

**ESTIMACIÓN DE GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN PARA EL CALOR DE  
FORMACIÓN EN COMPUESTOS AZUFRADOS**

**LAURA MILENA DÍAZ RODRÍGUEZ**

**DANIEL RODULFO RINCÓN FONSECA**

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

**2016**

**ESTIMACIÓN DE GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN PARA EL CALOR DE  
FORMACIÓN EN COMPUESTOS AZUFRADOS**

**LAURA MILENA DÍAZ RODRÍGUEZ**

**DANIEL RODULFO RINCÓN FONSECA**

**Trabajo de grado para optar al título de Ingeniera Química e Ingeniero  
Químico**

**Director**

**Dr. GIOVANNI MORALES MEDINA**

**Ingeniero Químico**

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

**2016**

## DEDICATORIA

*A Dios primero que nada por todas las bendiciones que me ha brindado a lo largo de esta carrera, por darme la fortaleza que necesite aun cuando pensé en desfallecer y por permitirme culminar esta etapa de mi vida al lado de todas las personas que amo.*

*A mi querida madre Rubiela Díaz Rodríguez por brindarme la oportunidad de estudiar lo que realmente me apasiona, por apoyarme en los momentos difíciles, por alentarme a culminar esto que empecé, que las cosas hay que trabajarlas y lucharlas para poder lograrlas y por darme la valiosa oportunidad de ser su hija.*

*A mis abuelitos Ana y Efraín, por todo el cariño que me dan día a día, por enseñarme a valorar todo lo que encontramos en la vida, por su sencillez y sus palabras de aliento, por los regaños y las felicitaciones y más que nada por haberme dado la oportunidad de vivir a su lado y demostrarme lo que es el amor verdadero. A mi tía Janet, por ser mi confidente, mi amiga, mi paño de lágrimas, por ser mi segunda mamá y por los invaluable consejos que me ha dado a lo largo de la vida, estos me han ayudado a formar mi carácter.*

*A mi hermanito Sergio Andrés, por las experiencias vividas, por las peleas, por el amor y comprensión que me brinda día a día y por la sabiduría con la que me ha demostrado que todo en la vida es posible si simplemente luchamos por ello. A mis tías Martha y Jasmith, por enseñarme que el que persevera alcanza. A mis primitas, M<sup>a</sup> José, Alexandra, Paula, Mariana y M<sup>a</sup> Lucia por su apoyo incondicional.*

*A todos mis amigos y amigas, en especial a Yuyo por sus enseñanzas sobre la humildad el perdón, la amistad y la familia.*

*Laura Milena Díaz Rodríguez*

## DEDICATORIA

*Dedico este trabajo a mi papá Arcenio Rincón González, por el esfuerzo que hizo para sostenerme todos estos años en la universidad, por la paciencia, la comprensión, por el ejemplo que me ha dado académicamente, a mi mamá Gloria Fonseca Suárez, por su apoyo moral en cada momento que decaía, por los ánimos que me daba para continuar en este proceso académico, por el amor que me tiene y su valentía que tiene a salir adelante en cada situación, por el ejemplo que veo en ella, a mis hermanos Juan Carlos Rincón Fonseca y Ángela Vanessa Rincón Fonseca, por la alegría que impregnan en mi vida, por sus consejos, por el apoyo que me dieron en este proceso de formación académica. A mis tías, Alba Mery y Luz Marina, por sus consejos, apoyo moral que me brindaron, a mi tío José, por sus palabras y consejos, por las risas que da a mi vida, a mi abuelo Rodolfo Rincón Gil por sus palabras sabías que me decía, la experiencia personal que me compartía para ponerlo en práctica en mi vida. Al Dr. Giovanni Morales Medina, por todo el conocimiento que nos compartió, por la confianza que nos dio al darnos la oportunidad de trabajar con él. A mis amigos, por apoyarme cuando más lo necesitaba.*

*Daniel Rodolfo Rincón Fonseca*

## AGRADECIMIENTOS

*A mi nonito, mi papá, Efraín Díaz, el motor de mi alegría, de mi empeño, por el que hoy estoy acá, mi divino: hoy te agradezco por cada palabra, por permitirme haber compartido todo este tiempo a tu lado, por apoyarme, por quererme como solo tú lo sabes hacer, Eres mi vida entera y esto es por ti, por el gran sueño que tenias de verme ingeniera, por fin lo cumplí.*

*A mi mamá por brindarme los beneficios, la comodidad y las mejores oportunidades para estar hoy donde estoy. Madre mía gracias por apoyarme en todas las decisiones que he tomado hasta hoy, por permitirme elegir y aprender de como es la vida lejos de casa y más que nada porqué en estos momentos podemos decir que lo logramos.*

*A mi director el Dr. Giovanni Morales, por su apoyo incondicional en este proceso, por compartir sus conocimientos con nosotros, profesor, gracias por el rigor, la inspiración y el ejemplo intelectual, bases fundamentales que aplicare en mi vida. Asimismo a todos los profesores que estuvieron en este camino, sin ustedes nada de esto habría sido posible.*

*A mi compañero de tesis Daniel, gracias por la paciencia, las palabras de aliento, por comprenderme en todo momento, por apoyarme y por ser un gran amigo.*

*A mis amigos por apoyarme en cada paso que di desde que entre a la Universidad, por las experiencias vividas, por todos los momentos inolvidables. Las vivencias que hemos tenido y todas las cosas aprendidas nunca las olvidaré ya que en todos esos momentos pude comprobar lo que realmente vale la amistad.*

*Al Ing. Javier Ronaldo Sanabria por todos los momentos compartidos, por el apoyo incondicional, por ayudarme a crecer como persona, por los grandes amigos que me permitió conocer y más que nada por creer en mí cuando nadie más lo hizo. Gracias por todo.*

*A mi padrino Rafael y mi Tío Francisco por cada palabra de aliento, porque siempre me han demostraron lo mucho que me quieren y soy muy afortunada de tener personas tan especiales en mi vida, son dos angelitos que siempre me han cuidado.*

*Laura Milena Díaz Rodríguez*

## AGRADECIMIENTOS

*A Dios, por darme la salud física y mental para haber terminado este proyecto de vida, por la inteligencia y la sabiduría para afrontar los problemas que se presentaron en este camino personal y académico.*

*A mis padres, por brindarme la confianza de haber salido de la casa a muy corta edad, espero que nunca se hallan sentido defraudados y que nunca se sientan defraudados, por la fe que pusieron en mí, por las palabras que me daban para seguir adelante y no decaer en los momentos difíciles, a pesar de la distancia siempre estuvieron pendientes de mí y apoyaron en cada momento, por la educación que me dieron de niño y de joven, no alcanzan las palabras para darles las gracias por todo lo que han hecho por mí.*

*A mis hermanos, por todos los momentos que han estado conmigo, por sus consejos y por estar pendiente de mí en cada momento.*

*A mis tías, mi tío, mi abuelo, por todos los consejos que me dieron en mi vida personal y en mi vida académica.*

*A mi director, el Dr. Giovanni Medina, por su dedicación, colaboración y por brindarnos sus conocimientos en pro de los nuestros, el interés que demostró en nosotros, la exigencia académica que dejó plasmada en este proyecto y en mi vida.*

*A mis amigos, gracias a Dios tengo muy buenos amigos a los cuales considero como mi segunda familia, con ellos viví muchas experiencias tanto buenas como malas, por estar pendiente cuando más lo necesitaba, por ser consejeros, por escuchar cuando necesita desahogarme, por compartir conmigo tantos momentos inolvidables, son tantos amigos que tengo y que hice en este camino que no puede decir todos los nombres, pero ellos que los llevo en mi corazón.*

*A mis profesores, por compartirme todas las enseñanzas y experiencias de su vida para aplicar en mi carrera, por la exigencia académica, por el interés de que sus estudiantes salgan adelante y dejen en alto el nombre de Universidad Industrial de Santander, esta universidad que siempre voy a llevar en mi corazón.*

*Daniel Rodolfo Rincón Fonseca*

## TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN .....	17
1. FUNDAMENTOS TEORICOS .....	18
1.1. Compuestos azufrados tipo tiol.....	18
1.2. Calor de formación .....	18
1.3. Grupos de contribución.....	19
1.4. Reacciones isodésmicas .....	20
1.5 Calores de reacción a partir de cálculos de estructura molecular .....	21
1.5.1. Método PM3.....	21
1.5.2. Método B2PLYP.....	22
1.6. Software libre GAMESS.....	22
2. METODOLOGÍA.....	23
2.1. Definición de los grupos de contribución de compuestos faltantes.....	23
2.2. Planteamiento del conjunto de moléculas.....	23
2.3. Formulación de reacciones isodesmicas.....	24
2.4. Cálculos de geometrías de equilibrio, frecuencias y energías.....	24
2.5. Cálculo de los grupos de contribución.....	24
3. RESULTADOS Y ANALISIS.....	26
3.1. GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN.....	26
3.2. REACCIONES ISODESMICAS .....	30
3.3. CÁCULO DE GEOMETRÍAS, FRECUENCIAS Y ENERGÍAS.....	32
3.4. GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DESCONOCIDOS .....	32
4. CONCLUSIONES .....	37

5. RECOMENDACIONES.....	38
6. BIBLIOGRAFÍA.....	39
ANEXOS.....	42

## LISTA DE TABLAS

	<b>Pág.</b>
<b>TABLA 1.</b> GRUPOS DE ADITIVIDAD DE BENSON. ....	19
<b>TABLA 2.</b> GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DESCONOCIDOS. ....	26
<b>TABLA 3.</b> MATRIZ GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DESCONOCIDOS. ....	27
<b>TABLA 4.</b> REACCIONES ISODESMICAS. ....	30
<b>TABLA 5.</b> VALORES PARA LOS GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DESCONOCIDOS. ....	33
<b>TABLA 6.</b> PORCENTAJE DE ERROR EN LOS CÁLCULOS. ....	34
<b>TABLA 7.</b> CONFORMACIONES ESPACIALES. ....	35
<b>TABLA 8.</b> SET DE MOLÉCULAS. ....	42
<b>TABLA 9.</b> MATRIZ GRUPOS CONOCIDOS. ....	48
<b>TABLA 10.</b> REACCIONES ISODÉSMICAS Y ENERGÍA. ....	51
<b>TABLA 11.</b> MATRIZ DESCONOCIDA REACCIONES ISODESMICAS. ....	72
<b>TABLA 12.</b> OPTIMIZACIÓN Y FRECUENCIA. ....	76
<b>TABLA 13.</b> ERROR EN LOS DATOS OBTENIDOS. ....	78

## LISTA DE FIGURAS

	<b>Pág.</b>
<b>FIGURA 1. REACCIÓN ISODÉSMICA.....</b>	<b>21</b>
<b>FIGURA 2. METODOLOGÍA PROPUESTA.....</b>	<b>23</b>
<b>FIGURA 3. MOLÉCULA PROPANO-2,2-DITIOLO.....</b>	<b>26</b>

## LISTA DE ANEXOS

	<b>Pág.</b>
<b>ANEXO A. SET DE MOLÉCULAS Y GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DE BENSON.....</b>	42
<b>ANEXO B. MATRIZ GRUPOS CONOCIDOS.....</b>	48
<b>ANEXO C. REACCIONES ISODESMICAS Y ENERGÍA.....</b>	51
<b>ANEXO D. MATRIZ BNC.....</b>	72
<b>ANEXO E. OPTIMIZACIÓN Y FRECUENCIA .....</b>	76
<b>ANEXO F. ENERGÍA TEORICA, EXPERIMENTAL Y ERROR. ....</b>	78

## RESUMEN

**TÍTULO: ESTIMACIÓN DE LOS GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN PARA EL CALOR DE FORMACIÓN DE COMPUESTOS AZUFRADOS\***

**AUTORES:** LAURA MILENA DÍAZ RODRÍGUEZ, DANIEL RODULFO RINCÓN FONSECA. \*\*

**PALABRAS CLAVES:** Grupos de contribución, tioles, B2PLYP/STO-3G, PM3, reacciones isodésmicas, calor de formación, Gamess, Avogadro.

### **DESCRIPCIÓN:**

Una metodología fue aplicada para el cálculo de los grupos de contribución desconocidos para la estimación del calor de formación de compuestos azufrados tipo tiol, basada en procedimientos de estructura electrónica y en reacciones isodésmicas. Un conjunto de 71 moléculas conteniendo los grupos de contribución desconocidos fue propuesta como paso inicial. Asimismo, 3 reacciones isodésmicas fueron propuestas para cada una de las moléculas del conjunto. Los métodos de estructura electrónica PM3 y B2PLYP/STO-3G codificados en Gamess fueron aplicados para las geometrías y los valores de las energías moleculares, respectivamente, estos últimos valores requeridos para las reacciones isodésmicas; la construcción y la visualización de las moléculas por realizada utilizando Avogadro. La descomposición de las moléculas y de sus reacciones isodésmicas en grupos de contribución condujo a una ecuación matricial para estimar los grupos faltantes por medio de regresión lineal múltiple. Los intervalos de confianza y los errores en las estimaciones de los calores de reacción fueron calculados para analizar la exactitud de la regresión aplicada. Según los anteriores estadísticos y las conformaciones geométricas de las moléculas, los compuestos azufrados tipo tiol presentan interacciones entre átomos no enlazados que deben ser incluidos explícitamente en la matriz de grupos desconocidos para reducir la incertidumbre en los grupos calculados en el presente trabajo.

---

\* Trabajo de grado

\*\* Facultad de ingenierías fisicoquímicas. Escuela de ingeniería química. Director: I.Q., Dr. Giovanni Morales Medina.

## ABSTRACT

**TITLE: ESTIMATIONS OF THE CONTRIBUTION GROUPS FOR THE HEAT OF FORMATION OF SULPHUR COMPOUNDS\***

**AUTHORS:** LAURA MILENA DIAZ RODRIGUEZ, DANIEL RODULFO RINCÓN FONSECA\*\*

**KEYWORDS:** Contribution groups, thiols, B2PLYP/STO-3G, PM3, Isodesmics reactions, heats of formation, Gamess, Avogadro.

### **SUMMARY:**

This work's main goal was to calculate the unknown contribution groups for thiol compounds based in molecular calculations and isodesmic reactions. The procedures depend on the type of molecule and the phenomena that requires analysis. Firstly, a set of 71 molecules containing the unknown groups was established. Later on, three isodesmic reactions were constructed for each molecule of the set. Geometries and energies for the molecules related to isodesmic reactions were calculated at the PM3 and B2PLYP/STO-3G levels of theory, respectively, as codified in Gamess. Energies were utilized for the heat of isodesmic reactions. Molecules were drawn in Avogadro program. The heat of formation for the molecules as well as the heat for the isodesmic reactions were represented using the contribution groups to obtain a matrix system. Unknown contribution groups were calculated through multivariate linear regression. Confidence intervals and residuals were calculated in order to analyze the regression. According to these statistics and molecular conformation analyses, thiols exhibit interactions between non-neighboring atoms that influence the values for the calculated contribution groups. As a recommendation, these interactions should be included in future works for reducing uncertainty in the calculated thiol groups.

