



INSTITUTO TECNOLÓGICO DE MINATITLÁN

TESIS

"ANÁLISIS ENERGÉTICO INTEGRAL DE UN

CICLO DE COGENERACIÓN CON TURBINA DE GAS

DE PETROQUÍMICA PAJARITOS DE PETROLEOS MEXICANOS"

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

MAESTRO EN INGENIERÍA ENERGÉTICA

PRESENTA:

ING. JOSÉ EDUARDO WILLIAMS MEX

ASESOR

DR. ROBERTO RAMÍREZ MESA.



Minatitlán, Veracruz México, Junio 2008.





SUBSECRETARÍA DE EDUCACIÓN SUPERIOR DIRECCIÓN GENERAL DE EDUCACIÓN SUPERIOR TECNOLÓGICA INSTITUTO TECNOLÓGICO DE MINATITLAN

SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA

Minatitlán, Ver., 23/Mayo /2008 DIV. DE EST. DE POSGRADO E INVEST. OFICIO No. DEPI-TIT-048-2008

ASUNTO: AUTORIZACIÓN DE IMPRESIÓN DE TESIS

ING. JOSÉ EDUARDO WILLIAMS MEX PRESENTE

Después de haber satisfecho los requisitos establecidos en el procedimiento académico para obtener el Grado de Maestro en Ingeniería en los Institutos Tecnológicos, y de conformidad con el H. Comité Revisor, es grato autorizarle la impresión de su Tesis:

"ANALISIS ENERGETICO INTEGRAL DE UN CICLO DE COGENERACIÓN CON TURBINA DE GAS DE PETROQUIMICA PAJARITOS DE PETROLEOS MEXICANOS"

ATENTAMENTE SES INSTITUTO TECNOLOGICO M.C. MARCIA LORENA HERNANDEZ NIETO INVESTIGACION

Boulevard Institutos Tecnológicos S/N, Col. Buena Vista Norte, C.P. 96848, Minatitlán, Veracruz Teléfono (01 922) 22 243 45, 2 43 39, Fax 22 243 36, e-mail: dirección@itmina.edu.mx http://www.itmina.edu.mx



DEDICATORIA

DEDICATORIA

A Dios:

A mi esposa, hijos, nuera y muy en especial a mi nieta Regina.

A mis hermanos, amigos y a todas aquellas personas que me apoyaron en este trabajo, por que sin su ayuda no hubiera logrado este proyecto. Muchas Gracias. AGRADECIMIENTO

AGRADECIMIENTO

AGRADECIMIENTO

Al Dr. Roberto Ramírez Mesa, por todas sus atenciones que me brindó, su apoyo incondicional, su confianza y estimulo, para la realización de este trabajo, ganándose mi respeto y admiración.

A todos los maestros que con sus sabias enseñanzas y sus orientaciones académicas, me fortalecieron en los momentos difíciles del estudio, y algunas otras razones más, como amigos y seres humanos valiosos:

DR. Lázaro Valentín García Aguilar.

MI. René Yamamoto Arana

MC. Andrés Álvarez Alvarado

MI. Arturo Casados Mellado

DR. Hernardo Paredes Romero

DR. Artemio Jesus Benítez Fundora

A mis amigos y compañeros de clase, que estuvieron siempre presentes en las actividades compartidas.

Al Instituto Tecnológico de Minatitlán y a Pemex Petroquímica.

A todos gracias.

RESUMEN

RESUMEN

RESUMEN

El complejo Petroquímico Pajaritos, fue inaugurado oficialmente en el año 1968, con las plantas de Etileno I, Clorados I, Acetaldehído, Criogénica, Oxido de Etileno. Esta ubicado a 7.5 kilómetros de la ciudad de Coatzacoalcos, Veracruz y es desde su puesta en operación, una de las principales generadoras de divisas del país y una importante fuente de empleo para cientos de trabajadores.

Este trabajo de recepción de tesis, se desarrolla en la planta de generación eléctrica, misma que es objeto de un análisis Integral Termodinámico y de los resultados de este estudio, visualizar las áreas donde existe energía que no se aprovecha y en que secciones del proceso existen los mayores costos operativos, que permitan optimizar.

Para tal fin se desarrolló una metodología, basada en los datos de diseño del sistema, flujo, presión, composición, temperatura, etc., considerando un sistema en estado estacionario, que permite el análisis Integral Termodinámico periódicamente, se utilizo hoja de calculo Excel para las determinaciones.

Simultáneamente se entrega a la empresa los resultados experimentales y así se contribuye al buen desempeño de la misma; energético, económico y ambiental.

ABSTRACT

ABSTRACT

The Pajaritos Petrochemical Complex, was officially opened in the year 1968, with ethylene plants I Clorados I Acetaldehyde, Cryogenic, Ethylene Oxide. It is located at 7.5 kilometers from the city of Coatzacoalcos, Veracruz and since its operation, is one of the main generators of foreign exchange into the country and an important source of employment for hundreds of workers.

The power plant consists of three gas turbine model DM-5001 to 19500 kilowatts to 100 degrees Fahrenheit °F ambient tem perature, are identified as TG-1, TG-2, TG-3. Electricity is generated 13.8 KV, 60Hz.

This paper reception thesis, developed in the power generation plant, which is itself the subject of a thermodynamics analysis, and results of this study, display areas where there is power that remains largely untapped and and in which sections of the process There are higher operating costs, which will allow us to optimize.

In order to reach the main objective it was necessary to develope a methodology, based on data from system design, flow, pressure, composition, temperature, etc.. Considering a system in steady state, which allows the evaluation thermodynamics regularly and use Excel spreadsheet for determinations.

Simultaneously, the company delivers the experimental results and contributing to the good performance of the same; energy, economic and environmental.

ÍNDICE

ÍNDICE

CONTENIDO	Pág.		
DEDICATORIA	ii		
AGRADECIMIENTO			
RESUMEN	vi		
ABSTRACT	viii		
INTRODUCCIÓN	2		
CAPÍTULO I. GENERALIDADES DE PETROQUIMICA PAJARITOS	6		
1.1 Reseña histórica y ubicación	6		
1.2 Producción comercial	7		
1.3 Petroquímica pajaritos	7		
1.4 Misión, Visión, Valores y Política de Calidad de su modelo de Gestión que	o		
Implementó Pemex Petroquímica	0		
1.4.1 Misión	8		
1.4.2 Visión	8		
1.4.3 Valores			
1.5 Política de calidad	8		
1.5.1 Calidad	9		
1.5.2 Política	9		
1.5.3 Modelo de Seguridad, Salud y Protección Ambiental	9		
1.6 Ahorro de energía	9		
CAPÍTULO II. ANÁLISIS ENERGÉTICOS Y EXERGÉTICOS	12		
2.1 Estudio Termoeconómico	12		

2.2 Análisis Económico	12
2.3 Análisis termodinámico	13
2.3.1 Conceptos de Energía y Exergía	13
2.4 Primera Ley de la Termodinámica	13
2.5 Segunda Ley de la Termodinámica	14
2.6 Ecuación del Flujo constante o Ecuación General de la Energía	15
2.7 Entalpía de los Gases Perfectos	16
2.8 Entropía	16
2.9 Compresión del Aire y de los Gases	19
2.10 Análisis de la Turbina de Gas	21
2.11 Exergía	22
2.12 Exergía Física	23
2.13 Exergía Química	23
CAPITULO III. ANÁLISIS INTEGRAL ENERGÉTICO- EXERGÉTICO BASADOS	
EN EL CONTENIDO DE EXERGÍA	26
3.1 Información mínima que se requiere para efectuar este análisis	26
3.2 Análisis del sistema Turbogenerador de Ciclo Simple	26
3.3 Análisis Energético-Exergético del Compresor	27
3.4 Análisis Energético-Exergético de la Cámara de Combustión	28
3.5 Análisis Exergético Químico de la cámara de combustión	29
3.6 Análisis Energético-Exergético de la Turbina	30
3.7 Cálculo de la Exergía Química de un Compuesto	31
CAPÍTULO IV. CÁLCULO TERMODINÁMICO PRIMERA Y SEGUNDA LEY	35

CONTENIDO

4.1 Cálculo de la Potencia del Compresor	35
4.2 Cálculo del Balance Estequiométrico y Real de la Cámara de Combustión y del valor Calórico del Combustible	36
4.3 Cálculo de la Potencia de la Turbina	39
4.4 Cálculo del Flujo Exergético, Pérdidas y la Eficiencia Exergética en el Compresor	40
4.5 Cálculo del Flujo Exergético de la Cámara de Combustión, Pérdida de Exergía y Eficiencia Exergética	42
4.6 Cálculo de las Exergías Especificas y del Flujo Exergético de la Turbina	44
4.7 Análisis de los Recuperadores de Calor	46
4.8 Aplicación de las Diferentes Estructuras	47
4.9 Balance de Materia y Energía para el Recuperador de Calor (HRSG)	47
4.10 Cálculo de la Entalpía a la Salida del Gas del Economizador hsg ^{eco}	48
4.11 Cálculo de Temperaturas de Entrada y Salida del lado del Gas	49
4.12 Resultados del Cálculo de Exergías Específicas y Flujo Exergético del Recuperador de Calor HRSG.	50
4.13 Gráfica de Cargas Térmicas del Recuperador de Calor	50
4.14 Gráfica de temperaturas del Recuperador de Calor	51
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	54
BIBLIOGRAFÍA	57
ÍNDICE DE FIGURAS	
Figura 1.1 Desarrollo de la filial	6
Figura 1.2 Insumos, productos y principales usos	7

CONTENIDO

Figura 2.1	Representación esquemática de flujo	15		
Figura 2.2	Diagrama T –E	17		
Figura 2.3	Expansión reversible e irreversible	18		
Figura 2.4	Compresor de aire teórico sin ningún espacio perjudicial	19		
Figura 2.5	Ciclo simple de una turbina de gas	21		
Figura 2.6	Diagrama teórico correspondiente a las turbinas de gas	22		
Figura 3.1	Balance de Entradas y Salidas Termodinámicas	26		
Figura 3.2	Esquema del Compresor	27		
Figura 3.3	Entrada y Salida de la Cámara	28		
Figura 3.4	Diagrama de la Turbina con sus Entradas y Salidas	30		
Figura 4.1	Entrada y Salida de la Cámara	36		
Figura 4.2	Diagrama de la Turbina con sus Entradas y Salidas	39		
Figura 4.3	Diagrama de Compresor con sus Entradas y Salidas	40		
Figura 4.4	Entrada y Salida de la Cámara	42		
Figura 4.5	Diagrama de la Turbina con sus Entradas y Salidas	44		
Figura 4.6	Esquema del Recuperador de Calor	47		
ÍNDICE DE	TABLAS			
Tabla 4.1	Exergías específicas y flujos exergéticos	50		
Tabla 4.2	Eficiencias energéticas y exergéticas	51		
Tabla 4.3	Exergías específicas y flujos exergéticos del Turbogenerador	51		
Tabla 4.4	Índices del Turbogenerador	52		
Nomenclatura				

Et,ct Exergía,[J], exergia especifica ,[J/mol]°C.

Δ_{Gt}	Energía libre de Gibas, [J].		
H,h,	Entalpia,[J], entalpia, especifica [J.mol].		
°m	Flujo másico.		
Ν	Número de moles.		
Р	Presión,[KPa].		
PCS	Poder calorífico Superior del combustible [kJ/kg].		
Q _{bc}	Valor calórico del combustible [kJ/kg].		
Q	Calor,[kJ].		
R	Constante universal de los gases [8.3143 KJ/kmol ºk].		
S,s	Entropía, [KJ/k], Entropía Especifica [J/kg k].		
Т	Temperatura [ºK].		
U,u,	Energía Interna [J], Energía Interna Especifica ,[J/kg].		
<i>V,v</i>	volumen [m³], volumen especifico ,[m³/kg].		
W	Trabajo [w].		
Xi	Fracción molar del componente.		
Y	Coeficiente de fugacidad.		
∨j, ∨ <i>k</i>	Componentes estequiométricos de reactivos y productos de una		
	reacción química.		
ANEXO 1. Entalpías y Exergías de formación.			

xiv

INTRODUCCIÓN

INTRODUCCION

INTRODUCCIÓN

El presente trabajo se realiza en el Complejo Petroquímico Pajaritos⁴, siendo este el único dentro de PEMEX Petroquímica que cuenta con un sistema de cogeneración donde no solo genera su propia energía eléctrica, sino que también portea a través de la red de la Comisión Federal de Electricidad (CFE) a otros centros industriales, tanto de PEMEX Gas y Petroquímica Básica como de PEMEX-Refinación y PEMEX Exploración y Producción (PEP).

Dentro del Programa Nacional de Energía y Medio Ambiente implementado por el gobierno federal, se considera la disminución de impacto ambiental a través del uso eficiente de la energía. PEMEX participa en este con su programa de salud, seguridad y protección ambiental SSPA. A través del programa uso eficiente y ahorro de energía (Proner)⁵.

Aplicando dicho programa a la recuperación de calor de los gases de escape de los turbogeneradores, en la planta de cogeneración de Energía de Petroquímica Pajaritos cumple con el citado programa y al mismo tiempo produce alrededor de 2,160 toneladas de vapor y 792,000 Kilowatts diariamente. Anteriormente las toneladas de vapor se producían en las calderas y los gases de escape se emitían a la atmósfera.

Para la realización de este análisis a la planta de cogeneración de energía eléctrica, se tomo muy en cuenta el antecedente⁵ que permitió la dualidad de la operación de un ciclo simple (sin recuperador de calor), al aprovechamiento de la energía térmica de los gases de escape, consistiendo este en la instalación de recuperadores de calor, para producir 45 toneladas por hora de vapor de 45 kilogramos sobre centímetro cuadrado, en dos de los tres turbogeneradores, el vapor generado lo distribuye a las plantas de proceso, elevando la eficiencia térmica en el uso del gas de 20.2 % a mas de 70%.

Los turbogeneradores a gas modelo MS-1500 de 19500 Kilowatts a 38 grados centígrados de temperatura ambiente, se identifican como TG-1, TG-2 y TG-3, generan energía eléctrica a 13.8 KV, 60 Hz;.

Se cuenta con la opción de alimentarlos con gas combustible para obtener fuego suplementario y duplicar la producción de vapor por recuperador de calor. En

INTRODUCCION

caso de falla de estos, se cuenta con un sistema que automáticamente desvían los gases de escape, permitiendo la operación continua de los turbogeneradores en ciclo abierto.

Los tres turbogas, como ciclo simple tienen la capacidad de generación real de 54,000 Kilowatts con una eficiencia de diseño de 27.7, real de 20.2% y descarga a la atmósfera de gases de combustión de escape con 487 grados centígrados.

Con tales antecedentes presentados este trabajo presenta el análisis integral energético, basado en la primera y segunda Ley de la Termodinámica, que permite conocer como se utiliza la energía suministrada a un proceso, base de la formación de los costos de operación de un proceso. Aunque directamente no refleja una reducción del impacto al ambiente, el análisis permite visualizar las áreas de oportunidad para hacer un uso más eficiente de la energía en un proceso, llámese térmico o químico, y con ello, el consumo del combustible utilizado para proporcionar energía al sistema disminuye, el flujo de los gases de combustión y el efecto térmico al ambiente de los mismos decrece y se lleva a cabo una mejor dispersión de los gases en la atmósfera.

Actualmente en la industria química y petroquímica los costos de operación se obtienen a través de un balance de materia, un balance de energía y balance económico.

