

METODOS GENERALIZADOS DE ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES DE TRANSPORTE: VISCOSIDAD

Dr. C. Yamilé Martínez Ochoa¹, Dr. C. Agustín Benítez Hernández¹

1. Departamento de Química e Ingeniería Química. Facultad de Ingenierías Química – Mecánica. Universidad de Matanzas. Autopista a Varadero. Km 3 ½. Matanzas. Cuba CP 44 740, Cuba.

Resumen.

El diseño o análisis de todo proceso químico se rige por modelos matemáticos en los cuales es importante tener en cuenta las propiedades de los fluidos que intervienen en los procesos de transferencia o transporte. Dentro de las propiedades de transporte se encuentra la viscosidad que indica la resistencia que ofrecen los fluidos a su deformación ante la acción de una tensión aplicada. Cuando se carece de datos experimentales para la determinación de la viscosidad se procede a estimarla a través de métodos reportados en la bibliografía especializada. El objetivo del presente trabajo es realizar un compendio de los métodos de estimación de la viscosidad tanto de gases como de líquidos a baja y altas presiones reportados por diferentes autores..

Palabras claves: viscosidad, propiedades de transporte, propiedades físicas, fenómenos de transporte.

Introducción.

El diseño o análisis de todo proceso químico se rige por modelos matemáticos y estos a su vez se constituyen haciendo uso de diferentes leyes, como son: las leyes de conservación de la materia, energía y el movimiento; o las leyes cinéticas que describen las reacciones químicas, bioquímicas y las ecuaciones de velocidad de transporte, además dependen de las propiedades que tenga el fluido que estará sujeto al transporte, las que pueden ser físicas, termodinámicas y de transporte.

Dentro de las propiedades de transporte se encuentra la viscosidad, la cual es una propiedad de los fluidos que indica la resistencia que ofrecen a su deformación ante la acción de una tensión aplicada. Depende de la naturaleza del fluido y de su estado termodinámico.

Según Perry's (1999) la viscosidad absoluta (μ) se define como el esfuerzo absoluto en un punto dividido por el gradiente de velocidad en el punto y la viscosidad cinemática (γ) es la relación entre la viscosidad absoluta y la densidad a la misma temperatura y presión.

Desarrollo.

Cuando se carece de datos tabulados o experimentales se pueden estimar las propiedades de transporte por métodos empíricos utilizando otros datos de la sustancia en cuestión o de las sustancias puras que componen la mezcla.

Los métodos de estimación de las propiedades de transporte propuestos a lo largo del tiempo son muy diversos y van desde los que se basan en teorías rigurosas hasta los simples ajustes polinómicos, sin embargo, existen tres grupos de ecuaciones o métodos que han sido aceptados para este fin. Estos son según Aucejo (1999) los siguientes:

- Las ecuaciones basadas en la teoría cinética de los gases ideales
- Las ecuaciones basadas en el teorema de los estados correspondientes
- Las ecuaciones basadas en procedimientos estructurales

Ecuaciones basadas en la teoría cinética de los gases ideales

Estas ecuaciones se obtienen a partir del modelo de los gases ideales que considera un gas puro constituido por moléculas esféricas, rígidas y que no se atraen, de diámetro d y masa m con una concentración de n moléculas por unidad de volumen. El volumen de una molécula es despreciable en comparación con el volumen del espacio intermolecular. Cada molécula se mueve aleatoriamente, en diferentes direcciones con una misma velocidad promedio (v) y recorre un espacio (l) entre dos colisiones consecutivas denominado recorrido libre medio. (Aucejo,1999; Bird,1992; Garcell, 1992)

A partir de este modelo muy elemental se llegó a la expresión generalizada para las propiedades de transportes:

$$\delta = \frac{1}{3} l \cdot v \quad (1)$$

El recorrido libre medio de las moléculas (l) y la velocidad media aritmética pueden determinarse a través de las siguientes expresiones:

$$l = \frac{1}{\sqrt{2} \pi d^2 n} \quad (2)$$

$$v = \sqrt{\frac{8 K T}{\pi m}} \quad (3)$$

donde:

K: Constante de Boltzman. ($1,38 \cdot 10^{-23}$ J/mol K)

A partir de estas expresiones elementales, se obtiene que la propiedad de transporte viene dada por:

$$\delta = \frac{2}{3 d^2 n} \sqrt{\frac{K T}{\pi^3 m}} \quad (4)$$

La validez de esta expresión para el cálculo de propiedades de transporte es muy reducida, ya que responde a un modelo de gas muy simplificado.

Esta expresión sencilla es modificada conforme a la teoría cinética que describe el comportamiento de los gases reales.

Ecuaciones basadas en el teorema de los estados correspondientes

El teorema de los estados correspondientes fue propuesto por Van der Waals en 1873 y establece que: “ todos los gases cuando se comparan a la misma presión reducida y temperatura reducida, tienen el mismo factor de compresibilidad, y todos se desvían del comportamiento ideal en el mismo grado”. Esto quiere decir que, aunque la relación entre el volumen y la presión a

temperatura constante es diferente para cada sustancia, si esta relación se establece entre la presión reducida P_r y el volumen reducido V_r , a una temperatura reducida dada T_r , el resultado es el mismo para todos los compuestos. (Aucejo, 1999)

Esta ley se cumple adecuadamente en sistemas formados por moléculas sencillas y con pequeñas modificaciones para moléculas polares. Es un procedimiento que ha dado buenos resultados aplicados a hidrocarburos, sobre todo para aquellas propiedades que dependen de las fuerzas intermoleculares.

Ecuaciones basadas en procedimientos estructurales.

Los procedimientos agrupados bajo esta denominación se derivan de la suposición de que las propiedades de los compuestos químicos están relacionadas con la estructura molecular. Si se divide la molécula en átomos, grupos de átomos, enlaces, etc., las propiedades podrían calcularse a partir de la contribución de cada una de estas partes elementales. A veces, no es la propiedad la que se estima por este procedimiento, sino algún parámetro relacionado con ella. (Aucejo, 1999)

A continuación se relacionan diferentes métodos reportados en la bibliografía especializada para estimar la viscosidad de gases puros y mezclas de gases multicomponentes.

1. Viscosidad de gases a bajas presiones

El coeficiente de viscosidad de los gases puros a bajas presiones, de peso molecular M , puede ser estimado por varios métodos.

Ecuaciones basadas en la teoría cinética de los gases ideales

- Ecuación de Chapman – Enskog

Partiendo del modelo de los gases ideales Chapman en Inglaterra y Enskog en Suecia desarrollaron, independientemente, una teoría cinética rigurosa de los gases monoatómicos a baja densidad. (Bird, 1992)

La teoría de Chapman – Enskog considera las interacciones entre las moléculas que chocan en función de la energía potencial de las mismas.

Una función empírica del potencial de energía de interacción que se ha utilizado para predecir, con bastante precisión, las propiedades de transporte de gases no polares a presiones próximas a la atmosféricas es el Potencial (6-12) de Lennard – Jones que presenta la forma (Betancourt, 2003; Aucejo, 1999; Bird, 1992; Garcell, 1992):

$$\varphi(r) = 4 \varepsilon_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (5)$$

donde:

σ : Diámetro de colisión (diámetro característico de la molécula)

ε_0 : Energía de atracción máxima entre dos moléculas

r: Distancia entre moléculas

Los valores de los parámetros del Potencial (6-12) de Lennard - Jones (σ y ε_0/K) se reportan en la bibliografía para algunos compuestos. En el Anexo 1 se muestra el valor de estas constantes reportados por Betancourt (2003), Aucejo (1999), Bird (1992), Garcell (1992) y Brodkey (1988)

Cuando no se encuentran reportadas en la bibliografía para las sustancias de trabajo los parámetros de Potencial 6-12 de Lennard – Jones, estos pueden ser estimados a través de propiedades del fluido.

