

31
2EJ



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS PROFESIONALES
CAMPUS ARAGON

DESARROLLO DE UN PROGRAMA PARA LA
ADQUISICION DIRECTA DE DATOS PARA ANALISIS
DE GASOLINA POR COMPONENTES

T E S I S

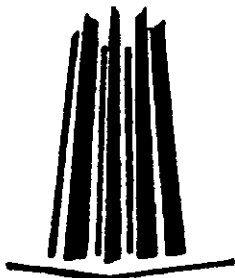
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

INGENIERO EN COMPUTACION

P R E S E N T A :

ALMA JUDITH PIEDRAGIL ROJAS

ASESOR: ING. SILVIA VEGA MUYTOY



SAN JUAN DE ARAGON, EDO. DE MEX.

1999

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

269999



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

PAGINACION

DISCONTINUA.

AGRADECIMIENTOS

Con amor :

A mi mamá, Leticia Rojas, por toda su ayuda, comprensión y el apoyo que siempre he recibido de ella.

A mi tío, Alfonso Rojas, por todo su apoyo y ayuda incondicional que siempre me ha brindado.

Con cariño :

A mis hermanos Carlos y Lourdes, por su apoyo moral, su entusiasmo, por alentarme en los momentos más difíciles y por creer siempre en mí.

Con gratitud y respeto :

A mis maestros de la ENEP-Aragón, al Ing. Juan Gastaldi Pérez y a mi asesora, la Ing. Silvia Vega Muytoy, por su infinita paciencia, su constante ayuda y consejos en todo el tiempo que estuve en la escuela.

Al Instituto Mexicano del Petróleo por abrirme las puertas y darme la oportunidad de realizar la tesis.

Al Ing. Lino Conroy Paz por darme la oportunidad de ingresar en la gerencia, su ayuda y apoyo incondicional en todo momento.

Al Q. Miguel Angel Flores Ríos y a la Q. Eunice Flores Astorga, por su paciencia, ayuda, apoyo, conocimientos e ideas sobre cromatografía de gases, que fueron de un valor incalculable y que sin los cuales este trabajo no se hubiera realizado.

Al honorable jurado.

Y a todas aquellas personas que colaboraron -directa e indirectamente- en la preparación y desarrollo de este trabajo de tesis.

I N D I C E

	PAGINA
OBJETIVO	iii
CAPITULO I. INTRODUCCION	
1. Introducción	1
2. Introducción a la Cromatografía	
2.1. Fundamentos de la Cromatografía de Gases	2
2.2. Columnas	5
2.3. Detectores	16
2.3.1. Detector de Ionización de Flama	21
2.4. Análisis Cualitativo	26
2.5. Análisis Cuantitativo	28
3. Generalidades del Petróleo	
3.1. Definición de Petróleo	46
3.2. Definición de Gasolina	47
3.3. Aplicación práctica del análisis detallado de la Gasolina	48
3.4. Procesos de Obtención de las Gasolinas	48
CAPITULO II. DETERMINACION DE LA COMPOSICION DE LA GASOLINA	
1. Introducción	52
2. Condiciones de Operación	54
3. Orden de Elución	56
CAPITULO III. DESARROLLO DEL PROGRAMA DE COMPUTO PARA EL ANALISIS PIONA	
1. Introducción	59
2. Desarrollo del Programa	60
3. Programa propuesto	61
4. Descripción del trabajo para la aplicación del Programa	89

CAPITULO IV. PRUEBAS DEL PROGRAMA DE COMPUTO	90
CAPITULO V. RESULTADOS	92
CAPITULO VI. CONCLUSIONES	111
BIBLIOGRAFIA	113

OBJETIVO.

Este trabajo está enfocado al desarrollo de un programa de cómputo que nos permita la identificación y cuantificación de los componentes de una gasolina, analizada por cromatografía de gas, en equipos que no están acoplados a las computadoras, por ser estos cromatógrafos de generaciones pasadas y en donde la actualización realizada por el personal especializado resulta demasiado costosa.

Además, los programas existentes en el mercado son demasiado generales, por lo que no se adecuan fácilmente a nuestras necesidades del laboratorio.

La cromatografía, como un método de análisis instrumental, es capaz de producir información, la cual puede describir la composición cualitativa y cuantitativa de las mezclas.

La mayor característica y requisito de los métodos cromatográficos es una buena *separación*; la información analítica es derivada del proceso generado de esa separación, por ejemplo, la información (datos de cada componente) de la mezcla analizada.

La instrumentación para el análisis de cromatografía de gases, se caracteriza por la combinación de los dispositivos de detección con columnas de separación de alta eficiencia. Los detectores continuamente generan señales eléctricas durante la separación completa. La detección de las especies separadas, dan señales sensibles y lineales las cuales forman picos para cada componente. El conjunto de picos generados por cada muestra se llama *cromatograma*.

Estos cromatogramas primeramente, proporcionan información de cuantos componentes pueden ser separados, y los datos sobre qué cantidad de cada componente eluyó del sistema cromatográfico.

El objeto principal cuando aplicamos el método cromatográfico, es el análisis cualitativo y especialmente, el análisis cuantitativo, aún en las mezclas demasiado complejas de difícil separación.

Dado el progreso y el desarrollo de la cromatografía de gas en los últimos años, hacen de esta técnica, una de las más usadas en el campo del análisis y es, a su vez, superior a otras técnicas de separación.

El mayor éxito en la aplicación de la cromatografía de gases es, primeramente, debido a la muy alta eficiencia de separación, la cual puede ser ejecutada con columnas capilares; segunda, por la alta sensibilidad en la detección de pequeñas cantidades de las especies separadas y finalmente, por la precisión y la exactitud de datos en el análisis cuantitativo de las mezclas complejas.

Los detectores están basados en principios físicos simples, los cuales producen señales para una amplia variedad de componentes, estos son los detectores universales.

Los análisis de cromatografía de gases de mezclas de compuestos orgánicos volátiles, son superiores a otros métodos en relación a la precisión y exactitud. Los tiempos del análisis son generalmente cortos.

Los diferentes pasos en el análisis por cromatografía de gases son sencillos de manejar, desde la introducción de la muestra, la separación, la detección, hasta la evaluación de los datos obtenidos, por lo que los diferentes tipos de análisis pueden ser ejecutados exitosamente.

Los cromatogramas se pueden evaluar fácilmente, porque las señales eléctricas generadas por los detectores, pueden ser procesadas por las computadoras después de la digitalización.

Los resultados cuantitativos, son confiables siempre y cuando contemos con estándares de sustancias puras. Sin embargo, algunos compuestos desconocidos pueden ser cuantificados mediante su área haciendo el área equivalente a su concentración.

La justificación económica de este trabajo, está principalmente en términos de ahorro de horas-hombre en la cuantificación de datos, con la ventaja en la repetibilidad y eliminación de errores de cálculo.

I. INTRODUCCION

La solución de numerosos problemas, que se presentan en los campos de la química pura y aplicada, está supeditada al aislamiento e identificación de ciertas especies orgánicas o inorgánicas existentes en una mezcla. El proceso normal de análisis consiste en separar los productos deseados para proceder a continuación a su identificación, por medio de reacciones químicas o midiendo ciertas propiedades físicas. Existen muchas técnicas analíticas de separación que varían considerablemente de un área de aplicación a otra, dependiendo del tipo de muestra, complejidad, matriz y concentración. Una de las herramientas más utilizadas es la *cromatografía de gases*.

Entre más compleja es la muestra, más difícil es la separación de sus componentes y sobretodo su cuantificación. Motivo por el cual, actualmente todos los equipos cromatográficos contienen softwares que auxilian en la identificación y en la cuantificación de los componentes, haciendo esta labor "más fácil" y rápida cuando se trata de muestras complejas como aceites esenciales, gasolinas, etc. Sin embargo, estos softwares son muy generales y no se adaptan fácilmente a las necesidades del analista que, además, requiere tener conocimientos de computación. Otro problema es que a los equipos de manufactura pasada es difícil y costoso adaptarles este tipo de softwares.

El enlace entre el cromatógrafo y la computadora con el software apropiado, en equipos antiguos, ha sido objeto de estudio por el personal que los fabrica resultando incosteable su actualización.

Por este motivo se pensó en crear un software que cubra las necesidades cromatográficas de muestras específicas como la gasolina para poder utilizarlo en equipos que cuentan sólo con integradores. El análisis de la gasolina presenta muchos problemas por su compleja composición (más de 300 componentes), que van de compuestos con número de carbonos de C_2 hasta C_{14} . Es un análisis largo, y la cuantificación de cada componente necesita hacerse de manera automática para evitar pérdida de horas-hombre gastadas en la obtención de los resultados.

Además, de que la mayoría de los problemas cromatográficos, son generados por un cambio en la apariencia de los picos ó en los tiempos de retención en el cromatograma, afectando la exactitud cuantitativa de los análisis.

Los problemas que se tienen en el análisis de gasolinas específicamente, son de tiempo del analista, ya que la identificación de los componentes se realiza a mano, pues la naturaleza de las gasolinas es diferente cada vez y en ocasiones el programa automático no identifica algunos compuestos, sobre todo los pesados a partir de la parafina C_{11} a la parafina C_{14} .

Desde el punto de vista ideal, debe ser posible identificar un compuesto por su tiempo de retención; sin embargo, el tiempo de retención sólo es de escaso valor porque depende de otros muchos factores cromatográficos, además de la naturaleza del compuesto. Se puede confiar, como medio de identificación, en el volumen de retención específico o en el coeficiente de partición, pero se requiere una gran cantidad de tablas de datos para las innumerables combinaciones de compuestos, fases líquidas y temperaturas que existen. Encontramos muchos datos de estos pero se hallan dispersos en las bibliografías y no se puede confiar en un buen número de ellos, o bien, les faltan detalles importantes. Sin embargo, hay algunas consideraciones teóricas útiles y observaciones empíricas que eliminan en parte el obstáculo del problema de identificación.

El principio común de todas las técnicas cromatográficas es el siguiente: Un fluido (fase móvil) circula a través de una fase estacionaria (líquida ó sólida); cuando una mezcla de sustancias se introduce en el sistema, se produce una serie de equilibrios de distribución entre las dos fases, generalmente de distinta magnitud para cada componente de la mezcla, por lo que cada uno de ellos se desplazará con diferente velocidad a lo largo del sistema. Obteniendo al final del análisis la separación de cada componente.

A continuación se verá lo que es la Cromatografía de Gases, sus fundamentos teóricos y prácticos para la aplicación del tema en el presente trabajo.

2.- INTRODUCCION A LA CROMATOGRAFIA

2.1.- FUNDAMENTOS DE LA CROMATOGRAFÍA DE GASES.

Generalmente se asume que la palabra "cromatografía" tiene su origen en las palabras griegas *croma* - color y *grafía* - descripción.

Sin embargo, Tswett enfatizó que: "Es evidente que el fenómeno de adsorción* no está restringido solamente a los pigmentos de la clorofila, y uno debe asumir que todos los tipos de colorantes y componentes químicos incoloros no están sujetos a las mismas leyes".¹

La *cromatografía* es una técnica analítica, que se utiliza para la separación física de 2 ó mas compuestos, basadas en la diferente distribución de dos fases, una de las cuales constituye una fase estacionaria, de gran desarrollo superficial, y la otra es un fluido que pasa a través o a lo largo de la fase estacionaria. Estas dos fases se conocen como fase estacionaria y fase móvil, respectivamente. La separación ayuda a determinar la identidad y a conocer las concentraciones del soluto.

* Adsorción. Fenómeno de retención o adherencia de un líquido o un gas en un cuerpo sólido.

¹ Ettore, S. *Analytical Chem.*, Vol. 43, No.14, pág. 27A

La cromatografía tuvo sus comienzos en 1850 con la separación de anilinas por F. F. Runge. En este proceso se utilizó un papel filtro y un solvente para lograr la separación de varios colorantes. Runge tomó como base la afinidad color-papel y la diferencia de peso molecular. Esta técnica se conoce como cromatografía en papel.

En 1906 Tswett presentó la utilización de columnas de gas, empacadas con un adsorbente adecuado para separar los pigmentos coloreados de las hojas de las plantas. A este proceso le llamó cromatografía de tintas o cromatografía en columna. En esta técnica también se empleó un líquido móvil para remover (eluir) los compuestos desadsorbidos en el material de empaque. Los compuestos adsorbidos se eluyeron en la corriente del líquido móvil y pudieron colectarse al final de la columna. Aunque la separación fue directa, el problema es más complejo para la mayoría de los sistemas de detección y para la cuantificación de los compuestos eluidos. Desde entonces permaneció ignorada, hasta que en 1931, fue redescubierta por Kuhn.

En 1941 Martin y Singe, sugirieron la posibilidad de utilizar un gas en la fase móvil del cromatógrafo, pero esto se quedó sólo en teoría y nunca se puso en práctica.

Dentro del desarrollo de la cromatografía de gases, el primer instrumento fue descrito por Martin y James en 1952, que utilizaron un gas como fase móvil en una separación cromatográfica. Empleaba una bureta automática para detectar y determinar los ácidos grasos cortos y bases. El primer cromatógrafo de gases satisfizo sólo estos dos grupos funcionales. El verdadero potencial no se pudo alcanzar hasta la publicación de Ray, del primer cromatograma, en 1954. El detector empleado fue de conductividad térmica, que aún se sigue usando.

Fue hasta 1955 cuando los primeros instrumentos comerciales aparecieron en el mercado.

La cromatografía puede ser aplicada a gases y a líquidos, basándose para ello en sus pesos moleculares. La cromatografía de gases se aplica a compuestos de peso molecular comprendidos entre 1 y 1400.

Esquema básico de un cromatógrafo.

En el cromatógrafo se utiliza un gas acarreador (fase móvil) que bajo presión mueve una muestra de vapor del puerto de inyección, a través de una fase estacionaria (columna) donde se efectúa la separación de cada componente pasando al detector donde la concentración se convierte en una señal eléctrica la cual puede medirse con un graficador.

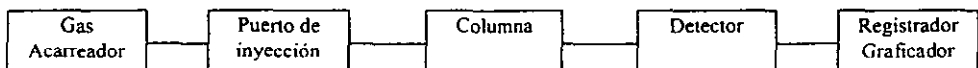


Fig. 1. Diagrama Básico de un Cromatógrafo.*

* Rowland, Fred. *Manual de HP*, 1977, pág. 1.2

A la gráfica obtenida se le conoce como *cromatograma*. El tiempo de retención absoluto (tra) se mide del punto de inyección a la punta del pico, en centímetros, pulgadas o minutos, y constituye un inicio cualitativo de cada compuesto bajo las mismas condiciones de análisis.

Los cromatógrafos de gases están constituidos esencialmente de: (Ver fig. 1)

- 1) Una fuente de gas comprimido, nos proporciona la fase móvil (gas portador). Los gases más utilizados son el Hidrógeno, Helio, Nitrógeno y Argón.
- 2) Un regulador de presión para mantener constante el flujo del gas portador.
- 3) Inyector. Es un dispositivo que permite la introducción de la muestra en la corriente del gas portador. El más común es el inyector de líquidos que puede utilizarse para sólidos en dilución y gases (mediante jeringas especiales). Consiste en una cámara situada a la entrada de la columna y calentada independientemente de ésta (generalmente a temperatura superior al punto de ebullición del componente menos volátil de la muestra), que suele tener una membrana de caucho a través de la cual se introduce la muestra con la ayuda de una microjeringa hipodérmica. El volumen interior del inyector ha de ser lo más reducido posible. Las cantidades de muestra aplicadas oscilan, aproximadamente, entre 0.1 μ l y 2 μ l, en el trabajo analítico normal.
- 4) Columna cromatográfica. Es un tubo de metal (acero inoxidable, cobre, aluminio, etc.) ó sílica fundida de 1 a 200 metros de longitud, cuyo diámetro interior puede ser desde 0.1 a 52 μ m, la separación de la mezcla se realiza en ella, siendo, por tanto, la parte más importante del instrumento.
- 5) El horno, en cuyo interior se sitúa la columna, debe poseer una buena regulación de temperatura.
- 6) El detector. Es un dispositivo que permite medir de una manera continua una propiedad física del gas portador, que se modifica ampliamente con la presencia de muy pequeñas concentraciones de la sustancia a analizar (entre los más comunes se encuentran los de conductividad térmica, ionización de flama, captura de electrones, afinidad electrónica, etc.), y está situado en la salida de la columna.
- 7) La señal generada por el detector, es una señal eléctrica la cual es medida y amplificada, y se envía a un registrador.

Descripción detallada de cada una de las partes del cromatógrafo.

Como ya se había señalado los gases acarreadores más comunes son: helio, hidrógeno, nitrógeno y argón. La consideración más importante para seleccionar un gas acarreador depende del tipo de detector que se va a usar. El gas acarreador debe ser: Inerte, seco y puro.

Para muchos fines, los gases mencionados anteriormente son inertes, pero no lo suficientemente secos. El agua en un gas acarreador puede interferir en el material de empaque de la columna produciendo picos falsos o fantasmas (lo cual es particularmente cierto cuando se emplea un programa de temperatura en el análisis), además reduce seriamente la vida de la columna.

Con la utilización de un acarreador impuro se encontrarán algunos de estos mismos problemas que con el agua, desviación de línea base y ruido de fondo. Las impurezas deben ser lo suficientemente bajas para que no interfieran en una operación de alta sensibilidad.

El gas acarreador debe estar regulado para proveer una presión constante así como un flujo de masa constante. Los controladores de flujo en el instrumento requieren de una diferencia de 10 a 15 psi (presión x pulgada²), entre el cilindro de gas y la entrada al sistema de inyector/columna. Se sugiere una presión mínima de 40 psi en el manómetro del cilindro.

El puerto de inyección provee un medio de introducción de la muestra a la corriente del gas acarreador y por consiguiente a la columna. Un puerto de inyección que haya sido calentado vaporiza las muestras no gaseosas, por lo tanto la temperatura debe ser variable y encontrarse bajo control. La técnica más utilizada para introducir la muestra es por medio de una jeringa graduada en microlitros a través, de una septa* de hule para muestras líquidas y una jeringa en ml para muestras gaseosas.

"La muestra debe introducirse en la columna en una sola inyección rápida para obtener picos definidos y una separación completa de los compuestos".²

Después de pasar al puerto de inyección, la muestra entra en la columna en donde se efectúa el proceso de separación. Los compuestos deben detectarse cuando se separan de la muestra y emergen de la columna al detector.

Los errores se pueden introducir desde el muestreo y preparación de la muestra y pueden deberse a:

- Muestras con dos fases
- No obtener una porción representativa de la muestra
- Descomposición, vaporización, reacciones
- Adsorción con el inyector, columna ó detector

2.2.- COLUMNAS

La columna es la parte más importante del cromatógrafo de gases y consta de 3 elementos:

1. Un recipiente, que es un tubo de metal ó sílica fundida
2. Un soporte sólido
3. Una fase estacionaria

* Septa. Sello de hule de forma redonda que se utiliza en el puerto de inyección de los cromatógrafos.

² Rowland, Fred. *Manual de HP*, 1977, pág. 1.4

Todos los materiales de las columnas deben ser térmica y químicamente estables.
Limpios, libres de óxido y de sitios activos.
Las columnas deben ser mecánicamente fuertes y flexibles.
Las primeras columnas capilares se hicieron después de las empacadas.
Las primeras columnas capilares se fabricaron en 1960.
Las columnas capilares son más inertes que las empacadas, pero más frágiles.
Las columnas de sílica fundida se fabricaron en 1979. Son fuertes, flexibles e inertes.

Las fases estacionarias están compuestas por grupos orgánicos funcionales. La fase estacionaria puede ser un sólido (cromatografía gas-líquido) que puede estar sencillamente relleno la columna, o bien, dispuesto en forma de recubrimiento sobre un sólido portador. En este caso el sólido portador puede ser un relleno o bien la propia pared del tubo (columna de relleno y de tubo abierto, respectivamente).

Para preparar una columna empacada, el sólido (que funcione de estacionario o de soporte) se suele someter a una activación para aumentar su superficie específica, mejorando así la interfase y con ello la transferencia de materia entre las dos fases.

Una vez tratado el sólido, se llena el tubo con el mismo, distribuyéndolo perfectamente dentro sin dejar espacios vacíos.

En el caso de que la fase estacionaria sea líquida, se deposita diluida en un disolvente apropiado (que después se evaporará) sobre el soporte. Cuando ya está lleno el tubo, se deberán tapar sus extremos con alguna materia porosa.

El sólido puede trabajar como fase estacionaria o como soporte de la misma, en el caso de que sea líquida. En el caso de que el relleno sólido actúe como fase estacionaria, deberá ser activado como se dijo anteriormente. Como rellenos sólidos se usan: carbón activado, gel de sílice, alúmina, etc.

En muchos casos el sólido es tratado antes de ser utilizado como relleno con ácidos, álcalis u otras sustancias que aumentan su superficie útil de interacción, aumentando con ello el poder adsorbente del sólido.

Si el sólido actúa solamente como soporte, deberá ser inerte y su superficie específica menor, este también se somete a tratamientos para aumentar su superficie específica, pero posteriormente deberá sufrir otro tratamiento para eliminar su actividad. Los tratamientos que recibe son variados y van desde lavados diversos hasta la adición de desactivantes inorgánicos (plata) u orgánicos (polietilenglicol).

Diferentes tipos de columnas.

La primera columna utilizada en cromatografía de gases fue ideada por James y Martin para sus primeras experiencias, fue una columna de relleno, a semejanza de las utilizadas en cromatografía líquida. Posteriormente Golay introdujo la columna capilar enrollada, innovación que se puede considerar como lo más importante que ha ocurrido en cromatografía de gases desde su aparición. Estos dos tipos de columna constituyen los extremos de una gama que se ha desarrollado posteriormente.

Según Halasz, el criterio de diferenciación de los diferentes tipos de columna debe basarse en dos propiedades fundamentales de las mismas: su relación de fases y su permeabilidad. Siguiendo esta pauta, encontramos en la bibliografía los siguientes tipos de columna:

Hay dos tipos diferentes de columnas de uso común, la empacada y la tubular abierta (capilar). Las columnas empacadas son más fáciles de hacer, menos caras, duran más, tienen mayor capacidad y sirven para toda clase de separaciones, aún para las más difíciles. Las columnas tubulares abiertas tienen menor caída de presión y, por consiguiente, pueden tener mayor longitud (más platos de separación).

Las columnas empacadas tienen, generalmente, de 1 a 15 metros de longitud y de 3.175 a 9.525 milímetros de diámetro. Las columnas de diámetro mayor se usan para trabajos en escala preparativa. Las columnas tubulares abiertas tienen, generalmente, de 15 a 50 metros de longitud y de 0.254 a 1.270 milímetros de diámetro. Es posible estirar un tubo capilar en longitudes de varios cientos de metros. Se han fabricado columnas capilares hasta de una milla de longitud.

El parámetro que mide la eficiencia de la columna es la resolución.*

La columna capilar tiene una resolución mayor que las columnas empacadas.

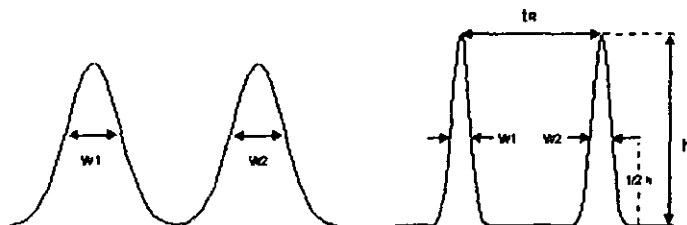


Fig. 2. Resolución de las columnas empacada y capilar.*

$$R = 1.18 \Delta t_R / (W_1 + W_2)$$

donde: Δt_R = diferencia en los tiempos de retención entre los picos.

W_1 y W_2 = amplitud a la mitad de la altura de los picos.

La resolución es una función de la eficiencia, selectividad y capacidad.

* Resolución. Es el grado de separación entre dos picos.

* *Varian Chromatography Manual*, 1996, pág. 1-18

- 1) Eficiencia.- Es la medida de los efectos del ensanchamiento de los picos. Se expresa cuantitativamente con el número de platos teóricos (divisiones de la columna).
- 2) Selectividad.- Es la habilidad de la columna para distinguir entre dos componentes. Se expresa en función de la retención relativa de dos picos. Depende:
 - a) De la solubilidad del componente en la fase estacionaria.
 - b) De la presión de vapor del componente.
- 3) Capacidad.- Es la mayor ó menor cantidad de muestra que resuelve la columna. La resolución se puede aumentar utilizando una película más gruesa de fase estacionaria pero los componentes pesados se retienen. Sin embargo, la columna tiene mayor capacidad de muestra.

Clasificación de las Columnas³

Columna clásicas empacadas	<ul style="list-style-type: none"> • Soporte convencional • Bolas de relleno
Columnas capilares rellenas	
Columnas capilares de capa porosa	<ul style="list-style-type: none"> • Soporte convencional • Microsoporte
Columna capilar abierta	

a) Columnas clásicas empacadas.

Están constituidas por un tubo de metal, cuyo interior se encuentra relleno de un soporte granular con una superficie recubierta por una película de la fase estacionaria. El tamaño de grano del relleno suele ser del orden de diez veces menor que el diámetro del tubo, lo que proporciona una gran regularidad en su distribución.

Al estar ocupado el tubo en su mayor parte por el soporte inerte, el volumen de huecos por unidad de longitud de columna será muy pequeño y, como la cantidad de fase estacionaria es grande, su relación de fase es muy pequeña. Por esta razón, también la permeabilidad es muy baja, lo que supone una limitación de tipo práctico para la construcción de columnas largas. Dentro de ellas existe, no obstante, cierta variedad: cuanto mayor sea su permeabilidad, y cuanto más rugosa la superficie de dichos granos, se obtendrán capacidades de cargas mayores. Así, si utilizamos

³ Dabrio Bañuis, M.; Farré Rius, F. *Cromatografía de gases I*, 1979.

como soporte bolas de vidrio de tamaño relativamente grande, obtendremos unos valores de la permeabilidad y la capacidad de carga que se aproximan a los de las columnas capilares.

b) Columnas capilares rellenas. PLOT (Porous Layer Open Tube)

Tiene una película de material finamente dividido tal como la tierra de diatomeas ó un adsorbente. Su única diferencia aparente con las columnas clásicas de relleno es el diámetro interior del tubo, que no suele exceder de 1 mm. Sin embargo, su diferencia más importante consiste en que la relación entre los diámetros del tubo y de la partícula del relleno es del orden de 3 a 5 micras. La consecuencia de esta diferencia es un relleno mucho más irregular y una permeabilidad diez veces superior. La relación de fases será también mayor y, por tanto, la capacidad de carga es inferior.

Al ser mayor la permeabilidad, podrán construirse columnas más largas. En este tipo de columnas desempeña un importante papel la resistencia a la transferencia de masas que opone la fase móvil.

c) Columnas capilares de capa porosa. SCOT (Support Coated Open Tube)

Tiene una fase líquida depositada en un soporte sólido el cual permite soportar una fase líquida estacionaria. Se utilizan cuando se requieren grandes cantidades de masa. Sobre la pared interior de un tubo capilar se ha depositado el soporte, que se recubre con la fase estacionaria; la parte central del capilar permanece vacía. El tamaño de grano del soporte puede oscilar entre el de un soporte clásico y las finas partículas de carbón producidas por la pirólisis* de una sustancia orgánica. El diámetro interior del tubo capilar puede ser de 0.1 a 0.5 mm.

La permeabilidad de este tipo de columnas es del mismo orden que el de las capilares abiertas, es decir, de valores máximos. Esto permite la construcción de columnas muy largas (de 25 a 200 metros).

d) Columnas capilares abiertas. WCOT (Wall Coated Open Tube)

Tiene una fase estacionaria líquida depositada en la superficie interior inerte de la columna (la más común), y también existen las fases químicamente unidas (CGL-Cromatografía Gas Líquido). Al poseer los valores más altos de la permeabilidad, pueden construirse de forma normal columnas de hasta 200 m de longitud, aunque los tamaños más utilizados oscilan entre los 50 y 100 m. Su capacidad de carga, por el contrario, es muy pequeña, debido a la pequeña cantidad de fase por unidad de longitud de columna que poseen, como consecuencia de ello, su utilización va unida al empleo de sistemas de detección muy sensibles. Evidentemente, su relación de fases es la más alta.

* Pirólisis. Descomposición de compuestos químicos al someterlos a temperaturas muy elevadas.

Diferencias en el funcionamiento de los distintos tipos de columnas.

Existen dos hechos que marcan una diferencia fundamental entre las características que debe poseer un aparato para utilizar columnas clásicas de relleno o cualquier tipo de columna capilar: la cantidad de muestra que admiten y los valores de los flujos de gas portador.

La cantidad de muestra que admite una columna capilar sin que sufra sobrecarga es mucho menor que en una columna clásica. La sobrecarga se alcanza cuando la concentración de soluto en la fase estacionaria es un sólido (CGS- Cromatografía Gas Sólido), este punto se alcanza rápidamente, puesto que las isotermas de adsorción son no lineales; en CGL, por el contrario, el margen de linealidad es muy alto, desapareciendo solamente cuando la concentración es tal que las interacciones entre moléculas soluto-soluto se hacen apreciables, modificando así, los valores de los coeficientes de actividad.

Los flujos del gas portador que se utilizan en columnas capilares suelen ser del orden de 0.5 a 3.0 ml/min, mientras que en una columna clásica ascienden a un orden de 30 a 100 ml/min. Como consecuencia, la velocidad lineal en el bloque de inyección y sistemas de conexión de la columna al mismo será mucho menor en el caso de las columnas capilares, produciéndose en estas partes del instrumento una dispersión de las zonas del soluto debido a la difusión molecular en el gas portador; la distribución de entrada en la columna se alejaría considerablemente del caso ideal, de espesor infinitamente pequeño. Para poder utilizar la columna capilar con éxito será necesario introducir entre el inyector y la columna un dispositivo denominado divisor de flujo, que tiene como misión permitir la entrada en la columna de una pequeña fracción solamente del flujo que pasa por el sistema de inyección. La relación de división (flujo al exterior/ flujo que pasa por la columna) suele oscilar entre 50 y 120. De esta manera se consiguen dos efectos simultáneos:

- a) Disminuir la cantidad de muestra que pasa por la columna, que queda reducida a la fracción que indica la relación de división.
- b) Aumentar la velocidad lineal del gas portador en el sistema de inyección en la cantidad indicada por la relación de división, con lo que la contribución de la difusión molecular en esta parte del instrumento se hace muy pequeña.

Si la salida de la columna no incide directamente en el detector, podemos tener el mismo problema de bajas velocidades en los conductos de unión, cuando estos poseen secciones grandes. Para suprimir esta difusión molecular parasitaria, si no existe la posibilidad de suprimir los conductos de unión, que sería lo ideal, se puede introducir un gas adicional, que suele ser el mismo portador, con un flujo aproximado de 60 a 100 ml/min. Con esto se consigue aumentar la velocidad lineal a valores tales que la difusión molecular se haga prácticamente despreciable.

La construcción del divisor de flujo y del dispositivo para la introducción del gas adicional deben cumplir dos condiciones fundamentales:

- a) No provocar turbulencias en la vena gaseosa, cuyo efecto sería una pérdida de eficiencia.
- b) Una regulación muy fina de los caudales.

Cuando se trabaja con columnas clásicas es innecesario el uso de estos dispositivos, siempre que el aparato no posea unos volúmenes excesivos.

El trabajo con columnas clásicas será, pues, más cómodo que con columnas capilares, desde el punto de vista instrumental.

Ventajas de la cromatografía de gases capilar.

Es posible utilizar columnas largas debido a su baja resistencia al flujo.

Se pueden separar y cuantificar los solutos que se encuentran relativamente cerca uno de otro en el cromatograma.

Se pueden resolver mezclas complejas.

La columna empacada muestra un incremento típico en los ensanchamientos de bandas conforme se incrementa el tiempo.

La columna capilar mantiene la forma del pico (bandas angostas) para todos los tipos de solutos. (Ver figura 2).

Para seleccionar las columnas se toman los siguientes parámetros:

- a) Longitud de la columna
- b) Diámetro interno
- c) Fase estacionaria
- d) Espesor de película

a) Longitud de la columna:

1. Las columnas de longitud corta se recomiendan para analizar muestras con alto peso molecular ó muestras con pocos componentes (C_1 - C_6)
2. Las columnas de longitud intermedia (30 m) son suficientes para analizar la mayoría de las muestras.
3. Las columnas más largas (60 m) son necesarias para analizar muestras complejas (75 ó más componentes)
4. Las columnas de longitud corta con películas gruesas son recomendables para analizar solutos extremadamente activos

b) Diámetro interno:

1. Utilizar un diámetro interno de 0.25 mm para inyección con divisor de flujo cuando el tamaño de la muestra no es crítico.
2. Utilizar un diámetro interno de 0.32 mm para inyección sin divisor de flujo y "On Column" cuando se inyectan cantidades grandes de muestra.
3. Utilizar un diámetro interno de 0.53 mm cuando se reemplaza una columna empacada, cuando se analizan menos de 30 componentes ó cuando un intervalo variable de concentraciones de soluto está presente.
4. Utilizar un diámetro interno de 0.18 mm para GC/MS (Cromatografía de Gas/Espectrometría de Masas) o un trabajo de alta eficiencia.

c) Fase estacionaria:

Se recomienda optimizar el diámetro interno, el espesor de la película y su longitud después de elegir correctamente la fase estacionaria.

1. Utilizar una fase cuya polaridad es muy parecida al de los solutos.
2. Para propósitos generales la mejor fase es la DB-5 (Metil fenil silicón), cuando se tiene una mezcla de polares y no polares.
3. Utilizar la fase menos polar que separe adecuadamente a los solutos.
4. Evitar utilizar fases que contienen el elemento específico correspondiente a los detectores específicos.
5. Para muestras con enlaces de hidrógeno, utilizar DB-WAX (polientiglicol).
6. Para hidrocarburos ligeros y gases azufrados, utilizar una columna Pora Plot.

d) Espesor de película:

1. Utilizar películas de espesor estándar para la mayoría de las aplicaciones.
2. Utilizar películas delgadas para solutos de puntos de ebullición altos tales como ceras, glicéridos y esteroides.
3. Utilizar películas gruesas para solutos muy volátiles tales como solventes y purgables.
4. Los espesores de 1.0-1.5 μm son útiles para solutos ligeros que eluyen de 100 a 200 $^{\circ}\text{C}$.
5. Los espesores de 0.25 a 0.5 μm son útiles para solutos que eluyen arriba de 300 $^{\circ}\text{C}$.
6. Los espesores de 0.1 μm son útiles para solutos de pesos moleculares altos que eluyen arriba de 300 $^{\circ}\text{C}$.

Los parámetros más importantes en el funcionamiento de la columna son:

- a) Eficiencia de separación: Es la medida de la habilidad de la columna para separar una mezcla en sus componentes individuales. La eficiencia es caracterizada por los picos estrechos. La

capacidad tiene un gran efecto en la eficiencia de la columna. La saturación del componente genera un “coleo” en el pico reduciendo la eficiencia.

- b) **Actividad de superficie:** El grado de actividad es el parámetro más importante para determinar la calidad de la columna. La limpieza de la columna influye en la eficiencia y estabilidad de la columna. Se deben utilizar niveles bajos de inyección para evitar la saturación en los sitios activos.

Las columnas pueden experimentar 3 tipos de actividad:

Adsorción reversible: Que puede ser indicada por el “coleo” de los picos.

Adsorción irreversible: Conduce a la eliminación del soluto de la muestra y se presenta por la respuesta baja del pico o la completa desaparición de un soluto.

Degradación catalítica: En los compuestos se presenta por picos coleados y una disminución en la respuesta del pico.

- c) **Estabilidad térmica:** Es importante porque la mayoría de las separaciones se lleva a cabo a temperaturas elevadas ó con un programa de temperaturas. La fase debe permanecer como una película delgada, uniforme y no romperse en gotas.

El “sangrado” de la columna es una señal de fondo normal, originada por la elución de los productos de degradación de la fase estacionaria. Los productos de degradación están siempre presentes y no necesariamente son una señal de daño en la columna. Los factores que provocan esta contaminación o “sangrado” pueden ser impurezas del gas de arrastre, contaminantes del inyector y detector, y sangrado de la fase estacionaria.

Los detectores selectivos registran niveles de sangrado más altos debido a su alta sensibilidad.

Muestras que deterioran la columna:

La causa común de pérdida de la eficiencia de la columna es la formación de residuos volátiles o semivolátiles. Los no volátiles deben ser eliminados durante la preparación de muestras o con el uso de una pre-columna desechable.

La fibra de vidrio silanizada en el inserto del inyector, actúa como un filtro o punto de adhesión para algunos residuos.

Los residuos semivolátiles originan picos fantasmas.

La acumulación de residuos origina picos coleados, adsorción de solutos, y cambios en los tiempos de retención.

Causas que alteran la forma de los picos:

Los picos pueden utilizarse como patrones para comparar otros picos. Los picos deben ser muy delgados y de forma Gaussiana. La forma pobre de los picos es debido a los problemas de flujo de gas, técnica de inyección, contaminación del sistema o una columna dañada por la oxidación. El "coleo" indica oxidación de la fase estacionaria.

El tiempo requerido para que la muestra se transfiera desde el inyector hasta la columna, determina el ancho de la banda inicial.

Si se utilizan relaciones de divisor bajas, para incrementar la sensibilidad, se presentará un ensanchamiento de banda.

El sistema debe ser optimizado para permitir que una proporción máxima de muestra se transfiera a la columna mientras se mantiene un ancho de banda inicial estrecho.

La evaporización de muestra debe ser tan rápida como sea posible para evitar la discriminación y lograr un ancho de banda estrecho.

La temperatura del inyector deberá ser al menos 20 °C, arriba del punto de ebullición más alto del soluto. Utilizar una inyección rápida sin dar tiempo a calentar la aguja. Inyectar 1 µl ó menos.

La muestra es vaporizada en un inyector caliente y transferido a una columna mucho más fría. Los solutos deben estar en fase vapor operando a temperaturas de (50 a 350 °C). Algunos de los solutos son más solubles en la fase estacionaria por lo cual se mueven más lentamente a través de la columna. Los solutos más rápidos son retenidos para permitir que los solutos más lentos sean atrapados.

Se utiliza un programa de temperatura del horno de la columna para llevar a cabo la separación de los solutos. La temperatura de la columna debe ser más baja que el punto de ebullición del disolvente. El enfriamiento no controlado de la columna durante la introducción de muestra pueden causar problemas.

La mayoría de los solventes deben ser compatibles con la muestra y la fase estacionaria.

Aplicaciones de la cromatografía capilar.