---

\* Trabajo de grado

\*\* Facultad de ingenierías fisicoquímicas. Escuela de ingeniería química. Director: I.Q., Dr. Giovanni Morales Medina.

## INTRODUCCIÓN

En la actualidad los estudios relacionados con la ingeniería química van de la mano del uso de computadores que permiten el análisis de sistemas complejos [1]. Las herramientas del modelado molecular permiten la predicción de propiedades, características y comportamientos de un sistema a nivel molecular; la información obtenida por modelado molecular complementa los resultados de mediciones a nivel experimental [2]. Una de las propiedades que reporta el modelado molecular corresponde a la energía, la cual puede ser utilizada para la predicción de propiedades termoquímicas. Entre estas, el calor de formación conlleva a la determinación de los efectos energéticos en un sistema reaccionante.

De otro lado, los cálculos de modelado molecular pueden suministrar los valores adecuados para la habilitar el uso de métodos de predicción basados en la estructura, tal como el método de los grupos de contribución. El método de contribución de grupos proporciona una estimación rápida de las propiedades termoquímicas sin necesidad del soporte computacional. En el presente trabajo se aplica una metodología para el cálculo de los grupos de contribución de compuestos azufrados de tipo tiol basado en cálculos de modelado molecular. La aplicación del modelado molecular se efectúa por medio del programa libre Gamess y la construcción y la visualización de las moléculas por medio del programa libre Avogadro.

## 1. FUNDAMENTOS TEORICOS

### 1.1. Compuestos azufrados tipo tiol

Los mercaptanos son compuestos orgánicos que poseen el grupo funcional tiol o sulfhidrilo formado por un átomo de azufre unido a 1 átomo de hidrogeno, según  $R - SH$ , donde  $R$  es una cadena hidrocarbonada [3]. La estructura electrónica del azufre atómico es análoga en el último nivel a la del oxígeno, con la diferencia de que la capa de valencia está en el tercer nivel en vez del segundo. A causa de esta diferencia, el muestra divergencias importantes respecto al grupo alcohol; e.g. los puentes de hidrogeno del grupo tiol son más débiles.

Los tioles se pueden encontrar en la industria del refino del petróleo y se encuentran sobre todo en los cortes ligeros. Entre los tioles identificados se encuentran metanotiol ( $CH_4S$ ), etanotiol ( $C_2H_6S$ ), 2-metilpropanotiol ( $C_4H_{10}S$ ), 2-metilheptanotiol ( $C_8H_{18}S$ ) y ciclohexanotiol ( $C_6H_{12}S$ ). Los tioles, en particular el etanotiol ( $C_2H_6S$ ) se usan industrialmente como odorante del gas licuado de petróleo para imprimirle ese olor fuerte característico [4]. De otro lado, los tioles varietales, particularmente el 4-mercapto-4-metilpentan-2-ona y el 3-mercaptohexan-1-ol han sido identificados como compuestos claves en el aroma de los vinos jóvenes de diferentes variedades [5]. Asimismo, los grupos tiol también se encuentran en las proteínas que contienen cisteína, cistina, metionina y glutatión [6].

### 1.2. Calor de formación

El calor de formación corresponde a la variación de entalpía cuando una mol del compuesto se produce en su estado estándar a partir de las cantidades necesarias de los elementos que lo componen, en sus estados estándar [7]. El estado estándar corresponde a 298 K y 1 atm.

El calor de formación constituye una herramienta indispensable para determinar los efectos energéticos de procesos industriales; con los calores de formación se

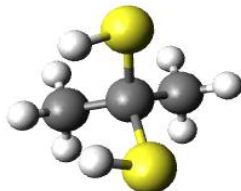
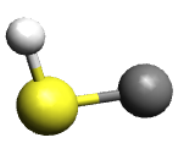
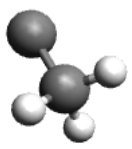
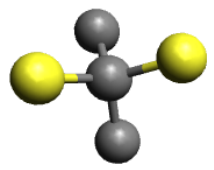
puede determinar si una reacción es endotérmica o exotérmica. La literatura presenta una base de datos experimental para diferentes compuestos, sin embargo, las mediciones referentes al calor de formación de moléculas con la estructura tiol es escasa. Lo anterior puede ser solventado por el uso de métodos de estimación teórica de propiedades termoquímicas basados en la estructura molecular.

### 1.3. Grupos de contribución

Las propiedades termoquímicas pueden ser estimadas de forma rápida utilizando las llamadas reglas de aditividad de grupos de contribución. Los grupos de contribución son definidos como los átomos polivalentes (número de ligandos  $\geq 2$ ) unidos con sus ligandos. En la nomenclatura de los grupos de contribución, el átomo polivalente es identificado en primer lugar y después se especifican sus ligandos; es decir, el grupo de contribución C/H<sub>3</sub>/C representa un átomo de carbono conectado a 3 hidrógenos y a otro carbono [8]. La Tabla 1 presenta los grupos de contribución para una molécula tipo tiol.

**Tabla 1.** Grupos de aditividad de Benson.

 Carbono,  Hidrogeno,  Azufre

			Propano-2,2-ditiol
			
2S/C/H	2C/C/H <sub>3</sub>	C/S <sub>2</sub> /C <sub>2</sub>	

Según la Tabla 1, el calor de formación para el compuesto *Propano – 2,2 – ditiol* puede obtenerse al sumar los valores de los respectivos grupos de contribución, según:

$$\Delta H_f^\circ(\text{Propano} - 2,2 - \text{ditiol}) = 2[S/C/H] + 2[C/C/H_3] + [C/S_2/C_2] \quad (1)$$

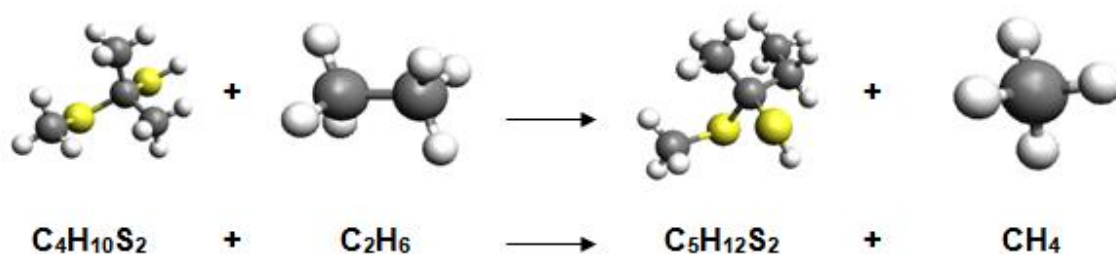
$$\Delta H_f^\circ(\text{Propano} - 2,2 - \text{ditiol}) = 2 * (4,62) + 2 * (-10.2) + C/S_2/C_2$$

$$\Delta H_f^\circ(\text{Propano} - 2,2 - \text{ditiol}) = -11,16 \text{ Kcal/mol} + C/S_2/C_2$$

El  $\Delta H_f^\circ$  de este compuesto no puede ser estimado ya que se requiere el valor para el grupo de contribución  $C/S_2/C_2$ . El cálculo de los valores para los grupos de contribución desconocidos de diferentes estructuras es reportada en artículos de investigación, principalmente por las ventajas de la aplicación de este método; usualmente, las estimaciones utilizando los grupos de contribución presentan en promedio una desviación de  $\pm 0,5$  kcal/mol para el calor de formación [8].

#### 1.4. Reacciones isodésmicas

Las reacciones isodesmicas pueden ser reales o hipotéticas con la restricción de que el número total de cada tipo de enlace debe conservarse en ir de reactivos a productos. Estas reacciones son empleadas para estimar entalpías de formación de sustancias combinando datos experimentales con valores de energía obtenidos a partir de cálculos de la química cuántica [9]. La Figura 1 presenta un ejemplo de reacción isodésmica para el compuesto 2-(metilsulfanilo)propano-2-tiol ( $C_4H_{10}S_2$ ), en donde se aprecia que los enlaces carbono-carbono, carbono-azufre, hidrógeno-carbono y azufre-hidrogeno se conservan antes y después de la reacción.



**Figura 1.** Reacción isodésmica.

### 1.5 Calores de reacción a partir de cálculos de estructura molecular

Los calores para las reacciones isodésmicas pueden ser estimados a partir de cálculos de estructura electrónica, los cuales consideran la solución de la ecuación de Schrödinger para describir el efecto de las interacciones atómicas y subatómicas en las propiedades moleculares. Los procedimientos de estructura electrónica dependen del tipo de molécula y de los fenómenos que se requieren analizar. Para las moléculas azufradas, se reporta el uso de los métodos PM3 para la geometría [10] y el método B2PLYP para la energía [11].

#### 1.5.1. Método PM3.

El método PM3 (Parameterized Model Number 3) aplica un procedimiento denominado semiempírico para aproximar el comportamiento de determinados átomos (interacciones internucleares) según resultados experimentales o cálculos en un nivel de teoría superior [12] [13]. El método PM3 presenta una mayor exactitud que otros métodos semiempíricos y una exactitud comparable con algunos niveles de teoría superiores [14]. Para información sobre el formalismo del método semiempírico PM3 se remite al lector a las referencias [15] y [16].

### 1.5.2. Método B2PLYP

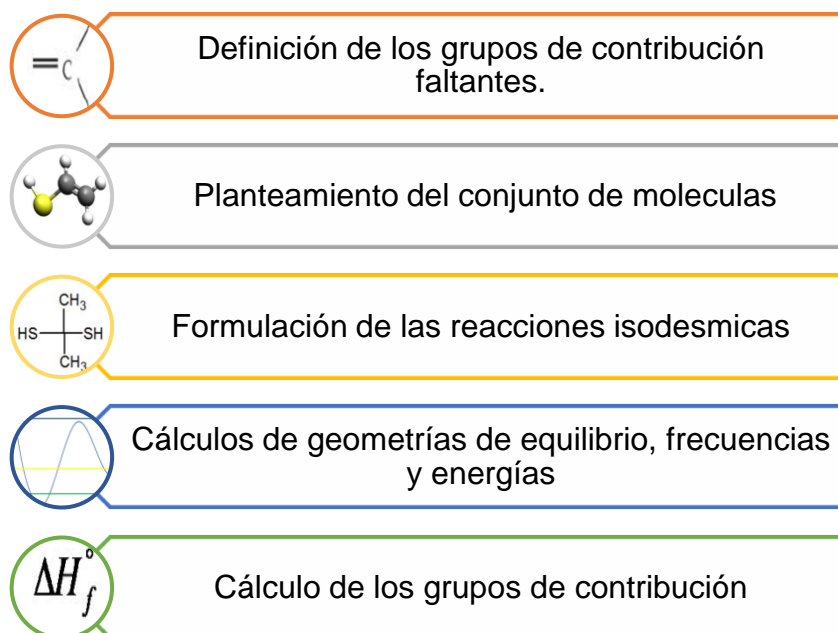
El funcional B2PLYP es un funcional híbrido, donde el “2” indica el número de parámetros y el orden de la teoría de perturbaciones y PLYP denota una correlación de perturbaciones con los funcionales CLY. Este funcional ha reportado errores con desviación absoluta media 0,1 Kcal/mol en sus predicciones [17].

### 1.6. Software libre GAMESS

GAMESS es un programa libre que permite realizar una gran diversidad de cálculos mecanocuánticos de sistemas moleculares. En la actualidad, la Universidad Estatal de Iowa es la encargada de realizar modificaciones y actualizar los cambios a las nuevas versiones de GAMESS. Este programa presenta una amplia gama de cálculos de química cuántica entre los cuales se encuentra la optimización de geometrías moleculares, el cálculo de frecuencias y estimaciones energéticas [17].

GAMESS está limitado para un total de 2.000 átomos. El número total de conjuntos de base simétrica única, no puede exceder 5.000, que no contiene más de 20.000 Gauss primitivas. Cada contracción no debe contener más de 30 Gaussianas. En la práctica, la restricción en el uso de GAMESS se encuentra en los recursos computacionales (tiempo de CPU y almacenamiento en disco) más que en la limitaciones anteriores [17].

## 2. METODOLOGÍA



**Figura 2.** Metodología propuesta.

### 2.1. Definición de los grupos de contribución de compuestos faltantes.

Una revisión bibliográfica en diferentes bases de datos y libros fue realizada para determinar los grupos de contribución reportados para los compuestos azufrados tipo tiol. Los grupos de contribución definidos en el presente trabajo corresponden a los no reportados en la consulta realizada (desconocidos).

### 2.2. Planteamiento del conjunto de moléculas.

Las moléculas de trabajo fueron seleccionadas considerando:

- Tres moléculas por cada grupo de contribución desconocido (33 moléculas en total).
- 20 moléculas adicionales combinando dos grupos de contribución desconocidos.

- 18 moléculas adicionales conteniendo tres grupos de contribución desconocidos.

Con estas estructuras se construyó una matriz de grupos conocidos ( $A_{CON}$ ) y otra matriz de grupos no conocidos ( $A_{NC}$ ).

### 2.3. Formulación de reacciones isodesmicas.

Tres reacciones isodesmicas fueron formuladas para cada molécula propuesta anteriormente; las moléculas propuestas fueron ubicadas en los reactivos o en los productos para relacionar diferentes estructuras. Los calores de formación de las moléculas propuestas fueron especificados en términos de los calores de formación y de las energías de los compuestos implicados en las reacciones isodesmicas. Los calores de formación para varios compuestos fueron tomados del Webbook Nist [18]; los compuestos sin calores de formación experimental fueron expresados en sus grupos de contribución respectivos con lo cual se formó una nueva matriz de grupos desconocidos denominada  $B_{NC}$ .

### 2.4. Cálculos de geometrías de equilibrio, frecuencias y energías.

Para la determinación de estos valores se utilizaron los programas Avogadro (edición y visualización molecular) y GAMESS (cálculos de química cuántica). Para la determinación de las geometrías de equilibrio y de las frecuencias se utilizó el método semiempírico PM3, mientras que para la energía el nivel de teoría utilizado fue el B2PLYP/STO-3G.

### 2.5. Cálculo de los grupos de contribución.

Los grupos de contribución desconocidos fueron calculados por medio de la siguiente derivación:

- Grupos de contribución para las 71 moléculas definidas:

$$\Delta H_f^\circ = A_{CON} * X_{CON} + A_{NC} * X_{NC} \quad (2)$$

Donde  $A_{CON}$  son los grupos de contribución conocidos,  $X_{CON}$  los coeficientes,  $A_{NC}$  los grupos de contribución no conocidos y  $X_{NC}$  los coeficientes.

- Grupos de contribución a partir de las reacciones isodésmicas:

$$\Delta H_f^\circ = C + B_{NC} * X_{NC} \quad (3)$$

**Ecuación 1.** Entalpia de formación reacciones isodesmicas.

Donde C son los valores de las entalpias de las moléculas de las reacciones isodesmicas,  $B_{NC}$  la matriz de los grupos no conocidos y  $X_{NC}$  los coeficientes.