Siendo el objetivo general de este trabajo analizar y calcular que las energías y exergías de operación aplicando los principios de la Termodinámica, tomando las siguientes consideraciones:

De los manuales del diseño de la cogeneración los parámetros establecidos de la operación, potencia de los equipos, consumo de gas combustible, relación de flujo aire/flujo de combustible, eficiencia adiabática y mecánica del compresor y la turbina de gas, así como la de generación y las variables, presión, temperatura, la composición de las corrientes de entradas y salidas.

El proyecto de cogeneración tuvo un costo de 12.3 mil millones de dólares mediante el cual la pretensión original buscaba beneficios económicos estimados en 13.3 mil millones de dólares anuales y la disminución de emisiones atmosféricas de 92 mil toneladas anuales de bióxido de carbono, permitiendo el ahorro de 42 millones

INTRODUCCION

752 mil 265 metros cúbicos de gas al año y producir 633,500 toneladas de vapor al año y enviar a otros centros de PEMEX ,131 millones 400 mil Kilowatts al año, esto como resultado de la recuperación de calor de los gases de escape de los turbogeneradores.

De los 792,000 Kilowatts que se producen diariamente, 360,000 Kilowatts se envía a la red de la CFE para ser entregado a otras instalaciones de Petróleos Mexicanos 432,000 kilowatts es para consumo propio.

A mas de tres años del inicio de sus operaciones, los resultados que arroja el funcionamiento son ampliamente bondadosos: en materia ambiental se ha disminuido la emisión de bióxido de carbono a la atmósfera en un volumen de 103 mil 143 toneladas, en promedio, se ha ahorrado un total de 48 millones 463 mil 954 metros cúbicos de gas combustible, equivalentes a 290 mil 950 barriles de petróleo y se ha enviado energía eléctrica a través de la CFE por un total de 118 millones 370 mil 24 Kilowatts.

Dicho de otra manera y traducido en números, ha permitido el ahorro anual de 204 millones 433 mil pesos, considerando solo un periodo de aproximadamente de año y medio, de cuya cifra 137 millones 240 mil 744 pesos correspondieron al ahorro por las anteriores adquisiciones de gas y 67 millones 192 mil 602 pesos por concepto de porteo de energía a la comisión Federal de Electricidad.

Las variables de investigación que tenemos que son las siguientes

1.- ¿Cual es el consumo actual de combustible?. Que permite ahorros sustanciales de energía.

2.- La Temperatura Adiabática de salida de los gases de la cámara de combustión esta dentro del rango que nos permite la disminución de emisión de sustancias toxicas a la atmósfera como CO2, NOx, etc.,

Las hipótesis de investigación son las siguientes:

1.- ¿Que potencial de ahorro se puede obtener mediante un análisis integral energético? De combustible y energía.

2.- ¿Que índice se obtendrá entre los Kw. Generados y el Poder Calorífico Superior combustible?

CAPÍTULO I

CAPÍTULO I. GENERALIDADES DE PETROQUÍMICA PAJARITOS.

1.1 Reseña Histórica y Ubicación.

Es indudable que el petróleo ha sido el principal impulsor de la economía y contribuye al progreso general de país.

Es la industria petroquímica el principal motor de la economía del sur de Veracruz.

Corría el año de 1967, cuando inicia operaciones el complejo Petroquímico Pajaritos, ubicado como el principal centro productor de los derivados clorados para abastecer el mercado nacional.

Petroquímica pajaritos⁶, esta ubicada a 7.5 kilómetros de la ciudad de Coatzacoalcos, Veracruz Figura. 1, esta asentada en una extensión de 47 hectáreas en terrenos que fueron expropiados al Ejido Mundo Nuevo y las necesidades dieron origen al asentamiento de otras industrias que vinieron a sumarse al corredor industrial.

Junto con Petroquímica Morelos y la Cangrejera siguen siendo considerados como el Emporio Petroquímico más grande de América latina.

DESARROLLO DE LA FILIAL

Ubicación del mercado nacional del monómero de cloruro de vinilo



Figura 1.1 Desarrollo de la filial.

Comercialización

1.2 Producción Comercial.

Los productos obtenidos de Petroquímica Pajaritos se utilizan en las industrias diversas como son resinas sintéticas, plastificantes, pinturas, lacas, barnices, agroquímicos, productos farmacéuticos y químicos.

Sus principales líneas de negocios están basadas en el Gas Etano y Cloro así como productos como Etileno, Monómero de Cloruro de Vinilo, Oxido de Etileno y Ácido Muriático además de Vapor y Energía Eléctrica (Figura 1.2).



INSUMOS, PRODUCTOS Y PRINCIPALES USOS

Figura. 1.2 Insumos, productos y principales usos.

1.3 Petroquímica Pajaritos.

Historia; petroquímica pajaritos generador de divisas desde 1967 y una importante fuente de empleos para cientos de trabajadores⁶.

Antecedentes y Desarrollo; gracias al potencial petrolero de la zona sur de Veracruz, con los descubrimientos de yacimientos desde diciembre de 1901, por parte de la entonces compañía inglesa Pearson and Limited, a través de su filial conocida como la compañía el Águila, explotaron los mantos durante décadas.

Hasta que en marzo de 1938 fue decretada la expropiación petrolera y la industria pasó a manos de la nación por el bien del país y de los mexicanos. Fue en la década de los 60´s, estando ya operando la refinería "Lázaro Cárdenas del Rió" en

el municipio de Minatitlán. Las necesidades de procesamiento del petróleo y sus derivados dieron origen a la Industria Petroquímica.

Primero fue el Complejo Petroquímico de Cosoleacaque en 1962, considerado entonces el principal productor de Amoníaco en América Latina. Siguió después la unidad Petroquímica la Venta en el Estado de Tabasco en 1963.

1.4 Misión, Visión, Valores y Política de Calidad de su Modelo de Gestión que Implementó Pemex Petroquímica.

1.4.1 Misión

En Petroquímica Pajaritos, somos un organismo subsidiario de Petróleos Mexicanos que elabora, comercializa y distribuye productos Petroquímicos para satisfacer la demanda del mercado y maximizar su valor económico a través de sus empresas filiales y centros de trabajo, con calidad, seguridad, respeto al medio ambiente, a su entorno social y promoviendo el desarrollo integral a su personal.

1.4.2 Visión.

Ser una empresa de clase mundial, líder en el mercado, rentable, confiable, flexible y competitiva, reconocida por la calidad de sus productos; con una arraigada cultura de servicio al cliente, respetuosa del medio ambiente, cuidadosa de sus relaciones con la comunidad y promotora del desarrollo integral de su personal.

1.4.3 Valores.

- Actitud sobresaliente de servicio al cliente
- Innovación y mejora continúa
- Desarrollo sustentable
- Generación de valores (rentabilidad)
- Integridad
- Seguridad

1.5 Política de Calidad.

Satisfacer los requisitos acordados con nuestros clientes, cuidando el medio ambiente, la integridad física de las instalaciones, el desarrollo y salud del personal, con una actuación ética, transparente y de mejora continua.

1.5.1 Calidad.

En petroquímica pajaritos, la calidad se ha convertido en un instrumento preventivo aplicado a lo largo de la cadena que forman esos procesos, llegando a ser hoy una verdadera herramienta de gestión.

1.5.2 Política.

Ser una empresa eficiente y competitiva que se distinga por el esfuerzo y compromiso de sus trabajadores con la Seguridad, Salud y Protección Ambiental.

1.5.3 Modelo de Seguridad Salud y Protección Ambiental.

- La Seguridad, Salud y Protección Ambiental son valores con igual prioridad que la producción, el transporte las ventas, la calidad y los costos.
- Todos los incidentes y lesiones se pueden prevenir.
- La Seguridad, Salud y Protección Ambiental son responsabilidad de todos y condiciones de empleo.
- En PEMEX nos comprometemos a continuar la protección y el mejoramiento del medio ambiente en beneficio de la comunidad.
- Los trabajadores estamos convencidos de que la Seguridad, Salud y Protección Ambiental son en beneficio propio y nos motivan a participar en este esfuerzo.

1.6 Ahorro de Energía.

La Secretaria de Energía (SENER)⁵ otorgo cuatro Premios Nacionales de Ahorro de Energía Térmica 2005 en la categoría de Modernización de sus instalaciones a plantas de Petróleos Mexicanos y sus organismos subsidiarios, entre ellos el complejo Petroquímico Pajaritos.

Con ello PEMEX desarrolla actualmente el Programa Institucional de Uso Eficiente de Energía (Proener) cuya ejecución ha permitido, la disminución de costos asociados a los energéticos, mediante el incremento de la competitividad y el valor económico agregado en cada centro de trabajo, además de coadyuvar <u>a la reducción de las emisiones contaminantes a la atmósfera, principalmente los gases de efecto invernadero (CO₂).</u>

El objetivo principal de los premios, otorgados a través de la Comisión Nacional de Ahorro de Energía (CONAE), es estimular la búsqueda de la máxima eficiencia energética en la industria y el transporte, por medio de la aplicación de mejores practicas, innovación, uso de nuevas tecnologías, así como la implementación de modernos sistemas operativos.

La puesta en marcha del proyecto de Cogeneración a partir de febrero del 2005 ha permitido la reducción sustancial de sus descargas de bióxido de carbono a la atmósfera, del orden de las 90 mil toneladas anuales disminuyendo con ello las afectaciones al medio ambiente y a la capa de ozono del planeta cumpliendo con el Protocolo de Kyoto.

CAPÍTULO II

CAPÍTULO II. ANÁLISIS ENERGÉTICOS Y EXERGÉTICOS.

2.1 Estudio Termoeconómico.

Un análisis que combina la primera con la segunda ley de la termodinámica con un análisis económico, deriva a un estudio de termoeconómico, que usa la energía disponible (exergía) para propósitos de costos, proporcionando una herramienta de gran alcance para el estudio y la optimización sistemáticos de los sistemas de energías complejos, su meta es combinar matemáticamente, en un solo modelo, la primera y asegunda ley del análisis termodinámico con los factores económico.

Según sea el objetivo del análisis en cuestión, como la optimización de la operación del sistema energético o la asignación de costos a sus flujos internos y productos. Parten del conocimiento de que es la exergía y no la energía, la propiedad que expresa la utilidad termodinámicas de los productos, por lo tanto la asignación de costos debe basarse en ello.

Un estudio termoeconómico completo debe considerar un análisis detallado de la exergía del sistema, un análisis económico, un análisis de costos de exergía y una evaluación termoeconómica de cada componente del sistema.

En términos generales, los objetivos de un análisis integral termoeconómico; son: identificar la localización, la magnitud y fuente de pérdidas termodinámicas reales, energía no utilizada en un sistema de energía, destrucción de exergía.

Calcular los costos asociados con la destrucción de la exergía y sus perdidas, facilitar estudios de factibilidad y optimización durante la fase de diseño de un sistema de energía, así como estudios para mejorar un proceso existente. Auxiliar en la elaboración de tomas de decisión concerniente que la operación y mantenimiento de plantas. Compara técnicamente alternativas tecnológicas de un proceso.

2.2.- Análisis Económico.

El análisis económico permite conocer como se generan y fluyen los costos a través de un proceso térmico o químico, el costo total de los productos debe ser igual a los costos de las materias primas, el costo de la energía consumida en el proceso, más los costos asociados a la operación, mantenimiento, administración y capital invertido.

Para efectuar el análisis económico es necesario conocer o estimar los costos involucrados en cada una de las áreas que integran una planta de proceso químicos o planta térmica estos costos son:

CAPÍTULO II

- Costos fijos: depreciación, amortización, impuestos, seguras, intereses, manteamiento, administración y capital.
- Costos variables: materiales, mano de obra, transporte, almacenamiento, combustible, energía eléctrica, la parte variable del manteamiento y la administración.

Uno de los factores más importantes que afecta la selección del diseño de un proceso químico o sistema térmico es el costo del producto final, sin embargo, el precio del mercado de un producto, es, en general, afectado no solo por el costo de producción y los beneficios deseados, sino por otros factores, como la oferta y la demanda, el suministro, la competencia, la regulación y los subsidios.

2.3.- Análisis Termodinámico.

2.3.1.- Conceptos de Energía y Exergía.

Los conceptos de energía y exergía se pueden expresar en los siguientes términos.

Energía¹³. La capacidad para producir un efecto se denomina energía. Aparece en diversas formas y puede transformarse de una en otra. Es movimiento o la habilidad de producir movimiento.

Exergía⁹ es el máximo trabajo que se puede realizar cuando el sistema cerrado evoluciona hasta alcanzar el equilibrio con el ambiente. Es trabajo o la habilidad de producir trabajo.

Las leyes de termodinámica pueden ser formuladas como: la energía siempre se conserva en un proceso (primera ley). La exergía siempre se conserva en un proceso reversible, pero siempre es consumida en un proceso irreversible (segunda ley).

2.4. Primera Ley de la Termodinámica.

El principio de la conservación de la energía¹² constituye la primera ley de la Termodinámica, la cual dice que la energía no puede crearse ni destruirse sino únicamente convertirse de una forma en otra. Existen solamente tres manifestaciones de la energía consideradas en la primera ley, a saber: calor, energía interna y trabajo. Aplicada (a los cambios que ocurren en los sistemas cerrados, la primera ley puede escribirse de la siguiente manera: *Calor absorbido por el sistema = Aumento de su energía interna + Trabajo efectuado por el sistema.*

CAPÍTULO II

Todas las cantidades que intervienen en esta igualdad deben medirse con la misma unidad.

Un concepto relacionado con el anterior es el de que la masa no puede destruirse, sino solamente transformarse de una forma en otra, lo cual constituye la llamada ley de la conservación de la masa. Según la teoría de la relatividad de Einstein, la masa y la energía se pueden transformar una en otra.

2.5 Segunda Ley de la Termodinámica.¹³

La primera ley establece una reacción que debe satisfacerse en toda transformación de energía. La segunda Ley proporciona una información referente a la posibilidad de transformar una forma determinada de Energía en trabajo mecánico. Esto es lo que se denomina la utilidad de la energía. La segunda ley de la Termodinámica ha sido expresada de varias maneras, y la establecida por Clausius es: resulta imposible para una máquina automotriz sin cooperación de un agente externo, enviar calor de un cuerpo a otro a temperatura más elevada. De esta forma la segunda ley puede formularse directamente partiendo de la idea de temperatura.

En todos los procesos naturales parece existir una irreversibilidad, es decir, una tendencia universal a que la energía degenere en otras formas menos útiles para la transformación, en otras palabras, a una degradación inevitable. El trabajo puede transformarse en calor por fricción, y la electricidad asimismo en calor por efecto Ohm en un conductor. Incluso cuando intenta convertir una forma de energía de alta calidad en otra, se produce una transformación parcial, inevitable en otras formas de baja calidad. GRIFFITHS, en su obra Thermal Measurement of Energy, dice lo siguiente:"Cada Vez que alteramos nuestro presupuesto de energía tenemos que pagar comisión; este tributo nunca puede ser completamente recuperado y debe considerarse no como una destrucción, sino lanzado a la pila de desecho del Universo"

La segunda Ley afirma que el calor no pasa automáticamente de un cuerpo frío a otro más caliente. El calor puede ser obligado a pasar a un nivel más alto, como en el caso de una máquina frigorífica, pero únicamente a base de aplicarle un <<agente externo>> para accionar la máquina. Un motor térmico actúa dejando pasar calor aun nivel más bajo, desde un cuerpo caliente a otro más frío, no por conducción directa de uno a otro, sino haciendo que un medio tome alternativamente calor de un cuerpo caliente y lo ceda a otro frío. De esta forma el medio experimenta dilataciones y

contracciones en las cuales su presión en conjunto es más grande durante la dilatación que durante la contracción, y, de esta forma, parte del calor que pasa a un nivel más bajo a través del motor se convierte en trabajo mecánico.

