol_S_Y.med$ sólidos desde sulfuros hasta yoduros.

Información detallada sobre el contenido de cada programa se encuentra en los apéndices, página 64 y siguientes. En cada programa se calculan además, las Capacidades Caloríficas a volumen constante, el cociente entre C_p y C_v (γ), las Capacidades Caloríficas Medias y los cambios de Energía Interna y de Entalpía.

Las capacidades caloríficas como función de la temperatura se calculan a partir de ecuaciones cúbicas. Lo único que debe hacerse para obtener las capacidades caloríficas es seleccionar un compuesto e introducir la temperatura. El programa proporciona el C_p , el C_v y la relación C_p/C_v para la sustancia escogida a la temperatura especificada. También es posible que el programa calcule las Capacidades Caloríficas Medias y los cambios de Entalpía y de Energía Interna si se especifica un rango de temperaturas en vez de especificar una temperatura puntual. Además, todas las magnitudes calculadas se reportan en tres sistemas de unidades: Sistema Internacional, Sistema MKS y Sistema Inglés. Los resultados se obtienen rápidamente y se presentan de forma ordenada y clara.

Para las magnitudes C_{pm} , C_{vm} , ΔH y ΔU , se muestran gráficas contra la temperatura. De estas gráficas, la más importante es la de C_{pm} contra la temperatura. Esto es debido a que en los cálculos termodinámicos se requiere que C_{pm} no varíe mucho con la temperatura. Con la pendiente de la gráfica de C_{pm} contra T , puede observarse qué tanto varía C_{pm} con el cambio de temperatura. Si la variación de C_{pm} es pequeña (pendiente pequeña), el error que se introduce en los cálculos es mínimo y viceversa. Entonces el usuario puede darse cuenta de qué tanto error puede introducir en sus cálculos si usa un C_{pm} dado, sólo con ver la gráfica.

Para garantizar que los programas realmente fueran fáciles de usar, se le pidió a un grupo de personas que intentaran usarlos. Este grupo lo integraron personas que sabían qué es

capacidad calorífica y personas ajenas. Al principio se vio que era necesario agregar instrucciones que dejaran en claro el procedimiento a seguir. Una vez que se agregaron las instrucciones suficientes a los programas, ya no hubo dificultad al trabajar con ellos.

II ANTECEDENTES

A. CAPACIDAD CALORIFICA

Cuando se agrega calor a un sistema su temperatura aumenta. Para una transferencia de calor infinitesimal, el incremento de temperatura es proporcional a la cantidad de calor agregado:

$$dT \propto dq \text{ o } dT = cte \cdot dq$$

donde el valor de la constante depende de la composición y de la temperatura del sistema. Es más conveniente escribir la ecuación anterior así:

$$dq = C dT \quad (a)$$

La constante C recibe el nombre de Capacidad Calorífica o Calor Específico del sistema (I I O2).

Cuando la constante C es numéricamente grande, la transferencia de una cantidad dada de calor hacia un sistema, da como resultado sólo un pequeño incremento en la temperatura (el sistema presenta una capacidad elevada para el calor). Cuando por el contrario C es pequeña, la misma cantidad de calor transferido causa un gran incremento en la temperatura (I I I I).

Es más indicado hablar de la capacidad calorífica de cierta cantidad de material. Generalmente esta cantidad de material corresponde a un mol. La Capacidad Calorífica de un mol de sustancia se simboliza C_m y se dice que es la Capacidad Calorífica molar. El tamaño de C depende del tamaño del sistema; para conseguir un cierto dT de un cuerpo grande se necesita más calor que para conseguir el mismo dT de uno pequeño (I I O4).

La Capacidad Calorífica también depende de las condiciones bajo las cuales se transfiere calor al sistema. Si el sistema tiene un volumen constante, la cantidad de calor necesaria para elevar la temperatura un dT es una cantidad igual a $C_v dT$ (el subíndice v denota la restricción de volumen constante). Si al sistema le está permitido cambiar de volumen con la transferencia de calor, la cantidad requerida para obtener un dT es $C_p dT$ (el subíndice p denota la restricción de presión constante). En el segundo caso, el sistema ha tenido que cambiar de tamaño, por lo cual ha efectuado un trabajo. Por esta razón C_p es distinto de C_v . C_p considera el trabajo hecho por el sistema, mientras que C_v no. En un proceso a presión constante, la energía agregada al sistema se transforma en un trabajo de expansión y también se usa para elevar la temperatura del sistema. Es por ello que se necesita más energía para provocar un incremento dT en el sistema. Por lo anterior, C_p será siempre mayor que C_v (11.03).

Las capacidades caloríficas a presión y volumen constante son un caso especial de la ecuación (a). Si se desea una expresión para estas capacidades, basta con sustituir C por C_v o C_p :

$$C_v = dq/dT \quad \text{y} \quad C_p = dq/dT$$

Generalizando estas definiciones:

$$C_v = \left[\frac{\partial q}{\partial T} \right]_v \quad (b)$$

$$C_p = \left[\frac{\partial q}{\partial T} \right]_p \quad (c)$$

C_v se ha definido en términos del calor entregado a un cuerpo, pero también podemos

relacionarlo con el incremento en Energía Interna (1102)

La Energía Interna (U), "se refiere a la energía de las moléculas constitutivas de la sustancia

que se encuentran en movimiento continuo y poseen energía cinética de traslación y, a

excepción de las moléculas monoatómicas, también cuentan con energía cinética de rotación y

vibración interna. La adición de calor a una sustancia aumenta esta actividad molecular, por lo

que causa un incremento en su Energía Interna" (1112)

Dado que el calor es transferido a volumen constante, no se realiza trabajo. Concluímos que

el cambio de Energía Interna (dU) es igual a la cantidad de calor transferido: $dU = dq$. Entonces

la ecuación (b) se convierte en:

$$C_v = \left[\frac{\partial U}{\partial T} \right]_v$$

(d)

(1102)

Ahora, para C_p tenemos que el calor es transferido a presión constante. Entonces el trabajo

realizado será igual a $p dV$ (esto es por la restricción de presión constante). Entonces, el cambio

de Entalpía (dH) será igual al trabajo realizado a presión constante ($p dV$), más el cambio de

Energía Interna (dU): $dH = dU + p dV$. Esta expresión surge de la definición explícita de Entalpía:

$H = U + pV$. Al derivar la ecuación anterior bajo la restricción de presión constante, entonces

tenemos: $dH = dU + p dV$. A dH podemos identificarla con la cantidad de calor transferido al

sistema a presión constante: $dH = (dq)_p$. Entonces la ecuación (c) se convierte en:

$$C_p = \left[\frac{\partial H}{\partial T} \right]_p$$

(e)

Las ecuaciones (d) y (e) son las definiciones generales de las capacidades caloríficas (11.02).

Para un proceso mecánicamente reversible a volumen constante, la ecuación (e) puede escribirse:

$$dU = C_v dT \quad (\text{volumen constante})$$

La integración entre T_1 , T_2 y U_1 , U_2 nos da:

$$U_2 - U_1 = \Delta U = \int_{T_1}^{T_2} C_v dT \quad (f)$$

Las cantidades C_v , U y T son todas funciones de estado, es decir, no dependen de la trayectoria del proceso. Entonces la ecuación (f) puede aplicarse cuando $V_1 = V_2$, sin importar que las condiciones varíen durante el proceso. Para un proceso a volumen estrictamente constante, mecánicamente reversible, $q = n\Delta U$. Combinando esta expresión con la ecuación (f) tenemos:

$$q = n\Delta U = n \int_{T_1}^{T_2} C_v dT \quad (g)$$

Siguiendo el procedimiento anterior, para un proceso a presión constante, la ecuación (e) se escribe:

$$dH = C_p dT \quad (\text{presión constante})$$

de donde:

$$H_2 - H_1 = \Delta H = \int_{T_1}^{T_2} C_p dT \quad (h)$$

Como en el caso anterior, las cantidades H , C_p y T son funciones de estado. Esto nos dice que si $p_1 = p_2$, la ecuación (h) se puede aplicar, esto sin importar que la presión varíe a lo largo del proceso. En un proceso a presión estrictamente constante se cumple que $q = n\Delta H$. Combinando este resultado con la ecuación (h) tenemos:

$$q = n\Delta H = n \int_{T_1}^{T_2} C_p dT \quad (i)$$

(11.08)

B. ECUACIONES PARA CALCULAR CAPACIDADES CALORIFICAS

Con frecuencia es necesario evaluar las ecuaciones (h) o la (i), pero en especial la última, que representa la principal aplicación directa en ingeniería: la transferencia de calor en estado estable. Es necesario entonces que las capacidades caloríficas se expresen como una ecuación. Las capacidades caloríficas difieren de una sustancia a otra, y si bien son función de la temperatura, son independientes de la presión. Se hace uso de este hecho para representar la dependencia respecto de la temperatura, como una ecuación cúbica:

$$C_p = w + xT + yT^2 + zT^3 \quad (j)$$

o de la forma:

$$C_p = a + bT + cT^{-2} \quad (k)$$

donde w , x , y y z , así como a , b y c son constantes que caracterizan a un compuesto en particular.

Dado que las ecuaciones anteriores son similares, pueden combinarse dando lugar a una sola expresión:

$$C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^{-2} \quad (1)$$

Una expresión de este tipo es susceptible de integración, pudiendo llevarse a la práctica las ecuaciones (j) a la (i) (11.12).

La mayor parte de ecuaciones para capacidad calorífica de gases, líquidos y sólidos son empíricas. Estas ecuaciones son válidas sólo dentro de rangos de temperatura moderados. Debe hacerse notar que la capacidad calorífica es una función continua únicamente en la región comprendida entre las transiciones de fase. En consecuencia, no es posible obtener una ecuación de capacidad calorífica que cubra desde el cero absoluto hasta una temperatura elevada (11.12).

C. ECUACIONES QUE INVOLUCRAN A C_p Y A C_v

Como se mencionó con anterioridad, debido a que C_p involucra el trabajo por expansión o compresión, esta es siempre numéricamente mayor a C_v . Esta diferencia es mayor para gases que para líquidos o sólidos, pues los últimos dos apenas cambian su volumen cuando son calentados o enfriados de temperatura. Es por ello que efectúan poco trabajo. La diferencia $C_p - C_v$ puede calcularse para un gas ideal debido a que la conexión entre la Entalpía y la Energía interna depende sólo de la temperatura:

$$H = U + pV = U + nRT$$

al diferenciar esta expresión:

$$dH = dU + nRdT$$

ahora $dH/dT = C_p$ y $dU/dT = C_v$, entonces:

$$C_p - C_v = nR \quad (m)$$

La expresión anterior se debe aplicar únicamente para gases ideales (1106).

Se puede generalizar la ecuación (m) con la ayuda de dos cantidades que aparecen en la siguiente expresión:

$$C_p - C_v = (\beta^2/k)TV \quad (n)$$

donde β es el coeficiente de expansión isobárica (en $1/K$) y k es la compresibilidad isotérmica (en $1/atm$). Esta es una expresión termodinámica aplicable universalmente. A β se le define como:

$$\beta = (1/V)(\partial V/\partial T)_P$$

y la compresibilidad isotérmica se define como:

$$k = -(1/V)(\partial V/\partial P)_T$$

(1108).

Tanto β como k se encuentran comúnmente tabulados en la literatura para líquidos. Una idealización para los líquidos conocida como el modelo del fluido incompresible sugiere que $\beta = k = 0$. En la realidad ningún fluido es totalmente incompresible, pero el modelo es útil para fines prácticos. Con este modelo se puede explicar con aproximación el comportamiento de los

líquidos. Para fluidos reales, β y k son funciones débiles de la temperatura y de la presión. Para cambios pequeños de T y p , se incurre en un error despreciable si se consideran β y k como constantes. Ya teniendo la información de β y k puede calcularse una C_v a partir de la C_p o viceversa (11.05).

D. CAPACIDAD CALORIFICA MEDIA

Se puede definir una Capacidad Calorífica Media la cual si se conoce es una herramienta muy útil para calcular cambios de Entalpía o de Energía Interna. La Capacidad Calorífica Media a Presión Constante se define como el cambio de Entalpía dividido por el gradiente de temperatura que originó dicho cambio, esto es:

$$C_{pm} = \frac{H_2 - H_1}{T_2 - T_1} \quad (a)$$

Entonces es posible calcular cambios de Entalpía si se cuenta con el dato de C_{pm} . Dado que C_p puede expresarse como una función de la temperatura, entonces C_{pm} puede calcularse así:

$$C_{pm} = \frac{\int_{T_1}^{T_2} C_p dT}{T_2 - T_1} \quad (a)$$

Análogamente, es posible calcular cambios de Energía Interna si se cuenta con una Capacidad Calorífica Media a Volumen Constante:

$$C_{vm} = \frac{U_2 - U_1}{T_2 - T_1} \quad (b)$$

Y la Capacidad Calorífica Media a Volumen Constante sería:

$$C_{vm} = \frac{\int_{T1}^{T2} C_v dT}{T2 - T1} \quad (g)$$

(1108).

E. COCIENTE ENTRE C_p Y C_v (γ)

El cociente entre capacidades caloríficas C_p/C_v se designa como γ . Esta cantidad es indispensable para cálculos en procesos isentrópicos. Los procesos isentrópicos son aquellos procesos adiabáticos (en que el sistema no cambia calor con los alrededores) e irreversibles. En estos procesos la Entropía del sistema se mantiene constante ($\Delta S = 0$). La Entropía (S), en forma cualitativa, es una medida del desorden de un sistema. A mayor desorden, mayor Entropía y viceversa. Los procesos isentrópicos se describen con las expresiones siguientes:

$$p_1 V_1^\gamma = p_2 V_2^\gamma = p V^\gamma = \text{cte.} \quad (x)$$

$$(T_2/T_1) = (V_1/V_2)^{\gamma-1} = (p_2/p_1)^{(\gamma-1)/\gamma} \quad (z)$$

Dado que C_p siempre es mayor que C_v , γ será mayor que la unidad. Puede tomarse un γ de 1.67 para gases monoatómicos, de 1.4 aproximadamente para gases diatómicos y de 1.3 para gases poliatómicos simples (CO_2 , SO_2 , NH_3 , CH_4 y otros) (1102).

El trabajo efectuado en un proceso isentrópico puede calcularse de la siguiente manera:

$$W = -C_v T = \frac{-RT}{\gamma-1} = \frac{p_1 V_1 - p_2 V_2}{\gamma-1} \quad (t)$$

o cuando se desconoce V_2 :

$$W = \frac{p_1 V_1 \left[1 - \left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} \right]}{\gamma-1} = \frac{RT_1 \left[1 - \left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} \right]}{\gamma-1} \quad (u)$$

Con las expresiones anteriores se puede predecir la temperatura de un gas que se ha expandido (o contraído) reversible y adiabáticamente desde un volumen V_1 y una temperatura T_1 , hasta un volumen V_2 . Se puede calcular también la presión final que alcanzó el sistema. Además, es posible calcular el trabajo efectuado por el gas (11.12).

F. IMPLEMENTACION DE LOS PROGRAMAS

El paquete Math Cad[®] es una herramienta muy útil para realizar cálculos complejos. Por ejemplo, es posible efectuar integraciones numéricas, sumatorias, resolver ecuaciones con una variable, efectuar iteraciones, etc. (11.10).

Para resolver una ecuación se debe hacer lo siguiente:

- Definir las constantes de la ecuación.
- Especificar la ecuación.

Por ejemplo, para la ecuación (u) (página 9) de capacidad calorífica a presión constante: supongamos que $a = 6.132$, $b = 1.952 \times 10^{-3}$ y $c = -1.299 \times 10^5$, entonces se alimentan los valores al paquete así:

$$a = 6.132$$

$$b = 1.952 \times 10^{-3}$$

$$c = -1.299 \times 10^5$$

Si la temperatura fuera 300 Kelvin:

$$T= 300$$

Ahora se define la ecuación:

$$C_p = a + bT + cT^{-2}$$

Para obtener el valor de C_p , simplemente se escribe:

$$C_p =$$

y el paquete procesará la información y brindará el resultado. Para este caso $C_p = 5.2737$ (11.10).

Es posible que el paquete muestre las unidades en las cuales se expresa la respuesta. Para ello se deben especificar las unidades de las constantes. En el mismo ejemplo anterior, se tendría que especificar las constantes como sigue:

$$a = 6.132 \text{ J/(molK)}$$

$$b = 1.952 \times 10^{-3} \text{ J/(molK}^2\text{)}$$

$$c = -1.299 \times 10^5 \text{ JK/mol}$$

$$T = 300 \text{ K}$$

Se define la misma ecuación para el C_p y al teclear $C_p =$ tenemos:

$$C_p = 5.2737 \text{ J/(molK)}$$

(11.09 y 11.10).

