

**GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN PARA LA PREDICCIÓN DE CALORES DE  
FORMACIÓN EN COMPUESTOS CON FÓSFORO Y OXÍGENO**

**MARÍA EUGENIA CALA DÍAZ  
BREIDY LORENA TÉLLEZ MARÍN**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA**

**2016**

**GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN PARA LA PREDICCIÓN DE CALORES DE  
FORMACIÓN EN COMPUESTOS CON FÓSFORO Y OXÍGENO**

**MARÍA EUGENIA CALA DÍAZ  
BREIDY LORENA TÉLLEZ MARÍN**

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de Ingeniera  
Química**

**Director  
GIOVANNI MORALES MEDINA  
Ingeniero Químico, Dr.**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA**

**2016**

## **AGRADECIMIENTOS**

Primeramente a Dios, nuestro sustento y guía, el motivo y la fuerza para cada paso que hemos dado en nuestras vidas.

A nuestros padres, quienes con esfuerzo y dedicación han contribuido en nuestra formación como personas integra para la sociedad.

Al profesor Giovanni Morales Medina, por aceptarnos para realizar éste trabajo de investigación bajo su dirección, apoyo, disponibilidad y paciencia al momento de compartir su conocimiento sobre Simulación Molecular.

De igual manera a cada uno de los docentes de la Escuela Ingeniería Química por brindar los pilares necesarios en nuestra formación como Ingenieras Químicas.

## **DEDICATORIA**

*A Dios por ser mi guía espiritual de sustento, apoyo y protección. Por darme una familia maravillosa, salud y ganas de superarme cada día cómo persona y profesional.*

*A mis padres Saulo y Edilia por educarme en valores, por su incansable amor y principalmente por hacer de mí quien soy.*

*A mi hermano y mis hermanas por sus buenos deseos y compañía.*

**Breidy Lorena Téllez Marín**

## **DEDICATORIA**

*A Dios.*

*A mis queridos padres María Eugenia Díaz y Alfonso Cala, por estar siempre apoyarme incondicionalmente, por su amor, cariño y por sus sabios consejos.*

*A mis hermanos por siempre querer lo mejor para mí.*

*A Fredy Ortiz por su amor y cariño, por sus palabras de alientos en los momentos difíciles.*

**María Eugenia Cala Díaz**

## TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN .....	16
1. MARCO TEÓRICO.....	18
1.1. CALORES DE FORMACIÓN DE COMPUESTOS CON FÓSFORO Y OXÍGENO.....	18
1.2. GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN.....	19
1.3. REACCIONES ISODÉSMICAS .....	19
1.4. CÁLCULOS DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA.....	20
1.5. SOFTWARE LIBRE GAMESS.....	21
2. METODOLOGÍA.....	22
2.1. FASE 1: GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN A ESTIMAR .....	23
2.2. FASE 2: CALORES DE FORMACIÓN EN FUNCIÓN DE REACCIONES ISODÉSMICAS.....	23
2.3. FASE 3: CÁLCULOS DE ENERGÍA .....	24
2.4. FASE 4: OBTENCIÓN DE GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN POR RLM....	24
3. RESULTADOS .....	26
3.1. GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN REPORTADOS EN LA LITERATURA. ..	26
3.2. PROPOSICIÓN DE REACCIONES ISODÉSMICAS .....	27
3.3. CÁLCULO DE GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN.....	29

3.4. VERIFICACIÓN DE LOS GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN CALCULADOS.....	31
4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES .....	35
5. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	36
6. BIBLIOGRAFÍA .....	39
ANEXOS.....	40

## LISTA DE FIGURAS

	<b>Pág.</b>
Figura 1. Reacción isodésmica para el ácido etenil-fosfónico. ....	20
Figura 2. Cuadro metodológico.....	22
Figura 3. Geometrías para dos moléculas analizadas. ....	32

## LISTA DE TABLAS

	<b>Pág.</b>
Tabla 1. Dos funcionales utilizados en DFT.....	20
Tabla 2. Dos bases usadas en cálculos cuánticos.....	21
Tabla 3. Calor de formación para grupos de contribución con contenido de fósforo y oxígeno reportados en literatura. ....	26
Tabla 4. Estructura molecular y desglose en grupos de contribución. ....	27
Tabla 5. Calor de formación para el compuesto $(\text{OH})_2\text{POC}_2\text{H}_3$ a partir de reacciones isodésmicas; calor de formación en kJ/mol. ....	28
Tabla 6. Calores de formación de moléculas sencillas reportadas en literatura. ...	28
Tabla 7. Energías calculadas para algunas moléculas. ....	29
Tabla 8. Grupos de contribución calculados en el presente trabajo.....	30
Tabla 9. Comparación entre el delta energía de la reacción y el delta de energía de la simulación. ....	33
Tabla 10. Cálculo de las entalpías de formación de las moléculas estudiadas.....	33

## LISTA DE ANEXOS

	<b>Pág.</b>
ANEXO A. Estructuras moleculares y desglose en grupos de contribución. ....	40
ANEXO B. Matriz de grupos de contribución conocidos. ....	48
ANEXO C. Matriz de grupos de contribución desconocidos. ....	50
ANEXO D. Reacciones isodesmicas. ....	53
ANEXO E. Energías de formación de las moléculas propuestas. ....	61
ANEXO F. Comparación entre el delta energía de la reacción y el delta de energía de la simulación. ....	62

## RESUMEN

**TÍTULO:** GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN PARA LA PREDICCIÓN DE CALORES DE FORMACIÓN EN COMPUESTOS CON FÓSFORO Y OXÍGENO. \*

**AUTORES:** María Eugenia Cala Díaz.  
Breidy Lorena Téllez Marín. \*\*

**PALABRAS CLAVE:** Calor de formación, reacciones isodésmicas, grupos de contribución, B3LYP, B2PLYP, regresión lineal, GAMESS, Avogadro.

### DESCRIPCIÓN:

En esta investigación se ha efectuado un análisis del calor de formación de moléculas de tipo  $R_1-PO(R_2)(R_3)$ , para el cálculo de los grupos de contribución faltantes en esas estructuras. La estimación de los grupos faltantes fue realizada por medio de un conjunto de moléculas iniciales y de reacciones isodésmicas para las mismas. Los cálculos al nivel B3LYP/6-31+G(d,p)//B2PLYP/6-31+G(d,p) fueron aplicados para generar resultados energéticos en las reacciones isodésmicas. El desglose en grupos de contribución para los calores de formación de las moléculas iniciales y los calores de las reacciones isodésmicas condujo a un sistema matricial que fue resuelto mediante regresión lineal múltiple para obtener los grupos de contribución desconocidos. Según los resultados, los valores para los grupos de contribución obtenidos presentan un margen de error apreciable, debido a que las moléculas presentan interacciones como eclipses y puentes de hidrógenos entre átomos no enlazados. A pesar de lo anterior, los grupos de contribución calculados en el presente trabajo constituyen una aproximación de gran valor para estimaciones iniciales de los requerimientos calóricos en procesos que involucren estructuras de tipo  $R_1-PO(R_2)(R_3)$ , ya que proporciona una alternativa para el cálculo de los grupos de contribución, ampliando la base de calores de formación para compuestos desconocidos. Se recomienda que estas interacciones entre átomos no enlazados sean incluidas en la matriz de grupos para disminuir la incertidumbre en los valores de los grupos de contribución ajustados

---

\*Trabajo de grado

\*\* Facultad de Ingenierías Físicoquímica. Escuela de Ingeniería Química. Director: Giovanni Morales, Dr. Ing. Químico.

## ABSTRACT

**TITLE:** CONTRIBUTION GROUPS FOR THE HEAT OF FORMATION OF COMPOUNDS WITH PHOSPHORUS AND OXYGEN.\*

**AUTHORS:** María Eugenia Cala Díaz.  
Breidy Lorena Téllez Marín.\*\*

**KEY WORDS:** Heat of formation, isodesmic reactions, contribution groups, B3LYP, B2PLYP, linear regression, GAMESS, Avogadro.

### SUMMARY:

This research's main goal was to analyze the heat of formation for molecules with the structure  $R_1-PO(R_2)(R_3)$  in order to calculate the related unknown contribution groups. A set of molecules containing the unknown groups as well as different isodesmic reactions involving these molecules were proposed for the procedure. Calculations at the B3LYP/6-31+G(d,p)//B2PLYP/6-31+G(d,p) level were applied to predict energies for the isodesmic reactions. Linear regression was applied to estimate the unknown groups from a matrix system derived from the isodesmic reactions. According to the results, the values obtained for the contribution groups presented high errors, mainly because molecules reported interactions such as eclipses and bridges of hydrogen between non-bounded atoms, which were not taken into account in the implementation of the respective calculations. In spite of the above, the contribution groups calculated in the present work constitute a great value approximation for initial estimations of the caloric requirements in processes involving structures of type  $R_1-PO(R_2)(R_3)$ , since it provides an alternative For the calculation of contribution groups, by expanding the heat heats of formation for unknown compounds. It is recommended that these interactions between unbound atoms be included in the group matrix to reduce uncertainty in the values of the adjusted contribution groups.

---

\*Degree project

\*\* Chemical Physics Engineering Faculty. School of Chemical Engineering. Advisor: Giovanni Morales, Ph.D. Chem. Eng.

## INTRODUCCIÓN

La primera ley de la termodinámica establece el principio de conservación de la energía, la cual aplicada a la ingeniería química puede ser expresada como la diferencia de entalpía entre los reactivos y los productos. Esta diferencia en la entalpía, según la ley de Hess puede ser expresada como la diferencia entre los calores de formación de productos y reactivos. Los calores de formación pueden ser medidos por procedimientos experimentales.

Para una gran cantidad de compuestos con átomos de fósforo y oxígeno de la forma  $R_1-PO(R_2)(R_3)$ , estos calores de formación no han sido aún medidos, posiblemente debido que la experimentación puede ser costosa y demorada y en algunos casos, la experimentación también puede ser riesgosa.

Las propiedades termoquímicas, pueden ser estimadas con rapidez y sin costo, a través de los grupos de contribución; un grupo de contribución está definido como un átomo polivalente y los átomos enlazados al mismo. Estos grupos de contribución están basados en las reglas de aditividad propuestas por Benson & Buss [1]; las cuales establecen que las propiedades de moléculas corresponden a la suma de los aportes de los grupos individuales.

Los grupos de contribución han ayudado a reducir los altos costos en la determinación de propiedades termodinámicas en la industria (por lo menos en la parte inicial de un diseño), y sus valores han sido ampliados para un gran número de compuestos con contenido de carbono, oxígeno, nitrógeno, halógenos e hidrógeno [2].

De otro lado, los grupos de contribución para las estructuras  $R_1-PO(R_2)(R_3)$  son limitados a moléculas sencillas, los reportes de estas estructuras han sido dirigidos a análisis geométricos y espectroscópicos. El presente trabajo está dedicado a la

ampliación de la base de datos correspondiente al calor de formación de moléculas con contenido de fósforo y oxígeno, según el grupo  $R_1-PO(R_2)(R_3)$  en donde el fósforo posee tres valencias disponibles.

## 1. MARCO TEÓRICO

### 1.1. CALORES DE FORMACIÓN DE COMPUESTOS CON FÓSFORO Y OXÍGENO.

El calor de formación de un compuesto puro se define como el cambio de entalpía que ocurre cuando una mol de un compuesto químico se forma isotérmicamente y a presión constante a partir de sus elementos constituyentes [3].

Uno de los reportes en la estimación de esta propiedad para óxidos de fósforo fue dirigido por Ewig y Van Wazer, quienes abordaron los ácidos fosfínico, fosfónico y fosfórico [4]. Más recientemente, los cálculos de geometría y estabilidad han sido estudiados por métodos “*ab initio*” y métodos *DFT*. Leroy *et al*, calcularon las entalpías de formación de compuestos con fósforo utilizando los niveles de teoría MP2 y B3LYP con incertidumbre en sus resultados debido a los tamaños de las bases utilizadas (STO-G y 3-21G) [5].

Asimismo, Morgon reportó entalpías de formación para compuestos con fósforo y oxígeno al nivel de teoría CCCA para especies con limitado número de átomos pesados, probablemente debido a los requerimientos computacionales con este nivel de teoría [6].

También, *Khalfa et al*, analizaron compuestos órgano-fosfatados utilizados como pesticidas y fungicidas. Estos autores utilizaron el método compuesto CBS-QB3 reportando valores aceptables; además dado el gran número de moléculas analizadas se determinaron algunos valores para grupos de contribución con fósforo y oxígeno [7].

De otro lado, los métodos B3LYP/6-31+G(d,p) para geometría y B2PLYP/6-31+G(d,p) para energía han reportado valores que concuerdan con resultados experimentales para compuestos con estructuras  $C_nH_{2n+2}$  y  $CO_2NH_xR_y$  [14][15]. En

el presente documento se utilizan cálculos a nivel B3LYP/6-31+G(d,p) y B2PLYP/6-31+G(d,p) para generar resultados energéticos útiles para la estimación de grupos de contribución de tipo  $R_1-PO(R_2)(R_3)$ .

## 1.2. GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN

Las propiedades termoquímicas de una molécula pueden obtenerse utilizando las contribuciones debidas a grupos. Un grupo está definido como un átomo polivalente (número de ligandos  $\geq 2$ ) dentro de una molécula teniendo en cuenta los demás ligandos. En la nomenclatura se identifica primero, el átomo polivalente y seguido de este se colocan los ligandos [8].