2.6 Ecuación del Flujo Constante o Ecuación General de la Energía.¹³

La figura 2.1 representa un proceso de flujo constante para un sistema abierto,



Figura 2.1 Representación esquemática de flujo

Es decir, en el que tanto la masa como la energía pueden atravesar los límites. En la figura 2.1 pueden observarse las distintas formas de energía que intervienen sus símbolos y signos algebraicos, debiendo recordar que dentro del sistema abierto puede existir un amplio intercambio de energía. Consideremos el sistema constituido por un motor automotriz con la entrada formando el primer punto-estado y el tubo de escape como el segundo. Dentro del sistema existe un intercambio de energía química en el combustible, energía interna de los gases, energía cinética de las partículas en movimiento, flujo de energía, así como también transmisión de calor y trabajo útil en el eje.

En la figura 2.1 prevalece el flujo constante si no existe ninguna variación de flujo de masa o de energía con el tiempo a través de los límites del sistema. Las condiciones reinantes dentro del sistema pueden experimentar variaciones cíclicas o no cíclicas. Como consecuencia, la masa total que entra en el sistema por unidad de tiempo es igual a la masa total saliente por unidad de tiempo, y la energía total que entra en el sistema es igual a la energía total que sale del mismo.

La energía química, cuando se halla presente, se incluye como energía interna.

Es aplicable a cualquier medio en el caso de un proceso o evolución de flujo constante, no solamente a las máquinas rotativas, tales como ventiladores, bombas y compresores centrífugos, sino también a las máquinas de pistón tales como las máquinas de vapor y los compresores de émbolo.

El flujo constante requiere que la masa salga del sistema abierto a la misma velocidad con que entra, o sea $m_1 = m_2$

$$m_1 = \frac{A_1 V_1}{v_1} m_2 = \frac{A_2 V_2}{v_2}$$
(2.1)

En donde

 $A = \text{sección recta del camino del flujo., en m}^2$

V= velocidad media en m/seg.

u = volumen específico del medio, en m³ kg.

2.7 Entalpía de los Gases Perfectos.¹³

La expresión que define la entalpía, es:

$$H = u + Pv \tag{2.2}$$

De donde el paso de un estado cualquiera 1 a otro estado 2 producirá una variación de entalpía.

La fórmula 2.2 es válida para cualquier medio. Aplicando las relaciones propias de un gas perfecto se obtiene una expresión más sencilla, la cual únicamente es cierta para un gas perfecto. Sustituyendo en la fórmula $P_1V_1 = mRT_1 y P_2V_2 = m RT_2$, resulta. Puesto que Si C_p se considera entre amplios límites de temperatura,

$$H_2 - H_1 = mc_p \left(T_2 - T_1 \right)$$
(2.3)

$$H_2 - H_1 = m \int_1^2 c_p dt$$
 (2.4)

La relación precedente demuestra que la entalpía de un gas perfecto es función solamente de la temperatura, como sucede con su energía interna. **2.8 Entropía.**¹³

CLAUSIUS definió esta propiedad termodinámica de la siguiente manera: <<Si en una evolución reversible cualquiera un elemento de calor absorbido (positivo o negativo) se divide por la temperatura absoluta a la cual se toma, el resultado es igual a la correspondiente variación de entropía.» Expresado matemáticamente para una evolución reversible,



Entropía, s

Figura 2.2 diagrama T -E

En donde $(s_2 - s_1)$ representa la variedad de entropía y los restantes símbolos conservan su significado propio. Para una evolución reversible.

$$dQ = Tds \tag{2.5}$$

$$s_2 - s_1 = \int_1^2 T ds \tag{2.6}$$

Si la temperatura τ permanece constante durante la transmisión reversible de calor $_1Q_2 = T$ (s₂-s₁). Expresado en palabras, la fórmula (2.6) dice que el calor absorbido o expulsado en la evolución desde el estado-punto 1 al estado-punto 2, es igual a la temperatura absoluta T multiplicada por la variación de entropía. La figura 2.2 representa la fórmula 2.2 y muestra un uso del concepto de entropía, esto es, el de una coordenada.

La variación de entropía $(s_b - s_a)$ aparece en la figura 2.2 como $(s_b - s_a) = {}_1Q_2$ para esta evolución reversible a temperatura constante. Cuando se dibuja a escala, la superficie a-1-2-b-a representa el calor transmitido. La entropía es una propiedad característica de todos los medios, toda vez que su valor es invariable para un medio determinado en un estado punto dado, independiente de la forma como se alcanzó dicho estado-punto. Por este motivo, los valores de la entropía pueden calcularse y ser tabulados.

La entropía puede emplearse con otras muchas propiedades (T, P, V, U, y H) para la representación gráfica de variaciones de estado. Los diagramas más corrientes son los de temperatura-entropía y de entalpía-entropía.



Figura. 2.3 Expansión reversible e irreversible.

Este último se denomina diagrama de Mollier. Es de suma utilidad cuando se trabaja con medios cuyas condiciones de trabajo son tales que se pasa de estado 'líquido al de vapor y viceversa (vapor de agua, amoníaco y Freon).

En una evolución adiabática reversible la entropía es constante y se dice que la evolución es isentrópica. Una expansión o compresión isentrópica sirve como modelo de perfección, debido a que en ella se han supuesto nulas todas las pérdidas de transmisión de calor, así como también los efectos producidos por los rozamientos.

La figura 2.3 representa una expansión isentrópica entre los puntos 1 y 2 sobre el plano entalpía-entropía y también sobre el plano temperatura- entropía. Esta expansión referente al caso del flujo constante que pasa por una tobera demuestra que se ha producido la máxima variación de entalpia, $h_1 - h_2$, y por la ecuación del flujo constante esta energía debe aparecer en alguna otra forma, como por ejemplo energía cinética o trabajo. Si la evolución es irreversible desde 1 a 2', la entropía aumenta tal como representa ($s_4 - s_3$). La variación de entalpía, $h_1 - h_2$, por el camino irreversible es menor que por el reversible, y como consecuencia en dicha expansión se realiza menos trabajo. En el supuesto de que, en el plano Ts, figura 2.3, T₂ sea la temperatura más baja a la cual es utilizable la energía, la superficie situada en este plano bajo T₂ representa energía no utilizable. Debido a la irreversibilidad de la evolución esta superficie viene incrementada por el área T₂ ($s_4 - s_3$) por cada kilogramo de medio.

La variación de entropía puede calcularse por la fórmula 2.2, tanto si la evolución es reversible como irreversible, debido a que dos evoluciones reversibles siempre pueden reemplazar a una irreversible. En la figura (2.3) la variación de entropía de 1 a 2' por el camino irreversible es igual a la variación de entropía por los dos caminos reversibles 1 a 2 (expansión reversible) y 2 a 2' (transmisión reversible de calor).

2.9 Compresión del Aire y de los Gases¹³

Compresor ideal de émbolo. La palabra «ideal» supone que no existan pérdidas por rozamientos, que el gas comprimido sea perfecto, y que no haya espacios perjudiciales en el cilindro. En la figura 2.4 se representa compresor de esta clase.



Figura. 2.4 Compresor de aire teórico sin ningún espacio perjudicial

La superficie sombreada 1-2-3-4-1 es el trabajo que hay que efectuar para comprimir y descargar un volumen V₁ de aire libre; V₁ es también el desplazamiento de este compresor ideal de simple efecto, y se representa por la longitud del segmento rectilíneo 4—1.
El trabajo efectuado durante el ciclo es la suma algebraica de los trabajos realizados en este ciclo.

En donde

m = peso del aire comprimido

R = constante del gas individual

Tratándose de compresores de aire de este tipo es preferible trabajar con presiones de admisión y de escape que con temperaturas. Para un proceso isentrópico

$$W = \frac{K}{K-1} * P_1 V_1 * \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\left(\frac{K-1}{K} \right)} - 1 \right]$$
(2.7)

En donde

 P_1 = presión absoluta de admisión, KPa

 P_2 = presión absoluta de escape, kPa

k = Cp/Cv = 1,4 para el aire y gases biatómicos.

 $V_1 = mv_1$ = volumen de aire libre aspirado, o producto del peso por el volumen especifico en el punto $1, m^3$

T= Temperatura absoluta, K

La fórmula 2.7 es la expresión del trabajo isentrópico de comprimir un Volumen V_1 desde la presión P_1 a la presión P_2 , y no está limitado a un ciclo, puesto que V_1 = m v_1 , esto es, el producto de un peso cualquiera por un volumen específico cualquiera. Cuando en la fórmula (2.7) se sustituyen valores reales resulta una cantidad negativa, lo cual significa que se ha efectuado trabajo sobre el medio comprimido. La fórmula (2.7) también puede escribirse bajo la forma siguiente:

$$W = \frac{K}{K-1} * R T_1 * \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\left(\frac{K-1}{K} \right)} - 1 \right]$$
(2.8)

Las fórmulas (2.7) y (2.8) son las expresiones generales del trabajo de un compresor de un solo escalonamiento, y con compresión isentrópica. Como quiera que todas las condiciones se pueden prefijar, es posible confeccionar tablas del trabajo o potencia requeridos para comprimir un gas cualquiera entre límites de presión

determinados. Estos valores se encuentran en los manuales en el apartado «potencia isentrópicas. Las fórmulas 2.7 y 2.8 son aplicables a unidades de diferentes velocidades y tamaños.

2.10 Análisis de la Turbina de Gas¹³

En el año 1873 BRAYTON concibió la idea del presente ciclo simple de la turbina de gas, el cual es la base para el estudio de esta clase de motores. Inspeccionando la figura 2.5 se puede observar que el ciclo está formado por compresión isoentrópica (1 a 2), adición de energía a presión constante (2 a 3), expansión isoentrópica (3 a 4) y cesión de energía a presión constante (4 a 1).



Figura 2.5 Ciclo simple de una turbina de gas.

La figura 2.6 (a) representa el trabajo del compresor ideal; la (b) el de la turbina ideal, y la (c) la diferencia Útil. Según esto, para el compresor

$$W = h_1 - h_2 = c_p (T_1 - T_2)$$
(2.9)

En donde

W = trabajo kJ/kg de caudal de aire

h =entalpia kJ por kg de caudal de aire.

Para la turbina

$$W = h_3 - h_4 = c_p (T_3 - T_4)$$
(2.10)

El trabajo resultante del ciclo ideal es la suma algebraica de los trabajos del compresor y de la turbina. Para el compresor los valores obtenidos son negativos, y positivos para la turbina. Por lo tanto, la suma de los trabajos según el ciclo 1-2-3-4-1 puede obtenerse por varias combinaciones.



Figura. 2.6. Diagrama teórico correspondiente a las turbinas de gas.

2.11 Exergía.¹⁶

La exergía total de un sistema³ E_t , (W), puede ser dividida en cuatro componentes: exergía física E_{PH} , exergía cinética E_{KN} , exergía potencial E_{PT} y exergía química E_{CH} :

$$E_{t} = E_{ph} + E_{kn} + E_{pt} + E_{ch}$$
(2.11)

Debido a que la exergía E es una propiedad extensiva, existen casos donde es conveniente expresarla por unidad de masa o unidad molar. La exergía especifica por unidad de masa e, (J/kg), está dada por:

$$e_{t} = e_{ph} + e_{kn} + e_{pt} + e_{ch}$$
(2.12)

Cuando se evalúa un sistema relativo al ambiente, la energía cinética y la energía potencial son, en principio, totalmente convertibles en trabajo cuando el sistema es llevado a las condiciones del ambiente de referencia, esto corresponde a la exergía cinética y exergía potencial

Si el sistema se considera en equilibrio químico, cinético y potencial con el ambiente de referencia $(e_{ch} + e_{kn} + e_{pt} = 0)$ entonces la exergía física es el máximo trabajo teórico útil que se puede obtener al pasar el sistema de un estado de

temperatura T (K) y presión P (Pa) a un estado de referencia T_o y P_o. (298.15 K y 101,325 Pa).

.2.12. Exergía Física.^{2,3,15,}

La exergía física de un sistema esta dada por la expresión:

$$E_{ph} = (U - U_0) + p_0(V - V_o) - T_0(S - S_o)$$
(2.13)

Donde: *U*, *V* y *S* son la energía interna, volumen y entropía de un sistema en un estado específico y U_0 , V_0 y S_0 son los valores de las mismas propiedades en un estado de referencia determinado.

Análogamente la ecuación 2.13 puede ser escrita como:

$$E_{ph} = (H - H_0) - T_0 (S - S_o)$$
(2.14)

donde *H* es la entalpía del sistema en un estado especifico y H_o es la entalpía del sistema en un estado de referencia. Reescribiendo la ecuación 2.14 por unidad molar o másica se tiene que:

$$e_{ph} = (h - h_0) - T_0(s - s_o)$$
(2.15)

2.13 Exergía Química.^{3,8,15}

La exergía química de un sistema se representa como:

$$E_{CH} = \sum_{i=1}^{n} (u_i - u_{0_j}) N_i$$
(2.16)

Donde N_i es el número de moles del sistema y $\mu_i, \mu_{0,i}$ se define como el potencial químico del sistema a un estado específico y en un estado de referencia determinado.

Representando la exergía química por unidad de moles o unidad de masa,

CAPÍTULO II

$$e_{ch} = \sum_{i=1}^{n} (u_i - u_{0j})$$
(2.17)

El cálculo de la exergía química de los gases que forman parte de la atmósfera de referencia puede obtenerse a partir de la siguiente formula:

$$e_{ch} = RT_0 \ln \frac{p_0}{p_{00}}$$
(2.18)

Donde: P_{00} es la presión parcial del componente en el estado de referencia.

Para componentes puros que no forman parte del estado de referencia la exergía química puede obtenerse de la siguiente manera:

 ΔG_0 puede ser calculada de la siguiente relación: ¹⁶

$$\Delta G_0 = \sum_{prod} v_k \Delta g_k - \sum_{reac} v_j \Delta g_j$$
(2.19)

Donde ΔG_0 es la energía de formación de Gibbs.

Donde v_k, v_j y $\Delta g_k, \Delta g_j$ son los coeficientes estequiométricos de la ecuación de reacción y la energía de formación de Gibbs respectivamente, *j* es el coeficiente para los reactivos y *k* es el coeficiente de los productos.

La exergía química para mezclas de gases puede ser calculada a partir de la siguiente ecuación:¹

$$e_{ch} = \sum_{i} x_{i} e_{chi} + RT_{0} \sum_{i} x_{i} \ln y_{i} x_{i}$$
(2.20)

Donde x_i es la fracción molar del componente *i*, *R* es la constante molar de los gases y γ_i es el coeficiente de actividad. Para mezclas ideales el coeficiente de actividad es igual a 1.

CAPÍTULO III

CAPÍTULO III ANÁLISIS INTEGRAL ENERGÉTICO- EXERGÉTICO BASADOS EN EL CONTENIDO EXERGÍA.

3.1 Información mínima que se requiere para efectuar este análisis

- Diagrama de flujo del proceso
- Corrientes de entrada y salida
- Condiciones de operaciones y composición de las corrientes
- Balances de materia, energía y exergia

3.2 Análisis del Sistema Turbogenerador de Ciclo Simple

La figura 3.1 muestra el turbogenerador integrado con sus entradas y salidas termodinámicas.