En el caso de que se deseara saber C_p para un grupo de compuestos, se necesitarían más constantes. Estas constantes pueden arreglarse en vectores. Por ejemplo para cinco compuestos:

$$a_1 = 6.132$$

$$a_2 = -0.206$$

$$a_3 = 2.734$$

$$a_4 = -3.876$$

$$a_5 = 3.518$$

Entonces se crea un vector llamado a , por ejemplo, y en él se ordenan las constantes:

$$a = \begin{bmatrix} 6.132 \\ -0.206 \\ 2.734 \\ -3.876 \\ 3.518 \end{bmatrix}$$

Si se desea especificar las unidades de a , se multiplica todo el vector por las unidades requeridas:

$$a = \begin{bmatrix} 6.132 \\ -0.206 \\ 2.734 \\ -3.876 \\ 3.518 \end{bmatrix} \text{ *J/(molK)}$$

Se procede de la misma forma para las constantes b_i y c_i , creando vectores b y c , respectivamente. Como el C_p varía con T y con i , se define como función de ambas así:

$$C_p(i,T) = a_i + b_i T + c_i T^{-2}$$

Se hace necesario aclarar cuál es el compuesto 3 ó el 5, por ejemplo. Para ello se construye una tabla que contenga esa información:

Tabla 1.1
Gases Disponibles

1 Compuesto	Fórmula	Rango de Temperaturas (Kelvin)
1 Acetileno	C_2H_2	298 - 1500
2 Benceno	C_6H_6	298 - 1500
3 1,3-Butadieno	C_4H_6	298 - 1500
4 Ciclohexano	C_6H_{12}	298 - 1500
5 Etanol	C_2H_6O	298 - 1500

Gas= 1

Cuando se requiera saber el C_p de un compuesto sólo debe cambiarse la definición de 'Gas' que aparece al final de la Tabla 1.1. Por ejemplo para el Ciclohexano debe definirse a 'Gas' como cuatro. El programa calculará el C_p para el Ciclohexano y nada más.

Luego de la definición de Gas aparecen indicaciones de cómo cambiar dicha definición. En seguida el programa da instrucciones para calcular las cantidades disponibles, ya sea C_p , C_v y γ o C_{pm} , C_{vm} , ΔH y ΔU (Ver ejemplo en la página 42, sección de Resultados).

Si se necesita saber C_p , C_v y γ , deberá definirse una temperatura puntual para el cálculo. Las instrucciones de cómo cambiar la temperatura aparecen luego de la definición de temperatura. Además, el programa muestra el rango de temperaturas en el cuál el cálculo será válido (ver ejemplo en la página 42). Fuera del rango especificada los resultados serán muy inciertos.

Nótese que también en la Tabla I.1 anterior aparece listado el rango de temperaturas dentro del cual son válidos los resultados. Esto es para advertir desde un principio al usuario de que el programa no proporcionará resultados confiables fuera del rango mostrado. Cada compuesto tiene un rango de temperaturas diferente (vea ejemplo en la página 41).

Ya teniendo C_p podemos calcular C_v partiendo de la ecuación (m) para gases ideales, o de la ecuación (n) si se conocen β y k (página 11). En el primer caso es suficiente con definir R ($R=8.3143/\text{molK}$) por ejemplo y especificar la expresión para C_v :

$$C_v(T) = C_p(T) - R$$

Para el caso general que involucre la ecuación (n), debe construirse un vector β con los coeficientes de expansión, un vector k para las compresibilidades y un vector V para los volúmenes molares. Luego se define la expresión para C_v :

$$C_v(T) = C_p(T) + \beta^2 TV_i/k_i$$

Como antes, si se desea obtener C_v para el Ciclohexano se define C_{us} como cuatro y los resultados se reportan solamente para dicho compuesto.

En este punto es sencillo calcular la relación entre C_p y C_v . Definamos la relación de esta manera:

$$\gamma_1 = PC(T)/C_v(T)$$

En el caso que se decida calcular C_{pm} , C_{vm} , ΔH y ΔU , se deberá especificar un rango de temperaturas (ver ejemplo, página 44). Al igual que en el caso anterior, hay instrucciones para cambiar las temperaturas T_1 y T_2 y también se muestra el rango de temperaturas dentro del

cual los cálculos tendrán validez.

Para calcular ΔH , primero se define C_{pm} por medio de la ecuación (c):

$$C_{pm}(i, T1, T2) = \frac{\int_{T1}^{T2} C_p(i, T) dT}{T2 - T1}$$

Luego con la ecuación (b) arreglada se define ΔH :

$$\Delta H(i, T1, T2) = C_{pm}(i, T1, T2)(T2 - T1)$$

Análogamente, para calcular ΔU , se define C_{vm} :

$$C_{vm}(i, T1, T2) = \frac{\int_{T1}^{T2} C_v(i, T) dT}{T2 - T1}$$

y luego se define ΔU :

$$\Delta U(i, T1, T2) = C_{vm}(i, T1, T2)(T2 - T1)$$

Para hacer las gráficas, se hace uso de la función @ (arroba), con la cual aparece el cuadro de gráfica. En este cuadro se define qué magnitud va en qué eje coordenado. Por último se elabora el formato del tamaño de la gráfica (ver ejemplo de las gráficas en la página 46).

En resumen, primero se crean los vectores para las constantes a , b , c , k , β , y V . El siguiente paso es definir i (número del compuesto) y la temperatura (o el rango de temperaturas). Por

último se definen todas las ecuaciones para C_p , C_v , C_{pm} , C_{vm} , γ , ΔH y ΔU y se construyen las gráficas. Los resultados se escriben a continuación de todas las ecuaciones (ver ejemplo, páginas 40 a la 52).

El proceso descrito en las páginas anteriores se usó para implementar los doce programas. Los dos primeros calculan las capacidades caloríficas para gases, el tercero y el cuarto son para líquidos y los últimos ocho para sólidos (elementos, óxidos, oxisales, sales de halógenos, sólidos orgánicos y otros). Se hacen doce programas por limitaciones de memoria del paquete Math Cad® y por comodidad. Por comodidad, ya que es más fácil buscar en una lista de pocos compuestos (40 ó 50 por ejemplo) y no en una de muchos (100 o más). Además, dicho paquete pueda crear vectores con cien filas máximo. El número de compuestos disponibles es casi de 700, por lo cual se decidió la implementación de doce programas independientes.

A veces resulta útil conocer la capacidad calorífica en otro sistema de unidades. Se pierde tiempo haciendo las conversiones, pues a menudo no se cuenta con los equivalentes entre un sistema y otro. El paquete Math Cad® realiza conversiones de unidades in situ. Puede especificarse entonces que las respuestas se presenten en tres sistemas de unidades: Internacional, MKS o Inglés. Por ejemplo los resultados para el C_p de un compuesto X se reportará así:

$$C_p(T) = 5.27 \text{ J/(K} \times \text{mol)} \quad (\text{SI})$$

$$C_p(T) = 1.26 \text{ kCal/}^\circ\text{C} \times \text{Kgmol)} \quad (\text{MKS})$$

$$C_p(T) = 0.32 \text{ BTU/(}^\circ\text{R} \times \text{lbmol)} \quad (\text{Inglés})$$

Es también conveniente saber la capacidad calorífica en términos de gramos, kilogramos o libras y no en moles. Para obtener el C_p por unidad de masa se divide el C_p molar por la masa molecular del compuesto:

$$CP = C_p/M$$

donde CP es la capacidad calorífica en $J/(g \cdot K)$ y M es la masa molecular en g/mol. Para que el programa brindara tanto el C_p molar como el CP, debió definirse un vector con las masas moleculares. Este vector se nombró M. Luego se definió CP:

$$CP(i,T) = C_p(i,T)/M_i$$

Esta última magnitud también se reporta en los tres sistemas de unidades antes mencionados.

G. COMO USAR LOS PROGRAMAS

1. Para que los programas corran adecuadamente, se debe cumplir con lo siguiente: La versión del Math Cad[®] que se utilice debe ser 2.50 o superior, la computadora debe tener un procesador 80386 o superior, con velocidad mínima de 20 MHz y con memoria RAM de 2 MB o más.
2. Si su computadora no tiene disco duro, introduzca el diskette de DOS en el drive A (unidad de diskette A). El lado de la etiqueta debe estar hacia arriba. Si su diskette es de 5¼", empújelo dentro del drive hasta oír un clic y cierre la compuerta. Si es de 3¼", basterá con empujarlo hasta oír el clic (1107).
3. Encienda la computadora y el monitor. Espere a que la computadora revise los sistemas. Ingrese la fecha y la hora correctas (1107).
4. Si su computadora posee disco duro, enciéndala, encienda el monitor y espere a que revise los sistemas.

5. Completados los primeros pasos, la computadora presentará el comando prompt:
- A\> (su computadora no tiene disco duro), o
 - C\> (su computadora posee disco duro) (11.07).
6. Sustituya el diskette de DOS por el de Math Cad[®], teclee MCAD y oprima la tecla [ENTER] (11.01 y 11.10).
7. Si su computadora tiene disco duro y tiene el paquete Math Cad[®] instalado en él, cámbiese al directorio que contenga el Math Cad[®], teclee MCAD y presione [ENTER]. Si el paquete no está en el disco duro (o disco fijo), inserte el diskette de Math Cad[®], cámbiese al drive donde va a trabajar, escriba MCAD y presione [ENTER] (11.10).
8. Una vez cargado el paquete, pulse la tecla [F5]. En este punto, el paquete dará el mensaje "File to load:". Debe pulsar de nuevo [ENTER]. Aparecerá un recuadro conteniendo los archivos siguientes:

- CPGASIN	- ÓXIDOS
- CPGASORG	- SOL_A-B
- CPLIQIN	- SOL_C
- CPLIQORG	- SOL_D-P
- CPSOLORG	- SOL_S
- ELEMENTS	- SOL_S-Y

Usando las teclas con flechas, se elige un archivo. Si necesita saber el C_p de un gas inorgánico, la elección deberá ser CPGASIN. CPGASORG si desea saber el C_p de un gas orgánico etc. (11.10).

9. Con el archivo ya cargado se presentan las instrucciones básicas de uso. Se brinda una tabla similar a la Tabla 7.1 de la página 41 de la sección de resultados. Se elige el compuesto y debe recordarse el número que aparece al lado del mismo.
10. Al final de la tabla encontrará las instrucciones para definir con qué compuesto desea trabajar (ver ejemplo página 42 de la sección de resultados).
11. A continuación se proporcionan instrucciones para elegir qué cálculos se desean hacer. Se da a elegir entre calcular C_p , C_v y γ o C_{pm} , C_{vm} , ΔH y ΔU .
12. Cualquiera que sea su elección, el paquete lo llevará hasta una sección donde debe especificar la temperatura (o rango de temperaturas) a la cual se calcularán las magnitudes. Por último hay un menú que lo conducirá a los resultados esperados.
13. A continuación de los resultados, encontrará un menú con opciones tales como: hacer otros cálculos, elegir otro compuesto, elegir otro archivo, salir del paquete y otros (ver ejemplo en página 43).
14. Para abandonar el paquete en cualquier momento oprima la secuencia [Ctrl][Q] (QUIT). El paquete dará el mensaje: "Changes not saved. ok to discard?". Oprima [Y] y presione [ENTER]. Esto lo llevará de vuelta al sistema operativo (comando prompt) (11.10).

III. JUSTIFICACIÓN

En los cálculos termodinámicos, en procesos que involucran transferencia de calor, es necesario conocer la capacidad calorífica de la o las sustancias con las cuales se trabaja. Para procesos adiabáticos e irreversibles, la relación entre capacidades caloríficas ($C_p/C_v = \gamma$) es indispensable. Existen en la literatura diferentes caminos para calcular capacidades caloríficas. Es muy común encontrar en la literatura datos de C_p (capacidad calorífica a presión constante), sin embargo los datos de C_v (capacidad calorífica a volumen constante) son escasos.

Una de las formas más rápidas de calcular un C_p es por medio de nomogramas. Estos nomogramas nos dan rápidamente un dato de C_p si conocemos la temperatura de trabajo. Existe un inconveniente al usar los nomogramas, nos dan la C_p para una temperatura puntual, por ejemplo: el C_p del agua a 25°C es 4.186 J/gK . Pero para un rango de temperaturas no nos dicen nada: el C_p del agua entre 25 y 50°C no se puede obtener directamente. Es necesario calcular un promedio entre el C_p a 25 y el C_p a 50°C , por ejemplo. Esto con el inconveniente de que el C_p no se comporta de una forma lineal, entonces tendríamos un valor muy poco confiable. Además, los datos proporcionados por los nomogramas son aproximaciones, por lo cual se desvían considerablemente de la realidad en los extremos de su rango de aplicabilidad. Un inconveniente más es la cantidad limitada de sustancias involucradas en los nomogramas. Esta cantidad es a veces menor que 25. Por último, los nomogramas están dados para líquidos y gases, pero para sólidos no existen datos.

Otro método para calcular el C_p es por medio de ecuaciones cúbicas de la forma:

$$C_p = a + bT + cT^2 + dT^3$$

o bien:

$$C_p = a + bT + cT^{-2}$$

Por simple inspección, se puede ver que estas expresiones son complicadas y para aplicarlas se necesita conocer cinco datos:

- la temperatura de trabajo (T)
- las cuatro constantes de la ecuación (a, b, c y d).

El cálculo de C_p por este método consume tiempo aunque los resultados obtenidos se desvían poco de la realidad. Otra ventaja de las ecuaciones cúbicas es que existen para diversos compuestos y para los tres estados de la materia (gas, líquido y sólido).

Al implementar en computadora los programas (que son capaces de resolver las ecuaciones cúbicas de C_p), se obtuvieron varias ventajas:

- Ahorro de tiempo.
- Precisión y exactitud de los datos obtenidos.
- Abundancia de compuestos disponibles (comparado con los nomogramas).
- Se puede seleccionar el estado de la sustancia.
- A partir del C_p pueden calcularse otras cantidades como C_v y γ .
- Si se trabaja bajo un rango de temperaturas, se puede calcular un C_p medio (C_{pm}), un C_v medio (C_{vm}), un cambio de Entalpía (ΔH) y un cambio de Energía Interna (ΔU).
- Todas las cantidades se reportan en tres sistemas de unidades: SI, MKS e Inglés.
- Es un método poco complicado para obtener un C_p .

En resumen, los programas creados son capaces de brindar la siguiente información:

- Para una temperatura puntual: C_p , C_v y γ .

- Para un rango de temperaturas: C_{pm} , C_{vm} , ΔH y ΔU , y gráficas de estas magnitudes contra la temperatura.

Los únicos datos necesarios para llegar a dicha información son:

- El nombre del compuesto.
- El estado del compuesto (gas, líquido o sólido).
- La temperatura de trabajo.

Aunque C_v no es muy usada, la relación C_p/C_v , es decir el coeficiente γ si lo es. Este dato se usa en procesos isentrópicos, principalmente cuando se trabaja con gases.

Existen pocos datos de γ reportados en la literatura. Cuando se encuentran, se reportan bajo rangos de temperatura muy estrechos. Con los programas implementados, se logró obtener γ para cada compuesto a distintas temperaturas. Además, este coeficiente se puede obtener en un amplio rango de temperaturas y para compuestos gaseosos, sólidos o líquidos. El conocimiento del coeficiente γ , abre la posibilidad de poder calcular el trabajo efectuado en un proceso, el volumen final del sistema, la presión final que alcanzó el sistema o la temperatura final del mismo (ver ecuaciones de la (r) a la (u), páginas 13 y 14).

IV. OBJETIVOS

A. OBJETIVOS GENERALES

1. Implementar un programa que:
 - a. Reúna información para calcular el C_p de la mayor cantidad de compuestos posible.
 - b. Los datos calculados no se desvíen apreciablemente de la realidad.
 - c. Teniendo el C_p , calcular C_v , C_{pm} , C_{vm} , ΔH y ΔU .

B. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Alimentar toda la información recopilada sobre el C_p en doce programas para computadora.
2. Hacer que la información implementada sea de fácil acceso y se reporte en un formato fácil de comprender.
3. Proporcionar una herramienta útil para el cálculo de Capacidades Caloríficas, Cambios de Entalpía y de Energía Interna.

