

110
2ej.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA



EXAMENES PROFESIONALES
FAC. DE QUÍMICA

ANÁLISIS P.I.A.N.O., DESARROLLO DEL MÉTODO PARA
EL ANÁLISIS DE HIDROCARBUROS. APLICACIÓN A
MUESTRAS DE ALQUILACIÓN DE ISOPARAFINAS Y
BENCENO CON PROPILENO.

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE :

INGENIERO QUÍMICO

PRESENTA :

FILIBERTO MENDOZA RANGEL



265629

México D.F. 1998.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



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).

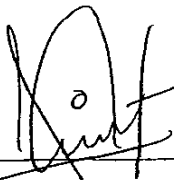
El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición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

Jurado Asignado :

Presidente	Prof. LÓPEZ TORRES ARTURO.
Vocal	Prof. ALCARAZ CIENFUEGOS JORGE.
Secretario	Prof. UGALDE SALDIVAR VÍCTOR MANUEL.
1er. Suplente	Prof. JIMÉNEZ BEDOLLA JUAN CARLOS
2° Suplente	Prof. VARGAS CHAVEZ VÍCTOR MANUEL.

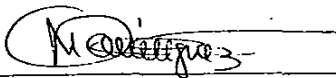
Sito donde se Desarrolló el Tema : Laboratorio de Investigaciones en Procesos,
Lab. 223, Departamento de Ingeniería Química,
Conjunto E, Facultad de Química, U.N.A M.

Asesor del tema :



Dr. JORGE ALCARAZ CIENFUEGOS

Supervisor Técnico :



MIGUEL AGUSTÍN DOMÍNGUEZ B.

Sustentante :



FILIBERTO MENDOZA RANGEL

DEDICATORIAS

ESTA TESIS LA DEDICO ESPECIALMENTE...

A MI MAMÁ :

POR TODO EL CARÍÑO Y APOYO QUE RECIBÍ Y POR SER UNO DE MIS PRINCIPALES MOTTVADORES PARA SEGUIR ADELANTE.

A MIS HERMANOS:

ROBERTO :

QUE CON SU AYUDA, HIZO POSIBLE QUE CONCLUYERA MI FORMACIÓN ACADÉMICA UNIVERSITARIA.

IGNACIO :

POR SUS CONSEJOS Y ENSEÑANZAS QUE CONTRIBUYERON A MI DESARROLLO PERSONAL Y POR SER UN BUEN EJEMPLO A SEGUIR.

MARCOS :

POR QUE TAMBIÉN ESTUVO A MI LADO EN LOS TIEMPOS DIFÍCILES.

ADRIANA Y LETICIA :

POR EL CARÍÑO QUE SIEMPRE ME HAN DADO.

A HAYDAED GÓMEZ :

**QUE CON SU APOYO Y CONSEJOS CONTRIBUYÓ ENORMEMENTE EN EL
DESARROLLO DE NUESTRA TESIS. MUCHAS GRACIAS MOFE.**

A MIS AMIGOS:

**DALIA M. FLORES, DANIEL SÁNCHEZ, ROBERTO RIBERA, ALEJANDRA
TREJO, MONICA VALDÉS, BLANCA DE LA ROSA, Y VERÓNICA GARCÍA.
QUIENES ME BRINDARON UNA AMISTAD SINCERA E INOLVIDABLE.**

**ERICK O. MARTÍNEZ, RAMÓN GARCÍA, ELIAS JUÁREZ.
CON LOS QUE COMPARTÍ MOMENTOS DE ALEGRÍA, ANGUSTIA, Y DE
APRENDIZAJE ACADÉMICO. NO EXISTEN PALABRAS PARA
EXPRESARLES MI CARIÑO.**

A MIS SOBRINOS :

POR TODO EL CARIÑO QUE ME INSPIRAN.

AGRADECIMIENTOS

A TODOS MIS PROFESORES, QUE DESINTERESADAMENTE CONTRIBUYERON EN MI FORMACIÓN ACADÉMICA Y PROFESIONAL, EN ESPECIAL LOS INGENIEROS : ERNESTO RÍOS MONTERO, JOAQUÍN RODRÍGUEZ TORREBLANCA Y RAMÓN RODRÍGUEZ BETANCOURT.

AL DOCTOR JORGE ALCARAZ CIENFUEGOS

POR EL GRAN APOYO RECIBIDO EN EL DESARROLLO DE ESTE TRABAJO

AL MAESTRO EN CIENCIAS MIGUEL AGUSTÍN DOMÍNGUEZ BARRÓN.

POR TODAS LAS OBSERVACIONES, CONSEJOS RECIBIDOS, Y EL TIEMPO DEDICADO A ESTE TRABAJO.

A LOS PROFESORES ARTURO LÓPEZ TORRES Y VÍCTOR MANUEL UGALDE SALDIVAR POR EL TIEMPO DEDICADO EN LA REVISIÓN DE ÉSTE TRABAJO.

	Pág.
INTRODUCCIÓN	1
OBJETIVOS	4
 PRIMERA PARTE : ANTECEDENTES	
CAPÍTULO 1. REFORMULACIÓN DE LAS GASOLINAS EN MÉXICO .	5
1.1 CAMBIOS EN LA COMPOSICIÓN DE LAS GASOLINAS	6
1.2 CORRIENTES DE REFORMULACIÓN	8
1.3 ADITIVOS EMPLEADOS EN LA REFORMULACIÓN	12
1.4 IMPORTANCIA DEL PROCESO DE ALQUILACIÓN DE ISOPARAFINAS CON OLEFINAS LIGERAS EN PRESENCIA DE CATALIZADORES ÁCIDOS SÓLIDOS	14
 CAPÍTULO 2. IMPORTANCIA DE LOS MÉTODOS QUÍMICO- ANALÍTICOS EN LOS PROCESOS QUÍMICOS	16
2.1 EJEMPLOS Y APLICACIONES DE LAS TÉCNICAS QUÍMICO-ANALÍTICAS	16
2.2 MÉTODOS MÁS COMUNES EN EL MERCADO	18
2.3 MÉTODO P.O.N.A.	19
2.4 MÉTODO P.I.A.N.O.	22
 CAPÍTULO 3. CONCEPTOS EN CROMATOGRAFÍA DE GASES	24
3.1 TIEMPO DE RETENCIÓN Y TIEMPO MUERTO	26
3.2 COEFICIENTE DE PARTICIÓN Y RELACIÓN DE PARTICIÓN	27
3.3 NÚMERO DE PLATOS TEÓRICOS EFECTIVOS	28
3.4 RESOLUCIÓN ENTRE PICOS	30
3.5 ÍNDICE DE RETENCIÓN	31
3.6 FACTOR DE RESPUESTA	33

3.7 NÚMERO DE TRENNAHL	36	
3.8 EFICIENCIA DE RECUBRIMIENTO	37	
 SEGUNDA PARTE : DESARROLLO EXPERIMENTAL		
 CAPÍTULO 4. DESARROLLO DEL MÉTODO ANALÍTICO		39
4.1 DESCRIPCIÓN DEL EQUIPO, MEZCLAS Y ESTÁNDARES UTILIZADOS	39	
4.2 SELECCIÓN Y EVALUACIÓN DE LA COLUMNA CROMATOGRÁFICA	43	
4.3 SELECCIÓN Y DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN DEL CROMATÓGRAFO DE GASES	48	
4.4 DETERMINACIÓN DEL VOLUMEN DE INYECCIÓN	51	
4.5 ESTABILIDAD DE LOS ÍNDICES DE RETENCIÓN DE LAS DIFERENTES MEZCLAS	53	
4.5.1 P.I.A.N.O. MEZCLA COMERCIAL	54	
4.5.2 ALQUILADOS	55	
4.5.3 GASOLINAS	55	
4.6 ELABORACIÓN DE LA BASE DE DATOS PARA EL ANÁLISIS DE MUESTRAS DE ALQUILADOS Y GASOLINAS	56	
 CAPÍTULO 5. DESARROLLO DE UN PROGRAMA EN “ LENGUAJE C ” PARA EL MANEJO DE DATOS CROMATOGRÁFICOS PARA EL ANÁLISIS CUALITATIVO Y CUANTITATIVO DE UNA MEZCLA DE HIDROCARBUROS		58
5.1 ALGORITMO DE CÁLCULO	59	
5.2 DIAGRAMA DE FLUJO	61	
5.3 LISTADO	65	
5.4 COMENTARIOS PARA EL MANEJO DEL PROGRAMA	71	

CAPÍTULO 6. APLICACIÓN DEL PROGRAMA DESARROLLADO	72
6.1 ESTÁNDAR P.I.A.N.O	73
6.2 MUESTRAS DE ALQUILADO	79
6.2.1 ISOPENTANO CON PROPILENO	80
6.2.2 BENCENO CON PROPILENO	82
6.3 MUESTRAS COMERCIALES	85
6.3.1 GASOLINA MAGNA SIN	85
6.3.2 GASOLINA PREMIUM	87
6.4 ALQUILADO DE REFINERÍA	88
ANÁLISIS DE RESULTADOS	91
CONCLUSIONES	93
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	95
ANEXO I	100
ANEXO II	110
ANEXO III	119

INTRODUCCIÓN

Uno de los problemas más importantes en nuestro país en los últimos años, ha sido el de la contaminación ambiental causada por el parque vehicular de la ciudad de México; esto se debe a que se emplean gasolinas con especificaciones de calidad fuera de las normas internacionales para las gasolinas modernas, conteniendo compuestos nocivos para la salud y el ambiente, tales como: azufre, benceno y plomo. Por esto el gobierno de México y en particular PEMEX, junto con investigadores de diferentes instituciones del país, están trabajando en nuevos proyectos para reformular las gasolinas, tales que, cumplan o superen las normas internacionales y así contribuir en la reducción de la contaminación del aire y disminuir las importaciones de gasolina de calidad.

Actualmente en el Departamento de Ingeniería Química de la U.N.A.M., se están realizando investigaciones en busca de catalizadores que favorezcan las reacciones de alquilación para proponer alternativas viables de procesos, los cuales inciden directamente en el programa de reformulación de gasolinas.

Los principales objetivos del programa de reformulación son:

- Reducir el contenido de benceno en las gasolinas de reformación.
- Disminuir la concentración de olefinas.
- Producir gasolinas de alto octanaje.
- Disminución de la Presión de Vapor Reid.
- Limitar la concentración de compuestos aromáticos.
- Eliminar el empleo de compuestos de plomo.
- Reducir la cantidad de compuestos orgánicos volátiles.

En estas investigaciones, es fundamental contar con una técnica o sistema de análisis químico que proporcione información confiable acerca de la composición de las mezclas problema, para así, determinar las condiciones de operación más adecuadas del proceso, en las que se obtenga la mayor cantidad de productos deseados y selectividad.

De las técnicas analíticas que existen en el mercado, las mas comunes que se emplean en el análisis de muestras de hidrocarburos son :

- Cromatografía de Gases.
- Cromatografía de Líquidos.
- Espectrometría de Masas.
- Espectroscopia de Infrarrojo.
- Espectroscopia de U.V.
- Resonancia Magnética Nuclear.
- Difracción de Rayos X.
- Absorción Atómica.

de éstas, la que cuenta con mayores ventajas en cuanto a costo de equipo, operación, tiempo de análisis e interpretación de los resultados es la Cromatografía de gases, que en algunos casos se combina con sistemas de Infrarrojo, Rayos X y Masas con el fin de dar mayor veracidad a los resultados.

Dentro de los equipos de cromatografía de gases, existen dos sistemas que se utilizan para el análisis de muestras de hidrocarburos, éstos son: el "Análisis P.O.N.A. (Parafinas, Olefinas, Naftenos, Aromáticos) y el Análisis P.I.A.N.O."(Parafinas, Isoparafinas, Aromáticos, Naftenos, Olefinas) o "Análisis Detallado de Hidrocarburos".

El análisis P.O.N.A. emplea cinco columnas que contienen diferente polaridad en la fase estacionaria, con el fin de evitar la coelución de los componentes de una mezcla y obtener mejor separación e identificación de los mismos. Debido a que en el laboratorio no se cuenta con el equipo necesario para implementar dicho sistema, se decidió desarrollar el Sistema P.I.A.N.O., ya que este último, sólo requiere de una columna capilar y cualquier cromatógrafo que pueda reproducir las condiciones de operación especificadas.

Este trabajo está enfocado a desarrollar un sistema P.I.A.N.O. sencillo, para realizar el análisis cualitativo y cuantitativo de los productos obtenidos en las alquilaciones de isoparafinas y benceno con propileno, y además, de muestras de gasolinas comerciales.

OBJETIVOS

Desarrollar un sistema de análisis analítico eficiente para el análisis cromatográfico de muestras de hidrocarburos ligeros (Alquilados y Gasolinas).

Determinar las condiciones de operación del equipo cromatográfico , así como también la técnica de inyección y método de integración de picos.

Desarrollar una base de datos a partir de muestras estándar, que permita realizar el análisis cualitativo y cuantitativo de los productos de alquilación y de gasolinas comerciales.

Elaborar un programa para computadora en lenguaje C, que procese los resultados generados por el sistema cromatográfico e identifique la mayor cantidad de compuestos posibles de las muestras problema, utilizando las bases de datos desarrolladas.

Determinar la composición cualitativa y cuantitativa de los productos obtenidos en la reacción de alquilación de isopentano con propileno, en presencia del catalizador Amberlyst 15-BF₃ y de la reacción de alquilación de benceno con propileno en presencia del catalizador Amberlyst 15.

PRIMERA PARTE : ANTECEDENTES.

CAPÍTULO 1. REFORMULACIÓN DE LAS GASOLINAS EN MÉXICO.

Como consecuencia de los altos niveles de contaminación en el aire, registrados en el Valle de México, se han desarrollado y aplicado programas de regulación ambiental, los cuales, contemplan la reformulación de las gasolinas con el fin de contribuir en la disminución de la contaminación ambiental.

El programa de reformulación de gasolinas se ha planteado en diferentes etapas, al principio, la formulación sólo se limitaba en satisfacer las especificaciones que los motores de los automóviles de la época requerían, como por ejemplo, que la gasolina contara con el mayor octanaje posible y el menor contenido de azufre, por lo que se adicionaron a las mezclas aditivos cuyos componentes principales son compuestos que contienen plomo, el cual, bien se sabe, es un contaminante de alta peligrosidad por los efectos que causa al hombre y a la naturaleza.

Posteriormente se incluyeron restricciones hacia el contenido de plomo y azufre, debido al aumento gradual de la acidez en la lluvia de la ciudad de México y el daño que ésta causaba a las plantas, animales y mantos acuíferos. Finalmente en los últimos cambios se integró a éstas restricciones al benceno, ya que es un compuesto altamente cancerígeno.

En los últimos años, la gran preocupación por mejorar la calidad del aire, ha conducido al desarrollo e implantación de estudios más completos de las diferentes fuentes de contaminación, sus efectos y posibles mecanismos de solución, con el fin de abatir las emisiones de contaminantes provenientes tanto de fuentes fijas como móviles.

En la actualidad la composición de las mezclas de gasolinas se determina tomando en cuenta los avances tecnológicos de los motores de combustión interna, las condiciones climatológicas, la localización geográfica de cada estado considerando su altitud al nivel del mar, que la cantidad de benceno y otros compuestos sea la mínima posible al igual que el contenido de olefinas, por ser éstas compuestos altamente fotorreactivos que contribuyen a la formación de ozono. Los aspectos anteriores se consideran sin dejar de obtener una mezcla con el mayor octanaje posible y una Presión de Vapor Reid (P.V.R.) que se encuentre dentro de los límites establecidos.

En México ya se está trabajando para emitir normas que regulen la composición de las gasolinas con base en las consideraciones antes mencionadas; para esto, la Secretaría del Medio Ambiente, Recursos Naturales y Pesca, y el Instituto Nacional de Ecología (SEMARNAP e I.N.E. respectivamente), trabajan en coordinación con PEMEX-Refinación y las industrias involucradas, con el objetivo de definir dicha normatividad y las acciones que ayuden a resolver el problema de la contaminación.

Desafortunadamente estos trabajos no se han desarrollado con la suficiente rapidez que se requiere. Se estima que para el año 2000, la legislación nacional en materia de gasolina sea equivalente a la vigente en E.U.A. en los años de 1996 y 1997, pero que es adecuada a la realidad nacional y tomando en cuenta las diferentes zonas del país, como ya lo contiene actualmente la Norma Oficial Mexicana NOM-086-ECOL/94.¹

1.1 CAMBIOS EN LA COMPOSICIÓN DE LAS GASOLINAS.

En forma similar en E.U.A., los cambios en la composición de la gasolina están regidos por diferentes organismos privados y gubernamentales, los cuales desarrollan diferentes estudios de impacto ambiental, climatológicos y geográficos para poder determinar la composición de los combustibles.

En ese país, ya se ha aprobado lo que se conoce como Acta del Aire Limpio (C.A.A. por sus siglas en inglés), éste documento asigna responsabilidades a la Agencia de Protección Ambiental Estadounidense (E.P.A. por sus siglas en inglés) a fin de establecer las regulaciones para la formulación de las gasolinas en los próximos años.

Los principales objetivos de la E.P.A. al emitir las regulaciones son las siguientes:

- ⇒ Reducir el contenido de benceno en las gasolinas.
- ⇒ Disminución de la Presión de Vapor Reid (P.V.R.).
- ⇒ Limitar la concentración de compuestos aromáticos.
- ⇒ Disminuir la concentración de olefinas.
- ⇒ Eliminar el empleo de compuestos de plomo.
- ⇒ Producir gasolinas de alto octanaje.
- ⇒ Reducir la cantidad de Compuestos Orgánicos Volátiles.

Después de múltiples estudios técnicos y de impacto ecológico, la E.P.A. emitió una serie de especificaciones para la composición promedio de las gasolinas de E.U.A., paralelamente en Europa, y posteriormente en México se emitieron especificaciones similares, las cuales se muestran en la tabla 1.1².

COMPUESTO	ESTADOS UNIDOS	MÉXICO	EUROPA
Azufre (p.p.m.)	339	1000	500 máximo.
Aromáticos (% vol.)	29	28	----
Benceno (% vol.)	2.0	1 en ZMVM* 2 resto del país.	----
Olefinas (% vol.)	10	10	----
Oxigenados (% vol)	2.0 mínimo.	2.0 mínimo.	----
Plomo (g/gal.)	----	----	0.6 máximo.
P.V.R. (psi)	7.2 - 8.1	6.5 - 8.5	6.4 - 11.3

* Zona Metropolitana del Valle de México.

Tabla 1.1 ESPECIFICACIÓN DE GASOLINAS PARA 1996.

¹ Martínez Ma. de L., *et. al.*, "La Reformulación de Gasolinas en México", Revista del I.M.I.Q. México, 1996, Vol. 7-8, (jul. - ago.), pág. 11.

² Martínez Ma. de L. *Op. Cit.* pág. 11.

Para lograr cubrir las especificaciones establecidas, es necesario que la gasolina reformulada se componga de la mezcla de tres corrientes de procesos diferentes. La contribución que cada una de estas corrientes tenga en la mezcla, depende principalmente del tipo de gasolina que se trate, de la estación del año, y del lugar en donde será distribuida. La tabla 1.2 muestra un promedio de la proporción de estas tres corrientes³ :

Mayor Proporción	Reformulación	Complementarias
Reformado F.C.C.*	Alquilado Isomerizado Oxigenados	Nafta Virgen n-Butano Hidrodesintegración, etc.
70 %	25 %	3 - 5 %

* Desintegración Catalítica Fluida o F.C.C., por sus siglas en inglés.

Tabla 1.2 COMPOSICIÓN DE LAS GASOLINAS

1.2 CORRIENTES DE REFORMULACIÓN.

Como se puede observar en la tabla 1.2, el 25% de la composición de las gasolinas la conforman corrientes llamadas de Reformulación; éstas a su vez, están formadas por corrientes de *Alquilado*, *Isomerización* y *Oxigenados*.

La gasolina de Alquilación es el resultado de la reacción de isobutano con olefinas para producir hidrocarburos con cadenas ramificadas. Las plantas productoras de alquilado han tomado gran importancia por proporcionar mezclas con alto número de octano, baja Presión de Vapor Reid, y la posibilidad de incluir al proceso la alquilación de aromáticos provenientes de las unidades de reformación con olefinas ligeras. Además de que las olefinas empleadas en este proceso pueden provenir de las corrientes de amilenos previamente tratados, que actualmente son dejados en la gasolina F.C.C., y así contribuir a la reducción de compuestos precursores de la formación de ozono.⁴

³ Martínez, Ma. de L., *Op. Cit.*, pág. 12.

⁴ Alkana, C.R., et al., "Alquilación de Isobutano con Olefinas C4 y C5 en Presencia de Ácido Fluorhídrico", *Revista del IMIQ, México*, 1996, Vol. 7-8, (jul. - ago.), págs. 6-7.

Se han realizado estudios para determinar la calidad del alquilado tomando como referencia al número de octano con el que contribuye en la mezcla de gasolina. En estos estudios se modifican las condiciones de operación de las plantas existentes en las refinerías, en lo que se refiere a la temperatura de operación y las relaciones de isoparafina/olefina e hidrocarburo/catalizador.

Los resultados muestran que en condiciones óptimas de operación, los valores del número de octano varían de 92 a 94 unidades en el mejor de los casos⁵. Es por esto que se ha promovido la construcción de plantas de alquilado en las refinerías, y además, porque sus productos, como ya se mencionó anteriormente, son cadenas lineales ramificadas menos tóxicas que los compuestos de benceno y menos fotorreactivos que las olefinas.

Sin embargo, el uso de esta corriente de alquilación tiene una pequeña limitación económica, ya que su costo es relativamente más alto en comparación con las corrientes de isomerizado, reformado y F.C.C. como se muestra en la figura 1.1⁶

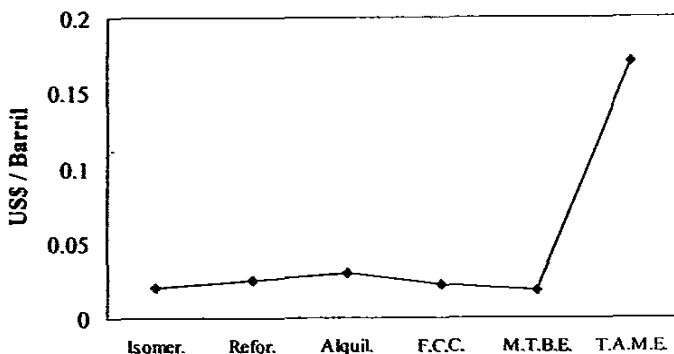


Figura 1.1 Costo aproximado de las corrientes de formulación de las gasolinas.

⁵ Aldana, C.R., *Op. Cit.*, pág. 8-9.

⁶ Martínez, Ma. de L., *Op. Cit.*, pág. 16.

En los procesos de isomerización se llevan a cabo reacciones que consisten básicamente en el cambio de la estructura molecular de un hidrocarburo, sin que exista cambio en el número de átomos presentes, es decir, se producen isómeros estructurales y espaciales o estereoisómeros.

Los principales productos de la isomerización son moléculas ramificadas, las cuales, contienen en su estructura carbonos secundarios y terciarios, por lo que suelen ser más reactivos y presentan diferentes propiedades físicas, así como también, diversas aplicaciones.

Algunas de las principales aplicaciones a nivel industrial de la isomerización son :

Isomerización de Xileno. La producción de estos isómeros está regida principalmente por las necesidades y demanda del mercado, ya que sus productos son importantes intermediarios para la producción de fibras de poliéster, plastificantes, resinas, etc.

Isomerización de parafinas C3 a C6. El objetivo de las unidades de este tipo, es la de isomerizar mezclas de pentanos con hexanos (naftas ligeras), para obtener gasolinas con un alto índice de octano. En estas unidades, también se pueden manejar cargas de C3 a C4, y obtener productos que puedan servir como materia prima para otros procesos, como por ejemplo, para los procesos de alquilación.⁷

Debido a que la corriente de isomerizado aporta una alta P.V.R. a la mezcla de gasolina, se está reorientando a otros procesos que produzcan gasolinas de mayor calidad. De esta manera, el proceso de isomerización de n-pentano a isopentanos, está tomando gran importancia en la esterificación para la producción de ter-amil metil éter (T.A.M.E.), de la misma forma, la isomerización de n-butano a isobutano se refleja en el aumento de la producción de metil ter-butil éter (M.T.B.E) y alquilado.

⁷ McKetta, J.J., "Encyclopedia of Chemical Processing and Design", edit. Marcel Dekker Inc., Vol. 27, U.S.A., págs.435-436.

Cabe señalar que los productos de la isomerización, tienen que pasar por un proceso de deshidrogenación, para que puedan ser materia prima en la producción de los compuestos oxigenados ya mencionados.

Los compuestos oxigenados juegan un papel muy importante en la reformulación de la gasolina, ya que éstos promueven la vaporización del combustible cuando la máquina se encuentra fría y enriquece de oxígeno a la mezcla aire/gasolina, disminuyendo así, las emisiones de hidrocarburos no quemados, y al mismo tiempo promueven la conversión de CO a CO₂.

Los compuestos oxigenados que se agregan a la gasolina son principalmente : metanol, etanol, M.T.B.E., etil ter-butil éter o E.T.B.E., y T.A.M.E.; estos compuestos contribuyen en el octanaje de la mezcla con un valor similar al de los compuestos aromáticos ligeros, permitiendo así, la reducción de éstos en la gasolina final.

Sin embargo, estos compuestos tienden a modificar en diferente forma la Presión de Vapor Reid de la mezcla, como se muestra en la figura 1.2⁸.

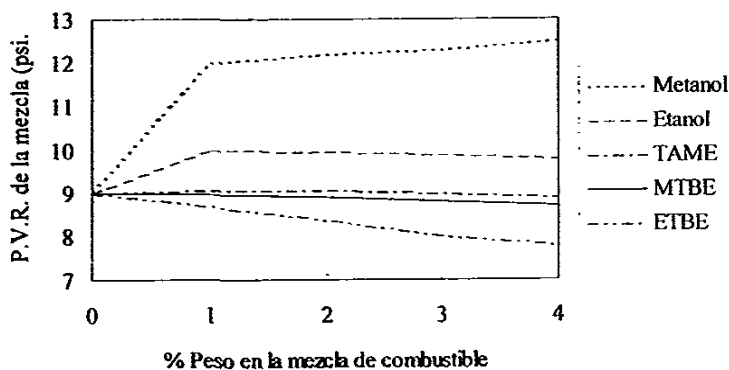


Figura 1.2 Efecto en la P.V.R. al adicionar compuestos oxigenados.

⁸ Piel W.J. et al., "Oxygenates for reformulated gasoline", Hydrocarbon Processing, Julio 1990, págs.72-73.

De la figura anterior, se puede deducir que el mejor compuesto oxigenado para la reformulación de la gasolina es el E.T.B.E., debido a que al agregarse a la mezcla, disminuye la Presión de Vapor Reid, y en consecuencia la volatilidad de ésta, lo que repercute directamente en una disminución de la cantidad de compuestos orgánicos volátiles.

Sin embargo, debido a que la producción de E.T.B.E. tiene un alto costo en comparación con el M.T.B.E. y el T.A.M.E., no resulta rentable agregarlo a las gasolinas; esta es una de las razones por las cuales, el M.T.B.E. y el T.A.M.E. son agregados a las gasolinas en mayor proporción.

1.3 ADITIVOS EMPLEADOS EN LA REFORMULACIÓN.

Las nuevas gasolinas contienen los mismos componentes básicos que las no reformuladas, y sólo difieren en la concentración de cada compuesto, además se le han adicionado diversos aditivos, los cuales, tienen las características de ser tensoactivos y surfactantes, cuya función principal es la de minimizar los depósitos de residuos pesados en los conductos de inyección de los motores, conservando por mayor tiempo una inyección y combustión eficientes.

Dentro de los aditivos más comunes se encuentran:

- ◆ Carboxilatos de aminas.
- ◆ Polibuteno-aminas.
- ◆ Polieter-aminas.
- ◆ Compuestos de aminas ligeras.

Existen estudios donde se monitorean las emisiones producidas por motores que utilizan gasolinas conteniendo este tipo de aditivos, y en todos los casos, se han obtenido emisiones de contaminantes más bajas que en los motores que emplean combustibles sin aditivos.

En las figuras 1.3, 1.4 y 1.5, se muestran los resultados obtenidos en estos estudios⁹.

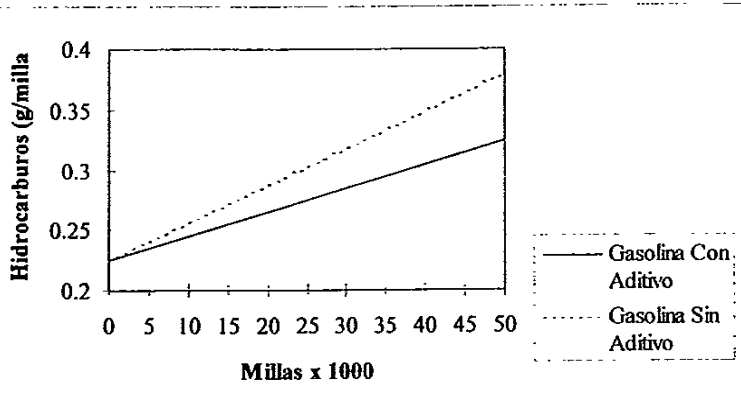


Figura 1.3 Efecto de los Aditivos en la Emisión de Hidrocarburos.

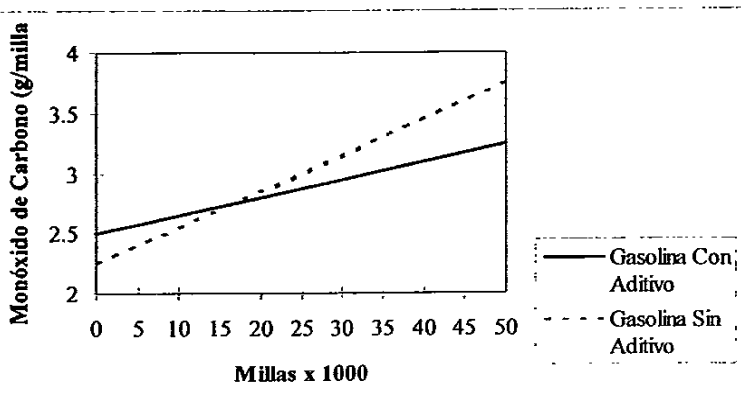


Figura 1.4 Efecto de los Aditivos en la Emisión de Monóxido de Carbono.

⁹ Peyla, R.J., "Additives to have key role in new gasoline era", Oil & Gas Journal, U.S.A., Feb. 11 1991, pág.53.

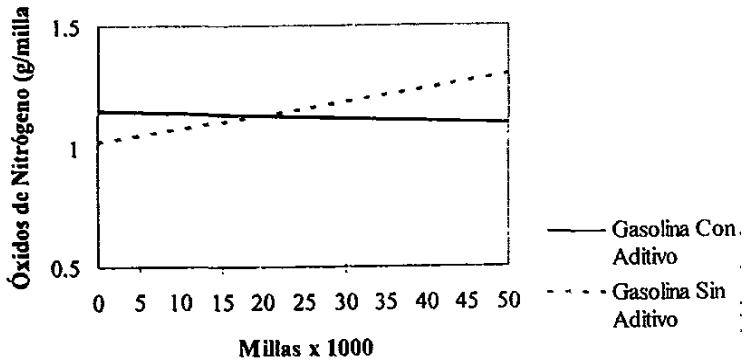


figura 1.5 Efecto de los Aditivos en la Emisión de Óxidos de Nitrógeno.

Aunque con el uso de los aditivos en las gasolinas se obtienen resultados favorables en la reducción de las emisiones contaminantes, éstos están limitados por cuestiones económicas y tecnológicas de cada país.

1.4 IMPORTANCIA DEL PROCESO DE ALQUILACIÓN DE ISOPARAFINAS CON OLEFINAS LIGERAS EN PRESENCIA DE CATALIZADORES ÁCIDOS SÓLIDOS

En la actualidad, los procesos comerciales de alquilación emplean ácido sulfúrico (H_2SO_4) o ácido fluorhídrico (HF) como catalizadores; de estos, el proceso con HF es el que ofrece mayores ventajas, como son : bajos costos de operación, poco consumo de ácido y regeneración *in situ* del mismo; sin embargo, estos ácidos presentan serios problemas de operación y de seguridad de la planta, ya que en ambos casos se manejan en fase líquida dentro del proceso.

Para el caso del HF, el problema principal está ligado a su alta volatilidad y difusividad; es por esto que las firmas *Phillips* y *Mobil* han realizado investigaciones para desarrollar aditivos que reduzcan dichos efectos y que además, no interfieran en las propiedades catalíticas del ácido.

El empleo de catalizadores ácidos sólidos en la alquilación de isoparafinas con olefinas ligeras, es una alternativa para sustituir a los catalizadores líquidos actuales. Algunos procesos están en etapa de desarrollo en el laboratorio y otros en etapa de planta piloto.

Las ventajas que se obtienen al utilizar catalizadores sólidos en estos procesos de alquilación, son principalmente de tipo económico, operacional y de seguridad.¹⁰

Un ejemplo de estas ventajas es que se eliminaría el riesgo de fugas del ácido empleado como catalizador y los efectos de corrosión serían evitados, lo que repercute directamente en la aleación del material de los equipos y en los sistemas de seguridad necesarios para controlar tales eventualidades, reduciendo así, los costos en los equipos y accesorios.

Por estas ventajas y otras más, es que se tiene la necesidad de sustituir los catalizadores líquidos, empleados actualmente en el proceso de alquilación, y la solución más viable para llevar a cabo dicha sustitución, es el desarrollo de catalizadores ácidos sólidos.

Actualmente, no existe una unidad comercial operando con un catalizador de este tipo, pero ya se han instalado plantas piloto desarrolladas por *Haldor-Topsøe* donde se están realizando las pruebas para su futura comercialización.¹¹

¹⁰ PERALTA, Solorio D., "Alquilación de Isoparafinas con Olefinas Ligeras en Presencia de Catalizadores Ácidos Sólidos", U.N.A.M., Facultad de Química, México, 1997, págs. 16-17.