Según Garcell (1992), Bird (1992) y Betancourt (2003) los parámetros del Potencial 6-12 de Lennard – Jones (σ y ε_0/K) pueden calcularse a partir de las propiedades del fluido en el punto crítico (c), de la temperatura normal de ebullición del líquido (b) o del punto de fusión del sólido (m), mediante las siguientes ecuaciones empíricas:

$$\varepsilon/K = 0,77 T_c = 1,15 T_b = 1,92 T_f \quad (K) \quad (6)$$

$$\sigma = 0,841 V_c^{1/3} = 2,44 \left(\frac{T_c}{P_c} \right)^{1/3} = 1,166 V_{b(lig)}^{1/3} = 1,222 V_{f(sol)}^{1/3} \quad (A^\circ) \quad (7)$$

donde:

K: Constante de Boltzman. ($1,38 \cdot 10^{-23}$ J/mol K)

σ : Diámetro de colisión (A°)

T_c : Temperatura crítica del fluido (K)

T_b : Temperatura normal de ebullición del líquido (K)

T_f : Temperatura de fusión del sólido (K)

V_c : Volumen molar a T_c (cm^3/mol)

V_b : Volumen molar a T_b (cm^3/mol)

V_f : Volumen molar a T_f (cm^3/mol)

P_c : Presión crítica del fluido (atm)

Aucejo (1999) y Brodkey (1988) han propuesto estimar los parámetros del Potencial 6-12 de Lennard – Jones (σ y ε_0/K) a partir de las propiedades críticas y del factor acéntrico mediante las siguientes ecuaciones:

$$\sigma \left(\frac{P_c}{T_c} \right)^{1/3} = 2,3551 - 0,087 \omega \quad (8)$$

$$\frac{\varepsilon}{K T_c} = 0,7915 + 0,1693 \omega \quad (9)$$

donde:

K: Constante de Boltzman. ($1,38 \cdot 10^{-23}$ J/mol K)

σ : Diámetro de colisión (Å)

Tc: Temperatura crítica del fluido (K)

Pc: Presión crítica del fluido (atm)

ω : Factor acéntrico

Para moléculas polares, el Potencial (6-12) de Lennard – Jones no es adecuado. Para estas moléculas debe usarse los parámetros del Potencial de Stokmayer, los cuales pueden ser estimados de la siguiente manera (Betancourt, 2003; Brodkey, 1988):

$$\varepsilon/K = 1,18 (1 + 1,3 \delta^2) T_b \quad (K) \quad (10)$$

$$\sigma = 1,166 \cdot 10^{-9} \left(\frac{V_b}{1 + 1,3 \delta^2} \right)^{1/3} \quad (m) \quad (11)$$

donde:

δ : Momento dipolar adimensional

Tb: Temperatura normal de ebullición (K)

Vb: Volumen molar del líquido a la temperatura normal de ebullición (Tb) (cm³/mol)

El momento dipolar se determina como:

$$\delta = \frac{1,94 (DPM)^2}{V_b T_b} \quad (12)$$

donde:

DMP: Momento dipolar (debye)

El volumen molar del líquido (V_b) puede ser estimado a partir de las contribuciones de los átomos constituyentes de la molécula. El volumen atómico y molecular de algunos átomos y moléculas se encuentran en el Anexo 2.

Atendiendo a esta teoría, la expresión para determinar viscosidad de gases no polares monoatómicos y poliatómicos toma la forma siguiente:

$$\mu = A \frac{\sqrt{M T}}{\sigma^2 \Omega_v} \quad (13)$$

donde:

μ : Viscosidad del gas

T: Temperatura

M: Masa molecular

σ : Diámetro de colisión (diámetro característico de la molécula)

Ω_v : Función integral de colisión (adimensional). Factor de corrección de la desviación respecto al comportamiento de la esfera rígida.

A: Constante empírica que depende del sistema de unidades en que se trabaje

Los valores de la constante empírica A según varios autores, se muestran a continuación:

Tabla 1: Valores de la constante empírica A según varios autores

A	Unidades			Autor
	μ	T	σ	
$2,6693 \cdot 10^{-6}$	Pa.s	K	Å	Aucejo, 1999, Garcell, 1992
$2,6693 \cdot 10^{-8}$	Pa.s	K	nm	Betancourt, 2003
$2,6693 \cdot 10^{-26}$	Pa.s	K	m	Brodkey, 1988
$2,6693 \cdot 10^{-5}$	$\text{g} \cdot \text{cm}^{-1} \text{ s}^{-1}$	K	Å	Betancourt, 2003; Bird, 1992

La expresión anterior muestra que la viscosidad de los gases a bajas presiones aumenta con la temperatura y que es independiente de la presión.

La función integral de colisión (Ω_v) es una función decreciente con la temperatura adimensional.

La temperatura adimensional se determina como:

$$T^* = \frac{T}{\varepsilon / K} \quad (14)$$

La función integral de colisión para moléculas no polares ($\Omega_{v, \text{no polar}}$) puede ser estimada mediante las siguientes expresiones según Betancourt (2003), Garcell (1992) y Brodkey (1988):

$$\Omega_{v, \text{nopolar}} = 1,6016 (T^*)^{-0,474} \quad \text{para } 0,3 < (T^*) \leq 2,0 \quad (15)$$

$$\Omega_{v, \text{nopolar}} = 1,306 - 0,085 (T^*) \quad \text{para } 2,0 < (T^*) \leq 4,2 \quad (16)$$

$$\Omega_{v, \text{nopolar}} = 1,1809 (T^*)^{-0,1525} \quad \text{para } 4,2 < (T^*) \leq 100 \quad (17)$$

Aucejo (1999) y Bird (1992) reportan tabulada la función de la integral de colisión para moléculas no polares en función de la temperatura adimensional. Betancourt (2003), Aucejo (1999) y Brodkey (1988) reportan un modelo matemático para los datos de la función integral de colisión para moléculas no polares en función de la temperatura adimensional para que pueda ser utilizado en ordenadores sin tener que acudir a la tabla:

$$\Omega_{v, \text{nopolar}} = \frac{A}{T^{*B}} + \frac{C}{e^{DT^*}} + \frac{E}{e^{FT^*}} \quad \text{para } 0,3 \leq T^* \leq 100 \quad (18)$$

donde:

$$\begin{array}{ll} A = 1,16145 & D = 0,77320 \\ B = 0,14874 & E = 2,16178 \\ C = 0,52487 & F = 2,43787 \end{array}$$

Para estimaciones rápidas, Betancourt (2003) y Brodkey (1988) reportan una ecuación simplificada para la estimación de la función integral de colisión para moléculas no polares:

$$\Omega_{v, \text{nopolar}} = \frac{1,604}{T^{*1/2}} \quad \text{para } 0,4 \leq T^* \leq 1,4 \quad (19)$$

La función de la integral de colisión para moléculas polares ($\Omega_{v, \text{polar}}$) es una modificación de la función de la integral de colisión para moléculas no polares y se determina como:

$$\Omega_{v, \text{polar}} = \Omega_{v, \text{nopolar}} + \frac{0,2 \delta^2}{T^*} \quad (20)$$

Ecuaciones basadas en el Teorema de los estados correspondientes

- Ecuación de Yoon y Thodos.

Aplicando la teoría de los estados correspondientes Yoon y Thodos proponen las siguientes ecuaciones (Perry's, 1984; Aucejo, 1999)

Gases no polares:

$$\mu \cdot \varepsilon \cdot 10^8 = 46,10 T_r^{0,618} - 20,40 e^{-0,449 T_r} + 19,40 e^{-4,058 T_r} + 1 \quad (21)$$

Según Perry's (1984) esta ecuación no ofrece buenos resultados para gases como el Hidrógeno (H₂) y el Helio (He), ni para gases halogenados diatómicos.

Gases polares con puentes de hidrógeno y $T_r < 2$:

$$\mu \cdot \varepsilon \cdot 10^8 = (7,55 T_r - 0,55) Z_c^{-5/4} \quad (22)$$

Gases polares sin puente de hidrógeno y $T_r < 2.5$:

$$\mu \cdot \varepsilon \cdot 10^8 = (19,0 T_r - 2,9) Z_c^{-2/3} \quad (23)$$

En todas estas expresiones, ε es el parámetro de viscosidad que se determina como:

$$\varepsilon = 2173,424 \frac{T_c^{1/6}}{M^{1/2} P_c^{2/3}} \quad (24)$$

donde:

μ : Viscosidad (Pa.s)

T_c : Temperatura crítica (K)

P_c : Presión crítica (Pa)

Z_c : Factor de compresibilidad en el punto crítico.

M : Masa molar (kg/kmol)

T_r : Temperatura reducida $T_r = T/T_c$

- Ecuación de Stiel and Thodos

Perry's (1999) recomienda uso de la ecuación de Stiel and Thodos para la determinación de la viscosidad de gases de hidrocarburos puros a bajas presiones.

$$\mu = 4,60 \cdot 10^{-4} \frac{N M^{1/2} P_c^{2/3}}{T_c^{1/6}} \quad (25)$$

donde

μ : Viscosidad (cP)

M: Peso molecular

T_c: Temperatura crítica (K)

P_c: Presión crítica (Pa)

Los valores de N pueden obtenerse a través de las siguientes ecuaciones:

$$N = 3,40 \cdot 10^{-4} T_r^{0,94} \quad T_r \leq 1,5 \quad (26)$$

$$N = 1,778 \cdot 10^{-4} (4,58 T_r - 1,67)^{0,625} \quad T_r > 1,5 \quad (27)$$

donde

T_r: Temperatura reducida

Este método también puede ser usado para gases ligeros que no sean hidrocarburos, excepto para el hidrógeno. Para hidrocarburos por debajo de 10 átomos de carbono, los errores promedios que se obtiene de aplicar esta ecuación se encuentra en un 3 %, mientras que el error se incrementa hasta 5 – 10 % para hidrocarburos pesados.

Ecuaciones basadas en procedimientos estructurales

- Ecuación de Reichenberg.