V. PROBLEMA A RESOLVER

En la literatura puede encontrarse información sobre el C_p de las sustancias. A veces resulta difícil encontrar esta propiedad para una sustancia en especial o para una temperatura dada o ambas. Se invierte algún tiempo revisando un libro y luego otro y otro más en busca del dato requerido. Al final debe usarse un dato muy aproximado de C_p para la aplicación que se requiere. Por lo anterior, es deseable una fuente que reúna la mayor cantidad de datos posible con respecto de la capacidad calorífica. Además, que estos datos se puedan encontrar en rangos amplios de temperatura. Esta fuente debe ser fácil de usar, accesible y que proporcione datos muy confiables.

La forma más confiable de obtener el C_p es por medio de ecuaciones cúbicas. Para minimizar el tiempo requerido para el cálculo de C_p , se hizo uso de un programa para computadora. Las ecuaciones de capacidad calorífica a presión constante son muy abundantes en la literatura. Se reunió la mayor cantidad de ecuaciones cúbicas posible y luego se implementaron todas en doce programas para computadora.

Ya que todas las ecuaciones tienen la forma:

$$C_p = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^{-2}$$

se facilitó la implementación de las ecuaciones. Una ecuación bastó para el cálculo de las capacidades caloríficas disponibles (ver ecuaciones, sección de resultados, página número 50). Entonces, el problema consistió en recabar la mayor cantidad de constantes de la ecuación anterior, es decir a , b , c , d y e . Cuando se tuvieron todas las constantes posibles, estas fueron alimentadas a los diferentes programas.

Una vez se tuvo la capacidad calorífica a presión constante (C_p), se calcularon las otras cantidades:

- Capacidad calorífica a volumen constante (C_v).
- Cociente entre C_p y C_v ($C_p/C_v = \gamma$).
- Capacidades caloríficas medias (C_{pm} y C_{vm}).
- Cambio de Entalpía ΔH .
- Cambio de Energía Interna ΔU .

VI. METODOLOGÍA

A. PASOS A SEGUIR EN EL DESARROLLO DEL TRABAJO

1. Transformar las unidades de los datos recopilados a unidades del Sistema Internacional.

Por ejemplo, para el Acetileno gaseoso, el C_p se define por la siguiente ecuación:

$$C_p = 42.43 + 6.053 \times 10^{-2}T - 5.033 \times 10^{-5}T^2 + 18.20 \times 10^{-9}T^3$$

donde T está en grados Celsius y C_p en cal/(mol $^{\circ}$ C). Para transformar T en Kelvin y C_p en J/(molK), se procede de la siguiente forma:

$$- T \text{ (en grados Celsius)} = T \text{ (en Kelvin)} - 273.15$$

$$- 1 \text{ cal} = 4.186 \text{ J.}$$

Se sustituye la expresión para T en la ecuación anterior y se multiplica toda por 4.186(J/cal):

$$C_p = (4.186 \text{ J/cal}) \{ 42.43 + 6.053 \times 10^{-2}(T - 273.15) - 5.033 \times 10^{-5}(T - 273.15)^2 + 18.20 \times 10^{-9}(T - 273.15)^3 \}$$

$$C_p = 21.7701 + 9.2099 \times 10^{-2}T - 6.5244 \times 10^{-5}T^2 + 18.20 \times 10^{-9}T^3$$

2. Cálculo de masas moleculares. Estas masas son necesarias para poder calcular el C_p , es decir, la capacidad calorífica en las unidades J/(gK).
3. Nomenclatura de compuestos. En algunas fuentes, las sustancias reportadas aparecen ya nombradas. Sin embargo, existe bibliografía en donde solamente se listan las fórmulas moleculares. Este es el caso de libros especializados (de Termodinámica, por ejemplo). En este caso, es necesario nombrar cada compuesto para poder ordenarlo en forma alfabética.
4. Clasificación de compuestos. Por limitaciones de memoria del paquete Math Cad[®], no

pueden reunirse todos los compuestos disponibles en un sólo programa. Por ello estos compuestos fueron divididos en tres categorías: gases, sólidos y líquidos. A su vez, cada categoría tiene subdivisiones. Los gases se dividieron en gases orgánicos e inorgánicos. Los sólidos se subdividieron en orgánicos, elementos, óxidos y otros sólidos (sulfuros, sulfatos, hidróxidos, etc). Por último los líquidos fueron divididos en orgánicos e inorgánicos.

5. Ordenamiento de compuestos en forma alfabética. Esto se hizo para facilitar la búsqueda de los compuestos disponibles en cada programa.
6. Ordenamiento de las constantes en vectores. La ecuación que define a C_p consta de hasta cinco constantes, a saber: a, b, c, d y e. Estas se agruparon en vectores: el vector a contiene todas las constantes a, el vector b contiene las constantes b, etc. Por ejemplo, para los compuestos de la Tabla I.1, página 17, los vectores son:

$$a = \begin{bmatrix} 6.132 \\ -0.206 \\ 2.734 \\ -3.876 \\ 3.518 \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} 1.952 \\ 39.064 \\ 26.786 \\ 63.249 \\ 20.001 \end{bmatrix} * 10^{-3}$$

$$c = \begin{bmatrix} 0 \\ -13.301 \\ -8.882 \\ -20.928 \\ -6.002 \end{bmatrix} * 10^{-6} \quad M = \begin{bmatrix} 28.0378 \\ 78.1134 \\ 54.0914 \\ 84.1608 \\ 46.0684 \end{bmatrix}$$

Estos vectores contienen las constantes de las ecuaciones:

$$C_{pi} = a_i + b_i T + c_i T^2 \quad y$$

$$C_{Pi} = C_{pi} / M_i$$

7. Alimentación de las constantes al paquete. Se copian al paquete los vectores con las

- constantes respectivas.
8. Definición de las ecuaciones necesarias. Se definen en el paquete Math Cad[®] todas las ecuaciones a usar.
 9. Especificación de unidades. Cada vector se multiplica por las unidades adecuadas, para que el C_p sea reportado en $J/(molK)$. Entonces el vector a se multiplica por las unidades $J/(molK)$ (ver ejemplo en la página 16 y 47), el vector b por $J/(molK^2)$, el c por $J/(molK^3)$, el d por $J/(molK^4)$, el e por JK/mol y el vector M por g/mol .
 10. Formateo de gráficas y respuestas. Se especificó el tipo de gráfica su tamaño y qué magnitud correspondería a cada eje coordenado. También se le indicó el paquete que reportara los todos los resultados en los sistemas de unidades Internacional MKS e Inglés. Además, que proporcionara estos los resultados con cinco cifras decimales.
 11. Revisión del funcionamiento de los programas. Se revisaron los C_p reportados a varias temperaturas y para cada compuesto. Cuando se encontró un C_p extraño (muy grande o pequeño), se procedió a revisar las constantes para corregir el error. También se revisaron todas las ecuaciones.
 12. Elaboración de las instrucciones para el usuario. Para que el usuario pueda manejar fácilmente cada programa, se elaboraron instrucciones claras y sencillas. Estas instrucciones contienen información acerca de:
 - a. Qué sustancias contiene el programa (sólidos orgánicos, líquidos inorgánicos, óxidos, etc).
 - b. Cómo elegir el compuesto que el usuario desee.
 - c. Cómo especificar la temperatura o el rango de temperaturas de trabajo.
 - d. Dónde se reportan los resultados y cómo llegar a ellos.

e. Cómo pasarse a trabajar a otro programa.

f. Cómo abandonar el paquete.

13. Implementación de las instrucciones a cada programa. Las instrucciones son muy parecidas entre un programa y otro. Pero ya que cada programa calcula el C_p para un grupo distinto de compuestos, las instrucciones variaron un poco de programa en programa. Por ejemplo, varió la indicación de qué compuestos contenía un programa. Dentro de estas instrucciones se proporciona una tabla como la siguiente:

Tabla 6.1
Compuestos Disponibles

i	Compuesto	Fórmula	Rango de Temperaturas (K)
1	Acetileno	C_2H_2	298 - 1500
2	Benceno	C_6H_6	298 - 1500
3	1,3-Butadieno	C_4H_6	298 - 1500
4	Ciclohexano	C_6H_{12}	298 - 1500
5	Etanol	C_2H_5OH	298 - 1500
.	.	.	.
.	.	.	.
50	Tolueno	C_7H_8	278 - 1500

Esta tabla lista los compuestos disponibles, el número i del compuesto su fórmula molecular y el rango de temperaturas al cual se puede calcular C_p , C_v , etc. Para ver una tabla completa, vaya a la página 41, sección de resultados. El programa calcula el C_p para cualquier temperatura, aunque ésta esté fuera del rango de temperaturas sugerido, pero las C_p calculadas fuera de rango serán muy inciertas.

14. Revisión exhaustiva de los programas. Se revisaron todas las constantes, las ecuaciones, las instrucciones, las tablas y los resultados para eliminar cualquier error.

B. MATERIALES

1. PAQUETES DE COMPUTACIÓN UTILIZADOS:

- a. *Asystant*. The Scientific Number Cruncher. Software Technologies, Inc. versión 1.10.
- b. *Math Cad*[®]. Math Soft Inc. versión 2.50. Copyright 1988.
- c. *Professional Write*. Art Soft Inc. versión 3.0. Copyright 1990.
- d. *Monasanto*. Monsanto Company Runtime Module. Copyright Microsoft Company. versión 2.0. 1987.

2. EQUIPO AUXILIAR:

- a. Computador Personal: marca Dell Computer Corp. modelo 425z/L (intel inside). Hecha en USA. 110 - 220 V. 1.3 A. 50/60 Hz.
- b. Impresora: marca Epson LX 810. modelo P80EA. Hecha en USA. 120 v. 0.7 A. 50/60 Hz.

VII. RESULTADOS

Los programas ya revisados y afinados, brindan información valiosa acerca de las siguientes magnitudes:

- Capacidad calorífica a presión constante (C_p).
- Capacidad calorífica a volumen constante (C_v).
- Coeficiente γ (relación C_p/C_v).
- Capacidad calorífica media a presión constante (C_{pm}).
- Capacidad calorífica media a volumen constante (C_{vm}).
- Cambio de Entalpía (ΔH).
- Cambio de Energía Interna (ΔU).

Las magnitudes anteriores pueden obtenerse de forma clara ordenada y rápida. Los programas cumplen con el objetivo de reunir la mayor cantidad de compuestos posible. Para cada compuesto se puede calcular su capacidad calorífica en un amplio rango de temperaturas.

En las siguientes páginas se muestra un ejemplo de lo que es en sí un programa, desde las instrucciones de uso hasta las instrucciones de cómo abandonar el paquete. El programa que se ilustra calcula las magnitudes anteriormente listadas para Gases Orgánicos a una atmósfera de presión. El nombre del programa es CPGASORGMCD y contiene 40 gases distintos.

A. EJEMPLO

- ARCHIVO CPGASORG.MCD (contiene 40 gases).
- CÁLCULOS PARA GASES ORGÁNICOS A UNA ATMÓSFERA DE PRESIÓN.

Este programa calcula capacidades caloríficas para GASES ORGÁNICOS a una atmósfera de presión.

La siguiente tabla muestra los gases disponibles. Las Capacidades Caloríficas deben calcularse solamente dentro del rango de temperaturas indicado al lado de cada gas.

COMO ELEGIR UN GAS:

1. Vaya a la Tabla 7.1 y busque el gas de interés.
2. Observe el número 'i' que aparece al lado izquierdo del gas escogido.
3. Sustituya ese número en la definición de 'Gas' que aparece al final de la Tabla 7.1.

Para ver las instrucciones, oprima [ESC],
teclea 'GO 57' y presione [ENTER].

Gas := 1 (Número del Gas)

COMO CAMBIAR EL NUMERO DEL GAS:

1. Coloque el cursor sobre el número del gas.
2. Oprima las teclas [Ctrl] y [F3] simultáneamente.
3. Dentro del cuadro que escriba el número del gas elegido.

PARA CALCULAR LAS CAPACIDADES
CALORIFICAS (Cp y Cv) Y SU
COCIENTE τ :

1. Oprima la tecla [ESC]
2. Teclee 'GO 100'
3. Presione [ENTER]

PARA CALCULAR LAS CAPACIDADES
CALORIFICAS MEDIAS (Cpm y Cvm)
Y LOS CAMBIOS DE ENTALPIA Y
ENERGIA INTERNA:

1. Oprima la tecla [ESC]
2. Teclee 'GO 190'
3. Presione [ENTER]

¿A qué temperatura desea que se calculen las Capacidades
Caloríficas Cp y Cv y su cociente τ ?

Rango de Aplicabilidad

Kelvin	--->	Tmin = 298	Tmax = 1000
Celcius	--->	tmin = 25	tmax = 727

T := 298.15 GK (Temperatura en Kelvin)

COMO CAMBIAR LA TEMPERATURA:

1. Coloque el cursor sobre la temperatura.
2. Oprima simultáneamente las teclas [Ctrl] y [F3].
3. Dentro del cuadro que debe escribir la nueva temperatura.

RESULTADOS:

1. Para ver las CAPACIDADES CALORIFICAS A PRESION CONSTANTE (Cp) y τ , ejecute la secuencia: [ESC], 'GO 128' y [ENTER]
2. Para ver las CAPACIDADES CALORIFICAS A VOLUMEN CONSTANTE (Cv) y τ , ejecute la secuencia: [ESC], 'GO 160' y [ENTER]

CAPACIDADES CALORIFICAS A PRESION CONSTANTE A T = 298.15

Gas = 1 (número del gas).

$C_p = 54.08862 \frac{J}{mol \cdot GK}$	SI	$CP = 1.22782 \frac{J}{g \cdot GK}$
$C_p = 12.92131 \frac{kcal}{kmol \cdot C}$	MKS	$CP = 0.29332 \frac{kcal}{kg \cdot C}$
$C_p = 12.91906 \frac{BTU}{lbmol \cdot GR}$	Inglés	$CP = 0.29326 \frac{BTU}{lb \cdot GR}$

$\tau = 1.18163$

PARA CALCULAR OTRAS MAGNITUDES, EJECUTE LO SIGUIENTE:

- Calcular C_v y τ : [ESC], GO 160 [ENTER]
- Seleccionar otro compuesto: [ESC], GO 14 [ENTER]
- Cambiar la temperatura: [ESC], GO 100 [ENTER]
- Calcular C_{pm} , C_{vm} , δH y δU : [ESC], GO 190 [ENTER]
- Trabajar en otro archivo: [ESC], GO 360 [ENTER]
- Salir del paquete: [ESC], GO 360 [ENTER]

CAPACIDADES CALORIFICAS A VOLUMEN CONSTANTE A T = 298.15

Gas = 1 (número del gas).

$C_v = 45.77462 \frac{J}{mol \cdot GK}$	SI	$CV = 1.03909 \frac{J}{g \cdot GK}$
$C_v = 10.93517 \frac{kcal}{kmol \cdot GK}$	MKS	$CV = 0.24823 \frac{kcal}{kg \cdot GK}$
$C_v = 10.93326 \frac{BTU}{lbmol \cdot GR}$	Inglés	$CV = 0.24819 \frac{BTU}{lb \cdot GR}$

$\tau = 1.18163$

PARA CALCULAR OTRAS CANTIDADES, EJECUTE LO SIGUIENTE:

- Calcular C_p y τ : [ESC], GO 128 [ENTER]
- Seleccionar otro compuesto: [ESC], GO 14 [ENTER]
- Cambiar la temperatura: [ESC], GO 100 [ENTER]
- Calcular C_{pm} , C_{vm} , δH y δU : [ESC], GO 190 [ENTER]
- Trabajar en otro archivo: [ESC], GO 360 [ENTER]
- Salir del paquete: [ESC], GO 360 [ENTER]

¿Dentro de qué rango de temperaturas desea que se calculen las Capacidades Caloríficas Medias (C_{pm} y C_{vm}) y los cambios de Entalpía (δH) y de Energía Interna (δU)?

Rango de Aplicabilidad:

Kelvin	--->	Tmin = 298	Tmax = 1000
Celcius	--->	tmin = 25	tmax = 727

T1 := 298 GK

T2 := 500 GK

(Temperaturas en Kelvin)

COMO CAMBIAR LAS TEMPERATURAS 'T1' Y 'T2':

1. Coloque el cursor sobre la temperatura.
2. Oprima las teclas [Ctrl] y [F3] simultaneamente.
3. Dentro del cuadro que debe escribir la nueva temperatura.

RESULTADOS:

1. Para ver las CAPACIDADES CALORIFICAS MEDIAS (C_{pm} y C_{vm}), presione [ESC], teclee 'GO 222' y presione [ENTER].
2. Para ver los Cambios de ENTALPIA y de ENERGIA INTERNA, presione [ESC], teclee 'GO 250' y presione [ENTER].

CAPACIDADES CALORIFICAS MEDIAS ENTRE
T1 = 298 Y T2 = 500 KELVIN

Gas = 1 (número del gas).