¹¹ Nakamura, D.N., "HP in processing: Alkylate - a key gasoline component", Hydrocarbon Processing, Agosto 1995, pág. 15.

CAPÍTULO 2. IMPORTANCIA DE LOS MÉTODOS QUÍMICO-ANALÍTICOS EN LOS PROCESOS QUÍMICOS.

Las técnicas analíticas son herramientas muy importantes en las investigaciones que se realizan tanto a nivel laboratorio, como en planta piloto e incluso en la industria, ya que proporcionan información muy valiosa del proceso en cuestión, lo que permite conocer los elementos necesarios para poder tomar decisiones acertadas y así optimizar los procesos.

Estas técnicas están directamente enfocadas a determinar la composición cualitativa y/o cuantitativa de una mezcla. Al contar con dicha información, se puede diagnosticar si un proceso está operando dentro de las especificaciones, y en el caso de no ser así, se puede determinar con mayor facilidad y certidumbre cuales son las medidas necesarias para corregir las fallas o mejorar los procesos.

2.1 EJEMPLOS Y APLICACIONES DE LAS TÉCNICAS QUÍMICO-ANALÍTICAS.

La información de los métodos químico-analíticos se puede aplicar en las diferentes áreas de la ingeniería, como por ejemplo:

En la determinación de la *Cinética de Reacción*. La información que se requiere para poder plantear un modelo cinético es básicamente, el cambio de concentración tanto de los reactivos como de los productos a través de tiempo, por lo que se requiere analizar la mezcla de reacción en diferentes tiempos y condiciones de operación, para determinar la concentración de las especies de interés, y modelar posteriormente, la rapidez del cambio de concentración que representa a determinada reacción.

Diseño de Equipo. Uno de los objetivos de la ingeniería básica, es la de proporcionar información necesaria para diseñar del equipo de proceso, en la que se incluye la composición de cada corriente, la cual es obtenida en la fase experimental a nivel laboratorio y planta piloto. Una vez que se cuenta con dicha información, se puede determinar si se requieren de aleaciones especiales para el material de los equipos y accesorios.

Simulación de Procesos. La aplicación de esta área es más notoria en las plantas de proceso, ya que existen departamentos encargados de simular el proceso en cuestión, para así tener mayor control y hacerlos más eficientes. En este caso, los reportes del método analítico contribuyen para corroborar los resultados obtenidos en la simulación con los que se obtienen realmente en las corrientes del proceso en campo. Una vez que son reproducibles los resultados, se pueden simular cambios en las condiciones de operación del sistema para mejorar la calidad de los productos, contribuir con el ahorro de energía y servicios, etc.

Dinámica y Control de Procesos. Las plantas modernas que cuentan con cuartos de control distribuido, requieren de estar en contacto con un laboratorio que se encarga de analizar la composición de las corrientes de proceso, con la finalidad de poder detectar los cambios producidos por alguna variación en las condiciones de operación debidas a causas externas y/o inherentes del proceso, tales como: cambios en la temperatura ambiente, humedad, composición de la materia prima, variaciones en la temperatura y presión de las corrientes de alimentación, etcétera. Una vez que se ha detectado alguna variación en la composición de las corrientes de proceso, se pueden tomar medidas correctivas o preventivas desde el cuarto de control.

Pero éstas, sólo son un ejemplo de la aplicación e importancia de las técnicas químico-analíticas en el campo de la Ingeniería Química. Existen muchas más como por ejemplo: Control de Calidad e Ingeniería Ambiental.

Es importante señalar, que las necesidades de información de cada una de estas áreas es diferente, y por lo tanto, requieren de resultados detallados unos más que otros. Esto se refiere a la cantidad de componentes reportados en el análisis, ya que en ocasiones, sólo se necesita la composición de las especies que se encuentran en mayor proporción y/o de las de interés.

2.2 MÉTODOS MÁS COMUNES EN EL MERCADO.

Las técnicas analíticas más comunes que existen en el mercado, y que sirven para dicho propósito son:

- ◆ Cromatografía de Gases
- ◆ Cromatografía de Líquidos.
- ◆ Espectrometría de Masas.
- ◆ Espectroscopia de Infrarrojo.
- ◆ Espectroscopia de U.V.
- ◆ Resonancia Magnética Nuclear.
- ◆ Difracción de Rayos X.
- ◆ Absorción Atómica.

De éstas, la técnica más empleada para el análisis de mezclas con compuestos orgánicos, es la cromatografía de gases, debido a que cuenta con mayores ventajas con respecto a las demás, tales como:

- ◆ Tiempos de análisis cortos.
- ◆ Costos de equipo y de operación relativamente bajos.
- ◆ Operación sencilla del equipo.
- ◆ Resultados fáciles de interpretar.
- ◆ Análisis cualitativo y cuantitativo.

Es común encontrar equipos que cuentan con dos técnicas acopladas para trabajar simultáneamente; una de ellas es generalmente Cromatografía de Gases y la otra, varía dependiendo de las necesidades de cada laboratorio. Las más usuales son: Espectroscopía de Infrarrojo¹² y Espectrometría de Masas.

En la industria del petróleo, es común que se utilice la técnica de Cromatografía de Gases para analizar muestras de hidrocarburos, tales como: gas natural, cortes de destilación del petróleo, gasolinas de reformado, corrientes de alquilación e isomerización, etc.

Cabe señalar que para analizar estas muestras, la gran mayoría de los cromatógrafos cuentan con columnas capilares que miden desde 25 hasta 100 metros de longitud, debido a que ofrecen un número de platos teóricos suficientes para separar adecuadamente la gran cantidad de componentes que contienen.

Existen dos sistemas o métodos muy importantes que son los más utilizados en esta área, éstos son: el **Método P.O.N.A.** y el **Método P.I.A.N.O.**, los cuales tienen la capacidad de identificar compuestos tales como: *Parafinas*, *Isoparafinas*, *Aromáticos*, *Naftenos* y *Olefinas*, es por esto que son sus nombres característicos. Dichos métodos se describen detalladamente a continuación.

2.3 MÉTODO P.O.N.A.

El equipo típico con que cuenta el sistema P.O.N.A., consiste en un Cromatógrafo de Gases Hewlett-Packard 5890 G.C. (Wilmington, DE), una computadora personal para el manejo de los resultados, inyector automático 7673A y una interfase que conecta al cromatógrafo con la computadora.¹³

¹² Diehl, J.W., "Detemination of Aromatic Hydrocarbons in Gasolines by Gas Chromatography/Fourier Transform Infrared Spectroscopy", Analytical Chemistry, Vol. 67, No. 13, Jul. 1, 1995, pág. 2015.

¹³ Buchanan, J.S., "Analysis of Olefinic Gasolines with Multidimensional Gas Chromatography". Journal of Chromatographic Science, Vol. 32, Mayo 1994, Pág. 199.

Así mismo, el cromatógrafo de gases está provisto de un sistema de trampas, válvulas y columnas, que ayudan a ser más selectiva la separación de la muestra problema. Esta selectividad está enfocada a separar compuestos Aromáticos, Parafinas, Olefinas y Naftenos; ya que las mezclas que contienen dichas especies, son particularmente difíciles de separar e identificar en un sistema sencillo de Cromatografía Capilar.¹⁴

Existe un fenómeno denominado *sangrado de la columna* el cual consiste en el desgaste de la fase estacionaria, éste depende básicamente de dos factores, uno de ellos es la fricción que se presenta entre la fase móvil o gas acarreador y la fase estacionaria, debido a esto, es recomendable que el número de carbonos de las especies contenidas en las mezclas problema no excedan de 11 ó 12, ya que compuestos más pesados al mezclarse con la fase móvil, producen un incremento importante en la fricción contribuyendo así al aumento de dicho fenómeno. El otro factor es la temperatura del horno cromatográfico, ya que a determinada temperatura se le proporciona energía cinética a las moléculas superficiales de la fase estacionaria para desprenderse de ésta, provocándose así su desgaste. Finalmente es importante tomar en cuenta al *sangrado*, ya que éste repercute directamente en la estabilidad y en la vida útil de la columna. A continuación se presenta un diagrama de bloques simplificado del sistema de trampas y columnas del analizador P.O.N.A.(figura 2.1).

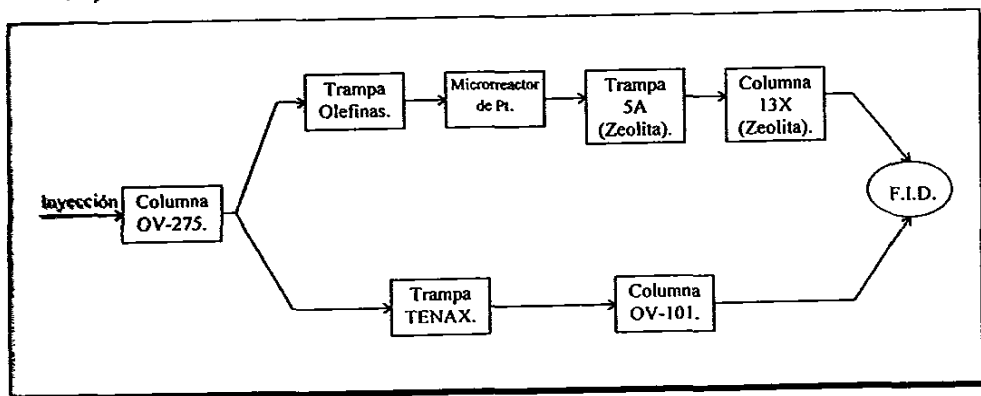


Figura 2.1 Arreglo de Trampas y Columnas en un Analizador P.O.N.A.

¹⁴ Ibid.

La descripción de la operación de las trampas y columnas en el cromatógrafo de gases es la siguiente:

Una vez que la muestra ha sido inyectada, los compuestos aromáticos son retenidos en la columna polar denominada OV-275, mientras que los otros componentes pasan a través de la trampa de olefinas, en donde se retienen reversiblemente las olefinas. Las parafinas y los naftenos, continúan hacia la trampa 5A, en donde se retienen reversiblemente solo las *n*-parafinas, mientras que las isoparafinas y naftenos entran a la columna 13X, la cual los separa en dos grupos (cíclicos y acíclicos respectivamente) para cada número de carbonos.

Las *n*-parafinas son entonces desorbidas por calentamiento en la trampa 5A y separadas en la columna 13X de acuerdo al número de carbonos que contenga cada componente.

Cuando las olefinas son desorbidas por calentamiento de la trampa de olefinas, pasa por un microrreactor de platino con una corriente de hidrógeno como gas acarreador, en donde son hidrogenadas para transformarlas en parafinas, y entonces separarlas utilizando la trampa 5A y la columna 13X.

Los aromáticos son desorbidos en tres cortes desde la columna OV-275. cada corte es concentrado en la trampa TENAX y posteriormente liberados hacia la columna OV-101 que es no polar, esta columna separa los componentes de acuerdo a su punto de ebullición y más adelante, serán detectados por el Detector de Ionización de Flama (F.I.D., por sus siglas en inglés).¹⁵

Como se puede observar, el sistema de separación del método P.O.N.A., tiene un alto grado de complejidad, y debido a esto, es también su elevado costo en el mercado; pero además ofrece la garantía de poder separar con mayor eficiencia, que los sistemas sencillos, mezclas que contienen olefinas y aromáticos de C4 a C11. Si las necesidades de la investigación así lo requieren, es recomendable adquirir un sistema de éstos, en caso contrario, es suficiente el empleo de otros sistemas de análisis más sencillos.

¹⁵ Buchanan, J.S. *Op. Cit.* Pág. 200.

2.4 MÉTODO P.I.A.N.O.

Una de las alternativas para analizar muestras de hidrocarburos, es el Método P.I.A.N.O. o P.I.O.N.A. A este análisis se le conoce también con el nombre de Análisis Detallado de Hidrocarburos (A.D.H.).

El sistema de separación es mucho más sencillo que el análisis P.O.N.A., y sólo difiere de los sistemas cromatográficos comunes, en la longitud de la columna capilar, las bases de datos y el programa de identificación que lleva incluido, por lo que ofrece múltiples ventajas, como por ejemplo :

- ◆ Operación sencilla.
- ◆ Alta eficiencia de separación.
- ◆ La posibilidad de implementar el sistema en muchos modelos de cromatógrafos de gases.
- ◆ Una extensa y variada base de datos (alrededor de 250 picos identificados y 150 compuestos con nombre).
- ◆ La clasificación de 60 olefinas típicas de la gasolina.
- ◆ El empleo de una columna capilar de 100 m., con sílica como fase estacionaria, que es fácil de adquirir.

Un esquema de este sistema se presenta en la figura 2.2.

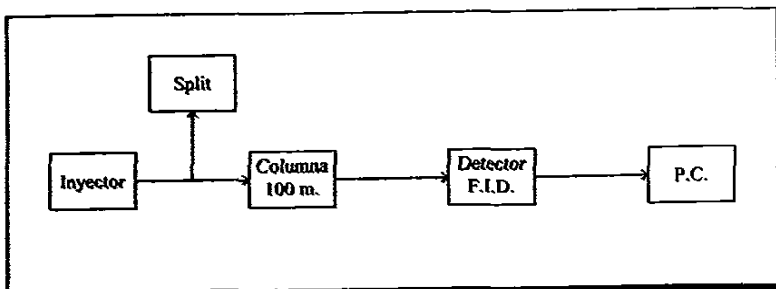


Figura 2.2 Arreglo General de Analizador P.I.A.N.O.

En este sistema, la muestra entra al inyector que se encuentra a alta temperatura, en el cual se volatilizan por completo todos los componentes. La mayor parte de la mezcla se elimina mediante un sistema de dilución interna denominado "*Split*", esto es para evitar que la columna se sature, y en consecuencia, se obtengan picos mal definidos. Sólo una mínima parte de la mezcla entra a la columna capilar de 100 m., en donde son separados sus componentes de acuerdo a su polaridad, punto de ebullición y tamaño. Una vez separados dichos componentes, serán detectados en el *Detector de Ionización de Flama*, el cual manda la señal a la computadora que generará el reporte.

El analizador P.I.A.N.O. comercial, incluye un programa en "Lotus 123." y bases de datos, cuyo reporte proporciona la siguiente información :

- ◆ Nombre del compuesto identificado.
- ◆ Composición en %Peso, %Volúmen, %Mol.
- ◆ Índice de Retención.
- ◆ Clasificación de los compuestos por familias.
- ◆ Factor de Respuesta.
- ◆ Peso molecular del compuesto.
- ◆ Punto de Ebullición¹⁶.

Por toda la información que ofrece este sistema, es el más adecuado para las investigaciones relacionadas con hidrocarburos; desafortunadamente para adquirir un equipo de éstos se requiere de hacer una inversión considerable, ya que es de los equipos más avanzados del mercado, por esto es pretensión de este trabajo, realizar dicho programa y sólo adquirir la columna necesaria para implementar el sistema de A.D.H. para reducir así el costo de éste.

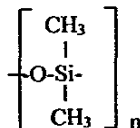
Por otro lado, al implementar esta herramienta, nos ayuda a comprender mejor los fenómenos involucrados en el análisis, y así, conocer ampliamente sus alcances y limitaciones.

¹⁶Johansen N.G., "The Determination of Individual Components and Groups of Components in Gasoline by High Efficiency Open Tubular column Gas Chromatography", Neil G. Johansen, Inc. 4^a ed. U.S.A. 1994, págs. 1-3.

CAPÍTULO 3. CONCEPTOS EN CROMATOGRAFÍA DE GASES.

La Cromatografía de Gases es un método fisicoquímico de separación, cuyo fundamento está basado en la distribución e interacción de los componentes de una mezcla entre dos fases. Una de estas fases es una sustancia impregnada o fijada químicamente dentro de una columna, y la otra fase, es un gas que se mueve sobre dicha fase estacionaria¹⁷. Debido a la constante interacción de los componentes de la mezcla con la fase estacionaria, es que se lleva a cabo la separación. Los componentes que tuvieron menos interacción con la fase estacionaria, serán los primeros en salir de la columna y ser detectados; y los que interactúan más, permanecerán más tiempo en ella y saldrán al último.¹⁸

Las fases estacionarias pueden ser de dos tipos, sólidos o líquidos. En el caso de ser un sólido, se dice que la técnica es *Cromatografía Gas-Sólido*; y cuando es líquido, *Cromatografía Gas-Líquido*. Cabe mencionar que en la presente investigación se trabajó en *Cromatografía Gas-Sólido*, ya que la columna capilar empleada, tiene depositada químicamente en sus paredes una película de polidimetilsiloxano, cuya estructura general es la siguiente :



¹⁷ Mc.Nair, H.M., "Basic Gas Chromatography", VARIAN Instruments. U.S.A. 5ª ed. 1969. Pág. 1

¹⁸ Willard, H.H., "Instrumental Methods of Analysis", Edit. Wadsworth Publishing Company, 7ª ed., U.S.A. 1988, pág. 513.

Un sistema cromatográfico de gases consiste básicamente de los siguientes seis componentes :

1. *Suministro de gas acarreador o de fase móvil.* El gas acarreador debe suministrarse de acuerdo a las condiciones de pureza y presión, requeridas por el fabricante del cromatógrafo y las condiciones óptimas de operación de la columna.
2. *Puerto de inyección de la muestra.* Este puerto permite introducir la muestra ya sea en fase gaseosa o líquida, y debe ser capaz de mantener la temperatura de inyección fijada por el usuario o la técnica de análisis. La inyección puede ser manual o con inyector automático.
3. *Columna cromatográfica de separación.* Esta debe ser elegida de acuerdo al tipo y el número de compuestos a separar; esto es, tomando en cuenta su polaridad, peso molecular, propiedades corrosivas, entre otras, podemos elegir adecuadamente la fase estacionaria, mientras que con el número de componentes de interés, y la necesidad de su resolución, se determina la longitud de la columna.
4. *Cámara con termostato u Horno del cromatógrafo.* Este componente juega un papel muy importante, ya que tiene que ser capaz de trabajar y reproducir programas de temperatura para reducir el tiempo de análisis.
5. *Detector de compuestos contenidos en la mezcla.* Los detectores más comúnmente empleados son, el Detector de Ionización de Flama (F.I.D. por sus siglas en inglés), y el Detector de Conductividad Térmica (T.C.D. por sus siglas en inglés), y su selección depende de los compuestos que se requiera identificar, ya que el F.I.D. sólo es capaz de detectar compuestos ionizables, como por ejemplo, los constituidos por átomos de carbono, y algunos de los compuestos que no detecta son H_2O y N_2 . En cambio, el T.C.D. sí puede detectar los compuesto no ionizables, pero tiene la desventaja de ser poco sensible a concentraciones "muy pequeñas".
6. *Microprocesador o computadora.* Este equipo registra y procesa las señales emitidas por el detector, para elaborar el cromatograma y el reporte que contiene los tiempos de retención y las áreas integradas de cada pico detectado.

Un esquema general de estos componentes se muestra en la figura 3.1.

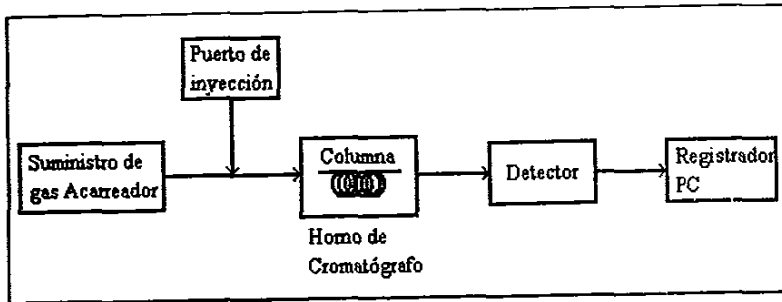


Figura 3.1 Arreglo general de un sistema cromatográfico.

3.1 TIEMPO DE RETENCIÓN Y TIEMPO MUERTO.

El comportamiento cromatográfico de un componente dado, se puede describir de varias formas, las más comunes son :

- ◆ Volumen de Retención y Tiempo de Retención.
- ◆ Relación de Partición.

El *Volumen de Retención* se define como, el volumen de la fase móvil necesario para transportar a través de la columna a un componente, desde el punto de inyección hasta el detector. Este puede ser obtenido directamente mediante el *correspondiente Tiempo de Retención* (t_R) y el flujo volumétrico de la fase móvil, de acuerdo con la siguiente expresión:

$$V_R = t_R F_c \quad (3.1)$$

donde V_R es el volumen de retención, t_R es el tiempo de retención y F_c el flujo volumétrico de fase móvil. El flujo volumétrico, a su vez está definido como :

$$F_c = \frac{\pi d_c^2}{4} \varepsilon_{tot} \frac{L}{t_M} = \frac{V_{col} \varepsilon_{tot}}{t_M} \quad (3.2)$$

donde d_c es el diámetro interno de la columna, L su longitud, ε_{tot} porosidad total de la columna de empaque, V_{col} el volumen que ocupa el empaque y finalmente, t_M es el *Tiempo Muerto*, que se define como el tiempo que necesita un elemento que no es retenido en la columna para pasar del inyector al detector.

El valor de ε_{tot} es adimensional y varía dependiendo del tipo de empaque utilizado. Existen valores promedio para empaques sólidos que van desde 0.35 a 0.45, mientras que para empaques porosos, van de 0.70 a 0.90. Para columnas capilares este valor es el de la unidad.

3.2 COEFICIENTE DE PARTICIÓN Y RELACIÓN DE PARTICIÓN.

Cuando un componente entra a un sistema cromatográfico, éste inmediatamente se distribuye entre la fase estacionaria y la móvil. Si el flujo de la fase móvil es detenido en cualquier tiempo, el compuesto asume un equilibrio de distribución entre las dos fases.

La concentración en cada fase está dada, por el coeficiente termodinámico de partición, que está definido como :

$$K = \frac{C_S}{C_M} \quad (3.3)$$

en donde C_S y C_M representan la concentración del componente en la fases estacionaria y móvil respectivamente. Cuando $K=1$, el componente se encuentra distribuido en la misma concentración en las dos fases.

La *Relación de Partición* k' , es una de las variables más importantes en cromatografía ya que relaciona el equilibrio de distribución de la muestra con las propiedades termodinámicas de la columna.

Para determinadas condiciones de operación, k' es una relación del tiempo que permanece un componente tanto en la fase estacionaria como en la fase móvil. Esta relación de tiempos la proporcionan el tiempo de retención (t_R) del compuesto y el tiempo muerto (t_M), de acuerdo con la ecuación 3.4.

$$k' = \frac{t_R - t_M}{t_M} = \frac{V_R - V_M}{V_M} \quad (3.4)$$

3.3 NÚMERO DE PLATOS TEÓRICOS EFECTIVOS.

Una característica importante de un sistema cromatográfico es su eficiencia expresada como una cantidad adimensional llamada *Número de Platos Teóricos Efectivos* N_{eff} , éste representa el número de etapas de partición del componente durante su paso a través de la columna. Este número se puede determinar con la siguiente expresión :

$$N_{eff} = \frac{L}{H} = \left(\frac{t'_R}{\sigma} \right)^2 \quad (3.5)$$

donde L es la longitud de la columna, H es la altura entre platos, t'_R es el tiempo de retención ajustado de un componente dado, el cual está definido como $t'_R = t_R - t_M$, y σ^2 es la *varianza* de la curva que describe el pico de un componente dado. El ancho de la base de este pico, W_b , es igual a cuatro desviaciones estándar asumiendo que el pico describe una curva de distribución gaussiana ideal, como se muestra en la **figura 3.2**, esto es, $\sigma = W_b / 4$, lo que simplifica la ecuación 3.5, quedando :

$$N_{eff} = 16 \left(\frac{t'_R}{W_b} \right)^2 \quad (3.6)$$

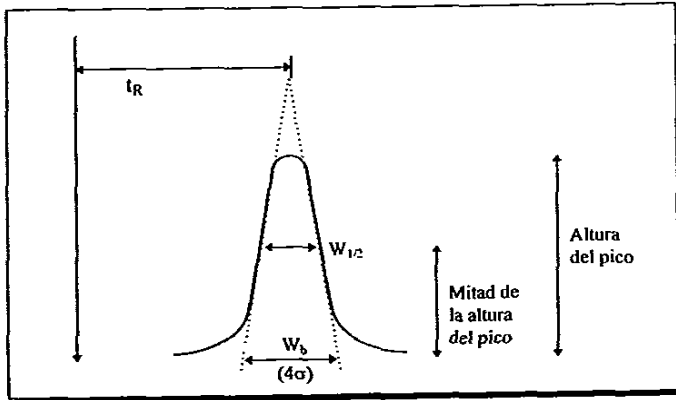


Figura 3.2. Perfil del pico de la señal de un componente.

Es común que los picos presenten dos efectos muy importantes, uno de ellos es lo que se conoce como "coleo", el cual se produce debido a la saturación de la columna por un excedente de muestra; originando que el descenso del pico se prolongue. El segundo efecto es el llamado "frenteo", cuyo origen se debe a defectos de inyección (inyecciones lentas). Estos efectos se explican con mayor detalle en el capítulo 5.

Con el fin de minimizar los efectos arriba mencionados, se ha encontrado una relación que emplea el ancho a la mitad de la altura del pico, en donde se presentan menos frecuentemente dichos efectos; dicha relación se describe en la ecuación 3.7.

$$\sigma = \frac{W_{1/2}}{\sqrt{8 \ln 2}} \quad (3.7)$$

sustituyendo la ecuación 3.7 en 3.5, se obtiene :

$$N_{eff} = \frac{L}{H} = 554 \left(\frac{t_R}{W_{1/2}} \right)^2 \quad (3.8)$$

FALTA PAGINA

No. **30**

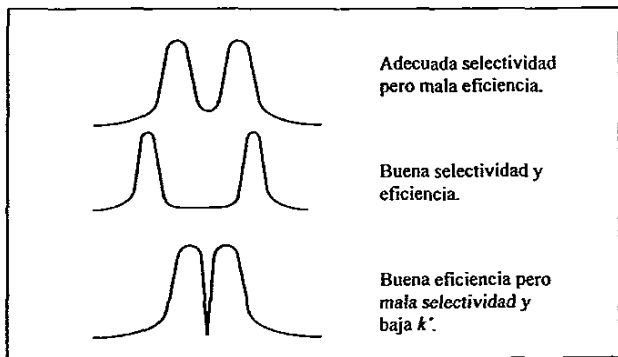


Figura 3.3 Selectividad, Eficiencia y Relación de Partición de Picos.

Es muy importante que entre dos picos se obtenga la mayor eficiencia y selectividad posible, así como también, eliminar los efectos de “coleo” y “frenteo”, ya que con esto se asegura que un pico dado no sea el resultado de la señal de dos o más componentes que tengan tiempos de retención muy similares, y además se elimina la posibilidad de que se presenten coeluciones.

3.5 ÍNDICE DE RETENCIÓN

Para poder realizar el análisis cualitativo de una mezcla problema de hidrocarburos ligeros, se cuenta con una técnica que se basa en la normalización de los tiempos de retención, mediante un índice denominado *Índice de Retención de Kovats*. Este índice es una relación logarítmica entre el tiempo de retención de un componente dado, con el tiempo de retención de la parafina inmediata superior e inferior, con respecto al número de carbonos de la cadena lineal en dicho compuesto, esta relación se presenta en la ecuación 3.10.

$$IR_k = 100 C + 100 \left[\frac{\log t'_R - \log t'_C}{\log t'_{C+1} - \log t'_C} \right] \quad (3.10).$$

IR_K : Índice de Retención de Kovats.

C : Número de carbonos de la cadena lineal del componente X.

t'_R : Tiempo de retención ajustado del componente X.

t'_C : Tiempo de retención ajustado de la n-parafina inmediata inferior al componente X.

t'_{C+1} : Tiempo de retención ajustado de la n-parafina inmediata superior al componente X.

Por definición, el índice de retención para las n-parafinas se asigna progresivamente en múltiplos de cien, así para el metano, 100, etano, 200, propano, 300,,dodecano 1200, tridecano, 1300, etc. Cabe señalar que este modelo de índice de retención, se emplea cuando los componentes son detectados en condiciones isotérmicas.

Existe otra expresión para condiciones no isotérmicas, que es similar a la del índice de retención de Kovats, ésta es :

$$IR_{NI} = 100 C + 100 \left[\frac{t'_R - t'_C}{t'_{C+1} - t'_C} \right] \quad (3.11).$$

La existencia de un tiempo de retención característico para cada compuesto, en condiciones fijas de operación, conlleva a un índice de retención, el cual, también es característico de cada compuesto pero exclusivo.

La ventaja de emplear estos índices de retención, es que se puede determinar donde aparecen los compuestos en el cromatograma, con respecto a los alcanos de cadenas lineales (n-parafinas) inyectados en la muestra. Es común que en inyecciones sucesivas, el tiempo de retención de los componentes en la mezcla, varíen como consecuencia de inyecciones imprecisas. El empleo del índice de retención minimiza dicho efecto, debido a que la relación que se guarda de un componente con las n-parafinas de referencia se conserva, esto es porque dichas parafinas sufren el mismo corrimiento.

Es evidente la importancia de las n-parafinas dentro de la mezcla, ya que tienen la función de ser puntos de referencia para determinar el índice de retención; y en el caso de no encontrarse en la mezcla problema original, es necesario adicionarlas como estándar interno.

3.6 FACTOR DE RESPUESTA.

Para determinar la composición de cada especie contenida en una mezcla, se cuenta con técnicas que requieren de diferente información. Dentro de éstas se encuentran las siguientes:

- ◆ Calibración por Estándar Externo.
- ◆ Estándar Interno.
- ◆ Normalización de Área.
- ◆ Factor de Respuesta.

Para el caso de la *Calibración por Estándar Externo*, sólo es práctica cuando el número de componentes de interés es pequeño, ya que se requiere de la preparación de soluciones de dichos componentes a diferentes concentraciones, con el fin de obtener la *curva de calibración* de cada uno de ellos.

Una de las ventajas que ofrece la técnica de *Estándar Interno* es que se reduce el error producido por inyecciones deficientes de la muestra problema. La desventaja que presenta ésta técnica, es que hace una relación directa entre el área de un compuesto con respecto al área y concentración del estándar interno y no toma en cuenta la sensibilidad del detector hacia las diferentes especies. De la misma forma, hace la misma consideración el método de Normalización de Áreas.

El método por *Factor de Respuesta* si considera la sensibilidad del detector. Este método utiliza un número adimensional denominado Factor de Respuesta, que se emplea para corregir el área reportada por el registrador, y así, obtener la concentración del componente en cuestión, de acuerdo con la siguiente expresión :

$$C_i = \frac{A_i FR_i}{\sum_{i=1}^n A_i FR_i} \quad (3.12).$$

donde :

C_i : La concentración de componente i .

A_i : Área del pico i .

FR_i : Factor de respuesta del componente i .¹⁹

Este factor depende del tipo de muestra y del detector con los que se esté trabajando; para el caso de un detector F.I.D. y muestras de hidrocarburos, el factor de respuesta sólo es función del número de átomos de carbono y de hidrógeno que contiene la molécula del compuesto detectado.

Para determinar su valor, se puede hacer de manera experimental y teórica. Para la forma teórica, se debe referir el valor a un hidrocarburo; generalmente se toman como referencia la respuesta del detector para el metano o el n-heptano, y se emplea la siguiente ecuación :

$$FR = \frac{(C C_N + H H_N) K}{C} \quad (3.13).$$

donde :

C : es el peso atómico de Carbono; 12.011.

C_N : es el número de carbonos que contiene la molécula.

H : es el peso atómico del Hidrógeno; 1.008.

H_N : es el número de hidrógenos que contiene la molécula.

K : es una constante que es 0.83905, si los factores de respuesta son referidos al n-heptano y 0.7487, si son referidos al metano.²⁰

¹⁹ Johansen N.G., *Op. Cit.*, pág. 14.

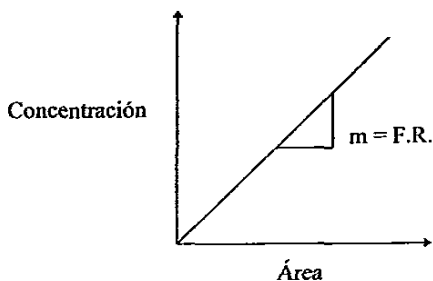
²⁰ Johansen, N.G., *Op. Cit.* pág. 13.

En la tabla 3.1 se muestra los valores del factor de respuesta calculados para compuestos aromáticos, naftenos, n-parafinas y olefinas, referidos al n-heptano.

Núm. Carbonos	n-Parafinas	Olefinas	Naftenos	Aromáticos
1	1.1207	----	----	----
2	1.0503	----	----	----
3	1.0268	0.9799	----	----
4	1.0151	0.9799	----	----
5	1.0080	0.9799	0.9799	----
6	1.0034	0.9799	0.9799	0.9095
7	<u>1.0000</u>	0.9799	0.9799	0.9195
8	0.9975	0.9799	0.9799	0.9271
9	0.9955	0.9799	0.9799	0.9329
10	0.9940	0.9799	0.9799	0.9376
11	0.9927	0.9799	0.9799	0.9415
12	0.9916	0.9799	0.9799	0.9447
13	0.9907	0.9799	0.9799	0.9474
14	0.9899	0.9799	0.9799	0.9497
15	0.9893	0.9799	0.9799	0.9517

Tabla 3.1. Factores de Respuesta Teóricos para un F.I.D.²¹

Por otro lado, para obtener el factor de respuesta experimental, se requiere de preparar soluciones a diferente concentración de cada uno de los compuestos y obtener sus áreas correspondientes y posteriormente determinar la pendiente de la línea que represente a los puntos de las Áreas vs. Concentración.



²¹ *ibid.* pág. 17.

Cabe señalar que no todas las concentraciones presentan un comportamiento lineal, esto depende precisamente de la respuesta del detector ante los diferentes compuestos.