Figura 3.1 Balance de Entradas y Salidas Termodinámicas

$$m_a * Cp_a * T_a + m_c (Cp_c * T_c + V_c) = Ne + (m_a + m_c) Cp_{gpc} * T_{gpc}$$
(3.1)

3.3 Análisis Energético-Exergético del Compresor.



Figura 3.2 Esquema del Compresor

Efectuando un balance de materia en el compresor figura 3.2

$$m_1 = m_2 \tag{3.2}$$

Efectuando un balance de energía en el compresor

$$h_1 = m_a * C p_a * T_1 \tag{3.3}$$

$$h_2 = m_a * C p_a * T_2 \tag{3.4}$$

$$H_1 - H_2 = m_a * C p_{a \, prom} * (T_1 - T_2) \tag{3.5}$$

$$-w = h_2 - h_1$$
 (3.6)

Efectuando un balance de exergía en la figura 3.2

$$E_{p} = E_{2} - E_{1}$$
(3.7)

$$E_F = W \tag{3.8}$$



3.4 Análisis Energético-Exergético de la Cámara de Combustión.

Figura 3.3 Entrada y Salida de la Cámara

Efectuando balance de materia en la cámara de acuerdo al esquema de la figura 3.3

$$m_4 = m_2 + m_3 \tag{3.9}$$

Efectuando un balance de energía m la cámara figura 3.3

$$m_4 h_4 = m_2 h_2 + m_3 h_3 \tag{3.10}$$

La energía cedida por el gas combustible estará compuesta por la energía absorbida por el aire para elevar su temperatura de entrada hasta la temperatura de combustión mas la energía que se llevan los gases de combustión y las pérdidas de energía en la cámara por lo tanto

$$m_2h_2 + m_3h_3 = m_4h_4 + \Delta p \tag{3.11}$$

$$H_2 + H_3 = H_4 + \Delta p \tag{3.12}$$

La energía del gas combustible se compone de su poder calorífico superior (PCS) y del flujo del gas combustible; $h_3=m_3*PCS$.

Efectuando un análisis de exergia a la figura 3.3 se obtienen las siguientes relaciones.

$$E_p = E_4 \tag{3.13}$$

Exergia de los productos

$$E_F = E_2 + E_3 (3.14)$$

CAPÍTULO III

Exergia de combustible

El proceso de combustión con lleva a la destrucción de exergia derivada de la reacción química, siendo esta igual a la exergia proporcionada por el combustible menos la exergia de los gases de combustión.

$$E_d = (E_2 + E_3) - E_4 \tag{3.15}$$

Con los valores de exergia obtenidos para los productos y el combustible se pudo determinar y la eficiencia exegética

$$\epsilon = \frac{E_4}{E_2 + E_3} \tag{3.16}$$

3.5 Análisis Exergético de la Cámara de Combustión.

Cuando se lleva a efecto una transformación química, que origina que cambie la composición de las corrientes , es necesario considerar la exergia química como es el caso de la cámara de combustión , donde se mezcla el aire y el combustible originando como producto de la reacción gases de combustión (GPC) y calor, la reacción es exotérmica esto conduce a que la entalpía de los productos sea mayor que la entalpia de la reactivos: $\Delta H_{reacc} = H_{prod} - H_{reac.}$

Pudiéndose calcular de las condiciones de operación del proceso. Se conoce, la presión, temperatura, flujo y composición de la corriente de salida de la cámara por lo que es posible calcular, sus propiedades termodinámicas.

En el caso de que no se conozca la temperatura de salida de la cámara este se podrá calcular haciendo un balance de energía según la figura 3.3

$$maCpaT_{2} + mc(Vccomb + CpT_{3}) = mgpc(CpgpcTadia)$$
(3.17)

Realizando el balance de exergia¹⁶ en la cámara de acuerdo a las ecuaciones. Continuando con el análisis y considerando el proceso unitario de transformación química (Combustión) y el cambio de composición, se considera en el análisis la exergia química para lo cual se amplían las ecuaciones siguientes. $e_{ch} = RT_0$ In x_i

$$\Delta G_0 = \sum_{prod} v_k \Delta g_k - \sum_{reac} v_j \Delta g_j$$
(3.18)

$$e_{ch} = \sum_{i} x_{i} e_{chi} + RT_{0} \sum_{i} x_{i} \ln y_{i} x_{i}$$
(3.19)

3.6 Análisis Energético-Exergético de la Turbina.



Figura 3.4 Diagrama de la Turbina con sus Entradas y Salidas

Balance de Masa según la Figura 3.4

 $m_4 = m_5$ (3.20)

Balance de Energía según la Figura 3.4

$$m_4 h_4 = m_5 h_5 \tag{3.21}$$

$$W = h_5 - h_4 \tag{3.22}$$

$$H_5 - H_4 = m_5 c_p (T_5 - T_4) \tag{3.23}$$

Efectuando un balance de exergia en la Figura 3.4 se establecen las siguientes relaciones

Flujo Exergético de producto

$$E_p = W \tag{3.24}$$

Flujo Exergético de combustible

$$E_{F} = E_{5} - E_{4} \tag{3.25}$$

3.7 Cálculo de la Exergía Química de un Compuesto.

Tomando como ejemplo el metano de este caso en estudio decimos que de acuerdo a las ecuaciones

$$e_{ch} = RT_0 \, \stackrel{Po}{/}_{Poo} \tag{2.17}$$

$$e_{ch} = -\Delta G_0 - \sum x_i e^{in}_{ch,i} + \sum x_i e^{out}_{ch,i}$$
(2.18)

$$\Delta G_0 = \sum_{\text{prod}} v_K \Delta g_{k-} \sum_{\text{reac}} v_j \Delta g_j$$
(2.19)

Para obtener la exergía química o el trabajo máximo que puede entregar la mezcla (gas natural) a compuestos presentes en el ambiente CO₂ Y H₂O es necesario efectuar a la reacción siguiente para el metano.

$$CH_4+2O_2 \quad CO_2+2H_2O \quad (3.26)$$

Y a partir de la ecuación
$$\Delta G_{0CH4} = \Delta G_{0C02} + 2 \Delta_{GOH20} - \Delta_{GOCH4} - 2\Delta G_{002}$$

Tomando los valores tabulados de las energías libres de Gibbs para cada componente del Anexo 1.

 $\Delta G_{0CH4} = (-393,510) + 2 (-241,826) - (-74,840)$ $\Delta G_{0CH4} = 802,352, \text{ KJ/kmol}$ $\Delta G_{0C2H6} = 1407.79$ $\Delta G_{0C3H8} = 2045.4$ $\Delta G_{0C4H10} = 2658.4$

Estos valores están tabulados en la Anexo 1 como entalpías de formación en kg/mol.

Continuando para calcular la exergia química se utilizó la ecuación

$$e_{ch} = RT \ln \frac{P_o}{P_{oo}}$$
(2.17)

Es necesario conocer la composición del aire en fracción mol o volumétrico lo cual se expresa a continuación.

$$x_{N2} = 0.7567$$

CAPÍTULO III

 $x_{O2} = 0.2035$ $x_{H2O} = 0.0303$ $x_{CO2} = 0.0003$ $x_{otros} = 0.0092$

Considerando que la presión que se lleva la reacción es P_o / que P_{oo} es la presión parcial del componente en el aire, entonces la ecuación $e_{ch} = RT \ln p_0/p_{00}$.

Puede expresarse como

 $e_{ch} = RT_o \ In \ (p_0/p_{00}.) = RT_o \ In \ (p_0/x_i \ p_{0.}) = RT_o \ In \ (1/x_i)$ Calculando la exergia química para componente se obtiene. $e_{ch}c_{o2} = RT_o \ In \ (1/x_i) = (8.3145) \ (298.15) \ In \ (1/0.0003) = 20.108.47 \ KJ/kmol$ $e_{ch}C_{HO2} = RT_o \ In \ (1/x_i) = (8.3145) \ (298.15) \ In \ (1/0.0303) = 8,667.87 \ KJ/kmol$ $e_{ch}C_{O2} = RT_o \ In \ (1/x_i) = (8.3145) \ (298.15) \ In \ (1/0.2035) = 3.946.69 \ KJ/kmol$

La exergia química de la mezcla se calcula a partir de la ecuación.

 $\boldsymbol{e}_{ch} = -\Delta \boldsymbol{G}_{0CH4} - \sum \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{e}^{in}_{ch,i} + \sum \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{e}^{out}_{ch,i}$

 $\boldsymbol{e}_{chCH_4} = \Delta GO_{CH_4} - \boldsymbol{e}_{ch,O_2} + \boldsymbol{e}_{ch,CO_2} + \boldsymbol{e}_{ch,H_2O}$

 $e_{chCH_4} = (-802,352) - 2(3,946.69) + (20108.47) + 2(8.667.87) = 831,902.83 KJ/kmol$

е_{ch,C2H0}= 1495.84 КJ/kmol

e_{ch,C3H8}= 2154.00 KJ/kmol.

*e*_{ch,C4H10} = 2805.8 KJ/kmol

Mismos que están tabulados como exergia de formación *KJ/kmol*. En la tablas del apéndice.

Composición de la mezcla

$$x_{CH4} = 0.96320$$
$$x_{C2H4} = 0.02160$$
$$x_{C3H8} = 0.0004$$
$$x^{C4H10} = 0.0004$$
$$xN_{2} = 0.0318$$
$$x_{O2} = 0.0006$$

TABLAS ANEXO 1

 $e_{ch,CH4} = 831,650 \text{ KJ/kmol}$ $e_{ch,C2H6} = 1,495,840 \text{ KJ/kmol}$ $e_{ch,C3H8} = 2,154.000 \text{ KJ/kmol}$ $e_{ch,C4H10} = 2,805,800 \text{ KJ/kmol}$ $T_0 = 298.15 \text{ K}$

 $e_{ch,CH4}$ = (0.9632) (831,650) + (83145) (298.15) (0.0632) In(0.9632) = 800,955.756 KJ/kmoL $e_{ch,C2H6}$ = (0.02160) (1,495,840) +(8.314) (298.15) (0..02160) In (0.02160) = 183,304.806 KJ/kmol

 $e_{ch,C3H8} = (0.0004) (2,154.000) + (8.314) (298.15) (0.0004) ln (0.0004) = 853.85 KJ/kmol$ $e_{ch,C4H10} = (0.0004) (2,805,800) + (8.314)(298.15) (0.0004) lin(0.0004) = 114.57 KJ/kmol$ $e_{ch,mezcla} = 986,228.982 KJ/kmol$

Este análisis no es privativo de un equipo en especial, se puede desarrollar para todo equipo en proceso unitario.

CAPÍTULO IV

CAPÍTULO IV. CÁLCULO TERMODINÁMICO PRIMERA Y SEGUNDA LEY 4.1- Cálculo de la Potencia del Compresor.

En esta sección se aplican las formulas descritas en el capítulo II, para calcular las potencias de los equipos dinámicos principales del turbogenerador, iniciando con el compresor, en virtud de que se requiere comprimir un alto volumen de aire, de las condiciones de operación se toman los siguientes datos:

Datos: Del compresor	
Tipo de calculo	Isentrópico
Método de calculo	Ecuación de estado
Eficiencia	.72
Eficiencia mecánica	.99
Relación de compresión	6.52
Temperatura entrada	38 °C
Temperatura salida	333°C
Presión	6.52 KPa
Flujo másico	376,747 kg/hr

Aplicando la ecuación para cálculo de temperatura ideal;

$$T_2 ideal = T_1 * \left(\frac{P_2}{P_1}\right)^{\left(\frac{k-1}{k}\right)}$$
(4.1)

$$T_2 ideal = 311^{\circ} K^* (6.52)^{1.4} = 530^{\circ} K$$
(4.2)

Se calculan los calores específicos promedio entre las temperaturas:

T₂ ideal =530℃	Cp promedio	1.03053055	kJ/kg-Ƙ
T₂ real=606℃	Cp promedio	1.030258806	kJ/kg-Ƙ

Aplicando la ecuación 2.9 para cálculo de la potencia del compresor:

$$W = h_1 - h_2 = c_p (T_1 - T_2)$$
(2.9)

$$W = h_1 - h_2 = c_p prom(T_1 - T_2)$$
(2.9a)

$$N_ideal = m * c_p prom(T_{2ideal} - T_1)$$
(2.9b)

 $N_ideal = 109kg / seg * 1.030KJ / kg^{\circ}K * [(530 - 311)^{\circ}K]] = 24651Kw$

$$N_real = m * c_p prom(T_{2real} - T_1)$$
(2.9c)

$$N_real = 109kg / seg * 1.03kJ / kg^{\circ}K * [(606 - 311)^{\circ}K] = 31814Kw$$

Cálculo de eficiencia

<i>n</i> mecánica	0.99
<i>n</i> adiabática	0.77
<i>n</i> total	0.76

4.2 Cálculo del Balance Estequiométrico y Real de la Cámara de Combustión y del Valor Calórico Superior del Combustible.



Figura 4.1 Entrada y Salida de la Cámara

De acuerdo a la figura 4.1 a la cámara entran las mezclas de aire comprimido y gas combustible y es necesario conocer las composiciones de ambos:

La mezcla de aire tiene la siguiente composición:

OXIGENO .23 % masíco NITROGENO .77% masíco

La mezcla de gas combustible de acuerdo al análisis volumétrico que proporciona el departamento de laboratorio, tiene la siguiente composición y de estos datos se calcula el peso molecular y la composición másica. Estos cálculos fueron procesados en Excel, y están registrados en la memoria de calculo electrónica, que se anexo a este trabajo.

