



**UNIVERSIDAD MICHOACANA  
DE SAN NICOLÁS DE  
HIDALGO**



**DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO  
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA**

**EVALUACIÓN Y CORRELACIÓN DE PROPIEDADES  
TERMOFÍSICAS DE LÍQUIDOS IÓNICOS PUROS Y SUS  
MEZCLAS BINARIAS**

**TESIS presentada por:**

**INDIRA YARELY LÓPEZ CORTÉS**

**A la División de Estudios de Posgrado  
de la Facultad de Ingeniería Química como  
requisito parcial para obtener el grado de**

**DOCTOR EN CIENCIAS  
EN  
INGENIERÍA QUÍMICA**

**ASESOR: Dra. Mariana Ramos Estrada**

**Morelia, Michoacán**

**Junio 2018**

# RESUMEN

## EVALUACIÓN Y CORRELACIÓN DE PROPIEDADES TERMOFÍSICAS Y PROPIEDADES DE EXCESO DE LÍQUIDOS IÓNICOS PUROS Y SUS MEZCLAS BINARIAS

Por

Indira Yarely López Cortés

Junio del 2018

Doctor en Ciencias en Ingeniería Química

*Palabras clave: sales fundidas, densidad, viscosidad, velocidad del sonido, correlaciones*

Se determinaron experimentalmente densidades, viscosidades dinámicas y velocidades de sonido a de los líquidos iónicos puros [Bmppyrr][NTf<sub>2</sub>], [Et<sub>3</sub>S][NTf<sub>2</sub>], [Amim][NTf<sub>2</sub>] y [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI] y sus mezclas binarias con 1-propanol en un intervalo de temperatura de (293.15 a 343.15) K a presión atmosférica.

Las densidades experimentales se midieron utilizando un densímetro de tubo vibrante, para el caso de las viscosidades se utilizó un viscosímetro de balón rodante. La velocidad de sonido se determinó mediante la técnica del tiempo de propagación. Las densidades experimentales de los compuestos puros se ajustaron a la ecuación propuesta por Gardas y Coutinho; por otro lado, las viscosidades se ajustaron a la ecuación propuesta por Arrhenius, al modelo de la fluidez y a la ecuación de Vogel-Fulcher-Tammann (VFT). Para el caso de los sistemas de mezclas binarias con 1-propanol, se obtuvieron las propiedades de exceso y desviaciones de viscosidad, velocidad de sonido y compresibilidad isoentrópica en un intervalo de temperatura de (293.15 a 343.15) K a presión atmosférica y en todo el intervalo de concentración. Por otro lado, se utilizaron los modelos de Gardas y Coutinho (2008), Linear Generalized Model (2009), Rackett (1970), Valderrama y Abu-Sharkh (1989), Ye y Woods (1966), Yamada y Gunn (1973), Reid y Prausnitz (1977), Mchaweh et

al (2004), Gunn y Yamada (1971), Hankinson y Thomson (1979) y *Gene Expression Programming* (2017) para predecir las densidades de los líquidos iónicos utilizados en el presente trabajo obteniéndose los porcentajes de desviación.

Para correlacionar las viscosidades cinemáticas de mezclas binarias de líquidos iónicos con solventes orgánicos y con agua, se utilizaron las ecuaciones de Vásquez-Castillo (2013), Nava-Ríos (2012) y Eyring-MTSM (2014).

**Dirigido por: Dra. Mariana Ramos Estrada y Dr. Gustavo A. Iglesias Silva.**

## ABSTRACT

*Keywords: molten salts, density, viscosity, speed of sound, correlations*

In this work, densities, dynamic viscosities and speed of sound of pure and binary mixtures of ionic liquids 1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide, [Bm<sub>4</sub>pyrr][NTf<sub>2</sub>], triethylsulfonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide, [Et<sub>3</sub>S][TFSI], 1-allyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide, [Amim][TFSI], and 1,3-dihydroxyimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide, [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI], with 1-propanol were determined from (293.15 to 343.15) K at atmospheric pressure. Densities and speed of sound are measured using a vibrating tube densimeter while viscosities are from a pellet micro-viscometer. The densities of pure ionic liquids are correlated by means of the Gardas and Coutinho equation and Arrhenius, fluidity and Vogel–Tammann–Fulcher equations were used for correlating dynamic viscosities. Excess molar volumes and viscosity deviations are calculated from the experimental data. Also, from speed of sound measurements, isentropic compressibility, speed of sound deviation and isentropic compressibility deviation for mixtures of ionic liquids and 1-propanol were obtained. The models of Gardas and Coutinho (2008), Linear Generalized Model (2009), Rackett (1970), Valderrama and Abu-Sharkh (1989), Ye and Woods (1966), Yamada and Gunn (1973), Reid y Prausnitz (1977), Mchaweh et al (2004), Gunn and Yamada (1971), Hankinson and Thomson (1979) and Gene Expression Programming (2017) were used for predicting the densities of ionic liquids used in this work. For binary mixtures, Vásquez-Castillo (2013), Nava-Ríos (2012) and Eyring-MTSM (2014) were used for correlating mixtures of ionic liquids with organic compounds and water in a wide range of temperature and concentration at atmospheric pressure.

## DEDICATORIA

A mis padres: *Ma. Engracia Cortés Ceja y Raúl López Ceja.*

Por el apoyo que me han brindado en cada decisión que he tomado. Por su amor incondicional y porque a pesar de la distancia, han estado conmigo siempre y en todo momento.

A mis hermanos: *María S. López Cortés y Raúl Ezequiel López Cortés.*

A mis sobrinitos: *Itzel Gabriela, Luna Elizabeth, Ángel Miguel y Jesús Gabriel.*

A mi amiga y casi hermana desde hace ya mucho tiempo: *Aydée Karolina López Romero.* Gracias por tu amistad, por el apoyo y por los momentos que nos ha tocado compartir juntas. Por estar siempre ahí cuando lo he necesitado.

## AGRADECIMIENTOS

*Dr. Gustavo Iglesias:*

Gracias por darme la oportunidad de formar parte de su grupo de investigación, por la experiencia y el conocimiento compartidos. Por todos sus consejos y por el apoyo brindado. Gracias también por sembrar una semilla más en mi formación profesional y personal.

*Dra. Mariana Ramos:*

Por su apoyo durante la realización del presente trabajo y la confianza puesta en mí.

A mis sinodales: *Dr. Rafael Maya Yescas, Dr. Javier Lara Romero* y al *Dr. Fernando Pérez Villaseñor:*

Por su aportación para la finalización del presente trabajo.

A mis compañeros del posgrado de Ingeniería Química de la UMSNH:

A mis compañeros de grupo y los que no formaron parte de él, pero que nos tocó compartir laboratorio o cubículo, con los que compartí muy buenos ratos, por su amistad y apoyo.

A mis compañeros del Instituto Tecnológico de Celaya:

Gracias porque me acogieron desde el primer momento. Por el apoyo que siempre me brindaron, por el aprendizaje y los momentos compartidos. Gracias también por su amistad, cariño y por formar parte de mi crecimiento personal y profesional.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT):

Por el apoyo financiero durante estos cuatro años.

| <b>CONTENIDO</b>                                                                               | <b>PÁGINA</b> |
|------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------|
| Resumen                                                                                        | i             |
| Dedicatoria                                                                                    | iv            |
| Agradecimientos                                                                                | v             |
| Lista de tablas                                                                                | viii          |
| Lista de figuras                                                                               | x             |
| <br><b>CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN</b>                                                            | <br>1         |
| 1.1. Planteamiento del problema                                                                | 3             |
| 1.2. Hipótesis                                                                                 | 3             |
| 1.3. Objetivo general                                                                          | 3             |
| 1.4. Objetivos específicos                                                                     | 4             |
| 1.5. Organización de la tesis                                                                  | 4             |
| <br><b>CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO</b>                                                           |               |
| 2.1. Antecedentes                                                                              | 5             |
| 2.2. Características de los líquidos iónicos                                                   | 6             |
| 2.3. Síntesis de los líquidos iónicos                                                          | 8             |
| 2.4. Propiedades de los líquidos iónicos                                                       | 9             |
| 2.5. Interacciones en los líquidos iónicos                                                     | 20            |
| 2.6. Correlaciones y modelos                                                                   | 21            |
| 2.7. Aplicaciones de los líquidos iónicos                                                      | 23            |
| 2.8. Aplicaciones de los líquidos iónicos utilizados en el presente trabajo                    | 25            |
| <br><b>CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA</b>                                                             |               |
| 3.1. Desarrollo experimental                                                                   | 27            |
| 3.1.1. Descripción de las muestras                                                             | 27            |
| 3.1.2. Principio de operación del densímetro de tubo vibrante                                  | 29            |
| 3.1.3. Principio de operación del viscosímetro de balón rodante                                | 33            |
| 3.1.4. Validación del método y de datos experimentales                                         | 36            |
| 3.1.5. Metodología para la medición de densidades y velocidades del sonido de líquidos iónicos | 37            |
| 3.1.6. Metodología para la medición de viscosidades de líquidos iónicos                        | 38            |
| 3.2. Desarrollo teórico                                                                        | 41            |
| 3.2.1. Ecuaciones para la densidad de líquidos iónicos puros                                   | 41            |

|                                                                                               |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.2.2. Ecuaciones para la correlación de viscosidades de mezclas binarias de líquidos iónicos | 46 |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------|----|

## **CAPÍTULO 4. RESULTADOS**

|                                                                                                         |     |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 4.1. Calibración de los equipos                                                                         | 56  |
| 4.2. Densidad, viscosidad y velocidad del sonido de líquidos iónicos puros                              | 61  |
| 4.3. Densidad, viscosidad y velocidad del sonido de mezclas binarias de líquidos iónicos con 1-propanol | 72  |
| 4.4. Comparación de la densidad de líquidos iónicos con modelos reportados en la literatura             | 109 |
| 4.5. Correlación de viscosidades de mezclas binarias de líquidos iónicos                                | 117 |

## **CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES**

|                    |     |
|--------------------|-----|
| <b>REFERENCIAS</b> | 140 |
|--------------------|-----|

## **APÉNDICES**

|                                                                                                                                                            |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Apéndice A. Parámetros de la ecuación de Redlich-Kister para las propiedades de exceso y desviaciones de viscosidad, velocidad de sonido y compresibilidad | 151 |
| Apéndice B. Parámetros de las ecuaciones de Vásquez-Castillo, Nava-Ríos y Eyring-MTSM para mezclas binarias de líquidos iónicos                            | 155 |

| Lista de tablas |                                                                                                                                                                                                   | Página |
|-----------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| Tabla 3.1.      | Líquidos iónicos utilizados en el presente trabajo                                                                                                                                                | 28     |
| Tabla 3.2.      | Especificaciones del Densímetro DSA 5000 M Anton Paar                                                                                                                                             | 30     |
| Tabla 3.3.      | Especificaciones del Viscosímetro AMVn Anton Paar                                                                                                                                                 | 33     |
| Tabla 3.4.      | Características de los capilares para la medición de la viscosidad                                                                                                                                | 39     |
| Tabla 3.5.      | Sistemas de líquidos iónicos con compuestos orgánicos y su intervalo de temperatura y composición                                                                                                 | 49     |
| Tabla 3.6.      | Sistemas de líquidos iónicos con agua y su intervalo de temperatura y composición                                                                                                                 | 54     |
| Tabla 4.1.      | Constantes de calibración para el capilar diámetro D=3.0 mm a diferentes inclinaciones                                                                                                            | 58     |
| Tabla 4.2.      | Constantes de calibración para el capilar D=1.8 mm a diferentes inclinaciones                                                                                                                     | 59     |
| Tabla 4.3.      | Constantes de calibración para el capilar D=1.6 mm a diferentes inclinaciones                                                                                                                     | 60     |
| Tabla 4.4.      | Comparación entre densidades experimentales del líquido iónico [Bmpyrr][TFSI] con datos de la literatura a diferentes temperaturas y a presión p=0.1 MPa                                          | 64     |
| Tabla 4.5.      | Densidades experimentales de líquidos iónicos puros medidos en este trabajo a diferentes temperaturas y a presión p=0.1 MPa                                                                       | 65     |
| Tabla 4.6.      | Velocidades del sonido experimentales para los líquidos iónicos puros medidos en este trabajo a diferentes temperaturas y a presión p=0.1 MPa                                                     | 66     |
| Tabla 4.7.      | Viscosidades experimentales de líquidos iónicos puros medidos en este trabajo a diferentes temperaturas y a presión p=0.1 MPa                                                                     | 66     |
| Tabla 4.8.      | Parámetros de la ecuación de Gardas y Coutinho para densidad                                                                                                                                      | 68     |
| Tabla 4.9.      | Parámetros de la ecuación de Arrhenius para viscosidad                                                                                                                                            | 69     |
| Tabla 4.10.     | Parámetros de la ecuación de Vogel-Tamman-Fulcher para viscosidad                                                                                                                                 | 70     |
| Tabla 4.11.     | Parámetros de la ecuación de la fluidez para viscosidad                                                                                                                                           | 71     |
| Tabla 4.12.     | Densidades, volúmenes molares de exceso, viscosidades y desviaciones de viscosidad para el sistema [Et <sub>3</sub> S][TFSI] (1) + 1-propanol (2) en función de la temperatura y la concentración | 94     |
| Tabla 4.13.     | Densidades, volúmenes molares de exceso, viscosidades y desviaciones de viscosidad para el sistema [Anim][TFSI] (1) + 1-propanol (2) en función de la temperatura y la concentración              | 97     |
| Tabla 4.14.     | Densidades, volúmenes molares de exceso, viscosidades y desviaciones de viscosidad para el sistema [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] + 1-propanol (2) en función de la temperatura y la concentración  | 100    |
| Tabla 4.15.     | Velocidades del sonido y su desviación en función de la temperatura y de la concentración para el sistema [Et <sub>3</sub> S][TFSI] (1) + 1-propanol (2) a presión p=0.1 MPa                      | 103    |
| Tabla 4.16.     | Velocidades del sonido y su desviación en función de la temperatura y de la concentración para el sistema                                                                                         | 105    |

|             |                                                                                                                                                               |     |
|-------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
|             | [Amim][TFSI] (1) + 1-propanol (2) a presión $p=0.1$ MPa                                                                                                       |     |
| Tabla 4.17. | Velocidades del sonido y su desviación en función de la temperatura y de la concentración para el sistema                                                     | 107 |
|             | [[ $(\text{OH})_2\text{Im}$ ][TFSI] (1) + 1-propanol (2) a presión $p=0.1$ MPa                                                                                |     |
| Tabla 4.18. | Porcentajes de error promedio absoluto para la densidad de los líquidos iónicos utilizados en el presente trabajo con los modelos reportados en la literatura | 114 |
| Tabla 4.19. | Propiedades críticas estimadas para los líquidos iónicos utilizados en el presente trabajo                                                                    | 115 |
| Tabla 4.20. | AAPD, bias y DS para las ecuaciones de Vásquez-Castillo, Nava-Ríos y Eyring-MTSM de líquidos iónicos con compuestos orgánicos                                 | 125 |
| Tabla 4.21. | AAPD, bias y DS para las ecuaciones de Vásquez-Castillo y Eyring-MTSM de líquidos iónicos con agua                                                            | 128 |
| Tabla A.1.  | Parámetros de la ecuación de Redlich-Kister en función de la temperatura para el volumen molar de exceso                                                      | 151 |
| Tabla A.2.  | Parámetros de la ecuación de Redlich-Kister en función de la temperatura para las desviaciones de viscosidad                                                  | 152 |
| Tabla A.3.  | Parámetros de la ecuación de Redlich-Kister en función de la temperatura para las desviaciones de velocidad del sonido                                        | 153 |
| Tabla A.4.  | Parámetros de la ecuación de Redlich-Kister en función de la temperatura para las desviaciones de compresibilidad.                                            | 154 |
| Tabla B.1.  | Parámetros de la ecuación de Vásquez-Castillo para mezclas binarias de líquidos iónicos con compuestos orgánicos                                              | 156 |
| Tabla B.2.  | Parámetros de la ecuación de Vásquez-Castillo para mezclas binarias líquidos iónicos con agua                                                                 | 159 |
| Tabla B.3.  | Parámetros de la ecuación de Eyring-MTSM para mezclas binarias de líquidos iónicos con compuestos orgánicos                                                   | 161 |
| Tabla B.4.  | Parámetros de la ecuación de Eyring-MTSM para mezclas binarias de líquidos iónicos con agua                                                                   | 164 |
| Tabla B.5.  | Parámetros de la ecuación de Nava-Ríos para mezclas binarias de líquidos iónicos con compuestos orgánicos                                                     | 166 |

| <b>Lista de figuras</b>                                                                                                                 | <b>Página</b> |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------|
| Figura 2.1. Estructura general de un líquido iónico                                                                                     | 7             |
| Figura 2.2. Cationes y aniones más comunes                                                                                              | 8             |
| Figura 2.3. Efecto del catión y del anión en la densidad del LI imidazolium ( $[C_nC_1Im][X]$ ) a 298.15 K                              | 11            |
| Figura 2.4. Efecto de la temperatura y la presión en el volumen molar de exceso para el sistema $[C_1C_1Im][C_1SO_4]$ (1) + metanol (2) | 14            |
| Figura 2.5. Métodos utilizados en la medición de la velocidad de sonido en líquidos iónicos                                             | 19            |
| Figura 3.1. Diagrama de las celdas de densidad y velocidad de sonido                                                                    | 29            |
| Figura 3.2. Vista superior del densímetro DSA 5000 M                                                                                    | 31            |
| Figura 3.3. Vista lateral del densímetro DSA 5000 M                                                                                     | 32            |
| Figura 3.4. Esquema del viscosímetro de balón rodante AMVn                                                                              | 34            |
| Figura 3.5. Esquema de un capilar de balón rodante                                                                                      | 35            |
| Figura 3.6. Corte transversal de la celda del capilar para la medición de la viscosidad                                                 | 40            |
| Figura 4.1. Calibración para el capilar de diámetro $D=3.0$ mm                                                                          | 58            |
| Figura 4.2. Calibración para el capilar de diámetro $D=1.8$ mm                                                                          | 59            |
| Figura 4.3. Calibración para el capilar de diámetro $D=1.6$ mm                                                                          | 60            |
| Figura 4.4. Porcentaje de desviación de la densidad del líquido iónico $[Bmpyrr][TFSI]$ con la literatura                               | 61            |
| Figura 4.5. Porcentaje de desviación de la viscosidad del líquido iónico $[Bmpyrr][TFSI]$ con la literatura                             | 62            |
| Figura 4.6. Porcentaje de desviación de la velocidad del sonido del líquido iónico $[Bmpyrr][TFSI]$ con la literatura                   | 63            |
| Figura 4.7. Densidades experimentales de los líquidos iónicos puros representados con la ecuación de Gardas y Coutinho                  | 68            |
| Figura 4.8. Viscosidades experimentales de los líquidos iónicos puros representados con la ecuación de Arrhenius                        | 69            |
| Figura 4.9. Viscosidades experimentales de los líquidos iónicos puros representados con la ecuación de Vogel-Tamman-Fulcher             | 70            |
| Figura 4.10. Viscosidades experimentales de los líquidos iónicos puros representados con la ecuación de fluidez                         | 71            |
| Figura 4.11. Volúmenes molares de exceso para el sistema $[Et_3S][TFSI]$ + 1-propanol a diferentes temperaturas                         | 73            |
| Figura 4.12. Volúmenes molares de exceso para el sistema $[Amim][TFSI]$ + 1-propanol a diferentes temperaturas                          | 74            |
| Figura 4.13. Volúmenes molares de exceso para el sistema $[(OH)_2Im][TFSI]$ + 1-propanol a diferentes temperaturas                      | 76            |
| Figura 4.14. Comparación del volumen de exceso de líquidos iónicos con el anión en TFSI y diferentes alcoholes a 298.15 K               | 80            |
| Figura 4.15. Desviaciones de viscosidad para el sistema $[Et_3S][TFSI]$ + 1-propanol a diferentes temperaturas                          | 83            |
| Figura 4.16. Desviaciones de viscosidad para el sistema $[Amim][TFSI]$ + 1-propanol a diferentes temperaturas                           | 84            |
| Figura 4.17. Desviaciones de viscosidad para el sistema $[(OH)_2Im][TFSI]$ +                                                            | 85            |

|              |                                                                                                                                                    |     |
|--------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
|              | 1-propanol a diferentes temperaturas                                                                                                               |     |
| Figura 4.18. | Desviaciones de velocidad de sonido para el sistema $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ a diferentes temperaturas             | 87  |
| Figura 4.19. | Desviaciones de velocidad de sonido para el sistema $[\text{Amim}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ a diferentes temperaturas                     | 88  |
| Figura 4.20. | Desviaciones de velocidad del sonido para el sistema $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ a diferentes temperaturas         | 89  |
| Figura 4.21. | Desviaciones de compresibilidad isoentrópica para el sistema $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ a diferentes temperaturas    | 91  |
| Figura 4.22. | Desviaciones de compresibilidad isoentrópica para el sistema $[\text{Amim}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ a diferentes temperaturas            | 92  |
| Figura 4.23. | Desviaciones de compresibilidad isoentrópica para el sistema $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ a diferentes temperaturas | 93  |
| Figura 4.24. | Porcentaje de desviación para la densidad el líquido iónico $[\text{Bmppyrr}][\text{TFSI}]$ con los modelos reportados en la literatura            | 110 |
| Figura 4.25. | Porcentaje de desviación para la densidad del líquido iónico $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}]$ con los modelos reportados en la literatura      | 111 |
| Figura 4.26. | Porcentaje de desviación para la densidad del líquido iónico $[\text{Amim}][\text{TFSI}]$ con los modelos reportados en la literatura              | 112 |
| Figura 4.27. | Porcentaje de desviación para la densidad del líquido iónico $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}]$ con los modelos reportados en la literatura   | 113 |
| Figura 4.28. | Viscosidades para sistemas de LI con $\text{H}_2\text{O}$ con un mayor porcentaje de error para la ec. de Vásquez-Castillo a 298.15 K              | 120 |
| Figura 4.29. | Porcentaje de desviación de viscosidad para mezclas binarias de LI con $\text{H}_2\text{O}$ para la ecuación de Nava-Ríos a 298.15 K               | 121 |
| Figura 4.30. | Porcentajes de desviación de viscosidad para mezclas binarias de LI con compuestos orgánicos con Vásquez-Castillo a 298.15 K                       | 122 |
| Figura 4.31. | Porcentaje de desviación de viscosidad para mezclas binarias de LI con compuestos orgánicos con Nava-Ríos a 298.15 K                               | 123 |
| Figura 4.32. | Porcentaje de desviación de viscosidad para mezclas binarias de LI con compuestos orgánicos con Eyring-MTSM a 298.15 K                             | 124 |
| Figura 4.33. | Dependencia de temperatura de $G_{123}^*$ con la ecuación de Vásquez-Castillo para líquidos iónicos con alcoholes                                  | 131 |
| Figura 4.34. | Dependencia de temperatura de $G_{13}^*$ con la ecuación de Vásquez-Castillo para líquidos iónicos con alcoholes                                   | 132 |
| Figura 4.35. | Dependencia de temperatura de $G_{23}^*$ con la ecuación de Vásquez-Castillo para líquidos iónicos con alcoholes                                   | 133 |
| Figura 4.36. | Viscosidades correlacionadas con la ecuación Vásquez-Castillo para líquidos iónicos con compuestos orgánicos a 298.15 K                            | 134 |
| Figura 4.37. | Viscosidades correlacionadas con la ecuación de Vásquez-Castillo para líquidos iónicos con agua a 298.15 K                                         | 135 |
| Figura 4.38. | Viscosidades correlacionadas con la ecuación de Nava-Ríos para líquidos iónicos con compuestos orgánicos a 298.15 K                                | 136 |
| Figura 4.39. | Viscosidades correlacionadas con la ecuación de Nava-Ríos para líquidos iónicos con agua a 298.15 K                                                | 137 |

---

---

## CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

Hasta el siglo XIX, el único medio en cual se llevaban a cabo las reacciones químicas era el medio acuoso, por lo que la solubilidad en dicho medio era lo que determinaba las posibles transformaciones. Fue así que surgen otros disolventes orgánicos, como los hidrocarburos, nitrilos, etc., iniciándose el estudio de reacciones que hasta ese momento se encontraban limitadas por la insolubilidad de sus reactivos en agua. Posteriormente, surgen otros disolventes como los fluidos supercríticos o compuestos perfluorados que se utilizan en nuevos procesos de transformación y se mejoran los ya existentes.

El empleo de una fase líquida constituida por iones se basaba en la fusión de óxidos o sales, por lo que se utilizaban procesos donde se requerían temperaturas elevadas. Con el descubrimiento de los líquidos iónicos, se dispone de una nueva familia de compuestos que se pueden utilizar para diversas aplicaciones sin requerir de altas temperaturas.

Los líquidos iónicos (LI) son sustancias que han tenido diversas aplicaciones en los últimos años debido a sus múltiples propiedades que los han hecho atractivos en el área de la investigación y de la industria química. Entre sus propiedades más importantes destacan su presión de vapor que es prácticamente cero, por lo que han sustituido en gran medida a los compuestos orgánicos volátiles, los cuales causan contaminación ambiental. Otra propiedad importante es su temperatura de fusión (menor a 100°C), por lo que pueden permanecer líquidos en un amplio intervalo de temperatura. Además, sus propiedades fisicoquímicas se pueden cambiar con solo modificar el catión o el anión presente en su estructura o añadiendo grupos funcionales, por lo que es posible adaptar un líquido iónico para una aplicación específica. Es por esta razón que se les ha llamado disolventes de diseño.

Debido a que los líquidos iónicos son sustancia relativamente nuevas, uno de los principales problemas para entender la naturaleza de los líquidos iónicos y poder expandir sus aplicaciones es la ausencia de datos de sus propiedades termofísicas y termodinámicas de líquidos iónicos puros y sus mezclas con otros solventes.

El estudio de propiedades termodinámicas de mezclas binarias de líquidos iónicos ha sido una herramienta para elucidar las interacciones que están ocurriendo entre los componentes y para un

---

---

entendimiento de los fenómenos que están ocurriendo en las soluciones. Además, las mezclas de LI con solventes moleculares proporcionan potenciales aplicaciones industriales. Por ejemplo, una mezcla de líquido iónico con alcohol se ha utilizado en reacciones químicas. Además, si se requiere utilizar un LI como solvente en procesos de extracción, es importante conocer sus propiedades con agua o compuestos orgánicos. Por otro lado, las funciones de exceso, las cuales dependen de la temperatura, presión y de la composición del sistema, son de gran importancia en el diseño de procesos de separación [5, 22, 70, 59, 145].

En años recientes, las propiedades fisicoquímicas de LI puros y sus mezclas han sido extensamente investigadas y reportadas, incluyendo densidad, viscosidad, tensión superficial, velocidad de sonido, conductividad eléctrica, punto de fusión, índice de refracción, etc.

Entre sus propiedades más importantes destacan la densidad y la viscosidad. La densidad es una propiedad requerida para el desarrollo de modelos termodinámicos y para el diseño de procesos industriales, en el dimensionamiento de recipientes de almacenamiento, cálculos de medición, diseño de equipos, balances de materia y energía, separaciones líquido-líquido y líquido-vapor. Por otro lado, la viscosidad es una propiedad de gran importancia para el diseño de equipos de transferencia de calor, reactores, columnas de destilación, extractores líquido-líquido, equipos de cristalización, tuberías y otras unidades utilizadas en la industria química. Debido a que la viscosidad afecta fuertemente el comportamiento de los fluidos, se ha considerado en cálculos en procesos de ingeniería, diseño y análisis, así como en optimización y simulación de procesos [46, 139].

Por otro lado, debido a la gran cantidad de líquidos iónicos que pueden ser sintetizados (aproximadamente  $10^{18}$ ), no es posible determinar todas sus propiedades fisicoquímicas y termodinámicas experimentalmente. En este sentido, el desarrollo de modelos y correlaciones para predecir sus propiedades podría ser de gran importancia para reducir tiempos de consumo e inversión en los laboratorios. El desarrollo de modelos es una de las herramientas más poderosas que se pueden utilizar en la predicción de propiedades físicas de LI y mezclas. Actualmente, existe un aumento en el número de investigaciones teóricas que permiten desarrollar modelos para la predicción de sus propiedades con resultados muy cercanos a los datos experimentales.

---

---

### **1.1. Planteamiento del problema**

Uno de los principales obstáculos para el uso de los líquidos iónicos en diferentes aplicaciones, es que actualmente, existe escases de sus propiedades termofísicas más importantes, tanto para fluidos puros como sus mezclas, en un amplio intervalo de temperatura y presión. Además, debido a la gran cantidad de combinaciones de líquidos iónicos que se pueden formar, al alto costo y tiempo de consumo que se requiere para determinar sus propiedades, determinar experimentalmente sus propiedades se ha vuelto una tarea poco viable. En este sentido, surge la necesidad del desarrollo de modelos que puedan predecir o correlacionar sus propiedades termofísicas más importantes. Por otro lado, debido a que los líquidos iónicos son más viscosos que los compuestos orgánicos, su aplicación en la industria se encuentra limitada. En este sentido, se han investigado las propiedades de líquidos iónicos con diversos solventes, con el objetivo de reducir costos y determinar nuevas aplicaciones.

### **1.2. Hipótesis**

La determinación de las propiedades termofísicas tales como la densidad, viscosidad y velocidad de sonido en las mezclas, permitirá analizar el comportamiento y las interacciones existentes a nivel molecular, así como el desarrollo de modelos matemáticos para la predicción de dichas propiedades.

### **1.3. Objetivo general**

Evaluar, analizar y correlacionar las propiedades volumétricas de los líquidos iónicos puros [Bmpyr][TFSI], [Et<sub>3</sub>S][TFSI], [Amim][TFSI], [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI] y [(OMe)<sub>2</sub>Im][TFSI] así como sus mezclas binarias con 1-propanol a diferentes temperaturas y a presión atmosférica, en base a la determinación de sus propiedades termofísicas como densidad, viscosidad y velocidad de sonido.

---

---

#### 1.4. Objetivos específicos

- ❖ Medición experimental de densidades, viscosidades y velocidad de sonido de los líquidos iónicos puros de (278.15 a 343.15) K a presión atmosférica.
- ❖ Medición experimental de densidades, viscosidades y velocidad de sonido de líquidos iónicos y sus mezclas binarias con 1-propanol de (293.15 a 343.15) K a presión atmosférica.
- ❖ Validación de los datos experimentales y del método de medición.
- ❖ Determinación y análisis de los volúmenes de exceso, deltas de viscosidad y desviaciones de velocidad de sonido.
- ❖ Evaluación de las interacciones existentes a nivel molecular en las mezclas.
- ❖ Correlacionar las propiedades determinadas.

#### 1.5. Organización de la tesis

El Capítulo 2 describe las características y propiedades más importantes, así como una breve descripción de los antecedentes y síntesis de los líquidos iónicos. También se describen algunos modelos predictivos y aplicaciones más recientes para estas sustancias.

El Capítulo 3 presenta la calibración de los equipos utilizados, el principio de medición, así como la metodología para la determinación de densidad, viscosidad y velocidad de sonido. También se presentan las ecuaciones utilizadas para la validación de los datos experimentales y del método de medición. Además, se describen los modelos utilizados para la predicción de la densidad y los modelos utilizados para la correlación de las viscosidades de los sistemas de mezclas de líquidos iónicos con diferentes solventes.

El Capítulo 4 presenta los resultados del análisis experimental y teórico, y finalmente, en el Capítulo 5 se reportan las conclusiones de la presente investigación.

---

---

## CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

En este capítulo se describen las características principales sobre los líquidos iónicos, como son su estructura básica, interacciones, propiedades, síntesis general, además de algunas correlaciones para la predicción de sus propiedades más importantes. Se presentan también algunos antecedentes de los primeros líquidos iónicos utilizados y algunas aplicaciones recientes.

### 2.1. Antecedentes

El desarrollo de los líquidos iónicos se remonta a 1914 cuando Walden [133] reportó por primera vez la síntesis de nitrato de etilamonio, pero su descubrimiento no estimuló ningún interés en ese momento. Posteriormente, en el año de 1948 surgió el desarrollo de líquidos iónicos conformados por iones cloroaluminatos, reportados por Hurley y Wier [82] en el Instituto Rice en Texas, los cuales se utilizaron como soluciones para electrodeposición de aluminio. Sin embargo, estos sistemas se investigaron más ampliamente hasta finales de 1970, cuando los grupos de trabajo de Osteryoung y Wilkes [20, 115, 150] los utilizaron en la generación de la síntesis de sales líquidas a temperatura ambiente. Durante ese tiempo, la investigación y el desarrollo se centraron principalmente en aplicaciones electroquímicas. A mediados de 1967, una publicación realizada por Swain et al. [134] amplió el campo de aplicaciones de los líquidos iónicos utilizando benzoato tetra-*n*-hexilamonio como solvente para estudios cinéticos. En la década de 1980, Hussey et al. y Seddon et al. [24, 93, 124, 125] estudiaron la aplicación de líquidos iónicos cloroaluminatos como solventes polares en la formación y estabilidad de complejos de metales de transición. Es ese mismo año, surgieron las primeras publicaciones en las que los líquidos iónicos fueron descritos como nuevos medios de reacción y catalizadores en la síntesis orgánica, donde los líquidos iónicos ácidos constituidos por iones cloroaluminatos demostraron ser catalizadores efectivos en la reacción de Friedel–Crafts y ciertos halogenuros de fosfonio fueron usados exitosamente en reacciones de sustitución aromática nucleofílica. Posteriormente, en el año 1990 se estudió el uso de líquidos iónicos como solventes para catálisis homogénea de metales de transición en reacciones bifásicas, en el cual Chauvin et al. [15] reportaron la dimerización de propeno mediante complejos de níquel disueltos en líquidos iónicos cloroaluminatos, y Wilkes et al. [150] realizaron la polimerización de etileno con catalizadores de Ziegler-Natta utilizando el mismo tipo de líquidos iónicos. El principal problema con los líquidos iónicos basados en

---

---

aniones cloroaluminatos es que son sensibles al agua y al oxígeno. Además, estos fluidos son incompatibles con algunos compuestos orgánicos, tales como alcoholes y acetona.

En el año 1992, el concepto de líquidos iónicos dio un gran giro debido a los estudios realizados por el grupo de trabajo de Wilkes [150], cuando descubrieron que la síntesis de sistemas se podría llevar a cabo con fluidos iónicos basados en los aniones tetrafluoroborato y hexafluorofosfato. En comparación con los líquidos iónicos a base de iones cloroaluminatos, estos sistemas brindan una alta tolerancia a la hidrólisis, generando una gama más amplia de aplicaciones especialmente para catálisis de metales de transición. Finalmente, los trabajos más recientes se han enfocado en la síntesis de nuevos líquidos iónicos, caracterización de sus propiedades físicas y químicas y el desarrollo de nuevas aplicaciones como solventes y catalizadores. Las investigaciones realizadas por Welton [149] y Seddon et al. [79] describen el uso de líquidos iónicos cloroaluminatos en aplicaciones catalíticas y sintéticas.

## **2.2. Características de los líquidos iónicos**

Los líquidos iónicos se pueden definir como sales cuyo punto de fusión se encuentra por debajo de los 100°C. La estructura general de los líquidos iónicos consiste de un catión orgánico, voluminoso y asimétrico asociado con un anión inorgánico débilmente coordinado, cuyas estructuras y combinaciones pueden afectar sus propiedades (Figura 2.1). La mayor parte de los cationes tienen naturaleza aromática mientras que los aniones suelen estar constituido por diferentes elementos químicos. Al disponer de un gran número de aniones y cationes, se puede elegir la combinación más apropiada para que se adapte a las exigencias de una determinada aplicación, por lo que existe la posibilidad de modular sus propiedades físicas y químicas variando la naturaleza del catión y del anión presentes en sus estructuras específicas [117].

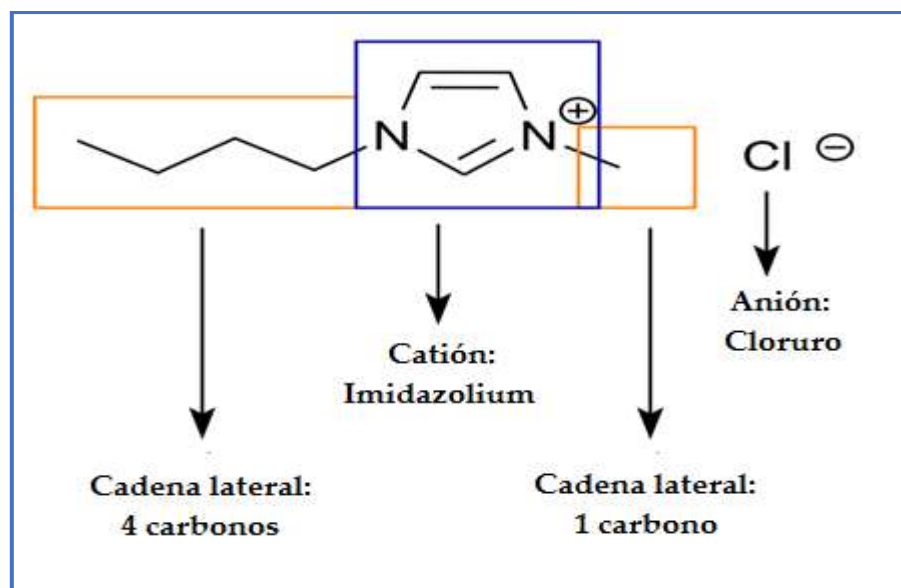


Figura 2.1. Estructura general de un líquido iónico.

Entre los cationes más populares se encuentran 1,3-dialkylimidazolium-, N,N-dialkylpyrrolidinium-, N,N,N,N-tetraalkylammonium y N-alkylpyridinium y entre los aniones más comunes se encuentran tetrafluoroborate ( $[\text{BF}_4]$ ), hexafluorophosphate, ( $[\text{PF}_6]$ ), bis(trifluoromethylsulfonyl)amide ( $[\text{NTf}_2]$ ) y triflate ( $[\text{OTf}]$ ). En la Figura 2.2 se muestran los cationes y aniones más utilizados en la preparación de líquidos iónicos [161].

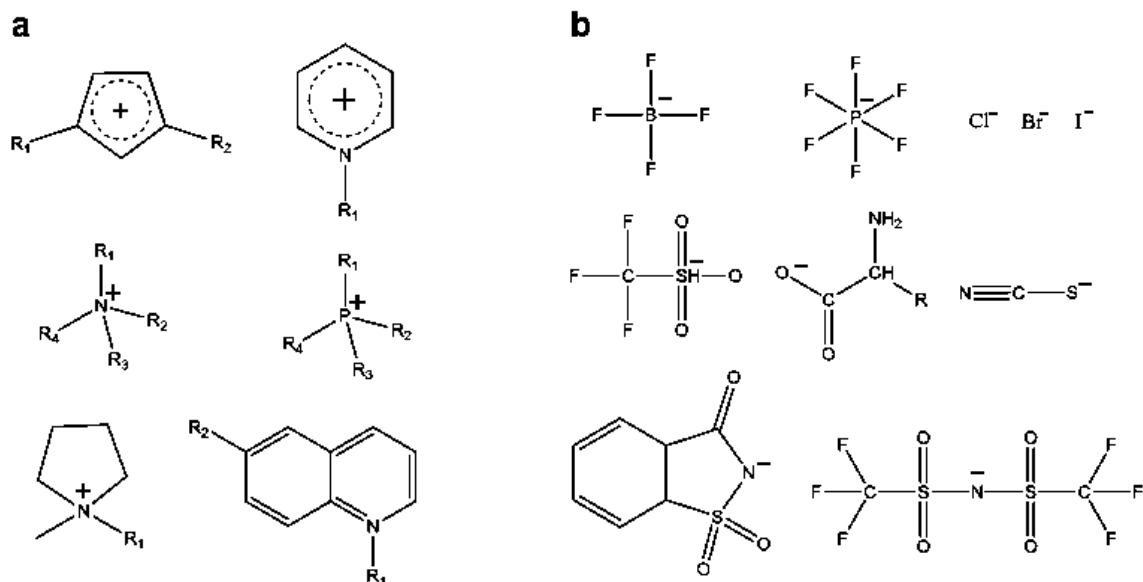


Figura 2.2. a) Cationes y b) aniones más comunes [161].

### 2.3. Síntesis de líquidos iónicos

El proceso de síntesis se fundamenta en dos etapas: la reacción de cuaternización de una amina o fosfina principalmente con un haluro de alquilo para formar el catión y la reacción de intercambio iónico que generará el producto deseado.

*Reacción de cuaternización.* La formación de los cationes que posteriormente constituirán el líquido iónico, se fundamenta en poli-sustituir una amina o una fosfina hasta conseguir hacerla cuaternaria mediante la reacción con un haluro de alquilo. Aquí se esquematiza la síntesis con base en el catión imidazolio. Sin embargo, esta metodología puede ser aplicada para cualquier catión. En esta etapa un haluro de alquilo reacciona con la amina metilimidazolio para formar la sal de haluro de imidazolio. Estas sales de haluro con diferentes aniones son obtenidas por medio de la reacción de cuaternización dependiendo del reactivo de alquilación. Algunos líquidos iónicos con puntos de ebullición inferiores a 100°C pueden ser obtenidos por una serie de combinaciones específicas de catión-anión mediante este camino de reacción. Los procesos de cuaternización poseen como ventajas el amplio número de haloalcanos disponibles y el hecho de que las reacciones transcurran a temperaturas moderadas. Sin embargo, el tiempo de reacción es muy dependiente de la reactividad del haloalcano utilizado, por ejemplo, para el clorobutano el

---

---

tiempo de reacción es de aproximadamente 96 horas. Recientemente ha surgido un método que involucra la síntesis de líquidos iónicos imidazolio asistida con radiación de microondas, reduciendo el tiempo de reacción desde varias horas a minutos y evitando el uso de solventes orgánicos como medio de reacción. Por otra parte, algunas sales de haluro obtenidas mediante la reacción de cuaternización, pueden ser obtenidas comercialmente a precios razonables, por lo tanto, lo único que se requiere para formar el líquido iónico deseado es el intercambio del anión mediante la reacción de intercambio iónico [26].

*Reacciones de intercambio.* En situaciones donde no es posible formar el anión deseado por medio de la reacción de cuaternización, se requiere de una etapa adicional de intercambio iónico. Por ejemplo, iniciando desde una sal de haluro de metilimidazolio, se pueden utilizar tres diferentes trayectorias para variar el anión. Primero, el haluro  $[\text{RMIM}]^+ \text{Cl}^-$  puede ser tratado con un ácido de Lewis  $\text{AlCl}_3$ , conduciendo a un líquido iónico del tipo  $[\text{RMIM}]^+ [\text{AlCl}_4]^-$ . La segunda alternativa se fundamenta en la adición de una sal metálica  $\text{NaBF}_4$  sobre la sal de haluro  $[\text{RMIM}]^+ \text{Cl}^-$  para obtener el líquido  $[\text{RMIM}]^+ [\text{BF}_4]^-$ . Finalmente, el tercer camino para modificar el anión consiste en la reacción de desplazamiento del ion haluro por un ácido fuerte generando el líquido iónico  $[\text{RMIM}]^+ [\text{PF}_6]^-$  [26].

Los métodos descritos pueden también ser usados para preparar previamente combinaciones de cationes y aniones, los cuales pueden resultar en sales de bajo punto de fusión. Además, existe la posibilidad de obtener líquidos iónicos con nuevas propiedades mediante mezclas de diversas sales iónicas.

## **2.4. Propiedades de los líquidos iónicos**

En comparación con las sales fundidas simples, la estructura de los líquidos iónicos es más complicada y sus propiedades varían considerablemente. Se necesita mucho tiempo de consumo para explorar experimentalmente los LI cuando nos enfrentamos al enorme número de combinaciones que existen.

Las propiedades físicas y químicas de los líquidos iónicos dependen de la naturaleza y tamaño del catión y del anión. Muchas de sus aplicaciones en la industria y en el campo de la ciencia, se deben a sus únicas propiedades, como son presión de vapor muy baja, alta estabilidad térmica, miscibilidad en agua y en compuestos orgánicos e inorgánicos, así como una alta conductividad

---

---

eléctrica. Además, tienen una gran habilidad de solvatar tanto compuestos orgánicos e inorgánicos y permanecen líquidos en un intervalo de temperatura entre (180-600) K.

El conocimiento de sus propiedades fisicoquímicas es de gran importancia para evaluar y seleccionar un líquido iónico para una aplicación específica, así como también en el diseño de procesos. Por otro lado, en comparación con el número de posibles líquidos iónicos que se pueden sintetizar mediante combinaciones de cationes y aniones, los datos disponibles actualmente de sus propiedades se encuentran escasos, lo cual obstaculiza su aplicación en diferentes áreas.

### *Densidad*

La densidad y su dependencia con la temperatura y la presión es de gran importancia para el análisis de la compresibilidad isotérmica, expansión térmica, propiedades de exceso y en el desarrollo de ecuaciones de estado. Es una propiedad que se utiliza en el diseño de procesos industriales. La densidad de los LI se puede modular ajustando la estructura del catión y del anión [161].

Los líquidos iónicos presentan una densidad mayor a la del agua, los valores oscilan entre 1.0 y 2.3 g cm<sup>-3</sup>. La densidad de un líquido iónico es una manifestación del arreglo de catión y del anión y depende fuertemente de la diferencia de tamaño entre catión-anión, de la longitud de cadena del catión, de la simetría de los iones y de las interacciones que existen entre el catión-anión. Se ha observado que la densidad incrementa con la simetría del catión. Para un compuesto cíclico es mayor a la de una estructura alifática. Un alargamiento en la longitud de cadena del catión incrementa el volumen libre dando como resultado una densidad menor. Los líquidos iónicos que presentan grupos funcionales en su estructura revelan mayores densidades a aquellos que contienen cadenas de alquilo simples. En la Figura 2.3 se muestra el efecto del catión y del anión en la densidad del líquido iónico de la familia imidazolium a 298.15 K [89, 161].

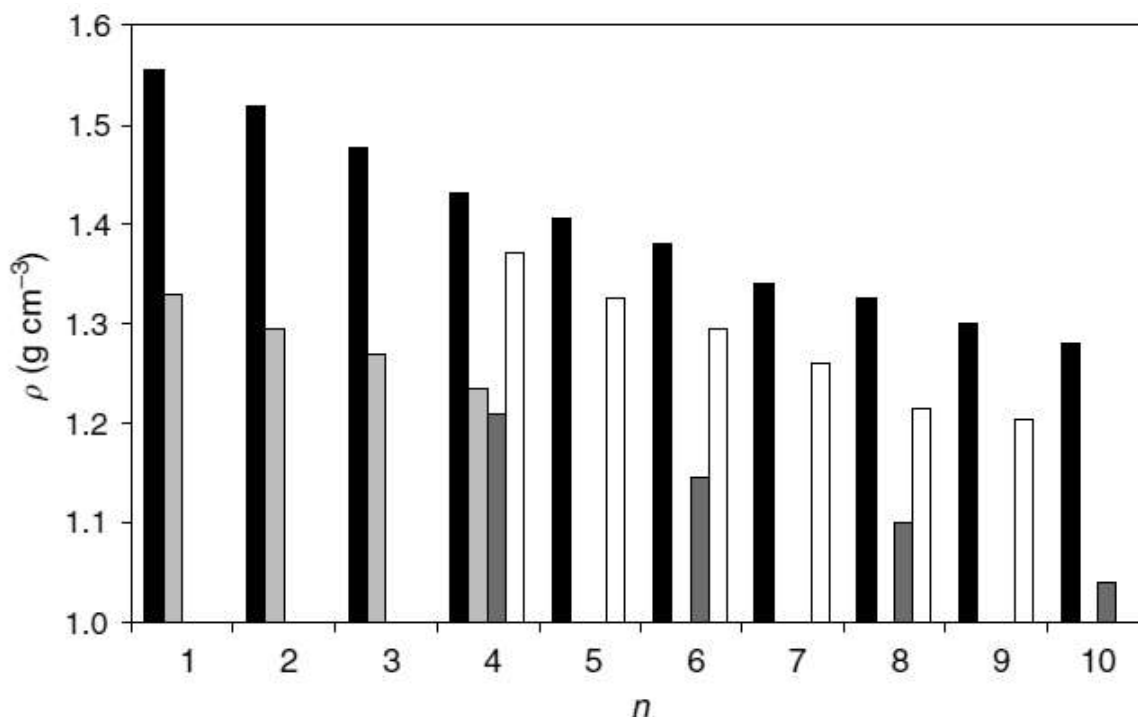


Figura 2.3. Efecto del catión y del anión en la densidad del LI imidazolium ( $[C_nC_1Im][X]$ ) a 298.15 K, donde  $n=1-10$  y el anión  $[X]^- = [Tf_2N]^-$  (negro),  $[AlCl_4]^-$  (gris claro),  $[BF_4]^-$  (gris oscuro),  $[PF_6]^-$  (blanco) [89].

Existe diversos estudios para la determinación de la densidad de líquidos iónicos y su dependencia con la temperatura y presión. Se han hecho experimentos sistemáticos para evaluar el efecto del catión, del anión y de la cadena del catión sobre la densidad. La densidad de diferentes líquidos iónicos con el anión  $[Tf_2N]^-$  ha sido determinada para evaluar el efecto del catión. Otro estudio revela que las densidades del líquido iónico  $[C_nMIM][Tf_2N]$  con un anión en común, la densidad sigue una disminución lineal conforme incrementa la longitud de cadena alquilo que se encuentra adherida al catión imidazolium [161].

La mayoría de las mediciones de densidad de LI reportados utilizan la técnica del densímetro de tubo vibrante. El costo del densímetro de tubo vibrante es relativamente bajo, y el intervalo de medición de la densidad es amplio. Sin embargo, el efecto de la viscosidad en la densidad debe ser considerado ya que los líquidos iónicos son más viscosos en comparación con compuestos moleculares. Las grandes diferencias en los datos de densidad reportadas en la literatura se deben

---

---

principalmente al método de medición utilizado. Las diferencias mayores se observaron para aquellos valores que se determinaron con un picnómetro que aquellos determinados con un densímetro. La presencia de contaminantes, por ejemplo, agua o iones  $\text{Cl}^-$ , tienden a disminuir su densidad [161].

### *Viscosidad*

Las propiedades de transporte juegan un papel importante en las reacciones químicas, electroquímica y extracción líquido-líquido. Esto comprende principalmente la viscosidad en solución con solventes moleculares. La viscosidad de los LI se encuentra entre 10 y 500 cP a temperatura ambiente. Su valor es uno o tres veces mayor en orden de magnitud que los solventes convencionales. Valores muy altos de viscosidad puede ser una desventaja para muchas de las aplicaciones de los líquidos iónicos y puede ejercer un efecto considerable en la velocidad de transporte de masa, en soluciones o en la conductividad, así como dificultades en la difusión de solutos y en los sistemas de mezclado y bombeo. La viscosidad de los LI se encuentra determinada por fuerzas de van der Waals y de puentes de hidrógeno. Las fuerzas electrostáticas y los cambios de carga del anión juegan también un papel importante. La viscosidad de los LI depende fuertemente de la naturaleza del anión. El anión  $[\text{Tf}_2\text{N}]^-$  presenta un punto de fusión y viscosidad bajos, debido a la combinación de su deslocalización de carga y su flexibilidad en la cadena, lo que produce una mayor entropía de fusión e incrementa la movilidad de la cadena. Por el contrario, los líquidos iónicos con aniones más simétricos tienen una viscosidad más elevada. Se ha encontrado que el tamaño, la forma y el peso molecular del anión contribuyen también a la viscosidad de líquido iónicos. Adicionalmente, la basicidad relativa del anión y su habilidad para formar puentes de hidrógeno o interacciones van der Waals también tienen un efecto pronunciado en la viscosidad. Los aniones fluorados como el  $[\text{BF}_4]$ ,  $[\text{PF}_6]$  o  $[\text{BETI}]$  forman líquidos iónicos con viscosidades más altas debido a su habilidad para formar puentes de hidrógeno o fuertes interacciones de van der Waals, por el contrario, las sales con los aniones como  $[\text{N}(\text{CN})_2]$  y  $[\text{C}(\text{CN})_3]$  presentan viscosidades más bajas. En comparación con el anión, el catión tiene un efecto secundario en la viscosidad. Para cualquier tipo de catión, un incremento en la longitud de cadena de alquilo da como resultado viscosidades más altas debido a interacciones de van der Waals más fuertes y a un incremento en la energía requerida para el movimiento molecular. Una ramificación en la cadena alquilo reduce la libertad rotacional y por lo tanto hace que el LI sea

---

---

más viscoso. Por otro lado, la sustitución de un grupo hidroxilo en la cadena de alquilo causa un incremento en la viscosidad debido a la presencia de puentes de hidrógeno adicionales. La dependencia de la temperatura en los líquidos iónicos es más complicada que en los compuestos moleculares, debido a que la mayoría de ellos no sigue el comportamiento de la ecuación de Arrhenius. La mayoría de los estudios que se han realizado para describir la viscosidad de los LI en función de la temperatura corresponden a la ecuación de Vogel-Tamman-Fulcher (VTF), la cual considera un parámetro adicional (temperatura de transición vítrea) al término exponencial. En general, todos los LI muestran una disminución significativa de la viscosidad con un incremento en la temperatura. La presencia mínima de iones  $\text{Cl}^-$  o  $\text{Br}^-$  durante la síntesis puede causar un efecto considerable en la viscosidad [89, 161].

#### *Volumen molar de exceso*

Para el diseño de cualquier proceso que involucra líquidos iónicos como uso industrial, es necesario conocer la densidad en todo el intervalo de concentración para una mezcla, así como las interacciones moleculares entre LI-solvente. Volúmenes molares de exceso negativos están atribuidos a la formación de puentes de hidrógeno entre alcoholes de cadena corta y el LI, así como a efectos de empaquetamiento eficiente. Valores de exceso positivos se han obtenido para líquidos iónicos con cadenas más largas en la estructura del catión, para el mismo alcohol. Para el caso de los líquidos iónicos con alcoholes de diferente número de carbonos, el volumen molar de exceso tiende a ser más positivo en el siguiente orden: metanol < etanol < 1-butanol < 1-hexanol < 1-octanol < 1-decanol. Además, se ha encontrado también que las interacciones existentes son más débiles entre líquidos iónicos en solución con agua que con alcoholes, especialmente en alcoholes de cadena corta. La influencia de la temperatura y la presión en el volumen molar de exceso no es del todo conocida. Se han observado volúmenes de exceso más negativos con un aumento en la temperatura. Con un incremento en la presión de 0.1 a 20 MPa para la misma temperatura, se observaron volúmenes de exceso menos positivos. En la Figura 2.4 se muestra el efecto de la temperatura y la presión para un sistema binario de LI + alcohol [89].

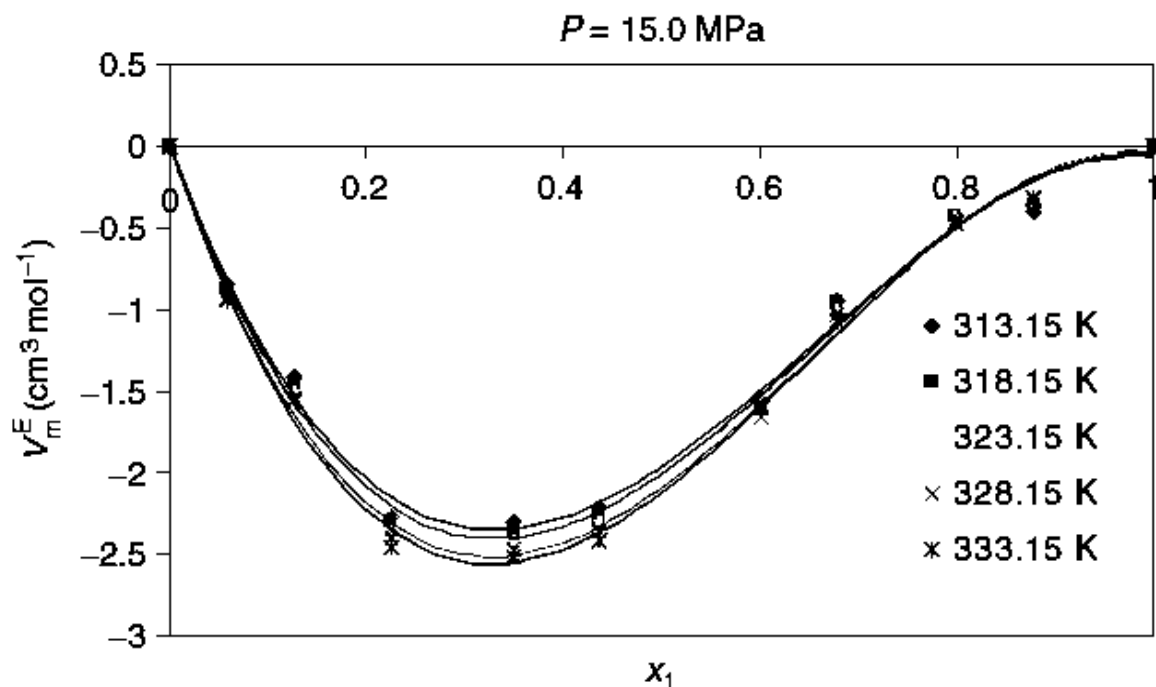


Figura 2.4. Efecto de la temperatura y la presión en el volumen molar de exceso para el sistema  $[C_1C_1Im][C_1SO_4]$  (1) + metanol (2) [89].

#### *Expansividad isobárica y compresibilidad isotérmica*

El conocimiento de las propiedades físicas y químicas y su dependencia con la temperatura y la presión se utilizan para estimar propiedades derivadas, como el coeficiente de expansión térmica y compresibilidad isotérmica. Se ha encontrado que los líquidos iónicos no se expanden apreciablemente en el intervalo de temperatura en el que se determinan normalmente (293.15–343.15) K. Los valores del coeficiente de expansión isobárica de los LI son similares a los del agua. Los valores reportados de mediciones de expansividades y compresibilidades isotérmicas de diversos líquidos iónicos a presiones por encima de 206.9 MPa revelan que los LI son menos compresibles en comparación con los solventes orgánicos [89, 161].

#### *Tensión superficial*

Una de las propiedades más importantes de los líquidos iónicos es la tensión superficial. Las investigaciones se han enfocado en la caracterización de la tensión superficial de mezclas de líquidos iónicos con agua y alcoholes, y algunos de ellos se centraban en la determinación de la

---

---

concentración micelar crítica del LI como surfactantes en medio acuoso. La tensión superficial proporciona información sobre las fuerzas de cohesión entre las moléculas del líquido presentes en la interface aire-líquido, sobre las energías intrínsecas, el carácter estructural y la migración preferencial y organización del LI en la superficie. La tensión superficial de los líquidos iónicos es menor a la del agua, pero mayor que la de los alcanos. Las investigaciones demuestran que los líquidos iónicos presentan habilidad para la formación de micelas (capacidad de solvatación) con diferentes surfactantes. Se ha encontrado también que la concentración micelar crítica (CMC) de los surfactantes, puede ser modificada seleccionando un apropiado líquido iónico con propiedades hidrofóbicas-hidrofílicas [107, 89].

La tensión superficial tiene un efecto decisivo en la separación, adsorción, destilación, extracción, reacción catalítica, ingeniería de reactores, flujo y transporte en medios porosos, selección de materiales, absorción de gas, así como en el rendimiento de membranas biológicas y otros procesos de ingeniería química. Las mediciones experimentales de la tensión superficial se encuentran aún escasas, especialmente para los LI basados en los cationes pyridinium, ammonium, phosphonium y guanidinium [8, 152].

#### *Punto de fusión*

Los líquidos iónicos se han definido como sales que tienen un punto de fusión por debajo de 373 K y la mayoría de ellos son líquidos a temperatura ambiente. El punto de fusión de muchos LI se encuentra por debajo de 0°C. El bajo punto de fusión se encuentra relacionado con la estructura y el empaquetamiento molecular de los iones. El catión y el anión también tienen una cierta influencia en el bajo punto de fusión. En general, un incremento en el tamaño y asimetría del anión causa una disminución en la temperatura del punto de fusión. Por otro lado, el tamaño, la simetría y la flexibilidad del catión también tienen un efecto importante. Ramificando la cadena del catión incrementa el punto de fusión, pero disminuye la estabilidad térmica y hace que el LI sea más viscoso y menos conductivo. La sustitución de un grupo metilo por un grupo etilo disminuye la temperatura en 26 K y de un grupo etilo a un grupo decil disminuye 107 K. Un incremento en la longitud de cadena del catión mejora el volumen molar y su flexibilidad. La simetría de la cadena del catión también tiene una influencia en el punto de fusión, por ejemplo, una cadena alquilo corta con una simetría molecular más alta puede incrementar el punto de fusión. Una regla simple es que los cationes con una cadena corta ( $C_n \leq 3$ ) forman fases

---

---

cristalinas con un alto punto de fusión, mientras que los líquidos iónicos con  $C_n$  entre 4 y 10, presentan un amplio rango en estado líquido con un bajo punto de fusión. Cuando el número de carbonos es mayor a diez, las sales muestran un comportamiento de fase complejo [89, 161].

Para líquidos iónicos con una cadena de alquilo corta en el catión y aniones rígidos, las fuerzas que predominan en el punto de fusión son las fuerzas electrostáticas, las cuales se encuentran inversamente relacionadas con el volumen molar y masa molar del LI. Por otro lado, los puntos de fusión para LI con cadenas más largas en el catión y con aniones rígidos las fuerzas que predominan son las de van der Waals. Esta propiedad puede ser modificada adicionando un grupo funcional en el catión. El anión  $[\text{Tf}_2\text{N}]^-$  ha sido reconocido como uno de los aniones más efectivos para dar como resultado un punto de fusión bajo. Esto se atribuye a una mejor deslocalización de carga y su imposibilidad para formar puentes de hidrógeno [161].

#### *Estabilidad térmica*

La temperatura de descomposición de LI es regularmente determinada por análisis termogravimétrico (TGA). Los líquidos iónicos son estables a temperaturas mayores a 700 K. La estabilidad térmica se ve afectada por los mismos factores que contribuyen a la temperatura del punto de fusión. La estabilidad térmica para un anión específico está determinada por la densidad de carga. Para muchas de las sales que contienen el anión  $[\text{Tf}_2\text{N}]^-$  se observan temperaturas de descomposición más altas y el punto de fusión más bajo. Para un líquido iónico en particular con diferente catión en su estructura la temperatura de descomposición presenta un cambio insignificante. La metilación del anillo imidazolium incrementa la estabilidad térmica del catión y la sustitución del C(2)-H tiene un efecto mayor debido a la acidez del protón. La introducción de un grupo funcional puede cambiar significativamente la estabilidad térmica. Si la cadena es ramificada en vez de lineal disminuye la estabilidad térmica de los líquidos iónicos de la familia imidazolium y presenta un aumento en la densidad de carga del anión si la densidad de carga del catión es también alta [89, 161].

#### *Conductividad eléctrica*

Debido a que los líquidos iónicos se encuentran compuestos de iones, son considerados como electrolitos portadores con una mayor carga por unidad de volumen. Algunos tienen una conductividad del orden  $10 \text{ mS}\cdot\text{cm}^{-1}$  para los LI que corresponden a la familia imidazolium. La

---

---

conductividad de los LI tiene un impacto directo en la viscosidad debido a que la conductividad se encuentra inversamente relacionada con la viscosidad. El anión  $[\text{NTf}_2]^-$  se encuentra entre los que presentan una conductividad más alta. Existen muchos otros factores que influyen en la conductividad, como el tamaño del ion, la deslocalización de carga del anión y el movimiento de los iones. Por otro lado, un aumento en la longitud de cadena del catión causa una viscosidad más alta y una conductividad menor [161].

En años recientes, las sales de 1,3-dialkylimidazolium han sido ampliamente investigadas para ser utilizadas como electrolito, especialmente en combinación con aniones como  $[\text{PF}_6]^-$ ,  $[\text{BF}_4]^-$ ,  $[\text{Tf}_2\text{N}]^-$ ,  $[\text{TfO}]^-$  o cualquier otro que sea estable en agua y menos viscoso a temperatura ambiente. Una viscosidad baja y una alta conductividad iónica, así como una estabilidad química y térmica, no inflamabilidad y un amplio intervalo de potencial electroquímico, son propiedades ideales para una solución electrolítica en baterías de litio [89].

La influencia del agua o etanol en la conductividad iónica ha sido analizada en sales de 1-allyl-3-methylimidazolium. La conductividad aumenta con un aumento en la temperatura y en la cantidad de agua o etanol. La adición de agua siempre causará un aumento en la conductividad. La dependencia de la conductividad con respecto a la temperatura obedece la ley de Arrhenius. Las mezclas de dos líquidos iónicos o líquidos iónicos con solventes moleculares pueden tener diversas aplicaciones en condensadores electroquímicos [89].

#### *Entalpía de vaporización*

Una de las propiedades más importantes de los líquidos iónicos es su baja volatilidad por lo que se pueden considerar sustituyentes de los tradicionales compuestos orgánicos volátiles (COV). Debido a sus fuertes interacciones iónicas, las entalpías molares de vaporización se encuentran en un orden de magnitud mayor que la de los compuestos típicos moleculares. La simetría del anión tiene un efecto directo en la vaporización, por lo que los LI con aniones más simétricos, como  $\text{Cl}^-$ ,  $[\text{BF}_4]^-$  y  $[\text{PF}_6]^-$ , presentan una entalpía de vaporización más alta que el anión  $[\text{NTf}_2]^-$ . Sin embargo, los líquidos iónicos que tienen aniones más simétricos se pueden descomponer en la fase gaseosa, por ejemplo, el LI  $[\text{Emim}]\text{Cl}$  se descompone cuando se calienta a  $190^\circ\text{C}$  en vacío, mientras que los LI que contienen el anión  $[\text{NTf}_2]^-$ , son térmicamente más estables y pueden calentarse hasta 600 K sin sufrir descomposición. Según las investigaciones demuestran que un

---

---

incremento en la longitud de cadena del catión conduce a una entalpía de vaporización mayor debido a que existen interacciones más fuertes entre el catión y el anión [161].