- Igualando ecuaciones 2 y 3:

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

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

$$b = C - A_{CON} * X_{CON} \quad M = (A_{NC} - B_{NC})$$

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

- Los valores de los grupos de contribución fueron obtenidos por mínimos cuadrados, según:

$$X_{NC} = (M' * M)^{-1} * M' * b \quad (4)$$

### 3. RESULTADOS Y ANALISIS

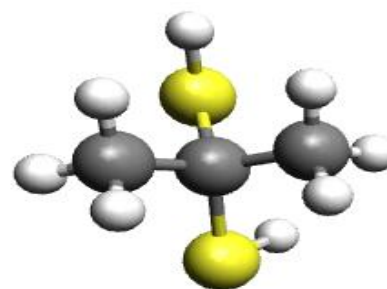
De acuerdo con lo establecido anteriormente en la metodología, se obtuvieron los grupos de contribución definidos. Los resultados se presentan a continuación.

#### 3.1. GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN

Los grupos definidos para ampliar la base de grupos de los compuestos azufrados tipo tiol son mostrados en la Tabla 2. Las moléculas propuestas basadas en los grupos de la Tabla 2 se pueden apreciar en el ANEXO A. La Figura 3 presenta una molécula propuesta que contiene el grupo desconocido  $C/S_2/C_2$ . Cada molécula fue expresa en sus respectivos grupos de contribución, con lo cual los calores de formación fueron representados por las matrices de grupos desconocidos,  $A_{NC}$ , (Tabla 3 ) y de grupos conocidos,  $A_{CON}$ , (ANEXO B).

**Tabla 2.** Grupos de contribución desconocidos.

GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN	
$C/S_3/H$	$C/S/H_3$
$C/C_2/S_2$	$S/C_d/H$
$C/S_3/C$	$S/C_t/H$
$C/S_2/C/H$	$S/C_t/C$
$C/S_2H_2$	$C_d/S/C_b$
$C_t/S$	$C/C_d/H_3$
$C_d/S/C_d$	$S/C_t/C_d$
$C_d/S/C_t$	$C/S_3/C_d$
$C/S_4$	$C_t/C_t$
$C_d/S_2$	



**Figura 3.** Molécula Propano-2,2-Ditio

Tabla 3. Matriz grupos de contribución desconocidos.

MOLÉCULAS	C/S3/H	C/C2/S2	C/S3/C	C/S2/C/H	C/S2/H2	Ct/S	Cd/S/Cd	Cd/S/Ct	C/S4	Cd/S2	C/S/H3	S/Cd/H	S/Ct/H	S/Ct/C	Cd/S/Cb	C/Cd/H3	S/Ct/Cd	C/S3/Cd	Ct/Ct
1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
13	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
16	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
20	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
21	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	2	0	0	0	0	0	0	0
23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0
24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0
25	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0
26	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0
27	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
28	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
29	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0

31	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0
33	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
34	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
35	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
36	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
37	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
38	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
39	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
40	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
41	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
42	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
43	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
44	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
45	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
46	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
47	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
48	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
49	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
50	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
51	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
52	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
53	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
54	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	2	0	0	0	0	0	1	0
55	1	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
56	0	0	1	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
57	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
58	0	1	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
59	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0
60	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
61	1	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
62	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
63	0	0	0	0	0	1	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0

64	0	1	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
65	1	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
66	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
67	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	2
68	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
69	0	0	1	0	1	2	0	0	0	0	2	0	0	2	0	0	0	0	0
70	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0
71	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	2

### 3.2. REACCIONES ISODESMICAS

La tabla 4 presenta las reacciones isodésmicas para las moléculas propan-2,2-ditiol, butano-2,2-ditiol y 2-(metilsulfanil)propano-2-tiol. La lista completa de las reacciones isodésmicas para las moléculas propuestas puede ser analizada en el ANEXO C. Asimismo, la matriz de grupos desconocidos,  $B_{NC}$ , obtenida a partir de estas reacciones puede ser consultada en el ANEXO D.

**Tabla 4.** Reacciones isodesmicas.

MOLÉCULA 1. PROPANO-2,2-DITIOLO ( $C_3H_8S_2$ )						
REACCIÓN 1						
$C_3H_8S_2$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_4H_{10}S_2$	+	$CH_4$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR [Hartree]						
E= -904.6783		E= -78.6841		E= -943.4349		E= -39.9288
$\Delta E_{rxn} [kcal/mol] = -0.82$						
REACCIÓN 2						
$C_3H_8S_2$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_5H_{12}S_2$	+	$CH_4$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR [Hartree]						
E= -904.6783		E= -117.4407		E= -982.1907		E= -39.9288
$\Delta E_{rxn} [kcal/mol] = -0.31$						
REACCIÓN 3						
$C_5H_{12}S_2$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_3H_8S_2$	+	$C_3H_8$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR [Hartree]						
E= -982.1907		E= -78.6841		E= -904.6783		E= -117.4407
$\Delta E_{rxn} [kcal/mol] = -0.63$						

<b>MOLÉCULA 2. BUTANO-2,2-DITIOLO (C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>S<sub>2</sub>)</b>				
<b>REACCIÓN 1</b>				
<b>C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>S<sub>2</sub></b>	+	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	→	<b>C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>S<sub>2</sub></b> + <b>CH<sub>4</sub></b>
<b>ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR [Hartree]</b>				
E= -943.4343		E= -78.6841		E= -982.1868    E= -39.9288
$\Delta E_{rxn} [kcal/mol] = 1.757$				
<b>REACCIÓN 2</b>				
<b>CH<sub>4</sub>S<sub>2</sub></b>	+	<b>C<sub>4</sub>H<sub>10</sub></b>	→	<b>C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>S<sub>2</sub></b> + <b>CH<sub>4</sub></b>
<b>ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR [Hartree]</b>				
E= -827.1617		E= -156.1974		E= -943.4343    E= -39.9288
$\Delta E_{rxn} [kcal/mol] = -2.51$				
<b>REACCIÓN 3</b>				
<b>C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>S<sub>2</sub></b>	+	<b>CH<sub>4</sub></b>	→	<b>C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>S<sub>2</sub></b> + <b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>
<b>ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR [Hartree]</b>				
E= -982.1907		E= -39.9288		E= -943.4343    E= -78.6841
$\Delta E_{rxn} [kcal/mol] = 0.692$				

<b>MOLÉCULA 3. 2-(METILSULFANILO)PROPANO-2-TIOL (C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>S<sub>2</sub>)</b>				
<b>REACCIÓN 1</b>				
<b>C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>S<sub>2</sub></b>	+	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	→	<b>C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>S<sub>2</sub></b> + <b>CH<sub>4</sub></b>
<b>ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR [Hartree]</b>				

E= -943.4385		E= -78.6841		E= -982.1993		E= -39.9288
$\Delta E_{rxn} [kcal/mol] = -3.4513$						
<b>REACCIÓN 2</b>						
<b>C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>S<sub>2</sub></b>	+	<b>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub></b>	$\longrightarrow$	<b>C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>S<sub>2</sub></b>	+	<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>
<b>ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR [Hartree]</b>						
E= -943.4385		E= -117.4407		E= -982.1971		E= -78.6841
$\Delta E_{rxn} [kcal/mol] = -2.6355$						
<b>REACCIÓN 3</b>						
<b>C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>S<sub>2</sub></b>	+	<b>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub></b>	$\longrightarrow$	<b>C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>S<sub>2</sub></b>	+	<b>CH<sub>4</sub></b>
<b>ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR [Hartree]</b>						
E= -943.4385		E= -117.4407		E= -1020.9475		E= -39.9288
$\Delta E_{rxn} [kcal/mol] = 1.8197$						

### 3.3. CÁLCULO DE GEOMETRÍAS, FRECUENCIAS Y ENERGÍAS

Los valores para las energías de las reacciones isodésmicas para las tres primeras moléculas son mostradas en la Tabla 4; las frecuencias para los compuestos de la Tabla 4 resultaron positivas, con lo cual las estructuras obtenidas corresponden a compuestos estables. Las energías incluyen las contribuciones de los términos rotacional, vibracional y traslacional a condiciones estándar. La lista de geometrías y frecuencias se puede apreciar en el ANEXO E y las energías pueden ser consultadas en el ANEXO C.

### 3.4. GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DESCONOCIDOS

Los valores para los grupos de contribución desconocidos calculados a partir de una regresión lineal (Ecuación 4), considerando las moléculas propuestas y las reacciones isodésmicas, son mostrados en la Tabla 6. En esta tabla también se

presentan los intervalos de confianza (95%) obtenidos para cada grupo de contribución calculado [19].

Asimismo, la Tabla 7 reporta los valores para las energías de reacción de las reacciones isodérmicas calculadas al nivel B2PLYP/STO-3G y las estimadas por medio de los grupos de contribución obtenidos en el presente trabajo. En esta tabla se aprecia que los grupos de contribución conducen a errores apreciables para la estimación de las entalpías de varias reacciones; estos errores concuerdan con los tamaños para los intervalos de confianza obtenidos para los grupos de contribución calculados (Tabla 6). La lista de los errores encontrados se encuentra en el ANEXO F.

**Tabla 5.** Valores para los grupos de contribución desconocidos.

GRUPO DE CONTRIBUCIÓN	VALOR OBTENIDO POR REGRESIÓN LINEAL MULTIPLE	INTERVALO DE CONFIANZA
C/S <sub>3</sub> /H	8.49	±5.81
C/C <sub>2</sub> /S <sub>2</sub>	-5.29	±3.97
C/S <sub>3</sub> /C	-15.18	±4.3
C/S <sub>2</sub> /C/H	8.31	±4.86
C/S <sub>2</sub> /H <sub>2</sub>	-12.63	±4.88
C <sub>t</sub> /S	-11.50	±8.06
C <sub>d</sub> /S/C <sub>d</sub>	21.05	±5.4
C <sub>d</sub> /S/C <sub>t</sub>	-7.42	±5.18
C/S <sub>4</sub>	6.21	±4.75
C <sub>d</sub> /S <sub>2</sub>	34.55	±6.68
C/S/H <sub>3</sub>	-6.64	±4.41
S/C <sub>d</sub> /H	-22.36	±4.28
S/C <sub>t</sub> /H	-4.38	±13.75
S/C <sub>t</sub> /C	24.58	±8.41
C <sub>d</sub> /S/C <sub>b</sub>	6.74	±7.27

C/C <sub>d</sub> /H <sub>3</sub>	5.53	±11.92
S/C <sub>t</sub> /C <sub>d</sub>	21.35	±12.7
C/S <sub>3</sub> /C <sub>d</sub>	-23.00	±8.31
C <sub>t</sub> /C <sub>t</sub>	10.95	±9.16

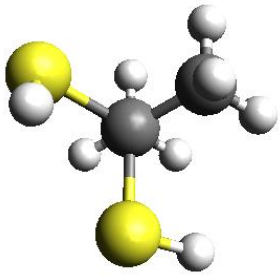
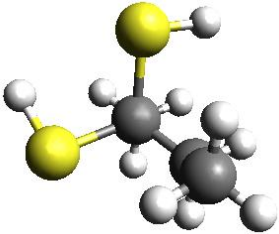
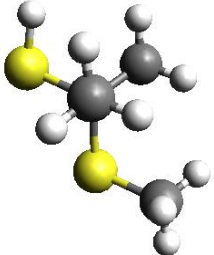
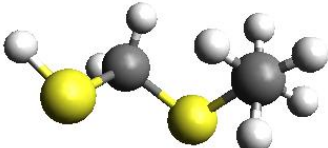
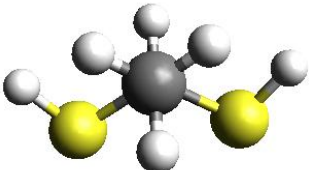
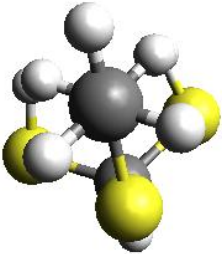
**Tabla 6.** Porcentaje de error en los cálculos.

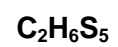
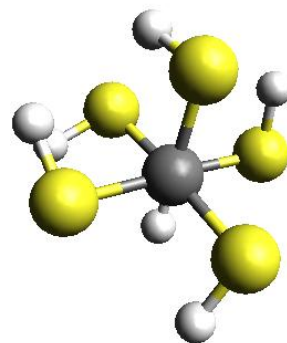
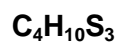
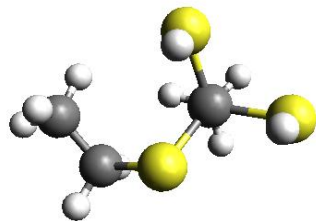
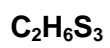
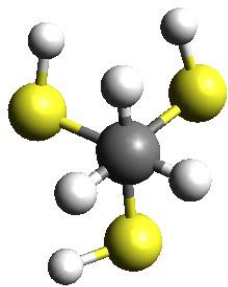
Molécula	Reacciones Isodesmicas	$\Delta E$ teórico [kcal/mol]	$\Delta E$ experimental [kcal/mol]	Error [%]
1	Reacción 1	-0.81	0.58	171,52
	Reacción 2	-0.31	0.58	285,11
	Reacción 3	-0.62	1.66	365,48
2	Reacción 1	1.75	-1.64	193,85
	Reacción 2	-2.51	-6.87	173,82
	Reacción 3	0.69	1.64	138,28
3	Reacción 1	-3.45	-2.32	32,73
	Reacción 2	-2.63	0.37	114,38
	Reacción 3	1.81	-2.32	227,73

Los errores en la estimación de los grupos de contribución calculados para los tioles pueden deberse a las interacciones entre átomos no enlazados [24]. Las diferentes conformaciones espaciales que adoptan los átomos como consecuencia de la rotación en torno a enlaces sencillos conducen a interacciones entre átomos distantes.

La conformación alternada fue la que más se presentó en la mayoría de las moléculas, esta conformación se caracteriza por presentar ángulos de  $60^\circ$  entre los átomos de cada carbono, la conformación alternada es la más estable de todas las conformaciones. También hubo presencia de un tipo de conformación especial, la conformación Gauche, en este tipo de conformación los grupos voluminosos (en este caso los grupo tiol) forman ángulos menores a  $90^\circ$ , además de eso los grupos voluminosos se encuentran en distintos planos. Además de conformaciones espaciales también se encontró en algunas moléculas presencia de puentes de hidrógeno, estos puentes de hidrógeno tienen enlaces débiles con el azufre a comparación con el oxígeno. Para los cálculos de la energía es fundamental tener en cuenta la presencia de los puentes de hidrógeno debido a que estos poseen valores de energía apreciables, con lo cual tergiversan el cálculo de los grupos de contribución de las moléculas correspondientes

**Tabla 7.** Conformaciones Espaciales.

Conformaciones Espaciales		
 <p><math>C_3H_8S_2</math></p>	 <p><math>C_4H_{10}S_2</math></p>	 <p><math>C_4H_{10}S_2</math></p>
 <p><math>C_3H_8S_2</math></p>	 <p><math>C_2H_6S_2</math></p>	 <p><math>C_3H_8S_3</math></p>



#### 4. CONCLUSIONES

- La metodología seguida en el presente trabajo, basada en las reacciones isodésmicas y en el cálculo de las energías al nivel B2PLYP/STO-3G conduce a la estimación de los valores para los grupos de contribución no reportados para las estructuras tipo tiol. Los valores obtenidos para estos grupos de contribución pueden ser utilizados en aplicaciones de tipo semicuantitativo debido al grado de incertidumbre alcanzado.
- Los errores reportados al hacer la comparación de las energías es considerable debido a que el método utilizado en la presente investigación no tiene en cuenta las interacciones entre átomos no enlazados y no diferencia cada conformación espacial que se puede presentar en cada molécula.