COMPOSICION VOLUMÉTRICA	COMPOSICIÓN MÁSICA
97.98%	96.32%
1.17%	2.16%
0.01%	0.04%
0.01%	0.04%
0.80%	1.38%
0.02%	0.06%
100.00%	100.00%
16.27538446	Kg/kmol
	COMPOSICION VOLUMÉTRICA 97.98% 1.17% 0.01% 0.01% 0.80% 0.02% 100.00% 16.27538446

Se procede a continuación a calcular el valor calórico másico de la mezcla

tomando las entalpías de reacción de cada componente¹⁴

Metano (CH4)

CALOR DE COMBUSTION	∆Hc(kJ/kmol)
Metano (CH4)	-802854
Etano (C2H6)	-1428797
Propano (C3H8)	-2045438
Butano (C4H10)	-2660325
Nitrógeno (N2)	0
Dióxido de Carbono (CO2)	0
	-
Valor Calórico Molar del Gas	803963.0858
Valor Calórico Masíco del Gas (kJ/kg)	49397.4866

Se calcula la relación aire teórico. Kg de aire-Kg de combustible

calculo de la relación teórica			
COMPONENTE DE COMBUSTIBLE	kg O2/kgCH4	kg O2/kgc	kg Aire/kgc
Metano (CH4)	4	3.8528	16.75130435
Etano (C2H6)	3.733333333	0.08064	0.350608696
Propano (C3H8)	3.636363636	0.001454545	0.006324111
Butano (C4H10)	3.586206897	0.001434483	0.006236882
Nitrógeno (N2)		0	0
Dióxido de Carbono (CO2)		0	0
	kg de Aire a 0%		
	de Exceso/kgc		17.11447404
Cálculo el kgCO2/kgc y de k	gH2O/kgc		
COMPONENTE DE COMBUSTIBLE	kgCO2/kgComp	kgCO2/kgc	
Metano (CH4)	2.75	2.6488	
Etano (C2H6)	2.933333333	0.06336	
Propano (C3H8)	3	0.0012	
Butano (C4H10)	3.034482759	0.001213793	
Nitrógeno (N2)	0	0	
Dióxido de Carbono (C02)	0	0.0006	
	TOTAL	2.715173793	
COMPONENTE DE COMBUSTIBLE	kgH2O/kgComp	kgH2O/kgc	

2.25

2.1672

Etano (C2H6)	1.8	0.03888
Propano (C3H8)	1.636363636	0.000654545
Butano (C4H10)	1.551724138	0.00062069
Nitrógeno (N2)	0	0
Dióxido de Carbono (CO2)	0	0
	TOTAL	2.207355235

Cálculo de la composición de los productos de la combustión y el peso molecular

PRODUCTOS DE LA COMBUSTÍON	kg Comp/kgc	% MASICO	% VOLUMEN
DIOXIDO DE CARBONO (CO2)	2.715173793	4.7877%	3.09%
AGUA	2.2963505	4.0492%	6.39%
N2	42.84277127	75.5457%	76.65%
02	8.856740313	15.6173%	13.87%
Total	56.71103588	100.0000%	100.0000%
PM	28.41012743		

Se calculan los calores específicos de los gases involucrados en el sistema

Calor especifico de los componentes Temperatura del combustible Temperatura promedio del aire Temperatura promedio de los gases	Cp=A+BT+CT ² +DT ³	Temperaturas K 308.15 458. 991
AIRE	KJ/KIIIOF K	Ko/Kg-K
OXIGENO	30 752272703	0.96100852
NITROGENO	29.436312289	1.05129687
Calor Específico del Aire	29.712663976	1.03053055
COMBUSTIBLE		
CH4	36.119818201	2.25748864
C2H6	53.958766171	1.79862554
C3H8	76.045168927	1.72829929
C4H10	100.975971438	1.74096502
N2	29.171466424	1.04183809
CO2	37.613338302	0.85484860
Calor Específico del Combustible		2.22954135
PRODUCTOS DE LA COMBUSTIÓN		
DIOXIDO DE CARBONO (CO2)	53.352217127	1.21255039
AGUA	40.181867706	2.23232598
N2	32.275125297	1.15268305
02	34.609244510	1.08153889
Calor Específico de gases producto de		
combustión		1.188155569

4.3 Cálculo de la Potencia de la Turbina.



Figura 4.2 Diagrama de la Turbina con sus Entradas y Salidas

Balance de Masa y Energía según la Figura 4.2 y las ecuaciones

$$m_4 = m_5 \tag{3.20}$$

$$m_4 h_4 = m_5 h_5 \tag{3.21}$$

$$W = h_5 - h_4 \tag{3.22}$$

$$H_5 - H_4 = m_5 c_p (T_5 - T_4) \tag{3.23}$$

Aplicando la ecuación 2.10 para calculo de la potencia de la turbina

$$W = h_5 - h_4 = c_p (T_4 - T_5)$$
(2.10)

$$N_{id} = m * Cp \ prom(T_4 - T_5 id)$$
 (2.10b)

 $N_i d = 111 kg / seg * 1.185 (KJ / kg^{\circ}K) * [(1147 - 671)^{\circ}K] = 62307 Kw$

$$N_real = mgpc c_p prom(T_4 - T_{5r})$$
(2.10c)

 $N _ real = 111 kg / seg * 1.020 kJ / kg^{\circ}K * [(1147 - 780)^{\circ}K] = 48471 Kw$

Cálculo de la eficiencia adiabática:

n adiabática	0.73
n mecánica	0.99
n total	0.72

4.4 Cálculo del Flujo Exergético, Pérdidas y la Eficiencia Exergética en el Compresor. E₂ aire



Figura 4.3 Diagrama del Compresor con sus Entradas y Salidas

Para proceder con el calculo del flujo exegético en el compresor primero se deben calcular las exergías específicas de las entradas y salidas figura 4.3 Se establece un estado de referencia siendo este el medio ambiente:

ESTADO DE REFERENCIA			
То	298.15	K	
Po	101	KPa	

El aire se encuentra en equilibrio con el medio ambiente y no tiene exergia termomecánica

Aire a la entrada del Compresor				
R	0.291992063	kJ/kg-K		
То	298.16	K		
Cp aire	1.013151235	kJ/kg-K		
ho	302.0811723	kJ/kg		

Cálculo de la exergía termomecánica especifica del aire a la salida del compresor, se aplica la ecuación 2.14 del capítulo.

$$E_{ph} = (H - H_0) - T_0(S - S_o)$$
 2.14

Aire a la salida del Compresor				
Р	652.000	KPa		
Т	606	ĸ		
Ср	1.060508623	KJ/kg-K		
h ₂	642.6682257	kJ/kg		
delta s	0.190828329	kJ/kg-℃		
е _{2 ТМ}	283.6915871	kJ/kg		

Cálculo de la contribución de la exergia como mezcla del aire en el ambiente

				Contribución		
	Aire Hu	úmedo		Específica	Unidades	
Gas	Composici	ón en (%)	Peso Molecular	de Mezcla		
			- P <i>M -</i>			
	% Vol.(%mol)	% Masa AH	(kg/kmol)			
Oxígeno	20.00120703	22.47849392	32	797.946083	kJ/kmol	
Nitrógeno	74.55342515	73.36632375	28.02	542.704246	kJ/kmol	
Dióxido de						
Carbono	0.028641347	0.044269623	44.01	5.79215905	kJ/kmol	
G. Inertes	0.889003453	1.245444024	39.88960533	104.079367	kJ/kmol	
Agua	4.527723027	2.865468674	18.02	347.370578	kJ/kmol	
Mezcla			28.47337669			
Suma	100	100		1797.89243	kJ/kmol	
		Exergía Es	specífica de la	Mezcla	63.142930	kJ/kg

Aplicando Ei=mi*ei donde mi es el flujo másico del aire igual a 109.2 kg/seg

Exergías especificas			Flujo exegético		
e 1	63.142930	kJ/kg	E ₁	6895	KJ/seg
e ₂	346.83	kJ/kg	E ₂	37874	KJ/seg

Cálculo de las pérdidas de exergía y la eficiencia exegética del compresor de acuerdo a las ecuaciones

$$E_{p} = E_{2} - E_{1}$$
(3.7)

$$E_F = W \tag{3.8}$$

 $E_p = 36296.03 - 6607.91 = 29688 \, kw$

 $E_{F} = 31814 \, kw$

Pérdidas $\Omega ex=(E_1+N_c)-E_2$ UNIDADES eficiencia $n ex=E_P/N_c$ 2218.39 KJ/seg 0.93

4.5 Cálculo del Flujo Exergético de la Cámara de Combustión, Pérdida de Exergía y Eficiencia Exergética.



Figura 4.4 Entradas y Salida de la Cámara

Efectuando un análisis de exergía a la figura 4.4 se obtienen las siguientes relaciones

$$E_p = E_4 \tag{3.16}$$

$$E_F = E_2 + E_3 (3.17)$$

$$E_d = (E_2 + E_3) - E_4 \tag{3.18}$$

$$\epsilon = \frac{E_4}{E_2 + E_3} \tag{3.19}$$

Se calculan primero las exergías específicas de entradas aire y combustible y salida de los productos de la combustión de la cámara con las siguientes relaciones y ecuaciones.

Realizando el balance de exergía en la cámara de acuerdo a las ecuaciones (3.16),(3.17),(3.18),(3.19). Continuando con el análisis y considerando el proceso unitario de transformación química (Combustión) y el cambio de composición, se considera en el análisis la exergia química para lo cual se amplían las ecuaciones siguientes. $e_{ch} = RT_0 \ln x_i$ y se aplican, las ecuaciones 2.14. 2.19. 2.20 del Capítulo II.

Resultados de los cálculos de exergía específica y flujo exegético en la cámara:

Aplicando la ecuación 2.14 calculamos la exergia específica termomecánica del combustible a las condiciones de operación.

	Entrada del combustible a la cámara	
Temp. Comb.	308	К
Cp ₂ Comb.	2.2295E+00	Kj/kgk
Р	650.0000	KPa
R	0.510863508	KJ/Kg-K
e _{TM} comb	283.9613	Kj/Kg

Aplicando la ecuación 2.19 separada se encuentra la exergía de reacción química de la mezcla y la exergía de mezcla. Tomando las exergías molares de los componentes del ANEXO 1.

$ech = \sum xi \ ech, i$ COMPOSICIÓN	e _{mezcla} =RTo ∑	xi ln (1/xi) ANEXO-1	
ANÁLISIS	F. volumétrica	Exergías Químicas	
CH4 C2H6	97.98% 1.17%	831650 1495840	kj/kmol kj/kmol
C3H8	0.01%	2154000	kj/kmol
C4H10+	0.01%	2805000	kj/kmol
N2	0.80%	0	
ech comb.	832994.7072	Kj/kmol	
ech comb.	51181.26145	Kj/kg	
	e mezcla = RTo xi I	n (1/ xi)	

R	8.3145	kJ/kgmol-K
e mz comb.	285.140631	KJ/Kmol
e mz comb.	17.5197478	KJ/Kg

Exergía específica del combustible:

Se suman las exergías termomecánica, química y de mezcla

e _{2 TM}	283.6915871	kJ/kg
ech comb.	51181.26145	KJ/kg
e mz comb.	17.51974781	KJ/Kg
e total	51483.2016	KJ/Kg

Aplicando *Ei=mi*ei* donde *mi* es el flujo másico del combustible, igual a 2.16 kg/seg.

Δ.	51/02 20	k l/ka		111011 25	K l/cog
C 3	51465.20	KJ/KY	⊑3	111011.20	ru/sey
-		0	Ŷ.		

4.6 Cálculo de las Exergías Específicas y del Flujo Exergético de la Turbina.



Figura 4.5 Diagrama de la Turbina con sus Entradas y Salidas

Efectuando un balance de exergía en la Figura 4.6 se establecen las siguientes relaciones

Exergía de producto

Ep = W	(3.27)
Ep = W	(3.27)

Exergía de combustible

 $E_F = E_5 - E_4 (3.28)$

Aplicando la ecuación 2.14

$$E_{ph} = (H - H_0) - T_0(S - S_o)$$
(2.14)

Se establece un estado de referencia siendo este el medio ambiente:

	ESTADO DE REFERENCIA
То	298.15 K
Po	101 KPa

Tomando datos de las condiciones de operación de la turbina se calcula la exergía termomecánica de la entrada y salida de GPC de la turbina.

R	0.2927	KJ/Kg-K
То дрс	298.15	K
Ср дрс	1.0470403	Kj/kg-K
ho	312.1750666	kJ/kg
Tadm gpc	1143	ĸ
Ср дрс	1.224993310	Kj/kgK
P entrada	652	KPa
h ₄	1400.532392	kJ/kg
delta s	0.981036538	kJ/kg-K
e ₄	795.8612812	kJ/kg

Entrada de gases producto de la combustión a la turbina

Salida de gases producto de la combustión de la turbina

P salida	140	KPa
Tesc gpc	780	К
Cp_real gpc	1.1521	Kj/kg-K
h ₅	898.2321501	kJ/kg
delta s	0.961396225	Kj/kgK
e ₅	299.4167989	Kj/kg

Cálculo de la aportación de exergía específica de la mezcla de gases producto de la combustión:

Contribución a la	a Exergía E	specífica de Me	zcla de G.P.C.					
Composición	F. mol	F. mol e mezcla = RTo xi In (1/ xi)						
CO2	0.03138	e _{mz} CO2=	269.2949779	kJ/kmol				
N2	0.06484	e _{mz} N2=	439.7575417	kJ/kmol				
O2	0.76616	e _{mz} O2=	505.9262287	kJ/kmol				
H20	0.13762	e _{mz} H2O=	676.6314308	kJ/kmol				
		e _{mezcla} GPC	1891.610179	kJ/kmol				
		e _{mezcla} GPC	66.696	kJ/kg				

Aplicando *Ei=mi*ei* donde *mi* es el flujo masíco del combustible, igual a 111.53 kg/seg.

E ₄	96031.21	KJ/seg
E ₅	96031.21	KJ/seg

Cálculo de las perdidas de exergía especifica y las eficiencia de la cámara

$E_P = E_4$	UNIDADES	$E_F = E_2 + E_3$	UNIDADES
96031.21	KJ/seg	148885.58	KJ/seg
$\Omega ex=(E_2+E_3)-E_4$	UNIDADES	$n \exp E_4/E_2 + E_3$	
52854.37	KJ/seg	0.65	

Cálculo de las perdidas de flujo exegético y la eficiencia exegética de la turbina.

E _P =N_turb.	UNIDADES	$E_F = E4 - E_5$	UNIDADES
48471	KJ/seg	55282.20	KJ/seg
Ωex=E4-(E5+N_neta)	UNIDADES	<i>n</i> ex=Ep/E _F	
6810.74	KJ/seg	0.88	

4.7 Análisis del Recuperador de Calor.

En este capítulo se presentan los diferentes elementos que pueden conformar un Recuperador de Calor como son: los economizadores, evaporadores y supercalentadores. Cada combinación de estos elementos dependerá de los requerimientos del tipo de vapor y de las condiciones a las cuales es suministrado los gases de turbina y el agua para la generación de vapor.

- Elementos de los Recuperadores de calor
- Combinación de los Elementos
- Formación de las Curvas Compuestas



4.8 Aplicación de las Diferentes Estructuras.

Figura 4.6 Esquema recuperador de calor

Se requiere hacer una selección del equipo recuperador de calor como se representa en la figura 4.6 en este caso se considero que consistiría de tres elementos, economizador, evaporador y superalentador y se le realizo un balance de materia y energía en hoja Excel y se le determinaron las eficiencias energéticas y exergéticas, partiendo de los gases de escape de la turbina y su composición, su temperatura y su potencial de calor disponible.

4.9 Balance de Materia y Energía para el Recuperador de Calor (HRSG).

1.- Qad= Mg*(hgst - hsg^{eco})

hgst= entalpía del gas que sale de la descarga de la turbina

hsg^{eco} = entalpía del gas que sale del economizador

2.- Qabs= Qeco + Q evap + Q sc

Qeco= calor absorbido en el economizador por el liquido saturado (agua)

Q evap= calor absorbido por el evaporador

Q sc= calor absorbido por el sobrecalentador (vapor de agua seco)

3.- Qeco=(Daa-Datmp)*(h´sat-haa)

Donde: hsat= entalpía del agua saturada para Ts(47.8 bar-5℃)

4.- Qevap= (Daa-Datemp)*(hvs-h´sat)

Donde: (Daa-Datemp)=Dv y hvs= entalpía de vapor saturado para 47.8 bar

5.- Qsc=Daahvsc-Daahvs

Pero Do=Daa

Qsc=D"o*(hvsc^{atemp} -hvs)

Donde: hvsc^{atemp}= entalpía de vapor s.c. para 45 bar y 417 °C

Continuando con nuestro balance:

6.- Qg^{s.c}=Mg*(hgst-hg^{s.c}.) y de aquí se despeja la temperatura Tsg^{s.c.} del gas a la salida del sobrecalentador v con el Cp prom s.c.(iterando)

7.- Qg^{eva}=Mg*(hgs^{s.c.} –hgs^{eva}) y de aquí se despeja la temperatura Tgs^{eva} del gas a la salida del evaporador, con el Cp. Prom.(iterando).