Cpm = 65.38887	$\frac{J}{mol \cdot GK}$	SI	Cvm = 57.07487	$\frac{J}{mol \cdot GK}$
Cpm = 15.62085	$\frac{kcal}{kmol \cdot GK}$	MKS	Cvm = 13.6347	$\frac{kcal}{kmol \cdot GK}$
Cpm = 15.61813	$\frac{BTU}{lbmol \cdot GR}$	Inglés	Cvm = 13.63233	$\frac{BTU}{lbmol \cdot GR}$

PARA CALCULAR OTRAS MAGNITUDES, EJECUTE LO SIGUIENTE:

- | | | | |
|---|-------|----------|---------|
| - Ver gráfica C_{pm} , C_{vm} contra T: | [ESC] | 'GO 280' | [ENTER] |
| - Calcular δH y δU : | [ESC] | 'GO 250' | [ENTER] |
| - Seleccionar otro compuesto: | [ESC] | 'GO 14' | [ENTER] |
| - Cambiar rango de temperaturas: | [ESC] | 'GO 190' | [ENTER] |
| - Calcular C_p , C_v , y τ : | [ESC] | 'GO 100' | [ENTER] |
| - Trabajar en otro archivo: | [ESC] | 'GO 360' | [ENTER] |
| - Salir del paquete: | [ESC] | 'GO 360' | [ENTER] |

CAMBIOS DE ENTALPIA Y DE ENERGIA INTERNA
ENTRE T1 = 298 Y T2 = 500 KELVIN

Gas = 1 (número del gas)

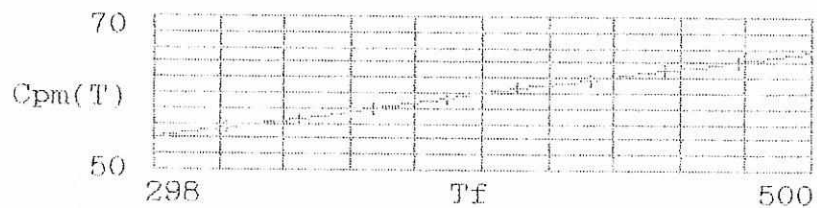
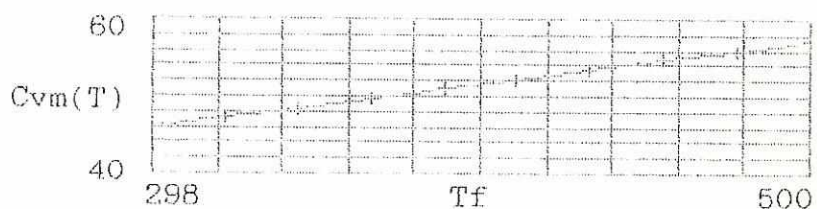
$\delta H = 13.20855 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$	SI	$\delta U = 11.52912 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$
$\delta H = 3155.41121 \frac{\text{kcal}}{\text{kmol}}$	MKS	$\delta U = 2754.21006 \frac{\text{kcal}}{\text{kmol}}$
$\delta H = 5678.75043 \frac{\text{BTU}}{\text{lbmol}}$	Inglés	$\delta U = 4956.71421 \frac{\text{BTU}}{\text{lbmol}}$

PARA CALCULAR OTRAS MAGNITUDES, EJECUTE LO SIGUIENTE:

- Ver gráfica δH , δU contra T: [ESC] GO 310 [ENTER]
- Calcular Cpm y Cvm: [ESC] GO 222 [ENTER]
- Seleccionar otro compuesto: [ESC] GO 14 [ENTER]
- Cambiar rango de temperaturas: [ESC] GO 190 [ENTER]
- Calcular Cp, Cv, y τ : [ESC] GO 100 [ENTER]
- Trabajar en otro archivo: [ESC] GO 360 [ENTER]
- Salir del paquete: [ESC] GO 360 [ENTER]

COMPORTAMIENTO DE LAS CAPACIDADES CALORIFICAS MEDIAS

Gas = 1 (número del gas)

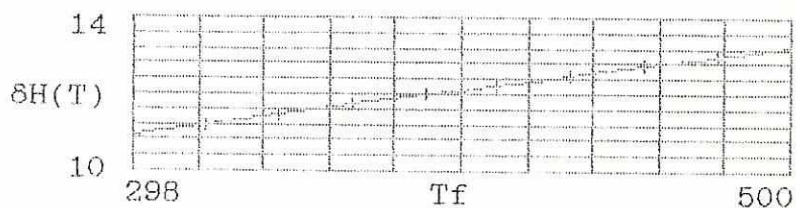
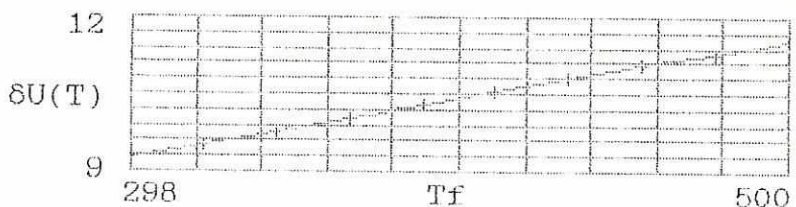
CAPACIDAD
A PRESION
CONSTANTE
(J/mol*GK)CAPACIDAD
A VOLUMEN
CONSTANTE
(J/mol*GK)

TEMPERATURA (Kelvin)

- Para ver otra vez Cp y Cv, ejecute: [ESC] GO 222 [ENTER].

COMPORTAMIENTO DE δH Y δU

Gas = 1 (número del gas)

ENTALPIA
(kJ/mol)ENERGIA
INTERNA
(kJ/mol)

TEMPERATURA (Kelvin)

- Para ver otra vez δH y δU , ejecute [ESC] GO 250 [ENTER].

	14.0756		14.9469	
	21.7701		9.2099	
	6.81317		27.8598	
	11.469		20.9434	
	18.3823		10.1564	
	-36.3258		48.453	
	22.7305		22.2699	
	3.8906		37.1142	
	-7.9654		41.5768	
	16.3536		26.2972	
	-1.0702		36.205	
	-66.8412		68.8517	
	-54.3582		54.7693	
	-39.7889		78.1945	
	17.0437		41.7296	
	6.8598		17.2602	
	9.34494		46.0429	
	3.91835		15.6298	
	22.7991		4.0734	-2
a :=	-58.7821	J	97.7428	J · 10
	22.6479	mol · GK	61.7403	
	20.8922		16.4631	2
	51.5564		39.0201	mol · GK
	29.681		51.6524	
	31.3272		47.0473	
	6.8362		55.2081	
	26.7711		40.0643	
	19.87		5.021	
	-63.3092		79.3927	
	-50.848		64.3623	
	67.8672		58.6694	
	35.9497		54.0077	
	-3.2009		19.5071	
	6.65329		45.4015	
	22.373		33.0506	
	-4.1003		30.4618	
	3.1159		23.8165	
	-67.7303		110.326	
	-29.2712		79.2741	
	-32.0407		55.018	

	5.1198		0	
	6.5244		18.2	
	15.6284		34.76	
	10.374		19.83	
	2.8683		0	
	31.5565		77.57	
	7.3845		0	
	18.3364		34.98	
	22.9966		49.87	
	8.2084		0	
	21.4082		50.5	
	38.5072		80.63	
	31.1663		68.66	
	49.6644		120.5	
	13.8528		0	
	6.4126		7.28	
	15.3609		0	
	8.33815		17.66	
	-.7124		-8.694	
c :=	241.041	$-J \cdot 10^{-5}$	2230.39	$J \cdot 10^{-9}$
	15.4258		1542.58	
	22.2903		208.593	
	66.3722	$\text{mol} \cdot \text{GK}^3$	585.06	$\text{mol} \cdot \text{GK}^4$
	16.2007		0	
	14.838		0	
	28.6449		57.66	
	12.6015		0	
	-1.268		-11	
	45.9801		100.08	
	37.3078		83.81	
	18.4637		0	
	17.0612		0	
	7.7287		0	
	22.453		42.46	
	10.34844		0	
	15.7085		31.71	
	12.1858		24.6	
	154.314		1336.84	
	49.086		224.27	
	34.4426		80.33	

	44.0526	
	26.0378	
	58.0794	
	46.0732	
	32.0448	
	78.1134	
	54.0914	
	58.123	
	58.123	
	56.1072	
	58.123	
	84.1608	
	70.134	
	120.1938	
	105.0959	
	30.0694	
	106.167	
	28.0536	
	30.0258	
	137.368	
M :=	102.9229	$\frac{g}{mol}$
	86.4679	
	187.375	
	100.2034	
	98.1876	
	86.1766	
	84.1608	
	16.0426	
	98.1876	
	84.1608	
	114.2302	
	112.2144	
	44.05	
	72.1498	
	70.134	
	44.0962	
	42.0804	
	134	
	166	
	92.1402	

ECUACIONES NECESARIAS

Capacidades Calorificas a Presión y Volumen Constante:

$$C_p := a_i + b_i \cdot T + c_i \cdot T^2 + d_i \cdot T^3 \quad \square$$

$$C_v := C_p - R \quad \square \quad C_V := \frac{C_v}{M_i} \quad \square \quad C_P := \frac{C_p}{M_i} \quad \square \quad \tau := \frac{C_p}{C_v} \quad \square$$

Capacidades Calorificas Medias:

$$C_{pm} := \frac{\int_{T1}^{T2} (a_i + b_i \cdot T + c_i \cdot T^2 + d_i \cdot T^3) dT}{T2 - T1} \quad \square$$

$$C_{vm} := C_{pm} - R \quad \square$$

Cambios de Entalpía y de Energía Interna:

$$\delta H := C_{pm} (T2 - T1) \quad \square$$

$$\delta U := C_{vm} (T2 - T1) \quad \square$$

Gráficas Cpm, Cvm, δH y δU contra T:

$$\delta T := \frac{T2 - T1}{9} \quad \square \quad n := \delta T \cdot 10^{-7} \quad \square \quad w := \frac{\text{mol} \cdot \text{GK}}{\text{J}} \quad \square$$

$$T_f := (T1 + n), (T1 + \delta T) \dots T2 \quad \square$$

$$C_{pm}(i, T1, T2) := \frac{\int_{T1}^{T2} (a_i + b_i \cdot T + c_i \cdot T^2 + d_i \cdot T^3) dT}{T2 - T1} \quad \square$$

$$C_{pm}(T) := C_{pm}(i, T1, T_f) \cdot w \quad \square$$

$$C_{vm}(T) := C_{pm}(T) - R \cdot w \quad \square$$

$$\delta H(T) := C_{pm}(T) \cdot \frac{T2 - T1}{1000} \quad \square$$

$$\delta U(T) := C_{vm}(T) \cdot \frac{T2 - T1}{1000} \quad \square$$

UNIDADES

cGR \equiv 459.67	GK \equiv 1	cGK \equiv 273.15	C \equiv 1
cm \equiv 1L	g \equiv 1M	seg \equiv 1T	* mol \equiv 1Q
lb \equiv 453.6 g	m \equiv 100 cm	ft \equiv .3048 m	cm \equiv .01 m
	mm \equiv .001 m	km \equiv 1000 m	lt \equiv (.1 m) ³
in \equiv $\frac{\text{cm}}{2.54}$	ft \equiv $\frac{\text{in}}{12}$	kg \equiv $\frac{\text{lb}}{.45358247}$	kg \equiv 10 ³ g
mg \equiv 10 ⁻³ g	newton \equiv kg m seg ⁻²	J \equiv newton m	
min \equiv 60 seg	lbmol \equiv 453.6 mol	erg \equiv 10 ⁻⁷ J	
hr \equiv 3600 seg	cal \equiv 4.1868 J	kcal \equiv 1000 cal	
BTU \equiv 1.05505585262 \cdot 10 ³ J	kmol \equiv 10 ³ mol	kJ \equiv 10 ³ J	
R \equiv 8.316 $\frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{GK}}$	GR \equiv $\frac{5}{9}$ GK		

NOTA: Se omitió el uso de Carga (Q) y se substituyó por mol, unidad de masa de extenso uso en Ingeniería.

PARA CARGAR OTRO ARCHIVO:

1. Presione la tecla [F5]
2. Presione [ENTER]
3. Al mensaje: "Changes not saved. OK to discard?", responda [Y] y luego presione [ENTER]
4. Elija el archivo en el cual desea trabajar

PARA ABANDONAR EL PAQUETE:

1. Oprima la secuencia [Ctrl][Q]
2. Al mensaje: "Changes not saved. OK to discard?", responda [Y] y luego presione [ENTER]

PARA REGRESAR AL PRINCIPIO:

1. Oprima la secuencia:
[Ctrl][Home] o
2. Ejecute [ESC] GO 14
[ENTER].

El formato con que se despliegan las respuestas es muy conveniente y fácil de comprender. Dicho formato muestra la información de interés en tres sistemas de unidades:

- Sistema Internacional de Medidas (SI).
- Sistema Metro Kilogramo Segundo (MKS).
- Sistema Inglés.

Estos sistemas son los de uso más común en la industria aunque puede ser que se encuentren mezclas de estos y de otros sistemas menos comunes.

Las respuestas no sólo se despliegan en tres sistemas de unidades, también se reportan por unidad de masa y por mol (ver página 43).

A continuación de las respuestas, hay una lista de instrucciones que ayudan al usuario a obtener más información sobre el compuesto que eligió y también lo guían si desea cambiar de compuesto temperatura (o rango de temperaturas) o si quiere abandonar el paquete (ver página 43).

Cada respuesta reportada posee cinco cifras decimales, lo que le da al usuario la seguridad de contar con datos muy exactos. Si se diera el caso de que cinco no fueran suficientes, este número de cifras puede ampliarse hasta 15.

VIII DISCUSIÓN DE RESULTADOS

El presente trabajo desarrolla la implementación de doce programas que calculan Capacidades Caloríficas a presión y volumen constantes. Además puede calcularse con estos programas, la relación C_p/C_v , cambios de Entalpía y de Energía Interna.

El objetivo inicial del trabajo era crear un solo programa que incluyera todos los compuestos. Se trató de hacer un programa que involucrara gases, líquidos y sólidos, pero llegó el momento en el que eran tantos los compuestos, que ya no pudo hacerse un programa para reunirlos. El paquete Math Cad®, ya no pudo dar cabida a los compuestos. Esto es debido a que dicho paquete puede crear vectores de cien filas máximo. Los compuestos disponibles son casi 700, por lo que no se podían incluir todos en un solo programa. Además de las limitaciones que ofreció el paquete, se pensó en que al usuario se le facilitaría más buscar un compuesto dado entre un grupo de 50 ó 70 y no entre un grupo de 700. Fue por ello que se ordenaron los compuestos en líquidos, sólidos y gases; y estos a su vez en orgánicos e inorgánicos.

Cada programa fue especialmente diseñado para calcular las capacidades caloríficas para un grupo determinado de sustancias:

- Programas para gases
- Programas para líquidos y
- Programas para sólidos

Además, cada una de las clasificaciones anteriores, se divide en otras subclases que son:

- Compuestos Orgánicos
- Compuestos Inorgánicos

Para el caso de los compuestos inorgánicos, los programas están en orden alfabético, es decir, para compuestos de la A a la B un programa (SOL-A_B), otro programa para compuestos que empiezan con C (SOL-C), otro con compuestos de la D a la P (SOL-D_P), etc.

Las gráficas que se incorporaron a los programas son de mucha ayuda para el usuario. Principalmente la gráfica de C_{pm} contra T. La pendiente de la curva de esta gráfica permite ver qué tanto error se puede introducir en un cálculo que involucre a C_{pm} . Esto es porque mientras mayor sea la pendiente, mayor es la variación de C_{pm} con la temperatura y mayor es el error que se introduce en un cálculo que involucre a C_{pm} . Idealmente C_{pm} no debe variar con el aumento de la temperatura. Esto casi se logra al usar rangos de temperatura estrechos, de 5 a 10 Kelvin, por ejemplo. Claro que esta no es una regla general pues el cambio de C_{pm} con la temperatura es más sensible en unos compuestos que en otros. Por ejemplo algunos gases varían su C_{pm} más que otros con el cambio de la temperatura. Podemos mencionar por ejemplo que el fluido térmico Therminol VP - I varía su C_{pm} mucho más que el acetileno o que el metano en el rango de 298 a 500 Kelvin.

Las otras gráficas que se construyeron son más que todo ilustrativas, para que el usuario pueda ver la variación del C_{vm} , ΔH y ΔU con la temperatura.

Los doce programas que se implementaron fueron revisados exhaustivamente hasta asegurar que funcionaran correctamente. También se revisó cada dato por separado para asegurar que los resultados brindados fueran los correctos. Las cantidades reportadas por los programas se examinaron para verificar su validez.