#### *Miscibilidad en agua*

Se ha encontrado que los líquidos iónicos son capaces de absorber cantidades significativas de agua. Los LI con los aniones nitrato y cloruros absorben mucha más cantidad de agua del aire atmosférico a temperatura ambiente que LI con los aniones hexafluorophosphate o tetrafluoroborate. Las investigaciones demuestran que las moléculas de agua que son absorbidas del aire, se encuentran ligadas por medio de puentes de hidrógeno para líquidos iónicos de la familia imidazolium. La presencia de agua en los LI puede afectar muchas de sus propiedades como densidad, viscosidad, tensión superficial, conductividad y polaridad. La solubilidad de un líquido iónico en agua está determinada por el anión. La longitud de la cadena del catión también tiene una influencia en la solubilidad, así como en otros solventes. La solubilidad en agua disminuye con un incremento en la longitud de la cadena del catión. Los aniones halogenuros  $[\text{BF}_4]^-$ ,  $[\text{MeSO}_4]^-$ ,  $[\text{NO}_3]^-$  y  $[\text{ClO}_4]^-$  son hidrofílicos. Por otro lado, aniones  $[\text{PF}_6]^-$ ,  $[\text{SbF}_6]^-$ ,  $[\text{OSO}_2\text{CF}_3]$  y  $[\text{OCOCF}_3]$  son hidrofóbicos por lo que han tenido gran potencial en aplicaciones industriales. Sin embargo, es importante aclarar que los líquidos iónicos hidrofóbicos son higroscópicos y pueden absorber ciertas cantidades de agua del ambiente [89, 161].

#### *Velocidad de sonido*

Las medidas de la velocidad de sonido proporcionan información que pueden ayudar en el análisis estructural de líquidos. La velocidad del sonido está relacionada con la densidad por medio de la compresibilidad isoentrópica. La compresibilidad isoentrópica de líquidos iónicos puros a presión atmosférica y a una temperatura dada es necesaria para tener un mayor entendimiento de las interacciones inter e intramoleculares, incluyendo los iones y el efecto de los sustituyentes o grupos funcionales. Diferentes investigaciones demuestran que la compresibilidad es un parámetro clave en el uso de nuevos líquidos iónicos como fluidos hidráulicos [35]. La velocidad de sonido en líquidos iónicos se ha determinado en un intervalo de temperatura de (278.15 a 393.15) K. Las condiciones de presión más altas se han determinado es a 200 MPa. La dependencia de la temperatura con la velocidad de sonido se ha descrito generalmente como una función lineal. Una ecuación cuadrática también ha sido utilizada [35].

Entre los métodos más utilizados para la determinación de la velocidad de sonido se basan en la técnica del tiempo de propagación (*time of flight*), el cual se lleva a cabo con equipos de la serie Anton-Paar DSA. El segundo más utilizado es el método interferométrico. En la Figura 2.5 se muestran los métodos más utilizados para la medición de la velocidad de sonido de líquidos iónicos. Los métodos se pueden dividir en dos categorías: métodos acústicos y métodos ópticos. Los métodos acústicos incluyen las técnicas de *time-of-flight*, *pulse-echo-overlap*, y *sing-around*, los cuales se basan en una longitud de trayectoria acústica constante, y *ultrasonic interferometers*, los cuales se basan en una longitud de trayectoria acústica variable. Los métodos ópticos incluyen *the transient grating*. Estos métodos se basan en la presencia de una onda acústica la cual es precedida por la creación de un láser inducido en la muestra [35].

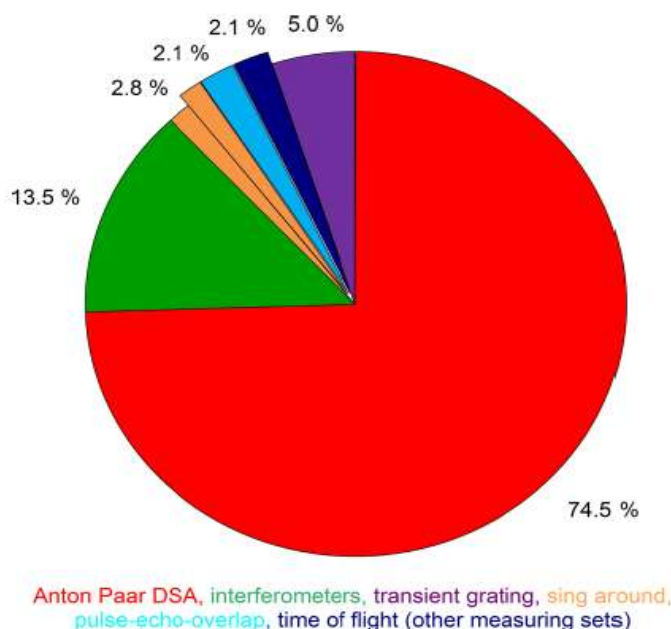


Figura 2.5. Métodos utilizados en la medición de la velocidad de sonido en líquidos iónicos [35].

Los líquidos iónicos pueden presentar cierta absorción debido a la dispersión de la velocidad de sonido. A frecuencias bajas (aproximadamente 3 MHz) donde puede existir una menor absorción, es decir, cuando el proceso de dispersión puede ser despreciado, la velocidad de sonido se puede considerar como una propiedad termodinámica en equilibrio de acuerdo a la ecuación de Newton-Laplace. Debido a la naturaleza disipativa de muchos líquidos iónicos, se debe tratar con precaución la velocidad de sonido, especialmente a temperaturas bajas o presiones altas. La

---

---

existencia de una región de dispersión, especialmente para líquidos iónicos que presentan una alta viscosidad o un rápido incremento de la viscosidad conforme la temperatura disminuye, o grandes desviaciones en la linealidad de la temperatura con respecto a la velocidad de sonido, podría indicar que el fenómeno de absorción o relajación probablemente está ocurriendo [35]. Fukuda et al. [39] define la relajación estructural como un fenómeno en el cual la viscosidad cinemática se relaja a un nuevo estado de equilibrio después de una fuerza externa repentina como un cambio de temperatura o presión. Por otro lado, Dzida et al. [35] encontraron que el proceso de absorción es influenciado principalmente por el anión.

Esperanca et al. [36] establece que la velocidad del sonido en los líquidos iónicos de la serie [CnC1im][NTf2] regularmente decrece con la adición de átomos de carbono en la cadena del catión imidazolium. La posición de la cadena de alquilo en líquidos iónicos también tiene cierta influencia. Esto se observó para líquidos iónicos con el catión pyridinium, los cuales mostraron un valor mayor para aquellos que se encontraban en la posición dos del átomo de nitrógeno. Por otro lado, la velocidad del sonido presenta un incremento conforme la masa molar del anión disminuye. Se ha encontrado también que los líquidos iónicos con el anión [NTf2]<sup>-</sup> presentan las velocidades de sonido más bajas, mientras que los líquidos iónicos con el anión [Cl]<sup>-</sup> presentan las velocidades más altas [35].

En general, las propiedades descritas anteriormente son de suma importancia para la aplicación de los líquidos iónicos. Sin embargo, algunas de estas propiedades son difíciles de medir directamente. Estas propiedades dependen directamente de la estructura y de diferentes combinaciones entre catión-anión, por lo que, entendiendo dichas estructuras e interacciones iónicas, proporcionarán una forma más conveniente de estimar datos termodinámicos de líquidos iónicos. Por otro lado, las técnicas de dinámica molecular y Monte Carlo han tenido una particular importancia en predecir las propiedades de estos materiales en estado líquido [89].

## **2.5. Interacciones en los líquidos iónicos**

Las interacciones típicas entre catión-anión en un líquido iónico incluyen interacciones Coulombicas, van der Waals, e interacciones específicas como puentes de hidrógeno. La presencia de puentes de hidrógeno entre los iones está muy relacionada con las propiedades de los LI.

---

---

Las interacciones que ocurren entre moléculas de soluto y solvente se pueden expresar por medio de su polaridad, definida por medio de la constante dieléctrica. Además, los líquidos iónicos con grupos funcionales en su estructura molecular son capaces de proporcionar interacciones adicionales con otros solventes. En cada solución donde se involucran líquidos iónicos, existen un gran número de interacciones soluto-soluto, soluto-solvente y solvente-solvente, las cuales son diferentes según el tipo y la intensidad de la interacción [89].

Es muy bien sabido que los líquidos iónicos son sustancias que forman puentes de hidrógeno con fuertes interacciones moleculares. Los cationes y aniones que contienen el grupo oxígeno, tienden a presentar interacciones específicas. El carbono ácido ubicado en la posición 2 del catión imidazolium C(2)-H, se encuentra ligado a un carbono localizado entre dos átomos de nitrógeno electronegativos, por lo que tiene la habilidad de formar puentes de hidrógeno, lo cual se ha demostrado por medio de espectroscopía de resonancia magnética nuclear (NMR). Por otro lado, la habilidad del anión para formar puentes de hidrógeno depende de su simetría y de la densidad de carga efectiva [89].

La distribución de la carga en los iones proporciona la variedad de interacciones que se observan en el estado líquido. Recientemente, los líquidos iónicos que contienen el anión bis(trifluoromethylsulfonyl)imide,  $[\text{Tf}_2\text{N}]^-$ , han tenido diversas aplicaciones ya que presentan hidrofobicidad y alta estabilidad térmica. Debido al incremento en el tamaño del ion, comparándolo por ejemplo con los iones chloride o hexafluorophosphate, presenta una mayor carga negativa extendida o esparcida (distribución de carga sobre la superficie molecular). Esto debilita las interacciones Coulómbicas entre los iones dando como resultado una reducción en la viscosidad en comparación con los aniones chloride y hexafluorophosphate [89].

## **2.6. Correlaciones y modelos**

Un gran número de modelos se han utilizado para correlacionar y predecir las propiedades de líquidos iónicos. Algunos están basados en parámetros de ajuste (correlaciones), mientras otros se basan en método de contribución de grupos (semiempírico y predictivo), en dinámica molecular o en principios de química cuántica [161].

Ye et al. [158] propusieron un método de contribución de grupos para estimar la densidad de 59 líquidos iónicos basados en los cationes imidazolium, pyridinium, pyrrolidinium,

---

---

tetraalkylammonium y phosphonium. Posteriormente, se realizó una modificación a este modelo el cual mejoraba la densidad en un intervalo de temperatura de (273.15 a 393.15) K y en un rango de presión de (0.1 a 100) MPa. Guan et al. [71] presentaron un método de contribución de grupos para predecir el volumen molar, entropía estándar molar, tensión superficial y la entalpía molar de vaporización de líquidos iónicos aminoácidos. Wang et al. [148] desarrollaron una ecuación de estado basada en la teoría de perturbación electrolítica para predecir la densidad de LI a diferentes temperaturas y presiones. Lazzus et al. [94] combinaron un método de red neuronal artificial y un método de contribución de grupos para predecir la densidad de 131 líquidos iónicos de la familia imidazolium a diferentes temperaturas y presiones.

La simulación molecular basada en campos de fuerza es una herramienta poderosa para predecir las propiedades de solventes que no están disponibles en la literatura. Ghatee et al. [53] determinaron la densidad del LI  $[C_nMIM]I$  ( $n=4, 6, 8$ ) con una desviación de 3.0 % con respecto a los datos experimentales. Derecskei et al. [25] investigaron la densidad y solubilidad de una variedad de LI utilizando el modelo molecular a nivel atómico.

Existe un gran número de modelos que se han utilizado en la predicción y correlación de viscosidades de líquidos iónicos. Kermanpour et al. [87] utilizaron las ecuaciones de McAllister, Hind y Nissan para correlacionar las viscosidades de líquidos iónicos en mezclas binarias y ternarias con solventes polares a 298.15 K y a presión atmosférica. Bajić et al. [6] utilizaron un método de contribución de grupos (UNIFAC-VISCO y ASOG-VISCO) para predecir la viscosidad de mezclas binarias de líquidos iónicos con compuestos orgánicos en un amplio intervalo de temperatura a presión atmosférica. Zhu et al. [165] utilizaron el modelo exponencial de un parámetro de la ecuación de Seddom para correlacionar la dependencia de la viscosidad con la fracción mol de líquidos iónicos de la familia imidazolium con compuestos moleculares a 298.15 K. Chen et al. [16] desarrollaron un modelo basado en *Quantitative Structure–Property Relationships* (QSPR) y un método de contribución de grupos para correlacionar la viscosidad de líquidos iónicos con el catión imidazolium. Abolala et al. [1] utilizaron los modelos de *Frictional Theory*, *Free-Volume Theory* y *Modified Yarranton–Satyro* para estimar la viscosidad de líquidos iónicos de la familia imidazolium. Hosseini et al. [80] desarrollaron un modelo basado en la teoría de *Rough HardSphere* (RHS) para predecir y correlacionar propiedades de transporte de 17 líquidos iónicos en un intervalo de temperatura de (263 a 388) K y a presiones por encima de

---

---

249.6 MPa. Jiménez de la Parra et al. [85] realizaron una modificación a la ecuación de Seddon para correlacionar la viscosidad en función de la temperatura y de la concentración de mezclas binarias de líquidos iónicos con agua y etanol.

Hasta la fecha, la forma más frecuente para estimar la velocidad del sonido de líquidos iónicos puros a 0.1 MPa es el modelo de Auerbach, el cual relaciona la velocidad del sonido con la tensión superficial y densidad para un fluido dado [35].

Más recientemente, la evaluación de la velocidad de sonido en función de la estructura y de la temperatura para líquidos iónicos puros a 0.1 MPa se ha investigado por diferentes autores por medio del método de contribución de grupos [35].

## **2.7. Aplicaciones de los líquidos iónicos**

La posibilidad de modular las propiedades físicas y químicas de los líquidos iónicos ha dado lugar a una gran variedad de aplicaciones, como catalizadores tanto en síntesis orgánica como inorgánica, biocatálisis y polimerizaciones. Sin embargo, en la última década ha habido un creciente impulso en el uso de los LI como disolventes en la industria de proceso. Debido a su elevado poder como solvente y a la capacidad de ajustar fácilmente su hidrofobicidad, se ha hecho posible su empleo como disolventes en procesos de extracción líquido-líquido y en procesos absorción de gases.

### *Extracción y separación*

Algunos líquidos iónicos se han utilizado como solventes en procesos de separación debido a sus propiedades de recuperación y reciclaje. Huddleston et al. [81] han reportado la remoción de sulfuros y nitruros de la gasolina y del diésel, la separación de compuestos alifáticos y aromáticos y la eliminación de contaminantes (fenoles, ácidos orgánicos y colorantes) del agua utilizando líquidos iónicos hidrofóbicos) [161].

### *Absorción de gas*

Los estudios demuestran que muchos de los contaminantes, como CO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub> y NH<sub>3</sub> pueden disolverse en líquido iónicos. Cuando las moléculas de CO<sub>2</sub> están en contacto con la fase del LI, los átomos de oxígeno del CO<sub>2</sub> forman puentes de hidrógeno con el grupo C-H del catión imidazolium por lo que los átomos de carbono pueden ser atraídos mediante interacciones

---

---

electrostáticas. La estructura del  $\text{CO}_2$  cambia por lo que resulta en una estructura que se puede absorber fácilmente en el líquido iónico [161].

### *Catalizadores*

Los líquidos iónicos no sólo pueden actuar como medios de reacción sino también como catalizadores, es decir, acelerando la velocidad de la reacción y manteniendo su naturaleza física y química después del proceso. Los líquidos iónicos basados en cloroaluminatos tiene la propiedad de ser ácidos de Lewis fuertes. Esto, asociado con el hecho de que son relativamente fáciles de manejar, hacen que estos compuestos se presenten como alternativas no volátiles a los catalizadores ácidos de Lewis convencionales, tales como  $\text{AlCl}_3$  y a los ácidos de Brönsted como el HF [26].

### *Agentes rompedores de azeótropos*

La separación de azeótropos ha sido uno de los mayores retos en destilación y procesos de membranas. Este problema es a menudo solucionado empleando agentes de extracción. Los LI son una alternativa interesante ya que: (1) dan lugar a una mínima contaminación del destilado; (2) ofrecen altas selectividades y capacidades; (3) permiten trabajar con relaciones de reflujo más bajas optimizando energéticamente la destilación extractiva; (4) pueden regenerarse mediante extracción, evaporación, secado o cristalización. Experimentalmente, han sido empleados satisfactoriamente en la separación de mezclas azeotrópicas de etanol/agua, acetona/metanol, tetrahidrofurano/agua, metilciclohexano/tolueno y ácido acético/tolueno [41].

### *Lubricantes*

Los líquidos iónicos presentan propiedades deseadas por todo buen lubricante: baja volatilidad, alta estabilidad térmica y baja temperatura de fluidez. Estudios recientes han demostrado que pueden disminuir la fricción y el desgaste en contactos metal-metal, metal-cerámico y cerámico-cerámico [41].

### *Electrolitos*

Se emplean en síntesis electroquímica, disolvente en electrodeposición de metales, baterías, supercondensadores, pilas de combustible, celdas solares y dispositivos basados en polímeros

---

---

conductores como sensores electroquímicos, músculos artificiales y dispositivos electrocrómicos [41].

### *Dispersantes y tensoactivos*

Algunos pueden ser empleados satisfactoriamente como dispersantes secundarios en pastas de pigmentos universales, solucionando de este modo los serios problemas originados por el uso de colorantes en sistemas de recubrimientos que emplean disolventes. Además, los cationes de algunos líquidos iónicos (basados en amonio) pueden actuar como tensoactivos ya que tienen estructuras similares a los tensoactivos catiónicos utilizados convencionalmente [41].

## **2.8. Aplicaciones de los líquidos iónicos utilizados en el presente trabajo**

García et al. [44] determinaron experimentalmente el equilibrio líquido-líquido de una mezcla ternaria de (tolueno + heptano + 1-allyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide) y (tolueno + heptano + 1-methyl-3-propylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide) a 313.2 K y a presión atmosférica. El efecto del doble enlace en la cadena del catión imidazolium se evaluó en términos de selectividad y capacidad de extracción.

Seoane et al. [126] reportaron datos de equilibrio de una mezcla ternaria de diferentes solventes como heptano, tolueno y ciclohexano con el líquido iónico 1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide) a 298.15 K y a presión atmosférica. El objetivo fue evaluar la capacidad como solvente para la extracción de tolueno de compuestos alifáticos.

Gaciño et al. [40] reportaron propiedades fisicoquímicas de una serie de líquidos iónicos, incluyendo el 1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide para evaluar su uso como lubricantes y como aditivos. Propiedades como densidad, índice de viscosidad, temperatura de transición vítrea, coeficiente de expansión térmica isobárica y fragilidad fueron determinadas.

Lee et al. [95] determinaron propiedades fisicoquímicas y electroquímicas de líquidos iónicos basados en los cationes sulfonium y ammonium con el anión bis(trifluoromethylsulfonyl)imide (incluyendo el triethylsulfonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide) para evaluar su uso como electrolitos en celdas solares.

---

---

Hayyan et al. [76] evaluaron el efecto de la estructura de líquidos iónicos en ventanas electroquímicas (*electrochemical windows*), incluyendo 1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide y triethylsulfonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide.

Más recientemente, Trigueiro et al. [136] utilizaron el líquido iónico triethylsulfonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide para ser probado como electrolito en supercondensadores, integrados con base de hojas de grafeno y nanotubos de carbono incluyendo la filtración de nanomateriales para producir una película de electrodo.

Hiraga et al. [78] utilizaron diferentes líquidos iónicos, incluyendo el 1,3-dihydroxyimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide, para evaluar las propiedades del solvente, así como la acidez y basicidad, dipolaridad/polarizabilidad de mezclas del LI con dióxido de carbono supercrítico para aplicarse en el tratamiento de compuestos derivados de biomasa.

---

---

## CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA

En este capítulo se presentan la metodología que se utilizó en el desarrollo experimental y en la parte teórica.

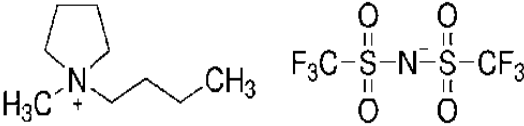
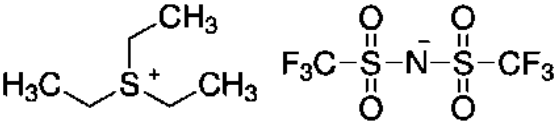
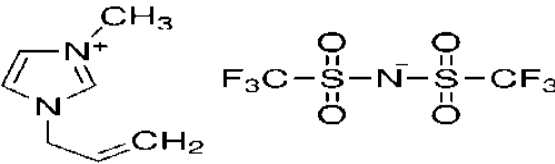
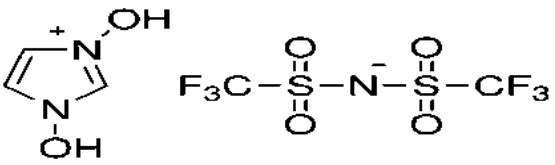
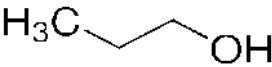
El desarrollo experimental consiste de la determinación de densidades, viscosidades y velocidad del sonido de líquidos iónicos puros y sus mezclas con alcohol, así como la validación del método y de los datos experimentales. La parte teórica comprende la comparación de modelos para la predicción de densidades y viscosidades de mezclas binarias de líquidos iónicos.

### 3.1. DESARROLLO EXPERIMENTAL

#### 3.1.1. Descripción de las muestras

Los líquidos iónicos fueron adquiridos de Sigma Aldrich. Los líquidos iónicos seleccionados fueron los siguientes: 1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide ([Bmpyr][TFSI]), triethylsulfonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide ([Et<sub>3</sub>S][TFSI]), 1-allyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide ([Amim][TFSI]) y 1,3-dihydroxyimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide ([OH<sub>2</sub>Im][TFSI]). En la Tabla 3.1 se muestra las características de cada uno de ellos.

**Tabla 3.1. Líquidos iónicos utilizados en el presente trabajo**

| Nombre                                                          | Fuente        | Peso molecular<br>( $g \cdot mol^{-1}$ ) | Pureza (%) | Contenido de agua <sup>a</sup> | Número de CAS | Estructura                                                                            |
|-----------------------------------------------------------------|---------------|------------------------------------------|------------|--------------------------------|---------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| 1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | Sigma-Aldrich | 422.41                                   | ≥ 98.0     | ≤ 2.0 %                        | 223437-11-4   |    |
| Tryethylsulfonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide             | Sigma-Aldrich | 399.39                                   | ≥ 99.0     | ≤ 200 ppm                      | 321746-49-0   |    |
| 1-allyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide   | Sigma-Aldrich | 403.32                                   | ≥ 98.5     | ≤ 1.0 %                        | 655249-87-9   |    |
| 1,3-dihydroxyimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide      | Sigma-Aldrich | 381.23                                   | 98.0       | < 200 ppm                      | 951021-12-8   |   |
| 1-propanol                                                      | Fluka         | 60.10                                    | ≥ 99.8     | ≤ 0.1 %                        | 71-23-8       |  |

<sup>a</sup>proporcionado por el proveedor

---

---

### 3.1.2. Principio de operación del densímetro de tubo vibrante

Esta técnica de medición fue introducida por primera vez por Kratky et al. en 1969 [90]. Ha sido ampliamente utilizada debido a su exactitud, rapidez y a la poca cantidad de muestra que se requiere.

El densímetro de tubo vibrante DSA 5000 M determina dos propiedades físicas independientes usando una sola muestra. Está equipado con una celda de densidad y una celda de velocidad del sonido las cuales combinan el método vibrante y oscilante de un tubo en forma de “U” (Figura 3.1).

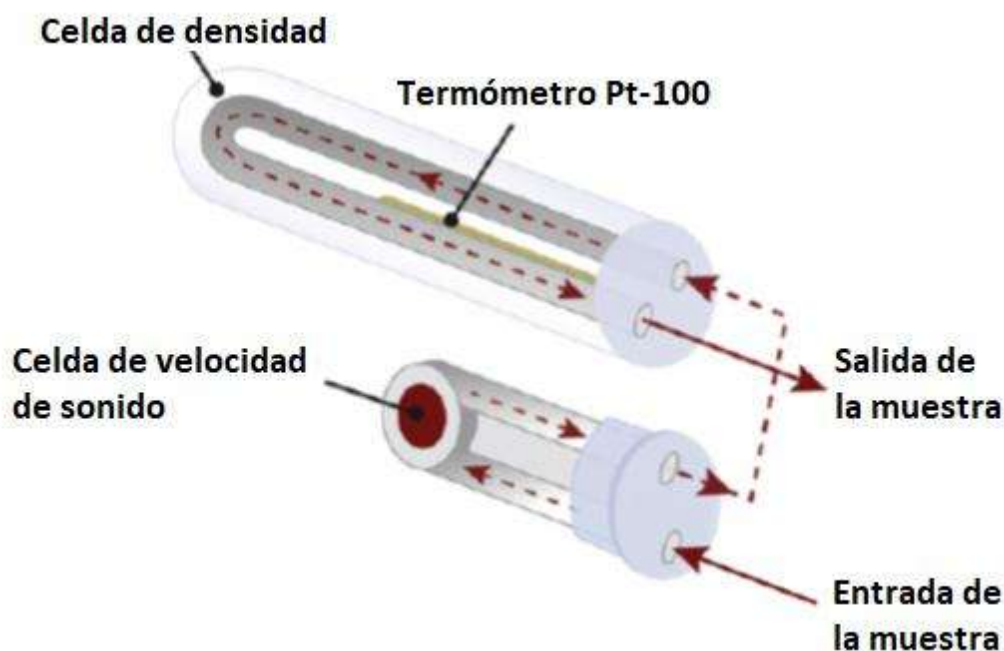


Figura 3.1. Diagrama de las celdas de densidad y velocidad de sonido [38].

La muestra es introducida en un tubo de borosilicato de vidrio el cual a través de una fuerza electromagnética es excitado para producir una vibración a una frecuencia característica. Esta frecuencia cambia dependiendo de la densidad de la muestra. El objetivo es determinar el periodo natural de vibración del tubo que contiene la muestra y cuya densidad se desea conocer. La densidad de fluido es función de la masa del tubo y del líquido que contiene en su interior. La densidad es calculada de la siguiente forma:

$$\rho = KA \cdot Q^2 \cdot f_1 - KB \cdot f_2 \quad (3.1)$$

donde  $KA$  y  $KB$  son constantes características del equipo,  $Q$  es el cociente del periodo de oscilación del tubo dividido entre el periodo de oscilación de referencia del oscilador,  $f_1$  y  $f_2$  son términos de corrección por temperatura, viscosidad y no linealidad. La determinación de la densidad y la velocidad de sonido emplea un oscilador de referencia el cual se encuentra lleno con una sustancia de referencia y es sometida a las mismas condiciones del oscilador que contiene la muestra. Al dividir el periodo de oscilación de la celda de medición y del oscilador de referencia, ciertos efectos térmicos son compensados. La corrección por viscosidad es necesaria ya que puede tener efectos en el periodo de oscilación que conduzcan a un error en la determinación de la densidad. La temperatura es determinada por un termómetro de platino Pt-100 y controlada por un termostato Peltier [38]. Las especificaciones del fabricante se muestran en la Tabla 3.2.

**Tabla 3.2 Especificaciones del Densímetro DSA 5000 M Anton Paar**

| Intervalo de medición               |                            |
|-------------------------------------|----------------------------|
| Densidad                            | 0 a 3 g/cm <sup>3</sup>    |
| Velocidad del sonido                | 1000 a 2000 m/s            |
| Temperatura                         | 0 a 70 °C                  |
| Presión                             | 0 a 3 bar                  |
| Precisión                           |                            |
| Densidad                            | 0.000005 g/cm <sup>3</sup> |
| Velocidad del sonido                | 0.5 m/s                    |
| Repetibilidad (desviación estándar) |                            |
| Densidad                            | 0.000001 g/cm <sup>3</sup> |
| Velocidad del sonido                | 0.1 m/s                    |
| Temperatura                         | 0.001 °C                   |

En las Figuras 3.2 y 3.3 se muestra una vista superior y lateral, respectivamente, del densímetro de tubo vibrante. De acuerdo a la Figura 3.2, el densímetro consta de un bloque aislante que sujeta los extremos del tubo y lo aísla de vibraciones externas. En la sección

---

---

libre del tubo, se encuentran dos magnetos montados y en la base del densímetro se localizan dos bobinas que se prolongan hasta los magnetos. Una fuente de energía eléctrica se conecta a la bobina de impulsión y el contador de frecuencia se conecta a la bobina de captación. El densímetro opera al activar la bobina de impulsión con la fuente de energía eléctrica aplicando una fuerza en el magneto haciendo que el tubo vibre; un circuito de retroalimentación optimiza el tiempo entre cada pulso. Al vibrar transversalmente, el tubo hace que el segundo magneto se mueva entrando y saliendo de la bobina de captación, este movimiento induce una corriente en una frecuencia o periodo propio de la oscilación, el osciloscopio recibe esta señal y mide la frecuencia de resonancia del tubo [97].

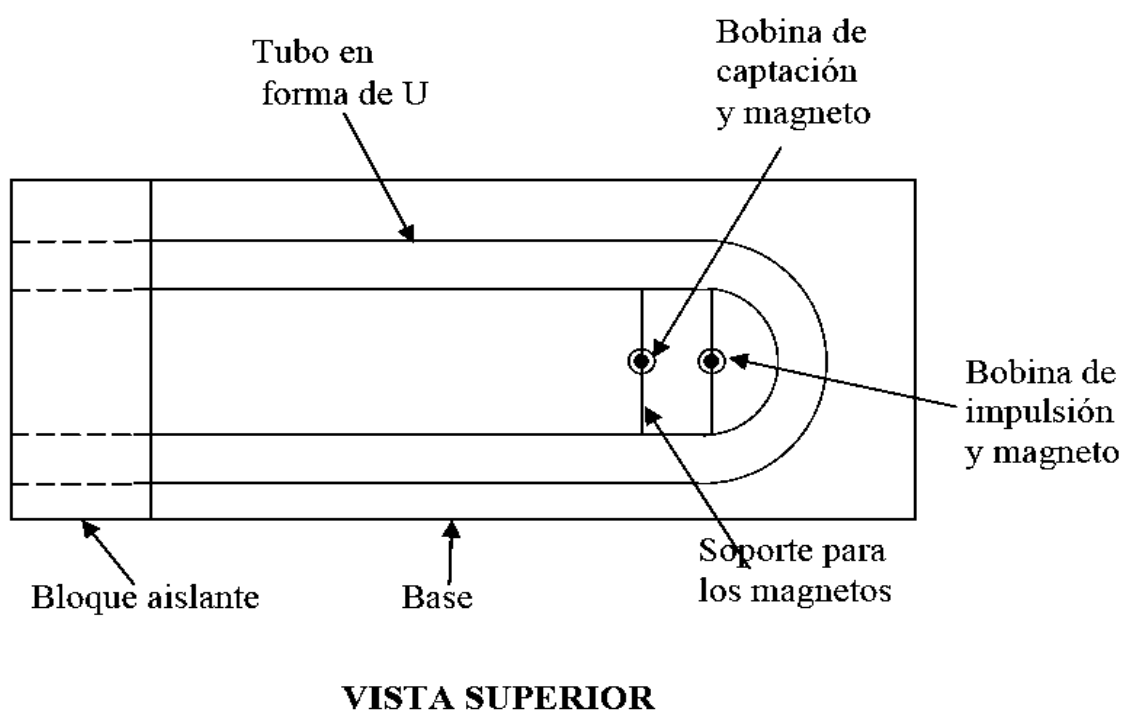
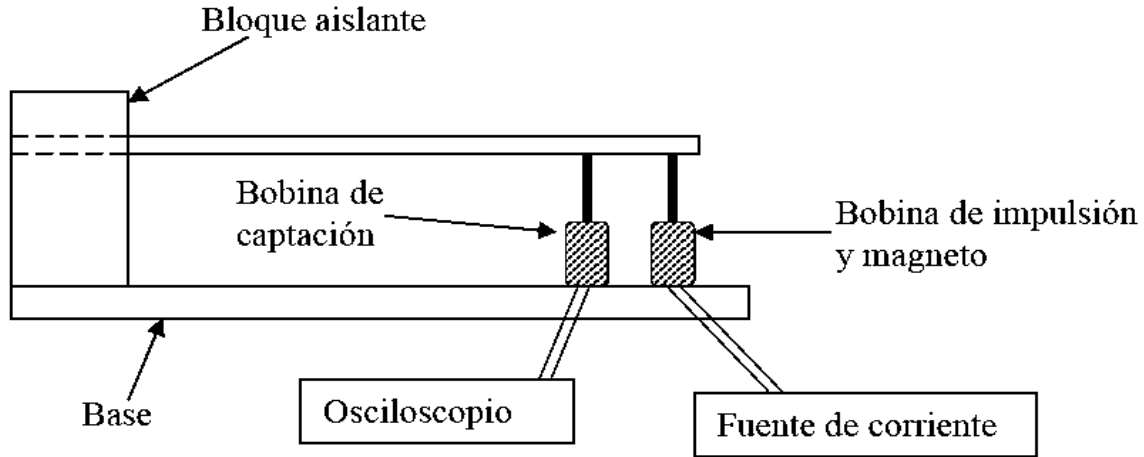


Figura 3.2. Vista superior del densímetro DSA 5000 M.



### VISTA LATERAL

Figura 3.3. Vista lateral del densímetro DSA 5000 M.

Para la determinación de la velocidad del sonido, el densímetro DSA 5000 M utiliza la técnica del tiempo de propagación. La muestra se coloca entre dos transductores ultrasónicos piezoeléctricos. Uno de los transductores emite ondas de sonido a través de la celda con la muestra a una frecuencia de aproximadamente 3 MHz. El segundo transductor recibe dichas ondas. La velocidad de sonido se obtiene dividiendo la distancia conocida entre los dos transductores y el tiempo de propagación de la onda de sonido [38]. La ecuación utilizada por el fabricante es la siguiente:

$$u = \frac{l \cdot (1 + 1.6 \times 10^{-5} \times \Delta T)}{\frac{P_s}{512} - \tau - f_3} \quad (3.2)$$

donde  $u$  es la velocidad de sonido,  $l$  es la longitud de la trayectoria de la onda de sonido (5 mm aproximadamente),  $\Delta T$  es la desviación de temperatura a 293 K,  $P_s$  es el tiempo de propagación de la onda,  $\tau$  es la constante del equipo para la velocidad del sonido y  $f_3$  es el término de corrección por temperatura para  $\tau$ .

---

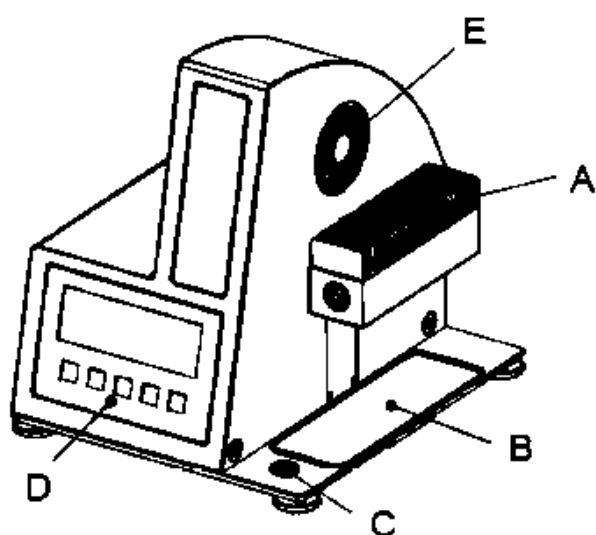
---

### 3.1.3. Principio de operación del viscosímetro de balón rodante

Esta técnica ha sido ampliamente utilizada para determinar la viscosidad de líquidos. Entre las ventajas que presenta se encuentran: su facilidad de operación, una cantidad mínima de muestra (lo que permite alcanzar el equilibrio térmico rápidamente), la medición repetitiva, amplios intervalos de viscosidades dependiendo del diámetro del tubo y ángulo de inclinación. Las especificaciones del equipo se describen en la Tabla 3.3 y en la Figura 3.4 se muestra la vista frontal y trasera del viscosímetro AMVn.

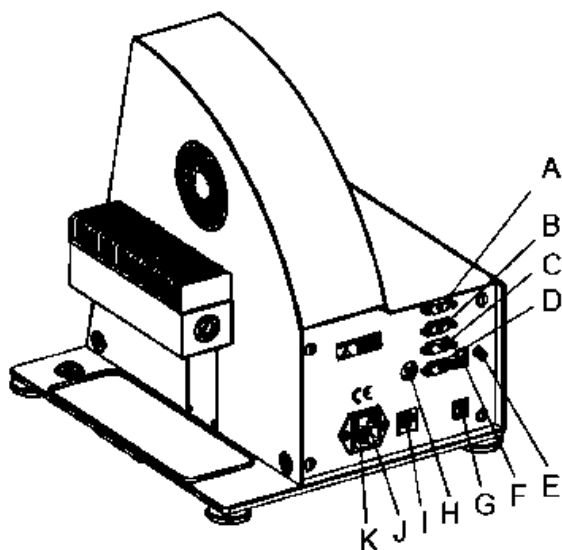
**Tabla 3.3. Especificaciones del Viscosímetro AMVn Anton Paar**

| Temperatura           |                  |
|-----------------------|------------------|
| Intervalo de medición | 10 a 70 °C       |
| Resolución            | 0.01 °C          |
| Presión               | < 0.05 °C        |
| Viscosidad            |                  |
| Intervalo de medición | 0.3 a 2500 mPa s |
| Repetibilidad         | < 0.1 %          |
| Reproducibilidad      | < 0.5 %          |
| Tiempo                |                  |
| Intervalo de medición | 0 a 250 s        |
| Resolución            | 0.001 s          |
| Presión               | < 0.002 s        |



- A Celda para el capilar
- B Plato de goteo
- C Nivel
- D Pantalla y teclado
- E Ventilador

**VISTA FRONTAL**



- A Interfase SPV o SP3-V (COM3)
- B Interfase para impresora (COM2)
- C Interfase para densímetro (COM1)
- D Interfase par computadora
- E Ajuste de contraste en la pantalla
- F Interfase S-BUS
- G Placa de modelo
- H Conexión de teclado
- I Placa de especificaciones
- J Interruptor
- K Conector

**VISTA TRASERA**

Figura 3.4. Esquema del viscosímetro de balón rodante AMVn.

El principio de operación del viscosímetro AMVn se basa en determinar el tiempo de caída de un balón de densidad conocida a través de un tubo capilar que contiene la muestra. Está basado en la ley de Stokes. La expresión matemática que emplea este equipo para relacionar el tiempo y la viscosidad es la siguiente:

$$\eta_D = Kt(\rho_b - \rho_m) \quad (3.3)$$

donde  $\eta_D$  es la viscosidad dinámica,  $t$  es el tiempo que tarda en caer el balón a través del tubo,  $\rho_b$  es la densidad del balón y  $\rho_m$  es la densidad de la muestra,  $K$  es la constante de calibración la cual se determina experimentalmente. El balón desciende debido a la diferencia de densidades entre el balón y el fluido, por lo que la densidad del balón siempre debe ser mayor que la del fluido. Si existe un incremento en la densidad del fluido se reducirá la velocidad de caída del balón y esto indicaría un valor de viscosidad mayor. El tiempo de caída dependerá de la viscosidad de la muestra. El control de la temperatura se realiza con un termómetro de resistencia de platino Pt-100 [12, 73]. En la Figura 3.5 se muestran las variables involucradas en el principio de medición del viscosímetro de balón rodante.

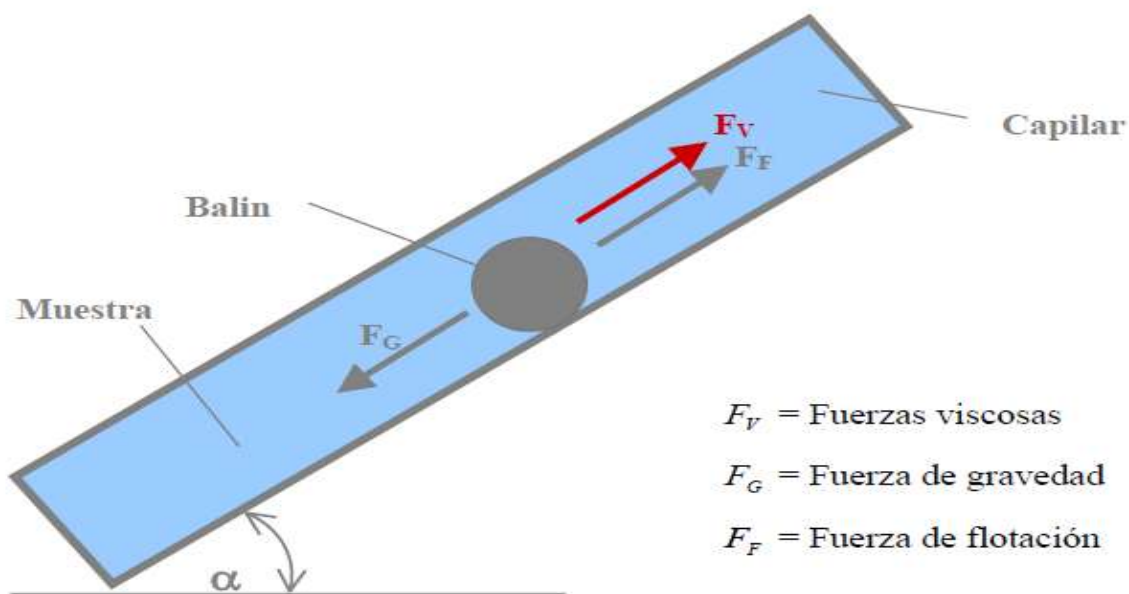


Figura 3.5. Esquema de un capilar de balón rodante.

---

---

### 3.1.4. Validación del método y de datos experimentales

Para la validación del método de medición, se determinó la densidad, viscosidad y velocidad del sonido del líquido iónico [Bmppyrr][TFSI], el cual ha tenido diversas aplicaciones y muchas de sus propiedades han sido determinadas, incluyendo densidad y viscosidad. Se obtuvo el porcentaje de desviación entre los datos experimentales y su comparación con diferentes autores por medio de la ecuación:

$$PD = \left( \frac{\rho^{exp} - \rho^{cal}}{\rho^{exp}} \right) \cdot 100 \quad (3.4)$$

El porcentaje de error promedio absoluto se calcula con:

$$AAPD = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{v^{exp} - v^{cal}}{v^{exp}} \right| \quad (3.5)$$

Para la validación de los datos experimentales, se utilizaron ecuaciones reportadas en la literatura, las cuales se han utilizado para representar los datos de densidades y viscosidades de líquidos iónicos. Las ecuaciones que se utilizaron para representar las densidades de los líquidos iónicos puros fue la propuesta por Gardas y Coutinho [45].

$$\rho = \frac{M}{NV(a + bT + cP)} \quad (3.6)$$

donde  $\rho$  es la densidad en  $kg \cdot m^{-3}$ ;  $M$  es el peso molecular en  $kg \cdot mol^{-1}$ ;  $N$  es el número de Avogadro;  $V$  es el volumen molar en  $A^3$ ;  $T$  es la temperatura en  $K$  y  $P$  es la presión en  $MPa$ . Los parámetros  $a$ ,  $b$ , y  $c$  se obtienen a partir de los datos experimentales.

Para el caso de la viscosidad se utilizaron las ecuaciones de Arrhenius (Ec. 7), Vogel-Fulcher-Tamman (Ec. 3.8) y la ecuación de que considera a la fluidez como el inverso de la viscosidad (Ec. 3.9):

$$\ln(\eta) = A + \frac{B}{RT} \quad (3.7)$$

$$\ln(\eta) = A + \frac{B}{T - C} \quad (3.8)$$

$$\left(\frac{1}{\eta}\right)^{\emptyset} = A + BT \quad (3.9)$$

donde  $\eta$  es la viscosidad,  $R$  es la constante de los gases,  $T$  es la temperatura en  $K$ ,  $\emptyset$  es un exponente característico,  $A, B$  y  $C$  son constantes.

### 3.1.5. Metodología para la medición de densidades y velocidades del sonido de líquidos iónicos

La determinación de densidades de líquidos iónicos puros y sus mezclas se realizó en un intervalo de temperatura de (293.15 a 343.15) K a presión atmosférica. Para el caso de las mezclas, se determinó la densidad en todo el intervalo de concentración de fracción mol (0 a 1).

Las mezclas fueron preparadas gravimétricamente en una balanza analítica Ohaus Modelo AS120S con una precisión de 0.1 mg. Estas fueron analizadas inmediatamente después de ser preparadas para evitar pérdidas por evaporación del alcohol. Antes de introducir la muestra en el equipo, la celda se limpia varias veces con agua destilada y acetona, y posteriormente se seca con aire por medio de la bomba que se encuentra integrada al equipo. La muestra (aproximadamente 3.0 ml) se introduce en la celda con una jeringa evitando que se formen burbujas de aire. Una vez que se alcanza el equilibrio térmico, el equipo proporciona los valores de la densidad y velocidad del sonido en todo el intervalo de temperatura programado. Este procedimiento se realizó para cada uno de los sistemas de mezclas de líquido iónico + 1-propanol.

Para las mezclas binarias, los volúmenes molares de exceso se calculan con la ecuación:

$$V^E = \frac{x_1 M_1 + x_2 M_2}{\rho} - \frac{x_1 M_1}{\rho_1} - \frac{x_2 M_2}{\rho_2} \quad (3.10)$$

donde  $x_i$ ,  $M_i$  y  $\rho_i$  son la fracción mol, peso molecular y densidad del componente  $i$ , respectivamente. El volumen molar de exceso se puede representar con la ecuación de Redlich-Kister de cuatro parámetros:

$$Y = x_2(1 - x_2) \sum_{i=0}^4 A_i(2x_2 - 1)^i \quad (3.11)$$

La velocidad de sonido está relacionada con la compresibilidad isoentrópica por medio de la ecuación de Laplace–Newton:

$$k_s = \frac{1}{u^2 \rho} \quad (3.12)$$

donde  $k_s$  es la compresibilidad isoentrópica,  $u$  es la velocidad de sonido y  $\rho$  es la densidad de la mezcla. Las desviaciones de la velocidad de sonido se pueden calcular con:

$$\Delta u = u - (x_1 u_1 - x_2 u_2) \quad (3.13)$$

donde  $u$ ,  $u_1$  y  $u_2$  son las velocidades de sonido de la mezcla y los subíndices 1 y 2 representan a los componentes. Las desviaciones de la compresibilidad isoentrópica se calcularon con la siguiente ecuación:

$$\Delta k_s = k_s - (x_1 k_{s1} - x_2 k_{s2}) \quad (3.14)$$

donde  $k_s$ ,  $k_{s1}$  y  $k_{s2}$  son las compresibilidades de la mezcla, y los subíndices 1 y 2 representan a los componentes.

### 3.1.6. Metodología para la medición de viscosidades de líquidos iónicos

La determinación de las viscosidades de líquidos iónicos puros y sus mezclas se realizó en un intervalo de temperatura de (293.15 a 343.15) K a presión atmosférica. Para el caso de las mezclas, se determinó la viscosidad en todo el intervalo de concentración de fracción mol (0 a 1). Las mezclas fueron preparadas gravimétricamente en una balanza analítica Ohaus Modelo AS120S con una precisión de 0.1 mg. Las muestras fueron utilizadas inmediatamente después de ser preparadas para evitar pérdidas por evaporación del alcohol.

El viscosímetro cuenta con cuatro capilares diferentes, cada uno de ellos se utiliza para diferentes intervalos de viscosidad. En la Tabla 3.4 se muestran las especificaciones de los capilares.

**Tabla 3.4. Características de los capilares para la medición de la viscosidad**

| Diámetro del capilar (mm) | Volumen aproximado ( $\mu$ l) | Diámetro del balón (mm) | Intervalo de viscosidad recomendado (mPa·s) |
|---------------------------|-------------------------------|-------------------------|---------------------------------------------|
| 1.6                       | 400                           | 1.5                     | 0.3 – 10                                    |
| 1.8                       | 510                           | 1.5                     | 2.5 – 70                                    |
| 3.0                       | 1500                          | 2.5                     | 20 – 230                                    |
| 4.0                       | 2500                          | 3.0                     | 80 – 2500                                   |

Se utilizaron los capilares de 1.6, 1.8 y 3.0. El capilar se limpia con agua destilada y con acetona, y posteriormente se seca con aire caliente para eliminar cualquier residuo. El balón se coloca dentro del capilar. La muestra de la cual se desea determinar la viscosidad se succiona con una jeringa (que se coloca en la parte superior del capilar) para introducirla en el tubo. El capilar se coloca en el cabezal del equipo y una vez alcanzado el equilibrio térmico, se empieza a determinar las lecturas del tiempo a diferentes temperaturas y a presión atmosférica. Las variables a introducir en el equipo son el método de medición, el cual incluye el ángulo de inclinación, la temperatura, el diámetro del capilar y el número de repeticiones. Este mismo procedimiento se realizó para cada una de las mezclas. El viscosímetro cuenta con seis diferentes ángulos de inclinación: (20, 30, 40, 50, 60 y 70)°. Las mediciones se realizaron a 50° debido a que a esa inclinación se presentó un menor porcentaje de error. En la Figura 3.6 se observa la parte interna de la celda donde se coloca el capilar para realizar las mediciones a diferentes ángulos de inclinación.

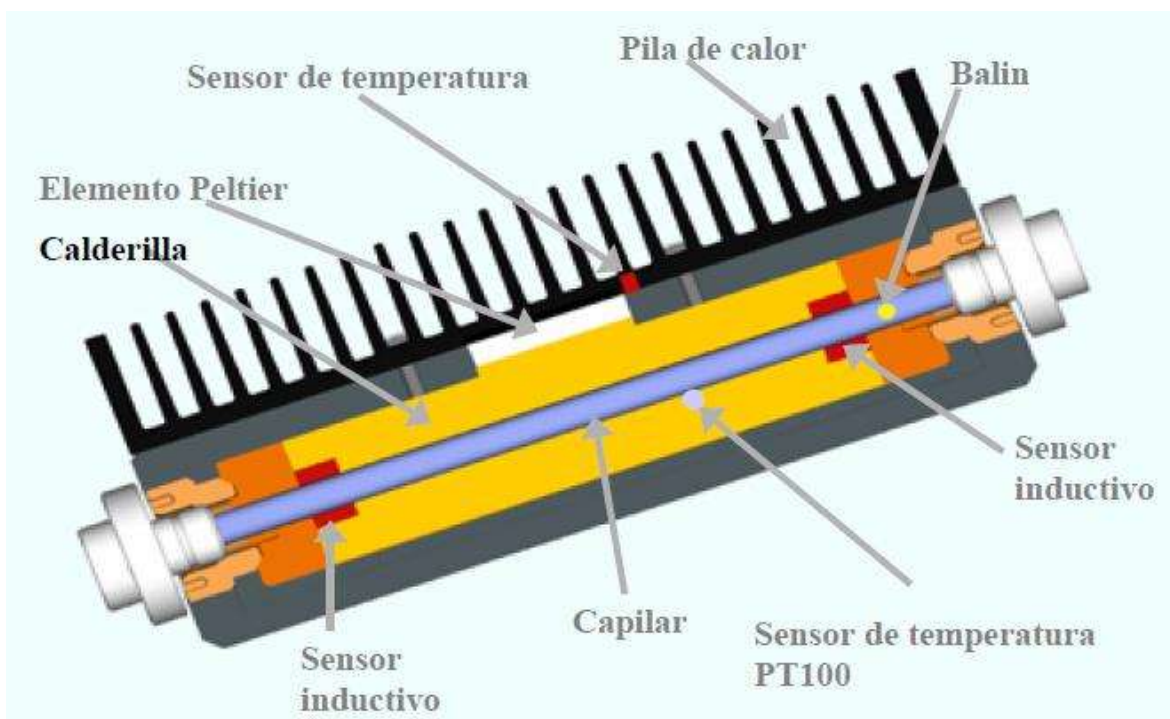


Figura 3.6. Corte transversal de la celda del capilar para la medición de la viscosidad.

Las desviaciones de viscosidad se pueden calcular con

$$\Delta\mu = \mu - (x_1\mu_1 + x_2\mu_2) \quad (3.15)$$

donde  $x_1$ ,  $x_2$  y  $\mu_1$ ,  $\mu_2$  son las fracciones molares y viscosidades para el componente 1 y 2, respectivamente.

---

---

## 3.2. DESARROLLO TEÓRICO

### 3.2.1. Ecuaciones para la densidad de líquidos iónicos puros

Existen diferentes modelos reportados en la literatura para la predicción de densidades de líquidos iónicos. A continuación, se describen los modelos.

**a) Gardas y Coutinho [45]:**

$$\rho = \frac{M_w}{NV(a + bT + cp)} \quad (3.16)$$

donde

$$a = 0.8005, b = 0.0006652, c = -0.0005919$$

con

$$V = \frac{M}{N\rho} \quad (3.17)$$

donde

$M_w$  es el peso molecular,  $N$  es el número de Avogadro,  $V$  es el volumen molar a 25°C,  $a = 0.8005$ ,  $b = 0.0006652$ , y  $c = -0.0005919$ .

**b) Linear Generalized Model [140]:**

$$\rho = \left(\frac{A}{B}\right) + \left(\frac{2}{7}\right) \cdot \left(\frac{A \cdot \ln B}{B}\right) \cdot \frac{(T - T_b)}{(T_c - T_b)} \quad (3.18)$$

$$A = a + b \cdot \frac{M}{V_c} \quad (3.19)$$

$$B = \left(\frac{c}{V_c} + \frac{d}{M}\right) \cdot V_c^\delta \quad (3.20)$$

donde  $T_b$ ,  $T_c$  son las temperaturas de ebullición y temperatura crítica, respectivamente,  $M$  es el peso molecular,  $V_c$  es el volumen crítico,  $a = 0.3411$ ,  $b = 2.0443$ ,  $c = 0.5386$ ,  $d = 0.0393$  y  $\delta = 1.0476$ . Las constantes anteriores fueron determinadas por los autores utilizando los datos de literatura.

---

---

**c) Racket [111]:**

$$\rho = \rho_c Z_c^{-(1-T_r)^{2/7}} \quad (3.21)$$

$$\rho_c = \frac{M}{V_c}, \quad Z_c = \frac{P_c V_c}{RT_c}, \quad T_r = \frac{T}{T_c} \quad (3.22)$$

donde

$\rho_c$  es la densidad crítica,  $Z_c$  es el factor de compresibilidad crítico,  $T_r$  es la temperatura reducida,  $M$  es el peso molecular,  $V_c$  es el volumen crítico,  $P_c$  es la presión crítica,  $T_c$  es la temperatura crítica.

**d) Valderrama y Abu-Sharkh [137]:**

$$\rho = \left(0.01256 + 0.9533 \frac{M}{V_c}\right) \left[\left(\frac{0.0039}{M} + \frac{0.2987}{V_c}\right) V_c^{1.033}\right]^{\gamma(T)} \quad (3.23)$$

$$\gamma(T) = -\left[\frac{(1-T_r)}{(1-T_{br})}\right]^{2/7} \quad (3.24)$$

$$T_{br} = \frac{T_b}{T_c} \quad (3.25)$$

donde

$T_{br}$  es la temperatura reducida al punto normal de ebullición.

**e) Valderrama y Abu-Sharkh [137]:**

$$\rho = \left(\frac{MP_c}{RT_c}\right) \left[\left(0.3445 \frac{P_c}{RT_c}\right) V_c^{1.0135}\right]^{-[1+(1-T_r)^{2/7}]/[1+(1-T_{br})^{2/7}]} \quad (3.26)$$

**f) Yen y Woods [159]:**

$$\rho = \rho_c \left[1 + \sum_{i=1}^4 k_i (1-T_r)^{i/3}\right] \quad (3.27)$$

$$k_1 = 17.4425 - 214.578 Z_c + 989.625 Z_c^2 - 1522.06 Z_c^3 \quad (3.28)$$

---

---


$$Z_c < 0.26: k_2 = -3.28257 + 13.6377Z_c + 107.4844Z_c^2 - 384.211Z_c^3 \quad (3.29)$$

$$Z_c > 0.26: k_2 = 60.2091 - 402.063Z_c + 501.0Z_c^2 + 641.0Z_c^3 \quad (3.30)$$

$$k_3 = 0; \quad k_4 = 0.93 - k_2 \quad (3.31)$$

**g) Yamada y Gunn [157]:**

$$\rho = \rho_c (0.29056 - 0.08775\omega)^{-(1-T_r)^{2/7}} \quad (3.32)$$

$$\omega = \frac{\alpha}{\beta} \quad (3.33)$$

$$\alpha = -\ln \frac{P_c}{1.01325} - 5.97214 + \frac{6.09648}{T_{br}} + 1.28862 \cdot \ln T_{br} - 0.169347 T_{br}^6 \quad (3.34)$$

$$\beta = 15.2518 - \frac{15.6875}{T_{br}} - 13.4721 \cdot \ln T_{br} + 0.43577 T_{br}^6 \quad (3.35)$$

donde  $\omega$  es el factor acéntrico.

**h) Reid y Prausnitz [113]:**

$$\rho = \rho_c [1 + 0.85(1 - T_r) + (1.6916 + 0.984\omega)(1 - T_r)^{1/3}] \quad (3.36)$$

**i) Mchaweh et al. [98]:**

$$\rho(T) = \rho_c \left( 1 + 1.169\tau^{\frac{1}{3}} + 1.818\tau^{\frac{2}{3}} - 2.658\tau + 2.161\tau^{\frac{4}{3}} \right) \quad (3.37)$$

$$\tau = 1 - \frac{(T/T_c)}{[1 + m(1 - \sqrt{T/T_c})]^2} \quad (3.38)$$

$$m = 0.480 + 1.574\omega - 0.176\omega^2 \quad (3.39)$$

**j) Gunn y Yamada [72]:**

$$\rho = \frac{V_0}{[V_1(1 - \omega V_2)]} \quad (3.40)$$

---

---


$$V_0 = \frac{P_c M}{[RT_c(0.2920 - 0.0967\omega)]} \quad (3.41)$$

donde

$$\begin{aligned} 0.2 < T_r < 0.8: V_1 \\ &= 0.33593 - 0.33953T_r + 1.51941T_r^2 \\ &\quad - 2.02512T_r^3 + 1.11422T_r^4 \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} 0.8 < T_r < 1.0: V_1 \\ &= 1.0 + 1.3(1 - T_r)^{1/2} \cdot \log(1 - T_r) \\ &\quad - 0.50879(1 - T_r) - 0.91534(1 - T_r)^2 \end{aligned} \quad (3.43)$$

$$T_r > 0.2: V_2 = 0.29607 - 0.09045T_r - 0.04842T_r^2 \quad (3.44)$$

**k) Hankinson y Thomson [74]:**

$$\rho = \frac{\rho_c}{[V^{(0)}(1 - \omega V^{(1)})]} \quad (3.45)$$

donde

$$\begin{aligned} V^{(0)} &= 1 - 1.5281(1 - T_r)^{\frac{1}{3}} + 1.4390(1 - T_r)^{\frac{2}{3}} - \\ &\quad 0.8144(1 - T_r) + 0.19045(1 - T_r)^{4/3} \end{aligned} \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned} V^{(1)} &= (-0.296123 + 0.386914T_r - 0.0427258T_r^2 \\ &\quad - 0.0480645T_r^3)/(T_r - 1.00001) \end{aligned} \quad (3.47)$$

**l) Gene Expression Programming [104]:**

$$\rho = A + B + C \quad (3.48)$$

donde

$$A = \frac{3M_w + \omega}{V_c - \frac{5.837703}{\omega}} \quad (3.49)$$

$$B = \sqrt{\left(-2.586557 + \frac{T}{26.60977} - e^\omega\right)^{-1.92067}} \quad (3.50)$$

---

---


$$C = \frac{1}{\sqrt{673.6503P_c} (2T_b - M_w - 803.7)} \quad (3.51)$$

### *Estimación de las propiedades críticas*

Para el cálculo de las propiedades críticas se utilizaron los métodos de Joback-Reid y Lydersen:

Método de Joback-Reid:

$$T_b(K) = 198 + \sum T_{bi} \quad (3.52)$$

$$T_m(K) = 122.5 + \sum T_{mi} \quad (3.53)$$

$$T_c(K) = T_b \left[ 0.58 + 0.965 \sum T_{ci} - \left( \sum T_{ci} \right)^2 \right]^{-1} \quad (3.54)$$

$$P_c(bar) = T_b \left[ 0.113 + (0.0032 + N_A) - \sum P_{ci} \right]^{-2} \quad (3.55)$$

$$V_c \left( \frac{cm^3}{mol} \right) = 17.5 + \sum V_{ci} \quad (3.56)$$

donde  $T_{bi}$ ,  $T_{mi}$ ,  $T_{ci}$  y  $V_{ci}$  es la temperatura de ebullición, temperatura de punto de fusión, temperatura crítica y volumen crítico, respectivamente.

Método de Lydersen

$$T_c = \frac{T_b}{0.567 + \sum G_i - \sum G_i^2} \quad (3.57)$$

$$P_c = \frac{M}{(0.34 + \sum G_i)^2} \quad (3.58)$$

$$V_c = 40 + \sum G_i \quad (3.59)$$

---

---

### 3.2.2. Ecuaciones para la correlación de viscosidades de mezclas binarias de líquidos iónicos

En esta sección se realizó la correlación de las viscosidades cinemáticas de mezclas binarias de líquidos iónicos con solventes orgánicos y con agua, utilizando las ecuaciones de Vásquez-Castillo [142], Nava-Ríos [105] y Eyring-MTSM [4].

#### *Ecuación de Vásquez-Castillo*

La ecuación de Vásquez-Castillo et al. [142] fue desarrollada originalmente para viscosidades cinemáticas de soluciones electrolíticas. Está basada en la teoría de Eyring y asume que en la mezcla están ocurriendo tres tipos interacciones: entre ion-ion, molécula-molécula y ion-molécula. El modelo es el siguiente:

$$\ln(v) = \ln\left(\frac{v_1 M_1}{M}\right) + x_2^3 G_{123}^* + 3x_2^2 G_{13}^* + 3x_2 G_{23}^* \quad (3.60)$$

$$M = \sum x_i M_i \quad (3.61)$$

$$x_2 = \frac{1 - x_1}{1 + z} \quad (3.62)$$

$$x_3 = z \cdot x_2 \quad (3.63)$$

donde  $v$  y  $v_1$  son las viscosidades cinemáticas de la mezcla y del solvente;  $M_1$  y  $M$  son los pesos moleculares del solvente y de la mezcla;  $x_1$ ,  $x_2$  y  $x_3$  son las concentraciones del solvente, catión y anión;  $z$  es el grado de disociación de los iones (se asume una disociación completa),  $G_{123}^*$ ,  $G_{13}^*$  y  $G_{23}^*$  son parámetros dependientes de la temperatura.

#### *Ecuación de Nava-Ríos*

Nava-Ríos et al. [105] desarrollaron una ecuación basada en una regla de mezclado para la energía de activación de Gibbs. Este modelo se utilizó para viscosidades cinemáticas de sistemas binarios con alcanos, alcoholes, compuestos aromáticos, freones, ésteres y ácidos. La ecuación es:

$$\ln(v_m) = -\ln(M_{mix}) + x_1 \ln(v_1) + x_1 \ln(M_1) + x_2 \ln(v_2) + x_2 \ln(M_2) + x_1 x_2 \left[ \ln(\delta v_{12}) + x_1^3 \ln(\delta g_{12}^*) + x_2^3 \ln(\delta g_{21}^*) + x_1 \ln\left(\frac{M_{112}^3}{M_1^2 M_2}\right) + x_2 \ln\left(\frac{M_{122}^3}{M_1 M_2^2}\right) \right] \quad (3.64)$$

El peso molecular de la mezcla se calcula con:

$$M_{mix} = \sum_{i=1}^n x_i M_i \quad (3.65)$$

$$M_{ijk} = \frac{M_i + M_j + M_k}{3} \quad (3.66)$$

donde  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $v_1$ ,  $v_2$ ,  $M_1$  y  $M_2$  son las concentraciones, viscosidades cinemáticas y pesos moleculares, del componente 1 y 2, respectivamente,  $\delta v_{12}$ ,  $\delta g_{12}^*$  y  $\delta g_{21}^*$  son parámetros que se obtienen de los datos experimentales.

#### *Ecuación de Eyring-MTSM*

El modelo de Eyring-MTSM (*Modified Two Suffix Margules*) [4] se desarrolló para viscosidades dinámicas de mezclas binarias de 122 líquidos iónicos. Esta ecuación se basa en una modificación al modelo de “Two-Suffix-Margules” aplicando la teoría de Eyring y el modelo de la energía de Gibbs. La ecuación es:

$$\ln(\eta_{mix}) = x_1 \ln(\eta_1) + x_2 \ln(\eta_2) + \alpha_{12} X_{12} X_{21} \quad (3.67)$$

$$X_{12} = \frac{x_1 G_{12}}{x_1 G_{12} + x_2} \quad (3.68)$$

$$X_{21} = \frac{x_2 G_{21}}{x_2 G_{21} + x_1} \quad (3.69)$$

$$G_{12} = \exp\left(-\frac{\tau_{12}}{RT}\right) \quad (3.70)$$

$$G_{21} = \exp\left(-\frac{\tau_{21}}{RT}\right) \quad (3.71)$$

---

---

donde  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $\eta_1$ ,  $\eta_2$  son las concentraciones y viscosidades dinámicas del componente 1 y 2, respectivamente,  $R$  es la constante de los gases (8.314 J/mol-K),  $\alpha_{12}$ ,  $\tau_{12}$  y  $\tau_{21}$  son parámetros ajustables.

En el presente trabajo se utilizaron estas tres ecuaciones para correlacionar las viscosidades cinemáticas de 72 sistemas binarios de líquidos iónicos con compuestos orgánicos (3650 puntos) y 36 sistemas de líquidos iónicos con agua (2027 puntos). Los sistemas incluyen a los cationes sulfonium, imidazolium, ammonium y pyridinium, ammonium, pyrrolidinium y piperidinium, y a los aniones bis(trifluoromethylsulfonyl)imide, tetrafluoroborate, hexafluorophosphate, nitrate, thiocyanate, dimethylphosphate, acetate, dicyanamide, sulfate chloride, bromide, trifluoroacetate, tricyanomethane, trifluoromethanesulfonate y triflate, en un amplio intervalo de temperatura y concentración a presión atmosférica. Los sistemas de mezclas se describen en las Tablas 3.5 y 3.6. La ecuación de Vásquez-Castillo y de Nava-Ríos no han sido utilizadas anteriormente para viscosidades cinemáticas de líquidos iónicos.