Para gases no polares a bajas presiones la viscosidad puede estimarse por el método de Reichenberg (Aucejo, 1999; Perry's; 1999)

$$\mu = \frac{a^* T_r}{[1 + 0,36 T_r (T_r - 1)]^{1/6}} \quad (28)$$

El factor de corrección a* puede calcularse como:

Para compuestos inorgánicos:

$$a^* = 1,6104 \cdot 10^{-10} \frac{M^{1/2} P_c^{2/3}}{T_c^{1/6}} \quad (29)$$

Para compuestos orgánicos:

$$a^* = \frac{M^{1/2} T_c}{\sum n_i c_i} \quad (30)$$

donde:

μ : Viscosidad (Pa.s)

T_c : Temperatura crítica (K)

P_c : Presión crítica (Pa)

M : Masa molar (kg/kmol)

$T_r = T/T_c$
 T_r : Temperatura reducida

n_i : Número de grupos atómicos del tipo i

c_i : Contribución del grupo i (m.s.K/kg)

El valor de la contribución de cada grupo se encuentra en la Tabla 2.

Tabla 2: Valores de la contribución de grupos (c_i (m.s.K/kg)) para la determinación de la viscosidad de gases

Grupo	$c_i \cdot 10^{-8}$	Grupo	$c_i \cdot 10^{-8}$	Grupo	$c_i \cdot 10^{-8}$
$-\text{CH}_3$	0,904	$>\text{CH}_2$ (lineal)	0,647	$>\text{CH}-$ (lineal)	0,267
$>\text{C}<$ (lineal)	-0,153	$=\text{CH}_2$	0,768	$=\text{CH}-$ (lineal)	0,553
$\equiv\text{CH}$	0,741	$\equiv\text{C}-$ (lineal)	0,524	$>\text{CH}_2$ (anillo)	0,691
$>\text{CH}-$ (anillo)	0,116	$>\text{C}<$ (anillo)	0,023	$=\text{CH}-$ (anillo)	0,590
$>\text{C}=$ (anillo)	0,359	$-\text{F}$	0,446	$-\text{Cl}$	1,006
$-\text{Br}$	1,283	$-\text{OH}$ (alcohol)	0,796	$>\text{O}$ (lineal)	0,359
$>\text{C}=\text{O}$ (lineal)	1,202	$-\text{CHO}$ (aldehído)	1,402	$-\text{COOH}$ (ácido)	1,865
$-\text{COO}$ o $\text{HCOO}-$ (éster o formaldehído)	1,341	$-\text{NH}_2$	0,971	$>\text{NH}$ (lineal)	0,368
$=\text{N}-$ (lineal)	0,497	$-\text{CN}$	1,813	$>\text{S}$ (anillo)	0,886
$>\text{C}=$ (lineal)	0,178				

Efecto de la Temperatura

La viscosidad de los gases a bajas presiones aumenta con la temperatura.

- Ecuación de Sutherland

Si se disponen de datos experimentales puede utilizarse la Ecuación de Sutherland, para correlacionar datos de viscosidad de gases en función de la temperatura, la cual ha sido demostrada que es altamente confiable (Aucejo, 1999):

$$\mu = \frac{b + T^{3/2}}{S + T} \quad (31)$$

donde:

b y S: Son los parámetros a ajustar a partir de los datos experimentales.

Perrys's (1999) recomienda la siguiente ecuación para estimar el efecto de la temperatura

$$\mu = \frac{AT^B}{1 + \frac{C}{T} + \frac{D}{T^2}} \quad (32)$$

donde A, B, C y D son constantes que se ajustan a partir de datos experimentales.

Según Betancourt (2003) existe una forma más sencilla de predecir el cambio de la viscosidad con la temperatura, teniendo en cuenta que la viscosidad es directamente proporcional a $T^{0.5} / \Omega_\mu$. La ecuación que propone este autor es la siguiente:

$$\frac{\mu_2}{\mu_1} = \left[\frac{T_2}{T_1} \right]^{0.5} \left[\frac{\Omega_{\mu 1}}{\Omega_{\mu 2}} \right] \quad (33)$$

2. Viscosidad de gases a altas presiones

Ecuaciones basadas en el Teorema de los estados correspondientes

- Método de Uyehara y Watson

La determinación de la viscosidad de gases a altas presiones puede realizarse a través del método gráfico propuesto por Uyehara y Watson en 1944 (Bird, 1992 y Garcell 1992) haciendo uso de los valores críticos de presión, temperatura, volumen y viscosidad.

En la Figura 1 se muestra el gráfico que propone este método donde se determina la viscosidad reducida (μ_r) a partir de la temperatura reducida (T_r) y la presión reducida (P_r). Para completar el cálculo de la viscosidad se necesitan valores de la viscosidad en el punto crítico.

En el Anexo 3 se muestran valores de las constantes críticas para algunos gases

Si no se disponen de datos experimentales de la viscosidad del gas en el punto crítico, ésta puede estimarse a través de las siguientes ecuaciones recomendadas por (Bird, 1992 y Garcell, 1992):

Para gases de moléculas complejas

$$\mu_c = 61,6 \cdot 10^{-7} \frac{\sqrt{M T_c}}{V_c^{2/3}} \quad (34)$$

Para gases diatómicos

$$\mu_c = 7,7 \cdot 10^{-7} \frac{\sqrt{M P_c^3}}{T_c^{1/6}} \quad (35)$$

En ambas expresiones se tiene que

μ_c : Viscosidad crítica (Pa.s)

T_c : Temperatura crítica (K)

P_c : Presión crítica (atm)

V_c : Volumen crítico (cm³/mol)

M : Masa molar (kg/kmol)

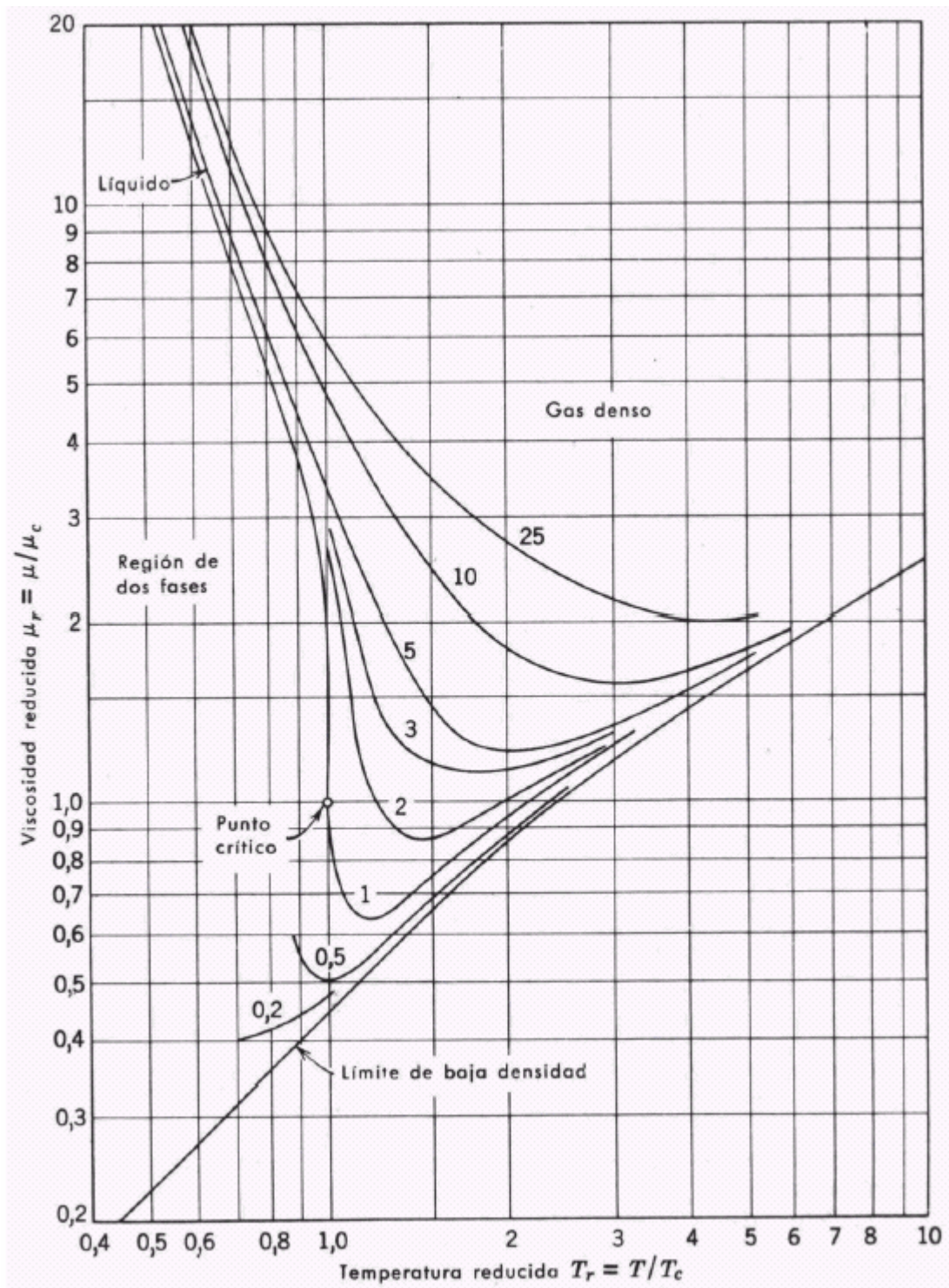


Figura 1: Viscosidad reducida en función de temperatura y presión reducidas

Existen en la bibliografía reportada ecuaciones más precisas para estimar la viscosidad de gases a altas presiones, las cuales se exponen a continuación (Perry's 1999).