Por ejemplo, el ácido etenil fosfónico,  $(OH)_2POC_2H_3$  analizado en éste proyecto Figura 1, compete los siguientes grupos de aditividad para la estimación del calor de formación:

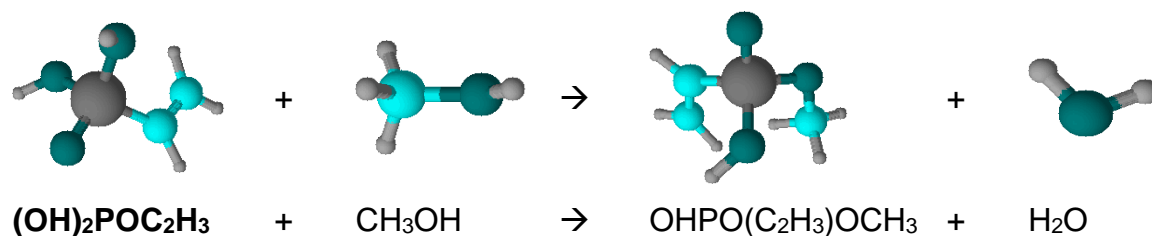
$$\Delta H_f = PO/O_2/Cd + Cd/PO/H + Cd/H_2 + 2*O/PO/H$$

## 1.3. REACCIONES ISODÉSMICAS

Una reacción isodésmica es aquella en la que el número de enlaces de cada tipo no cambia. Éste tipo de reacción presenta una alta fiabilidad en la predicción de entalpías de formación dada la cancelación de las energías de correlación entre las conformaciones moleculares [9].

Así, siguiendo el caso para el ácido etenil fosfónico un ejemplo de reacción isodésmica se presenta en la Figura 1, en la cual tanto en reactivos como productos se presentan un enlace PO-Cd, un enlace O-C, dos enlaces PO-O tres enlaces O-H y seis enlaces para C-H:

**Figura 1.** Reacción isodésmica para el ácido etenil-fosfónico.



#### 1.4. CÁLCULOS DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA

Los cálculos de estructura electrónica predicen el comportamiento de las sustancias, basados en la distribución electrónica a escala atómica y molecular, la cual puede ser representada matemáticamente, mediante la ecuación de Schrödinger. La solución de esta ecuación reporta la energía y la función de onda que contiene información sobre las propiedades electrónicas del sistema [9].

Complementariamente la teoría de los funcionales de la densidad electrónica (DFT: *density functional theory*) basados en los teoremas de Hohenberg y Kohn y en las ecuaciones de Kohn y Sham [10] postulan que las propiedades del sistema dependen de la densidad electrónica. Entre los métodos DFT se encuentran los funcionales B3LYP y B2PLYP (Tabla 1) usados en el cálculo de geometría molecular y energía, respectivamente.

**Tabla 1.** Dos funcionales utilizados en DFT.

Método		Fundamento
Funcionales DFT	B2PLYP	Se combina el funcional B de Becke para el intercambio, el cual incluye el funcional de Slater con unas correcciones del gradiente de la densidad electrónica, con el funcional de correlación de Lee, Yang y Parr.
	B3LYP	Es un funcional híbrido y es el funcional más utilizado. Se combina una expresión para la energía de intercambio del método de Hartree-Fock, con una expresión para la energía

Método	Fundamento
	de correlación que mezcla el funcional VWN con el funcional LYP.

Para describir un cálculo mecano-cuántico se debe especificar el método y la función base a utilizar, aproximación a la función de onda (Tabla 2). De esta forma un cálculo de optimización de la geometría o un cálculo de energía puede ser especificado como B3LYP/6-31G; un cálculo de optimización geométrica seguido de un cálculo de energía utilizando un mayor nivel de teoría puede ser especificado como B3LYP/6-31G//B2PLYP/6-31+G\*\*.

**Tabla 2.** Dos bases usadas en cálculos cuánticos.

Base	Tipo de base	Modo de descripción de los orbitales atómicos
6-31+G	Doble Zeta	Core: 1 función de base con 6 primitivas gaussianas. Valencia: 2 funciones de base, una con 3 primitivas gaussianas y otra con sólo 1.
6-31+G**	Doble Zeta	Ídem a 6-31G, con funciones difusas y con polarización.

## 1.5. SOFTWARE LIBRE GAMESS

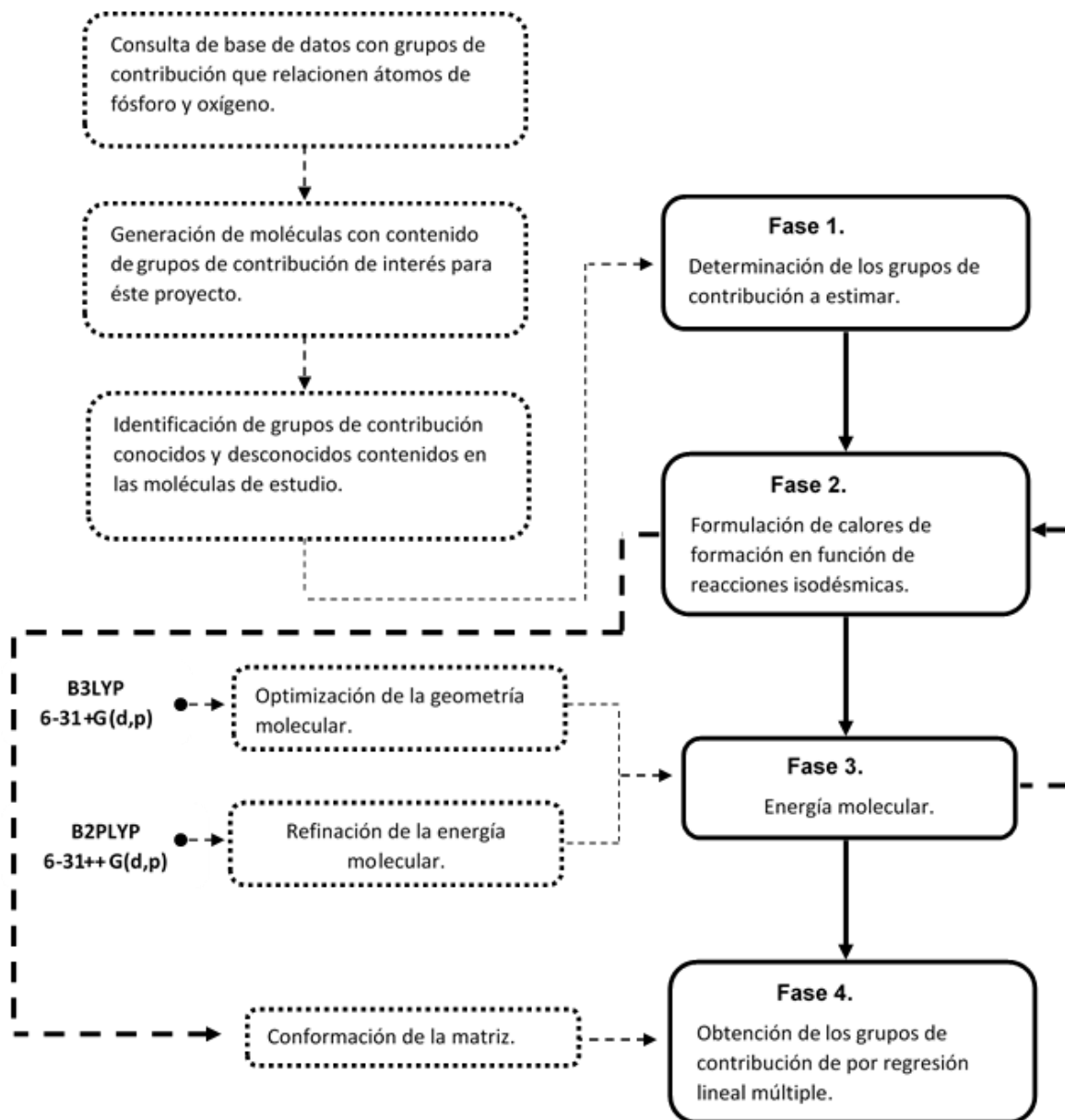
La ecuación de Schrödinger y las ecuaciones de Kohn y Sham pueden ser resueltas por el software libre GAMESS (*The General Atomic and Molecular Electronic Structure System*) [11].

GAMESS es un programa de química cuántica que permite realizar una gran diversidad de cálculos mecano-cuánticos de sistemas moleculares, mediante el ajuste de las funciones ondas de la molécula [12].

## 2. METODOLOGÍA

En la Figura 2 se muestra el cuadro metodológico utilizado en el presente trabajo de investigación

Figura 2. Cuadro metodológico.



## 2.1. FASE 1: GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN A ESTIMAR

Diferentes grupos de contribución desconocidos para compuestos con estructuras  $R_1-PO(R_2)(R_3)$  fueron seleccionados para ampliar la lista de grupos reportados en la literatura. Para cada grupo identificado se proponen 3 moléculas con la respectiva estructura.

Con base en las moléculas planteadas, se conforman dos matrices a partir del desglose en sus grupos de contribución. Una de las matrices correspondió a grupos conocidos y la otra a los desconocidos (A), con la particularidad, que (A'A) fuera invertible como un requerimiento del método RLM.

## 2.2. FASE 2: CALORES DE FORMACIÓN EN FUNCIÓN DE REACCIONES ISODÉSMICAS

La estimación de los calores de formación fue obtenida por medio de la proposición de tres reacciones isodésmicas para cada molécula de la fase anterior; el calor de formación fue obtenido como un promedio aritmético. Los calores de formación conocidos para las estructuras involucradas en las reacciones isodésmicas fueron tomados del *webbook NIST* [13].

Los calores de formación desconocidos para las estructuras diferentes a la molécula central de cada reacción isodésmica fueron desglosados en sus respectivos grupos de contribución. Con lo anterior, los calores de formación para las estructuras de la fase anterior fueron expresados en términos de las energías moleculares y de los grupos de contribución desconocidos a través de la ley de Hess.

### 2.3. FASE 3: CÁLCULOS DE ENERGÍA

En ésta fase, el paquete computacional libre denominado Avogadro, fue utilizado para dibujar y generar la matriz de coordenadas internas de cada una de las moléculas involucradas en las reacciones isodésmicas planteadas en la fase 2.

Las geometrías de las moléculas utilizadas en las reacciones isodésmicas, fueron optimizadas al nivel B3LYP/6-31+G(d,p) mientras que la energía de la geometría optimizadas fueron refinadas al nivel B2PLYP/6-31+G(d,p). Las frecuencias vibracionales fueron estimadas al nivel B3LYP/6-31+G(d,p) para corroborar la estabilidad de las estructuras.

Los cálculos de geometría, frecuencia y energía fueron efectuados según los códigos del programa GAMESS.

### 2.4. FASE 4: OBTENCIÓN DE GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN POR RLM

Con las energías moleculares los calores de formación expresados según las reacciones isodésmicas fueron expresados en términos de los grupos de contribución desconocidos.

El sistema para la obtención de los grupos de contribución desconocidos para los compuestos propuestos se obtiene por medio de la aplicación de la regresión lineal múltiple según el siguiente modelo:

$$\Delta H_f^o = G * X$$

$$G * X = A_{CON} * X_{CON} + A_{NC} * X_{NC}$$

$$C + B_{NC} * X_{NC} = A_{CON} * X_{CON} + A_{NC} * X_{NC}$$

$$C - A_{CON} * X_{CON} = (A_{NC} - B_{NC})X_{NC}$$

$$b = C - A_{CON} * X_{CON}$$

$$b = M * X_{NC}$$

$$X_{NC} = (M' M)^{-1} * M' * b$$

Dónde:

G: Grupos de contribución.

$A_{CON}$ : Matriz con el número de grupos conocidos en las moléculas planteadas.

$A_{NC}$ : Matriz con el número de grupos conocidos desconocidos en las moléculas planteadas

$X_{CON}$ : Vector de valores de los grupos de contribución conocidos.

$X_{NC}$ : Vector de valores de los grupos de contribución desconocidos.

$B_{NC}$ : Matriz con el número de grupos desconocidos por parte de las reacciones isodésmicas.

C: Matriz de valores conocidos por parte de las reacciones isodésmicas.

La regresión lineal múltiple fue aplicada según el algoritmo implementado en el programa Matlab.

### 3. RESULTADOS

De acuerdo con lo establecido en cada una de las fases de la metodología se obtuvo el calor de formación para 58 moléculas (Anexo 1) y se determinaron 18 grupos de contribución no reportados en la literatura. Los resultados para cada fase se presentan a continuación.