**Tabla 3.5. Sistemas de líquidos iónicos con compuestos orgánicos y su intervalo de temperatura y composición**

| <b>Líquido iónico</b>                                                    | <b>Abreviación</b>                        | <b>Solvente</b> | <b>NP</b> | <b>Intervalo T / K</b> | <b>Intervalo fracción mol</b> | <b>Referencia</b>    |
|--------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------|-----------------|-----------|------------------------|-------------------------------|----------------------|
| Triethylsulfonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                      | [Et <sub>3</sub> S][NTf <sub>2</sub> ]    | 1-propanol      | 99        | 293.15 - 343.15        | 0.08895 - 0.90025             | Este trabajo         |
| 1-allyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | [Amim][NTf <sub>2</sub> ]                 | 1-propanol      | 99        | 293.15 - 343.15        | 0.09456 - 0.89972             | Este trabajo         |
| 1,3-dihydroxyimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide               | [(OH) <sub>2</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ] | 1-propanol      | 99        | 293.15 - 343.15        | 0.09807 - 0.87315             | Este trabajo         |
| 2-hydroxyethyl-N,N,N-trimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | [N1112OH][NTf <sub>2</sub> ]              | 1,3-propanediol | 63        | 313.15 - 353.15        | 0.12720 - 0.94740             | Domanska et al. [32] |
| 2-hydroxyethyl-N,N,N-trimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | [N1112OH][NTf <sub>2</sub> ]              | 1,2-propanediol | 54        | 313.15 - 353.15        | 0.21890 - 0.87440             | Domanska et al. [32] |
| 2-hydroxyethyl-N,N,N-trimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | [N1112OH][NTf <sub>2</sub> ]              | 1,5-pentenediol | 49        | 313.15 - 343.15        | 0.13510 - 0.90710             | Domanska et al. [32] |
| butyltrimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                 | [N1114][NTf <sub>2</sub> ]                | 1,2-propanediol | 42        | 323.15 - 348.15        | 0.13200 - 0.88430             | Domanska et al. [32] |
| butyltrimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                 | [N1114][NTf <sub>2</sub> ]                | 2,3-butanediol  | 30        | 323.15 - 343.15        | 0.08790 - 0.81420             | Domanska et al. [32] |
| butyltrimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                 | [N1114][NTf <sub>2</sub> ]                | 1,2-butanediol  | 42        | 323.15 - 353.15        | 0.22910 - 0.90310             | Domanska et al. [32] |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | [emim][NTf <sub>2</sub> ]                 | etanol          | 40        | 278.15 - 338.15        | 0.09300 - 0.94900             | Salinas et al. [120] |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | [emim][NTf <sub>2</sub> ]                 | 1-propanol      | 30        | 298.15 - 338.15        | 0.09750 - 0.94810             | Salinas et al. [121] |
| 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | [hmim][NTf <sub>2</sub> ]                 | etanol          | 30        | 278.15 - 318.15        | 0.09700 - 0.95300             | Salinas et al. [120] |
| 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | [hmim][NTf <sub>2</sub> ]                 | 1-propanol      | 40        | 278.15 - 338.15        | 0.10010 - 0.95200             | Salinas et al. [121] |
| 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | [bmim][NTf <sub>2</sub> ]                 | 1-propanol      | 40        | 278.15 - 338.15        | 0.09700 - 0.94920             | Salinas et al. [121] |

**Tabla 3.5 (continuación)**

| Líquido iónico                                                | Abreviación                | Solvente              | NP | Intervalo T / K | Intervalo fracción mol | Referencia                  |
|---------------------------------------------------------------|----------------------------|-----------------------|----|-----------------|------------------------|-----------------------------|
| 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | [bmim][NTf <sub>2</sub> ]  | 2,2,2-trifluoroetanol | 72 | 278.15 - 333.15 | 0.08770 - 0.87480      | Salgado et al. [119]        |
| 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | [bmim][NTf <sub>2</sub> ]  | etanol                | 40 | 278.15 - 338.15 | 0.10000 - 0.95100      | Salinas et al. [120]        |
| 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                 | [bmim][BF <sub>4</sub> ]   | 2,2,2-trifluoroetanol | 72 | 278.15 - 333.15 | 0.39130 - 0.95870      | Salgado et al. [119]        |
| 1-methyl-3-octylimidazolium tetrafluoroborate                 | [Omim][BF <sub>4</sub> ]   | etanol                | 77 | 283.15 - 343.15 | 0.08100 - 0.75300      | Mokhtarani et al. [99]      |
| 1-butyl-4-methylpyridinium tetrafluoroborate                  | [4bmpyr][BF <sub>4</sub> ] | etanol                | 48 | 293.15 - 323.15 | 0.05400 - 0.95190      | García-Mardones et al. [43] |
| 1-butyl-4-methylpyridinium tetrafluoroborate                  | [4bmpyr][BF <sub>4</sub> ] | metanol               | 48 | 293.15 - 323.15 | 0.05350 - 0.95230      | García-Mardones et al. [43] |
| 1-butyl-3-methylpyridinium tetrafluoroborate                  | [3bmpyr][BF <sub>4</sub> ] | metanol               | 48 | 293.15 - 323.15 | 0.03110 - 0.95190      | García-Mardones et al. [43] |
| 1-butyl-3-methylpyridinium tetrafluoroborate                  | [3bmpyr][BF <sub>4</sub> ] | etanol                | 48 | 293.15 - 323.15 | 0.05230 - 0.94790      | García-Mardones et al. [43] |
| 1-butylpyridinium tetrafluoroborate                           | [bmpyr][BF <sub>4</sub> ]  | metanol               | 48 | 293.15 - 323.15 | 0.05290 - 0.95220      | García-Mardones et al. [43] |
| 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                 | [C4mim][BF <sub>4</sub> ]  | metanol               | 36 | 303.15 - 333.15 | 0.10030 - 0.90010      | Wu et al. [151]             |
| 1-hexyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                 | [C6mim][BF <sub>4</sub> ]  | 1-propanol            | 35 | 293.15 - 333.15 | 0.11060 - 0.89940      | Kermanpour y Sharifi [88]   |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                 | [emim][BF <sub>4</sub> ]   | metanol               | 65 | 278.15 - 318.15 | 0.05240 - 0.95010      | Vercher et al. [144]        |
| 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate               | [bmim][PF <sub>6</sub> ]   | 2,2,2-trifluoroetanol | 60 | 278.15 - 333.15 | 0.46320 - 0.94170      | Salgado et al. [119]        |
| 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate                           | [Bmim][NO <sub>3</sub> ]   | etanol                | 88 | 283.15 - 333.15 | 0.11000 - 0.85200      | Mokhtarani et al. [100]     |
| 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate                           | [Bmim][NO <sub>3</sub> ]   | 1-propanol            | 88 | 283.15 - 333.15 | 0.12100 - 0.85700      | Mokhtarani et al. [100]     |
| 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate                           | [Bmim][NO <sub>3</sub> ]   | 1-butanol             | 88 | 283.15 - 333.15 | 0.12900 - 0.84800      | Mokhtarani et al. [100]     |

**Tabla 3.5 (continuación)**

| <b>Líquido iónico</b>                     | <b>Abreviación</b>       | <b>Solvente</b> | <b>NP</b> | <b>Intervalo T / K</b> | <b>Intervalo fracción mol</b> | <b>Referencia</b>            |
|-------------------------------------------|--------------------------|-----------------|-----------|------------------------|-------------------------------|------------------------------|
| 1-methyl-3-octylimidazolium nitrate       | [Omim][NO <sub>3</sub> ] | etanol          | 80        | 283.15 - 328.15        | 0.12800 - 0.86800             | Mokhtarani et al. [102]      |
| 1-methyl-3-octylimidazolium nitrate       | [Omim][NO <sub>3</sub> ] | 1-propanol      | 80        | 283.15 - 328.15        | 0.10700 - 0.86600             | Mokhtarani et al. [102]      |
| n-butylammonium nitrate                   | [N4][NO <sub>3</sub> ]   | metanol         | 40        | 293.15 - 313.15        | 0.09930 - 0.90010             | Xu et al. [155]              |
| n-butylammonium nitrate                   | [N4][NO <sub>3</sub> ]   | etanol          | 40        | 293.15 - 313.15        | 0.10110 - 0.90050             | Xu et al. [155]              |
| n-butylammonium nitrate                   | [N4][NO <sub>3</sub> ]   | 1-propanol      | 40        | 293.15 - 313.15        | 0.09920 - 0.90010             | Xu et al. [155]              |
| n-butylammonium nitrate                   | [N4][NO <sub>3</sub> ]   | 1-butanol       | 39        | 293.15 - 313.15        | 0.10020 - 0.89960             | Xu et al. [155]              |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate   | [BMIM][SCN]              | etanol          | 42        | 298.15 - 348.15        | 0.08260 - 0.88710             | Domańska y Laskowska [31]    |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate   | [BMIM][SCN]              | 1-propanol      | 60        | 298.15 - 348.15        | 0.06580 - 0.97330             | Domańska y Laskowska [31]    |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate   | [BMIM][SCN]              | 1-butanol       | 60        | 298.15 - 348.15        | 0.09110 - 0.97380             | Domańska y Laskowska [30]    |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate   | [BMIM][SCN]              | pentanol        | 66        | 298.15 - 348.15        | 0.01930 - 0.91350             | Domańska y Laskowska [30]    |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate   | [BMIM][SCN]              | hexanol         | 60        | 298.15 - 348.15        | 0.04240 - 0.91020             | Domańska y Laskowska [30]    |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate   | [BMIM][SCN]              | heptanol        | 66        | 298.15 - 348.15        | 0.02070 - 0.91940             | Domańska y Królikowska, [29] |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate   | [BMIM][SCN]              | octanol         | 54        | 298.15 - 348.15        | 0.03810 - 0.91260             | Domańska y Królikowska, [29] |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate   | [BMIM][SCN]              | nonanol         | 48        | 298.15 - 348.15        | 0.03490 - 0.87970             | Domańska y Królikowska [29]  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate   | [BMIM][SCN]              | decanol         | 60        | 298.15 - 348.15        | 0.04130 - 0.92530             | Domańska y Królikowska, [29] |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate | [Mmim][DMP]              | metanol         | 63        | 293.15 - 323.15        | 0.10540 - 0.89980             | Zhang et al. [163]           |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate | [Mmim][DMP]              | etanol          | 24        | 298.15 - 323.15        | 0.19300 - 0.79800             | Zhang et al. [163]           |

**Tabla 3.5 (continuación)**

| <b>Líquido iónico</b>                             | <b>Abreviación</b>         | <b>Solvente</b> | <b>NP</b> | <b>Intervalo T / K</b> | <b>Intervalo fracción mol</b> | <b>Referencia</b>              |
|---------------------------------------------------|----------------------------|-----------------|-----------|------------------------|-------------------------------|--------------------------------|
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | [Mmim][DMP]                | 1-propanol      | 63        | 298.15 - 323.15        | 0.09800 - 0.89980             | Zhang et al. [163]             |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | [Mmim][DMP]                | 2-propanol      | 62        | 298.15 - 323.15        | 0.09990 - 0.90130             | Zhang et al. [163]             |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dimethylphosphate     | [EMIM][DMP]                | metanol         | 36        | 298.15 - 333.15        | 0.19800 - 0.79900             | Gong et al. [57]               |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dimethylphosphate     | [EMIM][DMP]                | etanol          | 36        | 293.15 - 333.15        | 0.19900 - 0.79800             | Gong et al. [57]               |
| 1-butyl-3-methyl-1H-imidazolium dimethylphosphate | [BMIM][DMP]                | metanol         | 36        | 293.15 - 333.15        | 0.20300 - 0.80000             | Gong et al. [57]               |
| 1-butyl-3-methyl-1H-imidazolium dimethylphosphate | [BMIM][DMP]                | etanol          | 36        | 293.15 - 333.15        | 0.20100 - 0.80000             | Gong et al. [57]               |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate               | [emim][OAc]                | etanol          | 40        | 298.15 - 343.15        | 0.10590 - 0.86660             | Quijada-Maldonado et al. [110] |
| butylammonium acetate                             | [N4][AC]                   | metanol         | 50        | 293.15 - 313.15        | 0.10120 - 0.96980             | Xu et al. [156]                |
| butylammonium acetate                             | [N4][AC]                   | etanol          | 50        | 293.15 - 313.15        | 0.09910 - 0.96810             | Xu et al. [156]                |
| butylammonium acetate                             | [N4][AC]                   | 1-propanol      | 50        | 293.15 - 313.15        | 0.10190 - 0.96850             | Xu et al. [156]                |
| butylammonium acetate                             | [N4][AC]                   | 1-butanol       | 50        | 293.15 - 313.15        | 0.09970 - 0.97100             | Xu et al. [156]                |
| 1-methylimidazolium acetate                       | [Mim][Ac]                  | metanol         | 40        | 293.15 - 313.15        | 0.09970 - 0.97100             | Qian et al. [109]              |
| 1-methylimidazolium acetate                       | [Mim][Ac]                  | etanol          | 45        | 293.15 - 313.15        | 0.09970 - 0.97100             | Qian et al. [109]              |
| 1-methylimidazolium acetate                       | [Mim][Ac]                  | 1-propanol      | 45        | 293.15 - 313.15        | 0.09970 - 0.97100             | Qian et al. [109]              |
| 1-methylimidazolium acetate                       | [Mim][Ac]                  | 1-butanol       | 40        | 293.15 - 313.15        | 0.09970 - 0.97100             | Qian et al. [109]              |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamide           | [emim][DCA]                | etanol          | 40        | 293.15 - 313.15        | 0.09970 - 0.97100             | Quijada-Maldonado et al. [110] |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate         | [EMIM][ES]                 | metanol         | 48        | 298.15 - 323.15        | 0.09600 - 0.89330             | Anwar [3]                      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate         | [EMI] [EtSO <sub>4</sub> ] | etanol          | 30        | 298.15 - 328.15        | 0.06230 - 0.98630             | Gómez et al. [54]              |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate         | [EMI] [EtSO <sub>4</sub> ] | 1-propanol      | 27        | 298.15 - 328.15        | 0.16190 - 0.97270             | González et al. [64]           |

**Tabla 3.5 (continuación)**

| Líquido iónico                            | Abreviación                | Solvente   | NP | Intervalo T / K | Intervalo fracción mol | Referencia           |
|-------------------------------------------|----------------------------|------------|----|-----------------|------------------------|----------------------|
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | [EMI][EtSO <sub>4</sub> ]  | 2-propanol | 27 | 298.15 - 328.15 | 0.12280 - 0.97060      | González et al. [64] |
| 1-ethylpyridinium ethyl sulfate           | [EpyESO <sub>4</sub> ]     | etanol     | 27 | 298.15 - 328.15 | 0.04760 - 0.94760      | González et al. [64] |
| 1-ethylpyridinium ethyl sulfate           | [EpyESO <sub>4</sub> ]     | 1-propanol | 30 | 298.15 - 328.15 | 0.08140 - 0.95210      | González et al. [60] |
| 1-ethyl-3-methylpyridinium ethylsulfate   | [empy][EtSO <sub>4</sub> ] | etanol     | 30 | 298.15 - 328.15 | 0.06090 - 0.93890      | González et al. [61] |
| 1,3-dimethylimidazolium methylsulfate     | [Mmim][MeSO <sub>4</sub> ] | etanol     | 33 | 298.15 - 328.15 | 0.06690 - 0.94500      | Gómez [56]           |
| 1-butyl-3-methylimidazolium methylsulfate | [Bmim][MeSO <sub>4</sub> ] | etanol     | 33 | 298.15 - 328.15 | 0.06510 - 0.94450      | González et al. [58] |

**Tabla 3.6. Sistemas de líquidos iónicos con agua y su intervalo de temperatura y composición**

| Líquido iónico                                                | Abreviación                              | NP  | Intervalo T / K | Intervalo fracción mol | Referencia                     |
|---------------------------------------------------------------|------------------------------------------|-----|-----------------|------------------------|--------------------------------|
| 1-ethylpyridinium bis(trifluoromethyl)sulfonyl)imide          | [Epy][NTf <sub>2</sub> ]                 | 30  | 298.15-343.15   | 0.16000 – 0.31100      | González et al. [65]           |
| 1-ethyl-2-methylpyridinium bis(trifluoromethylsulfonyl)amide  | [1E <sub>2</sub> Mpy][NTf <sub>2</sub> ] | 30  | 298.15-343.15   | 0.12400 – 0.25600      | González et al. [65]           |
| 1-ethyl-3-methylpyridinium bis(trifluoromethyl)sulfonyl)amide | [1E <sub>3</sub> Mpy][NTf <sub>2</sub> ] | 30  | 298.15-343.15   | 0.1310 0– 0.26600      | González et al. [65]           |
| 1-ethyl-4-methylpyridinium bis(trifluoromethyl)sulfonyl)amide | [1E <sub>4</sub> Mpy][NTf <sub>2</sub> ] | 27  | 298.15-338.15   | 0.14400 – 0.30600      | González et al. [65]           |
| 1-hexyl-3-methylimidazolium chloride                          | [C <sub>6</sub> mim][Cl]                 | 32  | 298.15-343.15   | 0.12740 – 0.78300      | Gomez et al. [55]              |
| 1-hexyl-3-methyl-1H-imidazolium bromide                       | [C <sub>6</sub> mim][Br]                 | 75  | 293.15-333.15   | 0.12250 – 0.98990      | Li et al. [96]                 |
| 1-ethyl-1-methylpyrrolidinium ethyl sulfate                   | [EMPYR][EtSO <sub>4</sub> ]              | 63  | 313.15-343.15   | 0.10500 – 0.96520      | Królikowska et al. [91]        |
| 1-ethyl-1-methylpiperidinium ethyl sulfate                    | [EMPIP][EtSO <sub>4</sub> ]              | 100 | 298.15-343.15   | 0.18670 – 0.89400      | Królikowska et al. [91]        |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate                     | [EMIM][EtSO <sub>4</sub> ]               | 24  | 298.15 - 328.15 | 0.07150 – 0.95060      | Gomez et al. [55]              |
| 1-ethyl-3-methylpyridinium ethylsulfate                       | [empy][EtSO <sub>4</sub> ]               | 33  | 298.15 - 328.15 | 0.05260 – 0.94840      | González et al. [60]           |
| 1-propyl-2,3-dimethylimidazolium tetrafluoroborate            | [PDMIM][BF <sub>4</sub> ]                | 72  | 298.15 - 343.15 | 0.09390 – 0.89880      | Ge et al. [48]                 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                 | [BMIM][BF <sub>4</sub> ]                 | 72  | 303.15 - 353.15 | 0.10020 – 0.89990      | Zhou et al. [164]              |
| 1-octylpyridinium tetrafluoroborate                           | [OcPy][BF <sub>4</sub> ]                 | 112 | 283.15 - 348.15 | 0.10000 – 0.78300      | Mokhtarani et al. [101]        |
| 1-butylpyridinium tetrafluoroborate                           | [BuPy][BF <sub>4</sub> ]                 | 103 | 283.15 - 343.15 | 0.11000 – 0.85600      | Mokhtarani et al. [101]        |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                 | [emim][BF <sub>4</sub> ]                 | 63  | 293.15 - 323.15 | 0.09950 – 0.90270      | Zhang et al. [162]             |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate                       | [BMIM][SCN]                              | 60  | 298.15 - 348.15 | 0.09980 – 0.94440      | Domanska y Królikowska [28]    |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium thiocyanate                       | [EMIM][SCN]                              | 70  | 288.15 - 318.15 | 0.10057 – 0.95057      | Vataščin y Dohnal [143]        |
| 1-butyl-4-methylpyridinium thiocyanate                        | [BMPy][SCN]                              | 78  | 298.15 - 348.15 | 0.05640 – 0.99240      | Domanska y Królikowska [28]    |
| 1-butyl-1-methylpyrrolidinium thiocyanate                     | [BMPYR][SCN]                             | 48  | 298.15 - 348.15 | 0.08530 – 0.96570      | Domanska y Królikowska [28]    |
| 1-butyl-1-methylpiperidinium thiocyanate                      | [BMPIP][SCN]                             | 28  | 318.15 - 348.15 | 0.27740 – 0.93510      | Domanska y Królikowska [28]    |
| 1-methylimidazolium acetate                                   | [Mim][Ac]                                | 45  | 293.15 - 313.15 | 0.10130 – 0.95040      | Chen et al. [17]               |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate                           | [emim][OAc]                              | 40  | 298.15 - 343.15 | 0.09920 – 0.90670      | Quijada-Maldonado et al. [110] |
| n-butylammonium acetate                                       | [N <sub>4</sub> ][Ac]                    | 50  | 293.15 - 313.15 | 0.10280 – 0.96900      | Xu et al. [154]                |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium trifluoroacetate                  | [emim][TFA]                              | 35  | 288.15 - 348.15 | 0.20420 – 0.92560      | Rodríguez y Brennecke [116]    |

**Table 3.6 (continuación)**

| <b>Líquido iónico</b>                                 | <b>Abreviación</b>                       | <b>NP</b> | <b>Intervalo T / K</b> | <b>Intervalo fracción mol</b> | <b>Referencia</b>              |
|-------------------------------------------------------|------------------------------------------|-----------|------------------------|-------------------------------|--------------------------------|
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamide               | [EMIM][DCA]                              | 70        | 288.15 - 318.15        | 0.10164 – 0.94978             | Vataščin y Dohnal [143]        |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamide               | [emim][DCA]                              | 40        | 298.15 - 343.15        | 0.12990 – 0.95300             | Quijada-Maldonado et al. [110] |
| 1-butyl-3-methylimidazolium dicyanamide               | [C4mim][N(CN) <sub>2</sub> ]             | 54        | 278.15 - 358.15        | 0.05900 – 0.48310             | Carvalho et al. [14]           |
| 1-butyl-1-methylpyrrolidinium dicyanamide             | [BMPYR][DCA]                             | 140       | 298.15 - 343.15        | 0.02680 – 0.92710             | Królikowska et al. [92]        |
| 1-butyl-1-methylpiperidinium dicyanamide              | [BMPIP][DCA]                             | 80        | 298.15 - 343.15        | 0.07840 – 0.90640             | Królikowska et al. [92]        |
| 1-butyl-3-methylimidazolium tricyanomethane           | [C4mim][C(CN) <sub>3</sub> ]             | 72        | 278.15 - 358.15        | 0.04580 – 0.56070             | Carvalho et al. [14]           |
| 1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate | [BMIM][CF <sub>3</sub> SO <sub>3</sub> ] | 63        | 303.15 - 343.15        | 0.10320 – 0.90100             | Ge et al. [49]                 |
| ethylammonium nitrate                                 | [EtNH <sub>3</sub> ][NO <sub>3</sub> ]   | 54        | 293.15 - 318.15        | 0.10880 – 0.94990             | Zarrougui et al. [169]         |
| n-butylammonium nitrate                               | [N <sub>4</sub> ][NO <sub>3</sub> ]      | 40        | 293.15 - 313.15        | 0.09780 – 0.90000             | Xu [154]                       |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate             | [MMIM][DMP]                              | 24        | 298.15 - 323.15        | 0.20500 – 0.74800             | He et al. [77]                 |
| 1,3-dimethylimidazolium methylsulfate                 | [Mmim][MeSO <sub>4</sub> ]               | 33        | 298.15 - 328.15        | 0.04970 – 0.94850             | Gomez [56]                     |
| 1-ethylpyridinium triflate                            | [C2py][OTf]                              | 37        | 293.15 - 353.15        | 0.10700 – 0.93300             | Sánchez et al. [122]           |

---

---

## CAPÍTULO 4. RESULTADOS

En esta sección se describe la calibración de los equipos de medición. Posteriormente se realiza la determinación de la densidad y viscosidad de los componentes puros y la representación de datos experimentales con ecuaciones reportadas en la literatura. Después se realizó la medición de mezclas de LI con 1-propanol en todo el intervalo de concentración, así como la determinación de las propiedades de exceso, desviaciones de viscosidad y velocidad de sonido. Finalmente se utilizaron diferentes modelos para predecir las densidades de los líquidos iónicos puros utilizados en el presente trabajo y las ecuaciones para correlacionar las viscosidades cinemáticas de mezclas binarias de líquidos iónicos.

### 4.1. Calibración de los equipos

Para el caso de la densidad, la calibración se realizó constantemente con agua destilada grado HPLC y con aire, así como metanol, propanol y nonano, los cuales se utilizaron como sustancias de referencia para su comparación con datos reportados en la literatura.

Para la viscosidad se utilizaron tres estándares (S3, N14 y N44 Cannon Fenske), según el intervalo de viscosidad de los sistemas de LI + alcohol, de acuerdo a la Tabla 3.4. Se determinó el tiempo de caída del balón para cada uno de los aceites mencionados. La calibración se realizó a 30, 40, 50, 60 y 70 ángulos de inclinación para cada capilar en un intervalo de temperatura de (293.15 a 343.15) K. Los capilares utilizados fueron de diámetro 1.6, 1.8 y 3.0 mm.

Para cada capilar se construyó la gráfica de viscosidad  $\eta$  contra  $t(\rho_b - \rho_m)$  para cada ángulo de inclinación. Las gráficas de calibración se construyen a partir de datos de densidad y viscosidad conocidos. Para la calibración del capilar de  $D = 3.0$  mm, se incluyó al líquido iónico de [Bmpyr][TFSI] además de los aceites y para el capilar de  $D = 1.6$  mm se utilizaron además de los estándares, 1-nonanol y decano. En las Figuras 4.1, 4.2 y 4.3 se muestran las gráficas de calibración de  $\eta$  contra  $t(\rho_b - \rho_m)$  para los capilares de 3.0, 1.8 y

---

---

1.6, respectivamente. Como se puede observar en las Figuras 4.1, 4.2 y 4.3, la línea no pasa por el origen, de forma que la viscosidad se puede representar como:

$$\eta_D = K_1 t(\rho_b - \rho_m) + K_2 \quad (4.1)$$

donde  $K_1$  y  $K_2$  son constantes de calibración determinadas experimentalmente. En las Tablas 4.1, 4.2 y 4.3 se presentan las constantes de calibración para los capilares de 3.0, 1.8 y 1.6 mm, respectivamente y para cada ángulo de inclinación.

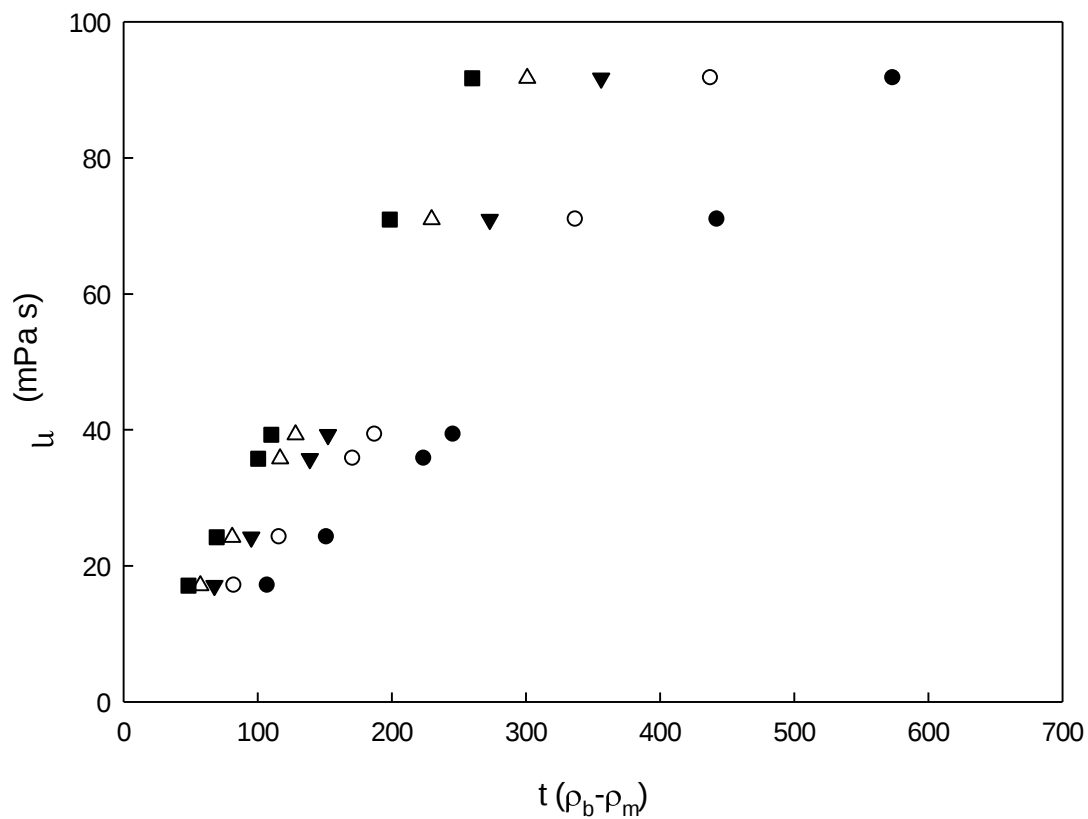


Figura 4.1. Calibración para el capilar de diámetro  $D = 3.0$  mm. ● 30, ○ 40, ▼ 50, △ 60, ■ 70.

**Tabla 4.1. Constantes de calibración para el capilar de diámetro  $D = 3.0$  mm a diferentes inclinaciones**

| Angulo de inclinación | $K_1$  | $K_2$   |
|-----------------------|--------|---------|
| 30                    | 0.1601 | -0.0807 |
| 40                    | 0.2103 | -0.1885 |
| 50                    | 0.2595 | -0.3301 |
| 60                    | 0.3077 | -0.3284 |
| 70                    | 0.3546 | 0.0360  |

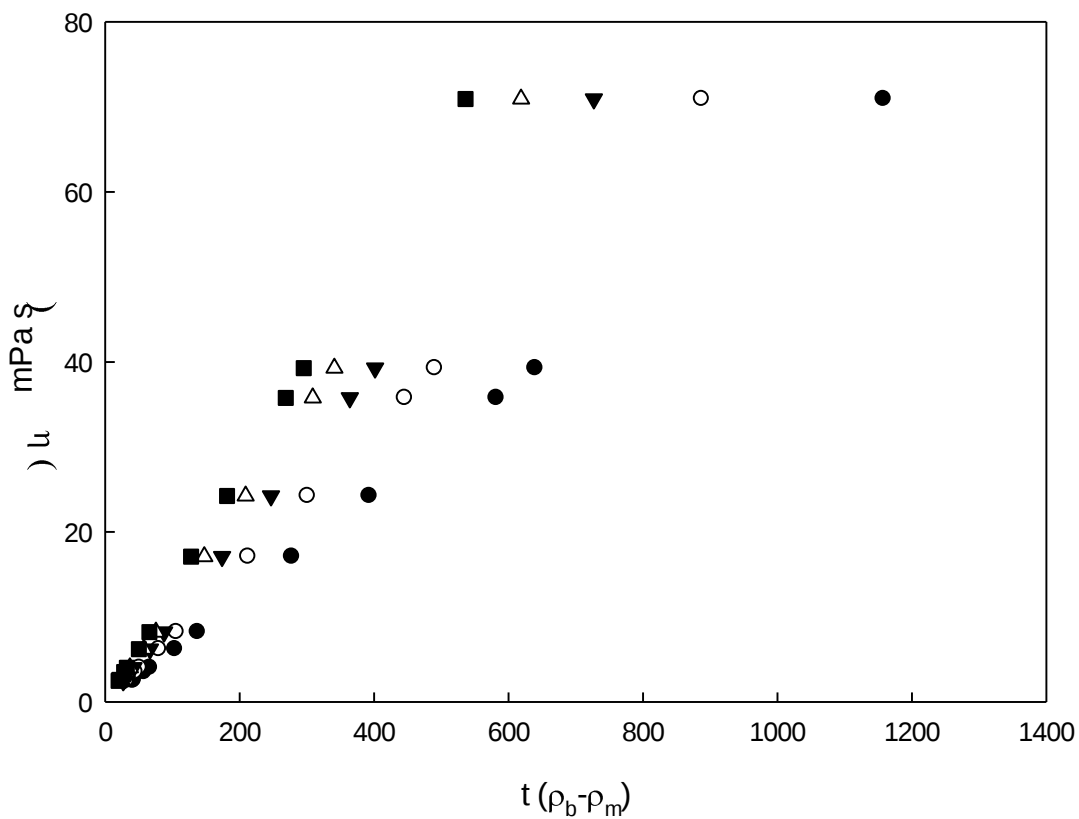


Figura 4.2. Calibración para el capilar de diámetro  $D = 1.8$  mm. ● 30, ○ 40, ▼ 50, △ 60, ■ 70.

**Tabla 4.2. Constantes de calibración para el capilar de diámetro  $D = 1.8$  mm a diferentes inclinaciones**

| Angulo de inclinación | $K_1$  | $K_2$   |
|-----------------------|--------|---------|
| 30                    | 0.0613 | -0.0427 |
| 40                    | 0.0801 | -0.0641 |
| 50                    | 0.0979 | -0.1134 |
| 60                    | 0.1154 | -0.1777 |
| 70                    | 0.1332 | -0.1976 |

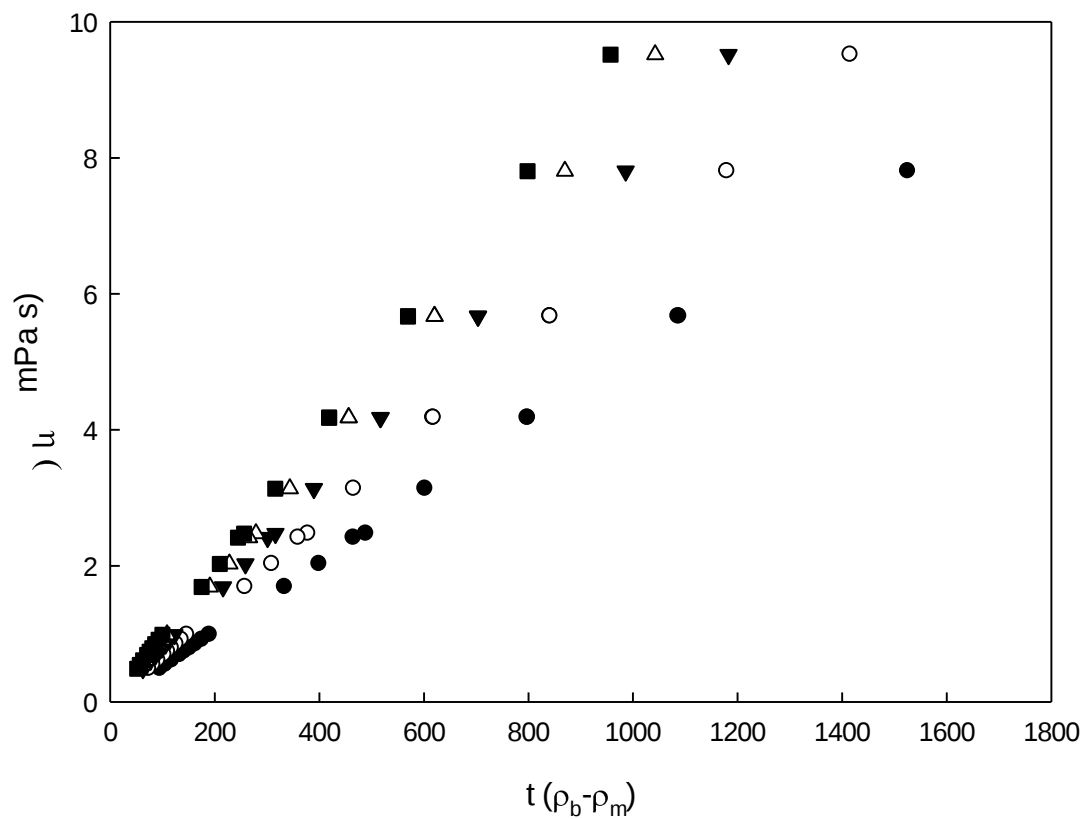


Figura 4.3. Calibración para el capilar de diámetro  $D = 1.6$  mm. ● 30, ○ 40, ▼ 50, △ 60, ■ 70.

**Tabla 4.3. Constantes de calibración para el capilar de diámetro  $D = 1.6$  mm a diferentes inclinaciones**

| Angulo de inclinación | $K_1$  | $K_2$                 |
|-----------------------|--------|-----------------------|
| 30                    | 0.0051 | $-2.5 \times 10^{-5}$ |
| 40                    | 0.0067 | -0.0060               |
| 50                    | 0.0080 | -0.0075               |
| 60                    | 0.0091 | -0.0098               |
| 70                    | 0.0099 | -0.0127               |

## 4.2. Densidad, viscosidad y velocidad del sonido de líquidos iónicos puros

En las Figuras 4.4 a 4.6 se observa el porcentaje de desviación para la densidad, viscosidad y velocidad del sonido, respectivamente, calculado con la Ec. 3.4 del LI iónico [Bmpyr][TFSI] y su comparación con diferentes autores.

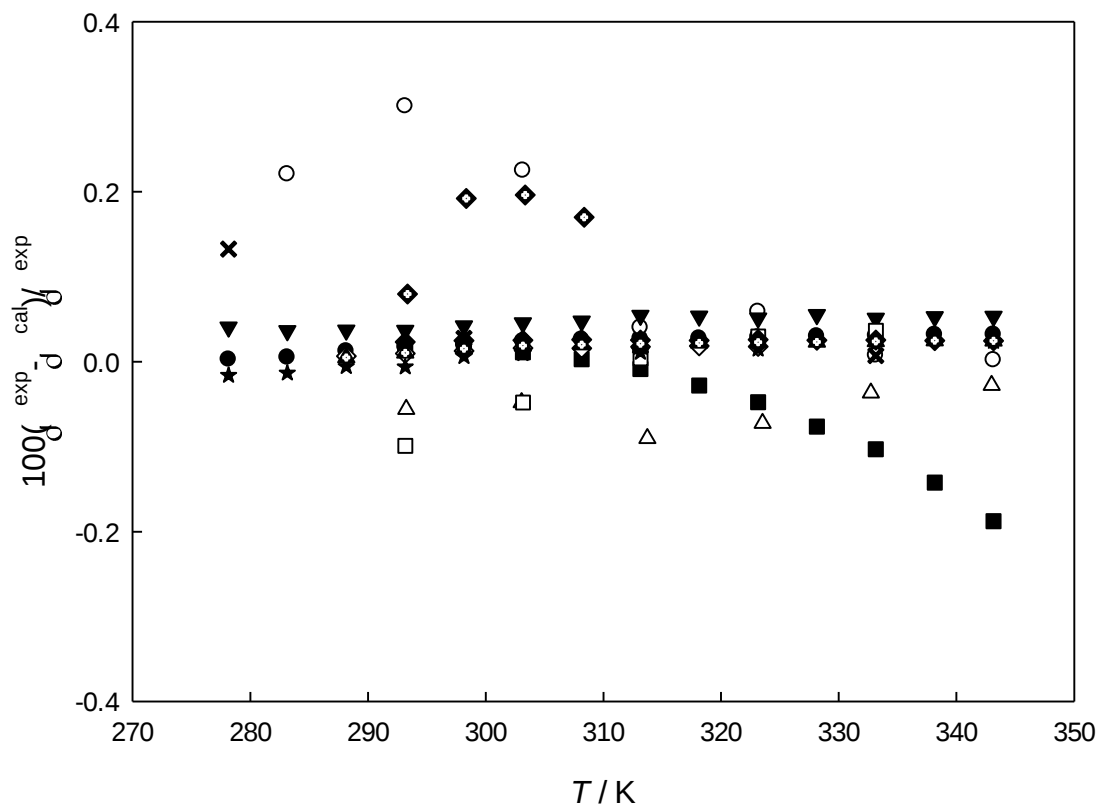


Figura 4.4. Porcentaje de desviación de la densidad del líquido iónico [Bmpyr][TFSI] con la literatura. ●Pereiro [108], ○Shamsipur [128], ▼Gaciño [40], △Deng [23], ■Vranes [146], □Mutelet [103], ◆Seoane [127], ◇Geppert [51], ★Harris y Woolf [75], ◆Katsuta [86], ×Rogueira [114] ▲Zorębski [167].

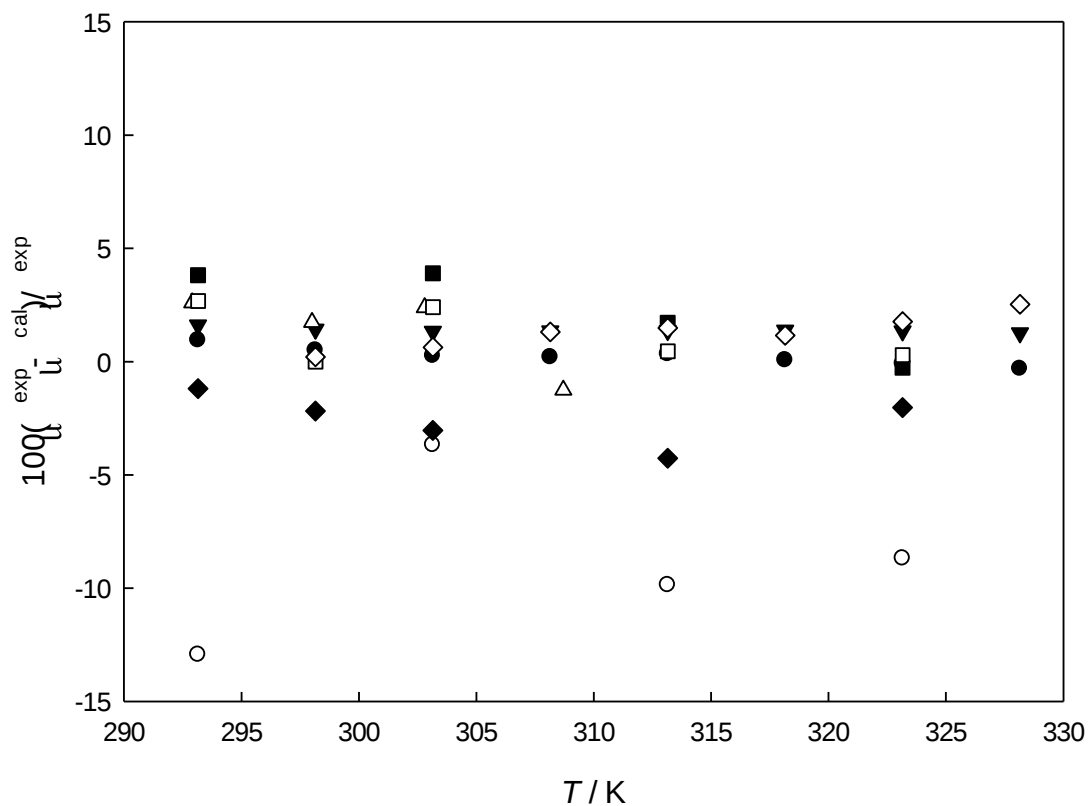


Figura 4.5. Porcentaje de desviación de la viscosidad del líquido iónico [Bmppyrr][TFSI] con la literatura. ● Pereiro [108], ○ Shamsipur [128], ▼ Gacino [40], △ Katsuta [86], ■ Deng [23], □ Harris y Woolf [75], ◆ Tokuda [135], ◇ Vranes [146].

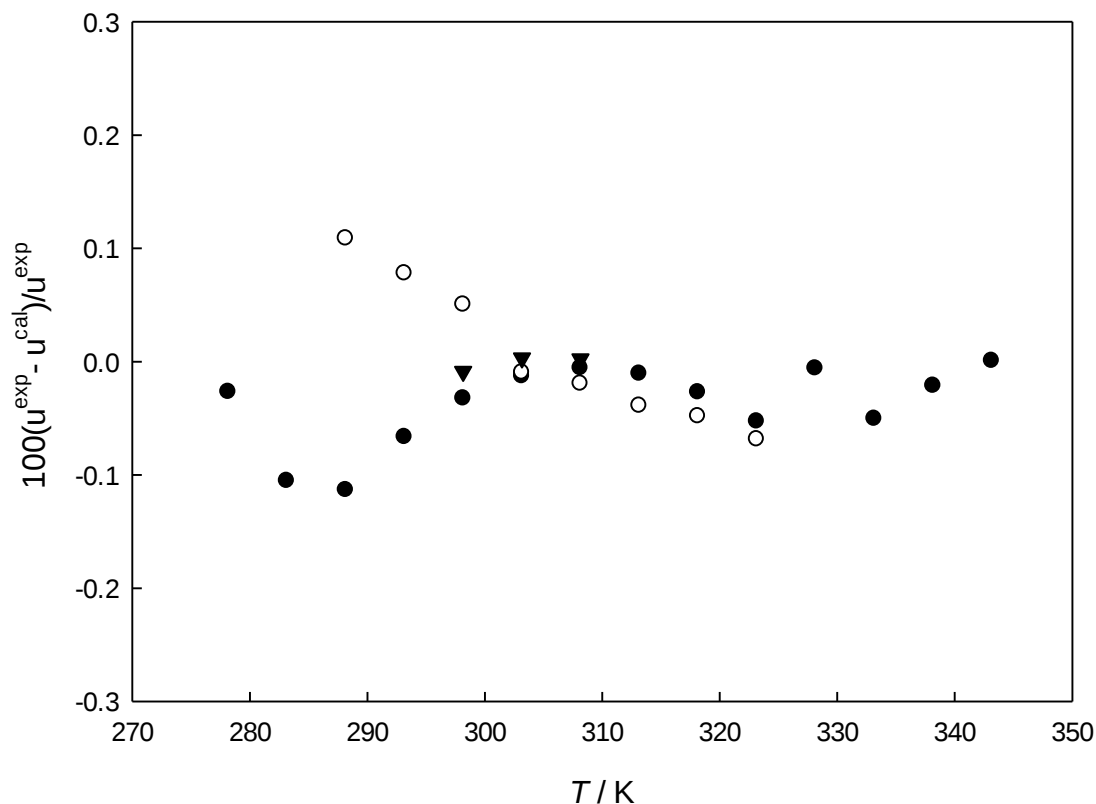


Figura 4.6. Porcentaje de desviación de la velocidad del sonido del líquido iónico [Bmpyrr][TFSI] con la literatura. ● Pereiro [108], ○ Geppert [51], ▼ González [66].

En la Tabla 4.4 se muestra el porcentaje de error promedio absoluto calculado con la Ec. 3.5 para la densidad del líquido iónico [Bmpyrr][TFSI] y su comparación con diferentes autores, así como el método que se utilizó. Nuestros datos de densidad se encuentran más cercanos a Pereiro et al. [108], Geppert et al. [51], Harris y Woolf [75] y Zorebski et al. [167] con un porcentaje de error promedio absoluto de (0.022, 0.014, 0.013 y 0.019) % respectivamente. El porcentaje de desviación máximo se presenta para Shamsipur et al. [128] con 0.122 %.

**Tabla 4.4. Comparación entre densidades experimentales del líquido iónico [Bmpyrr][TFSI] con datos de la literatura a diferentes temperaturas y a presión  $p = 0.1$  MPa**

| T / K  | Este trabajo | Literatura               | AAPE / % | Método                                     |
|--------|--------------|--------------------------|----------|--------------------------------------------|
| 278.15 | 1.41232      | 1.41236 <sup>[108]</sup> | 0.00240  | Densímetro de tubo vibrante DSA - 5000     |
| 283.15 | 1.40778      | 1.40786 <sup>[108]</sup> | 0.00504  | Densímetro de tubo vibrante DSA - 5000     |
| 288.15 | 1.40327      | 1.40345 <sup>[108]</sup> | 0.01218  | Densímetro de tubo vibrante DSA - 5000     |
| 293.15 | 1.39878      | 1.39800 <sup>[23]</sup>  | 0.05608  | Densímetro de tubo vibrante DMA - 512P     |
| 298.15 | 1.39431      | 1.39459 <sup>[108]</sup> | 0.01971  | Densímetro de tubo vibrante DSA - 5000     |
| 303.15 | 1.38986      | 1.38920 <sup>[23]</sup>  | 0.04801  | Densímetro de tubo vibrante DMA - 512P     |
| 308.15 | 1.38544      | 1.38580 <sup>[108]</sup> | 0.02597  | Densímetro de tubo vibrante DSA - 5000     |
| 313.15 | 1.38104      | 1.38093 <sup>[146]</sup> | 0.00847  | Densímetro de tubo vibrante DDM 2911       |
| 318.15 | 1.37666      | 1.37628 <sup>[146]</sup> | 0.02790  | Densímetro de tubo vibrante DDM 2911       |
| 323.15 | 1.37229      | 1.37270 <sup>[103]</sup> | 0.02950  | Densímetro de tubo vibrante DMA 60 digital |
| 328.15 | 1.36794      | 1.36870 <sup>[40]</sup>  | 0.05530  | Densímetro-viscosímetro Stabinger SVM-3000 |
| 333.15 | 1.36360      | 1.36370 <sup>[128]</sup> | 0.00711  | Densímetro-viscosímetro Stabinger SVM-3000 |
| 338.15 | 1.35928      | 1.35971 <sup>[108]</sup> | 0.03155  | Densímetro de tubo vibrante DSA - 5000     |
| 343.15 | 1.35497      | 1.35460 <sup>[23]</sup>  | 0.02783  | Densímetro de tubo vibrante DMA 512P       |

Incertidumbre estándar:  $u_r(\rho) = 0.001 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  para la densidad,  $u_r(T) = 0.01 \text{ K}$  para la temperatura,  $u_r(P) = 10 \text{ kPa}$  para la presión.

En las Tablas 4.5 a la 4.7 se presentan los datos experimentales para densidad, viscosidad y velocidad del sonido de los líquidos iónicos puros, respectivamente. Para el caso del  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}]$ , solo es posible comparar nuestros datos con Bhattacharjee et al. [9] en un intervalo de temperatura de (283.15 a 343.15) K. El porcentaje de error promedio absoluto es de 0.147 % y 5.403 % para la densidad y viscosidad, respectivamente. También es posible comparar la densidad del líquido iónico  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}]$  a 298.15 K con Lee et al. [95]. El porcentaje de error es de 2.012 %. Para los líquidos iónicos  $[\text{Amim}][\text{TFSI}]$  y  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}]$  no es posible realizar una comparación ya que no existen datos de densidad ni viscosidad reportados en la literatura.

**Tabla 4.5. Densidades experimentales de líquidos iónicos puros medidos en este trabajo a diferentes temperaturas y a presión  $p=0.1$  MPa**

| T / K  | $\rho/\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$   |                              |                                         |
|--------|--------------------------------------|------------------------------|-----------------------------------------|
|        | $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}]$ | $[\text{Amim}][\text{TFSI}]$ | $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}]$ |
| 278.15 | 1.47952                              | 1.52012                      | -                                       |
| 283.15 | 1.47461                              | 1.51497                      | -                                       |
| 288.15 | 1.46971                              | 1.50981                      | -                                       |
| 293.15 | 1.46483                              | 1.50469                      | 1.74639                                 |
| 298.15 | 1.45997                              | 1.49959                      | 1.74043                                 |
| 303.15 | 1.45514                              | 1.49452                      | 1.73451                                 |
| 308.15 | 1.45032                              | 1.48947                      | 1.72863                                 |
| 313.15 | 1.44552                              | 1.48444                      | 1.72278                                 |
| 318.15 | 1.44074                              | 1.47944                      | 1.71697                                 |
| 323.15 | 1.43599                              | 1.47445                      | 1.71119                                 |
| 328.15 | 1.43127                              | 1.46949                      | 1.70543                                 |
| 333.15 | 1.42656                              | 1.46455                      | 1.69971                                 |
| 338.15 | 1.42187                              | 1.45964                      | 1.69401                                 |
| 343.15 | 1.41719                              | 1.45475                      | 1.68833                                 |

Incertidumbre estándar:  $u_r(\rho) = 0.001 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  para la viscosidad,  $u_r(T) = 0.01 \text{ K}$  para la temperatura,  $u_r(P) = 10 \text{ kPa}$  para la presión.

**Tabla 4.6. Velocidades del sonido experimentales para los líquidos iónicos puros medidos en este trabajo a diferentes temperaturas y a presión  $p=0.1$  MPa**

| T /K   | $u/\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ |                           |              |                              |
|--------|--------------------------------|---------------------------|--------------|------------------------------|
|        | [Bmpyrr][TFSI]                 | [Et <sub>3</sub> S][TFSI] | [Amim][TFSI] | [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] |
| 278.15 | 1316.35                        | 1284.81                   | 1286.56      | -                            |
| 283.15 | 1304.37                        | 1274.06                   | 1274.87      | -                            |
| 288.15 | 1292.46                        | 1263.35                   | 1263.08      | -                            |
| 293.15 | 1280.85                        | 1252.87                   | 1251.57      | 1208.24                      |
| 298.15 | 1269.41                        | 1242.52                   | 1240.16      | 1196.60                      |
| 303.15 | 1258.16                        | 1232.37                   | 1228.89      | 1185.22                      |
| 308.15 | 1247.07                        | 1222.43                   | 1217.78      | 1174.06                      |
| 313.15 | 1236.13                        | 1212.67                   | 1206.81      | 1163.08                      |
| 318.15 | 1225.33                        | 1203.09                   | 1195.97      | 1152.27                      |
| 323.15 | 1214.64                        | 1193.73                   | 1185.25      | 1141.60                      |
| 328.15 | 1204.07                        | 1184.65                   | 1174.66      | 1131.08                      |
| 333.15 | 1193.60                        | 1175.94                   | 1164.18      | 1120.68                      |
| 338.15 | 1183.25                        | 1166.82                   | 1153.80      | 1110.41                      |
| 343.15 | 1172.99                        | 1157.57                   | 1143.54      | 1100.25                      |

Incertidumbre estándar:  $u_r(u) = 0.5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  para la velocidad de sonido,  $u_r(T) = 0.01 \text{ K}$  para la temperatura,  $u_r(P) = 10 \text{ kPa}$  para la presión.

**Tabla 4.7. Viscosidades experimentales de líquidos iónicos puros medidos en este trabajo a diferentes temperaturas y a presión  $p=0.1$  MPa**

| T / K  | $\eta/\text{mPa}\cdot\text{s}$ |                           |              |                              |
|--------|--------------------------------|---------------------------|--------------|------------------------------|
|        | [Bmpyrr][TFSI]                 | [Et <sub>3</sub> S][TFSI] | [Amim][TFSI] | [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] |
| 293.15 | 97.139                         | 39.640                    | 41.829       | 238.601                      |
| 298.15 | 76.538                         | 32.433                    | 34.318       | 171.825                      |
| 303.15 | 61.308                         | 26.920                    | 28.511       | 127.520                      |
| 308.15 | 49.837                         | 22.643                    | 23.965       | 96.923                       |
| 313.15 | 41.079                         | 19.241                    | 20.410       | 75.562                       |
| 318.15 | 34.297                         | 16.526                    | 17.512       | 59.803                       |
| 323.15 | 28.976                         | 14.310                    | 15.188       | 48.286                       |
| 328.15 | 24.756                         | 12.503                    | 13.230       | 39.566                       |
| 333.15 | 20.741                         | 10.995                    | 11.621       | 32.879                       |
| 338.15 | 18.026                         | 9.726                     | 10.276       | 27.690                       |
| 343.15 | 15.801                         | 8.658                     | 9.124        | 23.592                       |

Incertidumbre estándar:  $u_r(\eta) = 0.02 \text{ mPa}\cdot\text{s}$  para la viscosidad,  $u_r(T) = 0.01 \text{ K}$  para la temperatura,  $u_r(P) = 10 \text{ kPa}$  para la presión.

---

---

Zorebski et al. [166] señalan que los líquidos iónicos 1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide y 1-butyl-1-propylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide presentan cierta absorción de la velocidad de sonido a temperaturas menores a 288.15 K. Sin embargo, debido a que la medición de la velocidad de sonido se llevó a cabo a frecuencias bajas (3 MHz), la absorción puede ser despreciada, por lo tanto, la ecuación de Newton-Laplace puede ser utilizada y la velocidad del sonido se puede tratar como una propiedad termodinámica en equilibrio debido a que el efecto de la absorción en la velocidad del sonido es mínimo [166].

En la Figura 4.7 se muestran las densidades de los líquidos iónicos puros representados con la ecuación de Gardas y Coutinho [45] (Ec. 3.6) y en la Tablas 4.8 se presentan las constantes correspondientes junto con el porcentaje de error promedio absoluto. En las Figuras 4.8 a la 4.10 se pueden observar las viscosidades para los líquidos iónicos puros representados con las ecuaciones de Arrhenius (Ec.3.7), Vogel-Fulcher-Tamman (Ec. 3.8) y la fluidez (Ec. 3.9), respectivamente, y en las Tablas 4.9 a la 4.11 presentan las constantes obtenidas para cada una de estas ecuaciones junto con los porcentajes de error.

Se ha encontrado que la Ec. 3.9 es adecuada para representar los datos de viscosidad de líquidos iónicos y su dependencia con la temperatura Ghatee et al. [52] correlacionaron la densidad de 49 líquidos iónicos basados en los cationes imidazolium, pyridinium, pyrrolidinium y quaternary ammonium con la Ec. 3.9 obteniendo una desviación estándar de 1.8 % utilizando un valor de  $\phi = 0.30$ . Sin embargo, los porcentajes de error que se obtuvieron para la predicción de la densidad de nuestros líquidos iónicos fueron entre 1.15 % y 2.33 %, utilizando  $\phi = 0.30$ , por lo que se ajustó el exponente  $\phi$  para los sistemas utilizados en este trabajo (Tabla 4.11).

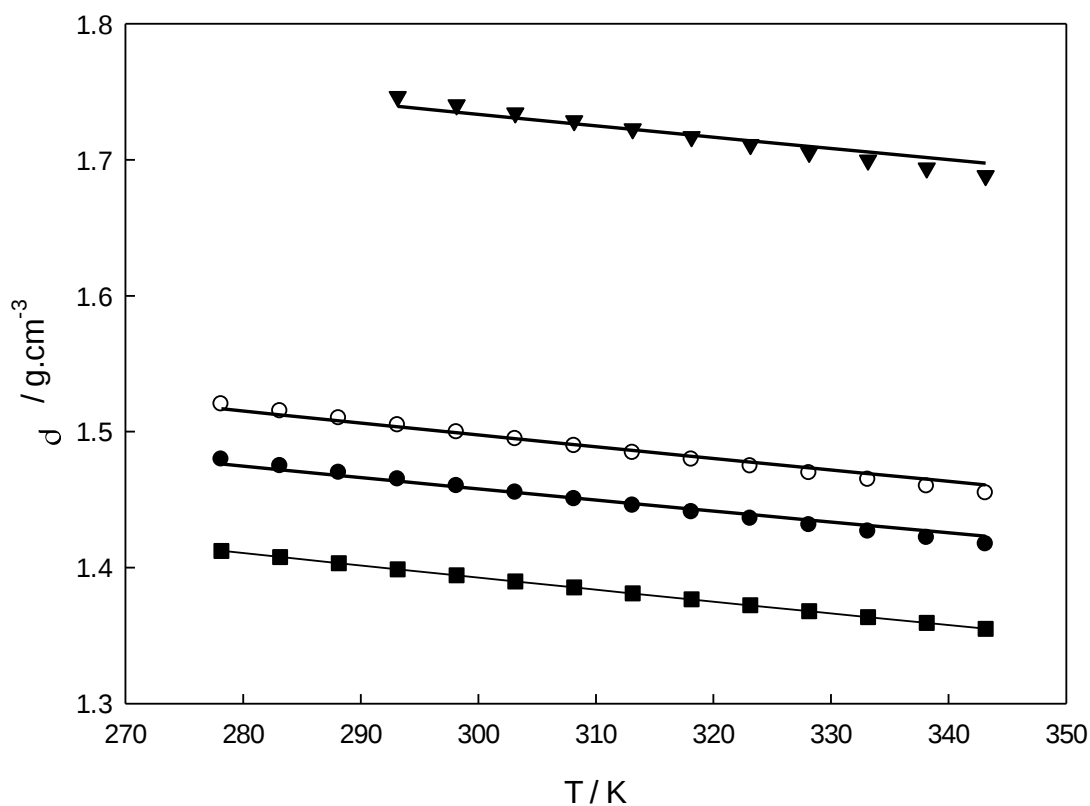


Figura 4.7. Densidades experimentales de los líquidos iónicos puros representados con la ecuación de Gardas y Coutinho [45]. ■ [Bmpyr][TFSI], ● [Et<sub>3</sub>S][TFSI], ○ [Amim][TFSI], ▼ [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI]. La línea representa la Ec. 3.6.

**Tabla 4.8. Parámetros de la ecuación de Gardas y Coutinho [45] para densidad**

| Líquido iónico               | A       | B       | C       | AAPE (%) |
|------------------------------|---------|---------|---------|----------|
| [Bmpyr][TFSI]                | 0.71280 | 0.00064 | 0.95667 | 0.00394  |
| [Et <sub>3</sub> S][TFSI]    | 0.73391 | 0.00057 | 0.97341 | 0.18469  |
| [Amim][TFSI]                 | 0.72924 | 0.00058 | 0.97295 | 0.18317  |
| [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] | 0.75865 | 0.00049 | 0.97590 | 0.26532  |

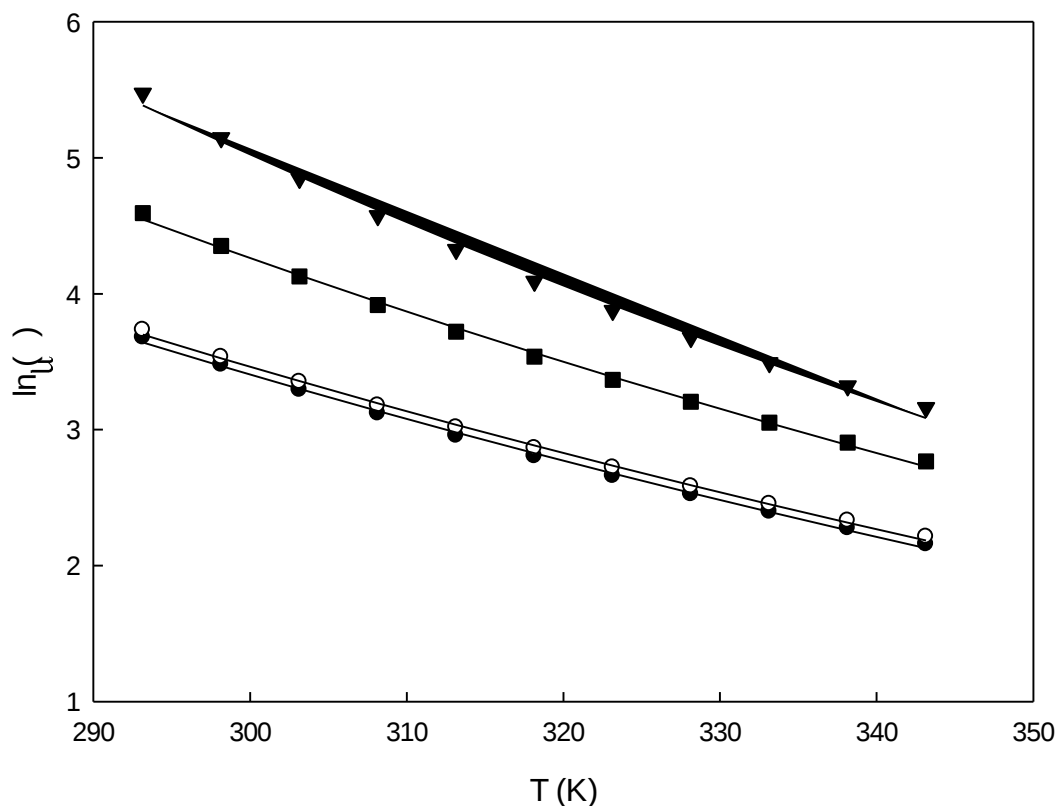


Figura 4.8. Viscosidades experimentales de los líquidos iónicos puros representados con la Ecuación de Arrhenius. ■ [Bmpyr][TFSI], ● [Et<sub>3</sub>S][TFSI], ○ [Amim][TFSI], ▼ [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI]. La línea representa la Ec. 3.7.

**Tabla 4.9. Parámetros de la ecuación de Arrhenius para viscosidad**

| Líquido iónico               | A       | B       | AAPE (%) |
|------------------------------|---------|---------|----------|
| [Bmpyr][TFSI]                | -7.941  | 32424.0 | 0.64414  |
| [Et <sub>3</sub> S][TFSI]    | -6.747  | 25310.4 | 0.60830  |
| [Amim][TFSI]                 | -6.700  | 25334.0 | 0.54097  |
| [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] | -10.397 | 38444.9 | 1.02194  |

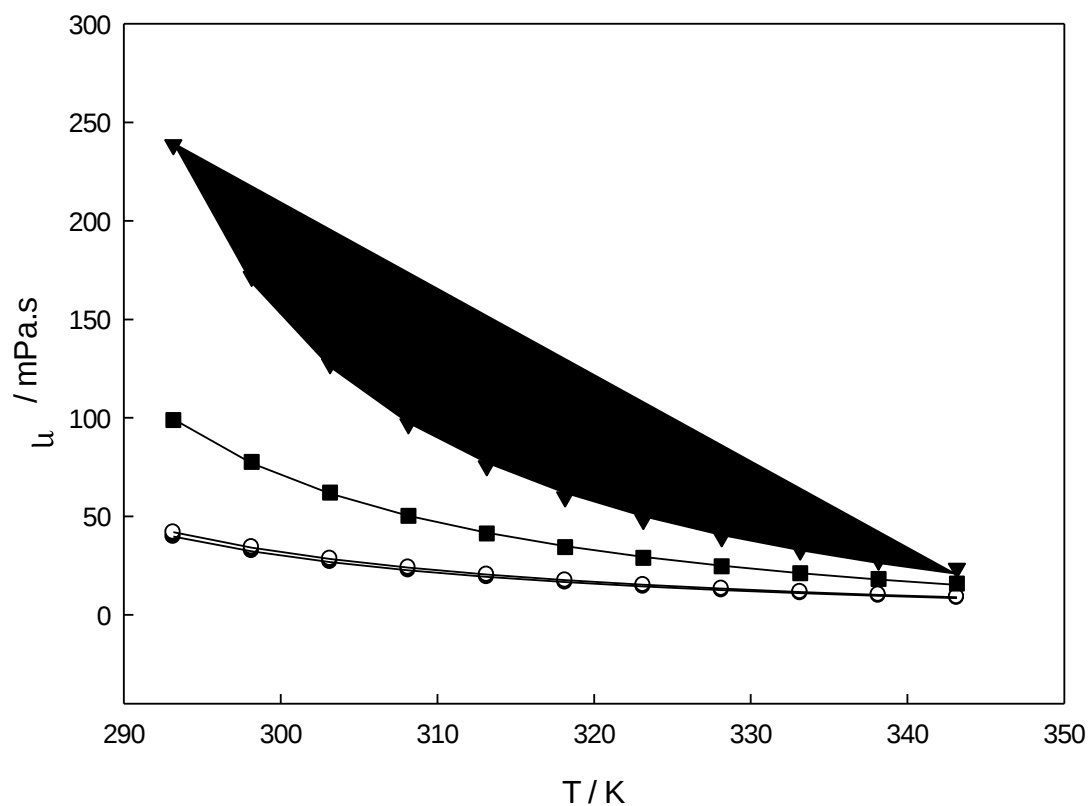


Figura 4.9. Viscosidades experimentales de los líquidos iónicos puros representados con la ecuación de Vogel-Tamman-Fulcher. ■ [Bmpyr][TFSI], ● [Et<sub>3</sub>S][TFSI], ○ [Amim][TFSI], ▼ [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI]. La línea representa la Ec. 3.8.