3.7 NÚMERO DE TRENNZAHL.

Una alternativa para determinar la eficiencia de las columnas capilares está dada por el número de Trennzahl (TZ); éste relaciona la separación entre los picos de dos sustancias de la misma familia, el cual se representa por la ecuación 3.14.

$$TZ = \frac{t_{R,2} - t_{R,1}}{w_{1/2,2} + w_{1/2,1}} - 1 \quad (3.14).$$

TZ, representa el número de picos que pueden ser insertados entre dos picos consecutivos de sustancias homólogas en un cromatograma. Por ejemplo, un valor de TZ=15, calculado para éteres de C₉ a C₁₀, significa que existen 15 picos que pueden ser clasificados en el intervalo de éstos. La ecuación 3.14, se puede representar en términos de la resolución entre picos (R_s), quedando la ecuación 3.15.

$$TZ = \frac{R_s}{1.18} - 1 \quad (3.15).$$

El concepto de TZ, se emplea frecuentemente en las técnicas de análisis que utilizan temperatura programada con el objetivo de hacer más eficiente el análisis de las mezclas; ya que en estas condiciones, TZ es la única herramienta para determinar la eficiencia de la columna capilar.²²

²² GROB L. Robert, "Modern Practice of Gas Chromatography", 3ª ed., U.S.A. 1995, págs. 189-190.

3.8 EFICIENCIA DE RECUBRIMIENTO.

El porcentaje de la eficiencia de recubrimiento es un parámetro que relaciona indirectamente, mediante la altura entre platos, las eficiencias de separación teórica y real de la columna capilar, y nos da una idea de que tan homogénea está la fase estacionaria impregnada en las paredes internas de la misma.

La expresión que representa la eficiencia de recubrimiento, está dada en la ecuación 3.16.

$$\boxed{\% \text{Eficiencia de Recubrimiento} = \frac{H_{\min}}{H} \cdot 100} \quad (3.16).$$

donde, H_{\min} es la altura mínima posible entre platos y H es la altura real entre platos para un compuesto determinado. H_{\min} está definida por la ecuación 3.17, mientras que H se puede deducir fácilmente de la ecuación 3.5 quedando finalmente la expresión 3.18.

$$\boxed{H_{\min} = r \sqrt{\frac{1 + 6k' + 11k'^2}{3(1 + k')^2}}} \quad (3.17).$$

$$\boxed{H = \frac{L}{N_{\text{eff}}}} \quad (3.18).$$

de la ecuación 3.17, r es el radio interno de la columna capilar y k' es la relación de partición definida en la ecuación 3.4. Es importante tener cuidado en utilizar las unidades de longitud coherentes de L y r para obtener resultados correctos.

Se ha observado que la eficiencia de recubrimiento para fases estacionarias no polares presentan valores en un intervalo de 90 a 100%, mientras que para fases polares van de 60 a 80%; debido a que las fases polares son más difíciles de depositarse uniformemente en las paredes internas de la columna capilar.²³

En resumen, todos los puntos tratados en este capítulo son imprescindibles para el entendimiento de los fenómenos involucrados en la técnica cromatográfica, así como también, para el manejo de la información que ésta genera.

²³ GROB L. Robert, *Op. cit.* págs. 190-191.

SEGUNDA PARTE : DESARROLLO EXPERIMENTAL.

CAPÍTULO 4. DESARROLLO DEL MÉTODO ANALÍTICO.

En este capítulo se describe el equipo, estándares y mezclas problema que se emplearon en el desarrollo experimental del presente trabajo. Por otro lado, se presentan los datos obtenidos en la experimentación para determinar los siguientes puntos: las condiciones de operación del cromatógrafo de gases, evaluación de la columna cromatográfica, determinación del volumen de inyección manual, y por último, la obtención de las bases de datos que servirán para realizar el análisis cualitativo de las muestras problema.

4.1 DESCRIPCIÓN DEL EQUIPO, MEZCLAS Y ESTÁNDARES UTILIZADOS.

El equipo en el que se desarrolló la parte experimental es un cromatógrafo de gases, el cual tiene las siguientes características:

Marca :	Varian.
Modelo :	Star 3400 CX.
Detector :	Ionización de Flama.
Tipo de Horno :	Temperatura Programable.
Tipo de Inyección :	Manual con microjeringa.
Puerto de Inyección :	Equipado con dilución interna ("split").
Interfase :	Conexión directa con una computadora en la cual se procesan los datos automáticamente.

El equipo arriba mencionado requiere de cuatro corrientes principales de gases, éstas son : gas acarreador, gas enmascarante, combustible, y comburente. Nitrógeno, Helio e Hidrógeno, pueden emplearse como gas acarreador dependiendo de las especificaciones de operación del equipo.

El efecto que tiene cada uno de los gases acarreadores sobre la altura de los platos teóricos en la columna, varía de acuerdo a la velocidad promedio del gas. Este efecto se muestra claramente en la figura 4.1.

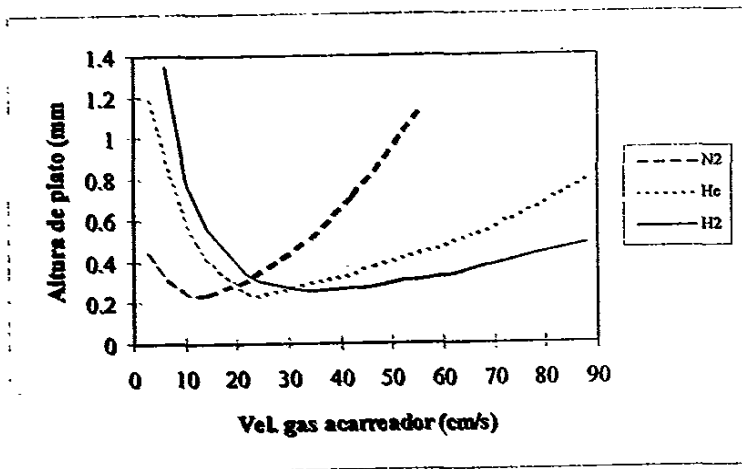


Figura 4.1 Comportamiento de gases acarreadores en columnas cromatográficas.

Como se puede observar en la figura 4.1, el hidrógeno respecto al nitrógeno y al helio, presenta mayor estabilidad en la altura de los platos efectivos en un intervalo de velocidades más amplio; además, el valor de la altura entre platos resulta ser pequeño, lo que repercute directamente en el incremento de los platos efectivos de la columna, y por lo tanto, se tiene un mayor número de etapas de equilibrio y una mejor separación de los componentes en la mezcla.

Otra de las ventajas que presenta el hidrógeno como gas acarreador, es que se obtiene mayor resolución entre picos y en consecuencia, se pueden optimizar las condiciones de operación del equipo cromatográfico y el tiempo de análisis. Por último, es importante mencionar su bajo costo y fácil adquisición en el mercado; todos estos aspectos se consideraron para determinar el gas acarreador más adecuado.

En la tabla 4.1, se muestran las características, condiciones de alimentación y funciones de los gases con los que se operó el cromatógrafo.

Nombre del Gas	Función	Pureza (% peso)	Presión de Alimentación (psi.)
Hidrógeno	Gas acarreador	99.998	80
Hidrógeno	Combustible	99.998	40
Nitrógeno	Enmascarante	99.999	60
Aire a presión	Comburente	99.995	60

Tabla 4.1 Características y condiciones de alimentación de los gases requeridos para el equipo cromatográfico.

Para desarrollar una base de datos que incluyera a los compuestos de interés en las muestras de alquilación y de gasolinas comerciales, se plantearon dos posibilidades; la primera fue adquirir por separado cada uno de los componentes y posteriormente realizar la mezcla; la segunda contemplaba comprar la mezcla ya elaborada que incluye todos los componentes clásicos para un análisis P.I.A.N.O., y que además, se emplea para calibrar los equipos comerciales.

De éstas dos posibilidades, la primera resultó demasiado costosa e impráctica, debido a que todos los componentes no se encuentran con la misma facilidad en el mercado; posteriormente es difícil elaborar la mezcla bajo condiciones controladas de volumen y temperatura para asegurar una composición confiable, por lo que se decidió adquirir el paquete P.I.A.N.O. comercial por medio de un proveedor especializado en estándares de este tipo. Dicho paquete consta de mezclas individuales certificadas de parafinas, isoparafinas, aromáticos, naftenos, olefinas y la mezcla de todos estos componentes.

Una de las ventajas que tiene el paquete P.I.A.N.O. es que todos sus componentes (aproximadamente 140) están debidamente identificados, cuantificados y clasificados por familia mediante cromatogramas y reportes individuales, al igual que la mezcla de las familias (mezcla P.I.A.N.O.).

A continuación se muestran las características de los estándares adquiridos :

Proveedor :	SUPELCO.
Elaboró :	AIR LIQUIDE AMERICA CORPORATION.
Fecha de elaboración :	28 de Febrero de 1997.
Lote Parafinas :	9211.
No. de Componentes:	11 (de C5-C15).
Lote Isoparafinas :	9211.
No. de Componentes:	35 (de C5-C10).
Lote Aromáticos :	9511.
No. de Componentes:	38 (de C6-C12).
Lote Naftenos :	9604.
No. de Componentes:	30 (de C5-C12).
Lote Olefinas :	9502.
No. de Componentes:	25 (de C5-C10).
Lote P.I.A.N.O. :	7466B267.
No. de Componentes:	139 (de C5-C15).

Es importante señalar que se presentaron problemas con la identificación de algunos componentes en la mezcla P.I.A.N.O. completa; estos fueron ocasionados por la coelución de dos compuestos en el mismo tiempo de retención obteniéndose un solo pico en este caso. Sin embargo, se verificó la existencia de los compuestos relacionando el área del pico con la suma de sus concentraciones individuales reportadas en la certificación.

En lo que se refiere a las mezclas problema, se emplearon de tres diferentes fuentes; las primeras fueron obtenidas en el laboratorio mediante las reacciones de alquilación de isopentano con propileno y de benceno con propileno. La segunda fuente fue un corte de alquilado proveniente de una refinería y finalmente, se adquirieron gasolinas comerciales como MAGNA SIN y PREMIUM.

Cabe mencionar que para asegurar una composición constante de las mezclas durante el tiempo de experimentación, se mantuvieron en refrigeración y se almacenaron en ampollas selladas herméticamente. Esta medida es importante ya que una vez determinada la composición de las mezclas con la mayor certidumbre posible, las muestras contenidas en las ampollas se podrán emplear como estándares para verificar la correcta operación del equipo cromatográfico y del programa desarrollado; y por otro lado, se reduce el costo de adquisición de nuevos estándares para calibración.

4.2 SELECCIÓN Y EVALUACIÓN DE LA COLUMNA CROMATOGRÁFICA.

Para seleccionar adecuadamente el tipo de columna es necesario tener una idea de que componentes constituyen la muestra problema, así como también sus propiedades fisico-químicas. Las dos propiedades principales que se requieren son: Polaridad y Punto de ebullición.

Comúnmente se busca que la polaridad de los componentes de la mezcla y la de la fase estacionaria de la columna sean similares, con el fin de que los componentes interactúen por mayor tiempo con la fase estacionaria y así obtener una mayor resolución y selectividad entre los picos.

Es recomendable que los puntos de ebullición de las especies no sobrepasen la temperatura máxima de operación de la columna, ya que esto provocaría que los tiempos de retención de dichos compuestos fueran muy grandes, y que para reducirlos sea necesario trabajar a altas temperaturas favoreciendo el sangrado de la columna. Por lo tanto, es evidente que se necesita seleccionar una fase cuya temperatura máxima de operación sea mayor que la de los puntos de ebullición de los componentes de la mezcla problema.

Por otro lado, otros de los parámetros que se tomaron en cuenta para la selección de la columna fueron los siguientes :

1. La información reportada por los fabricantes de columnas capilares, acerca de los diferentes modelos existentes en el mercado con relación al tipo de mezcla que se desea analizar; tal es el caso de la firma **CHROMPACK**, la cual proporciona una serie de columnas específicas para cada tipo de muestra, y al mismo tiempo contempla las normas emitidas por la American Society for Testing and Materials (A.S.T.M.) y la E.P.A.

Por ejemplo, para el caso específico de los hidrocarburos presentes en la gasolina, recomiendan una columna capilar de 100 m. de longitud, con un diámetro interno de 250 μm ., micropelícula de fase estacionaria de 0.5 μm ., temperatura máxima de operación de 250 a 275 °C, y alrededor de 400,000 platos teóricos.

Cabe señalar que dicha columna corresponde para el análisis P.I.A.N.O. comercial y además, contempla otro modelo de columna para el análisis P.I.A.N.O. especificado por la A.S.T.M..²²

²² CHROMPACK, "Reproducible Capillary Columns. Comprehensive guide to capillary gas chromatography column standard methods, practical application notes and accessories for gas chromatography", Chrompack Inc. U.S.A., 1995, pág. 39.

2. Las especificaciones de las normas A.S.T.M. D 5134-90²³ y C.G.S.B 3.0²⁴; las cuales se describen a continuación:

Norma	Longitud (m)	Diámetro interno (μm)	Espesor de película (μm)	Fase estacionaria
A.S.T.M. D 5134-90	50	210	0.5	Sílica
C.G.S.B. 3.0	100	250	0.5	Sílica

3. Otras de las referencias tomadas en cuenta, son los reportes de las diferentes investigaciones realizadas para optimizar las condiciones de operación de los sistemas *cromatográficos*, y las pruebas de nuevas columnas con diferentes fases estacionarias, como por ejemplo, los artículos publicados por Bruce D. Quimby²⁵ y por Dietrich Estel²⁶.

4. Finalmente, la información facilitada por los proveedores de los equipos *cromatográficos* del P.I.A.N.O. comercial contribuyó a la selección de la columna, ya que especifica las características de todos los componentes del equipo incluyendo la columna capilar.

Al evaluar la información arriba citada, se decidió que las características de la columna más adecuadas para nuestros fines fueran las siguientes:

Una columna capilar abierta con fase estacionaria de sílica depositada químicamente en sus paredes internas; esta fase tiene la característica de ser no polar con el propósito de que exista una óptima retención y separación de los hidrocarburos presentes en las mezclas problema.

²³ A.S.T.M. D 5134-90, Standard Test Method, "Detailed Analysis of Petroleum Naphthas Through n-Nonane by Capillary Gas Chromatography", U.S.A., 1990, pág. 842.

²⁴ Canadian C.G.S.B.-3.0, No. 14.3-94, "Methods for Testing Petroleum and Associated Products", Canadian General Standards Board, Canada, 1994, p.p. 31.

²⁵ Bruce D. Quimby, *et. al.*, "Speed Improvements in Detailed Hydrocarbon Analysis of Gasoline Using 100- μm Capillary Columns", Hewlett Packard, U.S.A., 1995, pág. 2.

²⁶ Dietrich Estel, *et. al.*, "The Analysis of C₇-C₁₁ Hydrocarbons in Naphtha and Reformate with a New Apolar Fused Silica Column", Journal High Resol. Chromatogr., U.S.A., 1995, Vol. 18, pág. 403.

La longitud de la columna es de 100 m., con diámetro interno de 250 μm ., y un recubrimiento de película de sílica en la fase estacionaria de 0.5 μm ., ya que con éstas características se proporciona la mayor eficiencia de separación posible y además, es la que recomienda el sistema de análisis P.I.A.N.O. comercial.

Al adquirir una columna cromatográfica, el proveedor proporciona un reporte acerca de las características físicas y la evaluación de los parámetros cromatográficos específicos para dicha columna. Con la finalidad de corroborar experimentalmente dicha evaluación, se requiere de reproducir lo mejor posible las condiciones de operación del cromatógrafo establecidas por el proveedor. En la tabla 4.2 se comparan los valores reportados por el fabricante para las condiciones de operación, y las reproducidas en el laboratorio.

Variables de Operación	Proveedor SUPELCO	Experimental
Temperatura del Inyector	220 °C	170 °C
Relación de "Split"	100 : 1	100 : 1
Temperatura del Horno	60 °C	60 °C
Gas Acarreador	Helio	Hidrógeno
Velocidad de Gas Acarreador	20 cm / seg.	34.2 cm / seg.
Detector	F.I.D.	F.I.D.
Temperatura del Detector	220 °C	180 °C

Tabla 4.2 Comparación de las variables de operación cromatográficas.

Para poder evaluar los parámetros cromatográficos de la columna, se requiere disponer de una mezcla que es especificada por el proveedor, dicha mezcla fue preparada en el laboratorio y su composición se muestra en la tabla 4.3.

Componente	Composición (% peso)
n-Hexano	0.62
Benceno	1.76
Ciclohexano (disolvente)	82.79
n-Heptano	2.16
Tolueno	4.14
n-Octano	1.41
m-Xileno	2.06
p-Xileno	4.00
n-Nonano	1.07

Tabla 4.3 Composición de la mezcla para evaluación de la columna.

Esta mezcla se analizó en el cromatógrafo de gases antes descrito con la nueva columna capilar, y el reporte generado por el equipo (que se muestra en el Anexo I, página 101 a 103), proporcionó la información necesaria para poder evaluar los valores de los parámetros cromatográficos con la ayuda de las ecuaciones descritas en el capítulo 3, y corroborarlos con los reportados por el proveedor. En la tabla 4.4 se comparan tales valores.

Parámetro Cromatográfico	Proveedor SUPELCO	Experimental
Valor de k' (n-Nonano)	6.8	6.15
Número de platos teóricos/metro (n-Nonano)	4277	4464
Eficiencia de recubrimiento (n-Nonano)	93 %	95.98 %
Índice de retención (n-Benceno)	653	654.026
Índice de retención (n-Tolueno)	756	756.467
Separación entre isómeros del Xileno	91 %	91 %
Número de Trennzahl (n-Heptano y n-Octano)	80	75

Tabla 4.4 Comparación de parámetros cromatográficos de la columna capilar.

Como se puede observar en la tabla 4.4 existe variación en algunos de los valores, debido principalmente a que el gas acarreador empleado fue Hidrógeno y no Helio como lo especifica el fabricante. Sin embargo, la mayoría de los valores son satisfactorios ya que son de la misma magnitud o superiores a los reportados, y los únicos parámetros que muestran valores menores a los esperados son el número de Trennzahl y k' , no obstante la desviación que existe no es muy significativa, por lo que en términos generales es aceptable la calidad de la columna.

4.3 DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN DEL CROMATÓGRAFO DE GASES.

Para determinar las condiciones de operación del cromatógrafo de gases se consideró la información de los artículos y normas mencionados en el subcapítulo 4.2, ya que éstos resultan ser buenos puntos de referencia para plantear condiciones de operación lo más acertadas posible.

Las variables que se controlaron fueron: la relación de "split", el programa de temperatura para el horno, la temperatura del inyector y detector; para el caso de la determinación del volumen de inyección; las condiciones de operación fueron las siguientes:

Temperatura del inyector	250 °C
Relación de "split"	100 : 1
Presión del gas acarreador en la columna	35 psi.
Programa de temperatura para el horno	figura 4.6
Temperatura del detector	300 °C
Flujo de gas combustible	2.6 mL / min
Flujo de gas comburente	300 mL / min
Flujo de gas enmascarante	28.4 mL / min
Atenuación	8
Rango	11

En lo referente a la reproducibilidad de los índices de retención de los compuestos sólo se modificó el programa de temperatura para el horno, con el propósito de obtener la mejor resolución entre picos y optimizar el tiempo de análisis; por lo que se plantearon tres programas de temperatura para el horno del cromatógrafo, los cuales se describen en las figuras 4.6 a 4.8.

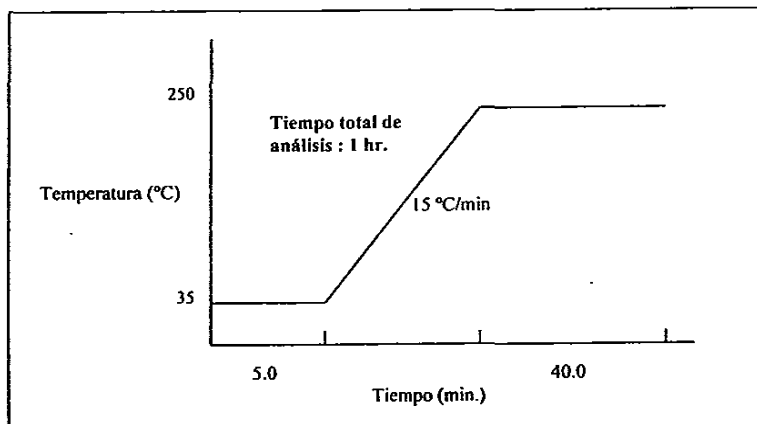


Figura 4.6 Programa A de temperatura para el horno cromatográfico.

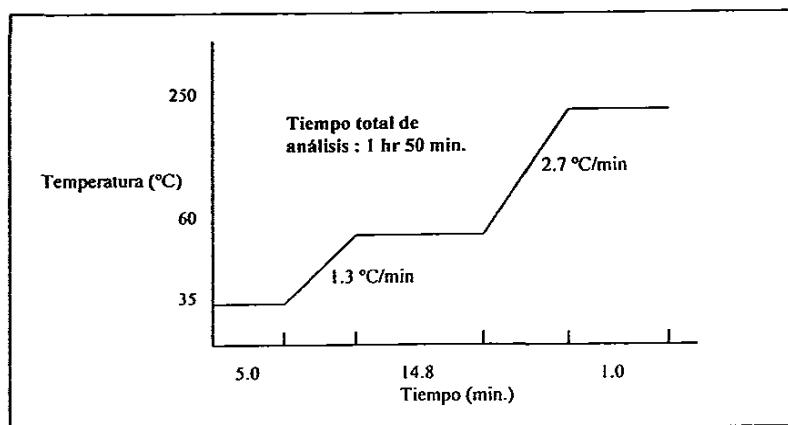


Figura 4.6 Programa B de temperatura para el horno cromatográfico.

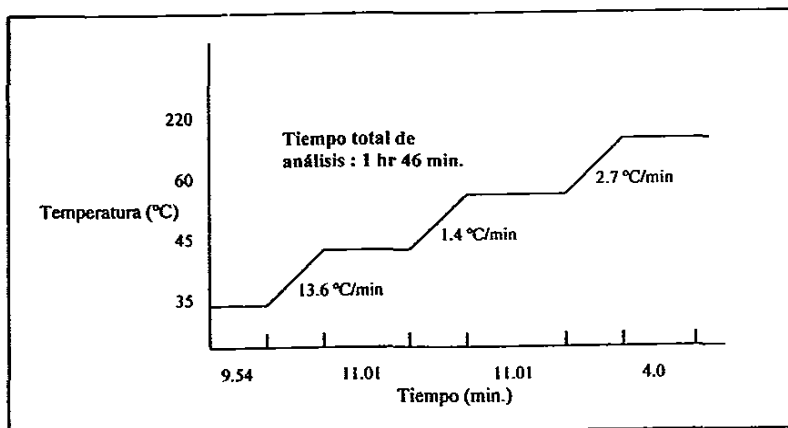


Figura 4.6 Programa C de temperatura para el horno cromatográfico.

En los cromatogramas de las páginas 104 a 106 del Anexo I, se presentan los efectos de los programas de temperatura A, B y C respectivamente. En el cromatograma de la página 104 se observa que los picos son demasiado anchos, esto se debe a que varios compuestos se encuentran en un solo pico. En el cromatograma de la página 105 se obtiene ya una mejor separación y resolución entre picos y finalmente, en el cromatograma de la página 106 se observa que se pierde un poco la resolución entre los picos. Por éstas razones se eligió el **programa de temperatura B** para los análisis posteriores ya que es el que ofrece la mejor resolución.

4.4 DETERMINACIÓN DEL VOLUMEN DE INYECCIÓN.

Para determinar el volumen de inyección más adecuado se consideraron tres puntos fundamentales, éstos son: que en diferentes inyecciones el valor de las áreas y el tiempo de retención de cada uno de los picos fueran lo más semejantes posible, es decir, que sean reproducibles; además, que los efectos de “coleo” y “frenteo” se minimizaran; para este fin, se varió el volumen de inyección de la muestra, así como también, los pasos a seguir para la toma de la misma y la rapidez de inyección.

Para administrar el uso de los estándares adquiridos, se decidió emplear en las inyecciones una mezcla de pentanos proveniente de una refinera, la cual contiene una gran cantidad de compuestos similares (en los ligeros) a los del estándar P.I.A.N.O.

Con base en la información de los artículos consultados y del reporte del estándar, se decidió que el volumen de inyección fuera de 0.2, 0.4, 0.6 y 0.8 μ L.; en las figuras 4.2 a 4.5 se muestran los resultados de estas inyecciones.

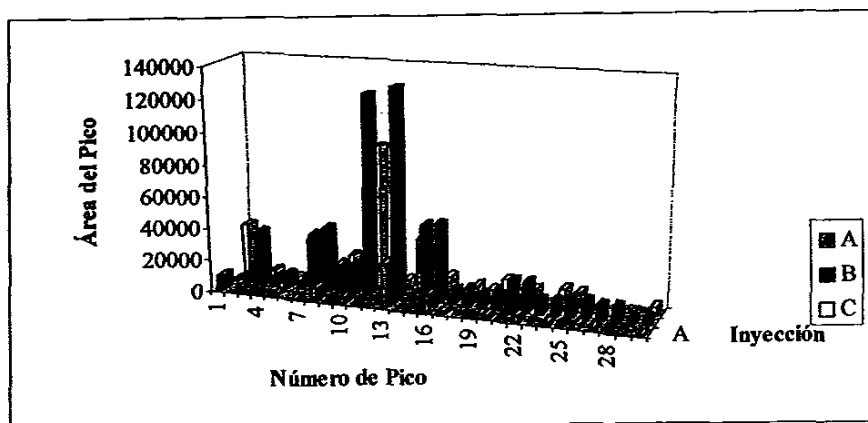


Figura 4.2 Reproducibilidad de la inyección con volumen de 0.2 μ L.

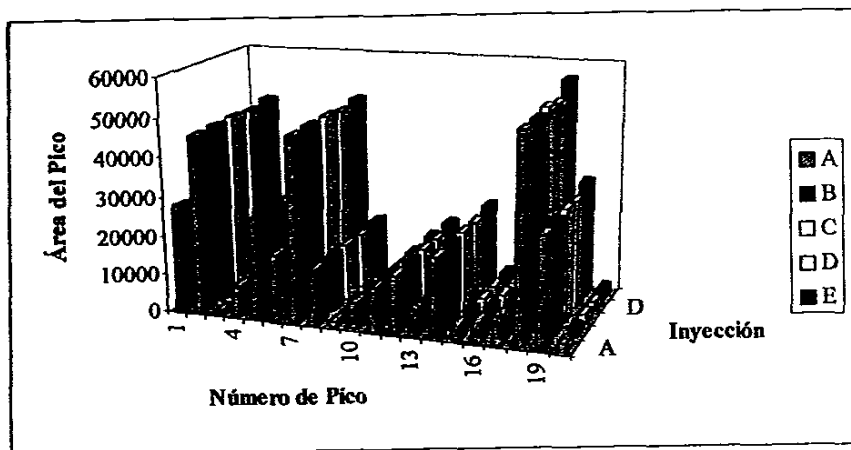


Figura 4.3 Reproducibilidad de la inyección con volumen de 0.4 µL.

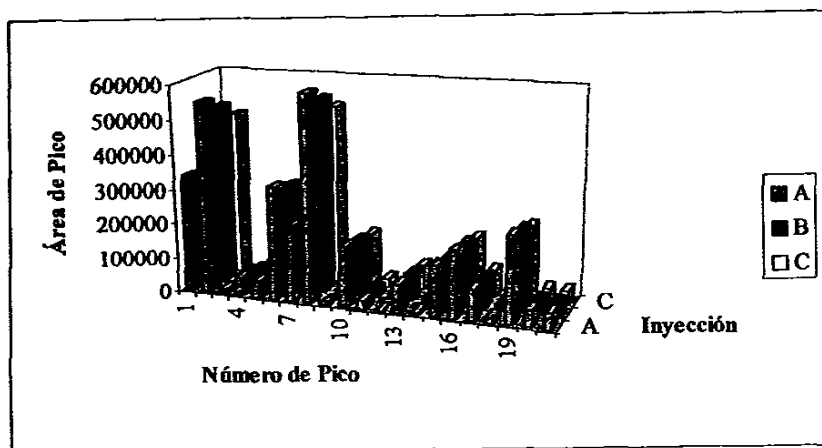


Figura 4.4 Reproducibilidad de la inyección con volumen de 0.6 µL.

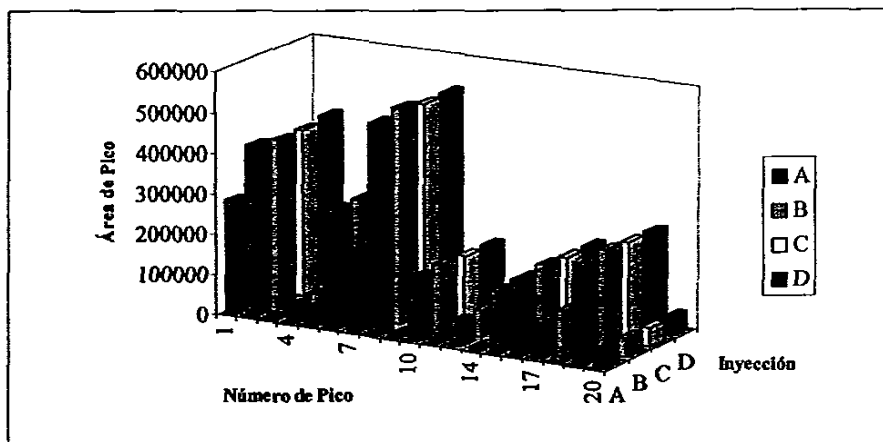


Figura 4.5 Reproducibilidad de la inyección con volumen de 0.8 μL .

Como se puede observar en las figuras anteriores, al inyectar un volumen de 0.2 μL no se reproduce la cantidad de picos ni el área de los mismos; a partir de 0.4 μL en adelante, se reproduce la cantidad de picos y áreas, sin embargo, para los volúmenes inyectados de 0.6 y 0.8 μL comienzan a presentarse problemas de “coleo” y “frenteo” entre los picos (ver Anexo II págs. 107 a 109), por lo tanto, el volumen más adecuado para las inyecciones subsecuentes es de 0.4 μL .

4.5 ESTABILIDAD DE LOS ÍNDICES DE RETENCIÓN DE LAS DIFERENTES MEZCLAS.

Con el propósito de verificar la estabilidad de los índices de retención de cada uno de los compuestos contenidos en las diferentes mezclas problema, se procedió a determinar sus respectivos índices, observándose un ligero desplazamiento en cada valor obtenido; esto se debe a la interacción intermolecular que existe entre los componentes de cada mezcla, ya que dicha interacción es diferente en presencia de otros compuestos, por ejemplo : aditivos, colorantes y oxigenados. Es por esto que se desarrollaron diferentes bases de datos tanto para la mezcla P.I.A.N.O. como para alquilados y gasolinas.

4.5.1 P.I.A.N.O. MEZCLA COMERCIAL.

Para poder observar la desviación existente en cada uno de los índices de retención de los compuestos incluidos en la mezcla P.I.A.N.O. comercial, se realizaron cinco inyecciones, y una vez calculados los índices de retención, se determinó el promedio y la desviación estándar para dichos compuestos. En la figura 4.6, se grafica la desviación estándar vs. índices de retención promedio.

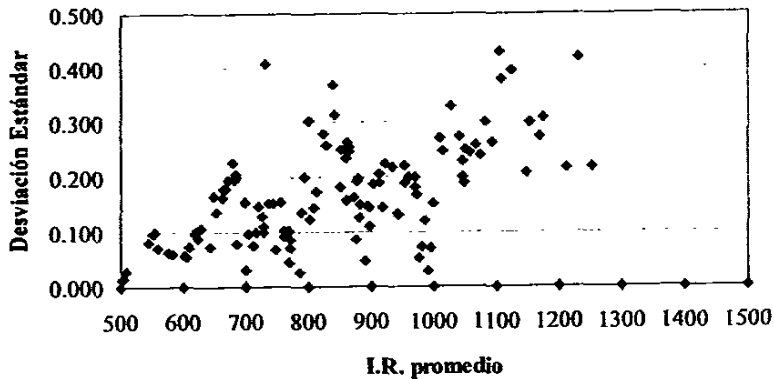


Figura 4.6 Relación entre la desviación estándar con el índice de retención promedio para los compuestos de la mezcla P.I.A.N.O. comercial.

Es importante mencionar que la desviación estándar de los índices de retención promedio es prácticamente despreciable, ya que sólo representa el 0.1% del valor de éstos.

4.5.2 ALQUILADOS.

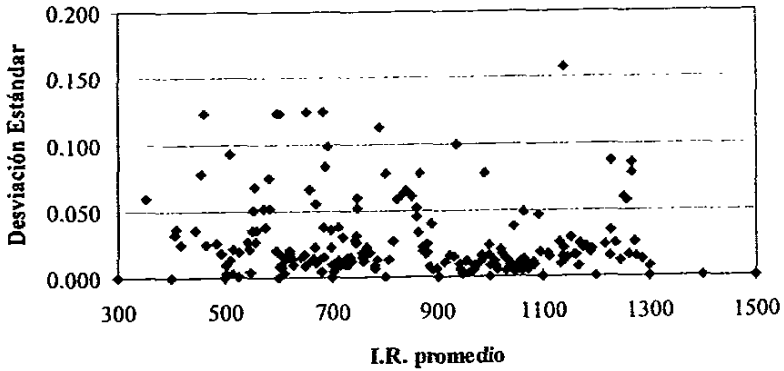


Figura 4.7 Relación entre la desviación estándar con el índice de retención promedio para los compuestos de alquilados.

