Universidad del Mar

Campus Puerto Ángel

Termoquímica de 3 nitro isómeros

Tesis

Que para obtener el Título Profesional de

Ingeniero Ambiental

Presenta

Ernan Adalid Mendoza Ruiz

Director de tesis

Dr. Juan Mentado Morales

Puerto Ángel, Oaxaca 2016

El presente trabajo se realizó en los laboratorios de la Universidad del Mar, campus Puerto Ángel, bajo la dirección del Dr. Juan Mentado Morales, con apoyo del proyecto titulado “Termoquímica de Nitro Estereoisómeros de Compuestos Aromáticos” con clave de unidad programática 2II1006, financiado por PROMEP bajo el proyecto 103.5/10/7342.

Agradecimientos

A mi director de tesis el Dr. Juan Mentado Morales por todo el tiempo y atención que dedico a enseñarme y formarme como estudiante, por el apoyo que me dio durante el desarrollo del presente trabajo, por sus consejos y gran amistad le doy las gracias.

A mis revisores de tesis el Dr. Aitor Aizpuru, el Dr. Alejandro Regalado Méndez, a la M. en C. Belem Espinoza Chávez, y el M. en C. Cervando Sánchez Muñoz, les agradezco a todos ustedes por contribuir con sus enseñanzas para formarme como profesionista y persona, les agradezco por contribuir con sus comentarios y observaciones para que este trabajo fuera mejor.

A mis padres, doña mari y don goyo, por ser tan grandes seres, por estar conmigo en las buenas y en las malas, por sacrificar su tiempo y esfuerzo para que hoy, yo sea un hombre de bien, a mis hermanos Juan, Teresa, Ivan, Brizzio e Isis que con su ejemplo y dedicación me instruyeron para seguir adelante en mis estudios profesionales, a mis sobrinos Carlitos y Chel que llegaron a la familia para sacarle canas verdes y robarnos sonrisas con sus travesuras, gracias a esta gran familia por estar conmigo y empujarme cada vez que mis pies se oponían a seguir adelante, los quiero mucho mi ¡gran familia!

De todo corazón, a la mujer que nunca me dejo solo, a aquella mujer que me demostró que una simple persona puede convertirse en el más temible guerrero y seguir adelante, ha sido una mujer incondicional en mi vida, ha sido mi soporte y mi apoyo, ha caminado a mi lado en senderos buenos y malos ayudándome y enseñándome a nunca quedarse en el suelo, a sonreír cuando el cielo se queda obscuro, por todo tu esfuerzo, dedicación, paciencia y amor, gracias mi niña BRIANDA.

Como olvidarme de ti carnalito Sergio, compañero de andares y penares, las dos vueltas y estamos en Zipolite, el café, los gritos en las canchas y el resultado que muy pocas veces nos favorecía, las comidas de los fines de semana, y muchas otras cosas, por todo eso que pasamos en estos años gracias carnal.

Índice General

1. INTRODUCCIÓN 1

2. MARCO TEÓRICO 3

2.1 Química de Nitro isómeros. 3

2.2 Calorimetría de combustión 4

2.3 Tipos de calorímetros 5

2.4 Calorimetría diferencial de barrido (DSC) 6

2.5 Calorimetría de micro-combustión 7

2.6 Calibración y validación del calorímetro 7

2.7 Termograma experimental 9

2.8 Correcciones de Washburn 12

3. ANTECEDENTES 18

4. JUSTIFICACIÓN 21

5. OBJETIVO GENERAL 22

5.1 Objetivos particulares 22

6. HIPÓTESIS 23

7. DESARROLLO EXPERIMENTAL 24

7.1 Esquema general de trabajo 24

7.2 Ensamblaje del calorímetro 25

7.3 Calibración 26

7.4 Validación 27

7.5 Determinación de la pureza y Cp por DSC 28

8. RESULTADOS 29

8.1 Calorimetría Diferencial de Barrido 29

8.2 Propiedades de los compuestos 32

8.3 Calibración 33

8.4 Validación 35

8.5 Entalpía de combustión y formación estándar 39

8.6 Entalpía de formación molar estándar del 2NFC, 3NFC y 4NFC 41

9. CONCLUSIONES 46

10.REFERENCIAS 47

11.PRODUCTOS OBTENIDOS 52

I. Índice de tablas

Tabla 1. Estructura y propiedades físicas de los Nitro isómeros. 3
Tabla 2. Pureza, entalpía de fusión y temperatura de fusión del 2NFC por DSC. 29
Tabla 3. Pureza, entalpía de fusión y temperatura de fusión del 3NFC por DSC. 30
Tabla 4. Pureza, entalpía de fusión y temperatura de fusión del 4NFC por DSC. 31
Tabla 5. Capacidad calorífica (Cp) del 2NFC, 3 NFC y 4NFC por DSC. 31
Tabla 6. Propiedades físicas y energéticas de los compuestos estudiados. 32
Tabla 7. Resultados de los experimentos de calibración con Ácido Benzoico (NIST 39j) a 298.15 K y 0.1 MPa. 34
Tabla 8. Comparación de la masa utilizada, equivalente calorimétrico y porcentaje de error en calorímetros isoperibólicos reportados en bibliografía. 35
Tabla 9. Resultados de los experimentos de validación con 1,2,4-Triazol a 298.15 K y 0.1MPa. 36
Tabla 10. Resultados de los experimentos de validación con Ácido Salicílico a 298.15 K y 0.1 MPa. 37
Tabla 11. Energía de combustión del 1,2,4-Triazol reportados en la bibliografía. 38
Tabla 12. Energía de combustión del Ácido Salicílico reportado en bibliografía. 39
Tabla 13. Energía de combustión molar estándar, entalpía de combustión y formación molar estándar del Ácido Salicílico y 1,2,4-Triazol a 298.15 K y 0.1 MPa. 40
Tabla 14. Comparación de la entalpía de formación molar estándar del Ácido Salicílico obtenido. 41
Tabla 15. Valores de entalpía de formación molar del 1,2,4-Triazol reportados en bibliografía y el obtenido. 41
Tabla 16. Estructura y propiedades físicas de los compuestos de estudio. 42

II. Simbología

2NFC	5-(2-Nitrofenil)-2-furanocarboxaldehido
3NFC	5-(3-Nitrofenil)-2-furanocarboxaldehido
4NFC	5-(4-Nitrofenil)-2-furanocarboxaldehido
T	Temperatura
P	Presión
M	Masa molar
T_{fus}	Temperatura de fusión
Cp	Capacidad calorífica
ΔH_{fus}	Entalpía de fusión
ε(calor)	Equivalente calorimétrico del calorímetro
ΔT_c	Incremento de temperatura corregido
$\mathrm{m_{AB}}$	Masa del ácido benzoico
$\mathrm{m_{aux}}$	Masa del auxiliar en la reacción de combustión
ΔT_{corr}	Término de corrección de temperatura
R	Constante de los gases ideales
R	Resistencia
ΔU_{ign}	Energía de ignición
ΔU_{IBP}	Energía del proceso isotérmico de la bomba
$\Delta_{\mathrm{c}} U^{\mathrm{o}}$	Energía de combustión estándar
$\Delta_{\mathrm{c}} H^{\mathrm{o}}$	Entalpía de combustión estándar
$\Delta_{\mathrm{f}} H^{\mathrm{o}}$	Entalpía de formación estándar