Se aplican en métodos de la EPA para la determinación de contaminantes orgánicos volátiles y semivolátiles en el agua y aire.

En la industria petroquímica para determinar la composición de combustibles e identificación de contaminantes y aditivos.

Determinación de sustancias ilegales en fluidos biológicos ó información médica.

En la industria alimenticia para el análisis de saborizantes y perfumes.

En la industria farmacéutica.

En la investigación académica.

Precauciones en el Análisis Cromatográfico.

Antes de comenzar con un análisis cromatográfico se deberán de tomar en cuenta algunos parámetros:

Elegir la mejor combinación de inyector y detector para el análisis. Iniciar con una combinación simple (por ejemplo Split y FID) para determinar la naturaleza de la muestra. Considerar las características de la muestra cuando se elija un inyector y la técnica de inyección.

Al elegir el detector se determinarán que compuestos serán analizados.

Elegir la fase estacionaria correcta. Igualar la polaridad del soluto con la polaridad de la columna.

Escoger la longitud, diámetro interno y espesor de la película dependiendo de las características de la muestra.

Es necesario optimizar la velocidad de flujo para lograr una eficiencia alta. La velocidad de flujo determina el tiempo de elución de los solutos a una temperatura dada.

La temperatura influye en la retención y en la separación de los solutos.

Los tiempos de retención son generalmente divididos a la mitad por cada 15-20 °C de aumento de temperatura.

Se debe considerar el tiempo para enfriar el horno y el tiempo para regresar a la temperatura inicial para iniciar un nuevo análisis. El flujo de la columna cambia conforme cambia la temperatura. En los nuevos inyectores (EPC) se compensa la presión, por tanto el flujo se mantiene casi constante.

Introducción de la muestra.

Uno de los requerimientos del proceso cromatográfico ideal es que la muestra se introduzca en el primer plato teórico en forma casi instantánea. Si la muestra no se encuentra ya como vapor se debe suministrar suficiente calor para establecer un equilibrio inmediato. Si estos requisitos no se llenan, la muestra se difundirá innecesariamente antes de que principie el proceso de separación.

La muestra debe evaporarse rápidamente y mezclarse con el gas portador para evitar que se fraccione antes de entrar a la columna.

Las muestras líquidas se inyectan a través de un tapón de hule y con una jeringa de capacidad adecuada en una pequeña cámara calentada que antecede a la columna. La inyección se debe hacer con un movimiento rápido y preciso del émbolo y se debe tener mucho cuidado en la manipulación porque esta parte del aparato está bajo presión. Las muestras gaseosas se pueden medir con precisión más fácilmente debido a su mayor volumen. Las muestras sólidas son más difíciles de introducir, pero se puede colocar en una pequeña ampolleta cerrada que se inserta en la entrada del inyector y luego se rompe desde afuera.

La entrada de la muestra debe estar lo más cerca posible de la cabeza de la columna para evitar dispersiones innecesarias.

Funcionamiento del cromatógrafo.

La fuente de gas portador es la que suministra el gas de una manera regulada, este gas es llevado de los sistemas de inyección hasta el detector. En el caso de que la muestra sea gaseosa, el sistema suele ser una cámara que puede ser atravesada por una corriente del gas a introducir y en el momento en que se quiera introducir la muestra a la columna, se cierra una llave de paso y ésta se conecta a la cámara en circuito con la columna. En el caso de que la muestra sea líquida y hasta sólida vaporizable, el sistema de inyección pasa a ser un pequeño recinto en serie con el circuito del gas portador y se introduce la muestra con una aguja hipodérmica. Una vez introducida la muestra, ésta es llevada a la columna, en donde dicha mezcla es separada.

La columna se encuentra en un recinto termostático, ya que la temperatura influye de modo importante en la retención de los componentes por la columna, y por tanto, en la separación de los mismos; por ello, la temperatura deberá ser constante ó programada a través de toda la columna.

A la salida de la columna, la corriente gaseosa pasa al detector, que se utiliza para cuantificar los componentes ya separados. El detector realiza una prueba de comparación entre el gas portador puro y el que sale de la columna y está construido de tal forma que la medida comparativa que realiza de la propiedad de los gases en que se basa, se manifiesta en forma de señal de tipo eléctrico.

Esta señal se transmite mediante un circuito adecuado a un colector y amplificador de señal, la cual se registra gráficamente.

El registro del detector puede ser acumulativo (escalonado) ó instantáneo. En ambos, el tiempo de retención es el que corresponde a un aumento de volumen.

2.3.- DETECTORES

Antes de iniciar la descripción y estudio de los principales detectores empleados en cromatografía de gases, es conveniente hacer una breve referencia al concepto de transductor, para poder enfocar desde un punto de vista más general el tema de los detectores.

Transductor es todo artificio ó instrumento capaz de convertirnos una propiedad física, no medible directamente, en una señal elaborable y ofrecernos información sobre la naturaleza y magnitud de la propiedad física que incide en el transductor.

Los transductores de mayor interés en instrumentación química y, por tanto, también en cromatografía de gases, son los que nos transforman la propiedad física en una señal eléctrica. Señal extraordinariamente útil, que puede amplificarse adecuadamente; por otra parte, actualmente, se dispone de instrumentos sensibles y precisos para su medida correcta.

Las separaciones notables que se efectúan en la columna se deben poner en evidencia y registrar en alguna forma. Todos los componentes se encuentran sumamente diluidos en el gas transportador, en concentraciones que van de 1 parte por millón (ppm), en el mejor de los casos, hasta cero. Además, los primeros picos bien definidos pueden pasar por el detector en menos de un segundo, en tanto que los últimos pueden tardar horas en salir y apenas distinguirse sobre la línea base. En alguna forma, el detector debe pasar por alto la gran cantidad de gas transportador y encontrar las huellas de los componentes de la muestra que contiene.

Aún no se ha encontrado el detector universal, ya que tendría que llenar los siguientes requisitos: bajo límite de detección, respuesta lineal en límites extremos de concentración, respuesta uniforme a todas las sustancias posibles, calibración sencilla, tiempo de respuesta corto, volumen interno pequeño, escaso ruido y estabilidad prolongada; además, debe ser sencillo, barato, resistente y seguro al operar. También se pueden presentar casos en que se desee una respuesta selectiva para algunos de los componentes, que ayude a su identificación, o como medio para encontrar huellas de un componente que no ha sido totalmente separado del componente principal.

El detector es uno de los elementos más importantes de un cromatógrafo. Gran parte de los detectores realizan su función comparando una propiedad física entre el gas portador puro y el mismo gas portador llevando cada uno de los componentes que previamente se han separado en la columna. Otros se basan en medir directamente la propiedad del componente en el gas portador o en un gas auxiliar.

El papel del detector es indicar los momentos de elución de los componentes y de proporcionar una indicación cuantitativa de los mismos. La acción del detector se traduce en una señal de tipo eléctrico, que posteriormente se amplificará e interpretará mediante un registrador gráfico o un integrador, en picos agudos.

Tipos de detectores y sus aplicaciones.

Los detectores empleados en cromatografía de gases son, en realidad, transductores de concentración. La propiedad física que miden es la variación de concentración de las sustancias eluidas en el seno del gas portador, y la mayoría de ellos nos ofrecen una señal eléctrica proporcional, fácilmente medible y registrable en función del tiempo.

Detector	Selectividad	Mercado	Detección	RDL *
TCD (Thermal Conductivity Detector)	Universal	Petróleo y medio ambiente: gases inorgánicos y ligeros	0.2 ppm	10 E4
FID (Flame Ionization Detector)	Universal para hidrocarburos	Todos los mercados, especialmente petróleo	< 10 pg/seg	10 E7
ECD (Electron Capture Detector)	Compuestos electronegativos, halógenos, peróxidos, quinonas, organometálicos y grupos nitro	Farmacéutico y medio ambiente	< 0.1 ppb	10 E3
TSD (Thermionic Specific Detector)	Fósforo, nitrógeno	Todos los mercados, especialmente farmacéuticos, medio ambiente	< 0.05 pg P/seg < 0.1 pg N/seg	10 E3
FPD (Flame Photometric Detector)	Sulfuros, fósforos	Petróleo y medio ambiente	0.1 ng S/seg 1 pg P/seg	10 E4
ELCD (Electrolytic Conductivity Detector)	Compuestos orgánicos con nitrógeno, sulfuros y halógenos	Medio ambiente, alimentos, saborizantes y farmacéuticos	2 pg N/seg 2 pg S/seg 0.5 pg Cl/seg	10 E4
PID (Photo Ionization Detector)	Fenoles aromáticos e hidrocarburos aromáticos	Medio ambiente	< 10 pg/seg	10E7

* Rangos Dinámicos Lineales

Tabla 1. Especificaciones de los detectores*

Características generales de un detector.

En primer lugar, el detector debe ser un transductor de concentración en fase vapor y, además, poseer una sensibilidad adecuada junto con un bajo nivel de ruido.

* *Varian Chromatography Manual*, 1996, pág. 5-3

El detector debe ser rápido, capaz de revelar casi instantáneamente variaciones de concentración en el gas portador que emerge de la columna cromatográfica; esta rapidez de respuesta es inherente a la naturaleza del detector, pero puede disminuir si el volumen interno del mismo es grande. Por tanto, para conseguir una rápida respuesta y también para evitar pérdida de resolución de las sustancias separadas en la columna, el volumen interno del detector debe ser lo más pequeño posible.

En orden a obtener información cuantitativa es evidente que la respuesta del detector debe ser lineal y con un margen de linealidad lo más amplio posible.

En resumen, al comparar la calidad de los detectores en cromatografía de gases, hay que tener en cuenta estos tres conceptos primordiales: sensibilidad, linealidad y una rapidez de respuesta adecuada.

Detectores integrales y diferenciales: La primera clasificación general de los diversos tipos de detectores puede efectuarse según la modalidad en que ofrecen la señal, y son varios los autores que aceptan esta primera distinción como fundamental.

Se han propuesto decenas de tipos de detectores y su clasificación no tendría límite. Los detectores diferenciales miden la concentración del momento o velocidad de salida del componente del momento, mientras que los detectores integrales acumulan los componentes de la muestra y la señal de la cantidad total que ha salido hasta un momento determinado.

Dependiendo al componente que analizan, los detectores se clasifican en instantáneos o diferenciales y acumulativos o integrales. Finalmente y desde el punto de vista de las aplicaciones de la cromatografía de gases, se clasifican en base a su selectividad ante diferentes componentes.

Entre los detectores más empleados están los de flama de hidrógeno, de conductividad térmica y el detector de captura de electrones.

Considerando el destino que se dé a los componentes detectados, los detectores se clasifican en destructores y no destructores, según que consuman o no el componente al realizar la detección.

Desde el punto de vista de la propiedad en que se basa la detección se puede clasificar según se trate de propiedades de la mezcla formada por el gas portador y el componente o solamente de propiedades del componente.

Linealidad del detector

La precisión de un análisis cuantitativo depende de la relación lineal entre la concentración y la respuesta del detector.

Para que un detector sea perfectamente lineal deberá tener una pendiente de 1.00 en una escala de log-log.

El rango lineal es la relación de la concentración más grande a la más pequeña donde el detector es lineal.

Sensibilidad.

Es un cambio de la respuesta del detector con un cambio en la cantidad detectada.

Para un detector que depende de la masa:

$$S = A / M$$

donde: S = sensibilidad

A = área del pico integrado

M = cantidad de masa

Para un detector que depende de la concentración:

$$S = h_i / C$$

donde: h_i = altura del pico

C = concentración

Selectividad

La respuesta es definida como la cantidad de una señal generada por una cantidad de muestra dada.

Las cantidades iguales de muestra pero de diferentes clases de componentes no siempre producen una respuesta igual en el detector.

Cada detector requiere de una calibración para determinar los factores de respuesta para cada componente durante el análisis cuantitativo.

Mezclas de prueba.

Las mezclas de prueba proporcionan una referencia gráfica y se pueden utilizar para monitorear el funcionamiento del detector como una función del tiempo.

Se debe utilizar la columna de prueba y muestra de prueba específicas para cada detector.

Observar el cromatograma respecto a la separación, alturas y tiempos de retención de los picos.

Una falla del funcionamiento es detectado por la aparición de picos anchos, pequeños, tiempos de retención largos y una línea base ruidosa.

Rango del detector y atenuación

El rango del detector se utiliza para seleccionar la región correcta del intervalo total en donde la respuesta es lineal. Se debe elegir el rango adecuado de acuerdo al nivel de concentración de la muestra.

El control de atenuación ajusta la señal de salida para fijarlo en la escala (dividiendo la señal entre el valor elegido). Es estética del cromatograma a menos que se haga una cuantificación manual.

Es una función binaria, por ejemplo, 1, 2, 4, 8,....1024

Detectores de elevada sensibilidad.

Los detectores de elevada sensibilidad que tienen en la actualidad mayor interés son los de ionización. Existen diversos tipos de detectores de ionización y es conveniente clasificarlos por grupos afines, según el principio químico-físico de su funcionamiento:

– Detectores de ionización no radioactivos:

- 1) Detector de ionización de flama (FID)
- 2) Detector termoiónico (TSD)

– Detectores de ionización de fuente radioactiva:

- 1) Detector de captura electrónica (ECD)
- 2) De ionización de Argón (AID)
- 3) Detector de sección eficaz (ESD)

De todos los detectores de ionización, el más utilizado es el de ionización de flama, por poseer una elevada sensibilidad, buena linealidad y universalidad.

Para la realización de este trabajo se va a utilizar el detector de ionización de flama ya que es el detector que va a cuantificar todos los componentes de la gasolina.

2.3.1. DETECTOR DE IONIZACION DE FLAMA (FID)

El *detector de ionización de flama* emplea una flama de hidrógeno para la combustión de la muestra y produce iones. Los iones se forman en una flama (a 2000 °C) localizada entre dos electrodos (punta de la flama y colector). El flujo real a través de los electrodos varía con el número de iones formados. Consta de dos partes fundamentales: el sistema para producir una flama adecuada y la parte electrónica. El conjunto constituye el transductor o detector y la flama es propiamente el ionizador. Cuando se queman compuestos orgánicos en una flama de hidrógeno-aire, se obtiene partículas cargadas o iones. Se producen iones positivos y negativos más

electrones libres cuando la muestra pasa por la flama. Un par de electrodos con un voltaje polarizado aplicado recoge estos iones y la corriente resultante se amplifica con un electrómetro.

La figura 3 es un esquema simplificado de un detector de flama de hidrógeno.

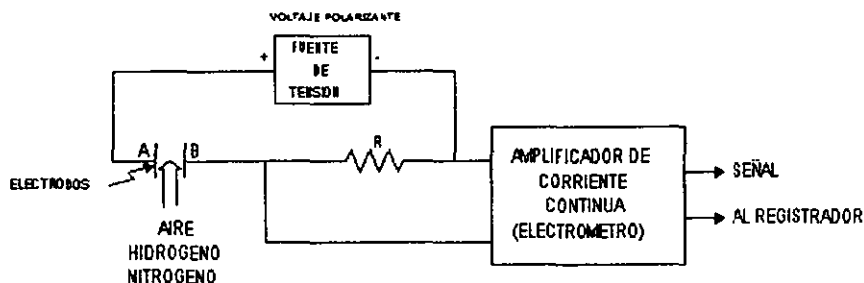


Fig. 3. Diagrama básico del FID.*

La fuente de tensión continua debe ser perfectamente estable; en muchos aparatos se emplea incluso una batería. Los voltajes aplicados a los electrodos oscilan entre 80 y 250 V. La resistencia R tiene la misión de dar lugar a una caída de voltaje, proporcional a la corriente de ionización. Esta resistencia es la resistencia de entrada al amplificador y su magnitud es del orden de 10^{12} Ohms, pues las corrientes de ionización son muy pequeñas.

El amplificador de corriente continua es, en realidad, un electrómetro.

El circuito asociado al detector de ionización de flama consiste en una fuente de poder para el voltaje polarizante, más un electrómetro para amplificar la señal resultante.

Básicamente el electrómetro es un amplificador de alta ganancia y muy bajo ruido. Acepta corrientes pequeñas del orden de 10^{-9} a 10^{-12} amperios y produce un voltaje proporcional a la entrada de la corriente pero lo suficientemente grande para transmitir la señal a un registrador de 1 milivoltio.

Aunque los electrómetros varían mucho en los detalles de diseño, tienen elementos comunes. La mayoría de los electrómetros están hechos alrededor de lo que se llama un circuito amplificador operacional (OpAmp). (Ver figura 4.)

* Rowland, Fred. *Manual de HP*, 1977, pág. 4.11

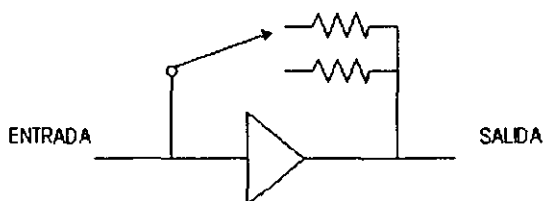


Fig. 4. Circuito Amplificador Operacional.*

El circuito operacional es un amplificador de alta ganancia, está estabilizado y toda su amplificación está determinada por la alimentación de la salida a la entrada a través de un resistor de alto valor. Si se cambian los resistores la ganancia que se llama orden (ó range) en el cromatógrafo también cambia.

Estos resistores de orden tienen una resistencia extremadamente alta. De hecho tan alta que un poco de suciedad, humedad o una impresión digital en la parte exterior constituye un mejor conductor que el resistor mismo. Los resistores de orden o el interruptor de orden están comprendidos en un compartimiento sellado, con un desecante por su vulnerabilidad.

Se ha desarrollado un segundo paso por los problemas asociados con el alto valor de los resistores de orden, y por la inestabilidad temporal que hay cuando la ganancia del amplificador cambia. Esto consiste en dos amplificadores en serie que funcionan con factores de amplificación fijos. El primer amplificador tiene una salida logarítmica y el segundo una antilogarítmica, que al trabajar juntos tienen una característica enteramente lineal como el amplificador operacional. El orden se establece sustrayendo el voltaje apropiado (proporcional a $\log 1$, $\log 10$, $\log 100$, etc.) de la salida del primer amplificador, y esto no requiere el uso de los resistores de alto valor. Las desviaciones momentáneas quedan eliminadas.

Así como es posible sobrecargar el detector con un exceso de muestra también se puede sobrecargar el electrómetro con una señal de entrada demasiado grande. Ocurrirá entonces una distorsión de pico, con una cima en forma de cigarro (tabaco), la solución, por supuesto, es un ajuste de orden menos sensible.

El botón del cero y el interruptor de suspensión hacen esencialmente lo mismo, y algunas veces se combinan en un solo control. Desde el punto de vista eléctrico proveen una pequeña corriente que se resta de la señal del detector antes de la amplificación. Todos los detectores tienen una corriente de fondo que se genera aunque no haya nada de muestra.

Todos los electrómetros tienen un atenuador que es un divisor de voltaje en la salida para poner el registrador en escala apropiada. Estos operan usualmente en pasos binarios (1, 2, 4, 8, etc.).

* Rowland, Fred. *Manual de HP*, 1977, pág. 4.14

La corriente de fondo, se establece al someter la flama a una diferencia de potencial. Al aparecer en la flama una sustancia extraña habrá una variación en la corriente de fondo debida a la aparición de nuevas especies iónicas o, incluso, modificación de las que había.

La aparición de una sustancia orgánica en la flama de hidrógeno-aire provoca un fuerte aumento de la corriente de ionización, siempre que el compuesto orgánico contenga unidades C-H en su molécula. Por el momento no existe aún una clara y total explicación sobre el origen de la corriente de ionización que producen las sustancias orgánicas en la flama de hidrógeno, a pesar de que las primeras observaciones sobre este fenómeno datan de 1801, pues Volta describe la descarga de un condensador a través de una flama orgánica.

Actualmente, parece ser que el mecanismo que mejor explica este fenómeno en más bien una ionización química que tiene lugar, preferentemente, en algunas zonas de la flama.

Existen algunas pruebas de tipo experimental que refuerzan la hipótesis de la ionización química, pues parece ser que la concentración de especies iónicas se encuentra en la parte externa de la flama, zona de reacción, y no en la parte más caliente de la misma.

Por otra parte, la energía de reacción en la flama no es eficaz para ionizar los radicales o especies formadas en la reacción cuando se degrada en energía de translación o vibracional.

Detalles para el empleo del detector de ionización de flama

Del funcionamiento físico de este detector de ionización de flama se deduce que serán varios los parámetros que influirán en la ionización química, además del propio diseño del detector, según sea éste, se conseguirá un mayor rendimiento en la recolección de las cargas formadas por los electrodos.

La relación de caudales de los tres gases que intervienen en el detector de ionización de flama influye seriamente en la magnitud de la señal y debe buscarse experimentalmente la relación óptima entre los flujos de hidrógeno y aire para obtener la máxima sensibilidad, ya que de ordinario el caudal del gas portador es una exigencia de la separación cromatográfica y no puede variarse arbitrariamente, pues se corre el riesgo de perder resolución.

Es también importante el no pasar de un caudal determinado de hidrógeno, puesto que si la flama es demasiado grande aumenta excesivamente la temperatura del detector, lo cual es perjudicial para el propio detector y, por otra parte, aumenta el nivel de ruido del mismo.

Una fuente de perturbaciones, ruido no electrónico, pueden ser impurezas de tipo orgánico que contengan los gases que van al detector, y es aconsejable utilizar un sistema de purificación para los gases que se emplean para el detector de ionización de flama.

Respuesta del detector de ionización de flama de hidrógeno

En los derivados oxigenados la respuesta dependerá del número efectivo de carbonos. El detector de ionización de flama es alrededor de 1,000 veces más sensible que el detector de conductividad térmica, para la mayoría de los materiales, pero hay algunos compuestos con los que tiene una respuesta baja o ninguna. Con la excepción de estos pocos, la cantidad mínima detectable es aproximadamente 1 nanogramo, lo cual en una inyección de 1 microlitro es aproximadamente 1 parte por millón (ppm).

Los materiales que no se queman y se ionizan en la flama de hidrógeno/aire dan poca o nada de respuesta.

El detector de ionización de flama tiene un amplio orden lineal, de 10^5 a 10^7 en los diseños actuales. El tope del orden lineal está en 10 microgramos de un compuesto dado; para una inyección de 1 microlitro es alrededor del 1%. Si se tienen que analizar cuantitativamente concentraciones más altas que ésta, tiene que diluirse la muestra.

Para columnas empacadas el nitrógeno como gas acarreador es mejor que el helio por dos razones. La sensibilidad que se obtiene con el nitrógeno es dos veces mayor que con el helio, y la alta densidad del nitrógeno reduce la expansión del pico en la columna y aumenta la eficiencia.

Y está generalmente determinado por el diámetro de la columna, de 30 ml/min para columnas de 1/8 pulgada y 50-60 ml/min para 1/4 pulgada. Sin embargo, para un cierto flujo acarreador hay un flujo de hidrógeno óptimo para la flama.

Una manera conveniente para determinar lo óptimo de un flujo acarreador dado, es ajustar la sensibilidad y la temperatura del horno hasta que aparezca un sangrado constante en la columna, luego hay que ajustar el flujo de hidrógeno para el desplazamiento máximo.

El flujo de aire es menos crítico, basta tener lo suficiente para la combustión, normalmente es adecuado de 8 a 10 veces más que la cantidad de hidrógeno.

Las columnas bien acondicionadas son necesarias por la alta sensibilidad de este detector. Por la misma razón cuando se usa el detector de ionización de flama, los límites de temperatura de columna son un 100% más bajos que los de conductividad térmica. Se recomiendan cargas de fase líquida más bajas para reducir la señal de sangrado, lo cual mejorará la eficiencia de la columna.

Los detectores de flama siempre deben operarse arriba de los 100 °C para prevenir condensación de agua del proceso de combustión.

Algunas muestras, especialmente los compuestos aromáticos, no se queman bien y pueden dejar depósitos de hollín en el detector. Si se deja que se formen y esto puede pasar rápidamente si el benceno u otros aromáticos se usan como solvente, algunas partículas se rompen y caen en la flama. Esto causa un claveteo (spiking) severo en el papel del registrador. Los depósitos de sílica blanca son el resultado de pérdida de fase líquida (sangrado). La formación de sílica puede causar una pérdida gradual de la sensibilidad antes de que aparezca el claveteo en el papel.

La muestra que sale de la columna llega a la flama y se mezcla con el hidrógeno y el aire que la alimentan. Existe la posibilidad de una formación explosiva debida al hidrógeno que se usa como combustible. Por eso siempre tiene que haber una columna o un tapón Swagelok conectada a

los aditamentos de entrada del detector de flama. Si el aditamento se deja abierto y el hidrógeno circula, hay una vía libre para que entre el gas directamente al horno donde se puede mezclar con aire y existe una posibilidad de que los calentadores provoquen la ignición.

Las columnas capilares utilizan hidrógeno como gas acarreador y la sensibilidad del detector es mejor.

2.4.- ANALISIS CUALITATIVO

El *análisis cualitativo* proporciona información de la identidad de los componentes de la muestra.

Diferentes componentes pueden tener idénticos o muy cercanos tiempos de retención.

Se utilizan los tiempos de retención relativos de los componentes para comparar los solutos conocidos con los solutos desconocidos bajo condiciones idénticas.

La variedad de los sistemas de identificación por índices de retención se basan en los mismos principios.

El concepto de índice de retención, originalmente desarrollado por Kovats⁴, usa un conjunto distinto de materiales de referencia para todas las muestras. El conjunto que se elige es el normal (cadena recta) de hidrocarburos saturados, ya que son baratos, muy fáciles de encontrar, estables y se cromatografían bien con todas las fases estacionarias.

Uno de los métodos más usados para identificar los componentes, son los índices de Kovats para columnas con temperatura isotérmica.

En los índices de Kovats se necesitan 2 ó 3 compuestos para establecer la pendiente de la curva de calibración. La curva se utiliza para identificar a los otros miembros de la misma serie.

El logaritmo de t_r contra el número de carbonos de una serie homóloga. (Ver figura 5)

⁴ Rowland, Fred. *Manual de HP*, 1977, pág. 5.3

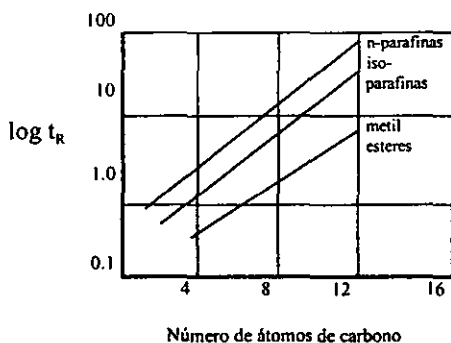


Fig. 5. Curva de calibración para los índices de Kovats.*

Se debe utilizar el mismo tipo de columna para obtener la curva de calibración y los tiempos de retención de los componentes.

$$KI(x) = 100z + 100 \frac{t_R(x) - t_R(z)}{t_R(z+1) - t_R(z)} \cdot 5$$

donde: $KI = 100z$, $z =$ número de átomos de carbono

$t_R(x) =$ tiempo de retención del componente desconocido

$t_R(z) =$ tiempo de retención de un hidrocarburo de cadena lineal

Se dispone solamente de un parámetro característico en la identificación química de un compuesto en una muestra: el *tiempo de retención*, o sea el lapso de tiempo transcurrido desde la inyección hasta la aparición del pico en el registrador.

El lapso de tiempo total se llama usualmente *tiempo de retención absoluto* (t_R). Se compone de dos partes, el tiempo requerido por solamente el gas acarreador para desplazarse desde el punto de inyección hasta el detector, y el tiempo adicional del compuesto debido a la retención que produce la fase líquida estacionaria. El primero se designa como tiempo "muerto", que es una característica del equipo y la columna en uso, es el mismo para todos los componentes y por esto carece de significado en la identificación.

La diferencia entre el tiempo de retención absoluto y el tiempo muerto se llama *tiempo de retención corregido* (t'_R). (Ver figura 6)

* *Varian Chromatography Manual*, 1996, pág. 6-10

⁵ -----*ibidem*, 1996, pág. 6-10

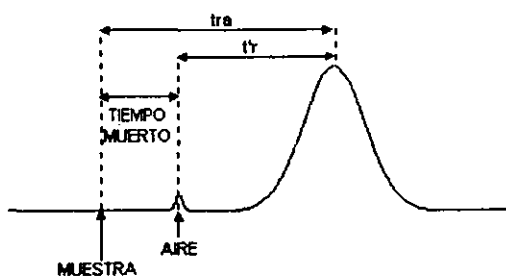


Fig. 6. Gráfica de Tiempo de Retención.*

Esto es característico de un componente dado a una combinación específica de tamaño de columna, selección de fase líquida, porcentaje de fase líquida, velocidad de flujo, gas portador, temperatura del horno. Dado que hay gran sensibilidad en muchos parámetros, es difícil reproducirlos día a día. Para evitar muchos de estos problemas de reproducibilidad, se usa con frecuencia el tiempo relativo de retención. Esta es la relación del tiempo de retención corregido del pico en cuestión con la de un pico conocido en la muestra, que se denomina *pico de referencia*. Este procedimiento elimina los efectos de variaciones en el diámetro de la columna y su longitud, porcentaje de fase líquida, régimen de flujo de gas portador y cualquier otro parámetro que afecta los dos picos en la misma forma.

En todo trabajo donde los tiempos de retención deben medirse exactamente, debe cuidarse mucho de no sobrecargar la columna. Esto creará un desplazamiento del vértice del pico y por lo tanto del tiempo de retención aparente. La dirección del desplazamiento dependerá de la fase estacionaria; en general cuando se sobrecarga una fase líquida causa un desplazamiento que prolonga el tiempo mientras que la sobrecarga de los adsorbentes ó polímeros porosos crea un aparente decrecimiento en tiempo de retención.

Las columnas capilares tienen menor caída de presión y pueden tener mayor longitud. La columna capilar tiene una resolución mayor que la columna empacada.

La forma de los picos es mucho más aguda que el de la forma tradicional gaussiana.

2.5.- ANALISIS CUANTITATIVO

El *análisis cuantitativo* proporciona información de las cantidades de los componentes de la muestra.

* Rowland, Fred. *Manual de HP*, 1977, pág.5.2

En cromatografía, la mayor parte de los análisis se realizan con el fin de determinar la concentración o el peso absoluto del, o de los componentes presentes en la muestra. Ya que el cromatógrafo no presenta los resultados en forma numérica, sino como variación del voltaje de salida en función del tiempo, es necesario, transformar dichas variaciones en un número y convertirlo luego en la información deseada. En general, estas etapas son:

- a) Optimización de las condiciones instrumentales
- b) Determinación del rango lineal
- c) Medida de la respuesta
- d) Conversión de esa respuesta a concentración

Los objetivos son:

1. Los picos de interés no deben estar distorsionados
2. Los picos deben estar bien separados de los adyacentes
3. La relación señal/ruido debe ser grande
4. La línea base debe ser plana

El pico ideal en cromatografía debe ser simétrico y estrecho. La simetría depende de muchos factores; además del diseño del instrumento de inyección, las interacciones y sobrecarga en la columna. Es esencial una buena "carga". Esto significa una entrada limpia a través de la septa, una rápida depresión del émbolo de la jeringa y el retiro rápido de la misma.

Una técnica lenta siempre causará ensanchamiento y cola en el pico. Estas alteraciones (ensanchamiento y cola) en la columna pueden originarse debido al exceso de la fase líquida, o a interacciones de los componentes de la muestra con el soporte o material de la columna.

La programación de la temperatura es una técnica óptima para evitar el ensanchamiento característico en los últimos picos del análisis isotérmico, y tiene la ventaja de reducir el tiempo total del análisis.

Para la separación de los picos una resolución de al menos 1 (si es 1.5 mejor) es la recomendable para todos los picos.

La razón principal por la que existe un gran número de procedimientos de cómputo es que ninguno conoce realmente la forma del pico cromatográfico. Raramente es un pico "gaussiano", como sabe todo cromatografista. Casi siempre está presente alguna asimetría, particularmente cerca de la línea base. Muchos de los métodos matemáticos comienzan con un modelo "gaussiano" y luego lo modifican con algún factor de corrección para dicha asimetría. Los cálculos pueden ser extremadamente elaborados, y requerir además de una considerable capacidad de cómputo y de tiempo, y la respuesta real aún no es posible. La mejor forma de evitar esos problemas y complicaciones es primordialmente tratar de lograr una buena separación.

En los casos en que esta separación no pueda lograrse es necesario utilizar algunos recursos matemáticos en la integración. En primer lugar consideraremos las técnicas de líneas punteadas, que consisten en separar los picos unidos por medio de líneas perpendiculares, el valle entre los picos y la línea base. Este procedimiento da una división del área sorprendentemente exacta.

Los principales puntos para obtener un pico grande y una línea base estable son la limpieza, tanto del detector, como de las líneas de gas del instrumento.

La línea base plana está relacionada con la necesidad de una línea base estable. El ruido puede aparecer como una "hierba" a lo largo de la línea base, o como una deflexión de la misma.

El cromatógrafo nos da un voltaje de salida, el cual cambia con el tiempo. El dispositivo más simple para ello es un registrador, el cual traza una línea sobre una hoja de papel. Con el fin de calcular una respuesta necesitamos convertir este registro en un número cualquiera.

Lo más fácil de medir es la máxima distancia a la cual el pico sale de la línea base. Las ventajas son velocidad y facilidad, sin embargo, está sujeto a muchas fuentes de error.

Cualquier cosa que altere la forma del pico creará problemas. Las diferencias de operador a operador en la técnica de inyección causan variaciones en la anchura del pico, y por lo tanto en la altura, aún si se inyecta la misma cantidad de muestra. La sobrecarga en la columna inducirá a no-linealidades. La velocidad de flujo y el control de la temperatura se vuelven algo críticas. Debido a estos y otros factores particularmente el problema de reproducibilidad en los laboratorios se prefiere medir el área en lugar de la altura.

El área no depende de la forma. De tal manera que cuando se inyecta la misma cantidad de material, aún si la columna se sobrecarga, se obtendrá el mismo número. Variación en la técnica del operador, asumiendo que se inyectó la misma cantidad, no tiene un efecto apreciable en el área. Aún las velocidades de flujo son menos críticas. Sin embargo, el área es más difícil de medir.

Medición del área.

En la práctica, el área se mide por cualquiera de las técnicas siguientes:

1. Calculando el área por triangulación. Se trazan tangentes a los puntos de inflexión en los lados del pico y se calcula el área del triángulo que se forma en la línea fundamental (base).
2. Acoplado un aditamento mecánico o electrónico al registrador, que automáticamente integre el área. (Algunos aditamentos operan directamente del detector.)

Cualquiera de estos métodos es satisfactorio y cuando el factor de calibración se determine en la misma forma, la elección la determina la mayor conveniencia. Cuando se tienen picos que no están totalmente resueltos (sobreposición), generalmente se traza una perpendicular de la señal menor a la línea base dividiendo el área.

Probablemente es más difícil determinar el factor de calibración correcto, que determinar el área del pico. Para cada componente se requiere un factor diferente y que las condiciones de operación del detector deben permanecer constantes. La calibración absoluta de un detector es realmente difícil y requiere muestras de composición conocida preparadas cuidadosamente o cantidades de sustancias pura medidas con precisión.

Se presenta otro problema cuando el pico es tan agudo (angosto) que no se puede determinar el área con exactitud. En este caso, está permitido usar la altura del pico como medida

de la cantidad, a condición de que el factor de calibración se determine correctamente. Esta técnica puede, naturalmente, aplicarse a los análisis de repetición, como los que se requieren en un proceso de control.

Es necesario el flujo constante del gas acarreador, la temperatura y el buen aspecto de los picos.

Varios de los métodos manuales dependen de la construcción de un triángulo de la misma área que el pico, y luego calcular dicha área. Al realizarlo por medio de rectas tangentes hay un área en la cima la cual no debería ser incluida, y dos pequeñas áreas a los lados que deberían incluirse. (Ver figura 7).

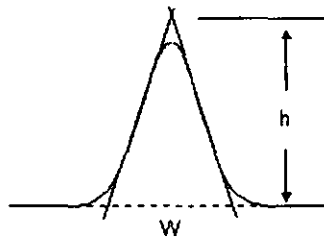


Fig. 7. $A = \frac{1}{2} Wh$ *

Una variación de la anterior es usar la altura y el ancho a la media altura, lo que evita el problema del dibujo real del triángulo, pero siempre se sobre estima el área pues el triángulo está completamente dentro del pico real. (Ver figura 8).

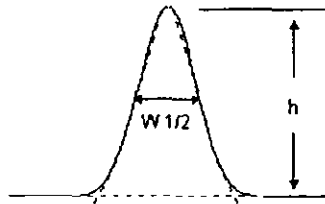


Fig. 8. $A = W1/2 h$ **

* Rowland, Fred. *Manual de HP*, 1977, pág. 6.4

** Rowland, Fred. *Manual de HP*, 1977, pág. 6.5

Estos dos métodos muestran un problema común. El pico ideal, para el cromatografista es alto y estrecho. La altura puede medirse con bastante exactitud, pero la medida del ancho por el contrario puede tener un error grande. El pico puede ampliarse aumentando la velocidad del papel pero, además de ser un desperdicio, manejar el papel resulta ser un inconveniente.

Otros métodos evitan la aproximación del triángulo y pretenden medir el área verdadera. El más simple es el de contar los cuadros (o rectángulos), se cuenta el número de rectángulos completos dentro del pico y luego se suman las fracciones hasta obtener el área total. Es sin embargo, un proceso muy laborioso y entran elementos subjetivos cuando se miden las fracciones. En el trabajo de rutina no es nada adecuado. Sin embargo, es independiente de la forma del pico.

Existen otras variaciones a los métodos manuales, pero todos ellos adolecen de alguna combinación de errores del operador, error inherente al método, etc. Para mejorar la situación necesitamos ayuda mecánica.

El integrador de disco consiste de un dispositivo mecánico acoplado directamente al mecanismo de la pluma del registrador, tiene su plumilla independiente y dibuja un trazo fino a lo largo del papel del registrador. La unión es tal que la distancia total desplazada por la plumilla del integrador es proporcional al área del pico del trazo principal que causó el desplazamiento.

Las ventajas del integrador de disco son: bajo costo, operación automática, independiente de la forma del pico y registro directo en el mismo papel donde está el cromatograma.

Las desventajas se deben al hecho de que siente la posición de la pluma del registrador en vez de la señal misma. Si la señal es lo suficientemente grande que lleve a la pluma del registrador al extremo del papel, el integrador de disco no se entera de que la señal continúa, así como también si el pico tiene la cúspide plana de igual forma aparecerá en el papel.