4.4.3 GASOLINAS.

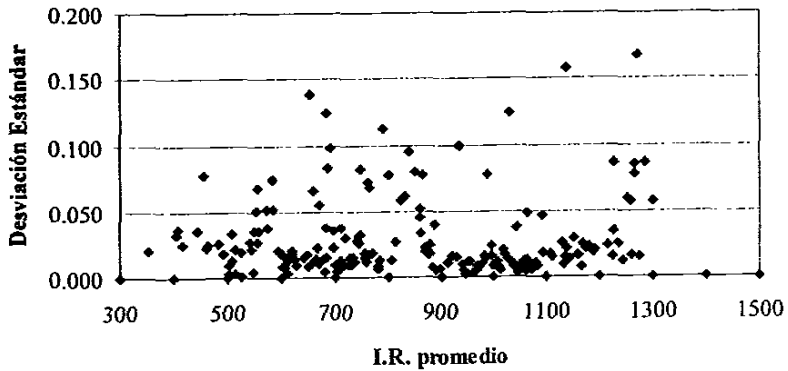


Figura 4.8 Relación entre la desviación estándar con el índice de retención promedio para los compuestos de gasolina comercial.

Al analizar los resultados obtenidos, se verificó que sólo el 1% de los índices de retención presentan una desviación estándar en el intervalo de 0.3 a 0.43 unidades, este hecho es muy importante ya que nos habla de la estabilidad y reproducibilidad de las condiciones de operación tanto del cromatógrafo como de la columna, y consecuentemente de los índices de retención. Con este antecedente se determinó el criterio de discriminación con el cual operará el programa para la identificación cualitativa, de tal manera que la desviación máxima permisible de un índice de retención no debe de exceder de 0.5 unidades para poder ser identificado con la mayor certidumbre posible.

4.6 ELABORACIÓN DE LAS BASES DE DATOS PARA EL ANÁLISIS DE MUESTRAS DE ALQUILADOS Y GASOLINAS.

Una vez que se verificó la estabilidad de los índices de retención de los componentes de las mezclas de alquilados y gasolinas, se procedió a realizar la identificación cualitativa de éstos, tomando como referencia los índices de retención calculados para los compuestos de la mezcla P.I.A.N.O., es decir, se compararon los índices de retención de los compuestos en las mezclas con los índices de la mezcla P.I.A.N.O., y aquellos que presentaron una diferencia de 0.5 unidades se les asignó el nombre correspondiente registrado en la certificación de los estándares.

Para el caso en que la comparación indicara la presencia de un aromático en las muestras de alquilado de isopentano con propileno, se corrigió el nombre del aromático por el de "Isoparafina de Alquilado", ya que se sabe, por información encontrada en previas investigaciones²⁷, que en ésta reacción no se obtienen compuestos aromáticos.

Por otro lado, en las muestras de gasolina se encontró que los componentes del estándar no fueron suficientes para identificar todos sus compuestos, por lo que se decidió asignarle el nombre de "Desconocido" a los índices de retención no identificados, con el propósito de que más adelante se enriquezca la base de datos con nuevos estándares y así se logren identificar.

Además se consideró que dichos compuestos "Desconocidos" son propios de las gasolinas, ya que siempre se detectaron en los análisis cromatográficos, con este antecedente, se pueden identificar los compuestos no tanto por el nombre sino por el índice de retención correspondiente.

Ya que fueron asignados los nombres a cada índice de retención, se procedió a calcular el factor de respuesta de cada compuesto con la ayuda de la ecuación 3.13 (capítulo 3); por lo cual, fue necesario determinar el número de carbonos y de hidrógenos que constituyen a la molécula de cada uno de los compuestos.

Cabe señalar que el factor de respuesta se calculó tomando como referencia al n-heptano, sin embargo, también se puede tomar como referencia al metano, siendo éstos, puntos de referencia totalmente arbitrarios.

En el Anexo II (páginas 111 a 118) se muestra la Base de Datos final con la cual se realizaron los análisis cualitativo y cuantitativo de las mezclas de alquilados y gasolinas. Como se puede observar, es una base de datos bastante amplia en donde se pueden encontrar los compuestos más importantes de las mezclas problema.

²⁷ PERALTA, Solorio D., *Op. Cit.*, pág. 70.

CAPÍTULO 5. DESARROLLO DE UN PROGRAMA EN “ LENGUAJE C ” PARA EL MANEJO DE DATOS CROMATOGRÁFICOS PARA EL ANÁLISIS CUALITATIVO Y CUANTITATIVO DE UNA MEZCLA DE HIDROCARBUROS.

La computadora resulta ser una herramienta muy importante en la vida cotidiana de cualquier área de trabajo, ya que tiene la capacidad de hacer un número enorme de operaciones en corto tiempo, lo que facilita la realización de trabajos muy extensos; para llevar a cabo dichas tareas, se requiere de disponer de un programa comercial que las realice, y de no ser así, es necesario desarrollar el programa mediante el uso de cualquier lenguaje de programación.

Los lenguajes más sencillos y comunes que se emplean para el desarrollo de programas son básicamente los siguientes: Basic, Fortran, Turbo Pascal, DBase y Turbo C. Estos lenguajes son adecuados de acuerdo a las necesidades que se tengan para resolver un problema, por ejemplo, es recomendable programar en lenguaje Fortran cuando la solución del problema se obtenga mediante procedimientos iterativos muy complejos, como sucede en la simulación de destilaciones multicomponentes.

En el caso particular de esta investigación, se empleó el lenguaje Turbo C debido a que tiene la capacidad de manejar bases de datos y además, de generar fácilmente un programa ejecutable, el cual se puede correr sin la necesidad del compilador correspondiente en sistema operativo MS-DOS, o bien, como una aplicación desde el ambiente Windows.

Por otro lado, el algoritmo de cálculo para el tratamiento de los resultados cromatográficos resulta sencillo programarlo en dicho lenguaje, y la facilidad en el suministro de los datos reportados por el cromatógrafo es notable. Además, el conocimiento previo de este lenguaje influyó en su selección para el desarrollo del programa; el cual se encargará de determinar la composición cualitativa y cuantitativa de los elementos contenidos en las mezclas problema.

5.1 ALGORITMO DE CÁLCULO.

Para proceder a la realización de un programa, se debe plantear la secuencia de pasos que éste realizará para procesar la información requerida; a esta secuencia de pasos se le conoce comúnmente como algoritmo de cálculo. Estos pasos se tienen que detallar lo mejor posible y tratar de no omitir alguno, ya que de esto depende que el programa tenga una buena lógica y codificación.

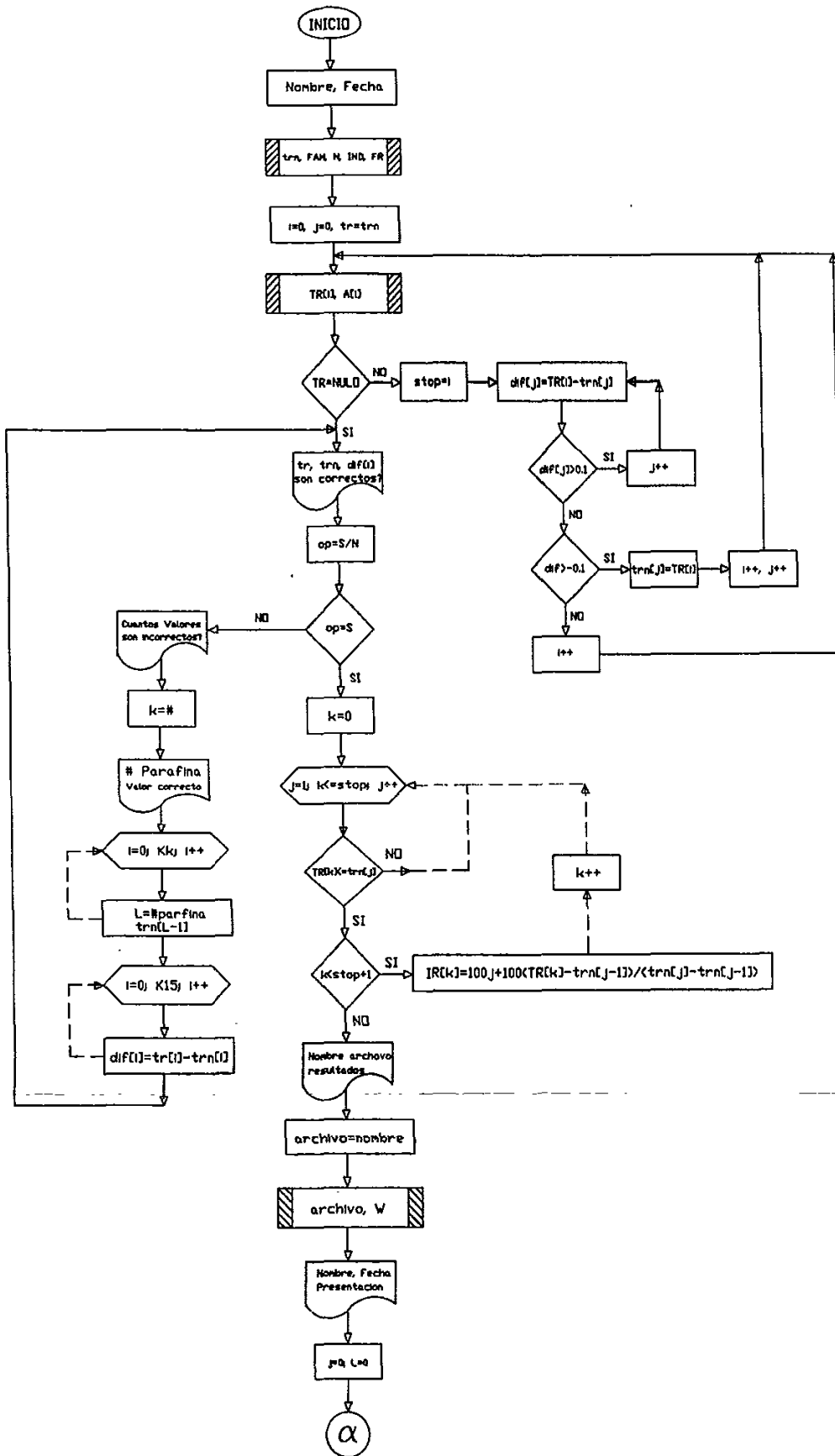
La manera más sencilla de plantear los pasos es realizarlos a mano, con la finalidad de determinarlos y así tener la certeza de no excluir a ninguno.

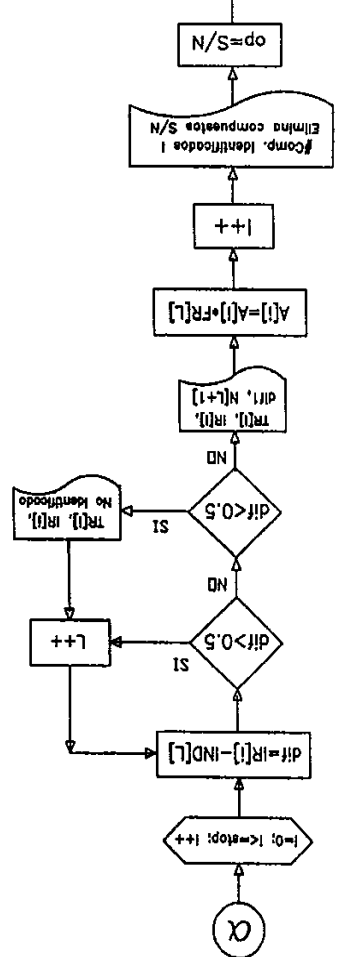
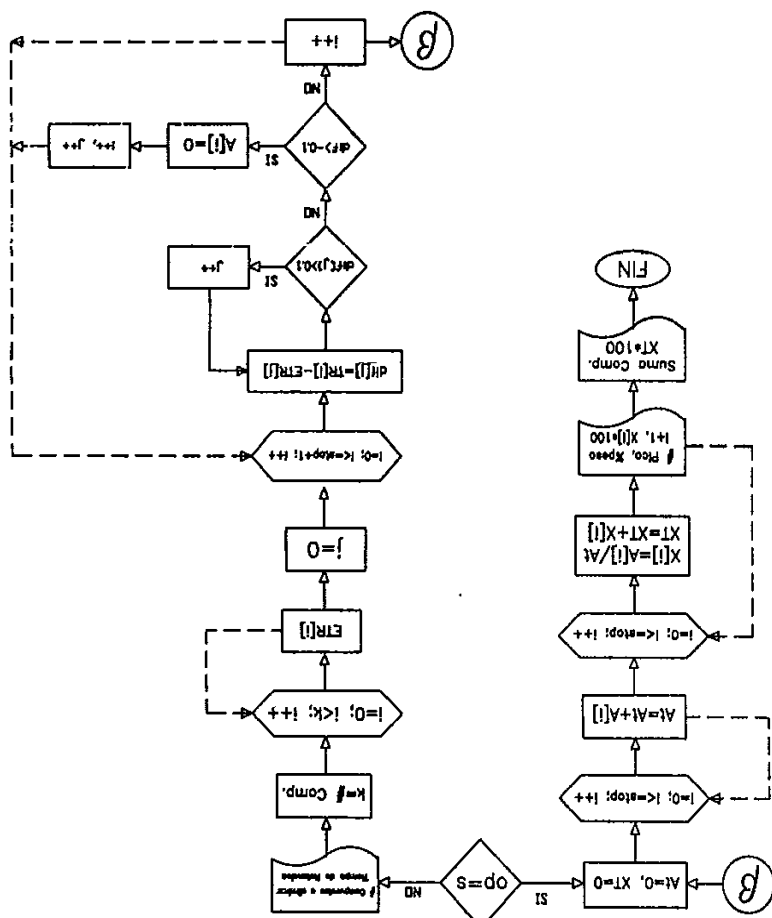
A continuación se presenta el algoritmo de cálculo para el método desarrollado en el presente trabajo.

1. Registro de la información acerca del nombre de la muestra problema y fecha de análisis.
2. Abrir y leer las bases de datos correspondientes al tiempo de retención de las n-parafinas, índices de retención, nombres de los compuestos y factores de respuesta, con las cuales se hará la comparación para el análisis.
3. Accesar y leer la información de los archivos que contienen los tiempos de retención y áreas de cada pico en la mezcla problema, asignándolas a sus respectivas variables.
4. Comparar los tiempos de retención de los picos detectados en el sistema cromatográfico con los tiempos de retención de las n-parafinas, con el objetivo de determinar la existencia de éstas en la mezcla problema.

5. Verificar que los tiempos de retención de las parafinas encontradas sean correctos, y de no ser así corregirlos.
6. Una vez que se han identificado, se sustituyen los tiempos de retención de las *n*-parafinas de la base de datos por los de la mezcla en cuestión.
7. Calcular los índices de retención para cada pico de la muestra problema, empleando los tiempos de retención de las *n*-parafinas corregidas.
8. Identificar los compuestos de la mezcla comparando los índices de retención calculados previamente con los índices de retención de la base de datos.
9. Corregir el área de cada pico con el correspondiente factor de respuesta del compuesto identificado.
10. Para el caso de los picos no identificados, se debe de considerar la zona en la que aparece la señal cromatográfica; contemplando el hecho de que las muestras, en determinados intervalos de tiempos de retención, suelen presentar compuestos característicos como isoparafinas o naftenos. Con este antecedente, se puede asignar un valor de factor de respuesta a los compuestos no identificados correspondiente a la especie que se encuentra comúnmente en dicha zona.
11. Una vez corregidas las áreas, se determina la concentración en % peso de los componentes de la mezcla.
12. Generar el reporte del análisis cualitativo y cuantitativo especificando el número de compuestos identificados y el criterio de discriminación empleado para la identificación cualitativa.





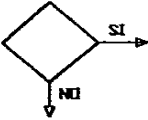



5.2 DIAGRAMA DE FLUJO





SIMBOLO

FUNCION

	INICIO O FIN DE PROGRAMA
	ASIGNACION DE VALORES
	IMPRESION DE LEYENDAS Y VALORES
	CIRCUITO 'FOR'
	SI CONDICIONAL
	CONECTOR DE FLUJO
	SECUENCIA NORMAL DE FLUJO
	SECUENCIA PARA CICLO 'FOR'

F.Q	DEPARTAMENTO DE INGENIERIA QUIMICA LABORATORIO DE INVESTIGACION EN PROCESOS CREDITO "E", 1-228	
	DIAGRAMA DE FLUJO DE PROGRAMA	
ELABORADO	I.Q. FLORENTINO MORENOZA RAMIREZ	
REVISADO	M.C. MIGUEL AGUSTIN DOMINGUEZ B.	
APROBADO	D.R. JORGE ALCARAZ CORTUZZO	1977-05

5.3 LISTADO.

/* Este programa realiza las siguientes funciones :

- 1.- Localiza los tiempos de retención de las n-parafinas en la mezcla problema.
- 2.- Calcula los índices de retención empleando los tiempos de las n-Parafinas encontradas.
- 3.- Compara los índices de retención calculados con los de la base de datos identificando los compuestos correspondientes.
- 4.- Determina la concentración de cada constituyente utilizando factores de respuesta teóricos referidos al n-heptano.
- 5.- Reporta la contribución de cada familia de compuestos en la mezcla.
- 6.- Almacena la información en disco.

Las bases de datos contienen información para poder analizar muestras de GASOLINA O ALQUILADO */

```
#include <math.h>
#include <stdio.h>
#include <letras.h>

main()

{ int i,l,j,k,L,TRN[16],stop;

FILE *a,*b,*c,*d,*e,*f,*g,*h,*imp,*B,*D;

float TR[300],A[300],trn[16],tr[16],TRC[200],
      IR[300],Ind[10],IND[300],dif1,dif[15],
      X[300],XT,At,tf,FR[300],ETR[35],AF[7],XF[7],
      FAM[300];

char op,op1,N[300][90],nom[70],fecha1[50],fecha2[50],
      archivo[11],archt[11],archa[11],error[16][3];

clrscr();
printf("\n
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO");
printf("\n
FACULTAD DE QUÍMICA ");
printf("\n
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA ");
printf("\n
LABORATORIO DE INVESTIGACIÓN EN PROCESOS ");
printf("\n
ANÁLISIS DETALLADO DE HIDROCARBUROS ");
printf("\n
PARA MUESTRAS DE GASOLINA O ALQUILADO ");

for(i=0;i<63;i++)
{ gotoxy(10+i,1);
printf("-");
gotoxy(10+i,13);
printf("-");
}

for(i=0;i<11;i++)
{ gotoxy(9,2+i);
printf(" ");
gotoxy(73,2+i);
printf(" ");
}
gotoxy(9,1);
```

```

printf("+"); gotoxy(73,1); printf("+"); gotoxy(9,13); printf("+"); gotoxy(73,13); printf("+");
gotoxy(3,12); printf("\n\n\n Nombre de la muestra : "); gets(nom);
printf("\n Fecha del Análisis Cromatográfico: "); gets(fecha1);
printf("\n Fecha Actual : "); gets(fecha2);
printf("\n Nombre del archivo a leer para el Tiempo de Retención : "); gets(archt);
printf("\n Nombre del archivo a leer para las Areas : "); gets(archa);

```

```
/* Lee Bases de Datos */
```

```

d=fopen("npgasol.txt","r");
i=0;
while(fscanf(d,"%f",&tm[i])!=EOF)
{ tm[i]=tm[i];
  i++;
}
fclose(d);
a=fopen("Famgasol.txt","r");
i=0;
while(fscanf(a,"%f",&FAM[i])!=EOF)
  i++;
fclose(a);
e=fopen("Nomgasol.txt","r");
i=0;
while(fgets(N[i],50,e)!=NULL)
  i++;
fclose(e);
h=fopen("irgasol.txt","r");
i=0;
while(fscanf(h,"%f",&IND[i])!=EOF)
  i++;
fclose(h);
B=fopen("frgasol.txt","r");
i=0;
while(fscanf(B,"%f",&FR[i])!=EOF)
  i++;
fclose(B);

```

```
/* Lee los datos del reporte */
```

```

b=fopen(archt,"r");
i=0; j=0; t=0;
while(fscanf(b,"%f",&TR[i])!=EOF)
{ stop=i;
  dif[j]=TR[j]-tm[j]; /* Identifica T.R. de parafinas en mezcla */
  while(dif[j]>0.1)
  { t=j;
    TRN[t]=i;
    j++;
    if(j==16) goto AREA;
    dif[j]=TR[j]-tm[j]; }
  if(dif[j]>0.1)
  { tm[j]=TR[t]; /* Corrige T.R. de parafinas con las del análisis */
    j++; i++;
    TRN[t]=0;
  }
}

```



```
/* Determina Índice de Retención No Isotérmico */
```

```
INDICE:
```

```
k=0;
```

```
for(j=1;k<=stop;j++)
```

```
  while(TR[k]<=trn[j])
```

```
    if(k<stop+1)
```

```
      { IR[k]=100*j+100*(TR[k]-trn[j-1])/(trn[j]-trn[j-1]);
```

```
        k++;
```

```
      }
```

```
    else goto H;
```

```
H:
```

```
printf("\n Nombre del archivo para el reporte : ");
```

```
scanf("%s",&archivo);
```

```
D=fopen(archivo,"w");
```

```
fprintf(D,"\n          UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MÉXICO");
```

```
fprintf(D,"\n          FACULTAD DE QUIMICA ");
```

```
fprintf(D,"\n          DEPARTAMENTO DE INGENIERIA QUIMICA ");
```

```
fprintf(D,"\n          LABORATORIO DE INVESTIGACIÓN EN PROCESOS ");
```

```
fprintf(D,"\n          ANALISIS DETALLADO DE HIDROCARBUROS ");
```

```
fprintf(D,"\n          PARA MUESTRAS DE GASOLINA O ALQUILADO ");
```

```
fprintf(D,"\n\n Nombre de la muestra : %s",nom);
```

```
fprintf(D,"\n\n Fecha del Análisis Cromatográfico : %s",fecha1);
```

```
fprintf(D,"\n\n Fecha de este reporte : %s",fecha2);
```

```
fprintf(D,"\n\n Pico Tiempo de Índice de Diferencia Nombre del compuesto ");
```

```
fprintf(D,"\n\n Retención Retención Índices \n\n");
```

```
j=0; L=0; I=0;
```

```
for(i=0;i<=stop;i++)
```

```
  { difl=IR[i]-IND[L];
```

```
    while(difl>0.5)
```

```
      { L++;
```

```
        difl=IR[i]-IND[L];
```

```
      }
```

```
  if(difl<0.5)
```

```
    { fprintf(D," %i %6.3f %6.3f ----- No Identificado \n",i+1,TR[i],IR[i]);
```

```
      AF[6]=AF[6]+A[i];
```

```
      /* L=L-1;*/
```

```
    }
```

```
  else
```

```
    { fprintf(D," %i %6.3f %6.3f %5.4f %s ",i+1,TR[i],IR[i],difl,N[L+1]);
```

```
      A[i]=A[i]*FR[L];
```

```
      for(j=0;j<=5;j++)
```

```
        { if(FAM[L+1]==j+1) /* Se determina a que familia pertenece */
```

```
          AF[j]=AF[j]+A[i]; /* el compuesto identificado y se acumula */
```

```
        } /* el área correspondiente */
```

```
      I++;
```

```
    }
```

```
  }
```

```
printf(D,"\n\n %i Compuestos identificados de %i",I,stop+1);
```

```
printf(D,"\n\n La ventana empleada es de 0.5 ");
```

```
/* Detemina Composicion de la mezcla*/
```

```
clrscr();
DCM:
printf("\n\n ¿ Quiere eliminar algún compuesto para deteminar la composición (s/n) ? ");
scanf("%s",&op);
if(op==115)
{ QP:
printf("\n\n Los compuestos a eliminar son sólo las n-Parafinas (s/n) ? ");
scanf("%s",&op1);
if(op1==115)
{ P:
printf(D,"\n\n Composición en %Peso SIN LAS n-PARAFINAS ");
AF[0]=0;
for(i=0;i<=16;i++)
ETR[i]=tm[i];
goto ELIMINA;
}
else
if(op1==83) goto P;
else
if(op1==78) goto COM;
else
if(op1==110) goto COM;
else
if(op1!=110)
{ printf("\n\n TIENE QUE PRESIONAR S o N");
goto QP;
}
}
COM:
AF[0]=0;
printf("\n\n Cuántos compuestos quiere eliminar ? ");
scanf("%i",&k);
printf("\n\n Teclee el Tiempo de Retención de dichos compuestos");
printf("\n\n Número de Compuesto Tiempo de Retención ");

for(i=0;i<k;i++)
{ gotoxy(27,15+i);
printf("%i",i+1);
gotoxy(48,15+i);
scanf("%f",&ETR[i]);
}
printf(D,"\n\n Composición en %Peso SIN LOS COMPUESTOS SELECCIONADOS ");
ELIMINA: /* Elimina los compuestos seleccionados mediante su tiempo de retención */
j=0;
for(i=0;i<=stop;i++)
{ dif[j]=TR[i]-ETR[j];
while(dif[j]>0.1)
{ j++;
dif[j]=TR[i]-ETR[j];
}
if(dif[j]>-0.1)
A[i]=0;
}
}
```


5.4 COMENTARIOS PARA EL MANEJO DEL PROGRAMA.

Para que el programa pueda leer la información proporcionada por el cromatógrafo de gases, es necesario que se le dé un tratamiento previo a estos resultados. El programa que procesa la información generada por el cromatógrafo de gases, desarrolla un reporte que lo almacena en un archivo de tipo "ASCII" con extensión .RPB; este archivo es fácil de leer en diferentes procesadores de texto u hojas de cálculo, en nuestro caso, es necesario leerlo en una hoja de cálculo (LOTUS 123 o EXCEL), con el propósito de crear dos archivos independientes en los que se encuentren el tiempo de retención y el área de cada uno de los picos detectados con formato de texto para MS-DOS.

CAPÍTULO 6. APLICACIÓN DEL PROGRAMA DESARROLLADO.

En el presente capítulo se muestran los resultados obtenidos con el programa desarrollado; en primer lugar, se aplica el análisis a la propia mezcla comercial P.I.A.N.O. con el fin de verificar la consistencia de los resultados del programa; posteriormente se aplica a mezclas de alquilación de isopentano y benceno con propileno, además se analizan muestras de gasolinas comerciales PREMIUM y MAGNA-SIN y finalmente una muestra de alquilado proveniente de una refinería.

Es importante señalar que el equipo cromatográfico tiene la capacidad de separar la mayoría de compuestos de las mezclas complejas, y además que la base de datos es capaz de identificar un número considerable de éstos, sin embargo, para fines prácticos en la presentación de los resultados, sólo se exponen los compuestos identificados con una composición superior o igual a 0.1 %Peso, y el resto de los componentes se encuentran en el correspondiente reporte que se muestra en el Anexo III.

Para poder realizar un análisis con el programa desarrollado en este trabajo, e inclusive con el programa comercial, es indispensable que la muestra problema contenga las n-Parafinas; ya sea que formen parte de su composición natural o bien, que sean adicionadas como estándar interno, de lo contrario, los resultados del análisis no serán confiables. Esto se debe a que el método de identificación se lleva a cabo mediante el uso de los índices de retención, los cuales toman como puntos de referencia a las n-Parafinas.

Para el caso en que las n-Parafinas se han adicionado a la mezcla problema como estándar interno, el programa cuenta con la opción de determinar la composición real de la mezcla, al eliminar la contribución de las n-Parafinas mediante la exclusión de las áreas correspondientes a éstas.

6.1 ESTÁNDAR P.I.A.N.O.

A continuación se muestra un ejemplo de los análisis realizados a la mezcla P.I.A.N.O. tal como lo reporta el programa desarrollado.

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
LABORATORIO DE INVESTIGACIÓN EN PROCESOS
ANÁLISIS DETALLADO DE HIDROCARBUROS
PARA LA MUESTRA COMERCIAL P.I.A.N.O.

Nombre de la muestra : ESTÁNDAR P.I.A.N.O.

Fecha del Análisis Cromatográfico : 28 DE AGOSTO DE 1997.

Fecha de este reporte : 17 DE DICIEMBRE DE 1997.

Pico No.	Tiempo de Retención	Índice de Retención	Diferencia Índices	Nombre del compuesto
1	8.234	445.710	-----	No Identificado
2	8.601	465.515	-----	No Identificado
3	8.934	483.486	-----	No Identificado
4	9.109	492.930	-----	No Identificado
5	9.240	500.000	0.0000	n-Pentane (G)
6	9.375	502.901	-0.0023	trans-2-Pentene (G)
7	9.450	504.512	-0.0028	cis-2-Pentene (G)
8	9.698	509.841	0.0180	4-Methylpentene-1
9	11.341	545.144	0.0410	Cyclopentane (G)
10	11.733	553.567	0.0598	2,3-Dimethylbutane (G)
11	11.802	555.049	0.0364	Desconocido
12	12.006	559.433	0.0388	2-Methylpentane (G)
13	12.806	576.622	0.0292	3-Methylpentane (G)
14	13.149	583.992	0.0112	1-Hexene
15	13.894	600.000	0.0000	n-Hexane (G)
16	14.208	603.333	0.0370	trans-2-Hexene
17	14.371	605.063	0.0272	2-Methylpentene-2
18	14.884	610.508	0.0344	cis-2-Hexene
19	15.691	619.074	0.0444	2,2-Dimethylpentane

20	15.887	621.155	0.0549	Methylcyclopentane (G)
21	16.194	624.414	0.0426	2,4-Dimethylpentane (G)
22	16.645	629.201	0.0547	2,2,3-Trimethylbutane
23	17.900	642.522	0.0261	Benzene (G)
24	18.433	648.180	0.0847	3,3-Dimethylpentane
25	18.786	651.927	0.0705	Cyclohexane (G)
26	19.690	661.522	0.0862	2-Methylhexane (G)
27	19.858	663.305	0.1024	2,3-Dimethylpentane
28	20.136	666.256	0.0952	1,1-Dimethylcyclopentane
29	20.590	671.075	0.1133	3-Methylhexane (G)
30	21.257	678.155	0.1362	cis-1,3-Dimethylcyclopentane
31	21.557	681.340	0.1105	trans-1,3-Dimethylcyclopentane
32	21.694	682.794	0.1288	3-Ethylpentane
33	21.855	684.503	0.1197	trans-1,2-Dimethylcyclopentane
34	21.981	685.840	0.0372	1-Heptene
35	23.075	697.453	0.0985	trans-3-Heptene
36	23.315	700.000	0.0000	n-Heptane (G)
37	23.435	700.861	0.0182	cis-3-Heptene
38	23.861	703.919	0.0657	trans-2-Heptene
39	24.826	710.845	0.0557	cis-2-Heptene
40	25.639	716.680	0.0778	Methylcyclohexane (G)
41	25.975	719.091	0.1124	2,2-Dimethylhexane
42	27.090	727.094	0.1099	Ethylcyclopentane
43	27.262	728.328	0.0914	2,5-Dimethylhexane
44	27.504	730.065	-0.0847	2,4-Dimethylhexane (G)
45	28.208	735.118	0.1340	ctc-1,2,4-Trimethylcyclopentane
46	29.151	741.886	0.1442	ctc-1,2,3-Trimethylcyclopentane
47	29.984	747.865	0.0887	Toluene (G)
48	30.993	755.107	0.1456	2,3-Dimethylhexane (G)
49	31.855	761.293	0.1053	2-Methylheptane
50	32.065	762.801	0.1055	4-Methylheptane
51	32.950	769.152	0.0563	cct-1,2,4-Trimethylcyclopentane
52	33.267	771.428	0.0826	3-Methylheptane (G)
53	33.432	772.612	0.0707	trans-1,4-Dimethylcyclohexane
54	35.259	785.725	0.0336	1-Octene
55	35.724	789.062	0.0939	1-Ethyl-1-Methylcyclopentane
56	36.184	792.363	0.1324	trans-1,2-Dimethylcyclohexane
57	37.169	799.433	0.2110	ccc-1,2,3-Trimethylcyclopentane
58	37.248	800.000	0.0000	n-Octane
59	37.872	803.354	0.0625	trans-2-Octene
60	38.608	807.311	0.0510	Isopropylcyclopentane
61	39.342	811.257	0.0508	cis-2-Octene
62	41.711	823.992	0.0530	cis-1,2-Dimethylcyclohexan
63	42.708	829.352	0.0097	n-Propylcyclopentane (N9+N8)
64	44.468	838.813	0.0391	1,1,4-Trimethylcyclohexane(+ 2 I9)

65	44.834	840.781	-0.0134	3,5-Dimethylheptane(2 I9)
66	46.561	850.065	-0.0535	Ethylbenzene (G)
67	47.139	853.172	0.0117	ctt-1,2,4-Trimethylcyclohexane
68	48.274	859.273	0.0402	m-Xylene (G)
69	48.489	860.429	-0.0090	p-Xylene (G)
70	48.703	861.579	0.0804	2,3-Dimethylheptane
71	49.052	863.456	0.0785	3,4-Dimethylheptane(D)
72	49.203	864.267	0.0763	3,4-Dimethylheptane(L)
73	50.349	870.428	0.0459	2-Methyloctane
74	51.264	875.347	0.0657	ctc-1,2,4-Trimethylcyclohexane
75	51.487	876.546	0.0135	3-Methyloctane
76	51.784	878.142	0.0781	3,3-Diethylpentane
77	52.190	880.325	0.0357	1,1,2-Trimethylcyclohexane
78	52.320	881.024	0.0496	o-Xylene (G)
79	54.110	890.646	0.0182	1-Nonene
80	54.426	892.345	0.0679	Isobutylcyclopentane
81	55.159	896.285	0.0864	trans-3-Nonene
82	55.383	897.490	0.0615	cis-3-Nonene
83	55.850	900.000	0.0000	n-Nonane
84	56.254	903.430	0.1099	trans-2-Nonene
85	57.196	911.427	0.1082	Isopropylbenzene (cumeno)
86	57.348	912.718	0.1176	cis-2-Nonene
87	57.958	917.896	0.0643	Isopropylcyclohexane
88	58.426	921.869	0.1384	2,2-Dimethyloctane
89	59.902	934.400	0.1232	n-Butylcyclopentane
90	60.627	940.555	0.0732	3,3-Dimethyloctane
91	61.010	943.807	0.0657	n-Propylbenzene
92	61.929	951.609	0.1268	1-Methyl-3-Ethylbenzene (G)
93	62.164	953.604	0.0999	1-Methyl-4-Ethylbenzene (G)
94	62.871	959.606	0.1121	1,3,5-Trimethylbenzene (G) + I10
95	63.899	968.333	0.0945	1-Methyl-2-Ethylbenzene
96	63.997	969.165	0.1125	2-Methylnonane
97	64.358	972.230	0.1043	3-Ethyloctane
98	64.708	975.202	0.0377	3-Methylnonane
99	65.501	981.934	0.0220	tert-Butylbenzene + A9
100	66.047	986.569	0.0483	Isobutylcyclohexane
101	66.464	990.109	-0.0185	1-Decene
102	67.173	996.129	0.0137	Isobuthylbenzene + N10
103	67.442	998.412	0.0545	sec-Butylbenzene
104	67.629	1000.000	0.0000	n-Decane
105	68.464	1009.605	0.1314	1-Methyl-3-Isopropylbenzene
106	68.779	1013.229	0.1151	1-Methyl-4-Isopropylbenzene
107	70.000	1027.275	0.1589	1-methyl-2-isopropylbenzene
108	71.228	1041.401	0.1221	1-Methyl-3-n-Propylbenzene
109	71.581	1045.462	0.0939	1-Methyl-4-n-Propylbenzene