## 5. RECOMENDACIONES

- Los valores para los grupos de contribución obtenidos en el presente trabajo pueden ser recalculados considerando las diferentes interacciones entre átomos no enlazados. La inclusión de estas interacciones puede conducir a la estimación adecuada de los calores de formación para los compuestos tipo tiol. Por lo anterior, se recomienda que los futuros trabajos relacionados con la obtención de grupos de contribución consideren de forma explícita este tipo de interacciones.
- Considerar la energía de la geometría de las conformaciones espaciales de cada molécula, ya que cada una genera un aporte diferente y esto lleva a posibles errores considerables.

## 6. BIBLIOGRAFÍA

- [8] BENSON, S. W. The Foundations of Chemical Kinetics, McGraw-Hill, 1960. p. 20-26.
- [19] CANDIA B.; CAIOZZI G. Intervalos de Confianza. Universidad Católica de Chile. Santiago, Chile. 2005. Vol. 133. p. 1111-1115. < [http://www.scielo.cl/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0034-98872005000900017](http://www.scielo.cl/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0034-98872005000900017)>
- [16] CRAMER CH. J. Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. 2ª ed. Oxford Univ. Press; 1989.
- [14] [en línea] Disponible en <[http://www.agalano.com/Cursos/QC/P10\\_Semiempiricos.pdf](http://www.agalano.com/Cursos/QC/P10_Semiempiricos.pdf)>
- [10] FUERTES, P. Síntesis de nuevas sondas cromogénicas a partir de heterociclos de azufre y nitrógeno. 2009. Burgos, España.
- [3] GUTSCHE, C.; PASTO, D. Fundamentos de Química Orgánica. Segunda Edición. Barcelona. p. 441-443.
- [9] HEHRE, W. AB INITIO Molecular Orbital Theory. Universidad de Minnesota. 1986.
- [15] JENSEN F.; Introduction to Computational Chemistry. 2ª ed. England: Wiley; 2007.
- [12] LEVINE I. Química Cuántica. 5ta edición. Madrid: Pearson Prentice Hall; 2001
- [18] LIBRO WEB DE QUÍMICA DEL NIST. National Institute of Standards and Technology. Estados Unidos. [en línea]. < <http://webbook.nist.gov/chemistry/>> [Citado el 4 de septiembre de 2016].

- [24] MORALES MEDINA, Giovanni. MARTINEZ REY, Ramiro. Thermochemical Properties and contribution Groups for Ketene Dimers and Structures from Theoretical Calculations. *The Journal of Physical Chemistry*. 2009. 113(30). p. 8683-8703.
- [17] M. W. Schmidt., K. K. Baldrige., J. A. Boatz., S. T. Elbert., M. S. Gordon., J. H. Jensen., S. Koseki., N. Matsunaga., K. A. Nguyen., S. J. Su., T. L. Windus., M. Dupuis., J. A. Montgomery. General Atomic and Molecular Electronic Structure System [en línea]. <[http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS\\_Manual/intro.pdf](http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS_Manual/intro.pdf)> [citado en 8 de julio de 2016]
- [11] ORIO, M.; PANTAZIS, D.; NEESE, F. Density functional theory. *Photosynthesis Research*. 2009. Vol. 102. p. 443-453.
- [5] ROLAND, AURÉLIE. CAVELIER, FLORINE. SCHNEIDER, RÉMI. Los tioles varietales: información actualizada sobre las vías de la biogénesis y el impacto de técnicas vitivinícolas. *Revista de Enología científica y profesional*. 2012.
- [6] SALAZAAR-LUGO, RAQUEL. PÉREZ, ROYLDA. LEÓN, ALIDA. LEMUS, MAIRIN. ROJAS, LUISA. Determinación de tioles totales y tioles solubles en ácido en el pez *colossoma macropomum* (cuvier, 1818) expuesto a cadmio. *Revista científica Scielo*. 2009. Vol. 19, no. 4, p 414-420.
- [2] SANCHEZ M. JOSÉ M. Metodologías de modelado molecular en biocatálisis para la explicación racional de resultados. Universidad Complutense de Madrid. 2011. p. 80-85. <<http://www.sebiot.org/userfiles/files/MetodMMfinal.pdf>>.
- [13] STEWART J.J.; Optimization of parameters for semiempirical methods I, II Methods and Applications. *J. Comput. Chem* 1989; 10(2). p.209-221.
- [1] TAPIAS G. HEBERTO. Ingeniería Química: Escenario futuro y dos nuevos paradigmas. *Revista Ciencia y Tecnología*. 1998, Vol. 16. p. 25-36. <[http://jaibana.udea.edu.co/producciones/Heberto\\_t/ingenieria\\_quimica.html](http://jaibana.udea.edu.co/producciones/Heberto_t/ingenieria_quimica.html)>.

[4] WAUQUIER, JEAN-PIERRE. El Refino del Petróleo. Primera Edición. París. p. 320.

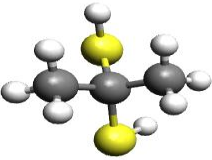
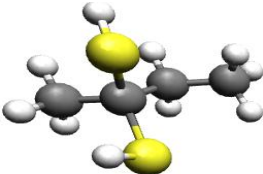
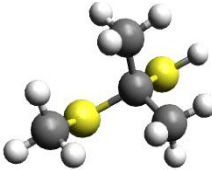
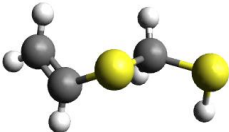
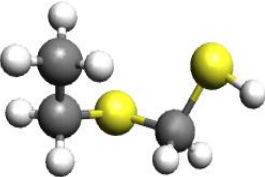
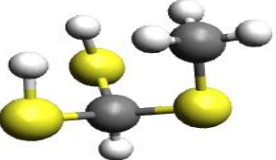
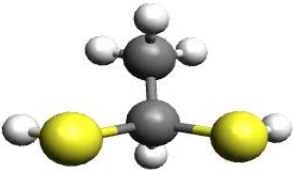
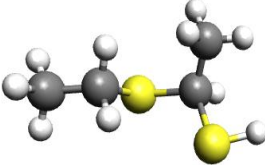
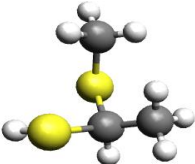
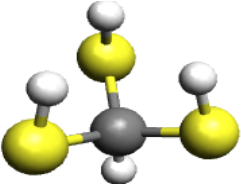
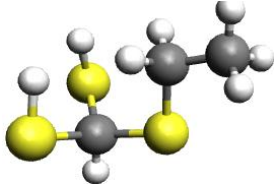
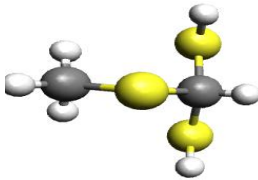
[7] WILLIS, CHRISTOPHER. Resolución de problemas de química general. Primera Edición. Barcelona. p. 110-111.

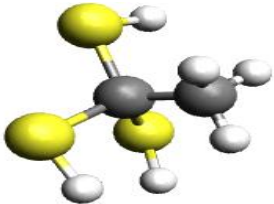
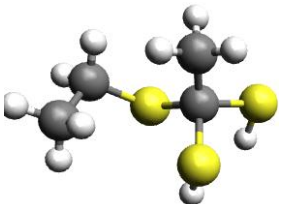
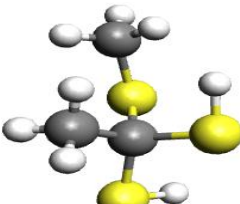
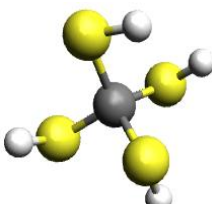
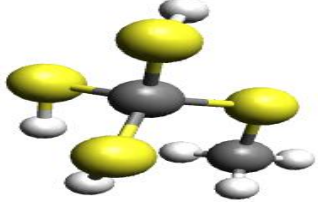
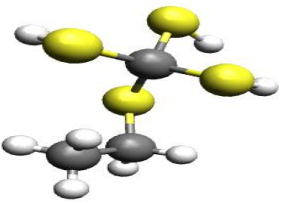
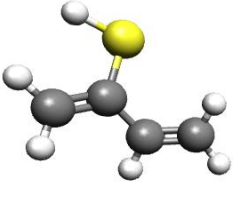
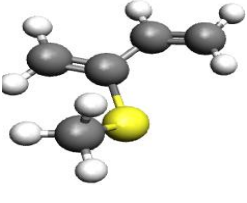
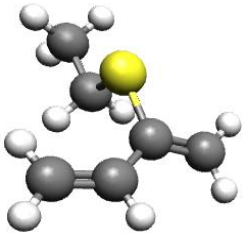
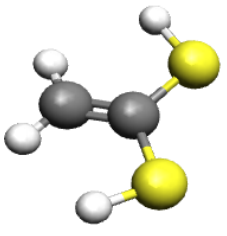
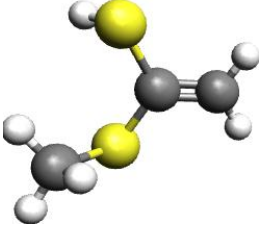
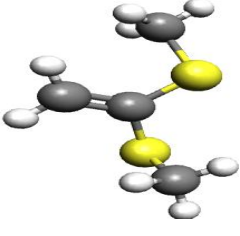
[24] MORALES MEDINA, Giovanni. MARTINEZ REY, Ramiro. Thermochemical Properties and contribution Groups for Ketene Dimers and Structures from Theoretical Calculations. The Journal of Physical Chemistry. 2009. 113(30). p. 8683-8703.

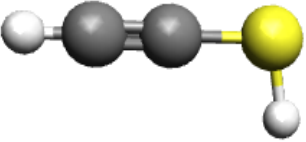
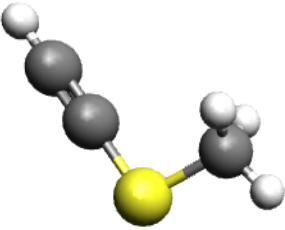
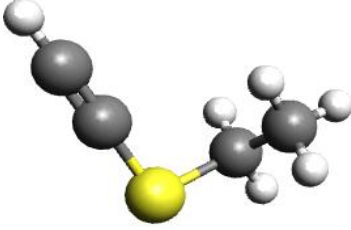
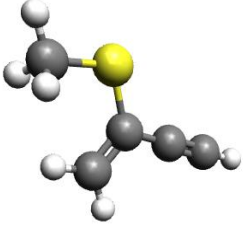
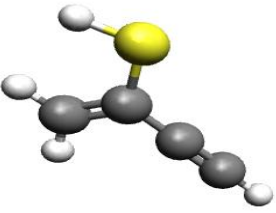
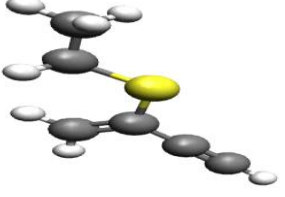
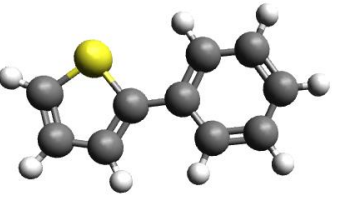
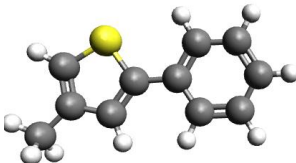
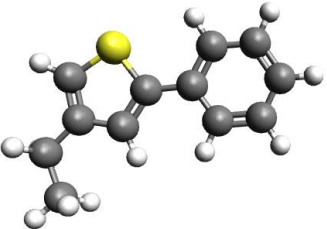
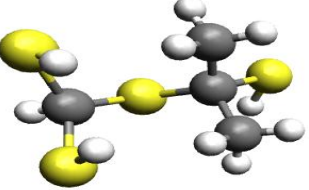
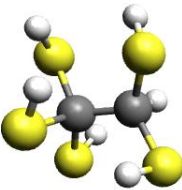
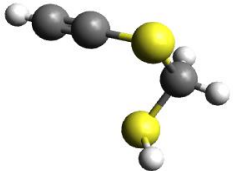
## ANEXOS

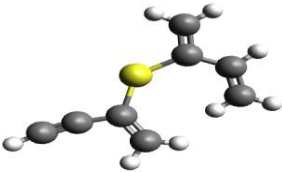
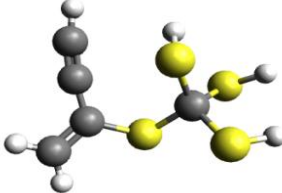
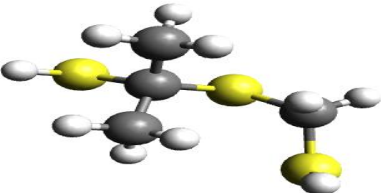
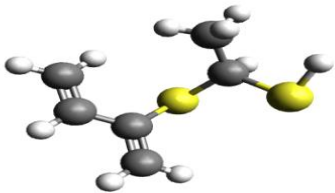
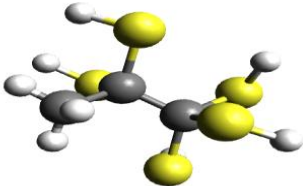
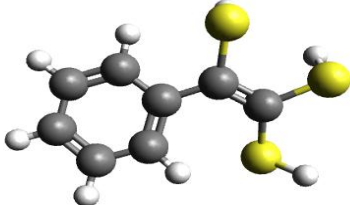
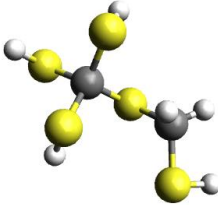
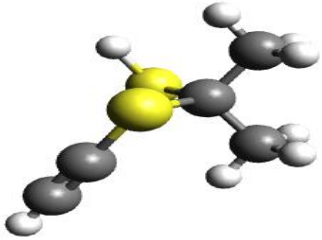
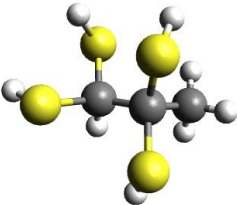
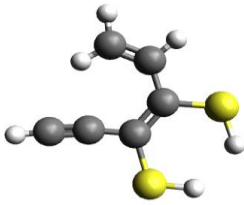
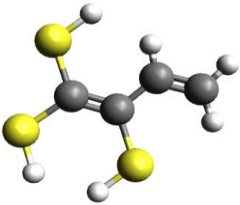
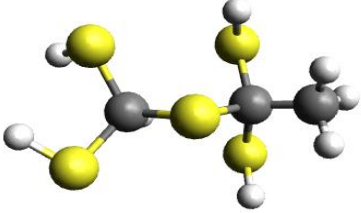
### ANEXO A. SET DE MOLÉCULAS Y GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DE BENSON.