#### 3.1. GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN REPORTADOS EN LA LITERATURA.

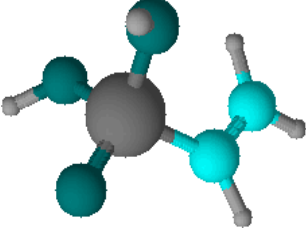
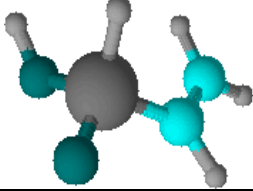
Tras la consulta del apéndice A del libro *Thermochemical Kinetics* de Sydney Benson y el artículo *Quantum Chemical Study of the Thermochemical Properties of Organophosphorous Compounds* de *The Journal of Physical Chemistry*, se compilaron los siguientes datos a condiciones estándar:

**Tabla 3.** Calor de formación para grupos de contribución con contenido de fósforo y oxígeno reportados en literatura.

GRUPO DE CONTRIBUCIÓN	$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]	GRUPO DE CONTRIBUCIÓN	$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]
C/PO/H <sub>3</sub>	-42.18	PO/N <sub>3</sub>	-437.65
C/PO/C/H <sub>2</sub>	-14.23	O/C/PO	-98.32
C <sub>B</sub> /PO	9.62	O/H/PO	-271.96
PO/C <sub>3</sub>	-304.60	O/PO <sub>2</sub>	-228.03
PO/C/Cl <sub>2</sub>	-514.63	N/PO/C <sub>2</sub>	134.73
PO/C/O/Cl	-471.12	PO/C/O/H	-313.59
PO/C/O <sub>2</sub>	-416.31	PO/O <sub>2</sub> /H	-358.19
PO/O <sub>3</sub>	-437.65	PO/C <sub>2</sub> /O	-339.20
PO/O <sub>2</sub> /F	-701.66	PO/C <sub>B3</sub>	-221.33

Seguido de la consulta se procedió a generar 58 moléculas (Anexo 1) con los grupos de contribución de interés identificando los grupos de contribución conocidos y desconocidos como se muestra en las Tablas 1 y 4.

**Tabla 4.** Estructura molecular y desglose en grupos de contribución.

MOLÉCULA	GRUPO DE CONTRIBUCIÓN
	$PO/O_2/Cd + 2O/PO/H + Cd/PO/H + Cd/H_2$
$(OH)_2POC_2H_3$ Ácido Etenil-fosfónico	
	$PO/Cd/O/H + Cd/PO/H + O/PO/H + Cd/H_2$
$HPO(OH)C_2H_3$ Ethenylphosphinic acid	

Ya identificados los grupos de contribución faltantes para las estructuras tipo  $R_1-PO(R_2)(R_3)$ , las matrices de número de grupos conocidos (Anexo 2) y de número de términos desconocidos (Anexo 3) fueron obtenidas a partir de las moléculas propuestas .

### 3.2. PROPOSICIÓN DE REACCIONES ISODÉSMICAS

Para cada una de las 58 moléculas se plantearon tres reacciones isodésmicas (Anexo 4), teniendo en cuenta que la conservación del tipo y el número de enlaces. En la tabla 5 se presentan las tres reacciones isodésmicas para la molécula  $(OH)_2POC_2H_3$ ; también, en esta tabla se presenta el calor de formación en términos de los grupos desconocidos y las energías de reacción.

**Tabla 5.** Calor de formación para el compuesto (OH)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub> a partir de reacciones isodésmicas; calor de formación en kJ/mol.

Reactivo 1		Reactivo 2		Producto 1		Producto 2
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	+	CH <sub>3</sub> OH	→	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OCH <sub>3</sub>	+	H <sub>2</sub> O
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	+	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	→	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	+	H <sub>2</sub> O
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	+	CH <sub>4</sub>	→	CH <sub>4</sub> PO(OH) <sub>2</sub>	+	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
$\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3\text{PO/Cd/O}_2 + 2/3\text{Cd/PO/H} + \text{O/PO/C} - 510.50$						

Para los calores de formación de las moléculas conocidas involucradas en cada reacción, se consultó la base de datos NIST, los cuales se muestran en la Tabla 6 [13].

**Tabla 6.** Calores de formación de moléculas sencillas reportadas en literatura.

Fórmula	Nombre	$\Delta H_f^o$ [kJ/mol]	Fórmula	Nombre	$\Delta H_f^o$ [kJ/mol]
CH <sub>4</sub>	Metano	-74.6 ± 0.30	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	Butano	-125.6 ± 0.67
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	Eteno	52.4 ± 0.50	CH <sub>4</sub> O	Metanol	-205. ± 10.00
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	Etano	-84. ± 0.40	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O	Etenol	-128
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	1-Propeno	20.41	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	Etanol	-234. ± 2.00
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	Propano	-104.7 ± 0.50	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	Butanol	-277. ± 5.00
C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>	1-Buteno	-0.63 ± 0.79	H <sub>2</sub> O	Agua	-241.83
C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>	1,3-Butadieno	108.8 ± 0.79			

El delta de energía de reacción fue calculado a partir de:

$$\Delta E = \sum E_P - \sum E_R$$

Donde  $E_P$  es la energía de las moléculas del producto y  $E_R$  la energía de los reactivos calculadas al nivel B3LYP/6-31+G(d,p)//B2PLYP/6-31+G(d,p) (Anexo 5). En la Tabla 7 se muestran las energías calculadas para las moléculas presentes en las reacciones isodésmicas de la tabla 5. Los valores del delta de energía para cada reacción son 11.72, 27.40 y 12.22 kJ/mol, y el promedio corresponde a -17.11 kJ/mol.

### 3.3. CÁLCULO DE GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN.

Los calores de formación de los 58 compuestos en términos de las energías de las reacciones isodésmicas correspondientes y de los grupos de contribución desconocidos, con lo cual se conformaron el vector de términos conocidos (energías de reacción, calores de formación conocidos y grupos de contribución conocidos) y la matriz de repetición de los grupos desconocidos (Anexo 3).

Teniendo las matrices conocida ( $A_{CON}$ ) y desconocida ( $A_{NC}$ ) de las moléculas planteadas para este estudio; las matrices de valores ( $C$ ) y desconocida del promedio de las reacciones ( $B_{NC}$ ), se generó la matriz  $m$  la cual se obtuvo realizando la resta entre la matriz no conocida ( $A_{NC}$ ) y la matriz desconocida del promedio de las reacciones ( $B_{NC}$ ), también se generó la matriz  $b$ , la cual se obtuvo restando la matriz de valores ( $C$ ) con la matriz conocida ( $A_{CON}$ ). Finalmente se realizó la operación de matrices en Matlab (sección metodología). Los valores obtenidos, mostrados en la Tabla 8 son los correspondientes a los grupos de contribución desconocidos de las moléculas propuestas en el Anexo 1.

**Tabla 7.** Energías calculadas para algunas moléculas.

Fórmula	$\Delta E$ [Hartree]	Fórmula	$\Delta E$ [Hartree]
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-637.38	H <sub>2</sub> O	-75.20
CH <sub>3</sub> OH	-113.96	CH <sub>4</sub>	-39.93

Fórmula	$\Delta E$ [Hartree]	Fórmula	$\Delta E$ [Hartree]
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OCH <sub>3</sub>	-676.14	CH <sub>4</sub> PO(OH) <sub>2</sub>	-599.87
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	-714.89	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	-77.43
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	-152.72		

**Tabla 8.** Grupos de contribución calculados en el presente trabajo.

GRUPO DE CONTRIBUCIÓN	$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]	INTERVALO DE CONFIANZA [kJ/mol]
PO/H <sub>2</sub> /Cd	-231.38	± 50.06
PO/C/H/Cd	-398.46	± 53.42
PO/Cd <sub>3</sub>	-444.13	± 159.52
PO/Cd/O <sub>2</sub>	-260.03	± 53.94
Cd/PO/H	92.43	± 49.26
Cd/PO/C	34.07	± 53.24
Cd/PO/Cd	4.94	± 57.56
PO/C/O/Cd	-286.89	± 49.31
PO/C/H <sub>2</sub>	-339.90	± 64.45
PO/O/H <sub>2</sub>	-552.41	± 49.37
PO/C <sub>2</sub> /Cd	-348.13	± 59.64
PO/C/Cd <sub>2</sub>	-401.19	± 108.92
PO/H/Cd <sub>2</sub>	-387.36	± 104.58
PO/O/Cd <sub>2</sub>	-272.50	± 100.62
O/PO/C	-140.29	± 13.53
C/O/PO/H <sub>2</sub>	24.14	± 23.47
C/C/Cd/H <sub>2</sub>	97.24	± 19.71
PO/Cd/O/H	-331.81	± 48.57

### 3.4. VERIFICACIÓN DE LOS GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN CALCULADOS.

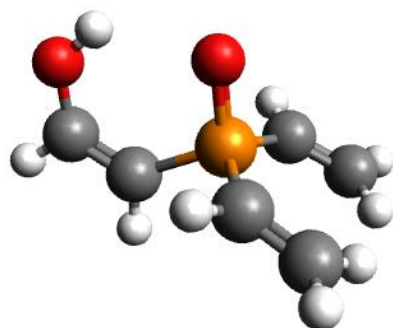
Los grupos de contribución calculados en el presente trabajo fueron utilizados para obtener los calores de reacción de las reacciones isodésmicas. Estos valores fueron comparados con los obtenidos utilizando la energía de las moléculas al nivel B3LYP/6-31+G(d,p)//B2PLYP/6-31+G(d,p), para determinar los errores en los grupos obtenidos. En la Tabla 9 y en el Anexo 6, se muestran los resultados para las reacciones isodésmicas utilizando los grupos de contribución y por la energía de las moléculas propuestas. En esta tabla se aprecia que se presentan errores en la predicción por los grupos de contribución calculados, con un valor promedio de 87%.

La magnitud del error promedio obtenido es un reflejo de los tamaños de los intervalos de confianza (95%) para los grupos calculados (Tabla 8).

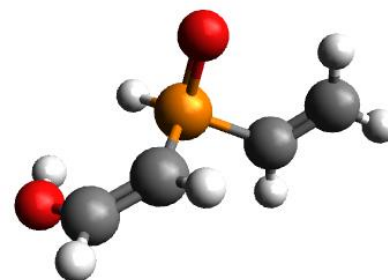
Un análisis estructural de las moléculas iniciales propuestas (58) y sus reacciones isodésmicas refleja que los mayores errores se presentan en las reacciones que involucran compuestos con enlaces C=C. Estos enlaces se encuentran presente en moléculas como la  $\text{OHPO}(\text{C}_2\text{H}_3)\text{C}_2\text{H}_5$  (número 28) (Figura 3a) que reporta un error promedio de 111% en las predicciones de las respectivas reacciones isodésmicas.

Asimismo, los compuestos con enlaces C=C-OH, presente en moléculas como la  $\text{C}_2\text{H}_3\text{PO}(\text{H})\text{C}_2\text{H}_2\text{OH}$  (número 18) (Figura 3b) que reporta un error de 213% en las predicciones de las respectivas reacciones isodésmicas.

**Figura 3.** Geometrías para dos moléculas analizadas.



a.  $\text{OHPO}(\text{C}_2\text{H}_3)\text{C}_2\text{H}_5$



b.  $\text{C}_2\text{H}_3\text{PO}(\text{H})\text{C}_2\text{H}_2\text{OH}$

Según el análisis anterior, los errores en las predicciones por grupos de contribución se deben a que las moléculas consideradas presentan interacciones importantes entre átomos no enlazados [17]; *i.e.* diferentes moléculas presentan eclipses entre el enlace C=C y el grupo PO, enlaces C-C y el grupo PO y puentes de hidrógeno entre el hidrógeno del grupo OH y el oxígeno del P=O (Figura 3). Es importante mencionar que estas interacciones, en especial la relacionada con los puentes de hidrógeno (Figura 3a) poseen valores de energía apreciables, con lo cual sesgan el cálculo de los grupos de contribución en las moléculas correspondientes (ver [17]). Las interacciones entre átomos no enlazados deben ser consideradas explícitamente para una estimación adecuada de las propiedades moleculares. La inclusión de estas interacciones requiere de la identificación de posiciones eclipsadas, *gauche* y puentes de hidrógeno en las geometrías de las posiciones más estables. El presente trabajo no incluyó estas interacciones en el cálculo de los grupos de contribución debido a los tiempos requeridos para el análisis y la obtención de los isómeros más estables. Asimismo, la inclusión y el cálculo de estas interacciones como grupos de contribución adicionales en las matrices utilizadas para el proceso de regresión puede ser objeto de un próximo trabajo partiendo de los resultados consignados en el presente documento.

**Tabla 9.** Comparación entre el delta energía de la reacción y el delta de energía de la simulación.

MOLÉCULA	$\Delta E_S$ [kJ/mol]	$\Delta E_R$ [kJ/mol]	MOLÉCULA	$\Delta E_S$ [kJ/mol]	$\Delta E_R$ [kJ/mol]
<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>			<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>		
R1	11.72	100.21	R1	-322.08	279.24
R2	27.40	93.64	R2	273.37	168.67
R3	12.22	-142.53	R3	304.03	431.18
<b>HPO(OH)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>			<b>H<sub>2</sub>POOC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>		
R1	1.80	-2.62	R1	28.25	22.62
R2	-2.23	2.93	R2	29.91	47.24
R3	42.23	26.70	R3	-24.15	-12.45

En la Tabla 10 se reportan los valores de calor de formación para moléculas tipo  $R_1$ - $PO(R_2)(R_3)$ , obtenidos.