**Tabla 4.10. Parámetros de la ecuación de Vogel-Tamman-Fulcher para viscosidad**

| Líquido iónico               | A       | B      | C      | AAPE (%) |
|------------------------------|---------|--------|--------|----------|
| [Bmpyr][TFSI]                | -22.032 | 2685.0 | 271.02 | 1.2679   |
| [Et <sub>3</sub> S][TFSI]    | -8.581  | 1318.8 | 265.86 | 0.6384   |
| [Amim][TFSI]                 | -9.414  | 1428.7 | 265.34 | 0.6173   |
| [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] | -44.854 | 4271.6 | 278.15 | 2.9846   |

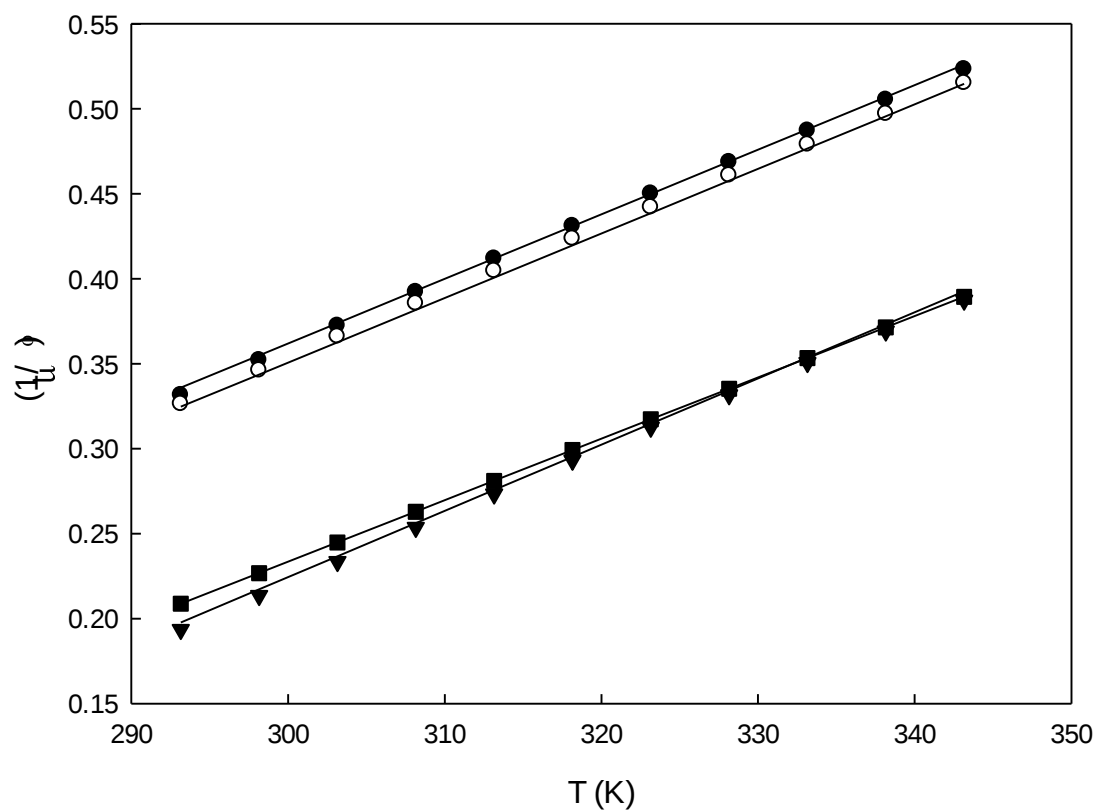


Figura 4.10. Viscosidades experimentales de los líquidos iónicos puros representados con la ecuación de fluidez. ■ [Bmpyr][TFSI], ● [Et<sub>3</sub>S][TFSI], ○ [Amim][TFSI], ▼ [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI]. La línea representa la Ec. 3.9.

**Tabla 4.11. Parámetros de la ecuación de la fluidez para viscosidad**

| Líquido iónico               | A        | B       | $\phi$ | AAPE (%) |
|------------------------------|----------|---------|--------|----------|
| [Bmpyr][TFSI]                | -0.85127 | 0.00362 | 0.341  | 0.03009  |
| [Et <sub>3</sub> S][TFSI]    | -0.89754 | 0.00350 | 0.399  | 0.04102  |
| [Amim][TFSI]                 | -0.87249 | 0.00379 | 0.385  | 0.03330  |
| [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] | -0.93547 | 0.00369 | 0.348  | 0.10684  |

---

---

### 4.3. Densidad, viscosidad y velocidad del sonido de mezclas binarias de líquidos iónicos con 1-propanol

#### *Volúmenes molares de exceso*

Las propiedades volumétricas de las mezclas son propiedades complejas debido a que no solo dependen del tamaño, forma y naturaleza química de los componentes de la mezcla, sino que también de las interacciones soluto-soluto, soluto-solvente y solvente-solvente. Además, también dependen de la temperatura, de la presión y de la composición.

El volumen molar de exceso ( $V_m^E$ ) es una indicación del tipo de interacción que está ocurriendo entre los componentes de la mezcla. Estos se calcularon con la Ec. 3.10.

En las Figuras 4.11 a la 4.13, se muestran los volúmenes molares de exceso para los sistemas  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  y  $[\text{Amim}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  y  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ , respectivamente, representados con la ecuación de Redlich-Kister (Ec.3.11). En las Tablas 4.12 a la 4.14 se muestran los valores de densidad y volúmenes molares de exceso.

Como se muestra en las Figuras 4.11 y 4.12 las curvas son asimétricas presentándose un cambio de signo de negativo a positivo. Los valores de los volúmenes molares de exceso negativos presentan un mínimo en la fase rica en alcohol y los volúmenes molares de exceso positivos se presentan en la fase rica en líquido iónico para ambos sistemas. Para el sistema  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  el cambio de signo de negativo a positivo se presentó a concentraciones de  $X_{LI} = 0.9$ , presentándose el mínimo a  $X_{LI} = 0.2$ , mientras que para el sistema  $[\text{Amim}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  el cambio se observó a concentraciones mayores a  $X_{LI} > 0.5$  con un mínimo a  $X_{LI} = 0.2$ . Este comportamiento de curvas asimétricas en forma de “S” es muy común cuando se tiene una mezcla binaria en la cual están involucrados componentes con una gran diferencia en el volumen molar, como es en el caso del líquido iónico y el 1-propanol [62].

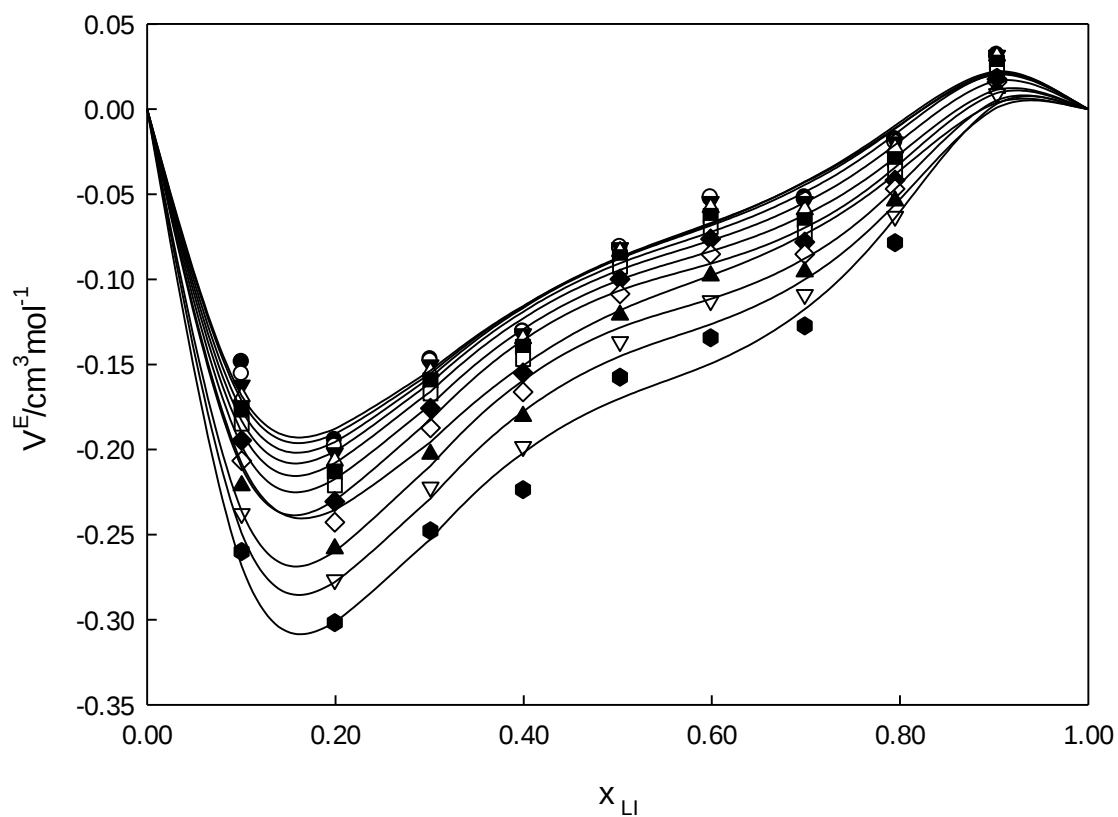


Figura 4.11. Volúmenes molares de exceso para el sistema  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  a diferentes temperaturas. ● 93.15, ○ 98.15, ▼ 303.15, △ 308.15, ■ 313.15, □ 318.15, ◆ 323.15, ◇ 328.15, ▲ 333.15, ▽ 338.15, ● 343.15. La línea representa la Ec. 3.11.

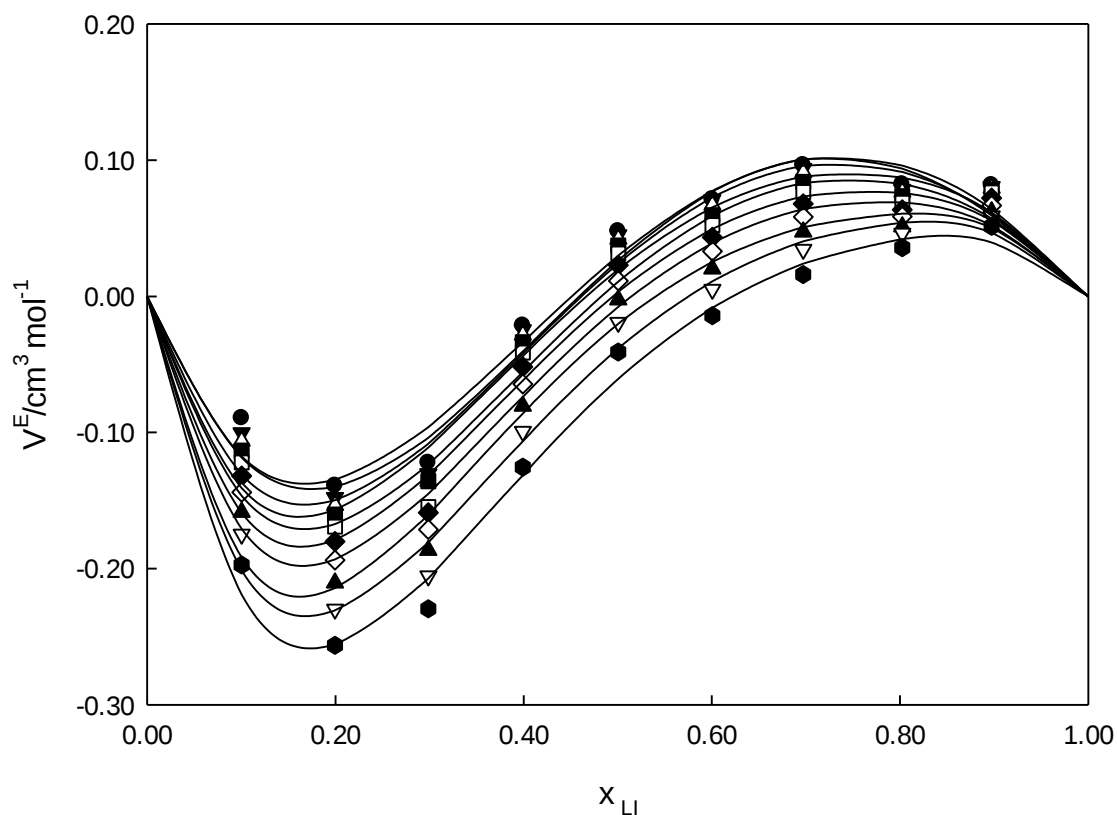


Figura 4.12. Volúmenes molares de exceso para el sistema [Amim][TFSI] + 1-propanol a diferentes temperaturas. ● 93.15, ○ 98.15, ▼ 103.15, △ 108.15, ■ 113.15, □ 118.15, ◆ 123.15, ◇ 128.15, ▲ 133.15, ▽ 138.15, ● 143.15. La línea representa la Ec. 3.11.

Los volúmenes molares negativos en la fase rica en alcohol son el resultado de interacciones químicas fuertes como la formación de puentes de hidrógeno, transferencia de carga, interacciones ion-dipolo y contribuciones estructurales debido a la diferencia en el tamaño de las moléculas. Debido a las interacciones atractivas y a un empaquetamiento eficiente que está ocurriendo entre el LI y el 1-propanol, el volumen total de la mezcla se contrae lo que conduce a valores negativos [22]. Por otro lado, valores positivos del volumen molar de exceso en la fase rica en líquido iónico indican que las interacciones entre las moléculas en el líquido iónico puro y el alcohol puro son más fuertes que las interacciones ion-dipolo que están ocurriendo entre estos componentes después de mezclarse [145]. Es decir, debido a fuerzas débiles entre el líquido iónico y el alcohol, el

---

---

volumen total de la mezcla se expande. Con el incremento de la concentración de LI en la mezcla, las moléculas de alcohol no pueden romper las fuertes interacciones de puentes de hidrógeno que existen entre catión-anión del LI, por lo que dichas interacciones se debilitan. Entre las interacciones que se encuentran presentes son las fuerzas de dispersión e interacciones no específicas, disociación de las interacciones entre catión-anión, ruptura de los puentes de hidrógeno y efectos estructurales como acomodamiento no favorable entre los componentes de la mezcla [5, 84].

Las interacciones que están ocurriendo entre moléculas similares conducen a un aumento en el volumen molar de exceso, por el contrario, interacciones que ocurren entre moléculas diferentes dan como resultado volúmenes de exceso negativos [154].

También se ha encontrado que una contribución negativa en los  $V_m^E$  negativos se debe a una gran diferencia en el volumen libre de los componentes de la mezcla. Por lo tanto, los  $V_m^E$  en el caso de alcoholes de cadena corta pueden ser interpretados en términos de interacciones de puentes de hidrógeno, mientras que los valores positivos de  $V_m^E$  con alcoholes de cadena larga pueden ser el resultado de disociaciones de puentes de hidrógeno en el alcohol [22].

En la Figura 4.13 se observan volúmenes molares de exceso negativos en todo el intervalo de concentración y temperatura para el sistema  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ . Las investigaciones demuestran que líquidos iónicos con el grupo OH en la estructura del catión tiene un efecto considerable en el volumen molar de exceso debido a la presencia de puentes de hidrógeno adicionales además de las interacciones de van der Waals e interacciones de Coulomb [19].

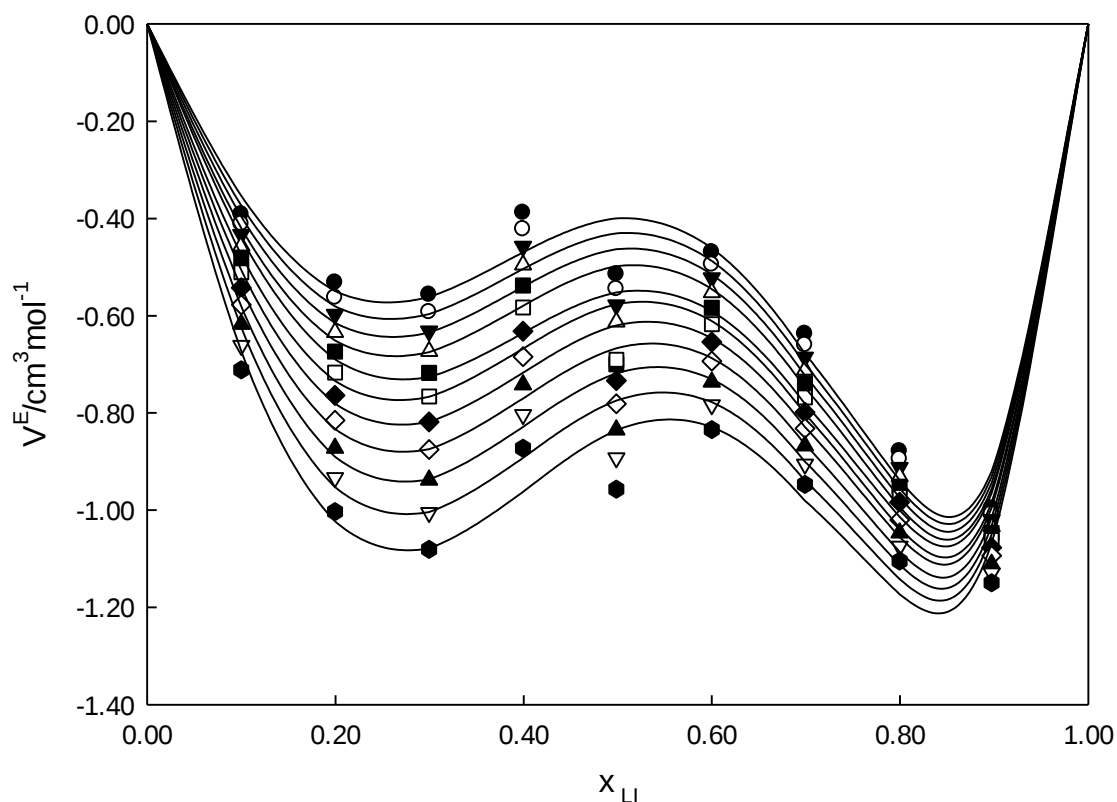


Figura 4.13. Volúmenes molares de exceso para el sistema [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI] + 1-propanol a diferentes temperaturas. ● 93.15, ○ 98.15, ▼ 303.15, △ 308.15, ■ 313.15, □ 318.15, ◆ 323.15, ◇ 328.15, ▲ 333.15, ▽ 338.15, ● 343.15. La línea representa la Ec. 3.11.

Dos de los líquidos iónicos utilizados en este trabajo tienen el catión imidazolium presente en su estructura. También se ha encontrado que el hidrógeno ubicado en el carbono 2 C2 del catión imidazolium está positivamente cargado debido a un electrón faltante en el enlace C=N, mientras que los carbonos C4 y C5 son prácticamente neutros. Por esta razón el carbono C2 tiene la habilidad de formar puentes de hidrógeno con las moléculas del soluto. Además, las investigaciones demuestran que el catión imidazolium es de carácter más ácido en comparación con el catión pyridinium. Esto se debe a que el catión pyridinium es de mayor tamaño, además de la presencia de solo un átomo electronegativo, por lo tanto, esta característica demuestra que las interacciones de puentes de hidrógeno son de mayor importancia en el catión imidazolium que en el catión pyridinium [42, 112].

---

---

Tomando en cuenta las características de los componentes puros, es posible entender los efectos energéticos y estructurales involucrados en el proceso de mezclado. El volumen molar de exceso depende de ambos efectos. Por un lado, los efectos estructurales están relacionados con las grandes diferencias entre el volumen de los componentes, el cual puede modificar la estructura y organización en la mezcla. Valores de exceso negativos sugieren una contracción en el volumen final lo cual está relacionado con un empaquetamiento más compacto de los componentes en la mezcla con respecto a los componentes puros. Los principales efectos energéticos están involucrados con el debilitamiento o quebrantamiento de las interacciones en los componentes puros y a la formación de nuevas interacciones entre los componentes de la mezcla. Es importante tomar en cuenta la ruptura de los puentes de hidrógeno entre las moléculas del 1-propanol y la reducción de fuerzas electrostáticas y fuerzas de van der Waals en el líquido iónico. Esto conduce a la formación de puentes de hidrógeno entre el OH del alcohol y el anión TFSI<sup>-</sup> [42].

El signo y la magnitud de las funciones de exceso son el resultado de efectos físicos, químicos y estructurales que están ocurriendo en el proceso de mezclado. Las contribuciones físicas comprenden fuerzas de dispersión e interacciones no específicas (débiles), lo que conduce a valores positivos del volumen molar de exceso. Las contribuciones químicas involucran interacciones no específicas como la formación de puentes de hidrógeno, transferencia de carga, dipolo-dipolo entre los componentes de la mezcla dando como resultado valores negativos. Las contribuciones estructurales se deben al ajuste geométrico de las moléculas de diferente tamaño. Este acomodamiento puede ser favorable o desfavorable, por lo que se pueden presentar valores positivos o negativos del volumen molar de exceso [132].

Para diferentes sistemas de líquidos iónicos con el anión bis(trifluoromethylsulfonyl)imide + alcohol se ha encontrado que el comportamiento de los volúmenes molares de exceso presenta curvas asimétricas en forma de “S” con un mínimo en la fase rica en alcohol y un máximo en la fase rica en líquido iónico. Deng et al. [22] investigaron el efecto de la longitud de cadena del catión imidazolium del líquido iónico 1-alkyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide + alcohol. González et al. [63] determinaron la densidad

---

---

y volumen molar de exceso del líquido iónico 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide con metanol, etanol, 1-propanol y 2-propanol a diferentes temperaturas y a presión atmosférica. Domańska et al. [34] determinaron la densidad y volúmenes molares de exceso del líquido iónico N-octylisoquinolinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide con 1-butanol, 1-hexanol y 2-feniletanol a diferentes temperaturas. González y González [59] también evaluaron las propiedades de exceso del líquido iónico con el anión bis(trifluoromethylsulfonyl)imide y con diferentes alcoholes (metanol, etanol y 1-propanol). Geppert-Rybczyńska et al. [51] determinaron las propiedades de exceso de dos líquidos iónicos con el anión bis(trifluoromethylsulfonyl)imide y el catión pyrrolidinium con metanol en un intervalo de temperatura de (288.15 a 323.15) K. En la Figura 4.14 se muestra una comparación del volumen molar de exceso para diferentes sistemas de líquidos iónicos con el anión TFSI<sup>-</sup> + alcohol. Como se observa en la gráfica, el comportamiento sigue la tendencia descrita anteriormente. Esto sostiene la idea de que el anión es principal grupo influyente en la forma, magnitud y signo del volumen molar de exceso [5].

Domańska et al. [34] demuestran que la densidad de líquidos iónicos es difícil de reproducir debido a que su valor cambia para el mismo procedimiento. Esta variación también se debe al contenido de impurezas, contenido de agua y formación de burbujas. Además, debido a que los líquidos iónicos son más viscosos que los solventes orgánicos, son más difíciles de manejar. Por ejemplo, el líquido iónico puro [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI] forma burbujas a temperaturas de (278.15, 283.15 y 288.15) K por lo tanto no fue posible determinar ninguna de las propiedades consideradas en este trabajo. Además, a concentraciones de 0.1, 0.2 y 0.3 de fracción mol de líquido iónico, la solución se vuelve amarillo-turbio. Este fenómeno puede ser atribuido al llamado “*cloud-point*”. El “*cloud point*” es la temperatura a la cual la muestra inicialmente cambia de una a dos fases [21]. Inoue y Misono [83] determinaron la temperatura de “*cloud point*” del surfactante polyoxyethylene (POE) en el líquido iónico 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate. Ellos encontraron que la temperatura de “*cloud point*” es afectada principalmente por el anión del LI. Crosthwaite et al. [21] evaluaron el efecto de la longitud de cadena del alcohol, la longitud de cadena del catión, el efecto de la sustitución del grupo metilo en el carbono 2 del catión y el efecto del anión de líquidos iónicos con el catión

---

---

imidazolium y diferentes alcoholes. Ferreira et al. [37] determinaron la temperatura de “*cloud point*” en función de la composición para investigar la solubilidad de un número de mezclas de líquidos iónicos basados en los cationes imidazolium, pyridinium, phosphonium y ammonium con alcoholes parcialmente fluorados.

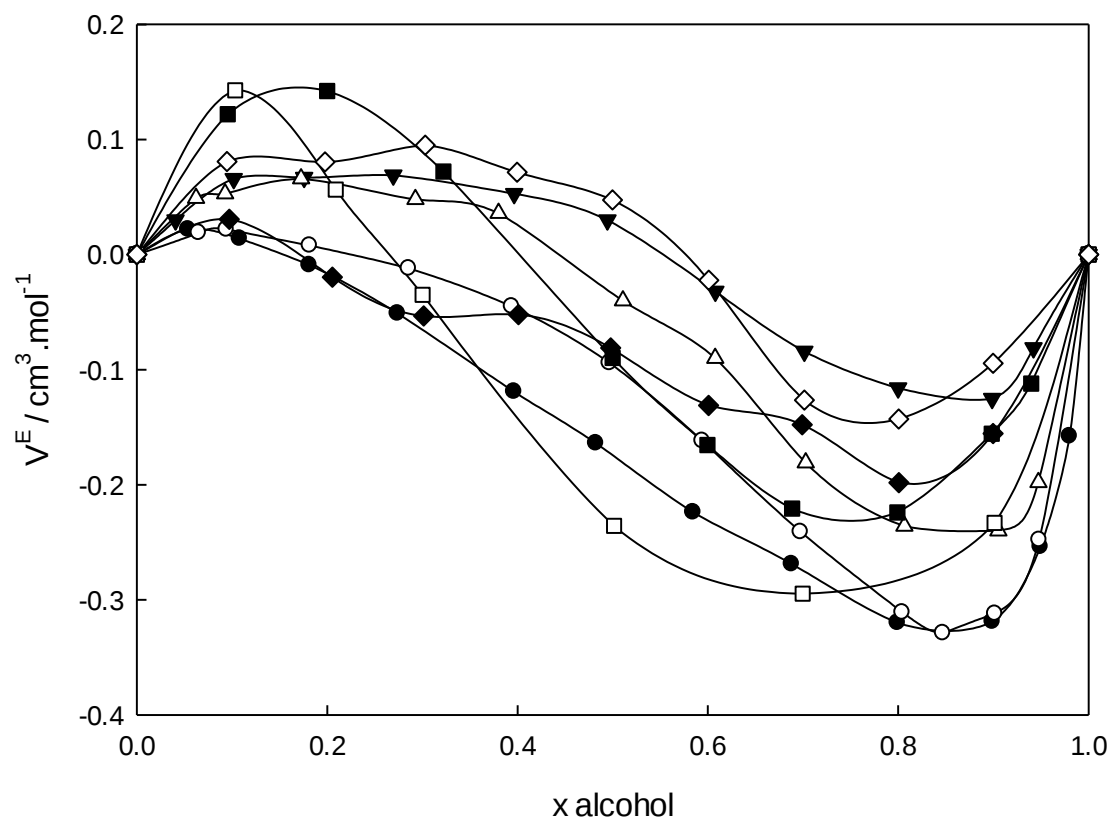


Figura 4.14. Comparación del volumen de exceso de líquidos iónicos con el anión TFSI<sup>-</sup> y diferentes alcoholes a 298.15 K. —●— metanol + [HMim][TFSI] (González et al. [63]), —○— etanol + [HMim][TFSI] (González et al. [63]), —▼— 1-propanol + [HMim][TFSI] (González et al. [63]), —△— 2-propanol + [HMim][TFSI] (González et al. [63]), —■— PEG200 + [C<sub>2</sub>mim][TFSI] (Vuksanovic et al. [147]), —□— PEG200 + [C<sub>6</sub>mim][TFSI] (Calado et al. [11]), —◆— [Et<sub>3</sub>S][TFSI] + 1-propanol (este trabajo), —◇— [Amim][TFSI] + 1-propanol (este trabajo). La línea es solo una guía para el ojo.

---

---

### *Desviaciones de viscosidad*

Al igual que los volúmenes molares de exceso, las desviaciones de viscosidad son una estimación cualitativa del tipo de interacción que está ocurriendo en la mezcla.

Las desviaciones de viscosidad ( $\Delta\eta$ ) se calcularon con la Ec. 3.15. En las Figuras 4.15 a la 4.17 se muestran las desviaciones de viscosidad para los sistemas  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  y  $[\text{Amim}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  y  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ , respectivamente y representados con la Ec. 3.11, y en las Tablas 4.12 a la 4.14 se muestran los valores de las viscosidades y desviaciones de viscosidad.

Para el sistema  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  (Figura 4.15), las desviaciones de viscosidad presentaron valores positivos en todo el intervalo de concentración y a todas las temperaturas. Para el caso del sistema  $[\text{Amim}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  (Figura 4.16), los valores de  $\Delta\eta$  fueron positivos en la fase rica en alcohol y negativos a concentraciones más altas de líquido iónico. Las desviaciones negativas se encuentran entre 0.4 y 0.9 de fracción mol de líquido iónico, mientras que los valores positivos se presentan a concentraciones bajas de LI. A composiciones de entre 0.2 y 0.3, las desviaciones de viscosidad presentaron valores positivos y negativos.

En la Figura 4.17 se observan las desviaciones de viscosidad para el sistema  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ , en el cual se presentaron valores negativos en todo el intervalo de concentración y temperatura.

De acuerdo con la literatura, la viscosidad de la mezcla depende fuertemente de su entropía, la cual está relacionada con la estructura del líquido. Las desviaciones de viscosidad de la mezcla dependen de las interacciones moleculares, así como de la forma y tamaño de las moléculas. El signo de las desviaciones de viscosidad se puede explicar mediante la competencia entre las interacciones de puente de hidrógeno y de van der Waals en la mezcla que contiene solventes moleculares y especies iónicas. En el caso de la mezcla en la cual predominan interacciones de van der Waals,  $\Delta\eta$  es negativo, por el contrario, para las mezclas en las cuales predominan los puentes de hidrógeno,  $\Delta\eta$  es positivo [18].

Por otro lado, las desviaciones de viscosidad se pueden explicar considerando diversos factores:

- 
- 
- a) la pérdida de asociación dipolar en el componente puro puede contribuir a una disminución en la viscosidad.
  - b) interacciones específicas entre diferentes componentes como la formación de puentes de hidrógeno y transferencia de carga causando un aumento en la viscosidad de la mezcla en comparación con el componente puro.

El primer factor produce desviaciones negativas en la viscosidad mientras que el segundo produce desviaciones positivas. Además, la temperatura es otro factor importante que influye fuertemente en las desviaciones de viscosidad [7, 69]. Con un incremento en la temperatura, los valores negativos de  $\Delta\eta$  se van reduciendo progresivamente, acercándose a desviaciones positivas, como es en el caso de los sistemas [Anim][TFSI] + 1-propanol y [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI] + 1-propanol (Figuras 4.16 y 4.17). El cambio en la magnitud del signo de  $\Delta\eta$  como función de la temperatura se puede atribuir a una disminución de puentes de hidrógeno. Conforme aumenta la temperatura, las interacciones se reducen debido al debilitamiento de la asociación dipolar, así como a la disociación del LI [69].

Finalmente, Gardas y Coutinho [46] mencionan que la viscosidad de líquidos iónicos está controlada principalmente por puentes de hidrógeno, fuerzas de van der Waals, peso molecular y movilidad. Además, también mencionan que un cambio en la estructura de la molécula puede producir diferencias considerables en la viscosidad.

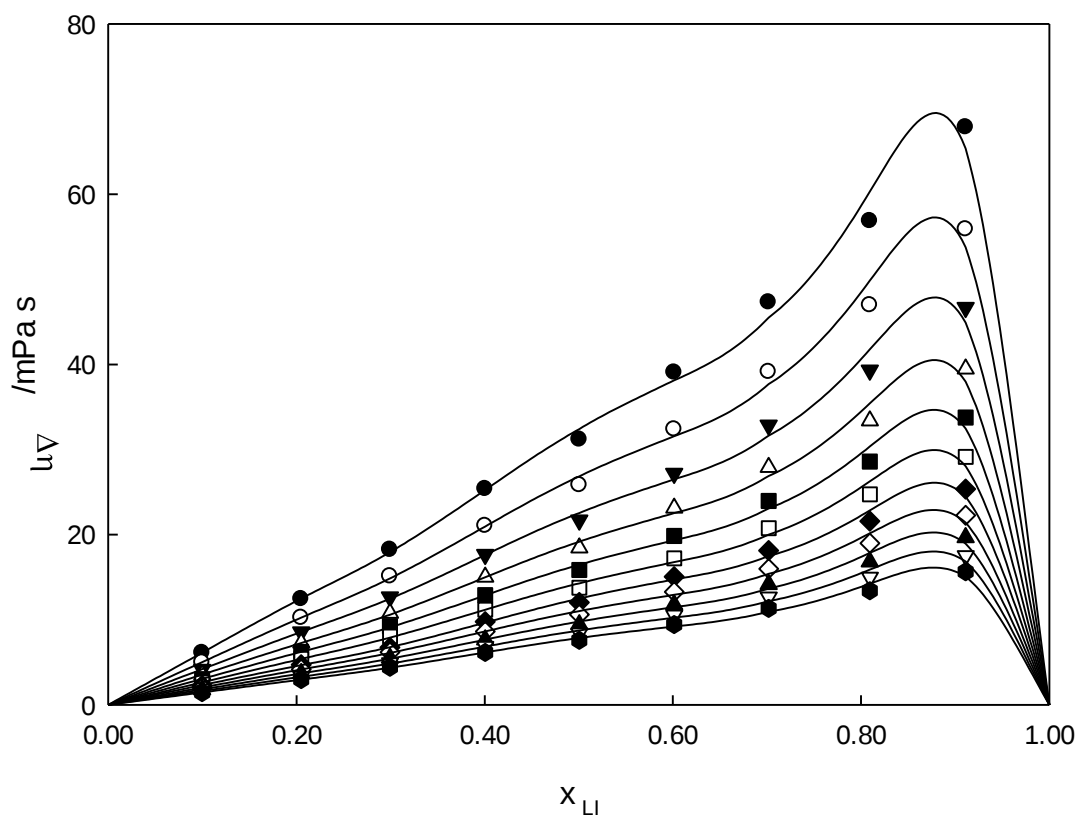


Figura 4.15. Desviaciones de viscosidad para el sistema  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  a diferentes temperaturas. ● 93.15, ○ 98.15, ▼ 103.15, △ 108.15, ■ 113.15, □ 118.15, ◆ 123.15, ◇ 128.15, ▲ 133.15, ▽ 138.15, ● 143.15. La línea representa la Ec. 3.11.

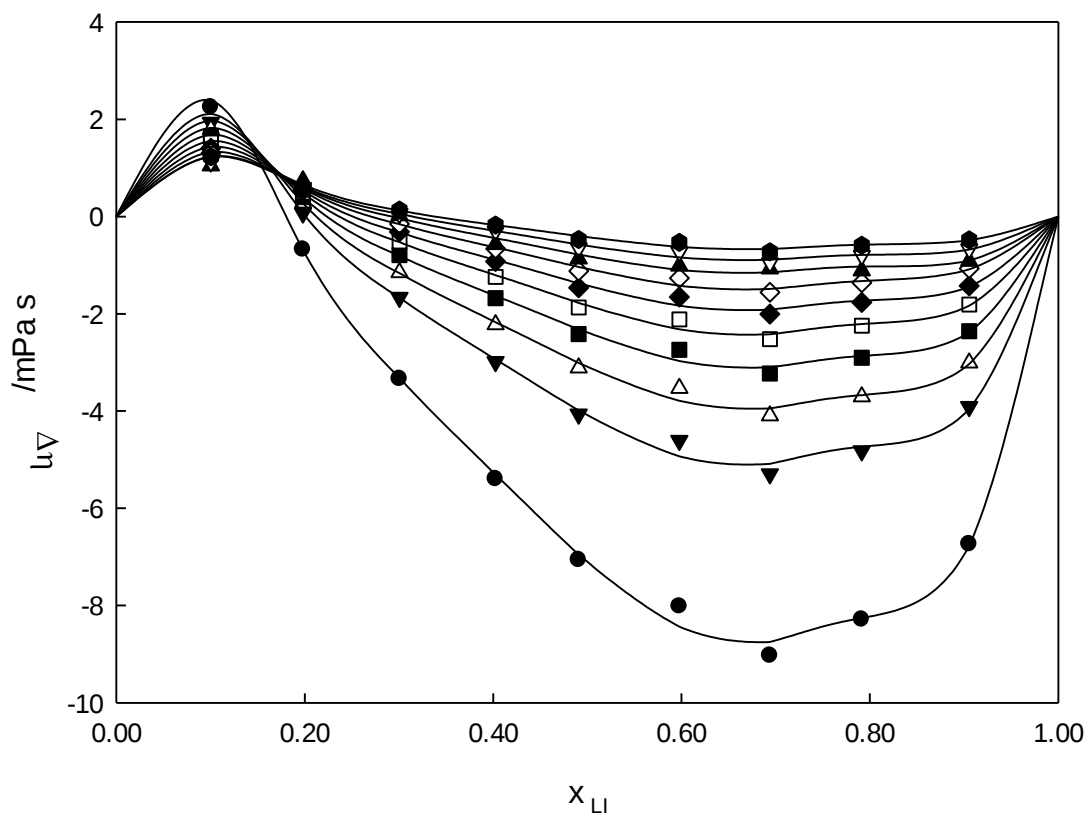


Figura 4.16. Desviaciones de viscosidad para el sistema [Amin][TFSI] + 1-propanol a diferentes temperaturas. ● 93.15, ○ 98.15, ▼ 103.15, △ 108.15, ■ 113.15, □ 118.15, ◆ 123.15, ◇ 128.15, ▲ 133.15, ▽ 138.15, ● 143.15. La línea representa la Ec. 3.11.

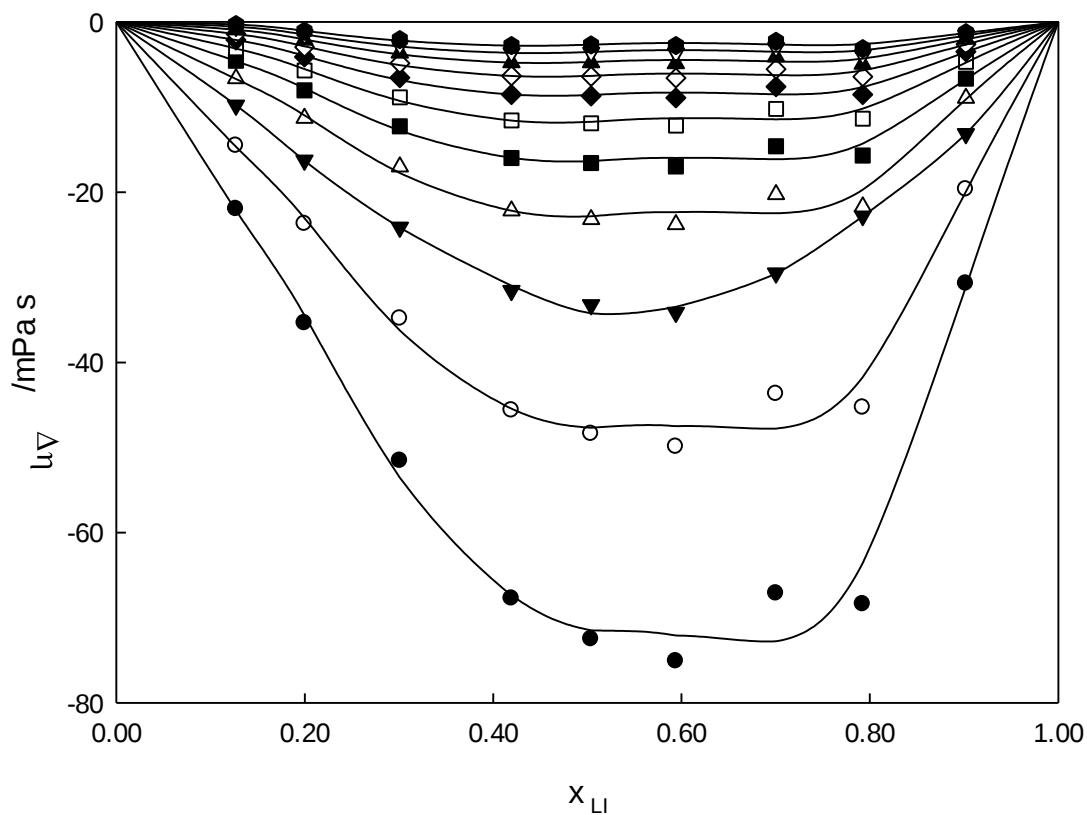


Figura 4.17. Desviaciones de viscosidad para el sistema  $[(OH)_2Im][TFSI] + 1-propanol$  a diferentes temperaturas. ● 93.15, ○ 98.15, ▼ 103.15, △ 108.15, ■ 113.15, □ 118.15, ◆ 123.15, ◇ 128.15, ▲ 133.15, ▽ 138.15, ● 143.15. La línea representa la Ec. 3.11.

---

---

### *Desviaciones de velocidad del sonido y compresibilidad isoentrópica*

La velocidad del sonido es una propiedad de gran importancia la cual describe las interacciones que existen entre soluto-soluto, solvente-solvente y soluto-solvente que están ocurriendo en la mezcla.

Las desviaciones de velocidad de sonido se determinaron con la Ec. 3.13. En las Figuras 4.18 a la 4.20 se presentan las desviaciones de velocidad de sonido para los sistemas  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  y  $[\text{Amim}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  y  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ , respectivamente representados con la Ec. 3.11 y en las Tablas 4.15 a la 4.17 se muestran los valores.

Para el caso de los sistemas  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  y  $[\text{Amim}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  (Figuras 4.18 y 4.19), se observaron valores positivos y negativos, mientras que para el sistema  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  (Figura 4.20), las desviaciones fueron negativas en todo el intervalo de concentración y temperatura estudiados.

Interacciones fuertes entre los componentes de la mezcla dan como resultado a la formación de agregados moleculares y estructuras más compactas, así, la velocidad de sonido viajará más rápido a través de la mezcla por medio de ondas longitudinales conduciendo a desviaciones de velocidad de sonido positivas con respecto al comportamiento lineal. Si la estructura se quebranta provocando una expansión en el volumen de la molécula, entonces la velocidad de sonido a través de la mezcla será menor dando como resultado desviaciones de negativas [106, 112]. Por otro lado, la temperatura es un factor importante que afecta a la velocidad de sonido y sus desviaciones. Como se observa en las Figuras 4.18 a la 4.20, las desviaciones de velocidad se acercan más a valores positivos conforme aumenta la temperatura. Esto se debe al debilitamiento en las interacciones que están ocurriendo en la mezcla entre líquido iónico + solvente con el incremento de la temperatura.

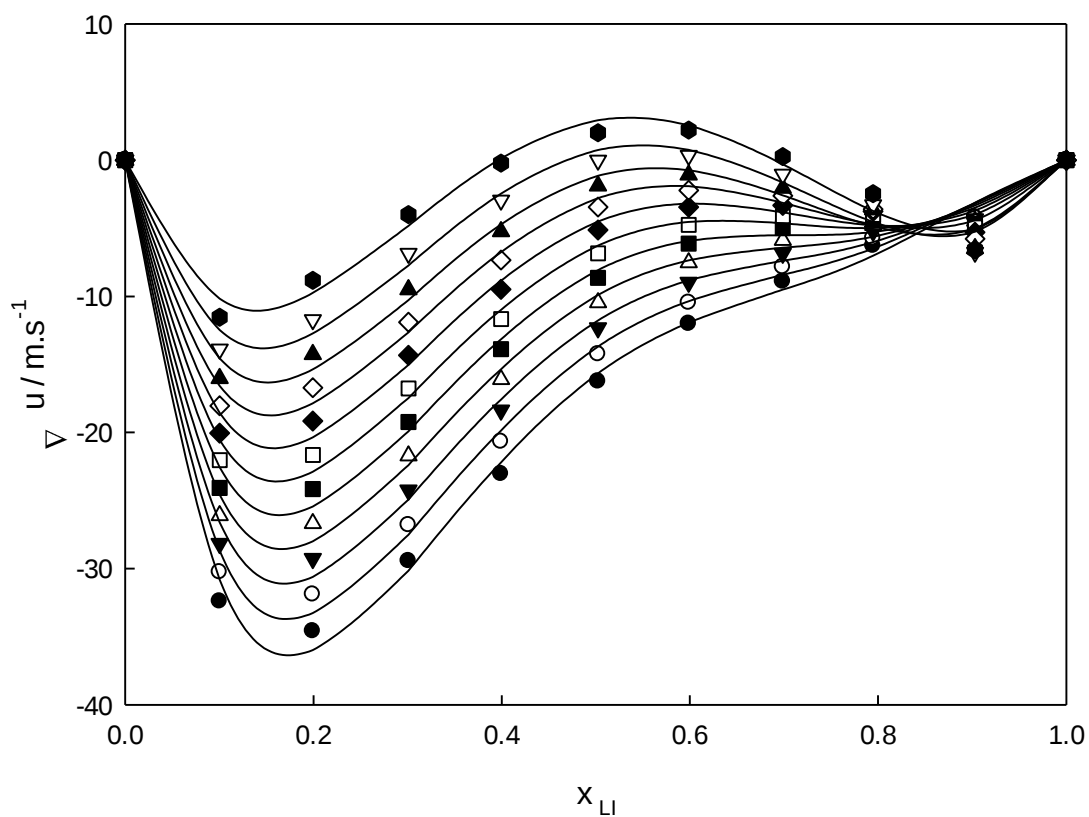


Figura 4.18. Desviaciones de velocidad de sonido para el sistema  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  a diferentes temperaturas. ● 93.15, ○ 98.15, ▼ 303.15, △ 308.15, ■ 313.15, □ 318.15, ◆ 323.15, ◇ 328.15, ▲ 333.15, ▽ 338.15, ● 343.15. La línea representa la Ec. 3.11.

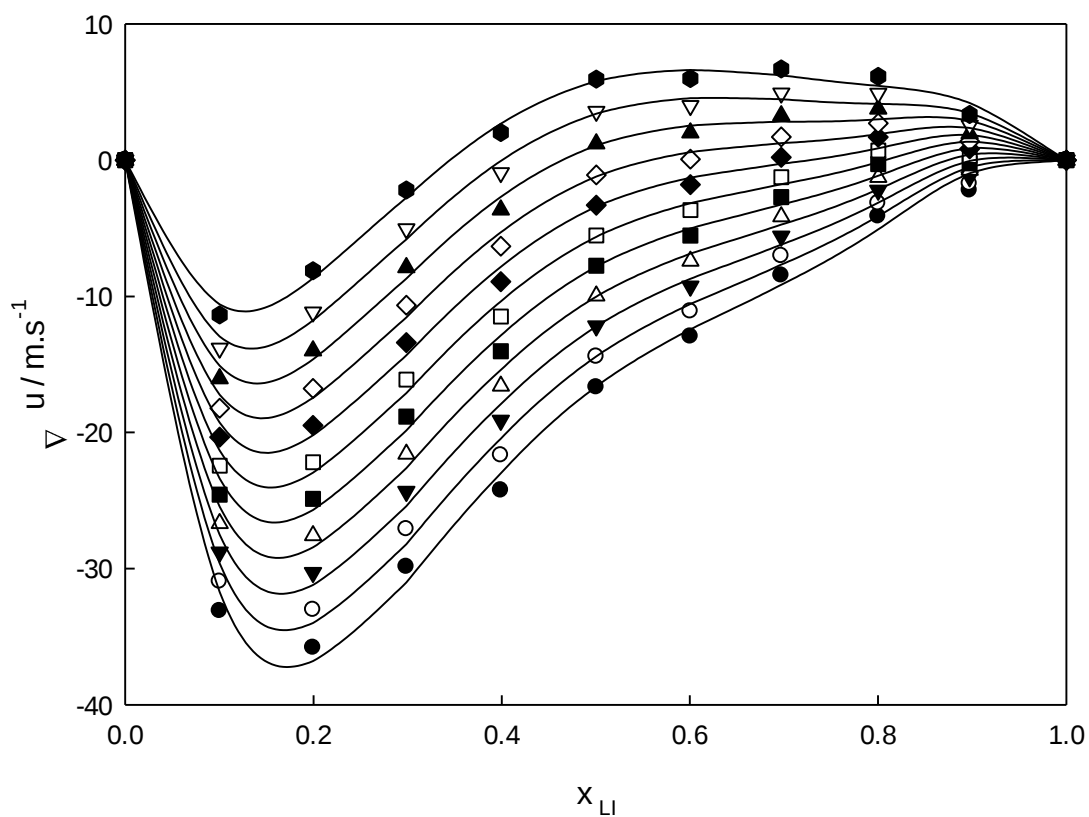


Figura 4.19. Desviaciones de velocidad de sonido para el sistema [Amim][TFSI] + 1-propanol a diferentes temperaturas. ●:93.15, ○:98.15, ▼303.15, △308.15, ■313.15, □318.15, ◆323.15, ◇328.15, ▲333.15, ▽338.15, ●343.15. La línea representa la Ec. 3.11.

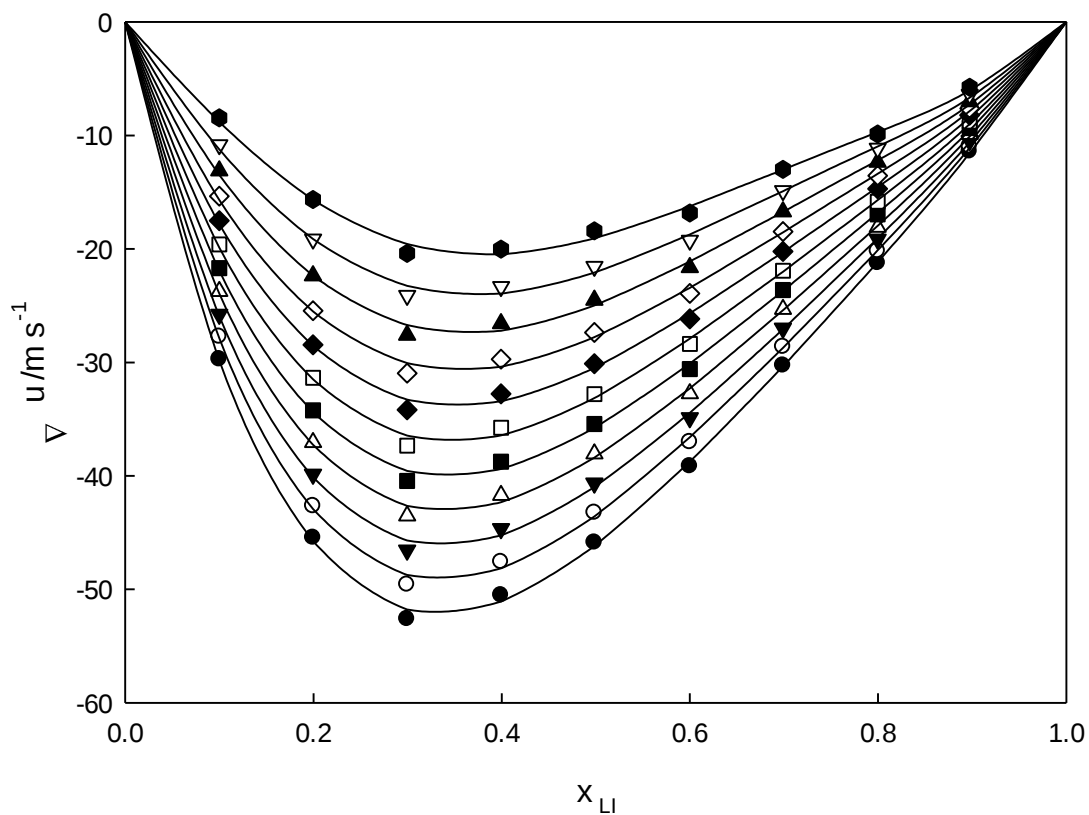


Figura 4.20. Desviaciones de velocidad del sonido para el sistema  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  a diferentes temperaturas. ● 93.15, ○ 98.15, ▼ 303.15, △ 308.15, ■ 313.15, □ 318.15, ◆ 323.15, ◇ 328.15, ▲ 333.15, ▽ 338.15, ● 343.15. La línea representa la Ec. 3.11.

---

---

El término de compresibilidad significa que mientras una onda de sonido pasa a través de un fluido, la temperatura y la presión cambian dentro de un volumen microscópico permaneciendo la entropía del sistema constante. Además, es la facilidad con la cual un medio puede ser comprimido [68].

Las compresibilidades isoentrópicas se calcularon con la Ec. 3.12 y sus desviaciones con la Ec. 3.14. En las Figuras 4.21 a la 4.23 se observan las desviaciones en la compresibilidad isoentrópica representadas con la Ec. 3.11 para los sistemas  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ ,  $[\text{Amim}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  y  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ , respectivamente. Como se muestra en las Figuras 4.21 a la 4.23, los tres sistemas presentaron desviaciones negativas en la compresibilidad para todo el intervalo de concentración y de temperatura, esto indica que estas mezclas son menos compresibles en comparación con la mezcla ideal. Además, también se debe a la proximidad o cercanía que existe entre las diferentes moléculas, así como a interacciones fuertes entre el LI y el alcohol, lo que conduce a una disminución en la compresibilidad de la mezcla [70, 141, 131]. Por otro lado, valores negativos de  $\Delta\kappa_s$  indican que especies menos compresibles se están formando en la mezcla, es decir, las interacciones entre los componentes de la mezcla dan como resultado una disminución en el espacio libre contribuyendo a desviaciones negativas en la compresibilidad (Singh et al., 2015) [131]. De acuerdo con Shekaari et al. [129] y Burakowski y Gliński [10], el proceso de solvatación implica una disminución en la compresibilidad de la solución en comparación con la del solvente. Además, la desviación en compresibilidad decrece, es decir, presenta valores más negativos, con un incremento en la temperatura, como se observa en las Figuras 4.21-4.23. Por otro lado, Govardhana et al. [67] mencionan que una variación en el volumen de la mezcla es el resultado de diversas interacciones que se están llevando a cabo a nivel molecular. Una variación no lineal de la compresibilidad en función de la temperatura es una evidencia suficiente de que existen interacciones moleculares en la solución.

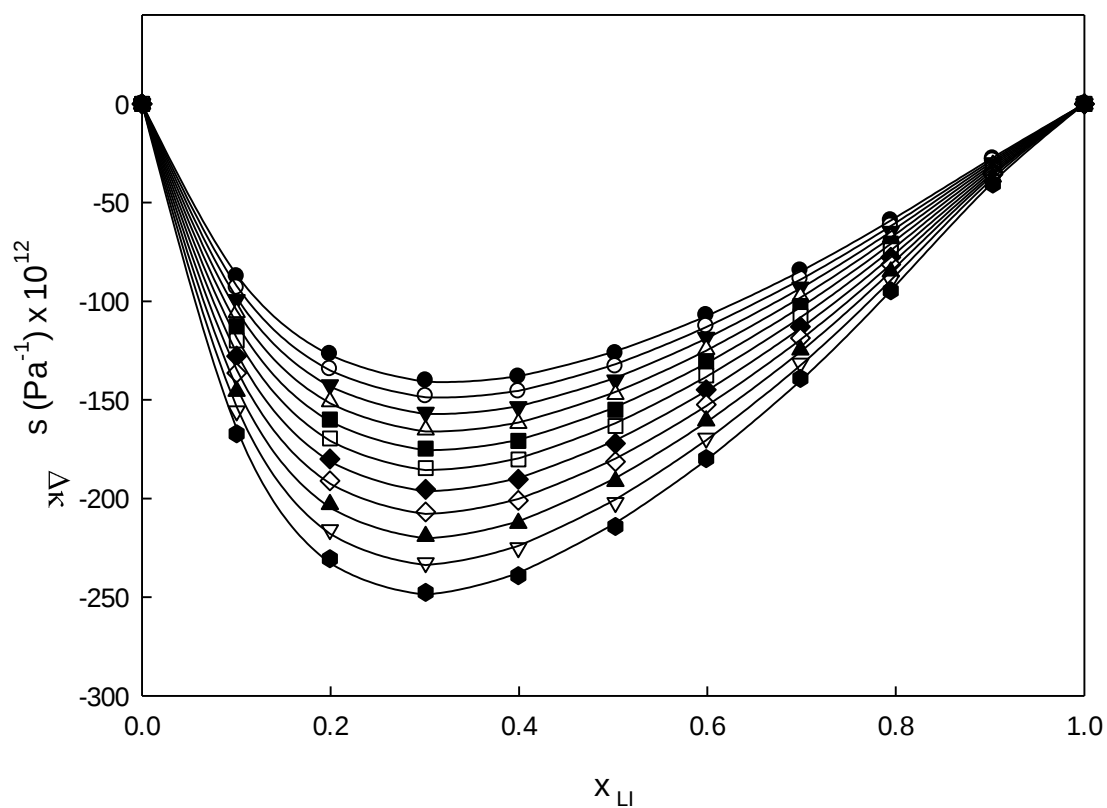


Figura 4.21. Desviaciones de compresibilidad isoentrópica para el sistema  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  a diferentes temperaturas. ● 293.15, ○ 298.15, ▼ 303.15, △ 308.15, ■ 313.15, □ 318.15, ◆ 323.15, ◇ 328.15, ▲ 333.15, ▽ 338.15, ● 343.15. La línea representa la Ec. 3.11.

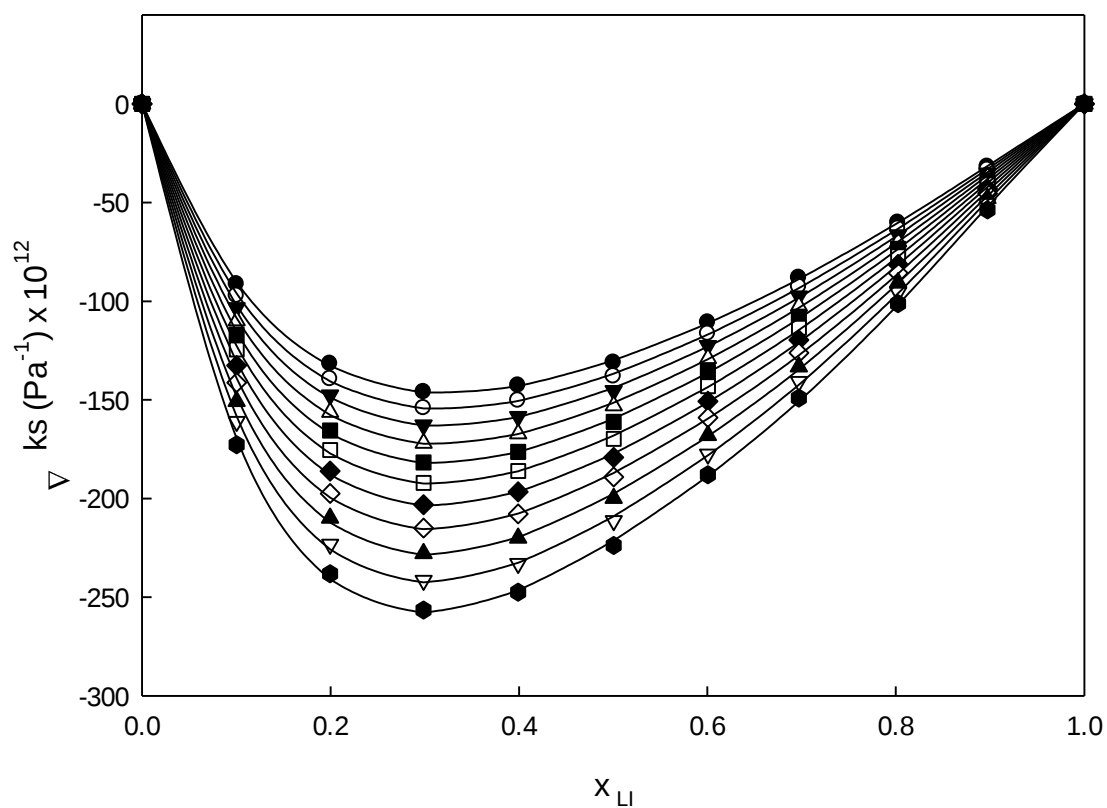


Figura 4.22. Desviaciones de compresibilidad isoentrópica para el sistema [Amim][TFSI] + 1-propanol a diferentes temperaturas. ● 293.15, ○ 298.15, ▼ 303.15, △ 308.15, ■ 313.15, □ 318.15, ◆ 323.15, ◇ 328.15, ▲ 333.15, ▽ 338.15, ● 343.15. La línea representa la Ec. 3.11.

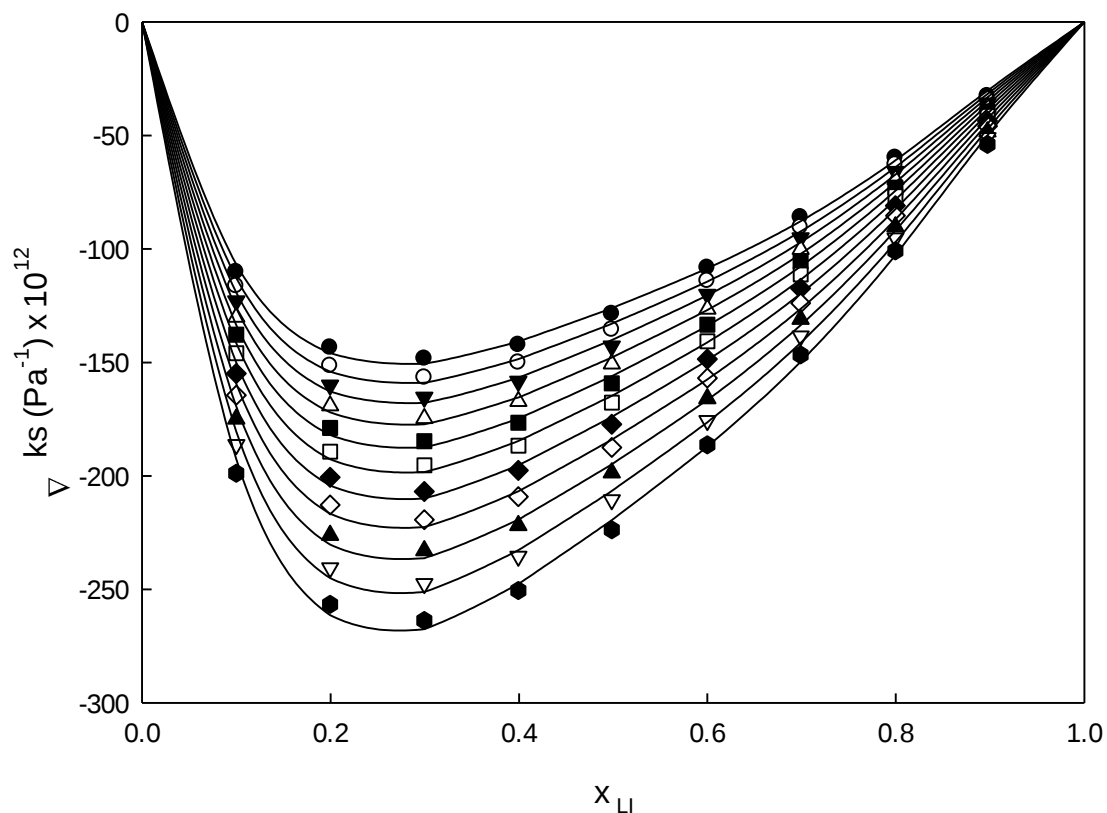


Figura 4.23. Desviaciones de compresibilidad isoentrópica para el sistema  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  a diferentes temperaturas. ● 293.15, ○ 298.15, ▼ 303.15, △ 308.15, ■ 313.15, □ 318.15, ◆ 323.15, ◇ 328.15, ▲ 333.15, ▽ 338.15, ● 343.15. La línea representa la Ec. 3.11.

En los apéndices A.1.- A.4. se muestran los parámetros de la Ec. 3.11 para los volúmenes molares de exceso, desviaciones de viscosidad, de velocidad de sonido y compresibilidad isoentrópica, respectivamente para los sistemas  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ ,  $[\text{Amim}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$  y  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}] + 1\text{-propanol}$ .