8.- Qg^{eco}=Mg*(hgs^{eva}- hgs^{eco)} y de aquí se calcula la temperatura Tgs^{eco} del gas a la salida del economizador, con el Cp prom. (iterando)

Balance para la temperatura flash o limite de roció:

Do*(ho-haa)=Mg*(hgst-hg^{eco})

Donde: hg^{eco}/Cpprom= Tg^{eco}

4.10 Cálculo de la Entalpía a la Salida del Gas del Economizador hsg^{eco}

1.- Qad= Mg*(hgst - hsg^{eco})

Con ayuda del TPx se calcula la entalpía h2 de la corriente 2 del lado de producción de vapor, y de ahí se realizan los demás cálculos:

Т	380	К
Р	4828	Кра
h2	451.42	kJ/kg

A partir de estos datos se calculan las cargas térmicas de los diferentes bancos de intercambio de calor

Qeco=carga térmica del saturador IPE 2

Q1=m2(h4-h2)	33055.27809	MJ/h
	9.182021692	Mw
Qeva=carga te	érmica del evaporador IPB	
Q2= m4(h5-h4)	83967.96817	MJ/h

	23.3244356	MW
Csc= Carga téi	mica del sobrecalenta	ador IPS 2
Q3=m5(h6-h5)	22107.9922	MJ/h
	6.141108944	MW
Gases de combustió	n a la entrada al banc	o de calentamiento
Tgst	780	٥K
Р	140	Kpa
PM prom	28.41	g/mol
hgst	898.23	kJ/kg
hgst	25515.71979	Kj/Kgmol
Mg	401	T/hr
Q=Mg(hgst-hseco)		
-Q= Q1+Q2+ Q3		
-Q =	139131.2385	MJ/hr
hs=	-347.0623534	MJ/ton
	-347.0623534	kJ/kg
hsg ^{eco}	551.17	kJ/kg
hsg ^{eco}	15656.86	kJ/Kgmol

4.11 Cálculo de Temperaturas de Entrada y Salida del lado del Gas.

Continuando con nuestro balance								
Qg ^{s.c} =Mg*(hgst-hg ^{s.c} .)								
CONDICIONES DE ENTRADA								
Tst	780	٥K						
Μ	401	T/hr						
DATOS								
Qsc	2.21E+04	MJ/h						
Μ	401	T//hr						
hgst	898	kJ/kg						
hg ^{s.c}	843.08	kJ/kg						
hg ^{s.c}	23949.14	KJ/kgmol						
Tgs.c	740	٥K						
CpgTs.c. DATOS	1.141321805	KJ/kg°-K						
Qeva	8.40E+04	MJ/h						
Μ	401	T//hr						

hgs.c hgeva	843.08 633.63	kJ/kg KJ/Kg
hg ^{eva}	17741.53	KJ/Kgmol
Tgeva	580	٥K
CpgTeva. DATOS	1.098436921	KJ/kg°-K
Qeco	3.31E+04	KJ/h
Μ	401	T//hr
hgeva	633.63	kJ/kg
hg ^{eco}	551.17	KJ/Kg
hg ^{eco}	15656.86	KJ/KgmoL
Tgeco	502	٥K
CpgTeco	1.079709408	KJ/kg-K

4.12 Resultados del Cálculo de Exergías Específicas y Flujo Exergético del

Recuperador de Calor HRSG.

Tabla 4.1 Exergías específicas y flujos exergéticos.

TABLA DE EXERGIAS ESPECIFICAS Y FLUJO EXERGETICO											
SISTEMA DEL RECUPERADOR DE CALOR HRSG							PÉRDIDAS	EFICIENCIA			
VARIABLES/UNIDAD	DES	т	Р	h	s	Δs	G	е	Е	Ω	ŋ
CORRIENTES		ĸ	KPa	kJ/ka	kJ/kg- K		T/hr	KJ/Ka	kJ/sea	kJ/sea	
liquido saturado	C-1	380	129	448	1.38		50.5	40	564		
liquido	C-2	380	4828	451	1.38		49.9	45	621	65	0.90
liquido	C-3	380	4828	451	1.38		0.62	45	8	613	0.01
liquido	C-4	529	4828	1114	2.84		49.9	271	3751	3130	0.17
vapor saturado	C-5	534	4751	2797	6.00		49.9	1,014	14057	10307	0.27
vapor s.calentado	C-6	690	4828	3240	6.73		49.9	1,344	18628	4571	0.91
vapor s.calentado	C-7	673	4545	3203	6.70		50.5	1,212	17006	1614	
GPC ent, al s.c.	C-8	780	140	898		0.96	401	366	40749	3877	0.90
GPC ent, al eva.	C-9	740	140	845		0.9	401	331	36872	8627	0.77
GPC ent, al eco.	C-10	580	140	637		0.46	401	254	28245	10468	0.63
GPC sal, al eco.	C-11	502	140	542		0.46	401	160	17777		

4.13 Gráfica de Cargas Térmicas del Recuperador de Calor.



Tabla 4.2 Eficiencias energéticas y exergéticas.

EFICIENCIAS ENERGETICAS Y EXERGETICAS						
Eficiencia Energética del ciclo Turbo-						
HRSG						
ŋ= Ne+Qo/Qvc	0.56547	56.55%				
Ne	15274	Kw				
Qo=Go*h7(Vapor s.c. C-7)	44956.6	Kw				
Qvc	106514	Kw				
Eficiencia Exergética del ciclo						
ŋ=Ne+Eo/Evc	0.29078	29.08%				
Ne	15274	Kw				
Eo=Go* <i>e</i> o	17006	Kw				
Evc	111011	Kw				

4.14 Gráfica de temperaturas del Recuperador de Calor



TABLA DE EXERGÍAS ESPECÍFICAS Y FLUJO EXERGÉTICO DEL TURBOGENERADOR										
VARIABLES/UNIDADES	т	Р	h	s	Δs	G	е	Е	Ω	ŋ
CORRIENTES	ĸ	Кра	Kj/kg	Kj/ kg-K	Kj/ kg-K	Kg/ seg	KJ/kg	kJ/seg	PÉRDIDAS	EFICIENCIA
ENTRADA AIRE COMPRESOR	311	101	302	n/a	0	109	63.14	6895	2218	0.93
SALIDA AIRE COMPRESOR	606	652	643	n/a	0.19	109	346.83	37874		
ENTRADA COMBUSTIBLE A LA CAMARA	308	652	687	n/a	n/a	2	51483.2	111011	52854	0.65
ENTRADA GPC A LA TURBINA	1143	652	1401	n/a	0.98	111	862.38	96031		
SALIDAS GPC DE LA TURBINA	780	101	898	n/a	0.96	111	365.93	40749	6811	0.88

Tabla 4.3 Exergías específicas y Flujo Exergético del Turbogenerador.

Tabla 4.4 Índices del Turbo Generador.

TABLA 2 DE RESULTADOS DE LOS INDICES DEL CONSUMO DE ENERGÍA DEL TURBOGENERADOR									
COMPRESOR	POTENCIA	UNIDADES	m3 gas comb. a Camara	UNIDADES	m3 gas comb.	UNIDADES	INDICE		
Kw.hr/m³ gas a.cámara	33198	Kw-H	1891	m³/hr			18		
CAMARA	m ³ gas. Ob. gpc	UNIDADES	Q disponible	UNIDADES	m ³ gas quemado	UNIDADES	INDICE		
m³gas.ob. gpc/m³g.quemado	205740	m³/Hr			1891	m³/hr	109		
TURBINA DE GAS	Kw geb	UNIDADES	m ³ gas. Ob. gpc	UNIDADES	Qt gas	UNIDADES	INDICE		
Kw gen/m ³ gpc	48471	Kw-H	205740	m3/hr			0.236		
Cogen.=Kw gen./ Qt gas	48471	Kw-Hr			106514	Kw	46		
Eficencia bruta	CONSUMO DEL COMPRESOR	UNIDADES	Kw PRODUCIDOS TURB	UNIDADES					
indice consumo de Comp.=Kw comp/Kw prod tur	33198	Kw-Hr	48471	Kw-Hr			0.685		
Eficiencia neta	potencia de la turbina	UNIDADES	potencia del compresor	UNIDADES	Qt gas	UNIDADES			
l efic=((kwtur gas- Kw comp)/kw camara)X100	48471	Kw-H	33198	Kw-H	106514	Kw	14%		

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

El proyecto original implico la generación de 36 Mw mediante la operación de tres turbogeneradores; 17.7 Mw serían para autoconsumo y el excedente de 18.3 Mw serían transferidos a la red de Comisión Federal de Electricidad. Para tal fin se instaló un sistema de cogeneración, instalando dos recuperadores de calor HRSG, para producir un total de 50Ton/h de vapor de alta por recuperador, aprovechando la energía térmica de los gases de combustión provenientes de dos turbogeneradores. El tercer turbogenerador es considerado para otro proyecto. A este proyecto se le denomino: "Máxima Producción de vapor sin fuego suplementario".

Las conclusiones a la que se llegó con este análisis es que los objetivos trazados por la empresa, son correctos desde el punto de vista termodinámico, ya que cumplen con el principio de conservación de materia y con la primera ley de la termodinámica. Además en el arreglo de los HRSG no se detectó ninguna transferencia de calor que traicione a la segunda ley de la termodinámica, esto es que en los intercambios de calor no existen "cruces de temperatura"; y en consecuencia se produce el flujo de 50 ton/h de vapor de 45 bar y 400°C

Esto no excluye la posibilidad de otros arreglos factibles en los bancos de intercambio que de presentarse como alternativas deberán ser evaluados aplicando los criterios de la termodinámica.

La eficiencia del turbogenerador, aumenta desde 0.14 hasta 0.57 aprovechándose el escape de los gases de la turbinas de gas y al mismo tiempo se producen 50 toneladas por hora de vapor sobrecalentado, por equipo el cual se usa como carga térmica a las plantas de proceso, con un sustancial ahorro de combustible.

Por lo mismo se puede asegurar que el beneficio se refleja en el consumo disminuido de gas combustible, y la reducción de costos anuales de energía eléctrica y vapor, mejorando los factores de insumo, como resultado del cambio tecnológico.

Las emisiones realizadas a la atmósfera cumplen con lo establecido en la NOM-085-ECOL-1994. En este sentido, el impacto ambiental es positivo al disminuir significativamente la temperatura actual de las emisiones como resultado de ser empleadas para la cogeneración de energía eléctrica, pasando de
aproximadamente 400°C a menos de 150°C. Asimismo, d e manera indirecta, se considera que este tipo de actividad contribuye a la disminución de gases de combustión tipo NO_X y CO_2 debido a que a partir del mismo volumen de gas actualmente empleado, se podrá obtener mayor cantidad de energía eléctrica, disminuyendo en esa misma proporción el uso de combustible adicional necesario para lograrlo bajo las condiciones actuales de operación. Por todo lo anterior, desde el punto de vista de contaminación atmosférica se dictamina que el proyecto es ambientalmente factible.

La recomendación sugerida es, que en toda industria de PEMEX donde haya emisiones atmosféricas de gases producto de la combustión por tener ciclo simple de generación, se establezca, el compromiso de la instalación de recuperadores de calor, para cogeneración, que aumenten los rendimientos, que se reflejen en los índices de consumo y en la reducción de emisiones de CO₂.

A partir de proyectos similares, se contribuiría a cumplir el compromiso adquirido por México en relación con el Protocolo de Kyoto de la Convención Marco sobre el Cambio Climático de las Naciones Unidas. BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA

- Bares Cerny Fried Collections Problems in Physical Chemistry Editorial Addison Wessley
- Bejan Adrian "Advantaged Engineering Thermodynamics" second edition, John Wiley and Son, Inc 1997.
- Bejan Adrian, Tsatsaronis George, Moran Michael "Thermal Design & Optimization", John Wiley & Son, inc, 1996.1,4
- Boletín informativo "Desafió Petroquímico". Pajaritos cogenerador de energía.
 Pagina 8 y 9 folleto editado por órgano de comunicación interna.
- 5. Boletín informativo "Desafió Petroquímico". Premio nacional de ahorro de energía 2005. Pagina 10 folleto editado por órgano de comunicación interna.
- Boletín informativo "Desafió Petroquímico".Petroquímica Pajaritos Generador de Divisas desde 1987 pagina 8.
- Cengel Yunus A. Boles Michael. "Termodinámica" cuarta edición, MC Graw-Hill Latinoamericana, 2003
- Desmond E. Winterbone, "Advance Thermodynamics for Engineers John Willey, INC: 1997
- 9. Fernández Diez Pedro Termódinamica técnica Universidad de Cantabria capitulo ix pagina 125
- 10. Juarez Y C.- Carlos Rochin LEMUS. manual de Química aplicada Editorial Rorez.
- 11. Manual de diseño de la planta de cogeneración de Petroquímica Pajaritos. memorias de cálculo. Termodinámica aplicada.
- 12. Puron de la Borbolla Principios de los Procesos de Ingeniería volumen i. Editorial LIMUSA.
- 13. Severns W. H. Degler H.E. Miles J.C. "Energía mediante vapor, aire o gas Editorial REVERT. Pagina 4
- Smith J.M. Ingeniería de la cinetica quimica 8ª. impresión Editorial C.E.C.S.A tabla 2.1 pagina 23
- 15. Tsatsaronis George, "A Review of Exergoeconomic Metyhodologies" Second Law Analysis of Thermal Systems: p.p. 81-87

ANEXO 1

Anexo 1. Entalpías y Exergías de formación.

Entalpía y exergía de formación de sustancias inorgánicas en el estado de referencia (T₀=298.15 K, P₀=101.325 kPa).

Sustancia	Estado	Masa Molar	Entalpía	Exergía
		[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
g	S			
Ag_2CO_3	S	275.749	-17.38	115.0
AgCl	s	143.323	0.0	22.2
AgF	S	126.868	47.60	118.5
AgNO₃	S	169.875	-76.91	43. I
Ag ₂ O	S	231.739	63.91	57.6
Ag_2O_2	s	247.739	70.69	172.1
Ag ₂ S	s, α	247.804	787.79	709.5
Ag ₂ SO ₄	s	311.802	104.50	139.6
AI	s	26.9815	930.69	888.4
Al ₄ C ₃	s	143.959	4694.51	4588.2
AICI ₃	s	133.3405	467.18	444.9
Al ₂ O ₃	s, α, corundum	101.9612	185.69	200.4
Al ₂ O ₃ ·H ₂ O	s, boermite	119.9765	128.35	195.3
Al2O3·₃H₂O	s, gibbsite	156.0072	24.13	209.5
AI_2S_3	s	150.155	3313.81	2890.7
$AI_2(SO_4)_3$	s	342.148	596.80	529.7
AI_2SiO_5	s, andalusite	162.046	28.03	43.9
AI_2SiO_5	s, kyanite	162.046	25.94	45.1
Al ₂ SiO ₅	s, sillimanite	162.046	0.0	15.4
$AI_2Si_2O_5(OH)_4$	s, kaolinite	258.1615	68.25	197.8
3Al ₂ O ₃ ·2SiO ₂	s, mullite	426.0536	630.11	618.8
Ar	g	39.948	0.0	11.69
As	S	74.9216	462.44	494.6
As ₂ O ₅	S	229.8402	0.0	216.9