- Ecuación de Stiel and Thodos.

Para la determinación de la viscosidad a altas presiones de gases polares puros que no sean hidrocarburos se puede utilizar la ecuación de Stiel and Thodos que depende de la densidad reducida como corrector de la viscosidad a bajas presiones.

$$(\mu - \mu^0)\varepsilon = 1,656 \cdot 10^{-7} \rho_r^{1,111} \quad \rho_r \leq 0,1 \quad (36)$$

$$(\mu - \mu^0)\varepsilon = 6,07 \cdot 10^{-9} (9,045 \rho_r + 0,63)^{1,739} \quad 0,1 < \rho_r \leq 0,9 \quad (37)$$

$$\log \{4 - \log [(\mu - \mu^0)10^7 \varepsilon]\} = 0,6439 - 0,1005 \rho_r - \Delta \quad 0,9 < \rho_r \leq 2,6 \quad (38)$$

$$\Delta = 0 \quad 0,9 < \rho_r \leq 2,2$$

$$\Delta = 4,75 \cdot 10^{-4} (\rho_r^3 - 10,65)^2 \quad 2,2 < \rho_r \leq 2,6 \quad (39)$$

- Ecuación de Jossi y colaboradores

Para la determinación de la viscosidad a altas presiones de gases no polares puros que no sean hidrocarburos Jossi y colaboradores extendieron el método de Stiel and Thodos para un intervalo de densidad reducida de 0,1 hasta 3,0.

$$\begin{aligned} [(\mu - \mu^0)10^7 \varepsilon + 1]^{1/4} = & 1,0230 + 0,23364 \rho_r + 0,58533 \rho_r^2 \\ & - 0,40758 \rho_r^3 + 0,093324 \rho_r^4 \end{aligned} \quad (40)$$

En todas estas expresiones, ε es el parámetro de viscosidad que se determina como:

$$\varepsilon = 2173,424 \frac{T_c^{1/6}}{M^{1/2} P_c^{2/3}} \quad (41)$$

Tanto en la ecuación de Stiel and Thodos y como en la ecuación de Jossi y colaboradores se tiene la siguiente simbología:

μ : Viscosidad del gas a altas presiones (Pa.s)

μ^0 : Viscosidad del gas a baja presión (Pa.s)

T_c : Temperatura crítica (K)

P_c : Presión crítica (Pa)

M : Masa molar (kg/kmol)

ρ_r : Densidad reducida

La densidad reducida se determina a través de la siguiente expresión:

$$\rho_r = \frac{V_c}{V} = \frac{V_c P}{Z R T} \quad (42)$$

donde:

V_c: Volumen crítico (m³/kmol)

P: Presión (Pa)

T: Temperatura (K)

Z: Factor de compresibilidad

R: Constante de los gases ideales (8314 Pa·m³/kmol K)

Con estas ecuaciones se alcanzan errores pequeños para gases no polares mientras que para gases polares el error puede alcanzar un 11 % (Perry's 1999).

- Ecuación de Dean y Stiel

Según Perry's (1999) la predicción de la viscosidad de gases de hidrocarburos a altas presiones (no aplicable a gases que no sean hidrocarburos) y $T_r > 0,6$ se determina por el método de Dean y Stiel. En este método es necesario calcular la viscosidad a bajas presiones a través de la ecuación de Stiel and Thodos (Ecuación 25) y corregir la presión

$$\mu - \mu^o = 5 \cdot 10^{-8} \frac{M^{1/2} P_c^{2/3}}{T_c^{1/6}} \left(e^{1,439 \rho_r} - e^{-1,11 \rho_r^{1,858}} \right) \quad (43)$$

donde:

P_c: Presión crítica del componente (Pa)

T_c: Temperatura crítica del componente (K)

M: Masa molecular

μ: Viscosidad a alta presión (cP)

μ^o: Viscosidad a baja presión (cP)

3. Viscosidad de mezclas de gases a bajas presiones

Ecuaciones basadas en la teoría cinética de los gases ideales

La viscosidad de mezclas de gases es normalmente una función compleja de la composición de los componentes en la mezcla (Aucejo, 1999).

- Ecuación de Wilke

La aplicación de la teoría cinética de los gases ideales conduce a la Ecuación de Wilke, la cual es recomendada por varios autores para la estimación de la viscosidad de mezclas de gases a bajas presiones. (Aucejo, 1999; Bird, 1992; Betancourt, 2003; Garcell, 1992)

$$\mu_m = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \mu_i}{\sum_{j=1}^n y_j \phi_{ij}} \quad (44)$$

en la que:

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (45)$$

En estas ecuaciones se tiene que:

$$\phi_{ji} = \frac{\mu_j}{\mu_i} \frac{M_i}{M_j} \phi_{ij} \quad (46)$$

n: Número de componentes en la mezcla.

y_i y y_j : Fracciones molares de los componentes i y j respectivamente

μ_i y μ_j : Viscosidades de los componentes i y j a la temperatura y presión de la mezcla.

M_i y M_j : Masas moleculares de los componentes i y j

ϕ_{ij} : Parámetro de interacción. Para el caso en que $i = j$ el término $\phi_{ij} = 1$.

La ecuación 44 requiere conocer los valores de viscosidades de los componentes puros que forman la mezcla a la temperatura y presión de esta. En el caso de que no se disponga de estos valores de viscosidad puede usarse la ecuación 13 para estimarlos.

- Ecuación de Bromley y Wilke

Según Perry's (1999) para la predicción de la viscosidad de mezclas gaseosas de hidrocarburos y mezclas de gases que no sean hidrocarburos a bajas presiones y $Tr < 0.6$, se recomienda el método propuesto por Bromley y Wilke.

$$\mu_m = \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i}{1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left(\phi_{ij} \frac{y_j}{y_i} \right)} \quad (47)$$

El parámetro de interacción ϕ_{ij} se determina a través de la ecuación 45

Según Betancourt (2003) el cálculo de la viscosidad de una mezcla gaseosa de hidrocarburos de pesos moleculares similares se puede estimar a través de la siguiente ecuación, la cual es simple y suficientemente exacta

$$\mu_m = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \mu_i \sqrt{M_i}}{\sum_{i=1}^n y_i \sqrt{M_i}} \quad (48)$$

Tanto para mezclas binarias y multicomponentes de gases de hidrocarburos y de no hidrocarburos el error promedio usando esta ecuación es de un 3 %

Ecuaciones basadas en el Teorema de los estados correspondientes

- Ecuación de Yoon y Thodos.

Yoon y Thodos a partir del principio de los estados correspondientes, proponen una correlación para calcular la viscosidad de mezclas binarias y multicomponentes de gases no polares a la presión normal, para la cual no es necesario conocer los valores de la viscosidad de los componentes puros. (Garcell, 1992)

$$\mu_m \varepsilon_m \cdot 10^5 = 1 + 46,10 (T_r')^{0,618} - 20,4 e^{-0,449 T_r'} + 19,4 e^{-4,058 T_r'} \quad (49)$$

donde:

μ_m : Viscosidad de la mezcla (mPa.s)

T_r' : Temperatura seudoreducida.

ε_m : Parámetro de viscosidad de la mezcla.

Los valores de la temperatura seudoreducida se determinan mediante la siguiente expresión:

$$T_r' = \frac{T}{T_c'} = \frac{T}{\sum y_i T_{c_i}} \quad (50)$$

donde:

T: Temperatura de la mezcla (K)

y_i: Fracción molar de cada componente.

T_{c_i}: Temperatura crítica de los componentes puros que constituyen la mezcla (K).

T'_c: Temperatura pseudocrítica (K)

El valor del parámetro de viscosidad de la mezcla (ε_m) se determina como:

$$\varepsilon_m = \varepsilon' + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{y_i y_j}{A_{ij} + B_{ij} y_i} \quad \text{para } j > 1 \quad (51)$$

Para mezclas binarias, la ecuación anterior se simplifica de tal manera que:

$$\varepsilon_m = \varepsilon' + \frac{y_i y_j}{A_{ij} + B_{ij} y_i} \quad (52)$$

Los parámetros que intervienen en ambas ecuaciones se determinan como:

$$\varepsilon' = \sum_{i=1}^n y_i \varepsilon_i \quad (53)$$

$$\varepsilon_i = \frac{T_{c_i}^{1/6}}{M_i^{1/2} P_{c_i}^{2/3}} \quad (54)$$

$$B_{ij} = \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \quad (55)$$

$$A_{ij} \cdot B_{ij} = - \frac{0,875}{(\varepsilon_i - \varepsilon_j)^{2,18}} \quad (56)$$

donde:

ε_i y ε_j: Parámetros de viscosidad de los componentes i y j respectivamente, siendo i el componente que posee mayor valor de ε, de manera que ε_i > ε_j

ε' : Parámetro de pseudoviscosidad.

P_{ci} : Presiones críticas de los componentes puros (atm)

A_{ij} y B_{ij} : Coeficientes de interacción.