En otras palabras, para una operación adecuada del integrador todos los picos deben permanecer en el papel de la carta. Si hay una apreciable diferencia en el tamaño del pico es aconsejable cambiar la atenuación en el modo de integrar los picos exactamente, y luego incluir el factor de atenuación en el cálculo del área. Es de hacer notar que la atenuación debe colocarse antes de que comience el pico, de lo contrario los datos serán difíciles de interpretar.

La atenuación correcta debe conocerse previa experiencia con esa muestra, o analizar dos veces la muestra, la primera para determinar las atenuaciones y la segunda, las áreas.

El integrador electrónico, es gigante en capacidad y costo. Su precio varía dependiendo de si tiene o no la función del tiempo adicional a la del área. Las versiones que no tienen la función tiempo son, por supuesto, menos costosas, pero de muy poca aceptación. La gran ventaja de los integradores electrónicos digitales es su habilidad de funcionar sin ninguna atención por parte del operador. Una vez que se ha inyectado la muestra y presionado el botón de partida, mide los tiempos de retención y las áreas de los picos que corresponden, produciendo luego un registro impreso de los datos. Si se usa un inyector de muestras automático, éste puede conectarse con el dispositivo de arranque del integrador en el momento de la inyección, de modo tal que el operador sólo necesita colocar las condiciones iniciales en el instrumento, cargar las muestras en el muestreador e iniciar la secuencia.

Para picos con cola es deseable tener controles independientes del inicio y fin del pico.

Cuando un pico aparece en la cola del solvente, y los trucos cromatográficos usuales no dan una buena separación, un integrador en forma normal puede dar errores muy grandes. La característica de la línea base tangencial es que automáticamente construye una línea que parte del punto donde la subida de la pendiente señala el comienzo del pico y va tangente a la cola del pico del solvente, e integra toda el área por encima de esa línea. La línea ideal debería ser una extensión exponencial de la cola del solvente, sin embargo, la tangente es una aproximación muy buena. Este circuito reduce el error de integración de un 60 ó 70% a aproximadamente 1%.

El integrador electrónico es el más exacto de los dispositivos de medición de áreas. Se han reportado diferentes cifras, un promedio razonable es alrededor de 0.1%. Con los modelos más flexibles (y de mayor precio), su comportamiento puede adaptarse muy bien a la necesidades de tipo de muestra que va a ser analizada.

Asumiendo que tenemos una separación cromatográfica buena, o al menos tan buena como la muestra lo permita, y habiendo decidido el método para convertir los picos a números discretos, debemos ahora relacionar estos números con la composición de la muestra. Hay muchas formas posibles de cómputo; la selección de uno en particular depende de la exactitud deseada y de la cantidad de trabajos que se quiera realizar.

Existen 4 métodos básicos de cuantificación, los cuales son, en orden creciente de complejidad (y de exactitud) los siguientes:

- a) Normalización de área
- b) Normalización con factores de respuesta
- c) Estandarización externa
- d) Estandarización interna

La complejidad se refiere generalmente al proceso de calibración; desde el punto de vista del operador , el método más "complejo" será con frecuencia el más fácil de usar.

a) NORMALIZACIÓN DE ÁREA

Nos indica la cantidad de un componente relativo a los otros componentes en la muestra. Todos los componentes de la muestra deben responder de igual manera frente al detector. Todos los componentes deben estar bien separados.

$$\% \text{ Area} = \frac{A_i}{\Sigma A} \times 100$$

donde: A_i = área de un pico

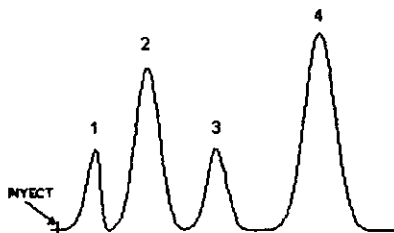
ΣA = suma de todas las áreas

El método más simple de todos es el de normalización de áreas. No requiere calibración y, por lo tanto, es usado con frecuencia para una determinación rápida de la composición aproximada.

Las etapas en el cálculo para la muestra son:

- 1) Sumar todas las áreas
- 2) Se expresa cada área de pico como un porcentaje del total
- 3) Establecer que el % de área es el mismo que el % de composición

Ejemplo:



Para este cromatograma, las áreas de los picos son:

Pico	Area	% Area	% Composición
1	1272	13.5	13.5
2	2750	28.8	28.8
3	1451	15.4	15.4
4	3977	42.3	42.3
Total	94100	100.0	100.0

En este método se asume que:

- 1) El detector responde cuantitativamente en la misma forma a todos los componentes de la muestra; es decir, que todos los factores de respuesta son iguales
- 2) Todos los componentes eluyen de la columna
- 3) Se detectan todos los componentes y por lo tanto aparecen como picos

Las ventajas son:

- 1) No requiere calibración
- 2) El cálculo es rápido y simple
- 3) La cantidad de muestra inyectada no es crítica

Las desventajas son:

- 1) Lo que se asumió en el punto 1 rara vez es cierto; los detectores no funcionan de este modo; responden vigorosamente a algunos componentes y pobremente a otros.
Por lo tanto, no es el método más exacto
- 2) Depende del detector que se use.

b) NORMALIZACIÓN CON FACTORES DE RESPUESTA

Calcula el por ciento de composición de cada uno de los componentes

Se calculan los factores de respuesta con respecto a un compuesto de referencia para cada componente (A_{ref}).

Se prepara la mezcla de cantidades conocidas de los componentes, se corre un cromatograma, se asigna un pico de referencia.

$$f_i = \frac{\text{conc}_i}{A_i} \times \frac{A_{ref}}{\text{conc}_{ref}}$$

donde: f_i = factor de respuesta para el pico i

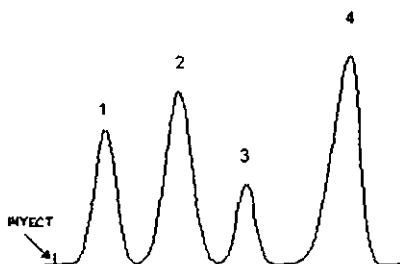
conc_i = concentración del pico i

A_i = área integrada del pico i

A_{ref} = área integrada del pico elegido como referencia

conc_{ref} = concentración del pico de referencia

Ejemplo:



Para este cromatograma, las áreas de los picos son:

Pico	Area	% Peso	Area por % de peso	Factor de respuesta relativo
1	2172	20.5	106.0	1.12
2	2516	26.6	94.6	1.00
3	1237	17.0	72.8	0.77
4	3488	35.9	97.2	1.03

Los factores de respuesta se utilizan para calcular el por ciento de área normalizada para cada uno de los picos.

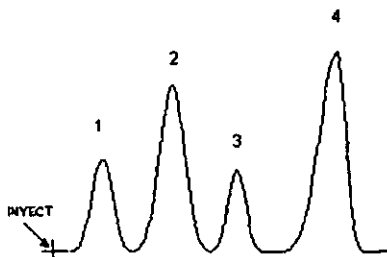
Cada pico se calcula por separado con su respectivo factor de respuesta

$$\% \text{ Area} = \frac{A_i \times F_i}{\sum (A \times f)} \times 100 \%$$

Las etapas del cálculo para la muestra son:

- 1) Para cada pico, se divide el área medida por su factor de respuesta relativo para obtener las áreas corregidas. Esto corrige la respuesta no uniforme del detector
- 2) Se suman todas las áreas corregidas
- 3) Se expresa cada una de las áreas como un % del área total corregida. Estos son los % en peso

Ejemplo:



Para este cromatograma, las áreas de los picos son:

Pico	Area	Factor de respuesta relativa	Area corregida	Porcentaje peso
1	1725	1.12	1540	16.7
2	2885	1.00	2885	31.2
3	1419	0.77	1843	19.9
4	3069	1.03	2980	32.2
Total			9248	100.0

Este método asume que todos los componentes salen y se detectan, pero no confía en la uniformidad de los factores de respuesta. Sus ventajas son cálculo rápido y simple, e insensible a la cantidad exacta de muestra inyectada. Las desventajas son:

- 1) Todos los picos deben ser calibrados. Esto no es una dificultad si son unos pocos, pero si el cromatograma es complejo la identidad de muchos picos puede ser desconocida. El trabajo de identificarlos, obtener muestras de los componentes puros, y realizar las calibraciones puede hacer impráctico este método.
- 2) Todos los componentes deben eluir y todos los picos deben ser medidos.
- 3) Los componentes no detectados pueden introducir errores grandes y desconocidos.

c) ESTANDARIZACIÓN EXTERNA

Utiliza una serie de estándares externos conocidos para construir una curva de calibración. Se construyen curvas para cada componente de interés. Se deben conocer exactamente las cantidades y volúmenes de los estándares inyectados. Las curvas de calibración deben ser lineales y pasar a través del origen.

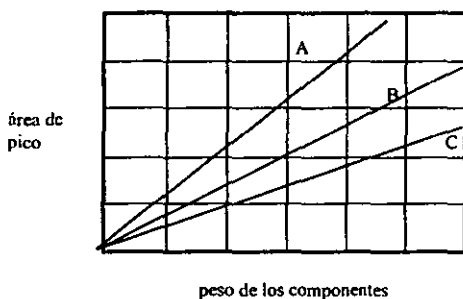


Fig. 9. Curvas de calibración para estándares externos.*

Se debe inyectar el mismo volumen de la muestra que de estándar externo.

Este método requiere preparación de las muestras patrones, pero difiere del método anterior en que sólo los picos de interés necesitan ser calibrados.

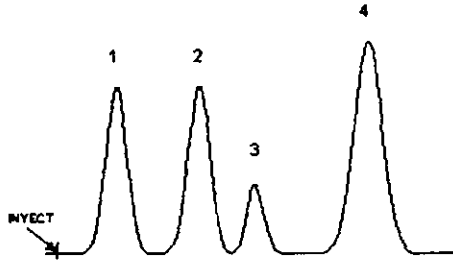
El patrón o estándar de calibración contiene solamente los materiales que serán analizados, posiblemente diluidos con un solvente adecuado para alcanzar los niveles de concentración esperados de las muestras. Debe inyectarse una cantidad de patrón medida exactamente.

* *Varian Chromatography Manual*, 1996. pág. 6-14

Las etapas del cálculo para la muestra son:

- 1) Para cada pico a ser calibrado, calcule la cantidad del componente inyectado a partir del volumen inyectado y de la composición conocida del patrón
- 2) Divida el área del pico por el peso del componente correspondiente (una unidad conveniente es 1 microgramo ó nanogramo dependiendo del detector) para obtener el factor de respuesta absoluto

Ejemplo:



Para este cromatograma, las áreas de los picos son:

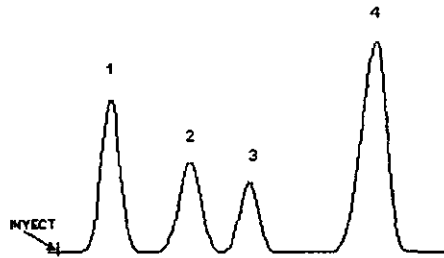
Pico	Area	Concentración (gramos/litro)	Peso inyectado (microgramos)	Factor de respuesta absoluto
1	2398	0.2213	0.332	7223
2	2276	0.2880	0.432	5269
3	1194	.01840	0.276	4326
4	3291	0.3880	0.582	5655

Cada uno de los factores de respuesta absolutos es completamente independiente de los demás. La presencia de picos adicionales, aún si son la mayoría, no tienen efecto en estos valores. Si los picos no son de interés no necesitan ser calibrados; lo mismo se aplica a los picos desconocidos, en contraste al método anterior.

Las etapas del cálculo para las muestras son:

- 1) Para cada pico, divida el área medida por el factor de respuesta absoluto para obtener la cantidad absoluta del componente que fue inyectado
- 2) Si se desea, estos números pueden convertirse a concentraciones usando el valor conocido del volumen inyectado

Ejemplo:



Para este cromatograma, las áreas de los picos son:

Pico	Area	Factor de respuesta absoluto	Peso absoluto inyectado (μg)	Concentración (gramos/litro)
1	2855	7223	0.395	0.282
2	1793	5269	0.340	0.243
3	1532	4326	0.354	0.253
4	4473	5655	0.791	0.565

Este método reduce el número de factores asumidos y simplifica el procedimiento de medida, ya que podemos ignorar todos los picos excepto los que son de interés. Sin embargo, introduce requisitos operacionales bastante estrictos.

- 1) El tamaño de muestra debe ser controlado muy rígidamente. No podemos determinar un factor de respuesta absoluto exacto, ni podemos convertir los resultados de muestra a términos de concentración, a menos que se conozca la cantidad inyectada. Un buen operador puede hacer inyecciones con una reproducibilidad del 1 ó 2%.

El problema del tamaño de muestra puede resolverse por medios mecánicos, tanto en los muestreadores automáticos para muestras líquidas o en solución, los cuales constituyen la gran mayoría de los análisis cromatográficos, como las válvulas de muestreo para gases son capaces de una reproducibilidad excelente.

- 2) La estabilidad del instrumento es vital. Cualquier cosa que altere la respuesta del detector introducirá errores en la cuantificación. Poner atención a la limpieza del detector, a la estabilidad de los flujos de gases, a los valores de temperatura, etc., son factores críticos. La calibración debe ser frecuentemente comprobada para asegurar que no ha ocurrido ninguna alteración.

d) ESTANDARIZACIÓN INTERNA

Se requiere solamente la resolución completa de los picos de interés y los estándares
Se puede cuantificar uno, más de uno o todos los picos.

El estándar interno no debe ser parte de los componentes de la muestra problema

Debe ser estable, no reactivo y de alta pureza

La respuesta del componente se calcula en relación al estándar interno

En la curva de calibración se grafican las relaciones de área contra las relaciones de cantidades.

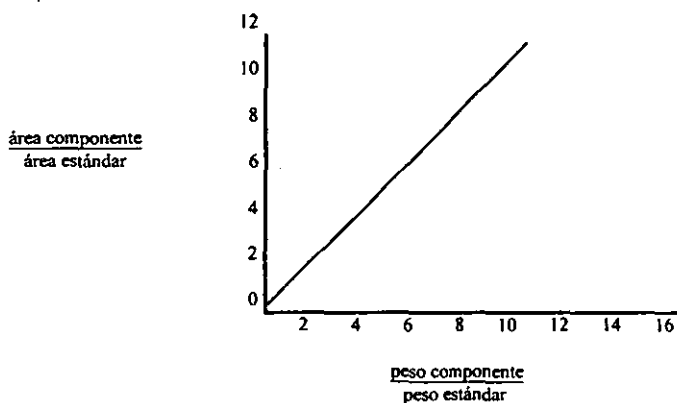


Fig. 10. Curva de calibración para el método del estándar interno.*

Medir las relaciones del área de los picos

Utilizar la curva de calibración para interpolar en la relación y determinar la cantidad de los componentes de la muestra problema.

$$RRF_i = F_i = \frac{\text{conc}_i}{\text{Area}_i} \times \frac{\text{Area}_{ref}}{\text{conc}_{ref}}$$

$$\text{Masa}_i = \frac{\text{Area}_i \cdot f_i \cdot M_{ref}}{\text{Area}_{ref}}$$

* *Varian Chromatography Manual*, 1996. pág. 6-17

donde: f_i = factor de respuesta relativo del pico i
 $conc_i$ = concentración ó masa del pico i
 $Area_i$ = área del pico i
 $Area_{ref}$ = área del pico del estándar interno
 $conc_{ref}$ = concentración ó masa del pico del estándar interno
 $masa_i$ = masa del pico i
 M_{ref} = masa del pico del estándar interno adicionado

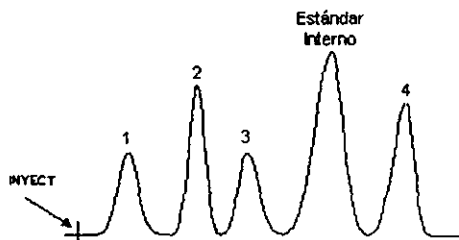
Los problemas operacionales encontrados con el método anterior de estándar externo se deben al hecho de que el patrón y la muestra se corren en inyecciones separadas y en tiempos diferentes. Esto se evita con el método del estándar interno, donde se combinan la muestra y el patrón en una sola inyección.

Se prepara una mezcla de calibración que contiene cantidades conocidas de cada uno de los componentes a ser analizados, más un componente añadido (el estándar interno) que no esté presente en las muestras analíticas.

Las etapas del cálculo para el patrón de calibración son:

- 1) Para cada pico, divida el área medida entre la cantidad de ese componente para obtener el factor de respuesta. La "cantidad" puede tomarse en unidades de concentración o peso absoluto, ya que sólo las cantidades relativas nos interesan.
- 2) Divida cada uno de los factores de respuesta entre la del estándar interno para obtener factores de respuesta relativos.

Ejemplo:



Para este cromatograma, las áreas de los picos son:

Pico	Area	Concentración (gramo/litro)	Factores de respuesta	Factor de respuesta relativo
1	1434	0.2101	6825	1.02
2	2467	0.3762	6558	0.98
3	1396	0.2559	5455	0.82
Estándar interno	2421	0.3621	6686	1.00
4	1942	0.2776	6995	1.05

El procedimiento es idéntico al del método de normalización, excepto que se ha añadido un componente adicional, el estándar interno, y se ha usado como material de referencia.

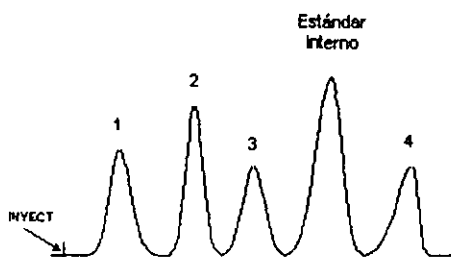
Este procedimiento de calibración está dirigido a obtener factores de respuesta relativos; no calibramos en un sentido absoluto, como se hizo con el método estándar externo.

La cantidad inyectada tampoco es crítica. Todo aumenta o disminuye proporcionalmente con la cantidad inyectada (siempre y cuando permanezcamos en el rango lineal), pero los factores de respuesta relativos permanecen constantes.

Las etapas del cálculo para la muestra son:

- 1) Para cada pico, divida el área medida entre su factor de respuesta relativa para obtener el área corregida. Esta etapa elimina el efecto de la no-uniformidad del detector.
- 2) Divida cada una de estas áreas corregidas entre la del estándar interno para obtener la cantidad de cada componente relativa a la del estándar interno.
- 3) Multiplique cada una de las cantidades relativas por la cantidad real del estándar interno para obtener las cantidades reales de cada componente.

Ejemplo:



Para este cromatograma, las áreas de los picos son:

Pico	Area	Factor	Area corregida	Cantidad relativa	Cantidad real (gramos/litro)
1	2001	1.02	1932	0.760	0.724
2	2732	0.98	2788	1.080	1.028
3	1759	0.82	2145	0.831	0.791
Estándar interno	2582	1.00	2582	1.000	0.952
4	1417	1.05	1350	0.523	0.498

Las grandes ventajas de este método son debidas al hecho de que tanto el estándar como la muestra desconocida se corren juntas en la misma inyección. Si la sensibilidad del detector se altera, todos los picos se afectan en igual forma; las cantidades relativas no cambian. Si dos operadores inyectan diferentes cantidades de la misma muestra, las alturas de los picos serán diferentes, pero las cantidades relativas permanecen constantes.

La clave del procedimiento total es añadir una cantidad conocida del estándar interno a cada muestra.

La muestra de un sólido o un líquido el cual debe ser diluido (disuelto) en un solvente antes del análisis. El solvente usado es realmente una solución que contiene el estándar interno. Usando una cantidad conocida de esta solución, introducimos una cantidad conocida del estándar interno.

¿Qué compuesto químico debemos seleccionar para usarlo como estándar interno? Existen varios requisitos:

1. Debe ser posible de obtener en alta pureza
2. Debe ser estable bajo condiciones cromatográficas
3. Debe ser inerte a todos los componentes de la muestra y de la columna
4. Debe ser cromatográficamente limpio, dando un pico bien formado y separado de todos los picos de la muestra
5. Debe ser soluble en la muestra
6. Debe tener un tiempo de retención comparable a los de los componentes de la muestra

Una serie muy útil de compuestos para uso como estándares internos son los *hidrocarburos* normales. Tienen los requisitos de pureza, estabilidad, son inertes y cromatografían bien en prácticamente todas las fases estacionarias, aunque debe tenerse cuidado con columnas sobrecargadas de fases polares. Debido a que constituyen una serie, tenemos una selección de puntos de vaporización que nos permiten colocar el pico del estándar en diferentes lugares del cromatograma; podemos casi siempre encontrar un punto abierto para el pico. La solubilidad es un problema posible. Los hidrocarburos pueden usarse prácticamente en todos los compuestos orgánicos aunque, no necesitamos de una solubilidad muy alta. Para sistemas acuosos debemos probar otra cosa, los alcoholes primarios son los que se recomiendan más ampliamente en este caso. Es siempre recomendable usar compuestos simples; son más fáciles de obtener con una pureza suficiente y menos probable de descomponerse, reaccionar con la muestra, o interactuar desfavorablemente con la columna que moléculas más complejas.

A pesar del esquema de cálculo utilizado, es necesario algún dispositivo de cálculo. Inicialmente puede hacerse con lápiz y papel, pero tarde o temprano (la mayoría temprano) es necesario algo más rápido. Reglas de cálculo y calculadoras de escritorio mitigarán el problema por un rato, pero si la carga de muestras continúa creciendo, estos dispositivos serán difíciles de mantener excepto a un costo prohibitivo de horas-hombre gastadas en la obtención de las respuestas. Afortunadamente hay dispositivos capaces de solucionar este problema, los integradores-computadores y los sistemas de datos para cromatografía de gases.

Como ya se mencionó anteriormente, el integrador electrónico es uno de los dispositivos para realizar cálculos cromatográficos más exacto que existe en el mercado.

El esquema general del integrador electrónico es el mismo para todos los fabricantes: Ver (Figura 11.)

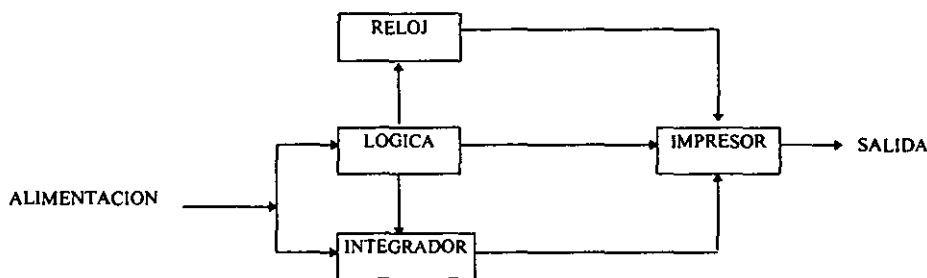


Fig. 11. Esquema General del Integrador Electrónico.*

El reloj acumula los segundos, o las fracciones de minutos transcurridos desde que se presionó el botón de partida. El valor de este tiempo se imprime sin necesidad de un circuito lógico.

El integrador tiene dos etapas: la primera convierte la señal del voltaje de entrada en una serie de pulsos cuya frecuencia es proporcional al voltaje; la segunda etapa es un contador controlado por un circuito lógico. Empieza y finaliza de contar dirigido por el circuito lógico, y pasa la cantidad acumulada (el área de pico) al impresor.

El impresor genera una lista de tiempos de retención y de las correspondientes áreas de los picos con la información suministrada por el reloj y los circuitos del integrador; es controlado por los circuitos lógicos.

* Rowland, Fred. 1977, pág. 6.7

Los circuitos lógicos son el corazón de todo el instrumento. Deciden cuando ocurre el comienzo y el final del pico, la partida y la parada del contador en el integrador, y localizan la cúspide del pico para que el tiempo de retención impreso sea el correcto. Estas decisiones están generalmente basadas en la medida de la pendiente de la señal de entrada; cuando ésta excede el valor predeterminado se considera que empieza el pico, y cuando es menor (en magnitud, no en signo) que otro valor, el final del pico. La cúspide del pico ocurre cuando la pendiente cambia de positiva a negativa. El circuito necesario para hacer estas decisiones es necesariamente más complejo e influye significativamente en el costo del instrumento.

Muchos otros elementos pueden aparecer en un integrador dado, como:

Rechazo de ruido: También conocido como filtro analógico, cada señal cromatográfica contiene una cierta cantidad de ruido. Si es algo grande, o el sistema corre a su máxima sensibilidad, puede causar un arranque de los circuitos lógicos. En el caso en que se muestre el margen, el integrador probablemente debería tratar a cada ruido pequeño como un pico independiente debido a las fluctuaciones violentas en la pendiente. Estos efectos del ruido pueden eliminarse por filtración del mismo.

Filtro digital: También llamado rechazo de picos. Cuando hay picos pequeños que no son de interés, puede asignarse un nivel de rechazo. La integración ocurre normalmente, pero antes de imprimir el área la compara con este nivel. Si el área es menor no la imprime, el contador de áreas se aclara, y el integrador espera al próximo pico.

Sensibilidad de la pendiente: Este control determina cuando detectar el comienzo y el final del pico, y por lo tanto la cantidad de área que va a ser incluida. En picos muy agudos el valor no es crítico, pero en los picos anchos puede haber diferencias. La nomenclatura es algo confusa; un alto valor de sensibilidad implica un criterio de pendiente bajo, y la sensibilidad baja es el resultado de un valor de pendiente alto.

Los integradores-computadores tienen una aparición reciente en la escena cromatográfica y hay, una considerable variación en los diferentes modelos. Esencialmente hay integradores electrónicos con una pequeña unidad procesadora digital para realizar los cálculos numéricos finales. El procesador contiene dos registros aritméticos completos para almacenamiento y manipulación de datos y dos registros cortos en el control lógico para la operación de transferencias entre memoria, los registros y la entrada-salida. El procesador tiene acceso sin restricción a toda la memoria.

Algunas de las características deseables que pueden encontrarse son: control de tiempo de dispositivos externos, un registrador que a medida que grafica el pico también va dando el tiempo de retención, promedian automáticamente múltiples corridas de calibración, selección apropiada de los valores de sensibilidad de la pendiente, y otras cualidades. La operación de un integrador-computador, sin tomar en cuenta la relativa al cálculo, es generalmente más simple que los integradores electrónicos convencionales, ya que el proceso digital puede efectuar muchas decisiones que previamente requieren un cambio en un botón por parte del operador.

Esta técnica de la cromatografía de gases, que se ha resumido teórica y prácticamente, es aplicable principalmente al análisis de las fracciones del petróleo crudo y a los productos petroquímicos que se obtienen a partir de éste. Por lo que en el siguiente tema se describirán algunas generalidades del petróleo y en cual de sus fracciones se basará el objetivo principal del presente trabajo, que es la fracción de la gasolina.

3.- GENERALIDADES DEL PETROLEO

3.1. DEFINICION DE PETROLEO

La palabra petróleo (del latín *petroleum*: *petra* = piedra y *oleum* = aceite) significa aceite de piedra.

El petróleo es una mezcla compleja de hidrocarburos, siendo estos últimos una combinación de carbono e hidrógeno.

Su composición es de: Carbono de 76 a 86 por ciento
 Hidrógeno de 10 a 14 por ciento

Además contiene compuestos complejos combinados con oxígeno, azufre y nitrógeno. También se han encontrado vestigios de compuestos de hierro, níquel, vanadio y otros metales.

El petróleo es separado por destilación en varias fracciones listadas a continuación:

Fracción	Temperatura de destilación °C	Número de carbonos
Gas	Abajo de 20°	C ₁ - C ₄
Eter de petróleo	20° - 60°	C ₅ - C ₆
Nafta ligera	60° - 100°	C ₆ - C ₇
Gasolina natural	40° - 205°	C ₅ - C ₁₀ y cicloalcanos
Diesel	175° - 325°	C ₁₂ - C ₁₈ y aromáticos
Gasóleo	Hasta 350°	C ₁₂ y más pesados
Aceite lubricante	Líquidos no volátiles	Probablemente largas cadenas ligadas a estructuras cíclicas
Asfalto o coque de petróleo	Sólidos no volátiles	Estructuras policíclicas

Tabla 2. Fracciones del petróleo.*

* Morrison and Boyd. *Organic Chemistry*, 1973, pág. 87

3.2. DEFINICION DE GASOLINA

La gasolina es una mezcla compleja de hidrocarburos líquidos, muy volátiles y fácilmente inflamables, adecuada para la operación de motores de combustión interna.

La gasolina es una mezcla de familias de hidrocarburos (que son los compuestos principales del crudo) con diferentes características y propiedades que se obtienen en los procesos de refinación del petróleo crudo. Estos compuestos están formados por cadenas desde 5 hasta 14 carbonos. El carbón se combina con hidrógeno, para formar cadenas lineales, anillos y estructuras ramificadas.

Los n-alcanos (n-parafinas) son los más prevalecientes en el petróleo. Están formados por cadenas lineales de átomos de carbono con enlaces simples al hidrógeno (C_nH_{2n+2}). Los ciclo alcanos (ciclo parafinas) son cadenas de átomos de carbón enlazados al final de la cadena formando un anillo. Los alcanos de cadenas ramificadas (iso-parafinas) son hidrocarburos que contienen únicamente carbonos e hidrógenos, son isómeros (diferentes compuestos que tienen la misma estructura molecular) de las parafinas. Los hidrocarburos insaturados (olefinas) son los que tienen dobles enlaces (alquenos) y triples enlaces (alquinos). Los aromáticos son compuestos que contienen en su estructura un anillo de benceno. Son deseables en la gasolina porque tienen un alto número de octano.

A continuación enlistamos la composición de la Gasolina por familias⁶ de compuestos químicos:

Grupo de Carbono e Hidrógeno	Fórmula
n Parafinas (n-alcanos)	$C_n H_{2n+2}$
Iso parafinas (iso alcanos)	$C_n H_{2n+2}$
Ciclo parafinas (Naftenos) (ciclo alcanos)	$C_n H_{2n}$
Olefinas (alquenos)	$C_n H_{2n}$
Di-ciclo parafinas y/o Di-olefinas	$C_n H_{2n-2}$
Tri-ciclo parafinas y/o Tri-olefinas	$C_n H_{2n-4}$
Aromáticos (Alquil bencenos)	$C_n H_{2n-6}$

Tabla 3. Composición de la Gasolina por familias

Los hidrocarburos aromáticos son aquellos donde los electrones π deslocalizados aumentan significativamente la estabilidad del hidrocarburo, por ejemplo, benceno, tolueno, orto-xileno, metil-xileno y para-xileno.

⁶ Nelson, W. *Petroleum Refinery Engineering*, pág. 9-12

De cada una de estas familias existen una gran cantidad de isómeros para cada grupo de número de carbonos, lo cual nos refleja que una gasolina está formada por más de 300 componentes individuales, los cuales requieren ser identificados y determinada su concentración. Lo cual muestra la necesidad de la identificación automática y cuantificación de cada uno de los componentes individuales y que es el objetivo del presente trabajo, desarrollar un programa de computación (software) que nos identifique y cuantifique sin errores cada uno de los compuestos.

El índice de octano, es la medida de la calidad y capacidad antidetonante de una gasolina y es indicativo del grado de eficiencia de la combustión, eliminando la presencia de explosiones múltiples dentro del motor (originadas por el uso de gasolinas de bajo índice de octano), de forma tal que se produzca la máxima cantidad de energía útil.

Comercialmente existen 2 tipos de gasolina.

Gasolina	Octanaje
Pemex Magna	87 octanos
Pemex Premium	92 octanos

3.3. APLICACIÓN PRACTICA DEL ANALISIS DETALLADO DE LA GASOLINA

El cumplimiento de los reglamentos federales para las gasolinas es cada día más estricto. Las gasolinas reformuladas que se están vendiendo en México, contemplan cambios cada vez más rigurosos tendientes a evitar la contaminación, sobre todo en las grandes urbes, controlando la concentración de algunos compuestos que se determinan por medio del análisis PIONA. Como también en el control de los procesos de obtención de las diferentes fracciones que conforman la mezcla de las gasolinas.

3.4. PROCESOS DE OBTENCION DE LAS GASOLINAS

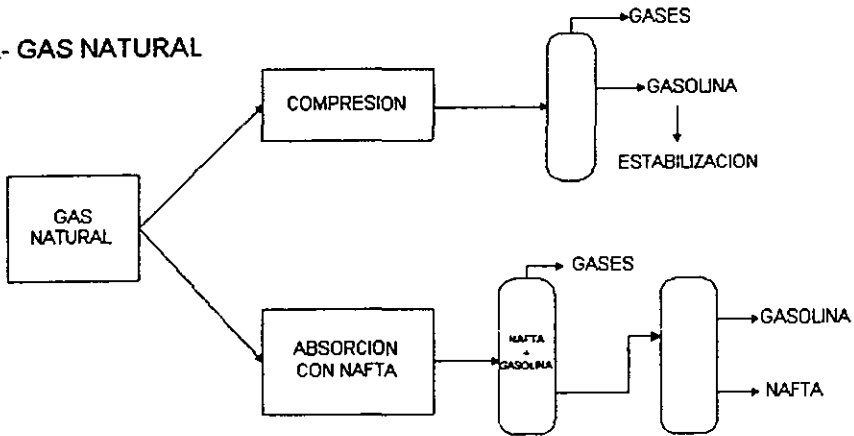
Los procesos de Refinación⁷ para la obtención y producción de la gasolina son los siguientes:

1. Gas natural
2. Gas de procesos
3. Destilación primaria
4. Reformación
5. Desintegración catalítica
6. Desintegración térmica
7. Alquilación

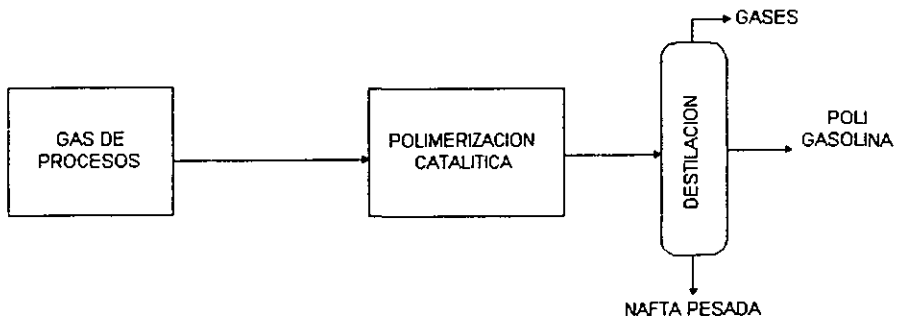
⁷ Nelson, W. *Petroleum Refinery Engineering*, cap. 6

PROCESOS DE OBTENCION DE LAS GASOLINAS

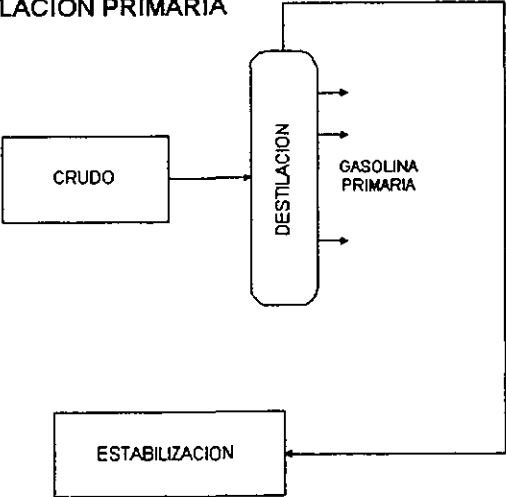
1.- GAS NATURAL



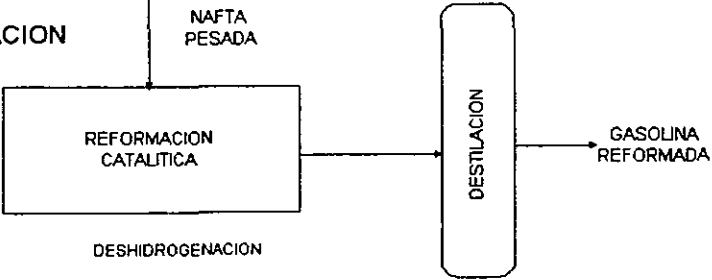
2.- GAS DE PROCESOS

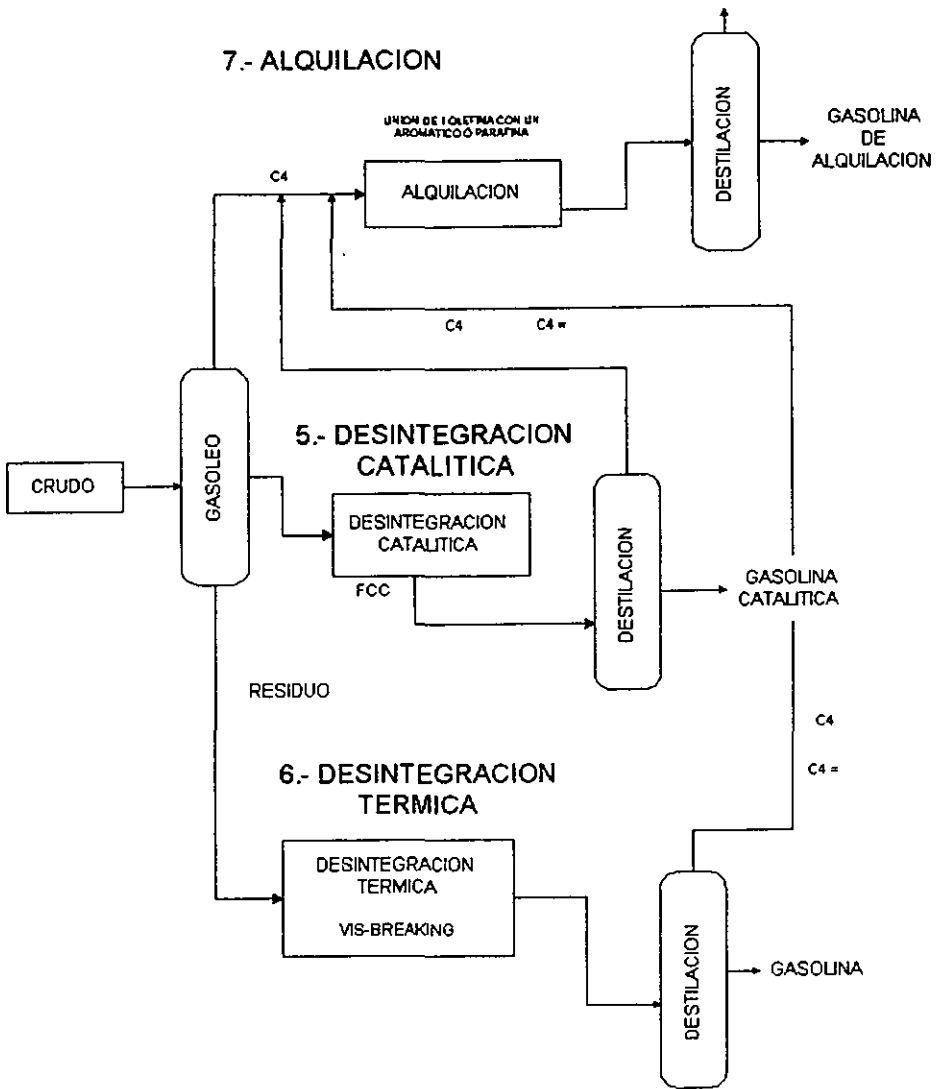


3.- DESTILACION PRIMARIA



4.- REFORMACION





CAPITULO II. DETERMINACION DE LA COMPOSICION DE LA GASOLINA

1.- INTRODUCCION

Las computadoras modernas pueden ejecutar cientos de miles de operaciones aritméticas básicas cada segundo sin error ó fatiga y pueden ser programadas para resolver una gran variedad de problemas desde los relativamente fáciles hasta los muy complejos, manipulando miles de datos a velocidades de microsegundo, con exactitudes rutinarias en cálculos de muestras para obtener su concentración en partes por millón (ppm).