**Tabla 10.** Cálculo de las entalpias de formación de las moléculas estudiadas.

MOLÉCULA	$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]	MOLÉCULA	$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-732.87	(OH) <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	-704.74
HPO(OH)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-502.93	H <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	-5.45
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-86.41	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	-315.11
H <sub>2</sub> POOC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	-769.30	HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	-234.64
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	-393.64	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-314.70
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-449.81	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	-387.69
HPO(OH)C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	-556.91	CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	-328.67
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub> OH	-405.57	OHCH <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-312.30
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OCH <sub>3</sub>	-590.87	CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	-377.20
H <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	-192.27	CH <sub>3</sub> OPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-337.98
HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-274.32	OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	-537.62

MOLÉCULA	$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]	MOLÉCULA	$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]
$H_2POC_2H_2PO(H)CH_3$	-528.13	$CH_3PO(C_2H_3)_2$	-197.91
$OHPO(C_2H_3)C_2H_4POH_2$	-867.42	$HPO(C_2H_3)C_3H_5$	-279.33
$OHPO(CH_3)C_2H_2PO(H)CH_3$	-710.10	$(OH)_2POC_2H_2PO(C_2H_3)_2$	-814.26
$H_2POOC_4H_9$	-931.36	$OHPO(C_2H_5)C_4H_5$	-542.70
$C_2H_3PO(H)C_2H_2OH$	-364.42	$HPO(C_2H_3)C_2H_2PO(CH_3)_2$	-448.81
$OHPO(C_2H_3)_2$	-324.60	$OHPO(C_2H_3)C_2H_2PO(CH_3)_2$	-691.02
$(OH)_2POC_4H_5$	-710.19	$(C_2H_3)_2POC_2H_2OH$	-307.63
$HPO(C_2H_2OH)_2$	-369.68	$PO(C_2H_3)_3$	-99.06
$OHPO(C_2H_3)C_2H_2OH$	-387.25	$(C_2H_3)_2POC_3H_5$	-115.78
$H_2POC_4H_5$	-120.70	$HPO(C_3H_5)C_4H_5$	-291.65
$HPO(C_2H_3)_2$	-146.56	$HPO(CH_3)C_2H_2PO(C_2H_3)_2$	-456.69
$H_2POC_2H_2PO(H)C_2H_3$	-378.90	$OHPO(C_2H_3)C_2H_2PO(CH_3)C_2H_3$	-596.65
$HPO(OH)C_4H_7$	-413.78	$(CH_3)_2POC_2H_2PO(CH_3)C_2H_3$	-581.40
$OHPO(CH_3)C_3H_5$	-604.97	$OHPO(C_2H_3)C_4H_4PO(H)C_2H_3$	-456.93
$OHPO(C_2H_3)C_2H_5$	-395.38	$H_2POOCH_3$	-778.98
$CH_3OPO(CH_3)C_2H_3$	-478.57	$H_2POCH_3$	-364.98
$CH_3PO(C_2H_3)CH_2OH$	-422.42	$H_2POOCH_2POH_2$	-1040.93
$OHPO(C_2H_3)OC_2H_5$	-653.14	$H_2POOH$	-658.83

#### 4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

- La metodología presentada utilizando reacciones isodésmicas y la estimación de las geometrías, las frecuencias y las energías al nivel B3LYP/6-31+G(d,p)//B2PLYP/6-31+G(d,p) proporciona una alternativa para el cálculo de los grupos de contribución, ampliando la base de calores de formación para compuestos desconocidos. Para las estructuras tratadas en este trabajo,  $R_1-PO(R_2)(R_3)$ , la metodología reportó un error en la estimación de los calores de las reacciones isodésmicas; un análisis estructural sugiere que estos errores se deben principalmente a compuestos con enlaces de tipo C=C eclipsados con el grupo PO y a la presencia de puentes de hidrógeno.
- Diferentes valores para los grupos de contribución obtenidos en el presente trabajo poseen incertidumbre apreciable en los intervalos de confianza debido a la carencia de términos referentes a interacciones entre átomos no enlazados en la matriz de número de grupos. A pesar de lo anterior, los grupos de contribución calculados en el presente trabajo constituyen una aproximación de gran valor para estimaciones iniciales de los requerimientos calóricos en procesos que involucren estructuras de tipo  $R_1-PO(R_2)(R_3)$ .
- Para futuros trabajos se recomienda la inclusión de términos relacionados con interacciones entre átomos no enlazados (eclipses, *gauche*, puente de hidrógeno) para disminuir la incertidumbre en la estimación de nuevos grupos de contribución.
- Debido a la facilidad de uso y versatilidad, la aplicación del software libre GAMESS es recomendada para trabajos relacionados con cálculos cuánticos.

## 5. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] BENSON, Sydney; BUSS, Jerry. Additivity Rules for the Estimation of Molecular Properties. Thermodynamic Properties. The Journal of Chemical Physics. 1958. Disponible en: [www. Scitation.aip.org](http://www.Scitation.aip.org).

[2] RODRÍGUEZ, A. y AVENDAÑO, M. Planteamiento de una guía metodológica usando simulación molecular, para determinar propiedades termoquímicas de sustancias altamente reactivas utilizadas en la industria química. Proyecto de grado para optar al título de Ingeniero Químico. Universidad Industrial de Santander. 2007.

[3] MOVILLA, José y RAJADELL, Fernando. Termodinámica química. Universidad Jume I. España. 2005. 148 p.

[4] EWIG, C. S.; VAN WAZER, J. R. Ab Initio Structures of Phosphorus Acids and Esters. 1. Phosphinic, Phosphonic, and Phosphoric Acids. J. Am. Chem. Soc. 1985, 107 (7), 1965–1971.

[5] LEROY, G.; TEMSAMANI, D.; WILANTE, C.; DEWISPELAERE, J.P. Determination of Bond Energy Terms in Phosphorus Containing Compounds. J. Mol. Struct.: THEOCHEM 1994, 309 (2), 113–119.

[6] MORGON, N. H. Enthalpies of Formation of Phosphorus and Oxygen Compounds Determined by the Correlation Consistent Composite Approach. Int. J. Quantum Chem. 2012, 112 (19), 3256–3260.

[7] KHALFA, A. FERRARI, M. FOURNET, R. SIRJEAN, B. VERDIER, L. y GLAUDE, P. Quantum Chemical Study of the Thermochemical Properties Chemical of Organophosphorous Compounds. The Journal of physical Chemistry. Disponible en: <http://pubs.acs.org/JPCA>

**[8]** GÓMEZ, Lilibiana. Metodología computacional para el cálculo de entropía y calor específico de moléculas en fase gaseosa. Universidad Industrial de Santander. Bucaramanga.2010.

**[9]** LEVINE, Ira. Química cuántica.668-672 p. 5 edición. Madrid, España. Prentice Hall.2001.

**[10]** P. Hohenberg, W. Kohn; Phys. Rev., (1964) 136, B864.

**[11]** POPELIER, Paul. Solving the Schrödinger equation. Imperial College Press. Londres. 2011. 230-232 p.

**[12]** The General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS). <http://www.msg.ameslab.gov/gamess/>

**[13]** Libro del Web de Química NIST. Base de datos de referencia estándar del NIST número 69. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

**[14]** FAKHR M. ABU-AWWADDepartment of Chemistry, The Islamic University of GazaGaza, Palestinian Authority. The Gas-Phase Heats of Formation of n-Alkanes as aFunction of the Electrostatic Potential Extremaon their Molecular Surfaces. E-Journal of ChemistryVol. 1, No. 2, pp 81-86, April 2004.

**[15]** JORGENSEN, B. KAMERON, R. THERMOCHEMISTRY INVESTIGATIOIS VIA THE CORRELATION CONSISTEN COMPOSITE APPROACH. Dissertation prepared for the degree of Doctor of Philosophy. University of North Texas. 2012.

**[16]** Morales Medina, Giovanni; Martínez Rey, Ramiro Molecular and multiscale modeling: Review on the theories and applications in chemical engineering CT&F Ciencia, Tecnología y Futuro, vol. 3, núm. 5, diciembre, 2009, pp. 205-223 ECOPETROL S.A. Bucaramanga, Colombia

[17] MORALES, G. y MARTÍNEZ, R. Thermochemical properties and contribution groups for ketene dimer and related structures from theoretical calculations. Universidad Industrial de Santander. 2009.

## 6. BIBLIOGRAFÍA

EWIG, C. S.; VAN WAZER, J. R. Ab Initio Structures of Phosphorus Acids and Esters. 1. Phosphinic, Phosphonic, and Phosphoric Acids. J. Am. Chem. Soc. 1985, 107 (7), 1965–1971

FAKHR M. ABU-AWWAD Department of Chemistry, The Islamic University of Gaza Gaza, Palestinian Authority. The Gas-Phase Heats of Formation of n-Alkanes as a Function of the Electrostatic Potential Extrema on their Molecular Surfaces. E-Journal of Chemistry Vol. 1, No. 2, pp 81-86, April 2004.

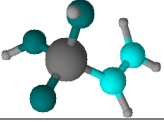
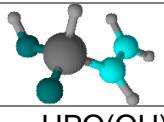
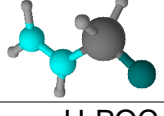
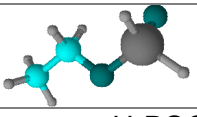
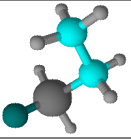
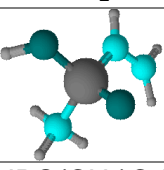
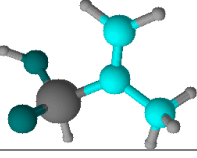
LEROY, G.; TEMSAMANI, D.; WILANTE, C.; DEWISPELAERE, J.P. Determination of Bond Energy Terms in Phosphorus Containing Compounds. J. Mol. Struct.: THEOCHEM 1994, 309 (2), 113–119.

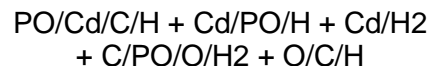
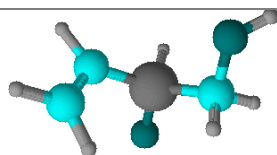
MORALES, G. y MARTÍNEZ, R. Thermochemical properties and contribution groups for ketene dimer and related structures from theoretical calculations. Universidad Industrial de Santander. 2009.

RODRÍGUEZ, A. y AVENDAÑO, M. Planteamiento de una guía metodológica usando simulación molecular, para determinar propiedades termoquímicas de sustancias altamente reactivas utilizadas en la industria química. Proyecto de grado para optar al título de Ingeniero Químico. Universidad Industrial de Santander. 2007.

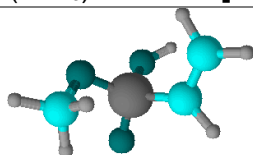
## ANEXOS

### ANEXO A. Estructuras moleculares y desglose en grupos de contribución.

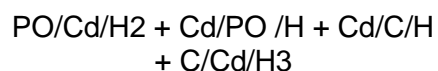
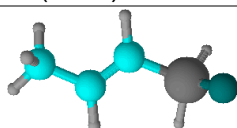
MOLÉCULA	GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN
 $(\text{OH})_2\text{POC}_2\text{H}_3$ <b>Ethenylphosphonic acid</b>	$\text{PO/O}_2/\text{Cd} + 2\text{O/PO/H} +$ $\text{Cd/PO/H} + \text{Cd/H}_2$
 $\text{HPO}(\text{OH})\text{C}_2\text{H}_3$ <b>Ethenylphosphinic acid</b>	$\text{PO/Cd/O/H} + \text{Cd/PO/H} + \text{O/PO/H}$ $+ \text{Cd/H}_2$
 $\text{H}_2\text{POC}_2\text{H}_3$ <b>Ethenylphosphane oxide</b>	$\text{PO/Cd/H}_2 + \text{Cd/PO/H} + \text{Cd/H}_2$
 $\text{H}_2\text{POOC}_2\text{H}_5$ <b>Ethyl phosphinate</b>	$\text{PO/O/H}_2 + \text{O/PO/C} + \text{C/O/C/H}_2$ $+ \text{C/C/H}_3$
 $\text{H}_2\text{POC}_2\text{H}_5$ <b>Ethylphosphane oxide</b>	$\text{PO/C/H}_2 + \text{C/C/H}_3 + \text{C/C/PO/H}_2$
 $\text{OHPO}(\text{CH}_3)\text{C}_2\text{H}_3$ <b>Ethenyl(methyl)phosphonic acid</b>	$\text{PO/O/C/Cd} + \text{C/PO/H}_3 +$ $\text{O/PO/H} + \text{Cd/PO/H} + \text{Cd/H}_2$
 $\text{HPO}(\text{OH})\text{C}_3\text{H}_5$ <b>Prop-1-en-2-ylphosphonic acid</b>	$\text{PO/Cd/O/H} + \text{O/PO/H} +$ $\text{Cd/PO/C} + \text{Cd/H}_2 + \text{C/Cd/H}_3$



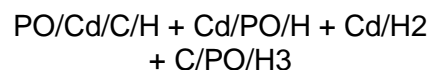
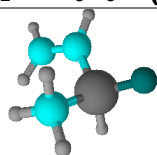
$\text{HPO}(\text{C}_2\text{H}_3)\text{CH}_2\text{OH}$  **[Ethenyl(oxido)-I5-phosphanyl]methanol**



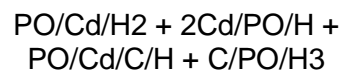
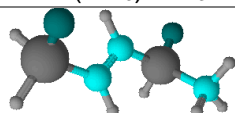
$\text{OHPO}(\text{C}_2\text{H}_3)\text{OCH}_3$  **Methyl hydrogen ethenylphosphonate**



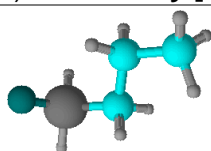
$\text{H}_2\text{POC}_3\text{H}_5$  **(1E)-Prop-1-en-1-ylphosphane oxide**