**Tabla 4.12. Densidades,  $\rho$ , volúmenes molares de exceso,  $V_m^E$ , viscosidades,  $\eta$ , y desviaciones de viscosidad  $\Delta\eta$ , para [Et<sub>3</sub>S][TFSI] (1) + 1-propanol (2)**

| $x_1$    | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>* $mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ | $x_1$   | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>* $mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ |
|----------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|---------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|
| 293.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.803              | 0.000                        | 2.140          | 0.000                | 0.59868 | 1.362              | -0.052                       | 15.930         | 39.051               |
| 0.10030  | 0.996              | -0.148                       | 4.059          | 6.086                | 0.69872 | 1.395              | -0.052                       | 19.924         | 47.282               |
| 0.19931  | 1.120              | -0.194                       | 5.998          | 12.416               | 0.79473 | 1.421              | -0.017                       | 24.948         | 56.853               |
| 0.30084  | 1.208              | -0.146                       | 7.862          | 18.219               | 0.90298 | 1.445              | 0.031                        | 31.638         | 67.867               |
| 0.39912  | 1.272              | -0.130                       | 10.676         | 25.351               | 1.00000 | 1.464              | 0.000                        | 39.640         | 0.000                |
| 0.50230  | 1.324              | -0.082                       | 12.275         | 31.143               |         |                    |                              |                |                      |
| 298.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.799              | 0.000                        | 1.897          | 0.000                | 0.59868 | 1.357              | -0.052                       | 13.492         | 32.351               |
| 0.10030  | 0.991              | -0.155                       | 3.437          | 4.964                | 0.69872 | 1.390              | -0.053                       | 16.788         | 39.128               |
| 0.19931  | 1.115              | -0.198                       | 5.082          | 10.217               | 0.79473 | 1.416              | -0.019                       | 20.874         | 46.951               |
| 0.30084  | 1.203              | -0.147                       | 6.704          | 15.076               | 0.90298 | 1.440              | 0.030                        | 26.248         | 55.876               |
| 0.39912  | 1.267              | -0.130                       | 9.087          | 21.004               | 1.00000 | 1.459              | 0.000                        | 32.433         | 0.000                |
| 0.50230  | 1.319              | -0.081                       | 10.445         | 25.808               |         |                    |                              |                |                      |
| 303.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.795              | 0.000                        | 1.687          | 0.000                | 0.59868 | 1.352              | -0.054                       | 11.560         | 27.167               |
| 0.10030  | 0.987              | -0.162                       | 2.978          | 4.144                | 0.69872 | 1.385              | -0.054                       | 14.327         | 32.835               |
| 0.19931  | 1.110              | -0.202                       | 4.379          | 8.551                | 0.79473 | 1.411              | -0.019                       | 17.707         | 39.328               |
| 0.30084  | 1.199              | -0.150                       | 5.780          | 12.650               | 0.90298 | 1.436              | 0.031                        | 22.095         | 46.675               |
| 0.39912  | 1.263              | -0.132                       | 7.814          | 17.635               | 1.00000 | 1.455              | 0.000                        | 26.920         | 0.000                |
| 0.50230  | 1.314              | -0.081                       | 8.984          | 21.677               |         |                    |                              |                |                      |
| 308.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.791              | 0.000                        | 1.506          | 0.000                | 0.59868 | 1.348              | -0.057                       | 10.010         | 23.101               |
| 0.10030  | 0.982              | -0.168                       | 2.608          | 3.511                | 0.69872 | 1.380              | -0.059                       | 12.350         | 27.890               |
| 0.19931  | 1.106              | -0.206                       | 3.816          | 7.256                | 0.79473 | 1.406              | -0.022                       | 15.186         | 33.353               |
| 0.30084  | 1.194              | -0.154                       | 5.033          | 10.751               | 0.90298 | 1.431              | 0.031                        | 18.808         | 39.472               |
| 0.39912  | 1.258              | -0.134                       | 6.787          | 14.994               | 1.00000 | 1.450              | 0.000                        | 22.643         | 39.472               |
| 0.50230  | 1.309              | -0.083                       | 7.806          | 18.437               |         |                    |                              |                |                      |
| 313.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.787              | 0.000                        | 1.348          | 0.000                | 0.59868 | 1.343              | -0.062                       | 8.742          | 19.836               |
| 0.10030  | 0.978              | -0.175                       | 2.304          | 3.009                | 0.69872 | 1.375              | -0.065                       | 10.753         | 23.936               |
| 0.19931  | 1.101              | -0.212                       | 3.354          | 6.223                | 0.79473 | 1.401              | -0.029                       | 13.150         | 28.573               |

**Tabla 4.12 (continuación)**

| $x_1$    | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>$* mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ | $x_1$   | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>$* mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ |
|----------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|---------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|
| 0.30084  | 1.189              | -0.159                       | 4.420          | 9.231                | 0.90298 | 1.426              | 0.027                        | 16.184         | 33.735               |
| 0.39912  | 1.253              | -0.139                       | 5.944          | 12.874               | 1.00000 | 1.445              | 0.000                        | 19.241         | 0.000                |
| 0.50230  | 1.304              | -0.087                       | 6.841          | 15.838               |         |                    |                              |                |                      |
| 318.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.783              | 0.000                        | 1.211          | 0.000                | 0.59868 | 1.338              | -0.069                       | 7.697          | 17.203               |
| 0.10030  | 0.973              | -0.184                       | 2.049          | 2.607                | 0.69872 | 1.371              | -0.072                       | 9.440          | 20.745               |
| 0.19931  | 1.096              | -0.221                       | 2.971          | 5.393                | 0.79473 | 1.397              | -0.036                       | 11.489         | 24.724               |
| 0.30084  | 1.184              | -0.167                       | 3.913          | 8.007                | 0.90298 | 1.421              | 0.021                        | 14.055         | 29.122               |
| 0.39912  | 1.248              | -0.146                       | 5.250          | 11.167               | 1.00000 | 1.440              | 0.000                        | 16.526         | 0.000                |
| 0.50230  | 1.299              | -0.092                       | 6.044          | 13.742               |         |                    |                              |                |                      |
| 323.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.779              | 0.000                        | 1.090          | 0.000                | 0.59868 | 1.333              | -0.076                       | 6.830          | 15.042               |
| 0.10030  | 0.969              | -0.194                       | 1.833          | 2.278                | 0.69872 | 1.366              | -0.078                       | 8.346          | 18.120               |
| 0.19931  | 1.091              | -0.230                       | 2.651          | 4.715                | 0.79473 | 1.392              | -0.041                       | 10.123         | 21.573               |
| 0.30084  | 1.180              | -0.175                       | 3.234          | 6.750                | 0.90298 | 1.416              | 0.017                        | 12.308         | 25.348               |
| 0.39912  | 1.243              | -0.154                       | 4.669          | 9.766                | 1.00000 | 1.435              | 0.000                        | 14.310         | 0.000                |
| 0.50230  | 1.295              | -0.099                       | 5.378          | 12.021               |         |                    |                              |                |                      |
| 328.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.774              | 0.000                        | 0.984          | 0.000                | 0.59868 | 1.328              | -0.085                       | 6.099          | 13.258               |
| 0.10030  | 0.964              | -0.206                       | 1.648          | 2.008                | 0.69872 | 1.361              | -0.085                       | 7.437          | 15.965               |
| 0.19931  | 1.087              | -0.242                       | 2.379          | 4.157                | 0.79473 | 1.387              | -0.046                       | 8.976          | 18.971               |
| 0.30084  | 1.175              | -0.187                       | 3.129          | 6.179                | 0.90298 | 1.412              | 0.015                        | 10.858         | 22.246               |
| 0.39912  | 1.238              | -0.166                       | 4.187          | 8.617                | 1.00000 | 1.431              | 0.000                        | 12.503         | 0.000                |
| 0.50230  | 1.290              | -0.108                       | 4.821          | 10.607               |         |                    |                              |                |                      |
| 333.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.770              | 0.000                        | 0.892          | 0.000                | 0.59868 | 1.324              | -0.097                       | 5.483          | 11.766               |
| 0.10030  | 0.960              | -0.221                       | 1.489          | 1.782                | 0.69872 | 1.356              | -0.095                       | 6.666          | 14.155               |
| 0.19931  | 1.082              | -0.258                       | 2.147          | 3.690                | 0.79473 | 1.382              | -0.053                       | 8.023          | 16.805               |

**Table 4.12 (continuación)**

| $x_1$    | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>$* mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ | $x_1$   | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>$* mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ |
|----------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|---------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|
| 0.30084  | 1.170              | -0.202                       | 2.824          | 5.488                | 0.90298 | 1.407              | 0.012                        | 9.653          | 19.662               |
| 0.39912  | 1.234              | -0.180                       | 3.775          | 7.652                | 1.00000 | 1.426              | 0.000                        | 10.995         | 0.000                |
| 0.50230  | 1.285              | -0.120                       | 4.346          | 9.418                |         |                    |                              |                |                      |
| 338.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.766              | 0.000                        | 0.810          | 0.000                | 0.59868 | 1.319              | -0.112                       | 4.956          | 10.503               |
| 0.10030  | 0.955              | -0.237                       | 1.351          | 1.592                | 0.69872 | 1.352              | -0.109                       | 6.007          | 12.623               |
| 0.19931  | 1.077              | -0.276                       | 1.949          | 3.298                | 0.79473 | 1.378              | -0.063                       | 7.205          | 14.967               |
| 0.30084  | 1.165              | -0.222                       | 2.563          | 4.905                | 0.90298 | 1.402              | 0.008                        | 8.627          | 17.477               |
| 0.39912  | 1.229              | -0.198                       | 3.421          | 6.836                | 1.00000 | 1.421              | 0.000                        | 9.726          | 0.000                |
| 0.50230  | 1.280              | -0.136                       | 3.941          | 8.414                |         |                    |                              |                |                      |
| 343.15   |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.761              | 0.000                        | 0.737          | 0.000                | 0.59868 | 1.314              | -0.134                       | 4.506          | 9.436                |
| 0.10030  | 0.950              | -0.259                       | 1.232          | 1.431                | 0.69872 | 1.347              | -0.127                       | 5.444          | 11.326               |
| 0.19931  | 1.072              | -0.301                       | 1.778          | 2.965                | 0.79473 | 1.373              | -0.078                       | 6.506          | 13.410               |
| 0.30084  | 1.160              | -0.247                       | 2.338          | 4.411                | 0.90298 | 1.398              | -0.000                       | 7.765          | 15.640               |
| 0.39912  | 1.224              | -0.223                       | 3.123          | 6.151                | 1.00000 | 1.417              | 0.000                        | 8.658          | 0.000                |
| 0.50230  | 1.275              | -0.157                       | 3.594          | 7.566                |         |                    |                              |                |                      |

Incertidumbre estándar relativa en densidad = 0.001

Incertidumbre estándar relativa en viscosidad = 0.02

Incertidumbre estándar en la temperatura = 0.01 K

Incertidumbre estándar en la presión: 10 kPa

Incertidumbre en la fracción mol: 0.0002

**Tabla 4.13. Densidades,  $\rho$ , volúmenes molares de exceso,  $V_m^E$ , viscosidades,  $\eta$ , y desviaciones de viscosidad  $\Delta\eta$ , para [Amim][TFSI] (1) + 1-propanol (2)**

| $x_1$    | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>$* mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ | $x_1$   | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>$* mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ |
|----------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|---------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|
| 293.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.803              | 0.000                        | 2.140          | 0.000                | 0.60065 | 1.394              | 0.071                        | 15.658         | -8.018               |
| 0.10027  | 1.004              | -0.089                       | 3.840          | 2.248                | 0.69710 | 1.428              | 0.096                        | 19.103         | -9.029               |
| 0.19952  | 1.135              | -0.139                       | 5.726          | -0.675               | 0.80242 | 1.459              | 0.082                        | 24.101         | -8.287               |
| 0.29866  | 1.228              | -0.122                       | 7.589          | -3.335               | 0.89736 | 1.482              | 0.081                        | 30.620         | -6.736               |
| 0.39895  | 1.297              | -0.021                       | 9.850          | -5.397               | 1.00000 | 1.504              | 0.000                        | 41.829         | 0.000                |
| 0.50035  | 1.351              | 0.047                        | 12.169         | -7.063               |         |                    |                              |                |                      |
| 298.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.799              | 0.000                        | 1.897          | 0.000                | 0.60065 | 1.389              | 0.071                        | 13.295         | -6.064               |
| 0.10027  | 1.000              | -0.094                       | 3.319          | 2.087                | 0.69710 | 1.423              | 0.095                        | 16.148         | -6.892               |
| 0.19952  | 1.131              | -0.143                       | 4.911          | -0.235               | 0.80242 | 1.454              | 0.080                        | 20.241         | -6.304               |
| 0.29866  | 1.223              | -0.126                       | 6.503          | -2.368               | 0.89736 | 1.477              | 0.080                        | 25.503         | -5.135               |
| 0.39895  | 1.292              | -0.022                       | 8.419          | -4.006               | 1.00000 | 1.499              | 0.000                        | 34.318         | 0.000                |
| 0.50035  | 1.346              | 0.047                        | 10.375         | -5.339               |         |                    |                              |                |                      |
| 303.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.795              | 0.000                        | 1.687          | 0.000                | 0.60065 | 1.384              | 0.070                        | 11.423         | -4.609               |
| 0.10027  | 0.995              | -0.100                       | 2.899          | 1.936                | 0.69710 | 1.418              | 0.093                        | 13.815         | -5.296               |
| 0.19952  | 1.126              | -0.147                       | 4.265          | 0.070                | 0.80242 | 1.448              | 0.078                        | 17.213         | -4.820               |
| 0.29866  | 1.218              | -0.130                       | 5.633          | -1.666               | 0.89736 | 1.472              | 0.080                        | 21.533         | -3.913               |
| 0.39895  | 1.287              | -0.024                       | 7.268          | -2.985               | 1.00000 | 1.494              | 0.000                        | 28.511         | 0.000                |
| 0.50035  | 1.341              | 0.045                        | 8.939          | -4.066               |         |                    |                              |                |                      |
| 308.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.791              | 0.000                        | 1.506          | 0.000                | 0.60065 | 1.379              | 0.066                        | 9.908          | -3.529               |
| 0.10027  | 0.991              | -0.106                       | 2.555          | 1.788                | 0.69710 | 1.413              | 0.091                        | 11.945         | -4.096               |
| 0.19952  | 1.121              | -0.153                       | 3.740          | 0.278                | 0.80242 | 1.443              | 0.076                        | 14.802         | -3.703               |
| 0.29866  | 1.213              | -0.135                       | 4.928          | -1.151               | 0.89736 | 1.467              | 0.079                        | 18.376         | -3.007               |
| 0.39895  | 1.282              | -0.028                       | 6.339          | -2.223               | 1.00000 | 1.489              | 0.000                        | 23.965         | 0.000                |
| 0.50035  | 1.336              | 0.041                        | 7.782          | -3.110               |         |                    |                              |                |                      |
| 313.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.787              | 0.000                        | 1.348          | 0.000                | 0.60065 | 1.374              | 0.059                        | 8.677          | -2.739               |
| 0.10027  | 0.986              | -0.113                       | 2.265          | 1.652                | 0.69710 | 1.408              | 0.084                        | 10.421         | -3.224               |
| 0.19952  | 1.116              | -0.160                       | 3.302          | 0.402                | 0.80242 | 1.438              | 0.073                        | 12.850         | -2.899               |

**Tabla 4.13 (continuación)**

| $x_1$    | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>* $mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ | $x_1$   | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>* $mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ |
|----------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|---------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|
| 0.29866  | 1.208              | -0.135                       | 4.343          | -0.792               | 0.89736 | 1.462              | 0.078                        | 15.851         | -2.356               |
| 0.39895  | 1.277              | -0.033                       | 5.573          | -1.675               | 1.00000 | 1.484              | 0.000                        | 20.410         | 0.000                |
| 0.50035  | 1.331              | 0.037                        | 6.833          | -2.416               |         |                    |                              |                |                      |
| 318.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.783              | 0.000                        | 1.211          | 0.000                | 0.60065 | 1.369              | 0.052                        | 7.657          | -2.115               |
| 0.10027  | 0.981              | -0.122                       | 2.020          | 1.521                | 0.69710 | 1.403              | 0.076                        | 9.173          | -2.522               |
| 0.19952  | 1.111              | -0.169                       | 2.937          | 0.488                | 0.80242 | 1.433              | 0.068                        | 11.260         | -2.244               |
| 0.29866  | 1.203              | -0.154                       | 3.857          | -0.514               | 0.89736 | 1.457              | 0.076                        | 13.808         | -1.811               |
| 0.39895  | 1.272              | -0.041                       | 4.937          | -1.241               | 1.00000 | 1.479              | 0.000                        | 17.512         | 0.000                |
| 0.50035  | 1.326              | 0.031                        | 6.042          | -1.870               |         |                    |                              |                |                      |
| 323.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.779              | 0.000                        | 1.090          | 0.000                | 0.60065 | 1.364              | 0.043                        | 6.806          | -1.652               |
| 0.10027  | 0.977              | -0.131                       | 1.813          | 1.407                | 0.69710 | 1.398              | 0.067                        | 8.131          | -2.002               |
| 0.19952  | 1.107              | -0.180                       | 2.631          | 0.537                | 0.80242 | 1.428              | 0.063                        | 9.944          | -1.762               |
| 0.29866  | 1.198              | -0.158                       | 3.452          | -0.313               | 0.89736 | 1.452              | 0.072                        | 12.121         | -1.424               |
| 0.39895  | 1.267              | -0.051                       | 4.401          | -0.923               | 1.00000 | 1.474              | 0.000                        | 15.188         | 0.000                |
| 0.50035  | 1.321              | 0.022                        | 5.384          | -1.463               |         |                    |                              |                |                      |
| 328.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.774              | 0.000                        | 0.984          | 0.000                | 0.60065 | 1.359              | 0.033                        | 6.089          | -1.264               |
| 0.10027  | 0.972              | -0.143                       | 1.635          | 1.301                | 0.69710 | 1.393              | 0.058                        | 7.261          | -1.558               |
| 0.19952  | 1.102              | -0.193                       | 2.369          | 0.571                | 0.80242 | 1.423              | 0.058                        | 8.833          | -1.360               |
| 0.29866  | 1.193              | -0.171                       | 3.106          | -0.152               | 0.89736 | 1.447              | 0.066                        | 10.730         | -1.068               |
| 0.39895  | 1.262              | -0.064                       | 3.956          | -0.660               | 1.00000 | 1.469              | 0.000                        | 13.230         | 0.000                |
| 0.50035  | 1.316              | 0.011                        | 4.829          | -1.121               |         |                    |                              |                |                      |
| 333.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.770              | 0.000                        | 0.892          | 0.000                | 0.60065 | 1.354              | 0.020                        | 5.484          | -0.964               |
| 0.10027  | 0.967              | -0.158                       | 1.480          | 1.203                | 0.69710 | 1.388              | 0.047                        | 6.517          | -1.224               |
| 0.19952  | 1.097              | -0.210                       | 2.145          | 0.586                | 0.80242 | 1.418              | 0.051                        | 7.905          | -1.045               |

**Table 4.13 (continuación)**

| $x_1$    | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>$* mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ | $x_1$   | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>$* mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ |
|----------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|---------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|
| 0.29866  | 1.188              | -0.186                       | 2.812          | -0.032               | 0.89736 | 1.442              | 0.062                        | 9.475          | -0.889               |
| 0.39895  | 1.257              | -0.080                       | 3.572          | -0.455               | 1.00000 | 1.464              | 0.000                        | 11.621         | 0.000                |
| 0.50035  | 1.311              | -0.002                       | 4.360          | -0.856               |         |                    |                              |                |                      |
| 338.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.766              | 0.000                        | 0.810          | 0.000                | 0.60065 | 1.349              | 0.005                        | 4.964          | -0.731               |
| 0.10027  | 0.963              | -0.174                       | 1.346          | 1.117                | 0.69710 | 1.383              | 0.034                        | 5.888          | -0.953               |
| 0.19952  | 1.092              | -0.229                       | 1.952          | 0.589                | 0.80242 | 1.414              | 0.046                        | 7.110          | -0.802               |
| 0.29866  | 1.183              | -0.205                       | 2.558          | 0.057                | 0.89736 | 1.437              | 0.058                        | 8.497          | -0.668               |
| 0.39895  | 1.252              | -0.099                       | 3.252          | -0.298               | 1.00000 | 1.459              | 0.000                        | 10.276         | 0.000                |
| 0.50035  | 1.306              | -0.019                       | 3.956          | -0.648               |         |                    |                              |                |                      |
| 343.15   |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.761              | 0.000                        | 0.737          | 0.000                | 0.60065 | 1.344              | -0.014                       | 4.520          | -0.529               |
| 0.10027  | 0.958              | -0.197                       | 1.230          | 1.230                | 0.69710 | 1.378              | 0.016                        | 5.347          | -0.724               |
| 0.19952  | 1.087              | -0.256                       | 1.786          | 0.590                | 0.80242 | 1.409              | 0.035                        | 6.434          | -0.590               |
| 0.29866  | 1.178              | -0.229                       | 2.341          | 0.133                | 0.89736 | 1.432              | 0.051                        | 7.660          | -0.479               |
| 0.39895  | 1.247              | -0.125                       | 2.974          | -0.175               | 1.00000 | 1.454              | 0.000                        | 9.124          | 0.000                |
| 0.50035  | 1.301              | -0.040                       | 3.611          | -0.470               |         |                    |                              |                |                      |

Incertidumbre estándar relativa en densidad = 0.001

Incertidumbre estándar relativa en viscosidad = 0.02

Incertidumbre estándar en la temperatura = 0.01 K

Incertidumbre estándar en la presión: 10 kPa

Incertidumbre en la fracción mol: 0.0002

**Tabla 4.14. Densidades,  $\rho$ , volúmenes molares de exceso,  $V_m^E$ , viscosidades,  $\eta$ , y desviaciones de viscosidad  $\Delta\eta$ , para [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI] (1) + 1-propanol (2)**

| $x_1$    | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>$* mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ | $x_1$   | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>$* mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ |
|----------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|---------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|
| 293.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.803              | 0.000                        | 2.140          | 0.000                | 0.59991 | 1.575              | -0.469                       | 65.747         | -75.122              |
| 0.09979  | 1.038              | -0.391                       | 6.428          | -21.969              | 0.69895 | 1.631              | -0.637                       | 99.341         | -67.148              |
| 0.19941  | 1.206              | -0.531                       | 10.555         | -35.382              | 0.79958 | 1.679              | -0.879                       | 120.221        | -68.399              |
| 0.29934  | 1.333              | -0.556                       | 18.740         | -51.567              | 0.89727 | 1.719              | -0.996                       | 184.260        | -30.731              |
| 0.39925  | 1.429              | -0.388                       | 31.048         | -67.760              | 1.00000 | 1.746              | 0.000                        | 238.601        | 0.000                |
| 0.49846  | 1.510              | -0.514                       | 46.706         | -72.503              |         |                    |                              |                |                      |
| 298.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.799              | 0.000                        | 1.897          | 0.000                | 0.59991 | 1.570              | -0.495                       | 51.397         | -49.903              |
| 0.09979  | 1.034              | -0.411                       | 5.606          | -14.532              | 0.69895 | 1.625              | -0.660                       | 76.101         | -43.686              |
| 0.19941  | 1.201              | -0.563                       | 9.086          | -23.709              | 0.79958 | 1.673              | -0.895                       | 90.444         | -45.314              |
| 0.29934  | 1.328              | -0.592                       | 15.555         | -34.827              | 0.89727 | 1.713              | -1.007                       | 135.124        | -19.664              |
| 0.39925  | 1.424              | -0.421                       | 25.305         | -45.644              | 1.00000 | 1.740              | 0.000                        | 171.825        | 0.000                |
| 0.49846  | 1.504              | -0.545                       | 37.273         | -48.398              |         |                    |                              |                |                      |
| 303.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.795              | 0.000                        | 1.687          | 0.000                | 0.59991 | 1.564              | -0.522                       | 40.936         | -34.131              |
| 0.09979  | 1.029              | -0.432                       | 4.920          | -9.781               | 0.69895 | 1.619              | -0.685                       | 59.327         | -29.490              |
| 0.19941  | 1.196              | -0.597                       | 7.864          | -16.252              | 0.79958 | 1.668              | -0.912                       | 77.947         | -22.748              |
| 0.29934  | 1.322              | -0.631                       | 13.067         | -24.128              | 0.89727 | 1.707              | -1.020                       | 101.708        | -13.141              |
| 0.39925  | 1.419              | -0.457                       | 20.933         | -31.559              | 1.00000 | 1.734              | 0.000                        | 127.520        | 0.000                |
| 0.49846  | 1.499              | -0.577                       | 30.207         | -33.234              |         |                    |                              |                |                      |
| 308.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.791              | 0.000                        | 1.506          | 0.000                | 0.59991 | 1.558              | -0.552                       | 33.184         | -23.779              |
| 0.09979  | 1.024              | -0.456                       | 4.339          | -6.639               | 0.69895 | 1.614              | -0.711                       | 47.169         | -20.270              |
| 0.19941  | 1.192              | -0.633                       | 6.844          | -11.306              | 0.79958 | 1.662              | -0.931                       | 54.767         | -21.720              |
| 0.29934  | 1.317              | -0.673                       | 11.092         | -17.022              | 0.89727 | 1.701              | -1.033                       | 78.316         | -8.954               |
| 0.39925  | 1.414              | -0.495                       | 17.589         | -22.178              | 1.00000 | 1.728              | 0.000                        | 96.923         | 0.000                |
| 0.49846  | 1.493              | -0.612                       | 24.908         | -23.200              |         |                    |                              |                |                      |
| 313.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.787              | 0.000                        | 1.34825        | 0.000                | 0.59991 | 1.553              | -0.583                       | 27.380         | -16.959              |
| 0.09979  | 1.020              | -0.481                       | 3.84882        | -4.559               | 0.69895 | 1.608              | -0.738                       | 37.928         | -14.595              |
| 0.19941  | 1.187              | -0.673                       | 5.99086        | -8.020               | 0.79958 | 1.656              | -0.951                       | 43.918         | -15.676              |

**Table 4.14 (continuación)**

| $x_1$    | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>* $mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ | $x_1$   | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>* $mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ |
|----------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|---------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|
| 0.29934  | 1.312              | -0.717                       | 9.54086        | -12.256              | 0.89727 | 1.695              | -1.047                       | 61.381         | -6.638               |
| 0.39925  | 1.408              | -0.537                       | 14.918         | -15.984              | 1.00000 | 1.722              | 0.000                        | 75.562         | 0.000                |
| 0.49846  | 1.488              | -0.699                       | 20.849         | -16.571              |         |                    |                              |                |                      |
| 318.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.783              | 0.000                        | 1.211          | 0.000                | 0.599   | 1.547              | -0.617                       | 22.857         | -12.176              |
| 0.09979  | 1.015              | -0.510                       | 3.433          | -3.094               | 0.698   | 1.602              | -0.767                       | 31.313         | -10.213              |
| 0.19941  | 1.182              | -0.716                       | 5.274          | -5.699               | 0.799   | 1.650              | -0.972                       | 35.763         | -11.372              |
| 0.29934  | 1.307              | -0.766                       | 8.279          | -8.871               | 0.897   | 1.690              | -1.061                       | 49.131         | -4.688               |
| 0.39925  | 1.403              | -0.583                       | 12.808         | -11.565              | 1.000   | 1.716              | 0.000                        | 59.803         | 0.000                |
| 0.49846  | 1.482              | -0.690                       | 17.641         | -11.903              |         |                    |                              |                |                      |
| 323.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.779              | 0.000                        | 1.090          | 0.000                | 0.59991 | 1.542              | -0.653                       | 19.340         | -8.900               |
| 0.09979  | 1.011              | -0.542                       | 3.071          | -2.101               | 0.69895 | 1.597              | -0.798                       | 25.887         | -7.608               |
| 0.19941  | 1.177              | -0.763                       | 4.674          | -4.096               | 0.79958 | 1.645              | -0.983                       | 29.516         | -8.518               |
| 0.29934  | 1.302              | -0.818                       | 7.233          | -6.535               | 0.89727 | 1.684              | -1.076                       | 39.966         | -3.478               |
| 0.39925  | 1.398              | -0.631                       | 11.089         | -8.525               | 1.00000 | 1.711              | 0.000                        | 48.286         | 0.000                |
| 0.49846  | 1.477              | -0.733                       | 15.106         | -8.692               |         |                    |                              |                |                      |
| 328.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.774              | 0.000                        | 0.984          | 0.000                | 0.59991 | 1.536              | -0.693                       | 16.532         | -6.571               |
| 0.09979  | 1.006              | -0.577                       | 2.759          | -1.400               | 0.69895 | 1.591              | -0.831                       | 21.876         | -5.542               |
| 0.19941  | 1.172              | -0.815                       | 4.171          | -2.942               | 0.79958 | 1.639              | -1.020                       | 24.734         | -6.413               |
| 0.29934  | 1.297              | -0.875                       | 6.368          | -4.850               | 0.89727 | 1.678              | -1.093                       | 32.990         | -2.599               |
| 0.39925  | 1.393              | -0.684                       | 9.679          | -6.340               | 1.00000 | 1.705              | 0.000                        | 39.566         | 0.000                |
| 0.49846  | 1.472              | -0.781                       | 13.051         | -6.404               |         |                    |                              |                |                      |
| 333.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.770              | 0.000                        | 0.892          | 0.000                | 0.59991 | 1.531              | -0.736                       | 14.292         | -4.876               |
| 0.09979  | 1.001              | -0.617                       | 2.491          | -0.900               | 0.69895 | 1.586              | -0.867                       | 18.679         | -4.083               |
| 0.19941  | 1.167              | -0.872                       | 3.742          | -2.110               | 0.79958 | 1.633              | -1.046                       | 20.938         | -4.929               |

**Table 4.14 (continuación)**

| $x_1$    | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>$* mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ | $x_1$   | $\rho/g * cm^{-3}$ | $V_m^E/cm^3$<br>$* mol^{-1}$ | $\eta/mPa * s$ | $\Delta\eta/mPa * s$ |
|----------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|---------|--------------------|------------------------------|----------------|----------------------|
| 0.29934  | 1.292              | -0.938                       | 5.644          | -3.626               | 0.89727 | 1.673              | -1.110                       | 27.567         | -2.000               |
| 0.39925  | 1.388              | -0.741                       | 8.509          | -4.760               | 1.00000 | 1.699              | 0.000                        | 32.879         | 0.000                |
| 0.49846  | 1.466              | -0.834                       | 11.370         | -4.760               |         |                    |                              |                |                      |
| 338.15 K |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.766              | 0.000                        | 0.810          | 0.000                | 0.59991 | 1.526              | -0.783                       | 12.460         | -3.660               |
| 0.09979  | 0.996              | -0.661                       | 2.255          | -0.549               | 0.69895 | 1.580              | -0.905                       | 16.119         | -3.033               |
| 0.19941  | 1.162              | -0.933                       | 3.374          | -1.507               | 0.79958 | 1.628              | -1.074                       | 17.867         | -3.905               |
| 0.29934  | 1.287              | -1.005                       | 5.034          | -2.732               | 0.89727 | 1.667              | -1.129                       | 23.337         | -1.557               |
| 0.39925  | 1.382              | -0.804                       | 7.521          | -3.619               | 1.00000 | 1.694              | 0.000                        | 27.690         | 0.000                |
| 0.49846  | 1.461              | -0.892                       | 9.988          | -3.567               |         |                    |                              |                |                      |
| 343.15   |                    |                              |                |                      |         |                    |                              |                |                      |
| 0.00000  | 0.761              | 0.000                        | 0.737          | 0.000                | 0.59991 | 1.520              | -0.834                       | 10.949         | -2.766               |
| 0.09979  | 0.992              | -0.710                       | 2.051          | -0.297               | 0.69895 | 1.575              | -0.946                       | 14.031         | -2.273               |
| 0.19941  | 1.157              | -1.003                       | 3.057          | -1.064               | 0.79958 | 1.622              | -1.104                       | 15.406         | -3.134               |
| 0.29934  | 1.282              | -1.080                       | 4.514          | -2.070               | 0.89727 | 1.661              | -1.149                       | 19.942         | -1.263               |
| 0.39925  | 1.377              | -0.872                       | 6.692          | -2.772               | 1.00000 | 1.688              | 0.000                        | 23.592         | 0.000                |
| 0.49846  | 1.456              | -0.956                       | 8.831          | -2.695               |         |                    |                              |                |                      |

Incertidumbre estándar relativa en densidad = 0.001

Incertidumbre estándar relativa en viscosidad = 0.02

Incertidumbre estándar en la temperatura = 0.01 K

Incertidumbre estándar en la presión: 10 kPa

Incertidumbre en la fracción mol: 0.0002

**Tabla 4.15. Velocidades del sonido  $u$ , y su desviación  $\Delta u$ , en función de la temperatura y de la concentración para el sistema  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}]$  (1) + 1-propanol (2) a presión  $p = 0.1$  MPa**

| $x_1$    | $u/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ | $\Delta u/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ | $x_1$   | $u/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ | $\Delta u/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ | $x_1$   | $u/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ | $\Delta u/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ |
|----------|----------------------------------|-----------------------------------------|---------|----------------------------------|-----------------------------------------|---------|----------------------------------|-----------------------------------------|
| 293.15 K |                                  |                                         |         |                                  |                                         |         |                                  |                                         |
| 0.00000  | 1223.77                          | 0.000                                   | 0.39912 | 1212.32                          | -23.052                                 | 0.79473 | 1240.60                          | -6.297                                  |
| 0.10030  | 1194.27                          | -32.419                                 | 0.50230 | 1222.15                          | -16.237                                 | 0.90298 | 1245.84                          | -4.207                                  |
| 0.19931  | 1194.96                          | -34.598                                 | 0.59868 | 1228.49                          | -12.029                                 | 1.00000 | 1252.87                          | 0.000                                   |
| 0.30084  | 1203.08                          | -29.444                                 | 0.69872 | 1235.19                          | -8.913                                  |         |                                  |                                         |
| 298.15 K |                                  |                                         |         |                                  |                                         |         |                                  |                                         |
| 0.00000  | 1206.53                          | 0.000                                   | 0.39912 | 1200.20                          | -20.682                                 | 0.79473 | 1229.40                          | -5.732                                  |
| 0.10030  | 1179.87                          | -30.270                                 | 0.50230 | 1210.35                          | -14.258                                 | 0.90298 | 1234.80                          | -4.228                                  |
| 0.19931  | 1181.79                          | -31.901                                 | 0.59868 | 1216.95                          | -10.463                                 | 1.00000 | 1242.52                          | 0.000                                   |
| 0.30084  | 1190.54                          | -26.817                                 | 0.69872 | 1223.83                          | -7.847                                  |         |                                  |                                         |
| 303.15 K |                                  |                                         |         |                                  |                                         |         |                                  |                                         |
| 0.00000  | 1189.42                          | 0.000                                   | 0.39912 | 1188.18                          | -18.370                                 | 0.79473 | 1218.34                          | -5.214                                  |
| 0.10030  | 1165.56                          | -28.168                                 | 0.50230 | 1198.67                          | -12.324                                 | 0.90298 | 1223.88                          | -4.323                                  |
| 0.19931  | 1168.70                          | -29.268                                 | 0.59868 | 1205.51                          | -8.969                                  | 1.00000 | 1232.37                          | 0.000                                   |
| 0.30084  | 1178.10                          | -24.241                                 | 0.69872 | 1212.59                          | -6.840                                  |         |                                  |                                         |
| 308.15 K |                                  |                                         |         |                                  |                                         |         |                                  |                                         |
| 0.00000  | 1172.44                          | 0.000                                   | 0.39912 | 1176.28                          | -16.100                                 | 0.79473 | 1207.39                          | -4.779                                  |
| 0.10030  | 1151.35                          | -26.104                                 | 0.50230 | 1187.09                          | -10.460                                 | 0.90298 | 1213.11                          | -4.470                                  |
| 0.19931  | 1155.70                          | -26.692                                 | 0.59868 | 1194.20                          | -7.523                                  | 1.00000 | 1222.43                          | 0.000                                   |
| 0.30084  | 1165.76                          | -21.719                                 | 0.69872 | 1201.48                          | -5.889                                  |         |                                  |                                         |
| 313.15 K |                                  |                                         |         |                                  |                                         |         |                                  |                                         |
| 0.00000  | 1155.55                          | 0.000                                   | 0.39912 | 1164.46                          | -13.876                                 | 0.79473 | 1196.57                          | -4.375                                  |
| 0.10030  | 1137.20                          | -24.079                                 | 0.50230 | 1175.61                          | -8.631                                  | 0.90298 | 1202.45                          | -4.678                                  |
| 0.19931  | 1142.76                          | -24.163                                 | 0.59868 | 1182.99                          | -6.121                                  | 1.00000 | 1212.67                          | 0.000                                   |
| 0.30084  | 1153.50                          | -19.234                                 | 0.69872 | 1190.48                          | -4.980                                  |         |                                  |                                         |
| 318.15 K |                                  |                                         |         |                                  |                                         |         |                                  |                                         |
| 0.00000  | 1138.72                          | 0.000                                   | 0.39912 | 1152.73                          | -11.670                                 | 0.79473 | 1185.85                          | -4.027                                  |
| 0.10030  | 1123.13                          | -22.046                                 | 0.50230 | 1164.21                          | -6.843                                  | 0.90298 | 1191.91                          | -4.935                                  |
| 0.19931  | 1129.88                          | -21.658                                 | 0.59868 | 1171.87                          | -4.761                                  | 1.00000 | 1203.09                          | 0.000                                   |
| 0.30084  | 1141.32                          | -16.765                                 | 0.69872 | 1179.58                          | -4.117                                  |         |                                  |                                         |

**Tabla 4.15. (continuación)**

| $x_1$   | $u/m \cdot s^{-1}$ | $\Delta u/m \cdot s^{-1}$ | $x_1$   | $u/m \cdot s^{-1}$ | $\Delta u/m \cdot s^{-1}$ | $x_1$   | $u/m \cdot s^{-1}$ | $\Delta u/m \cdot s^{-1}$ |
|---------|--------------------|---------------------------|---------|--------------------|---------------------------|---------|--------------------|---------------------------|
|         |                    |                           |         | 323.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1121.93            | 0.000                     | 0.39912 | 1141.09            | -9.486                    | 0.79473 | 1175.24            | -3.752                    |
| 0.10030 | 1109.08            | -20.052                   | 0.50230 | 1152.88            | -5.115                    | 0.90298 | 1181.48            | -5.284                    |
| 0.19931 | 1117.07            | -19.159                   | 0.59868 | 1160.85            | -3.448                    | 1.00000 | 1193.73            | 0.000                     |
| 0.30084 | 1129.21            | -14.320                   | 0.69872 | 1168.78            | -3.318                    |         |                    |                           |
|         |                    |                           |         | 328.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1105.15            | 0.000                     | 0.39912 | 1129.53            | -7.339                    | 0.79473 | 1164.73            | -3.601                    |
| 0.10030 | 1095.07            | -18.054                   | 0.50230 | 1141.64            | -3.443                    | 0.90298 | 1171.16            | -5.777                    |
| 0.19931 | 1104.28            | -16.704                   | 0.59868 | 1149.92            | -2.217                    | 1.00000 | 1184.65            | 0.000                     |
| 0.30084 | 1117.17            | -11.897                   | 0.69872 | 1158.09            | -2.608                    |         |                    |                           |
|         |                    |                           |         | 333.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1088.32            | 0.000                     | 0.39912 | 1118.05            | -5.230                    | 0.79473 | 1154.33            | -3.624                    |
| 0.10030 | 1081.09            | -16.018                   | 0.50230 | 1130.45            | -1.882                    | 0.90298 | 1160.96            | -6.479                    |
| 0.19931 | 1091.52            | -14.253                   | 0.59868 | 1139.10            | -1.078                    | 1.00000 | 1175.94            | 0.000                     |
| 0.30084 | 1105.19            | -9.490                    | 0.69872 | 1147.50            | -2.042                    |         |                    |                           |
|         |                    |                           |         | 338.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1071.45            | 0.000                     | 0.39912 | 1106.56            | -2.943                    | 0.79473 | 1143.96            | -3.283                    |
| 0.10030 | 1067.13            | -13.886                   | 0.50230 | 1119.34            | -0.014                    | 0.90298 | 1150.80            | -6.767                    |
| 0.19931 | 1078.72            | -11.727                   | 0.59868 | 1128.29            | 0.333                     | 1.00000 | 1166.82            | 0.000                     |
| 0.30084 | 1093.28            | -6.861                    | 0.69872 | 1137.04            | -1.047                    |         |                    |                           |
|         |                    |                           |         | 343.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1054.53            | 0.000                     | 0.39912 | 1095.44            | -0.205                    | 0.79473 | 1133.96            | -2.459                    |
| 0.10030 | 1053.34            | -11.525                   | 0.50230 | 1108.31            | 2.023                     | 0.90298 | 1141.00            | -6.573                    |
| 0.19931 | 1066.24            | -8.816                    | 0.59868 | 1117.85            | 2.212                     | 1.00000 | 1157.57            | 0.000                     |
| 0.30084 | 1081.54            | -3.989                    | 0.69872 | 1126.79            | 0.264                     |         |                    |                           |

Incertidumbre estándar en velocidad del sonido =  $0.5 \text{ ms}^{-1}$

Incertidumbre estándar en la temperatura =  $0.01 \text{ K}$

Incertidumbre estándar en la presión:  $10 \text{ kPa}$

Incertidumbre en la fracción mol:  $0.0002$

**Tabla 4.16. Velocidades del sonido  $u$ , y su desviación  $\Delta u$ , en función de la temperatura y de la concentración para el sistema [Amim][TFSI] (1) + 1-propanol (2) a presión  $p = 0.1$  MPa**

| $x_1$    | $u/m \cdot s^{-1}$ | $\Delta u/m \cdot s^{-1}$ | $x_1$   | $u/m \cdot s^{-1}$ | $\Delta u/m \cdot s^{-1}$ | $x_1$   | $u/m \cdot s^{-1}$ | $\Delta u/m \cdot s^{-1}$ |
|----------|--------------------|---------------------------|---------|--------------------|---------------------------|---------|--------------------|---------------------------|
| 292.15 K |                    |                           |         |                    |                           |         |                    |                           |
| 0.00000  | 1223.77            | 0.000                     | 0.39895 | 1210.60            | -24.261                   | 0.80242 | 1241.88            | -4.134                    |
| 0.10027  | 1193.50            | -33.119                   | 0.50035 | 1221.00            | -16.680                   | 0.89736 | 1246.50            | -2.217                    |
| 0.19952  | 1193.50            | -35.817                   | 0.60065 | 1227.51            | -12.958                   | 1.00000 | 1251.57            | 0.000                     |
| 0.29866  | 1202.20            | -29.861                   | 0.69710 | 1234.68            | -8.469                    |         |                    |                           |
| 298.15 K |                    |                           |         |                    |                           |         |                    |                           |
| 0.00000  | 1206.53            | 0.000                     | 0.39895 | 1198.26            | -21.687                   | 0.80242 | 1230.26            | -3.178                    |
| 0.10027  | 1179.00            | -30.962                   | 0.50035 | 1208.93            | -14.427                   | 0.89736 | 1234.98            | -1.728                    |
| 0.19952  | 1180.20            | -33.040                   | 0.60065 | 1215.63            | -11.099                   | 1.00000 | 1240.16            | 0.000                     |
| 0.29866  | 1189.47            | -27.092                   | 0.69710 | 1222.94            | -7.033                    |         |                    |                           |
| 303.15 K |                    |                           |         |                    |                           |         |                    |                           |
| 0.00000  | 1189.42            | 0.000                     | 0.39895 | 1186.04            | -19.127                   | 0.80242 | 1218.79            | -2.211                    |
| 0.10027  | 1164.63            | -28.807                   | 0.50035 | 1196.99            | -12.179                   | 0.89736 | 1223.61            | -1.229                    |
| 0.19952  | 1167.00            | -30.295                   | 0.60065 | 1203.87            | -9.258                    | 1.00000 | 1228.89            | 0.000                     |
| 0.29866  | 1176.86            | -24.336                   | 0.69710 | 1211.35            | -5.585                    |         |                    |                           |
| 308.15 K |                    |                           |         |                    |                           |         |                    |                           |
| 0.00000  | 1172.44            | 0.000                     | 0.39895 | 1173.95            | -16.578                   | 0.80242 | 1207.47            | -1.248                    |
| 0.10027  | 1150.36            | -26.685                   | 0.50035 | 1185.17            | -9.956                    | 0.89736 | 1212.40            | -0.726                    |
| 0.19952  | 1153.91            | -27.576                   | 0.60065 | 1192.26            | -7.413                    | 1.00000 | 1217.78            | 0.000                     |
| 0.29866  | 1164.39            | -21.580                   | 0.69710 | 1199.90            | -4.147                    |         |                    |                           |
| 313.15 K |                    |                           |         |                    |                           |         |                    |                           |
| 0.00000  | 1155.55            | 0.000                     | 0.39895 | 1161.97            | -14.030                   | 0.80242 | 1196.29            | -0.275                    |
| 0.10027  | 1136.18            | -24.568                   | 0.50035 | 1173.45            | -7.748                    | 0.89736 | 1201.33            | -0.219                    |
| 0.19952  | 1140.90            | -24.877                   | 0.60065 | 1180.81            | -5.529                    | 1.00000 | 1206.81            | 0.000                     |
| 0.29866  | 1152.02            | -18.828                   | 0.69710 | 1188.57            | -2.713                    |         |                    |                           |
| 318.15 K |                    |                           |         |                    |                           |         |                    |                           |
| 0.00000  | 1138.72            | 0.000                     | 0.39895 | 1150.07            | -11.490                   | 0.80242 | 1185.23            | 0.703                     |
| 0.10027  | 1122.06            | -22.457                   | 0.50035 | 1161.83            | -5.535                    | 0.89736 | 1190.40            | 0.306                     |
| 0.19952  | 1127.95            | -22.193                   | 0.60065 | 1169.44            | -3.667                    | 1.00000 | 1195.97            | 0.000                     |
| 0.29866  | 1139.70            | -16.107                   | 0.69710 | 1177.37            | -1.259                    |         |                    |                           |

**Tabla 4.16. (continuación)**

| $x_1$   | $u/m \cdot s^{-1}$ | $\Delta u/m \cdot s^{-1}$ | $x_1$   | $u/m \cdot s^{-1}$ | $\Delta u/m \cdot s^{-1}$ | $x_1$   | $u/m \cdot s^{-1}$ | $\Delta u/m \cdot s^{-1}$ |
|---------|--------------------|---------------------------|---------|--------------------|---------------------------|---------|--------------------|---------------------------|
|         |                    |                           |         | 323.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1121.93            | 0.000                     | 0.39895 | 1138.28            | -8.912                    | 0.80242 | 1174.29            | 1.696                     |
| 0.10027 | 1107.99            | -20.345                   | 0.50035 | 1150.31            | -3.302                    | 0.89736 | 1179.59            | 0.839                     |
| 0.19952 | 1115.07            | -19.494                   | 0.60065 | 1158.17            | -1.793                    | 1.00000 | 1185.25            | 0.000                     |
| 0.29866 | 1127.45            | -13.380                   | 0.69710 | 1166.29            | 0.220                     |         |                    |                           |
|         |                    |                           |         | 328.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1105.15            | 0.000                     | 0.39895 | 1126.56            | -6.321                    | 0.80242 | 1163.48            | 2.713                     |
| 0.10027 | 1093.95            | -18.225                   | 0.50035 | 1138.85            | -1.079                    | 0.89736 | 1168.91            | 1.385                     |
| 0.19952 | 1102.25            | -16.769                   | 0.60065 | 1146.98            | 0.079                     | 1.00000 | 1174.66            | 0.000                     |
| 0.29866 | 1115.26            | -10.639                   | 0.69710 | 1155.32            | 1.715                     |         |                    |                           |
|         |                    |                           |         | 333.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1088.32            | 0.000                     | 0.39895 | 1114.94            | -3.644                    | 0.80242 | 1152.79            | 3.772                     |
| 0.10027 | 1079.95            | -16.031                   | 0.50035 | 1127.49            | 1.213                     | 0.89736 | 1158.36            | 1.966                     |
| 0.19952 | 1089.47            | -13.986                   | 0.60065 | 1135.90            | 2.015                     | 1.00000 | 1164.18            | 0.000                     |
| 0.29866 | 1103.11            | -7.855                    | 0.69710 | 1144.48            | 3.278                     |         |                    |                           |
|         |                    |                           |         | 338.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1071.45            | 0.000                     | 0.39895 | 1103.38            | -0.924                    | 0.80242 | 1142.24            | 4.899                     |
| 0.10027 | 1065.94            | -13.821                   | 0.50035 | 1116.23            | 3.576                     | 0.89736 | 1147.90            | 2.552                     |
| 0.19952 | 1076.72            | -11.160                   | 0.60065 | 1124.91            | 3.996                     | 1.00000 | 1153.80            | 0.000                     |
| 0.29866 | 1090.99            | -5.044                    | 0.69710 | 1133.77            | 4.914                     |         |                    |                           |
|         |                    |                           |         | 343.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1054.53            | 0.000                     | 0.39895 | 1092.07            | 2.029                     | 0.80242 | 1131.91            | 6.160                     |
| 0.10027 | 1052.15            | -11.358                   | 0.50035 | 1105.02            | 5.954                     | 0.89736 | 1137.76            | 3.356                     |
| 0.19952 | 1064.18            | -8.109                    | 0.60065 | 1113.99            | 5.996                     | 1.00000 | 1143.54            | 0.000                     |
| 0.29866 | 1078.93            | -2.173                    | 0.69710 | 1123.28            | 6.701                     |         |                    |                           |

Incertidumbre estándar en velocidad del sonido =  $0.5 \text{ ms}^{-1}$

Incertidumbre estándar en la temperatura = 0.01 K

Incertidumbre estándar en la presión: 10 kPa

Incertidumbre en la fracción mol: 0.0002

**Tabla 4.17. Velocidades del sonido  $u$ , y su desviación  $\Delta u$ , en función de la temperatura y de la concentración para el sistema  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}]$  (1) + 1-propanol (2) a presión  $p = 0.1$  MPa**

| $x_1$    | $u/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ | $\Delta u/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ | $x_1$   | $u/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ | $\Delta u/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ | $x_1$   | $u/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ | $\Delta u/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ |
|----------|----------------------------------|-----------------------------------------|---------|----------------------------------|-----------------------------------------|---------|----------------------------------|-----------------------------------------|
| 293.15 K |                                  |                                         |         |                                  |                                         |         |                                  |                                         |
| 0.00000  | 1223.77                          | 0.000                                   | 0.39925 | 1166.93                          | -50.628                                 | 0.79958 | 1190.10                          | -21.253                                 |
| 0.09979  | 1192.51                          | -29.709                                 | 0.49846 | 1170.15                          | -45.879                                 | 0.89727 | 1198.90                          | -10.914                                 |
| 0.19941  | 1175.21                          | -45.463                                 | 0.59991 | 1175.29                          | -39.163                                 | 1.00000 | 1208.24                          | 0.000                                   |
| 0.29934  | 1166.49                          | -52.631                                 | 0.69895 | 1182.64                          | -30.275                                 |         |                                  |                                         |
| 298.15 K |                                  |                                         |         |                                  |                                         |         |                                  |                                         |
| 0.00000  | 1206.53                          | 0.000                                   | 0.39925 | 1154.90                          | -47.658                                 | 0.79958 | 1178.39                          | -20.200                                 |
| 0.09979  | 1177.80                          | -27.738                                 | 0.49846 | 1158.32                          | -43.260                                 | 0.89727 | 1187.09                          | -10.517                                 |
| 0.19941  | 1161.89                          | -42.660                                 | 0.59991 | 1163.55                          | -37.023                                 | 1.00000 | 1196.60                          | 0.000                                   |
| 0.29934  | 1153.97                          | -49.588                                 | 0.69895 | 1170.96                          | -28.629                                 |         |                                  |                                         |
| 303.15 K |                                  |                                         |         |                                  |                                         |         |                                  |                                         |
| 0.00000  | 1189.42                          | 0.000                                   | 0.39925 | 1143.03                          | -44.710                                 | 0.79958 | 1166.91                          | -19.152                                 |
| 0.09979  | 1163.23                          | -25.770                                 | 0.49846 | 1146.67                          | -40.656                                 | 0.89727 | 1175.58                          | -10.066                                 |
| 0.19941  | 1148.71                          | -39.872                                 | 0.59991 | 1152.00                          | -34.900                                 | 1.00000 | 1185.22                          | 0.000                                   |
| 0.29934  | 1141.60                          | -46.563                                 | 0.69895 | 1159.50                          | -26.984                                 |         |                                  |                                         |
| 308.15 K |                                  |                                         |         |                                  |                                         |         |                                  |                                         |
| 0.00000  | 1172.44                          | 0.000                                   | 0.39925 | 1131.34                          | -41.748                                 | 0.79958 | 1155.66                          | -18.075                                 |
| 0.09979  | 1148.86                          | -23.742                                 | 0.49846 | 1135.19                          | -38.058                                 | 0.89727 | 1164.35                          | -9.546                                  |
| 0.19941  | 1135.70                          | -37.063                                 | 0.59991 | 1140.67                          | -32.742                                 | 1.00000 | 1174.06                          | 0.000                                   |
| 0.29934  | 1129.40                          | -43.525                                 | 0.69895 | 1148.27                          | -25.302                                 |         |                                  |                                         |
| 313.15 K |                                  |                                         |         |                                  |                                         |         |                                  |                                         |
| 0.00000  | 1155.55                          | 0.000                                   | 0.39925 | 1119.81                          | -38.752                                 | 0.79958 | 1144.62                          | -16.951                                 |
| 0.09979  | 1134.62                          | -21.682                                 | 0.49846 | 1123.87                          | -35.433                                 | 0.89727 | 1153.29                          | -9.027                                  |
| 0.19941  | 1122.82                          | -34.232                                 | 0.59991 | 1129.50                          | -30.567                                 | 1.00000 | 1163.08                          | 0.000                                   |
| 0.29934  | 1117.35                          | -40.454                                 | 0.69895 | 1137.20                          | -23.613                                 |         |                                  |                                         |
| 318.15 K |                                  |                                         |         |                                  |                                         |         |                                  |                                         |
| 0.00000  | 1138.72                          | 0.000                                   | 0.39925 | 1108.42                          | -35.720                                 | 0.79958 | 1133.72                          | -15.834                                 |
| 0.09979  | 1120.47                          | -19.604                                 | 0.49846 | 1112.68                          | -32.794                                 | 0.89727 | 1142.41                          | -8.486                                  |
| 0.19941  | 1110.06                          | -31.362                                 | 0.59991 | 1118.47                          | -28.379                                 | 1.00000 | 1152.27                          | 0.000                                   |
| 0.29934  | 1105.42                          | -37.356                                 | 0.69895 | 1126.27                          | -21.921                                 |         |                                  |                                         |

**Tabla 4.17. (continuación)**

| $x_1$   | $u/m \cdot s^{-1}$ | $\Delta u/m \cdot s^{-1}$ | $x_1$   | $u/m \cdot s^{-1}$ | $\Delta u/m \cdot s^{-1}$ | $x_1$   | $u/m \cdot s^{-1}$ | $\Delta u/m \cdot s^{-1}$ |
|---------|--------------------|---------------------------|---------|--------------------|---------------------------|---------|--------------------|---------------------------|
|         |                    |                           |         | 323.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1121.93            | 0.000                     | 0.39925 | 1097.13            | -32.668                   | 0.79958 | 1122.97            | -14.688                   |
| 0.09979 | 1106.40            | -17.495                   | 0.49846 | 1101.64            | -30.095                   | 0.89727 | 1131.69            | -7.916                    |
| 0.19941 | 1097.41            | -28.442                   | 0.59991 | 1107.57            | -26.160                   | 1.00000 | 1141.60            | 0.000                     |
| 0.29934 | 1093.63            | -34.188                   | 0.69895 | 1115.47            | -20.208                   |         |                    |                           |
|         |                    |                           |         | 328.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1105.15            | 0.000                     | 0.39925 | 1085.96            | -29.562                   | 0.79958 | 1112.35            | -13.533                   |
| 0.09979 | 1092.39            | -15.350                   | 0.49846 | 1090.72            | -27.355                   | 0.89727 | 1121.10            | -7.351                    |
| 0.19941 | 1084.87            | -25.451                   | 0.59991 | 1096.79            | -23.916                   | 1.00000 | 1131.08            | 0.000                     |
| 0.29934 | 1081.96            | -30.952                   | 0.69895 | 1104.80            | -18.474                   |         |                    |                           |
|         |                    |                           |         | 333.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1088.32            | 0.000                     | 0.39925 | 1074.91            | -26.354                   | 0.79958 | 1101.85            | -12.344                   |
| 0.09979 | 1078.45            | -13.103                   | 0.49846 | 1079.95            | -24.500                   | 0.89727 | 1110.64            | -6.760                    |
| 0.19941 | 1072.43            | -22.343                   | 0.59991 | 1086.11            | -21.623                   | 1.00000 | 1120.68            | 0.000                     |
| 0.29934 | 1070.42            | -27.587                   | 0.69895 | 1094.24            | -16.698                   |         |                    |                           |
|         |                    |                           |         | 338.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1071.45            | 0.000                     | 0.39925 | 1063.99            | -23.044                   | 0.79958 | 1091.46            | -11.142                   |
| 0.09979 | 1064.52            | -10.822                   | 0.49846 | 1069.32            | -21.550                   | 0.89727 | 1100.31            | -6.151                    |
| 0.19941 | 1060.07            | -19.149                   | 0.59991 | 1075.57            | -19.252                   | 1.00000 | 1110.41            | 0.000                     |
| 0.29934 | 1059.01            | -24.102                   | 0.69895 | 1083.81            | -14.871                   |         |                    |                           |
|         |                    |                           |         | 343.15 K           |                           |         |                    |                           |
| 0.00000 | 1054.53            | 0.000                     | 0.39925 | 1053.32            | -19.498                   | 0.79958 | 1081.22            | -9.867                    |
| 0.09979 | 1050.65            | -8.447                    | 0.49846 | 1058.92            | -18.399                   | 0.89727 | 1090.11            | -5.505                    |
| 0.19941 | 1048.01            | -15.637                   | 0.59991 | 1065.13            | -16.828                   | 1.00000 | 1100.25            | 0.000                     |
| 0.29934 | 1047.83            | -20.386                   | 0.69895 | 1073.50            | -12.986                   |         |                    |                           |

Incertidumbre estándar en velocidad del sonido =  $0.5 \text{ ms}^{-1}$

Incertidumbre estándar en la temperatura =  $0.01 \text{ K}$

Incertidumbre estándar en la presión:  $10 \text{ kPa}$

Incertidumbre en la fracción mol:  $0.0002$

---

---

#### 4.4. Comparación de la densidad de líquidos iónicos con modelos reportados en la literatura

En esta sección se realizó una predicción de las densidades experimentales de los líquidos iónicos puros que se obtuvieron en el presente trabajo con los modelos descritos en la metodología (Ecs. 3.16 a la 3.51).

En las Figuras 4.24 a la 4.27 se presenta el porcentaje de desviación de la densidad para los líquidos iónicos puros [Bmpyr][TFSI], [Et<sub>3</sub>S][TFSI], [Amim][TFSI] y [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI] con cada uno de los modelos mencionados. Como se puede observar en las Figuras 4.24 a la 4.27 los porcentajes de desviación se encuentran entre (5.0 y -15) %, (4.0 y -12) %, (5.0 y -13) %, (5.0 y -47) %, para [Bmpyr][TFSI], [Et<sub>3</sub>S][TFSI], [Amim][TFSI] y [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI], respectivamente. Los porcentajes de error promedio absoluto (*AAPE*) se muestran en la Tabla 4.18. Para los LI [Bmpyr][TFSI], [Et<sub>3</sub>S][TFSI] y [Amim][TFSI] la mayor desviación fue con la ecuación de Gunn y Yamada [72] con porcentajes de desviación de (22, 29 y 17) %, respectivamente. La menor desviación para estos tres sistemas fue con el modelo de Gardas and Coutinho [45] con porcentajes entre (1.1 y 1.2) %. Sin embargo, para el líquido iónico [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI] los porcentajes de desviación mayores se encuentran entre (22 y 47) %. Las desviaciones menores se presentaron con las ecuaciones de Gardas y Coutinho [45] y Hankinson and Thomson [74] con (1.15 y 2.47) %, respectivamente.

Estos modelos se han utilizado anteriormente para la predicción de la densidad de líquidos iónicos puros. Najafi-Marghmaleki et al. [104] predijeron la densidad de 146 líquidos iónicos en un amplio intervalo de temperatura a presión atmosférica. Valderrama y Zaricueta [140] compararon la densidad de los líquidos iónicos puros utilizando estos modelos para 146 líquidos iónicos en un intervalo de temperatura de (270 a 360) K.

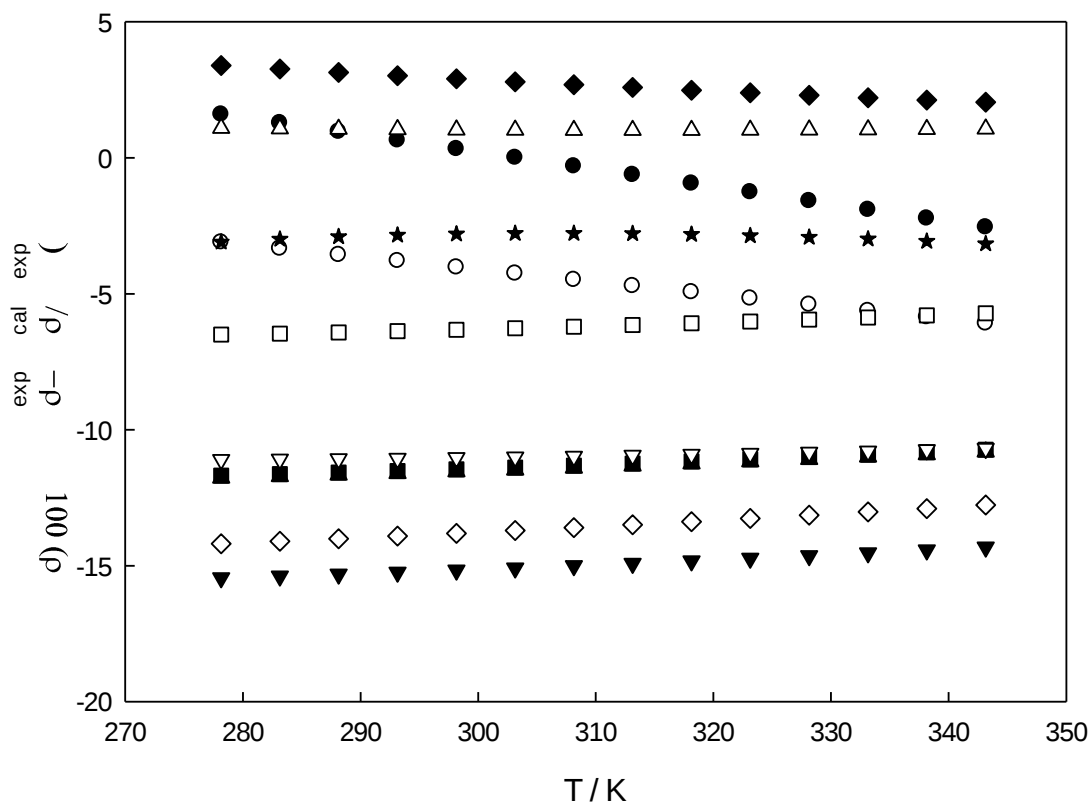


Figura 4.24. Porcentaje de desviación para la densidad el líquido iónico [Bmppyrr][TFSI] con los modelos reportados en la literatura. ● GC, ○ LGM, ■ RA, □ VSY, ▲ VSD, △ YW, ▼ YG, ▽ RR, ◆ MH, ◇ HT, ★ GEP.

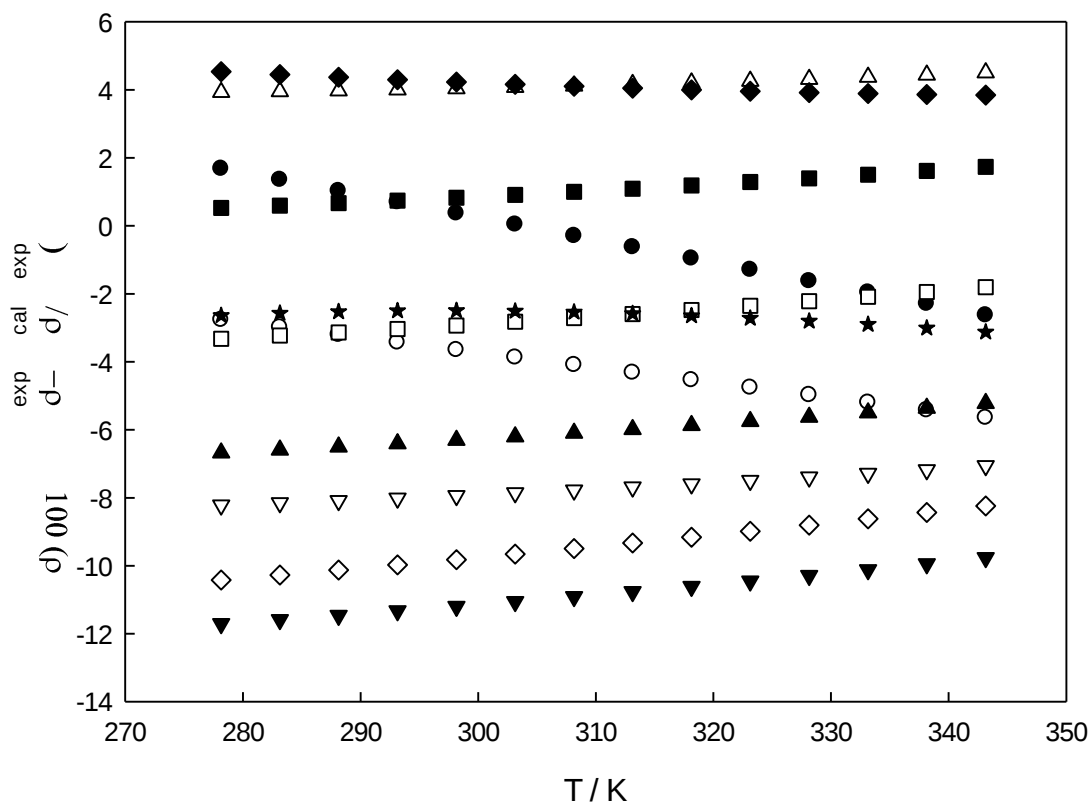


Figura 4.25. Porcentaje de desviación para la densidad del líquido iónico  $[\text{Et}_3\text{S}][\text{TFSI}]$  con los modelos reportados en la literatura. ● GC, ○ LGM, ■ RA, □ VSY, ▲ VSD, △ YW, ▼ YG, ▽ RR, ◆ MH, ◇ HT, ★ GEP.

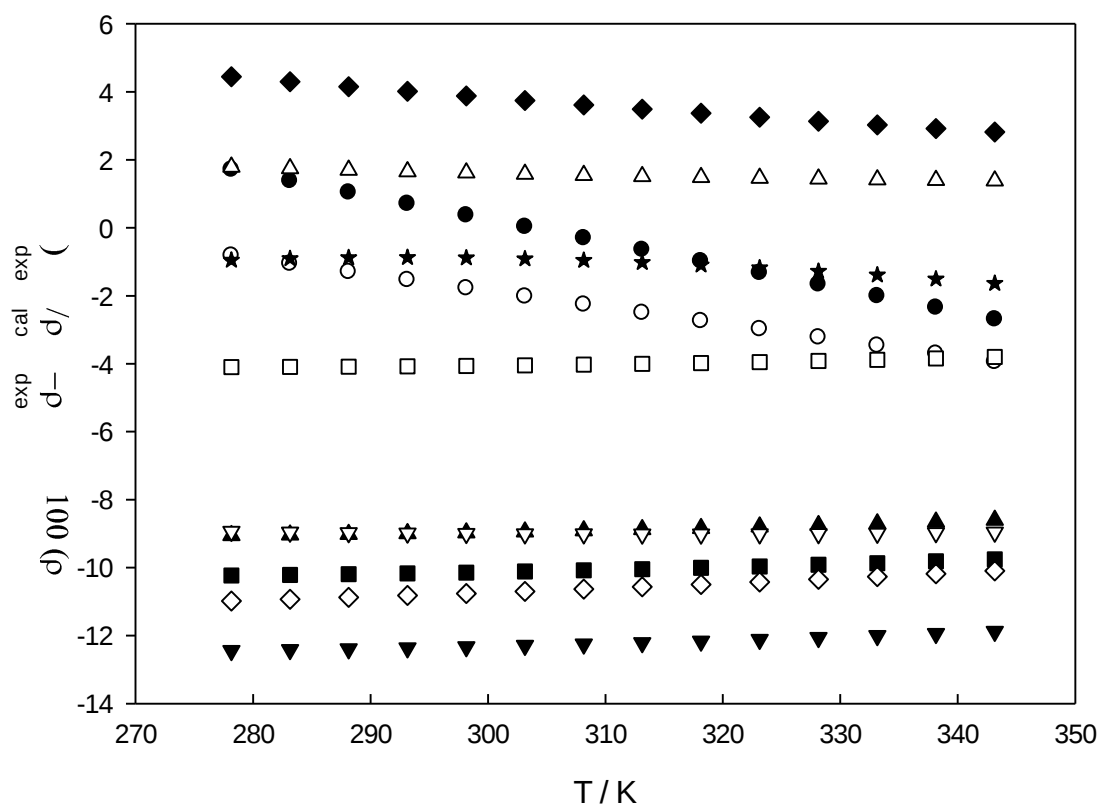


Figura 4.26. Porcentaje de desviación para la densidad del líquido iónico [Amim][TFSI] con los modelos reportados en la literatura. ● GC, ○ LGM, ■ RA, □ VSY, ▲ VSD, △ YW, ▼ YG, ▽ RR, ◆ MH, ◇ HT, ★ GEP.