Por lo tanto, no es sorprendente que un instrumento con esta capacidad del manejo de datos casi milagrosa haya encontrado un uso extensivo en la investigación científica.

Los sistemas de datos para cromatografía de gases comenzaron en los 60's como una operación "casera" rudimentaria. Una compañía, con frecuencia de la industria petrolera, se encontraba con una cantidad enorme de datos producidos en sus laboratorios cromatográficos y sin posibilidad de transformarlos a informes finales por los métodos de cálculo usuales.

Atacaron el problema comprando ó alquilando un computador digital, contratando programadores para escribir los programas necesarios (software), y conectando las señales de los detectores del cromatógrafo a una entrada del computador usando amplificadores apropiados, convertidores analógico a digital, y otro "hardware". Algunos de estos sistemas "caseros" fueron muy exitosos, la mayoría fueron bastante satisfactorios para su propósito, y unos pocos estuvieron cerca del desastre total, tanto para los que crearon el sistema como para los que se atrevieron a usarlo. Los problemas frecuentemente estaban más en el "software" que en el "hardware"; muy pocos programadores tenían algún conocimiento de cromatografía, mientras que muchos cromatografistas que habían hecho un poco de programación, carecían de un conocimiento profundo y de la práctica necesaria para usar al computador eficientemente.

Dos desarrollos ocurrieron aproximadamente en el mismo periodo de tiempo que solucionaron grandemente estos problemas. El costo de los computadores bajó drásticamente hasta el punto en que fueron comparables en precio a muchos instrumentos analíticos, y los fabricantes de cromatógrafos de gases comenzaron a producir "paquetes" de sistemas de datos (hardware/software) completos. Hoy varían en capacidad desde sistemas con una sola entrada (los integradores-computadores), hasta los capaces de manejar una docena o más de señales del detector simultáneamente, con procedimientos de cálculo diferentes en cada canal.

A pesar del sistema de datos en particular que se requiera, hay ciertas cosas que el usuario debería tener en mente:

1. Un sistema de datos sofisticado no es sustituto de una buena cromatografía. El computador tratará de separar picos unidos, pero la precisión y exactitud nunca son tan buenas como si los picos fuesen resueltos completamente por la columna.
2. El sistema de datos debe incluir un conjunto de datos y un software completos.
3. Es deseable, aunque no absolutamente necesario, que el computador esté accesible al usuario del sistema. Esto permite usar al computador para otros problemas.
4. El sistema de datos no debe ser sobrecargado. Puede haber una diferencia entre el número de instrumentos que pueden ser conectados simultáneamente y el número de datos que pueden ser procesados simultáneamente.

El cromatógrafo de gases ha sido diseñado para el manejo de operaciones de rutina y en la salida de grandes volúmenes de funciones en donde la computadora está en uso constante.

La salida del detector del cromatógrafo de gases es una señal análoga continua, en la cual los cambios de magnitud pueden ser cuantitativamente relacionados con la elución de los componentes.

La adquisición de datos en la computadora puede ser a través de la magnitud de muestra de esta señal periódica y convertirla en una forma de entrada aceptable, de tal manera que pueda ser trabajada hasta la reducción requerida de datos. En la computadora, se efectúa la conversión analógica-digital (ADC).

Los cálculos finales son simples manipulaciones de los datos reducidos de una manera específica, para producir la información analítica deseada.

Los picos pueden ser identificados por tiempo absoluto, por índices de Kovats, ó por tiempos relativos de retención, usando tiempos de referencia interno y externo. El usuario puede elegir usar factores de respuesta y entonces proceder a calcular cuantitativamente cada compuesto ó por normalización de área ó por relación de área usando un estándar interno.

Está previsto que los datos ADC (conversión analógica-digital) puedan ser procesados repetidamente por un programa de integración en tiempo real usando cualquier combinación de parámetros de la integración de picos y los resultados correspondientes serán impresos en un reporte.

La identificación de los picos mediante la computadora son realizados por la comparación de valores del tiempo de retención de los picos con aquellos componentes conocidos.

Los valores de tiempo son tiempos de retención relativos y las amplitudes obtenidas de la señal del detector están en milivolts.

El número de la identificación del componente es una referencia de una lista maestra de nombres. El nombre aparecerá opuesto al pico apropiado en el reporte de la computadora.

La elaboración del criterio y la identificación son necesarios no sólo para generar los nombres de los componentes en el reporte final sino también el enlace del propio factor de respuesta para los cálculos finales.

Al final, las identificaciones basadas en los datos de retención relativos de los picos entre sí y sus intensidades relativas, son calculados con precisión por una computadora y no pueden ser considerados como inequívocos en una prueba cualitativa.

Todos los sistemas de cromatografía de datos ofrecen muchas maneras de integrar picos cromatográficos.

En el análisis PIONA (Parafinas, Isoparafinas, Olefinas, Naftenos y Aromáticos) de las gasolinas, por la cantidad de constituyentes, es necesario contar con una herramienta como la computadora para realizar la identificación y los cálculos de concentración de cada componente.

Antes de iniciar el análisis se recomienda que el cromatografo tenga ciertas condiciones necesarias para su óptima operación, además de contar con que el septum no esté perforado, la jeringa no esté estrellada y el suministro de gases sea el adecuado.

2.- CONDICIONES DE OPERACIÓN

A continuación se enlistan las condiciones de operación cromatográficas para realizar este análisis:

Columna: Metil silicón de 50 metros x 0.2 mm d.i., 0.5µm de espesor de película.

Gas de arrastre: Helio

Flujo de gas de arrastre: 1 ml/min.

Gas auxiliar: Nitrógeno 30 ml/min.

Relación de Split: 1:100

Detector: FID (Flame Ionization Detector)

Flujo de Hidrógeno: Optimo para la máxima sensibilidad de la flama.

Flujo Aire: Optimo para la máxima sensibilidad de la flama.

Temperatura del inyector: 250 °C.

Temperatura del detector: 300 °C.

Programación de la temperatura de la columna:

Temperatura inicial : 0 °C
Tiempo inicial : 15 min.

Rampa 1

Velocidad de programación 1.5 °C/min
Temperatura final 35 °C
Tiempo final 0 min.

Rampa 2

Velocidad de programación 3.0 °C/min
Temperatura final 70 °C
Tiempo final 0 min.

Rampa 3

Velocidad de programación 1.5 °C/min
Temperatura final 130 °C
Tiempo final 32 min.

Rampa 4

Velocidad de programación Balística
Temperatura final 250 °C
Tiempo final 35 min.

El proceso para encontrar y medir los picos se enlista a continuación:

- a) Aceptar los datos
- b) Preparar los datos para la integración
- c) Buscar los datos preparados para los picos
- d) Medir los picos
- e) Construir la línea base cromatográfica
- f) Corregir la medida de los picos en la línea base
- g) Guardar datos
- h) Calcular la suma total
- i) Relacionar el tiempo de retención de la base de datos con los del análisis
- j) Identificar los picos
- k) Normalizar las áreas
- l) Cuantificar los datos obtenidos
- m) Imprimir resultados

3.- ORDEN DE ELUCIÓN

El orden de elución de los componentes se refiere a la forma progresiva de la salida de los compuestos que contiene la muestra a analizar.

No. Registro	Compuesto	No. Registro	Compuesto
1	Metano	120	Isobutilciclopentano
2	Etano	121	Olefinas C ₉
3	Propileno	122	Nafteno C ₉
4	Propano	123	Nonano normal
5	Isobutano	124	Olefina C ₁₀
6	Buteno-1+Isobutileno	125	t-1-Etil-3-Metilciclohexano
7	13-Butadieno	126	1-Metil-1-Etilciclohexano
8	Butano normal	127	Isopropilbenceno
9	Transbuteno-2	128	Parafina C ₁₀
10	22-Dimetilpropano	129	Secbutilciclopentano
11	Cisbuteno-2	130	Isopropilciclohexano
12	12-Butadieno	131	22-Dimetiloctano
13	3-Metilbuteno-1	132	44-Dimetiloctano
14	Isopentano	133	Parafina C ₁₀
15	14-Pentadieno	134	35-Dimetiloctano D/L
16	Buteno-2	135	N-Propilciclohexano
17	Penteno-1	136	Nafteno C ₉
18	Dimetilacetileno	137	N-Butilciclopentano
19	2-Metilbuteno-1	138	26-Dimetiloctano
20	Pentano normal	139	N-Propilbenceno
21	Isopreno	140	33-Dimetiloctano
22	Transpenteno	141	13-Dimetil-2-Etilciclohexano
23	Pentino-1	142	Meta-etiltolueno
24	Cispenteno	143	Para-Etiltolueno
25	2-Metilbuteno-2	144	135-Trimetilbenceno
26	t-13-Pentadieno	145	5-Metilnonano
27	c-13-Pentadieno	146	4-Etiloctano
28	22-Dimetilbutano	147	4-Metilnonano
29	Ciclopenteno	148	Orto-Etiltolueno
30	23-Pentadieno	149	3-Etiloctano
31	Ciclopentano	150	3-Metilnonano
32	23-Dimetilbutano	151	t-1-Metil-4-Isopropilciclohexano
33	2-Metilpentano	152	Parafina C ₁₁
34	3-Metilpentano	153	124-Trimetilbenceno
35	Olefinas C ₆	154	Terbutilciclohexano
36	Hexano normal	155	Isobutilciclohexano

37	22-Dimetilpentano	156	Nafteno C ₁₀
38	Metilciclopentano	157	c-1-Metil-4-Isopropilciclohexano
39	24-Dimetilpentano	158	1-Etil-23-Dimetilciclohexano
40	223-Trimetilbutano	159	Isobutilbenceno
41	Benceno	160	Decano normal
42	33-Dimetipentano	161	Nafteno C ₁₀
43	Ciclohexano	162	Parafina C ₁₁
44	2-Metilhexano	163	123-Trimetilbenceno
45	23-Dimetilpentano	164	Parafina C ₁₁
46	11-Dimetilciclopentano	165	1-Metil-3-Isopropilbenceno
47	3-Metilhexano	166	1-Metil-4-Isopropilbenceno
48	c-13-Dimetilciclopentano	167	Parafina C ₁₁
49	t-13-Dimetilciclopentano	168	Parafina C ₁₁
50	3-Etilpentano	169	Secbutilciclohexano
51	t-12-Dimetilciclopentano	170	1-Metil-2-Isopropilbenceno
52	224-Trimetilpentano	171	Parafina C ₁₁
53	Olefinas C ₇	172	Nafteno C ₁₀
54	Heptano normal	173	Nafteno C ₁₀
55	Metilciclohexano	174	13-Dietilbenceno
56	22-Dimetilhexano	175	1-Metil-3-Propilbenceno
57	Etilciclopentano	176	1-Metil-4-Propilbenceno
58	25-Dimetilhexano	177	N-Butilbenceno
59	24-Dimetilhexano	178	13-Dimetil-5-Etilbenceno
60	t-c-124-Trimetilciclopentano	179	12-Dietilbenceno
61	33-Dimetilhexano	180	1-Metil-2-Propilbenceno
62	t-c-123-Trimetilciclopentano	181	Parafina C ₁₁
63	234-Trimetilpentano	182	4-Metildecano
64	Tolueno	183	14-Dimetil-2-Etilbenceno
65	c-t-124-Trimetilciclopentano	184	13-Dimetil-4-Etilbenceno
66	23-Dimetilheptano	185	3-Metildecano
67	2-Metil-3-Etilpentano	186	12-Dimetil-4-Etilbenceno
68	2-Metilheptano	187	1-Metil-3-Terbutilbenceno
69	4-Metilheptano	188	Nafteno C ₁₀
70	34-Dimetilhexano	189	1-Metil-4-Terbutilbenceno
71	3-Metilheptano	190	Aromático C ₁₁
72	c-13-Dimetilciclohexano	191	13-Dimetil-2-Etilbenceno
73	t-14-Dimetilciclohexano	192	Aromático C ₁₁
74	2244-Tetrametilpentano	193	Parafina C ₁₂
75	t-1-Etil-3-Metilciclopentano	194	12-Dimetil-3-Etilbenceno
76	c-1-Etil-3-Metilciclopentano	195	Undecano normal
77	t-1-Etil-2-Metilciclopentano	196	Olefinas C ₁₁
78	t-12-Dimetilciclohexano	197	1245-Tetrametilbenceno
79	c-c-123-Trimetilciclopentano	198	1235-Tetrametilbenceno
80	Olefinas C ₈	199	Aromático C ₁₁
81	Octano normal	200	Parafina C ₁₂

82	Nafteno C ₈	201	Parafina C ₁₂
83	244-Trimetilhexano	202	Parafina C ₁₂
84	Nafteno C ₈	203	Aromático C ₁₁
85	Isopropilciclopentano	204	Aromático C ₁₁
86	2-Metil-4-Etilhexano	205	Parafina C ₁₂
87	235-Trimetilhexano	206	Aromático C ₁₁
88	c-1-Etil-2-Metilciclopentano	207	Aromático C ₁₁
89	22-Dimetilheptano	208	Parafina C ₁₂
90	22-Dimetil-3-Etilpentano	209	Aromático C ₁₁
91	c-12-Dimetilciclohexano	210	1234-Tetrametilbenceno
92	44-Dimetilheptano	211	Pentilbenceno
93	N-Propilciclopentano	212	t-1-Metil-2-(4-Metilpentil) Ciclopentano
94	26-Dimetilheptano	213	Parafina C ₁₂
95	113-Trimetilciclohexano	214	Aromático C ₁₁
96	35-Dimetilheptano	215	Aromático C ₁₁
97	233-Trimetilhexano	216	13-Dimetil-5-Terbutilbenceno
98	33-Dimetilhexano	217	Parafina C ₁₂
99	3-Metil-3-Etilhexano	218	Aromático C ₁₁
100	Etilbenceno	219	Parafina C ₁₂
101	t-t-124-Trimetilciclohexano	220	Aromático C ₁₁
102	234-Trimetilhexano	221	Parafina C ₁₂
103	Meta-Xileno	222	Aromático C ₁₁
104	Para-Xileno	223	Parafina C ₁₂
105	34-Dimetilheptano D/L	224	Olefina C ₁₂
106	Nafteno C ₉	225	Olefina C ₁₃
107	23-Dimetil-3-Etilheptano	226	Olefina C ₁₃
108	4-Metiloctano	227	135-Trietilbenceno
109	2-Metiloctano	228	1-Etil-4-Terbutilbenceno
110	Desconocido	229	124-Trietilbenceno
111	3-Etilheptano	230	Olefina C ₁₃
112	3-Metiloctano	231	Hexilbenceno
113	t-c-124-Trimetilciclohexano	232	Dodecano normal
114	Orto-Xileno	233	Tridecano normal
115	c-c-124-Trimetilciclohexano	234	Tetradecano normal
116	1-Metil-2-Propilciclopentano	235	Pesados
117	c-1-Etil-3-Metilciclohexano	236	No identificados
118	t-1-Etil-4-Metilciclohexano	237	MTBE (Metil Ter-Butil Eter)
119	Nafteno C ₉	238	TAME (Ter Amil Metil Eter)

Para el análisis cualitativo y cuantitativo de los componentes de la gasolina, se ha elaborado el siguiente programa para manejar la información que genera el cromatógrafo de gases, siendo esta información resultante básica en la realización de este trabajo.

CAPITULO III. DESARROLLO DEL PROGRAMA DE COMPUTO PARA EL ANALISIS PIONA.

1.- INTRODUCCION

Precisamente este capítulo consiste en el desarrollo del programa para el análisis cualitativo y cuantitativo de hidrocarburos de la gasolina y fracciones del petróleo que contengan compuestos desde Pentano hasta Tetradecano (C_5 a C_{14}) utilizando un cromatógrafo de gases, de la siguiente manera: los componentes individuales son separados mediante una columna capilar de alta resolución, detectados mediante un detector de ionización de flama cuya señal pasa a una computadora con dicho programa. Este programa identificará y cuantificará cada uno de los compuestos individuales y además los agrupa en Parafinas totales, Isoparafinas, Olefinas, Naftenos y Aromáticos (PIONA), así como también calculará el RON (Research Octane Number) y otras propiedades físicas de la gasolina.

Todos los componentes que eluyen de la columna son identificados usando índices de retención y ecuaciones polinomiales para cada uno de los picos, los cuales, saldrán con el nombre del compuesto en el cromatograma.

El programa calcula la concentración de cada uno de los componentes, el % de parafinas, % isoparafinas, % naftenos, % olefinas y % aromáticos. Todos los porcentajes son reportados en % peso y % volumen.

Este programa está diseñado para el análisis detallado de hidrocarburos en naftas, alquilados, reformados y gasolinas terminadas, así como otras corrientes de hidrocarburos.

Los componentes individuales son reportados secuencialmente ó por grupo. Los grupos son reportados por número de carbonos.

El número de Octano (RON) en las gasolinas de reformación se determina a partir de su composición cromatográfica. Relacionando los números de octano de cada componente con su concentración, mediante la formación de 31 grupos que se enumeran por orden de elución, los cuales se multiplican por un factor ya conocido y por su concentración. Los valores del RON teóricos de cada componente se tomaron del API* (American Petroleum Institute).

El programa básicamente realiza tanto la identificación como la cuantificación de cada uno de los componentes que tenga la muestra entre carbono 5 y carbono 14.

* API. *Technical Data Book*, 1971.

2.- DESARROLLO DEL PROGRAMA

La forma de como se desarrolló el programa de identificación y cuantificación de los componentes de una gasolina se llevó a cabo de la siguiente manera:

La información obtenida en los cromatogramas está expresada en términos de tiempo de retención y áreas de cada pico. Las áreas de los picos se obtienen por una aproximación de la Regla Trapezoidal, donde tenemos:

$$A = h/2 (Y_0 + Y_n) + h(Y_1+Y_2+\dots+Y_{n-1})$$

donde:

A = área de pico

Y_0 a Y_n = son los valores de cada entrada

h = es la distancia entre cada entrada

Para nuestros propósitos, el área actual del pico es tomada como la suma de todos los valores (Y) para el pico y la distancia entre ellos; esto asume que el valor ($Y_0 + Y_n$) es pequeño comparado con ($Y_1+Y_2+\dots+Y_{n-1}$).

Como una nota adicional, cuando se aplica esta regla se producen dos tipos de errores que se comenten con frecuencia: Uno de ellos, el *error por truncado*, se debe a la aproximación de la gráfica de la función mediante segmentos de líneas rectas. El otro tipo, el *error por redondeo*, es inevitable, debido a que los números que tienen una cantidad finita de cifras se usan para aproximar números reales. A medida que el valor de n (número de subintervalos) crece, la exactitud de la aproximación del área de la región mediante áreas de trapecoides, mejora; de este modo, el error por truncado se reduce. Sin embargo, cuando n crece, se hacen necesarias más operaciones de cálculo; en consecuencia, hay un incremento de error por redondeo.

El error por redondeo se ve afectado por la forma en que se realizan las operaciones de cálculo, bien en una calculadora manual o en una computadora, o si no se utilizan dispositivos mecánicos de ninguna clase.

La identificación de cada uno de los compuestos que salen del cromatógrafo, se basa principalmente en sus tiempos de retención. Para ello el programa lo ejecuta por medio de una tabla de datos, que está formada por el nombre del componente y el rango en tiempo en donde es posible que ese componente eluya. El reporte de dicha identificación tendrá el nombre del componente, su respectiva área, el % de área, así como el total de área resultante.

Para la obtención del área total, se realiza la sumatoria de todas las áreas resultantes de los componentes que salieron de la muestra. Para el resultado de el % de área se hicieron las operaciones para la normalización a 100%, la cual se obtiene dividiendo cada área entre el total de ellas y el resultado se multiplica por 100.

Una vez reportadas las áreas de cada uno de los componentes individuales de la gasolina, se procede a la parte de la cuantificación.

Mediante instrucciones sencillas se obtienen las operaciones fundamentales necesarias para llevar a cabo el cálculo de áreas y la normalización de estas, manipulando los resultados para la obtención del % peso y el % volumen.

El programa incluye una tabla de datos, la cual contiene (en orden de elución) el nombre del compuesto, el grupo de familia al cual pertenece y su respectiva densidad. Estos datos son esenciales para la obtención de los resultados en Parafinas, Isoparafinas, Olefinas, Naftenos y Aromáticos.

El programa cuenta con un menú principal, las opciones se pueden acceder mediante un número, el cual la seleccionarlo, nos muestra la opción que hayamos elegido.

Los resultados, los valores de las áreas, así como los archivos que se han guardado se pueden consultar en la pantalla.

3.- PROGRAMA PROPUESTO

En las siguientes páginas presentamos el programa completo para la identificación de los compuestos y el cálculo de los componentes de PIONA (Parafinas, Isoparafinas, Olefinas, Naftenos y Aromáticos) en una gasolina.

REM REALIZADO POR JPR, 1998

REM PROGRAMA DE IDENTIFICACION DE COMPONENTES DE LA GASOLINA

REM PARA EL ANALISIS PIONA

DIM A(280),B(280),C(280),CAL(280),W(280)

PEAKS=280

SLICES=280

DIM RT(280),COMP\$(280),RANGO(280),AREA(280)

REM LECTURA DE COMPUESTOS

FOR I=1 TO PEAKS

 READ COMP\$(I)

 READ RANGO(I)

NEXT I

Cls

GoSub Marco

Menu:

 Color 10:Locate 4,31:PRINT " " MENU PRINCIPAL " ":Color 11

 LOCATE 7,15:PRINT "CALCULOS PARA CORRIDA NUEVA (1) "

 LOCATE 8,15:PRINT "VALORES DE COMPUESTOS POR PANTALLA (2) "

 LOCATE 9,15:PRINT "CALCULOS DE CORRIDA ANTERIOR (3) "

 LOCATE 10,15:PRINT "RESULTADOS EN PANTALLA (4) "

 LOCATE 11,15:PRINT "IMPRIMIR RESULTADOS (5) "

 LOCATE 12,15:PRINT "GUARDAR LOS RESULTADOS EN ARCHIVO (6) "

 LOCATE 13,15:PRINT "REVISION DE ARCHIVOS (7) "

 LOCATE 14,15:PRINT "SALIDA (8) "

 LOCATE 16,30:INPUT "TECLEE EL NUMERO: ";T

 While (T < 1) Or (T > 8)

 Beep 3

 Locate 20,31:Input "Opción es de 1..8 :";T

 If T = 8 Then Fin

 Wend

 Beep 1

 ON T GoSub Inicio,VerComp,CorAnt,Pantalla,ImpRep,Archi,Rev,Fin

Return

Marco:

 Color 10

 For i=2 To 23

 Locate i,1:Print CHR\$(186)

 Locate i,79:Print CHR\$(186)

 Next i

 For j=2 To 79

 Locate 1,j:Print CHR\$(205)

 Locate 23,j:Print CHR\$(205)

 Next j

 Locate 23,1 :Print CHR\$(200)

 Locate 1,1:Print CHR\$(201)

 Locate 23,79:Print CHR\$(188)

 Locate 1,79:Print CHR\$(187)

 Color 15

Return

Limpia:

 For I= 2 TO 22

 Locate I,2:Print SPC(75)

 Next I

Return

Inicio:

```

Gosub Limpia
X=7:Y=5:W=7:Z=25
  REM Datos provenientes de la Muestra
  LOCATE 2,28:PRINT "DATOS PARA NUEVA CORRIDA"
  LOCATE 6,2:INPUT "NOMBRE DE LA MUESTRA: ";M$
  LOCATE 7,2:INPUT "REGISTRO(s): ";R$
  LOCATE 8,2:INPUT "FECHA: ";F$
  LOCATE 9,2:INPUT "ANALIZO: ";Y$
  LOCATE 12,20:INPUT "DESEA CORREGIR ALGUN DATO [S/N] ";S$
  IF Ucase$(S$)="S" THEN
    GoSub Inicio
  ELSE
    FOR j=6 TO 22
      LOCATE j,2:PRINT SPC(70)
    NEXT j
    FOR I=1 TO PEAKS
      LOCATE X,Y:PRINT RANGO(I)
      LOCATE W,Z:INPUT " ";COMP$(I)
      X=X+1:W=W+1
      IF X=22 AND W=22 THEN
        X=7:Y=5:W=7:Z=25
        FOR j=6 TO 22
          LOCATE j,3:PRINT SPC(75)
        NEXT j
      END IF
    NEXT I
  GoSub Calcula
Return

REM Ident:
GoSub Limpia
REM Condiciones de inicio para las muestras
Oven Temp Initial Value 150
Oven Temp Initial Time 0
Oven Temp Prgm Rate 5
Oven Temp Final Value 250
Oven Temp Final Time 5
Inj I Temp 100
Det 1 Temp 275
Flow 32
Signal A
ATTN 2**5
Start

Input "Cuantas muestras vas a analizar",N
Print "Coloque el diskette en la unidad A"
Print "Cargue la muestra empezando en la posición 1"
Input "Cuando esté listo, presione EXIT para comenzar el análisis ",A
For I=1 To N
  Start Auto Seq I,I
  REM Examinar la corrida para los primeros 2 minutos
  LET C=0
  For I=1 To Peaks
    IF RT(I)>2 Then
      LET C=C+1
  Next I
  REM C=Peaks en los primeros 2 minutos
  IF C<10 Then
    REM Corrida de análisis a baja temperatura
    Oven Temp Initial Value 100

```



```

Oven Temp Initial Time 2
Get Calib "Lowtemp" Device #6
Start Auto Seq I, I
REM "Resetea" para análisis normal y procede
Oven Temp Initial Value 150
Oven Temp Initial Time 0
Get Calib "Normtemp" Device #6
Next I
End

```

```

REM Cálculo del Area Total bajo la curva Cromatográfica
REM X=Variable independiente de la función
REM Y(X)=Función que se va a integrar
REM A=Límite inferior del intervalo de integración
REM B=Límite superior del intervalo de integración
REM N=Número de subintervalos en que se divide el intervalo de integración
REM H=Amplitud constante de los subintervalos.
REM AREA(1)=Valor de la integral al considerar N subintervalos
REM AREA(2)=Valor de la integral al considerar el doble de subintervalos
REM RICH=Valor de la integral después de hacer una extrapolación de
REM Richardson con los dos valores anteriores.

```

```

REM Programa para Integrar Numericamente
FOR I=1 TO SLICES
Y(X)=EXP(-X**2/2)/SQRT(2*3.141596)
INPUT A, B, N
IF N<1 THEN END
N=2*N
IF I<=2 THEN
H=(B-A)/N
X=A
AREA(I)=0
M=N-1
ELSE
AREA1=Y(X)
AREA2=AREA(I)+Y(X)
RICH=(4*(AREA2-AREA1))/3
PRINT RICH
END IF
WHILE J<M
X=X+H
AREA(I)=AREA(I)+Y(X)
WEND
AREA(I)=0.5*H*(Y(A)+Y(B)+2*AREA(I))
PRINT A, B, N, AREA(I)
NEXT I
END

```

```

REM Picos numerados secuencialmente en orden de tiempo de retención desde 1 a n-picos
LET C=0
FOR I=1 TO Peaks
IF CAL(I)=0 THEN
LET C=C+1
END IF
NEXT I
PRINT C; "Picos calibrados encontrados:"; Peaks

```

```

REM Programa para la Eficiencia de la Columna
REM Rechazo de picos antes de 0.5 minutos como picos solventes
REM R=Tiempo de Retención, A=Area, W=Ancho

```

```

LET R=0
LET W=0
LET A=0
FOR I=1 TO Peaks
  IF RT(I)<0.5 THEN
    IF AREA(I)<A THEN
      LET A=AREA(I)
      LET W=W(I)
      LET R=RT(I)
    END IF
  END IF
NEXT I
LET E=5.545*(R/W)**2
PRINT R,E

```

Calcula:

```

GoSub Limpia
REM Cálculo del Area de cada Pico
Locate 5,25:Print " Calculando las Areas de los Picos de PIONA "
S=0:T=0
Locate 12,20:Print "      Calculando Area      "
FOR I=1 TO PEAKS
  S=S+A(I)
NEXT I
REM NORMALIZACION DE AREAS
Locate 12,20:Print "      Normalización de Areas      "
FOR I=1 TO PEAKS
  B(I)=(A(I)/S)*(100)
  T=T+B(I)
NEXT I
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

```

CorAnt:

```

GoSub Limpia
Error2% = fnArchivo%
If Error2% < 0 Then
  Input #1, Ms$,Fs$,Rs$
  FOR X=1 TO PEAKS
    INPUT #1,A(X)
  NEXT X
  CLOSE #1
  Ms$=Ms$:Fs$=Fs$:Rs$=Rs$
  GoSub Calcula
Else
  Locate 10,10:Print "El Archivo ";O$;" No Existe"
  Locate 11,10:Print "Error No. ";Error2%
  Delay 3
End If
def fnArchivo%
  local NumError%
  NumError% = -1
On Error Goto NoArchivo
Locate 3,20: Print " Apertura de Archivos de Corridas Anteriores "
Locate 6,10:Input "NOMBRE DEL ARCHIVO :";O$
Open "A:"+O$ For Input As #1
On Error Goto 0
fnArchivo% = NumError%

```

```

Exit def
NoArchivo:
    NumError% = err
    resume next
end def
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

```

```

ImpRep:
GoSub Limpia
Error1% = fnImpresora%
If Error1% < 0 Then
    LOCATE 3,10:PRINT "IMPRESION DE REPORTES"
    LOCATE 10,5:INPUT " ¿DESEAS IMPRESION DEL REPORTE? [S/N]: ";T$
    If UCase$(T$) = "S" Then
        GoSub ImpElem
    Else
        Locate 10,5:INPUT "¿DESEAS IMPRIMIRLO DE NUEVO? [S/N]:";P$
        IF UCase$(P$) = "S" Then ImpElem
    END IF
Else
    Locate 10,10:Print "Impresora Apagada o Papel Agotado"
    Locate 11,10:Print "Error No. ";Error1%
    Delay 3
End If

```

```

def fnImpresora%
    local NumError%
    NumError% = -1
    On Error Goto ImpresoraApagada
        LPrint CHR$(7);
    On Error Goto 0
    fnImpresora% = NumError%
Exit def
ImpresoraApagada:
    NumError% = err
    resume next

```

```

end def
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

```

```

ImpElem:
LOCATE 3,10:Print "Reporte de Identificación de Componentes de PIONA"
LPRINT
LPRINT
Xc=1:yc=1:LPRINT TAB(32);"HOJA: ";yc:LPRINT
LPRINT TAB(5);"MUESTRA: ";M$,TAB(40);"CR-";R$,TAB(53);"FECHA: ";F$
LPRINT:LPRINT
LPRINT TAB(7)"TIEMPO",TAB(19)"AREA",TAB(30)"% AREA",TAB(45)"NOMBRE DEL COMPONENTE"
LPRINT TAB(8)"RET."
LPRINT TAB(7)"-----",TAB(19)"-----",TAB(30)"-----",TAB(45)"-----"
LPRINT
FOR I=1 TO PEAKS
    IF B(I) <> 0 THEN
        LPRINT TAB(7)USING "###.##";RANGO(I)
        LPRINT TAB(17)USING "#####.##";A(I)
        LPRINT TAB(30)USING "##.###";B(I)
        LPRINT TAB(45)COMP$(I)
    
```

```

xc=xc+1
END IF
IF xc = 51 THEN
  LPRINT CHR$(12)
  LPRINT
  yc=yc+1
  LPRINT TAB(32);"HOJA: ";yc:LPRINT
  LPRINT
  LPRINT TAB(5)"MUESTRA: ";M$,TAB(40);"CR-";R$,TAB(53);"FECHA: ";F$
  LPRINT:LPRINT
  Xc=1
END IF
NEXT I
LPRINT:LPRINT
LPRINT TAB(10) "AREA TOTAL: ",TAB(22)USING"#####.###";S
LPRINT TAB(22) "-----"
LPRINT CHR$(12)
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

Pantalla:
GoSub Limpia
X=5:Y=15:
LOCATE 3,15:PRINT "TPO. RET.", "NOMBRE", "AREA", "%AREA"
FOR I=1 TO PEAKS
  IF B(I) <> 0 THEN
    LOCATE X,Y:PRINT RANGO(I),COMP$(I),USING "#####.###"      ";A(I),B(I)
    X=X+1:W=W+1
    IF X=22 THEN X=5:Y=15:Locate 22,3:Input "<Enter>";a:For j=5 To 22
      Locate j,3:Print SPC(70)
    Next j
  End IF
  IF I = PEAKS THEN
    LOCATE 21,15:PRINT "AREA TOTAL: "
    LOCATE 21,25:PRINT USING"#####.###"      ";S
    LOCATE 22,3:Input "<Enter>";a
  End IF
NEXT I
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

Archi:
GoSub Limpia
LOCATE 3,15:PRINT " CREACION DE ARCHIVO PARA ALMACENAR COMPUESTOS "
LOCATE 10,10:INPUT "NOMBRE PARA LA CREACION DEL ARCHIVO";O$
Ms$=M$:Fs$=F$:Rs$=R$
OPEN "A:"+O$ FOR OUTPUT AS #1
  Write #1, Ms$,Fs$,Rs$
  FOR I=1 TO PEAKS
    Write #1,A(I)
  NEXT I
CLOSE #1
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

VerComp:
GoSub Limpia

```

```

X=5:Y=3
LOCATE 2,30:PRINT "Valores de Compuestos"
LOCATE 3,5:PRINT "TIEMPO";Spc(6);"COMPUESTO";Spc(35);"AREA"
FOR I=1 TO PEAKS
  LOCATE X,Y:PRINT USING "    ###.##          &";RANGO(I),COMP$(I)
  LOCATE X,Y+60:PRINT USING "#####.### ";A(I)
  X=X+1:W=W+1
  IF X=21 THEN X=5:Y=3:Locate 21,3:Input "<Enter>";a:For j=5 To 22
    Locate j,3:Print $PC(70):Next j
  IF I = PEAKS Then Locate 22,3:Input "<Enter>";a
NEXT I
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

```

```

REM *****TABLA DE COMPONENTES Y SUS TIEMPOS DE RETENCION*****
COMP$(1)"METANO" " ,RANGO(1)>=3.00 AND RANGO(1)<=3.18
COMP$(2)"ETANO" " ,RANGO(2)>=3.40 AND RANGO(2)<=3.74
COMP$(3)"PROPILENO" " ,RANGO(3)>=3.86 AND RANGO(3)<=3.99
COMP$(4)"PROPANO" " ,RANGO(4)>=4.08 AND RANGO(4)<=4.45
COMP$(5)"ISOBUTANO" " ,RANGO(5)>=4.88 AND RANGO(5)<=4.93
COMP$(6)"BUTENO-1+ISOBUTILENO" " ,RANGO(6)>=5.41 AND RANGO(6)<=5.49
COMP$(7)"13-BUTADIENO" " ,RANGO(7)>=5.52 AND RANGO(7)<=5.55
COMP$(8)"BUTANO NORMAL" " ,RANGO(8)>=5.63 AND RANGO(8)<=5.71
COMP$(9)"TRANSBUTENO-2" " ,RANGO(9)>=5.94 AND RANGO(9)<=6.03
COMP$(10)"22-DIMETILPROPANO" " ,RANGO(10)>=6.04 AND RANGO(10)<=6.11
COMP$(11)"CISBUTENO-2" " ,RANGO(11)>=6.40 AND RANGO(11)<=6.51
COMP$(12)"12-BUTADIENO" " ,RANGO(12)>=6.67 AND RANGO(12)<=7.23
COMP$(13)"3-METILBUTENO-1" " ,RANGO(13)>=7.75 AND RANGO(13)<=7.92
COMP$(14)"ISOPENTANO" " ,RANGO(14)>=8.76 AND RANGO(14)<=8.99
COMP$(15)"14-PENTADIENO" " ,RANGO(15)>=9.02 AND RANGO(15)<=9.08
COMP$(16)"BUTENO-2" " ,RANGO(16)>=9.10 AND RANGO(16)<=9.14
COMP$(17)"NO IDENTIFICADO" " ,RANGO(17)>=9.15 AND RANGO(17)<=9.36
COMP$(18)"PENTENO-1" " ,RANGO(18)>=9.95 AND RANGO(18)<=10.04
COMP$(19)"DIMETILACETILENO" " ,RANGO(19)>=10.15 AND RANGO(19)<=10.28
COMP$(20)"2-METILBUTENO-1" " ,RANGO(20)>=10.32 AND RANGO(20)<=10.62
COMP$(21)"PENTANO NORMAL" " ,RANGO(21)>=10.67 AND RANGO(21)<=10.99
COMP$(22)"ISOPRENO" " ,RANGO(22)>=11.04 AND RANGO(22)<=11.36
COMP$(23)"TRANSPENTENO" " ,RANGO(23)>=11.42 AND RANGO(23)<=11.78
COMP$(24)"PENTINO-1" " ,RANGO(24)>=11.83 AND RANGO(24)<=12.00
COMP$(25)"CISPENTENO" " ,RANGO(25)>=12.13 AND RANGO(25)<=12.53
COMP$(26)"2-METILBUTENO-2" " ,RANGO(26)>=12.61 AND RANGO(26)<=13.03
COMP$(27)"t-13-PENTADIENO" " ,RANGO(27)>=13.21 AND RANGO(27)<=13.32
COMP$(28)"c-13-PENTADIENO" " ,RANGO(28)>=13.80 AND RANGO(28)<=14.31
COMP$(29)"22-DIMETILBUTANO" " ,RANGO(29)>=14.56 AND RANGO(29)<=14.70
COMP$(30)"CICLOPENTENO" " ,RANGO(30)>=16.17 AND RANGO(30)<=16.79
COMP$(31)"23-PENTADIENO" " ,RANGO(31)>=16.88 AND RANGO(31)<=17.37
COMP$(32)"OLEFINA C6" " ,RANGO(32)>=17.69 AND RANGO(32)<=17.72
COMP$(33)"CICLOPENTANO" " ,RANGO(33)>=18.00 AND RANGO(33)<=18.13
COMP$(34)"23-DIMETILBUTANO" " ,RANGO(34)>=18.58 AND RANGO(34)<=18.67
COMP$(35)"MTBE" " ,RANGO(35)>=18.90 AND RANGO(35)<=19.06
COMP$(36)"2-METILPENTANO" " ,RANGO(36)>=19.38 AND RANGO(36)<=19.45
COMP$(37)"OLEFINA C6" " ,RANGO(37)>=19.65 AND RANGO(37)<=19.74
COMP$(38)"3-METILPENTANO" " ,RANGO(38)>=21.00 AND RANGO(38)<=21.14
COMP$(39)"NO IDENTIFICADO" " ,RANGO(39)>=21.29 AND RANGO(39)<=21.36
COMP$(40)"OLEFINA C6" " ,RANGO(40)>=21.39 AND RANGO(40)<=22.00
COMP$(41)"HEXANO NORMAL" " ,RANGO(41)>=22.94 AND RANGO(41)<=23.38
COMP$(42)"OLEFINA C6" " ,RANGO(42)>=23.67 AND RANGO(42)<=25.01
COMP$(43)"22-DIMETILPENTANO" " ,RANGO(43)>=25.36 AND RANGO(43)<=25.73
COMP$(44)"METILCICLOPENTANO" " ,RANGO(44)>=25.94 AND RANGO(44)<=26.0168