Para mezclas que contienen hidrógeno y helio las magnitudes de A_{ij} calculadas mediante la ecuación 56 dan valores de viscosidad que se alejan de los resultados experimentales. Para los sistemas que contienen estos componentes de comportamiento anormal, se utilizan las expresiones siguientes para el cálculo de A_{ij} .

$$A_{ij} \cdot B_{ij} = - \frac{0,5}{(\varepsilon_i - \varepsilon_j)^{2,48}} \text{ para mezclas con hidrógeno} \quad (57)$$

$$A_{ij} \cdot B_{ij} = - \frac{0,61}{(\varepsilon_i - \varepsilon_j)^{2,48}} \text{ para mezclas con helio} \quad (58)$$

4. Viscosidad de mezclas de gases a altas presiones

Ecuaciones basadas en el Teorema de los estados correspondientes

- Ecuación de Dean y Stiel

Para el cálculo de viscosidad de mezclas de gases a elevadas presiones el procedimiento recomendado es el propuesto por Dean y Stiel según Aucejo (1999), Perry's (1984) y Perry's (1999)

Mezclas de gases no polares. Según Perry's (1984) esta ecuación solo puede ser usada para mezclas de gases no polares.

$$(\mu_m - \mu_m^0) \varepsilon_m = 1,08 \cdot 10^{-7} \left[e^{1,439 \rho_{r_m}} - e^{1,111 \rho_{r_m}^{1,858}} \right] \quad (59)$$

Según Perry's (1984) después de ensayar con 9 mezclas de varias densidades se obtuvo un error promedio estimado de un 3,7 % siendo la mayoría de las mezclas ensayadas de hidrocarburos ligeros y de hidrocarburos y gases inertes.

En esta ecuación es necesario calcular la viscosidad de la mezcla a bajas presiones a través de la ecuación de Wilke (Ecuación 44), la ecuación de Bromley y Wilke (Ecuación 47) o la ecuación de Yoon y Thodos (Ecuación 49) y corregir la presión

En esta ecuación se utilizan las expresiones siguientes para calcular los valores correspondientes a la mezcla:

$$\varepsilon_m = 2173,4241 \frac{T_{c_m}^{1/6}}{M_{c_m}^{1/2} P_{c_m}^{2/3}} \quad \rho_{r_m} = \frac{\rho_m}{\rho_{c_m}} \quad (60)$$

$$\rho_{c_m} = \frac{1}{V_{c_m}} \quad T_{c_m} = \sum_{i=1}^n y_i T_{c_i} \quad P_{c_m} = \frac{Z_{c_m} R T_{c_m}}{V_{c_m}} \quad (61)$$

$$Z_{c_m} = \sum_{i=1}^n y_i Z_{c_i} \quad V_{c_m} = \sum_{i=1}^n y_i V_{c_i} \quad M_m = \sum_{i=1}^n y_i M_{c_i} \quad (62)$$

donde:

μ_m : Viscosidad de la mezcla a alta presión (Pa.s)

μ_m^o : Viscosidad de la mezcla a baja presión (Pa.s)

ρ_m : Densidad molar de la mezcla (kmol m^{-3})

ρ_{cm} : Densidad molar crítica de la mezcla (kmol m^{-3})

ρ_{rm} : Densidad reducida de la mezcla

M_i : Masa molecular del componente i (kg kmol^{-1})

M_m : Masa molecular de la mezcla (kg kmol^{-1})

R : Constante de los gases ($8314 \text{ Pa m}^3 \text{ kmol}^{-1} \text{ K}^{-1}$)

y_i : Fracción molar del componente i

P_{ci} : Presión crítica del componente i (Pa)

T_{ci} : Temperatura crítica del componente i (K)

V_{ci} : Volumen crítico del componente i ($\text{m}^3 \text{ kmol}^{-1}$)

Z_{ci} : Factor de compresibilidad critico del componente i

Mezclas de gases de hidrocarburos (no aplicable a gases que no sean hidrocarburos) y $Tr > 0,6$.
Según Perry's (1999)

$$\mu_m - \mu_m^o = 5 \cdot 10^{-8} \frac{M^{1/2} P_{c_m}^{2/3}}{T_{c_m}^{1/6}} \left(e^{1,439 \rho_{r_m}} - e^{-1,11 \rho_{r_m}^{1,858}} \right) \quad (63)$$

donde:

P_{cm}: Presión crítica de la mezcla (Pa)

T_{cm}: Temperatura crítica de la mezcla (K)

M: Masa molecular de la mezcla

μ_m: Viscosidad de la mezcla a alta presión (cP)

μ_m⁰: Viscosidad de la mezcla a baja presión (cP)

En esta ecuación es necesario calcular la viscosidad de la mezcla a bajas presiones a través de la ecuación de Wilke (Ecuación 44), la ecuación de Bromley y Wilke (Ecuación 47) o por la reportada por Betancourt (2003) (ecuación 48) y corregir la presión.

A continuación se relacionan diferentes métodos reportados en la bibliografía especializada para estimar la viscosidad de líquidos puros y mezclas de líquidos multicomponentes.

La teoría cinética molecular de los líquidos está mucho menos desarrollada que la de los gases, es por eso que el conocimiento que se tiene referente a las propiedades de transporte es fundamentalmente empírico.

5. Viscosidad de líquidos a bajas temperaturas.

- Ecuación de Eyring (Bird, 1992; Betancourt, 2003)

Esta ecuación es válida para líquidos newtonianos y no se comporta bien para moléculas largas o cercanas al punto crítico. Generalmente predice valores dentro de un margen de error de un 40 %

$$\mu = \frac{N h}{V} e^{3,8T_b/T} \quad (64)$$

donde:

N: Número de Avogadro (6,023 · 10²³ (g/mol)⁻¹)

h: Constante de Planck (6,624 · 10⁻²⁷ g cm²/s)

V: Volumen molar (cm³/g·mol⁻¹)

T_b: Temperatura normal de ebullición (K)

T: Temperatura (K)

- Ecuación de Van Velzen, Cardozo y Langerkamp (Aucejo, 1999, Perrys, 1999)

Esta ecuación se aplica al cálculo de la viscosidad de líquidos orgánicos.

$$\log \mu = B \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right] - 3.0 \quad (65)$$

donde:

μ : Viscosidad (Pa.s)

T: Temperatura (K)

B, T_0 : Parámetros relacionados con la estructura molecular del compuesto.

Para determinar los valores de B y T_0 se debe calcular la denominada longitud de cadena equivalente (N^*)

$$N^* = N + \sum_i \Delta N_i \quad (66)$$

donde:

N: Número real de átomos de carbono en la molécula

ΔN_i : Parámetro de contribución. (Anexo 4)

Si un grupo estructural aparece n veces hay que considerar n . ΔN correcciones. Tal como se indica en el Anexo 4 algunas contribuciones se utilizan cada vez que aparece el grupo, mientras que otras representan correcciones adicionales que modifican la contribución del grupo básico.

Una vez calculado N^* , se determinan los valores de B y T_0 de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} T_0 &= 28.86 + 37.439 N^* - 1.3547 (N^*)^2 + 0.02076 (N^*)^3 & N^* \leq 20 \\ T_0 &= 238.59 + 8.164 N^* & N^* \geq 20 \end{aligned} \quad (67)$$

Por otro lado

$$B = B_a + \sum_i \Delta B_i \quad (68)$$

$$\begin{aligned} B_a &= 24.79 + 66.885 N^* - 1.3173 (N^*)^2 + 0.00377 (N^*)^3 & N^* \leq 20 \\ B_a &= 530.59 + 13.74 N^* & N^* \geq 20 \end{aligned} \quad (69)$$

donde:

ΔB_i : Parámetro de contribución. (Anexo 5)

El término $\sum_i \Delta B_i$ se determina sumando las contribuciones de cada grupo. Aunque el grupo funcional aparezca más de una vez en el compuesto, la contribución ΔB_i nada más se tiene en cuenta una sola vez.

La ecuación 64 también se puede utilizar como base para correlacionar datos experimentales de viscosidad .

Efecto de la temperatura.

La viscosidad de líquidos es muy sensible a los cambios de temperatura

La bibliografía recomienda un gran número de procedimientos para estimar la viscosidad de líquidos a bajas temperaturas ($T_r < 0,8$) aunque todos presentan errores considerables. A continuación se muestran algunas de las ecuaciones empíricas que permiten predecir el efecto de la temperatura.

- Ecuación de Guzman – Andrade (Aucejo, 1999; Garcell, 1992)

$$\mu = A e^{\frac{B}{T}} \quad (70)$$

- Ecuación de Vogel

$$\log \mu = A + \frac{B}{T + C} \quad (71)$$

donde:

T: Temperatura

A, B y C: Constantes, cuyos valores dependen de las unidades de μ y T y se calculan a partir de datos experimentales.

6. Viscosidad de líquidos a altas temperaturas.

- Correlación de Letsou y Stiel

Esta ecuación es el mejor procedimiento para estimar la viscosidad de líquidos a temperaturas reducidas entre 0,76 y 0,98

$$\mu \varepsilon = (\mu \varepsilon)^0 + \omega (\mu \varepsilon)^1 \quad (72)$$

Los términos $(\mu.\xi)^0$ y $(\mu.\xi)^1$ solo dependen de la temperatura reducida según las expresiones siguientes:

$$(\mu \varepsilon)^0 = 1,5174.10^{-5} - 2,135.10^{-5} T_r + 7,5.10^{-6} T_r^2 \quad (73)$$

$$(\mu \varepsilon)^1 = 4,2552.10^{-5} - 7,674.10^{-5} T_r + 3,4.10^{-5} T_r^2 \quad (74)$$

donde

ε : Parámetro de viscosidad

ω : Factor acéntrico

El parámetro de viscosidad (ε) viene definido por la teoría de los estados correspondientes propuesta por Yoon y Thodos (Ecuación 24)

Las unidades corresponden al sistema internacional. El método debe usarse con mucha precaución ya que puede llegar a dar errores de más de un 30 %. El error aumenta al acercarse a las regiones críticas.