El total de compuestos involucrados en los doce programas está al rededor de 700. Esto dice que el trabajo es muy completo y que se puede calcular casi cualquier capacidad calorífica que se desee, en un rango amplio de temperaturas. Lo mismo para las demás magnitudes que son factibles de calcular (C_v , C_{pm} , C_{vm} , ΔH y ΔU).

Algunos compuestos fueron excluidos de este trabajo. Por ejemplo los sulfatos hidratados de cobre ($CuSO_4 \cdot nH_2O$). Esto se debió a que en la literatura se reportaba un rango muy estrecho de temperaturas, el cual era de dos a cinco grados Celcius. Algunos también se reportaban a una sola temperatura por lo que no se tomaron en cuenta. Se puede tomar como regla general que los compuestos que no se incluyeron, son compuestos que se descomponen la cambiar la temperatura del sistema. Por esta razón, no existen en la literatura ecuaciones que aproximen el comportamiento del C_p como función de la temperatura.

Ya implementados los programas, se probó cada uno por separado. Estas pruebas se realizaron cuidadosamente y se vio en cada una la eficiencia del programa. Para asegurar que los futuros usuarios no tuvieran dificultad al trabajar con los programas, se le pidió a un grupo de personas que hicieran uso de estos programas. Gracias a los acertados comentarios de las personas que usaron los programas, se modificaron algunos aspectos del formato del trabajo. Se agregaron muchas instrucciones para facilitar la operación de los archivos. Por ejemplo, se describe en forma sencilla el modo de cambiar una temperatura o un rango de temperaturas. En el formato antiguo todas las respuestas estaban juntas, ahora existe una sección para C_p y C_p (capacidades caloríficas a presión constante), otra para C_v y C_v (capacidades caloríficas a volumen constante), una más para C_{pm} y C_{vm} (capacidades caloríficas medias) y una última para ΔH y ΔU (cambios de Entalpia y Energía Interna).

Otra modificación necesaria fue agregar un menú a continuación de las respuestas. Este menú indica qué hacer en caso de que se quiera trabajar en otro programa, cambiar de compuesto, cambiar de temperatura o simplemente abandonar el paquete (ver página 43).

Ya hechos los cambios, se pidió a otro grupo de personas que intentaran usar los programas, y los comentarios obtenidos fueron totalmente satisfactorios. En consecuencia se puede garantizar que los programas poseen un formato práctico y comprensible.

IX. CONCLUSIONES

- A. Los resultados que brindan los programas son bastante confiables, dado que se revisaron los datos exhaustivamente y provienen de fuentes confiables (ver referencias 11.08, 11.09 y 11.12, página 61).
- B. El conjunto de programas se diseñó para que el usuario encuentre fácilmente la información que necesita. Por ello los programas se clasifican en programas para sólidos, para líquidos y para gases. Existen también subgrupos de estos grupos (gases orgánicos, líquidos inorgánicos, líquidos orgánicos, etc.).
- C. Dado que el número de compuestos disponibles es de casi 700, se puede decir que la información ofrecida es abundante y que son pocos los compuestos que no se incluyeron. Compuestos que no se incluyeron son, por ejemplo, sulfatos hidratados de cobre y sales hidratadas de magnesio.
- D. Gracias a que un grupo de personas pudo usar satisfactoriamente los programas, puede garantizarse que los programas son comprensibles totalmente, y que no se hallará dificultad para su manejo.

X. RECOMENDACIONES

- A. Los programas fueron diseñados en una computadora con procesador 80486, con 66 MHz y una memoria de 2 MB RAM. Los requerimientos mínimos para trabajar con los programas son: procesador 80386, 20 MHz y memoria RAM de 2 MB. Si no se cuenta con dicha memoria RAM no podrán cargarse los programas.
- B. Antes de cargar cualquier programa se aconseja leer el archivo CALORMCD. Este archivo resume el contenido de cada programa y contiene instrucciones de uso. Cada vez que necesite cargar cualquier programa (de gases, líquidos o sólidos), puede cargar el archivo mencionado y obtener ayuda en la elección del programa que necesita.
- C. Las instrucciones de cada programa deben ser seguidas al pie de la letra para no perderse y no alterar el contenido del mismo.
- D. La mayor dificultad en el uso de los programas se encuentra al definir las cantidades T e i (temperatura y número del compuesto seleccionado). Se deben leer bien las instrucciones y entenderlas perfectamente antes de intentar variar T o i .
- E. Existen compuestos que aparecen dos veces en el mismo programa. Esto no significa que estén repetidos, significa que ese compuesto posee dos rangos de temperaturas. El primer rango consta de temperaturas bajas y el segundo de temperaturas altas. Tal es el caso del n -Hexano, Metanol, Benceno, Niquel, Talco, Agua, etc. También está el Manganeso metálico, con tres rangos de temperaturas y el Hierro metálico con cuatro.

- F. Es importante que cuando se elige un compuesto se vea también cuál es el rango de temperaturas en el que se pueden calcular las magnitudes como C_p o ΔH . Si por algún motivo la temperatura de trabajo cae fuera del rango de temperaturas de un compuesto dado es mejor no calcular alguna magnitud pues el resultado no será confiable.
- G. Al calcular cualquier cantidad fuera del rango de temperaturas especificado, los resultados no serán confiables. Las desviaciones de los resultados con la realidad serán significativas, aun estando cerca de los límites del intervalo sugerido. Por ejemplo, si para el *n*-Pentano el rango de temperaturas válido es entre 298 y 350 Kelvin, al calcular el C_p a 352 Kelvin, la respuesta se desviará de la realidad.

XI. BIBLIOGRAFÍA

- Aréchiga G. Rafael. Introducción a la informática. México D.F. Editorial Limusa. 170 pp.
1986
- Atkins Peter Williams. Physical chemistry. 2nd ed. San Francisco, Freeman & Co. 1022
1982 pp.
- Berry R. S. Rice and J. Ross. Physical chemistry. New York John Wiley. 1306 pp.
1980
- Daniels. F. y R.A. Alberty. Fisicoquímica. 4a. ed. México D.F. Ed. Continental S.A. 736 pp.
1977
- Duffey, G. H. Química física. Madrid Editorial Del Castillo. 524 pp.
1965
- Glasstone, S. Thermodynamics for engineers. New York. D. Van Nostrand Co. Inc. 522 pp.
1947
- Goldstein L. y M. Goldstein. IBM PC (y compatibles). Introducción al sistema operativo
1988 programación y aplicaciones en Basic. 2a. ed. México D.F. Editorial Prentice
Hall. 445 pp.
- Himmelblau, David. Balances de materia y energía. 4a. ed. México D.F. Editorial Prentice
1989 Hall Hispanoamericana S.A. 660 pp.
- Liley, P. E., R. C. Reid and E. Buck. Physical and chemical data. Ed: Perry, R.H. y D.W.
1984 Green (8th ed). Chemical Engineers's Handbook pp. 3-99 a la 3-109. New
York McGraw-Hill Ltd
- Math Soft. The Math Cad®. ver. 2.09. user's guide. New York Math Soft Inc. 254 pp.
1987
- McAdams, W. H. Heat transmission. 3rd ed. Auckland McGraw-Hill Kogakusha Ltd 532
1954 pp.
- Smith, J. M. y H. C. Van Ness. Introducción a la termodinámica en ingeniería química. 2a.
1989 ed. México D.F. Editorial McGraw-Hill Interamericana, S.A. de C.V. 724 pp.
- Streeter, V.L. y E.B. Wyke. Mecánica de los fluidos. 3a. ed. México D.F. Editorial McGraw-
1990 Hill Interamericana S.A. de C.V. 598 pp.

APÉNDICES

En las siguientes páginas se lista el contenido detallado de los archivos. Encontrará la siguiente información:

- Nombre del programa.
- Naturaleza de los compuestos incluidos (gas, líquido, sólido, orgánico o inorgánico).
- Número de compuestos incluidos en el archivo.
- Nombre de cada compuesto incluido.
- Fórmula de cada compuesto (en algunos casos será el símbolo del elemento).
- Rango de temperaturas dentro del cual son válidos los cálculos efectuados (para cada compuesto).

A. APÉNDICE I

NOMBRE DEL ARCHIVO: CPGASIN.MCD

CONTIENE 54 GASES INORGÁNICOS

i	NOMBRE DEL GAS	FÓRMULA	Temperaturas (Kelvin)
1	Ácido Bromhídrico	HBr	273 - 2000
2	Ácido Cianhídrico (1)	HCN	273 - 450
3	Ácido Cianhídrico (2)	HCN	450 - 2500
4	Ácido Clorhídrico	HCl	273 - 2000
5	Ácido Fluorhídrico	HF	273 - 1673
6	Ácido Sulfhídrico (1)	H ₂ S	273 - 1773
7	Ácido Sulfhídrico (2)	H ₂ S	298 - 2300
8	Ácido Yodhídrico	HI	273 - 2000
9	Agua	H ₂ O	300 - 2500
10	Aire	----	273 - 1800
11	Amoníaco (1)	NH ₃	300 - 800
12	Amoníaco (2)	NH ₃	273 - 1473
13	Argón	Ar	TODOS
14	Azufre	S ₂	300 - 2500
15	Bromo	Br ₂	298 - 3000
16	Cloro (1)	Cl ₂	273 - 1473
17	Cloro (2)	Cl ₂	1000 - 3000
18	Dióxido de Azufre (1)	SO ₂	273 - 500
19	Dióxido de Azufre (2)	SO ₂	500 - 2500
20	Dióxido de Carbono	CO ₂	300 - 2500
21	Dióxido de Nitrógeno (1)	NO ₂	273 - 650
22	Dióxido de Nitrógeno (2)	NO ₂	650 - 2000
23	Disulfuro de Carbono	CS ₂	298 - 1800
24	Flúor	F ₂	300 - 3000
25	Helio	He	TODOS
26	Hidrógeno (atómico)	H	TODOS
27	Hidrógeno (molecular 1)	H ₂	273 - 1000
28	Hidrógeno (molecular 2)	H ₂	1000 - 3000
29	Kriptón	Kr	TODOS
30	Litio	Li	TODOS
31	Mercurio (atómico)	Hg	TODOS
32	Mercurio (molecular)	Hg ₂	300 - 2000
33	Monóxido de Carbono (1)	CO	273 - 420
34	Monóxido de Carbono (2)	CO	420 - 2500
35	Neón	Ne	TODOS
36	Nitrógeno	N ₂	273 - 1477
37	Nitrógeno	N ₂	300 - 3000
38	Oxido Fosfórico	P ₄ O ₁₀	631 - 1371
39	Oxido Nítrico	NO	273 - 3773
40	Oxido Nítrico	NO	300 - 5000
41	Oxido Nítrico	N ₂ O	273 - 1473
42	Oxido Nítrico	N ₂ O	298 - 2000
43	Oxígeno	O ₂	273 - 1773
44	Oxígeno	O ₂	300 - 5000
45	Potasio (atómico)	K	TODOS
46	Potasio (molecular)	K ₂	300 - 2000
47	Radón	Rn	TODOS
48	Sodio	Na	TODOS
49	Tetraóxido de Nitrógeno	N ₂ O ₄	273 - 573
50	Tetraóxido de Nitrógeno	N ₂ O ₄	298 - 2000
51	Trióxido de Azufre (1)	SO ₃	273 - 1273
52	Trióxido de Azufre (2)	SO ₃	298 - 2000
53	Xenón	Xe	TODOS
54	Yodo	I ₂	300 - 2000

B. APÉNDICE II.

NOMBRE DEL ARCHIVO: CPGASORG.MCD

CONTIENE 40 GASES ORGÁNICOS

Tabla 12.02

i	NOMBRE DEL GAS	FORMULA	Temperaturas (Kelvin)
1	Acetaldehído	C_2H_4O	298 - 1000
2	Acetileno	C_2H_2	273 - 1473
3	Acetona	C_3H_6O	273 - 1473
4	Alcohol Etilico	C_2H_6O	273 - 1473
5	Alcohol Metilico	CH_3OH	298 - 1500
6	Benceno	C_6H_6	273 - 1473
7	1,3 - Butadieno	C_4H_6	298 - 1500
8	n - Butano	C_4H_{10}	273 - 1473
9	iso - Butano	C_4H_{10}	273 - 1473
10	1 - Buteno	C_4H_8	298 - 1500
11	iso - Buteno	C_4H_{10}	273 - 1473
12	Ciclohexano	C_6H_{12}	273 - 1473
13	Ciclopentano	C_5H_{10}	273 - 1473
14	Cumeno (isopropilbenceno)	C_9H_{12}	273 - 1473
15	Estireno	C_8H_8	298 - 1500
16	Etano	C_2H_6	273 - 1473
17	Etilbenceno	C_8H_{10}	298 - 1500
18	Etileno	C_2H_4	273 - 1473
19	Formaldehído	CH_2O	273 - 1473
20	Freón 11	CCl_3F	273 - 423
21	Freón 21	$CHCl_2F$	273 - 423
22	Freón 22	$CHClF_2$	273 - 423
23	Freón 113	$CCl_2F-CClF_2$	273 - 423
24	n - Heptano	C_7H_{16}	298 - 1500
25	1 - Hepteno	C_7H_{14}	298 - 1500
26	n - Hexano	C_6H_{14}	273 - 1473
27	1 - Hexeno	C_6H_{12}	298 - 1500
28	Metano	CH_4	273 - 1500
29	Metilciclohexano	C_7H_{14}	273 - 1473
30	Metilciclopentano	C_6H_{12}	273 - 1473
31	n - Octano	C_8H_{18}	298 - 1500
32	1 - Octeno	C_8H_{16}	298 - 1500
33	Oxido de Etileno	C_2H_4O	298 - 1000
34	n - Pentano	C_5H_{12}	273 - 1473
35	1 - Penteno	C_5H_{10}	298 - 1500
36	Propano	C_3H_8	273 - 1473
37	Propileno	C_3H_6	273 - 1473
38	Therminol LT	----	200 - 588
39	Therminol VP - I	----	285 - 671
40	Tolueno	C_7H_8	273 - 1473

C. APÉNDICE III.

NOMBRE DEL ARCHIVO: CPLIQIN.MCD

CONTIENE 60 LIQUIDOS INORGANICOS

1	NOMBRE DEL LÍQUIDO	FÓRMULA	Temperaturas (Kelvin)
1	Ácido Clorhídrico al 30%	HCl	293 - 373
2	Ácido Nítrico	HNO ₃	273 - 298
3	Ácido Sulfúrico al 98%	H ₂ SO ₄	283 - 318
4	Agua (α)	H ₂ O	273 - 373
5	Agua (β)	H ₂ O	373 - 473
6	Aluminio	Al	931 - 1273
7	Amoníaco	NH ₃	273 - 373
8	Antimonio	Sb	903 - 1273
9	Bismuto	Bi	544 - 1273
10	Bromuro de Aluminio	AlBr ₂	373 - 407
11	Bromuro de Plata	AgBr	703 - 836
12	Bromuro Plumboso	PbBr ₂	761 - 860
13	Bromuro de Talio	TlBr	733 - 800
14	Cadmio	Cd	594 - 973
15	Cesio	Cs	302 - 943
16	Cinc	Zn	692 - 1122
17	Clorato de Sodio	NaClO ₃	528 - 572
18	Cloruro de Aluminio	AlCl ₃	465 - 504
19	Cloruro de Arsénico	AsCl ₃	286 - 371
20	Cloruro de Azufre	S ₂ Cl ₂	273 - 332
21	Cloruro Estánnico	SnCl ₄	286 - 371
22	Cloruro Fosforoso	PCl ₃	284 - 371
23	Cloruro de Plata	AgCl	728 - 808
24	Cloruro Plumboso	PbCl ₂	771 - 851
25	Cloruro Silícico	SiCl ₂ 4	293 - 373
26	Cloruro de Sodio	NaCl	1073 - 1205
27	Cloruro Taloso	TlCl	700 - 803
28	Cloruro Titánico	TiCl ₄	285 - 372
29	Cobalto	Co	1763 - 1863
30	Cobre	Cu	1357 - 1573
31	Cromo	Cr	1823 - 1923
32	Dicromato de Potasio	K ₂ Cr ₂ O ₇	671 - 757
33	Dióxido de Azufre	SO ₂	253 - 373
34	Disulfuro de Carbono (α)	CS ₂	173 - 223
35	Disulfuro de Carbono (β)	CS ₂	223 - 298
36	Estaño	Sn	286 - 371
37	Fluoruro de Aluminio 3 - (Fluoruro de Sodio)	AlF ₃ ·3NaF	1273 - 1373
38	Fósforo	P	317 - 373
39	Hierro	Fe	1803 - 1873
40	Magnesio	Mg	923 - 1048
41	Manganeso	Mn	1493 - 1673
42	Mercurio	Hg	273 - 630
43	Níquel	Ni	1725 - 1903
44	Nitrato de Litio	LiNO ₃	523 - 575
45	Nitrato de Plata	AgNO ₃	482 - 541
46	Nitrato de Potasio	KNO ₃	611 - 683
47	Nitrato de Sodio	NaNO ₃	583 - 703
48	Oro	Au	1336 - 1573
49	Plata	Ag	1234 - 1573
50	Plomo	Pb	600 - 1273
51	Potasio	K	336 - 373
52	Rubidio	Rb	312 - 373
53	Salmuera	CaCl 25%	233 - 293
54	Salmuera	NaCl 25%	233 - 293
55	Selenio	Se	490 - 570
56	Sodio	Na	371 - 451
57	Talio	Tl	576 - 773
58	Trióxido de Azufre	SO ₃	273 - 373
59	Yoduro de Aluminio	AlI ₃	464 - 480
60	Yoduro Plumboso	PbI ₂	648 - 776