```

COMP\$ (45) "24-DIMETILPENTANO	", RANGO (45) >=26.48 AND RANGO (45) <=26.82
COMP\$ (46) "NO IDENTIFICADO	", RANGO (46) >=26.95 AND RANGO (46) <=27.03
COMP\$ (47) "223-TRIMETILBUTANO	", RANGO (47) >=27.03 AND RANGO (47) <=27.08
COMP\$ (48) "OLEFINA C7	", RANGO (48) >=27.40 AND RANGO (48) <=27.45
COMP\$ (49) "BENCENO	", RANGO (49) >=28.32 AND RANGO (49) <=28.63
COMP\$ (50) "OLEFINA C7	", RANGO (50) >=28.79 AND RANGO (50) <=29.10
COMP\$ (51) "33-DIMETILPENTANO	", RANGO (51) >=29.32 AND RANGO (51) <=29.39
COMP\$ (52) "CICLOHEXANO	", RANGO (52) >=29.51 AND RANGO (52) <=29.58
COMP\$ (53) "OLEFINA C7	", RANGO (53) >=29.75 AND RANGO (53) <=30.97
COMP\$ (54) "2-METILHEXANO	", RANGO (54) >=30.98 AND RANGO (54) <=31.18
COMP\$ (55) "23-DIMETILPENTANO	", RANGO (55) >=31.25 AND RANGO (55) <=31.39
COMP\$ (56) "11-DIMETILCICLOPENTANO	", RANGO (56) >=31.42 AND RANGO (56) <=31.49
COMP\$ (57) "TAME	", RANGO (57) >=31.58 AND RANGO (57) <=31.64
COMP\$ (58) "3-METILHEXANO	", RANGO (58) >=31.86 AND RANGO (58) <=32.13
COMP\$ (59) "c-13-DIMETILCICLOPENTANO	", RANGO (59) >=32.34 AND RANGO (59) <=32.60
COMP\$ (60) "t-13-DIMETILCICLOPENTANO	", RANGO (60) >=32.65 AND RANGO (60) <=32.92
COMP\$ (61) "3-ETILPENTANO	", RANGO (61) >=33.00 AND RANGO (61) <=33.26
COMP\$ (62) "t-12-DIMETILCICLOPENTANO	", RANGO (62) >=33.30 AND RANGO (62) <=33.50
COMP\$ (63) "224-TRIMETILPENTANO	", RANGO (63) >=33.52 AND RANGO (63) <=33.70
COMP\$ (64) "OLEFINAS C7	", RANGO (64) >=33.77 AND RANGO (64) <=34.89
COMP\$ (65) "HEPTANO NORMAL	", RANGO (65) >=35.02 AND RANGO (65) <=35.07
COMP\$ (66) "OLEFINA C7	", RANGO (66) >=35.16 AND RANGO (66) <=36.60
COMP\$ (67) "METILCICLOHEXANO	", RANGO (67) >=36.79 AND RANGO (67) <=37.01
COMP\$ (68) "22-DIMETILHEXANO	", RANGO (68) >=37.29 AND RANGO (68) <=37.50
COMP\$ (69) "OLEFINA C8	", RANGO (69) >=37.60 AND RANGO (69) <=37.66
COMP\$ (70) "NO IDENTIFICADO	", RANGO (70) >=37.80 AND RANGO (70) <=37.95
COMP\$ (71) "ETILCICLOPENTANO	", RANGO (71) >=38.32 AND RANGO (71) <=38.53
COMP\$ (72) "25-DIMETILHEXANO	", RANGO (72) >=38.77 AND RANGO (72) <=38.96
COMP\$ (73) "24-DIMETILHEXANO	", RANGO (73) >=38.98 AND RANGO (73) <=39.17
COMP\$ (74) "t-c-124-TRIMETILCICLOPENTANO"	", RANGO (74) >=39.48 AND RANGO (74) <=39.67
COMP\$ (75) "33-DIMETILHEXANO	", RANGO (75) >=39.70 AND RANGO (75) <=39.89
COMP\$ (76) "t-c-123-TRIMETILCICLOPENTANO"	", RANGO (76) >=40.39 AND RANGO (76) <=40.58
COMP\$ (77) "234-TRIMETILPENTANO	", RANGO (77) >=40.88 AND RANGO (77) <=41.08
COMP\$ (78) "TOLUENO	", RANGO (78) >=41.37 AND RANGO (78) <=41.57
COMP\$ (79) "c-t-124-TRIMETILCICLOPENTANO"	", RANGO (79) >=41.70 AND RANGO (79) <=41.76
COMP\$ (80) "23-DIMETILHEPTANO	", RANGO (80) >=42.24 AND RANGO (80) <=42.40
COMP\$ (81) "OLEFINA C8	", RANGO (81) >=42.52 AND RANGO (81) <=42.68
COMP\$ (82) "2-METIL-3-ETILPENTANO	", RANGO (82) >=42.70 AND RANGO (82) <=43.00
COMP\$ (83) "2-METILHEPTANO	", RANGO (83) >=43.03 AND RANGO (83) <=43.18
COMP\$ (84) "4-METILHEPTANO	", RANGO (84) >=43.22 AND RANGO (84) <=43.37
COMP\$ (85) "34-DIMETILHEXANO	", RANGO (85) >=43.40 AND RANGO (85) <=43.48
COMP\$ (86) "NO IDENTIFICADO	", RANGO (86) >=43.51 AND RANGO (86) <=43.84
COMP\$ (87) "3-METILHEPTANO	", RANGO (87) >=43.94 AND RANGO (87) <=44.10
COMP\$ (88) "c-13-DIMETILCICLOHEXANO	", RANGO (88) >=44.15 AND RANGO (88) <=44.20
COMP\$ (89) "t-14-DIMETILCICLOHEXANO	", RANGO (89) >=44.25 AND RANGO (89) <=44.30
COMP\$ (90) "OLEFINA C8	", RANGO (90) >=44.95 AND RANGO (90) <=45.15
COMP\$ (91) "2244-TETRAMETILPENTANO	", RANGO (91) >=45.30 AND RANGO (91) <=45.45
COMP\$ (92) "t-1-ETIL-3-METILCICLOPENTANO"	", RANGO (92) >=45.48 AND RANGO (92) <=45.53
COMP\$ (93) "c-1-ETIL-3-METILCICLOPENTANO"	", RANGO (93) >=45.60 AND RANGO (93) <=45.74
COMP\$ (94) "t-1-ETIL-2-METILCICLOPENTANO"	", RANGO (94) >=45.78 AND RANGO (94) <=45.92
COMP\$ (95) "OLEFINA C8	", RANGO (95) >=46.07 AND RANGO (95) <=46.20
COMP\$ (96) "t-12-DIMETILCICLOHEXANO	", RANGO (96) >=46.30 AND RANGO (96) <=46.35
COMP\$ (97) "OLEFINA C8	", RANGO (97) >=46.60 AND RANGO (97) <=46.72
COMP\$ (98) "c-c-123-TRIMETILCICLOPENTANO"	", RANGO (98) >=46.94 AND RANGO (98) <=47.06
COMP\$ (99) "OLEFINAS C8	", RANGO (99) >=47.11 AND RANGO (99) <=47.22
COMP\$ (100) "OCTANO NORMAL	", RANGO (100) >=47.28 AND RANGO (100) <=47.40
COMP\$ (101) "NAFTENO C8	", RANGO (101) >=47.77 AND RANGO (101) <=47.88
COMP\$ (102) "244-TRIMETILHEXANO	", RANGO (102) >=47.94 AND RANGO (102) <=48.07
COMP\$ (103) "NAFTENO C8	", RANGO (103) >=48.10 AND RANGO (103) <=48.14
COMP\$ (104) "ISOPROPILCICLOPENTANO	", RANGO (104) >=48.16 AND RANGO (104) <=48.91

COMP\$ (105) "2-METIL-4-ETILHEXANO", RANGO (105) >=48.80 AND RANGO (105) <=48.85
 COMP\$ (106) "235-TRIMETILHEXANO", RANGO (106) >=48.93 AND RANGO (106) <=49.19
 COMP\$ (107) "c-1-ETIL-2-METILCICLOPENTANO", RANGO (107) >=49.27 AND RANGO (107) <=49.38
 COMP\$ (108) "22-DIMETILHEPTANO", RANGO (108) >=49.42 AND RANGO (108) <=49.54
 COMP\$ (109) "NO IDENTIFICADO", RANGO (109) >=49.80 AND RANGO (109) <=49.85
 COMP\$ (110) "22-DIMETIL-3-ETILPENTANO", RANGO (110) >=50.00 AND RANGO (110) <=50.18
 COMP\$ (111) "c-12-DIMETILCICLOHEXANO", RANGO (111) >=50.24 AND RANGO (111) <=50.35
 COMP\$ (112) "44-DIMETILHEPTANO", RANGO (112) >=50.42 AND RANGO (112) <=50.66
 COMP\$ (113) "N-PROPILCICLOPENTANO", RANGO (113) >=50.79 AND RANGO (113) <=50.90
 COMP\$ (114) "NO IDENTIFICADO", RANGO (114) >=50.98 AND RANGO (114) <=51.04
 COMP\$ (115) "26-DIMETILHEPTANO", RANGO (115) >=51.10 AND RANGO (115) <=51.14
 COMP\$ (116) "OLEFINA C9", RANGO (116) >=51.20 AND RANGO (116) <=51.35
 COMP\$ (117) "113-TRIMETILCICLOHEXANO", RANGO (117) >=51.45 AND RANGO (117) <=51.55
 COMP\$ (118) "35-DIMETILHEPTANO", RANGO (118) >=51.81 AND RANGO (118) <=51.90
 COMP\$ (119) "233-TRIMETILHEXANO", RANGO (119) >=51.95 AND RANGO (119) <=52.03
 COMP\$ (120) "33-DIMETILHEPTANO", RANGO (120) >=52.07 AND RANGO (120) <=52.12
 COMP\$ (121) "3-METIL-3-ETILHEXANO", RANGO (121) >=52.19 AND RANGO (121) <=52.23
 COMP\$ (122) "OLEFINA C9", RANGO (122) >=52.29 AND RANGO (122) <=52.48
 COMP\$ (123) "ETILBENCENO", RANGO (123) >=52.96 AND RANGO (123) <=53.05
 COMP\$ (124) "t-t-124-TRIMETILCICLOHEXANO", RANGO (124) >=53.13 AND RANGO (124) <=53.20
 COMP\$ (125) "234-TRIMETILHEXANO", RANGO (125) >=53.28 AND RANGO (125) <=53.30
 COMP\$ (126) "OLEFINA C9", RANGO (126) >=53.49 AND RANGO (126) <=53.73
 COMP\$ (127) "META-XILENO", RANGO (127) >=54.00 AND RANGO (127) <=54.10
 COMP\$ (128) "PARA-XILENO", RANGO (128) >=54.15 AND RANGO (128) <=54.19
 COMP\$ (129) "34-DIMETILHEPTANO D/L", RANGO (129) >=54.30 AND RANGO (129) <=54.38
 COMP\$ (130) "NAFTENO C9", RANGO (130) >=54.40 AND RANGO (130) <=54.46
 COMP\$ (131) "NO IDENTIFICADO", RANGO (131) >=54.55 AND RANGO (131) <=54.56
 COMP\$ (132) "23-DIMETIL-3-ETILPENTANO", RANGO (132) >=54.62 AND RANGO (132) <=54.69
 COMP\$ (133) "4-METILOCTANO", RANGO (133) >=54.95 AND RANGO (133) <=55.02
 COMP\$ (134) "2-METILOCTANO", RANGO (134) >=55.06 AND RANGO (134) <=55.13
 COMP\$ (135) "NO IDENTIFICADO", RANGO (135) >=55.40 AND RANGO (135) <=55.42
 COMP\$ (136) "3-ETILHEPTANO", RANGO (136) >=55.60 AND RANGO (136) <=55.67
 COMP\$ (137) "3-METILOCTANO", RANGO (137) >=55.74 AND RANGO (137) <=55.80
 COMP\$ (138) "NO IDENTIFICADO", RANGO (138) >=56.09 AND RANGO (138) <=56.16
 COMP\$ (139) "t-c-124-TRIMETILCICLOHEXANO", RANGO (139) >=56.20 AND RANGO (139) <=56.24
 COMP\$ (140) "ORTO-XILENO", RANGO (140) >=56.31 AND RANGO (140) <=56.38
 COMP\$ (141) "c-c-124-TRIMETILCICLOHEXANO", RANGO (141) >=56.54 AND RANGO (141) <=56.59
 COMP\$ (142) "1-METIL-2-PROPILCICLOPENTANO", RANGO (142) >=56.85 AND RANGO (142) <=56.91
 COMP\$ (143) "c-1-ETIL-3-METILCICLOHEXANO", RANGO (143) >=56.97 AND RANGO (143) <=57.04
 COMP\$ (144) "t-1-ETIL-4-METILCICLOHEXANO", RANGO (144) >=57.19 AND RANGO (144) <=57.25
 COMP\$ (145) "NO IDENTIFICADO", RANGO (145) >=57.38 AND RANGO (145) <=57.64
 COMP\$ (146) "NAFTENO C9", RANGO (146) >=57.71 AND RANGO (146) <=57.78
 COMP\$ (147) "ISOBUTILCICLOPENTANO", RANGO (147) >=57.85 AND RANGO (147) <=57.90
 COMP\$ (148) "OLEFINAS C9", RANGO (148) >=58.01 AND RANGO (148) <=58.04
 COMP\$ (149) "NAFTENO C9", RANGO (149) >=58.18 AND RANGO (149) <=58.23
 COMP\$ (150) "NONANO NORMAL", RANGO (150) >=58.45 AND RANGO (150) <=58.50
 COMP\$ (151) "OLEFINA C10", RANGO (151) >=58.63 AND RANGO (151) <=58.70
 COMP\$ (152) "t-1-ETIL-3-METILCICLOHEXANO", RANGO (152) >=58.80 AND RANGO (152) <=58.86
 COMP\$ (153) "1-METIL-1-ETILCICLOHEXANO", RANGO (153) >=59.05 AND RANGO (153) <=59.11
 COMP\$ (154) "ISOPROPILBENCENO", RANGO (154) >=59.46 AND RANGO (154) <=59.51
 COMP\$ (155) "PARAFINA C10", RANGO (155) >=59.70 AND RANGO (155) <=59.72
 COMP\$ (156) "SECBUTILCICLOPENTANO", RANGO (156) >=59.81 AND RANGO (156) <=59.84
 COMP\$ (157) "ISOPROPILCICLOHEXANO", RANGO (157) >=60.02 AND RANGO (157) <=60.07
 COMP\$ (158) "22-DIMETILOCTANO", RANGO (158) >=60.19 AND RANGO (158) <=60.24
 COMP\$ (159) "44-DIMETILOCTANO", RANGO (159) >=60.46 AND RANGO (159) <=60.59
 COMP\$ (160) "NO IDENTIFICADO", RANGO (160) >=60.72 AND RANGO (160) <=60.77
 COMP\$ (161) "PARAFINA C10", RANGO (161) >=60.83 AND RANGO (161) <=60.87
 COMP\$ (162) "35-DIMETILOCTANO D/L", RANGO (162) >=60.90 AND RANGO (162) <=60.94
 COMP\$ (163) "N-PROPILCICLOHEXANO", RANGO (163) >=61.14 AND RANGO (163) <=61.18
 COMP\$ (164) "NAFTENO C9", RANGO (164) >=61.26 AND RANGO (164) <=61.03

COMP\$ (165) "N-BUTILCICLOPENTANO", RANGO (165) >=61.60 AND RANGO (165) <=61.64
 COMP\$ (166) "26-DIMETILOCTANO", RANGO (166) >=61.75 AND RANGO (166) <=61.90
 COMP\$ (167) "N-PROPILBENCENO", RANGO (167) >=62.07 AND RANGO (167) <=62.12
 COMP\$ (168) "33-DIMETILOCTANO", RANGO (168) >=64.24 AND RANGO (168) <=62.29
 COMP\$ (168) "13-DIMETIL-2-ETILCICLOHEXANO", RANGO (169) >=62.42 AND RANGO (169) <=62.51
 COMP\$ (170) "META-ETILTOLUENO", RANGO (170) >=62.76 AND RANGO (170) <=62.80
 COMP\$ (171) "PARA-ETILTOLUENO", RANGO (171) >=62.91 AND RANGO (171) <=62.96
 COMP\$ (172) "135-TRIMETILBENCENO", RANGO (172) >=63.38 AND RANGO (172) <=63.42
 COMP\$ (173) "NO IDENTIFICADO", RANGO (173) >=63.73 AND RANGO (173) <=63.77
 COMP\$ (174) "5-METILNONANO", RANGO (174) >=63.87 AND RANGO (174) <=63.90
 COMP\$ (175) "4-ETILOCTANO", RANGO (175) >=63.98 AND RANGO (175) <=64.02
 COMP\$ (176) "4-METILNONANO", RANGO (176) >=64.06 AND RANGO (176) <=64.11
 COMP\$ (177) "ORTO-ETILTOLUENO", RANGO (177) >=64.15 AND RANGO (177) <=64.20
 COMP\$ (178) "3-ETILOCTANO", RANGO (178) >=64.35 AND RANGO (178) <=64.40
 COMP\$ (179) "3-METILNONANO", RANGO (179) >=64.60 AND RANGO (179) <=64.64
 COMP\$ (180) "t-1-METIL-4-ISOPROPILCICLOHEXANO", RANGO (180) >=64.77 AND RANGO (180) <=64.77
 COMP\$ (181) "NO IDENTIFICADO", RANGO (181) >=64.92 AND RANGO (181) <=65.21
 COMP\$ (182) "PARAFINA C11", RANGO (182) >=65.33 AND RANGO (182) <=65.38
 COMP\$ (183) "124-TRIMETILBENCENO", RANGO (183) >=65.41 AND RANGO (183) <=65.46
 COMP\$ (184) "TERBUTILCICLOHEXANO", RANGO (184) >=65.55 AND RANGO (184) <=65.62
 COMP\$ (185) "ISOBUTILCICLOHEXANO", RANGO (185) >=65.68 AND RANGO (185) <=65.72
 COMP\$ (186) "NAFTENO C10", RANGO (186) >=66.00 AND RANGO (186) <=66.03
 COMP\$ (187) "PARAFINA C10", RANGO (187) >=66.33 AND RANGO (187) <=66.37
 COMP\$ (188) "c-1-METIL-4-ISOPROPILCICLOHEXANO", RANGO (188) >=66.40 AND RANGO (188) <=66.40
 COMP\$ (189) "1-ETIL-23-DIMETILCICLOHEXANO", RANGO (189) >=66.47 AND RANGO (189) <=66.50
 COMP\$ (190) "ISOBUTILBENCENO", RANGO (190) >=66.54 AND RANGO (190) <=66.58
 COMP\$ (191) "DECANO NORMAL", RANGO (191) >=66.74 AND RANGO (191) <=66.77
 COMP\$ (192) "PARAFINA C10", RANGO (192) >=66.97 AND RANGO (192) <=67.01
 COMP\$ (193) "NAFTENO C10", RANGO (193) >=67.06 AND RANGO (193) <=67.14
 COMP\$ (194) "PARAFINA C11", RANGO (194) >=67.24 AND RANGO (194) <=67.29
 COMP\$ (195) "123-TRIMETILBENCENO", RANGO (195) >=67.44 AND RANGO (195) <=67.48
 COMP\$ (196) "PARAFINA C11", RANGO (196) >=67.74 AND RANGO (196) <=67.77
 COMP\$ (197) "NO IDENTIFICADO", RANGO (197) >=67.86 AND RANGO (197) <=67.90
 COMP\$ (198) "1-METIL-3-ISOPROPILBENCENO", RANGO (198) >=67.97 AND RANGO (198) <=68.01
 COMP\$ (199) "1-METIL-4-ISOPROPILBENCENO", RANGO (199) >=68.03 AND RANGO (199) <=68.10
 COMP\$ (200) "NO IDENTIFICADO", RANGO (200) >=68.14 AND RANGO (200) <=68.18
 COMP\$ (201) "PARAFINA C11", RANGO (201) >=68.27 AND RANGO (201) <=68.30
 COMP\$ (202) "PARAFINA C11", RANGO (202) >=68.39 AND RANGO (202) <=68.45
 COMP\$ (203) "SECCBUTILCICLOHEXANO", RANGO (203) >=68.50 AND RANGO (203) <=68.54
 COMP\$ (204) "1-METIL-2-ISOPROPILBENCENO", RANGO (204) >=68.77 AND RANGO (204) <=68.80
 COMP\$ (205) "NO IDENTIFICADO", RANGO (205) >=69.00 AND RANGO (205) <=69.05
 COMP\$ (206) "PARAFINA C11", RANGO (206) >=69.16 AND RANGO (206) <=69.20
 COMP\$ (207) "NAFTENO C10", RANGO (207) >=69.28 AND RANGO (207) <=69.32
 COMP\$ (208) "NAFTENO C10", RANGO (208) >=69.35 AND RANGO (208) <=69.40
 COMP\$ (209) "13-DIETILBENCENO", RANGO (209) >=69.43 AND RANGO (209) <=69.46
 COMP\$ (210) "1-METIL-3PROPILBENCENO", RANGO (210) >=69.62 AND RANGO (210) <=69.66
 COMP\$ (211) "1-METIL-4PROPILBENCENO", RANGO (211) >=69.68 AND RANGO (211) <=69.72
 COMP\$ (212) "NO IDENTIFICADO", RANGO (212) >=69.75 AND RANGO (212) <=69.78
 COMP\$ (213) "N-BUTILBENCENO", RANGO (213) >=69.89 AND RANGO (213) <=69.93
 COMP\$ (214) "13-DIMETIL-5-ETILBENCENO", RANGO (214) >=70.08 AND RANGO (214) <=70.11
 COMP\$ (215) "12-DIETILBENCENO", RANGO (215) >=70.27 AND RANGO (215) <=70.30
 COMP\$ (216) "NO IDENTIFICADO", RANGO (216) >=70.50 AND RANGO (216) <=70.52
 COMP\$ (217) "1-METIL-2-PROPILBENCENO", RANGO (217) >=70.70 AND RANGO (217) <=70.75
 COMP\$ (218) "NO IDENTIFICADO", RANGO (218) >=70.85 AND RANGO (218) <=70.88
 COMP\$ (219) "PARAFINA C11", RANGO (219) >=70.97 AND RANGO (219) <=71.01
 COMP\$ (220) "NO IDENTIFICADO", RANGO (220) >=71.10 AND RANGO (220) <=71.13
 COMP\$ (221) "4-METILDECANO", RANGO (221) >=71.31 AND RANGO (221) <=71.35
 COMP\$ (222) "14-DIMETIL-2-ETILBENCENO", RANGO (222) >=71.43 AND RANGO (222) <=71.47
 COMP\$ (223) "13-DIMETIL-4-ETILBENCENO", RANGO (223) >=71.56 AND RANGO (223) <=71.60
 COMP\$ (224) "3-METILDECANO", RANGO (224) >=71.68 AND RANGO (224) <=71.72

COMP\$ (225) "12-DIMETIL-4-ETILBENCENO", RANGO (225) >=71.79 AND RANGO (225) <=71.82
 COMP\$ (226) "1-METIL-3-TERBUTILBENCENO", RANGO (226) >=71.84 AND RANGO (226) <=71.88
 COMP\$ (227) "NAFTENO C10", RANGO (227) >=71.93 AND RANGO (227) <=71.97
 COMP\$ (228) "1-METIL-4-TERBUTILBENCENO", RANGO (228) >=72.02 AND RANGO (228) <=72.06
 COMP\$ (229) "AROMATICO C11", RANGO (229) >=72.24 AND RANGO (229) <=72.31
 COMP\$ (230) "13-DIMETIL-2-ETILBENCENO", RANGO (230) >=72.49 AND RANGO (230) <=72.53
 COMP\$ (231) "NO IDENTIFICADO", RANGO (231) >=72.90 AND RANGO (231) <=72.93
 COMP\$ (232) "AROMATICO C11", RANGO (232) >=73.13 AND RANGO (232) <=73.17
 COMP\$ (233) "NO IDENTIFICADO", RANGO (233) >=73.23 AND RANGO (233) <=73.25
 COMP\$ (234) "PARAFINA C12", RANGO (234) >=73.41 AND RANGO (234) <=73.45
 COMP\$ (235) "12-DIMETIL-3-ETILBENCENO", RANGO (235) >=73.55 AND RANGO (235) <=73.59
 COMP\$ (236) "UNDECANO NORMAL", RANGO (236) >=73.93 AND RANGO (236) <=73.96
 COMP\$ (237) "NO IDENTIFICADO", RANGO (237) >=74.05 AND RANGO (237) <=74.17
 COMP\$ (238) "OLEFINAS C11", RANGO (238) >=74.39 AND RANGO (238) <=74.44
 COMP\$ (239) "1245-TETRAMETILBENCENO", RANGO (239) >=74.53 AND RANGO (239) <=74.57
 COMP\$ (240) "1235-TETRAMETILBENCENO", RANGO (240) >=74.81 AND RANGO (240) <=74.85
 COMP\$ (241) "NO IDENTIFICADO", RANGO (241) >=75.22 AND RANGO (241) <=75.96
 COMP\$ (242) "AROMATICO C11", RANGO (242) >=76.13 AND RANGO (242) <=76.18
 COMP\$ (243) "PARAFINA C12", RANGO (243) >=76.26 AND RANGO (243) <=76.31
 COMP\$ (244) "PARAFINA C12", RANGO (244) >=76.34 AND RANGO (244) <=76.40
 COMP\$ (245) "PARAFINA C12", RANGO (245) >=76.43 AND RANGO (245) <=76.49
 COMP\$ (246) "AROMATICO C11", RANGO (246) >=76.55 AND RANGO (246) <=76.59
 COMP\$ (247) "AROMATICO C11", RANGO (247) >=76.67 AND RANGO (247) <=76.72
 COMP\$ (248) "PARAFINA C12", RANGO (248) >=76.80 AND RANGO (248) <=76.84
 COMP\$ (249) "AROMATICO C11", RANGO (249) >=76.94 AND RANGO (249) <=76.99
 COMP\$ (250) "AROMATICO C11", RANGO (250) >=77.16 AND RANGO (250) <=77.21
 COMP\$ (251) "PARAFINA C12", RANGO (251) >=77.24 AND RANGO (251) <=77.28
 COMP\$ (252) "AROMATICO C11", RANGO (252) >=77.31 AND RANGO (252) <=77.36
 COMP\$ (253) "1234-TETRAMETILBENCENO", RANGO (253) >=77.40 AND RANGO (253) <=77.46
 COMP\$ (254) "PENTILBENCENO", RANGO (254) >=77.51 AND RANGO (254) <=77.54
 COMP\$ (255) "t-1-METIL-2(4-METILPENTIL)CyC5", RANGO (255) >=77.68 AND RANGO (255) <=77.75
 COMP\$ (256) "PARAFINA C12", RANGO (256) >=77.94 AND RANGO (256) <=78.03
 COMP\$ (257) "AROMATICO C11", RANGO (257) >=78.33 AND RANGO (257) <=78.38
 COMP\$ (258) "AROMATICO C11", RANGO (258) >=78.57 AND RANGO (258) <=78.69
 COMP\$ (259) "PESADOS", RANGO (259) >=78.74 AND RANGO (259) <=79.17
 COMP\$ (260) "13-DIMETIL-5-TERBUTILBENCENO", RANGO (260) >=79.56 AND RANGO (260) <=79.60
 COMP\$ (261) "PARAFINA C12", RANGO (261) >=79.96 AND RANGO (261) <=80.02
 COMP\$ (262) "AROMATICO C11", RANGO (262) >=80.20 AND RANGO (262) <=80.22
 COMP\$ (263) "PARAFINA C12", RANGO (263) >=80.42 AND RANGO (263) <=80.47
 COMP\$ (264) "PESADOS", RANGO (264) >=80.56 AND RANGO (264) <=80.59
 COMP\$ (265) "AROMATICO C11", RANGO (265) >=80.83 AND RANGO (265) <=80.90
 COMP\$ (266) "PARAFINA C12", RANGO (266) >=81.02 AND RANGO (266) <=81.07
 COMP\$ (267) "PESADOS", RANGO (267) >=81.41 AND RANGO (267) <=81.47
 COMP\$ (268) "AROMATICO C11", RANGO (268) >=81.96 AND RANGO (268) <=82.01
 COMP\$ (269) "PARAFINA C12", RANGO (269) >=82.15 AND RANGO (269) <=82.20
 COMP\$ (270) "OLEFINA C12", RANGO (270) >=82.24 AND RANGO (270) <=82.27
 COMP\$ (271) "OLEFINA C13", RANGO (271) >=82.30 AND RANGO (271) <=82.33
 COMP\$ (272) "OLEFINA C13", RANGO (272) >=82.49 AND RANGO (272) <=82.52
 COMP\$ (273) "135-TRIETILBENCENO", RANGO (273) >=82.60 AND RANGO (273) <=82.68
 COMP\$ (274) "1-ETIL-4-TERBUTILBENCENO", RANGO (274) >=82.75 AND RANGO (274) <=82.79
 COMP\$ (275) "124-TRIETILBENCENO", RANGO (275) >=82.84 AND RANGO (275) <=82.88
 COMP\$ (276) "OLEFINA C13", RANGO (276) >=82.93 AND RANGO (276) <=83.00
 COMP\$ (277) "HEXILBENCENO", RANGO (277) >=83.05 AND RANGO (277) <=83.11
 COMP\$ (278) "DODECANO NORMAL", RANGO (278) >=83.20 AND RANGO (278) <=83.65
 COMP\$ (279) "TRIDECANO NORMAL", RANGO (279) >=92.00 AND RANGO (279) <=92.60
 COMP\$ (280) "TETRADECANO NORMAL", RANGO (280) >=102.00 AND RANGO (280) <=102.20

REM ***** Fin lectura de los Componentes de Piona *****

REM * DENSIDAD DEL NC12 TOMADA DEL HANDBOOK HODGEMAN (EDICION 40 1958-1959) 72

```
Fin:  
Cls:END
```

```
Rev:  
  CLS:FILES"A:  
  INPUT "REGRESAR AL MENU PRINCIPAL <ENTER> :";X  
  Cls  
  GoSub Marco  
  GoSub Menu  
Return
```

```

REM JPR, 1998
REM PROGRAMA DE CALCULO PARA LA CUANTIFICACION DE LOS COMPONENTES
REM DE LA GASOLINA POR EL ANALISIS PIONA
REM INCLUYE MUESTRAS QUE CONTENGAN MTBE Y/O TAME
DIM B(238),C(238),V(238)
CA=238
DIM N$(49),S(49),Z(49),A$(238),B$(238),D(238),A(238)
REM LECTURA DE GRUPOS DE COMPUESTOS
FOR I=1 TO 49
  READ N$(I)
NEXT I
PRINT
FOR I=1 TO CA
  READ A$(I)
  READ B$(I)
  READ D(I)
NEXT I

Cls
GoSub Marco
Menu:
  Color 10:Locate 4,30:PRINT " " MENU PRINCIPAL " ":Color 11
  LOCATE 6,15:PRINT "CALCULOS PARA CORRIDA NUEVA" (1) "
  LOCATE 7,15:Print "VALORES DE AREAS POR PANTALLA" (2) "
  LOCATE 8,15:Print "CORRECCION DE AREAS" (3) "
  LOCATE 9,15:PRINT "CALCULOS DE CORRIDA ANTERIOR" (4) "
  LOCATE 10,15:PRINT "RESULTADOS EN PANTALLA" (5) "
  LOCATE 11,15:PRINT "IMPRIMIR RESULTADOS" (6) "
  LOCATE 12,15:PRINT "CALCULAR RON" (7) "
  LOCATE 13,15:PRINT "GUARDAR LAS AREAS EN ARCHIVO" (8) "
  LOCATE 14,15:PRINT "REVISION DE ARCHIVOS" (9) "
  LOCATE 15,15:PRINT "SALIDA" (10) "
  LOCATE 19,30:INPUT "TECLEE EL NUMERO: ";T
  While (T < 1) Or (T > 10)
    Beep 3
    Locate 20,30:Input "Opción es de 1..10 :";T
    If T = 10 Then Fin
  Wend
  Beep 1
  ON T GoSub Captura,VerArea,Correc,CorAnt,Pantalla,PintImp,Ron,Archi,DirF
  ON T GoSub Fin
Return

Marco:
  Color 10
  For i=2 To 23
    Locate i,1:Print CHR$(186)
    Locate i,79:Print CHR$(186)
  Next i
  For j=2 To 79
    Locate 1,j:Print CHR$(205)
    Locate 23,j:Print CHR$(205)
  Next j
  Locate 23,1 :Print CHR$(200)
  Locate 1,1:Print CHR$(201)
  Locate 23,79:Print CHR$(188)
  Locate 1,79:Print CHR$(187)
  Color 15
Return

```

```

Limpia:
  For I= 2 TO 22
    Locate i,2:Print SPC(75)
  Next I
Return

```

Captura:

Gosub Limpia

X=7:Y=5:W=7:Z=45

```

LOCATE 2,28:PRINT "CORRIDA PARA MUESTRAS NUEVAS"
LOCATE 4,2:INPUT "DESCRIPCION DE LA MUESTRA: ";M$
LOCATE 5,2:INPUT "DAME EL % PESO DE MTBE = ";MT
LOCATE 5,40:INPUT "DAME EL % VOLUMEN DE MTBE = ";MTV
LOCATE 6,2:INPUT "DAME EL % PESO DE TAME = ";TA
LOCATE 6,40:INPUT "DAME EL % VOLUMEN DE TAME = ";TAM
LOCATE 7,2:INPUT "REGISTRO(s): ";R$
LOCATE 8,2:INPUT "PROCEDENCIA: ";L$
LOCATE 9,2:INPUT "FECHA: ";F$
LOCATE 10,2:INPUT "PROYECTO: ";G$
LOCATE 11,2:INPUT "FECHA DE RECEPCION: ";W$
LOCATE 12,2:INPUT "SOLICITANTE: ";K$
LOCATE 13,2:INPUT "OBSERVACIONES: ";X$
LOCATE 14,2:INPUT "ANALIZO: ";Y$
Locate 16,20:INPUT "DESEA CORREGIR ALGUN DATO [S/N] "; S$
IF Ucase$(S$)="S" Then

```

Gosub Captura

else

For j=6 To 22

Locate j,2:Print SPC(70):Next j

For I=1 To CA

Locate X,Y:Print A\$(I):

Locate W,Z:Input " ";A(I)

X=X+1:W=W+1

IF X=22 AND W=22 Then

X=7:Y=5:W=7:Z=45

For j=6 To 22

Locate j,3:Print SPC(75)

Next j

End IF

NEXT I

Gosub Calcula

Return

Calcula:

GoSub Limpia

Locate 5,25:Print " Calculando las Areas de PIONA "

S=0:T=0:SUM=0:SUMA=0

Locate 12,20:Print " Calculando Area "

FOR I=1 TO CA

S=S+A(I)

NEXT I

REM NORMALIZACION DE AREAS

Locate 12,20:Print " Normalización de Areas "

FOR I=1 TO CA

B(I)=(A(I)/S)*(100-(MT+TA))

T=T+B(I)

NEXT I

Locate 12,20:Print " %Peso Dividido por Densidad "

```

FOR I=1 TO CA
  C(I)=B(I)/D(I)
  SUM=SUM+C(I)
NEXT I
Locate 12,20:Print " Normalización del Volumen "
FOR I=1 TO CA
  V(I)=(C(I)/SUM)*(100-(MTV+TAM))
  SUMA=SUMA+V(I)
NEXT I
Locate 12,20:Print " Clasificación por Familias "
FOR Y=1 TO 49
  P=0:V=0
  FOR I=1 TO CA
    IF B$(I)=N$(Y) THEN
      P=P+B(I)
      V=V+V(I)
    End IF
  NEXT I
  S(Y)=P
  Z(Y)=V
NEXT Y
Locate 12,20:Print " Haciendo Sumas "
LET F1=S(1)+S(2)+S(3)+S(4)+S(5)+S(6)+S(7)+S(8)+S(9)+S(10)+S(11)+S(12)+S(13)+S(14)
LET F2=S(15)+S(16)+S(17)+S(18)+S(19)+S(20)+S(21)+S(22)+S(23)
LET F3=S(24)+S(25)+S(26)+S(27)+S(28)+S(29)+S(30)+S(31)+S(32)+S(33)
LET F4=S(34)+S(35)+S(36)+S(37)+S(38)+S(39)+S(40)
LET F5=S(41)+S(42)+S(43)+S(44)+S(45)+S(46)+S(47)
LET F6=S(48)
LET F7=S(49)
LET G1=Z(1)+Z(2)+Z(3)+Z(4)+Z(5)+Z(6)+Z(7)+Z(8)+Z(9)+Z(10)+Z(11)+Z(12)+Z(13)+Z(14)
LET G2=Z(15)+Z(16)+Z(17)+Z(18)+Z(19)+Z(20)+Z(21)+Z(22)+Z(23)
LET G3=Z(24)+Z(25)+Z(26)+Z(27)+Z(28)+Z(29)+Z(30)+Z(31)+Z(32)+Z(33)
LET G4=Z(34)+Z(35)+Z(36)+Z(37)+Z(38)+Z(39)+Z(40)
LET G5=Z(41)+Z(42)+Z(43)+Z(44)+Z(45)+Z(46)+Z(47)
LET G6=Z(48)
LET G7=Z(49)
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return
End If
CorAnt:
GoSub Limpia
Error2% = fnArchivo%
If Error2% < 0 Then
  Input #1, Ms$, Fs$, Gs$, Rs$, Ls$, Ws$, Ks$
  Input #1, Mts, Mtb, Tas, Tav
  FOR X=1 TO CA
    INPUT #1, A(X)
  NEXT X
  CLOSE #1
  Mt = Mts :Mtv = Mtb
  Ta = Tas :Tam = Tav
  M$=Ms$:F$=Fs$:G$=Gs$:R$=Rs$:L$=Ls$:K$=Ks$:W$=Ws$
  GoSub Calcula
Else
  Locate 10,10:Print "El Archivo ";O$;" No Existe"
  Locate 11,10:Print "Error No. ";Error2%
  Delay 3
End If