110	71.666	1046.440	0.0728	1,3-Diethylbenzene
111	71.830	1048.326	0.0723	1,3-Dimethyl-5-Ethylbenzene
112	72.047	1050.823	0.1075	1,2-Diethylbenzene"
113	72.594	1057.115	0.0980	1-Methyl-2-n-Propylbenzene
114	73.466	1067.146	0.1130	1,4-Dimethyl-2-Ethylbenzene
115	74.122	1074.692	0.1002	1,2-Dimethyl-4-Ethylbenzene
116	74.639	1080.640	0.1346	1,3-Dimethyl-2-Ethylbenzene
117	75.778	1093.742	0.1071	1,2-Dimethyl-3-Ethylbenzene
118	76.322	1100.000	0.0000	n-Undecane
119	76.930	1108.501	0.1750	2-methylbutylbenzene
120	78.057	1124.259	0.1790	tert-1-butyl-2-methylbenzene
121	79.810	1148.770	0.0835	n-Pentylbenzene
122	80.067	1152.363	0.1510	t-1-Methyl-2-(4MethylPentyl)cyclopentane
123	81.221	1168.498	0.1243	ter-1-butyl-3,5-dimethylbenzene
124	81.592	1173.686	0.1448	t-1-Butyl-4-Ethylbenzene
125	82.789	1190.422	-----	No Identificado
126	83.474	1200.000	0.0000	n-Dodecane
127	84.175	1211.193	0.1107	1,3,5-Triethylbenzene
128	85.429	1231.215	0.2001	1,2,4-triethylbenzene
129	86.806	1253.201	0.0863	n-Hexylbenzene
130	87.285	1260.849	-----	No Identificado
131	89.737	1300.000	0.0000	n-Tridecane
132	95.427	1400.000	0.0000	n-Tetradecane
133	100.700	1500.000	0.0000	n-Pentadecane

127 Compuestos identificados de 133

La ventana empleada es de 0.5

La Composición en %Peso CON LAS PARAFINAS es :

Reporte por FAMILIAS :

PARAFINAS :	19.7573
ISOPARAFINAS :	15.5593
AROMÁTICOS :	25.2867
NAFTENOS :	17.3165
OLEFINAS :	18.1648
DESCONOCIDOS :	0.2605
NO IDENTIFICADOS :	3.6551

Reporte por COMPUESTO :

Pico No.	Composición %Peso	Pico No.	Composición %Peso	Pico No.	Composición %Peso	Pico No.	Composición %Peso
1	0.4285	36	1.9631	71	0.2479	106	0.2691
2	0.8097	37	1.1525	72	0.2904	107	0.2831
3	0.9214	38	0.7874	73	0.5551	108	0.506
4	0.3226	39	1.2017	74	0.571	109	0.5322
5	2.0921	40	1.0266	75	0.8508	110	0.5336
6	0.4323	41	0.2772	76	0.2993	111	0.5314
7	0.3986	42	0.6464	77	0.5933	112	0.266
8	0.4211	43	0.5679	78	0.5321	113	0.5358
9	0.7516	44	0.3184	79	1.4798	114	0.5286
10	0.9765	45	0.2967	80	0.6249	115	0.5342
11	0.2605	46	0.2929	81	0.4072	116	0.2308
12	0.8911	47	1.1828	82	0.7822	117	0.5087
13	0.8854	48	0.2794	83	1.8864	118	1.8652
14	1.4843	49	0.816	84	0.4092	119	0.2664
15	1.9477	50	0.5672	85	0.5467	120	0.1833
16	0.374	51	0.7854	86	0.5257	121	1.0496
17	0.7382	52	0.4856	87	0.972	122	0.5802
18	0.8365	53	0.6123	88	0.5338	123	0.5132
19	0.2699	54	1.5742	89	0.6267	124	0.5294
20	0.61	55	0.1829	90	0.5577	125	0.3563
21	0.7027	56	0.2908	91	1.0969	126	1.7582
22	0.7411	57	0.1677	92	0.4744	127	1.0556
23	1.9007	58	1.6984	93	0.5961	128	0.2521
24	0.2945	59	0.3968	94	0.7731	129	1.0193
25	1.0059	60	0.609	95	0.5558	130	0.8167
26	0.4381	61	0.7587	96	0.5255	131	1.656
27	0.307	62	0.6519	97	0.5254	132	1.5886
28	0.6423	63	1.2169	98	0.8286	133	1.4962
29	0.2838	64	1.5705	99	1.6421		
30	0.0857	65	0.4144	100	0.9593		
31	0.4939	66	1.6903	101	1.579		
32	0.1491	67	0.6188	102	1.6829		
33	0.2894	68	0.5522	103	0.5467		
34	1.5828	69	1.1044	104	1.8055		
35	0.7933	70	0.2703	105	0.281		

Suma : 100.00

En el análisis anterior podemos observar más claramente el efecto que tiene la ausencia de las n-parafinas en la muestra problema. En este caso, la muestra carece de la presencia de la n-parafina C4 (n-butano), y por lo tanto, el índice de retención calculado para los compuestos que se encuentran entre el n-butano y el n-pentano, tendrán una desviación mayor con respecto al índice de retención registrado en la base de datos, por lo que no es posible llevar a cabo la identificación correcta de éstos compuestos.

La desviación que presenta el índice de retención calculado en la ausencia de la n-parafina C4, se debe a que el programa toma el tiempo de retención del n-butano registrado en la base de datos, el cual difiere del que podría tener en la mezcla problema como consecuencia de las imprecisiones en la inyección.

Asimismo, también se puede verificar que el programa determina adecuadamente la concentración de la mezcla, con respecto a la reportada en el estándar (concentración real), mediante el uso de los factores de respuesta; esto con la finalidad de corregir las áreas correspondientes a los compuestos identificados.

En la tabla 6.1 se compara la composición en % Peso por familias reportada en el estándar y la determinada por el programa.

Familia	%Peso Estándar P.I.A.N.O.	%Peso Programa
Parafinas	20.634	19.757
Isoparafinas	16.775	15.5593
Aromáticos	25.403	25.2867
Naftenos	17.320	17.3165
Olefinas	19.868	18.1648
Desconocidos	-----	0.2605
No Identificados	-----	3.6551

Tabla 6.1 Comparación de las concentraciones por familia de la mezcla P.I.A.N.O.

Como se puede observar en la tabla 6.1, existe una ligera diferencia entre los valores reportados por el proveedor del estándar P.I.A.N.O. y los calculados por el programa; esto se debe a que los compuestos “No Identificados” y “Desconocidos” principalmente son olefinas y consecuentemente, tienen una contribución negativa en la composición de esta familia.

6.2 MUESTRAS DE ALQUILADO.

Las muestras de alquilado que fueron analizadas forman parte de otros proyectos del laboratorio. Los detalles a cerca de los catalizadores y las diferentes condiciones de operación, se describen en los trabajos realizados por David Peralta Solorio²⁸ para el caso de la alquilación del Isopentano/Propileno, y de Carlos Islas Flores²⁹ para la correspondiente de Benceno/Propileno. En estos trabajos se estudian dichas reacciones bajo diferentes condiciones de operación, en las cuales se modificaron las siguientes variables:

1. Relación de isopentano/propileno y benceno/propileno.
2. Tipo y cantidad de catalizador.
3. Presión.
4. Temperatura.
5. Flujos de alimentación de los reactivos y productos.

Las muestras de isopentano/propileno y benceno/propileno analizadas en el presente trabajo, se produjeron en el laboratorio bajo las condiciones de operación que se describen en los subcapítulos 6.2.1. y 6.2.2. respectivamente.

²⁸ PERALTA, Solorio D., *Op. Cit.*

²⁹ ISLAS, Flores C. “Empleo de resinas de intercambio iónico como catalizadores para alquilación. Una propuesta para la reducción de benceno en gasolinas de reformado”, U.N.A.M., Facultad de Química, México, 1997, 110 p.p.

6.2.1 ISOPENTANO CON PROPILENO.

El sistema de reacción está formado por un reactor de acero inoxidable con capacidad nominal de 350 mL, que opera en forma semicontinua y con agitación constante; además está equipado con una mantilla de calentamiento para mantener la temperatura constante. El catalizador empleado es una mezcla de resina Amberlyst 15 y BF_3 que se prepara *in situ*.

En la tabla 6.2 se muestran las condiciones de operación con las cuales se obtuvo la muestra analizada.

Variable	Valor
Relación Isopentano / Propileno	3.46 mol ICS / mol O3
Relación Amberlyst / BF_3	0.403 g Amberlyst / g BF_3
Flujo de alimentación de Propileno	65 cm^3 / min.
Masa inicial de Isopentano	77.2 g.
Temperatura	41 °C
Presión	30 psi.
Tiempo de reacción	60 min.

Tabla 6.2 Condiciones de reacción para la obtención del alquilado de Isopentano / Propileno.

Al realizar el análisis cromatográfico de la muestra se lograron identificar los componentes más importantes de ésta. En la tabla 6.3 se muestran dichos componentes según el reporte correspondiente que se encuentra en el Anexo III (página 120 a 122).

Tiempo de Retención	Índice de Retención	Diferencia Índices	Composición (%Peso)	Nombre del compuesto
6.678	257.661	-----	0.1866	*Propilene*
8.577	465.063	0.2359	77.6477	Isopentane (G)
9.216	500	0	1.0339	n-Pentane (G)
11.976	559.483	0.0108	2.3903	2-Methylpentane (G)
12.773	576.659	-0.0575	0.5944	3-Methylpentane (G)
16.147	624.385	-0.0557	0.6446	2,4-Dimethylpentane (G)
19.633	661.49	-0.1068	0.514	2-Methylhexane (G)
19.799	663.257	-0.0989	0.4876	2,3-Dimethylpentane
20.527	671.006	-0.1461	0.2427	3-Methylhexane (G)
27.247	728.732	0.2957	4.4959	2,5-Dimethylhexane
27.462	730.278	0.1005	1.5624	2,4-Dimethylhexane (G)
30.922	755.155	-0.1006	1.0145	2,3-Dimethylhexane (G)
31.765	761.217	-0.1744	0.4072	2-Methylheptane
32.847	768.996	-0.2297	0.2058	cct-1,2,4-Trimethylcyclopentane
34.528	781.083	-0.2202	0.3896	2,2,5-Trimethylhexane
44.36	838.692	-0.1248	0.6141	2,5-Dimethylheptane (+ N9)
65.984	986.647	0.1265	0.1197	Isobutylcyclohexane

Tabla 6.3. Compuestos identificados más importantes en la muestra de alquilación de Isopentano / Propileno.

N9 : 1,1,4-Trimethylcyclohexane.

En este análisis la identificación del propileno se llevó a cabo mediante los registros de su tiempo de retención, los cuales fueron obtenidos al inyectar únicamente propileno de alta pureza. La necesidad de realizar de esta manera la identificación, se debió a la ausencia de las n-parafinas C2 y C3 en la mezcla problema, lo que origina que el valor de su índice de retención sea muy variable y no concuerde con el registrado en la base de datos para su correcta identificación.

En la tabla 6.3 se puede observar que la reacción tiende hacia la formación de cinco principales productos que se encuentran en mayor proporción; éstos se enlistan a continuación en orden descendente respecto a su concentración en % Peso:

- 2,5-Dimetilhexano.
- 2-Metilpentano.
- 2,4-Dimetilhexano.
- Pentano.
- 2,3-Dimetilhexano.

También se puede verificar que la reacción forma compuestos que son característicos de las gasolinas aunque en menor concentración.

Finalmente, tomando en cuenta todos los productos incluyendo los no identificados, se ha obtenido para esta reacción en las condiciones de operación ya mencionadas, una composición de 22.17% en peso de **Productos** y 77.83% de **Reactivos**, lo que sirve como referencia para optimizar posteriormente las condiciones de operación del reactor y así obtener un alquilado de mayor calidad.

6.2.2 BENCENO CON PROPILENO.

La muestra de alquilado benceno / propileno se obtuvo con un sistema de reacción igual al descrito en el caso del alquilado isopentano / propileno, modificándose únicamente las condiciones de operación del reactor y el catalizador empleado, el cual fue sólo resina de intercambio iónico Amberlyst 15. Las condiciones de operación para éste sistema se muestran en la tabla 6.4.

Variable	Valor
Relación Benceno / Propileno	1.43 mol C6 / mol O3.
Cantidad de Catalizador	4.0 gr.
Flujo de alimentación de Propileno	6 cm ³ / min.
Masa inicial de Benceno	20 gr.
Temperatura	400 °C.
Presión	100 psi.
Tiempo de reacción	60 min.

Tabla 6.4 Condiciones de reacción para la obtención del alquilado de Benceno / Propileno.

Posteriormente se procedió a analizar el producto obtenido en el cromatógrafo de gases y finalmente se procesaron los datos cromatográficos en el programa desarrollado con el que se lograron identificar los compuestos que se muestran en el Anexo III (páginas 123 a 125). En la tabla 6.5 se muestran los compuestos identificados más importantes de ésta muestra.

Teiempo de Retención	Indice de Retención	Diferencia Índices	Composición (%Peso)	Nombre del compuesto
6.717	299	-----	0.3504	Propylene**
14.227	603.312	0.0161	0.1565	trans-2-Hexene
14.390	605.042	0.0065	0.4248	2-Methylpentene-2
16.237	624.650	0.2787	0.2176	2,4-Dimethylpentane (G)
18.038	643.769	1.1830	54.6529	Benzene**
46.571	849.866	-0.2523	0.1904	Ethylbenzene (G)
57.402	912.756	0.1560	27.4714	Isopropylbenzene (cumeno) (GM)
61.017	943.477	-0.2635	0.4946	n-Propylbenzene
65.502	981.593	-0.3194	0.2273	tert-Butylbenzene + A9
67.447	998.122	-0.2361	0.2628	sec-Butylbenzene
79.590	1145.053	-----	6.4480	1,3-Diisopropylbenzene**
80.994	1164.673	-----	3.3369	1,4-Diisopropylbenzene**
91.339	1327.204	-----	0.6375	1,3,5-Triisopropylbenzene**
99.790	1481.568	-----	0.5376	1,2,3,5-Tetraisopropylbenzene**

Tabla 6.5. Compuestos identificados más importantes en la muestra de alquilación de Benceno / Propileno.

Es importante señalar que la base de datos desarrollada siempre tendrá limitaciones debido a que existe una gran cantidad de compuestos que no están incluidos en ésta; por ello, la identificación de los compuestos marcados con doble asterisco se efectuó por medio de la información reportada en el trabajo realizado por Carlos Islas Flores³⁰, ya que éstos compuestos no se encuentran incluidos en la base de datos desarrollada.

En el trabajo arriba citado, la identificación de éstos componentes se llevó a cabo mediante la inyección de los compuestos puros para obtener los tiempos de retención de éstos, y posteriormente se compararon con los obtenidos en las inyecciones de las muestras de alquilado; al coincidir los tiempos de retención se asignaron los nombres correspondientes.

En la Tabla 6.5 se observa que el producto principal de la reacción, bajo las condiciones de operación antes mencionadas, es el Isopropilbenceno (Cumeno) cuya concentración es de 27.47 %Peso, lo cual es muy aceptable considerando que los productos restantes tienen una concentración inferior a 0.1 %Peso a excepción del 1,4- y 1,3-Diisopropilbenceno que poseen una concentración de 6.45 y 3.31 %Peso respectivamente.

Aún con las limitaciones de la base de datos, se lograron identificar algunos de los subproductos de la reacción en estudio y en la medida de que éstos compuestos sean de interés, se puede verificar su existencia con la ayuda de otros equipos analíticos acoplados al cromatógrafo de gases, como por ejemplo uno de Espectroscopía de Infrarrojo.

³⁰ ISLAS. Flores C. *Op. Cit.*

6.3 MUESTRAS COMERCIALES :

Al realizar el Análisis Detallado de Hidrocarburos para las muestras de las gasolinas MAGNA SIN y PREMIUM, se identificaron para cada una de ellas sus compuestos más característicos, pero debido a la gran cantidad de compuestos identificados en estas muestras, solo se presentan aquellos que tienen una concentración superior o igual a 0.5 %Peso; encontrándose en el Anexo III (páginas 126 a 137) el reporte completo.

Es necesario mencionar que la base de datos no incluye a compuestos oxigenados, colorantes y otros aditivos, por lo que el análisis solo se efectuará para identificar la mayor cantidad posible de hidrocarburos.

6.3.1 GASOLINA MAGNA SIN.

Tiempo de Retención	Índice de Retención	Diferencia Índices	Composición (%Peso)	Nombre del compuesto
9.241	500	0	3.6431	n-Pentane (G)
12.036	559.761	0.2886	3.7809	2-Methylpentane (G)
12.824	576.609	-0.108	2.197	3-Methylpentane (G)
13.918	600	0	2.3047	n-Hexane (G)
15.895	620.967	-0.2138	0.9726	Methylcyclopentane (G)
16.206	624.266	-0.1754	0.7269	2,4-Dimethylpentane (G)
17.913	642.369	-0.1777	1.1044	Benzene (G)
19.721	661.544	-0.0528	1.3003	2-Methylhexane (G)
19.88	663.23	-0.1255	0.7229	2,3-Dimethylpentane
20.164	666.242	-0.3276	0.4942	1,1-Dimethylcyclopentane
20.625	671.132	-0.0204	1.4354	3-Methylhexane (G)
23.347	700	0	1.4195	n-Heptane (G)
27.292	728.353	-0.0833	0.7354	2,5-Dimethylhexane
27.532	730.078	-0.0994	0.7641	2,4-Dimethylhexane (G)
29.613	745.034	0.3408	2.7551	2,3,4-Trimethylpentane (G)
30.143	748.843	0.2579	6.8294	2,3,3-Trimethylpentane (G)
31.028	755.203	-0.0526	0.7176	2,3-Dimethylhexane (G)
31.876	761.298	-0.093	0.6171	2-Methylheptane

32.968	769.146	-0.0798	0.5979	cct-1,2,4-Trimethylcyclopentane
34.645	781.199	-0.1042	0.6675	2,2,5-Trimethylpentane?
37.261	800	0	0.8968	n-Octane
46.612	850.353	0.4037	1.5186	Ethylbenzene (G)
48.453	860.266	-0.146	3.7007	p-Xylene (G)
48.627	861.203	-0.3851	1.7063	2,3-Dimethylheptane
52.278	880.863	-0.1114	2.1733	o-Xylene (G)
55.832	900	0	0.5684	n-Nonane
60.994	943.854	-0.0535	0.5568	n-Propylbenzene
61.981	952.239	0.4445	1.7815	1-Methyl-3-Ethylbenzene (G)
62.194	954.048	0.2861	0.8064	1-Methyl-4-Ethylbenzene (G)
62.859	959.698	0.1855	0.8536	1,3,5-Trimethylbenzene (G) +I10
63.903	968.567	0.1118	0.8808	1-Methyl-2-Ethylbenzene
71.218	1041.686	0.0809	0.5894	1-Methyl-3-n-Propylbenzene
74.108	1075.012	0.1646	0.5470	1,2-Dimethyl-4-Ethylbenzene

Tabla 6.6 Compuestos identificados más importantes en la gasolina MAGNA SIN

Lo más importante que se puede observar de la tabla 6.6 es la identificación de los compuestos que en la literatura³¹ se conocen como característicos en las gasolinas, de los que sobresalen por su mayor concentración el 2,3,4-, 2,3,3-, trimetilpentano, n-pentano, 3-, 2-metilpentano, y el n-hexano.

Otro punto importante es la presencia y concentración determinada para el benceno, que tiene un valor de 1.104 %Peso, la cual se encuentra dentro de los niveles establecidos por las normas mexicanas en donde se establece que la concentración de benceno debe estar entre 1 y 2 %Vol.

³¹ Canadian C.G.S.B.-3.0, *Op. Cit.*

6.3.2 GASOLINA PREMIUM.

Tiempo de Retención	Índice de Retención	Diferencia Índices	Composición (%Peso)	Nombre del compuesto
7.49	400	0	1.3521	n-Butane (G)
8.682	464.783	-0.0444	7.2305	Isopentane (G)
9.33	500	0	2.1580	n-Pentane (G)
11.874	554.151	0.1317	5.8871	2,3-Dimethylbutane (G)
12.13	559.6	0.1279	1.9215	2-Methylpentane (G)
12.936	576.756	0.0391	1.2832	3-Methylpentane (G)
13.278	584.036	-0.0082	0.6090	1-Hexene
14.028	600	0	1.9098	n-Hexane (G)
15.829	619.022	-0.111	0.1342	2,2-Dimethylpentane
16.026	621.103	-0.0784	0.6564	Methylcyclopentane (G)
16.339	624.409	-0.0324	0.9145	2,4-Dimethylpentane (G)
18.053	642.512	-0.0354	1.5152	Benzene (G)
18.941	651.891	-0.0974	0.4724	Cyclohexane (G)
19.852	661.512	-0.0845	0.5912	2-Methylhexane (G)
20.02	663.287	-0.0692	0.6107	2,3-Dimethylpentane
20.755	671.05	-0.1021	0.5548	3-Methylhexane (G)
23.496	700	0	1.1285	n-Heptane (G)
23.611	700.821	-0.0221	0.5044	cis-3-Heptene
25.002	710.75	-0.1788	0.5053	cis-2-Heptene
25.82	716.589	-0.1647	0.5865	Methylcyclohexane (G)
27.466	728.339	-0.097	0.9175	2,5-Dimethylhexane
27.587	729.203	-0.1174	0.2257	2,2,3-Trimethylpentane
27.704	730.038	-0.1392	0.7069	2,4-Dimethylhexane (G)
29.76	744.714	0.0211	2.4318	2,3,4-Trimethylpentane (G)
30.266	748.326	0.269	5.4512	Toluene (G)
30.347	748.904	0.3193	2.2058	2,3,3-Trimethylpentane (G)
31.208	755.05	-0.2057	0.6846	2,3-Dimethylhexane (G)
32.065	761.168	-0.2232	0.5247	2-Methylheptane
34.866	781.162	-0.1409	0.7555	2,2,5-Trimethylpentane?
35.491	785.624	0.3485	0.6515	1-Octene
37.505	800	0	0.9664	n-Octane
43.008	829.65	0.3078	0.5416	n-Propylcyclopentane
44.788	839.24	0.4233	0.7415	1,1,4-Trimethylcyclohexane (+2 I9)
48.649	860.043	-0.3689	3.0764	p-Xylene (G)
48.844	861.094	-0.4943	1.9168	2,3-Dimethylheptane
52.484	880.706	0.3638	2.0575	o-Xylene (G)

54.33	890.652	0.024	0.6254	1-Nonene
56.065	900	0	0.9044	n-Nonane
61.211	943.822	-0.0851	0.8234	n-Propylbenzene
62.153	951.844	0.0497	1.3785	1-Methyl-3-Ethylbenzene (G)
62.379	953.768	0.0062	0.7981	1-Methyl-4-Ethylbenzene (G)
63.048	959.465	-0.0468	0.9175	1,3,5-Trimethylbenzene (G) +I10
64.099	968.415	0.3892	1.0488	desconocido
65.788	982.798	0.3183	2.7054	tert-Butylbenzene + A9
66.641	990.062	-0.0658	0.6655	1-Decene
67.355	996.142	-0.0766	0.7323	Isobuthylbenzene (+ N10)
67.808	1000	0	0.7811	n-Decane
71.41	1041.498	-0.1072	0.633	1-Methyl-3-n-Propylbenzene
74.302	1074.816	-0.0314	0.5156	1,2-Dimethyl-4-Ethylbenzene
76.488	1100	0	0.7616	n-Undecane
83.638	1200	0	0.6799	n-Dodecane

Tabla 6.7 Compuestos identificados más importantes en la gasolina PREMIUM.

En ésta muestra es interesante la contribución que presenta el isopentano, el 2,3-dimetilbutano, tolueno, o- y p-xileno, ya que a diferencia de la muestra de MAGNA SIN se encuentran en una concentración mucho mayor, lo que contribuye directamente a la obtención de una gasolina de mayor calidad. Sin embargo la concentración de benceno está un poco elevada, no obstante se encuentra dentro de los límites establecidos.

6.4 ALQUILADO DE REFINERÍA.

En la tabla 6.8 podemos observar los componentes identificados más importantes de una corriente de producto final que proviene de un proceso de alquilación industrial. En éste proceso los reactivos empleados provienen principalmente de dos corrientes de alimentación. La primera está constituida por olefinas ligeras entre las que se encuentran : propileno y butileno; mientras que la segunda, es una corriente de isoparafinas que contiene isobutano e isopentano principalmente. El objetivo principal de éste proceso es la obtención de los llamados compuestos TMP's o trimetilpentanos, debido a que éstos compuestos contribuyen con alto índice de octano a las mezclas de las gasolinas.

Tiempo de Retención	Índice de Retención	Diferencia Índices	Composición (%Peso)	Nombre del compuesto
7.094	355.54	-----	0.4263	Isobutane
7.415	400	0	1.4379	n-Butane (G)
8.594	464.816	-0.0112	3.4626	Isopentane (G)
11.801	555.027	0.1828	2.0595	2,3-Dimethylbutane
11.999	559.271	-0.2008	0.4984	2-Methylpentane (G)
12.799	576.42	-0.2968	0.2428	3-Methylpentane (G)
16.222	624.522	0.0814	2.6633	2,4-Dimethylpentane (G)
19.694	661.174	-0.4231	0.1495	2-Methylhexane (G)
19.896	663.306	-0.0498	2.502	2,3-Dimethylpentane
20.588	670.611	-0.3508	0.1117	3-Methylhexane
22.317	688.863	0.328	25.8946	2,2,4-Trimethylpentane
27.364	728.821	0.3851	3.3598	2,5-Dimethylhexane
27.475	729.622	0.3024	0.3511	2,2,3-Trimethylpentane
27.623	730.691	-0.3209	3.5517	2,4-Dimethylhexane
29.736	745.946	0.436	10.3036	2,3,4-Trimethylpentane
30.235	749.549	0.235	5.1992	2,3,3-Trimethylpentane
31.1	755.794	-0.4329	2.6344	2,3-Dimethylhexane
34.71	781.857	0.349	2.1707	2,2,5-Trimethylhexane
59.966	934.351	0.0735	0.1321	n-Butylcyclopentane

Tabla 6.8 Compuestos identificados con el sistema desarrollado.

Una vez realizado el Análisis Detallado de Hidrocarburos con el programa desarrollado, se pudo constatar la presencia del 2,2,4-TMP, 2,3,4-TMP, 2,3,3-TMP y del 2,2,3-Trimetilpentano (TMP's) en una concentración significativamente mayor (en total 41.7 %Peso) con respecto a las concentraciones del resto de los subproductos identificados. Por otro lado también se identificaron compuestos característicos de las gasolinas con una concentración que se encuentra en el intervalo de 1 a 3.5 %Peso.

Es importante señalar que la concentración que se reporta en la tabla 6.8, no corresponde a la que se obtiene dentro de la refinería, ya que no se tomaron las medidas necesarias para sustraer y conservar correctamente la muestra, como por ejemplo, emplear el envase y refrigeración adecuados. Sin embargo los principales componentes si se conservaron, lo que ayudó a verificar el análisis cualitativo de la muestra.

En la tabla 6.9 se presentan los componentes principales reportados por un equipo de análisis P.I.A.N.O. comercial que se encuentra en los laboratorios de la refinera. Comparando las tablas 6.8 y 6.9 podemos verificar que el sistema de análisis desarrollado, ha identificado satisfactoriamente la mayoría de los compuestos principales de la muestra en cuestión, lo que confirma la efectividad del sistema.

Tiempo de Retención	Índice de Retención	Composición (%Peso)	Nombre del compuesto
7.75	372.6	0.393	Isobutane
8.07	400.0	4.375	n-Butane
9.27	475.5	4.324	Isopentane
12.52	565.7	2.237	2,3-Dimethylbutane
12.74	569.6	0.550	2-Methylpentane
13.58	583.5	0.300	3-Methylpentane
17.24	632.2	2.799	2,4-Dimethylpentane
17.73	637.6	0.089	2,2,3-Trimethylbutane
21.15	669.6	0.128	2-Methylhexane
21.32	671.0	2.628	2,3-Dimethylpentane
22.17	677.6	0.104	3-Methylhexane
23.90	690.1	40.515	2,2,4-Trimethylpentane
29.85	735.6	4.143	2,4-Dimethylhexane
30.13	737.5	4.194	2,2,3-Trimethylpentane
32.49	753.6	16.047	2,3,4-Trimethylpentane
33.07	757.3	7.299	2,3,3-Trimethylpentane
34.17	764.1	3.446	1,1,2-Trimethylcyclopentane
34.34	765.2	0.105	2-Methylheptane
35.51	772.1	0.233	3,4-Dimethylhexane
35.60	772.6	0.228	4-Methylheptane
38.11	786.4	1.154	2,2,5-Trimethylhexane
43.97	817.4	0.187	2,3,4-Trimethylhexane

Tabla 6.9 Compuestos identificados con un equipo de análisis P.I.A.N.O. comercial.

ANÁLISIS DE RESULTADOS

Al realizar la evaluación de la columna capilar adquirida, se obtuvieron resultados que en su mayoría concuerdan con los reportados por el proveedor. Además en el transcurso del desarrollo experimental, la columna fue capaz de separar adecuadamente un gran número de componentes que constituyen a las muestras de alquilados y gasolinas; lo cual nos indica que la columna capilar es de buena calidad y que las condiciones de operación cromatográficas establecidas fueron las más adecuadas.

Con respecto al tiempo de análisis, se puede mencionar que éste se encuentra muy cerca del tiempo promedio empleado por un equipo de análisis P.I.A.N.O. comercial. Sin embargo, este promedio puede ser optimizado probando otros programas de temperatura que cumplan con los requerimientos de separación.

Fue importante determinar el volumen de inyección más adecuado para los diferentes tipos de muestras, ya que en el caso de que el volumen inyectado resultó insuficiente, provocó que no se detectaran los componentes que se encuentran en menor concentración; en el caso contrario, la inyección de un volumen excesivo ocasionó que la columna se saturara y se presentaran problemas de "coleo". Finalmente se encontró que el volumen de inyección más adecuado fuera de 0.4 μL para las inyecciones sucesivas.

Los índices de retención calculados para las diferentes muestras presentaron una desviación estándar máxima de 0.43 unidades, lo que indica que la fase estacionaria de la columna capilar es muy estable y que además, el cromatógrafo de gases es capaz de reproducir satisfactoriamente las condiciones de operación.

Estos antecedentes sirvieron para respaldar la confiabilidad de la bases de datos desarrollada, con la cual se pudieron identificar la mayoría de los compuestos presentes en las mezclas problema.

La Base de Datos obtenida finalmente consta de 142 compuestos con nombres conocidos, 113 compuestos "Desconocidos" que son característicos de las gasolinas pero que se ignora sus nombres y 19 compuestos también desconocidos, pero que se sabe son isoparafinas de alquilación debido a que se detectaron en los productos de la reacción de isopentano / propileno.

Cuando las muestras analizadas contengan compuestos "Desconocidos" y/o "Isoparafinas de Alquilación" y éstos sean de interés, se pueden identificar y cuantificar ya no por el nombre sino con sus respectivos índices de retención. Finalmente si se requiere el nombre preciso de dichos compuestos, se pueden identificar por medio de otros estándares y/o con otras técnicas analíticas.

Para las muestras de la mezcla P.I.A.N.O. y del alquilado de industrial, se cuenta con el reporte generado por un sistema de análisis P.I.A.N.O. comercial, el cual sirvió como referencia para evaluar los resultados obtenidos con el programa de cómputo desarrollado. Al comparar estos dos resultados se pudo verificar la correcta identificación de los componentes principales de las mezclas con el empleo de dicho programa.

En el caso de la alquilación de isopentano / propileno se observó que la reacción tiende a la formación preferente del 2,5-dimetilhexano, mientras que la reacción de alquilación de benceno / propileno es bastante selectiva para el isopropilbenceno (cumeno). No obstante, si se desea tener mayor certidumbre en los resultados obtenidos, se pueden verificar con la ayuda de otras técnicas analíticas como por ejemplo, Espectroscopía de Infrarrojo o Espectrometría de Masas

Por otro lado, el reporte generado para el alquilado de isopentano con propileno muestra compuestos que pertenecen a la familia de los naftenos, sin embargo, se sabe que ésta reacción no es capaz de producirlos. Esto indica que existen isoparafinas de alquilación que tienen tiempo e índice de retención muy cercano al de los compuestos identificados como naftenos, por lo que es necesario enriquecer la base de datos con más isoparafinas para realizar con mayor detalle y precisión el análisis.