7. Viscosidad de mezclas de líquidos a bajas temperaturas.

Las viscosidades de mezclas líquidas suele presentar un comportamiento fuertemente no lineal y no existe una teoría general que aporte buenas predicciones. La ecuación más recomendada es la propuesta por Grunberg y Nissan (Aucejo, 1999)

- Ecuación de Grunberg y Nissan

$$\ln \mu_m = \sum_i x_i \ln \mu_i + \sum_i \sum_{j \neq i} x_i x_j G_{ij} \quad (75)$$

donde:

x_i : Fracción molar. Si todos los componentes de la mezcla son no polares se recomienda utilizar fracciones másicas.

G_{ij} : Parámetro de interacción.

La ecuación 75 aplicada a mezclas binarias queda como:

$$\ln \mu_m = x_1 \ln \mu_1 + x_2 \ln \mu_2 + 2 x_1 x_2 G_{12} \quad (76)$$

Si no se dispone de datos experimentales para determinar el parámetro de interacción (G_{ij}) se puede utilizar un valor medio válido para grandes familias según se recomienda en la Tabla 3

Tabla 3: Valor medio del parámetro de interacción (Gij) para grandes familias.

Mezcla	Gij
no polar + no polar	-0,089
No Polar + Polar	-0,218
Polar + Polar	0.251
Acuosa	1,66

- Ecuación de Kendall – Monroe.

Esta ecuación es aplicable para la determinación de la viscosidad de mezclas de líquidos miscibles no electrolíticos y no asociados, cuya diferencia de viscosidades ($\mu_1 - \mu_2$) < 15 mPas (Garcell, 1992). Además Perrys (1999) recomienda esta ecuación para la determinación de mezclas de líquidos hidrocarburos

$$\mu_m^{1/3} = \sum_i x_i \mu_i^{1/3} \quad (77)$$

donde:

xi: Fracciones molares de los líquidos que conforman la mezcla

μ_i : Viscosidades de los líquidos puros a la temperatura de la mezcla

- Ecuación recomendada por Perrys (1999)

Esta ecuación se recomienda para la determinación de mezclas de líquidos no hidrocarburos

$$\ln \mu_m = \sum_i x_i \ln \mu_i \quad (78)$$

donde:

xi: Fracciones molares de los líquidos que conforman la mezcla

μ_i : Viscosidades de los líquidos puros a la temperatura de la mezcla

8. Viscosidad de mezclas de líquidos a altas temperaturas.

Para la predicción de la viscosidad de mezclas de hidrocarburos a altas temperaturas Perrys (1999) recomienda la correlación de Letsou y Stiel que se utiliza para la determinación de la viscosidad de líquidos puros a elevadas temperaturas.

9. Viscosidad de suspensiones líquido - sólido.

Para la estimación de la viscosidad de suspensiones líquido – sólidos se proponen las ecuaciones de Mori y Ototake y de Hatschek (Garcell, 1992)

- Ecuación de Mori y Ototake.

$$\mu_m = \mu_l \left(1 + \frac{1,56 \phi_s}{0,52 - \phi_s} \right) \quad (79)$$

donde:

μ_l : Viscosidad de la fase líquida

ϕ_s : Fracción volumétrica de sólidos

Esta ecuación es válida para $\phi_s < 0,1$

- Ecuación de Hatschek

$$\mu_m = \mu_l \left(\frac{1}{1 - \phi_s^{1/3}} \right) \quad (80)$$

Esta ecuación es válida para $0,5 < \phi_s < 0,9$

Conclusiones.

Se muestra un compendio de los métodos de estimación de la viscosidad tanto de gases como de líquidos a baja y altas presiones reportados por diferentes autores.

Bibliografía.

- Aucejo, A. 1999. *Introducció a l'Enginyeria Química*. Biblioteca Universitaria. Barcelona. 1999. ISBN: 84-7306-556-5.
- Betancourt, R. 2003. *Transferencia molecular de calor, masa y/o cantidad de Movimiento. Cap 3 Estimación de propiedades de transporte*. [on-line], descargado: 30-mar-2006. v.1. p.400. http://www.virtual.unal.edu.co/cursos/sedes/manizales/4090013/Links/PDF/cap_3.pdf
- Bird, R.B.; Stewart, W.E.; Lighthfoot, E.N. 1992. *Fenómenos de Transporte*. Barcelona: Editorial Reverté, (España), ISBN 84-291-7060-2.

Brodkey, R.S.; Hershey, H.C. 1988. *Transport phenomena - A unified approach*. New York (USA): McGraw-Hill Book Company. McGraw-Hill: Chemical engineering series, ISBN 0-07-007963-3.

Garcell, L. 1992. *Transferencia de cantidad de movimiento, calor y masa*. Ciudad de La Habana: Editorial Pueblo y Educación

Perry R.H. 1997. *Perry's Chemical Engineers Handbook*. New York (USA): McGraw-Hill, Inc. ISBN 0-07-049841-5. (7th Ed.).

Perry R.H. 1984. *Perry's Chemical Engineers Handbook*. New York (USA): McGraw-Hill, Inc. ISBN 0-07-049841-5. (6th Ed.).

Anexo 1: Parámetros del Potencial (6-12) de Lennard – Jones para algunos compuestos.

Fórmula	Nombre	σ (Å)	ϵ_0/K (K)	Fórmula	Nombre	σ (Å)	ϵ_0/K (K)
Ar	Argón	3,542	93,3	iso-C ₄ H ₁₀	Isobutano	5,278	330,1
He	Helio	2,551	10,22	C ₂ H ₅ OC ₂ H ₅	Eter etílico	5,678	313,8
Kr	Kriptón	3,655	178,9	CH ₃ COOC ₂ H ₅	Acetato de etilo	5,205	521,3
Ne	Neón	2,820	35,7	n-C ₅ H ₁₂	n-Pentano	5,784	341,1
Xe	Xenón	4,047	231,0	C(CH ₃) ₄	2,2 dimetil propano	6,464	193,4
Aire	Aire	3,711	78,6	C ₆ H ₆	Benceno	5,349	412,3
AsH ₃	Arsina	4,145	259,8	C ₆ H ₁₂	Ciclohexano	6,182	297,1
BCl ₃	Cloruro de boro	5,127	337,7	n-C ₆ H ₁₄	n-Hexano	5,949	399,3
BF ₃	Fluoruro de boro	4,198	186,3	Cl ₂	Cloro	4,115	357,0
B(OCH ₃) ₃	Borato de metilo	5,503	396,7	F ₂	Fluor	3,657	112,6
Br ₂	Bromo	4,296	507,9	HBr	Bromuro de hidrógeno	3,353	449,0
CCl ₄	Tetracloruro de carbono	5,947	322,7	HCN	Cianuro de hidrógeno	3,630	569,1
CF ₄	Tetrafluoruro de carbono	4,662	134,0	HCl	Cloruro de hidrógeno	3,339	344,7
CHCl ₃	Cloroformo	5,389	340,2	HF	Fluoruro de hidrógeno	3,148	330,0
CH ₂ Cl ₂	Cloruro de metileno	4,898	356,3	HI	yoduro de Hidrógeno	4,211	288,7
CH ₃ Br	Bromuro de metilo	4,118	449,2	H ₂	Hidrógeno	2,827	59,7
CH ₃ Cl	Cloruro de metilo	4,182	350,0	H ₂ O	Agua	2,641	889,1
CH ₃ OH	Metanol	3,623	481,8	H ₂ O ₂	Peróxido de hidrógeno	4,196	289,3
CH ₄	Metano	3,758	148,6	H ₂ S	Sulfuro de hidrógeno	3,623	301,1
CO	Monóxido de carbono	3,690	91,7	Hg	Mercurio	2,969	750,0
COS	Sulfuro de carbonilo	4,130	336,0	HgBr ₂	Bromuro de mercurio	5,080	686,2
CO ₂	Dióxido de carbono	3,941	195,2	HgCl ₂	Cloruro de mercurio	4,550	750,0
CS ₂	Disulfuro de carbono	4,483	467,0	HgI ₂	Yoduro de mercurio	5,625	695,6
C ₂ H ₂	Acetileno	4,033	231,8	I ₂	Yodo	5,160	474,2
C ₂ H ₄	Etileno	4,163	224,7	NH ₃	Amoniaco	2,900	558,3
C ₂ H ₆	Etano	4,443	215,7	NO	Oxido nítrico	3,492	116,7
C ₂ H ₅ Cl	Cloruro de etilo	4,898	300,0	NOCl	Cloruro de nitrosilo	4,112	395,3
C ₂ H ₅ OH	Etanol	4,530	362,6	N ₂	Nitrógeno	3,798	71,4