```

```

def fnArchivo%
  local NumError%
  NumError% = -1
On Error Goto NoArchivo
Locate 3,20: Print " Apertura de Archivos de Corridas Anteriores "
Locate 6,10:Input "NOMBRE DEL ARCHIVO :";O$
Open "A:"+O$ For Input As #1
On Error Goto 0
fnArchivo% = NumError%
Exit def
NoArchivo:
  NumError% = err
  resume next
end def
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

Correc:
  GoSub Limpia
  Locate 5,25:Print "CORRECCION DE AREAS"
  Locate 7,5:Print "NUMERO DE REGISTRO Y AREA CORRECTA: "
  Locate 8,5:Input L,AR
  A(L)=AR
  Locate 10,20:Input "FUERON TODOS LOS VALORES A CORREGIR [S/N]";S$
  IF UCASE$(S$) = "S" THEN
    GoSub Calcula
  Else
    GoSub Correc
  End If
Return

PintImp:
GoSub Limpia
Error1% = fnImpresora%
If Error1% < 0 Then
  LOCATE 3,10:PRINT "Impresión de Reportes de PIONA"
  LET TF=F1+F2+F3+F4+F5+F6+F7+MT+TA
  LET TG=G1+G2+G3+G4+G5+G6+G7+MTV+TAM
  LPRINT
  LPRINT TAB(24);"GERENCIA LABORATORIO CENTRAL"
  LPRINT TAB(24);"DIVISION DE ESTRUCTURAS QUIMICAS"
  LPRINT TAB(26);"LABORATORIO DE CROMATOGRAFIA"
  LPRINT TAB(29);"INFORME DE RESULTADOS"
  LPRINT
  LPRINT TAB(15);"REGISTRO(S): CR-";R$, "FECHA: ";F$
  LPRINT TAB(15);"FECHA DE RECEPCION: ";W$
  LPRINT TAB(15);"PROCEDENCIA: ";L$
  LPRINT TAB(15);"SOLICITANTE: ";K$
  LPRINT TAB(15);"PROYECTO: DOD-";G$
  LPRINT TAB(15);"DESCRIPCION DE LA MUESTRA: ";M$
  LPRINT TAB(15);"METODO EMPLEADO: IMP-QA-305"
  LPRINT
  LPRINT TAB(26);"ANALISIS POR COMPONENTE PIONA"
  LPRINT TAB(20);"-----"
  LPRINT TAB(20);" % PESO % VOL. "
  LPRINT TAB(20);"-----"
  LPRINT TAB(23);"TOTAL P",USING"###.## " ;F1,G1
  LPRINT TAB(23);"TOTAL I",USING"###.## " ;F2,G2
  LPRINT TAB(23);"TOTAL O",USING"###.## " ;F3,G3

```

```

LPRINT TAB(23); "TOTAL N", USING"###.## " ; F4, G4
LPRINT TAB(23); "TOTAL A", USING"###.## " ; F5, G5
LPRINT TAB(23); "PESADOS", USING"###.## " ; F6, G6
LPRINT TAB(23); "NO IDEN", USING"###.## " ; F7, G7
IF MT <> 0 THEN LPRINT TAB(23); "MTBE " , USING"###.## " ; MT, MTV
IF TA <> 0 THEN LPRINT TAB(23); "TAME " , USING"###.## " ; TA, TAM
LPRINT TAB(20); "-----"
LPRINT TAB(23); "TOTAL " , USING"###.## " ; TF, TG
LPRINT TAB(20); "-----"
LPRINT TAB(8); "PARAFINAS ISOPARAFINAS OLEFINAS NAFTENOS AROMATICOS"
LPRINT TAB(6); "%PESO %VOL. %PESO %VOL. %PESO %VOL. %PESO %VOL. %PESO %VOL."
LPRINT TAB(6); "-----|-----|-----|-----|-----"
LPRINT TAB(3); "C1 "USING"###.## " ; S(1), Z(1)
LPRINT TAB(3); "C2 "USING"###.## " ; S(2), Z(2)
LPRINT TAB(3); "C3 "USING"###.## " ; S(3), Z(3), C3, C3, S(24), Z(24)
LPRINT TAB(3); "C4 "USING"###.## " ; S(4), Z(4), S(15), Z(15), S(25), Z(25)
LPRINT TAB(3); "C5 "USING"###.## " ; S(5), Z(5), S(16), Z(16), S(26), Z(26), S(34), Z(34)
LPRINT TAB(3); "C6 "USING"###.## " ; S(6), Z(6), S(17), Z(17), S(27), Z(27), S(35), Z(35)
LPRINT TAB(62); USING"###.## " ; S(41), Z(41)
LPRINT TAB(3); "C7 "USING"###.## " ; S(7), Z(7), S(18), Z(18), S(28), Z(28), S(36), Z(36)
LPRINT TAB(62); USING"###.## " ; S(42), Z(42)
LPRINT TAB(3); "C8 "USING"###.## " ; S(8), Z(8), S(19), Z(19), S(29), Z(29), S(37), Z(37)
LPRINT TAB(62); USING"###.## " ; S(43), Z(43)
LPRINT TAB(3); "C9 "USING"###.## " ; S(9), Z(9), S(20), Z(20), S(30), Z(30), S(38), Z(38)
LPRINT TAB(62); USING"###.## " ; S(44), Z(44)
LPRINT TAB(3); "C10"USING"###.## " ; S(10), Z(10), S(21), Z(21), S(31), Z(31), S(39), Z(39)
LPRINT TAB(62); USING"###.## " ; S(45), Z(45)
LPRINT TAB(3); "C11"USING"###.## " ; S(11), Z(11), S(22), Z(22), S(32), Z(32), C3, C3
LPRINT TAB(62); USING"###.## " ; S(46), Z(46)
LPRINT TAB(3); "C12"USING"###.## " ; S(12), Z(12), S(23), Z(23), S(33), Z(33), S(40), Z(40)
LPRINT TAB(62); USING"###.## " ; S(47), Z(47)
LPRINT TAB(3); "C13"USING"###.## " ; S(13), Z(13), C3, C3, C3, C3, C3, C3, C3, C3
LPRINT TAB(3); "C14"USING"###.## " ; S(14), Z(14), C3, C3, C3, C3, C3, C3, C3, C3
LPRINT TAB(6); "-----|-----|-----|-----|-----"
LPRINT TAB(3); "TOT="USING"###.## " ; F1, G1, F2, G2, F3, G3, F4, G4, F5, G5
LPRINT TAB(6); "-----"
IF MT <> 0 THEN LPRINT TAB(6) "MTBE ="USING"###.## " ; MT, MTV
IF TA <> 0 THEN LPRINT TAB(6) "TAME ="USING"###.## " ; TA, TAM
LPRINT TAB(6); "PESADOS ="USING"###.## " ; S(48), Z(48)
LPRINT TAB(6); "No. IDENTIFICADOS ="USING"###.## " ; S(49), Z(49)
LPRINT
LPRINT TAB(6); "OBSERVACIONES: EL BENCENO COELUYE CON OTRO COMPONENTE. " ; X$
LPRINT TAB(6); "ANALIZO: " , Y$
LPRINT
LPRINT TAB(10); "-----"
LPRINT TAB(10); " I.Q. ANTONIO BADILLO G. Q. MIGUEL ANGEL FLORES R. "
LPRINT TAB(10); " JEFE DE LABORATORIO JEFE DE DIVISION "
LPRINT " ESTE DOCUMENTO SOLO PUEDE REPRODUCIRSE EN SU TOTALIDAD Y NO PARCIALMENTE
LPRINT CHR$(12)
LOCATE 10,5:INPUT " ¿CONTINUA LA IMPRESION ? [S/N]: " ; T$
If UCase$(T$) = "S" Then
  GoSub ImpElem
Else
  Locate 10,5:INPUT " DESEAS CALCULAR RON [ S/N ] : " ; T$
  If UCase$(T$) = "S" Then
    GoSub Ron
  Else
    Locate 10,5:INPUT " ¿DESEAS IMPRIMIRLO DE NUEVO? [S/N]:" ; P$
    IF UCase$(P$) = "S" Then PintImp
  End If

```

```

End If
Else
Locate 10,10:Print "Impresora Apagada o Papel Agotado"
Locate 11,10:Print "Error No. ";Error!%
Delay 3
End If
def fnImpresora%
local NumError%
NumError% = -1
On Error Goto ImpresoraApagada
LPrint CHR$(7);
On Error Goto 0
fnImpresora% = NumError%
Exit def
ImpresoraApagada:
NumError% = err
resume next
end def
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

Impelem:
LOCATE 3,10:Print "Impresión de Reportes de PIONA"
LPRINT
LPRINT
Xc=1:yc=1:LPrint Tab(32);"Hoja: ";yc:LPrint:LPrint Tab(10);"Muestra: ";M$
LPRINT
LPRINT TAB(2) "NOMBRE",TAB(44) "%PESO",TAB(58) "%VOL. "
LPRINT:LPRINT
FOR I=1 TO 34
IF B(I) <> 0 THEN LPRINT TAB(2)A$(I),TAB(44)USING "###.##" ";B(I),V(I)
xc=xc+1
NEXT I
LOCATE 10,5:INPUT "CONTINUA LA IMPRESION DE HEXANOS [S/N]:";T$
IF UCASE$(T$) = "S" THEN
FOR I=35 TO CA
IF B(I) <> 0 THEN LPRINT TAB(2)A$(I),TAB(44)USING"###.##" ";B(I),V(I)
xc=xc+1
IF xc = 51 THEN
LPRINT CHR$(12)
LPRINT
yc=yc+1
LPRINT TAB(32);"Hoja: ";yc:LPrint:LPrint Tab(10) "Muestra: ";M$
LPRINT
LPRINT TAB(2) "NOMBRE",TAB(44) "%PESO",TAB(58) "%VOL.":LPrint:LPrint
Xc=1
End IF
NEXT I
LPRINT:LPRINT
LPRINT TAB(41) "% EN PESO % VOLUMEN"
LPRINT TAB(41) "-----"
LPRINT TAB(43)USING"###.##" ";TF,TG
LPRINT TAB(41) "-----"
LPRINT CHR$(12)
End If
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

```


Pantalla:

```
GoSub Limpia
TF=0:TG=0
LOCATE 2,35:PRINT " P I O N A "
LOCATE 3,35:PRINT "*****"
LET TF=F1+F2+F3+F4+F5+F6+F7+MT+TA
LET TG=G1+G2+G3+G4+G5+G6+G7+MTV+TAM
LOCATE 8,25:PRINT "-----"
LOCATE 9,25:PRINT "                % PESO                % VOL. "
LOCATE 10,25:PRINT "-----"
LOCATE 11,25:PRINT "TOTAL P",USING "##.###"           ";F1,G1
LOCATE 12,25:PRINT "TOTAL I",USING "##.###"           ";F2,G2
LOCATE 13,25:PRINT "TOTAL O",USING "##.###"           ";F3,G3
LOCATE 14,25:PRINT "TOTAL N",USING "##.###"           ";F4,G4
LOCATE 15,25:PRINT "TOTAL A",USING "##.###"           ";F5,G5
LOCATE 16,25:PRINT "PESADOS",USING "##.###"           ";F6,G6
LOCATE 17,25:PRINT "NO IDEN",USING "##.###"           ";F7,G7
LOCATE 18,25:PRINT "TOTAL MTBE",USING "##.###"         ";MT,MTV
LOCATE 19,25:PRINT "TOTAL TAME",USING "##.###"         ";TA,TAM
LOCATE 20,25:PRINT "-----"
LOCATE 21,25:PRINT "TOTAL ",USING "###.###"           ";TF,TG
LOCATE 22,25:PRINT "-----"
LOCATE 23,3:Input "<Enter>";a:For j=4 To 23:Locate j,3:Print SPC(70):Next j
LOCATE 4,25:PRINT "-----"
LOCATE 5,25:PRINT "                TIPO                %PESO                %VOL. "
LOCATE 6,25:PRINT "-----"
LOCATE 7,25:PRINT "n-C1",USING "##.###"           ";S(1),Z(1)
LOCATE 8,25:PRINT "n-C2",USING "##.###"           ";S(2),Z(2)
LOCATE 9,25:PRINT "n-C3",USING "##.###"           ";S(3),Z(3)
LOCATE 10,25:PRINT "n-C4",USING "##.###"           ";S(4),Z(4)
LOCATE 11,25:PRINT "n-C5",USING "##.###"           ";S(5),Z(5)
LOCATE 12,25:PRINT "n-C6",USING "##.###"           ";S(6),Z(6)
LOCATE 13,25:PRINT "n-C7",USING "##.###"           ";S(7),Z(7)
LOCATE 14,25:PRINT "n-C8",USING "##.###"           ";S(8),Z(8)
LOCATE 15,25:PRINT "n-C9",USING "##.###"           ";S(9),Z(9)
LOCATE 16,25:PRINT "n-C10",USING "##.###"           ";S(10),Z(10)
LOCATE 17,25:PRINT "n-C11",USING "##.###"           ";S(11),Z(11)
LOCATE 18,25:PRINT "n-C12",USING "##.###"           ";S(12),Z(12)
LOCATE 19,25:PRINT "n-C13",USING "##.###"           ";S(13),Z(13)
LOCATE 20,25:PRINT "n-C14",USING "##.###"           ";S(14),Z(14)
LOCATE 21,25:PRINT " ",,"-----","-----"
LOCATE 22,25:PRINT TAB(25);"TOTAL n-C",USING "##.###"           ";F1,G1
LOCATE 23,25:PRINT "-----"
LOCATE 24,3:Input "<Enter>";a:For j=6 To 24:Locate j,3:Print SPC(70):Next j
LOCATE 6,25:PRINT "-----"
LOCATE 7,25:PRINT "i-C4",USING "##.###"           ";S(13),Z(13)
LOCATE 8,25:PRINT "i-C5",USING "##.###"           ";S(14),Z(14)
LOCATE 9,25:PRINT "i-C6",USING "##.###"           ";S(15),Z(15)
LOCATE 10,25:PRINT "i-C7",USING "##.###"           ";S(16),Z(16)
LOCATE 11,25:PRINT "i-C8",USING "##.###"           ";S(17),Z(17)
LOCATE 12,25:PRINT "i-C9",USING "##.###"           ";S(18),Z(18)
LOCATE 13,25:PRINT "i-C10",USING "##.###"           ";S(19),Z(19)
LOCATE 14,25:PRINT "i-C11",USING "##.###"           ";S(20),Z(20)
LOCATE 15,25:PRINT "i-C12+",USING "##.###"           ";S(21),Z(21)
LOCATE 16,25:PRINT " ",,"-----","-----"
LOCATE 17,25:PRINT "TOTAL i-C",USING "##.###"           ";F2,G2
LOCATE 18,25:PRINT "-----"
LOCATE 22,3:Input "<Enter>";a:For j=6 To 22:Locate j,3:Print SPC(70):Next j
LOCATE 6,25:PRINT "-----"
LOCATE 7,25:PRINT "O3",,USING "##.###"           ";S(22),Z(22)
```

80

ESTE TEXTO NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

```

LOCATE 8,25:PRINT "O4",,USING "###.###"           ";S(23),Z(23)
LOCATE 9,25:PRINT "O5",,USING "###.###"           ";S(24),Z(24)
LOCATE 10,25:PRINT "O6",,USING "###.###"          ";S(25),Z(25)
LOCATE 11,25:PRINT "O7",,USING "###.###"          ";S(26),Z(26)
LOCATE 12,25:PRINT "O8",,USING "###.###"          ";S(27),Z(27)
LOCATE 13,25:PRINT "O9",,USING "###.###"          ";S(28),Z(28)
LOCATE 14,25:PRINT "O10",,USING "###.###"         ";S(29),Z(29)
LOCATE 15,25:PRINT "O11",,USING "###.###"         ";S(30),Z(30)
LOCATE 16,25:PRINT "O12",,USING "###.###"         ";S(31),Z(31)
LOCATE 17,25:PRINT " ",,"-----",,"-----"
LOCATE 18,25:PRINT "TOTAL O",USING "###.###"       ";F3,G3
LOCATE 19,25:PRINT "-----"
LOCATE 22,3:Input "<Enter>";a:For j=6 To 22:Locate j,3:Print SPC(70):Next j
LOCATE 6,25:PRINT "-----"
LOCATE 7,25:PRINT "N5",,USING "###.###"           ";S(32),Z(32)
LOCATE 8,25:PRINT "N6",,USING "###.###"           ";S(33),Z(33)
LOCATE 9,25:PRINT "N7",,USING "###.###"           ";S(34),Z(34)
LOCATE 10,25:PRINT "N8",,USING "###.###"          ";S(35),Z(35)
LOCATE 11,25:PRINT "N9",,USING "###.###"          ";S(36),Z(36)
LOCATE 12,25:PRINT "N10",,USING "###.###"         ";S(37),Z(37)
LOCATE 13,25:PRINT "N12",,USING "###.###"         ";S(38),Z(38)
LOCATE 14,25:PRINT " ",,"-----",,"-----"
LOCATE 15,25:PRINT "TOTAL N",USING "###.###"       ";F4,G4
LOCATE 16,25:PRINT "-----"
LOCATE 22,3:Input "<Enter>";a:For j=6 To 22:Locate j,3:Print SPC(70):Next j
LOCATE 6,25:PRINT "-----"
LOCATE 7,25:PRINT "A6",,USING "###.###"           ";S(39),Z(39)
LOCATE 8,25:PRINT "A7",,USING "###.###"           ";S(40),Z(40)
LOCATE 9,25:PRINT "A8",,USING "###.###"           ";S(41),Z(41)
LOCATE 10,25:PRINT "A9",,USING "###.###"          ";S(42),Z(42)
LOCATE 11,25:PRINT "A10",,USING "###.###"         ";S(43),Z(43)
LOCATE 12,25:PRINT "A11",,USING "###.###"         ";S(44),Z(44)
LOCATE 13,25:PRINT "A12",,USING "###.###"         ";S(45),Z(45)
LOCATE 14,25:PRINT " ",,"-----",,"-----"
LOCATE 15,25:PRINT "TOTAL A",USING "###.###"       ";F5,G5
LOCATE 16,25:PRINT "-----"
LOCATE 17,25:PRINT "MTBE",USING"###.###"         ";MT,MTV
LOCATE 18,25:PRINT "TAME",USING"###.###"         ";TA,TAM
LOCATE 22,3:Input "<Enter>";a:For j=4 To 22:Locate j,3:Print SPC(70):Next j
X=5:Y=15:
LOCATE 3,15:PRINT "NO. REG.", "NOM.", "%PESO", "%VOL."
FOR I=1 TO CA
  IF B(I) <> 0 THEN
    LOCATE X,Y:PRINT I,A$(I),USING "###.###"       ";B(I),V(I)
    X=X+1:W=W+1
    IF X=22 THEN X=5:Y=15:Locate 22,3:Input "<Enter>";a:For j=5 To 22
      Locate j,3:Print SPC(70):Next j
    End IF
  IF I=CA THEN
    LOCATE 21,25:PRINT "% EN PESO", "%VOL."
    LOCATE 22,25:PRINT USING"###.###"             ";TF,TG
    LOCATE 22,3:Input "<Enter>";a
  End IF
NEXT I
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

```

```

Archi:
GoSub Limpia

```

```

LOCATE 3,15:PRINT " CREACION DE ARCHIVO PARA ALMACENAR AREAS "
LOCATE 10,10:INPUT "NOMBRE PARA LA CREACION DEL ARCHIVO":O$
Mts = Mt :Mtb = Mtv
Tas = Ta :Tav = Tam
Ms$=M$:Fs$=F$:Gs$=G$:Rs$=R$:Ls$=L$:Ws$=W$:Ks$=K$
OPEN "A:"+O$ FOR OUTPUT AS #1
  Write #1, Ms$,Fs$,Gs$,Rs$,Ls$,Ws$,Ks$
  Write #1, Mts,Mtb,Tas,Tav
  FOR I=1 TO CA
    Write #1,A(I)
  NEXT I
CLOSE #1
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

VerArea:
GoSub Limpia
X=5:Y=3
LOCATE 2,30:PRINT "Valores de Areas"
LOCATE 3,5:PRINT "REGISTRO";Spc(6);"COMPUESTO";Spc(35);"AREA"
FOR I=1 TO CA
  LOCATE X,Y:PRINT USING "   ###           &";I,A$(I)
  LOCATE X,Y+60:PRINT USING "#####.### ";A(I)
  X=X+1:W=W+1
  IF X=21 THEN X=5:Y=3:Locate 21,3:Input "<Enter>";a:For j=5 To 22
    Locate j,3:Print SPC(70):Next j
  IF I = CA Then Locate 22,3:Input "<Enter>";a
NEXT I
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

REM ***** Lectura de los Componentes de Piona *****
DATA P1,P2,P3,P4,P5,P6,P7,P8,P9,P10,P11,P12,P13,P14
DATA I4,I5,I6,I7,I8,I9,I10,I11,I12
DATA O3,O4,O5,O6,O7,O8,O9,O10,O11,O12
DATA N5,N6,N7,N8,N9,N10,N12
DATA A6,A7,A8,A9,A10,A11,A12
DATA PES
DATA NOI
REM *****DATOS DE LA DENSIDAD TOMADOS DEL API*****
DATA METANO,P1,.26,ETANO,P2,.358,PROPILENO,O3,.522,PROPANO,P3,.508
DATA ISOBUTANO,I4,.563,BUTENO-1+ISOBUTILENO,O4,.601,13-BUTADIENO,O4,.650
DATA BUTANO NORMAL,P4,.5840,TRANSBUTENO-2,O4,.6100,22-DIMETILPROPANO,P5,.613
DATA CISBUTENO-2,O4,.6270,12-BUTADIENO,O4,.650,3-METILBUTENO-1,O5,.6320
DATA ISOPENTANO,I5,.625,14-PENTADIENO,O5,.666,BUTENO-2,O4,.635,PENTENO-1,O5,.64
DATA DIMETILACETILENO,O4,.696,2-METILBUTENO-1,O5,.6560,PENTANO NORMAL,P5,.6310
DATA ISOPRENO,O5,.686,TRANSPENTENO,O5,.653,PENTINO-1,O5,.695
DATA CISPENTENO,O5,.6610,2-METILBUTENO-2,O5,.6680,t-13-PENTADIENO,O5,.681
DATA c-13-PENTADIENO,O5,.6960,22-DIMETILBUTANO,I6,.6540,CICLOPENTENO,O5,.7780
DATA 23-PENTADIENO,O5,.6810,CICLOPENTANO,N5,.7510,23-DIMETILBUTANO,I6,.6660
DATA 2-METILPENTANO,I6,.658,3-METILPENTANO,I6,.669,OLEFINAS C6,O6,.681
DATA HEXANO NORMAL,P6,.6640,22-DIMETILPENTANO,I7,.67,METILCICLOPENTANO,N6,.7540
DATA 24-DIMETILPENTANO,I7,.677,223-TRIMETILBUTANO,I7,.6950,BENCENO,A6,.8850
DATA 33-DIMETILPENTANO,I7,.6980,CICLOHEXANO,N6,.7830
DATA 2-METILHEXANO,I7,.6830,23-DIMETILPENTANO,I7,.695
DATA 11-DIMETILCICLOPENTANO,N7,.7590,3-METILHEXANO,I7,.692
DATA c-13-DIMETILCICLOPENTANO,N7,.753,t-13-DIMETILCICLOPENTANO,N7,.777
DATA 3-ETILPENTANO,I7,.693,t-12-DIMETILCICLOPENTANO,N7,.756

```

DATA 224-TRIMETILPENTANO, I8, .696, OLEFINAS C7,07, .707, HEPTANO NORMAL, P7, .688
DATA METILCICLOHEXANO, N7, .774, 22-DIMETILHEXANO, I8, .700, ETILCICLOPENTANO, N7, .771
DATA 25-DIMETILHEXANO, I8, .698, 24-DIMETILHEXANO, I8, .705
DATA t-c-124-TRIMETILCICLOPENTANO, N8, .752, 33-DIMETILHEXANO, I8, .714
DATA t-c-123-TRIMETILCICLOPENTANO, N8, .758, 234-TRIMETILPENTANO, I8, .723
DATA TOLUENO, A7, .872, c-t-124-TRIMETILCICLOPENTANO, N8, .758
DATA 23-DIMETILHEPTANO, I9, .718, 2-METIL-3-ETILPENTANO, I8, .732
DATA 2-METILHEPTANO, I8, .702, 4-METILHEPTANO, I8, .709, 34-DIMETILHEXANO, I8, .715
DATA 3-METILHEPTANO, I8, .710, c-13-DIMETILCICLOHEXANO, N8, .770
DATA t-14-DIMETILCICLOHEXANO, N8, .767, 2244-TETRAMETILPENTANO, I9, .722
DATA t-1-ETIL-3-METILCICLOPENTANO, N8, .771, c-1-ETIL-3-METILCICLOPENTANO, N8, .771
DATA t-1-ETIL-2-METILCICLOPENTANO, N8, .773, t-12-DIMETILCICLOHEXANO, N8, .780
DATA c-c-123-TRIMETILCICLOPENTANO, N8, .784, OLEFINAS C8,08, .726
DATA OCTANO NORMAL, P8, .707, NAFTENO C8, N8, .780, 244-TRIMETILHEXANO, I9, .728
DATA NAFTENO C8, N8, .781, ISOPROPILCICLOPENTANO, N8, .78
DATA 2-METIL-4-ETILHEXANO, I9, .726, 235-TRIMETILHEXANO, I9, .726
DATA c-1-ETIL-2-METILCICLOPENTANO, N8, .773, 22-DIMETILHEPTANO, I9, .714
DATA 22-DIMETIL-3-ETILPENTANO, I9, .730, c-12-DIMETILCICLOHEXANO, N8, .801
DATA 44-DIMETILHEPTANO, I9, .785, N-PROPILCICLOPENTANO, N8, .781
DATA 26-DIMETILHEPTANO, I9, .768, 113-TRIMETILCICLOHEXANO, N9, .763
DATA 35-DIMETILHEPTANO, I9, .727, 233-TRIMETILHEXANO, I9, .725
DATA 33-DIMETILHEPTANO, I9, .72, 3-METIL-3-ETILHEXANO, I9, .730, ETILBENCENO, A8, .872
DATA t-t-124-TRIMETILCICLOHEXANO, N9, .780, 234-TRIMETILHEXANO, I9, .72
DATA META-XILENO, A8, .869, PARA-XILENO, A8, .866, 34-DIMETILHEPTANO D/L, I9, .736
DATA NAFTENO C9, N9, .780, 23-DIMETIL-3-ETILPENTANO, I9, .734
DATA 4-METILOCTANO, I9, .722, 2-METILOCTANO, I9, .718, DESCONOCIDO, I9, .736
DATA 3-ETILHEPTANO, I9, .718, 3-METILOCTANO, I9, .725
DATA t-c-124-TRIMETILCICLOHEXANO, N9, .776, ORTO-XILENO, A8, .885
DATA c-c-124-TRIMETILCICLOHEXANO, N9, .728, 1-METIL-2-PROPILCICLOPENTANO, N9, .776
DATA c-1-ETIL-3-METILCICLOHEXANO, N9, .798, t-1-ETIL-4-METILCICLOHEXANO, N9, .798
DATA NAFTENO C9, N9, .798, ISOBUTILCICLOPENTANO, N9, .803, OLEFINAS C9,09, .736
DATA NAFTENO C9, N9, .800, NONANO NORMAL, P9, .723, OLEFINA C10,010, .750
DATA t-1-ETIL-3-METILCICLOHEXANO, N9, .798, 1-METIL-1-ETILCICLOHEXANO, N9, .785
DATA ISOPROPILBENCENO, A9, .874, PARAFINA C10, I10, .738, SECBUTILCICLOPENTANO, N9, .798
DATA ISOPROPILCICLOHEXANO, N9, .805, 22-DIMETILOCTANO, I10, .728
DATA 44-DIMETILOCTANO, I10, .738, PARAFINA C10, I10, .738
DATA 35-DIMETILOCTANO D/L, I10, .730, N-PROPILCICLOHEXANO, N9, .798
DATA NAFTENO C9, N9, .798, N-BUTILCICLOPENTANO, N9, .803, 26-DIMETILOCTANO, I10, .728
DATA N-PROPILBENCENO, A9, .867, 33-DIMETILOCTANO, I10, .728
DATA 13-DIMETIL-2-ETILCICLOHEXANO, N10, .798, META-ETILTOLUENO, A9, .880
DATA PARA-ETILTOLUENO, A9, .880, 135-TRIMETILBENCENO, A9, .871, 5-METILNONANO, I10, .730
DATA 4-ETILOCTANO, I10, .730, 4-METILNONANO, I10, .731, ORTO-ETILTOLUENO, A9, .880
DATA 3-ETILOCTANO, I10, .733, 3-METILNONANO, I10, .731
DATA t-1-METIL-4-ISOPROPILCICLOHEXANO, N10, .803, PARAFINA C11, I11, .734
DATA 124-TRIMETILBENCENO, A9, .875, TERBUTILCICLOHEXANO, N10, .803
DATA ISOBUTILCICLOHEXANO, N10, .817, NAFTENO C10, N10, .803
DATA c-1-METIL-4-ISOPROPILCICLOHEXANO, N10, .803
DATA 1-ETIL-23-DIMETILCICLOHEXANO, N10, .805, ISOBUTILBENCENO, A10, .870
DATA DECANO NORMAL, P10, .734, NAFTENO C10, N10, .803, PARAFINA C11, I11, .745
DATA 123-TRIMETILBENCENO, A9, .840, PARAFINA C11, I11, .745
DATA 1-METIL-3-ISOPROPILBENCENO, A10, .861, 1-METIL-4-ISOPROPILBENCENO, A10, .881
DATA PARAFINA C11, I11, .744, PARAFINA C11, I11, .744, SECBUTILCICLOHEXANO, N10, .805
DATA 1-METIL-2-ISOPROPILBENCENO, A10, .862, PARAFINA C11, I11, .744
DATA NAFTENO C10, N10, .805, NAFTENO C10, N10, .805, 13-DIETILBENCENO, A10, .803
DATA 1-METIL-3PROPILBENCENO, A10, .865, 1-METIL-4PROPILBENCENO, A10, .875
DATA N-BUTILBENCENO, A10, .870, 13-DIMETIL-5-ETILBENCENO, A10, .795
DATA 12-DIETILBENCENO, A10, .803, 1-METIL-2PROPILBENCENO, A10, .878
DATA PARAFINA C11, I11, .753, 4-METILDECANO, I11, .740
DATA 14-DIMETIL-2-ETILBENCENO, A10, .787, 13-DIMETIL-4-ETILBENCENO, A10, .789
DATA 3-METILDECANO, I11, .740, 12-DIMETIL-4-ETILBENCENO, A10, .789

DATA 1-METIL-3-TERBUTILBENCENO,A11,.880,NAFTENO C10,N10,.805
 DATA 1-METIL-4-TERBUTILBENCENO,A11,.880,AROMATICO C11,A11,.880
 DATA 13-DIMETIL-2-ETILBENCENO,A10,.788,AROMATICO C11,A11,.744
 DATA PARAFINA C12,I12,.744,12-DIMETIL-3-ETILBENCENO,A10,.787
 DATA UNDECANO NORMAL,P11,.744,OLEFINAS C11,O11,.760
 DATA 1245-TETRAMETILBENCENO,A10,.880,1235-TETRAMETILBENCENO,A10,.880
 DATA AROMATICO C11,A11,.880,PARAFINA C12,I12,.760,PARAFINA C12,I12,.760
 DATA PARAFINA C12,I12,.760,AROMATICO C11,A11,.880,AROMATICO C11,A11,.880
 DATA PARAFINA C12,I12,.760,AROMATICO C11,A11,.880,AROMATICO C11,A11,.880
 DATA PARAFINA C12,I12,.760,AROMATICO C11,A11,.760
 DATA 1234-TETRAMETILBENCENO,A10,.880,PENTILBENCENO,A11,.880
 DATA C-1-METIL-2-(4-METILPENTIL)CICLOPENTANO,N12,.817,PARAFINA C12,I12,.760
 DATA AROMATICO C11,A11,.880,AROMATICO C11,A11,.880
 DATA 13-DIMETIL-5-TERBUTILBENCENO,A12,.875,PARAFINA C12,I12,.753
 DATA AROMATICO C11,A11,.880,PARAFINA C12,I12,.753,AROMATICO C11,A11,.880
 DATA PARAFINA C12,I12,.753,AROMATICO C11,A11,.880,PARAFINA C12,I12,.753
 DATA OLEFINA C12,O12,.770,OLEFINA C13,O12,.780,OLEFINA C13,O12,.780
 DATA 135-TRITILBENCENO,A12,.880,1-ETIL-4-TERBUTILBENCENO,A12,.880
 DATA 124-TRITILBENCENO,A12,.880,OLEFINA C13,O12,.780
 DATA HEXILBENCENO,A12,.800,DODECANO NORMAL,P12,.766,TRIDECANO NORMAL,P13,.774
 DATA TETRADECANO NORMAL,P14,.781,PESADOS,PES,.809,NO IDENTIFICADOS,NOI,0.752
 DATA MTBE,MTBE,0.758,TAME,TAME,0.77
 REM ***** Pin lectura de los Componentes de Piona *****

REM * DENSIDAD DEL NC12 TOMADA DEL HANDBOOK HODGEMAN (EDICION 40 1958-1959)
 Ron:

```

GoSub Limpia
LOCATE 2,25:PRINT " CALCULO DE RON "
LOCATE 6,10:PRINT "NOMBRE DE LA MUESTRA :";M$"          FECHA: ";F$
REM -----SELECCION DE GRUPOS-----
REM GRUPO 1
LET X1=0
FOR I=1 TO 7
  LET X1=B(I)+X1
  P1=X1*1.039
NEXT I
REM GRUPO 2
P2=B(8)*.881
REM GRUPO 3
X3=0
FOR I=9 TO 13
  LET X3=B(I)+X3
  LET P3=X3*1.443
NEXT I
REM GRUPO 4
LET P4=B(14)*.84
REM GRUPO 5
LET X5=0
FOR I=15 TO 19
  LET X5=B(I)+X5
  P5=X5*1.982
NEXT I
REM GRUPO 6
LET P6=B(20)*.679
REM GRUPO 7
LET X7=0
FOR I=21 TO 32
  LET X7=B(I)+X7
  P7=X7*.952
NEXT I
  
```

```

REM GRUPO 8
LET X8=0
FOR I=33 TO 34
  LET X8=B(I)+X8
  P8=X8*.866
NEXT I
REM GRUPO 9
LET P9=B(35)*.959
REM GRUPO 10
LET P10=B(36)*.209
REM GRUPO 11
LET X11=0
FOR I=37 TO 40
  LET X11=B(I)+X11
  P11=X11*.949
NEXT I
REM GRUPO 12
LET P12=B(41)*1.052
REM GRUPO 13
LET X13=0
FOR I=42 TO 43
  LET X13=B(I)+X13
  P13=X13*1.136
NEXT I
REM GRUPO 14
LET X14=0
FOR I=44 TO 47
  LET X14=B(I)+X14
  P14=X14*.8
NEXT I
REM GRUPO 15
LET X15=0
FOR I=48 TO 53
  LET X15=B(I)+X15
  P15=X15*.978
NEXT I
REM GRUPO 16
LET P16=B(54)*(-.478)
REM GRUPO 17
LET X17=0
FOR I=55 TO 63
  LET X17=B(I)+X17
  P17=X17*.623
NEXT I
REM GRUPO 18
LET P18=B(64)*1.139
REM GRUPO 19
LET X19=0
FOR I=65 TO 67
  LET X19=B(I)+X19
  P19=X19*1.151
NEXT I
REM GRUPO 20
LET X20=0
FOR I=68 TO 70
  LET X20=B(I)+X20
  P20=X20*.817
NEXT I
REM GRUPO 21
LET X21=0

```

```

FOR I=71 TO 80
  LET X21=B(I)+X21
  P21=X21*1.097
NEXT I
REM GRUPO 22
LET P22=B(81)*.105
REM GRUPO 23
LET X23=0
FOR I=82 TO 99
  LET X23=B(I)+X23
  P23=X23*.961
NEXT I
REM GRUPO 24
LET P24=B(100)*1.226
REM GRUPO 25
LET X25=0
FOR I=101 TO 102
  LET X25=B(I)+X25
  P25=X25*.454
NEXT I
REM GRUPO 26
LET X26=0
FOR I=103 TO 104
  LET X26=B(I)+X26
  P26=X26*1.02
NEXT I
REM GRUPO 27
LET X27=0
FOR I=105 TO 113
  LET X27=B(I)+X27
  P27=X27*.733
NEXT I
REM GRUPO 28
LET P28=B(114)*1.236
REM GRUPO 29
LET X29=0
FOR I=115 TO 123
  LET X29=B(I)+X29
  P29=X29*.35
NEXT I
REM GRUPO 30
LET X30=0
FOR I=124 TO 162
  LET X30=B(I)+X30
  P30=X30*1.12
NEXT I
REM GRUPO 31
LET X31=0
FOR I=163 TO CA
  LET X31=B(I)+X31
  P31=X31*.856
NEXT I
LET R=P1+P2+P3+P4+P5+P6+P7+P8+P9+P10
LET O=P11+P12+P13+P14+P15+P16+P17+P18+P19+P20
LET N=P21+P22+P23+P24+P25+P26+P27+P28+P29+P30+P31
LET RON=(R+O+N)
FOR j=6 TO 22:LOCATE j,3:PRINT SPC(70):NEXT j
LOCATE 3,5:PRINT "MUESTRA: ";M$ " FECHA: ";F$
LOCATE 3,45:PRINT " TOTAL RON = "USING"###.###";RON
LOCATE 4,15:PRINT " GRUPO RESULTADO GRUPO

```

RESULTADO*86

```

LOCATE 5,15:PRINT "
LOCATE 6,18:PRINT " 1 "; Spc(10)USING"###.### " ; P1,17,P17
LOCATE 7,18:PRINT " 2 "; Spc(10)USING"###.### " ; P2,18,P18
LOCATE 8,18:PRINT " 3 "; Spc(10)USING"###.### " ; P3,19,P19
LOCATE 9,18:PRINT " 4 "; Spc(10)USING"###.### " ; P4,20,P20
LOCATE 10,18:PRINT " 5 "; Spc(10)USING"###.### " ; P5,21,P21
LOCATE 11,18:PRINT " 6 "; Spc(10)USING"###.### " ; P6,22,P22
LOCATE 12,18:PRINT " 7 "; Spc(10)USING"###.### " ; P7,23,P23
LOCATE 13,18:PRINT " 8 "; Spc(10)USING"###.### " ; P8,24,P24
LOCATE 14,18:PRINT " 9 "; Spc(10)USING"###.### " ; P9,25,P25
LOCATE 15,18:PRINT " 10 "; Spc(10)USING"###.### " ; P10,26,P26
LOCATE 16,18:PRINT " 11 "; Spc(10)USING"###.### " ; P11,27,P27
LOCATE 17,18:PRINT " 12 "; Spc(10)USING"###.### " ; P12,28,P28
LOCATE 18,18:PRINT " 13 "; Spc(10)USING"###.### " ; P13,29,P29
LOCATE 19,18:PRINT " 14 "; Spc(10)USING"###.### " ; P14,30,P30
LOCATE 20,18:PRINT " 15 "; Spc(10)USING"###.### " ; P15,31,P31
LOCATE 21,18:PRINT " 16 "; Spc(10)USING"###.### " ; P16
LOCATE 22,10:INPUT "¿ DESEAS IMPRIMIR EL REPORTE [S/N]:";T$
IF UCASE$(T$) = "S" THEN

```

```

  GoSub ImpRon

```

```

Else

```

```

  GoSub Limpia

```

```

  GoSub Menu

```

```

End IF

```

```

Return

```

```

ImpRon:

```

```

GoSub Limpia

```

```

Locate 10,30:Print "... REPORTE DE RON ..."