Sustancia	Estado	Masa Molar	Entalpía	Exergía
		[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
Au	S	196.967	0.0	15.4
AuCl	S	232.42	45.49	62.2
AuCl ₃	S	303.326	123.09	155.5
AuF ₃	s	253.962	246.46	437.3
Au ₂ O ₃	S	441.932	-80.81	114.7
В	S	10.811	636.39	628.5
B ₂ O ₃	S	69.6202	0.0	69.4
Ba	s, II	137.34	747.77	747.7
BaCO₃	s, II	197.35	-75.18	26.3
BaCl ₂	S	208.25	48.69	61.3
BaF ₂	S	175.34	-53.24	57.2
BaO	S	153.34	194.15	224.6
BaO ₂	S	169.34	113.38	169.3
Ba(OH) ₂	s	171.36	45.93	132.9
BaS	S	169.40	1012.88	901.9
BaSO₄	s, barite	233.40	0.0	3.4
Bi	S	208.980	286.94	274.5
Bi ₂ O ₃	s	465.958	0.0	61.4
Bi ₂ S ₃	s	514.152	2607.05	2237.3
Br ₂	I	159.812	_	101.2
С	s, graphite	12.01115	393.509	410.26
С	s, diamond	12.01115	395.406	413.16
CCI4	I	153.823	578.95	473.1
CN	g, cyano	26.01785	858.00	845.0
C_2N_2	g, cyanogen	52.0357	1096.14	1118.9
CO	g	28.0105	282.984	275.10
CO2	g	44.0095	0	19.87
CS ₂	I	76.139	1934.09	1694.7
Са	s, II	40.08	813.57	712.4
CaC ₂	s	64.10	1541.18	1468.3
CaCO3	s, aragonite	100.09	0.0	1.0
CaCO₃·MgCO₃	s, dolomite	184.411	0.0	15.1
CaCl ₂	s	110.99	178.21	87.9

Sustancia	Estado	Masa Molar	Entalpía	Exergía
		[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
CaF₂	s	78.077	0.0	11.4
CaFe ₂ O ₄	S	215.77	161.07	104.0
Ca ₂ Fe ₂ O ₄	s	271.85	321.00	194.7
Ca₂Mg₅Si ₈ O₂₂(OH)₂	s, tremolite	812.41	425.49	81.6
Ca(NO ₃) ₂	s	164.0898	-124.90	-18.1
CaO	s	56.08	178.44	110.2
CaO·Al ₂ O ₃	s	158.04	351.66	275.4
CaO·2Al ₂ O ₃	s	260.00	541.71	460.4
3CaO·Al ₂ O ₃	s	270.20	716.72	500.6
12CaO·7Al₂O₃	s	1386.68	3415.71	2526.8
$CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 2SiO_2$	s, anortite	222.038	273.92	218.3
Ca(OH) ₂	s	74.09	69.04	53.7
Ca ₃ (PO ₄) ₂	s,	310.18	0.0	19.4
CaS	s	72.14	1056.57	844.6
CaSO ₄	s, anhydrite	136.14	104.88	8.2
CaSO₄·1/2H₂O	s, α	145.15	83.16	12.1
CaSO ₄ ·2H ₂ O	s, gypsum	172.17	0.0	8.6
CaSiO₃	s, volastonite	116.16	90.24	23.6
Ca ₂ SiO ₄	s, β	172.24	232.28	95.7
Ca₃SiO₅	s	282.32	424.94	219.8
Cd	s, ν	112.40	357.10	293.8
Cd	s, α	112.40	356.51	293.2
CdCO₃	s	172.41	0.0	40.6
CdCl ₂	s	183.31	126.04	73.4
CdO	s	128.40	98.95	67.3
Cd(OH) ₂	s	146.41	38.26	59.5
CdS	S	144.46	920.60	746.9
CdSO ₄	s	208.46	149.24	88.6
CdSO ₄ ·H ₂ O	S	226.48	84.79	80.6
Cl ₂	g	70.906	160.44	123.6
CI	g	35.453	201.90	87.1
Co	s, α, hexagonal	58.9332	297.06	265.0
CoCO3	s	118.9426	-22.38	45.8

Sustancia	Estado	Masa Molar	Entalpía	Exergía
		[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
CoCl ₂	s	129.839	144.96	118.8
CoO	s	74.9326	59.12	52.8
Co ₃ O ₄	S	240.7872	0.0	38.2
Co(OH) ₂	s, pink	92.9479	-0.86	50.7
CoS	S	90.997	942.27	792.2
CoSO4	S	154.995	134.22	99.8
Cr	S	51.996	569.86	544.3
Cr_3C_2	S	180.010	2415.85	2372.0
Cr7Cl	S	400.005	5007.63	4874.2
CrCl ₂	s	122.902	361.91	311.9
CrCl₃	s	158.355	281.05	261.6
Cr ₂ O ₃	S	151.990	0.0	36.5
Cs	S	132.905	362.68	404.4
CsCl	S	168.358	0.0	51.5
CsNO₃	S	194.910	-80.22	18.2
Cs ₂ O	S	281.809	407.75	521.8
Cs_2SO_4	S	361.872	30.53	127.0
Cu	S	63.54	201.59	134.2
CuCO3	S	123.55	0.0	31.5
CuCl	S	98.99	144.57	76.2
CuCl ₂	S	134.45	141.95	82.1
CuFe ₂ O ₄	S	239.23	60.62	36.1
CuO	s	79.54	44.27	6.5
Cu ₂ O	s	143.08	234.56	124.4
Cu(OH) ₂	s	97.55	-6.37	15.3
CuS	s	95.60	873.87	690.3
Cu ₂ S	s	159.14	1049.10	791.8
CuSO ₄	s	159.60	155.65	89.8
Cu ₂ SO ₄	s	223.14	377.15	253.6
D_2	g	4.02946	249.199	263.8
D ₂ O	g	20.02886	0.0	31.2
D ₂ O	I	20.02886	-45.401	22.3
F ₂	g	37.9968	406.07	466.3

Sustancia	Estado	Masa Molar	Entalpía	Exergía
		[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
Fe	s, α	55.847	412.12	376.4
Fe₃C	α, cementite	179.552	1654.97	1560.2
FeCO₃	s, siderite	115.856	65.06	125.9
FeCl ₂	s	126.753	230.77	197.6
FeCl ₃	s	162.206	253.29	230.2
FeCr ₂ O ₄	s	223.837	107.10	129.1
Fe _{0.947} O	s, wustite	68.8865	124.01	113.3
FeO	s	71.846	140.16	127.0
Fe ₂ O ₃	s, hematite	159.692	0.0	16.5
Fe ₃ O ₄	s, magnetite	231.539	117.98	121.6
Fe(OH)₃	s	106.869	-48.14	39.6
FeS	s, α	87.911	1037.54	885.6
FeS ₂	s, pyrite	119.975	1684.72	1428.7
FeSO₄	s	151.909	209.11	173.0
FeSi	s	83.933	1249.42	1157.3
FeSiO₃	s	131.931	118.07	161.7
Fe ₂ SiO ₄	s, fayalite	203.778	255.30	236.2
FeTiO₃	s	151.75	118.90	131.4
H ₂	g	2.01594	241.818	236.1
Н	g	1.00797	338.874	331.3
HCI	g	36.461	108.82	84.5
HDO	g	19.0213	0.21	18.8
HDO	1	19.0213	-44.38	10.0
HF	g	20.0064	52.82	80.0
HNO₃	1	63.0129	-53.19	43.5
H ₂ O	g	18.01534	0.0	9.5
H ₂ O	1	18.01534	-44.012	0.9
H ₃ PO ₄	S	98.0013	-76.26	104.0
H₂S	g	34.080	946.61	812.0
H ₂ SO ₄	T	98.077	153.25	163.4
Не	g	4.0026	0.0	30.37
Hg	T	200.59	63.82	115.9
Hg ₂ CO ₃	S	461.189	-12.39	179.8

Sustancia	Estado	Masa Molar	Entalpía	Exergía
		[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
HgCl ₂	S	271.50	0.0	60 8
Hg ₂ Cl ₂	S	472.09	22.86	144.5
HgO	s, red, orthorhombic	216.59	-27.01	57.3
HgS	s, red	232.65	731.08	674.8
HgSO₄	S	296.65	81.73	146.0
Hg₂SO₄	S	497.24	110.36	223.4
I_2	S	253.8088	_	174.7
К	S	39.102	356.63	366.6
KAISi₃O₄	s, adularia	278.337	66.26	99.9
K ₂ CO ₃	S	138.213	-43.58	85.1
KCI	S	75.555	0.0	19.6
KCIO ₄	S	138.553	6.67	136.0
KF	S	58.100	-7.77	62.2
KNO₃	S	101.1069	-135.90	-19.4
K ₂ O	S	94.203	350.04	413.1
КОН	S	56.109	52.72	107.6
K ₂ S	S	110.268	1024.40	943.0
K ₂ SO ₃	S	158.266	300.47	302.6
K ₂ SO ₄	S	174.266	4.62	35.0
K_2SiO_3	S	154.288	75.9	137.9
Kr	g	83.80	0.0	34.36
Li	S	6.939	328.10	393.0
Li ₂ CO ₃	S	73.887	-166.33	70.1
LiCI	s	42.392	0.0	70.7
Li ₂ O	S	29.877	57.38	225.7
LiOH	S	23.946	-35.73	74.1
Li ₂ SO ₄	S	109.940	-52.86	204.3
Mg	S	24.312	725.71	633.8
MgAl ₂ O ₄	s, spinel	142.273	274.17	230.3
MgCO ₃	s	84.321	23.43	37.9
MgCl ₂	s	95.218	244.65	165.9
$MgFe_2O_4$	S	200.004	121.53	77.9
MgO	S	40.311	124.38	66.8

Sustancia	Estado	Masa Molar	Entalpía	Exergía
		[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
Mg(OH) ₂	s	58.327	42.73	40.9
$Mg(NO_3)_2$	S	148.3218	-64.34	57.4
$Mg_3(PO_4)_2$	s	262.879	76.59	130.0
MgS	s	56.376	1105.11	901.6
MgSO ₄	s	120.374	166.22	80.7
MgSiO₃	s	100.396	87.73	22.0
Mg ₂ SiO ₄	s	140.708	188.35	74.9
$Mg_3Si_2O_5(OH)_4$	s, chrysolite	277.134	117.06	61.3
Mg ₃ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂	s, talc	379.289	140.26	36.5
Mg ₂ TiO ₄	s	160.52	231.48	134.3
Mn	s, α	54.9381	520.03	482.3
Mn₃C	s	176.82545	1958.20	1862.3
MnCO3	s	114.9475	19.42	81.8
MnCl ₂	s	125.844	199.18	165.4
MnFe ₂ O ₄	s	230.630	118.36	121.4
MnO	s	70.9375	134.81	119.4
MnO ₂	s	86.9369	0.0	21.1
Mn ₂ O ₃	s	157.8744	81.09	89.4
Mn ₃ O ₄	s	228.8119	172.26	171.6
Mn(OH) ₂	s, amorphous	88.9528	66.47	107.3
MnS	s, green	87.002	1031.23	873.5
MnSO ₄	s	151.000	180.20	142.4
MnSiO₃	s	131.022	110.08	102.3
Мо		95.94	745.09	730.3
Mo ₂ C		203.89	1838.88	1824.6
MoO ₂	s	127.94	156.15	201.2
MoO3	s	143.94	0.0	68.2
Mo_2S_3	s	288.07	3302.43	2891.2
MoS ₂	S	160.068	1960.78	1723.1
N ₂	g	28.0134	0.0	0.72
N ₂ , atmospheric	g	28.1541	0.0	0.69
NH ₃	g	17.0305	316.62	337.9
NH₄CL	S	53.491	249.43	331.3

Sustancia	Estado	Masa Molar	Entalpía	Exergía
		[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
NH ₄ NO ₃	S	80.04348	118.08	294.8
(NH4) ₂ SO ₄	S	132.138	511.84	660.6
NO	g	30.0061	90.25	88.9
NO ₂	g	46.0055	33.18	55.6
N ₂ O	g	44.0128	82.05	106.9
N_2O_4	g	92.0110	9.163	106.5
N ₂ O ₅	g	108.0104	11.30	125.7
Na	S	22.9898	330.90	336.6
NaAlO ₂	S	81.9701	128.40	151.7
NaAlSi₂O ₆ · H₂O	s, analcime	220.055	35.41	104.2
NaAlSi ₃ O ₈	s, low albite	262.2245	72.75	105.5
Na ₂ CO ₃	S	105.9891	75.62	41.5
NaCl	S	58.443	0.0	14.3
NaHCO₃	S	84.0071	-101.94	21.6
Nal	S	149.8942		136.1
NaNO₃	S	84.9947	-135.62	-22.7
Na₂O	S	61.9790	243.82	296.2
NaOH	S	39.9972	23.79	74.9
Na ₂ S	S	78.044	1014.84	921.4
Na ₂ SO ₃	S	126.042	297.63	287.5
Na ₂ SO ₄	S	142.041	0.0	21.4
Na ₂ SiO ₃	S	122.064	11.31	66.1
Na ₂ Si ₂ O ₅	S	182.149	13.28	67.6
Na₄SiO₄	S	184.043	151.45	256.6
Ne	g	20.183	0.0	27.19
Ni	S	58.71	239.74	232.7
Ni₃C	S	188.14	1180.09	1142.9
NiCO ₃	S	11 8.72	-49.93	36.4
NiCl ₂	S	129.62	94.85	97.2
NiO	S	74.71	0.0	23.0
Ni(OH) ₂	S	92.72	-48.13	25.5
NiS	S	90.77	883.15	762.8
Ni ₃ S ₂	S	240.26	1967.14	1720.2

Sustancia	Estado	Masa Molar	Entalpía	Exergía
		[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
NiSO ₄	S	154.77	92.25	90.4
NiSO₄·6H₂0	s, α, tetragonal, green	262.86	-266.75	53.6
O ₂	g	31.9988	0.0	3.97
0	g	15.9994	249.17	233.7
O ₃	g	47.9982	142.67	169.1
Р	s, α, white	30.9738	840.06	875.8
Р	s, red, triclinic	30.9738	822.49	863.6
P ₄ O ₁₀	s, hexagonal	283.8892	376.21	825.3
Pb	S	207.19	305.64	232.8
PbCO ₃	S	267.20	0.0	23.5
PbCl ₂	S	278.10	106.67	42.3
PbO	s, yellow	223.19	88.32	46.9
PbO	s, red	223.19	86.65	45.9
PbO ₂	S	239.19	28.24	19.4
Pb₃O₄	S	685.57	198.53	105.2
Pb(OH) ₂	S	241.20	32.48	20.6
PbS	S	239.25	930.64	743.7
PbSO ₄	S	303.25	111.12	37.2
PbSiO₃	S	283.27	70.88	31.2
Pb ₂ SiO ₄	S	506.46	159.07	75.5
Rb	s	85.47	350.38	388.6
Rb ₂ CO ₃	S	230.95	-33.90	152.4
RbCl	s	120.92	0.0	48.6
Rb ₂ O	S	186.94	370.60	491.3
S	s, rhombic	32.064	725.42	609.6
SO2	g	64.0628	428.59	313.4
SO3	g	80.0622	329.70	249.1
Sb	s, III	121.75	485.97	435.8
Sb_2O_3	S	291.50	263.07	251.2
Sb_2O_4	S	307.50	62.63	83.7
Sb_2O_5	S	323.60	0.0	52.3
Se	s, black	78.96	-	346.5
Si	S	28.086	910.94	854.6