CONCLUSIONES

Considerando la información recopilada y los resultados obtenidos durante el desarrollo del presente trabajo, se llegó a las siguientes conclusiones :

Para determinar las condiciones de operación de los sistemas cromatográficos se deben contemplar los siguientes puntos :

- Las características de los posibles componentes que integran la muestra, ya que dependiendo de punto de ebullición y de la polaridad de cada componente se determinan las temperaturas máximas y mínimas de operación del horno cromatográfico y además las características de la columna como son : la fase estacionaria, longitud, diámetro y su temperatura máxima de operación.
- Tener bien definidos cuales son los principales compuestos de interés, con el fin de plantear los programas de temperatura más adecuados para optimizar el tiempo de análisis y obtener a la vez su mejor separación.
- Es importante tomar en cuenta el peso molecular de los componentes, ya que las muestras que contienen compuestos de alto peso suelen saturar la fase estacionaria de la columna provocando separaciones poco eficientes, por esto es recomendable diluir este tipo de muestras.
- Tomar en cuenta toda la información existente con respecto al tipo de muestra analizada en trabajos de otros autores para tomarlos como puntos de referencia.

Con la base de datos desarrollada en el presente trabajo es posible identificar satisfactoriamente a los compuestos más representativos de las mezclas de hidrocarburos, tales como alquilados y gasolinas. Sin embargo, si las necesidades de trabajo requieren de un análisis más completo, en cuanto a los compuestos de interés, es posible enriquecer a la base de datos por medio del empleo de otros estándares.

El programa de computo desarrollado para manejar la información obtenida con el cromatógrafo de gases y realizar el análisis cualitativo y cuantitativo de las muestras problema, proporcionó resultados aceptables, ya que para los casos de gasolina, alquilado de refinería y la mezcla P.I.A.N.O., se obtuvieron resultados que concuerdan con la composición reportada por un equipo de análisis P.I.A.N.O. comercial. Con este antecedente se pudo tener mayor confiabilidad en los resultados obtenidos para las muestras de alquilación de Isopentano / Propileno y de Benceno / Propileno.

Con base en la información anterior se puede concluir que el sistema de análisis desarrollado funciona satisfactoriamente. No obstante en ocasiones el programa desarrollado, e inclusive el programa comercial P.I.A.N.O., puede identificar erróneamente compuestos que de antemano se sabe no existen en determinadas mezclas; por lo que es muy importante tener conocimiento de los posibles componentes que constituyen a las muestras en estudio, con el fin de corregir las identificaciones erróneas.

Para realizar un buen Análisis Detallado de Hidrocarburos a muestras que están constituidas por un número considerable de compuestos, es importante contar con un equipo cromatográfico que sea capaz de separar la mayor cantidad posible de los componentes, para que posteriormente sean identificados y cuantificados.

Tomando en cuenta que las muestras contienen alrededor de 25 a 40 picos significativos y que para un experimento de reacción se producen de 5 a 10 muestras, es evidente la complejidad de analizar cada una de ellas manualmente, por lo que se justifica el uso de programas que realicen el análisis.

Sin embargo, el adquirir un sistema comercial de análisis para dicho fin (el cual consta de : Columna capilar de 100 m., programa, y tarjeta de interfase), resulta demasiado costoso (aprox. 8,000.00 USD) por esto, es importante el desarrollo del presente trabajo ya que sólo se invirtió el 25% (aprox. 2,000.00 USD) del costo total de dicho sistema, obteniéndose finalmente un importante ahorro.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1.- ALDANA, C.R., *et. al.*, "Alquilación de Isobutano con Olefinas C4 y C5 en Presencia de Ácido Fluorhídrico", Revista del IMIQ, México, Vol. 7-8, (jul. - ago.), 1996.
- 2.- ANDERSON , J.M. , *et. al.*, "Calculation of Research Octane Number of Motor Gasolines from Gas Chromatographic Data and a New Approach to Motor Gasoline Quality Control", Journal of the Institute of Petroleum, U.S.A., Vol. 58, No. 560, Marzo 1972.
- 3.- A.S.T.M, D 3710-88, Standard Test Method for : "Boiling Range Distribution of Gasoline and Fractions by gas Chromatography", U.S.A., 1988.
- 4.- A.S.T.M, D 4814-96, Standard Specification for : "Automotive Spark-Ignition Engine Fuel", U.S.A., 1996.
- 5.- A.S.T.M, D 5134-90, Standard Test Method for : "Detailed Analysis of Petroleum Naphthas Through n-Nonane by Capillary Gas Chromatography", U.S.A., 1990.
- 6.- AVELINO, Corma, *et. al.* "Chemistry, Catalysts, and Processes for Isoparaffin-Olefin alkylation : Actual Situation and Future Trends", Catalyst Reviw, Vol.35, No. 4, 1993.
- 7.- BRUCE D. Quimby, *et. al.*, "Speed Improvements in Detailed Hydrocarbon Analysis of Gasoline Using 100- μ m Capillary Columns", Hewlett Packard, U.S.A., 1995.
- 8.- BUCHANAN, J.S., "Analysis of Olefinic Gasolines with Multidimensional Gas Chromatography", Journal of Chromatographic Science, Vol. 32, Mayo 1994.
- 9.- CANADIAN C.G.S.B.-3.0, No. 14.3-94, "Methods for Testing Petroleum and Associated Products", Canadian General Standards Board, Canada, 1994.

- 10.- CHROMPACK, "Reproducible Capillary Columns. Comprehensive guide to capillary gas chromatography columns, standard methods, practical application notes and accessories for gas chromatography", Chrompack Inc., U.S.A., 1995.
- 11.- CURVERS, J., *et al.*, "Automated Multidimensional Gas Chromatographic PNA Analysis of Hydrocarbon-Type Samples, Optimization with Respect to Speed of Analysis", *Journal of Chromatographic Science*, U.S.A., Vol. 26, Junio 1988.
- 12.- DAVIS, B.C., "Adventures in Clean Air Act Amendments Implementation", *Hydrocarbon Processing*, U.S.A., Mayo 1992.
- 13.- DIEHL, J.W., "Determination of Benzene, Toluene, Ethylbenzene, and Xylenes in Gasolines by Gas Chromatography / Deuterium Isotope Dilution Fourier Transform Infrared Spectroscopy", *Analytical Chemistry*, U.S.A., Vol. 65, No. 18, Septiembre 15, 1993.
- 14.- DIEHL, J.W., "Determination of Aromatic Hydrocarbons in Gasolines by Gas Chromatography/Fourier Transform Infrared Spectroscopy", *Analytical Chemistry*, U.S.A., Vol. 67, No. 13, Julio 1, 1995.
- 15.- DIETRICH, Estel, *et al.*, "The Analysis of C₄-C₁₁ Hydrocarbons in Naphtha and Reformate with a New Apolar Fused Silica Column", *Journal High Resol. Chromatogr.*, U.S.A., Vol. 18, 1995.
- 16.- GROB, L. Robert, "Modern Practice of Gas Chromatography", Wadsworth Publishing Company, 3^a ed., U.S.A., 1995.
- 17.- ISLAS, Flores C. "Empleo de resinas de intercambio iónico como catalizadores para alquilación. Una propuesta para la reducción de benceno en gasolinas de reformado", U.N.A.M., Facultad de Química, México, 1997.

- 18.- JOHANSEN N.G., "The Determination of Individual Components and Groups of Components in Gasoline by High Efficiency Open Tubular column Gas Chromatography", Neil G. Johansen Inc., 4^a ed. U.S.A. 1994.
- 19.- MARTÍNEZ Ma. de L., *et. al.*, "La Reformulación de Gasolinas en México", Revista del I.M.I.Q., México, Vol. 7-8, (jul. - ago.), 1996.
- 20.- MCKETTA, J.J., "Encyclopedia of Chemical Processing and Design", Marcel Dekker Inc., Vol. 27, U.S.A., 1994.
- 21.- MCNAIR, H.M., "Basic Gas Chromatography", VARIAN Instruments, U.S.A., 5^a ed., 1969.
- 22.- NAKAMURA, D.N., "HP in processing: Alkylate - a key gasoline component", Hydrocarbon Processing, Agosto 1995.
- 23.- PAULS, R.E., *et. al.* "A Comparison of Methods to Determine Benzene in Gasoline Boiling Range Material", Journal of Chromatographic Science, U.S.A., Vol. 30, Junio 1992.
- 24.- PERALTA, Solorio D., "Alquilación de Isoparafinas con Olefinas Ligeras en Presencia de Catalizadores Ácidos Sólidos", U.N.A.M., Facultad de Química, México, 1997.
- 25.- PETROFF, N., "Automated Simulated Distillation by Gas Chromatography. Performance Test for Petroleum Product Control", Journal of Chromatography, U.S.A., Vol. 395, 1987.
- 26.- PETROFF, N., *et. al.*, "Détermination Automatique de L'indice D'octane et de la Composition des Reformates par Chromatographie en Phase Gazeuse", Institut Français du Pétrole, Francia, Vol. 43, No. 2, Marzo-Abril 1988.

- 27.- PEYLA. R.J. "Additives to have key role in new gasoline era", Oil & Gas Journal, U.S.A., Feb. 11, 1991.
- 28.- PIEL W.J. *et al.*, "Oxygenates for reformulated gasoline", Hydrocarbon Processing, Julio 1990.
- 29.- WILLARD, H. H., "Instrumental Methods of Analysis", Wadsworth Publishing Company, 7ª ed., U.S.A., 1988.
- 30.- YEYSEN, G., "Refiners have Options to Deal with Reformulated Gasoline", Oil and Gas Journal, U.S.A., Abril 8 1991.
- 31.- ZUDKEVITCH, D., "Thermodynamics of Reformulated Automotive Fuels", Hydrocarbon Processing, U.S.A., Junio 1995.

ARTÍCULOS OBTENIDOS VÍA INTERNET

- 1.- <http://www.dmo.hp.com/apg/chpartners/ac.html>, "AC PIONA Analyzer", Analytical Controls Inc., 1997.
- 2.- <http://www.epa.gov/goal-TME.html>, "RFG Goals and Timetable.", United States Environmental Protection Agency (U.S.E.P.A.), 1997.
- 3.- <http://www.epa.gov/perf-ISS.html>, "RFG Performance Issues.", U.S.E.P.A., 1997.
- 4.- <http://www.epa.gov/rfg-CHAR.html>, "RFG Characteristics.", U.S.E.P.A., 1997.
- 5.- <http://www.epa.gov/rfg-ECON.html>, "Fuel Economy Impact Analysis of RFG.", U.S.E.P.A., 1997.

- 6.- <http://www.epa.gov/rfg-VEHPF.html>, **“Reformulated Gasoline and Vehicle Performance.”**, U.S.E.P.A, 1997.

- 7.- <http://www.epa.gov/docs/fedrgstr/EPA-AIR.html>, **“Fuels and Fuel Additives; Elimination of Oxygenated Gasoline Program Reformulated Gasoline (OPRG) Category From the Reformulated Gasoline Regulations.”**, U.S.E.P.A, 1997.

- 8.- <http://www.epa.gov/docs/fedrgstr/EPA-PEST.html>, **“Registration of Fuels and Fuel Additives: Extension of Specified Deadlines for Atypical Additives and Biodiesel Fuels; and, Reformulated Gasoline Complex Model: Modification of Survey Precision Requirements.”**, U.S.E.P.A, 1997.

- 9.- <http://www.epa.gov/docs/fedrgstr/EPA-ATMV.html>, **“Air Toxics from Motor Vehicles.”**, U.S.E.P.A, 1997.

ANEXO I

Print Date: Fri Feb 06 16:41:33 1998

Page 1 of 1

Title : Evaluación de columna 100 m.
 Run File : C:\STAR\1997\1106002.RUN
 Method File : C:\STAR\FMR.MTH
 Sample ID : Manual Sample

Injection Date: 11-JUN-97 11:34 AM Calculation Date: 11-JUN-97 12:26 PM

Operator : FILIBERTO Detector Type: ADCB (10 Volts)
 Workstation: Bus Address : 16
 Instrument : Varian Star #1 Sample Rate : 10.00 Hz
 Channel : B = B Run Time : 51.787 min

***** Star Chromatography Workstation ***** Version 4.5 *****

Run Mode : Analysis
 Peak Measurement: Peak Area
 Calculation Type: Percent

Peak No.	Peak Name	Result (%)	Ret. Time (min)	Time Offset (min)	Area (counts)	Sep. Code	Width 1/2 (sec)	Status Codes
1		0.8435	10.807	0.000	1274	BB	3.3	
2		1.9572	12.910	0.000	2956	BB	3.7	
3		81.1340	13.451	0.000	122544	BB	3.7	
4		2.1290	15.611	0.000	3216	BB	3.8	
5		4.4588	20.604	0.000	6735	BB	4.8	
6		1.4602	26.391	0.000	2206	BB	5.7	
7		1.2191	35.553	0.000	1841	BB	7.8	
8		3.2064	37.557	0.000	4843	BV	8.6	
9		1.5277	37.804	0.000	2307	VB	8.0	
10		0.7765	43.330	0.000	1173	BB	9.4	
11		1.2876	50.525	0.000	1945	BB	10.8	
Totals:		100.0000		0.000	151040			

Total Unidentified Counts : 151039 counts

Detected Peaks: 13 Rejected Peaks: 2 Identified Peaks: 0

Multiplier: 1 Divisor: 1

Baseline Offset: 0 microVolts

Noise (used): 30 microVolts - monitored before this run

Manual injection

Data Handling: Reference peak not identified correctly
 Data Handling: Default to A*

Revision Log:

11-JUN-97 12:26 PM: Calculated results from channel B using method:
 'C:\STAR\FMR.MTH'

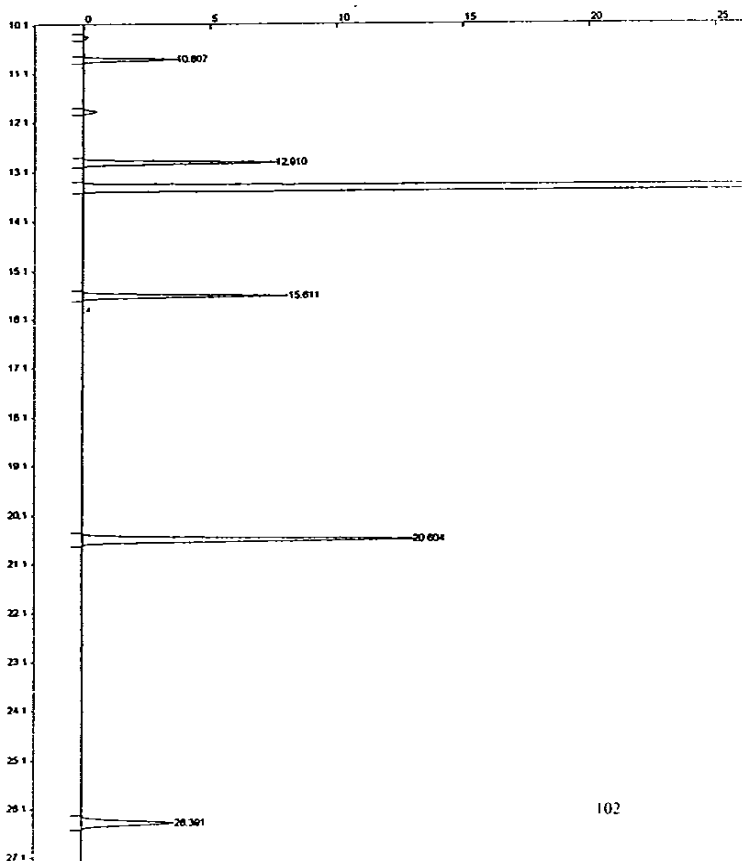
Title : Evaluación de columna 100 m.
 Run File : C:\STAR\1997\1106002.RUN
 Method File : C:\STAR\FMR.MTH
 Sample ID : Manual Sample

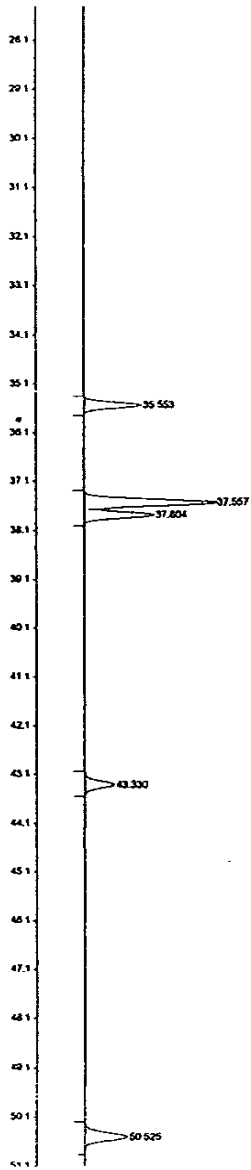
Injection Date: 11-JUN-97 11:34 AM Calculation Date: 11-JUN-97 12:26 PM

Operator : FILIBERTO Detector Type: ADCB (10 Volts)
 Workstation: Bus Address : 16
 Instrument : Varian Star #1 Sample Rate : 10.00 Hz
 Channel : B = B Run Time : 51.787 min

***** Star Chromatography Workstation ***** Version 4.5 *****

Chart Speed = 1.06 cm/min Attenuation = 13 Zero Offset = 6
 Start Time = 10.090 min End Time = 51.140 min Min / Tick =





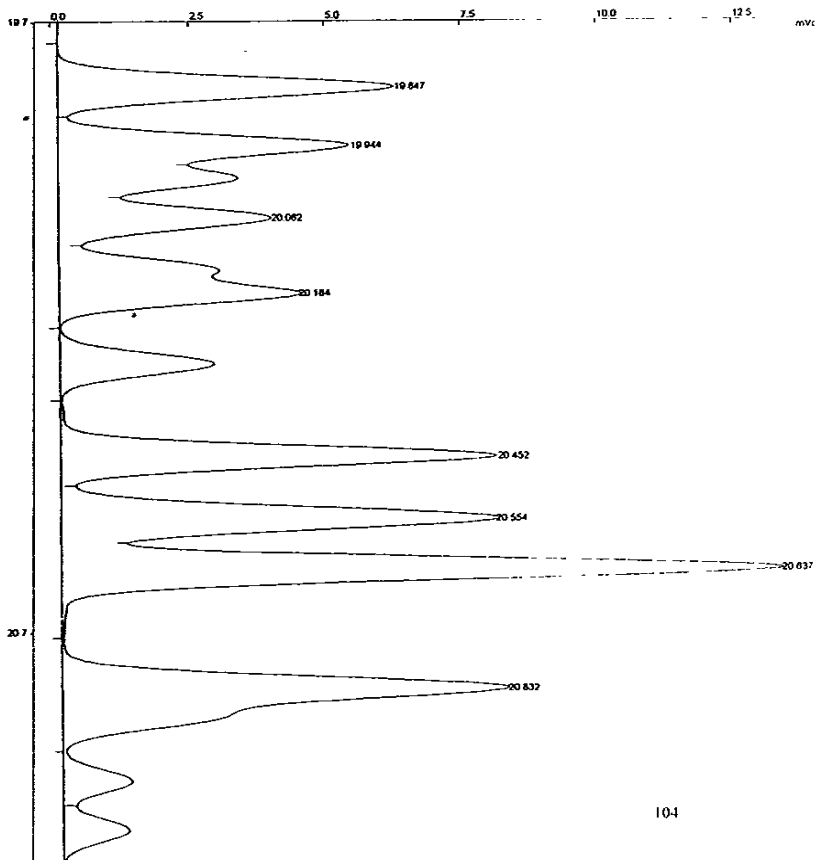
Title : Mezcla P.I.A.N.O. en metodo 1
 Run File : C:\STAR\1997\2980002.RUN
 Method File : C:\STAR\MODULE16\MIGUEL.MTH
 Sample ID : Manual Sample

Injection Date: 29-AUG-97 1:25 PM Calculation Date: 29-AUG-97 4:55 PM

Operator : Operator Detector Type: ADCB (10 Volts)
 Workstation: Bus Address : 16
 Instrument : Varian Star #1 Sample Rate : 10.00 Hz
 Channel : B = B Run Time : 38.002 min

***** Star Chromatography Workstation ***** Version 4.5 *****

Chart Speed = 13.33 cm/min Attenuation = 6 Zero Offset = 2%
 Start Time = 19.740 min End Time = 21.120 min Min / Tick = 1.00



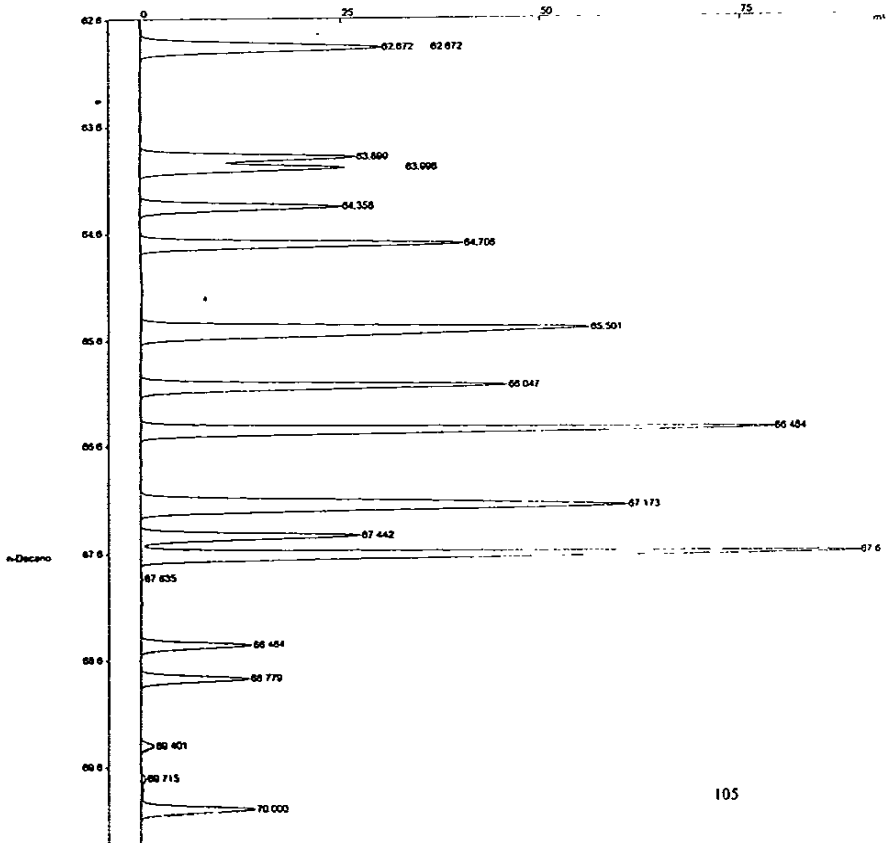
Title : Mezcla P.I.A.N.O. en metodo 2
Run File : C:\STAR\1997\2880003.RUN
Method File : C:\STAR\MODULE16\MIGUEL.MTH
Sample ID : Manual Sample

Injection Date: 28-AUG-97 2:13 PM Calculation Date: 20-SEP-97 1:20 PM

Operator : Operator Detector Type: ADCB (10 Volts)
Workstation: Bus Address : 16
Instrument : Varian Star #1 Sample Rate : 10.00 Hz
Channel : B = B Run Time : 105.002 min

***** Star Chromatography Workstation ***** Version 4.5 *****

Chart Speed = 2.32 cm/min Attenuation = 41 Zero Offset = 4%
Start Time = 62.600 min End Time = 70.500 min Min / Tick = 1.00



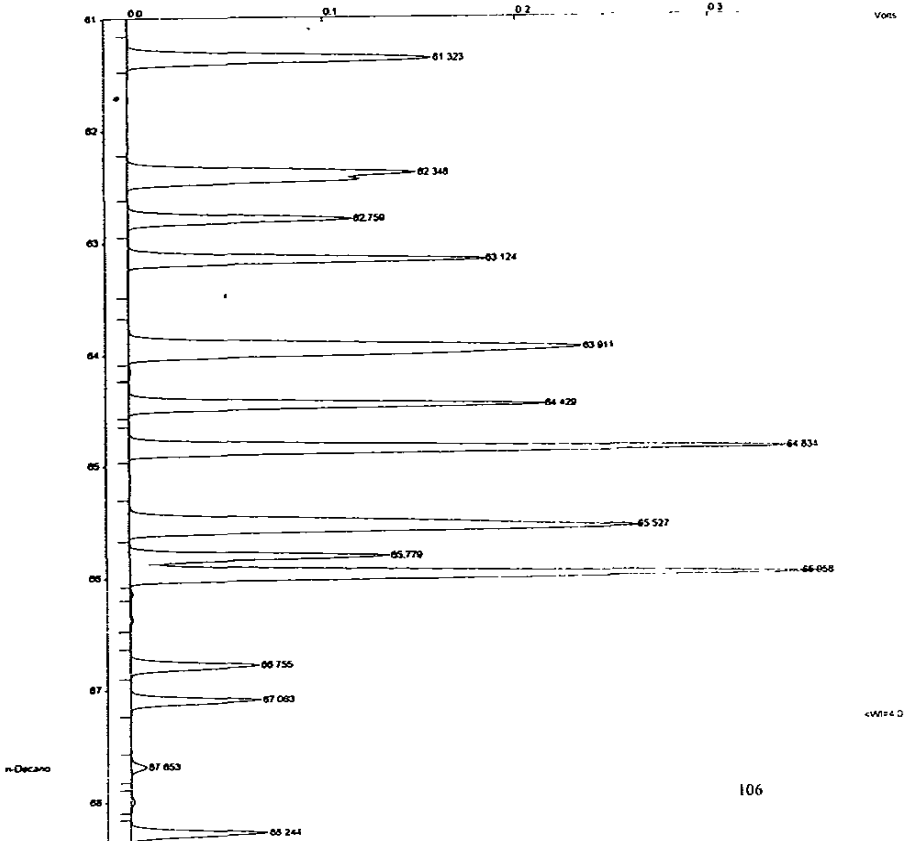
Title : Mezcla P.I.A.N.O. en metodo 3
 Run File : C:\STAR\1997\0280002.RUN
 Method File : C:\STAR\MODULE16\MIGUBL.MTH
 Sample ID : Manual Sample

Injection Date: 2-AUG-97 12:52 PM Calculation Date: 8-AUG-97 10:36 AM

Operator : Operator Detector Type: ADCB (10 Volts)
 Workstation: Bus Address : 16
 Instrument : Varian Star #1 Sample Rate : 10.00 Hz
 Channel : B = B Run Time : 107.002 min

***** Star Chromatography Workstation ***** Version 4.5 *****

Chart Speed = 2.43 cm/min Attenuation = 169 Zero Offset = 3 1/2
 Start Time = 60.960 min End Time = 68.520 min Min / Tick = 1.00



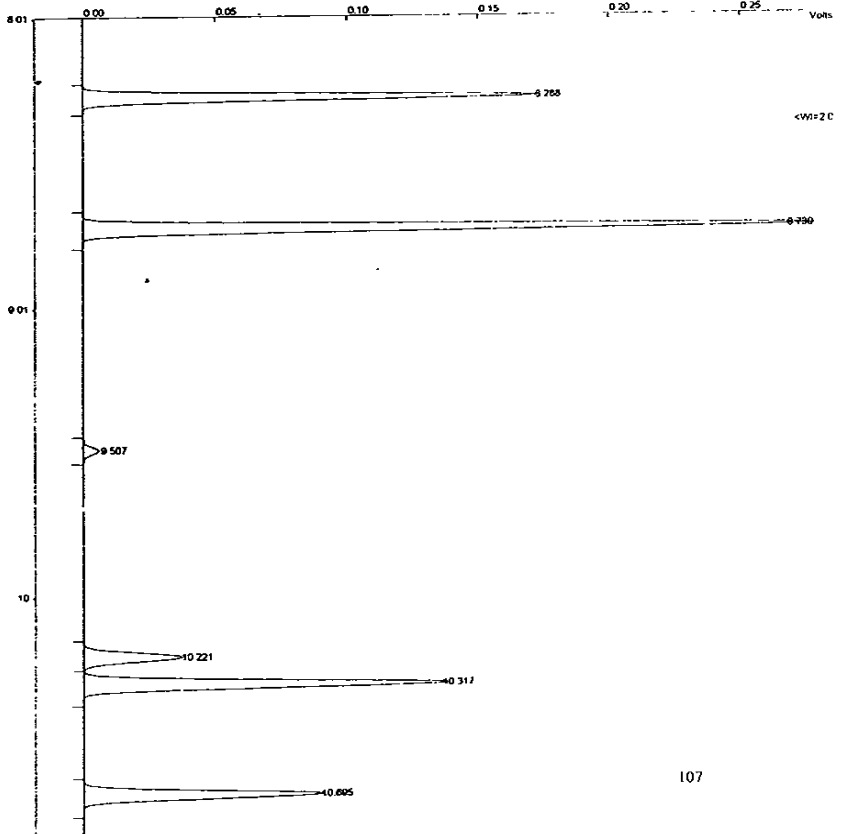
Title : Mezcla Pentanos volúmen inyectado 0.4 uL.
 Run File : C:\STAR\1997\2170002.RUN
 Method File : C:\STAR\MODULE16\MIGUEL.MTH
 Sample ID : Manual Sample

Injection Date: 21-JUL-97 1:00 PM Calculation Date: 21-JUL-97 7:14 PM

Operator : Operator Detector Type: ADCB (10 Volts)
 Workstation: Bus Address : 16
 Instrument : Varian Star #1 Sample Rate : 10.00 Hz
 Channel : B = B Run Time : 60.002 min

***** Star Chromatography Workstation ***** Version 4.5 *****

Chart Speed = 6.27 cm/min Attenuation = 125 Zero Offset = 6%
 Start Time = 8.010 min End Time = 10.940 min Min / Tick = 1.00



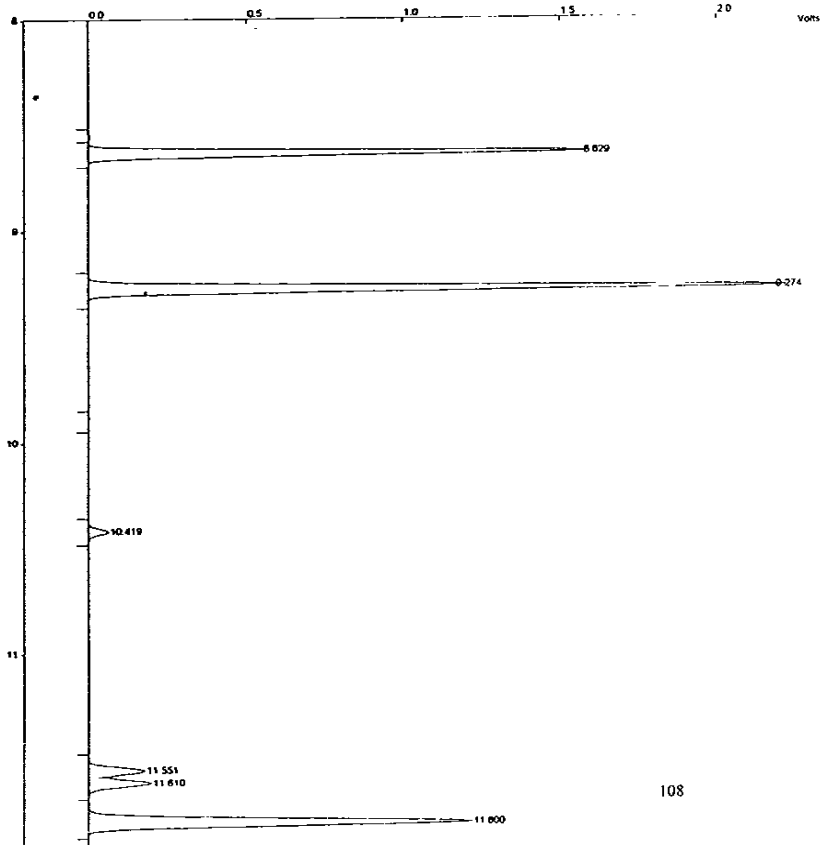
Title : Mezcla Pentanos volúmen inyectado 0.6 uL.
Run File : C:\STAR\1997\3070002.RUN
Method File : C:\STAR\MODULE16\MIGUEL.MTH
Sample ID : Manual Sample

Injection Date: 30-JUL-97 1:14 PM Calculation Date: 30-JUL-97 6:53 PM

Operator : Operator Detector Type: ADCB (10 Volts)
Workstation: Bus Address : 16
Instrument : Varian Star #1 Sample Rate : 10.00 Hz
Channel : B = B Run Time : 55.002 min

***** Star Chromatography Workstation ***** Version 4.5 *****

Chart Speed = 4.60 cm/min Attenuation = 1044 Zero Offset = 8%
Start Time = 8.000 min End Time = 12.000 min Min / Tick = 1.00



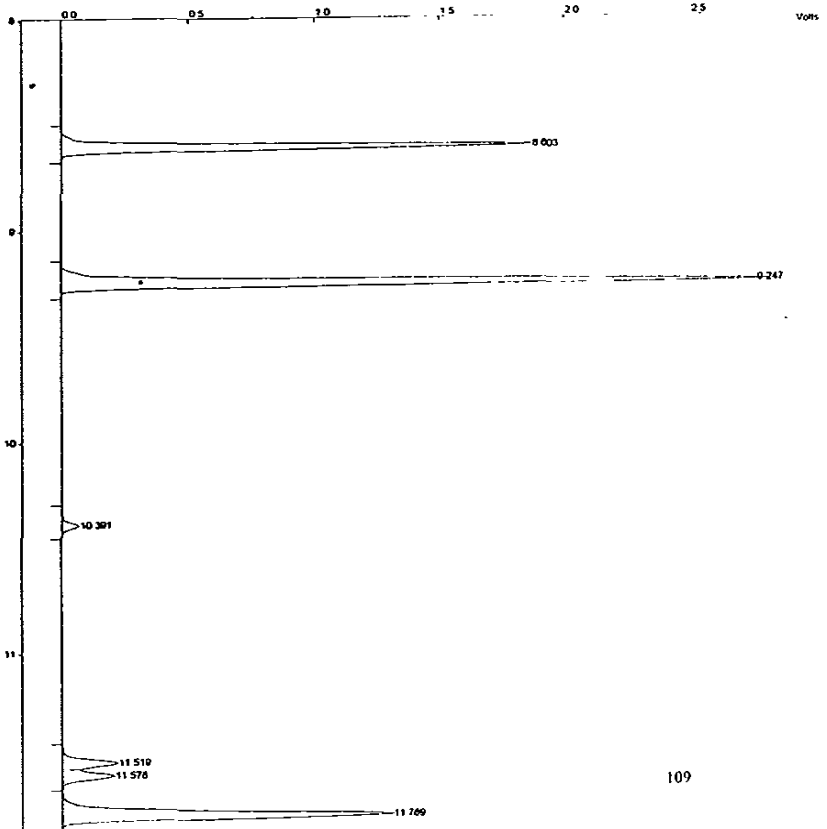
Title : Mezcla Pentanos volúmen inyectado 0.8 uL.
Run File : C:\STAR\1997\2370002.RUN
Method File : C:\STAR\MODULE16\MIGUEL.MTH
Sample ID : Manual Sample

Injection Date: 23-JUL-97 12:39 PM Calculation Date: 23-JUL-97 7:03 PM

Operator : Operator Detector Type: ADCB (10 Volts)
Workstation: Bus Address : 16
Instrument : Varian Star #1 Sample Rate : 10.00 Hz
Channel : B = B Run Time : 52.002 min

***** Star Chromatography Workstation ***** Version 4.5 *****

Chart Speed = 4.60 cm/min Attenuation = 1305 Zero Offset = 5%
Start Time = 8.000 min End Time = 12.000 min Min / Tick = 1.00



ANEXO II

BASE DE DATOS PARA EL ANÁLISIS DETALLADO DE HIDROCARBUROS.