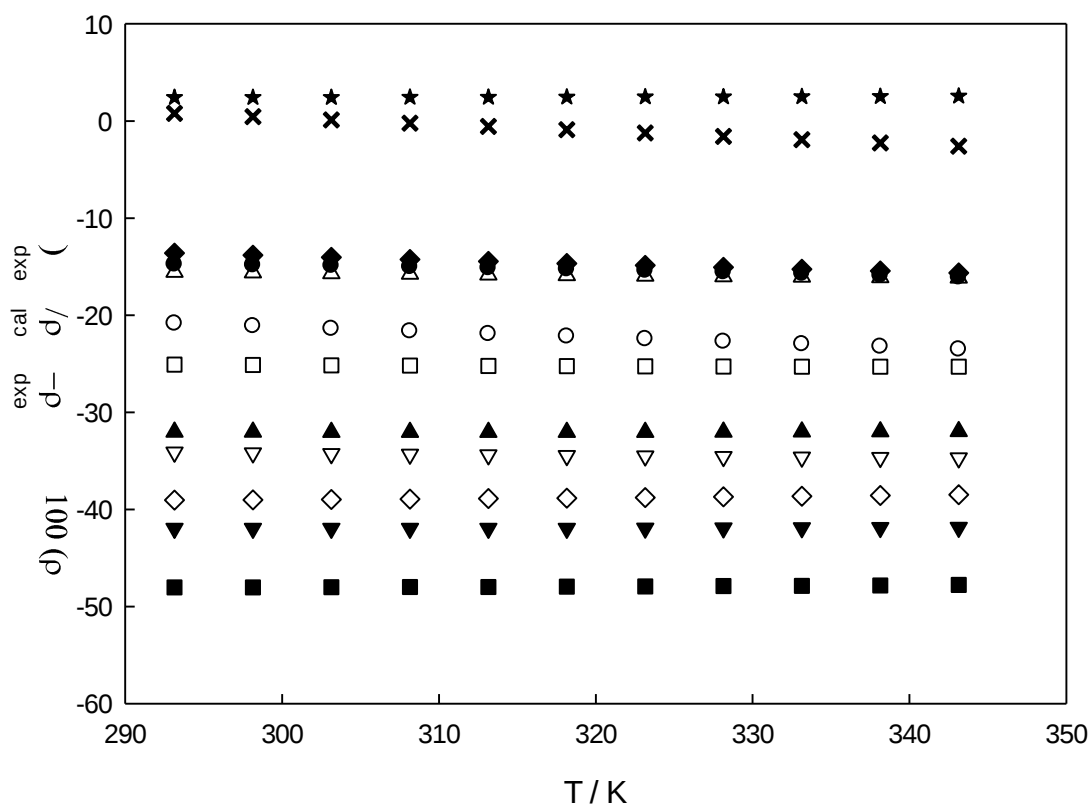


Figura 4.27. Porcentaje de desviación para la densidad del líquido iónico  $[(\text{OH})_2\text{Im}][\text{TFSI}]$  con los modelos reportados en la literatura.  $\times$ GC,  $\circ$ LGM,  $\blacksquare$  RA,  $\square$ VSY,  $\blacktriangle$  VSD,  $\triangle$  YW,  $\blacktriangledown$  YG,  $\nabla$  RR,  $\blacklozenge$  MH,  $\diamond$  GY,  $\star$  HT,  $\bullet$  GEP.

**Tabla 4.18. Porcentajes de error promedio absoluto para la densidad de líquidos iónicos utilizados en el presente trabajo con los modelos reportados en la literatura**

| Modelo                                  | [Bmppyrr][TFSI] | [Et <sub>3</sub> S][TFSI] | [Amim][TFSI] | [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] |
|-----------------------------------------|-----------------|---------------------------|--------------|------------------------------|
| Gardas and Coutinho (GC) [45]           | 1.161           | 1.203                     | 1.228        | 1.150                        |
| Linear Generalized Model (LGM) [140]    | 4.484           | 4.098                     | 2.258        | 22.06                        |
| Racket (RA) [111]                       | 11.25           | 1.077                     | 10.04        | 47.92                        |
| Valderrama y Abu-Sharkh (VSY) [137]     | 6.152           | 2.618                     | 3.988        | 25.22                        |
| Valderrama y Abu-Sharkh (VSD) [137]     | 11.33           | 6.005                     | 8.869        | 32.01                        |
| Yen and Woods (YW) [159]                | 1.042           | 4.170                     | 1.555        | 15.88                        |
| Yamada and Gunn (YG) [157]              | 14.93           | 10.80                     | 12.21        | 41.93                        |
| Reid et al. (RR) [113]                  | 10.94           | 7.695                     | 8.992        | 34.44                        |
| Mchaweh et al. (MH) [98]                | 2.669           | 4.120                     | 3.583        | 14.64                        |
| Gunn and Yamada (GY) [72]               | 21.65           | 28.69                     | 16.89        | 38.79                        |
| Hankinson and Thomson (HT) [74]         | 13.52           | 9.380                     | 10.58        | 2.470                        |
| Gene Expression Programming (GEP) [104] | 2.913           | 2.682                     | 1.105        | 15.34                        |

---

---

### Estimación de las propiedades críticas

Existen diversos métodos para estimar las propiedades críticas de los líquidos iónicos, entre ellos se encuentra el método de contribución de grupos (MCG). En este método se asigna un valor determinado para cada grupo funcional que conforma la estructura molecular de un compuesto, y ese valor representa la contribución que ese grupo funcional aporta a una propiedad específica para molécula, además se asume que es el mismo en otra molécula que contiene ese mismo grupo. Este método es aproximado, ya que una de sus desventajas es que no toma en cuenta las interacciones que están ocurriendo entre las moléculas.

En el presente trabajo la temperatura crítica (Ec.3.54), la temperatura de ebullición (Ec. 3.52) y el volumen crítico (Ec. 3.56) se calcularon con el método de Joback-Reid. La presión crítica se calculó con el método de Lydersen (Ec. 3.58). En la Tabla 4.19 se muestran estas propiedades calculadas para los LI puros.

**Tabla 4.19. Propiedades críticas estimadas para los líquidos iónicos utilizados en el presente trabajo**

| Líquido iónico               | $T_b / K$ | $T_c / K$ | $P_c$ | $V_c / cm^3 \cdot mol^{-1}$ |
|------------------------------|-----------|-----------|-------|-----------------------------|
| [Bmpyr][TFSI]                | 623.57    | 795.88    | 14.51 | 1018.5                      |
| [Et <sub>3</sub> S][TFSI]    | 549.78    | 709.13    | 16.00 | 911.5                       |
| [Amin][TFSI]                 | 626.51    | 813.17    | 16.65 | 908.5                       |
| [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] | 689.59    | 899.56    | 22.94 | 635.5                       |

Existen diversas investigaciones que se han enfocado en la predicción de propiedades críticas de líquidos iónicos. Shen et al. [130] determinaron las propiedades críticas de 747 líquidos iónicos a temperatura ambiente y a presión atmosférica utilizando el método de Lydersen–Joback–Reid.

Otro método que se ha utilizado para determinar la temperatura crítica de líquidos iónicos es el método de Eötvös and Guggenheim, el cual utiliza la tensión superficial y la densidad como parámetros. Almeida et al. [2] determinaron la temperatura crítica de líquidos iónicos

---

---

utilizando este modelo. El líquido iónico utilizado fue el 1-ethyl-3-methylimidazolium con diferentes aniones como acetate, dicyanamide, dimethylphosphate, methylphosphonate, methanesulfonate, thiocyanate, tosylate, y trifluoromethanesulfonate. Domańska et al. [33] utilizaron también este método para determinar la temperatura crítica de líquidos iónicos como 1-butyl-3-cyanopyridinium bis(trifluoromethyl sulfonyl)imide, 1-hexyl-3-cyanopyridinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide, 1-hexyl-4-cyanopyridinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide y 1-octyl-3-cyanopyridinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide. Domańska y Krolikowska [27] determinaron la tensión superficial de líquidos iónicos puros y sus mezclas con alcoholes (1-butanol, 1-pentanol, 1-hexanol) a partir de la temperatura crítica y otras propiedades termodinámicas de superficie utilizando el modelo de Eötvös y Guggenheim. Sattari et al. [123] también utilizaron la ecuación de Guggenheim para estimar la temperatura crítica de 106 líquidos iónicos a partir de datos de tensión superficial. Además, desarrollaron un método de contribución de grupos y utilizaron el método de *Quantitative Structure-Property Relationship* (QSPR) para evaluar y predecir la temperatura crítica de estos líquidos iónicos. Wu et al. [153] determinaron la temperatura crítica de líquidos iónicos con el anión bis(trifluoromethanesulfonyl)imide utilizando la ecuación de Eötvös-Guggenheim. Gardas et al. [47] determinaron las propiedades críticas de diferentes líquidos iónicos a base de amino ácidos con el método de Lydersen-Joback-Reid. Valderrama et al. [138] propusieron un nuevo modelo basado en un método de contribución de grupos propuesto por Valderrama y Rojas [139] para la estimación de propiedades críticas de 1130 líquidos iónicos. Este nuevo método incluye el cálculo de la presión de saturación a la temperatura normal del punto de ebullición utilizando una ecuación de estado.

---

---

#### 4.5. Correlación de viscosidades de mezclas binarias de líquidos iónicos

En este apartado se correlacionaron las viscosidades cinemáticas de mezclas binarias de líquidos iónicos con solventes orgánicos y con agua, utilizando las ecuaciones de Vásquez-Castillo et al. [142] (Ec. 3.60), Nava-Ríos et al. [105] (Ec. 3.64) y Eyring-MTSM [4] (Ec. 3.67).

Para la evaluación de los parámetros de interacción, se minimizó la función objetivo para cada sistema de mezcla:

$$OF = \min \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \left| \frac{v_i^{exp} - v_i^{cal}}{v_i^{exp}} \right| \quad (4.2)$$

Para determinar el nivel de correlación de las tres ecuaciones, se calculó el porcentaje de error promedio absoluto (*AAPD*), el porcentaje del bias y la desviación estándar (*SD*):

$$AAPD = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{v^{exp} - v^{cal}}{v^{exp}} \right| \quad (4.3)$$

$$Bias = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \frac{v^{exp} - v^{cal}}{v^{exp}} \quad (4.4)$$

$$SD = \left[ \frac{\sum_{i=1}^N (v^{exp} - v^{cal})^2}{N - m} \right]^{1/2} \quad (4.5)$$

donde  $N$  es el número de datos experimentales,  $m$  es el número de parámetros ajustables y  $v$  es la viscosidad cinemática.

Vásquez-Castillo et al. [142] propusieron que los parámetros  $G_{13}^*$  y  $G_{23}^*$  tienen un comportamiento lineal para soluciones electrolíticas, por lo tanto, la Ec. 3.60 se puede reducir a solo dos parámetros de ajuste. Sin embargo, para el caso de mezclas de líquidos iónicos, los porcentajes de error promedios observados fueron mayores con la ecuación de dos parámetros en comparación con la ecuación de tres parámetros.

La dependencia de la temperatura para los parámetros de la ecuación de Vásquez-Castillo [142] es la siguiente:

$$G_{123}^* = a_0 + \frac{a_1}{T^{0.50}} \quad (4.6)$$

$$G_{13}^* = b_0 + \frac{b_1}{T^{0.75}} \quad (4.7)$$

$$G_{23}^* = c_0 + \frac{c_1}{T^{0.25}} \quad (4.8)$$

Para la ecuación de Nava-Ríos [105] (Ec. 3.64) la dependencia de temperatura es:

$$v_{12} = a_0 + \frac{a_1}{T^2} \quad (4.9)$$

$$g_{12}^* = b_0 + \frac{b_1}{T^2} \quad (4.10)$$

$$g_{21}^* = c_0 + \frac{c_1}{T^2} \quad (4.11)$$

La dependencia de temperatura para la ecuación de Eyring-MTSM [4] (Ec. 3.67) es:

$$\alpha_{12} = + \frac{\alpha_{12}^1}{T} \quad (4.12)$$

donde  $a_0, a_1, b_0, b_1, c_0, c_1, \alpha_{12}^1$  son constantes obtenidas de datos experimentales.

Mediante un ajuste por los métodos de mínimos cuadrados no lineales (Marquardt y Newton) en el programa SAS versión V9, se obtuvieron los ajustes de 72 sistemas de mezclas binarias de líquidos iónicos con alcohol y 36 sistemas de mezclas binarias de líquidos iónicos con agua.

En las Tablas 4.20 y 4.21 se muestran los porcentajes de error promedio absoluto, el porcentaje promedio bias y la desviación estándar para líquidos iónicos con compuestos orgánicos y líquidos iónicos con H<sub>2</sub>O, respectivamente, con las ecuaciones de Vásquez-Castillo, Nava-Ríos y Eyring-MTSM. Para la ecuación de Vásquez-Castillo, los porcentajes de error promedio fueron de (1.61 y 7.52) % para los sistemas de LI con compuestos orgánicos y LI con agua, respectivamente, y de (2.25 y 7.88) % con dependencia de temperatura. Como se puede observar, el error fue mayor para las mezclas de líquidos iónicos con agua. Esto se debe a inconsistencias que se observaron en los datos reportados

---

---

en la literatura. En la Figura 4.28 se muestra la viscosidad en función de la composición a 298.15 K para las mezclas de LI con agua que presentaron mayor error (entre 10 % y 15 %).

Para el caso de la ecuación de Nava-Ríos [105], los porcentajes de error fueron de (2.99 y 16.36) % para LI con compuestos orgánicos y LI con agua, respectivamente, y de (3.33 y 18.29) % con dependencia de la temperatura. Estas desviaciones son mayores que para la ecuación de Vásquez-Castillo. Como se observa en la Figura 4.29, Nava-Ríos no correlaciona adecuadamente mezclas binarias de líquidos iónicos con agua.

Para realizar una comparación de las ecuaciones de Vásquez-Castillo y Nava-Ríos, se utilizó el modelo de Eyring-MTSM [4]. Los porcentajes de error fueron de (2.47 y 2.86) % para líquidos iónicos y compuestos orgánicos, y líquidos iónicos con agua, respectivamente, y de (2.27 y 3.18) % con dependencia de temperatura.

Los porcentajes bias y desviación estándar fueron de  $(4.31 \times 10^{-3}, 5.31 \times 10^{-4})$  %,  $(1.92 \times 10^{-2}, 9.98 \times 10^{-4})$  %,  $(-2.00 \times 10^{-2}, 1.45 \times 10^{-3})$  % para líquidos iónicos y compuestos orgánicos con Vásquez-Castillo, Nava-Ríos y Eyring-MTSM, respectivamente. Para líquidos iónicos con agua los porcentajes bias y desviación estándar fueron de  $(5.12 \times 10^{-2}, 3.50 \times 10^{-3})$  % y  $(1.42 \times 10^{-3}, 1.36 \times 10^{-3})$  con Vásquez-Castillo y Eyring-MTSM, respectivamente.

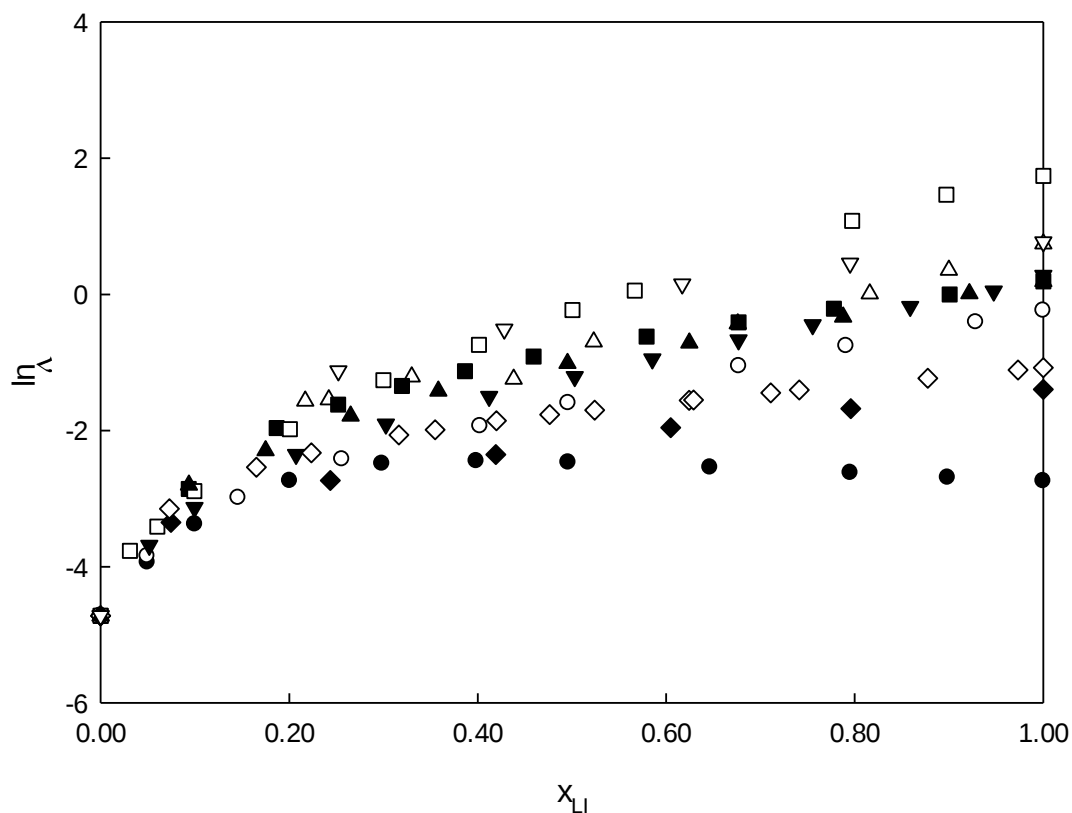


Figura 4.28. Viscosidades para sistemas de líquido iónico con agua con un mayor porcentaje de error para la ecuación de Vásquez-Castillo a 298.15 K. ● 1-methylimidazolium acetate (9.85 %), ○ 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate (11.86 %), ▼ 1-ethyl-3-methylpyridinium ethylsulfate (12.77 %), △ 1-octylpyridinium tetrafluoroborate (15.29 %), ■ 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate (11.14 %), □ butylammonium acetate (13.67 %), ◆ 1-ethyl-3-methylimidazolium trifluoroacetate (15.11 %), ◇ 1-butyl-1-methylpyrrolidinium dicyanamide (12.31%), ▲ 1-butyl-1-methylpiperidinium dicyanamide (13.02 %), ▽ 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate (11.79 %).

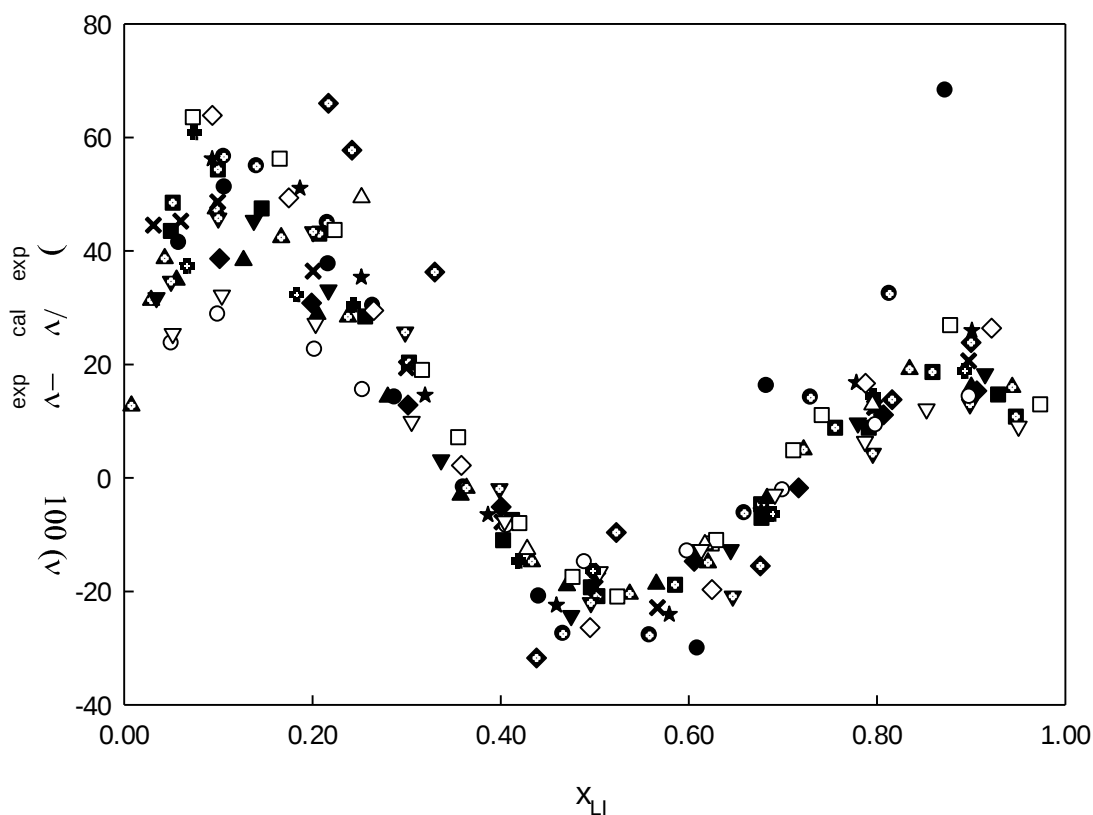


Figura 4.29. Porcentaje de desviación de viscosidad para mezclas binarias de LI con H<sub>2</sub>O para la ecuación de Nava-Ríos a 298.15 K ● 1-hexyl-3-methylimidazolium chloride, ⊕ 1-ethyl-1-methylpiperidinium ethyl sulfate, ■ 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate, ⊞ 1-ethyl-3-methylpyridinium ethylsulfate, ◆ 1,2-dimethyl-3-propylimidazolium tetrafluoroborate, ◇ 1-octylpyridinium tetrafluoroborate, ▲ 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate, △ 1-butyl-4-methylpyridinium thiocyanate, ▼ 1-butyl-1-methylpyrrolidinium thiocyanate, ▽ 1-methylimidazolium acetate, ★ 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate, × butylammonium acetate, \* 1-ethyl-3-methylimidazolium trifluoroacetate, ○ 1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamide, □ 1-butyl-1-methylpyrrolidinium dicyanamide, ◇ 1-butyl-1-methylpiperidinium dicyanamide, △ 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate, ▽ 1,3-dimethylimidazolium methylsulfate, ⊛ 1-ethylpyridinium triflate.

En las Figuras 4.30 a la 4.32, se presenta el porcentaje de desviación para Vázquez-Castillo, Nava-Ríos y Eyring-MTSM, respectivamente, para las mezclas binarias de líquidos iónicos con compuestos orgánicos a 298.15. Las desviaciones que se observaron se encuentran entre (10 y -10) %, (15 y -10) % y (10 y -20) %, para las ecuaciones de Vázquez-Castillo, Nava-Ríos y Eyring-MTSM, respectivamente.

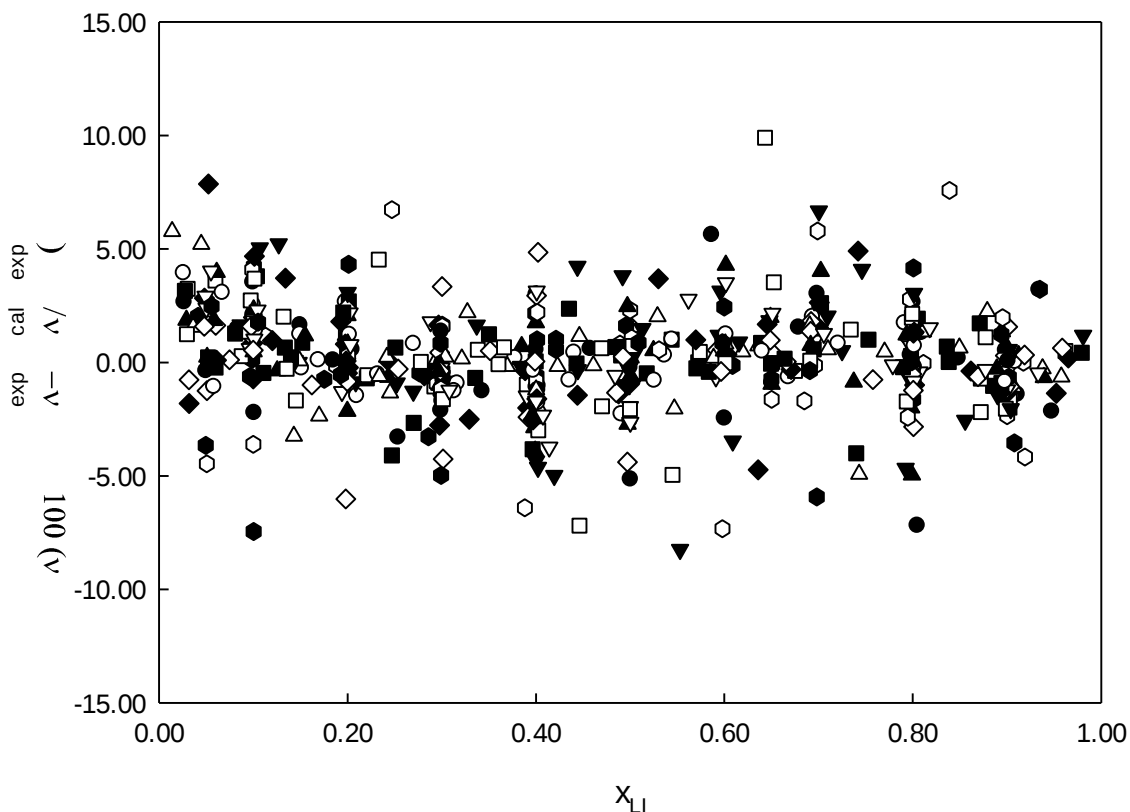


Figura 4.30. Porcentajes de desviación de viscosidad para mezclas binarias de LI con compuestos orgánicos con la ecuación de Vázquez-Castillo (Ec. 3.60) a 298.15 K.

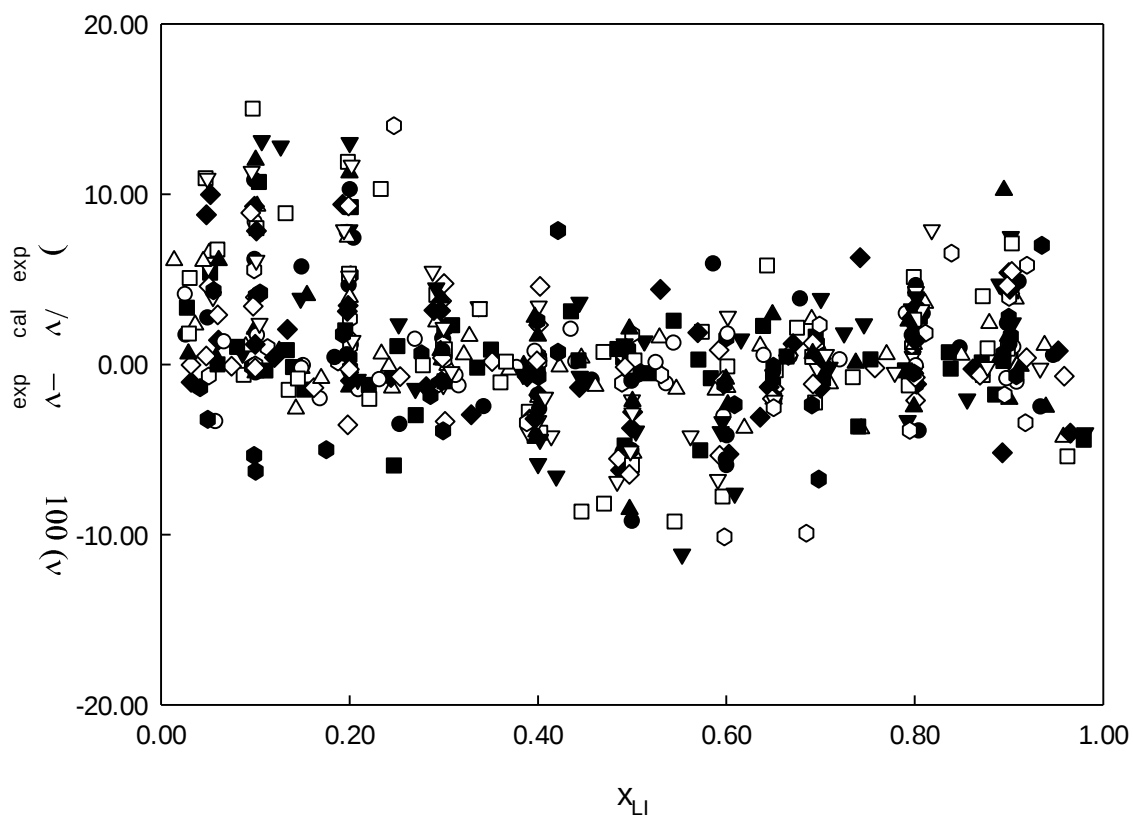


Figura 4.31. Porcentaje de desviación de viscosidad para mezclas binarias de LI con compuestos orgánicos con la ecuación de Nava-Ríos (Ec. 3.64) a 298.15 K.

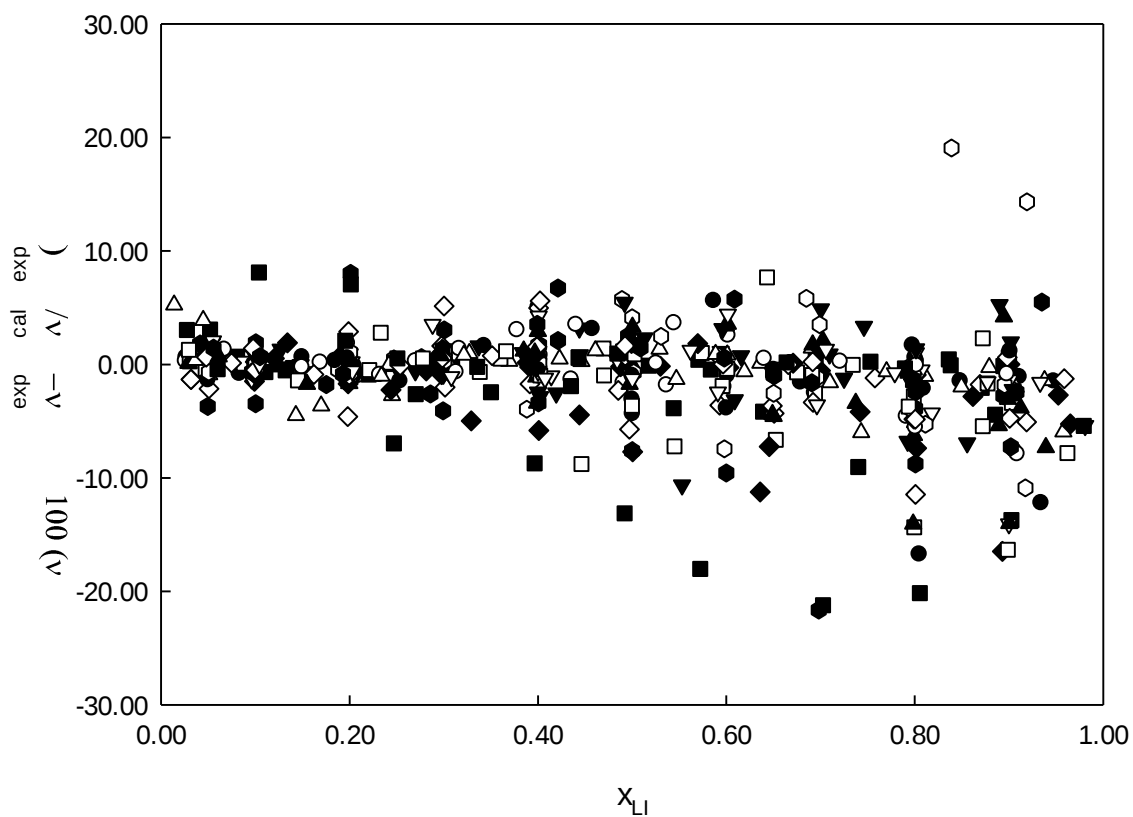


Figura 4.32. Porcentaje de desviación de viscosidad para mezclas binarias de LI con compuestos orgánicos con la ecuación de Eyring-MTSM (Ec. 3.67) a 298.15 K.

**Tabla 4.20. AAPD, *bias* y DS para Vásquez-Castillo, Nava-Ríos y Eyring-MTSM de líquidos iónicos con compuestos orgánicos**

| Líquido iónico                            | Solvente              | Vásquez-Castillo |                          |                         | Nava-Ríos   |                          |                         | Eyring-MTSM |                          |                         |
|-------------------------------------------|-----------------------|------------------|--------------------------|-------------------------|-------------|--------------------------|-------------------------|-------------|--------------------------|-------------------------|
|                                           |                       | <i>AAPD</i>      | <i>bias</i>              | <i>DS</i>               | <i>AAPD</i> | <i>bias</i>              | <i>DS</i>               | <i>AAPD</i> | <i>bias</i>              | <i>DS</i>               |
| [Et <sub>3</sub> S][NTf <sub>2</sub> ]    | 1-propanol            | 1.85             | 2.15 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.09 x 10 <sup>-4</sup> | 4.03        | 1.41 x 10 <sup>-2</sup>  | 2.27 x 10 <sup>-4</sup> | 1.54        | -8.25 x 10 <sup>-4</sup> | 9.99 x 10 <sup>-5</sup> |
| [Amim][NTf <sub>2</sub> ]                 | 1-propanol            | 1.45             | 2.07 x 10 <sup>-3</sup>  | 8.50 x 10 <sup>-5</sup> | 2.99        | 1.03 x 10 <sup>-2</sup>  | 1.44 x 10 <sup>-4</sup> | 1.52        | -8.67 x 10 <sup>-3</sup> | 1.39 x 10 <sup>-4</sup> |
| [(OH) <sub>2</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ] | 1-propanol            | 2.98             | 4.83 x 10 <sup>-3</sup>  | 4.73 x 10 <sup>-4</sup> | 5.71        | 2.05 x 10 <sup>-2</sup>  | 8.44 x 10 <sup>-4</sup> | 2.19        | -5.58 x 10 <sup>-5</sup> | 4.66 x 10 <sup>-4</sup> |
| [N1112OH][NTf <sub>2</sub> ]              | 1,3-propanediol       | 1.07             | -4.58 x 10 <sup>-3</sup> | 1.60 x 10 <sup>-4</sup> | 0.85        | -5.36 x 10 <sup>-3</sup> | 1.12 x 10 <sup>-4</sup> | 0.96        | 2.16 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.61 x 10 <sup>-4</sup> |
| [N1112OH][NTf <sub>2</sub> ]              | 1,2-propanediol       | 1.28             | -2.24 x 10 <sup>-3</sup> | 2.21 x 10 <sup>-4</sup> | 0.83        | -1.42 x 10 <sup>-3</sup> | 1.40 x 10 <sup>-4</sup> | 1.85        | -7.92 x 10 <sup>-3</sup> | 3.58 x 10 <sup>-4</sup> |
| [N1112OH][NTf <sub>2</sub> ]              | 1,5-pentanediol       | 0.74             | -1.66 x 10 <sup>-3</sup> | 1.99 x 10 <sup>-4</sup> | 1.02        | -5.11 x 10 <sup>-3</sup> | 2.52 x 10 <sup>-4</sup> | 0.71        | 2.38 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.98 x 10 <sup>-4</sup> |
| [N1114][NTf <sub>2</sub> ]                | 1,2-propanediol       | 3.12             | -8.09 x 10 <sup>-3</sup> | 4.38 x 10 <sup>-4</sup> | 2.40        | -3.51 x 10 <sup>-3</sup> | 3.21 x 10 <sup>-4</sup> | 3.44        | -1.13 x 10 <sup>-2</sup> | 4.79 x 10 <sup>-4</sup> |
| [N1114][NTf <sub>2</sub> ]                | 2,3-butanediol        | 0.71             | -8.80 x 10 <sup>-5</sup> | 1.40 x 10 <sup>-4</sup> | 1.18        | -6.38 x 10 <sup>-3</sup> | 2.69 x 10 <sup>-4</sup> | 1.11        | -6.48 x 10 <sup>-3</sup> | 2.48 x 10 <sup>-4</sup> |
| [N1114][NTf <sub>2</sub> ]                | 1,2-butanediol        | 1.43             | -4.36 x 10 <sup>-3</sup> | 2.01 x 10 <sup>-4</sup> | 1.07        | -3.49 x 10 <sup>-3</sup> | 1.50 x 10 <sup>-4</sup> | 1.03        | 6.28 x 10 <sup>-6</sup>  | 1.51 x 10 <sup>-4</sup> |
| [emim][NTf <sub>2</sub> ]                 | etanol                | 0.78             | 2.51 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.12 x 10 <sup>-4</sup> | 4.51        | 4.68 x 10 <sup>-2</sup>  | 4.92 x 10 <sup>-4</sup> | 1.27        | -2.02 x 10 <sup>-2</sup> | 2.81 x 10 <sup>-4</sup> |
| [emim][NTf <sub>2</sub> ]                 | 1-propanol            | 1.15             | 8.53 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.35 x 10 <sup>-4</sup> | 3.31        | 4.71 x 10 <sup>-2</sup>  | 3.29 x 10 <sup>-4</sup> | 4.08        | -8.12 x 10 <sup>-2</sup> | 7.74 x 10 <sup>-4</sup> |
| [hmim][NTf <sub>2</sub> ]                 | etanol                | 1.57             | 1.04 x 10 <sup>-2</sup>  | 7.07 x 10 <sup>-4</sup> | 7.91        | 1.15 x 10 <sup>-1</sup>  | 2.69 x 10 <sup>-3</sup> | 1.84        | -4.57 x 10 <sup>-2</sup> | 1.49 x 10 <sup>-3</sup> |
| [hmim][NTf <sub>2</sub> ]                 | 1-propanol            | 1.60             | 1.01 x 10 <sup>-2</sup>  | 4.85 x 10 <sup>-4</sup> | 5.43        | 5.81 x 10 <sup>-2</sup>  | 1.40 x 10 <sup>-3</sup> | 0.86        | -8.83 x 10 <sup>-3</sup> | 3.11 x 10 <sup>-4</sup> |
| [bmim][NTf <sub>2</sub> ]                 | 1-propanol            | 1.68             | 4.98 x 10 <sup>-3</sup>  | 3.65 x 10 <sup>-4</sup> | 4.89        | 4.86 x 10 <sup>-2</sup>  | 9.55 x 10 <sup>-4</sup> | 1.97        | -2.67 x 10 <sup>-2</sup> | 5.77 x 10 <sup>-4</sup> |
| [bmim][NTf <sub>2</sub> ]                 | 2,2,2-trifluoroetanol | 0.70             | -8.69 x 10 <sup>-6</sup> | 9.09 x 10 <sup>-6</sup> | 1.04        | 2.82 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.07 x 10 <sup>-4</sup> | 2.50        | -1.77 x 10 <sup>-2</sup> | 8.52 x 10 <sup>-4</sup> |
| [bmim][NTf <sub>2</sub> ]                 | etanol                | 1.26             | 7.35 x 10 <sup>-3</sup>  | 2.49 x 10 <sup>-4</sup> | 6.37        | 6.83 x 10 <sup>-2</sup>  | 1.07 x 10 <sup>-3</sup> | 2.65        | -3.62 x 10 <sup>-2</sup> | 7.99 x 10 <sup>-4</sup> |
| [bmim][BF <sub>4</sub> ]                  | 2,2,2-trifluoroetanol | 0.82             | 3.77 x 10 <sup>-3</sup>  | 2.33 x 10 <sup>-5</sup> | 3.35        | -8.86 x 10 <sup>-3</sup> | 2.30 x 10 <sup>-4</sup> | 3.89        | 4.52 x 10 <sup>-2</sup>  | 3.00 x 10 <sup>-4</sup> |
| [Omim][BF <sub>4</sub> ]                  | etanol                | 4.29             | 6.07 x 10 <sup>-3</sup>  | 4.29 x 10 <sup>-3</sup> | 6.14        | 2.21 x 10 <sup>-2</sup>  | 4.96 x 10 <sup>-3</sup> | 5.89        | 5.79 x 10 <sup>-2</sup>  | 9.63 x 10 <sup>-3</sup> |
| [4bmpyr][BF <sub>4</sub> ]                | etanol                | 1.37             | 4.13 x 10 <sup>-3</sup>  | 6.14 x 10 <sup>-4</sup> | 2.82        | 2.30 x 10 <sup>-2</sup>  | 1.17 x 10 <sup>-3</sup> | 3.71        | -5.00 x 10 <sup>-2</sup> | 2.26 x 10 <sup>-3</sup> |
| [4bmpyr][BF <sub>4</sub> ]                | metanol               | 1.21             | -1.91 x 10 <sup>-4</sup> | 4.89 x 10 <sup>-4</sup> | 4.58        | 3.88 x 10 <sup>-2</sup>  | 1.68 x 10 <sup>-3</sup> | 5.45        | -1.04 x 10 <sup>-1</sup> | 3.52 x 10 <sup>-3</sup> |
| [3bmpyr][BF <sub>4</sub> ]                | metanol               | 1.87             | 7.29 x 10 <sup>-3</sup>  | 6.07 x 10 <sup>-4</sup> | 5.49        | 5.03 x 10 <sup>-2</sup>  | 1.36 x 10 <sup>-3</sup> | 5.23        | -9.56 x 10 <sup>-2</sup> | 2.41 x 10 <sup>-3</sup> |
| [3bmpyr][BF <sub>4</sub> ]                | etanol                | 2.04             | 9.32 x 10 <sup>-3</sup>  | 4.86 x 10 <sup>-4</sup> | 3.72        | 3.48 x 10 <sup>-2</sup>  | 9.29 x 10 <sup>-4</sup> | 8.67        | -1.64 x 10 <sup>-1</sup> | 4.27 x 10 <sup>-3</sup> |
| [bmpyr][BF <sub>4</sub> ]                 | metanol               | 1.66             | 3.27 x 10 <sup>-3</sup>  | 3.72 x 10 <sup>-4</sup> | 4.81        | 4.22 x 10 <sup>-2</sup>  | 1.23 x 10 <sup>-3</sup> | 5.98        | -1.08 x 10 <sup>-1</sup> | 2.63 x 10 <sup>-3</sup> |
| [C4mim][BF <sub>4</sub> ]                 | metanol               | 0.92             | 5.57 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.07 x 10 <sup>-4</sup> | 3.29        | 3.47 x 10 <sup>-2</sup>  | 4.31 x 10 <sup>-4</sup> | 1.78        | -2.78 x 10 <sup>-2</sup> | 4.41 x 10 <sup>-4</sup> |
| [C6mim][BF <sub>4</sub> ]                 | 1-propanol            | 0.93             | -4.59 x 10 <sup>-3</sup> | 1.55 x 10 <sup>-4</sup> | 1.56        | 6.56 x 10 <sup>-3</sup>  | 5.56 x 10 <sup>-4</sup> | 3.29        | -6.51 x 10 <sup>-2</sup> | 1.49 x 10 <sup>-3</sup> |

**Tabla 4.20 (continuación)**

| Líquido iónico           | Solvente               | Vásquez-Castillo |                          |                         | Nava-Ríos   |                          |                         | Eyring-MTSM |                          |                         |
|--------------------------|------------------------|------------------|--------------------------|-------------------------|-------------|--------------------------|-------------------------|-------------|--------------------------|-------------------------|
|                          |                        | <i>AAPD</i>      | <i>bias</i>              | <i>DS</i>               | <i>AAPD</i> | <i>bias</i>              | <i>DS</i>               | <i>AAPD</i> | <i>bias</i>              | <i>DS</i>               |
| [emim][BF <sub>4</sub> ] | metanol                | 1.67             | 3.33 x 10 <sup>-3</sup>  | 2.32 x 10 <sup>-4</sup> | 3.22        | 1.84 x 10 <sup>-2</sup>  | 2.89 x 10 <sup>-4</sup> | 2.11        | -1.87 x 10 <sup>-2</sup> | 4.05 x 10 <sup>-4</sup> |
| [bmim][PF <sub>6</sub> ] | 2,2,2-trifluoroethanol | 0.68             | -1.98 x 10 <sup>-3</sup> | 6.34 x 10 <sup>-5</sup> | 1.67        | -8.16 x 10 <sup>-3</sup> | 1.43 x 10 <sup>-4</sup> | 1.08        | 6.94 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.30 x 10 <sup>-4</sup> |
| [Bmim][NO <sub>3</sub> ] | etanol                 | 3.80             | 3.96 x 10 <sup>-3</sup>  | 8.87 x 10 <sup>-4</sup> | 4.34        | 1.12 x 10 <sup>-2</sup>  | 9.64 x 10 <sup>-4</sup> | 3.78        | 3.16 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.27 x 10 <sup>-3</sup> |
| [Bmim][NO <sub>3</sub> ] | 1-propanol             | 1.88             | -1.31 x 10 <sup>-3</sup> | 4.40 x 10 <sup>-4</sup> | 1.78        | -2.42 x 10 <sup>-3</sup> | 4.86 x 10 <sup>-4</sup> | 4.81        | -3.93 x 10 <sup>-2</sup> | 1.48 x 10 <sup>-3</sup> |
| [Bmim][NO <sub>3</sub> ] | 1-butanol              | 1.78             | 2.54 x 10 <sup>-4</sup>  | 3.58 x 10 <sup>-4</sup> | 2.86        | -4.75 x 10 <sup>-3</sup> | 6.49 x 10 <sup>-4</sup> | 4.96        | -4.35 x 10 <sup>-2</sup> | 1.80 x 10 <sup>-3</sup> |
| [Omim][NO <sub>3</sub> ] | etanol                 | 3.75             | 5.21 x 10 <sup>-3</sup>  | 2.74 x 10 <sup>-3</sup> | 6.25        | 2.07 x 10 <sup>-2</sup>  | 3.63 x 10 <sup>-3</sup> | 4.02        | -9.43 x 10 <sup>-3</sup> | 3.21 x 10 <sup>-3</sup> |
| [Omim][NO <sub>3</sub> ] | 1-propanol             | 2.29             | 2.16 x 10 <sup>-3</sup>  | 3.07 x 10 <sup>-3</sup> | 2.85        | -1.67 x 10 <sup>-3</sup> | 5.41 x 10 <sup>-3</sup> | 4.89        | -3.33 x 10 <sup>-2</sup> | 7.98 x 10 <sup>-3</sup> |
| [N4][NO <sub>3</sub> ]   | metanol                | 1.95             | 4.00 x 10 <sup>-3</sup>  | 4.51 x 10 <sup>-4</sup> | 2.36        | 1.59 x 10 <sup>-2</sup>  | 6.69 x 10 <sup>-4</sup> | 3.69        | -4.95 x 10 <sup>-2</sup> | 1.68 x 10 <sup>-3</sup> |
| [N4][NO <sub>3</sub> ]   | etanol                 | 1.13             | 2.96 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.80 x 10 <sup>-4</sup> | 1.45        | 1.09 x 10 <sup>-2</sup>  | 4.33 x 10 <sup>-4</sup> | 2.42        | -2.42 x 10 <sup>-2</sup> | 1.08 x 10 <sup>-3</sup> |
| [N4][NO <sub>3</sub> ]   | 1-propanol             | 1.37             | 3.22 x 10 <sup>-3</sup>  | 3.20 x 10 <sup>-4</sup> | 1.52        | 7.33 x 10 <sup>-3</sup>  | 4.31 x 10 <sup>-4</sup> | 1.76        | -1.33 x 10 <sup>-2</sup> | 7.14 x 10 <sup>-4</sup> |
| [N4][NO <sub>3</sub> ]   | 1-butanol              | 1.92             | 7.34 x 10 <sup>-3</sup>  | 4.20 x 10 <sup>-4</sup> | 2.74        | 1.64 x 10 <sup>-2</sup>  | 8.59 x 10 <sup>-4</sup> | 2.56        | 3.34 x 10 <sup>-3</sup>  | 7.12 x 10 <sup>-4</sup> |
| [BMIM][SCN]              | etanol                 | 0.61             | 1.23 x 10 <sup>-3</sup>  | 5.65 x 10 <sup>-5</sup> | 1.05        | -1.04 x 10 <sup>-3</sup> | 2.05 x 10 <sup>-4</sup> | 2.26        | -3.56 x 10 <sup>-2</sup> | 5.91 x 10 <sup>-4</sup> |
| [BMIM][SCN]              | 1-propanol             | 2.73             | 8.44 x 10 <sup>-3</sup>  | 3.09 x 10 <sup>-4</sup> | 2.52        | 5.10 x 10 <sup>-3</sup>  | 2.78 x 10 <sup>-4</sup> | 3.35        | -1.80 x 10 <sup>-2</sup> | 6.04 x 10 <sup>-4</sup> |
| [BMIM][SCN]              | 1-butanol              | 1.37             | 8.27 x 10 <sup>-3</sup>  | 7.77 x 10 <sup>-5</sup> | 1.08        | 6.82 x 10 <sup>-3</sup>  | 7.97 x 10 <sup>-5</sup> | 2.00        | 8.72 x 10 <sup>-3</sup>  | 2.57 x 10 <sup>-4</sup> |
| [BMIM][SCN]              | pentanol               | 1.30             | 1.17 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.45 x 10 <sup>-4</sup> | 1.30        | -2.79 x 10 <sup>-3</sup> | 2.08 x 10 <sup>-4</sup> | 1.94        | -9.14 x 10 <sup>-3</sup> | 3.52 x 10 <sup>-4</sup> |
| [BMIM][SCN]              | hexanol                | 1.14             | 3.39 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.29 x 10 <sup>-4</sup> | 0.96        | -1.32 x 10 <sup>-3</sup> | 1.88 x 10 <sup>-4</sup> | 1.46        | -5.75 x 10 <sup>-4</sup> | 2.82 x 10 <sup>-4</sup> |
| [BMIM][SCN]              | heptanol               | 0.83             | 2.22 x 10 <sup>-3</sup>  | 9.11 x 10 <sup>-5</sup> | 1.08        | -2.16 x 10 <sup>-3</sup> | 2.12 x 10 <sup>-4</sup> | 1.48        | -5.33 x 10 <sup>-3</sup> | 3.03 x 10 <sup>-4</sup> |
| [BMIM][SCN]              | octanol                | 0.38             | 3.16 x 10 <sup>-4</sup>  | 6.88 x 10 <sup>-5</sup> | 1.10        | -6.56 x 10 <sup>-3</sup> | 2.77 x 10 <sup>-4</sup> | 1.45        | -1.71 x 10 <sup>-2</sup> | 4.37 x 10 <sup>-4</sup> |
| [BMIM][SCN]              | nonanol                | 0.47             | 1.18 x 10 <sup>-3</sup>  | 8.99 x 10 <sup>-5</sup> | 0.98        | -2.30 x 10 <sup>-3</sup> | 2.70 x 10 <sup>-4</sup> | 1.10        | -1.08 x 10 <sup>-2</sup> | 3.64 x 10 <sup>-4</sup> |
| [BMIM][SCN]              | decanol                | 0.45             | 8.20 x 10 <sup>-4</sup>  | 8.30 x 10 <sup>-5</sup> | 0.46        | -1.85 x 10 <sup>-3</sup> | 8.59 x 10 <sup>-5</sup> | 0.68        | -2.94 x 10 <sup>-3</sup> | 1.45 x 10 <sup>-4</sup> |
| [Mmim][DMP]              | metanol                | 2.35             | 4.23 x 10 <sup>-3</sup>  | 9.26 x 10 <sup>-4</sup> | 6.26        | 3.78 x 10 <sup>-2</sup>  | 2.26 x 10 <sup>-3</sup> | 1.97        | 2.07 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.24 x 10 <sup>-3</sup> |
| [Mmim][DMP]              | etanol                 | 1.78             | 6.02 x 10 <sup>-3</sup>  | 7.46 x 10 <sup>-4</sup> | 6.52        | 7.78 x 10 <sup>-2</sup>  | 2.88 x 10 <sup>-3</sup> | 0.28        | 2.91 x 10 <sup>-3</sup>  | 2.04 x 10 <sup>-4</sup> |
| [Mmim][DMP]              | 1-propanol             | 3.05             | -3.02 x 10 <sup>-3</sup> | 1.43 x 10 <sup>-3</sup> | 3.47        | 3.91 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.70 x 10 <sup>-3</sup> | 7.17        | -7.23 x 10 <sup>-2</sup> | 4.41 x 10 <sup>-3</sup> |
| [Mmim][DMP]              | 2-propanol             | 2.78             | 7.05 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.76 x 10 <sup>-3</sup> | 3.80        | 1.95 x 10 <sup>-2</sup>  | 2.29 x 10 <sup>-3</sup> | 1.84        | 1.23 x 10 <sup>-3</sup>  | 1.34 x 10 <sup>-3</sup> |
| [EMIM][DMP]              | metanol                | 0.68             | 1.40 x 10 <sup>-3</sup>  | 2.49 x 10 <sup>-4</sup> | 6.20        | 4.63 x 10 <sup>-2</sup>  | 2.76 x 10 <sup>-3</sup> | 0.45        | 5.20 x 10 <sup>-4</sup>  | 2.26 x 10 <sup>-4</sup> |

**Tabla 4.20 (continuación)**

| Líquido iónico              | Solvente   | Vásquez-Castillo |                        |                       | Nava-Ríos   |                        |                       | Eyring-MTSM |                        |                       |
|-----------------------------|------------|------------------|------------------------|-----------------------|-------------|------------------------|-----------------------|-------------|------------------------|-----------------------|
|                             |            | <i>AAPD</i>      | <i>bias</i>            | <i>DS</i>             | <i>AAPD</i> | <i>bias</i>            | <i>DS</i>             | <i>AAPD</i> | <i>bias</i>            | <i>DS</i>             |
| [EMIM][DMP]                 | etanol     | 1.02             | $2.22 \times 10^{-3}$  | $4.13 \times 10^{-4}$ | 1.66        | $7.36 \times 10^{-3}$  | $6.27 \times 10^{-4}$ | 1.57        | $-1.52 \times 10^{-2}$ | $1.88 \times 10^{-3}$ |
| [BMIM][DMP]                 | metanol    | 2.44             | $6.51 \times 10^{-3}$  | $1.58 \times 10^{-3}$ | 6.89        | $5.36 \times 10^{-2}$  | $3.95 \times 10^{-3}$ | 1.55        | $-6.65 \times 10^{-4}$ | $1.82 \times 10^{-3}$ |
| [BMIM][DMP]                 | etanol     | 0.85             | $1.81 \times 10^{-3}$  | $5.19 \times 10^{-4}$ | 3.09        | $2.04 \times 10^{-2}$  | $1.80 \times 10^{-3}$ | 0.49        | $-2.19 \times 10^{-4}$ | $5.46 \times 10^{-4}$ |
| [emim][OAc]                 | etanol     | 0.93             | $2.82 \times 10^{-3}$  | $2.10 \times 10^{-4}$ | 1.53        | $1.07 \times 10^{-2}$  | $2.39 \times 10^{-4}$ | 0.28        | $-2.67 \times 10^{-4}$ | $7.85 \times 10^{-5}$ |
| [N4][AC]                    | metanol    | 2.23             | $1.41 \times 10^{-2}$  | $1.98 \times 10^{-3}$ | 4.59        | $4.35 \times 10^{-2}$  | $2.67 \times 10^{-3}$ | 5.11        | $-9.28 \times 10^{-2}$ | $1.35 \times 10^{-2}$ |
| [N4][AC]                    | etanol     | 0.97             | $-1.23 \times 10^{-3}$ | $6.84 \times 10^{-4}$ | 2.12        | $1.19 \times 10^{-2}$  | $2.75 \times 10^{-3}$ | 2.67        | $-3.90 \times 10^{-2}$ | $3.43 \times 10^{-3}$ |
| [N4][AC]                    | 1-propanol | 2.64             | $1.02 \times 10^{-3}$  | $1.11 \times 10^{-3}$ | 3.34        | $1.17 \times 10^{-2}$  | $2.80 \times 10^{-3}$ | 3.54        | $-1.76 \times 10^{-2}$ | $2.54 \times 10^{-3}$ |
| [N4][AC]                    | 1-butanol  | 1.41             | $6.84 \times 10^{-3}$  | $9.54 \times 10^{-4}$ | 1.57        | $-2.24 \times 10^{-3}$ | $1.87 \times 10^{-3}$ | 3.36        | $-4.07 \times 10^{-2}$ | $7.87 \times 10^{-3}$ |
| [Mim][Ac]                   | metanol    | 1.07             | $7.71 \times 10^{-3}$  | $3.76 \times 10^{-5}$ | 3.56        | $3.51 \times 10^{-2}$  | $2.21 \times 10^{-4}$ | 0.48        | $8.01 \times 10^{-4}$  | $1.65 \times 10^{-5}$ |
| [Mim][Ac]                   | etanol     | 0.84             | $-4.86 \times 10^{-3}$ | $3.62 \times 10^{-5}$ | 0.53        | $-1.06 \times 10^{-3}$ | $2.16 \times 10^{-5}$ | 1.35        | $-1.42 \times 10^{-2}$ | $6.91 \times 10^{-5}$ |
| [Mim][Ac]                   | 1-propanol | 1.89             | $-1.11 \times 10^{-2}$ | $9.14 \times 10^{-5}$ | 1.53        | $-1.34 \times 10^{-2}$ | $8.15 \times 10^{-5}$ | 1.29        | $-1.04 \times 10^{-2}$ | $7.14 \times 10^{-5}$ |
| [Mim][Ac]                   | 1-butanol  | 1.05             | $-5.09 \times 10^{-3}$ | $5.64 \times 10^{-5}$ | 1.69        | $-1.46 \times 10^{-2}$ | $9.03 \times 10^{-5}$ | 0.62        | $3.68 \times 10^{-3}$  | $4.37 \times 10^{-5}$ |
| [emim][DCA]                 | etanol     | 1.55             | $9.40 \times 10^{-3}$  | $7.45 \times 10^{-5}$ | 1.66        | $1.70 \times 10^{-2}$  | $6.84 \times 10^{-5}$ | 0.79        | $-4.98 \times 10^{-4}$ | $4.44 \times 10^{-5}$ |
| [EMIM][ES]                  | metanol    | 4.44             | $1.42 \times 10^{-2}$  | $6.34 \times 10^{-4}$ | 7.27        | $5.34 \times 10^{-2}$  | $9.20 \times 10^{-4}$ | 3.79        | $5.68 \times 10^{-3}$  | $3.56 \times 10^{-4}$ |
| [EMI][EtSO <sub>4</sub> ]   | etanol     | 2.49             | $3.83 \times 10^{-2}$  | $2.63 \times 10^{-4}$ | 3.16        | $6.08 \times 10^{-2}$  | $3.39 \times 10^{-4}$ | 2.15        | $1.36 \times 10^{-2}$  | $2.94 \times 10^{-4}$ |
| [EMI][EtSO <sub>4</sub> ]   | 1-propanol | 1.15             | $1.37 \times 10^{-2}$  | $1.27 \times 10^{-4}$ | 1.25        | $1.55 \times 10^{-2}$  | $1.65 \times 10^{-4}$ | 1.20        | $7.69 \times 10^{-3}$  | $2.50 \times 10^{-4}$ |
| [EMI][EtSO <sub>4</sub> ]   | 2-propanol | 0.64             | $4.23 \times 10^{-3}$  | $2.12 \times 10^{-4}$ | 0.82        | $9.83 \times 10^{-3}$  | $2.28 \times 10^{-4}$ | 1.26        | $-1.43 \times 10^{-2}$ | $7.77 \times 10^{-4}$ |
| EpyESO <sub>4</sub>         | etanol     | 2.67             | $3.10 \times 10^{-2}$  | $6.43 \times 10^{-4}$ | 3.93        | $6.17 \times 10^{-2}$  | $6.56 \times 10^{-4}$ | 1.62        | $-1.87 \times 10^{-3}$ | $6.05 \times 10^{-4}$ |
| EpyESO <sub>4</sub>         | 1-propanol | 0.95             | $6.94 \times 10^{-3}$  | $2.56 \times 10^{-4}$ | 1.09        | $1.12 \times 10^{-2}$  | $2.97 \times 10^{-4}$ | 1.50        | $1.07 \times 10^{-2}$  | $8.03 \times 10^{-4}$ |
| [empy][EtSO <sub>4</sub> ]  | etanol     | 1.43             | $1.35 \times 10^{-2}$  | $3.97 \times 10^{-4}$ | 2.90        | $2.31 \times 10^{-2}$  | $9.12 \times 10^{-4}$ | 3.76        | $-8.02 \times 10^{-2}$ | $2.43 \times 10^{-3}$ |
| [Mmim][[MeSO <sub>4</sub> ] | etanol     | 1.66             | $1.23 \times 10^{-2}$  | $2.51 \times 10^{-4}$ | 1.64        | $1.76 \times 10^{-2}$  | $1.87 \times 10^{-4}$ | 1.22        | $-1.67 \times 10^{-3}$ | $3.08 \times 10^{-4}$ |
| [Bmim][MeSO <sub>4</sub> ]  | etanol     | 1.55             | $7.95 \times 10^{-3}$  | $9.02 \times 10^{-4}$ | 2.66        | $3.66 \times 10^{-2}$  | $1.23 \times 10^{-3}$ | 1.55        | $6.20 \times 10^{-3}$  | $1.16 \times 10^{-3}$ |

**Tabla 4.21. AAPD, bias y DS para Vásquez-Castillo y Eyring-MTSM de líquidos iónicos con agua**

| Líquido iónico | Vásquez-Castillo      |                         |                        | Eyring-MTSM |                        |                       |
|----------------|-----------------------|-------------------------|------------------------|-------------|------------------------|-----------------------|
|                | <i>AAPD</i>           | <i>bias</i>             | <i>DS</i>              | <i>AAPD</i> | <i>bias</i>            | <i>DS</i>             |
| [Epy][NTf2]    | $3.06 \times 10^{-7}$ | $-1.02 \times 10^{-8}$  | $3.63 \times 10^{-11}$ | 1.54        | $-1.70 \times 10^{-2}$ | $4.72 \times 10^{-4}$ |
| [1E2Mpy][NTf2] | $7.61 \times 10^{-9}$ | $-2.54 \times 10^{-10}$ | $3.11 \times 10^{-12}$ | 1.41        | $-1.86 \times 10^{-2}$ | $8.02 \times 10^{-4}$ |
| [1E3Mpy][NTf2] | $1.89 \times 10^{-7}$ | $-6.29 \times 10^{-9}$  | $2.23 \times 10^{-11}$ | 0.65        | $-2.20 \times 10^{-3}$ | $1.29 \times 10^{-4}$ |
| [1E4Mpy][NTf2] | $2.61 \times 10^{-7}$ | $-9.65 \times 10^{-9}$  | $3.33 \times 10^{-11}$ | 0.25        | $-1.05 \times 10^{-3}$ | $4.64 \times 10^{-5}$ |
| [C6mim][Cl]    | 8.86                  | 0.094                   | $3.76 \times 10^{-2}$  |             |                        |                       |
| [C6mim][Br]    | 11.54                 | 0.054                   | $1.75 \times 10^{-2}$  | 5.53        | $4.14 \times 10^{-3}$  | $1.91 \times 10^{-2}$ |
| [EMPYR][EtSO4] | 10.35                 | 0.062                   | $1.64 \times 10^{-3}$  | 2.43        | $3.26 \times 10^{-3}$  | $2.39 \times 10^{-4}$ |
| [EMPIP][EtSO4] | 9.62                  | 0.024                   | $5.60 \times 10^{-3}$  | 2.13        | $2.15 \times 10^{-3}$  | $1.62 \times 10^{-3}$ |
| [EMIM][EtSO4]  | 11.86                 | 0.192                   | $3.45 \times 10^{-3}$  | 1.20        | $1.62 \times 10^{-3}$  | $3.09 \times 10^{-4}$ |
| [empty][EtSO4] | 12.77                 | 0.148                   | $4.48 \times 10^{-3}$  | 1.82        | $-2.02 \times 10^{-2}$ | $1.32 \times 10^{-3}$ |
| [PDMIM][BF4]   | 5.99                  | 0.019                   | $1.74 \times 10^{-3}$  | 1.32        | $-1.11 \times 10^{-2}$ | $8.53 \times 10^{-4}$ |
| [BMIM][BF4]    | 6.59                  | 0.020                   | $7.67 \times 10^{-4}$  | 5.65        | $-4.19 \times 10^{-2}$ | $6.11 \times 10^{-4}$ |
| [OcPy][BF4]    | 15.29                 | 0.038                   | $6.24 \times 10^{-3}$  | 6.44        | $4.52 \times 10^{-3}$  | $2.30 \times 10^{-3}$ |
| [BuPy][BF4]    | 3.69                  | $5.59 \times 10^{-3}$   | $4.18 \times 10^{-4}$  | 6.23        | $-5.15 \times 10^{-2}$ | $2.26 \times 10^{-3}$ |
| [emim][BF4]    | 7.00                  | 0.035                   | $4.83 \times 10^{-4}$  | 7.75        | $9.91 \times 10^{-2}$  | $7.88 \times 10^{-4}$ |
| [BMIM][SCN]    | 6.45                  | 0.033                   | $6.51 \times 10^{-4}$  | 1.04        | $-2.98 \times 10^{-3}$ | $1.66 \times 10^{-4}$ |
| [EMIM][SCN]    | 5.68                  | 0.030                   | $3.73 \times 10^{-4}$  | 0.69        | $-1.59 \times 10^{-3}$ | $9.78 \times 10^{-5}$ |
| [BMPy][SCN]    | 9.67                  | 0.055                   | $1.12 \times 10^{-3}$  | 1.25        | $1.66 \times 10^{-3}$  | $1.40 \times 10^{-4}$ |
| [BMPYR][SCN]   | 8.87                  | 0.060                   | $2.07 \times 10^{-3}$  | 1.12        | $-1.64 \times 10^{-3}$ | $2.68 \times 10^{-4}$ |
| [BMPIP][SCN]   | 4.72                  | 0.048                   | $1.40 \times 10^{-3}$  | 2.01        | $6.52 \times 10^{-3}$  | $1.49 \times 10^{-3}$ |
| [Mim][Ac]      | 9.85                  | 0.071                   | $8.07 \times 10^{-4}$  | 1.06        | $-6.91 \times 10^{-4}$ | $1.01 \times 10^{-4}$ |
| [emim][OAc]    | 11.14                 | 0.086                   | $3.65 \times 10^{-3}$  | 1.02        | $6.27 \times 10^{-3}$  | $6.20 \times 10^{-4}$ |
| [N4][Ac]       | 13.67                 | 0.137                   | $1.41 \times 10^{-2}$  | 4.32        | $1.32 \times 10^{-2}$  | $2.70 \times 10^{-3}$ |
| [emim][TFA]    | 15.11                 | 0.200                   | $1.47 \times 10^{-3}$  | 2.00        | $-1.97 \times 10^{-3}$ | $2.94 \times 10^{-4}$ |
| [EMIM][DCA]    | 5.06                  | 0.021                   | $3.19 \times 10^{-4}$  | 0.40        | $8.57 \times 10^{-4}$  | $3.12 \times 10^{-5}$ |

**Tabla 4.21 (continuación)**

| Líquido iónico             | Vásquez-Castillo |                       |                       | Eyring-MTSM |                        |                       |
|----------------------------|------------------|-----------------------|-----------------------|-------------|------------------------|-----------------------|
|                            | <i>AAPD</i>      | <i>bias</i>           | <i>DS</i>             | <i>AAPD</i> | <i>bias</i>            | <i>DS</i>             |
| [emim][DCA]                | 4.87             | 0.037                 | $2.86 \times 10^{-4}$ | 0.42        | $3.30 \times 10^{-4}$  | $2.33 \times 10^{-5}$ |
| [C4mim][N(CN)2]            | 0.51             | $6.62 \times 10^{-5}$ | $1.12 \times 10^{-4}$ | 1.06        | $-4.39 \times 10^{-3}$ | $2.42 \times 10^{-4}$ |
| [BMPYR][DCA]               | 12.31            | 0.031                 | $9.23 \times 10^{-4}$ | 0.53        | $-3.94 \times 10^{-4}$ | $4.24 \times 10^{-5}$ |
| [BMPIP][DCA]               | 13.02            | 0.060                 | $2.33 \times 10^{-3}$ | 4.20        | $-2.36 \times 10^{-2}$ | $1.30 \times 10^{-3}$ |
| [C4mim][C(CN)3]            | 1.49             | $5.53 \times 10^{-4}$ | $2.93 \times 10^{-4}$ | 1.60        | $-3.21 \times 10^{-3}$ | $3.28 \times 10^{-4}$ |
| [BMIM][CF3SO3]             | 11.34            | 0.058                 | $1.26 \times 10^{-3}$ | 3.16        | $-1.26 \times 10^{-2}$ | $5.08 \times 10^{-4}$ |
| [EtNH3][NO3]               | 4.65             | $1.26 \times 10^{-3}$ | $2.85 \times 10^{-4}$ | 9.87        | $9.32 \times 10^{-2}$  | $5.78 \times 10^{-4}$ |
| [N4][NO3]                  | 3.12             | 0.019                 | $6.31 \times 10^{-4}$ | 1.12        | $-3.65 \times 10^{-5}$ | $2.67 \times 10^{-4}$ |
| [MMIM][DMP])               | 11.79            | 0.088                 | $1.17 \times 10^{-2}$ | 4.64        | $1.53 \times 10^{-2}$  | $6.52 \times 10^{-3}$ |
| [Mmim][MeSO <sub>4</sub> ] | 6.85             | 0.060                 | $1.40 \times 10^{-3}$ | 1.25        | $4.80 \times 10^{-3}$  | $2.59 \times 10^{-4}$ |
| [C2py][OTf]                | 6.92             | 0.057                 | $9.89 \times 10^{-4}$ | 3.64        | $9.32 \times 10^{-3}$  | $7.78 \times 10^{-4}$ |

---

---

En las Figuras 4.33 a la 4.35, se puede observar la dependencia de la temperatura para los parámetros de la ecuación de Vásquez-Castillo [142] (Ecs. 4.6 a la 4.8) para líquidos iónicos con compuestos orgánicos y en las Figuras 4.36 y 4.37 se presentan las viscosidades correlacionadas con la ecuación de Vásquez-Castillo para las mezclas de líquidos iónicos con compuestos orgánicos y con agua, respectivamente, y en las Figuras 4.38 y 4.39 se observan las viscosidades correlacionadas con la ecuación de Nava-Ríos para las mezclas de líquidos iónicos con compuestos orgánicos y con agua, respectivamente.