Sustancia	Estado	Masa Molar	Entalpía	Exergía
		[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
SiC	s, α, hexagonal	40.097	1241.69	1204.6
SiCl ₄	1	169.898	544.81	481.9
SiO ₂	s, α, quartz	60.085	0.0	1.9
SiO ₂	s, α, cristobalite	60.085	1.46	2.8
SiO ₂	s, amorphous	60.085	7.45	7.9
SiS ₂	s	92.214	2149.23	1866.3
Sn	s, I, white	118.69	580.74	544.8
Sn	s, II, gray	118.69	578.65	544.9
SnCl ₂	S	189.60	416.08	386.4
SnO	s	134.69	294.97	289.9
SnO ₂	s	150.69	0.0	29.1
SnS	s	150.75	1205.74	1056.1
SnS ₂	S	182.82	1863.8	1604.6
Sr	s	87.62	826.34	730.2
SrCO3	s	143.63	0.0	6.2
SrCl ₂	S	158.53	157.93	72.6
SrO	S	103.62	234.30	170.2
SrO ₂	s	119.62	191.96	140.4
SrS	s	119.68	1098.99	891.8
SrSO ₄	S	183.68	98.66	7.1
Ti	S	47.90	944.75	906.9
TiC	s	59.91	1154.16	1136.7
TiO	S	63.90	425.14	418.5
TiO ₂	s, rutile	79.90	0.0	21.4
Ti ₂ O ₃	S	143.80	368.66	385.5
Ti₃Os	S	223.70	375.10	413.2
TiS ₂	s	112.03	2060.45	1875.9
U	S	238.03	1230.10	1190.7
UCl₃	s	344.39	577.35	550.1
UCI4	s	379.84	499.39	475.2
UCl₅	S	415.30	536.93	513.6
UO ₂	s	270.03	145.19	162.9
UO3	s	286.03	0.0	43.9

Sustancia	Estado	Masa Molar	Entalpía	Exergía
		[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
U ₃ O ₈	S	842.085	115.49	218.5
V	S	50.942	775.30	721.1
VC	S	62.953	1067.96	1032.6
VO	S	66.941	343.51	318.9
VO ₂	S	82.940	57.74	61.9
V ₂ O ₃	S	149.882	322.60	299.7
V ₂ O ₅	S	181.881	0.0	32.5
W	S	183.85	842.87	827.5
WC	S	195.86	1195.84	1199.5
WO ₂	S	215.85	253.18	297.5
WO ₃	S	231.85	0.0	69.3
WS ₂	S	249.98	2084.51	1796.6
Xe	g	131.30	0.0	40.33
Zn	S	65.37	419.27	339.2
ZnCO₃	S	125.38	0.0	23.9
ZnCl ₂	S	136.28	583.93	93.4
$ZnFe_2O_4$	S	241.06	74.08	36.4
ZnO	S	81.37	70.99	22.9
$Zn(OH)_2$	s, β	99.38	19.18	25.7
ZnS	s, sphalerite	97.43	938.71	747.6
ZnSO₄	S	161.43	161.87	82.3
Zn_2SiO_4	S	222.82	112.74	17.8

Entalpía y exergía de formación de sustancias orgánicas en el estado de referencia (T₀=298.15 K, P₀=101.325 kPa).

Fórmula	Nombre	Estado	Masa	Entalpía	Exergía
Química			Molar	de fo	ormación
			[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
CH2	Methylene	g	14.02709	1032.9	1030.5
CH3	Methyl	g	15.03506	889.9	900.5
	Aliphatic satur	ated hydrocarbo	ons CnH2n+2		
CH4	Methane	g	16.04303	802.33	831.65
C2H6	Ethane	g	30.07012	1427.79	1495.84
C3H8	Propane	g	44.09721	2045.4	2154.0
C4H10	<i>n</i> -Butane	g	58.1243	2658.4	2805.8
C5H12	<i>n</i> -Pentane	g	72.15139	3274.3	3463.3
				3247.2	3461.8
C6H14	<i>n</i> -Hexane	g	86.17848	3889.3	4118.5
				3857.6	4114.5
C7H16	<i>n</i> -Heptane		100.2055	4464.7	4761.7
C8H18	<i>n</i> -Octane	I	114.2326	5074.4	5413.1
C9H20	n-Nonane		128.2597	5684.2	6064.9
C10H22	<i>n</i> -Decane	I	142.2868	6294.0	6716.8
C11H24	<i>n</i> -Undecane	I	156.3139	6908.6	7376.9
C12H26	<i>n</i> -Dodecane	I	170.3410	7518.8	8029.4
C13H28	<i>n</i> -Tridecane	I	184.3681	8129.0	8682.0
C14H30	n-Tetradecane	I	198.3952	8739.2	9334.5
C15H32	n-Pentadecane	I	212.4222	9349.4	9984.8
C16H34	n-Hexadecane	I	226.4493	9959.6	10639.7
	Сус	loparaffins CnH	2n		
C3H6	Cyclopropane	g	42.08127	1959.2	2043.2
C4H8	Cyclobutane	g	56.10836	2388.7	2516.2
C6H12	Cyclohexane	g	84.16254	3691.4	3914.3
		I		3658.3	3909.2
C6H12	Methylcyclopentane	I	84.16254	3673.5	3910.8
C7H14	Methylcyclohexane	g	98.18963	4295.5	4556.9
C8H16	Ethylcyclohexane	g	112.2167	4914.3	5228.5

Fórmula	Nombre	Estado	Masa	Entalpía	Exergía			
Química			Molar	de fo	ormación			
			[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]			
				4873.8	5205.9			
C9H18	n-Propylcyclohexane	I	126.2438	5483.3	5857.7			
C10H20	n-Butylcyclohexane	I	140.2709	6094.3	6511.5			
Olefins (ethylenic hydrocarbons) CnH2n								
C2H4	Ethylene	g	28.05418	1323.1	1361.1			
C3H6	Propylene	g	42.08127	1927.7	2003.9			
C4H8	1-Butylene	g	56.10836	2542.9	2659.7			
C6H12	1-Hexylene	g	84.16254	3772.9	3970.5			
		I		3742.2	3967.9			
C7H14	1-Heptylene	g	98.18963	4388.0	4625.5			
		I		4338.5	4604.6			
Acetylene hydrocarbons CnH2n-2								
C2H2	Acetylene	g	26.03824	1255.6	1265.8			
C3H4	Propyne	g	40.06533	1850.9	1899.5			
C4H6	1-Butyne	g	54.09242	2465.6	2552.3			
C6H10	1-Hexyne	g	82.1466	3696.3	3865.1			
C7H12	1-Heptyne	g	96.17369	4311.4	4520.5			
C8H14	1-Octyne	g	110.2007	4923.2	5170.3			
C9H16	1-Nonyne	g	124.2278	5537.9	5825.1			
Diene hydrocarbons CnH2n-2								
C3H4	Propadiene	g	40.06533	1472.1	1523.8			
C5H8	Pentadiene	g	68.11951	2789.2	2914.8			
Aromatic hydrocarbons (benzene derivatives)								
C6H6	Benzene	q	78.11472	3171.6	3303.6			
		Ĩ		3137.7	3298.5			
C7H8	Toluene	q	92.14181	3774.4	3943.4			
		Ĩ		3736.4	3931.0			
C8H10	Ethylbenzene	g	106.1689	4390.0	4598.8			
	-			4347.7	4587.9			
C8H10	o-Xylene	I	106.1689	4332.8	4573.1			
C9H12	n-Propylbenzene	I.	120.1959	4957.5	5249.1			

Fórmula	Nombre	Estado	Masa	Entalpía	Exergía			
Química			Molar	de formación				
			[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]			
C10H14	n-Butylbenzene		134.2230	5567.7	5892.0			
C16H26	n-Decylbenzene		218.3856	9198.3	9700.8			
Solid hydrocarbons								
C10H8	Naphthalene	s	128.1752	4984.2	5255.0			
C10H14	1,2,4,5-Methylbenzene	s	134.2230	5533.0	5880.0			
C10H10	2-Methylnaphthalene	s	142.2023	5574.9	5881.4			
C11H16	Pentamethylbenzene	s	148.2501	6131.6	6516.0			
C12H18	Hexamethylbenzene	s	162.2772	6739.1	7171.0			
C14H10	Anthracene	s	178.2358	6850.9	7218.1			
C14H10	Phenanthrene	s	178.2358	6835.9	7201.8			
C14H14	1,1-Diphenylethan	s	182.2676	7250.9	7665.9			
C18H38	n-Octadecane	s	254.5035	11116.7	11937.4			
C19H16	Triphenylmethane	s	244.3393	9579.7	10109.2			
C24H18	1,3,5-Triphenylbenzene	s	306.4110	11850.1	12490.3			
C25H20	Tetraphenylmethane	s	320.4381	12544.1	13231.6			
Organic compounds containing oxygen								
CH2O	Formaldehyde	g	30.02649	519.4	538.4			
CH2O3	Formic acid	g	46.02589	259.1	301.3			
		I		213.0	291.7			
CH4O	Methanol	I	32.04243	638.4	718.0			
C2H6O	Ethyl alcohol	g	46.06952	1278.2	1363.9			
		I		1235.9	1357.7			
C2H6O	Dimethyl ether	g	46.06952	1328.1	1419.5			
C2H4O	Acetic aldehyde	g	44.05358	1105.5	1163.3			
C2H4O	Ethyleneoxyde	g	44.05358	1220.5	1284.4			
C2H6O2	Ethylene glycol	I	62.06892	1058.6	1207.3			
C2H4O2	Acetic acid	g	60.05298	834.1	919.0			
		I		786.6	908.0			
C3H8O	Propylalcohol-2		60.09661	1830.6	1998.6			
C3H6O	Acetone	g	58.08067	1690.9	1791.5			
				1659.6	1788.5			
C4H8O	Butylaldehyde-1	I	72.10776	2296.5	2463.3			

Fórmula	Nombre	Estado	Masa	Entalpía	Exergía
Química			Molar	de formación	
			[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
C4H8O	Butylketone-2	I	72.10776	2264.1	2432.6
C4H40	Furane	g	68.07588	2024.4	2118.8
		I		1996.7	2118.2
C4H8O2	Butyric acid	Ι	88.10716	2018.8	2215.8
C4H8O2	Ethyl acetate	I	88.10716	2073.6	2269.6
C5H12O	Amyl alcohol	I	88.15079	3060.7	3311.7
C5H12O	2-Methylbutanol-2	I	88.15079	3017.2	3275.7
C5H10O	Cyclopentanol	Ι	86.13485	2878.7	3109.7
C5H6O2	Furfuryl alcohol	I	98.10237	2418.6	2687.7
C6H14O	Hexyl alcohol-l	I	102.1778	3668.9	3961.1
C6H12O	Cyclohexanol	I	100.1619	3465.4	3750.8
C7H16O	Heptyl alcohol-l	Ι	116.2049	4285.6	4619.2
C7H8O	Benzyl alcohol	I	108.1412	3563.4	3795.8
C4H10O4	Erythrite	s	122.1219	1874.7	2193.0
C4H6O4	Succinic acid	s	118.0900	1356.9	1609.4
C4H4O4	Malonic acid	s	116.074	1271.3	1495.7
C4H4O4	Fumaric acid	s	116.074	1249.1	1471.5
C6H6O	Phenol	s	94.11412	2925.9	3128.5
C6H14O6	Dulcite	s	182.1748	2729.6	3196.3
C6H14O6	Mannit	s	182.1748	2739.6	3204.8
C6H12O6	-D-Galactose	s	180.1589	2529.6	2928.8
C6H12O6	L-Sorbose	s	180.1589	2544.6	2939.0
C7H6O2	Benzoic acid	s	122.1246	3097.2	3343.5
C7H6O3	Hydroxybenzoic acid	s	138.1240	2888.1	3151.2
C8H4O3	Phthalic acid anhydride	s	148.1192	3173.8	3434.8
C8H6O4	Phthalic acid	s	166.1346	3094.3	3412.6
C12H10O	Diphenyl ether	s	170.2129	5903.1	6282.4
C12H22O11	-Lactose	s	342.3025	5154.2	5988.1
C12H22O11	Saccharose	s	342.3025	5166.2	6007.8
C12H24O12	-Lactose monohydrate	s	360.3178	5152.2	6043.3
C12H24O12	-Maltose monohydrate	s	360.3178	5173.2	6063.4
C16H34O	Cetyl alcohol	s	242.4487	9731.3	10493.9

Fórmula	Nombre	Estado	Masa	Entalpía	Exergía		
Química			Molar	de for	mación		
			[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]		
C16H32O2	Palmitin acid	s	256.4322	9290.3	10052.3		
C2H2O4	Oxalic acid	s	90.03584	202.7	368.7		
Organic compounds containing nitrogen and oxygen							
C2H4N4	Dicyanodiamide	s	84.08098	1296.5	1477.4		
C3H6N6	Melamine	s	126.12147	1835.6	2120.5		
C5H5N5	Adenine	s	135.1291	2664.9	2941.0		
C6H4N2	2-Cyanopyridine	s	104.11218	3106.1	3246.9		
C12H11N	Diphenylamine	s	169.22817	6188.1	6540.7		
CH4ON2	Urea	s	60.05583	544.7	689.0		
CH6O2N2	Ammonium urethane	s	78.06037	474.8	666.7		
C2H5O2N	Aminoacetic acid	s	75.06765	867.6	1049.5		
C3H7O2N	D,L-Alanine	s	89.09474	1462.4	1689.4		
C4H7O4N	L-Aspartic acid	s	133.1046	1445.2	1743.8		
C4H8O3N2	L-Asparagine	s	132.1199	1749.9	2061.3		
C4H2O4N2	Alloxan	s	142.0715	813.1	1053.8		
C4H7ON3	Creatinine	s	113.1198	2179.7	2440.6		
C4H9O2N3	Creatine	s	131.1352	2123.1	2442.8		
C4H6O3N4	Allantoin	s	158.1174	1580.0	1909.9		
C5H9O4N	D-Glutamic acid	s	147.1317	2047.9	2393.2		
C5H4ON4	Hypoxanthine	s	136.1138	2337.3	2602.4		
C5H4O2N4	Xanthine	s	152.1132	2068.8	2361.7		
C5H5O3N4	Uric acid	s	169.1206	1950.6	2289.1		
C5H5ON5	Guanine	s	151.1285	2385.2	2691.2		
C9H9O3N	Hypuric acid	s	179.1769	4014.3	4388.1		
C12H5O12N7	1,3,5-Hexanitrodiphenylamine	s	439.21335	5397.2	6167.8		
Organic compounds containing sulfur							
C2H6S	Ethyl mercaptan	I	62.134	2164.9	2134.0		
C2H6S	Dimethyl sulfide	I	62.134	2173.2	2145.4		
C3H8S	Propyl mercaptan	I	76.161	2784.3	2794.7		
C3H8S	Methylethyl sulfide	I	76.161	2783.6	2795.0		
C4H10S	Butyl mercaptan	I	90.188	3386.2	3438.7		
C4H10S	2-Methylpropyl mercaptan	I	90.188	3378.9	3434.3		

Fórmula	Nombre	Estado	Masa	Entalpía	Exergía
Química			Molar	olar de formación	
			[kg/kmol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]
C4H10S	Diethyl sulfide		90.188	3392.9	3446.3
C4H10S	Methylpropyl sulfide	I	90.188	3386.2	3442.6
C4H4S	Thiophene	I	84.140	2865.9	2847.0
C4H10S2	Ethylbutyl disulfide	I	122.252	4117.1	4055.4
C5H12S	Amyl mercaptan	I	104.215	3994.8	4091.3
C5H6S	2-Methylthiophene	I	98.168	3374.5	3396.5
C5H6S	3-Methylthiophene	I	98.168	3376.1	3398.2
C6H6S	Thiophenol	I	110.179	3876.6	3916.1
C6H14S2	Dipropyl disulfide	I	150.306	5336.5	5358.4
C6H10O4S2	Milk acid , '-dithiane	s	210.272	4053.1	4168.6
C3H7OSN	1-Cysteine	s	105.159	2219.3	2285.8
C6H12O4S2N	1 Custing		240.202	4040.0	4445 5
2	1-Cystine	S	240.302	4212.8	4415.5