C ₂ N ₂	Cianógeno	4,361	348,6	N ₂ O	Oxido nitroso	3,828	232,4
CH ₃ OCH ₃	Eter metílico	4,307	395,0	O ₂	Oxígeno	3,467	186,7
CH ₂ CHCH ₃	Propileno	4,678	298,9	PH ₃	Fosfina	3,981	251,5
CH ₃ CCH	Metilacetileno	4,761	251,8	SF ₆	Hexafluoruro de azufre	5,128	222,1
C ₃ H ₆	Ciclopropano	4,807	248,9	SO ₂	Dióxido de azufre	4,112	335,4
C ₃ H ₈	Propano	5,118	237,1	SiF ₄	Tetrafluoruro de silicio	4,880	171,9
n-C ₃ H ₇ OH	n-propil alcohol	4,549	576,7	SiH ₄	Hidruro de silicio	4,084	287,6
CH ₃ COCH ₃	Acetona	4,600	560,2	SnBr ₄	Bromuro de estaño	6,388	563,7
CH ₃ COOC H ₃	Acetato de metilo	4,936	469,8	UF ₆	Hexafluoruro de uranio	596,7	236,8
n-C ₄ H ₁₀	n-butano	4,687	531,4				

Anexo 2: Volumen atómico y molecular de algunos átomos y moléculas (cm³/mol)

Átomos	Volumen atómico	Moléculas	Volumen molecular
Carbón	14,8	H ₂	14,3
Hidrógeno (en compuestos)	3,1	O ₂	25,6
Cloro (R-CHCl-R)	24,6	N ₂	31,2
Bromo	27,0	Aire	29,9
Yodo	37,0	CO	30,7
Azufre	25,6	CO ₂	34,0
Nitrógeno (doble enlace)	15,6	SO ₂	44,8
Nitrógeno en aminas primarias	10,5	NO	23,6
Nitrógeno en aminas secundarias	12,0	N ₂ O	36,4
Oxígeno (excepto los compuestos nombrados debajo)	7,4	NH ₃	25,8
Oxígeno en ésteres y éteres (metílicos)	9,1	H ₂ O	18,9
Oxígeno en ésteres y éteres (etílicos)	9,9	H ₂ S	32,9
Oxígeno en ésteres y éteres (mayores)	11,0		
Oxígeno en ácidos	12,0	COS	51,5
Oxígeno unido a S, P y N	8,3	Cl ₂	48,4
Anillo de tres miembros	-6,0	Br ₂	53,2
Anillo de cuatro miembros	-8,5	I ₂	71,5
Anillo de cinco miembros	-11,5		
Anillo de seis miembros (bencénico)	-15,0		
Anillo nafténico	- 30,0		
Anillo antraceno	-47,5		

Anexo 3: Masa molecular y constantes críticas de algunos compuestos.

Fórmula	Nombre	Peso molecular	Constantes críticas				
			T _c (K)	P _c · 10 ⁻⁵ (Pa)	V _c (cm ³ /mol)	μ _c · 10 ⁵ (Pa.s)	k _c · 10 ² (W/mK)
H ₂	Hidrógeno	2.016	33.30	12.97	65.0	0.347	-
He	Helio	4.003	5.26	2.29	57.8	0.254	-
Ne	Neón	20.183	44.50	27.26	41.7	1.560	3,32
Ar	Argón	39.944	151.00	48.64	75.2	2.640	2,97
Kr	Kriptón	83.800	209.40	55.02	92.2	3.96	2,07
Xe	Xenón	131.300	289.80	58.77	118.8	4.90	1,68
Aire	Aire	28.970	132.00	36.88	86.6	1.93	3,80
N ₂	Nitrógeno	28.020	126.20	33.94	90.1	1.80	3,63
O ₂	Oxígeno	32.000	154.40	50.36	74.4	2.50	4,41
O ₃	Ozono	48.000	268.00	67.89	89.4	-	-
CO	Monóxido de carbono	28.010	133.00	34.96	93.1	1.90	3,62
CO ₂	Dióxido de carbono	44.010	304.20	73.86	94.0	3.43	5,11
NH ₃	Amoniaco	17.030	405.50	113.96	-	-	
NO	Monóxido de nitrógeno	30.010	180.00	64.85	57.0	2.58	4,95
N ₂ O	Monóxido de dinitrógeno	44.020	309.70	72.65	96.3	3.32	5,48
NO ₂	Dióxido de nitrógeno	46.010	431.00	101.30	-	-	-
SO ₂	Dióxido de azufre	64.070	430.70	78.83	122.0	4.11	4,13
Cl ₂	Cloro	70.910	417.00	77.11	124.0	4.20	4,06
Br ₂	Bromo	159.830	584.00	103.35	144.0	-	-
I ₂	Yodo	253.820	800.00	-	-	-	-
CH ₄	Metano	16.040	190.70	46.41	99.3	1.59	6,62
C ₂ H ₂	Acetileno	26.040	309.50	62.42	113.0	2.37	
C ₂ H ₄	Etileno	28.050	282.40	50.66	124.0	2.15	
C ₂ H ₆	Etano	30.070	305.40	48.84	148.0	2.10	8,50
C ₃ H ₆	Ciclopropano	42.080	365.00	46.10	233.0	2.33	
C ₃ H ₈	Propano	44.090	370.00	42.56	200.0	2.28	
n-C ₄ H ₁₀	n-butano	58.120	425.20	37.99	255.0	2.39	
Iso-C ₄ H ₁₀	Isobutano	58.120	408.10	36.48	263.0	2.39	
n-C ₅ H ₁₂	n-Pentano	72.150	469.80	33.74	311.0	2.38	
n-C ₆ H ₁₄	n-Hexano	86.170	507.90	30.29	368.0	2.48	
n-C ₇ H ₁₆	n-Heptano	100.200	540.20	27.36	426.0	2.54	
n-C ₈ H ₁₈	n-Octano	114.220	569.40	24.92	485.0	2.59	
n-C ₉ H ₂₀	n-Nonano	128.250	595.00	22.80	543.0	2.65	
C ₆ H ₁₂	Ciclohexano	84.160	553.00	40.53	308.0	2.84	
C ₆ H ₆	Benceno	78.110	562.60	49.24	260.0	3.12	
CH ₃ Cl	Cloruro de metilo	50.490	416.30	66.77	143.0	3.38	

CH ₂ Cl ₂	Cloruro de metileno	84.940	510.00	60.79	-		
CHCl ₃	Cloroformo	119.390	536.60	54.72	240.0	4.10	
CCl ₄	Tetracloruro de carbono	153.840	556.40	45.60	276.0	4.13	
C ₂ N ₂	Cianógeno	52.040	400.00	59.78	-		
COS	Sulfuro de carbonilo	60.080	378.00	61.81	-		
CS ₂	Disulfuro de carbono	76.140	552.00	79.03	170.0	4.04	

Anexo 4: Parámetros de contribución para el cálculo de la viscosidad de líquidos utilizando la ecuación de Van Velzen, Cardozo y Langenkamp.

Estructura o grupo funcional	ΔN_i	ΔB_i	Compuesto	N^*	B	T_o	Notas
n-Alcanos	0	0	n-hexano	6,00	377,82	209,2 1	
Isoalcanos	1,386-0,238 N	15.51	2-metilbutano	5,20	351,95	189,8 3	
Hidrocarburos saturados con dos grupos metil en posición iso	2,319-0,238 N	15.51	2,3-dimetilbutano	6,89	437,37	229,2 9	
n-Alquenos	-0,152-0,042 N	-44,94+5,410 N^*	1-Octeno	7,51	446,89	242,4 1	
n-Alcadienos	-0,304-0,084 N	-44,94+5,410 N^*	1,3-butadieno	3,36	211,21	140,1 5	
Isoalquenos	1,237-0,280 N	-36,01+5,410 N^*	2-metil-2-buteno	4,84	307,40	180,6 8	
Isoalcadienos	1,085-0,322 N	-36,01+5,410 N^*	2-metil-1,3-butadieno	4,48	285,89	171,2 6	
Hidrocarburos con un doble enlace y dos grupos metil en posición iso	2,626-0,518N	-36,01+5,410 N^*	2,3-dimetil-1-buteno	5,52	347,07	197,7 4	Cada grupo CH ₃ , adicional en posición iso incrementa ΔN en 1,389-0,238 N
Ciclopentanos	0,205+0,069N	-45,96+2,224 N^*	n-butilciclopentano	9,83	527,30	285,7 0	N<16; no recomendado para N= 5 ó 6
	3,971-0,172 N	-339,67+23,135 N^*	Tridecilciclopentano	18,8 7	889,40	392,4 5	N≥16
Ciclohexanos	1,48	-272,85+25,041 N^*	Etilciclohexano	9,48	501,80	279,7 2	N<17; no recomendado para N= 6 ó 7
	6,517-0,311 N	-272,85+25,041 N^*	Dodecilciclohexano	18,9 2	994,10	392,8 7	N≥17
Alquilbencenos	0,60	-140,04+13,869 N^*	o-xileno	9,11	563,09	273,2 0	N<16; no recomendado para N= 6 ó 7 (a, e, f)
	3,055-0,161 N	-140,04+13,869 N^*					N≥16 (a, e, f)