En los apéndices B.1 a B.2. se presentan los parámetros de interacción para los sistemas de líquido iónico con compuestos orgánicos y líquidos iónico con agua para la ecuación de Vásquez-Castillo [142], respectivamente. En los apéndices B.3 y B.4. se presentan los parámetros de interacción para los sistemas de líquido iónico con compuestos orgánicos y líquidos iónico con agua para el modelo de Eyring-MTSM [4], respectivamente. Y en el apéndice B.5. se muestran los parámetros de interacción para los sistemas de líquido iónico con compuestos orgánicos para la ecuación de Nava-Ríos [105].

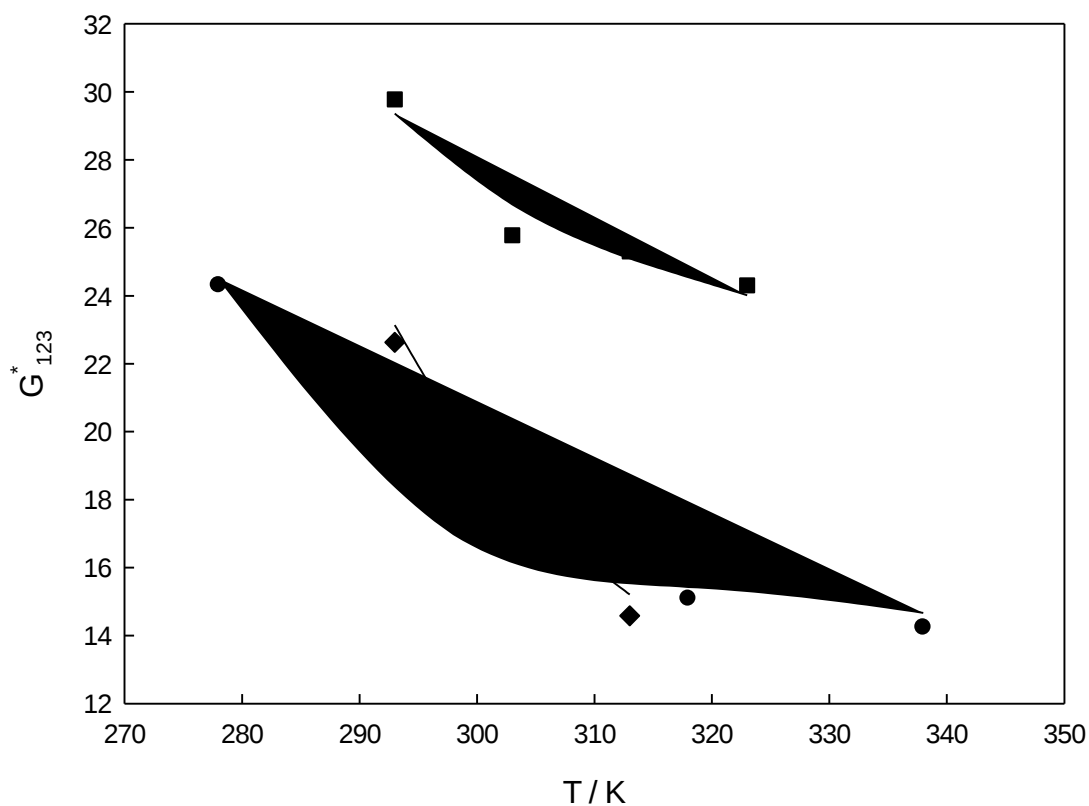


Figura 4.33. Dependencia de temperatura de  $G_{123}^*$  con la ecuación de Vázquez-Castillo para líquidos iónicos con alcohol●, 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide + etanol,■ 1-butyl-3-methylpyridinium tetrafluoroborate + metanol,◆ butylammonium acetate + 1-propanol. La línea representa la Ec. 4.6.

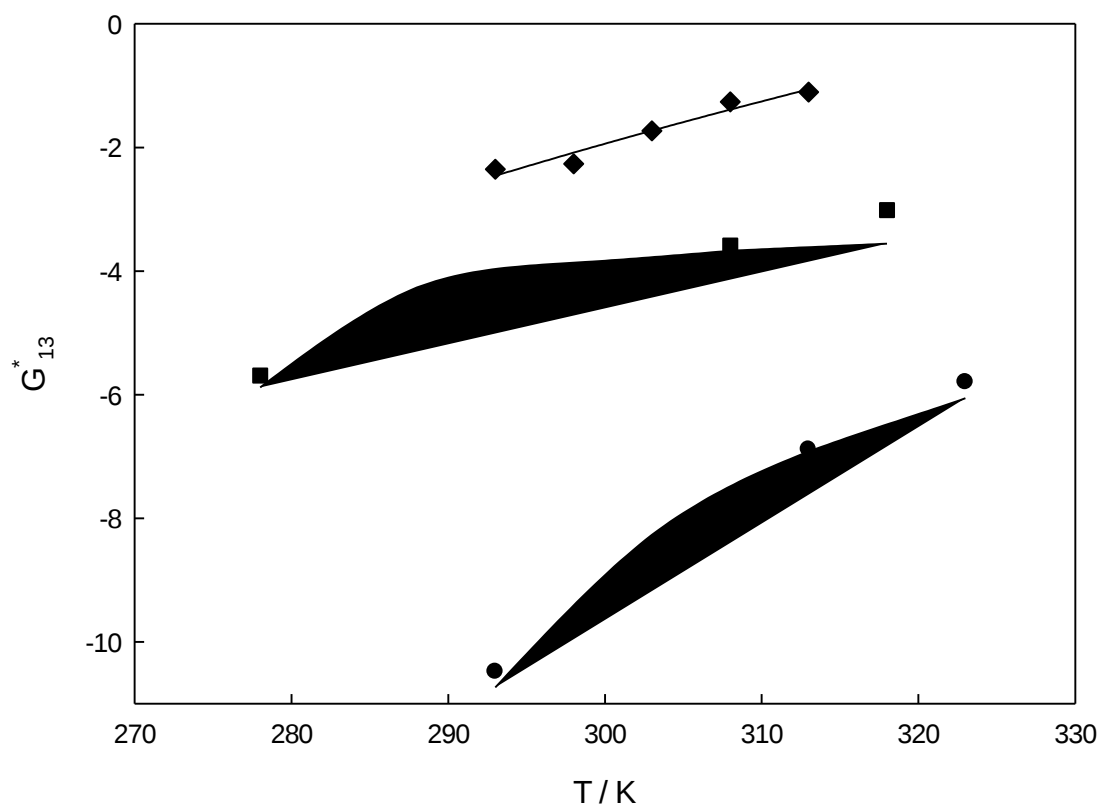


Figura 4.34. Dependencia de temperatura de  $G_{13}^*$  con la ecuación de Vázquez-Castillo para líquidos iónicos con alcoholes ● 1-butylpyridinium tetrafluoroborate + metanol, ■ 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate + metanol, ◆ butylammonium acetate + butanol. La línea representa la Ec. 4.7.

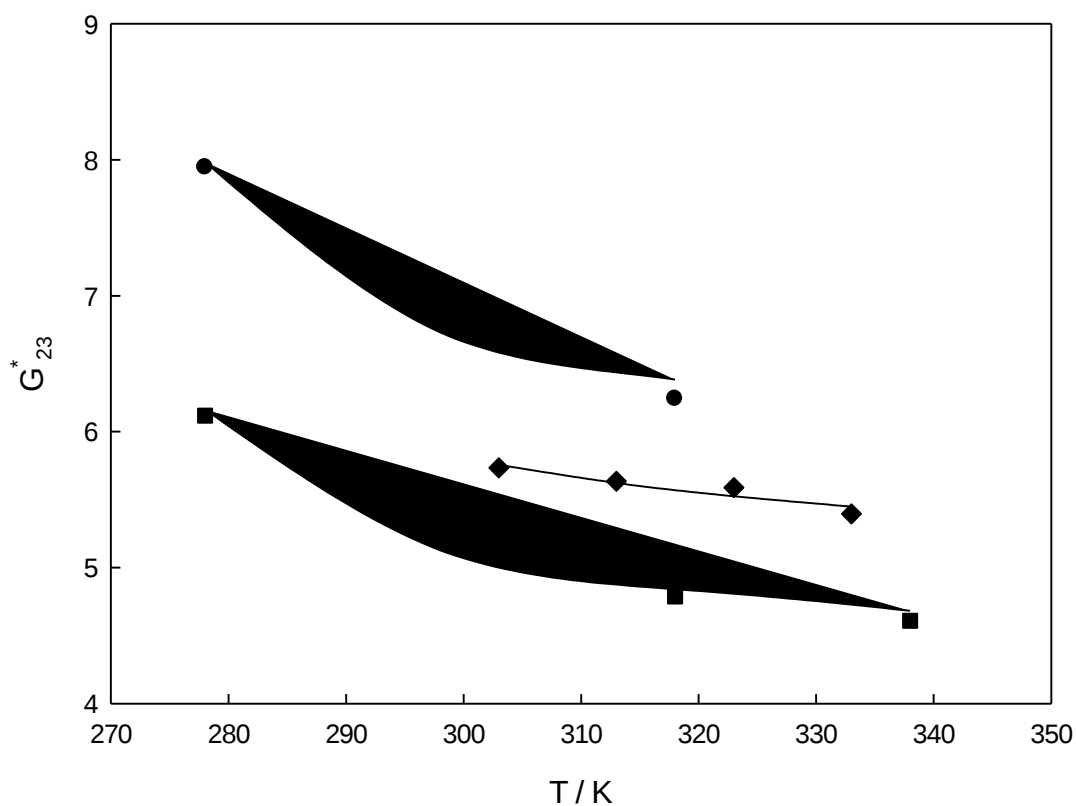


Figura 4.35. Dependencia de temperatura de  $G_{23}^*$  con la ecuación de Vásquez-Castillo para líquidos iónicos con alcoholes. ● 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide + etanol, ■ 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide + 1-propanol, ◆ 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate+ metanol. La línea representa la Ec. 4.8.

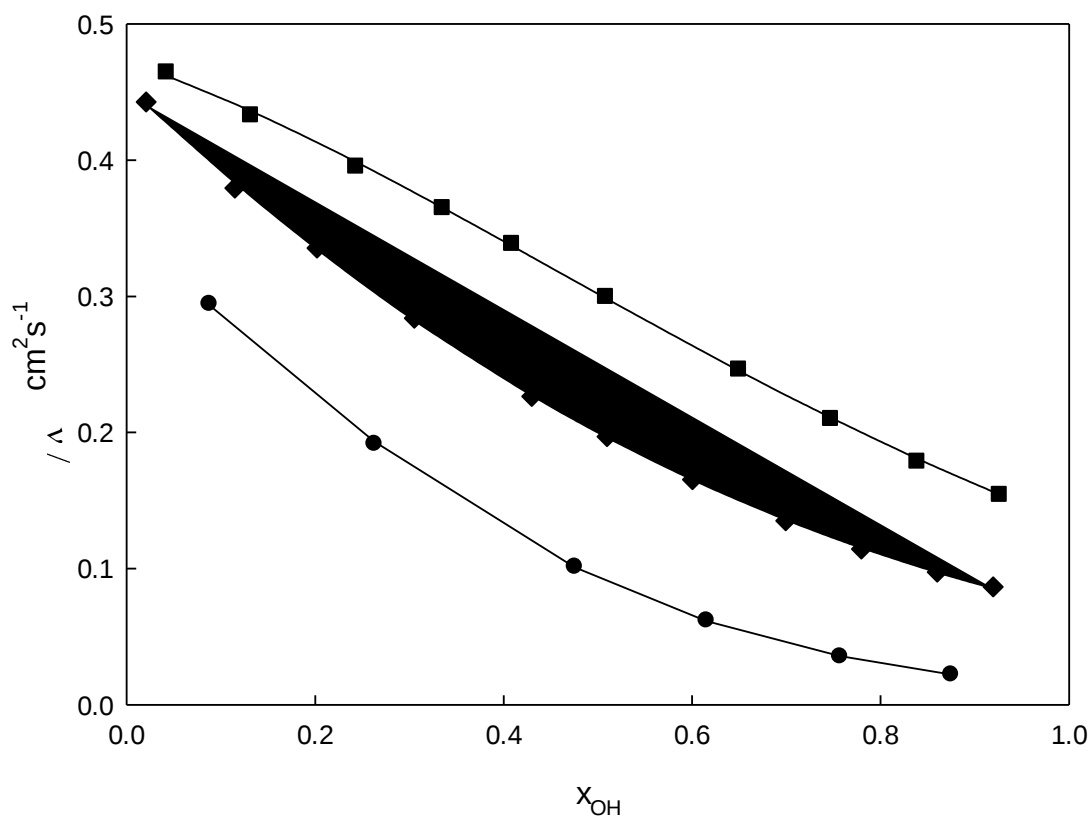


Figura 4.36. Viscosidades correlacionadas con la ecuación de Vázquez-Castillo para líquidos iónicos con compuestos orgánicos a 298.15 K. ● 1-butyl-3-methylimidazoliumbis(trifluoromethylsulfonyl)imide + 2,2,2-trifluoroetanol, ◆ 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate + heptanol, ■ 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate + decanol. La línea representa la Ec. 3.60.

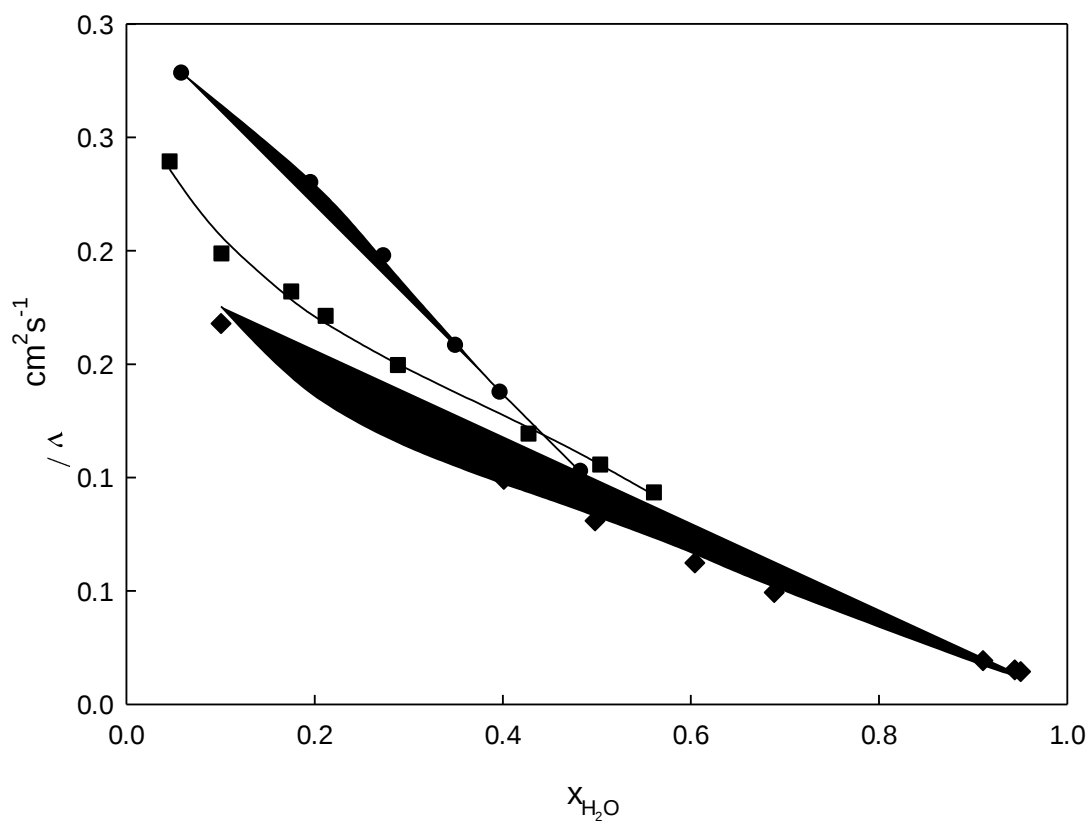


Figura 4.37. Viscosidades correlacionadas con la ecuación de Vázquez-Castillo para líquidos iónicos con agua a 298.15 K: ● 1-butyl-3-methylimidazolium dicyanamide + H<sub>2</sub>O, ◆ 1-ethyl-3-methylimidazolium thiocyanate + H<sub>2</sub>O, ■ 1-butyl-3-methylimidazolium tricyanomethane + H<sub>2</sub>O. La línea representa la Ec. 3.60.

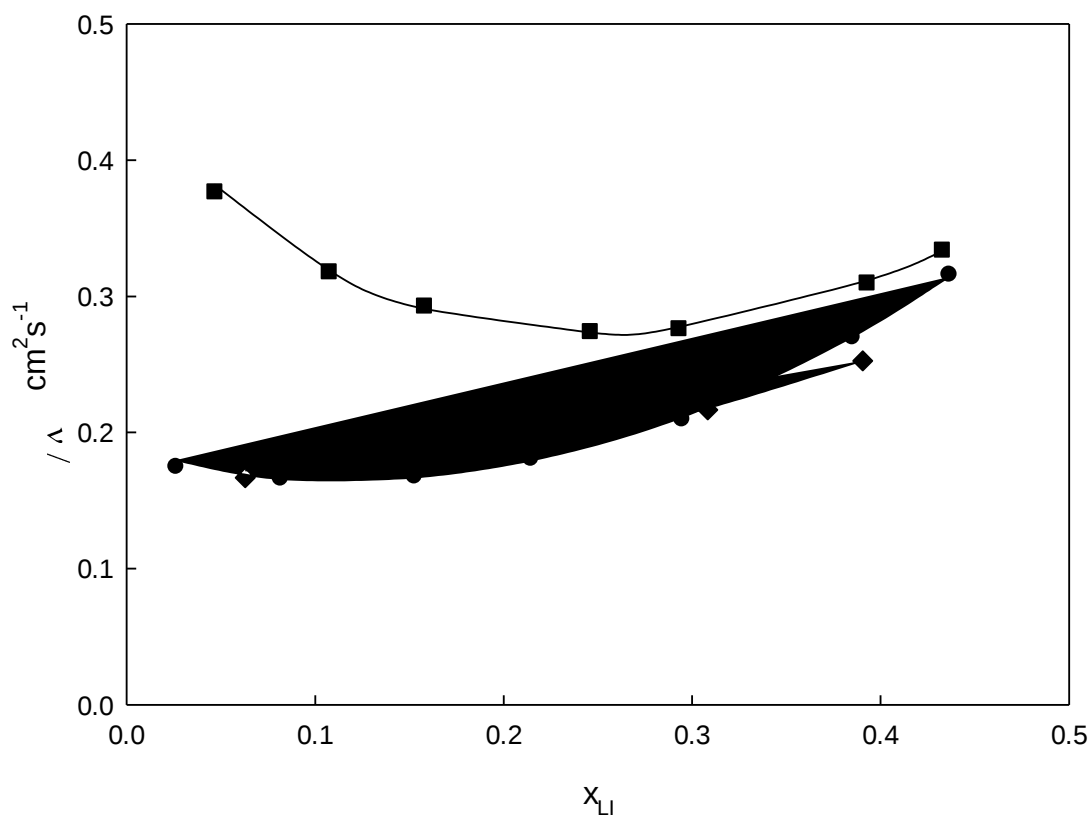


Figura 4.38. Viscosidades correlacionadas con la ecuación de Nava-Ríos para líquidos iónicos con compuestos orgánicos a 298.15 K: ● choline bis(trifluoromethylsulfonyl)imide + propan-1,3-diol, ◆ choline bis(trifluoromethylsulfonyl)imide + 1,2-propanediol, ■ choline bis(trifluoromethylsulfonyl)imide + 1,5-pentanediol. La línea representa la Ec. 3.64.

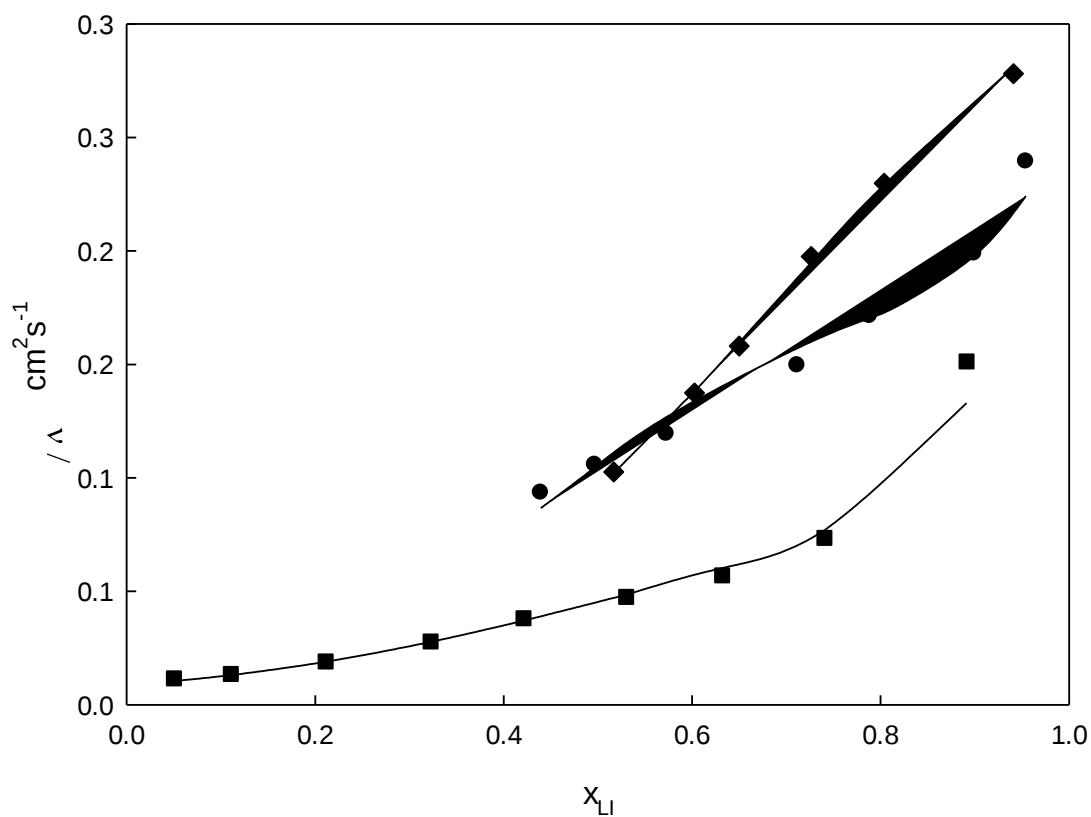


Figura 4.39. Viscosidades correlacionadas con la ecuación de Nava-Ríos para líquidos iónicos con agua a 298.15 K: ● 1-butyl-3-methylimidazolium tricyanomethane + H<sub>2</sub>O, ◆ 1-butyl-3-methylimidazolium dicyanamide + H<sub>2</sub>O, ■ ethylammonium nitrate + H<sub>2</sub>O. La línea representa la Ec. 3.64.

---

---

## CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se determinaron de forma experimental densidades, viscosidades y velocidades del sonido de líquidos iónicos puros [Bm<sup>+</sup>pyrr][TFSI], [Et<sub>3</sub>S][TFSI], [Amim][TFSI] y [(OH)<sub>2</sub>Im][TFSI] y sus mezclas con 1-propanol en un intervalo de temperatura de (298.15 a 343.15) K a presión atmosférica. En base a estos resultados, se correlacionaron las propiedades de los líquidos iónicos puros con la ecuación de Gardas y Coutinho para el caso de las densidades y con las ecuaciones de Arrhenius, Volger-Tamman-Fulcher y la ecuación de fluidez para el caso de las viscosidades. Los resultados muestran que la ecuación de Gardas y Coutinho puede correlacionar la densidad de líquidos iónicos puro con un porcentaje de error global de 0.211 %. Para el caso de la viscosidad, la ecuación que mejor relaciona los líquidos iónico puros es la ecuación de fluidez con un porcentaje de error global de 0.060 %, utilizando un valor de  $\phi$  entre 0.34 y 0.39.

A partir de las densidades y viscosidades de las mezclas binarias, se obtuvieron los volúmenes molares de exceso, desviaciones de viscosidad y de velocidad de sonido, así como la compresibilidad isoentrópica a partir de la ecuación de Laplace-Newton, y sus desviaciones. Todas las propiedades de exceso y las desviaciones se representaron con la ecuación de Redlich-Kister. Los resultados demuestran que los volúmenes molares de exceso y las desviaciones de viscosidad y de velocidad de sonido presentan resultados positivos y negativos, mientras que las desviaciones en la compresibilidad fueron negativas para los tres sistemas de mezclas estudiados.

Por otro lado, se utilizaron los modelos de Gardas y Coutinho, 2008 (GC), *Linear Generalized Model*, 2009 (LGM), Rackett, 1970 (RA), Valderrama y Abu-Sharkh, 1989 (VSY), Valderrama y Abu-Sharkh, 1989 (VSD), Yen y Woods, 1966 (YW), Yamada y Gun, 1973 (YG), Reid et al., 1977 (RR), Mchaweh et al., 2004 (MH), Gunn y Yamada, 1971 (GY), Hankinson y Thomson, 1979 (HT) y *Gene Expression Programming*, 2017 (GEP) para la predicción de la densidad de los líquidos iónicos utilizados en el presente trabajo, obteniéndose los porcentajes de desviación. Los resultados muestran que las ecuaciones de Gardas y Coutinho, Yen y Woods, Mchaweh et al. y *Gene Expression Programming* son las que mejor predicen las densidades con un porcentaje de error global de (1.19, 5.66, 6.25 y 5.51) %, respectivamente.

---

---

Por otro lado, se utilizaron las ecuaciones de Vásquez-Castillo, Nava-Ríos y el modelo de Eyring-MTSM para correlacionar las viscosidades cinemáticas de 76 mezclas binarias de líquidos iónicos con compuestos orgánicos y 36 mezclas binarias de líquidos iónicos con agua, en un amplio intervalo de temperatura y de composición a presión atmosférica. Los porcentajes de errores globales fueron de 1.59 %, 2.96 % y 2.44 % con las ecuaciones de Vásquez-Castillo, Nava-Ríos y Eyring-MTSM para mezclas binarias con compuestos orgánicos. Para el caso de las mezclas de líquidos iónicos con agua, los resultados fueron de 7.52 % y 2.86 % con la ecuación de Vásquez-Castillo y Eyring-MTSM, respectivamente. Utilizando la dependencia de temperatura, el resultado global fue de 2.22 %, 3.29 % y 2.24 % con las ecuaciones de Vásquez-Castillo, Nava-Ríos y Eyrin-MTSM, respectivamente, para líquidos iónicos con compuestos orgánicos; y para el caso de líquidos iónicos con agua, el porcentaje de error fue de 7.88 % y 3.18 % con las ecuaciones de Vásquez-Castillo y Eyrin-MTSM, respectivamente. Las ecuaciones de Vásquez-Castillo, Nava-Ríos y Eyring-MTSM, resultaron adecuadas para correlacionar viscosidades de mezclas binarias de líquidos iónico con compuestos orgánicos. Para los sistemas en medio acuoso, la ecuación de Eyring-MTSM resultó apropiada para correlacionar viscosidades de mezclas binarias de líquidos iónico.

## REFERENCIAS

- [1] Abolala, M.; Peyvandi, K.; Varaminian, F. Modeling the viscosity of pure imidazolium-based ionic liquids using SAFT-VR-Mie EoS. *Fluid Phase Equilib.* 2015, 394, 61-70.
- [2] Almeida, H. F. D.; Teles, A. R. R.; Lopes-da-Silva, J. A.; Freire, M.G.; Coutinho, J. A. P. Influence of the anion on the surface tension of 1-ethyl-3-methylimidazolium-based ionic liquids. *J. Chem. Thermodyn.* 2012, 54, 49-54.
- [3] Anwar, N; Riyazuddeen. Effect of composition and temperature variations on thermophysical properties of binary and ternary mixtures of 1-ethyl-3-methylimidazolium ethylsulfate with 1-butanol and/or methanol. *Fluid Phase Equilib.* 2017, 437, 127-139.
- [4] Atashrouz, S.; Zarghampour, M.; Abdollahimi, S.; Pazuki, G.; Nasernejad, B. Estimation of the Viscosity of Ionic Liquids Containing Binary Mixtures Based on the Eyring's Theory and a Modified Gibbs Energy Model. *J. Chem. Eng. Data.* 2014, 59, 3691-3704.
- [5] Bahadur, I.; Letcher, T. M.; Singh, S.; Redhi, G. G.; Venkatesu, P.; Ramjugernath, D. Excess molar volumes of binary mixtures (an ionic liquid+water): A review. *J. Chem. Thermodyn.* 2015, 82, 34-46.
- [6] Bajić, D. M.; Šerbanović, S. P.; Živković, E. M.; Jovanović, J.; Kijevčanin, M. L. Prediction and correlation of viscosity of binary mixtures of ionic liquids with organic solvents. *J. Mol. Liq.* 2014, 197, 1-6.
- [7] Balaji, R.; Sankar, M. G.; Sekhar, M. C. FT-IR Spectroscopic study of excess thermodynamic properties of liquid mixtures containing N-methylformamide with 2-alkoxyethanols at various temperatures. *J. Mol. Liq.* 2016, 216, 330-341.
- [8] Bhatt, D.; Maheria, K.; Parikh, J. Mixed system of ionic liquid and non-ionic surfactants in aqueous media: Surface and thermodynamic properties. *J. Chem. Thermodyn.* 2014, 74, 184-192.
- [9] Bhattacharjee, A.; Luis, A.; Santos, J. H.; Lopes-da-Silva, J. A.; Freire, M. G.; Carvalho, P.J.; Coutinho, J. A. P. Thermophysical properties of sulfonium- and ammonium-based ionic liquids. *Fluid Phase Equilib.* 2014, 381, 36-45.
- [10] Burakowski, A; Gliński, J. Solvation numbers of alcohols in n-heptane and alcohols in n-propanol diluted liquid mixtures from the acoustic Pasyński method. *Chem. Phys. Lett.* 2008, 453, 178-182.
- [11] Calado, M.S.; Branco, A.S.H.; Diogo, J.C.F.; Fareleira, J.M.N.A.; Visak, Z.P. Solubility, volumetric properties and viscosity of the sustainable systems of liquid poly(ethylene glycol) 200 with imidazolium- and phosphonium-based ionic liquids: Cation and anion effects. *J. Chem. Thermodyn.* 2015, 80, 79-91.
- [12] Cano-Gómez, J. J. Determinación Experimental y Predicción de Propiedades Termodinámicas de 1-Alcoholes. Tesis presentada en el Instituto Tecnológico de Celaya, México, 2013.
- [13] Carlin, R. T.; Wilkes, J. S. Complexation of  $\text{Cp}2\text{MCl}_2$  in a chloroaluminate molten salt: relevance to homogeneous Ziegler-Natta Catalysis. *J. Mol. Catal.* 1990, 63, 125-9.
- [14] Carvalho, P. J.; Regueira, T.; Santos, L. M.; Fernandez, J.; Coutinho, J. A. P. Effect of water on the viscosities and densities of 1-butyl-3-methylimidazolium dicyanamide and 1-butyl-3-methylimidazolium tricyanomethane at atmospheric pressure. *J. Chem. Eng. Data.* 2009, 55, 645-652.
- [15] Chauvin, Y.; Gilbert, B.; Guibard, I. Catalytic dimerization of alkenes by nickel complexes in organochloroaluminate molten salts. *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 1990, 1715-6.

- [16] Chen, B.K.; Liang, M.J.; Wu, T. Y.; Wang, H. P. A high correlate and simplified QSPR for viscosity of imidazolium-based ionic liquids. *Fluid Phase Equilib.* 2013, 350, 37-42.
- [17] Chen, J.; Chen, L.; Lu, Y.; Xu, Y. Physicochemical properties of aqueous solution of 1-methylimidazolium acetate ionic liquid at several temperatures. *J. Mol. Liq.* 2014 197, 374-380.
- [18] Chen, L.; Chen, J.; Song, Z.; Cui, G.; Xu, Y.; Wang, X.; Liu, J. Densities, viscosities, and excess properties of binary mixtures of two imidazolid anion functionalized ionic liquids with water at T=(293.15 to 313.15)K. *J. Chem. Thermodyn.* 2015, 91, 292-300.
- [19] Chhotaray, P. K; Gardas, R. L. Thermophysical properties of ammonium and hydroxylammonium protic ionic liquids. *J. Chem. Thermodyn.* 2014, 72, 117-124.
- [20] Chum, H. L.; Koch, V. R.; Miler, L. L.; Osteryoung, R. A. Electrochemical scrutiny of organometallic iron complexes and hexamethylbenzene in a room temperature molten salt. *J. Am. Chem. Soc.* 1975, 97, 264-5.
- [21] Crosthwaite, J. M.; Aki, S. N. V. K.; Maginn, E. J.; Brennecke, J. F. Liquid phase behavior of imidazolium-based ionic liquids with alcohols: effect of hydrogen bonding and non-polar interactions. *Fluid Phase Equilib.* 2005, 228-229, 303-309.
- [22] Deng, Y.; Husson, P.; Jacquemin, J.; Youngs, T. G. A.; Kett, V. L.; Hardacre, C.; Costa Gomes, M. F. Volumetric properties and enthalpies of solution of alcohols  $C_kH_{2k+1}OH$  ( $k=1, 2, 6$ ) in 1-methyl-3-alkylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide  $[C1CnIm][NTf_2]$   $n=2, 4, 6, 8, 10$  ionic liquids. *J. Chem. Thermodyn.* 2011, 43, 1708-1718.
- [23] Deng, Y.; Husson, P.; Delort, A-M; Besse-Hoggan, P.; Sancelme, M.; Costa, G.M.F. Influence of an Oxygen Functionalization on the Physicochemical Properties of Ionic Liquids: Density, Viscosity, and Carbon Dioxide Solubility as a Function of Temperature. *J. Chem. Eng. Data* 2011, 56, 4194-4202.
- [24] Dent, A. J.; Seddon, K.R.; Welton, T. The structure of halogenometallate complexes dissolved in both basic and acidic room-temperature halogenoaluminate (iii) ionic liquids, determined by EXAFS. *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 1990, 315-6.
- [25] Derecskei, B.; Derecskei-Kovacs, A. Molecular modelling simulations to predict density and solubility parameters of ionic liquids. *Mol. Simul.* 2008, 34, 1167–1175.
- [26] Díaz-Alvarez, J. C.; Martínez-Rey, R.; Barrero-Acosta, R. Líquidos iónicos: propiedades físicoquímicas y aplicación potencial en el mejoramiento de crudos pesados. Instituto Colombiano del Petróleo, 2012, 4185, 61-87.
- [27] Domanska, U.; Krolikowska, M. Effect of temperature and composition on the surface tension and thermodynamic properties of binary mixtures of 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate with alcohols. *J. Colloid Interface Sci.* 2010 348, 661-667.
- [28] Domanska, U.; Krolikowska, M. Density and Viscosity of Binary Mixtures of Thiocyanate Ionic Liquids + Water as a Function of Temperature. *J. Solution Chem.* 2012 41, 1422-1445.
- [29] Domańska, U.; Królikowska, M. Density and viscosity of binary mixtures of 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate + 1-heptanol, 1-octanol, 1-nonanol, or 1-decanol. *J. Chem. Eng. Data.* 2010, 55, 2994-3004.
- [30] Domańska, U.; Laskowska, M. Effect of temperature and composition on the density and viscosity of binary mixtures of ionic liquid with alcohols. *J. Solution Chem.* Chemistry 2009, 38, 779-799.

- [31] Domańska, U.; Laskowska, M. Temperature and composition dependence of the density and viscosity of binary mixtures of 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate+ 1-alcohols. *Chem. Eng. Data.* 2009, 54, 2113-2119.
- [32] Domańska, U.; Papis, P.; Szydłowski, J.; Królikowska, M.; Królikowski, M. Excess enthalpies of mixing, effect of temperature and composition on the density, and viscosity and thermodynamic properties of binary systems of ammonium-based ionic liquid + alkanediol. *J. Phys. Chem. B.* 2014, 118, 12692-12705.
- [33] Domańska, U.; Skiba, K.; Zawadzki, M.; Paduszynski, M.; Królikowski, M. Synthesis, physical, and thermodynamic properties of 1-alkyl-cyanopyridinium bis(trifluoromethyl)sulfonylimide ionic liquids. *J. Chem. Thermodyn.* 2013, 56, 153-161.
- [34] Domańska, U.; Zawadzki, M.; Lewandowska, A. Effect of temperature and composition on the density, viscosity, surface tension, and thermodynamic properties of binary mixtures of N-octylisoquinolinium bis(trifluoromethyl)sulfonylimide with alcohols. *J. Chem. Thermodyn.* 2012, 48, 101-111.
- [35] Dzida, M.; Zorebski, E.; Zorębski, M.; Żarska, M.; Geppert-Rybczyńska, M.; Chorążewski, M.; Jacquemin, M.; Cibulka, I. Speed of Sound and Ultrasound Absorption in Ionic Liquids. *Chem. Rev.* 2017, 117, 3883-3929.
- [36] Esperança, J. M. S. S.; Visak, Z. P.; Plechkova, N. V.; Seddon, K. R.; Guedes, H. J. R.; Rebelo, L. P. N. Density, Speed of Sound, and Derived Thermodynamic Properties of Ionic Liquids Over an Extended Pressure Range. 4. [C3mim][NTf2] and [C5mim][NTf2]. *J. Chem. Eng. Data.* 2006, 51, 2009–2015.
- [37] Ferreira, R.; Blesic, M.; Trindade, J.; Marrucho, I.; Canongia Lopes, J. N.; Rebelo, L. P. N. Solubility of fluorinated compounds in a range of ionic liquids. Cloud-point temperature dependence on composition and pressure. *Green Chem.* 2008, 10, 918-928.
- [38] Fortin, T.J.; Laesecke, A.; Freund, M.; Outcalt, S. Advanced calibration, adjustment, and operation of a density and sound speed analyzer. *J. Chem. Thermodyn.* 2013, 57, 276-285.
- [39] Fukuda, M.; Terazima, M.; Kimura, Y. Sound velocity dispersion in room temperature ionic liquids studied using the transient grating method. *J. Phys. Chem.* 2008 128, 114508.
- [40] Gaciño, F.M.; Regueira, T.; Lugo, L.; Comuñas, M.J.P.; Fernández, J. Influence of Molecular Structure on Densities and Viscosities of Several Ionic Liquids. *J. Chem. Eng. Data.* 2011, 56, 4984-4999.
- [41] García-Bernal, E.; De los Ríos, A. P.; Hernández-Fernández, F. J.; Larrosa-Guerrero, A.; Ginestá, A.; Sánchez-Segado, S.; Lozano, L. J.; Godínez, C. Aplicaciones de los líquidos iónicos en la industria química. Universidad Politécnica de Cartagena, 2011, 66-68.
- [42] García-Mardones, M.; Barrós, A.; Bandrés, I.; Artigas, H.; Lafuente, C. Thermodynamic properties of binary mixtures combining two pyridinium-based ionic liquids and two alkanols. *J. Chem. Thermodyn.* 2012, 51, 17-24.
- [43] García-Mardones, M.; Gascón, I.; López, M. C.; Royo, F. M.; Lafuente, C. Viscosimetric Study of Binary Mixtures Containing Pyridinium-Based Ionic Liquids and Alkanols." *J. Chem. Eng. Data.* 2012, 57, 3549-3556.
- [44] García, S.; Larriba, M.; García, J.; Torrecilla, J. S.; Rodríguez, S. (Liquid+liquid) equilibrium for the ternary systems {heptane+toluene+1-allyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide} and {heptane+toluene+1-methyl-3-propylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide} ionic liquids. *J. Chem. Thermodyn.* 2011, 43, 1641-1645.

- [45] Gardas, R.L.; Coutinho, J.A.P. Extension of the Ye and Shreeve group contribution method for density estimation of ionic liquids in a wide range of temperatures and pressures. *Fluid Phase Equilib.* 2008, 263, 26-32.
- [46] Gardas, R.L.; Coutinho, J.A.P. A group contribution method for viscosity estimation of ionic liquids. *Fluid Phase Equilib.* 2008, 266, 195-201.
- [47] Gardas, R. L.; Ge, R.; Goodrich, P.; Hardacre, C.; Hussain, A.; Rooney, D. W. Thermophysical properties of amino acid-based ionic liquids. *J. Chem. Eng. Data.* 2009, 55, 1505-1515.
- [48] Ge, M.L.; Ren, X.G.; Song, Y. J.; Wang, L.S. Densities and Viscosities of 1-Propyl-2, 3-dimethylimidazolium Tetrafluoroborate+ H<sub>2</sub>O at T=(298.15 to 343.15) K. *J. Chem. Eng. Data.* 2009, 54, 1400-1402.
- [49] Ge, M. L.; Zhao, R.S.; Yi, Y. F.; Zhang, Q.; Wang, L.S. Densities and viscosities of 1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate+ H<sub>2</sub>O binary mixtures at T=(303.15 to 343.15) K. *J. Chem. Eng. Data.* 2008, 53, 2408-2411.
- [50] Geng, Y.; Chen, S.; Wang, T.; Yu, D.; Peng, C.; Liu, H.; Hu, Y. Density, viscosity and electrical conductivity of 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate + monoethanolamine and + N, N-dimethylethanolamine. *J. Mol. Liq.* 2008, 143, 100-108.
- [51] Geppert-Rybczyńska, M.; Lehmann, J.K.; Heintz, A. Physicochemical properties of two 1-alkyl-1-methylpyrrolidinium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide ionic liquids and of binary mixtures of 1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide with methanol or acetonitrile. *J. Chem. Thermodyn.* 2014, 71, 171-181.
- [52] Ghatee, M. H.; Zare, M.; Zolghadr, A. Z.; Moosavi, F. Temperature dependence of viscosity and relation with the surface tension of ionic liquids. *Fluid Phase Equilib.* 2010, 291, 188-194.
- [53] Ghatee, M. H.; Zare, M.; Moosavi, F. Temperature-dependent density and viscosity of the ionic liquids 1-alkyl-3-methylimidazolium iodides: experiment and molecular dynamics simulation. *J. Chem. Eng. Data.* 2010, 55, 3084-3088.
- [54] Gómez, E.; González, B.; Calvar, N.; Tojo, M.; Domínguez, A. Physical properties of pure 1-ethyl-3-methylimidazolium ethylsulfate and its binary mixtures with ethanol and water at several temperatures. *J. Chem. Eng. Data.* 2006, 51, 2096-2102.
- [55] Gomez, E.; Gonzalez, B.; Domínguez, A.; Tojo, E.; Tojo, J. Dynamic viscosities of a series of 1-alkyl-3-methylimidazolium chloride ionic liquids and their binary mixtures with water at several temperatures. *J. Chem. Eng. Data.* 2006, 51, 696-701.
- [56] Gomez, E.; Gonzalez, B.; Calvar, N.; Dominguez, A. Excess molar properties of ternary system (ethanol + water + 1,3-dimethylimidazolium methyl sulfate) and its binary mixtures at several temperatures. *J. Chem. Thermodyn.* 2008, 40, 1208-1216.
- [57] Gong, Y. H.; Shen, C.; Lu, Y. Z.; Meng, H.; Li, C. X. Viscosity and Density Measurements for Six Binary Mixtures of Water (Methanol or Ethanol) with an Ionic Liquid ([BMIM][DMP] or [EMIM][DMP]) at Atmospheric Pressure in the Temperature Range of (293.15 to 333.15) K. *J. Chem. Eng. Data.* 2012, 57, 33-39.
- [58] González, B.; Calvar, N.; Gómez, E.; Domínguez, A. Physical properties of the ternary system (ethanol+ water+ 1-butyl-3-methylimidazolium methylsulphate) and its binary mixtures at several temperatures. *J. Chem. Thermodyn.* 2008, 40, 1274-1281.
- [59] González, B.; González, E. J. Physical properties of the pure 1-methyl-1-propylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide ionic liquid and its binary mixtures with alcohols. *J. Chem. Thermodyn.* 2014, 68, 109-116.

- [60] González, B.; Calvar, N.; Gómez, E.; Domínguez, I.; Domínguez, A. Synthesis and physical properties of 1-ethylpyridinium ethylsulfate and its binary mixtures with ethanol and 1-propanol at several temperatures. *J. Chem. Eng. Data.* 2008, 54, 1353-1358.
- [61] González, B.; Calvar, N.; Gómez, E.; Macedo, E. A.; Domínguez, A. Synthesis and physical properties of 1-ethyl 3-methylpyridinium ethylsulfate and its binary mixtures with ethanol and water at several temperatures. *J. Chem. Eng. Data.* 2008, 53, 1824-1828.
- [62] González, E.J.; Calvar, N.; Fernández, P.; Domínguez, A.; Macedo, E.A. Physical and Excess Properties for Binary Systems Containing an Alcohol and Ionic Liquid at T = 298.15 K. *Procedia Eng.* 2012, 42, 1383-1389.
- [63] González, E.J.; Domínguez, Á.; Macedo, E.A. Excess properties of binary mixtures containing 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide ionic liquid and polar organic compounds. *J. Chem. Thermodyn.* 2012, 47, 300-311.
- [64] González, E. J.; González, B.; Calvar, N.; Domínguez, A. Physical properties of binary mixtures of the ionic liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate with several alcohols at T=(298.15, 313.15, and 328.15) K and atmospheric pressure. *J. Chem. Eng. Data.* 2007, 52, 1641-1648.
- [65] González, E. J.; González, B.; Macedo, E. A. Effect of the relative humidity and isomeric structure on the physical properties of pyridinium based-ionic liquids. *J. Chem. Thermodyn.* 2015, 86, 96-105.
- [66] González, E. J.; Requejo, P.F.; Domínguez, Á.; Macedo, E.A. Physical Properties of Binary Alcohol + Ionic Liquid Mixtures at Several Temperatures and Atmospheric Pressure. *J. Solution Chem.* 2013, 42, 746-763.
- [67] Govardhana R., S.; Mohan, T. M.; Krishna, T. V.; Narendra, K.; Rao, B. S. Thermophysical properties of 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate and N-methyl-2-pyrrolidinone as a function of temperature. *J. Mol. Liq.* 2015, 211, 1009-1017.
- [68] Govardhana R., S.; Mohan, T. M.; Krishna, T. V.; Raju, K. T. Excess thermodynamic properties of ionic liquid 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate and N-octyl-2-pyrrolidone from T=(298.15 to 323.15)K at atmospheric pressure. *J. Chem. Thermodyn.* 2015, 89, 286-295.
- [69] Govinda, V.; Attri, P.; Venkatesu, P.; Venkateswarlu, P. Thermophysical properties of dimethylsulfoxide with ionic liquids at various temperatures. *Fluid Phase Equilib.* 2011, 304, 35-43.
- [70] Gowrisankar, M.; Venkateswarlu, P.; Sivakumar, K.; Sivarambabu, S. Ultrasonic studies on molecular interactions in binary mixtures of N-methyl aniline with methyl isobutylketone, + 3-pentanone, and + cycloalkanones at 303.15 K. *J. Solution Chem.* 2013, 42, 916-935.
- [71] Guan, W.; Tong, J.; Chen, S. P. Density and surface tension of amino acid ionic liquid 1-alkyl-3-methylimidazolium glutamate. *J. Chem. Eng. Data.* 2010, 55, 4075-4079.
- [72] Gunn, R. D.; Yamada, T. A corresponding states correlation of saturated liquid volumes. *AIChE Journal.* 1971, 17, 1341-1345.
- [73] Guzmán-López, A. Densidades, Viscosidades y Propiedades Derivadas a P = 0.1 MPa de mezclas de n-undecano + 1-alcoholes (C2-C10) en el intervalo de temperatura de (283.15 a 363.15 K). Tesis presentada en el Instituto Tecnológico de Celaya, México, 2007.
- [74] Hankinson, R. W.; Thomson, G. H. A new correlation for saturated densities of liquids and their mixtures. *AIChE Journal.* 1979, 25, 653-663.
- [75] Harris, K. R.; Woolf, L. A. Transport Properties of N-Butyl-N-methylpyrrolidinium Bis(trifluoromethylsulfonyl)amide. *J. Chem. Eng. Data* 2011, 56, 4672-4685.

- [76] Hayyan, M.; Mjalli, F. S.; Hashim, M. A.; AlNashef, I. M.; Mei, T. X. Investigating the electrochemical windows of ionic liquids. *J. Ind. Eng. Chem.* 2013, 19, 106-112.
- [77] He, Z.; Zhao, Z.; Zhang, X.; Feng, H. Thermodynamic properties of new heat pump working pairs: 1,3-Dimethylimidazolium dimethylphosphate and water, ethanol and methanol. *Fluid Phase Equilib.* 2010, 298, 83-91.
- [78] Hiraga, Y.; Duereh, A.; Richard, L.; Smith, Jr. Aspects of solvent polarity and solvent properties in developing efficient systems for processing biomass with ionic liquid mixtures and supercritical CO<sub>2</sub>. *J. Supercrit. Fluids.* 2018, 134, 12-20.
- [79] Holbrey, J. D.; Seddon, K. R. Ionic liquids. *Clean Products and Processes.* 1999, 1:223-6.
- [80] Hosseini, S. M.; Alavianmehr, M. M.; Moghadasi, J. Transport properties of pure and mixture of ionic liquids from new rough hard-sphere-based model. *Fluid Phase Equilib.* 2016, 429, 266-274.
- [81] Huddleston, J. G.; Willauer, H. D. Swatloski, R. P. Room temperature ionic liquids as novel media for 'clean' liquid-liquid extraction. *Chem. Commun.* 1998, 1765-1766
- [82] Hurley, F. H.; Wier, T. P. The electrodeposition of aluminum from nonaqueous solutions at room temperature. *J. Electrochem. Soc.* 1951, 98, 207-12.
- [83] Inoue, T.; Misono, T. Cloud point phenomena for POE-type nonionic surfactants in imidazolium-based ionic liquids: Effect of anion species of ionic liquids on the cloud point. *J. Colloid Interface Sci.* 2009, 337, 247-253.
- [84] Jiang, H.; Zhao, Y.; Wang, J.; Zhao, F.; Liu, R.; Hu, Y. Density and surface tension of pure ionic liquid 1-butyl-3-methyl-imidazolium l-lactate and its binary mixture with alcohol and water. *J. Chem. Thermodyn.* 2013, 64, 1-13.
- [85] Jiménez de la Parra, C.; Zambrano, J. R.; Bermejo, M. D.; Martín, A.; Segovia, J. J.; Cocero, M. J. Influence of water concentration in the viscosities and densities of cellulose dissolving ionic liquids. Correlation of viscosity data. *J. Chem. Thermodyn.* 2015, 91, 8-16.
- [86] Katsuta, S.; Shiozawa, Y.; Imai, K.; Kudo, W.; Takeda, Y. Stability of Ion Pairs of Bis(trifluoromethanesulfonyl)amide-Based Ionic Liquids in Dichloromethane. *J. Chem. Eng. Data.* 2010, 55, 1588-1593.
- [87] Kermanpour, F.; Iloukhani, H.; Javanshad, M. Measurement and modeling the excess properties of binary and ternary mixtures containing [Hmim][BF<sub>4</sub>], 2-methyl-2-propanol, and propylamin compounds at 298.15K using PFP theory. *J. Mol. Liq.* 2013, 188, 22-27.
- [88] Kermanpour, F.; Sharifi, T. Thermodynamic study of binary mixture of x<sub>1</sub>[C<sub>6</sub>mim][BF<sub>4</sub>]+x<sub>2</sub>1-propanol: Measurements and molecular modeling. *Thermochim. Acta.* 2012, 527, 211-218.
- [89] Koel, M. Ionic Liquids in Chemical Analysis; Taylor & Francis Group: New, York, 2009.
- [90] Kratky, O.; Leopold, H.; Stabinger, H. Determination of density of liquids and gases to an accuracy of 1/millionth g/cu cm with a sample volume of only 0.6 cu cm (Determining density of liquids and gases by changes in natural frequency of oscillator). *Z. Angew. Phys. (West Berlin).* 1969, 27, 273-277.
- [91] Królikowska, M.; Lipiński, P.; Maik, D. Density, viscosity and phase equilibria study of {ethylsulfate-based ionic liquid+water} binary systems as a function of temperature and composition. *Thermochim. Acta.* 2014, 582, 1-9.
- [92] Królikowska, M.; Zawadzki, M.; Królikowski, M. Physicochemical and thermodynamic study on aqueous solutions of dicyanamide – based ionic liquids. *J. Chem. Thermodyn.* 2014, 70, 127-137.

- [93] Laher. T. M.; Huseey, C. L. Copper (i) and copper (ii) chloro complexes in the basic aluminum chloride-1-methyl-3-ethylimidazolium chloride ionic liquid. *Inorg. Chem.* 1983, 22, 3247-51.
- [94] Lazzus, J. A. Estimation of density as a function of temperature and pressure for imidazolium-based ionic liquids using a multilayer net with particle swarm optimization. *Int. J. Thermophys.* 2009, 30, 883-909.
- [95] Lee, C-P; Peng, J-D; Velayutham, D.; Chang, J.; Chen, P-W; Suryanarayanan, V.; Ho, K-C. Trialkylsulfonium and tetraalkylammonium cations-based ionic liquid electrolytes for quasi-solid-state dye-sensitized solar cells. *Electrochim. Acta.* 2013, 114, 303-308.
- [96] Li, J. G.; Hu, Y. F.; Sun, S. F.; Liu, Y. S.; Liu, Z. C. Densities and dynamic viscosities of the binary system (water+1-hexyl-3-methylimidazolium bromide) at different temperatures. *J. Chem. Thermodyn.* 2010, 42, 904-908.
- [97] López-Lázaro, J. S. Modelos para Correlacionar la Tensión Superficial de Mezclas Líquidas Binarias no Electrolíticas. Tesis presentada en el Instituto Tecnológico de Celaya, México, 2012.
- [98] Mchaweh, A.; Alsaygh, A.; Nasrifar, Kh.; Moshfeghian, M. A simplified method for calculating saturated liquid densities. *Fluid Phase Equilib.* 2004, 224, 157-167.
- [99] Mokhtarani, B.; Mojtahedi, M. M.; Mortaheb, H. R.; Mafi, M.; Yazdani, F.; Sadeghian, F. Densities, refractive indices, and viscosities of the ionic liquids 1-methyl-3-octylimidazolium tetrafluoroborate and 1-methyl-3-butylimidazolium perchlorate and their binary mixtures with ethanol at several temperatures. *J. Chem. Eng. Data.* 2008, 53, 677-682.
- [100] Mokhtarani, B.; Sharifi, A.; Mortaheb, H. R.; Mirzaei, M.; Mafi, M.; Sadeghian, F. Density and viscosity of 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate with ethanol, 1-propanol, or 1-butanol at several temperatures. *J. Chem. Thermodyn.* 2009, 41, 1432-1438.
- [101] Mokhtarani, B.; Sharifi, A.; Mortaheb, H. R.; Mirzaei, M.; Mafi, M.; Sadeghian, F. Density and viscosity of pyridinium-based ionic liquids and their binary mixtures with water at several temperatures. *J. Chem. Thermodyn.* 2009, 41, 323-329.
- [102] Mokhtarani, B.; Sharifi, A.; Mortaheb, H. R.; Mirzaei, M.; Mafi, M.; Sadeghian, F. Densities and viscosities of pure 1-methyl-3-octylimidazolium nitrate and its binary mixtures with alcohols at several temperatures. *J. Chem. Eng. Data.* 2010, 55, 3901-3908.
- [103] Mutelet, F.; Hassan, E-S. R.E.; Stephens, T.W.; Acree, W. E.; Baker, G. A. Activity Coefficients at Infinite Dilution for Organic Solutes Dissolved in Three 1-Alkyl-1-methylpyrrolidinium Bis(trifluoromethylsulfonyl)imide Ionic Liquids Bearing Short Linear Alkyl Side Chains of Three to Five Carbons. *J. Chem. Eng. Data.* 2013, 58, 2210-2218.
- [104] Najafi-Marghmaleki, A.; Tatar, A.; Barati-Harooni, A.; Mohammadi, A. H. A GEP based model for prediction of densities of ionic liquids. *J. Mol. Liq.* 2017, 227, 373-385.
- [105] Nava-Ríos, G. E.; Iglesias-Silva, G. A.; Estrada-Baltazar, A.; Hall, K. R.; Atilhan, M. A new equation to correlate liquid kinematic viscosities of multicomponent mixtures. *Fluid Phase Equilib.* 2012, 329, 8-21.
- [106] Nayeem, M.; Kondaiah, M.; Sreekanth, K.; Krishna, Rao D. Thermoacoustic, volumetric, and viscometric investigations in binary liquid system of cyclohexanone with benzyl benzoate at T= 308.15, 313.15, and 318.15 K. *J. Thermodyn.* 2014, 2014.
- [107] Oliveira, M. B.; Domínguez-Pérez, M. Cabeza, O.; Lopes-da-Silva J. A.; Freire, M. G.; Coutinho, J. A. P. Surface tensions of binary mixtures of ionic liquids with

- bis(trifluoromethylsulfonyl)imide as the common anion. *J. Chem. Thermodyn.* 2013, 64, 22-27.
- [108] Pereiro, A.B.; Veiga, H. I. M.; Esperança, J. M. S. S.; Rodríguez, A. Effect of temperature on the physical properties of two ionic liquids. *J. Chem. Thermodyn.* 2009, 41, 1419-1423.
- [109] Qian, W.; Xu, Y.; Zhu, H.; Yu, C. Properties of pure 1-methylimidazolium acetate ionic liquid and its binary mixtures with alcohols. *J. Chem. Thermodyn.* 2012, 49, 87-94.
- [110] Quijada-Maldonado, E.; Boogaart, S.; Lijbers, J. H.; Meindersma, G. W.; Haan, A. B. Experimental densities, dynamic viscosities and surface tensions of the ionic liquids series 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate and dicyanamide and their binary and ternary mixtures with water and ethanol at T=(298.15 to 343.15K). *J. Chem. Thermodyn.* 2012, 51, 51-58.
- [111] Rackett, H. G. Equation of state for saturated liquids. *J. Chem. Eng. Data.* 1970, 15, 514-517.
- [112] Reddy, M. S.; Nayeem, S. M.; Raju, K.T.S.S R; Rao, V. S.; Babu, B. H. The study of solute-solvent interactions in 1-ethyl-3-methylimidazolium ethylsulfate+2-ethoxyethanol from density, speed of sound and refractive index measurements. *J. Mol. Liq.* 2016, 218, 83-94.
- [113] Reid, R. C.; Prausnitz, J. M. TK Sherwood The properties of gases and liquids. McGraw-Hill, New York, 1977.
- [114] Regueira, T.; Lugo, L.; Fernández, J. Influence of the pressure, temperature, cation and anion on the volumetric properties of ionic liquids: New experimental values for two salts. *J. Chem. Thermodyn.* 2013, 58, 440-4448.
- [115] Robinson, J.; Osteryoung, R. A. An electrochemical and spectroscopic study of some aromatic hydrocarbons in the room temperature molten salt system aluminum chloride-nbutylpyridinium chloride. *J. Am. Chem. Soc.* 1979, 101, 323-37.
- [116] Rodríguez, H.; Brennecke, J. F.; Temperature and composition dependence of the density and viscosity of binary mixtures of water + ionic liquid. *J. Chem. Eng. Data.* 2006, 51, 2145-2155.
- [117] Romero, S. A. Líquidos iónicos a temperatura ambiente: un nuevo medio para las reacciones químicas. Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, 2008, 102, 79-90.
- [118] Roy, M. N.; Ekka, D. Dewan, R. Physico-chemical studies of some bio-active solutes in pure methanoic acid. *Acta Chim. Slov.* 2011, 58, 792-796.
- [119] Salgado, J.; Regueira, T.; Lugo, L.; Vijande, J.; Fernández, J.; García, J. Density and viscosity of three (2,2,2-trifluoroethanol+1-butyl-3-methylimidazolium) ionic liquid binary systems. *J. Chem. Thermodyn.* 2014, 70, 101-110.
- [120] Salinas, R.; Pla-Franco, J.; Lladosa, E.; Montón, J. B. Density, Speed of Sound, Viscosity, and Excess Properties of Binary Mixtures Formed by Ethanol and Bis(trifluorosulfonyl)imide-Based Ionic Liquids. *J. Chem. Eng. Data.* 2015, 60, 525-540.
- [121] Salinas, R.; Pla-Franco, J.; Lladosa, E.; Montón, J. B. Density, Viscosity, and Sound Speed of Bis(trifluoromethylsulfonyl)imide-Based Ionic Liquids + 1-Propanol Mixtures. *J. Chem. Eng. Data.* 2016, 61, 56-66.
- [122] Sánchez, P. B.; Currás, M. R.; Mato, M. M.; Salgado, J.; García, J. Density and viscosity study of pyridinium based ionic liquids as potential absorbents for natural refrigerants: Experimental and modelling. *Fluid Phase Equilib.* 2015, 405, 37-45.