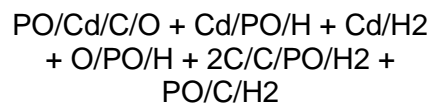
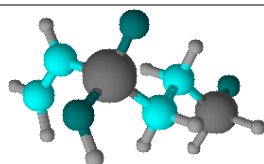
$\text{HPO}(\text{CH}_3)\text{C}_2\text{H}_3$  **Ethenyl(methyl)phosphane oxide**



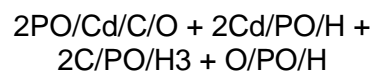
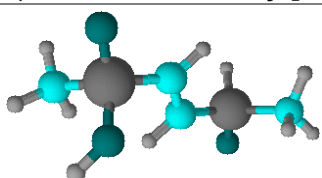
$\text{H}_2\text{POC}_2\text{H}_2\text{PO}(\text{H})\text{CH}_3$  **Methyl[2-(oxido-5-phosphanyl)ethenyl]phosphane oxide**



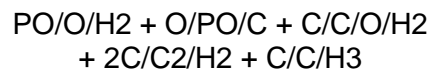
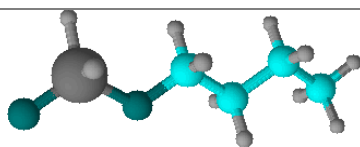
$\text{H}_2\text{POC}_3\text{H}_7$  **Propylphosphane oxide**



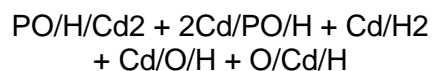
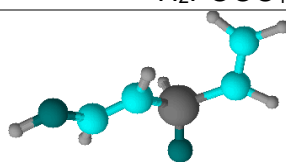
$\text{OHPO}(\text{C}_2\text{H}_3)\text{C}_2\text{H}_4\text{POH}_2$  **Ethenyl[2-(oxido-I5-phosphanyl)ethyl]phosphinic acid**



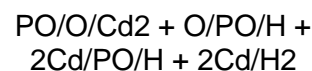
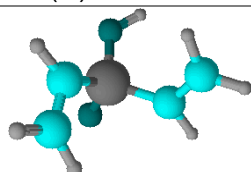
$\text{OHPO}(\text{CH}_3)\text{C}_2\text{H}_2\text{PO}(\text{H})\text{CH}_3$  **Methyl{2-[methyl(oxido)-I5-phosphanyl]ethenyl}phosphinic acid**



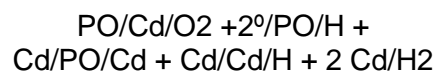
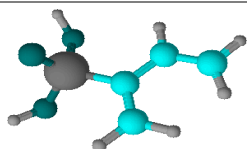
$\text{H}_2\text{POOC}_4\text{H}_9$  **Butyl phosphinate**



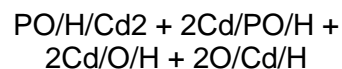
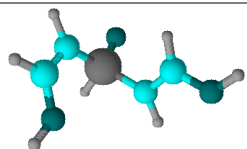
$\text{C}_2\text{H}_3\text{PO(H)C}_2\text{H}_2\text{OH}$  **E-2-[ethenyl(oxido)-phosphanyl]ethenol**



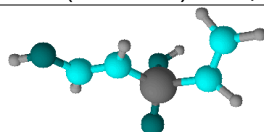
$\text{OHPO(C}_2\text{H}_3)_2$  **Diethenylphosphinic acid**



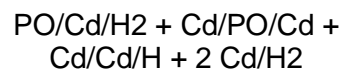
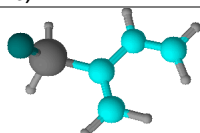
$(\text{OH})_2\text{POC}_4\text{H}_5$  **Buta-1,3-dien-2-ylphosphonic acid**



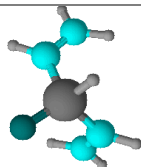
$\text{HPO(C}_2\text{H}_2\text{OH)}_2$  **2,2'-(Oxido-phosphanediyl)diethenol**



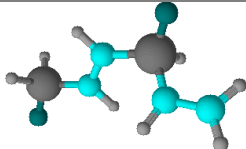
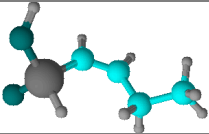
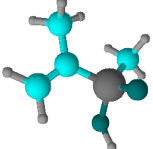
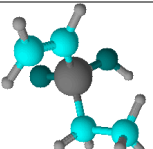
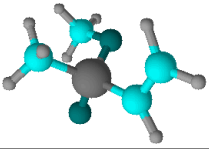
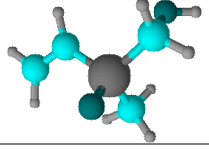
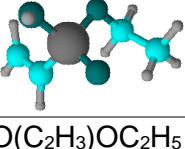
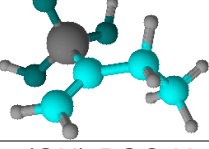
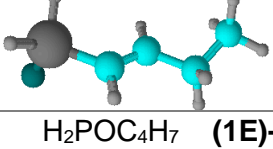
$\text{OHPO(C}_2\text{H}_3)_2\text{C}_2\text{H}_2\text{OH}$  **Ethenyl[(E)-2-hydroxyethenyl]phosphinic acid**

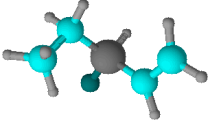
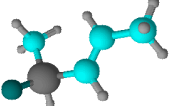
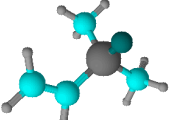
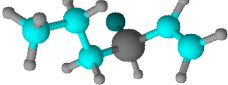
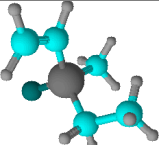
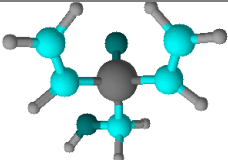
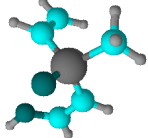
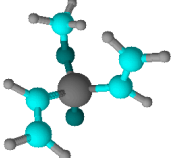
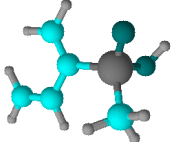


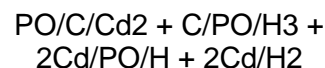
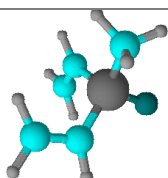
$\text{H}_2\text{POC}_4\text{H}_5$  **Buta-1,3-dien-2-ylphosphane oxide**



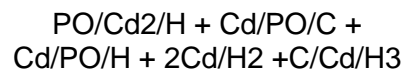
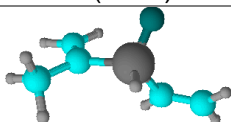
$\text{HPO(C}_2\text{H}_3)_2$  **Diethenylphosphane oxide**

	$PO/Cd/H2 + 3Cd/PO/H + PO/Cd2/H + Cd/H2$
$H_2POC_2H_2PO(H)C_2H_3$ <b>Ethenyl[2-(oxido-15-phosphanyl)ethenyl]phosphane oxide</b>	
	$PO/Cd/O/H + Cd/PO/H + C/C/Cd/H2 + O/PO/H + Cd/C/H + C/C/H3$
$HPO(OH)C_4H_7$ <b>But-1-en-1-ylphosphinic acid</b>	
	$PO/Cd/C/O + O/PO/H + C/PO/H3 + Cd/PO/C + Cd/H2 + C/Cd/H3$
$OHPO(CH_3)C_3H_5$ <b>Methyl(prop-1-en-2-yl)phosphinic acid</b>	
	$PO/O/C/Cd + O/PO/H + C/C/H3 + C/C/PO/H2 + Cd/PO/H + Cd/H2$
$OHPO(C_2H_3)C_2H_5$ <b>Ethenyl(ethyl)phosphinic acid</b>	
	$PO/O/C/Cd + C/O/H3 + C/PO/H3 + Cd/PO/H + Cd/H2 + O/PO/C$
$CH_3OPO(CH_3)C_2H_3$ <b>Methyl ethenyl(methyl)phosphinate</b>	
	$PO/C2/Cd + C/PO/O/H2 + O/C/H + C/PO/H3 + Cd/PO/H + Cd/H2$
$CH_3PO(C_2H_3)CH_2OH$ <b>[Ethenyl(methyl)phosphoryl]methanol</b>	
	$PO/Cd/O2 + Cd/PO/H + Cd/H2 + O/PO/H + O/PO/C + C/C/O/H2 + C/C/H3$
$OHPO(C_2H_3)OC_2H_5$ <b>Ethyl hydrogen ethenylphosphonate</b>	
	$PO/Cd/O2 + 2O/PO/H + Cd/PO/C + Cd/H2 + C/Cd/C/H2 + C/C/H3$
$(OH)_2POC_4H_7$ <b>But-1-en-2-ylphosphonic acid</b>	
	$PO/Cd/H2 + Cd/PO/H + Cd/C/H + C/C/Cd/H2 + C/C/H3$
$H_2POC_4H_7$ <b>(1E)-but-1-en-1-ylphosphane oxide</b>	

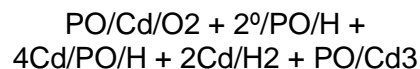
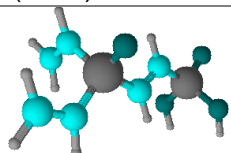
	$PO/Cd/C/H + Cd/PO/H + Cd/H_2 + C/PO/C/H_2 + C/C/H_3$
$HPO(C_2H_3)C_2H_5$ <b>Ethenyl(ethyl)phosphane oxide</b>	
	$PO/Cd/C/H + C/PO/H_3 + Cd/PO/H + Cd/C/H + C/Cd/H_3$
$HPO(CH_3)C_3H_5$ <b>Methyl[(1E)-prop-1-en-1-yl]phosphane oxide</b>	
	$PO/C_2/Cd + 2C/PO/H_3 + Cd/PO/H + Cd/H_2$
$(CH_3)_2POC_2H_3$ <b>Ethenyl(dimethyl)phosphane oxide</b>	
	$PO/Cd/C/H + Cd/PO/H + Cd/H_2 + C/PO/C/H_2 + C/C_2/H_2 + C/C/H_3$
$HPO(C_2H_3)C_3H_7$ <b>Ethenyl(propyl)phosphane oxide</b>	
	$PO/C_2/Cd + C/PO/H_3 + C/C/H_3 + C/C/PO/H_2 + Cd/PO/H + Cd/H_2$
$CH_3PO(C_2H_3)C_2H_5$ <b>Ethenyl(ethyl)methylphosphane oxide</b>	
	$PO/C/Cd_2 + O/C/H + C/O/PO/H_2 + 2Cd/PO/H + 2Cd/H_2$
$OHCH_2PO(C_2H_3)_2$ <b>(Diethenylphosphoryl)methanol</b>	
	$PO/C/Cd_2 + C/PO/H_3 + 2Cd/PO/H + Cd/H_2 + Cd/H/O + O/Cd/H$
$CH_3PO(C_2H_3)C_2H_2OH$ <b>2-[Ethenyl(methyl)phosphoryl]ethenol</b>	
	$PO/O/Cd_2 + C/O/H_3 + 2Cd/PO/H + 2Cd/H_2 + O/C/PO$
$CH_3OPO(C_2H_3)_2$ <b>Methyl diethenylphosphinate</b>	
	$PO/Cd/C/O + O/PO/H + C/PO/H_3 + Cd/Cd/PO + Cd/Cd/H + 2Cd/H_2$
$OHPO(CH_3)C_4H_5$ <b>Buta-1,3-dien-2-yl(methyl)phosphinic acid</b>	



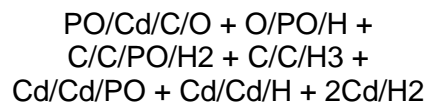
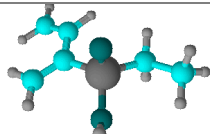
$\text{CH}_3\text{PO}(\text{C}_2\text{H}_3)_2$  **Diethenyl(methyl)phosphane oxide**



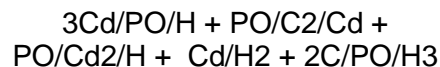
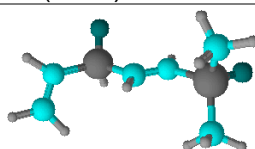
$\text{HPO}(\text{C}_2\text{H}_3)\text{C}_3\text{H}_5$  **Ethenyl(prop-1-en-2-yl)phosphane oxide**



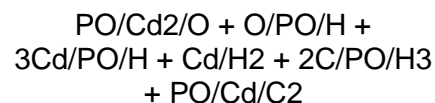
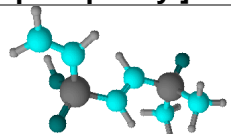
$(\text{OH})_2\text{POC}_2\text{H}_2\text{PO}(\text{C}_2\text{H}_3)_2$  **[2-(diethenylphosphoryl)ethenyl]phosphonic acid**



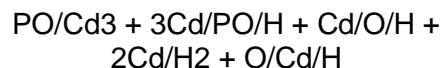
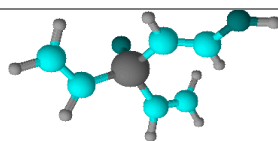
$\text{OHPO}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{C}_4\text{H}_5$  **Buta-1,3-dien-2-yl(ethyl)phosphinic acid**