D. APÉNDICE IV

NOMBRE DEL ARCHIVO: CPLIQORG.MCD

CONTIENE 69 LÍQUIDOS ORGÁNICOS

1	NOMBRE DEL LÍQUIDO	FÓRMULA	Temperaturas (Kelvin)
1	Acetato de Etilo	$C_5H_{10}O_2$	223 - 298
2	Acetato de Pentilo	$C_8H_{14}O_2$	273 - 373
3	Acetona	C_3H_6O	293 - 323
4	Ácido Acético al 100%	$C_2H_4O_2$	273 - 353
5	Alcohol Benzílico	$C_8H_5CH_3O$	253 - 303
6	Alcohol Butílico	$C_4H_{10}O$	273 - 373
7	Alcohol Etilico al 100%	C_2H_6O	273 - 373
8	Alcohol Etilico al 95%	C_2H_6O	293 - 353
9	Alcohol Etilico al 50%	C_2H_6O	293 - 353
10	Alcohol Isobutílico	$C_4H_{10}O$	273 - 373
11	Alcohol Isopentílico	$C_5H_{12}O$	283 - 373
12	Alcohol Isopropílico	C_3H_8O	253 - 323
13	Alcohol Metílico (1)	CH_4O	233 - 293
14	Alcohol Metílico (2)	CH_4O	273 - 373
15	Alcohol Pentílico	$C_5H_{12}O$	223 - 298
16	Alcohol Propílico	C_3H_8O	253 - 373
17	Anilina	$C_6H_5NH_2$	273 - 373
18	Benceno (1)	C_6H_6	279 - 350
19	Benceno (2)	C_6H_6	273 - 373
20	Bromuro de Etilo	C_2H_5Br	278 - 298
21	1,3-Butadieno	C_4H_6	273 - 373
22	Ciclohexano	C_6H_{12}	273 - 373
23	Clorobenceno	C_6H_5Cl	273 - 373
24	Cloroformo	$CHCl_3$	273 - 373
25	Cloruro de Bencilo	$C_8H_5CH_2Cl$	243 - 303
26	Cloruro de Etilo	C_2H_5Cl	243 - 313
27	Cloruro de Metilo	CH_3Cl	193 - 293
28	Decano	$C_{10}H_{22}$	193 - 298
29	Dicloroetano	$C_2H_4Cl_2$	243 - 333
30	Diclorometano	CH_2Cl_2	233 - 323
31	Difenil	$C_6H_5C_6H_5$	353 - 393
32	Difenilmetano	$C_6H_5CH_2C_6H_5$	303 - 373
33	Dowtherm A	$C_{12}H_{10}O$	273 - 473
34	Éter Etilico	$C_4H_{10}O$	173 - 298
35	Éter Isopropílico	$C_6H_{14}O$	193 - 293
36	Etilbenceno	$C_8H_5C_2H_5$	273 - 373
37	Etilenglicol	$C_2H_6O_2$	233 - 473
38	Freón 11	CCl_3F	253 - 343
39	Freón 12	CCl_2F_2	233 - 288
40	Freón 21	$CHCl_2F$	253 - 343
41	Freón 22	$CHClF_2$	253 - 333
42	Freón 113	CCl_2FCClF_2	253 - 343
43	Glicerina	$C_3H_8O_3$	233 - 293
44	n-Heptano	C_7H_{16}	273 - 333
45	n-Hexano (1)	C_6H_{14}	193 - 293
46	n-Hexano (2)	C_6H_{14}	20 - 373
47	Naftaleno	$C_{10}H_8$	363 - 473
48	Nitrobenceno	$C_6H_5NO_2$	273 - 373
49	Nonano	C_9H_{20}	223 - 298
50	Octano	C_8H_{18}	223 - 298
51	Oxido de Difenilo	$C_{10}H_{10}O$	273 - 473
52	Oxido de Etileno	C_2H_4O	273 - 373
53	n-Pentano	C_5H_{12}	273 - 309
54	Percloroetileno	C_2Cl_4	243 - 413
55	Piridina	C_5H_5N	223 - 298
56	Tetracloruro de Carbono	CCl_4	273 - 373
57	Therminol LT	----	200 - 588
58	Therminol 44	----	222 - 477
59	Therminol 55	----	245 - 580
60	Therminol 59	----	228 - 588
61	Therminol 60	----	222 - 599
62	Therminol 66	----	265 - 616
63	Therminol 75	----	343 - 671
64	Therminol VP-1	----	285 - 671
65	Tolueno	C_7H_8	273 - 373
66	Xileno (meta)	C_8H_{10}	273 - 373
67	Xileno (orto)	C_8H_{10}	273 - 373
68	Xileno (para)	C_8H_{10}	273 - 373
69	Yoduro de Etilo	C_2H_5I	273 - 373

E. APÉNDICE V.

NOMBRE DEL ARCHIVO: CPSOLORG.MCD

CONTIENE 80 SÓLIDOS ORGÁNICOS

1	NOMBRE DEL SÓLIDO	FÓRMULA	Temperaturas (Kelvin)
1	Acetona	C_3H_6O	63 - 193
2	Ácido Acético	$C_2H_4O_2$	73 - 298
3	Ácido o-Aminobenzóico	$C_7H_7NO_2$	358 - 421
4	Ácido m-Aminobenzóico	$C_7H_7NO_2$	393 - 447
5	Ácido p-Aminobenzóico	$C_7H_7NO_2$	401 - 461
6	Ácido Benzóico	$C_7H_6O_2$	293 - 395
7	Ácido o-Clorobenzóico	$C_7H_5ClO_2$	353 - 415
8	Ácido m-Clorobenzóico	$C_7H_5ClO_2$	367 - 431
9	Ácido p-Clorobenzóico	$C_7H_5ClO_2$	453 - 516
10	Ácido Crotonico (2-Butenóico)	$C_4H_6O_2$	311 - 343
11	Ácido Láurico	$C_{12}H_{24}O_2$	243 - 313
12	Ácido Mirístico	$C_{14}H_{28}O_2$	273 - 308
13	Ácido o-Nitrobenzóico	$C_7H_5NO_4$	110 - 421
14	Ácido m-Nitrobenzóico	$C_7H_5NO_4$	339 - 414
15	Ácido p-Nitrobenzóico	$C_7H_5NO_4$	113 - 515
16	Ácido Oxálico	$C_2H_2O_4$	73 - 323
17	Ácido Palmítico	$C_{16}H_{32}O_2$	93 - 293
18	Ácido Pírico	$C_6H_3N_3O_7$	173 - 393
19	Ácido Succínico	$C_4H_6O_4$	273 - 433
20	Ácido Tartárico	$C_4H_6O_6 \cdot H_2O$	123 - 323
21	Ácido 1-Tetril. 1-Pírico	$C_{13}H_8N_8O_{15}$	173 - 373
22	Ácido o-Tolúico	$C_8H_8O_2$	327 - 378
23	Ácido m-Tolúico	$C_8H_8O_2$	327 - 383
24	Ácido p-Tolúico	$C_8H_8O_2$	403 - 453
25	Ácido Tricloroacético	$C_2HCl_3O_2$	23 - 331
26	Alcohol Etilico (etanol)	C_2H_6O	83 - 143
27	Alcohol Etilico (vitreo)	C_2H_6O	83 - 103
28	Alcohol Isopropílico	C_3H_8O	73 - 113
29	Alcohol n-Propílico	C_3H_8O	73 - 143
30	Antraceno	$C_{14}H_{10}$	323 - 423
31	Antraquinona	$C_{14}H_8O_2$	273 - 543
32	Amiour (de C.S.S.)	$C_{12}H_{22}O_{11}$	295 - 324
33	Benceno	C_6H_6	23 - 273
34	Benzofenona	$C_{13}H_{10}O$	123 - 293
35	Betol	$C_{17}H_{12}O_3$	123 - 323
36	o-Bromoyodobenceno	$C_6H_4Br_2$	223 - 323
37	m-Bromoyodobenceno	$C_6H_4Br_2$	198 - 258
38	p-Bromoyodobenceno	$C_6H_4Br_2$	233 - 323
39	Dextrina	$(C_6H_{10}O_5)_x$	273 - 363
40	Dextrosa	$C_6H_{12}O_6$	23 - 293
41	p-Dibromobenceno	$C_6H_4Br_2$	223 - 323
42	p-Diclorobenceno	$C_6H_4Cl_2$	223 - 326
43	Diotandiamida (Cianoguanidina)	$C_2H_4N_4$	273 - 477
44	o-Dihidroxibenceno (Catecol)	$C_6H_6O_2$	110 - 378
45	m-Dihidroxibenceno (Resorcinol)	$C_6H_6O_2$	113 - 383
46	p-Dihidroxibenceno (Hidroquinona 1)	$C_6H_6O_2$	23 - 123
47	p-Dihidroxibenceno (Hidroquinona 2)	$C_6H_6O_2$	123 - 443
48	o-Dinitrobenceno	$C_6H_4N_2O_4$	113 - 391
49	m-Dinitrobenceno	$C_6H_4N_2O_4$	113 - 363
50	p-Dinitrobenceno	$C_6H_4N_2O_4$	392 - 447
51	o-Diyodobenceno	$C_6H_4I_2$	223 - 288
52	m-Diyodobenceno	$C_6H_4I_2$	221 - 231
53	p-Diyodobenceno	$C_6H_4I_2$	223 - 353
54	Etilenglicol	$C_2H_6O_2$	63 - 233
55	Fenol	C_6H_6O	287 - 299
56	Glicerol (Glicerina)	$C_3H_8O_2$	8 - 273
57	p-Hidroxiacetanilida	$C_8H_9NO_2$	314 - 441
58	Manitol	$C_6H_{14}O_6$	273 - 373
59	Naftaleno	$C_{10}H_8$	143 - 353
60	α -Nafthilamina	$C_{10}H_9N$	273 - 323
61	α -Nafiol	$C_{10}H_8O$	323 - 369
62	β -Nafiol	$C_{10}H_8O$	334 - 396
63	o-Nitroanilina	$C_6H_6N_2O_2$	113 - 345
64	m-Nitroanilina	$C_6H_6N_2O_2$	113 - 387
65	p-Nitroanilina	$C_6H_6N_2O_2$	113 - 420
66	Nitronaftaleno	$C_{10}H_7NO_2$	273 - 328
67	Oxalato de Dimetilo	$C_4H_6O_4$	263 - 323
68	Quinidrona	$C_{12}H_{10}O_4$	23 - 273
69	Quinona (p-Benzoquinona 1)	$C_6H_4O_2$	23 - 123
70	Quinona (p-Benzoquinona 2)	$C_6H_4O_2$	123 - 389
71	Tetracloroetileno	C_2Cl_4	233 - 273
72	Tetracloruro de Carbono	CCl_4	33 - 233
73	Tetral	C_7H_8	173 - 373
74	1-Tetral. 2-Trinitrotolueno	$C_{21}H_{15}N_3O_6$	173 - 323
75	Tinol	$C_{21}H_{15}N_3O_6$	273 - 323
76	p-Toluidina	C_7H_9N	273 - 313
77	Trifentmetano	$C_{19}H_{18}$	273 - 364
78	Trinitrotolueno (TNT)	$C_7H_5N_3O_6$	173 - 373
79	Trinitroxileno (1)	$C_8H_7N_3O_6$	88 - 293
80	Trinitroxileno (2)	$C_8H_7N_3O_6$	293 - 323

F. APÉNDICE VI

NOMBRE DEL ARCHIVO. ELEMENTS.MCD

CONTIENE 58 ELEMENTOS

i	Nombre Del Elemento	Símbolo	Temperaturas (Kelvin)
1	Aluminio	Al	273 - 931
2	Antimonio	Sb	273 - 903
3	Arsénico	As	273 - 1168
4	Azufre (monoclinico)	S	268 - 392
5	Azufre (rómico)	S	273 - 368
6	Berilio	Be	273 - 1173
7	Bismuto	Bi	273 - 544
8	Boro	B	273 - 1174
9	Cadmio	Cd	273 - 594
10	Calcio	Ca	273 - 673
11	Carbono (diamante)	C	273 - 1313
12	Carbono (grafito)	C	273 - 1373
13	Cerio	Ce	273 - 908
14	Césio	Cs	273 - 301
15	Cinc	Zn	273 - 692
16	Cromo	Cr	273 - 1083
17	Cobalto	Co	273 - 1763
18	Cobre	Cu	273 - 1357
19	Estaño	Sn	273 - 504
20	Fósforo (amarillo)	P	273 - 317
21	Fósforo (rojo)	P	273 - 472
22	Hierro (α)	Fe	273 - 1041
23	Hierro (β)	Fe	1041 - 1179
24	Hierro (γ)	Fe	1179 - 1874
25	Hierro (δ)	Fe	1874 - 1803
26	Iridio	Ir	273 - 1873
27	Lantano	La	273 - 1009
28	Litio	Li	273 - 459
29	Magnesio	Mg	273 - 923
30	Manganeso (α)	Mn	273 - 1108
31	Manganeso (β)	Mn	1108 - 1317
32	Manganeso (γ)	Mn	1317 - 1493
33	Molibdeno	Mo	273 - 1773
34	Níquel (α)	Ni	273 - 626
35	Níquel (β)	Ni	626 - 1725
36	Oro	Au	273 - 1366
37	Osmio	Os	273 - 1877
38	Paladio	Pd	273 - 1822
39	Plata	Ag	273 - 1234
40	Platino	Pt	273 - 1873
41	Plomo	Pb	273 - 600
42	Potasio	K	273 - 336
43	Renio	Re	273 - 2273
44	Rodio	Rh	273 - 1877
45	Rubidio	Rb	273 - 312
46	Selenio	Se	273 - 490
47	Silicio	Si	273 - 1174
48	Sodio	Na	273 - 371
49	Talio (α)	Tl	273 - 500
50	Talio (β)	Tl	500 - 576
51	Tantalio	Ta	273 - 1173
52	Telurio	Te	273 - 600
53	Titanio	Ti	273 - 713
54	Torio	Th	273 - 373
55	Tungsteno (Wolframio)	W	273 - 2073
56	Uranio	U	273 - 372
57	Vanadio	V	273 - 1993
58	Yodo	I ₂	273 - 387