Polifenilos	-5,340+0,815 N	-188,40+9,558 N*	m-terfenilo	27,4 4	1008,7 0	462,5 8	(a)
Alcoholes Primario	10,606-0,276 N	-589,44+70,519 N*	1-pentanol	14,2 3	1113,0	347,1 2	(b)
Secundario	11,200-0,605 N	497,58	Alcohol isopropílico	12,3 8	1141,3 5	324,1 2	(b)
Terciario	3,055-0,161 N	928,83	2-metil 2-butanol	13,4 2	1699,1	337,4 9	(b)
Dioles (correcciones)	Ver notas	557,77	Propilenglicol	22,6 6	1399,7 1	423,5 5	Para ΔN , hacer uso de las contribuciones del alcohol añadiéndole N – 2,50
fenoles (correcciones)	16,17- N	213,68					
-OH en cadena lateral de un anillo aromático (correcciones)	-0,16	213,68					(a, c, d)

Estructura o grupo funcional	ΔN_i	ΔB_i	Compuesto	N*	B	T _o	Notas
Acidos	6,795+0,365 N	-249,12+22,449 N*	Acido n-butírico	12,2 5	665,40	322,3 6	N<11; no recomendado para N= 1 ó 2
	10,71	-249,12+22,449 N*					N≥11
Isoácidos	Ver notas	-249,12+22,449 N*	Acido isobutírico	12,0 1	652,02	319,0 6	ΔB se calcula como el de cadena lineal, ΔN se reduce en 0,24 por cada grupo metilo en posición iso
Acidos con anillos aromáticos (corrección)	4,81	-188,40+9,558 N*	Acido fenil-acético	22,5 2	1123,2 9	422,4 1	
Esteres	4,337-0,230 N	-149,13+18,695 N*	Valerato de etilo	9,73	580,16	284,0 1	Si los radicales hidrocarburos tienen configuración iso, ver (e)
Esteres con anillos aromáticos (corrección)	-1,174+0,376 N	-140,04+13,869 N*	Benzoato de benzilo	19,2 1	1133,1 7	395,3 1	Añadirlo a los valores de ΔN y ΔB calculados como

							ésteres
Cetonas	3,265-0,122 N	-117,21+15,781 N [*]	Metil n-butil cetona	8,53	514,53	262,53	Si los radicales hidrocarburos tienen configuración iso, ver (e)
Cetonas con anillos aromáticos (corrección)	2,70	-760,65+50,478 N [*]	Acetofenona	12,99	645,92	322,10	Añadirlo a los valores de ΔN y ΔB calculados como cetonas
Eteres	0,298+0,209 N	-9,39+2,848 N [*]	Etil hexil éter	9,97	575,96	288,04	Si los radicales hidrocarburos tienen configuración iso, ver (e)
Eteres aromáticos	11,5 - N	-140,04+13,869 N [*]	Propil fenil éter	11,5	656,83	311,82	El valor de ΔN no es una corrección al valor calculado de manera normal, mientras que ΔB si que lo es, ver (c)
Aminas Primarias	3,581+0,325 N	25,39+8,744 N [*]	Propilamina	7,56	545,01	243,44	Si los radicales hidrocarburos tienen configuración iso, ver (e)
Amina primaria en cadena lateral de compuesto aromático (corrección)	-0,16	0	Bencilamina	12,70	790,47	328,36	La corrección hay que añadirla al calculo como amina (e)
Secundaria	1,390+0,461 N	25,39+8,744 N [*]	Etilpropilamina	8,69	605,44	265,53	Si los radicales hidrocarburos tienen configuración iso, ver (e)
Terciaria	3,27	25,39+8,744 N [*]					Si los radicales hidrocarburos tienen configuración iso, ver (e)
Primaria con el grupo – NH ₂ en anillo aromático	15,04 - N	0	m- Toluidina	15,04	904,08	356,13	El valor de ΔN no es una corrección, ΔB se calcula como amina primaria
Secundaria o terciaria con, al menos, un anillo aromático unido al nitrógeno	(f)	(f)	Benzilfenilamina	21,58	1041,18	414,74	

Anexo 5: Continuación

Estructura o grupo funcional	ΔN_i	ΔB_i	Compuesto	N^*	B	T_o	Notas
Compuestos nitro							
1-nitro	7,812-0,236 N	-213,14+18,330 N^*	Nitrometano	8,57	442,82	263,2 8	
2-nitro	5,84	-213,14+18,330 N^*	2-nitro-2- penteno	10,4 8	567,43	296,3 3	Hay que tener en cuenta la contribución del grupo alqueno
3- nitro	5,84	-338,01+25,086 N^*					
4- nitro; 5- nitro	5,84	-338,01+25,086 N^*					
Nitroaromáticos	7,812-0,236 N	-213,14+18,330 N^*	Nitrobenceno	13,0 0	728,79	332,2 3	Para la corrección aromática, (f)
Compuestos halogenados							
Fluorados	1,43	5,75					
Clorados	3,21	-17,03	Cloruro de etilo	5,21	319,94	190,0 8	(e,f)
Bromados	4,39	-101,97+5,954 N	1-bromo-2- metilpropano	8,15	435,85	255,2 4	(e,f)
Iodados	5,76	-85,32	Iodobenceno	12,3 6	589,18	323,8 6	(e,f)
Correcciones para configuraciones especiales							
C(Cl) _x	1,91-1,459 x	-26,38					
CCl-CCl	0,96	0					
-C(Br) _x -	0,50	81,34-86,850 x					

-CBr-CBr-	1,60	-57,73					
CF3 en alcoholes	-3,93	341,68					
CF3 en otros compuestos	-3,93	25,55					
Aldehídos	3,38	146,45-25,11 N*	Aldehído propílico	6,38	383,16	217,9 7	
Aldehídos con anillos aromáticos (corrección)	2,70	-760,65+50,478 N*	Benzaldehído	13,0 8	391,19	333,2 5	
Anhídridos	7,97-0,50 N	-33,50	Anhídrido propiónico	10,7 9	554,87	301,1 9	
Anhídridos con anillos aromáticos (corrección)	2,70	-760,65+50,478 N*					
Amidas	13,12+1,49 N	524,63-20,72 N*	Acetamida	18,1 0	931,07	385,7 9	
Amidas con anillos aromáticos (corrección)	2,70	-760,65+50,478 N*					

Anexo 5: Continuación

Notas

- (a) Para más de una sustitución en anillos aromáticos se requieren correcciones adicionales

orto	$\Delta N = 0,51$	$\Delta B = - 571,94$	(con -OH)
		$\Delta B = 54,84$	(sin -OH)
meta	$\Delta N = 0,11$	$\Delta B = 27,25$	
para	$\Delta N = - 0,04$	$\Delta B = - 17,57$	

- (b) Si hay un grupo metilo en posición iso respecto a un alcohol, hay que aumentar ΔN en 0,24 y ΔB en 94,23
- (c) Si el compuesto tiene un grupo -OH o -NH₂ en anillo aromático, o se trata de un éter aromático, utilizar el valor de ΔN obtenido, pero deben despreciarse los otros sustituyentes del anillo (halógenos, CH₃, NO₂, etc.). En cambio, estos grupos sí que se tendran en cuenta al calcular ΔB .
- (d) Para los alcoholes aromáticos y compuestos con -OH en cadena alteral, se deben incluir la contribución del grupo alcohol.

Por ejemplo:

Para el o-clorofenol

$$\Delta B = \Delta B_{\text{(alcohol primario)}} + \Delta B_{\text{(cloruro)}} + \Delta B_{\text{(fenol)}} + \Delta B_{\text{(corrección orto (a))}}$$

con $N^* = 16,17$ (c)

$$\Delta B = [-589,44 + 70,519 (16,17)] + (-17,03) + 213,68 + (-571,94) = 175,56$$

Para el 2 fenil etanol

$N = 8$

$$\Delta N = \Delta N_{\text{(alcohol primario)}} + \Delta N_{\text{(corrección)}}$$

$$N^* = N + \Delta N = 8 + 8,24 = 16,24$$

$$\Delta B = \Delta B_{\text{(alcohol primario)}} + \Delta B_{\text{(corrección)}}$$

$$\Delta B = [-589,44 + 70,519 (16,24)] + 213,68 = 769,47$$

- (e) Para ésteres, alquilbencenos, hidrocarburos halogenados y cetonas, hay que disminuir ΔN en 0,24 y aumentar ΔB en 8,93 por cada grupo metilo en posición iso. Para éteres y aminas hay que disminuir ΔN en 0,50 y aumentar ΔB en 8,93 por cada uno de estos grupos.
- (f) Para alquilbencenos, nitrobencenos, bencenos halogenados y aminas secundarias o terciarias con uno o varios anillos aromáticos unidos al nitrógeno, hay que añadir la siguiente corrección por cada anillo aromático.

Si $N < 16$

Aumentar ΔN en 0,60

Si $N \geq 16$

Aumentar ΔN en 3,055 – 0,161 N

Para cualquier valor de N

Aumentar ΔB en -140,04 +13,869

N^*