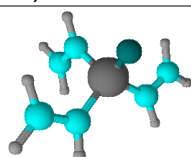
$\text{HPO}(\text{C}_2\text{H}_3)\text{C}_2\text{H}_2\text{PO}(\text{CH}_3)_2$  **{2-[ethenyl(oxido)-15-phosphanyl]ethenyl}(dimethyl)phosphane oxide**



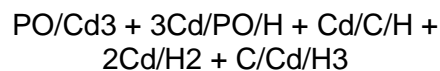
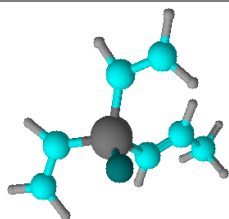
$\text{OHPO}(\text{C}_2\text{H}_3)\text{C}_2\text{H}_2\text{PO}(\text{CH}_3)_2$  **[2-(dimethylphosphoryl)ethenyl]ethenylphosphinic acid**



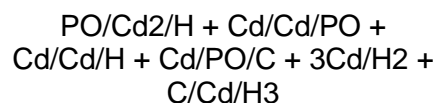
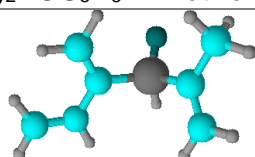
$(\text{C}_2\text{H}_3)_2\text{POC}_2\text{H}_2\text{OH}$  **E-2-(diethenylphosphoryl)ethenol**



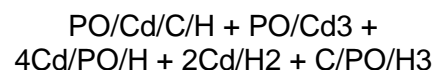
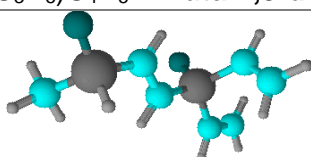
$\text{PO}(\text{C}_2\text{H}_3)_3$  **Triethenylphosphane oxide**



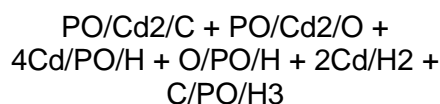
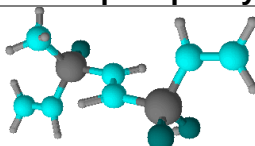
$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{POC}_3\text{H}_5$  **Diethenyl[(1E)-prop-1-en-1-yl]phosphane oxide**



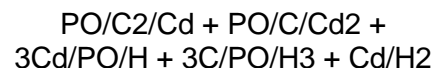
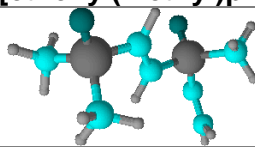
$\text{HPO}(\text{C}_3\text{H}_5)\text{C}_4\text{H}_5$  **Buta-1,3-dien-2-yl(prop-1-en-2-yl)phosphane oxide**



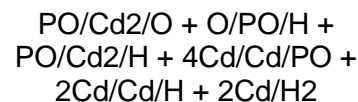
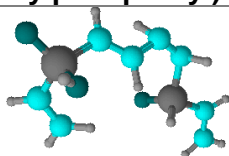
$\text{HPO}(\text{CH}_3)\text{C}_2\text{H}_2\text{PO}(\text{C}_2\text{H}_3)_2$  **Diethenyl{2-[methyl(oxido)-I5-phosphanyl]ethenyl}phosphane oxide**



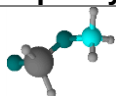
$\text{OHPO}(\text{C}_2\text{H}_3)\text{C}_2\text{H}_2\text{PO}(\text{CH}_3)\text{C}_2\text{H}_3$  **Ethenyl{2-[ethenyl(methyl)phosphoryl]ethenyl}phosphinic acid**



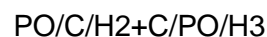
$(\text{CH}_3)_2\text{POC}_2\text{H}_2\text{PO}(\text{CH}_3)\text{C}_2\text{H}_3$  **[2-(dimethylphosphoryl)ethenyl](ethenyl)methyl(oxo)phosphane**



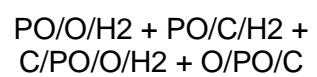
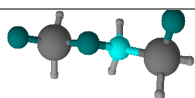
$\text{OHPO}(\text{C}_2\text{H}_3)\text{C}_4\text{H}_4\text{PO}(\text{H})\text{C}_2\text{H}_3$  **Ethenyl{(1E,3Z)-4-[ethenyl(oxido)-I5-phosphanyl]buta-1,3-dien-1-yl}phosphinic acid**



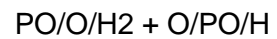
$\text{H}_2\text{POOCH}_3$  **Methyl phosphinate**



$\text{H}_2\text{POCH}_3$  **Methylphosphane oxide**



$H_2POOCH_2POH_2$  **(Oxo-15-phosphanyl)methyl phosphinate**



$H_2POOH$  **Phosphinic acid**

---

---

**ANEXO B.** Matriz de grupos de contribución conocidos.

Grupos de contribución	C <sub>d</sub> /H <sub>2</sub>	C <sub>d</sub> /C/H	C/C/H <sub>3</sub>	C/C <sub>2</sub> /H <sub>2</sub>	C/PO/C/H <sub>2</sub>	C/PO/H <sub>3</sub>	C <sub>d</sub> /O/H	O/C/H	O/PO/H	C/Cd/H <sub>3</sub>	C/O/H <sub>3</sub>	C/C/O/H <sub>2</sub>	C <sub>d</sub> /C <sub>d</sub> /H	O/H/C <sub>d</sub>
<b>FÓRMULA</b>	<b>26.192</b>	<b>35.941</b>	<b>-42.18</b>	<b>-20.711</b>	<b>-14.226</b>	<b>-42.175</b>	<b>35.982</b>	<b>-158</b>	<b>-272</b>	<b>-42.18</b>	<b>-42.175</b>	<b>-35.564</b>	<b>28.367</b>	<b>-186.2</b>
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0
HPO(OH)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POOC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0
HPO(OH)C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub> OH	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OCH <sub>3</sub>	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0
H <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)CH <sub>3</sub>	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> POH <sub>2</sub>	1	0	0	0	2	0	0	0	1	0	0	0	0	0
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)CH <sub>3</sub>	0	0	0	0	0	2	0	0	1	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POOC <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	0	0	1	2	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	1	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH) <sub>2</sub>	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	2
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	1	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0	1
H <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(OH)C <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	0	1	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	1	0	0	0	0	1	0	0	1	1	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	1	0	1	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0
CH <sub>3</sub> OPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0
CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub> OH	1	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	1	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0

Grupos de contribución	C <sub>d</sub> /H <sub>2</sub>	C <sub>d</sub> /C/H	C/C/H <sub>3</sub>	C/C <sub>2</sub> /H <sub>2</sub>	C/PO/C/H <sub>2</sub>	C/PO/H <sub>3</sub>	C <sub>d</sub> /O/H	O/C/H	O/PO/H	C/Cd/H <sub>3</sub>	C/O/H <sub>3</sub>	C/C/O/H <sub>2</sub>	C <sub>d</sub> /C <sub>d</sub> /H	O/H/C <sub>d</sub>
<b>FÓRMULA</b>	<b>26.192</b>	<b>35.941</b>	<b>-42.18</b>	<b>-20.711</b>	<b>-14.226</b>	<b>-42.175</b>	<b>35.982</b>	<b>-158</b>	<b>-272</b>	<b>-42.18</b>	<b>-42.175</b>	<b>-35.564</b>	<b>28.367</b>	<b>-186.2</b>
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	1	0	1	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	1	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	0	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	1	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	1	0	1	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
OHCH <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	1	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	1
CH <sub>3</sub> OPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	2	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	1	0
CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	2	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	2	0	1	0	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1	0	0	0	0	2	0	0	1	0	0	0	0	0
(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	2	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1
PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	2	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
HPO(C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	3	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0
HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	2	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	2	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	2	0
H <sub>2</sub> POOCH <sub>3</sub>	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
H <sub>2</sub> POCH <sub>3</sub>	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POOCH <sub>2</sub> POH <sub>2</sub>	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POOH	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0

**ANEXO C. Matriz de grupos de contribución desconocidos.**

GRUPO DE CONTRIBUCIÓN	PO/H <sub>2</sub> /Cd	PO/C/H/C <sub>d</sub>	PO/C/d <sub>3</sub>	PO/O <sub>2</sub> /C <sub>d</sub>	C <sub>d</sub> /P/O/H	C <sub>d</sub> /P/O/C	C <sub>d</sub> /PO/Cd	PO/C/O/C <sub>d</sub>	PO/C/H <sub>2</sub>	PO/O/H <sub>2</sub>	PO/C <sub>2</sub> /C <sub>d</sub>	PO/C/C <sub>d2</sub>	PO/H/C <sub>d2</sub>	PO/O/C <sub>d2</sub>	O/PO/C	C/O/P/O/H <sub>2</sub>	C/C/C <sub>d</sub> /H <sub>2</sub>	PO/C <sub>d</sub> /O/H
FÓRMULA																		
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(OH)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POOC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(OH)C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub> OH	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OCH <sub>3</sub>	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
H <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)CH <sub>3</sub>	1	1	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> POH <sub>2</sub>	0	0	0	0	1	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)CH <sub>3</sub>	0	0	0	0	2	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POOC <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH) <sub>2</sub>	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
HPO(OH)C <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

GRUPO DE CONTRIBUCIÓN	PO/H <sub>2</sub> / Cd	PO/C/H /C <sub>d</sub>	PO/C d <sub>3</sub>	PO/O <sub>2</sub> /C <sub>d</sub>	C <sub>d</sub> /P O/H	C <sub>d</sub> /P O/C	C <sub>d</sub> /PO/ Cd	PO/C/O /C <sub>d</sub>	PO/C/ H <sub>2</sub>	PO/O /H <sub>2</sub>	PO/C <sub>2</sub> /C <sub>d</sub>	PO/C/ C <sub>d2</sub>	PO/H/ C <sub>d2</sub>	PO/O/ C <sub>d2</sub>	O/PO /C	C/O/P O/H <sub>2</sub>	C/C/C <sub>d</sub> /H <sub>2</sub>	PO/C <sub>d</sub> / O/H
FÓRMULA																		
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH <sub>3</sub> OPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub> OH	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
H <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
OHCH <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0
CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
CH <sub>3</sub> OPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0	0	1	1	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0
(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	0	0	1	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	0	0	1	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	0	0	1	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
HPO(C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0	1	1	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

GRUPO DE CONTRIBUCIÓN	PO/H <sub>2</sub> / Cd	PO/C/H /Cd	PO/C d <sub>3</sub>	PO/O <sub>2</sub> /Cd	C <sub>d</sub> /P O/H	C <sub>d</sub> /P O/C	C <sub>d</sub> /PO/ Cd	PO/C/O /Cd	PO/C/ H <sub>2</sub>	PO/O /H <sub>2</sub>	PO/C <sub>2</sub> /Cd	PO/C/ C <sub>d2</sub>	PO/H/ C <sub>d2</sub>	PO/O/ C <sub>d2</sub>	O/PO /C	C/O/P O/H <sub>2</sub>	C/C/C <sub>d</sub> /H <sub>2</sub>	PO/C <sub>d</sub> / O/H
FÓRMULA																		
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO( CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> ) C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> PO( H)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POOCH <sub>3</sub>	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0
H <sub>2</sub> POCH <sub>3</sub>	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> POOCH <sub>2</sub> POH <sub>2</sub>	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	1	1	0	0
H <sub>2</sub> POOH	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0

## ANEXO D. Reacciones isodesmicas.

<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>3</sub> OH	→	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OCH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O
<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	→	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H <sub>2</sub> O
<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	CH <sub>4</sub> PO(OH) <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/O_2 + 2/3C_d/PO/H + 2/3O/PO/C - 510.504</math></b>				

<b>HPO(OH)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	HPO(OH)C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>HPO(OH)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	HPO(OH)CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>HPO(OH)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>3</sub> OH	→	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OCH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/O/H + 1/3C_d/PO/H + 1/3O/PO/C - 352.753</math></b>				

<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	H <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>4</sub>
<b>H<sub>2</sub>POCH<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b>H<sub>2</sub>POCH<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> OH	→	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>3</sub> OH
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(-\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + PO/C_d/H_2 + 1/3C_d/PO/H + 2/3 PO/C/H_2 + 40.939</math></b>				

H <sub>2</sub> POOC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH	CH <sub>4</sub>	→	<b>H<sub>2</sub>POOC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>3</sub> OH
H <sub>2</sub> POOH	OHC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	→	<b>H<sub>2</sub>POOC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	H <sub>2</sub> O
<b>H<sub>2</sub>POOC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	H <sub>2</sub> POOC <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	CH <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 - \Delta E_3) + PO/O/H_2 + 2/3O/PO/C - 150.799</math></b>				

H <sub>2</sub> POCH <sub>2</sub> OH	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>3</sub> OH
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH	CH <sub>4</sub>	→	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>3</sub> OH
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	H <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	CH <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 - \Delta E_3) + PO/C/H_2 + 1/3C/PO/O/H_2 - 61.027</math></b>				

<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	CH <sub>4</sub>	→	OHPO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )	CH <sub>4</sub>
<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	O(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	→	CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )(O)CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> OH
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/C/O + 2/3C_d/PO/H + 1/3O/PO/C - 313.445</math></b>				

<b>HPO(OH)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	HPO(OH)CH <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>
<b>HPO(OH)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	HPO(OH) <sub>2</sub>	→	H <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	PO(OH) <sub>3</sub>
<b>HPO(OH)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	HPO(OH)C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/H_2 + 1/3C_d/PO/C - 483.576</math></b>				