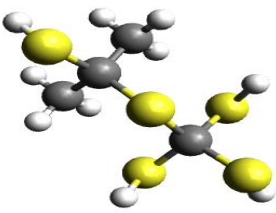
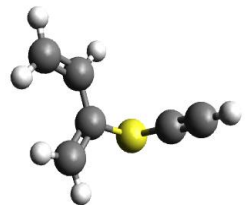
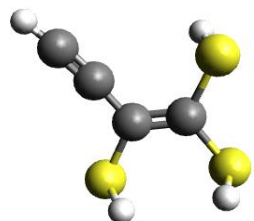
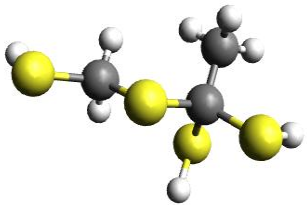
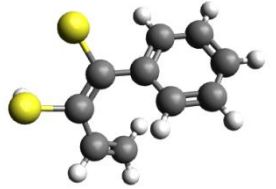
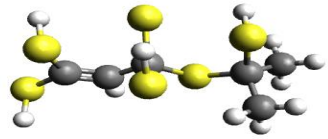
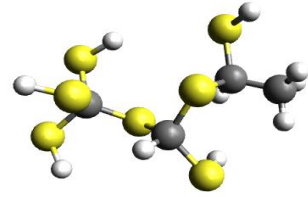
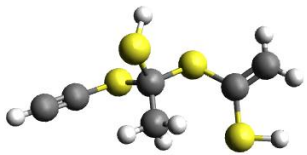
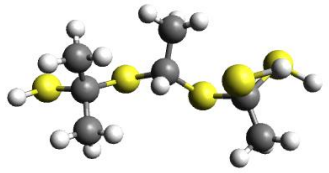
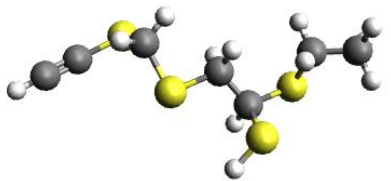
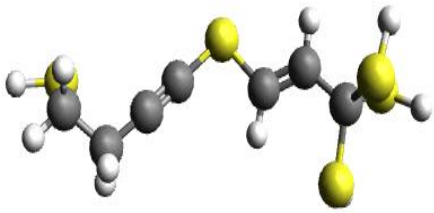
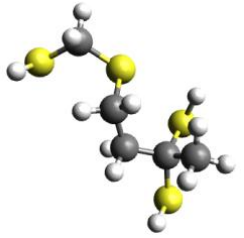
Tabla 8. Set de Moléculas.

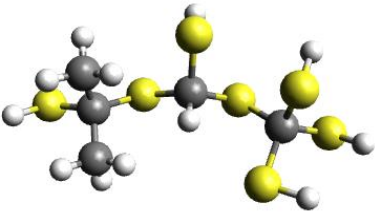
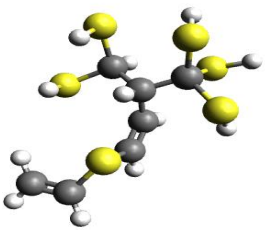
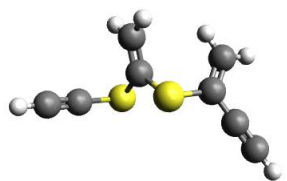
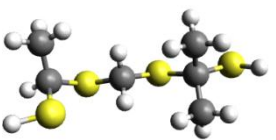
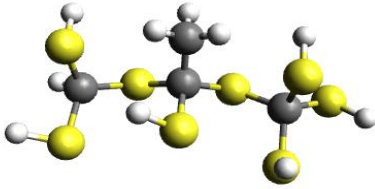
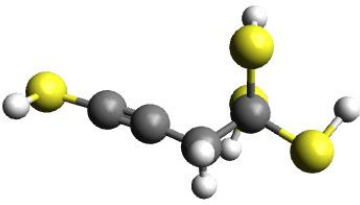
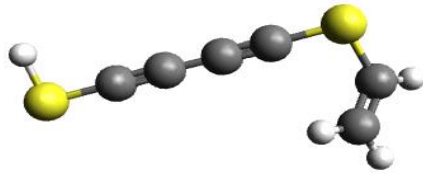
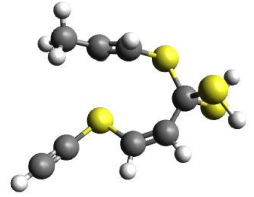
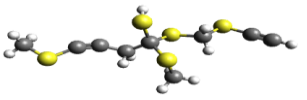
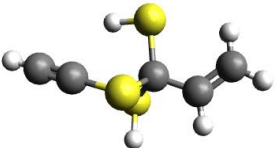
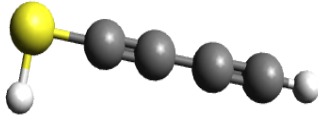
<p>Molécula 1</p>  <p>Propano-2,2-Ditiol</p> <p>2S/C/H, 2C/C/H3, C/S2/C2</p>	<p>Molécula 2</p>  <p>Butano-2,2-ditiol</p> <p>2C/C/H3, 2S/C/H, C/C2/H2, C/C2/S2</p>	<p>Molécula 3</p>  <p>2-(metilsulfanilo)propano-2-tiol</p> <p>C/S/H3, S/C2, 2C/C/H3, S/C/H, C/C2/S2</p>	<p>Molécula 4</p>  <p>(etenilsulfanil)metanotiol</p> <p>S/C/H, C/S2/H2, S/C/Cd, Cd/S/H, Cd/H2</p>
<p>Molécula 5</p>  <p>(etilsulfanilo)metanotiol</p> <p>C/C/H3, C/C/S/H2, S/C2, S/C/H, S/C2/H2</p>	<p>Molécula 6</p>  <p>1-(metilsulfanil)etanoditiol</p> <p>C/S/H3, S/C2, S/C/H, C/S/H, C/S2/H2</p>	<p>Molécula 7</p>  <p>etano-1,1-ditiol</p> <p>2S/C/H, C/C/H3, C/S2/C/H</p>	<p>Molécula 8</p>  <p>1-(etilosulfanilo)etanotiol</p> <p>C/C/H3, C/C/S/H2, S/C2, S/C/H, C/C/H3, C/S2/C/H</p>
<p>Molécula 9</p>  <p>1-(metilosulfanilo)etanotiol</p> <p>C/S/H3, S/C2, C/C/H3, S/C/H, C/S2/C/H</p>	<p>Molécula 10</p>  <p>Metanotritiol</p> <p>3S/C/H, C/S3/H</p>	<p>Molécula 11</p>  <p>(etilsulfanilo)metanoditiol</p> <p>C/C/H3, C/C/S/H2, S/C2, 2S/C/H, C/S3/H</p>	<p>Molécula 12</p>  <p>(metilsulfanilo)metanoditiol</p> <p>C/S/H3, 2S/C/H, S/C2, C/S3/H</p>

<p>Molécula 13</p>  <p>etano-1,1,1-tritíol</p> <p>3S/C/H, C/C/H3, C/S3/C</p>	<p>Molécula 14</p>  <p>1-(etilosulfanil)etano-1,1-ditíol</p> <p>C/C/H3, C/S/C/H2, S/C2, 2S/C/H, C/C/H3, C/S3/C</p>	<p>Molécula 15</p>  <p>1-(metilosulfanil)etano-1,1-ditíol</p> <p>C/S/H3, S/C2, 2S/C/H, C/C/H3, C/S3/C</p>	<p>Molécula 16</p>  <p>Metanotetrítol</p> <p>4S/C/H, C/S4</p>
<p>Molécula 17</p>  <p>(metilosulfanil)metanotritíol</p> <p>C/C/H3, C/C/S/H2, S/C2, 3S/C/H, C/S4</p>	<p>Molécula 18</p>  <p>(etilosulfanil)metanotritíol</p> <p>C/S/H3, S/C2, 3S/C/H, C/S4</p>	<p>Molécula 19</p>  <p>buta-1,2-dieno-2-tíol</p> <p>2Cd/H2, Cd/S/Cd, Cd/Cd/H, S/Cd/H</p>	<p>Molécula 20</p>  <p>2-(metilosulfanil)buta-1,3-dieno</p> <p>2Cd/H2, Cd/Cd/S, S/Cd/C, C/S/H3, Cd/H/Cd</p>
<p>Molécula 21</p>  <p>2-(etilosulfanil)buta-1,3-dieno</p> <p>2Cd/H2, Cd/S/Cd, S/Cd/C, C/S/C/H2, C/C/H3, Cd/Cd/H</p>	<p>Molécula 22</p>  <p>eteno-1,1-ditíol</p> <p>Cd/H2, Cd/S2, 2S/Cd/H</p>	<p>Molécula 23</p>  <p>1-(metilosulfanil)etanotíol</p> <p>S/H/Cd, Cd/S2, S/Cd/C, Cd/H2</p>	<p>Molécula 24</p>  <p>1,1-bis(metilosulfanil)eteno</p> <p>Cd/H2, Cd/S2, 2S/Cd/C, 2C/S/H3</p>

<p>Molécula 25</p>  <p>Etinotiol Ct/H, Ct/S, S/Ct/H</p>	<p>Molécula 26</p>  <p>(metilsulfanil)etino Ct/H, Ct/S, S/Ct/C, C/S/H3</p>	<p>Molécula 27</p>  <p>(etilsulfanil)etino Ct/H, Ct/S, S/Ct/C, C/S/C/H2, C/C/H3</p>	<p>Molécula 28</p>  <p>2-(metilsulfanil)but-1-en-3-ino Cd/H2, Cd/S/Ct, Ct/Cd, Ct/H, S/Cd/H</p>
<p>Molécula 29</p>  <p>but-1-en-3-ino-2-tiol Cd/H2, Cd/S/Ct, Ct/Cd, Ct/H, S/Cd/C, C/S/H3</p>	<p>Molécula 30</p>  <p>2-(etenilsulfanil)but-1-en-3-ino Cd/H2, Cd/Ct/S, Ct/Cd, Ct/H, S/Cd/C, C/S/C/H2, C/C/H3</p>	<p>Molécula 31</p>  <p>2-feniltetrahidrotiofeno S/Cd2, Cd/S/H, 2Cd/Cd/H, Cd/S/CB, RC</p>	<p>Molécula 32</p>  <p>4-metil-2-feniltetrahidrotiofeno S/Cd2, Cd/S/H, Cd/Cd/C, C/Cd/H3, Cd/Cd/H, Cd/S/CB, RC</p>
<p>Molécula 33</p>  <p>4-etil-2-feniltiofeno S/Cd2, Cd/S/H, Cd/Cd/C, C/C/H3, Cd/Cd/H, Cd/S/CB, RC, C/C2/H2</p>	<p>Molécula 34</p>  <p>[(2-sulfanilpropan-2-il)sulfanil]metanoditiol 3S/C/H, C/S3/H, S/C2, 2C/C/H3, C/C2/S2</p>	<p>Molécula 35</p>  <p>etano-1,1,1,2,2-pentatiol 5S/C/H, C/S3/C, C/S2/C/H</p>	<p>Molécula 36</p>  <p>(etinilsulfanil)metanotiol S/C/H, S/C2, C/S2/H2, Ct/H, Ct/S</p>

<p>Molécula 37</p>  <p>2-(but-1-eno-3-ilosulfanil)buta-1,3-dieno</p> <p>3Cd/H2, Cd/S/Cd, Cd/Cd/H, S/Cd2, Cd/S/Ct, Ct/Cd, Ct/H</p>	<p>Molécula 38</p>  <p>(but-1-eno-3-ilo-2-ilosulfanil)metanotritiol</p> <p>Cd/H2, Cd/S/Ct, Ct/Cd, Ct/H, S/Cd/C, C/S4</p>	<p>Molécula 39</p>  <p>2-[(sulfanilmetil)sulfanil]propano-2-tiol</p> <p>2S/C/H, 2C/C/H3, C/C2/S2, S/C2, C/S2/H2</p>	<p>Molécula 40</p>  <p>1-(buta-1,3-dieno-2-ilosulfanil)etanotiol</p> <p>2Cd/H2, Cd/Cd/S, S/C2, C/S/C/H2, C/C/H3</p>
<p>Molécula 41</p>  <p>propano-1,1,1,2,2-pentatiol</p> <p>5S/C/H, C/C/S3, C/C2/S2, C/C/H3</p>	<p>Molécula 42</p>  <p>2-feniloeteno-1,1,2-tritiol</p> <p>3S/C/H, Cd/S2, Cd/S/Cd</p>	<p>Molécula 43</p>  <p>[(sulfanilmetil)sulfanil]metanotritiol</p> <p>4S/C/H, C/S2/H2, S/C2, C/S4</p>	<p>Molécula 44</p>  <p>2-(etenilsulfanil)propano</p> <p>Ct/H, Ct/S, S/C2, C/S2/C2, S/C/H, 2C/C/H3</p>
<p>Molécula 45</p>  <p>propano-1,2,2-tritiol</p> <p>4S/C/H, C/C/S2/H, C/C2/S2, C/C/H3</p>	<p>Molécula 46</p>  <p>(3Z)-hexa-1,3-dieno-5-ine-3,4-ditiol</p> <p>2S/C/H, Cd/S/Cd, Cd/Cd/H, Cd/H2, Cd/S/Ct, Ct/Cd, Ct/H</p>	<p>Molécula 47</p>  <p>buta-1,3-dieno-1,1,2-tritiol</p> <p>3S/C/H, Cd/S2, Cd/Cd/S, Cd/Cd/H, Cd/H2</p>	<p>Molécula 48</p>  <p>1-[(disulfanilmetil)sulfanil]etano-1,1-ditiol</p> <p>4S/C/H, C/S3/H, S/C2, C/S3/C, C/C/H3</p>

<p>Molécula 49</p>  <p>[(2-sulfanylpropan-2-yl)sulfanyl]metanotritiol</p> <p>4S/C/H, 2C/C/H3, C/C2/S2, S/C2, C/S4</p>	<p>Molécula 50</p>  <p>2-(etenilsulfanil)buta-1,3-dieno</p> <p>Ct/H, Ct/S, S/C2, C/S2, Cd/C/S, 2Cd/H2, Cd/Cd/H</p>	<p>Molécula 51</p>  <p>but-1-eno-3-ino-1,1,2-tritio</p> <p>3S/C/H, Cd/S2, Cd/Cd/S, Cd/Cd/H, Cd/H2</p>	<p>Molécula 52</p>  <p>1-[(sulfanilmetil)sulfanil]etano-1,1-ditio</p> <p>3S/C/H, C/S2/H2, S/C2, C/S3/C, C/C/H3</p>
<p>Molécula 53</p>  <p>(1Z)-1-fenilbuta-1,3-dieno-1,2-ditio</p> <p>2S/C/H, Cd/Cd/S, Cd/Cd/H, Cd/H2, Cd/S/CB</p>	<p>Molécula 54</p>  <p>3-[(2-sulfanylpropan-2-ilo)sulfanil]prop-1-eno-1,1,3,3-tetratio</p> <p>3S/C/H, 2C/C/H3, C/S2/C2, S/C2, C/S3/Cd, Cd/C/H, Cd/S2, 2S/Cd/H</p>	<p>Molécula 55</p>  <p>((sulfanil[(1-sulfaniletil)sulfanil]metil)sulfanil)metanotritio</p> <p>C/C/H3, 5S/C/H, C/C/S2/H, 2S/C2, C/S2/H2, C/S4</p>	<p>Molécula 56</p>  <p>1-[[1-(etenilsulfanil)-1-sulfaniletil]sulfanil]etenotio</p> <p>Cd/H2, Cd/S2, 2S/C/H2, 2S/C2, C/S3/C, C/C/H3, Ct/S, Ct/H</p>
<p>Molécula 57</p>  <p>1-({1-[2-sulfanylpropan-2-ilo]etil}sulfanil)etano-1,1-ditio</p> <p>3S/C/H, C/S3/C, 4C/C/H3, 2S/C2, C/C/S2/H, C/C2/S2</p>	<p>Molécula 58</p>  <p>1-(etilsulfanil)-2-([etinilsulfanil]metil)sulfanil]etenotio</p> <p>Ct/H, Ct/S, S/Ct/C, C/S2/H2, 2S/C2, 2C/S/C/H2, C/S2/C2, S/C/H, C/C/H2</p>	<p>Molécula 59</p>  <p>3-[(4-sulfanilbut-1-in-il)sulfanil]prop-2-eno-1,1,1-tritio</p> <p>C/S3/H, Cd/C/H, Cd/S/H, Ct/S, Ct/C, C/C/Ct/H2, C/C/S/H, 4S/C/H</p>	<p>Molécula 60</p>  <p>4-[(sulfanilmetilo)sulfanil]butano-2,2-ditio</p> <p>C/C/H3, C/C2/S2, 3S/C/H, C/C2/H2, C/C/S/H2, S/C2, C/S2/H2</p>