I.R.	NOMBRE DEL COMPUESTO	F.R.
300.000	n-Propane	1.0268
353.818	Isobutane (G)	1.0151
385.200	desconocido	0.9799
400.000	n-Butane (G)	1.0151
406.092	desconocido	0.9799
408.878	trans-2-Butene (G)	0.9799
416.204	cis-2-Butene (G)	0.9799
444.694	3-Methyl-1-Butene	0.9799
455.116	desconocido	0.9799
461.438	desconocido	0.9799
464.827	Isopentane (G)	1.008
483.223	1-Pentene	0.9799
492.773	2-Methyl-1-Butene (G)	0.9799
500.000	n-Pentane (G)	1.008
502.907	trans-2-Pentene (G)	0.9799
504.521	cis-2-Pentene (G)	0.9799
507.967	desconocido	0.9799
509.827	4-Methylpentene-1	0.9681
513.297	desconocido	0.9799
515.020	desconocido	0.9799
524.160	desconocido	0.9799
526.016	desconocido	0.9799
542.087	desconocido	0.9799
545.123	Cyclopentane (G)	0.9799
546.813	desconocido	0.9799
550.581	desconocido	0.9799
554.019	2,3-Dimethylbutane (G) + MTBE	1.0034
554.844	desconocido	0.9799
557.306	desconocido	0.9799
559.472	2-Methylpentane (G)	0.9799
573.150	desconocido	0.9799
576.717	3-Methylpentane (G)	0.9799
582.719	desconocido	0.9799
584.044	1-Hexene	0.9799
596.515	desconocido	0.9799
598.472	desconocido	0.9799
600.000	n-Hexane (G)	1.0034

601.339	desconocido	0.9799
602.199	desconocido	0.9799
603.354	trans-2-Hexene	0.9799
605.095	2-Methylpentene-2	0.9799
606.868	desconocido	0.9799
607.629	desconocido	0.9799
609.274	desconocido	0.9799
610.538	cis-2-Hexene	0.9799
615.521	desconocido	0.9799
619.133	2,2-Dimethylpentane	1
621.181	Methylcyclopentane (G)	0.9799
622.830	desconocido	0.9799
624.441	2,4-Dimethylpentane (G)	1
629.239	2,2,3-Trimethylbutane	1
642.547	Benzene (G)	0.9095
648.220	3,3-Dimethylpentane	1
651.988	Cyclohexane (G)	0.9799
653.809	desconocido	0.9799
659.979	desconocido	0.9799
661.597	2-Methylhexane (G)	1
663.356	2,3-Dimethylpentane	1
666.570	1,1-Dimethylcyclopentane	0.9799
668.703	desconocido	0.9799
669.776	desconocido	0.9799
671.152	3-Methylhexane (G)	1
678.244	cis-1,3-Dimethylcyclopentane	0.9799
681.439	trans-1,3-Dimethylcyclopentan	0.9799
682.852	3-Ethylpentane	1
684.691	trans-1-Dimethylcyclopentane	0.9799
685.148	desconocido	0.9799
685.803	1-Heptene	0.9799
686.543	2,2,4-Trimethylpentane? (G)	0.9975
693.339	desconocido	0.9799
697.715	trans-3-Heptene	0.9799
698.768	desconocido	0.9799
700.000	n-Heptane (G)	1
700.843	cis-3-Heptene	0.9799
701.638	desconocido	0.9799
702.507	desconocido	0.9799
703.976	trans-2-Heptene	0.9799
708.049	desconocido	0.9799

710.929	cis-2-Heptene	0.9799
711.367	desconocido	0.9799
716.038	desconocido	0.9799
716.754	Methylcyclohexane (G)	0.9799
718.979	2,2-Dimethylhexane	0.9975
719.316	desconocido	0.9799
727.197	Ethylcyclopentane	0.9799
728.436	2,5-Dimethylhexane	0.9975
729.320	2,2,3-Trimethylpentane	0.9975
730.177	2,4-Dimethylhexane (G)	0.9975
735.237	ctc-1,2,4-Trimethylcyclopenta	0.9799
736.514	desconocido	0.9799
741.742	ctc-1,2,3-Trimethylcyclopenta	0.9799
742.036	desconocido	0.9799
744.102	desconocido	0.9799
744.693	2,3,4-Trimethylpentane? (G)	0.9975
747.443	desconocido	0.9799
748.057	Toluene (G)	0.9296
748.585	2,3,3-Trimethylpentane? (G)	0.9975
755.256	2,3-Dimethylhexane (G)	0.9975
756.477	desconocido	0.9799
758.613	desconocido	0.9799
761.391	2-Methylheptane	0.9975
762.919	4-Methylheptane	0.9975
764.015	desconocido	0.9799
764.596	desconocido	0.9799
769.226	cct-1,2,4-Trimethylcyclopenta	0.9799
770.437	3-Ethylhexane	0.9975
771.524	3-Methylheptane (G)	0.9975
772.716	trans-1,4-Dimethylcyclohexano	0.9799
781.303	2,2,5-Trimethylpentane?	0.9975
782.812	desconocido	0.9799
785.275	1-Octene	0.9799
786.757	desconocido	0.9799
789.155	1-Ethyl-1-Methylcyclopentane	0.9799
792.231	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0.9799
799.222	ccc-1,2,3-Trimethylcyclopenta	0.9799
800.000	n-Octane	0.9975
800.962	desconocido	0.9799
803.292	trans-2-Octene	0.9799
806.634	desconocido	0.9799

807.260	Isopropylcyclopentane	0.9799
811.206	cis-2-Octene	0.9799
816.005	desconocido	0.9799
824.023	cis-1,2-Dimethylcyclohexane	0.9799
829.342	n-Propylcyclopentane	0.9799
831.304	desconocido	0.9799
836.004	desconocido	0.9799
838.817	1,1,4-Trimethylcyclohexane (+ I9 a)	0.9799
840.794	3,5-Dimethylheptane(L) (+ I9 b)	0.9799
849.949	Ethylbenzene (G)	0.9271
853.200	ctt-1,2,4-Trimethylcyclohexane	0.9799
859.317	m-Xylene (G)	0.9271
860.412	p-Xylene (G)	0.9271
861.588	2,3-Dimethylheptane	0.9955
863.377	3,4-Dimethylheptane(D)	0.9955
864.191	3,4-Dimethylheptane(L)	0.9955
866.498	desconocido	0.9799
869.454	desconocido	0.9799
870.421	2-Methyloctane	1.0112
875.336	ctc-1,2,4-Trimethylcyclohexane	0.9799
876.545	3-Methyloctane	1.0112
878.064	3,3-Diethylpentane	0.9955
879.391	desconocido	0.9799
880.342	o-Xylene (G) + "algo?"	0.9271
880.974	1,1,2-Trimethylcyclohexane	0.9799
883.751	desconocido	0.9799
887.001	desconocido	0.9799
889.314	desconocido	0.9799
890.628	1-Nonene	0.9799
892.277	Isobutylcyclopentane	0.9799
896.199	trans-3-Nonene	0.9799
897.428	cis-3-Nonene	0.9799
899.212	desconocido	0.9799
900.000	n-Nonane	0.9955
903.320	trans-2-Nonene	0.9799
911.534	Isopropylbenzene (cumeno) (GM)	0.9329
912.600	cis-2-Nonene	0.9799
917.832	Isopropylcyclohexane	0.9799
920.000	desconocido	0.9799
921.731	2,2-Dimethyloctane	1.008
922.387	desconocido	0.9799

930.144	desconocido	0.9799
934.277	n-Butylcyclopentane	0.9799
935.100	isoparafina de alquilado	0.9799
939.640	desconocido	0.9799
940.482	3,3-Dimethyloctane	1.008
943.907	n-Propylbenzene	0.9329
947.034	desconocido	0.9799
951.794	1-Methyl-3-Ethylbenzene (G)	0.9329
953.762	1-Methyl-4-Ethylbenzene (G)	0.9329
959.512	1,3,5-Trimethylbenzene (G) (+ I10)	0.9329
961.072	desconocido	0.9799
965.241	desconocido	0.9799
966.887	desconocido	0.9799
968.026	desconocido	0.9799
968.455	1-Methyl-2-Ethylbenzene	0.9329
969.302	2-Methylnonane	0.994
972.126	3-Ethylloctane	0.994
975.293	3-Methylnonane	0.994
979.402	isoparafina de alquilado	0.994
982.480	tert-Butylbenzene (+ A9)	0.9376
986.034	isoparafina de alquilado	0.994
986.521	Isobutylcyclohexane	0.9799
986.870	isoparafina de alquilado	0.994
990.128	1-Decene	0.9799
994.708	isoparafina de alquilado	0.994
996.219	Isobutylbenzene (+ N10)	0.9799
998.481	sec-Butylbenzene	0.9376
1000.000	n-Decane	0.994
1007.903	desconocido	0.94
1009.728	1-Methyl-3-Isopropylbenzene	0.9799
1013.353	1-Methyl-4-Isopropylbenzene	0.9799
1018.009	isoparafina de alquilado	0.994
1020.169	desconocido	0.94
1026.716	1-Methyl-2-Isopropylbenzene	0.9799
1030.555	isoparafina de alquilado	0.994
1037.849	isoparafina de alquilado	0.994
1038.817	desconocido	0.94
1041.605	1-Methyl-3-n-Propylbenzene	0.9376
1042.119	isoparafina de alquilado	0.994
1045.540	1-Methyl-4-n-Propylbenzene	0.9376
1046.515	1,3-Diethylbenzene	0.9376

1048.483	1,3-Dimethyl-5-Ethylbenzene	0.9376
1050.979	1,2-Diethylbenzene	0.9376
1052.299	desconocido	0.94
1057.017	1-Methyl-2-n-Propylbenzene	0.9376
1057.292	isoparafina de alquilado	0.994
1060.372	isoparafina de alquilado	0.994
1061.889	isoparafina de alquilado	0.994
1064.013	desconocido	0.94
1067.332	1,4-Dimethyl-2-Ethylbenzene	0.9376
1069.091	desconocido	0.94
1069.877	isoparafina de alquilado	0.994
1074.847	1,2-Dimethyl-4-Ethylbenzene	0.9376
1080.870	1,3-Dimethyl-2-Ethylbenzene	0.9376
1082.302	isoparafina de alquilado	0.994
1087.138	desconocido	0.94
1089.851	desconocido	0.94
1091.427	isoparafina de alquilado	0.994
1092.069	desconocido	0.94
1093.961	1,2-Dimethyl-3-Ethylbenzene	0.9376
1098.690	isoparafina de alquilado	0.994
1100.000	n-Undecane	1.008
1102.899	isoparafina de alquilado	0.994
1106.245	1,2,4,5-Tetramethylbenzene	0.9376
1108.326	2-Methylbutylbenzene	0.9415
1110.000	desconocido	0.94
1124.080	tert-1-Butyl-2-Methylbenzene	0.9415
1128.572	desconocido	0.94
1130.584	isoparafina de alquilado	0.994
1132.803	desconocido	0.94
1135.878	desconocido	0.94
1137.375	desconocido	0.94
1139.347	desconocido	0.94
1143.699	desconocido	0.94
1148.061	n-Pentylbenzene?	0.9415
1149.867	desconocido	0.94
1152.212	t-1-Methyl-2-(4MethylPropyl)cyclopentane	0.9564
1153.097	desconocido	0.94
1157.625	desconocido	0.94
1159.333	desconocido	0.94
1162.526	desconocido	0.94

1166.371	desconocido	0.94
1168.374	t-1-Butyl-3,5-Dimethylbenzene	0.9329
1169.950	desconocido	0.94
1173.541	t-1-Butyl-4-Ethylbenzene	0.9447
1174.780	isoparafina de alquilado	0.994
1177.062	desconocido	0.94
1179.093	desconocido	0.94
1180.885	desconocido	0.94
1184.344	desconocido	0.94
1189.482	desconocido	0.94
1191.168	desconocido	0.94
1200.000	n-Dodecane	0.9916
1211.082	1,3,5-Triethylbenzene	0.9447
1217.090	desconocido	0.94
1223.989	desconocido	0.94
1226.450	desconocido	0.94
1228.285	desconocido	0.94
1231.015	1,2,4-Triethylbenzene	0.9447
1235.434	desconocido	0.94
1242.923	desconocido	0.94
1252.070	desconocido	0.94
1253.115	n-Hexylbenzene	0.9447
1256.867	desconocido	0.94
1260.599	desconocido	0.94
1264.864	desconocido	0.94
1267.435	desconocido	0.94
1271.543	desconocido	0.94
1275.201	desconocido	0.94
1284.338	desconocido	0.94
1298.380	desconocido	0.94
1300.000	n-Tridecane	0.9907
1400.000	n-Tetradecane	0.9899
1500.000	n-Pentadecane	0.9893

A continuación se muestra el significado de las claves empleadas en esta base de datos.

G : Compuesto característico de gasolina.

GM : Compuesto característico de gasolina mexicana.

I9a : 2,5-Dimethylheptane.

I9b : 3,5-Dimethylheptane y 3,3-Dimethylheptane.

I10 : 2,3,-Dimethyloctane.

A9 : 1,2,4-Trimethylbenzene.

N10 : t-1-Methyl-2-Propylcyclohexane.

L : Levógiro.

D : Dextrógiro.

ANEXO III

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
 FACULTAD DE QUÍMICA
 DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
 LABORATORIO DE INVESTIGACIÓN EN PROCESOS
 ANÁLISIS DETALLADO DE HIDROCARBUROS
 PARA MUESTRAS DE GASOLINA O ALQUILADO

Nombre de la muestra : ALQUILADO ISOPENTANO / PROPILENO.

Fecha del Análisis Cromatográfico : 12 DE OCTUBRE DE 1997.

Fecha de este reporte : 30 DE DICIEMBRE DE 1997.

Pico No.	Tiempo de Retención	Índice de Retención	Diferencia Índices	Nombre del compuesto
1	6.678	257.661	-----	*Propylene*
2	7.078	348.841	-----	No Identificado
3	8.577	465.063	0.2359	Isopentane (G)
4	9.216	500.000	0.0000	n-Pentane (G)
5	11.768	555.000	0.1560	desconocido
6	11.976	559.483	0.0108	2-Methylpentane (G)
7	12.773	576.659	-0.0575	3-Methylpentane (G)
8	13.856	600.000	0.0000	n-Hexane (G)
9	16.147	624.385	-0.0557	2,4-Dimethylpentane (G)
10	19.633	661.490	-0.1068	2-Methylhexane (G)
11	19.799	663.257	-0.0989	2,3-Dimethylpentane
12	20.527	671.006	-0.1461	3-Methylhexane (G)
13	21.962	686.280	0.4770	1-Heptene
14	23.251	700.000	0.0000	n-Heptane (G)
15	27.247	728.732	0.2957	2,5-Dimethylhexane
16	27.462	730.278	0.1005	2,4-Dimethylhexane (G)
17	30.922	755.155	-0.1006	2,3-Dimethylhexane (G)
18	31.080	756.291	-0.1857	desconocido
19	31.765	761.217	-0.1744	2-Methylheptane
20	31.973	762.712	-0.2069	4-Methylheptane
21	32.125	763.805	-0.2100	desconocido
22	32.206	764.387	0.3724	desconocido
23	32.847	768.996	-0.2297	cct-1,2,4-Trimethylcyclopentane
24	34.528	781.083	-0.2202	2,2,5-Trimethylhexane
25	37.159	800.000	0.0000	n-Octane
26	40.096	815.781	-0.2240	desconocido
27	41.592	823.819	-0.2038	cis-1,2-Dimethylcyclohexane
28	42.950	831.116	-0.1880	desconocido
29	44.360	838.692	-0.1248	2,5-Dimethylheptane (+ N9)
30	48.578	861.356	-0.2318	2,3-Dimethylheptane
31	50.037	869.196	-0.2584	desconocido

32	50.226	870.211	-0.2098	2-Methyloctane
33	51.363	876.320	-0.2245	3-Methyloctane
34	51.890	879.152	-0.2389	desconocido
35	52.100	880.280	-0.0615	isoparafina de alquilado
36	52.714	883.580	-0.1714	desconocido
37	53.746	889.125	-0.1893	desconocido
38	55.590	899.033	-0.1791	desconocido
39	55.770	900.000	0.0000	n-Nonane
40	58.088	919.664	-0.3359	desconocido
41	58.373	922.082	0.3508	2,2-Dimethyloctane
42	59.293	929.886	-0.2577	desconocido
43	59.822	934.374	0.0969	n-Butylcyclopentane
44	60.404	939.311	-0.3289	desconocido
45	63.737	967.586	-0.4403	desconocido
46	65.060	978.809	-----	No Identificado
47	65.436	981.999	-0.4814	tert-Butylbenzene + A9
48	65.530	982.796	0.3161	tert-Butylbenzene + A9
49	65.889	985.842	-0.1924	isoparafina de alquilado
50	65.984	986.647	0.1265	Isobutylcyclohexane
51	67.168	996.692	0.4725	Isobuthylbenzene (+ N10)
52	67.558	1000.000	0.0000	n-Decane
53	67.792	1002.690	-----	No Identificado
54	68.421	1009.919	0.1915	1-Methyl-3-Isopropylbenzene
55	68.774	1013.977	-----	No Identificado
56	68.995	1016.517	-----	No Identificado
57	69.221	1019.115	-----	No Identificado
58	69.489	1022.195	-----	No Identificado
59	69.588	1023.333	-----	No Identificado
60	69.850	1026.345	-0.3711	1-Methyl-2-Isopropylbenzene
61	70.311	1031.644	-----	No Identificado
62	70.907	1038.494	-0.3228	desconocido
63	74.112	1075.333	0.4862	1,2-Dimethyl-4-Ethylbenzene
64	74.396	1078.598	-----	No Identificado
65	74.711	1082.218	-0.0836	isoparafina de alquilado
66	74.812	1083.379	-----	No Identificado
67	76.258	1100.000	0.0000	n-Undecane
68	77.668	1119.704	-----	No Identificado
69	78.413	1130.115	-0.4694	isoparafina de alquilado
70	83.414	1200.000	0.0000	n-Dodecane
71	85.184	1228.243	-0.0419	desconocido
72	85.417	1231.961	-----	No Identificado
73	86.304	1246.115	-----	No Identificado
74	89.681	1300.000	0.0000	n-Tridecane
75	95.376	1400.000	0.0000	n-Tetradecane
76	100.654	1500.000	0.0000	n-Pentadecane

61 Compuestos identificados de 76

La ventana empleada es de 0.5

Composición en %Peso SIN LOS COMPUESTOS SELECCIONADOS

Reporte por FAMILIAS :

PARAFINAS : 2.3747
 ISOPARAFINAS : 8.9276
 AROMATICOS : 1.4126
 NAFTENOS : 2.7730
 OLEFINAS : 73.7116
 DESCONOCIDOS : 9.6593
 NO IDENTIFICADOS : 1.1412

Reporte por COMPUESTO :

Pico No.	Concentración %Peso	Pico No.	Concentración %Peso	Pico No.	Concentración %Peso
1	0.1866	26	0.0656	51	0.0303
2	2.5845	27	0.0227	52	0.0367
3	77.6477	28	0.0605	53	0.0572
4	1.0339	29	0.0340	54	0.1223
5	0.4432	30	0.0254	55	0.0389
6	2.3903	31	0.0273	56	0.1006
7	0.5944	32	0.3256	57	0.0374
8	0.6446	33	0.2079	58	0.0407
9	0.5140	34	0.2410	59	0.0402
10	0.4876	35	0.1401	60	0.0197
11	0.2427	36	0.0322	61	0.0284
12	4.4959	37	0.0986	62	0.0335
13	1.5625	38	0.0515	63	0.0422
14	1.0145	39	0.0911	64	0.0636
15	0.0269	40	0.0197	65	0.0381
16	0.4072	41	0.0204	66	0.0366
17	0.0675	42	0.0379	67	0.0236
18	0.0680	43	0.1457	68	0.1033
19	0.0646	44	0.2690	69	0.0252
20	0.2058	45	0.1309	70	0.0642
21	0.3896	46	0.3033	71	0.0338
22	0.0332	47	0.1197	72	0.0272
23	0.0781	48	0.1693	73	0.0323
24	0.3010	49	0.0220	74	0.0000
25	0.6141	50	0.1090	75	0.0000
				76	0.0000

Suma : 100.00

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
 FACULTAD DE QUÍMICA
 DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
 LABORATORIO DE INVESTIGACIÓN EN PROCESOS
 ANÁLISIS DETALLADO DE HIDROCARBUROS
 PARA MUESTRAS DE GASOLINA O ALQUILADO

Nombre de la muestra : ALQUILADO BENCENO / PROPILENO.

Fecha del Análisis Cromatográfico : 1 DE DICIEMBRE DE 1997.

Fecha de este reporte : 30 DE DICIEMBRE DE 1997.

Pico No.	Teimpo de Retención	Indice de Retención	Diferencia Indices	Nombre del compuesto
1	6.717	299	-----	Propylene
2	7.331	400	-----	No Identificado
3	9.131	493.216	-----	No Identificado
4	9.262	500	0	n-Pentane (G)
5	9.472	504.513	-0.0018	cis-2-Pentene (G)
6	9.881	513.303	-----	No Identificado
7	11.86	555.835	-----	No Identificado
8	12.028	559.445	0.0515	2-Methylpentane (G)
9	12.073	560.413	-----	No Identificado
10	12.825	576.574	-0.0187	3-Methylpentane (G)
11	13.105	582.592	-----	No Identificado
12	13.915	600	0	n-Hexane (G)
13	14.037	601.295	-----	No Identificado
14	14.227	603.312	0.0161	trans-2-Hexene
15	14.39	605.042	0.0065	2-Methylpentene-2
16	14.629	607.58	-----	No Identificado
17	14.903	610.488	0.0143	cis-2-Hexene
18	15.372	615.467	-----	No Identificado
19	16.237	624.65	0.2787	2,4-Dimethylpentane (G)
20	18.038	643.769	0.1840	Benzene
21	19.705	661.465	0.029	2-Methylhexane (G)
22	22.05	686.359	-----	No Identificado
23	23.335	700	0	n-Heptane (G)
24	23.545	701.505	-----	No Identificado
25	24.416	707.746	-----	No Identificado
26	24.902	711.228	0.4391	cis-2-Heptene
27	29.991	747.693	-0.0833	Toluene (G)
28	37.291	800	0	n-Octane
29	44.499	838.732	-0.0421	1,1,4-Trimethylcyclohexane(+2 I9)
30	46.571	849.866	-0.2523	Ethylbenzene (G)

31	50.35	870.172	-0.2101	2-Methyloctane
32	55.901	900	0	n-Nonane
33	57.402	912.756	0.156	Isopropylbenzene (cumeno) (GM)
34	61.017	943.477	-0.2635	n-Propylbenzene
35	62.848	959.038	-0.4561	1,3,5-Trimethylbenzene (G) + I10
36	63.902	967.995	-0.2438	1-Methyl-2-Ethylbenzene
37	65.502	981.593	-0.3194	tert-Butylbenzene + A9
38	67.447	998.122	-0.2361	sec-Butylbenzene
39	67.668	1000	0	n-Decane
40	74.122	1074.201	-0.3910	1,2-Dimethyl-4-Ethylbenzene
41	75.66	1091.883	-----	No Identificado
42	75.735	1092.745	-----	No Identificado
43	76.366	1100	0	n-Undecane
44	76.622	1103.578	-----	No Identificado
45	77.035	1109.349	-----	No Identificado
46	79.59	1145.053	-----	1,3 Diisopropylbenzene**
47	79.729	1146.995	-----	No Identificado
48	80.248	1154.248	-----	No Identificado
49	80.994	1164.673	-----	1,4 Diisopropylbenzene**
50	81.241	1168.125	-----	No Identificado
51	81.512	1171.912	-----	No Identificado
52	82.12	1180.408	-----	No Identificado
53	82.276	1182.588	-----	No Identificado
54	82.775	1189.561	-----	No Identificado
55	83.192	1195.388	-----	No Identificado
56	83.522	1200	0	n-Dodecane
57	84.947	1222.734	-----	No Identificado
58	86.524	1247.894	-----	No Identificado
59	89.79	1300	0	n-Tridecane
60	91.339	1327.204	-----	1,3,5 Triisopropylbenzene**
61	92.617	1349.649	-----	No Identificado
62	93.571	1366.403	-----	No Identificado
63	94.849	1388.848	-----	No Identificado
64	95.484	1400	0	n-Tetradecane
65	96.246	1414.435	-----	No Identificado
66	99.79	1481.568	-----	1,2,3,5-Tetraisopropylbenzene**
67	100.763	1500	0	n-Pentadecane

37 Compuestos identificados de 67

La ventana empleada es de 0.5

Composición en %Peso SIN LAS PARAFINAS.

Reporte por FAMILIAS :

PARAFINAS : 0.00
 ISOPARAFINAS : 0.6580
 AROMATICOS : 94.487
 NAFTENOS : 0.0495
 OLEFINAS : 1.1298
 DESCONOCIDOS : 0.00
 NO IDENTIFICADOS : 3.6762

Reporte por COMPUESTO :

Pico No.	Composición (%Peso)	Pico No.	Composición (%Peso)
1	0.3504	36	0.0632
2	0.0612	37	0.2273
3	0.0633	38	0.2628
4	0	39	0
5	0.0475	40	0.0639
6	0.2071	41	0.0838
7	0.1341	42	0.1388
8	0.2108	43	0
9	0.095	44	0.0709
10	0.1007	45	0.0562
11	0.1962	46	6.448
12	0	47	0.0838
13	0.07	48	0.1461
14	0.1565	49	3.3369
15	0.4248	50	0.0978
16	0.2484	51	0.0979
17	0.084	52	0.2444
18	0.4361	53	0.0746
19	0.2176	54	0.1653
20	54.6529	55	0.1142
21	0.0811	56	0
22	0.0555	57	0.1192
23	0	58	0.0614
24	0.1034	59	0
25	0.0646	60	0.6375
26	0.0666	61	0.2034
27	0.0527	62	0.0494
28	0	63	0.0721
29	0.0495	64	0
30	0.1904	65	0.062
31	0.0478	66	0.5376
32	0	67	0
33	27.4714		
34	0.4946		
35	0.0474		

Suma : 100.00

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

LABORATORIO DE INVESTIGACIÓN EN PROCESOS

ANÁLISIS DETALLADO DE HIDROCARBUROS

PARA MUESTRAS DE GASOLINA O ALQUILADO

Nombre de la muestra : GASOLINA MAGNA-SIN

Fecha del Análisis Cromatográfico : 02 DE AGOSTO DE 1997.

Fecha de este reporte : 27 DE DICIEMBRE DE 1997.

Píco No.	Tiempo de Retención	Índice de Retención	Diferencia Índices	Nombre del compuesto
1	6.723	300.000	0.0000	n-Propane
2	7.097	363.283	-----	No Identificado
3	7.314	400.000	0.0000	n-Butane (G)
4	7.417	405.345	-----	No Identificado
5	7.530	411.209	-----	No Identificado
6	7.581	413.856	-----	No Identificado
7	7.714	420.758	-----	No Identificado
8	8.233	447.691	-----	No Identificado
9	8.533	463.259	-----	No Identificado
10	8.597	466.580	-----	No Identificado
11	8.934	484.068	-----	No Identificado
12	9.109	493.150	0.3770	2-Methyl-1-Butene (G)
13	9.175	496.575	-----	No Identificado
14	9.241	500.000	0.0000	n-Pentane (G)
15	9.378	502.929	0.0222	trans-2-Pentene (G)
16	9.450	504.469	-0.0523	cis-2-Pentene (G)
17	9.602	507.719	-0.2484	desconocido
18	9.697	509.750	-0.0772	4-Methylpentene-1
19	9.859	513.214	-0.0834	desconocido
20	9.939	514.924	-0.0959	desconocido
21	10.375	524.246	0.0864	desconocido
22	10.452	525.893	-0.1234	desconocido
23	11.199	541.864	-0.2225	desconocido
24	11.345	544.986	-0.1369	Cyclopentane (G)
25	11.424	546.675	-0.1378	desconocido
26	11.791	554.522	-0.3218	desconocido
27	11.941	557.729	0.4233	desconocido
28	12.036	559.761	0.2886	2-Methylpentane (G)
29	12.760	575.241	-----	No Identificado
30	12.824	576.609	-0.1080	3-Methylpentane (G)
31	13.090	582.296	-0.4227	desconocido
32	13.152	583.622	-0.4220	1-Hexene
33	13.828	598.076	-0.3963	desconocido

34	13.918	600.000	0.0000	n-Hexane (G)
35	14.024	601.124	-0.2148	desconocido
36	14.105	601.983	-0.2158	desconocido
37	14.212	603.118	-0.2360	trans-2-Hexene
38	14.375	604.847	-0.2482	2-Methylpentene-2
39	14.542	606.618	-0.2501	desconocido
40	14.613	607.371	-0.2582	desconocido
41	14.766	608.994	-0.2805	desconocido
42	14.885	610.256	-0.2824	cis-2-Hexene
43	15.355	615.240	-0.2808	desconocido
44	15.696	618.857	-0.2763	2,2-Dimethylpentane
45	15.895	620.967	-0.2138	Methylcyclopentane (G)
46	16.206	624.266	-0.1754	2,4-Dimethylpentane (G)
47	16.488	627.256	-----	No Identificado
48	16.645	628.921	-0.3176	2,2,3-Trimethylbutane
49	17.859	641.797	-----	No Identificado
50	17.913	642.369	-0.1777	Benzene (G)
51	18.432	647.874	-0.3464	3,3-Dimethylpentane
52	18.785	651.617	-0.3706	Cyclohexane (G)
53	18.957	653.442	-0.3675	desconocido
54	19.296	657.037	-----	No Identificado
55	19.540	659.625	-0.3544	desconocido
56	19.721	661.544	-0.0528	2-Methylhexane (G)
57	19.880	663.230	-0.1255	2,3-Dimethylpentane
58	20.164	666.242	-0.3276	1,1-Dimethylcyclopentane
59	20.362	668.342	-0.3607	desconocido
60	20.625	671.132	-0.0204	3-Methylhexane (G)
61	20.955	674.631	-----	No Identificado
62	21.261	677.877	-0.3672	cis-1,3-Dimethylcyclopentane
63	21.563	681.080	-0.3594	trans-1,3-Dimethylcyclopentane
64	21.700	682.533	-0.3194	3-Ethylpentane
65	21.868	684.314	-0.3766	trans-1-Dimethylcyclopentane
66	22.153	687.337	-----	No Identificado
67	22.686	692.990	-0.3492	desconocido
68	23.092	697.296	-0.4194	trans-3-Heptene
69	23.347	700.000	0.0000	n-Heptane (G)
70	23.451	700.747	-0.0956	cis-3-Heptene
71	23.541	701.394	-0.2437	desconocido
72	23.656	702.221	-0.2863	desconocido
73	23.859	703.680	-0.2963	trans-2-Heptene
74	24.049	705.045	-----	No Identificado
75	24.420	707.712	-0.3373	desconocido
76	24.822	710.601	-0.3282	cis-2-Heptene
77	24.887	711.068	0.1390	cis-2-Heptene
78	25.541	715.768	-0.2697	desconocido
79	25.641	716.487	0.4490	desconocido
80	25.990	718.995	0.0162	2,2-Dimethylhexane
81	27.087	726.879	-0.3176	Ethylcyclopentane
82	27.292	728.353	-0.0833	2,5-Dimethylhexane
83	27.412	729.215	-0.1048	2,2,3-Trimethylpentane
84	27.532	730.078	-0.0994	2,4-Dimethylhexane (G)
85	28.209	734.943	-0.2938	ctc-1,2,4-Trimethylcyclopentane
86	28.389	736.237	-0.2771	desconocido
87	29.164	741.807	0.0648	ctc-1,2,3-Trimethylcyclopentane
88	29.613	745.034	0.3408	2,3,4-Trimethylpentane? (G)