<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	CH <sub>4</sub>	→	HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> OH
HPO(CH <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub> OH	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	CH <sub>4</sub>
<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(-\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/C/H + 1/3C_d/PO/H + 2/3C/PO/O/H_2 - 99.513</math></b>				

<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)OCH<sub>3</sub></b>	<b>CH<sub>3</sub>OH</b>	<b>→</b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>PO(OCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>O</b>
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)OCH<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>→</b>	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)OCH<sub>3</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)OCH<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/O_2 + 2/3C_d/PO/H + 4/3O/PO/C - 351.571</math></b>				
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub></b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>5</sub>H<sub>9</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/H_2 + 2/3C_d/PO/H + 1/3C/C_d/H_2 + 1/3PO/C/H_2 + 9.894</math></b>				
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>→</b>	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>CH<sub>3</sub>PO(OH)<sub>2</sub></b>	<b>→</b>	<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>HPO(OH)<sub>2</sub></b>
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub></b>	<b>→</b>	<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>7</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/C/H + 1/3PO/C_d/C_2 + 2/3C_d/PO/H + 96.519</math></b>				
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(H)CH<sub>3</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>POOH</b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>POH<sub>2</sub></b>	<b>HPO(OH)CH<sub>3</sub></b>
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(H)CH<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(H)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(H)CH<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(H)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 4/3PO/C_d/H_2 + 7/3C_d/PO/H + 1/3PO/C/C_d/H + 1/3PO/C_d/H - 1/3PO/O/H_2 - 167.858</math></b>				
<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>POH<sub>2</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>POH<sub>2</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>→</b>	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>POH<sub>2</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>POH<sub>2</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>POCH<sub>3</sub></b>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 - \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/C/O + PO/C/H_2 + 2/3C_d/PO/H - 364.757</math></b>				
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(OH)CH<sub>3</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>POCH<sub>3</sub></b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>POH<sub>2</sub></b>	<b>PO(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub></b>
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(OH)CH<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>→</b>	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(OH)CH<sub>3</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(H)OH</b>	<b>HPO(OH)CH<sub>3</sub></b>	<b>→</b>	<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(OH)CH<sub>3</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>POOH</b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 - \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/H_2 + 2C_d/PO/H - 1/3PO/C/H_2 + 2/3PO/C/C_d/H + 2/3PO/O/H/C_d + 2/3PO/C/C_d/O - 1/3PO/O/H_2 - 563.981</math></b>				
<b>H<sub>2</sub>POOC<sub>4</sub>H<sub>9</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>O</b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POOH</b>	<b>C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>OH</b>
<b>H<sub>2</sub>POOC<sub>4</sub>H<sub>9</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POOCH<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>4</sub>H<sub>10</sub></b>
<b>H<sub>2</sub>POOC<sub>4</sub>H<sub>9</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POOC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>4</sub>H<sub>10</sub></b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + PO/O/H_2 + 2/3O/PO/C - 116.102</math></b>				
<b>C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>PO(H)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	<b>CH<sub>3</sub>OH</b>
<b>C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>PO(H)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>OH</b>
<b>C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>PO(H)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/H + 2/3PO/C_d/C/H + 4/3C_d/PO/H - 70.927</math></b>				

<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	OHPO(CH <sub>3</sub> )(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )(C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> )	CH <sub>4</sub>
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	CH <sub>3</sub> OH	→	CH <sub>3</sub> OPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/O/C + 2/3PO/C_{d2}/O + 5/3C_d/PO/H + 1/3O/PO/C - 143.388</math></b>				

<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	(OH) <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	(OH) <sub>2</sub> POCH <sub>3</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>
<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	H <sub>2</sub> POOH	→	H <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	PO(OH) <sub>3</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/O_2 + 1/3C_d/PO/C + 1/3PO/C_d/H_2 + 1/3C_d/C_d/PO - 1/3 PO/O/H_2 - 717.537</math></b>				

<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH)<sub>2</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	CH <sub>3</sub> OH
HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> OH	→	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH)<sub>2</sub></b>	CH <sub>4</sub>
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH)(C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OCH <sub>3</sub> )	H <sub>2</sub> O	→	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH)<sub>2</sub></b>	CH <sub>3</sub> OH
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(-\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_{d2}/H + 1/3PO/C_d/C/H + 5/3C_d/PO/H - 274.794</math></b>				

<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	<b>CH<sub>3</sub>OH</b>	→	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> OH	→	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	CH <sub>4</sub>
<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	CH <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/C/O + 1/3PO/C_{d2}/O + 4/3C_d/PO/H - 206.220</math></b>				

<b>H<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	HPO(OH) <sub>2</sub>	→	HPO(OH)C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	POH <sub>3</sub>
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	H <sub>2</sub> POCH <sub>3</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C/H_2 + 1/3C_d/C_d/PO + 1/3PO/O/H_2 + 1/3PO/C_d/O/H + 238.856</math></b>				

HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	CH <sub>4</sub>
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>4</sub>	→	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
HPO(C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	→	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/C/H + 2/3PO/C_{d2}/H + 5/3C_d/PO/H + 52.669</math></b>				

H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>	→	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(H)CH<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> POOH	→	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(H)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	PO(OH) <sub>3</sub>
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(H)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	→	H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 - \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/O/H_2 + 1/3PO/C_d/O_2 + 1/3PO/C_{d2}/H + 2/3PO/C_d/H_2 + 2/3PO/C_d/H + 7/3C_d/PO/H + 209.550</math></b>				

<b>HPO(OH)C<sub>4</sub>H<sub>7</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	HPO(OH)CH <sub>3</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>
<b>HPO(OH)C<sub>4</sub>H<sub>7</sub></b>	H <sub>2</sub> POOH	→	H <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	HPO(OH) <sub>2</sub>
<b>HPO(OH)C<sub>4</sub>H<sub>7</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	HPO(OH)C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/H_2 + 1/3C_d/PO/H + 1/3C_d/C_d/H_2 - 1/3PO/O/H_2 - 580.705</math></b>				

<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>→</b>	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>POOH</b>	<b>→</b>	<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>POCH<sub>3</sub></b>
<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/O + 1/3PO/C_d/O_2 + 1/3PO/C/H_2 + 2/3C_d/PO/C - 1/3PO/O/H_2 - 415.917</math></b>				

<b>OHPO)(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>→</b>	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>3</sub>OH</b>
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>7</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>
<b><math>\Delta h_{OHPO(C_2H_3)C_2H_5}^o = 1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/C/O + 2/3C_d/PO/H + 1/3C/PO/O/H_2 - 393.157</math></b>				

<b>CH<sub>3</sub>OPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POOCH<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>
<b>CH<sub>3</sub>OPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>O</b>	<b>→</b>	<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>CH<sub>3</sub>OH</b>
<b>CH<sub>3</sub>OPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>→</b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)OCH<sub>3</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C/C_d/O + 2/3C_d/PO/H + 2/3O/PO/C - 217.606</math></b>				

<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>CH<sub>3</sub>OH</b>	<b>→</b>	<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POCH<sub>2</sub>OH</b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/C_2 + 2/3C/PO/O/H_2 + 2/3C_d/PO/H - 262.764</math></b>				

<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub></b>	<b>→</b>	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)OC<sub>3</sub>H<sub>7</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)OCH<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>
<b>C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>PO(OCH<sub>3</sub>)OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>O</b>	<b>→</b>	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>3</sub>OH</b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 - \Delta E_3) + PO/C_d/O_2 + C_d/PO/H + 4/3O/PO/C - 307.234</math></b>				

<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>7</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>3</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>
<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>7</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>CH<sub>3</sub>PO(OH)<sub>2</sub></b>	<b>C<sub>4</sub>H<sub>8</sub></b>
<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>7</sub></b>	<b>CH<sub>3</sub>OH</b>	<b>→</b>	<b>OHPO(C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>)OCH<sub>3</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>O</b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/O_2 + 2/3C_d/PO/C + 1/3C/C_d/C/H_2 + 1/3O/PO/C - 621.561</math></b>				

<b>H<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>7</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub></b>
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>7</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>7</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>→</b>	<b>H<sub>2</sub>POC<sub>5</sub>H<sub>9</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 - \Delta E_2 + \Delta E_3) + PO/C_d/H_2 + C_d/PO/H + 1/3 C/C_d/C/H_2 + 20.038</math></b>				

<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>	<b>→</b>	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>→</b>	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	<b>CH<sub>3</sub>OH</b>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 - \Delta E_2 - \Delta E_3) + 2/3PO/C/C_d/H + 2/3C_d/PO/H + 1/3C/PO/O/H_2 - 118.984</math></b>				

<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	CH <sub>4</sub>
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>4</sub>
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	→	HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>5</sub> H <sub>9</sub>	CH <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + PO/C_d/C/H + C_d/PO/H + 2/3C/C_d/C/H_2 - 43.755</math></b>				
<b>PO(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> PO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 - \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/C_2 + 1/3C_d/PO/H - 225.350</math></b>				
<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>7</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	→	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>7</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>7</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>7</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 - \Delta E_2 - \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/C/H + 2/3C_d/PO/H - 145.991</math></b>				
<b>C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>PO(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	CH <sub>4</sub>
<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 - \Delta E_2 - \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/C_2 + 2/3C_d/PO/H - 159.750</math></b>				
<b>OHCH<sub>2</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> OH
<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>OHCH<sub>2</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b>C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>PO(C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>	CH <sub>4</sub>	→	<b>OHCH<sub>2</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(-\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C/C_d2 + 2/3PO/C_d/C_2 + 5/3C_d/PO/H + 2/3C/PO/O/H_2 - 100.507</math></b>				
<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	CH <sub>4</sub>	→	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	CH <sub>4</sub>	→	CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> OH
<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> OH	→	<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	CH <sub>3</sub> OH
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(-\Delta E_1 - \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/C_2 + 1/3PO/C_d2/C + 4/3C_d/PO/H - 113.102</math></b>				
<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)OCH<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>CH<sub>3</sub>OPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b>CH<sub>3</sub>OPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	H <sub>2</sub> O	→	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>
<b>(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POOC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	<b>CH<sub>3</sub>OPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 - \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/C/O + 2/3PO/C_d2/O + 5/3C_d/PO/H + 2/3O/PO/C - 89.181</math></b>				
<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	OHPO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub>
<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	OHPO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/O/C + 1/3C_d/PO/C - 417.011</math></b>				

<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	CH <sub>3</sub> OH	→	(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POCH <sub>2</sub> OH	CH <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/C_2 + 1/3PO/C_{d2}/C + 4/3C_d/PO/H + 1/3C/PO/O/H_2 + 52.384</math></b>				

<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	→	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(-\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_d/C/H + 1/3C_d/PO/C + 1/3PO/C_{d2}/H + C_d/PO/H + 63.618</math></b>				

(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	CH <sub>4</sub>
CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	→	<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	CH <sub>4</sub>
PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> PO(OH) <sub>2</sub>	→	<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_{d2}/C + 1/3PO/C_{d3} + 3C_d/PO/H + 2/3PO/C_d/O_2 - 571.683</math></b>				

<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	OHPO(C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>4</sub>
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	HPO(OH) <sub>2</sub>	→	(OH) <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	HPO(OH)C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C/C_d/O + C_d/C_d/PO + 1/3PO/C_d/O_2 - 234.904</math></b>				

<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	H <sub>2</sub> POCH <sub>3</sub>	→	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> POH <sub>2</sub>	PO(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>
<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 1/3PO/C_d/H_2 + 1/3PO/C_d/C/H + 8/3C_d/PO/H + 2/3PO/C_{d2}/H + 2/3PO/C_d/C_2 - 1/3PO/C/H_2 - 141.754</math></b>				

<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(OH)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(OH)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>
<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(OH)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	H <sub>2</sub> POOH	→	OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(OH)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> POCH <sub>3</sub>
<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(OH)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(OH)CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_2/C_d + 2/3PO/C_{d2}/O + 2/3PO/C/C_d/O + 8/3C_d/PO/H + 1/3PO/C/H_2 - 1/3PO/O/H_2 - 312.182</math></b>				

<b>(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	CH <sub>3</sub> OH	→	(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OCH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O
<b>(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	→	(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H <sub>2</sub> O
<b>(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OCH<sub>2</sub>OH</b>	CH <sub>4</sub>	→	<b>(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>	O(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 - \Delta E_3) + PO/C_{d3} + 3C_d/PO/H - 138.467</math></b>				

<b>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	<b>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
<b><math>\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 - \Delta E_3) + 2/3PO/C/C_{d2} + 7/3C_d/PO/H + 1/3PO/C_{d3} + 108.381</math></b>				

<b>(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> PO(C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>
<b>(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	→	(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>6</sub> H <sub>11</sub>	CH <sub>4</sub>
CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>
$\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 - \Delta E_3) + 2/3PO/C_{d3} + 1/3PO/C_{d2}/C + 8/3C_d/PO/H + 1/3C/C_d/C/H_2 + 61.177$				

HPO(C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>HPO(C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b>HPO(C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>
<b>HPO(C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>5</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>
$\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 - \Delta E_2 - \Delta E_3) + 1/3PO/C_{d2}/H + 2/3PO/C_d/C/H + C_d/PO/C + 1/3C_d/C_d/PO + 117.953$				