G. APÉNDICE VII

NOMBRE DEL ARCHIVO: OXIDOS.MCD

CONTIENE 67 ÓXIDOS SÓLIDOS

Tabla 12.07

1	NOMBRE DEL ÓXIDO	FÓRMULA	Temperaturas (Kelvin)
1	Aluminato Berílico	$\text{BeO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$	273 - 373
2	Aluminato Magnésico	$\text{MgO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$	288 - 319
3	Anhidrido Arsenoso	As_2O_3	273 - 548
4	Anhidrido Bórico (glass 1)	B_2O_3	273 - 513
5	Anhidrido Bórico (glass 2)	B_2O_3	513 - 623
6	Anhidrido Fosfórico	P_2O_5	273 - 631
7	Anhidrido Molibdeno	MoO_3	273 - 1068
8	Anhidrido Silícico (Cuarzo α)	SiO_2	273 - 848
9	Anhidrido Silícico (Cuarzo β)	SiO_2	848 - 1873
10	Anhidrido Silícico (Cristobalita α)	SiO_2	273 - 523
11	Anhidrido Silícico (Cristobalita β)	SiO_2	523 - 1973
12	Anhidrido Silícico (glass)	SiO_2	273 - 1973
13	Anhidrido Tángstico	WO_3	273 - 1550
14	Oxido Aluminico	Al_2O_3	273 - 1973
15	Oxido Antimónico	Sb_2O_3	273 - 1198
16	Oxido Antimonio	Sb_2O_3	273 - 929
17	Oxido Berílico	BeO	273 - 1175
18	Oxido Bismutoso	Bi_2O_3	273 - 777
19	Oxido Cádrico	CdO	273 - 2086
20	Oxido Cálcico	CaO	273 - 1173
21	Oxido Cérico	CeO_2	273 - 373
22	Oxido Cincico	ZnO	273 - 1573
23	Oxido Circónico	ZrO_2	273 - 1873
24	Oxido Crómico	Cr_2O_3	273 - 2263
25	Oxido Cúprico	CuO	273 - 810
26	Oxido Escándico	Sc_2O_3	273 - 373
27	Oxido Estánico	SnO_2	273 - 1373
28	Oxido Estanoso	SnO	273 - 1273
29	Oxido Férrico	Fe_2O_3	273 - 1097
30	Oxido Férrico (hidratado)	$\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	273 - 373
31	Oxido Ferroso	FeO	273 - 1173
32	Oxido Ferrosiférrico (Magnetita)	Fe_3O_4	273 - 1065
33	Oxido Gálico	Ga_2O_3	273 - 923
34	Oxido Lantánico	La_2O_3	273 - 2273
35	Oxido Magnésico	MgO	273 - 2073
36	Oxido de Manganeso (II)	MnO	273 - 1923
37	Oxido de Manganeso (III)	Mn_2O_3	273 - 1173
38	Oxido de Manganeso (III) (hidrato)	$\text{Mn}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	291 - 322
39	Oxido de Manganeso (IV)	MnO_2	273 - 773
40	Oxido Manganomangánico	Mn_3O_4	273 - 1773
41	Oxido Mercurico	HgO	278 - 371
42	Oxido Niqueloso	NiO	273 - 1273
43	Oxido Plumboso	PbO	273 - 544
44	Oxido Titanico	TiO_2	273 - 713
45	Oxido Tóxico	ThO_2	273 - 1273
46	Silicato Aluminico (Silicatosita)	$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1573
47	Silicato Aluminico (Disteno)	$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1673
48	Silicato Aluminico (Andalucita)	$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1573
49	Silicato Aluminico (Mullita)	$3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$	273 - 576
50	Silicato de Aluminio	$4\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{SiO}_2$	273 - 575
51	Silicato Aluminico y Cálcico (Anortita)	$\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1673
52	Silicato Aluminico y Cálcico (glass)	$\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$	273 - 973
53	Silicato Cálcico (glass)	$\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$	273 - 973
54	Silicato Cálcico (Pseudowolastonita)	$\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1673
55	Silicato Cálcico (Wolastonita)	$\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1573
56	Silicato Cálcico y Magnésico	$\text{CaO} \cdot \text{MgO} \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1573
57	Silicato Circónico	$\text{ZrO}_2 \cdot \text{SiO}_2$	297 - 372
58	Silicato Cúprico	$\text{CuO} \cdot \text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	293 - 323
59	Silicato Magnésico (Anfibol)	$\text{MgO} \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1373
60	Silicato Magnésico (glass)	$\text{MgO} \cdot \text{SiO}_2$	273 - 973
61	Silicato Magnésico (Proxeno)	$\text{MgO} \cdot \text{SiO}_2$	273 - 773
62	Silicato Potásico y Aluminico (Microcline)	$\text{K}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1373
63	Silicato Potásico y Aluminico (Microline, glass)	$\text{K}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1373
64	Silicato Potásico y Aluminico (Orthoclase)	$\text{K}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1373
65	Silicato Potásico y Aluminico (Orthoclase, glass)	$\text{K}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1373
66	Silicato Sódico y Aluminico (Albita)	$\text{K}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$	273 - 1373
67	Silicato Sódico y Aluminico (glass)	$\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{SiO}_2$	273 - 1173

H. APÉNDICE VIII

NOMBRE DEL ARCHIVO: SOL-A_B.MCD

CONTIENE 44 SÓLIDOS INORGÁNICOS

TABLA 1208

i	NOMBRE DEL SÓLIDO	FÓRMULA	Temperaturas (Kelvin)
1	Ácido Pírosulfúrico	$H_2S_2O_7$	281 - 308
2	Aleación de Cobre y Aluminio (1)	$CuAl$	273 - 733
3	Aleación de Cobre y Aluminio (2)	$CuAl_2$	273 - 773
4	Aleación de Cobre y Aluminio (3)	Cu_3Al_2	273 - 775
5	Aleación de Estaño y Oro	$SnAu$	273 - 581
6	Aleación de Estaño y Platino	$SnPt$	273 - 1318
7	Aleación de Magnesio y Aluminio	Mg_4Al_3	273 - 736
8	Aleación de Magnesio y Cobre (1)	$MgCu_2$	273 - 903
9	Aleación de Magnesio y Cobre (2)	Mg_2Cu	273 - 843
10	Aleación de Magnesio y Níquel	$MgNi_2$	273 - 903
11	Aleación de Magnesio y Oro (1)	$MgAu$	273 - 1433
12	Aleación de Magnesio y Oro (2)	Mg_2Au	273 - 1073
13	Aleación de Magnesio y Oro (3)	Mg_3Au	273 - 1103
14	Aleación de Magnesio y Plata	$MgAg$	273 - 905
15	Aleación de Níquel y Estaño	Ni_3Sn	273 - 904
16	Aleación de Plata y Aluminio (1)	Ag_3Al	273 - 902
17	Aleación de Plata y Aluminio (2)	Ag_2Al	273 - 903
18	Aleación de Plata y Aluminio (3)	$AgAl_2$	273 - 768
19	Antimonio Cincoso	$ZnSb$	273 - 810
20	Antimonio Cobáltico	$CoSb$	273 - 1464
21	Antimonio Crómico	$CrSb$	273 - 1383
22	Antimonio Cromoso	$CrSb_2$	273 - 949
23	Antimonio Cúprico	Cu_2Sb	273 - 573
24	Antimonio Cuproso	Cu_3Sb	273 - 693
25	Antimonio de Plata	Ag_3Sb	273 - 694
26	Bicarbonato Sódico	$NaHCO_3$	278 - 400
27	Bisfosfato Sódico (hidrato 1)	$Na_2HPO_4 \cdot 7H_2O$	275 - 307
28	Bisfosfato Sódico (hidrato 2)	$Na_2HPO_4 \cdot 12H_2O$	275 - 307
29	Bisulfato Potásico	$KHSO_4$	292 - 324
30	Bromuro Potásico	KBr_3	273 - 370
31	Bromuro Amónico	NH_4Br	274 - 328
32	Bromuro Antimonico	$SbBr_3$	273 - 370
33	Bromuro Césico	$CsBr$	273 - 909
34	Bromuro Estróncico	$SrBr_2$	273 - 923
35	Bromuro Estróncico (hidrato 1)	$SrBr_2 \cdot H_2O$	277 - 370
36	Bromuro Estróncico (hidrato 2)	$SrBr_2 \cdot 8H_2O$	276 - 327
37	Bromuro Litico (1)	$LiBr$	278 - 318
38	Bromuro Litico (2)	$LiBr$	273 - 825
39	Bromuro de Plata	$AgBr$	273 - 703
40	Bromuro Plumboso	$PbBr_2$	273 - 761
41	Bromuro Potásico	KBr	273 - 543
42	Bromuro Rubídico	$RbBr$	273 - 954
43	Bromuro Sódico	$NaBr$	273 - 543
44	Bromuro Talcoo	$TlBr$	273 - 733

I. APÉNDICE IX.

NOMBRE DEL ARCHIVO: SOL-C.MCD

CONTIENE 55 SÓLIDOS INORGÁNICOS

i	NOMBRE DEL SÓLIDO	FÓRMULA	Temperaturas (Kelvin)
1	Carbonato Bórico (1)	BaCO ₃	273 - 1083
2	Carbonato Bórico (2)	BaCO ₃	1083 - 1255
3	Carbonato Cálcico	CaCO ₃	273 - 1033
4	Carbonato Cálcico y Magnésico	CaMg(CO ₃) ₂	299 - 372
5	Carbonato Estróncico	SrCO ₃	281 - 371
6	Carbonato Ferroso	FeCO ₃	293 - 368
7	Carbonato Manganeso	MnCO ₃	273 - 773
8	Carbonato Plumboso	PbCO ₃	286 - 320
9	Carbonato Potásico	K ₂ CO ₃	293 - 372
10	Carbonato Rubídico	Rb ₂ CO ₃	291 - 320
11	Carbonato Sódico	Na ₂ CO ₃	288 - 371
12	Carbonato Sódico (hidrato)	Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O	298 - 315
13	Carburo Cálcico (cementita)	CaC ₂	298 - 720
14	Carburo Ferroso	Fe ₃ C	273 - 1173
15	Carburo Silícico	SiC	273 - 1629
16	Cianato de Plata	AgCNO	273 - 353
17	Cianato Sódico	NaCNO	273 - 353
18	Cianuro Mercurio	Hg(CN) ₂	285 - 319
19	Clorato Bórico	Ba(ClO ₃) ₂ ·H ₂ O	289 - 320
20	Clorato Potásico	KClO ₃	289 - 371
21	Clorato Sódico	NaClO ₃	273 - 528
22	Cloruro Aluminico	AlCl ₃	273 - 465
23	Cloruro Amónico (α)	NH ₄ Cl	273 - 457
24	Cloruro Amónico (β)	NH ₄ Cl	457 - 523
25	Cloruro Antimonioso	SbCl ₃	273 - 346
26	Cloruro Bórico	BaCl ₂	273 - 1198
27	Cloruro Bórico (hidrato 1)	BaCl ₂ ·H ₂ O	273 - 307
28	Cloruro Bórico (hidrato 2)	BaCl ₂ ·2H ₂ O	273 - 307
29	Cloruro Cálcico	CaCl ₂	273 - 1055
30	Cloruro Césico	CsCl	273 - 307
31	Cloruro Cínico	ZnCl ₂	273 - 638
32	Cloruro Crómico	CrCl ₃	288 - 319
33	Cloruro Estanoso	SnCl ₂	273 - 520
34	Cloruro Estróncico	SrCl ₂	273 - 1143
35	Cloruro Estróncico (hidrato 1)	SrCl ₂ ·H ₂ O	276 - 365
36	Cloruro Estróncico (hidrato 2)	SrCl ₂ ·2H ₂ O	277 - 366
37	Cloruro Lítico	LiCl	273 - 887
38	Cloruro Lítico (hidrato)	LiCl·H ₂ O	279 - 360
39	Cloruro Magnésico	MgCl ₂	273 - 991
40	Cloruro Magnésico (hidrato)	MgCl ₂ ·6H ₂ O	292 - 342
41	Cloruro Manganeso	MnCl ₂	273 - 923
42	Cloruro Mercurio	HgCl ₂	273 - 553
43	Cloruro Mercuroso	HgCl	273 - 798
44	Cloruro de Plata	AgCl	273 - 728
45	Cloruro Plumboso	PbCl ₂	273 - 771
46	Cloruro Potásico	KCl	273 - 1043
47	Cloruro Potásico y Cínico	2KCl·ZnCl ₂	279 - 319
48	Cloruro Potásico y Cáprico	2KCl·CaCl ₂ ·2H ₂ O	292 - 323
49	Cloruro Potásico y Estánico	2KCl·SnCl ₄	292 - 323
50	Cloruro Potásico y Platínico	2KCl·PtCl ₄	288 - 319
51	Cloruro Rubídico	RbCl	273 - 987
52	Cloruro Sódico	NaCl	273 - 1074
53	Cloruro Taloso	TlCl	273 - 700
54	Cloruro Plumboso	PbCl ₃	292 - 323
55	Cromato Potásico	K ₂ CrO ₄	298 - 371

J. APÉNDICE X.

NOMBRE DEL ARCHIVO: SOL-D_P.MCD

CONTIENE 55 SÓLIDOS INORGÁNICOS

1	NOMBRE DEL SÓLIDO	FÓRMULA	Temperaturas (Kelvin)
1	Diantimonio Aurico (α)	AsSb_2	273 - 628
2	Diantimonio Aurico (β)	AsSb_2	628 - 713
3	Diantimonio Magnésico	Mg_3Sb_2	273 - 1234
4	Diaseniuro Disulfuro Cobáltico	$\text{CoAs}_2 \cdot \text{CoS}_2$	283 - 373
5	Diaseniuro Férrico	FeAs_2	283 - 373
6	Dicromato Potásico	$\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$	273 - 871
7	Disulfuro de Molibdeno (III)	MoS_2	273 - 729
8	Disulfuro Ferroso	FeS_2	273 - 773
9	Ferrocianato Potásico	$\text{K}_4\text{Fe}(\text{CN})_6$	273 - 319
10	Ferrocianato Potásico (hidrato)	$\text{K}_4\text{Fe}(\text{CN})_6 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	273 - 310
11	Fluoruro Aluminico	AlF_3	288 - 327
12	Fluoruro Aluminico (hidrato)	$\text{AlF}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	288 - 326
13	Fluoruro Aluminico y Sódico	$\text{AlF}_3 \cdot 3\text{NaF}$	273 - 1273
14	Fluoruro Cálculo	CaF_2	273 - 1851
15	Fluoruro Césico	CsF	273 - 957
16	Fluoruro Lítico	LiF	273 - 1117
17	Fluoruro Plumboso	PbF_2	273 - 1091
18	Fluoruro Potásico	KF	273 - 1129
19	Fluoruro Rubídico	RbF	273 - 1048
20	Fluoruro Sódico	NaF	273 - 1261
21	Fosfato Diácido de Potasio	KH_2PO_4	290 - 320
22	Fosfato de Plata	Ag_3PO_4	293 - 325
23	Hidróxido Cálculo	$\text{Ca}(\text{OH})_2$	276 - 373
24	Hidróxido Magnésico	$\text{Mg}(\text{OH})_2$	292 - 323
25	Hidróxido Sódico (sosa cáustica)	NaOH	298 - 566
26	Hipofosfato Cálculo	CaP_2O_6	287 - 371
27	Meta-arseniato Potásico	KAsO_3	290 - 372
28	Metaborato Plumboso	PbB_2O_4	288 - 371
29	Metaborato Potásico	KBO_2	273 - 1220
30	Metaborato Sódico	NaBO_2	273 - 1239
31	Molibdato Bórico	BaMoO_4	273 - 297
32	Molibdato Cálculo	CaMoO_4	273 - 297
33	Molibdato Ceroso	$\text{Ce}_2(\text{MoO}_4)_3$	273 - 297
34	Molibdato Estróncico	SrMoO_4	273 - 297
35	Molibdato Lantánico	$\text{La}_2(\text{MoO}_4)_3$	273 - 302
36	Molibdato Plumboso	PbMoO_4	292 - 322
37	Nitrato Amónico	NH_4NO_3	273 - 393
38	Nitrato Bórico	$\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$	285 - 371
39	Nitrato Estróncico	$\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$	290 - 320
40	Nitrato Lítico	LiNO_3	273 - 523
41	Nitrato Plumboso	$\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$	286 - 320
42	Nitrato Potásico (α)	KNO_3	273 - 401
43	Nitrato Potásico (β)	KNO_3	401 - 611
44	Nitrato de Plata (α)	AgNO_3	273 - 443
45	Nitrato de Plata (β)	AgNO_3	443 - 482
46	Nitrato Sódico	NaNO_3	273 - 563
47	Nitrato Bórico	BN	273 - 1273
48	Ortoarseniato Diácido de Potasio	KH_2AsO_4	289 - 319
49	Ortoarseniato Plumboso	$\text{Pb}_3(\text{AsO}_4)_2$	286 - 370
50	Ortofosfito Sódico	NaPO_3	290 - 319
51	Perclorato Potásico	KClO_4	287 - 318
52	Permanganato Potásico	KMnO_4	287 - 318
53	Pirofosfato Plumboso	$\text{Pb}_2\text{P}_2\text{O}_7$	284 - 371
54	Pirofosfato Potásico	$\text{K}_4\text{P}_2\text{O}_7$	290 - 371
55	Pirofosfato Sódico	$\text{Na}_4\text{P}_2\text{O}_7$	290 - 371