89	30.143	748.843	0.2579	2,3,3-Trimethylpentane? (G)
90	30.215	749.360	-----	No Identificado
91	31.028	755.203	-0.0526	2,3-Dimethylhexane (G)
92	31.182	756.310	-0.1668	desconocido
93	31.472	758.394	-0.2186	desconocido
94	31.876	761.298	-0.0930	2-Methylheptane
95	32.078	762.750	-0.1693	4-Methylheptane
96	32.235	763.878	-0.1369	desconocido
97	32.303	764.367	0.3518	desconocido
98	32.968	769.146	-0.0798	cct-1,2,4-Trimethylcyclopentane
99	33.121	770.246	-0.1912	3-Ethylhexane
100	33.278	771.374	-0.1498	3-Methylheptane (G)
101	33.438	772.524	-0.1920	trans-1,4-Dimethylcyclohexano
102	34.645	781.199	-0.1042	2,2,5-Trimethylpentane?
103	34.843	782.622	-0.1902	desconocido
104	35.176	785.015	-0.2599	1-Octene
105	35.377	786.460	-0.2974	desconocido
106	35.715	788.889	-0.2662	1-Ethyl-1-Methylcyclopentane
107	36.170	792.159	-0.0721	trans-1,2-Dimethylcyclohexane
108	36.692	795.911	-----	No Identificado
109	36.741	796.263	-----	No Identificado
110	37.261	800.000	0.0000	n-Octane
111	37.397	800.732	-0.2297	desconocido
112	37.847	803.155	-0.1365	trans-2-Octene
113	38.221	805.169	-----	No Identificado
114	38.445	806.376	-0.2584	desconocido
115	40.195	815.799	-0.2062	desconocido
116	41.688	823.838	-0.1848	cis-1,2-Dimethylcyclohexane
117	42.747	829.541	0.1987	n-Propylcyclopentane
118	43.049	831.167	-0.1371	desconocido
119	43.887	835.679	-0.3248	desconocido
120	44.458	838.754	-0.0630	1,1,4-Trimethylcyclohexane (+2 19)
121	46.612	850.353	0.4037	Ethylbenzene (G)
122	47.118	853.077	-0.1226	ctt-1,2,4-Trimethylcyclohexane
123	48.453	860.266	-0.1460	p-Xylene (G)
124	48.627	861.203	-0.3851	2,3-Dimethylheptane
125	49.585	866.362	-0.1365	desconocido
126	50.146	869.382	-0.0716	desconocido
127	50.338	870.416	-0.0048	2-Methyloctane
128	51.249	875.322	-0.0143	ctc-1,2,4-Trimethylcyclohexane
129	51.526	876.813	0.2683	3-Methyloctane
130	52.278	880.863	-0.1114	1,1,2-Trimethylcyclohexane
131	52.792	883.630	-0.1206	desconocido
132	53.220	885.935	-----	No Identificado
133	53.394	886.872	-0.1290	desconocido
134	53.815	889.139	-0.1750	desconocido
135	54.836	894.637	-----	No Identificado
136	55.653	899.036	-0.1758	desconocido
137	55.832	900.000	0.0000	n-Nonane
138	56.193	903.067	-0.2532	trans-2-Nonene
139	57.164	911.316	-0.2180	Isopropylbenzene (cumeno) (GM)
140	57.632	915.292	-----	No Identificado
141	58.148	919.675	-0.3245	desconocido
142	58.439	922.148	0.4166	2,2-Dimethyloctane
143	59.342	929.819	-0.3250	desconocido

144	59.877	934.364	0.0872	n-Butylcyclopentane
145	60.475	939.444	-0.1956	desconocido
146	60.994	943.854	-0.0535	n-Propylbenzene
147	61.205	945.646	-----	No Identificado
148	61.366	947.014	-0.0201	desconocido
149	61.981	952.239	0.4445	1-Methyl-3-Ethylbenzene (G)
150	62.194	954.048	0.2861	1-Methyl-4-Ethylbenzene (G)
151	62.668	958.075	-----	No Identificado
152	62.859	959.698	0.1855	1,3,5-Trimethylbenzene (G) +110
153	63.004	960.929	-0.1426	desconocido
154	63.490	965.058	-0.1828	desconocido
155	63.684	966.706	-0.1807	desconocido
156	63.903	968.567	0.1118	1-Methyl-2-Ethylbenzene
157	64.329	972.186	0.0599	3-Ethyltoluene
158	64.718	975.491	0.1976	3-Methylnonane
159	65.227	979.815	0.4128	isoparafina de alquilado
160	65.631	983.247	-----	No Identificado
161	67.135	996.024	-0.1948	Isobutylbenzene (+ N10)
162	67.405	998.318	-0.1631	sec-Butylbenzene
163	67.603	1000.000	0.0000	n-Decane
164	68.301	1008.049	0.1459	desconocido
165	68.438	1009.629	-0.0992	1-Methyl-3-Isopropylbenzene
166	68.752	1013.250	-0.1035	1-Methyl-4-Isopropylbenzene
167	69.142	1017.747	-0.2622	isoparafina de alquilado
168	69.352	1020.168	-0.0007	desconocido
169	69.902	1026.511	-0.2053	1-Methyl-2-Isopropylbenzene
170	70.243	1030.443	-0.1123	isoparafina de alquilado
171	70.961	1038.722	-0.0947	desconocido
172	71.218	1041.686	0.0809	1-Methyl-3-n-Propylbenzene
173	71.555	1045.572	0.0320	1-Methyl-4-n-Propylbenzene
174	71.640	1046.552	0.0371	1,3-Diethylbenzene
175	71.816	1048.582	0.0986	1,3-Dimethyl-5-Ethylbenzene
176	72.020	1050.934	-0.0450	1,2-Diethylbenzene
177	72.565	1057.219	0.2017	1-Methyl-2-n-Propylbenzene
178	72.964	1061.820	-0.0695	isoparafina de alquilado
179	73.159	1064.068	0.0553	desconocido
180	73.450	1067.424	0.0918	1,4-Dimethyl-2-Ethylbenzene
181	73.608	1069.246	0.1549	desconocido
182	73.986	1073.605	-----	No Identificado
183	74.108	1075.012	0.1646	1,2-Dimethyl-4-Ethylbenzene
184	74.608	1080.777	-0.0928	1,3-Dimethyl-2-Ethylbenzene
185	74.732	1082.207	-0.0948	isoparafina de alquilado
186	75.390	1089.795	-0.0563	desconocido
187	75.528	1091.386	-0.0409	isoparafina de alquilado
188	75.747	1093.911	-0.0496	1,2-Dimethyl-3-Ethylbenzene
189	76.275	1100.000	0.0000	n-Undecane
190	76.728	1106.349	0.1039	1,2,4,5-Tetramethylbenzene
191	77.004	1110.217	0.2172	desconocido
192	78.317	1128.620	0.0475	desconocido
193	78.613	1132.768	-0.0350	desconocido
194	78.833	1135.851	-0.0266	desconocido
195	78.947	1137.449	0.0741	desconocido
196	79.090	1139.453	0.1063	desconocido
197	79.396	1143.742	0.0432	desconocido
198	80.064	1153.104	0.0073	desconocido

199	80.383	1157.575	-0.0497	desconocido
200	80.505	1159.285	-0.0479	desconocido
201	80.725	1162.369	-0.1575	desconocido
202	81.009	1166.349	-0.0220	desconocido
203	81.283	1170.189	0.2391	desconocido
204	81.492	1173.118	-0.4227	t-1-Butyl-4-Ethylbenzene
205	81.618	1174.884	0.1042	isoparafina de alquilado
206	81.916	1179.061	-0.0321	desconocido
207	82.046	1180.883	-0.0021	desconocido
208	82.291	1184.317	-0.0273	desconocido
209	82.655	1189.418	-0.0637	desconocido
210	82.778	1191.142	-0.0258	desconocido
211	83.410	1200.000	0.0000	n-Dodecane
212	84.938	1223.950	-0.0392	desconocido
213	85.089	1226.317	-0.1334	desconocido
214	86.146	1242.884	-0.0389	desconocido
215	88.206	1275.172	-0.0287	desconocido
216	88.799	1284.467	0.1292	desconocido
217	89.675	1298.198	-0.1825	desconocido
218	89.790	1300.000	0.0000	n-Tridecane
219	95.356	1400.000	0.0000	n-Tetradecane
220	96.178	1415.533	-----	No Identificado

191 Compuestos identificados de 220

La ventana empleada es de 0.5

Composición en %Peso CON LAS PARAFINAS

Reporte por FAMILIAS :

PARAFINAS : 9.6779
 ISOPARAFINAS : 27.6302
 AROMATICOS : 14.6084
 NAFTENOS : 6.1609
 OLEFINAS : 1.8588
 DESCONOCIDOS : 17.4602
 NO IDENTIFICADOS : 22.6035

Reporte por COMPUESTO :

Pico No. (%Peso)	Pico No. (%Peso)	Pico No. (%Peso)	Pico No. (%Peso)	Pico No. (%Peso)	Pico No. (%Peso)
1	0.0575	51	0.1251	101	0.0601
2	0.3279	52	0.3270	102	0.6675
3	0.0620	53	0.0259	103	0.0844
4	1.9917	54	0.0221	104	0.0706
5	0.0815	55	0.0615	105	0.0745
6	0.0205	56	1.3003	106	0.0344
7	0.0844	57	0.7229	107	0.1163
8	0.0548	58	0.4942	108	0.0282
9	0.1505	59	0.0288	109	0.0616
10	8.4431	60	1.4354	110	0.8968
11	0.1499	61	0.0207	111	0.0220
12	0.1887	62	0.1778	112	0.0238
13	0.0634	63	0.1642	113	0.0459
14	3.6431	64	0.1720	114	0.0314
15	0.0187	65	0.1687	115	0.1206
16	0.4052	66	5.8942	116	0.0910
17	0.0327	67	0.0374	117	0.1544
18	0.2148	68	0.1370	118	0.1057
19	0.5008	69	1.4195	119	0.0670
20	0.0124	70	0.0108	120	0.1602
21	0.0387	71	0.0929	121	1.5186
22	0.8306	72	0.0392	122	0.0431
23	0.1091	73	0.0699	123	3.7007
24	0.0305	74	0.0351	124	1.7063
25	0.0419	75	0.1392	125	0.0456
26	8.3832	76	0.0447	126	0.2085
27	0.0391	77	0.0300	127	0.2561
28	3.7809	78	0.0737	128	0.0737
29	0.0612	79	0.4182	129	0.3023
30	2.1970	80	0.0929	130	2.1733
31	0.1426	81	0.1169	131	0.0646
32	0.0803	82	0.7354	132	0.0655
33	0.0942	83	0.2761	133	0.0734
34	2.3047	84	0.7641	134	0.0964
35	0.0829	85	0.0751	135	0.0346
36	0.0336	86	0.0594	136	0.0269
37	0.1829	87	0.0406	137	0.5684
38	0.2106	88	2.7551	138	0.0649
39	0.0563	89	6.8294	139	0.1476
40	0.1289	90	1.6866	140	0.0262
41	0.0285	91	0.7176	141	0.0371
42	0.1059	92	0.0513	142	0.0501
43	0.2137	93	0.0333	143	0.1073
44	0.1169	94	0.6171	144	0.0891
45	0.9726	95	0.2471	145	0.1139
46	0.7269	96	0.0740	146	0.5568
47	0.0143	97	0.0820	147	0.0108
48	0.0534	98	0.5979	148	0.0616
49	0.2250	99	0.2467	149	1.7815
50	1.1044	100	0.0317	150	0.8064
				151	0.0255
				152	0.8536
				153	0.0214
				154	0.0478
				155	0.1069
				156	0.8808
				157	0.0158
				158	0.1381
				159	0.0407
				160	2.9049
				161	0.0661
				162	0.0656
				163	0.3585
				164	0.5886
				165	0.0976
				166	0.0295
				167	0.0219
				168	0.2791
				169	0.0900
				170	0.0940
				171	0.2177
				172	0.5894
				173	0.2777
				174	0.1281
				175	0.4031
				176	0.0347
				177	0.1704
				178	0.1840
				179	0.0873
				180	0.3276
				181	0.3765
				182	0.0482
				183	0.5470
				184	0.0348
				185	0.0595
				186	0.0269
				187	0.0967
				188	0.1493
				189	0.1382
				190	0.2275
				191	0.3290
				192	0.2190
				193	0.0478
				194	0.0908
				195	0.0355
				196	0.1858
				197	0.1762
				198	0.0806
				199	0.0444
				200	0.0633
				201	0.0212
				202	0.1036
				203	0.3122
				204	0.0196
				205	0.0533
				206	0.0610
				207	0.0279
				208	0.0131
				209	0.1193
				210	0.0468
				211	0.1155
				212	0.0268
				213	0.0280
				214	0.0541
				215	0.0592
				216	0.2074
				217	0.0281
				218	0.0967
				219	0.0168
				220	0.0249

Suma : 100.0

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
 FACULTAD DE QUÍMICA
 DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
 LABORATORIO DE INVESTIGACIÓN EN PROCESOS
 ANÁLISIS DETALLADO DE HIDROCARBUROS
 PARA MUESTRAS DE GASOLINA O ALQUILADO

Nombre de la muestra : GASOLINA PREMIUM

Fecha del Análisis Cromatográfico : 01 DE SEPTIEMBRE DE 1997.

Fecha de este reporte : 27 DE DICIEMBRE DE 1997.

Pico No.	Tiempo de Retención	Índice de Retención	Diferencia Índices	Nombre del compuesto
1	7.167	354.314	0.4960	Isobutane (G)
2	7.384	385.007	-0.1929	desconocido
3	7.490	400.000	0.0000	n-Butane (G)
4	7.603	406.141	0.0493	desconocido
5	7.654	408.913	0.0351	trans-2-Butene (G)
6	7.789	416.250	0.0460	cis-2-Butene (G)
7	8.314	444.783	0.0886	3-Methyl-1-Butene
8	8.682	464.783	-0.0444	Isopentane (G)
9	9.022	483.261	0.0379	1-Pentene
10	9.197	492.772	-0.0013	2-Methyl-1-Butene (G)
11	9.330	500.000	0.0000	n-Pentane (G)
12	9.467	502.916	0.0091	trans-2-Pentene (G)
13	9.542	504.513	-0.0085	cis-2-Pentene (G)
14	9.695	507.769	-0.1978	desconocido
15	9.792	509.834	0.0070	4-Methylpentene-1
16	9.954	513.282	-0.0147	desconocido
17	10.552	526.011	-0.0049	desconocido
18	11.306	542.060	-0.0266	desconocido
19	11.452	545.168	0.0452	Cyclopentane (G)
20	11.874	554.151	0.1317	2,3-Dimethylbutane (G) + _i MBTE? (G)
21	12.130	559.600	0.1279	2-Methylpentane (G)
22	12.936	576.756	0.0391	3-Methylpentane (G)
23	13.215	582.695	-0.0242	desconocido
24	13.278	584.036	-0.0082	1-Hexene
25	14.028	600.000	0.0000	n-Hexane (G)
26	14.145	601.236	-0.1033	desconocido
27	14.337	603.264	-0.0904	trans-2-Hexene
28	14.501	604.996	-0.0992	2-Methylpentene-2
29	14.669	606.770	-0.0978	desconocido
30	14.740	607.520	-0.1089	desconocido
31	15.017	610.446	-0.0923	cis-2-Hexene
32	15.487	615.410	-0.1112	desconocido
33	15.829	619.022	-0.1110	2,2-Dimethylpentane

34	16.026	621.103	-0.0784	Methylcyclopentane (G)
35	16.339	624.409	-0.0324	2,4-Dimethylpentane (G)
36	16.788	629.151	-0.0882	2,2,3-Trimethylbutane
37	18.053	642.512	-0.0354	Benzene (G)
38	18.585	648.131	-0.0894	3,3-Dimethylpentane
39	18.941	651.891	-0.0974	Cyclohexane (G)
40	19.689	659.791	-0.1881	desconocido
41	19.852	661.512	-0.0845	2-Methylhexane (G)
42	20.020	663.287	-0.0692	2,3-Dimethylpentane
43	20.301	666.255	-0.3152	1,1-Dimethylcyclopentane
44	20.755	671.050	-0.1021	3-Methylhexane (G)
45	21.421	678.084	-0.1600	cis-1,3-Dimethylcyclopentane
46	21.726	681.305	-0.1336	trans-1,3-Dimethylcyclopentane
47	21.863	682.752	-0.0995	3-Ethylpentane
48	22.030	684.516	-0.1747	trans-1-Dimethylcyclopentane
49	22.276	687.115	-----	No Identificado
50	23.247	697.370	-0.3450	trans-3-Heptene
51	23.496	700.000	0.0000	n-Heptane (G)
52	23.611	700.821	-0.0221	cis-3-Heptene
53	24.034	703.840	-0.1356	trans-2-Heptene
54	24.599	707.874	-0.1755	desconocido
55	25.002	710.750	-0.1788	cis-2-Heptene
56	25.820	716.589	-0.1647	Methylcyclohexane (G)
57	26.155	718.981	0.0016	2,2-Dimethylhexane
58	27.275	726.976	-0.2215	Ethylcyclopentane
59	27.466	728.339	-0.0970	2,5-Dimethylhexane
60	27.587	729.203	-0.1174	2,2,3-Trimethylpentane
61	27.704	730.038	-0.1392	2,4-Dimethylhexane (G)
62	28.397	734.985	-0.2524	ctc-1,2,4-Trimethylcyclopentane
63	28.573	736.241	-0.2730	desconocido
64	29.349	741.780	0.0383	ctc-1,2,3-Trimethylcyclopentane
65	29.760	744.714	0.0211	2,3,4-Trimethylpentane? (G)
66	30.266	748.326	0.2690	Toluene (G)
67	30.347	748.904	0.3193	2,3,3-Trimethylpentane? (G)
68	31.208	755.050	-0.2057	2,3-Dimethylhexane (G)
69	31.371	756.214	-0.2631	desconocido
70	32.065	761.168	-0.2232	2-Methylheptane
71	32.278	762.688	-0.2307	4-Methylheptane
72	32.433	763.795	-0.2203	desconocido
73	32.510	764.344	0.3293	desconocido
74	33.331	770.205	-0.2321	3-Ethylhexane
75	33.492	771.354	-0.1699	3-Methylheptane (G)
76	33.658	772.539	-0.1769	trans-1,4-Dimethylcyclohexano
77	34.866	781.162	-0.1409	2,2,5-Trimethylpentane?
78	35.491	785.624	0.3485	1-Octene
79	35.963	788.993	-0.1622	1-Ethyl-1-Methylcyclopentane
80	36.426	792.298	0.0668	trans-1,2-Dimethylcyclohexane
81	37.505	800.000	0.0000	n-Octane
82	38.124	803.335	0.0432	trans-2-Octene
83	38.871	807.360	0.0999	Isopropylcyclopentane
84	39.606	811.320	0.1140	cis-2-Octene
85	40.487	816.067	0.0618	desconocido
86	41.999	824.213	0.1904	cis-1,2-Dimethylcyclohexane
87	43.008	829.650	0.3078	n-Propylcyclopentane
88	43.364	831.568	0.2639	desconocido

89	44.788	839.240	0.4233	1,1,4-Trimethylcyclohexane (+2 I9)
90	45.153	841.207	0.4129	3,5-Dimethylheptane(L) (+2 I9)
91	46.896	850.598	-----	No Identificado
92	47.433	853.491	0.2914	ctt-1,2,4-Trimethylcyclohexane
93	48.649	860.043	-0.3689	p-Xylene (G)
94	48.844	861.094	-0.4943	2,3-Dimethylheptane
95	48.978	861.816	0.2277	2,3-Dimethylheptane
96	49.320	863.658	0.2814	3,4-Dimethylheptane(D)
97	49.467	864.450	0.2595	3,4-Dimethylheptane(L)
98	50.405	869.504	0.0504	desconocido
99	50.601	870.560	0.1393	2-Methyloctane
100	51.514	875.480	0.1436	ctc-1,2,4-Trimethylcyclohexane
101	51.756	876.783	0.2384	3-Methyloctane
102	52.029	878.254	0.1903	3,3-Diethylpentane
103	52.279	879.601	0.2103	desconocido
104	52.484	880.706	0.3638	o-Xylene (G) + ¿algo?
105	53.037	883.685	-0.0656	desconocido
106	54.067	889.235	-0.0791	desconocido
107	54.330	890.652	0.0240	1-Nonene
108	54.648	892.365	0.0883	Isobutylcyclopentane
109	55.368	896.245	0.0457	trans-3-Nonene
110	55.594	897.462	0.0343	cis-3-Nonene
111	55.899	899.106	-0.1064	desconocido
112	56.065	900.000	0.0000	n-Nonane
113	56.458	903.347	0.0267	trans-2-Nonene
114	57.404	911.403	-0.1315	Isopropylbenzene (cumeno) (GM)
115	57.545	912.603	0.0033	cis-2-Nonene
116	58.164	917.875	0.0425	Isopropylcyclohexane
117	58.375	919.671	-0.3287	desconocido
118	58.619	921.749	0.0181	2,2-Dimethyloctane
119	59.569	929.839	-0.3049	desconocido
120	60.095	934.318	0.0414	n-Butylcyclopentane
121	60.690	939.385	-0.2548	desconocido
122	60.821	940.501	0.0187	3,3-Dimethyloctane
123	61.211	943.822	-0.0851	n-Propylbenzene
124	62.153	951.844	0.0497	1-Methyl-3-Ethylbenzene (G)
125	62.379	953.768	0.0062	1-Methyl-4-Ethylbenzene (G)
126	63.048	959.465	-0.0468	1,3,5-Trimethylbenzene (G) +110
127	63.882	966.567	-0.3197	desconocido
128	64.099	968.415	0.3892	desconocido
129	64.538	972.154	0.0276	3-Ethyloctane
130	64.905	975.279	-0.0142	3-Methylnonane
131	65.397	979.469	0.0667	isoparafina de alquilado
132	65.788	982.798	0.3183	tert-Butylbenzene + A9
133	66.233	986.588	0.0668	Isobutylcyclohexane
134	66.641	990.062	-0.0658	1-Decene
135	67.176	994.618	-0.0899	isoparafina de alquilado
136	67.355	996.142	-0.0766	Isobutylbenzene (+ N10)
137	67.622	998.416	-0.0649	sec-Butylbenzene
138	67.808	1000.000	0.0000	n-Decane
139	68.490	1007.857	-0.0459	desconocido
140	68.643	1009.620	-0.1082	1-Methyl-3-Isopropylbenzene
141	68.957	1013.237	-0.1157	1-Methyl-4-Isopropylbenzene
142	69.554	1020.115	-0.0538	desconocido
143	70.172	1027.235	-----	No Identificado

144	70.438	1030.300	-0.2555	isoparafina de alquilado
145	71.080	1037.696	-0.1531	isoparafina de alquilado
146	71.157	1038.583	-0.2341	desconocido
147	71.410	1041.498	-0.1072	1-Methyl-3-n-Propylbenzene
148	71.760	1045.530	-0.0100	1-Methyl-4-n-Propylbenzene
149	71.845	1046.509	-0.0057	1,3-Diethylbenzene
150	72.012	1048.433	-0.0498	1,3-Dimethyl-5-Ethylbenzene
151	72.225	1050.887	-0.0919	1,2-Diethylbenzene
152	72.770	1057.166	0.1489	1-Methyl-2-n-Propylbenzene
153	73.162	1061.682	-0.2069	isoparafina de alquilado
154	73.340	1063.733	-0.2803	desconocido
155	73.423	1064.689	-----	No Identificado
156	73.645	1067.246	-0.0856	1,4-Dimethyl-2-Ethylbenzene
157	73.797	1068.998	-0.0933	desconocido
158	74.302	1074.816	-0.0314	1,2-Dimethyl-4-Ethylbenzene
159	74.935	1082.108	-0.1937	isoparafina de alquilado
160	75.738	1091.359	-0.0675	isoparafina de alquilado
161	75.952	1093.825	-0.1361	1,2-Dimethyl-3-Ethylbenzene
162	76.488	1100.000	0.0000	n-Undecane
163	76.924	1106.098	-0.1470	1,2,4,5-Tetramethylbenzene
164	77.104	1108.615	0.2893	2-Methylbutylbenzene
165	77.196	1109.902	-0.0979	desconocido
166	78.227	1124.322	0.2417	tert-1-Butyl-2-Methylbenzene
167	78.520	1128.420	-0.1525	desconocido
168	78.812	1132.503	-0.2996	desconocido
169	79.029	1135.538	-0.3396	desconocido
170	79.143	1137.133	-0.2422	desconocido
171	79.289	1139.175	-0.1722	desconocido
172	79.595	1143.455	-0.2444	desconocido
173	79.980	1148.839	-----	No Identificado
174	80.234	1152.392	0.1796	t-1-Methyl-2-(4MethylPropyl)cyclopentane
175	80.589	1157.357	-0.2684	desconocido
176	80.711	1159.063	-0.2701	desconocido
177	81.209	1166.028	-0.3430	desconocido
178	81.387	1168.517	0.1434	t-1-Butyl-3,5-Dimethylbenzene
179	81.482	1169.846	-0.1038	desconocido
180	81.759	1173.720	0.1793	t-1-Butyl-4-Ethylbenzene
181	82.122	1178.797	-0.2958	desconocido
182	82.859	1189.105	-0.3772	desconocido
183	82.981	1190.811	-0.3567	desconocido
184	83.638	1200.000	0.0000	n-Dodecane
185	84.339	1211.194	0.1124	1,3,5-Triethylbenzene
186	85.595	1231.252	0.2369	1,2,4-Triethylbenzene
187	86.356	1243.405	0.4817	desconocido
188	86.973	1253.258	0.1427	n-Hexylbenzene
189	88.417	1276.318	-----	No Identificado
190	89.007	1285.739	-----	No Identificado
191	89.900	1300.000	0.0000	n-Tridecane
192	90.003	1301.809	-----	No Identificado
193	95.592	1400.000	0.0000	n-Tetradecane
194	100.868	1500.000	0.0000	n-Pentadecane

186 Compuestos identificados de 194

La ventana empleada es de 0.5

Composición en %Peso CON LAS PARAFINAS

Reporte por FAMILIAS :

PARAFINAS : 1.8893
 ISOPARAFINAS : 28.3400
 AROMATICOS : 9.0717
 NAFTENOS : 6.5570
 OLEFINAS : 13.4692
 DESCONOCIDOS : 32.6328
 NO IDENTIFICADOS : 8.0402

Reporte por COMPUESTO :

Pico No.	Composición (%Peso)	Pico No.	Composición (%Peso)	Pico No.	Composición (%Peso)	Pico No.	Composición (%Peso)	Pico No.	Composición (%Peso)
1	0.0874	31	0.3585	61	0.7069	91	1.8868	121	0.0244
2	0.0242	32	0.0733	62	0.1465	92	0.2552	122	0.2163
3	1.3521	33	0.1342	63	0.0200	93	3.0764	123	0.8234
4	0.0317	34	0.6564	64	0.1304	94	1.9168	124	1.3785
5	0.0179	35	0.9145	65	2.4318	95	0.0577	125	0.7981
6	0.0335	36	0.3040	66	5.4512	96	0.1133	126	0.9175
7	0.1839	37	1.5152	67	2.2058	97	0.1325	127	0.0284
8	7.2305	38	0.1481	68	0.6846	98	0.0660	128	1.0488
9	0.4038	39	0.4724	69	0.0182	99	0.3015	129	0.2253
10	0.2509	40	0.0191	70	0.5247	100	0.2695	130	0.3803
11	2.1580	41	0.5912	71	0.3064	101	0.4434	131	0.0438
12	0.1593	42	0.6107	72	0.0530	102	0.1249	132	2.7054
13	0.3141	43	0.3698	73	0.0614	103	0.0309	133	0.4343
14	0.0199	44	0.5548	74	0.0945	104	2.0575	134	0.6655
15	0.2515	45	0.1039	75	0.2121	105	0.0881	135	0.0231
16	0.2647	46	0.2641	76	0.2732	106	0.0748	136	0.7323
17	0.2104	47	0.1046	77	0.7555	107	0.6254	137	0.2864
18	0.0557	48	0.1356	78	0.6515	108	0.2671	138	0.7811
19	0.3107	49	5.2912	79	0.0925	109	0.1742	139	0.4136
20	5.8871	50	0.3544	80	0.1491	110	0.3322	140	0.1865
21	1.9215	51	1.1285	81	0.9664	111	0.0403	141	0.1335
22	1.2832	52	0.5044	82	0.1726	112	0.9044	142	0.1007
23	0.0444	53	0.3340	83	0.2271	113	0.1791	143	0.1553
24	0.6090	54	0.0483	84	0.3183	114	0.3410	144	0.1244
25	1.9098	55	0.5053	85	0.1230	115	0.2170	145	0.0336
26	0.0298	56	0.5865	86	0.3112	116	0.4096	146	0.1108
27	0.2047	57	0.1430	87	0.5416	117	0.0272	147	0.6330
28	0.3616	58	0.3028	88	0.0384	118	0.2354	148	0.3897
29	0.0191	59	0.9175	89	0.7415	119	0.0287	149	0.2895
30	0.0470	60	0.2257	90	0.1827	120	0.2944	150	0.4647

Pico	Composición	Pico	Composición	Pico	Composición	Pico	Composición	Pico	Composición
No.	(%Peso)	No.	(%Peso)	No.	(%Peso)	No.	(%Peso)	No.	(%Peso)
151	0.1364	160	0.0296	169	0.0366	178	0.2003	187	0.0236
152	0.3372	161	0.3164	170	0.0234	179	0.1895	188	0.3784
153	0.1221	162	0.7616	171	0.0934	180	0.2450	189	0.0354
154	0.0290	163	0.1691	172	0.0914	181	0.0210	190	0.1496
155	0.0353	164	0.1108	173	0.4575	182	0.0499	191	0.6583
156	0.3984	165	0.2076	174	0.2573	183	0.0264	192	0.0291
157	0.2808	166	0.0719	175	0.0219	184	0.6799	193	0.5990
158	0.5156	167	0.1075	176	0.0275	185	0.4046	194	0.5583
159	0.0444	168	0.0241	177	0.0413	186	0.0974		

Suma : 100.00

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
 FACULTAD DE QUÍMICA
 DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
 LABORATORIO DE INVESTIGACIÓN EN PROCESOS
 ANÁLISIS DETALLADO DE HIDROCARBUROS
 PARA MUESTRAS DE GASOLINA O ALQUILADO

Nombre de la muestra : ALQUILADO DE REFINERÍA.

Fecha del Análisis Cromatográfico : 10 DE SEPTIEMBRE DE 1997.

Fecha de este reporte : 27 DE DICIEMBRE DE 1997.

Pico No.	Tiempo de Retención	Índice de Retención	Diferencia Índices	Nombre del compuesto
1	7.094	355.540	-----	No Identificado
2	7.415	400.000	0.0000	n-Butane (G)
3	8.594	464.816	-0.0112	Isopentane (G)
4	9.234	500.000	0.0000	n-Pentane (G)
5	11.801	555.027	0.1828	desconocido
6	11.999	559.271	-0.2008	2-Methylpentane (G)
7	12.799	576.420	-0.2968	3-Methylpentane (G)
8	13.899	600.000	0.0000	n-Hexane (G)
9	16.222	624.522	0.0814	2,4-Dimethylpentane (G)
10	19.694	661.174	-0.4231	2-Methylhexane (G)
11	19.896	663.306	-0.0498	2,3-Dimethylpentane
12	20.588	670.611	-0.3508	3-Methylhexane
13	22.317	688.863	-----	No Identificado
14	23.372	700.000	0.0000	n-Heptane (G)
15	27.364	728.821	0.3851	2,5-Dimethylhexane
16	27.475	729.622	0.3024	2,2,3-Trimethylpentane
17	27.623	730.691	-0.3209	2,4-Dimethylhexane
18	29.736	745.946	-----	No Identificado
19	30.235	749.549	-----	No Identificado
20	31.100	755.794	-0.4329	2,3-Dimethylhexane
21	32.232	763.966	-0.0485	desconocido
22	32.311	764.537	-0.0591	desconocido
23	34.710	781.857	-----	No Identificado
24	37.323	800.535	-0.4272	desconocido
25	40.218	816.014	0.0093	desconocido
26	51.982	878.917	-0.4743	desconocido
27	52.713	882.825	-----	No Identificado
28	52.801	883.296	-0.4551	desconocido
29	53.832	888.809	-----	No Identificado
30	55.673	898.653	-----	No Identificado
31	55.925	900.000	0.0000	n-Nonane
32	59.966	934.351	0.0735	n-Butylcyclopentane

33	63.865	967.494	-----	No Identificado
34	65.180	978.672	-----	No Identificado
35	66.983	993.999	-----	No Identificado
36	67.356	997.169	-----	No Identificado
37	67.689	1000.000	0.0000	n-Decane
38	70.290	1029.896	-----	No Identificado
39	70.913	1037.057	-----	No Identificado
40	71.309	1041.609	0.0042	1-Methyl-3-n-Propylbenzene
41	71.622	1045.207	-0.3331	1-Methyl-4-n-Propylbenzene
42	73.013	1061.195	-----	No Identificado
43	73.162	1062.908	-----	No Identificado
44	73.703	1069.126	0.0355	desconocido
45	74.770	1081.391	-----	No Identificado
46	75.797	1093.195	-----	No Identificado
47	76.389	1100.000	0.0000	n-Undecane
48	83.539	1200.000	0.0000	n-Dodecane
49	89.806	1300.000	0.0000	n-Tridecane
50	95.501	1400.000	0.0000	n-Tetradecane
51	100.779	1500.000	0.0000	n-Pentadecane

32 Compuestos identificados de 51

La ventana empleada es de 0.5

Composición en %Peso CON LAS PARAFINAS

Reporte por FAMILIAS :

PARAFINAS : 25.2343
 ISOPARAFINAS : 13.2296
 AROMATICOS : 0.6252
 NAFTENOS : 0.1321
 OLEFINAS : 0.0000
 DESCONOCIDOS : 5.4135
 NO IDENTIFICADOS : 55.3653

Reporte por COMPUESTO :

Pico No.	Composición (%Peso)
1	0.4263
2	1.4379
3	3.4626
4	1.8272
5	2.0595
6	0.4984
7	0.2428
8	1.7904
9	2.6633
10	0.1495
11	2.5020
12	0.1117
13	25.8946
14	1.9529
15	3.3598
16	0.3511
17	3.5517
18	10.3036
19	5.1992
20	2.6344
21	0.1663
22	0.1746
23	2.1707
24	1.8818
25	0.3065
26	0.1243

Suma : 100

Pico No.	Composición (%Peso)
27	0.1281
28	0.1909
29	0.1578
30	0.1148
31	2.2960
32	0.1321
33	1.2527
34	0.3454
35	0.2237
36	0.1147
37	2.3954
38	0.8175
39	0.3279
40	0.3942
41	0.2310
42	0.7694
43	0.1065
44	0.5097
45	0.5575
46	0.1569
47	2.7310
48	2.6511
49	2.6569
50	2.7309
51	2.7645