<p>Molécula 61</p>  <p>((sulfanil[(2-sulfanilpropan-2-il)sulfanil]metilo)sulfanil)metanotritiol</p> <p>2C/C/H3, 5S/C/H, C/S2/C2, 2S/C2, C/S3/H, C/S4</p>	<p>Molécula 62</p>  <p>2-[2-(etenilsulfanil)etenil]propano-1,1,1,3,3-pentatiol</p> <p>C/S3/C, 5S/C/H, C/C3/H, C/S2/C/H, Cd/C/H, Cd/S/H, S/Cd2, Cd/S/H, Cd/H2</p>	<p>Molécula 63</p>  <p>2-[[1-(etinilsulfanil)etenilo]sulfanil]but-1-eno-3-ino</p> <p>2Ct/H, Ct/S, S/Ct/Cd, Cd/S2, Cd/S2, 2Cd/H2, S/Cd2, Cd/S/Ct, Ct/Cd</p>	<p>Molécula 64</p>  <p>2-(((1-sulfanilmetilo)sulfanil]metilo)sulfanil)propa no-2-tiol</p> <p>3C/C/H3, 2S/C/H, C/S2/C2, 2S/C2, C/S2/H2, C/S2/C/H</p>
<p>Molécula 65</p>  <p>((1-[disulfanilmetilo)sulfanil]-1-sulfaniletilo)sulfanil)metanotritiol</p> <p>6S/C/H, C/S3/H, 2S/C2, C/S3/C, C/S4</p>	<p>Molécula 66</p>  <p>but-3ino-1,1,1,4-tetratiol</p> <p>3S/C/H, C/S3/C, C/C/Ct/H2, Ct/C, Cd/S, S/Ct/H</p>	<p>Molécula 67</p>  <p>4-(etenilsulfanil)buta-1,3-diino-1-tiol</p> <p>Cd/H2, Cd/S/H, S/Cd/Ct, 2Ct/S, 2Ct/Ct, S/Ct/H</p>	<p>Molécula 68</p>  <p>3-(etenilsulfanil)-1-(metilsulfanil)prop-2-eno-1,1-ditiol</p> <p>3C/C/H3, Cd/C/H, Cd/C/H, Cd/S/H, S/C2, C/S3/C, 2S/C/H, Cd/C/H, Cd/S/H, S/Cd/Ct, Ct/S, Ct/H</p>
<p>Molécula 69</p>  <p>1-[[1-(etenilsulfanil)metil]sulfanil]-1,4-bis(metilsulfanil)but-3-ino-1-tiol</p> <p>2C/S/H3, S/C/Ct, 2Ct/S, Ct/C, C/Ct/C/H2, C/S3/C, 2S/C2, S/C/H, C/S2/Ct, Ct/H</p>	<p>Molécula 70</p>  <p>1-(etinilsulfanil)prop-2-eno-1,1-ditiol</p> <p>Ct/H, Ct/S, S/Ct/C, C/S3/Cd, Cd/C/H, Cd/H2</p>	<p>Molécula 71</p>  <p>buta-1,3diino-1-tiol</p> <p>SCt/H, Ct/S, 2Ct/Ct, Ct/H</p>	

## ANEXO B. MATRIZ GRUPOS CONOCIDOS

### Tabla 9. MATRIZ GRUPOS CONOCIDOS

MOLÉCULA	MATRIZ CONOCIDAD VALORES																		
	4.62	11.51	-10.2	26.93	6.3	6.78	-4.54	29.2	9.97	10.93	-4.95	-5.65	8.56	1.73	8.88	8.59	9.97	-4.73	27.55
	S/C/H	S/C2	C/C/H3	Ct/H	Cd/H2	Cd/Cd/H	S/Cd2	Ct/Cd	S/Cd/C	Cd/C/S	C/C2/H2	C/C/S/H2	Cd/S/H	RC	Cd/Cd/C	Cd/C/H	S/C/Cd	C/C/Ct/H2	Ct/C
1	9.24	0	-20.4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	9.24	0	-20.4	0	0	0	0	0	0	0	-4.95	0	0	0	0	0	0	0	0
3	4.62	11.51	-20.4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	9.24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	9.97	0	0
5	4.62	11.51	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	-5.65	0	0	0	0	0	0	0
6	4.62	11.51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	9.24	0	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	4.62	11.51	-20.4	0	0	0	0	0	0	0	0	-5.65	0	0	0	0	0	0	0
9	4.62	11.51	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	13.86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	9.24	11.51	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	-5.65	0	0	0	0	0	0	0
12	9.24	11.51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	13.86	0	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14	9.24	11.51	-20.4	0	0	0	0	0	0	0	0	-5.65	0	0	0	0	0	0	0
15	9.24	11.51	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	18.48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	13.86	11.51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	13.86	11.51	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	-5.65	0	0	0	0	0	0	0
19	0	0	0	0	12.6	6.78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20	0	0	0	0	12.6	6.78	0	0	9.97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21	0	0	-10.2	0	12.6	6.78	0	0	9.97	0	0	-5.65	0	0	0	0	0	0	0
22	0	0	0	0	6.3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
23	0	0	0	0	6.3	0	0	0	9.97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24	0	0	0	0	6.3	0	0	0	9.97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
25	0	0	0	26.93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
26	0	0	0	26.93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27	0	0	-10.2	26.93	0	0	0	0	0	0	0	-5.65	0	0	0	0	0	0	0

28	0	0	0	26.93	6.3	0	0	29.2	9.97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
29	0	0	0	26.93	6.3	0	0	29.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30	0	0	-10.2	26.93	6.3	0	0	29.2	9.97	0	0	-5.65	0	0	0	0	0	0	0
31	0	0	0	0	0	13.56	-4.54	0	0	0	0	0	8.56	1.73	0	0	0	0	0
32	0	0	0	0	0	6.78	-4.54	0	0	0	0	0	8.56	1.73	8.88	0	0	0	0
33	0	0	0	0	0	0	-4.54	0	0	0	0	0	8.56	1.73	17.76	0	0	0	0
34	13.86	11.51	-20.4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
35	23.1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
36	4.62	11.51	0	26.93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
37	0	0	0	26.93	18.9	6.78	-4.54	29.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
38	0	0	0	26.93	6.3	0	0	29.2	9.97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
39	9.24	23.02	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
40	0	11.51	-10.2	0	12.6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
41	23.1	0	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
42	13.86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
43	18.48	11.51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
44	4.62	11.51	-20.4	26.93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
45	18.48	0	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
46	9.24	0	0	26.93	6.3	6.78	0	29.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
47	13.86	0	0	0	6.3	6.78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
48	18.48	11.51	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
49	18.48	11.51	-20.4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
50	0	11.51	0	26.93	12.6	6.78	0	0	0	10.93	0	0	0	0	0	0	0	0	0
51	13.86	0	0	26.93	0	0	0	29.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
52	13.86	11.51	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
53	9.24	0	0	0	6.3	6.78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
54	18.48	0	-30.6	0	0	0	-9.08	0	0	0	0	-5.65	0	0	0	8.59	0	0	0
55	23.1	23.02	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
56	9.24	23.02	-10.2	26.93	6.3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
57	13.86	23.02	-40.8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
58	4.62	23.02	-10.2	26.93	0	0	0	0	0	0	0	-11.3	0	0	0	0	0	0	0
59	9.24	46.04	-10.2	26.93	0	0	0	29.2	0	0	0	-5.65	0	0	0	8.59	0	0	0
60	13.86	11.51	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	-4.95	-5.65	0	0	0	0	0	0	0

61	23.1	23.02	-20.4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
62	9.24	11.51	-20.4	0	12.6	6.78	0	0	9.97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
63	0	0	0	53.86	12.6	0	-4.54	29.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
64	9.24	23.02	-30.6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
65	27.72	23.02	-10.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
66	13.86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-4.73	27.55
67	0	0	0	0	6.3	0	0	0	0	0	0	0	8.56	0	0	0	0	0	0
68	9.24	11.51	-10.2	26.93	0	0	0	0	0	0	0	0	17.12	0	0	17.18	0	0	0
69	4.62	23.02	0	26.93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-4.73	27.55
70	4.62	0	-10.2	26.93	6.3	0	0	0	0	0	0	0	8.56	0	0	17.18	9.97	0	0
71	0	0	0	26.93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

## ANEXO C. REACCIONES ISODESMICAS Y ENERGÍA

**Tabla 10.** Reacciones Isodésmicas y Energía

La energía calculada para cada molécula esta en Hartree y el delta final de energía de cada reacción esta en kcal/mol

MOLÉCULA 1							
REACCIÓN 1							
$C_3H_8S_2$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_4H_{10}S_2$	+	$CH_4$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -904.6783		E= -78.6841		E= -943.4349		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-39.9288)+(-943.4349)] - [(-904.6783)+(-78.6841)] = -0.0013 * 627.51 = -0.8157$							
REACCIÓN 2							
$C_3H_8S_2$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_5H_{12}S_2$	+	$CH_4$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -904.6783		E= -117.4407		E= -982.1907		E= -39.9288	
$\Delta E_2 = [(-39.9288)+(-982.1907)] - [(-904.6783)+(-117.4407)] = -0.0005 * 627.51 = -0.3137$							
REACCIÓN 3							
$C_5H_{12}S_2$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_3H_8S_2$	+	$C_3H_8$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -982.1907		E= -78.6841		E= -904.6783		E= -117.4407	
$\Delta E_3 = [(-904.6783)+(-117.4407)] - [(-78.6841)+(-982.1907)] = -0.0010 * 627.51 = -0.6275$							

MOLÉCULA 2							
REACCIÓN 1							
$C_4H_{10}S_2$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_5H_{12}S_2$	+	$CH_4$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -943.4343		E= -78.6841		E= -982.1868		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-39.9288)+(-982.1868)] - [(-943.4343)+(-78.6841)] = 0.0028 * 627.51 = 1.7570$							
REACCIÓN 2							
$CH_4S_2$	+	$C_4H_{10}$	$\longrightarrow$	$C_4H_{10}S_2$	+	$CH_4$	

ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -827.1617		E= -156.1974		E= -943.4343		E= -39.9288	
$\Delta E_2 = [(-943.4343)+(-39.9288)] - [(-156.1974)+(-827.1617)] = -0.0040 * 627.51 = -2.5100$							
REACCIÓN 3							
<chem>C5H12S2</chem>	+	<chem>CH4</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C4H10S2</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -982.1907		E= -39.9288		E= -943.4343		E= -78.6841	
$\Delta E_3 = [(-943.4343)+(-78.6841)] - [(-39.9288)+(-982.1907)] = 0.0011 * 627.51 = 0.6902$							

MOLECULA 3							
REACCIÓN 1							
<chem>C4H10S2</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C5H12S2</chem>	+	<chem>CH4</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -943.4385		E= -78.6841		E= -982.1993		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-982.1993)+(-39.9288)] - [(-943.4385)+(-78.6841)] = -0.0055 * 627.51 = -3.4513$							
REACCIÓN 2							
<chem>C4H10S2</chem>	+	<chem>C3H8</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C5H12S2</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -943.4385		E= -117.4407		E= -982.1971		E= -78.6841	
$\Delta E_2 = [(-982.1971)+(-78.6841)] - [(-943.4385)+(-117.4407)] = -0.0042 * 627.51 = -2.6355$							
REACCIÓN 3							
<chem>C4H10S2</chem>	+	<chem>C3H8</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C6H14S2</chem>	+	<chem>CH4</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -943.4385		E= -117.4407		E= -1020.9475		E= -39.9288	
$\Delta E_3 = [(-1020.9475)+(-39.9288)] - [(-943.4385)+(-117.4407)] = 0.0029 * 627.51 = 1.8197$							

MOLECULA 4							
REACCIÓN 1							
<chem>CH4S2</chem>	+	<chem>C3H8</chem>	$\longrightarrow$	<chem>CH4</chem>	+	<chem>C3H8S2</chem>	

ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR					
E= -827.1617		E= -117.4407		E= -39.9288	E= -904.6813
$\Delta E_1 = [(-39.9288)+(-904.6813)] - [(-827.1617)+(-117.4407)] = -0.0077 * 627.51 = -4.8318$					
REACCIÓN 2					
CH <sub>4</sub> S		→	CH <sub>4</sub> S <sub>2</sub>	+	CH <sub>4</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR					
E= -433.5472			E= -827.1617		E= -39.9288
$\Delta E_2 = [(-827.1617)+(-39.9288)] - [2*(-433.5472)] = 0.0039 * 627.51 = 2.4473$					
REACCIÓN 3					
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> S	+	CH <sub>4</sub> S	→	CH <sub>4</sub> S <sub>2</sub>	+ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR					
E= -472.3044		E= -433.5472		E= -827.1617	E= -78.6841
$\Delta E_3 = [(-827.1617)+(-78.6841)] - [(-472.3044)+(-433.5472)] = 0.0058 * 627.51 = 3.6395$					

MOLECULA 5					
REACCIÓN 1					
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> S <sub>2</sub>	+	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> S <sub>2</sub>	+ CH <sub>4</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR					
E= -865.9299		E= -78.6841		E= -904.6825	E= -39.9288
$\Delta E_1 = [(-904.6825)+(-39.9288)] - [(-865.9299)+(-78.6841)] = 0.0027 * 627.51 = 1.6943$					
REACCIÓN 2					
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> S <sub>2</sub>	+	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	→	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> S <sub>2</sub>	+ C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR					
E= -943.4389		E= -117.4407		E= -904.6825	E= -156.1974
$\Delta E_2 = [(-904.6825)+(-156.1974)] - [(-943.4389)+(-117.4407)] = -0.0003 * 627.51 = -0.1882$					
REACCIÓN 3					
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> S <sub>2</sub>	+	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	→	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> S <sub>2</sub>	+ CH <sub>4</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR					
E= -904.6825		E= -117.4407		E= -982.1979	E= -39.9288

$$\Delta E_3 = [(-982.1979)+(-39.9288)] - [(-904.6825)+(-117.4407)] = -0.0035 * 627.51 = -2.1963$$