- [123] Sattari, M.; Kamari, A. Mohammadi, A. H.; Ramjugernath, D. On the prediction of critical temperatures of ionic liquids: Model development and evaluation. *Fluid Phase Equilib.* 2016, 411, 24-32.
- [124] Scheffler, T. B.; Huseey, C. L.; Seddon, K. R.; Kear, C. M.; Armitage, P. D. Molybdenum chloro complexes in room-temperature chloroaluminate ionic liquids: stabilization of hexachloromolybdate (2-) and hexachloromolybdate (3-). *Inorg. Chem.* 1983, 22, 2099-100.
- [125] Scheffler, T.B.; Huseey, C. L. Electrochemical study of tungsten chloro complex chemistry in the basic aluminum chloride-1-methylethylimidazolium chloride ionic liquid. *Inorg. Chem.* 1984, 23, 1926-32.
- [126] Seoane, R. G.; Gómez, E.; González, E. J. Domínguez, A.; (Liquid+liquid) equilibria for the ternary mixtures (alkane+toluene+ionic liquid) at T=298.15K: Influence of the anion on the phase equilibria. *J. Chem. Thermodyn.* 2012, 47, 402-407.
- [127] Seoane, R. G.; Corderí, S.; Gómez, E.; Calvar, N.; González, E. J.; Macedo, E. A.; Domínguez, A. Temperature Dependence and Structural Influence on the Thermophysical Properties of Eleven Commercial Ionic Liquids. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2012, 51, 2492-2504.
- [128] Shamsipur, M.; Beigi, A. A. M.; Teymouri, M.; Pourmortazavi, S. M.; Irandoust, M. Physical and electrochemical properties of ionic liquids 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate, 1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate and 1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide. *J. Mol. Liq.* 2010, 157, 43-50.
- [129] Shekaari, H.; Zafarani-Moattar, M. T.; Niknam, M. Thermodynamic evaluation of imidazolium based ionic liquids with thiocyanate anion as effective solvent to thiophene extraction. *J. Mol. Liq.* 2016, 219, 975-984.
- [130] Shen, C.; Li, C. X.; Li, X. M.; Lu, Y. Z.; Muhammad, Y. Estimation of densities of ionic liquids using Patel–Teja equation of state and critical properties determined from group contribution method. *Chem. Eng. Sci.* 2011, 66, 2690-2698.
- [131] Singh, S.; Bahadur, I.; Redhi, G.G.; Ebenso, E.E.; Ramjugernath, D. Influence of the alkyl group on thermophysical properties of carboxylic acids in 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate ionic liquid at various temperatures. *J. Chem. Thermodyn.* 2015, 89, 104-111.
- [132] Srinivasa K. T.; Nain, A. K.; Chentilnath, S.; Punyaseshudu, D.; Munibhadrayya, B. Densities, ultrasonic speeds, refractive indices, excess and partial molar properties of binary mixtures of imidazolium based ionic liquid with pyrrolidin-2-one at temperatures from 298.15L to 323.15K. *J. Chem. Thermodyn.* 2016, 101, 103-114.
- [133] Sugden, S.; Wilkins, H. The parachor and chemical constitution. part XII. fused metals and salts. *J. Chem. Soc.* 1929, 1291-98.
- [134] Swain, C. G.; Ohno, A.; Roe, D. K.; Brown, R.; Maugh. T. Tetrahexylammonium benzoate, a liquid salt at 25. degree. a solvent for kinetics or electrochemistry. *J. Am. Chem. Soc.* 1967, 89, 2648-9.
- [135] Tokuda H, Tsuzuki S, Susan MABH, Hayamizu K, Watanabe M. How ionic are room-temperature ionic liquids? An indicator of the physicochemical properties. *J. Phys. Chem. B.* 2006, 110, 19593-19600.
- [136] Trigueiro, J. P. C.; Lavall, R. L.; Silva, G. C. Nanocomposites of Graphene Nanosheets/Multiwalled Carbon Nanotubes as Electrodes for In-plane Supercapacitors. *Thermochim. Acta.* 2016, 187, 312-322.

- [137] Valderrama, J. O.; Abu-Sharkh, B. F. Generalized rackett-type correlations to predict the density of saturated liquids and petroleum fractions. *Fluid Phase Equilib.* 1989, 51, 87-100.
- [138] Valderrama, J. O.; Forero, L. A.; Rojas, R. E. Critical Properties and Normal Boiling Temperature of Ionic Liquids. Update and a New Consistency Test. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2012, 51, 7838-7844.
- [139] Valderrama, J. O.; Rojas, R. E. Critical properties of ionic liquids. Revisited. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2009, 48, 6890-6900.
- [140] Valderrama, J. O.; Zarricueta, K. A simple and generalized model for predicting the density of ionic liquids. *Fluid Phase Equilib.* 2009, 275, 145-151.
- [141] Vasanthakumar, A.; Bahadur, I.; Redhi, G. G.; Gengan, R. M.; Anand, K. Synthesis, characterization and thermophysical properties of ionic liquid N-methyl-N-(2',3'-epoxypropyl)-2-oxopyrrolidinium chloride and its binary mixtures with water or ethanol at different temperatures. *J. Mol. Liq.* 2016, 219, 685-693.
- [142] Vásquez-Castillo, G.; Iglesias-Silva, G. A.; Hall, K. R. An extension of the McAllister model to correlate kinematic viscosity of electrolyte solutions. *Fluid Phase Equilib.* 2013, 358, 44-49.
- [143] Vataščin, E.; Dohnal, V. Thermodynamic properties of aqueous solutions of [EMIM] thiocyanate and [EMIM] dicyanamide. *J. Chem. Thermodyn.* 2017, 106, 262-275.
- [144] Vercher, E.; Llopis, F. J.; González-Alfaro, V.; Miguel, P. J.; Orchillés, V.; Martínez-Andreu, A. Volumetric properties, viscosities and refractive indices of binary liquid mixtures of tetrafluoroborate-based ionic liquids with methanol at several temperatures. *J. Chem. Thermodyn.* 2015, 90, 174-184.
- [145] Vraneš, M. B.; Dožić, S.; Djerić, V.; Gadžurić, S. B: Volumetric Properties of Binary Mixtures of 1-Butyl-1-methylpyrrolidinium Bis(trifluoromethylsulfonyl)imide with N-Methylformamide and N,N-Dimethylformamide from (293.15 to 323.15) K. *J. Chem. Eng. Data.* 2013, 58, 1092-1102.
- [146] Vranes, M.; Dozic, S.; Djeric, V.; Gadzuric, S. Physicochemical Characterization of 1-Butyl-3-methylimidazolium and 1-Butyl-1-methylpyrrolidinium Bis(trifluoromethylsulfonyl)imide. *J. Chem. Eng. Data.* 2012, 57, 1072-1077.
- [147] Vuksanovic, J.M.; Calado, M.S.; Ivanis, G.R.; Kijevcanin, M.L.; Serbanovic, S.P.; Visak, Z.P. Environmentally friendly solutions of liquid poly(ethylene glycol) and imidazolium based ionic liquids with bistriflamide and triflate anions: Volumetric and viscosity studies. *Fluid Phase Equilib.* 2013, 352, 100-109.
- [148] Wang, J. F.; Li, Z. B.; Li, C.X. Density prediction of ionic liquids at different temperatures and pressures using a group contribution equation of state based on electrolyte perturbation theory. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2010, 49, 4420-4425.
- [149] Welton T. Room temperature ionic liquids: solvents for synthesis and catalysis. *Chem. Rev.* 1999, 99, 2071-83.
- [150] Wilkes, J. S.; Levisky, J. A.; Wilson, R. A.; Hussey, C. L. Dialkylimidazolium chloroaluminate melts: a new class of room-temperature ionic liquids for electrochemistry, spectroscopy, and synthesis. *Inorg. Chem.* 1982, 21, 1263-4.
- [151] Wu, J. Y.; Chen, Y. P.; Su, C. S. Density and viscosity of ionic liquid binary mixtures of 1-n-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate with acetonitrile, N, N-dimethylacetamide, methanol, and N-methyl-2-pyrrolidone. *J. Solution Chem.* 2015, 44, 395-412.

- [152] Wu, K.J.; Zhao, C. X.; He, C. H. A simple corresponding-states group-contribution method for estimating surface tension of ionic liquids. *Fluid Phase Equilib.* 2012, 328, 42-48.
- [153] Wu, T.Y.; Chen, B. K.; Kuo, C. W.; Hao, L.; Peng, Y. C.; Sun, I. W. Standard entropy, surface excess entropy, surface enthalpy, molar enthalpy of vaporization, and critical temperature of bis(trifluoromethanesulfonyl)imide-based ionic liquids. *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.* 2012, 43, 860-867.
- [154] Xu, Y. Volumetric, viscosity, and electrical conductivity properties of aqueous solutions of two n-butylammonium-based protic ionic liquids at several temperatures. *J. Chem. Thermodyn.* 2013, 64, 126-133.
- [155] Xu, Y.; Chen, B.; Qian, W.; Li, H. Properties of pure n-butylammonium nitrate ionic liquid and its binary mixtures of with alcohols at T=(293.15 to 313.15)K. *J. Chem. Thermodyn.* 2013, 58, 449-459.
- [156] Xu, Y.; Yao, J.; Wang, C.; Li, H. Density, Viscosity, and Refractive Index Properties for the Binary Mixtures of n-Butylammonium Acetate Ionic Liquid + Alkanols at Several Temperatures. *J. Chem. Eng. Data.* 2012, 57, 298-308.
- [157] Yamada, T.; Gunn, R. D. Saturated liquid molar volumes. Rackett equation. *J. Chem. Eng. Data.* 1973, 18, 234-236.
- [158] Ye, C.F.; Shreeve, J. M. Rapid and accurate estimation of densities of room-temperature ionic liquids and salts. *J. Phys. Chem. A.* 2007, 111, 1456-1461.
- [159] Yen, L. C.; Woods, S. S. A generalized equation for computer calculation of liquid densities. *AIChE Journal.* 1966, 12, 95-99.
- [160] Zarrougui, R.; Dhahbi, M.; Lemordant, D. Transport and Thermodynamic Properties of Ethylammonium Nitrate–Water Binary Mixtures: Effect of Temperature and Composition. *J. Solution Chem.* 2015, 44, 686-702.
- [161] Zhang, S.; Wang, J.; Lu, X.; Zhou, Q. Structures and Interactions of Ionic Liquids; Springer: Berlin Heidelberg, 2014.
- [162] Zhang, S.; Li, X.; Chen, H.; Wang, J.; Zhang, J.; Zhang, M. Determination of physical properties for the binary system of 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate+ H<sub>2</sub>O. *J. Chem. Eng. Data.* 2004, 49, 760-764.
- [163] Zhang, Z.; Zhou, Q.; Lu, X.; Qiao, C.; Zhang, S. Densities and viscosities of binary mixtures containing 1, 3-dimethylimidazolium dimethylphosphate and alcohols. *J. Chem. Eng. Data.* 2014, 59, 2377-2388.
- [164] Zhou, Q.; Wang, L. S.; Chen, H. P. Densities and viscosities of 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate+ H<sub>2</sub>O binary mixtures from (303.15 to 353.15) K. *J. Chem. Eng. Data.* 2006, 51, 905-908.
- [165] Zhu, A.; Wang, J.; Han, L.; Fan, M. Measurements and correlation of viscosities and conductivities for the mixtures of imidazolium ionic liquids with molecular solutes. *Chem. Eng. J.* 2009, 147, 27-35.
- [166] Zorebski, E.; Zorebski, M.; Musiał, M.; Dzida, M. Ultrasonic Relaxation Spectra for Pyrrolidinium Bis(trifluoromethylsulfonyl)imides: A Comparison with Imidazolium Bis(trifluoromethylsulfonyl)imides. *J. Phys. Chem. B.* 2017, 121, 9886-9894.
- [167] Zorębski, E.; Zorębski, M.; Dzida, M.; Goodrich, P.; Jacquemin, J. Isobaric and Isochoric Heat Capacities of Imidazolium-Based and Pyrrolidinium-Based Ionic Liquids as a Function of Temperature: Modeling of Isobaric Heat Capacity. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2017, 56, 2592-2606.

## APÉNDICE A. Parámetros de la ecuación de Redlich-Kister para las propiedades de exceso y desviaciones de viscosidad, velocidad de sonido y compresibilidad

**Tabla A.1. Parámetros de la ecuación de Redlich-Kister en función de la temperatura para el volumen molar de exceso**

| T (K)                                             | A <sub>0</sub> | A <sub>1</sub> | A <sub>2</sub> | A <sub>3</sub> | $\sigma^a$ |
|---------------------------------------------------|----------------|----------------|----------------|----------------|------------|
| [Et <sub>3</sub> S][TFSI] (1) + 1-propanol (2)    |                |                |                |                |            |
| 293.15                                            | -0.359         | -0.502         | -0.650         | -1.143         | 0.0047     |
| 298.15                                            | -0.354         | -0.492         | -0.719         | -1.213         | 0.0047     |
| 303.15                                            | -0.357         | -0.481         | -0.753         | -1.307         | 0.0045     |
| 308.15                                            | -0.368         | -0.461         | -0.798         | -1.399         | 0.0046     |
| 313.15                                            | -0.384         | -0.448         | -0.867         | -1.444         | 0.0046     |
| 318.15                                            | -0.407         | -0.449         | -0.947         | -1.469         | 0.0045     |
| 323.15                                            | -0.435         | -0.456         | -1.008         | -1.519         | 0.0043     |
| 328.15                                            | -0.472         | -0.469         | -1.061         | -1.602         | 0.0043     |
| 333.15                                            | -0.523         | -0.484         | -1.126         | -1.693         | 0.0041     |
| 338.15                                            | -0.588         | -0.502         | -1.194         | -1.798         | 0.0041     |
| 343.15                                            | -0.676         | -0.529         | -1.313         | -1.885         | 0.0040     |
| [Amim][TFSI] (1) + 1-propanol (2)                 |                |                |                |                |            |
| 293.15                                            | 0.112          | -1.186         | -0.603         | 0.007          | 0.0067     |
| 298.15                                            | 0.111          | -1.195         | -0.653         | -0.016         | 0.0068     |
| 303.15                                            | 0.105          | -1.203         | -0.696         | -0.055         | 0.0067     |
| 308.15                                            | 0.092          | -1.206         | -0.731         | -0.106         | 0.0067     |
| 313.15                                            | 0.072          | -1.159         | -0.757         | -0.255         | 0.0064     |
| 318.15                                            | 0.038          | -1.200         | -0.812         | -0.249         | 0.0070     |
| 323.15                                            | 0.005          | -1.178         | -0.861         | -0.356         | 0.0065     |
| 328.15                                            | -0.038         | -1.196         | -0.921         | -0.409         | 0.0062     |
| 333.15                                            | -0.093         | -1.213         | -0.985         | -0.490         | 0.0059     |
| 338.15                                            | -0.161         | -1.240         | -1.031         | -0.601         | 0.0057     |
| 343.15                                            | -0.248         | -1.276         | -1.130         | -0.711         | 0.0053     |
| [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] (1) + 1-propanol (2) |                |                |                |                |            |
| 293.15                                            | -1.597         | -0.342         | -8.487         | 6.588          | 0.0219     |
| 298.15                                            | -1.719         | -0.428         | -8.565         | 6.620          | 0.0218     |
| 303.15                                            | -1.850         | -0.519         | -8.660         | 6.651          | 0.0216     |
| 308.15                                            | -1.990         | -0.616         | -8.757         | 6.676          | 0.0216     |
| 313.15                                            | -2.205         | -0.728         | -8.669         | 6.717          | 0.0250     |
| 318.15                                            | -2.302         | -0.850         | -8.986         | 6.741          | 0.0215     |
| 323.15                                            | -2.475         | -0.998         | -9.073         | 6.746          | 0.0220     |
| 328.15                                            | -2.663         | -1.126         | -9.267         | 6.780          | 0.0217     |
| 333.15                                            | -2.869         | -1.283         | -9.427         | 6.778          | 0.0220     |
| 338.15                                            | -3.094         | -1.451         | -9.598         | 6.761          | 0.0224     |
| 343.15                                            | -3.338         | -1.644         | -9.799         | 6.729          | 0.0227     |

**Tabla A.2. Parámetros de la ecuación de Redlich-Kister en función de la temperatura para las desviaciones de viscosidad**

| T (K)                                             | A <sub>0</sub> | A <sub>1</sub> | A <sub>2</sub> | A <sub>3</sub> | A <sub>4</sub> | A <sub>5</sub> | $\sigma^a$ |
|---------------------------------------------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|------------|
| [Et <sub>3</sub> S][TFSI] (1) + 1-propanol (2)    |                |                |                |                |                |                |            |
| 293.15                                            | 136.54         | 174.77         | -30.73         | -158.96        | 716.73         | 869.17         | 0.733      |
| 298.15                                            | 113.12         | 144.43         | -25.42         | -128.87        | 588.23         | 712.28         | 0.603      |
| 303.15                                            | 94.98          | 121.14         | -21.01         | -106.85        | 490.03         | 592.86         | 0.503      |
| 308.15                                            | 80.74          | 102.82         | -17.54         | -89.72         | 413.35         | 499.62         | 0.423      |
| 313.15                                            | 69.33          | 88.25          | -14.82         | -76.70         | 352.46         | 426.14         | 0.362      |
| 318.15                                            | 60.12          | 76.45          | -12.63         | -66.12         | 303.58         | 367.06         | 0.312      |
| 323.15                                            | 52.44          | 68.65          | -11.84         | -65.71         | 265.77         | 327.27         | 0.261      |
| 328.15                                            | 46.36          | 58.74          | -9.45          | -50.33         | 230.98         | 279.24         | 0.237      |
| 333.15                                            | 41.13          | 51.98          | -8.20          | -44.04         | 203.71         | 245.93         | 0.209      |
| 338.15                                            | 36.73          | 46.31          | -7.25          | -39.16         | 180.78         | 218.32         | 0.185      |
| 343.15                                            | 33.02          | 41.53          | -6.65          | -35.28         | 161.78         | 195.46         | 0.166      |
| [Amim][TFSI] (1) + 1-propanol (2)                 |                |                |                |                |                |                |            |
| 293.15                                            | -28.29         | 31.65          | -5.31          | -13.77         | 14.57          | 99.04          | 0.057      |
| 298.15                                            | -21.32         | 25.09          | -3.47          | -11.23         | 14.65          | 80.58          | 0.048      |
| 303.15                                            | -16.30         | 20.18          | -0.18          | -11.31         | 11.78          | 69.12          | 0.039      |
| 308.15                                            | -12.32         | 16.24          | -0.86          | -7.26          | 13.93          | 53.99          | 0.034      |
| 313.15                                            | -9.52          | 13.35          | -0.26          | -5.90          | 13.25          | 45.27          | 0.030      |
| 318.15                                            | -7.31          | 10.99          | 0.34           | -4.73          | 12.63          | 37.53          | 0.026      |
| 323.15                                            | -5.67          | 9.22           | 0.79           | -4.04          | 11.72          | 32.05          | 0.024      |
| 328.15                                            | -4.29          | 7.61           | 0.88           | -2.61          | 11.60          | 25.76          | 0.021      |
| 333.15                                            | -3.24          | 6.39           | 1.45           | -2.91          | 9.50           | 24.45          | 0.020      |
| 338.15                                            | -2.39          | 5.43           | 1.24           | -2.49          | 9.64           | 20.88          | 0.017      |
| 343.15                                            | -1.68          | 4.68           | 0.85           | -3.22          | 11.66          | 21.30          | 0.022      |
| [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] (1) + 1-propanol (2) |                |                |                |                |                |                |            |
| 293.15                                            | -285.97        | 20.22          | -123.45        | 760.74         | 185.19         | -1106.08       | 1.176      |
| 298.15                                            | -190.69        | 0.25           | -80.80         | 550.01         | 133.79         | -784.12        | 0.863      |
| 303.15                                            | -136.97        | 22.74          | 70.09          | 72.68          | -81.42         | -117.81        | 0.159      |
| 308.15                                            | -91.26         | -9.75          | -40.89         | 301.15         | 78.02          | -412.83        | 0.466      |
| 313.15                                            | -65.36         | -8.35          | -31.00         | 223.20         | 58.20          | -296.83        | 0.323      |
| 318.15                                            | -46.87         | -9.23          | -22.58         | 172.92         | 45.55          | -223.18        | 0.263      |
| 323.15                                            | -34.28         | -7.39          | -20.51         | 134.97         | 41.22          | -171.45        | 0.190      |
| 328.15                                            | -25.27         | -6.93          | -15.82         | 107.40         | 33.03          | -131.93        | 0.152      |
| 333.15                                            | -18.77         | -6.45          | -12.64         | 87.56          | 26.84          | -103.36        | 0.124      |
| 338.15                                            | -14.06         | -6.08          | -10.65         | 73.98          | 22.81          | -84.29         | 0.107      |
| 343.15                                            | -10.62         | -5.52          | -8.54          | 62.09          | 18.37          | -67.52         | 0.091      |

**Tabla A.3. Parámetros de la ecuación de Redlich-Kister en función de la temperatura para las desviaciones de velocidad del sonido**

| T (K)                                             | A <sub>0</sub> | A <sub>1</sub> | A <sub>2</sub> | A <sub>3</sub> | $\sigma^a$ |
|---------------------------------------------------|----------------|----------------|----------------|----------------|------------|
| [Et <sub>3</sub> S][TFSI] (1) + 1-propanol (2)    |                |                |                |                |            |
| 293.15                                            | -63.07         | -100.98        | -196.52        | -140.85        | 0.379      |
| 298.15                                            | -55.16         | -93.49         | -190.49        | -129.56        | 0.375      |
| 303.15                                            | -47.45         | -86.01         | -185.01        | -118.11        | 0.375      |
| 308.15                                            | -39.95         | -78.50         | -180.05        | -106.50        | 0.374      |
| 313.15                                            | -32.58         | -71.06         | -175.55        | -94.66         | 0.376      |
| 318.15                                            | -25.35         | -63.50         | -171.26        | -82.47         | 0.378      |
| 323.15                                            | -18.26         | -55.72         | -167.55        | -70.02         | 0.385      |
| 328.15                                            | -11.36         | -47.74         | -164.71        | -56.49         | 0.394      |
| 333.15                                            | -4.76          | -39.38         | -162.71        | -41.04         | 0.406      |
| 338.15                                            | 2.85           | -31.87         | -158.60        | -27.68         | 0.412      |
| 343.15                                            | 11.65          | -24.21         | -150.48        | -17.03         | 0.401      |
| [Amim][TFSI] (1) + 1-propanol (2)                 |                |                |                |                |            |
| 293.15                                            | -66.54         | -102.29        | -178.56        | -174.47        | 0.409      |
| 298.15                                            | -57.69         | -95.42         | -170.34        | -167.08        | 0.396      |
| 303.15                                            | -48.88         | -88.69         | -162.05        | -159.72        | 0.384      |
| 308.15                                            | -40.10         | -81.90         | -153.90        | -152.83        | 0.374      |
| 313.15                                            | -31.31         | -75.26         | -145.84        | -145.80        | 0.361      |
| 318.15                                            | -22.55         | -68.78         | -137.71        | -138.78        | 0.348      |
| 323.15                                            | -13.70         | -62.26         | -129.62        | -131.91        | 0.334      |
| 328.15                                            | -4.84          | -55.70         | -121.21        | -125.17        | 0.322      |
| 333.15                                            | 4.27           | -49.24         | -112.51        | -117.91        | 0.306      |
| 338.15                                            | 13.62          | -43.04         | -103.77        | -110.17        | 0.294      |
| 343.15                                            | 23.16          | -36.46         | -91.95         | -102.74        | 0.266      |
| [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] (1) + 1-propanol (2) |                |                |                |                |            |
| 293.15                                            | -184.35        | -128.00        | -68.76         | -1.44          | 0.138      |
| 298.15                                            | -173.94        | -120.28        | -64.15         | 2.90           | 0.140      |
| 303.15                                            | -163.61        | -112.53        | -59.27         | 6.77           | 0.145      |
| 308.15                                            | -153.25        | -104.97        | -53.78         | 11.06          | 0.151      |
| 313.15                                            | -142.81        | -97.33         | -47.95         | 15.19          | 0.155      |
| 318.15                                            | -132.32        | -89.62         | -42.07         | 19.61          | 0.159      |
| 323.15                                            | -121.65        | -81.65         | -36.01         | 23.70          | 0.161      |
| 328.15                                            | -110.84        | -73.41         | -29.68         | 27.74          | 0.163      |
| 333.15                                            | -99.68         | -64.75         | -22.98         | 32.05          | 0.166      |
| 338.15                                            | -88.14         | -55.67         | -16.43         | 36.02          | 0.171      |
| 343.15                                            | -76.10         | -45.54         | -8.86          | 39.71          | 0.167      |

**Tabla A.4. Parámetros de la ecuación de Redlich-Kister en función de la temperatura para las desviaciones en compresibilidad isoentrópica**

| T (K)                                             | A <sub>0</sub> | A <sub>1</sub> | A <sub>2</sub> | A <sub>3</sub> | $\sigma^a$ |
|---------------------------------------------------|----------------|----------------|----------------|----------------|------------|
| [Et <sub>3</sub> S][TFSI] (1) + 1-propanol (2)    |                |                |                |                |            |
| 293.15                                            | -50.27         | -31.13         | -20.92         | -14.58         | 0.225      |
| 298.15                                            | -52.90         | -33.07         | -22.66         | -16.47         | 0.250      |
| 303.15                                            | -55.67         | -35.14         | -24.48         | -18.51         | 0.276      |
| 308.15                                            | -58.58         | -37.33         | -26.40         | -20.70         | 0.303      |
| 313.15                                            | -61.67         | -39.67         | -28.43         | -23.05         | 0.331      |
| 318.15                                            | -64.95         | -42.17         | -30.62         | -25.64         | 0.365      |
| 323.15                                            | -68.43         | -44.88         | -32.95         | -28.44         | 0.399      |
| 328.15                                            | -72.14         | -47.80         | -35.42         | -31.58         | 0.439      |
| 333.15                                            | -76.11         | -50.98         | -38.09         | -35.20         | 0.482      |
| 338.15                                            | -80.45         | -54.33         | -41.22         | -38.98         | 0.533      |
| 343.15                                            | -85.26         | -57.99         | -45.197        | -43.01         | 0.595      |
| [Amim][TFSI] (1) + 1-propanol (2)                 |                |                |                |                |            |
| 293.15                                            | -51.98         | -32.39         | -23.70         | -14.03         | 0.246      |
| 298.15                                            | -54.70         | -34.31         | -25.65         | -15.57         | 0.270      |
| 303.15                                            | -57.57         | -36.34         | -27.75         | -17.25         | 0.299      |
| 308.15                                            | -60.61         | -38.51         | -29.99         | -19.02         | 0.329      |
| 313.15                                            | -63.84         | -40.79         | -32.39         | -20.98         | 0.362      |
| 318.15                                            | -67.28         | -43.24         | -34.99         | -23.06         | 0.398      |
| 323.15                                            | -70.95         | -45.84         | -37.80         | -25.37         | 0.446      |
| 328.15                                            | -74.86         | -48.65         | -40.89         | -27.86         | 0.498      |
| 333.15                                            | -79.09         | -51.67         | -44.31         | -30.70         | 0.563      |
| 338.15                                            | -83.65         | -54.89         | -48.03         | -33.87         | 0.634      |
| 343.15                                            | -88.56         | -58.40         | -52.55         | -37.57         | 0.740      |
| [(OH) <sub>2</sub> Im][TFSI] (1) + 1-propanol (2) |                |                |                |                |            |
| 293.15                                            | -50.32         | -32.07         | -39.65         | -33.96         | 0.873      |
| 298.15                                            | -53.05         | -34.05         | -41.81         | -35.93         | 0.916      |
| 303.15                                            | -55.93         | -36.17         | -44.15         | -38.01         | 0.964      |
| 308.15                                            | -58.99         | -38.40         | -46.73         | -40.30         | 1.020      |
| 313.15                                            | -62.27         | -40.80         | -49.46         | -42.78         | 1.091      |
| 318.15                                            | -65.73         | -43.39         | -52.55         | -45.43         | 1.148      |
| 323.15                                            | -69.46         | -46.19         | -55.83         | -48.28         | 1.220      |
| 328.15                                            | -73.46         | -49.22         | -59.44         | -51.38         | 1.295      |
| 333.15                                            | -77.79         | -52.55         | -63.41         | -54.81         | 1.383      |
| 338.15                                            | -82.49         | -56.20         | -67.71         | -58.51         | 1.476      |
| 343.15                                            | -87.61         | -60.36         | -72.55         | -62.40         | 1.572      |

## **APÉNDICE B. Parámetros de las ecuaciones de Vásquez-Castillo, Nava-Ríos y Eyring-MTSM para mezclas binarias de líquidos iónicos**

**Tabla B.1. Parámetros de la ecuación de Vásquez-Castillo para mezclas binarias de líquidos iónicos con compuestos orgánicos**

| Líquido iónico                                                           | Solvente              | $a_0$   | $a_1$  | $b_0$  | $b_1$   | $c_0$  | $c_1$   |
|--------------------------------------------------------------------------|-----------------------|---------|--------|--------|---------|--------|---------|
| Triethylsulfonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                      | 1-propanol            | 14.611  | 15.453 | -5.233 | -8.714  | 2.445  | 3.127   |
| 1-allyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 1-propanol            | 12.507  | 6.416  | -4.782 | -2.367  | 2.678  | 2.129   |
| 1,3-dihydroxyimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide               | 1-propanol            | 17.154  | 63.445 | -8.820 | -17.095 | 2.681  | 7.514   |
| 2-hydroxyethyl-N,N,N-trimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | propan-1,3-diol       | -16.845 | 32.077 | 4.009  | 3.671   | 1.097  | -3.014  |
| 2-hydroxyethyl-N,N,N-trimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | 1,2-propanediol       | 55.164  | -      | -9.601 | 222.40  | 9.653  | -24.022 |
| 2-hydroxyethyl-N,N,N-trimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | 1,5-pentenediol       | -14.063 | 458.60 | 4.977  | -8.248  | -0.157 | -2.527  |
| butyltrimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                 | 1,2-propanediol       | 31.541  | -263.5 | -7.017 | 172.9   | 9.208  | -23.417 |
| butyltrimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                 | 2,3-butanediol        | 19.250  | -202.8 | -3.921 | 151.3   | 8.739  | -24.674 |
| butyltrimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                 | 1,2-butanediol        | 20.403  | -199.1 | -3.433 | 112.6   | 6.402  | -16.582 |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | etanol                | 8.491   | 40.802 | -5.473 | -13.169 | 3.011  | 3.882   |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 1-propanol            | 6.987   | 46.915 | -3.642 | -20.264 | 2.052  | 3.519   |
| 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | etanol                | 14.107  | 75.415 | -9.047 | -23.875 | 3.616  | 6.813   |
| 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 1-propanol            | 11.301  | 51.827 | -6.411 | -16.941 | 2.788  | 5.204   |
| 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 1-propanol            | 12.966  | 39.548 | -5.917 | -12.737 | 2.677  | 3.978   |
| 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 2,2,2-trifluoroetanol | -13.544 | 54.473 | -0.619 | -9.654  | 2.858  | 1.663   |
| 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | etanol                | 13.115  | 61.975 | -7.865 | -19.286 | 3.401  | 5.516   |
| 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                            | 2,2,2-trifluoroetanol | -72.541 | 154.1  | 8.413  | -5.646  | 2.510  | -1.978  |
| 1-methyl-3-octylimidazolium tetrafluoroborate                            | etanol                | -10.694 | 159.3  | -2.732 | -47.993 | 1.686  | 10.296  |
| 1-butyl-4-methylpyridinium tetrafluoroborate                             | etanol                | -17.789 | 174.3  | 0.095  | -49.687 | 0.482  | 9.302   |
| 1-butyl-4-methylpyridinium tetrafluoroborate                             | metanol               | -18.243 | 246.4  | -2.881 | -68.829 | 1.685  | 10.784  |
| 1-butyl-3-methylpyridinium tetrafluoroborate                             | metanol               | -3.099  | 166.3  | -5.649 | -34.071 | 3.359  | 6.621   |
| 1-butyl-3-methylpyridinium tetrafluoroborate                             | etanol                | -4.870  | 151.6  | -3.216 | -32.789 | 1.917  | 6.314   |
| 1-butylpyridinium tetrafluoroborate                                      | metanol               | -12.194 | 212.2  | -2.564 | -72.317 | 0.561  | 12.971  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                            | metanol               | -5.504  | 142.1  | -4.647 | -31.608 | 2.800  | 7.147   |

**Tabla B.1. (continuación)**

| Líquido iónico                                    | Solvente              | $a_0$   | $a_1$   | $b_0$   | $b_1$   | $c_0$ | $c_1$  |
|---------------------------------------------------|-----------------------|---------|---------|---------|---------|-------|--------|
| 1-hexyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate     | 1-propanol            | 19.256  | -57.217 | -6.820  | 50.999  | 6.247 | -5.615 |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate     | metanol               | -5.721  | 72.466  | -1.796  | -18.821 | 2.360 | 4.403  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate   | 2,2,2-trifluoroetanol | -72.498 | 212.10  | 7.534   | -18.223 | 2.037 | 0.936  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate               | Etanol                | -18.095 | 172.10  | -1.095  | -39.078 | 1.531 | 6.965  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate               | 1-propanol            | -43.937 | 204.40  | 4.560   | -45.676 | 0.300 | 5.926  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate               | 1-butanol             | -29.220 | 141.10  | 5.595   | -27.720 | 0.605 | 4.617  |
| 1-methyl-3-octylimidazolium nitrate               | etanol                | -25.839 | 255.10  | -1.702  | -67.929 | 1.071 | 12.450 |
| 1-methyl-3-octylimidazolium nitrate               | 1-propanol            | -69.961 | 324.20  | 6.860   | -79.949 | 0.133 | 10.152 |
| n-butylammonium nitrate                           | metanol               | 0.880   | 69.410  | -4.145  | -25.985 | 2.256 | 7.691  |
| n-butylammonium nitrate                           | etanol                | 18.306  | -19.664 | -6.510  | 10.201  | 3.582 | 2.234  |
| n-butylammonium nitrate                           | 1-propanol            | 19.741  | -31.789 | -6.042  | 11.522  | 3.053 | 1.724  |
| n-butylammonium nitrate                           | 1-butanol             | 7.816   | 36.386  | -3.960  | -11.185 | 1.831 | 3.420  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | etanol                | -6.367  | 75.396  | -2.237  | -21.156 | 1.663 | 5.551  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | 1-propanol            | 7.549   | -4.379  | -4.211  | 15.372  | 2.955 | 0.338  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | 1-butanol             | 10.552  | -41.638 | -4.150  | 34.175  | 3.289 | -2.050 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | pentanol              | 9.935   | -35.559 | -3.909  | 32.424  | 3.160 | -2.606 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | hexanol               | 6.506   | -20.112 | -2.965  | 22.484  | 2.473 | -1.781 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | heptanol              | 7.324   | -28.065 | -3.316  | 26.950  | 2.708 | -2.808 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | octanol               | 7.484   | -41.854 | -3.058  | 29.636  | 2.527 | -3.045 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | nonanol               | -3.658  | 36.821  | -1.378  | -3.633  | 1.412 | -0.403 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | decanol               | -2.079  | 32.714  | -2.319  | 3.025   | 1.989 | -1.732 |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | metanol               | 13.533  | 111.9   | -10.595 | -30.160 | 3.592 | 10.904 |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | etanol                | 38.188  | 28.309  | -13.964 | 7.996   | 4.468 | 6.235  |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | 1-propanol            | 2.280   | 54.529  | -5.625  | 0.529   | 3.244 | 4.344  |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | 2-propanol            | 17.876  | -18.047 | -9.310  | 31.184  | 5.398 | 0.440  |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dimethylphosphate     | metanol               | -2.021  | 224.3   | -9.376  | -70.258 | 2.524 | 15.082 |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dimethylphosphate     | etanol                | -13.979 | 125.6   | -4.933  | -26.808 | 2.996 | 8.444  |
| 1-butyl-3-methyl-1H-imidazolium dimethylphosphate | metanol               | -8.827  | 277.5   | -9.287  | -95.366 | 1.457 | 20.490 |
| 1-butyl-3-methyl-1H-imidazolium dimethylphosphate | etanol                | -17.506 | 213.2   | -5.404  | -59.242 | 1.860 | 13.908 |

**Tabla B.1. (continuación)**

| Líquido iónico                            | Solvente   | $a_0$   | $a_1$   | $b_0$  | $b_1$   | $c_0$  | $c_1$  |
|-------------------------------------------|------------|---------|---------|--------|---------|--------|--------|
| 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate       | etanol     | 2.434   | 67.632  | -6.010 | 5.119   | 3.421  | 3.406  |
| butylammonium acetate                     | metanol    | 14.698  | 72.628  | -8.575 | -29.402 | 2.896  | 11.723 |
| butylammonium acetate                     | etanol     | -4.007  | 121.1   | -4.351 | -31.315 | 2.480  | 8.311  |
| butylammonium acetate                     | 1-propanol | -13.245 | 170.9   | -1.641 | -48.106 | 1.041  | 8.839  |
| butylammonium acetate                     | 1-butanol  | -24.615 | 151.8   | 1.596  | -41.163 | 0.494  | 7.481  |
| 1-methylimidazolium acetate               | metanol    | 13.270  | 62.983  | -5.952 | -23.756 | 1.297  | 6.149  |
| 1-methylimidazolium acetate               | etanol     | 4.498   | -26.500 | -1.468 | 11.889  | 1.327  | 0.444  |
| 1-methylimidazolium acetate               | 1-propanol | -3.070  | -28.032 | 1.002  | 14.121  | 0.610  | -0.726 |
| 1-methylimidazolium acetate               | 1-butanol  | -13.004 | 24.373  | 2.828  | -1.260  | -0.363 | 0.243  |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamide   | etanol     | 19.666  | -53.447 | -6.843 | 36.259  | 4.514  | -3.243 |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | metanol    | -6.918  | 231.3   | -6.132 | -73.486 | 2.258  | 11.079 |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | etanol     | 16.873  | -33.953 | -6.987 | 26.625  | 4.201  | 1.363  |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | 1-propanol | 8.201   | -18.907 | -4.918 | 31.127  | 4.103  | -1.344 |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | 2-propanol | 15.463  | -55.011 | -7.151 | 49.979  | 5.959  | -5.057 |
| 1-ethylpyridinium ethyl sulfate           | etanol     | 35.762  | -135.3  | -9.023 | 51.110  | 4.124  | 1.962  |
| 1-ethylpyridinium ethyl sulfate           | 1-propanol | 31.539  | -158.5  | -7.604 | 72.604  | 5.148  | -3.809 |
| 1-ethyl-3-methylpyridinium ethylsulfate   | etanol     | 9.724   | 24.635  | -6.996 | 12.144  | 4.088  | 2.945  |
| 1,3-dimethylimidazolium methylsulfate     | etanol     | 7.638   | -4.895  | -4.964 | 20.603  | 3.844  | 0.502  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium methylsulfate | etanol     | 8.658   | 16.557  | -6.367 | 10.932  | 3.799  | 3.952  |

**Tabla B.2. Parámetros de la ecuación de Vásquez-Castillo para mezclas binarias de líquidos iónicos con agua**

| Líquido iónico                                                | $a_0$   | $a_1$  | $b_0$   | $b_1$   | $c_0$  | $c_1$  |
|---------------------------------------------------------------|---------|--------|---------|---------|--------|--------|
| 1-ethylpyridinium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide         | 46.340  | 73.081 | -17.318 | -54.062 | 4.810  | 11.395 |
| 1-ethyl-2-methylpyridinium bis((trifluoromethylsulfonyl)amide | 9.822   | 104.9  | -9.291  | -60.078 | 3.208  | 12.984 |
| 1-ethyl-3-methylpyridinium bis((trifluoromethylsulfonyl)amide | -3.339  | 60.116 | -4.544  | -47.684 | 2.461  | 11.077 |
| 1-ethyl-4-methylpyridinium bis((trifluoromethylsulfonyl)amide | 19.836  | 7.549  | -11.331 | -48.750 | 4.093  | 10.122 |
| 1-hexyl-3-methylimidazolium chloride                          | 47.737  | 773.5  | -28.983 | -259.2  | 1.850  | 36.197 |
| 3-hexyl-1-methyl-1H-imidazolium bromide                       | 92.111  | 187.5  | -32.013 | -33.951 | 9.491  | 10.223 |
| 1-ethyl-1-methylpyrrolidinium ethyl sulfate                   | -17.790 | 905.4  | -10.750 | -447.8  | -5.533 | 48.307 |
| 1-ethyl-1-methylpiperidinium ethyl sulfate                    | 54.392  | 634.5  | -26.356 | -250.4  | 0.454  | 36.124 |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate                     | 63.864  | 159.2  | -24.423 | -65.028 | 6.658  | 11.077 |
| 1-ethyl-3-methylpyridinium ethylsulfate                       | 82.684  | 107.4  | -28.551 | -56.770 | 6.962  | 13.231 |
| 1,2-dimethyl-3-propylimidazolium tetrafluoroborate            | 37.287  | 217.0  | -16.985 | -78.477 | 4.374  | 13.927 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                 | 69.784  | 116.0  | -22.866 | -43.189 | 5.728  | 9.835  |
| 1-octylpyridinium tetrafluoroborate                           | 127.6   | 216.2  | -41.301 | -84.879 | 8.434  | 16.451 |
| 1-butylpyridinium tetrafluoroborate                           | 27.755  | 212.6  | -14.312 | -62.688 | 4.313  | 10.094 |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                 | 50.196  | 35.490 | -14.384 | -29.035 | 4.038  | 7.464  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate                       | 37.581  | 227.6  | -16.648 | -114.2  | 2.491  | 11.790 |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium thiocyanate                       | 51.326  | 28.223 | -17.769 | -9.616  | 6.671  | 2.600  |
| 1-butyl-4-methylpyridinium thiocyanate                        | 54.098  | 195.1  | -21.008 | -97.666 | 3.535  | 17.700 |
| 1-butyl-1-methylpyrrolidinium thiocyanate                     | 55.731  | 190.0  | -21.490 | -108.4  | 3.556  | 19.525 |
| 1-butyl-1-methylpiperidinium thiocyanate                      | 87.936  | 520.7  | -27.243 | -252.7  | -0.211 | 36.536 |
| 1-methylimidazolium acetate                                   | 97.567  | 140.2  | -30.827 | -81.554 | 4.730  | 14.494 |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate                           | 84.121  | 222.4  | -29.587 | -124.4  | 4.057  | 22.773 |
| butylammonium acetate                                         | 73.408  | 278.8  | -29.393 | -94.531 | 6.830  | 15.784 |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium trifluoroacetate                  | 140.7   | 88.267 | -40.197 | -18.195 | 10.647 | 3.480  |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamide                       | 55.859  | 26.832 | -18.438 | -8.851  | 6.621  | 1.684  |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamide                       | 55.357  | 65.719 | -18.837 | -29.052 | 6.268  | 4.185  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium dicyanamide                       | -14.125 | 53.744 | -2.178  | -19.794 | 3.272  | 5.521  |
| 1-butyl-1-methylpyrrolidinium dicyanamide                     | 72.802  | 163.1  | -26.198 | -95.223 | 5.502  | 15.079 |
| 1-butyl-1-methylpiperidinium dicyanamide                      | 87.936  | 520.7  | -27.243 | -252.7  | -0.211 | 36.536 |

**Tabla B.2. (continuación)**

| System                                                | $a_0$  | $a_1$  | $b_0$   | $b_1$   | $c_0$ | $c_1$  |
|-------------------------------------------------------|--------|--------|---------|---------|-------|--------|
| 1-butyl-3-methylimidazolium tricyanomethane           | 40.686 | 45.317 | -16.581 | -17.953 | 5.965 | 5.559  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate | 96.008 | 170.9  | -31.760 | -81.946 | 7.272 | 13.177 |
| ethylammonium nitrate                                 | 38.558 | -6.374 | -10.375 | 10.995  | 5.024 | -1.039 |
| n-butylammonium nitrate                               | 25.254 | 68.819 | -11.144 | -20.949 | 5.105 | 4.814  |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate             | 118.2  | 220.7  | -37.334 | -129.4  | 4.241 | 27.617 |
| 1,3-dimethylimidazolium methylsulfate                 | 59.468 | 15.524 | -20.447 | -9.425  | 7.092 | 5.379  |
| 1-ethylpyridinium triflate                            | 47.997 | 158.9  | -19.807 | -49.808 | 6.913 | 6.327  |

**Tabla B.3. Parámetros de la ecuación de Eyring-MTSM para mezclas binarias de líquidos iónicos con compuestos orgánicos**

| Líquido iónico                                                           | Solvente              | $\alpha_{12}^0$ | $\alpha_{12}^1$ | $\tau_{12}$ | $\tau_{21}$ |
|--------------------------------------------------------------------------|-----------------------|-----------------|-----------------|-------------|-------------|
| Triethylsulfonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                      | 1-propanol            | 0.3242          | 406.6           | -42.028     | 3781.8      |
| 1-allyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 1-propanol            | 1.7654          | -378.5          | -2872.1     | 3168.8      |
| 1,3-dihydroxyimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide               | 1-propanol            | -1.0103         | 2615.3          | 941.1       | 4539.2      |
| 2-hydroxyethyl-N,N,N-trimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | propan-1,3-diol       | 0.9761          | -1021.9         | -719.3      | 3049.7      |
| 2-hydroxyethyl-N,N,N-trimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | 1,2-propanediol       | 7.4993          | -2755.7         | 445.8       | -457.2      |
| 2-hydroxyethyl-N,N,N-trimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | 1,5-pentanediol       | -1.0188         | -110.2          | -1835       | 522.7       |
| butyltrimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                 | 1,2-propanediol       | 9.2323          | -3494.2         | 605.7       | -680.5      |
| butyltrimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                 | 2,3-butanediol        | 3.3547          | -1351.1         | -3268.7     | -2328.2     |
| butyltrimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                 | 1,2-butanediol        | 1.3785          | -576.7          | -4569.7     | -7014.5     |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | etanol                | -0.2042         | 374.2           | -1051.9     | 675.5       |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 1-propanol            | -2.2883         | 1207.3          | 289         | 4213.2      |
| 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | etanol                | -2.0837         | 1255.2          | -1310       | 1109.1      |
| 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 1-propanol            | -5.6781         | 3187.8          | 1061.1      | 4053.6      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 1-propanol            | 0.1319          | 248.9           | -1958.1     | 1814.2      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 2,2,2-trifluoroetanol | 9.0523          | -2401.7         | -334.5      | 720.1       |
| 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | etanol                | -1.6805         | 1377.3          | -69.5961    | 2621.9      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                            | 2,2,2-trifluoroetanol | 10.2977         | -3303.6         | -2600.9     | 1923        |
| 1-methyl-3-octylimidazolium tetrafluoroborate                            | etanol                | -150.6          | 69133.7         | 3903.7      | 9337        |
| 1-butyl-4-methylpyridinium tetrafluoroborate                             | etanol                | 2.0582          | -554.2          | -3374.7     | 3645.3      |
| 1-butyl-4-methylpyridinium tetrafluoroborate                             | metanol               | 2.544           | -1429.5         | -1470.1     | 1851.8      |
| 1-butyl-3-methylpyridinium tetrafluoroborate                             | metanol               | 6.1588          | -1616.8         | -2183.1     | 2373.8      |
| 1-butyl-3-methylpyridinium tetrafluoroborate                             | etanol                | 2.0855          | -523            | -4349.9     | 4436.4      |
| 1-butylpyridinium tetrafluoroborate                                      | metanol               | -5.1419         | 1878.2          | -1744       | 1733.1      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                            | metanol               | 14.5112         | -1915.2         | 2986.6      | 4768.8      |

**Tabla B.3. (continuación)**

| Líquido iónico                                    | Solvente              | $\alpha_{12}^0$ | $\alpha_{12}^1$ | $\tau_{12}$ | $\tau_{21}$ |
|---------------------------------------------------|-----------------------|-----------------|-----------------|-------------|-------------|
| 1-hexyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate     | 1-propanol            | 29.3252         | -8792.2         | 1315.6      | 2348.2      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate     | metanol               | 0.1733          | 96.6341         | -1727.2     | 1726.2      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate   | 2,2,2-trifluoroetanol | 22.4808         | -7373.3         | -343.6      | 4062.9      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate               | etanol                | 495.8           | -110161         | 5936.1      | 11353.6     |
| 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate               | 1-propanol            | 6.2138          | -1896.5         | 0.6453      | -2953.4     |
| 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate               | 1-butanol             | 8.0367          | -2458.1         | 78.3483     | -645.2      |
| 1-methyl-3-octylimidazolium nitrate               | etanol                | 3.2018          | -620.7          | -2240.7     | 1596.4      |
| 1-methyl-3-octylimidazolium nitrate               | 1-propanol            | 3.0257          | -827.9          | -3264.4     | -2734.9     |
| n-butylammonium nitrate                           | metanol               | -17.6631        | 9309            | 3218.1      | 4151.3      |
| n-butylammonium nitrate                           | etanol                | 6.1608          | -1087.6         | -300.4      | 2612.2      |
| n-butylammonium nitrate                           | 1-propanol            | 3.9588          | -525.5          | -365.5      | 2583.3      |
| n-butylammonium nitrate                           | 1-butanol             | -2.5438         | 1633.2          | -70.1377    | 3978.3      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | etanol                | 3.1921          | -722.4          | -1513.5     | 283         |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | 1-propanol            | 24.442          | -5737.9         | 2263.5      | 6080        |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | 1-butanol             | 94.7751         | -21707.1        | 5998.2      | 7436.4      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | pentanol              | 7.7498          | -2250.3         | -1200.9     | 2176.3      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | hexanol               | 6.3482          | -1798.4         | -1021       | 2727.7      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | heptanol              | 6.323           | -1778           | -811.9      | 2017.1      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | octanol               | 4.6811          | -1335.8         | -1248.4     | 832.4       |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | nonanol               | 2.7399          | -581.1          | -81.2623    | 1243.9      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | decanol               | 2.8872          | -699.1          | -1587.4     | -117.2      |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | metanol               | 5.9939          | 239.8           | 598.3       | 2861        |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | etanol                | -10.1801        | 9307            | 2133.3      | 5613.4      |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | 1-propanol            | 10.9583         | -2720.3         | 103.8       | -116.7      |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | 2-propanol            | 20.1527         | 146             | 3632.5      | 4201.2      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dimethylphosphate     | metanol               | -3.4308         | 4035.9          | 1175.4      | 2802        |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dimethylphosphate     | etanol                | 18.3909         | -3547.4         | 1363        | 2372.2      |
| 1-butyl-3-methyl-1H-imidazolium dimethylphosphate | metanol               | -7.019          | 5006.8          | 760.5       | 2482.7      |
| 1-butyl-3-methyl-1H-imidazolium dimethylphosphate | etanol                | 6.5017          | -30.8691        | 887.1       | 1994.8      |

**Tabla B.3. (continuación)**

| Líquido iónico                            | Solvente   | $\alpha_{12}^0$ | $\alpha_{12}^1$ | $\tau_{12}$ | $\tau_{21}$ |
|-------------------------------------------|------------|-----------------|-----------------|-------------|-------------|
| 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate       | etanol     | 17.1379         | -3854.1         | 1291.4      | 3259.2      |
| butylammonium acetate                     | metanol    | -18.3622        | 10736.4         | 2718.6      | 4072.8      |
| butylammonium acetate                     | etanol     | 6.7208          | -1431.8         | -860.6      | 847.5       |
| butylammonium acetate                     | 1-propanol | 1.7071          | -202.3          | -1621.6     | 1547.8      |
| butylammonium acetate                     | 1-butanol  | 17.0262         | -2989.8         | 3793.3      | 6536.1      |
| 1-methylimidazolium acetate               | metanol    | -6.0822         | 3020.6          | 416.8       | 3647        |
| 1-methylimidazolium acetate               | etanol     | 2.5742          | -698.4          | 23.3165     | 35.7124     |
| 1-methylimidazolium acetate               | 1-propanol | 0.4451          | -161.2          | -12108.9    | -1254.5     |
| 1-methylimidazolium acetate               | 1-butanol  | 22.8707         | -8433.1         | 1515        | 6565.6      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamide   | etanol     | 12.1133         | -1879.3         | 1960.2      | 4814.5      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | metanol    | 5.5912          | -121.8          | 221.5       | 3881.5      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | etanol     | 18.6604         | -3349.4         | 2498.2      | 4538.5      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | 1-propanol | 18.2052         | -4661.8         | 2082        | 3014.7      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | 2-propanol | 13.2349         | -3639.5         | -586        | 1477.3      |
| 1-ethylpyridinium ethyl sulfate           | etanol     | -2.9195         | 3830.3          | 2387.8      | 5348.3      |
| 1-ethylpyridinium ethyl sulfate           | 1-propanol | 25.1038         | -6561.4         | 2375.2      | 4206.3      |
| 1-ethyl-3-methylpyridinium ethylsulfate   | etanol     | 23.941          | -5370.8         | 1607.1      | 4919        |
| 1,3-dimethylimidazolium methylsulfate     | etanol     | 19.8812         | -4841.8         | 1908.4      | 3900.4      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium methylsulfate | etanol     | 12.2464         | -1983.5         | 2106.2      | 3086.4      |

**Tabla B.4. Parámetros de la ecuación de Eyring-MTSM para mezclas binarias de líquidos iónicos con agua**

| Líquido iónico                                                | $\alpha_{12}^0$ | $\alpha_{12}^1$ | $\tau_{12}$ | $\tau_{21}$ |
|---------------------------------------------------------------|-----------------|-----------------|-------------|-------------|
| 1-ethylpyridinium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide         | -1.7018         | 1576            | -2232.8     | 2433        |
| 1-ethyl-2-methylpyridinium bis((trifluoromethylsulfonyl)amide | -1.3944         | 1493.1          | -5038.7     | 2393        |
| 1-ethyl-3-methylpyridinium bis((trifluoromethylsulfonyl)amide | -2.9217         | 2108.8          | -2509.2     | 2639        |
| 1-ethyl-4-methylpyridinium bis((trifluoromethylsulfonyl)amide | -11.1345        | 5941.3          | -1700       | 4668.5      |
| 1-hexyl-3-methylimidazolium chloride                          | 2.8321          | 859.8           | -2950.5     | 3039.2      |
| 3-hexyl-1-methyl-1H-imidazolium bromide                       | 12.3652         | -1751.9         | -1847.7     | 4293.9      |
| 1-ethyl-1-methylpyrrolidinium ethyl sulfate                   | -4.355          | 2266.2          | -4859.9     | 11.8891     |
| 1-ethyl-1-methylpiperidinium ethyl sulfate                    | -54.0933        | 23661.6         | -152        | 5952.5      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate                     | -42.6897        | 21077.9         | 562.3       | 6322.6      |
| 1-ethyl-3-methylpyridinium ethylsulfate                       | -20.1150        | 10646.9         | -876.3      | 5388.5      |
| 1,2-dimethyl-3-propylimidazolium tetrafluoroborate            | 3.3469          | -187.8          | -3147.6     | 3157.6      |
| 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                 | 2.2378          | 184.2           | -3859.7     | 3859.2      |
| 1-octylpyridinium tetrafluoroborate                           | -5.7962         | 3753.5          | -4787.4     | 3762.5      |
| 1-butylpyridinium tetrafluoroborate                           | 5.1250          | -1008           | -4851.7     | 4688.6      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                 | -712.2          | 255816          | 73.2731     | 13497.6     |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate                       | -17.4184        | 8798.4          | -243.3      | 4603.4      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium thiocyanate                       | 2.6762          | 1430.1          | -231.1      | 4112.8      |
| 1-butyl-4-methylpyridinium thiocyanate                        | -34.7818        | 16255.3         | 121.9       | 5602.1      |
| 1-butyl-1-methylpyrrolidinium thiocyanate                     | -0.9794         | 1047.3          | -4912.2     | -246.4      |
| 1-butyl-1-methylpiperidinium thiocyanate                      | -19.6967        | 10255.2         | -672        | 4869.9      |
| 1-methylimidazolium acetate                                   | -8.9620         | 4585.8          | -2526.9     | 2463.4      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate                           | -48.7555        | 23689.4         | 60.7436     | 5655.2      |
| butylammonium acetate                                         | 1.4132          | 198.8           | -6595.4     | -1571.5     |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium trifluoroacetate                  | -95.2956        | 49104.5         | 268.3       | 9048.5      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamide                       | -1.2698         | 2910.7          | -281.1      | 4395.3      |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamide                       | 1.7176          | -59.3893        | -4785.4     | -82.0321    |
| 1-butyl-3-methylimidazolium dicyanamide                       | 0.9838          | 428.2           | 407.3       | -467.9      |
| 1-butyl-1-methylpyrrolidinium dicyanamide                     | -0.5691         | 906.4           | -6985.6     | -21.2849    |
| 1-butyl-1-methylpiperidinium dicyanamide                      | -202.8          | 84608.7         | 1036.5      | 8074.9      |

**Tabla B.4. (continuación)**

| Líquido iónico                                        | $\alpha_{12}^0$ | $\alpha_{12}^1$ | $\tau_{12}$ | $\tau_{21}$ |
|-------------------------------------------------------|-----------------|-----------------|-------------|-------------|
| 1-butyl-3-methylimidazolium tricyanomethane           | -0.0811         | 1117.7          | -3518.5     | 2618        |
| 1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate | 0.5501          | 801             | -5205       | 2179.5      |
| ethylammonium nitrate                                 | 3.5243          | -1511.5         | 4619.6      | -4622.2     |
| n-butylammonium nitrate                               | -0.3101         | 2568.2          | 560.5       | 4798.1      |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate             | -722.9          | 271967          | 1057        | 9387.7      |
| 1,3-dimethylimidazolium methylsulfate                 | -1.8925         | 3760.7          | 111.6       | 4512.3      |
| 1-ethylpyridinium triflate                            | -107.7          | 52619.0         | 3650        | 7456.7      |

**Tabla B.5. Parámetros de la ecuación de Nava-Ríos para mezclas binarias de líquidos iónicos con compuestos orgánicos**

| Líquido iónico                                                           | Solvente              | $a_0$    | $a_1$    | $b_0$   | $b_1$    | $c_0$   | $c_1$    |
|--------------------------------------------------------------------------|-----------------------|----------|----------|---------|----------|---------|----------|
| Triethylsulfonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                      | 1-propanol            | 3.8307   | -23036.6 | 0.9056  | -68486.6 | 4.3642  | -174172  |
| 1-allyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 1-propanol            | 4.7478   | -152581  | -0.5666 | -43918.6 | 4.0079  | -117122  |
| 1,3-dihydroxyimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide               | 1-propanol            | 25.3772  | -972261  | -0.0990 | 16967.9  | 2.3656  | 40689.4  |
| 2-hydroxyethyl-N,N,N-trimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | propan-1,3-diol       |          |          |         |          |         |          |
| 2-hydroxyethyl-N,N,N-trimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | 1,2-propanediol       | 1.8017   | -154016  | -0.5742 | 110032   | -0.0217 | 57304.0  |
| 2-hydroxyethyl-N,N,N-trimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide | 1,5-pentanediol       |          |          |         |          |         |          |
| butyltrimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                 | 1,2-propanediol       | 1.3057   | -112524  | -1.0710 | 149422   | -3.9780 | 495175   |
| butyltrimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                 | 2,3-butanediol        | 0.7236   | -66554.5 | -0.8146 | 164966   | 0.0204  | 1479.2   |
| butyltrimethylammonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide                 | 1,2-butanediol        | 0.7942   | -61480.7 | -0.3175 | 91370.4  | -1.5441 | 226309   |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | etanol                | 1.7631   | 530969   | 0.3209  | -20848.7 | 4.0024  | -110290  |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 1-propanol            | 2.3688   | 72871.6  | 0.9118  | -64799.4 | 4.5968  | -166291  |
| 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | etanol                | -29.5219 | 5320967  | 0.0724  | -4581.6  | 6.3636  | -311497  |
| 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 1-propanol            | 1.0731   | 822469   | 0.2136  | -12394.5 | 5.9500  | -283101  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 1-propanol            | 2.2662   | 311740   | 0.2562  | -15468.1 | 4.8379  | -186751  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | 2,2,2-trifluoroetanol | 10.0935  | -701211  | -0.0299 | 111454   | 2.7944  | -209517  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide            | etanol                | 3.8059   | 1132429  | 0.0699  | -4130.8  | 5.9999  | -288183  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                            | 2,2,2-trifluoroetanol |          |          |         |          |         |          |
| 1-methyl-3-octylimidazolium tetrafluoroborate                            | etanol                | 11.0347  | -533848  | 8.9652  | -635726  | 2.0716  | 14302.8  |
| 1-butyl-4-methylpyridinium tetrafluoroborate                             | etanol                | 4.9061   | -320672  | 3.7893  | -309065  | 3.1814  | -57221.2 |
| 1-butyl-4-methylpyridinium tetrafluoroborate                             | metanol               | 18.2405  | -1279252 | 0.4244  | -34807.1 | 2.5749  | 763.1    |
| 1-butyl-3-methylpyridinium tetrafluoroborate                             | metanol               | 23.8611  | -1830374 | 0.1596  | -9572.0  | -0.4612 | 299597   |
| 1-butyl-3-methylpyridinium tetrafluoroborate                             | etanol                | 6.7992   | -492859  | 0.6122  | -45520.6 | -1.0296 | 359858   |
| 1-butylpyridinium tetrafluoroborate                                      | metanol               | 6.1118   | -154541  | 0.5954  | -49203.2 | 3.2904  | -56610.8 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate                            | metanol               | 25.2305  | -1824148 | 0.3384  | -19671.1 | 2.4065  | 33701.4  |

**Tabla B.5. (continuación)**

| Líquido iónico                                    | Solvente              | $a_0$   | $a_1$                 | $b_0$   | $b_1$    | $c_0$    | $c_1$    |
|---------------------------------------------------|-----------------------|---------|-----------------------|---------|----------|----------|----------|
| 1-hexyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate     | 1-propanol            | 8.3939  | -607435               | 1.2176  | -76609.2 | -16.2117 | 1881904  |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate     | metanol               | 4.6279  | -177956               | 1.6611  | -117767  | 3.3687   | -51646.5 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate   | 2,2,2-trifluoroetanol |         |                       |         |          |          |          |
| 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate               | etanol                | 5.5440  | -322187               | -0.0770 | 67544.9  | -9.6127  | 1109233  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate               | 1-propanol            | 2.8450  | -208305               | 0.2511  | 27225.0  |          |          |
| 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate               | 1-butanol             | 3.6898  | -268619               | 0.2607  | 95042.0  | 0.2979   | 91532.6  |
| 1-methyl-3-octylimidazolium nitrate               | etanol                | 22.8483 | -1576779              | -1.4128 | 153268   | 3.5804   | -86112.1 |
| 1-methyl-3-octylimidazolium nitrate               | 1-propanol            | 23.5590 | -1802671              | -3.4651 | 374172   | 5.9444   | 402639   |
| n-butylammonium nitrate                           | metanol               | 5.0062  | 475161                | 0.3075  | -6056.1  | 3.9866   | -100487  |
| n-butylammonium nitrate                           | etanol                | 10.2955 | -428367               | -0.1754 | 50682.9  | 0.8623   | 149494   |
| n-butylammonium nitrate                           | 1-propanol            | 4.7703  | -71720.6              | 0.6639  | -16316.3 | 0.2211   | 207276   |
| n-butylammonium nitrate                           | 1-butanol             | 5.5091  | -205115               | 0.4184  | -4617.9  | 17.7014  | -1292518 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | etanol                | 15.4844 | -1189457              | 1.1024  | -86875.5 | 9.9975   | -866151  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | 1-propanol            | 10.0920 | -1501032              | 0.1309  | 1393.5   | 29.6546  | -2608850 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | 1-butanol             | 12.8161 | -1075876              | -0.0785 | 71843.0  | 30.2902  | -2673244 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | pentanol              | 3.9514  | -295784               | 1.5315  | -85307.4 | 0.9361   | -52801.5 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | hexanol               | 8.1214  | -673594               | 1.2128  | -37260.6 | 22.6141  | -1992492 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | heptanol              | 2.8212  | -196187               | 1.2337  | -42276.5 | 0.0202   | 32970.6  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | octanol               | 2.2796  | -152072               | 0.7040  | -25235.2 | -0.2033  | 29965.7  |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | nonanol               | 2.5345  | -168416               | 2.6535  | -189864  | 1.0504   | -82702.8 |
| 1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate           | decanol               | 3.6561  | -256776               | 0.5247  | 50266.9  | 1.1096   | -80928.0 |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | metanol               | 129.4   | -7252472              | -0.0555 | 10024.5  | 2.3531   | 27192.6  |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | etanol                | 72.0750 | -4634739              | -0.7038 | 80699.9  | 1.7642   | 79514.6  |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | 1-propanol            | 35.5074 | -2617498              | -1.9841 | 252817   | 1.4926   | 38581.7  |
| 1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate         | 2-propanol            | 79.3228 | -5877472              | -7.8837 | 887481   | -3.4291  | 570564   |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dimethylphosphate     | metanol               | 93.3108 | 2116396               | -0.1229 | 17603.2  | 2.3947   | 12141.0  |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dimethylphosphate     | etanol                | 30.6955 | 912509                | 0.2547  | -9449.1  | -28.7889 | 3239281  |
| 1-butyl-3-methyl-1H-imidazolium dimethylphosphate | metanol               | -184.6  | 41935322              | -0.0562 | 7883.3   | 2.0608   | 59254.2  |
| 1-butyl-3-methyl-1H-imidazolium dimethylphosphate | etanol                | 235.1   | -1.81x10 <sup>7</sup> | -0.0680 | 23568.1  | 16.4727  | -1406245 |

**Tabla B.5. (continuación)**

| Líquido iónico                            | Solvente   | $a_0$   | $a_1$    | $b_0$   | $b_1$    | $c_0$    | $c_1$    |
|-------------------------------------------|------------|---------|----------|---------|----------|----------|----------|
| 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate       | etanol     | 31.8518 | -2405717 | -0.9673 | 119711   | -2.5873  | 549984   |
| butylammonium acetate                     | metanol    | 10.0598 | 2138384  | 0.2679  | -19675.8 | 0.1567   | 263172   |
| butylammonium acetate                     | etanol     | 24.0583 | -1502251 | 1.2490  | -79350.9 | 3.7130   | -113049  |
| butylammonium acetate                     | 1-propanol | 6.5984  | -373998  | 3.3213  | -263345  | 1.5049   | 65402.2  |
| butylammonium acetate                     | 1-butanol  | 1.8179  | -98598.8 | 1.6242  | -123587  | -2.1356  | 223871   |
| 1-methylimidazolium acetate               | metanol    | 0.0196  | 657462   | 0.2487  | -8823.9  | 4.5061   | -135518  |
| 1-methylimidazolium acetate               | etanol     | 1.2604  | -54784.0 | 0.7153  | -19722.4 |          |          |
| 1-methylimidazolium acetate               | 1-propanol |         |          |         |          |          |          |
| 1-methylimidazolium acetate               | 1-butanol  |         |          |         |          |          |          |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamide   | etanol     | 11.1577 | -650645  | -0.3768 | 80377.8  | -5.3232  | 893909   |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | metanol    | 44.1210 | -2553725 | 0.1335  | -7732.0  | 2.7861   | -8337.0  |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | etanol     | 19.7290 | -1238620 | 0.1638  | 11686.1  | -3.5061  | 673545   |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | 1-propanol | 22.3706 | -1864190 | -3.5591 | 437648   | 22.0060  | -1904628 |
| 1-ethyl-3-methylimidazolium ethyl sulfate | 2-propanol | 25.7721 | -1924812 | -0.4835 | 85249.0  | -22.1057 | 2644575  |
| 1-ethylpyridinium ethyl sulfate           | etanol     | 2.9939  | 329212   | 1.6216  | -130623  | -2.4951  | 563898   |
| 1-ethylpyridinium ethyl sulfate           | 1-propanol | 15.8264 | -1285046 | -5.3799 | 641592   | 11.6970  | -935547  |
| 1-ethyl-3-methylpyridinium ethylsulfate   | etanol     | 29.5332 | -2050527 | -0.1318 | 18782.7  | -3.5116  | 684196   |
| 1,3-dimethylimidazolium methylsulfate     | etanol     | 14.1356 | -955698  | 0.1873  | 29366.0  | -5.1116  | 837891   |
| 1-butyl-3-methylimidazolium methylsulfate | etanol     | 28.2625 | -1868671 | -0.8119 | 126172   | -1.8741  | 464501   |