```

```

Error!% = fnImpresora%

```

```

IF Error!% < 0 THEN

```

```

  LPRINT:LPRINT

```

```

  LPRINT TAB(29)"      REPORTE DE RON      "

```

```

  LPRINT:LPRINT

```

```

  LPRINT TAB(8);"MUESTRA: ";M$

```

```

  FECHA: ";F$

```

```

  LPRINT:LPRINT

```

```

  LPRINT TAB(30)"GRUPO      RESULTADO "

```

```

  LPRINT TAB(30)"=====      ===== "

```

```

  LPRINT

```

```

  LPRINT TAB(32)" 1          ";USING"###.### " ; P1

```

```

  LPRINT TAB(32)" 2          ";USING"###.### " ; P2

```

```

  LPRINT TAB(32)" 3          ";USING"###.### " ; P3

```

```

  LPRINT TAB(32)" 4          ";USING"###.### " ; P4

```

```

  LPRINT TAB(32)" 5          ";USING"###.### " ; P5

```

```

  LPRINT TAB(32)" 6          ";USING"###.### " ; P6

```

```

  LPRINT TAB(32)" 7          ";USING"###.### " ; P7

```

```

  LPRINT TAB(32)" 8          ";USING"###.### " ; P8

```

```

  LPRINT TAB(32)" 9          ";USING"###.### " ; P9

```

```

  LPRINT TAB(32)"10         ";USING"###.### " ; P10

```

```

  LPRINT TAB(32)"11         ";USING"###.### " ; P11

```

```

  LPRINT TAB(32)"12         ";USING"###.### " ; P12

```

```

  LPRINT TAB(32)"13         ";USING"###.### " ; P13

```

```

  LPRINT TAB(32)"14         ";USING"###.### " ; P14

```

```

  LPRINT TAB(32)"15         ";USING"###.### " ; P15

```

```

  LPRINT TAB(32)"16         ";USING"###.### " ; P16

```

```

  LPRINT TAB(32)"17         ";USING"###.### " ; P17

```

```

  LPRINT TAB(32)"18         ";USING"###.### " ; P18

```

```

  LPRINT TAB(32)"19         ";USING"###.### " ; P19

```

```

  LPRINT TAB(32)"20         ";USING"###.### " ; P20

```

```

  LPRINT TAB(32)"21         ";USING"###.### " ; P21

```



```

LPRINT TAB(32)"22          ";USING"###.##          ";P22
LPRINT TAB(32)"23          ";USING"###.##          ";P23
LPRINT TAB(32)"24          ";USING"###.##          ";P24
LPRINT TAB(32)"25          ";USING"###.##          ";P25
LPRINT TAB(32)"26          ";USING"###.##          ";P26
LPRINT TAB(32)"27          ";USING"###.##          ";P27
LPRINT TAB(32)"28          ";USING"###.##          ";P28
LPRINT TAB(32)"29          ";USING"###.##          ";P29
LPRINT TAB(32)"30          ";USING"###.##          ";P30
LPRINT TAB(32)"31          ";USING"###.##          ";P31
LPRINT:LPRINT:LPRINT
LPRINT TAB(34)"TOTAL RON = ";USING"###.## ";RON
LPRINT TAB(45)"======"
LPRINT CHR$(12)

Else
LOCATE 11,10:Print "Impresora Apagada o Papel Agotado"
LOCATE 12,10:Print "Error No. ";Error1$
Delay 3
End IF
GoSub Limpia
GoSub Menu
Return

Fin:
Cls:END

DirF:
CLS:FILES"A:
INPUT "REGRESAR AL MENU PRINCIPAL <ENTER> :";X
Cls
GoSub Marco
GoSub Menu
Return

```

4.- DESCRIPCION DEL TRABAJO PARA LA APLICACION DEL PROGRAMA

Antes de iniciar el análisis se recomienda que el cromatógrafo tenga ciertas condiciones necesarias para su óptima operación. Se debe contar con el detector adecuado, en nuestro caso usaremos el de ionización de flama (FID), contar con el suministro de gases adecuado (Helio, Nitrógeno, Hidrógeno y Aire) y las muestras a procesar que en este caso serán gasolinas.

Se inyecta 1 μ l de la muestra mediante una jeringa graduada al inyector del cromatógrafo.

Después de pasar al puerto de inyección, la muestra entra en la columna de alta resolución en donde se efectúa el proceso de separación de los componentes. La columna se encuentra dentro de un horno ya que la temperatura influye de modo importante en la retención de los componentes por la columna, y por tanto, en la separación de los mismos.

Los componentes deben detectarse cuando se separan de la muestra y emergen de la columna al detector, el cual se utiliza para cuantificar los componentes ya separados, manifestándose en forma de señal de tipo eléctrico. Esta señal se transmite mediante un circuito adecuado a un colector y amplificador de señal, la cual se registra gráficamente, a dicha gráfica se le conoce como cromatograma.

La identificación de los picos son realizados por la comparación de valores del tiempo de retención de los picos con aquellos componentes ya conocidos.

El tiempo de análisis de una muestra es de 2 horas, se debe considerar el tiempo para enfriar el horno y el tiempo para regresar a la temperatura inicial para iniciar un nuevo análisis.

El paso siguiente cuando ya se tiene el cromatograma, es la identificación de los picos, basándose principalmente en su tiempo de retención (tiempo de salida) de cada uno de los componentes.

Inmediatamente, con el programa, se procede a la etapa de la cuantificación, en donde se obtendrán las concentraciones de los componentes individuales (ya identificados) ó por grupos de familia, proporcionando el resultado en: % Parafinas, % Isoparafinas, % Olefinas, % Naftenos y % Aromáticos, así como también permite obtener, adicionalmente, el número de octano (RON) en base a la relación que existe entre los números de octano de cada componente con su respectiva concentración. Todos los porcentajes son calculados en % peso y % volumen. Los componentes individuales son reportados en secuencia ó por grupo.

Los resultados del correspondiente análisis se obtendrán mediante un reporte impreso, ésta información también podrá ser accesible por medio de la pantalla de la computadora.

De este capítulo podemos concluir que el programa está diseñado para realizar la identificación y cuantificación de los componentes individuales que contiene una gasolina. A continuación veremos la parte práctica de este programa, es decir, las pruebas.

CAPITULO IV. PRUEBAS DEL PROGRAMA DE COMPUTO.

El objeto de esta sección es la de establecer los tiempos de retención de los compuestos que nosotros consideramos como picos ancla ó de referencia.

Para este efecto se corrieron 20 muestras y se tomaron 5, las más repetitivas, para establecer mediante ecuaciones estadísticas las ventanas (en tiempo) con las que el programa integrará y cuantificará los picos de los componentes.

Se toman los tiempos de retención debido a que es más sencillo la corrección de algún componente, cuando no esté bien identificado ó cuando queramos reprocesar la muestra para identificar todos los componentes de la gasolina . Para establecer la desviación estándar de los tiempos de retención se tomaron 5 muestras. Lo anterior se hizo para conocer cuánto es el desplazamiento de los picos entre diferentes inyecciones.

En la siguiente tabla (ver Tabla 5) se indican los componentes de referencia (picos ancla) y sus respectivos tiempos de retención (elución).

NOMBRE	A	B	C	D	E	Desviación Estándar
Propano	4.08	4.11	4.11	4.14	4.13	0.0230
Butano normal	5.65	5.69	5.63	5.71	5.71	0.0363
Pentano normal	10.89	10.97	10.67	10.98	10.99	0.1345
MTBE (Metil Ter Butil Eter)	18.99	19.05	18.48	19.03	19.06	0.2485
Hexano normal	23.30	23.36	22.94	23.36	23.38	0.1858
24-Dimetilpentano	26.76	26.80	26.48	26.80	26.82	0.1425
Benceno	28.57	28.61	28.32	28.62	28.63	0.1306
2-Metilhexano	31.12	31.15	30.89	31.16	31.18	0.1194
TAME (Ter Amil Metil Eter)	31.58	31.61	31.37	31.63	31.64	0.1119
Heptano normal	35.02	35.04	34.83	35.05	35.07	0.0978
Tolueno	41.57	41.54	41.37	41.53	41.54	0.0797
2244-Tetrametilpentano	45.44	45.42	45.31	45.44	45.45	0.0581
Octano normal	47.38	47.37	47.28	47.40	47.40	0.0498
Etilbenceno	53.05	53.03	52.96	53.04	53.05	0.0378
Meta-xileno	54.10	54.07	54.00	54.07	54.08	0.0378
Para-xileno	54.19	54.17	54.10	54.17	54.18	0.0356
Orto-xileno	56.38	56.37	56.31	56.37	56.38	0.0295

Nonano normal	58.49	58.48	58.45	58.50	58.50	0.0207
Meta-etil-tolueno	62.80	62.79	62.76	62.79	62.80	0.0164
Para-etil-tolueno	62.96	62.94	62.91	62.95	62.96	0.0207
135-Trimetilbenceno	63.42	63.41	63.38	63.42	63.42	0.0173
Orto-etil-tolueno	64.19	64.18	64.15	64.19	64.20	0.0192
124-Trimetilbenceno	65.46	65.45	65.41	65.45	65.46	0.0207
Decano normal	66.76	66.75	66.74	66.77	66.77	0.0130
123-Trimetilbenceno	67.47	67.46	67.44	67.48	67.48	0.0167
1-Metil-4-Terbutilbenceno	72.04	72.03	72.02	72.05	72.06	0.0158
Undecano normal	73.94	73.93	73.93	73.96	73.96	0.0152
n-Pentilbenceno	77.52	77.52	77.51	77.55	77.54	0.0164
Dodecano normal	83.20	83.20	83.20	83.25	83.23	0.0230

Tabla 5. Tiempo de retención de los componentes de referencia.

Con los resultados de la tabla anterior pudimos comprobar que el equipo tiene muy buena respuesta y repetibilidad, ya que es evidente que la desviación estándar se encuentra dentro de los límites que se manejan para este tipo de análisis, que son del 0.1 y 0.2.

Por lo tanto, esto nos garantiza que la identificación de muestras tan complejas, como lo son las gasolinas, siempre va a ser correcta.

Se anexan los cromatogramas de la muestras B, C y D. En donde podemos observar que la muestra C tiene un desfase mayor en los tiempos de retención en comparación con las otras. Esto puede deberse, quizás, a que la cantidad de muestra inyectada fue menor ó que el horno estuviera completamente frío al iniciar esta corrida.

Estas pruebas realizadas al programa de cómputo, con datos reales de gasolinas analizadas por cromatografía de gas, nos lleva a mostrar los siguientes resultados obtenidos.

	M1: 40MMKI SPEED + 0.80 CM/MIN C5		
1,304=	3.555.47 CC4=1 CC4=1	4.92 CC4	
	6.44 220mcs	6.81 CC4=1 6.49 CC4=2	5.69 nC4
		7.98 3mC4=1	
	9.21		8.97 CC5
		10.02 CC5=1	
		10.68 2mC4=1	
	11.25 Isoprene		10.97 nC5
			11.75 TC5=1
		12.51 CC5=2	
	13.31 T13P04		13.01 2mC
	14.27 C13P04	14.66 220mC4	
	UV: STOP PRGM RATE 1		
		16.76 C4C5=	
	17.69 C6=	18.10 C4C5	
			18.65 23Dr
			19.03 mTDr
			19.44 2mC
		19.72 C6=	
			21.12 3m1
		21.70 21.84 X6=	
			23.36 nC6
	23.73	23.99	} C6=
	24.49	24.21	
	24.99		
		25.71 220m C5	25.99 mC
	UV: START PRNALKMIBLZ1		26.80 240
	27.20 27.87 223mC4		
	27.48 } C7=		
	28.46		28.61 82
	29.07 C7=		
	29.37 330mcs	29.55 C4C6	
	29.88		
	30.87 42 } C7=		
	30.94		
	31.46 110mC6	31.61 TAME	31.10 2m
			32.10 3m
		32.89 58430mC5	
		33.23 36C5	
			33.69 224
	34.34	} C7=	
	34.70 44.80		
	35.84=1		
			35.04 nC

~~35.33~~ ~~36.14~~ C7 =
~~36.36~~
~~37.69~~ 220mcu 36.98 mcu C8 =
~~38.31~~ 38.49 ECyCs

~~40.54~~ 40.65 T124Tmcys 38:73 250mcu
~~40.54~~ 350mcu
~~40.54~~ T123Tmcys

~~41.74~~ 41.24 T124Tmcys 41.54 TOL
~~42.07~~
~~42.07~~ C8 = 42.38 230mcu

~~43.04~~ 43.46 43.16 2mcu
~~43.04~~ 310mcu
~~44.20~~ 44.46 3mcu
~~44.20~~ T190mcu C150mcu

~~45.04~~ 45.51 C163mcys 45.42 2244Tmcu
~~45.04~~ T162mcys
~~46.04~~ C1120mcu
~~47.04~~ C1123Tmcys 47.37 nC8

~~48.04~~ 48.82 2mcu
~~48.04~~ 244Tmcu
~~48.04~~ 49.50 C122mcys

~~50.04~~ 220mcu 220m3ECs
~~50.04~~ T160MLK11E1S2
~~50.04~~ C120mcu

~~51.04~~ 51.11 20mcu
~~51.04~~ 113Tmcu
~~52.04~~ 350mcu

~~53.04~~ 53.45 C9 =
~~53.04~~ 234Tmcu
~~53.04~~ 33:73 C9 = 53.93 ETB 2

~~54.04~~ 54.75 230m3ECs 54.74 2mcu
~~54.04~~ 55.31 3EC 55.18 3mcu
~~55.04~~

~~56.04~~ 56.07 C124Tmcu 56.37 0x1L
~~56.04~~ 57.23 T164mcu

~~58.04~~ 58.48 nC9
~~58.04~~ 59.85 T163mcu
~~58.04~~ 59.44 1mcu

~~60.04~~ 60.22 220mcu
~~60.04~~ 60.92 C10
~~60.04~~ 61.28 C9
~~60.04~~ 61.62 nC9
~~60.04~~ 61.74 20mcu 62.18 nC3d
~~60.04~~ 330mcu 62:54 670L

~~63.04~~ 63.34 5mcu 63.41 135Tmd

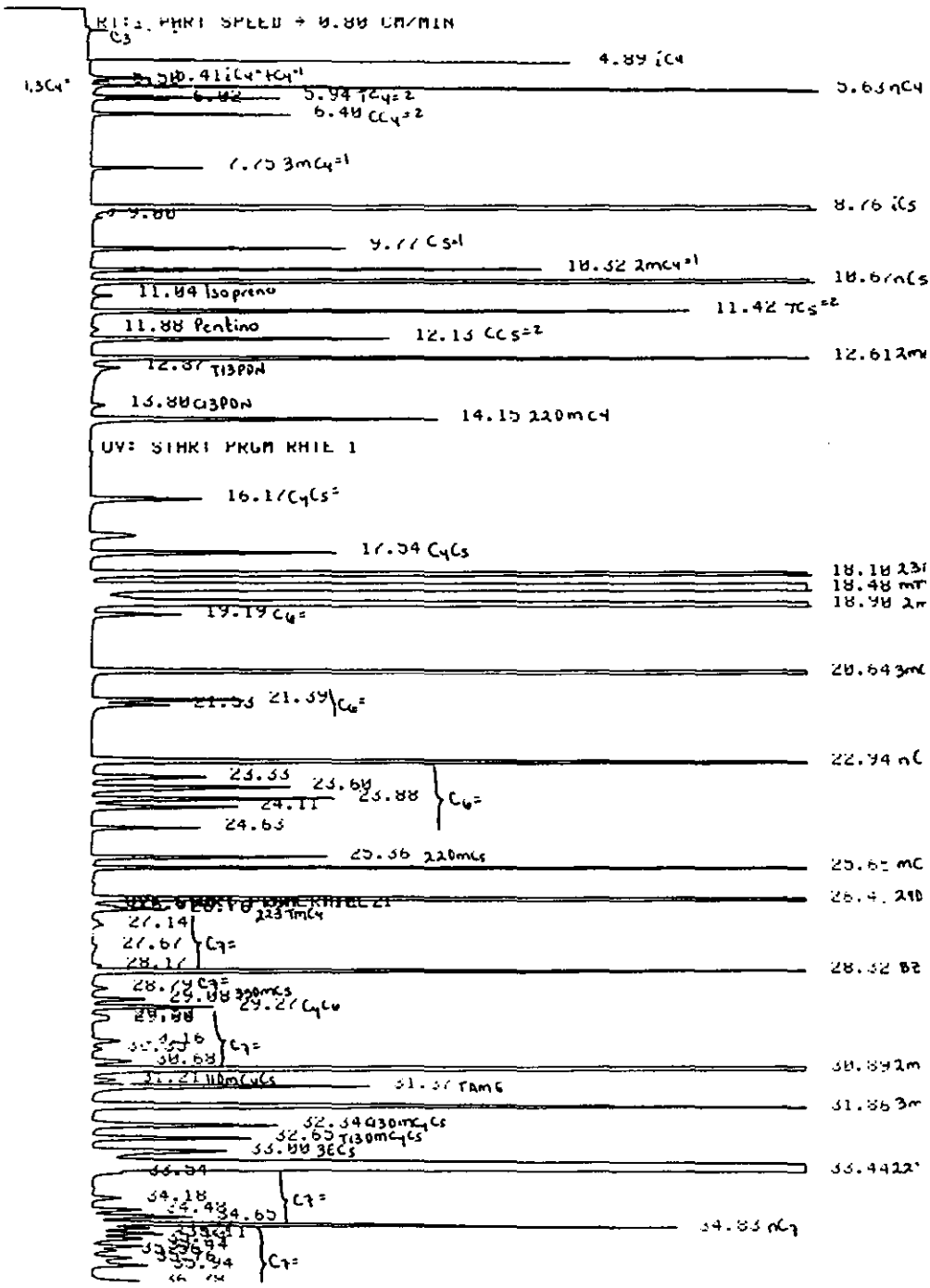
~~64.04~~ 64.36 64.63 3mcu 64.18 0ETOL
~~65.04~~ 65.45 65.45

~~66.04~~ 66.78 66.38 C10 = 66.40 124 Tmd
~~66.04~~ 66.78 C10 =

~~68.04~~ 68.28 C11
~~68.04~~ 68.78 1m21C3d
~~68.04~~ 69.01 Sec C10
~~68.04~~ 69.18 1m21C3d

~~69.04~~ 69.30 69.44 130C4
~~69.04~~ 69.78 69.78 nC4

~~70.04~~ 70.04 70.04 nC4
~~70.04~~ 70.04 70.04 nC4



36.79mcyc6

37.45 220mc6

38.14 - 38.32 50cyc6

38.46 250mc6
240mc6

39.78 48 TC124Tmc6

40.59 TC123Tmc6

40.88 234Tmc6

41.00 TC124Tmc6

41.94 -

41.57 TOL
42.24 230mc7

42.52 c6 =

43.72 = 43.73 43.22 4mc7

43.85 2mc7

44.18 c6 =

45.94 3m7

45.51 2244Tmc6

45.88 C183mc6

46.28 T120mc6

46.68 c6 =

46.94 C123Tmc6

47.28 nC6

48.14 2m4EC6

48.74 2m4EC6

49.27 C122mc6

C6 =

220m36c6

260mc7

330mc7

300mc6
C6 =

C183mc6

C10P
Sec C4cyc6

36c6

N2

UVI: S J H K L P R N M L K R I B E S Z
30.24 C120mc6

31.40 H3Tmc6

31.81 350mc7

32.39 1c9 =

33.66 1c9 =

34.88 220m36c6

35.66 1c9 =

36.44 -

37.19 T1E4mc6

37.85 T1E3mc6

38.51 1m4EC6

39.17 1m4EC6

39.83 1m4EC6

40.49 1m4EC6

41.15 1m4EC6

41.81 1m4EC6

42.47 1m4EC6

43.13 1m4EC6

43.79 1m4EC6

44.45 1m4EC6

45.11 1m4EC6

45.77 1m4EC6

46.43 1m4EC6

47.09 1m4EC6

47.75 1m4EC6

48.41 1m4EC6

49.07 1m4EC6

49.73 1m4EC6

50.39 1m4EC6

51.05 1m4EC6

51.71 1m4EC6

52.37 1m4EC6

53.03 1m4EC6

53.69 1m4EC6

54.35 1m4EC6

55.01 1m4EC6

55.67 1m4EC6

56.33 1m4EC6

56.99 1m4EC6

57.65 1m4EC6

58.31 1m4EC6

58.97 1m4EC6

59.63 1m4EC6

38.40 nC6

39.40 3mc8

39.40 nC6

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

39.40 3mc8

52.96 6T6

54.48 m4L

56.51 0x1L

58.46 m6L

58.58 130Tm6

59.10 0E7L

60.41 124Tm6

61.44 123Tm6

62.52 1m3C6

62.52 1m3C6

62.52 1m3C6

62.52 1m3C6

62.52 1m3C6

62.52 1m3C6

62.52 1m3C6

62.52 1m3C6

62.52 1m3C6

69.81- 69.24 CIA 45 130Eφ
 69.75 69.24 CIA 45 130Eφ
 70.10 69.24 CIA 45 130Eφ
 71.19 120m4Eφ 12.49 130m2Eφ
 72.02 1m4TerCup
 73.05 1245TETmφ
 74.81 1235TETmφ
 78.44
 78.53 CIA
 79.43
 79.56 130m5TETCup
 79.96 CIA
 80.72 CIA
 80.85 130m5CIA
 81.41 CIA
 82.70 130m5CIA
 83.20 CIA
 87.65
 88.22
 88.71
 89.24
 89.56
 89.84
 90.91
 91.51
 92.36
 92.84
 93.42
 93.93
 96.62
 99.82

CIA

SIRKI MUTU SEM

OVEN TEMP MUTU KENDUT

CR-3790D

Time	Notes	Value
0.00	SIRKI SPEED → 0.80 CM/MIN	
4.94		4.94 C ₄
5.52	5.52 48 C ₄ + C ₄ ¹	5.71 nC ₄
5.83	5.83 TC ₄ = 2	
6.51	6.51 C ₄ = 2	
7.92	7.92 3mC ₄ ¹	
8.97		8.97 C ₅
10.84	10.84 C ₅ ¹	
10.612	10.612 mC ₄ ¹	
11.56	11.56 Isopreno	10.98 nC ₅
12.24	12.24 Pentano	11.77 TC ₅ = 2
12.52	12.52 C ₅ = 2	
15.82	15.82 2mC ₄ = 2	
15.88	TIS PAM	
14.68	14.68 2mC ₄	
15.86	OV: SIRKI PRGM RATE 1	
16.78	16.78 C ₄ = 2	
17.71	17.71 C ₄ = 2	
19.11	19.11 C ₄ = 2	
18.66	18.66 23DmC ₄	
19.43	19.43 mTBE	
19.43	19.43 2mC ₅	
21.12	21.12 3mC ₅	
21.85	21.85 C ₆ = 2	
23.36	23.36 nC ₆	
24.21	24.21 C ₆ = 2	
24.49	24.49 C ₆ = 2	
25.88	25.88 C ₆ = 2	
25.71	25.71 220mC ₅	
26.88	26.88 mC ₄ = 2	
26.88	26.88 140mC ₅	
27.88	27.88 223mC ₄	
27.45	27.45 C ₇ = 2	
28.47	28.47 C ₇ = 2	
28.62	28.62 BB	
29.38	29.38 330mC ₅	
29.38	29.38 330mC ₄	
29.89	29.89 C ₇ = 2	
31.26	31.26 2mC ₆	
31.85	31.85 TAME	
32.13	32.13 3mC ₄	
32.54	32.54 130mC ₄ = 2	
32.90	32.90 TISDmC ₄ = 2	
33.24	33.24 3ECS	
33.67	33.67 224mC ₅	
34.48	34.48 C ₇ = 2	
35.85	35.85 C ₇ = 2	
36.15	36.15 mC ₆	
36.38	36.38 C ₇ = 2	

30.58 1
 31.55 220mCg
 38.52 38.52 ECyCg
 39.58 39.58 TC124TMCyCg
 40.56 TC123TMCyCg
 41.76 41.76 TC124TMCyCg
 42.84 42.84 Cg
 43.18 43.18 2mCg
 44.58 44.58 3mCg
 44.52 Cg
 45.54 45.54 Cg
 46.52 Cg
 47.54 47.54 Cg
 48.58 48.58 2m4Cg
 49.58 49.58 Cg
 50.54 50.54 Cg
 51.54 51.54 Cg
 52.58 52.58 Cg
 53.58 53.58 Cg
 54.58 54.58 Cg
 55.58 55.58 Cg
 56.58 56.58 Cg
 57.58 57.58 Cg
 58.58 58.58 Cg
 59.58 59.58 Cg
 60.58 60.58 Cg
 61.58 61.58 Cg
 62.11 62.11 Cg
 63.58 63.58 Cg
 64.58 64.58 Cg
 65.58 65.58 Cg
 66.58 66.58 Cg
 67.58 67.58 Cg
 68.58 68.58 Cg
 69.58 69.58 Cg
 70.58 70.58 Cg
 71.58 71.58 Cg
 72.58 72.58 Cg

01.55 mCgCg

38.52 250m
240m

41.58 234T
41.58 TOL

42.58 230m

43.44 2244

55.54 270

54.58 270

56.58 270

62.58 270
63.42 235T

64.58 270

65.42 244T

66.58 270

67.48 230T

69.58 270

220m3ECg

330mCg

240mCg
Cg

1m2CgCg
Cg

300mCg
Cg

3ECg

NI

43.18 2mCg

44.58 3mCg

47.48 nCg

58.58 nCg

62.11 nCg

64.58 4ECg

66.58 nCg

68.58 2m2Cg

69.58 2m2Cg

70.58 2m2Cg

71.58 2m2Cg

72.58 2m2Cg

70.11 30m5Cg

71.58 2m2Cg

72.58 2m2Cg

AA.5A
RB.4A
CA.7A
14.7A
17.7A
18.7A
19.7A
20.7A
21.7A
22.7A
23.7A
24.7A
25.7A
26.7A

27.7A
28.7A
29.7A
30.7A
31.7A
32.7A
33.7A
34.7A
35.7A
36.7A
37.7A
38.7A
39.7A
40.7A
41.7A
42.7A
43.7A
44.7A
45.7A
46.7A
47.7A
48.7A
49.7A
50.7A
51.7A
52.7A
53.7A
54.7A
55.7A
56.7A
57.7A
58.7A
59.7A
60.7A
61.7A
62.7A
63.7A
64.7A
65.7A
66.7A
67.7A
68.7A
69.7A
70.7A
71.7A
72.7A
73.7A
74.7A
75.7A
76.7A
77.7A
78.7A
79.7A
80.7A
81.7A
82.7A
83.7A
84.7A
85.7A
86.7A
87.7A
88.7A
89.7A
90.7A
91.7A
92.7A
93.7A
94.7A
95.7A
96.7A
97.7A
98.7A
99.7A
100.7A

101.7A
102.7A
103.7A
104.7A
105.7A
106.7A
107.7A
108.7A
109.7A
110.7A
111.7A
112.7A
113.7A
114.7A
115.7A
116.7A
117.7A
118.7A
119.7A
120.7A
121.7A
122.7A
123.7A
124.7A
125.7A
126.7A
127.7A
128.7A
129.7A
130.7A
131.7A
132.7A
133.7A
134.7A
135.7A
136.7A
137.7A
138.7A
139.7A
140.7A
141.7A
142.7A
143.7A
144.7A
145.7A
146.7A
147.7A
148.7A
149.7A
150.7A
151.7A
152.7A
153.7A
154.7A
155.7A
156.7A
157.7A
158.7A
159.7A
160.7A
161.7A
162.7A
163.7A
164.7A
165.7A
166.7A
167.7A
168.7A
169.7A
170.7A
171.7A
172.7A
173.7A
174.7A
175.7A
176.7A
177.7A
178.7A
179.7A
180.7A
181.7A
182.7A
183.7A
184.7A
185.7A
186.7A
187.7A
188.7A
189.7A
190.7A
191.7A
192.7A
193.7A
194.7A
195.7A
196.7A
197.7A
198.7A
199.7A
200.7A

201.7A
202.7A
203.7A
204.7A
205.7A
206.7A
207.7A
208.7A
209.7A
210.7A
211.7A
212.7A
213.7A
214.7A
215.7A
216.7A
217.7A
218.7A
219.7A
220.7A
221.7A
222.7A
223.7A
224.7A
225.7A
226.7A
227.7A
228.7A
229.7A
230.7A
231.7A
232.7A
233.7A
234.7A
235.7A
236.7A
237.7A
238.7A
239.7A
240.7A
241.7A
242.7A
243.7A
244.7A
245.7A
246.7A
247.7A
248.7A
249.7A
250.7A
251.7A
252.7A
253.7A
254.7A
255.7A
256.7A
257.7A
258.7A
259.7A
260.7A
261.7A
262.7A
263.7A
264.7A
265.7A
266.7A
267.7A
268.7A
269.7A
270.7A
271.7A
272.7A
273.7A
274.7A
275.7A
276.7A
277.7A
278.7A
279.7A
280.7A
281.7A
282.7A
283.7A
284.7A
285.7A
286.7A
287.7A
288.7A
289.7A
290.7A
291.7A
292.7A
293.7A
294.7A
295.7A
296.7A
297.7A
298.7A
299.7A
300.7A

301.7A
302.7A
303.7A
304.7A
305.7A
306.7A
307.7A
308.7A
309.7A
310.7A
311.7A
312.7A
313.7A
314.7A
315.7A
316.7A
317.7A
318.7A
319.7A
320.7A
321.7A
322.7A
323.7A
324.7A
325.7A
326.7A
327.7A
328.7A
329.7A
330.7A
331.7A
332.7A
333.7A
334.7A
335.7A
336.7A
337.7A
338.7A
339.7A
340.7A
341.7A
342.7A
343.7A
344.7A
345.7A
346.7A
347.7A
348.7A
349.7A
350.7A
351.7A
352.7A
353.7A
354.7A
355.7A
356.7A
357.7A
358.7A
359.7A
360.7A
361.7A
362.7A
363.7A
364.7A
365.7A
366.7A
367.7A
368.7A
369.7A
370.7A
371.7A
372.7A
373.7A
374.7A
375.7A
376.7A
377.7A
378.7A
379.7A
380.7A
381.7A
382.7A
383.7A
384.7A
385.7A
386.7A
387.7A
388.7A
389.7A
390.7A
391.7A
392.7A
393.7A
394.7A
395.7A
396.7A
397.7A
398.7A
399.7A
400.7A

CAPITULO V. RESULTADOS.

El programa desarrollado realiza tanto la identificación como la cuantificación de los componentes de la gasolina separados por cromatografía de gas.

La primera parte del programa consiste en la identificación de los picos resultantes de la muestra inyectada. Las señales provenientes del cromatógrafo, que salen en forma de pulsos eléctricos (señal análoga continua) serán convertidas en una forma de entrada aceptable en la computadora (señal digital), las cuales son manejadas por el programa para obtener de manera directa los picos de cada uno de los componentes.

La segunda parte del programa consta de la cuantificación, aquí se obtienen las áreas correspondientes que son convertidas por el programa en las concentraciones de los componentes individuales de la gasolina proporcionadas en % peso y % volumen. El programa es capaz de reunir esta información en grupos de familia de Parafinas, Isoparafinas, Olefinas, Naftenos y Aromáticos a la que pertenece cada uno de los compuestos resultantes, así como el reporte del número de octano (RON) que contenga la muestra analizada.

A continuación se presentan los resultados finales de las muestras B, C y D, como lo reporta el programa desarrollado en el presente trabajo. Los cromatogramas correspondientes se mostraron en el capítulo anterior.

Estos resultados son útiles para las diferentes áreas de proceso en donde se están obteniendo los diferentes tipos de gasolinas (las cuales vimos en el capítulo I*), para optimizar sus procesos de acuerdo a sus expectativas. También son útiles para las áreas de protección ambiental, en las cuales se formulan los nuevos tipos de gasolinas mejoradas que van a salir al mercado, con el objeto de disminuir los compuestos que son nocivos para el ser humano y eliminar los que reaccionan en la atmósfera con la luz ultravioleta y que son los precursores del ozono, también dañinos para la salud.

Todo esto para cumplir con las normas internacionales respecto a la protección ambiental y al desarrollo de nuevas técnicas de eliminación de los componentes nocivos, por ejemplo, los molles catalíticos.