MOLECULA 6							
REACCIÓN 1							
$C_2H_6S_3$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_3H_8S_3$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E=-1259.5389		E= -117.4407		E= -1298.2958		E= -78.6841	
$\Delta E_1 = [(-1298.2958)+(-78.6841)] - [(-1259.5389)+(-117.4407)] = -0.0003 * 627.51 = -0.1882$							
REACCIÓN 2							
$C_2H_6S_3$	+	$C_4H_{10}$	$\longrightarrow$	$C_3H_8S_3$	+	$C_3H_8$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1259.5389		E= -156.1974		E=-1298.2959		E=-117.4407	
$\Delta E_2 = [(-1298.2959)+(-117.4407)] - [(-1259.5389)+(-156.1974)] = -0.0003 * 627.51 = -0.1882$							
REACCIÓN 3							
$C_3H_8S_3$	+	$CH_4$	$\longrightarrow$	$C_2H_6S_3$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1298.3096		E=-39.9288		E= -1259.5389		E= -78.6841	
$\Delta E_3 = [(-1259.5389)+(-78.6841)] - [(-1298.3096)+(-39.9288)] = 0.0154 * 627.51 = 9.6636$							

MOLECULA 7							
REACCIÓN 1							
$C_2H_6S_2$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$CH_4S_2$	+	$C_3H_8$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -865.9179		E=-78.6841		E= -827.1617		E=-117.4407	
$\Delta E_1 = [(-117.4407)+(-827.1617)] - [(-865.9179)+(-78.6841)] = -0.0004 * 627.51 = -0.2510$							
REACCIÓN 2							
$C_2H_6$	+	$C_3H_8S_2$	$\longrightarrow$	$C_2H_6S_2$	+	$C_3H_8$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -78.6841		E= -904.6813		E= -865.9179		E=-117.4407	

$\Delta E_2 = [(-865.9179)+(-117.4407)] - [(-78.6841)+(-904.6813)] = -0.0068 * 627.51 = -4.2671$				
REACCIÓN 3				
CH <sub>4</sub> S	+	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> S	→	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> S <sub>2</sub> + C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR				
E= -433.5472		E= -588.5750		E= -865.9179      E= -156.1974
$\Delta E_3 = [(-865.9179)+(-156.1974)] - [(-433.5472)+(-588.5750)] = 0.0069 * 627.51 = 4.3298$				

<b>MOLÉCULA 8</b>				
REACCIÓN 1				
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> S <sub>2</sub>	+	CH <sub>4</sub>	→	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> S <sub>2</sub> + C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR				
E= -943.4414		E= -39.9288		E= -904.6844      E= -78.6841
$\Delta E_1 = [(-904.6844)+(-78.6841)] - [(-943.4414)+(-39.9288)] = 0.0017 * 627.51 = 1.0667$				
REACCIÓN 2				
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> S <sub>2</sub>	+	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> S <sub>2</sub> + C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR				
E= -943.4414		E= -78.6841		E= -904.6839      E= -117.4407
$\Delta E_2 = [(-904.6839)+(-117.4407)] - [(-943.4414)+(-78.6841)] = 0.0009 * 627.51 = 0.5647$				
REACCIÓN 3				
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> S	+	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> S	→	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> S <sub>2</sub> + C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR				
E= -511.0676		E= -588.5750		E= -943.4414      E= -156.1974
$\Delta E_3 = [(-943.4414)+(-156.1974)] - [(-511.0676)+(-588.5750)] = 0.0036 * 627.51 = 2.2590$				

<b>MOLÉCULA 9</b>				
REACCIÓN 1				
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> S <sub>2</sub>	+	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> S <sub>2</sub> + CH <sub>4</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR				
E= -904.6872		E= -78.6841		E= -943.4408      E= -39.9288

$\Delta E_1 = [(-943.4408)+(-39.9288)] - [(-904.6872)+(-78.6841)] = 0.0017 * 627.51 = 1.0667$							
REACCIÓN 2							
$C_3H_8S_2$	+	$CH_4$	$\longrightarrow$	$C_2H_6S_2$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -904.6872		E= -39.9288		E= -865.9272		E= -78.6841	
$\Delta E_2 = [(-78.6841)+(-865.9272)] - [(-904.6872)+(-39.9288)] = 0.0047 * 627.51 = 2.9493$							
REACCIÓN 3							
$C_3H_8S_2$	+	$CH_4$	$\longrightarrow$	$C_2H_6S_2$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -904.6872		E= -39.9288		E= -865.9196		E= -78.6841	
$\Delta E_3 = [(-865.9196)+(-78.6841)] - [(-904.6872)+(-39.9288)] = 0.0123 * 627.51 = 7.7183$							

<b>MOLÉCULA 10</b>							
REACCIÓN 1							
$CH_4S_3$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_3H_8S_3$	+	$CH_4$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1220.7717		E= -117.4407		E= -1298.2909		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-1298.2909)+(-39.9288)] - [(-1220.7717)+(-117.4407)] = -0.0073 * 627.51 = -4.5808$							
REACCIÓN 2							
$CH_4S_3$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_3H_8S$	+	$CH_4S_2$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1220.7717		E= -117.4407		E= -511.0619		E= -827.1617	
$\Delta E_2 = [(-511.0619)+(-827.1617)] - [(-1220.7717)+(-117.4407)] = -0.0112 * 627.51 = -7.0281$							
REACCIÓN 3							
$C_4H_{10}S$	+	$C_3H_8S_2$	$\longrightarrow$	$CH_4S_3$	+	$C_6H_{14}$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -549.8194		E= -904.6813		E= -1220.7717		E= -233.7107	
$\Delta E_3 = [(-1220.7717)+(-233.7107)] - [(-549.8194)+(-904.6813)] = 0.0183 * 627.51 = 11.4834$							

MOLECULA 11						
REACCIÓN 1						
$C_3H_8S_3$	+	$CH_4$	$\longrightarrow$	$C_2H_6S_3$	+	$C_2H_6$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -1298.2958		E= -39.9288		E= -1259.5389		E= -78.6841
$\Delta E_1 = [(-1259.5389)+(-78.6841)] - [(-1298.2958)+(-39.9288)] = 0.0016 * 627.51 = 1.0040$						
REACCIÓN 2						
$C_3H_8S_3$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_2H_6S_2$	+	$C_3H_8S$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -1298.2958		E= -78.6841		E= -865.9299		E= -511.0615
$\Delta E_2 = [(-865.9299)+(-511.0615)] - [(-1298.2958)+(-78.6841)] = -0.0115 * 627.51 = -7.2163$						
REACCIÓN 3						
$C_5H_{12}S$	+	$CH_4S_2$	$\longrightarrow$	$C_3H_8S_3$	+	$C_3H_8$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -588.5811		E= -827.1617		E= -1298.2958		E= -117.4407
$\Delta E_3 = [(-1298.2958)+(-117.4407)] - [(-588.5811)+(-827.1617)] = 0.0063 * 627.51 = 3.9533$						

MOLECULA 12						
REACCIÓN 1						
$C_2H_6S_3$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_4H_{10}S_3$	+	$CH_4$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -1259.5432		E= -117.4407		E= -1337.0528		E= -39.9288
$\Delta E_1 = [(-1337.0528)+(-39.9288)] - [(-1259.5432)+(-117.4407)] = 0.0023 * 627.51 = 1.4432$						
REACCIÓN 2						
$C_2H_6S_3$	+	$C_4H_{10}$	$\longrightarrow$	$C_5H_{12}S_3$	+	$CH_4$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -1259.5432		E= -156.1974		E= -1375.8108		E= -39.9288
$\Delta E_2 = [(-1375.8108)+(-39.9288)] - [(-1259.5432)+(-156.1974)] = 0.001 * 627.51 = 0.6275$						
REACCIÓN 3						
$C_5H_{12}S_3$	+	$C_4H_{10}$	$\longrightarrow$	$C_2H_6S_3$	+	$C_7H_{16}$

ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1375.8108		E= -156.1974		E= -1259.5432		E= -272.4674	
$\Delta E_3 = [(-1259.5432)+(-272.4674)] - [(-1375.8108)+(-156.1974)] = -0.0024 * 627.51 = -1.5060$							

MOLECULA 13							
REACCIÓN 1							
<chem>C2H6S3</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C3H8S3</chem>	+	<chem>CH4</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1259.5297		E= -78.6841		E= -1298.2909		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-1298.2909)+(-39.9288)] - [(-1259.5297)+(-78.6841)] = -0.0059 * 627.51 = -3.7023$							
REACCIÓN 2							
<chem>C4H10S3</chem>	+	<chem>C3H8</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C2H6S3</chem>	+	<chem>C5H12</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1337.0443		E= -117.4407		E= -1259.5297		E= -194.9541	
$\Delta E_2 = [(-1259.5297)+(-194.9541)] - [(-1337.0443)+(-117.4407)] = 0.0012 * 627.51 = 0.7530$							
REACCIÓN 3							
<chem>C2H6S4</chem>	+	<chem>CH4</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C2H6S3</chem>	+	<chem>CH4S</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1653.1516		E= -39.9288		E= -1259.5297		E= -433.5472	
$\Delta E_3 = [(-1259.5297)+(-433.5472)] - [(-1653.1516)+(-39.9288)] = 0.0035 * 627.51 = 2.1963$							

MOLECULA 14							
REACCIÓN 1							
<chem>C4H10S3</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C5H12S3</chem>	+	<chem>CH4</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1337.0528		E= -78.6841		E= -1375.8083		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-1375.8083)+(-39.9288)] - [(-1337.0528)+(-78.6841)] = -0.0002 * 627.51 = -0.1255$							
REACCIÓN 2							
<chem>C4H10S3</chem>	+	<chem>C3H8</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C6H14S3</chem>	+	<chem>CH4</chem>	

ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1337.0528		E= -117.4407		E= -1414.5653		E= -39.9288	
$\Delta E_2 = [(-1414.5653)+(-39.9288)] - [(-1337.0528)+(-117.4407)] = -0.006 * 627.51 = -0.3765$							
REACCIÓN 3							
<chem>C2H6S2</chem>	+	<chem>C5H12S</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C4H10S3</chem>	+	<chem>C3H8</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -865.9299		E= -588.5750		E= -1337.0528		E= -117.4407	
$\Delta E_3 = [(-1337.0528)+(-117.4407)] - [(-865.9299)+(-588.5750)] = 0.0114 * 627.51 = 7.1536$							

MOLÉCULA 15							
REACCIÓN 1							
<chem>C3H8S3</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C4H10S3</chem>	+	<chem>CH4</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1298.2974		E= -78.6841		E= -1337.0532		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-1337.0532)+(-39.9288)] - [(-1298.2974)+(-78.6841)] = -0.0005 * 627.51 = -0.3137$							
REACCIÓN 2							
<chem>C4H10S2</chem>	+	<chem>CH4S</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C3H8S3</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -943.4450		E= -433.5472		E= -1298.2974		E= -78.6841	
$\Delta E_2 = [(-1298.2974)+(-78.6841)] - [(-943.4450)+(-433.5472)] = 0.0107 * 627.51 = 6.7143$							
REACCIÓN 3							
<chem>C3H8S</chem>	+	<chem>C2H6S2</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C3H8S3</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -511.0676		E= -865.9299		E= -1298.2974		E= -78.6841	
$\Delta E_3 = [(-1298.2974)+(-78.6841)] - [(-511.0676)+(-865.9299)] = 0.0160 * 627.51 = 10.0401$							

MOLÉCULA 16							
REACCIÓN 1							
<chem>CH4S4</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C2H6S3</chem>	+	<chem>CH4S</chem>	

ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1614.3856		E= -78.6841		E= -1259.5295		E= -433.5472	
$\Delta E_1 = [(-1259.5295)+(-433.5472)] - [(-1614.3856)+(-78.6841)] = -0.0070 * 627.51 = -4.3926$							
REACCIÓN 2							
<chem>C3H8S3</chem>	+	<chem>C2H6S</chem>	$\longrightarrow$	<chem>CH4S4</chem>	+	<chem>C4H10</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1298.2860		E= -472.3044		E= -1614.3856		E= -156.1974	
$\Delta E_2 = [(-1614.3856)+(-156.1974)] - [(-1298.2860)+(-472.3044)] = 0.0074 * 627.51 = 4.6435$							
REACCIÓN 3							
<chem>C5H12S2</chem>	+	<chem>C3H8S2</chem>	$\longrightarrow$	<chem>CH4S4</chem>	+	<chem>C7H16</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -982.1868		E= -904.6813		E= -1614.3856		E= -272.4674	
$\Delta E_3 = [(-1614.3856)+(-272.4674)] - [(-982.1868)+(-904.6813)] = 0.0151 * 627.51 = 9.4754$							

MOLECULA 17							
REACCIÓN 1							
<chem>C2H6S4</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C3H8S4</chem>	+	<chem>CH4</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1653.1472		E= -78.6841		E= -1691.9074		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-1691.9074)+(-39.9288)] - [(-1653.1472)+(-78.6841)] = -0.0049 * 627.51 = -3.0748$							
REACCIÓN 2							
<chem>C2H6S4</chem>	+	<chem>C3H8</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C3H8S4</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1653.1472		E= -117.4407		E= -1691.9074		E= -78.6841	
$\Delta E_2 = [(-1691.9074)+(-78.6841)] - [(-1653.1472)+(-117.4407)] = -0.0036 * 627.51 = -2.2590$							
REACCIÓN 3							
<chem>C4H10S4</chem>	+	<chem>CH4</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C2H6S4</chem>	+	<chem>C3H8</chem>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1730.6648		E= -39.9288		E= -1653.1472		E= -117.4407	

$$\Delta E_3 = [(-1653.1472)+(-117.4407)] - [(-1730.6648)+(-39.9288)] = 0.0057 * 627.51 = 3.5768$$

MOLECULA 18							
REACCIÓN 1							
$C_3H_8S_4$	+	$CH_4$	$\longrightarrow$	$C_2H_6S_4$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1691.9074		E= -39.9288		E= -1653.1542		E= -78.6841	
$\Delta E_1 = [(-1653.1542)+(-78.6841)] - [(-1691.9074)+(-39.9288)] = -0.0021 * 627.51 = -1.3177$							
REACCIÓN 2							
$C_4H_{10}S_4$	+	$CH_4$	$\longrightarrow$	$C_3H_8S_4$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1730.6648		E= -39.9288		E= -1691.9074		E= -78.6841	
$\Delta E_2 = [(-1691.9074)+(-78.6841)] - [(-1730.6648)+(-39.9288)] = 0.0021 * 627.51 = 1.3177$							
REACCIÓN 3							
$C_2H_6S_4$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_3H_8S_4$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1653.1542		E= -117.4407		E= -1691.9074		E= -78.6841	
$\Delta E_3 = [(-1691.9074)+(-78.6841)] - [(-1653.1542)+(-117.4407)] = 0.0034 * 627.51 = 2.1335$							