<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>
<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	→	HPO(C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>
$\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C/C_d/H + 2/3PO/C_{d3} + 1/3PO/C/C_{d2} + 1/3PO/C_{d2}/H + 4C_d/PO/H + 8.597$				

<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>4</sub>
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>3</sub> OH	→	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> PO(OCH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O
$\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 - \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_{d2}/O + 11/3C_d/PO/H + PO/C/C_{d2} + 1/3PO/C/C_d/O + 1/3O/PO/C - 179.497$				

<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
PO(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	→	<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	→	<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>PO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>
$\Delta h_f^o = 1/3(-\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + 4/3PO/C_d/C_2 + 1/3PO/C_{d2}/C + 2C_d/PO/H - 143.242$				

OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> PO(H)CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	→	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>PO(H)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>PO(H)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>	→	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	→	<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>PO(H)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	CH <sub>4</sub>
$\Delta h_f^o = 1/3(-\Delta E_1 - \Delta E_2 + \Delta E_3) + 2/3PO/C_{d2}/O + 1/3PO/C_d/C/O + 10/3C_d/PO/H + 1/3PO/C_d/C/H + 2/3PO/C_{d2}/H - 111.149$				

<b>H<sub>2</sub>POOCH<sub>3</sub></b>	CH <sub>3</sub> OH	→	H <sub>2</sub> POOH	CH <sub>3</sub> OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>
<b>H<sub>2</sub>POOCH<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	H <sub>2</sub> POOC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>4</sub>
<b>H<sub>2</sub>POOCH<sub>3</sub></b>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	→	H <sub>2</sub> POOC <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	CH <sub>4</sub>
$\Delta h_f^o = -1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + PO/O/H_2 + 2/3O/PO/C - 140.016$				

H <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	CH <sub>4</sub>	→	<b>H<sub>2</sub>POCH<sub>3</sub></b>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
H <sub>2</sub> POCH <sub>3</sub> OH	CH <sub>4</sub>	→	<b>H<sub>2</sub>POCH<sub>3</sub></b>	CH <sub>3</sub> OH
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>4</sub>	→	<b>H<sub>2</sub>POCH<sub>3</sub></b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
$\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + PO/C/H_2 + 1/3C/PO/O/H_2 - 40.701$				

H <sub>2</sub> POCH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> POOCH <sub>3</sub>	→	H <sub>2</sub> POOCH <sub>2</sub> POH <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>
H <sub>2</sub> POCH <sub>2</sub> OH	H <sub>2</sub> POOH	→	H <sub>2</sub> POOCH <sub>2</sub> POH <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O
H <sub>2</sub> POCH <sub>2</sub> OH	H <sub>2</sub> POOCH <sub>3</sub>	→	H <sub>2</sub> POOCH <sub>2</sub> POH <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> OH
$\Delta h_f^o = 1/3(-\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + PO/C/H_2 + PO/O/H_2 + 2/3C/PO/O/H_2 + 2/3O/PO/C - 64.678$				

H <sub>2</sub> POOCH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> OH	→	H <sub>2</sub> POOH	O(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
H <sub>2</sub> POOC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub> OH	→	H <sub>2</sub> POOH	CH <sub>3</sub> OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>
H <sub>2</sub> POOC <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	CH <sub>3</sub> OH	→	H <sub>2</sub> POOH	O(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>
$\Delta h_f^o = 1/3(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) + PO/O/H_2 + O/PO/C + 60.221$				

ANEXO E. Energías de formación de las moléculas propuestas.

MOLÉCULA	E [Hartree]	MOLÉCULA	E [Hartree]
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-637.383	(OH) <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	-714.899
HPO(OH)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-563.286	H <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	-566.695
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-489.105	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	-566.750
H <sub>2</sub> POOC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	-564.484	HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	-566.735
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	-490.458	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-566.786
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-602.083	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	-605.522
HPO(OH)C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	-602.053	CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	-605.541
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub> OH	-602.029	OHCH <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-678.325
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OCH <sub>3</sub>	-676.140	CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	-678.345
H <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	-527.982	CH <sub>3</sub> OPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-678.362
HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-527.997	OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	-678.367
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)CH <sub>3</sub>	-939.794	CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-604.297
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> POH <sub>2</sub>	-1052.618	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	-604.275
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)CH <sub>3</sub>	-64.377	(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-83.842
H <sub>2</sub> POOC <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	-642.000	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	-58.391
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	-639.556	HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-63.378
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-639.597	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-74.202
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	-713.665	(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	-57.172
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH) <sub>2</sub>	-713.548	PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-641.808
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	-713.644	(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	-51.887
H <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	-565.457	HPO(C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	-680.550
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-565.508	HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-67.658
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-52.346	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-78.505
HPO(OH)C <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	-640.800	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-68.889
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	-640.846	OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-82.714
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	-640.845	H <sub>2</sub> POOCH <sub>3</sub>	-525.733
CH <sub>3</sub> OPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	-640.846	H <sub>2</sub> POCH <sub>3</sub>	-451.704
CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub> OH	-640.819	H <sub>2</sub> POOCH <sub>2</sub> POH <sub>2</sub>	-937.523
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	-714.893	H <sub>2</sub> POOH	-486.976

**ANEXO F.** Comparación entre el delta energía de la reacción y el delta de energía de la simulación.

MOLÉCULA	$\Delta E_S$	$\Delta E_R$	MOLÉCULA	$\Delta E_S$	$\Delta E_R$
	[kJ/mol]	[kJ/mol]		[kJ/mol]	[kJ/mol]
<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>			<b>(OH)<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>7</sub></b>		
R1	11.72	100.21	R1	-8.37	-90.52
R2	27.40	93.64	R2	6.20	-223.69
R3	12.22	-142.53	R3	-13.37	68.78
<b>HPO(OH)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>			<b>H<sub>2</sub>POC<sub>4</sub>H<sub>7</sub></b>		
R1	1.80	-2.62	R1	-114.65	-160.44
R2	-2.23	2.93	R2	110.57	64.79
R3	42.23	26.70	R3	-31.46	-53.81
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>			<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>		
R1	-322.08	279.24	R1	-4.33	-16.31
R2	273.37	168.67	R2	0.73	5.17
R3	304.03	431.18	R3	-5.50	-21.91
<b>H<sub>2</sub>POOC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>			<b>HPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>		
R1	28.25	22.62	R1	-62.39	-13.16
R2	29.91	47.24	R2	-69.40	-124.62
R3	-24.15	-12.45	R3	335.96	-13.17
<b>H<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>			<b>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>POC<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>		
R1	6.42	-40.39	R1	-4.19	-10.58
R2	11.02	24.14	R2	12.14	5.76
R3	-27.09	-13.97	R3	0.88	3.98
<b>OHPO(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>			<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>3</sub>H<sub>7</sub></b>		
R1	10.64	-118.70	R1	27.62	30.75
R2	-0.60	-37.43	R2	-35.20	-35.58
R3	35.99	35.99	R3	-50.20	-46.71
<b>HPO(OH)C<sub>3</sub>H<sub>5</sub></b>			<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>		
R1	11.53	24.19	R1	-13.02	-10.33
R2	-56.66	-7.80	R2	418.42	-10.72
R3	18.96	6.29	R3	-6.93	-189.09
<b>HPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>			<b>OHCH<sub>2</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>		
R1	-32.40	-46.84	R1	-18.85	-29.06
R2	-442.92	-6.95	R2	-2.67	-33.36
R3	11.92	-2.52	R3	19.24	9.03
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)OCH<sub>3</sub></b>			<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH</b>		
R1	12.15	80.14	R1	10.56	13.94
R2	4.42	-31.13	R2	31.36	40.67

MOLÉCULA	$\Delta E_S$	$\Delta E_R$	MOLÉCULA	$\Delta E_S$	$\Delta E_R$
	[kJ/mol]	[kJ/mol]		[kJ/mol]	[kJ/mol]
R3	-2.80	-54.75	R3	-22.63	-9.94
H <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>			CH <sub>3</sub> OPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>		
R1	83.19	153.71	R1	-63.47	65.61
R2	79.76	9.25	R2	11.94	67.60
R3	37.78	31.49	R3	-20.67	-94.10
HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>			OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>		
R1	-7.58	-52.51	R1	42.00	81.68
R2	9.20	60.76	R2	4.02	1.82
R3	15.00	-36.56	R3	23.31	25.52
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)CH <sub>3</sub>			CH <sub>3</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>		
R1	103.29	446.87	R1	15.75	11.05
R2	173.84	36.15	R2	14.86	6.23
R3	291.76	85.87	R3	16.68	30.00
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> POH <sub>2</sub>			HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>		
R1	-23.52	27.26	R1	93.47	-16.22
R2	-12.53	-63.31	R2	-29.49	-52.33
R3	-7.54	63.31	R3	-32.96	-119.82
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)C			(OH) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>		
H <sub>3</sub>					
R1	-235.84	10.76	R1	66.68	2.58
R2	-34.96	-151.53	R2	74.51	2.59
R3	69.36	-47.20	R3	65.80	201.81
H <sub>2</sub> POOC <sub>4</sub> H <sub>9</sub>			OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>		
R1	-25.73	71.82	R1	21.20	1.83
R2	-1.39	145.49	R2	-42.32	17.97
R3	6.96	140.66	R3	108.35	84.61
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH			HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>		
R1	33.78	83.90	R1	-20.95	84.51
R2	24.18	-11.00	R2	-6.98	-112.44
R3	7.95	-6.99	R3	8.05	-72.37
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>			OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>		
R1	22.79	-30.61	R1	28.84	12.74
R2	-0.56	-5.64	R2	90.35	291.31
R3	16.44	70.05	R3	-5.30	-30.62
(OH) <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>5</sub>			(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH		
R1	33.93	51.33	R1	4.22	19.19
R2	18.22	-108.81	R2	27.59	12.62

MOLÉCULA	$\Delta E_S$	$\Delta E_R$	MOLÉCULA	$\Delta E_S$	$\Delta E_R$
	[kJ/mol]	[kJ/mol]		[kJ/mol]	[kJ/mol]
R3	25.72	135.35	R3	29.58	24.85
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH) <sub>2</sub>			PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>		
R1	-135.49	-87.23	R1	18.27	15.11
R2	133.87	182.13	R2	16.77	19.93
R3	28.13	157.01	R3	3.99	-42.22
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH			(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>		
R1	-28.23	10.08	R1	64.98	-27.94
R2	-26.54	148.56	R2	8.88	-523.83
R3	-11.75	329.41	R3	11.28	439.90
H <sub>2</sub> POC <sub>4</sub> H <sub>5</sub>			HPO(C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>		
R1	-78.98	-82.80	R1	-37.09	-67.46
R2	-2.49	-319.64	R2	82.87	52.50
R3	-81.80	-77.97	R3	7.25	31.72
HPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>			HPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>		
R1	-14.87	48.46	R1	5.30	3.17
R2	32.96	26.58	R2	-105.43	38.93
R3	31.93	38.31	R3	-12.93	-10.81
H <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>			OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>		
R1	32.83	18.74	R1	20.79	26.10
R2	21.23	79.77	R2	11.96	17.27
R3	24.54	13.91	R3	1249.12	83.59
HPO(OH)C <sub>4</sub> H <sub>7</sub>			(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> POC <sub>2</sub> H <sub>2</sub> PO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>		
R1	-12.27	-139.97	R1	49.85	28.30
R2	-1.82	288.09	R2	9.86	-18.75
R3	24.01	-133.19	R3	-6.74	-28.29
OHPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>			OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> PO(H)C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>		
R1	12.90	17.19	R1	-27.15	40.94
R2	-70.45	261.40	R2	27.99	41.78
R3	26.53	22.23	R3	40.25	44.03
OHPO(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>			H <sub>2</sub> POOCH <sub>3</sub>		
R1	-22.37	187.35	R1	-17.56	-56.79
R2	-20.74	58.21	R2	8.35	-173.59
R3	-0.82	112.57	R3	-11.72	17.93
CH <sub>3</sub> OPO(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>			H <sub>2</sub> POCH <sub>3</sub>		
R1	36.62	-0.44	R1	20.19	21.93

<b>MOLÉCULA</b>	<b><math>\Delta E_S</math></b>	<b><math>\Delta E_R</math></b>	<b>MOLÉCULA</b>	<b><math>\Delta E_S</math></b>	<b><math>\Delta E_R</math></b>
	<b>[kJ/mol]</b>	<b>[kJ/mol]</b>		<b>[kJ/mol]</b>	<b>[kJ/mol]</b>
<b>R2</b>	6.38	33.00	<b>R2</b>	3.60	-21.13
<b>R3</b>	43.77	80.83	<b>R3</b>	-2.82	21.92
<b>CH<sub>3</sub>PO(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)CH<sub>2</sub>OH</b>			<b>H<sub>2</sub>POOCH<sub>2</sub>POH<sub>2</sub></b>		
<b>R1</b>	7.28	21.84	<b>R1</b>	-37.04	1.42
<b>R2</b>	-10.86	-26.12	<b>R2</b>	-23.12	15.86
<b>R3</b>	3.01	80.87	<b>R3</b>	-33.43	-36.80
<b>OHPO(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub></b>			<b>H<sub>2</sub>POOH</b>		
<b>R1</b>	-9.05	21.84	<b>R1</b>	-17.56	96.94
<b>R2</b>	-4.42	47.91	<b>R2</b>	-37.55	100.21
<b>R3</b>	12.76	-74.41	<b>R3</b>	-23.94	85.12