* Véase tema 3.4. Procesos de obtención de las gasolinas

GERENCIA DE LABORATORIO CENTRAL
 DIVISION DE ESTRUCTURAS QUIMICAS
 LABORATORIO DE CROMATOGRAFIA
 INFORME DE RESULTADOS

REGISTRO(S): CR-3790B FECHA: 3/09/98
 FECHA DE RECEPCION: 21/08/98
 PROCEDENCIA: AREA DE MOTOQUIMIA
 SOLICITANTE: ING. MARIO VERA
 PROYECTO: D0D-0224
 DESCRIPCION DE LA MUESTRA: GASOLINA PREMIUM
 METODO EMPLEADO: IMP-QA-305

ANALISIS POR COMPONENTE PIONA

	% PESO	% VOL.
TOTAL P	7.15	8.39
TOTAL I	38.86	42.56
TOTAL O	3.88	4.28
TOTAL N	5.32	5.13
TOTAL A	34.61	29.69
PESADOS	1.05	0.97
NO IDEN	0.59	0.59
MTBE	8.25	8.11
TAME	0.30	0.29
TOTAL	100.00	100.00

	PARAFINAS		ISOPARAFINAS		OLEFINAS		NAFTENOS		AROMATICOS	
	%PESO	%VOL.	%PESO	%VOL.	%PESO	%VOL.	%PESO	%VOL.	%PESO	%VOL.
C1	0.00	0.00								
C2	0.00	0.00								
C3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00				
C4	2.39	3.05	0.15	0.20	0.19	0.23				
C5	2.12	2.50	8.05	9.60	1.86	2.08	0.23	0.23		
C6	1.06	1.19	5.47	6.15	0.98	1.07	0.85	0.84	0.74	0.62
C7	0.48	0.52	3.52	3.84	0.62	0.66	0.71	0.69	12.18	10.41
C8	0.35	0.36	17.11	18.12	0.09	0.10	0.70	0.67	8.32	7.11
C9	0.28	0.29	2.66	2.74	0.06	0.06	2.66	2.55	8.64	7.37
C10	0.26	0.26	0.55	0.57	0.07	0.07	0.17	0.16	3.48	3.11
C11	0.14	0.14	0.67	0.67	0.00	0.00	0.00	0.00	1.19	1.01
C12	0.08	0.08	0.69	0.68	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.05
C13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TOT=	7.15	8.39	38.86	42.56	3.88	4.28	5.32	5.13	34.61	29.69

PESADOS = 1.05 0.97
 NO IDENTIFICADOS = 0.59 0.59

OBSERVACIONES: EL BENCENO COELUYE CON OTRO COMPONENTE
 ANALIZO:

I. Q. ANTONIO BADILLO G.
 JEFE DE LABORATORIO

Q. MIGUEL ANGEL FLORES R.
 JEFE DE DIVISION

ESTE DOCUMENTO SOLO PUEDE REPRODUCIRSE EN SU TOTALIDAD Y NO PARCIALMENTE

Muestra: GASOLINA PREMIUM

NOMBRE	\$/PESO	\$/VOL.
ISOBUTANO	0.15	0.20
BUTENO-1+ISOBUTILENO	0.04	0.05
13-BUTADIENO	0.01	0.01
BUTANO NORMAL	2.39	3.05
TRANSBUTENO-2	0.07	0.08
22-DIMETILPROPANO	0.03	0.04
CISBUTENO-2	0.08	0.09
3-METILBUTENO-1	0.05	0.06
ISOPENTANO	8.05	9.60
PENTENO-1	0.15	0.17
2-METILBUTENO-1	0.29	0.33
PENTANO NORMAL	2.08	2.46
ISOPRENO	0.01	0.01
TRANSPENTENO	0.40	0.46
CISPENTENO	0.21	0.24
2-METILBUTENO-2	0.60	0.67
t-13-PENTADIENO	0.03	0.03
c-13-PENTADIENO	0.01	0.01
22-DIMETILBUTANO	0.31	0.36
CICLOPENTENO	0.10	0.09
CICLOPENTANO	0.23	0.23
23-DIMETILBUTANO	1.33	1.48
2-METILPENTANO	2.39	2.71
3-METILPENTANO	1.44	1.60
OLEFINAS C6	0.98	1.07
HEXANO NORMAL	1.06	1.19
22-DIMETILPENTANO	0.17	0.19
METILCICLOPENTANO	0.75	0.74
24-DIMETILPENTANO	0.93	1.03
223-TRIMETILBUTANO	0.06	0.06
BENCENO	0.74	0.62
33-DIMETILPENTANO	0.04	0.05
CICLOHEXANO	0.10	0.09
2-METILHEXANO	1.45	1.58
11-DIMETILCICLOPENTANO	0.02	0.02
3-METILHEXANO	0.70	0.75
c-13-DIMETILCICLOPENTANO	0.17	0.17
t-13-DIMETILCICLOPENTANO	0.14	0.13
3-ETILPENTANO	0.17	0.18
224-TRIMETILPENTANO	9.47	10.14
OLEFINAS C7	0.62	0.66
HEPTANO NORMAL	0.48	0.52
METILCICLOHEXANO	0.30	0.29
22-DIMETILHEXANO	0.03	0.03
ETILCICLOPENTANO	0.09	0.08
25-DIMETILHEXANO	1.50	1.61
24-DIMETILHEXANO	1.05	1.11
t-c-124-TRIMETILCICLOPENTANO	0.05	0.05
33-DIMETILHEXANO	0.02	0.02
t-c-123-TRIMETILCICLOPENTANO	0.02	0.02

Muestra: GASOLINA PREMIUM

NOMBRE	%PESO	%VOL.
234-TRIMETILPENTANO	4.05	4.18
TOLUENO	12.18	10.41
c-t-124-TRIMETILCICLOPENTANO	0.03	0.03
23-DIMETILHEPTANO	0.99	1.02
2-METILHEPTANO	0.31	0.33
4-METILHEPTANO	0.21	0.22
34-DIMETILHEXANO	0.09	0.10
3-METILHEPTANO	0.37	0.39
c-13-DIMETILCICLOHEXANO	0.09	0.08
t-14-DIMETILCICLOHEXANO	0.02	0.02
2244-TETRAMETILPENTANO	0.90	0.93
c-1-ETIL-3-METILCICLOPENTANO	0.05	0.05
t-1-ETIL-2-METILCICLOPENTANO	0.04	0.03
t-12-DIMETILCICLOHEXANO	0.01	0.01
c-c-123-TRIMETILCICLOPENTANO	0.05	0.04
OLEFINAS C8	0.09	0.10
OCTANO NORMAL	0.35	0.36
NAFTENO C8	0.02	0.02
244-TRIMETILHEXANO	0.03	0.03
ISOPROPILCICLOPENTANO	0.05	0.05
2-METIL-4-ETILHEXANO	0.01	0.01
c-1-ETIL-2-METILCICLOPENTANO	0.13	0.13
22-DIMETILHEPTANO	0.02	0.02
c-12-DIMETILCICLOHEXANO	0.06	0.06
N-PROPILCICLOPENTANO	0.08	0.07
26-DIMETILHEPTANO	0.07	0.06
113-TRIMETILCICLOHEXANO	0.04	0.04
35-DIMETILHEPTANO	0.13	0.13
233-TRIMETILHEXANO	0.02	0.02
ETILBENCENO	1.42	1.21
234-TRIMETILHEXANO	0.03	0.03
META-XILENO	3.47	2.98
PARA-XILENO	1.40	1.20
34-DIMETILHEPTANO D/L	0.01	0.02
NAFTENO C9	0.01	0.01
23-DIMETIL-3-ETILPENTANO	0.03	0.03
4-METILOCTANO	0.10	0.11
2-METILOCTANO	0.13	0.14
3-ETILHEPTANO	0.03	0.03
3-METILOCTANO	0.16	0.17
t-c-124-TRIMETILCICLOHEXANO	2.03	1.95
ORTO-XILENO	2.03	1.71
c-c-124-TRIMETILCICLOHEXANO	0.13	0.13
1-METIL-2-PROPILCICLOPENTANO	0.03	0.03
c-1-ETIL-3-METILCICLOHEXANO	0.04	0.03
t-1-ETIL-4-METILCICLOHEXANO	0.11	0.10
ISOBUTILCICLOPENTANO	0.02	0.02
OLEFINAS C9	0.06	0.06
NAFTENO C9	0.01	0.01
NONANO NORMAL	0.28	0.29

Muestra: GASOLINA PREMIUM

NOMBRE	%PESO	%VOL.
OLEFINA C10	0.07	0.07
t-1-ETIL-3-METILCICLOHEXANO	0.03	0.03
1-METIL-1-ETILCICLOHEXANO	0.01	0.01
ISOPROPILBENCENO	0.14	0.12
PARAFINA C10	0.02	0.02
SECBUTILCICLOPENTANO	0.01	0.01
ISOPROPILCICLOHEXANO	0.05	0.05
22-DIMETILOCTANO	0.03	0.03
PARAFINA C10	0.02	0.03
35-DIMETILOCTANO D/L	0.03	0.03
NAFTENO C9	0.06	0.06
N-BUTILCICLOPENTANO	0.06	0.06
N-PROPILBENCENO	0.50	0.43
33-DIMETILOCTANO	0.03	0.03
META-ETILTOLUENO	1.80	1.52
PARA-ETILTOLUENO	0.80	0.68
135-TRIMETILBENCENO	0.89	0.76
5-METILNONANO	0.06	0.06
4-ETILOCTANO	0.27	0.27
ORTO-ETILTOLUENO	0.73	0.62
3-ETILOCTANO	0.02	0.02
3-METILNONANO	0.08	0.08
124-TRIMETILBENCENO	3.04	2.59
ISOBUTILCICLOHEXANO	0.01	0.01
NAFTENO C10	0.01	0.01
ISOBUTILBENCENO	0.07	0.06
DECANO NORMAL	0.26	0.26
123-TRIMETILBENCENO	0.74	0.66
PARAFINA C11	0.03	0.03
1-METIL-3-ISOPROPILBENCENO	0.04	0.04
PARAFINA C11	0.30	0.30
SECCBUTILCICLOHEXANO	0.05	0.04
1-METIL-2-ISOPROPILBENCENO	0.26	0.23
NAFTENO C10	0.10	0.10
13-DIETILBENCENO	0.14	0.13
1-METIL-3PROPILBENCENO	0.57	0.49
N-BUTILBENCENO	0.32	0.27
13-DIMETIL-5-ETILBENCENO	0.35	0.33
12-DIETILBENCENO	0.05	0.04
1-METIL-2PROPILBENCENO	0.15	0.13
PARAFINA C11	0.23	0.23
4-METILDECANO	0.11	0.12
14-DIMETIL-2-ETILBENCENO	0.25	0.23
13-DIMETIL-4-ETILBENCENO	0.41	0.39
12-DIMETIL-4-ETILBENCENO	0.04	0.04
1-METIL-4-TERBUTILBENCENO	0.47	0.40
13-DIMETIL-2-ETILBENCENO	0.19	0.18
AROMATICO C11	0.03	0.03
PARAFINA C12	0.09	0.09
12-DIMETIL-3-ETILBENCENO	0.12	0.12

Muestra: GASOLINA PREMIUM

NOMBRE	% PESO	% VOL.
UNDECANO NORMAL	0.14	0.14
1245-TETRAMETILBENCENO	0.22	0.19
1235-TETRAMETILBENCENO	0.30	0.26
AROMATICO C11	0.03	0.03
PARAFINA C12	0.16	0.16
AROMATICO C11	0.04	0.04
PARAFINA C12	0.06	0.06
AROMATICO C11	0.06	0.05
AROMATICO C11	0.17	0.14
PENTILBENCENO	0.18	0.15
AROMATICO C11	0.05	0.04
13-DIMETIL-5-TERBUTILBENCENO	0.06	0.05
PARAFINA C12	0.27	0.26
AROMATICO C11	0.02	0.01
PARAFINA C12	0.05	0.05
AROMATICO C11	0.06	0.05
PARAFINA C12	0.02	0.02
AROMATICO C11	0.09	0.08
PARAFINA C12	0.03	0.03
DODECANO NORMAL	0.08	0.08
PESADOS	1.05	0.97
NO IDENTIFICADOS	0.59	0.59
MTBE	8.25	8.11
TAME	0.30	0.29

% EN PESO	% VOLUMEN
100.00	100.00

REPORTE DE RON

MUESTRA: GASOLINA PREMIUM

FECHA: 3/09/98

GRUPO =====	RESULTADO =====
1	0.20
2	2.11
3	0.33
4	6.76
5	0.88
6	1.42
7	3.07
8	3.32
9	0.94
10	0.22
11	1.82
12	0.77
13	0.16
14	1.74
15	10.33
16	-0.23
17	4.44
18	13.87
19	1.17
20	0.50
21	1.77
22	0.04
23	0.63
24	1.74
25	0.01
26	4.97
27	1.85
28	2.51
29	0.24
30	10.19
31	14.82

TOTAL RON = 92.6
=====

GERENCIA DE LABORATORIO CENTRAL
 DIVISION DE ESTRUCTURAS QUIMICAS
 LABORATORIO DE CROMATOGRAFIA
 INFORME DE RESULTADOS

REGISTRO(S): CR-3790C FECHA: 3/09/98
 FECHA DE RECEPCION: 21/08/98
 PROCEDENCIA: AREA DE MOTOQUIMIA
 SOLICITANTE: ING. MARIO VERA
 PROYECTO: DOD-0224
 DESCRIPCION DE LA MUESTRA: GASOLINA PREMIUM
 METODO EMPLEADO: IMP-QA-305

ANALISIS POR COMPONENTE PIONA

	% PESO	% VOL.
TOTAL P	7.45	8.73
TOTAL I	40.21	43.94
TOTAL O	4.00	4.40
TOTAL N	3.33	3.21
TOTAL A	34.73	29.69
PESADOS	0.78	0.71
NO IDEN	0.51	0.50
MTBE	8.68	8.51
TAME	0.31	0.30
TOTAL	100.00	100.00

	PARAFINAS		ISOPARAFINAS		OLEFINAS		NAFTENOS		AROMATICOS	
	%PESO	%VOL.	%PESO	%VOL.	%PESO	%VOL.	%PESO	%VOL.	%PESO	%VOL.
C1	0.00	0.00								
C2	0.00	0.00								
C3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00				
C4	2.50	3.18	0.16	0.20	0.20	0.24				
C5	2.23	2.63	8.48	10.08	1.95	2.18	0.24	0.24		
C6	1.11	1.24	5.74	6.44	0.96	1.05	0.89	0.87	0.77	0.65
C7	0.50	0.54	3.71	4.03	0.65	0.69	0.73	0.71	12.52	10.67
C8	0.37	0.39	17.67	18.66	0.08	0.08	0.71	0.68	8.38	7.13
C9	0.28	0.29	2.62	2.70	0.10	0.10	0.60	0.58	8.53	7.26
C10	0.25	0.26	0.53	0.54	0.07	0.07	0.15	0.14	3.32	2.96
C11	0.14	0.14	0.65	0.65	0.00	0.00	0.00	0.00	1.15	0.97
C12	0.07	0.07	0.65	0.64	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.05
C13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TOT=	7.45	8.73	40.21	43.94	4.00	4.40	3.33	3.21	34.73	29.69

PESADOS = 0.78 0.71
 NO IDENTIFICADOS = 0.51 0.50

OBSERVACIONES: EL BENCENO COELUYE CON OTRO COMPONENTE
 ANALIZO:

I.Q. ANTONIO BADILLO G.

Q. MIGUEL ANGEL FLORES R.

JEFE DE LABORATORIO

JEFE DE DIVISION

ESTE DOCUMENTO SOLO PUEDE REPRODUCIRSE EN SU TOTALIDAD Y NO PARCIALMENTE

Muestra: GASOLINA PREMIUM

NOMBRE	%PESO	%VOL.
ISOBUTANO	0.16	0.20
BUTENO-1+ISOBUTILENO	0.04	0.05
BUTANO NORMAL	2.50	3.18
TRANSBUTENO-2	0.07	0.09
22-DIMETILPROPANO	0.03	0.04
CISBUTENO-2	0.08	0.10
3-METILBUTENO-1	0.06	0.07
ISOPENTANO	8.48	10.08
PENTENO-1	0.16	0.18
2-METILBUTENO-1	0.31	0.35
PENTANO NORMAL	2.20	2.59
ISOPRENO	0.01	0.02
TRANSPENTENO	0.42	0.48
CISPENTENO	0.22	0.25
2-METILBUTENO-2	0.63	0.70
t-13-PENTADIENO	0.02	0.02
c-13-PENTADIENO	0.01	0.01
22-DIMETILBUTANO	0.33	0.38
CICLOPENTENO	0.10	0.10
CICLOPENTANO	0.24	0.24
23-DIMETILBUTANO	1.39	1.56
2-METILPENTANO	2.51	2.83
3-METILPENTANO	1.51	1.67
OLEFINAS C6	0.96	1.05
HEXANO NORMAL	1.11	1.24
22-DIMETILPENTANO	0.18	0.20
METILCICLOPENTANO	0.79	0.77
24-DIMETILPENTANO	0.98	1.07
223-TRIMETILBUTANO	0.06	0.06
BENCENO	0.77	0.65
33-DIMETILPENTANO	0.04	0.05
CICLOHEXANO	0.10	0.10
2-METILHEXANO	1.51	1.64
11-DIMETILCICLOPENTANO	0.02	0.02
3-METILHEXANO	0.76	0.82
c-13-DIMETILCICLOPENTANO	0.17	0.17
t-13-DIMETILCICLOPENTANO	0.14	0.13
3-ETILPENTANO	0.17	0.19
224-TRIMETILPENTANO	9.79	10.45
OLEFINAS C7	0.65	0.69
HEPTANO NORMAL	0.50	0.54
METILCICLOHEXANO	0.31	0.30
22-DIMETILHEXANO	0.03	0.03
ETILCICLOPENTANO	0.09	0.08
25-DIMETILHEXANO	1.55	1.65
24-DIMETILHEXANO	1.09	1.14
t-c-124-TRIMETILCICLOPENTANO	0.05	0.05
33-DIMETILHEXANO	0.02	0.02
t-c-123-TRIMETILCICLOPENTANO	0.03	0.03
234-TRIMETILPENTANO	4.18	4.30

Muestra: GASOLINA PREMIUM

NOMBRE	%PESO	%VOL.
TOLUENO	12.52	10.67
c-t-124-TRIMETILCICLOPENTANO	0.03	0.03
23-DIMETILHEPTANO	1.01	1.04
2-METILHEPTANO	0.32	0.34
4-METILHEPTANO	0.22	0.23
34-DIMETILHEXANO	0.09	0.10
3-METILHEPTANO	0.38	0.40
c-13-DIMETILCICLOHEXANO	0.11	0.10
2244-TETRAMETILPENTANO	0.92	0.94
c-1-ETIL-3-METILCICLOPENTANO	0.05	0.05
t-1-ETIL-2-METILCICLOPENTANO	0.03	0.03
t-12-DIMETILCICLOHEXANO	0.01	0.01
c-c-123-TRIMETILCICLOPENTANO	0.06	0.05
OLEFINAS C8	0.08	0.08
OCTANO NORMAL	0.37	0.39
NAFTENO C8	0.02	0.02
244-TRIMETILHEXANO	0.03	0.03
ISOPROPILCICLOPENTANO	0.05	0.05
c-1-ETIL-2-METILCICLOPENTANO	0.14	0.13
22-DIMETILHEPTANO	0.02	0.02
c-12-DIMETILCICLOHEXANO	0.06	0.06
N-PROPILCICLOPENTANO	0.07	0.07
113-TRIMETILCICLOHEXANO	0.04	0.04
35-DIMETILHEPTANO	0.13	0.13
233-TRIMETILHEXANO	0.02	0.02
ETILBENCENO	1.44	1.22
234-TRIMETILHEXANO	0.03	0.03
META-XILENO	3.44	2.94
PARA-XILENO	1.46	1.26
34-DIMETILHEPTANO D/L	0.01	0.01
NAFTENO C9	0.01	0.01
23-DIMETIL-3-ETILPENTANO	0.03	0.03
4-METILOCTANO	0.10	0.10
2-METILOCTANO	0.13	0.14
3-ETILHEPTANO	0.03	0.03
3-METILOCTANO	0.16	0.17
ORTO-XILENO	2.05	1.72
c-c-124-TRIMETILCICLOHEXANO	0.13	0.13
1-METIL-2-PROPILCICLOPENTANO	0.03	0.03
c-1-ETIL-3-METILCICLOHEXANO	0.04	0.03
t-1-ETIL-4-METILCICLOHEXANO	0.11	0.10
ISOBUTILCICLOPENTANO	0.02	0.02
OLEFINAS C9	0.10	0.10
NAFTENO C9	0.01	0.01
NONANO NORMAL	0.28	0.29
OLEFINA C10	0.07	0.07
t-1-ETIL-3-METILCICLOHEXANO	0.03	0.03
1-METIL-1-ETILCICLOHEXANO	0.01	0.01
ISOPROPILBENCENO	0.13	0.11
ISOPROPILCICLOHEXANO	0.05	0.04

Muestra: GASOLINA PREMIUM

NOMBRE	%PESO	%VOL.
22-DIMETILOCTANO	0.03	0.03
PARAFINA C10	0.03	0.03
35-DIMETILOCTANO D/L	0.03	0.03
NAFTENO C9	0.06	0.06
N-BUTILCICLOPENTANO	0.06	0.06
N-PROPILBENCENO	0.49	0.42
33-DIMETILOCTANO	0.03	0.03
META-ETILTOLUENO	1.78	1.51
PARA-ETILTOLUENO	0.80	0.67
135-TRIMETILBENCENO	0.88	0.75
5-METILNONANO	0.06	0.06
4-ETILOCTANO	0.26	0.27
ORTO-ETILTOLUENO	0.73	0.61
3-ETILOCTANO	0.02	0.02
3-METILNONANO	0.08	0.08
124-TRIMETILBENCENO	3.00	2.55
ISOBUTILCICLOHEXANO	0.01	0.01
ISOBUTILBENCENO	0.07	0.06
DECANO NORMAL	0.25	0.26
123-TRIMETILBENCENO	0.73	0.64
PARAFINA C11	0.03	0.03
1-METIL-3-ISOPROPILBENCENO	0.04	0.04
PARAFINA C11	0.29	0.29
SECCBUTILCICLOHEXANO	0.05	0.04
1-METIL-2-ISOPROPILBENCENO	0.25	0.22
NAFTENO C10	0.09	0.08
13-DIETILBENCENO	0.13	0.12
1-METIL-3PROPILBENCENO	0.55	0.47
N-BUTILBENCENO	0.30	0.26
13-DIMETIL-5-ETILBENCENO	0.34	0.32
12-DIETILBENCENO	0.04	0.04
1-METIL-2PROPILBENCENO	0.12	0.10
PARAFINA C11	0.22	0.22
4-METILDECANO	0.11	0.11
14-DIMETIL-2-ETILBENCENO	0.24	0.22
13-DIMETIL-4-ETILBENCENO	0.40	0.37
12-DIMETIL-4-ETILBENCENO	0.04	0.04
1-METIL-4-TERBUTILBENCENO	0.45	0.38
13-DIMETIL-2-ETILBENCENO	0.18	0.17
AROMATICO C11	0.03	0.03
PARAFINA C12	0.09	0.09
12-DIMETIL-3-ETILBENCENO	0.12	0.11
UNDECANO NORMAL	0.14	0.14
1245-TETRAMETILBENCENO	0.21	0.18
1235-TETRAMETILBENCENO	0.29	0.25
AROMATICO C11	0.03	0.03
PARAFINA C12	0.15	0.15
AROMATICO C11	0.04	0.03
PARAFINA C12	0.06	0.06
AROMATICO C11	0.05	0.05

Hoja: 4

Muestra: GASOLINA PREMIUM

NOMBRE	% PESO	% VOL.
AROMATICO C11	0.16	0.14
PENTILBENCENO	0.17	0.15
AROMATICO C11	0.05	0.04
13-DIMETIL-5-TERBUTILBENCENO	0.06	0.05
PARAFINA C12	0.25	0.25
AROMATICO C11	0.01	0.01
PARAFINA C12	0.05	0.05
AROMATICO C11	0.06	0.05
PARAFINA C12	0.02	0.02
AROMATICO C11	0.09	0.07
PARAFINA C12	0.03	0.03
DODECANO NORMAL	0.07	0.07
PESADOS	0.78	0.71
NO IDENTIFICADOS	0.51	0.50
MTBE	8.68	8.51
TAME	0.31	0.30

% EN PESO	% VOLUMEN
-----	-----
100.00	100.00
-----	-----

REPORTE DE RON

MUESTRA: GASOLINA PREMIUM

FECHA: 3/09/98

GRUPO =====	RESULTADO =====
1	0.20
2	2.20
3	0.36
4	7.12
5	0.93
6	1.49
7	3.23
8	3.48
9	0.92
10	0.23
11	1.90
12	0.81
13	0.17
14	1.84
15	10.70
16	-0.24
17	4.58
18	14.26
19	1.19
20	0.51
21	1.80
22	0.04
23	0.57
24	1.76
25	0.01
26	5.00
27	0.35
28	2.53
29	0.25
30	10.04
31	14.64

TOTAL RON = 92.8
=====

GERENCIA DE LABORATORIO CENTRAL
 DIVISION DE ESTRUCTURAS QUIMICAS
 LABORATORIO DE CROMATOGRAFIA
 INFORME DE RESULTADOS

REGISTRO(S): CR-3790D FECHA: 3/09/98
 FECHA DE RECEPCION: 21/08/98
 PROCEDENCIA: AREA DE MOTOQUIMIA
 SOLICITANTE: ING. MARIO VERA
 PROYECTO: DOD-0224
 DESCRIPCION DE LA MUESTRA: GASOLINA PREMIUM
 METODO EMPLEADO: IMP-QA-305

ANALISIS POR COMPONENTE PIONA

	% PESO	% VOL.
TOTAL P	7.37	8.64
TOTAL I	40.08	43.83
TOTAL O	3.95	4.36
TOTAL N	3.30	3.20
TOTAL A	35.00	29.95
PESADOS	0.89	0.81
NO IDEN	0.44	0.43
MTBE	8.65	8.49
TAME	0.31	0.30
TOTAL	100.00	100.00

	PARAFINAS		ISOPARAFINAS		OLEFINAS		NAPTENOS		AROMATICOS	
	%PESO	%VOL.	%PESO	%VOL.	%PESO	%VOL.	%PESO	%VOL.	%PESO	%VOL.
C1	0.00	0.00								
C2	0.00	0.00								
C3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00				
C4	2.44	3.11	0.15	0.20	0.19	0.23				
C5	2.22	2.61	8.40	9.99	1.93	2.16	0.24	0.24		
C6	1.10	1.24	5.71	6.41	1.02	1.12	0.89	0.87	0.77	0.65
C7	0.50	0.54	3.68	4.00	0.67	0.70	0.74	0.72	12.51	10.67
C8	0.37	0.39	17.63	18.63	0.07	0.08	0.69	0.66	8.47	7.22
C9	0.28	0.29	2.67	2.75	0.00	0.00	0.60	0.57	8.58	7.31
C10	0.25	0.26	0.54	0.55	0.07	0.07	0.15	0.14	3.46	3.08
C11	0.13	0.13	0.66	0.66	0.00	0.00	0.00	0.00	1.15	0.98
C12	0.08	0.08	0.65	0.64	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.05
C13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TOT=	7.37	8.64	40.08	43.83	3.95	4.36	3.30	3.20	35.00	29.95

PESADOS = 0.89 0.81
 NO IDENTIFICADOS = 0.44 0.43

OBSERVACIONES: EL BENCENO COELUYE CON OTRO COMPONENTE ANALIZO:

I.Q. ANTONIO BADILLO G.
 JEFE DE LABORATORIO

Q. MIGUEL ANGEL FLORES R.
 JEFE DE DIVISION

ESTE DOCUMENTO SOLO PUEDE REPRODUCIRSE EN SU TOTALIDAD Y NO PARCIALMENTE

Hoja: 1

Muestra: GASOLINA PREMIUM

NOMBRE	%PESO	%VOL.
ISOBUTANO	0.15	0.20
BUTENO-1+ISOBUTILENO	0.04	0.05
BUTANO NORMAL	2.44	3.11
TRANSBUTENO-2	0.07	0.09
22-DIMETILPROPANO	0.03	0.04
CISBUTENO-2	0.08	0.10
3-METILBUTENO-1	0.06	0.07
ISOPENTANO	8.40	9.99
PENTENO-1	0.16	0.18
2-METILBUTENO-1	0.31	0.35
PENTANO NORMAL	2.18	2.57
ISOPRENO	0.02	0.02
TRANSPENTENO	0.42	0.48
CISPENTENO	0.23	0.25
2-METILBUTENO-2	0.63	0.70
c-13-PENTADIENO	0.01	0.01
22-DIMETILBUTANO	0.32	0.37
CICLOPENTENO	0.10	0.09
CICLOPENTANO	0.24	0.24
23-DIMETILBUTANO	1.39	1.55
2-METILPENTANO	2.50	2.82
3-METILPENTANO	1.50	1.67
OLEFINAS C6	1.02	1.12
HEXANO NORMAL	1.10	1.24
22-DIMETILPENTANO	0.18	0.20
METILCICLOPENTANO	0.79	0.78
24-DIMETILPENTANO	0.97	1.07
223-TRIMETILBUTANO	0.07	0.08
BENCENO	0.77	0.65
33-DIMETILPENTANO	0.04	0.05
CICLOHEXANO	0.10	0.10
2-METILHEXANO	1.51	1.64
11-DIMETILCICLOPENTANO	0.02	0.02
3-METILHEXANO	0.73	0.78
c-13-DIMETILCICLOPENTANO	0.18	0.17
t-13-DIMETILCICLOPENTANO	0.14	0.13
3-ETILPENTANO	0.17	0.19
224-TRIMETILPENTANO	9.79	10.45
OLEFINAS C7	0.67	0.70
HEPTANO NORMAL	0.50	0.54
METILCICLOHEXANO	0.31	0.30
22-DIMETILHEXANO	0.03	0.03
ETILCICLOPENTANO	0.09	0.09
25-DIMETILHEXANO	1.55	1.65
24-DIMETILHEXANO	1.09	1.15
t-c-124-TRIMETILCICLOPENTANO	0.05	0.05
33-DIMETILHEXANO	0.02	0.02
t-c-123-TRIMETILCICLOPENTANO	0.02	0.02
234-TRIMETILPENTANO	4.16	4.28
TOLUENO	12.51	10.67

Muestra: GASOLINA PREMIUM

NOMBRE	%PESO	%VOL.
c-t-124-TRIMETILCICLOPENTANO	0.02	0.01
23-DIMETILHEPTANO	1.01	1.04
2-METILHEPTANO	0.31	0.33
4-METILHEPTANO	0.21	0.22
34-DIMETILHEXANO	0.09	0.10
3-METILHEPTANO	0.38	0.40
c-13-DIMETILCICLOHEXANO	0.09	0.08
t-14-DIMETILCICLOHEXANO	0.02	0.02
2244-TETRAMETILPENTANO	0.92	0.95
c-1-ETIL-3-METILCICLOPENTANO	0.05	0.05
t-1-ETIL-2-METILCICLOPENTANO	0.04	0.04
t-12-DIMETILCICLOHEXANO	0.01	0.01
c-c-123-TRIMETILCICLOPENTANO	0.06	0.06
OLEFINAS C8	0.07	0.08
OCTANO NORMAL	0.37	0.39
NAFTENO C8	0.02	0.02
244-TRIMETILHEXANO	0.03	0.03
ISOPROPILCICLOPENTANO	0.06	0.05
c-1-ETIL-2-METILCICLOPENTANO	0.13	0.13
22-DIMETILHEPTANO	0.01	0.02
c-12-DIMETILCICLOHEXANO	0.06	0.06
N-PROPILCICLOPENTANO	0.06	0.05
26-DIMETILHEPTANO	0.05	0.05
113-TRIMETILCICLOHEXANO	0.04	0.04
35-DIMETILHEPTANO	0.12	0.13
233-TRIMETILHEXANO	0.02	0.02
ETILBENCENO	1.45	1.24
234-TRIMETILHEXANO	0.03	0.03
META-XILENO	3.48	2.98
PARA-XILENO	1.48	1.27
34-DIMETILHEPTANO D/L	0.01	0.01
NAFTENO C9	0.01	0.01
23-DIMETIL-3-ETILPENTANO	0.03	0.03
4-METILOCTANO	0.10	0.11
2-METILOCTANO	0.14	0.14
3-ETILHEPTANO	0.03	0.03
3-METILOCTANO	0.17	0.17
ORTO-XILENO	2.07	1.74
c-c-124-TRIMETILCICLOHEXANO	0.13	0.13
1-METIL-2-PROPILCICLOPENTANO	0.03	0.03
c-1-ETIL-3-METILCICLOHEXANO	0.04	0.04
t-1-ETIL-4-METILCICLOHEXANO	0.11	0.10
ISOBUTILCICLOPENTANO	0.02	0.01
NAFTENO C9	0.01	0.01
NONANO NORMAL	0.28	0.29
OLEFINA C10	0.07	0.07
t-1-ETIL-3-METILCICLOHEXANO	0.03	0.03
ISOPROPILBENCENO	0.13	0.11
ISOPROPILCICLOHEXANO	0.04	0.04
22-DIMETILOCTANO	0.03	0.03

Muestra: GASOLINA PREMIUM

NOMBRE	%PESO	%VOL.
PARAFINA C10	0.03	0.03
35-DIMETILOCTANO D/L	0.03	0.03
NAFTENO C9	0.06	0.06
N-BUTILCICLOPENTANO	0.06	0.06
N-PROPILBENCENO	0.50	0.43
33-DIMETILOCTANO	0.03	0.03
META-ETILTOLUENO	1.81	1.53
PARA-ETILTOLUENO	0.81	0.68
135-TRIMETILBENCENO	0.89	0.76
5-METILNONANO	0.06	0.06
4-ETILOCTANO	0.26	0.27
ORTO-ETILTOLUENO	0.74	0.62
3-ETILOCTANO	0.02	0.02
3-METILNONANO	0.09	0.09
124-TRIMETILBENCENO	2.96	2.51
ISOBUTILBENCENO	0.07	0.06
DECANO NORMAL	0.25	0.26
123-TRIMETILBENCENO	0.74	0.65
PARAFINA C11	0.03	0.03
1-METIL-3-ISOPROPILBENCENO	0.04	0.04
PARAFINA C11	0.30	0.30
SECCBUTILCICLOHEXANO	0.05	0.04
1-METIL-2-ISOPROPILBENCENO	0.26	0.23
NAFTENO C10	0.10	0.10
13-DIETILBENCENO	0.14	0.13
1-METIL-3PROPILBENCENO	0.57	0.49
N-BUTILBENCENO	0.32	0.28
13-DIMETIL-5-ETILBENCENO	0.35	0.33
12-DIETILBENCENO	0.05	0.04
1-METIL-2PROPILBENCENO	0.15	0.12
PARAFINA C11	0.23	0.22
4-METILDECANO	0.11	0.11
14-DIMETIL-2-ETILBENCENO	0.24	0.23
13-DIMETIL-4-ETILBENCENO	0.41	0.38
12-DIMETIL-4-ETILBENCENO	0.04	0.04
1-METIL-4-TERBUTILBENCENO	0.46	0.39
13-DIMETIL-2-ETILBENCENO	0.18	0.17
AROMATICO C11	0.03	0.03
PARAFINA C12	0.09	0.09
12-DIMETIL-3-ETILBENCENO	0.12	0.11
UNDECANO NORMAL	0.13	0.13
1245-TETRAMETILBENCENO	0.22	0.19
1235-TETRAMETILBENCENO	0.30	0.25
AROMATICO C11	0.03	0.03
PARAFINA C12	0.16	0.15
AROMATICO C11	0.04	0.04
PARAFINA C12	0.06	0.06
AROMATICO C11	0.06	0.05
AROMATICO C11	0.16	0.14
PENTILBENCENO	0.18	0.15

Muestra: GASOLINA PREMIUM

NOMBRE	% PESO	% VOL.
AROMATICO C11	0.05	0.04
13-DIMETIL-5-TERBUTILBENCENO	0.06	0.05
PARAFINA C12	0.26	0.25
PARAFINA C12	0.02	0.02
AROMATICO C11	0.05	0.04
PARAFINA C12	0.02	0.02
AROMATICO C11	0.09	0.07
PARAFINA C12	0.03	0.03
DODECANO NORMAL	0.08	0.08
PESADOS	0.89	0.81
NO IDENTIFICADOS	0.44	0.43
MTBE	8.65	8.49
TAME	0.31	0.30
	% EN PESO	% VOLUMEN
	-----	-----
	100.00	100.00
	-----	-----

REPORTE DE RON

MUESTRA: GASOLINA PREMIUM

FECHA: 3/09/98

GRUPO	RESULTADO
=====	=====
1	0.20
2	2.15
3	0.35
4	7.05
5	0.93
6	1.48
7	3.19
8	3.46
9	0.98
10	0.23
11	1.91
12	0.81
13	0.17
14	1.80
15	10.70
16	-0.24
17	4.57
18	14.25
19	1.17
20	0.50
21	1.80
22	0.04
23	0.58
24	1.78
25	0.01
26	5.05
27	0.36
28	2.56
29	0.22
30	10.06
31	14.80

TOTAL RON = 92.9
=====

CONCLUSIONES

Se logró el objetivo principal de ésta tesis que es el de desarrollar un programa capaz de identificar y cuantificar los componentes de la gasolina separados por cromatografía de gases.

Indirectamente se cumplió con otros objetivos secundarios como la aplicación de este tipo de información que nos permita la identificación y cuantificación de los componentes de una gasolina, analizada por cromatografía de gas, en equipos que no están acoplados a las computadoras, por ser estos cromatógrafos de generaciones pasadas y en donde la actualización realizada por el personal especializado resulta demasiado costosa.

El trabajo de desarrollar un software para esta aplicación en la cromatografía de gases resultó ser todo un reto ya que es una técnica de la química analítica desconocida para un Ingeniero en Computación, pero no lo suficiente como para no poder aplicar las herramientas y beneficios de la computación.

El químico analista necesita del auxilio y conocimientos de computación, ya que sin la ayuda de estos, su trabajo les resultaría bastante difícil.

En esta tesis se da una reseña sobre los inicios y fundamentos de la cromatografía de gases, el funcionamiento del equipo cromatográfico, las características y los procesos de obtención de las gasolinas, así como una explicación detallada de lo que realiza el programa de computación.

La utilidad de este programa de computación es la aplicación en aquellos equipos de cromatografía de fabricación un tanto obsoleta, ya que permitirá analizar los componentes de cualquier muestra de gasolina con la misma rapidez y eficiencia que en un equipo que tenga un software actualizado, ya que no resulta económicamente viable contar con un software nuevo de fábrica para este tipo de equipos. La implementación de este software traerá muchos beneficios en ahorro de tiempo y esfuerzos al aplicarse.

Por lo tanto se concluye que:

- El programa identifica uno por uno y en secuencia cada uno de los componentes ó picos que eluyen del cromatógrafo de gases.
- Se logra una gran rapidez y ahorro de tiempo (por parte del analista) en la obtención de los resultados y reporte de la muestra, ya que minimiza el trabajo del operador.
- El programa puede instalarse en PC's que se adapten a equipos cromatográficos que cuenten con las características necesarias para hacer los análisis.

- El programa permite la identificación de los componentes individuales ó por grupos de familias como Parafinas, Isoparafinas, Olefinas, Naftenos y Aromáticos.
- Los resultados se presentan en % peso y % volumen de cada uno de los componentes.
- El programa de computación adicionalmente permite obtener el número de octano (Research Octane Number) en la gasolina, en base a datos individuales de los compuestos de las gasolinas.

Para la aplicación de este programa de computación en un cromatógrafo de gases antigüo se requiere de un estudio complementario de acoplamiento y de compatibilidad, entre el cromatógrafo y la PC que se escoja para hacer los cálculos.

BIBLIOGRAFIA

1. API (American Petroleum Institute)
Technical Data Book - Petroleum Refining
2nd edition, 1971.
2. COLLYER, L. M., HAWKINS, L. H. C. and THOMSON, G. H.
"A Computer-Aided Gas Chromatography Laboratory"
Gas Chromatography 1970, pp. 257-276
London, 1971.
3. DABRIO Bañuis, M. V.; FARRÈ Rius, F.
Cromatografía de gases I
Editorial Alhambra
España, 1979.
4. ETTRE, Leslie S.
"The development of Chromatography"
Analytical Chemistry Appl.
Vol. 43, No. 14, 1971. pp. 21A-31A.
5. Manual de Hewlett Packard
ROWLAND, Fred W.
La práctica de la cromatografía de gases
2ª edición en inglés, 1974 (1ª ed. en español, 1977)
División de Avondale. Hewlett-Packard, Co.
6. *Manual del Análisis Piona*
AC Analytical Controls Inc.
Bensalem, Pennsylvania, USA. January 1991.
7. MEISCH, Arthur J.
Gas chromatography: Evaluation of binary data and characterization of adsorbent properties
Reysselaer Polytechnic Institute
Troy, New York, May, 1973.

8. MORRISON, Robert Thornton; BOYD, Robert Neilson
Organic Chemistry
3rd. edition. New York University
Boston, USA, 1973.
9. NELSON, Wilbur L.
Petroleum Refinery Engineering
International Student Edition, 4th edition
Editorial McGraw-Hill
Kōgakusha, Co. Tokyo, Japan.
10. PECSOK, Robert L.; SHIELDS, L. Donald
Métodos modernos de Análisis Químico
Editorial Limusa
México, 1977.
11. REESE, C. E.
"Chromatographic data acquisition and processing"
Journal of Chromatography Science
Vol. 18, N° 6, 1980. pp. 201-206, 249-257.
12. SCHOMBURG, Gerhard
Gas Chromatography. A practical course
VCH Publishers, Inc.,
New York, N. Y., 1990.
13. SPENCER, W. A. and ROGERS, L. B.
"Algorithm for converting peak detection and tailing into chromatographic information"
Analytical Chemistry Appl.
Vol. 52, N° 6, 1980. pp. 950-959.
14. STOCK, R.
Gas Chromatography 1970
The Institute of Petroleum
London, 1971.
15. TIVIN, Fred
"Routine and Research Compability in Computer Assisted Gas Chromatography"
Journal of Chromatography Science
Vol. 8, N° 1, 1970. pp. 13-19.
16. Varian Chromatography Systems Manual
Introduction to Gas Chromatography
USA, 1996.