K. APÉNDICE XL

NOMBRE DEL ARCHIVO. SOL-SMCD

CONTIENE 52 SÓLIDOS INORGÁNICOS

i	NOMBRE DEL SÓLIDO	FÓRMULA	Temperaturas (Kelvin)
1	Selenuro Cuproso (α)	Cu_2Se	273 - 383
2	Selenuro Cuproso (β)	Cu_2Se	383 - 488
3	Selenuro de Plata (α)	Ag_2Se	273 - 406
4	Selenuro de Plata (β)	Ag_2Se	406 - 460
5	Silicato Ferroso	Fe_2SiO_4	273 - 1161
6	Siliciuro Cuproso	Cu_3Si	273 - 1135
7	Siliciuro Ferroso	FeSi	273 - 903
8	Siliciuro Magnésico	Mg_2Si	273 - 1343
9	Siliciuro Niquélico	NiSi	273 - 1273
10	Siliciuro Niqueloso	Ni_2Si	273 - 1582
11	Sulfato Aluminico	$\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$	273 - 373
12	Sulfato Aluminico (hidrato)	$\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 18\text{H}_2\text{O}$	288 - 325
13	Sulfato Amónico	$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$	275 - 328
14	Sulfato Bórico	BaSO_4	273 - 1323
15	Sulfato Berílico	BeSO_4	273 - 373
16	Sulfato Cádrico	$\text{CdSO}_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$	293 - 315
17	Sulfato Cálcico	CaSO_4	273 - 1373
18	Sulfato Cálcico (hidrato)	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	282 - 373
19	Sulfato Ceroso	$\text{Ce}_2(\text{SO}_4)_3$	273 - 373
20	Sulfato Ceroso (hidrato)	$\text{Ce}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	273 - 319
21	Sulfato Cíncico	ZnSO_4	293 - 373
22	Sulfato Cíncico (hidrato)	$\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	273 - 307
23	Sulfato Cobaltoso	$\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	286 - 303
24	Sulfato Cromoso	$\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3$	273 - 373
25	Sulfato Cúprico	CuSO_4	282 - 873
26	Sulfato Cúprico (hidrato 1)	$\text{CuSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$	282 - 523
27	Sulfato Cúprico (hidrato 2)	$\text{CuSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	282 - 373
28	Sulfato Cúprico (hidrato 3)	$\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	282 - 373
29	Sulfato Escáncico	$\text{Sc}_2(\text{SO}_4)_3$	273 - 373
30	Sulfato Estróncico	SrSO_4	293 - 369
31	Sulfato Férrico	$\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$	273 - 373
32	Sulfato Ferroso	FeSO_4	293 - 373
33	Sulfato Ferroso (hidrato)	$\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	291 - 373
34	Sulfato Gálico	$\text{Ga}_2(\text{SO}_4)_3$	273 - 373
35	Sulfato Lantánico	$\text{La}_2(\text{SO}_4)_3$	273 - 373
36	Sulfato Lantánico (hidrato)	$\text{La}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$	273 - 319
37	Sulfato Magnésico	MgSO_4	296 - 372
38	Sulfato Magnésico (hidrato)	$\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	291 - 319
39	Sulfato Manganeso	MnSO_4	293 - 373
40	Sulfato Manganeso (hidrato)	$\text{MnSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	290 - 319
41	Sulfato Mercuroso	Hg_2SO_4	273 - 307
42	Sulfato Niqueloso	NiSO_4	293 - 373
43	Sulfato Niqueloso (hidrato)	$\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	291 - 325
44	Sulfato Plumboso	PbSO_4	293 - 372
45	Sulfato Potásico	K_2SO_4	278 - 371
46	Sulfato Potásico y Aluminico	$\text{K}_2\text{SO}_4 \cdot \text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	292 - 322
47	Sulfato Potásico y Cíncico	$\text{K}_2\text{SO}_4 \cdot \text{ZnSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	293 - 317
48	Sulfato Potásico y Cromoso	$\text{K}_2\text{SO}_4 \cdot \text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 24\text{H}_2\text{O}$	292 - 324
49	Sulfato Potásico y Magnésico	$\text{K}_2\text{SO}_4 \cdot \text{MgSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	292 - 323
50	Sulfato Potásico y Niquélico	$\text{K}_2\text{SO}_4 \cdot \text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	289 - 319
51	Sulfato Sódico	Na_2SO_4	289 - 371
52	Sulfato Tórico	$\text{Th}(\text{SO}_4)_2$	273 - 373

L. APÉNDICE XII

NOMBRE DEL ARCHIVO: SOL-S_Y.MCD

CONTIENE 51 SÓLIDOS INORGÁNICOS

i	NOMBRE DEL SÓLIDO	FÓRMULA	Temperaturas (Kelvin)
1	Sulfuro Antimonioso	Sb_2S_3	273 - 302
2	Sulfuro Arsenioso	As_2S_3	293 - 373
3	Sulfuro Bismutoso	Bi_2S_3	284 - 372
4	Sulfuro Cádmico	CdS	273 - 1273
5	Sulfuro Cínico	ZnS	273 - 1173
6	Sulfuro Cobaltoso	CoS	273 - 1373
7	Sulfuro Cúprico	CuS	273 - 1273
8	Sulfuro Cúprico y Ferroso	$CuS \cdot FeS$	292 - 321
9	Sulfuro Cuproso (α)	Cu_2S	273 - 376
10	Sulfuro Cuproso (β)	Cu_2S	376 - 1173
11	Sulfuro Estánico	SnS_2	273 - 873
12	Sulfuro Estanoso	SnS	273 - 1153
13	Sulfuro Ferroso (α)	FeS	273 - 411
14	Sulfuro Ferroso (β)	FeS	411 - 1468
15	Sulfuro Manganeso	MnS	273 - 1883
16	Sulfuro Mercurico	HgS	273 - 853
17	Sulfuro Niqueloso	NiS	273 - 597
18	Sulfuro de Plata (α)	Ag_2S	273 - 448
19	Sulfuro de Plata (β)	Ag_2S	448 - 597
20	Sulfuro Plumboso	PbS	273 - 873
21	Teluro Niqueloso	$NiTe$	273 - 700
22	Tetraborato Plumboso	PbB_4O_7	289 - 371
23	Tetraborato Potásico	$K_2B_4O_7$	290 - 372
24	Tetraborato Sódico	$Na_2B_4O_7$	289 - 371
25	Tetraborato Sódico (hidrato)	$Na_2B_4O_7 \cdot 10H_2O$	292 - 323
26	Tiosulfato Plumboso	PbS_2O_3	292 - 373
27	Tiosulfato Potásico	$K_2S_2O_3$	273 - 373
28	Tiosulfato Sódico	$Na_2S_2O_3$	273 - 307
29	Tiosulfato Sódico (hidrato)	$Na_2S_2O_3 \cdot 5H_2O$	273 - 307
30	Tungstato Cálcico	$CaWO_4$	292 - 322
31	Tungstato Plumboso	$PbWO_4$	273 - 297
32	Yoduro Aluminico	AlI_3	273 - 464
33	Yoduro Amónico	NH_4I	273 - 328
34	Yoduro Césico	CsI	273 - 894
35	Yoduro Cúprico	CuI_2	274 - 328
36	Yoduro Cuproso	CuI	273 - 675
37	Yoduro Estróncico	SrI_2	273 - 783
38	Yoduro Estróncico (hidrato 1)	$SrI_2 \cdot H_2O$	276 - 363
39	Yoduro Estróncico (hidrato 2)	$SrI_2 \cdot 2H_2O$	275 - 336
40	Yoduro Estróncico (hidrato 3)	$SrI_2 \cdot 6H_2O$	275 - 333
41	Yoduro Lítico	LiI	273 - 1117
42	Yoduro Lítico (hidrato 1)	$LiI \cdot H_2O$	273 - 723
43	Yoduro Lítico (hidrato 2)	$LiI \cdot 2H_2O$	277 - 359
44	Yoduro Lítico (hidrato 3)	$LiI \cdot 3H_2O$	277 - 345
45	Yoduro Mercurico (α)	HgI_2	273 - 403
46	Yoduro Mercurico (β)	HgI_2	403 - 523
47	Yoduro Mercuroso	HgI	273 - 563
48	Yoduro de Plata	AgI	273 - 423
49	Yoduro Plumboso	PbI_2	273 - 648
50	Yoduro Rubídico	RbI	273 - 913
51	Yoduro Sódico	NaI	273 - 936

□

M. APÉNDICE XIII

I. INSTRUCCIONES PARA EL USO DE LOS PROGRAMAS.

- a. Debe leer cuidadosamente todas las instrucciones.
- b. Para avanzar o retroceder de pantalla en pantalla, puede usar las teclas con flechas o las marcadas [Page Up] o [Page Down].
- c. Para cambiar las definiciones i= o T= puede practicar con el siguiente ejemplo:
- i. Primero coloque el cursor sobre el número de la definición. Por ejemplo para el número 298.15, el cursor puede ir sobre el dos, el nueve, etc.
 - ii. Teniendo el cursor sobre el último número, pulse la tecla [Ctrl] y sin soltarla, pulse la tecla [F3]. Aparecerá entonces un cuadro.
 - iii. Dentro del cuadro debe escribir el número que desee.


```
i= 45
T= 298.15
```
 - iv. Practique varias veces borrando e ingresando nuevos números, hasta que sienta seguridad al hacerlo.
- d. Durante el programa, encontrará que para ver los resultados o para cambiar de temperatura o de compuesto, se le indica que debe ejecutar cierta secuencia. Esta secuencia siempre empieza con la tecla [ESC] y finaliza con la tecla [ENTER]. Localícelas. Por ejemplo, se le pide que ejecute la secuencia: [Esc] 'GO 25' [Enter].
- i. Oprima primero la tecla [ESC] o 'escape'. Fijese en la esquina superior izquierda, presenta el mensaje: *Command _*. El paquete le pide que ingrese un comando.

- ii. El comando que Ud. debe ingresar es: GO 25. Entonces simplemente teclee o escriba GO 25. No importa que esté en mayúsculas o en minúsculas. No debe escribir las comillas.
 - iii. Por último presione la tecla [Enter] para que el paquete acepte el comando y lo realice. Ejecute varias veces la secuencia puede cambiar el número sugerido como GO 90, GO 225, etc. Para regresar use: [Esc] 'GO 40' [Enter].
- e. Ahora ya está listo(a) para cambiar definiciones o cambiar de una pantalla a otra. La siguiente es una lista de instrucciones que debe seguir para ver qué compuestos contienen los archivos disponibles:
- i. CPGASIN.MCD: ejecute [ESC] 'GO 70' [ENTER].
 - ii. CPGASORG.MCD: ejecute [ESC] 'GO 70' [ENTER].
 - iii. CPLIQIN.MCD: ejecute [ESC] 'GO 100' [ENTER].
 - iv. CPLIQORG.MCD: ejecute [ESC] 'GO 100' [ENTER].
 - v. CPSOLORG.MCD: ejecute [ESC] 'GO 130' [ENTER].
 - vi. ELEMENTS.MCD: ejecute [ESC] 'GO 130' [ENTER].
 - vii. OXIDOS.MCD: ejecute [ESC] 'GO 160' [ENTER].
 - viii. SOL_A-B.MCD: ejecute [ESC] 'GO 160' [ENTER].
 - ix. SOL_C.MCD: ejecute [ESC] 'GO 190' [ENTER].
 - x. SOL_D-P.MCD: ejecute [ESC] 'GO 190' [ENTER].
 - xi. SOL_S.MCD: ejecute [ESC] 'GO 220' [ENTER].
 - xii. SOL_S-Y.MCD: ejecute [ESC] 'GO 220' [ENTER].
- f. Para cargar un archivo: oprima [F5] y presione [Enter] dos veces. Aparecerá un listado con los archivos disponibles, elija uno y presione [Enter].

ARCHIVO CPGASIN.MCD:

Este archivo contiene información sobre *GASES*

Inorgánicas. Ejemplo de estos son:

- Ácidos (bromhídrico, cianhídrico, clorhídrico, etc.)
- Agua
- Amoniaco
- Cloruros
- Gases Elementales (Argón, Neón, Hidrógeno, Sodio etc.)
- Óxidos de Azufre, Carbono y de Nitrógeno

ARCHIVO CPGASORG.MCD:

Este archivo contiene información sobre *GASES*

Orgánicas. Ejemplo de estos son:

- Acetaldehído
- Acetona
- Alcoholes (Etilico, Metílico)
- Etileno
- Fluidos Térmicos (Freones y Therminoles)
- Tolueno

* Para regresar al menú, ejecute: [ESC] 'GO 40' [ENTER].

ARCHIVO CPLIQIN.MCD

Este archivo contiene información sobre *Líquidos*

Inorgánicos. Ejemplo de estos son:

- Ácidos (clorhídrico, nítrico, sulfúrico)
- Agua
- Amoniaco
- Cloruros
- Dióxido de Azufre
- Metales Líquidos (cobre, hierro, mercurio, etc.)
- Salmueras

ARCHIVO CPLIQORG.MCD

Este archivo contiene información sobre *Líquidos*

Orgánicos. Ejemplo de estos son:

- Acetatos (de Etilo y de Pentilo)
- Acetona
- Alcoholes (Bencílico, Butílico, Etilico, etc.)
- Benceno
- Cloroformo
- Fluidos Térmicos (Freones y Thermoboles)
- Tetracloruro de Carbono
- Xilencos (orto, meta, y para).

* Para regresar al menú, ejecute [ESC] 'GO 40' [ENTER].

ARCHIVO CPSOLORG.MCD:

Este archivo contiene información sobre *SÓLIDOS*

ORGÁNICOS. Ejemplo de estos son:

- Acetona
- Ácidos (Benzoico, Láurico, Oxálico, Succinico etc)
- Alcoholes (Etilico, Isopropílico y n-Propílico)
- Benceno
- Dextrasa
- Etilenglicol
- Nitronaftaleno
- p-Toluidina

ARCHIVO ELEMENTS.MCD:

Este archivo contiene información sobre *ELEMENTOS*

SÓLIDOS. Ejemplo de estos son:

- Azufre (monoclinico y diamante)
- Boro
- Carbono (grafito y diamante)
- Niquel
- Magnesio
- Potasio
- Uranio

* Para regresar al menú, ejecute: [ESC] 'GO 40' [ENTER]

ARCHIVO OXIDOS.MCD:

Este archivo contiene información sobre *ÓXIDOS* Anhídridos
y Silicatos Sólidos. Ejemplo de estos son:

- Aluminato Berílico
- Anhídrido Bórico
- Anhídrido Silícico (Cuarzo α y β)
- Óxido Aluminico
- Óxido Ferrosférico (Magnetita)
- Óxido Cálico
- Óxido de Manganeso
- Silicato Magnésico (Piroxeno)

ARCHIVO SOL_A-B.MCD:

Este archivo contiene información sobre *SÓLIDOS* Inorgánicos
de la *A* a la *B*. Ejemplo de estos son:

- Ácido Piroulfúrico
- Aleación de Magnesio y Aluminio
- Aleación de Níquel y Estaño
- Antimonio Cuproso
- Bicarbonato Sódico
- Bromuro Amónico
- Bromuro Sódico

* Para regresar al menú, ejecute: [ESC] 'GO 40' [ENTER].

ARCHIVO SOL_C.MCD.

Este archivo contiene información sobre *SÓLIDOS Inorgánicos*

cuyo nombre empieza con *C*. Ejemplo de estos son:

- Carbonato Cálcico
- Carbonato Manganeso
- Carburo Ferrroso (cementita)
- Cianato de Plata
- Cloruro Amónico (α y β)
- Cloruro Cálcico
- Cloruro Sódico

ARCHIVO SOL_D-P.MCD.

Este archivo contiene información sobre *SÓLIDOS Inorgánicos*

de la *D* a la *P*. Ejemplo de estos son:

- Diamoniuro Aurico (α y β)
- Disulfuro Ferrroso
- Ferrocianato Potásico
- Fluoruro Cálcico
- Fosfato Diácido de Potasio
- Hidróxidos (Cálcico, Magnésico y Sódico)
- Nitrato de Plata
- Pirofosfato Potásico

* Para regresar al menú, ejecute: [ESC] 'GO 40' [ENTER].

ARCHIVO SOL_S:

Este archivo contiene información sobre *SÓLIDOS* Inorgánicos

cuyo nombre empieza con *S*. Ejemplo de estos son:

- Selenuro Cuproso
- Selenuro de Plata
- Silicato Ferrico
- Sulfato Berílico
- Sulfato Cúprico (anhidro y 3 hidratos)
- Sulfato Magnésico
- Sulfato Sódico

ARCHIVO SOL_S-Y:

Este archivo contiene información sobre *SÓLIDOS* Inorgánicos

de la *S* a la *Y*. Ejemplo de estos son:

- Sulfuro Cuproso
- Sulfuro Ferroso
- Tetraborato Sódico
- Tiosulfato Plumboso
- Tungstato Cálcico
- Yoduro Amónico
- Yoduro Plumboso

* Para regresar al menú, ejecute: [ESC] 'GO 40' [ENTER].