MOLECULA 19							
REACCIÓN 1							
$C_4H_6S$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_5H_8S$	+	$CH_4$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -547.3314		E= -78.6841		E= -586.0871		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-586.0871)+(-39.9288)] - [(-547.3314)+(-78.6841)] = -0.0004 * 627.51 = -0.2510$							
REACCIÓN 2							
$C_4H_6S$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_5H_8S$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -547.3314		E= -117.4407		E= -586.0369		E= -78.6841	

$\Delta E_2 = [(-586.0369)+(-78.6841)] - [(-547.3314)+(-117.4407)] = 0.0511 * 627.51 = 32.0657$						
REACCIÓN 3						
$C_6H_{10}S$	+	$C_4H_{10}$	$\longrightarrow$	$C_4H_6S$	+	$C_6H_{14}$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -624.8455		E= -156.1974		E= -547.3314		E= -233.7107
$\Delta E_3 = [(-547.3314)+(-233.7107)] - [(-624.8455)+(-156.1974)] = 0.0008 * 627.51 = 0.5020$						

MOLÉCULA 20						
REACCIÓN 1						
$C_6H_{10}S$	+	$CH_4$	$\longrightarrow$	$C_5H_8S$	+	$C_2H_6$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -624.8584		E= -39.9288		E= -586.0945		E= -78.6841
$\Delta E_1 = [(-586.0945)+(-78.6841)] - [(-624.8584)+(-39.9288)] = 0.0086 * 627.51 = 5.3966$						
REACCIÓN 2						
$C_6H_{10}S$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_5H_8S$	+	$C_3H_8$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -624.8520		E= -78.6841		E= -586.0945		E= -117.4407
$\Delta E_2 = [(-586.0945)+(-117.4407)] - [(-624.8520)+(-78.6841)] = 0.0009 * 627.51 = 0.5648$						
REACCIÓN 3						
$C_7H_{12}S$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_5H_8S$	+	$C_5H_{12}$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -663.6154		E= -117.4407		E= -586.0945		E= -194.9541
$\Delta E_3 = [(-586.0945)+(-194.9541)] - [(-663.6154)+(-117.4407)] = 0.0075 * 627.51 = 4.7063$						

MOLÉCULA 21						
REACCIÓN 1						
$C_6H_{10}S$	+	$CH_4$	$\longrightarrow$	$C_5H_8S$	+	$C_2H_6$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -624.8512		E= -39.9288		E= -586.0936		E= -78.6841

$\Delta E_1 = [(-586.0936)+(-78.6841)] - [(-624.8512)+(-39.9288)] = 0.0023 * 627.51 = 1.4432$						
REACCIÓN 2						
$C_6H_{10}S$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_7H_{12}S$	+	$C_2H_6$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -624.8512		E= -117.4407		E= -663.6032		E= -78.6841
$\Delta E_2 = [(-663.6032)+(-78.6841)] - [(-624.8512)+(-117.4407)] = 0.0046 * 627.51 = 2.8865$						
REACCIÓN 3						
$C_8H_{14}S$	+	$C_4H_{10}$	$\longrightarrow$	$C_6H_{10}S$	+	$C_6H_{14}$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -702.3729		E= -156.1974		E= -624.8512		E= -233.7107
$\Delta E_3 = [(-624.8512)+(-233.7107)] - [(-702.3729)+(-156.1974)] = 0.0086 * 627.51 = 5.3966$						

<b>MOLÉCULA 22</b>						
REACCIÓN 1						
$C_2H_4S_2$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_3H_6S_2$	+	$CH_4$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -864.6754		E= -78.6841		E= -903.4380		E= -39.9288
$\Delta E_1 = [(-903.4380)+(-39.9288)] - [(-864.6754)+(-78.6841)] = -0.0073 * 627.51 = -4.5808$						
REACCIÓN 2						
$C_2H_4S_2$	+	$C_3H_8S$	$\longrightarrow$	$C_4H_8S_2$	+	$CH_4S$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -864.6754		E= -511.0676		E= -942.1953		E= -433.5472
$\Delta E_2 = [(-942.1953)+(-433.5472)] - [(-864.6754)+(-511.0676)] = 0.0005 * 627.51 = 0.3137$						
REACCIÓN 3						
$C_4H_8S_2$	+	$C_2H_6S$	$\longrightarrow$	$C_2H_4S_2$	+	$C_4H_{10}S$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -942.1998		E= -472.3044		E= -864.6754		E= -549.8183
$\Delta E_3 = [(-864.6754)+(-549.8183)] - [(-942.1998)+(-472.3044)] = 0.0105 * 627.51 = 6.5888$						

MOLECULA 23						
REACCIÓN 1						
$C_3H_6S_2$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_4H_8S_2$	+	$CH_4$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -903.4397		E= -78.6841		E= -942.1962		E= -39.9288
$\Delta E_1 = [(-942.1962)+(-39.9288)] - [(-903.4397)+(-78.6841)] = -0.0012 * 627.51 = -0.7530$						
REACCIÓN 2						
$C_3H_6S_2$	+	$C_4H_{10}$	$\longrightarrow$	$C_5H_{10}S_2$	+	$C_2H_6$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -903.4397		E= -156.1974		E= -980.9510		E= -78.6841
$\Delta E_2 = [(-980.9510)+(-78.6841)] - [(-903.4397)+(-156.1974)] = 0.0020 * 627.51 = 1.2550$						
REACCIÓN 3						
$C_4H_8S_2$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_3H_6S_2$	+	$C_3H_8$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -942.1978		E= -78.6841		E= -903.4397		E= -117.4407
$\Delta E_3 = [(-903.4397)+(-117.4407)] - [(-942.1978)+(-78.6841)] = 0.0015 * 627.51 = 0.9412$						

MOLECULA 24						
REACCIÓN 1						
$C_4H_8S_2$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_5H_{10}S_2$	+	$CH_4$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -942.2006		E= -78.6841		E= -980.9589		E= -39.9288
$\Delta E_1 = [(-980.9589)+(-39.9288)] - [(-942.2006)+(-78.6841)] = 0.0030 * 627.51 = -1.8825$						
REACCIÓN 2						
$C_4H_8S_2$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_5H_{10}S_2$	+	$C_2H_6$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -942.2006		E= -117.4407		E= -980.9616		E= -78.6841
$\Delta E_2 = [(-980.9616)+(-78.6841)] - [(-942.2006)+(-117.4407)] = -0.0044 * 627.51 = -2.7610$						
REACCIÓN 3						
$C_6H_{12}S_2$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_4H_8S_2$	+	$C_5H_{12}$

ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -1019.7191		E= -117.4407		E= -942.2006		E= -194.9541
$\Delta E_3 = [(-942.2006)+(-194.9541)] - [(-1019.7191)+(-117.4407)] = 0.0051 * 627.51 = 3.2003$						

MOLECULA 25						
REACCIÓN 1						
<chem>C2H2S</chem>	+	<chem>C2H6S</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C3H4S</chem>	+	<chem>CH4S</chem>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -469.8104		E= -472.3115		E= -508.5757		E= -433.5472
$\Delta E_1 = [(-508.5757)+(-433.5472)] - [(-469.8104)+(-472.3115)] = -0.0010 * 627.51 = -0.6275$						
REACCIÓN 2						
<chem>C4H6S</chem>	+	<chem>CH4S</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C2H2S</chem>	+	<chem>C3H8S</chem>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -547.3334		E= -433.5472		E= -469.8104		E= -511.0676
$\Delta E_2 = [(-469.8104)+(-511.0676)] - [(-547.3334)+(-433.5472)] = 0.0026 * 627.51 = 1.6315$						
REACCIÓN 3						
<chem>C5H8S</chem>	+	<chem>CH4S</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C2H2S</chem>	+	<chem>C4H10S</chem>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -586.0905		E= -433.5472		E= -469.8104		E= -549.8183
$\Delta E_3 = [(-469.8104)+(-549.8183)] - [(-586.0905)+(-433.5472)] = 0.0090 * 627.51 = 5.6476$						

MOLECULA 26						
REACCIÓN 1						
<chem>C3H4S</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C4H6S</chem>	+	<chem>CH4</chem>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -508.5757		E= -78.6841		E= -547.3334		E= -39.9288
$\Delta E_1 = [(-547.3334)+(-39.9288)] - [(-508.5757)+(-78.6841)] = -0.0024 * 627.51 = -1.5060$						
REACCIÓN 2						
<chem>C4H6S</chem>	+	<chem>C2H6</chem>	$\longrightarrow$	<chem>C3H4S</chem>	+	<chem>C3H8</chem>

ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR				
E= -547.3334		E= -78.6841		E= -508.5757
				E= -117.4407
$\Delta E_2 = [(-508.5757)+(-117.4407)] - [(-547.3334)+(-78.6841)] = 0.0011 * 627.51 = 0.6902$				
REACCIÓN 3				
C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> S	+	CH <sub>4</sub>	→	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> S
				+
				C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR				
E= -586.0905		E= -39.9288		E= -508.5757
				E= -117.4407
$\Delta E_3 = [(-508.5757)+(-117.4407)] - [(-586.0905)+(-39.9288)] = 0.0029 * 627.51 = 1.8197$				

MOLÉCULA 27				
REACCIÓN 1				
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> S	+	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> S
				+
				CH <sub>4</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR				
E= -508.5757		E= -78.6841		E= -547.3334
				E= -39.9288
$\Delta E_1 = [(-547.3334)+(-39.9288)] - [(-508.5757)+(-78.6841)] = -0.0024 * 627.51 = -1.5060$				
REACCIÓN 2				
C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> S	+	CH <sub>4</sub>	→	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> S
				+
				C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR				
E= -586.0905		E= -39.9288		E= -547.3334
				E= -78.6841
$\Delta E_2 = [(-547.3334)+(-78.6841)] - [(-586.0905)+(-39.9288)] = 0.0018 * 627.51 = 1.1295$				
REACCIÓN 3				
C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> S	+	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> S
				+
				C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR				
E= -586.0905		E= -78.6841		E= -547.3334
				E= -117.4407
$\Delta E_3 = [(-547.3334)+(-117.4407)] - [(-586.0905)+(-78.6841)] = 0.0005 * 627.51 = 0.3137$				

MOLÉCULA 28				
REACCIÓN 1				
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> S	+	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> S
				+
				CH <sub>4</sub>

ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -584.8541		E= -78.6841		E= -623.6060		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-623.6060)+(-39.9288)] - [(-584.8541)+(-78.6841)] = 0.0034 * 627.51 = 2.1335$							
REACCIÓN 2							
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> S	+	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	→	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> S	+	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -584.8541		E= -156.1974		E= -623.6112		E= -117.4407	
$\Delta E_2 = [(-623.6112)+(-117.4407)] - [(-584.8541)+(-156.1974)] = -0.0004 * 627.51 = -0.2510$							
REACCIÓN 3							
C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> S	+	CH <sub>4</sub>	→	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> S	+	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -623.6112		E= -39.9288		E= -584.8541		E= -78.6841	
$\Delta E_3 = [(-584.8541)+(-78.6841)] - [(-623.6112)+(-39.9288)] = 0.0018 * 627.51 = 1.1295$							

MOLECULA 29							
REACCIÓN 1							
C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> S	+	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	→	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> S	+	CH <sub>4</sub>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -546.0908		E= -78.6841		E= -584.8556		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-584.8556)+(-39.9288)] - [(-546.0908)+(-78.6841)] = -0.0095 * 627.51 = -5.9613$							
REACCIÓN 2							
C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> S	+	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	→	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> S	+	CH <sub>4</sub>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -546.0908		E= -117.4407		E= -623.6117		E= -39.93288	
$\Delta E_2 = [(-623.6117)+(-39.93288)] - [(-546.0908)+(-117.4407)] = -0.0090 * 627.51 = -5.6476$							
REACCIÓN 3							
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> S	+	CH <sub>4</sub>	→	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> S	+	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -584.8556		E= -39.9288		E= -546.0908		E= -78.6841	

$$\Delta E_3 = [(-546.0908)+(-78.6841)] - [(-584.8556)+(-39.9288)] = 0.0095 * 627.51 = 5.9613$$

MOLECULA 30							
REACCIÓN 1							
$C_6H_8S$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_7H_{10}S$	+	$CH_4$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -623.6112		E= -78.6841		E= -662.3606		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-662.3606)+(-39.9288)] - [(-623.6112)+(-78.6841)] = 0.0059 * 627.51 = 3.7023$							
REACCIÓN 2							
$C_8H_{12}S$	+	$CH_4$	$\longrightarrow$	$C_6H_8S$	+	$C_3H_8$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -701.1284		E= -39.9288		E= -623.6112		E= -117.4407	
$\Delta E_2 = [(-623.6112)+(-117.4407)] - [(-701.1284)+(-39.9288)] = 0.0053 * 627.51 = 3.3258$							
REACCIÓN 3							
$C_7H_{10}S$	+	$CH_4$	$\longrightarrow$	$C_6H_8S$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -662.3606		E= -39.9288		E= -623.6112		E= -78.6841	
$\Delta E_3 = [(-623.6112)+(-78.6841)] - [(-662.3606)+(-39.9288)] = -0.0059 * 627.51 = -3.7023$							

MOLECULA 31							
REACCIÓN 1							
$C_{10}H_8S$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_{11}H_{10}S$	+	$CH_4$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -773.9395		E= -78.6841		E= -812.6945		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-812.6945)+(-39.9288)] - [(-773.9395)+(-78.6841)] = 0.0003 * 627.51 = 0.1882$							
REACCIÓN 2							
$C_{10}H_8S$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_{11}H_{10}S$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -773.9395		E= -117.4407		E= -812.7008		E= -78.6841	

$\Delta E_2 = [(-812.7008)+(-78.6841)] - [(-773.9395)+(-117.4407)] = -0.0047 * 627.51 = -2.9493$						
REACCIÓN 3						
$C_{10}H_8S$	+	$C_4H_{10}$	$\longrightarrow$	$C_{11}H_{10}S$	+	$C_3H_8$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -773.9395		E= -156.1974		E= -812.6945		E= -117.4407
$\Delta E_3 = [(-812.6945)+(-117.4407)] - [(-773.9395)+(-156.1974)] = 0.0017 * 627.51 = 1.0667$						

<b>MOLÉCULA 32</b>						
REACCIÓN 1						
$C_{11}H_{10}S$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_{12}H_{12}S$	+	$CH_4$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -812.7008		E= -78.6841		E= -851.4546		E= -39.9288
$\Delta E_1 = [(-851.4546)+(-39.9288)] - [(-812.7008)+(-78.6841)] = 0.0015 * 627.51 = 0.9412$						
REACCIÓN 2						
$C_{11}H_{10}S$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_{13}H_{14}S$	+	$CH_4$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -812.7008		E= -117.4407		E= -890.2082		E= -39.9288
$\Delta E_2 = [(-890.2082)+(-39.9288)] - [(-812.7008)+(-117.4407)] = 0.0045 * 627.51 = 2.8234$						
REACCIÓN 3						
$C_{11}H_{10}S$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_{12}H_{12}S$	+	$C_2H_6$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -812.7008		E= -117.4407		E= -851.4546		E= -78.6841
$\Delta E_3 = [(-851.4546)+(-78.6841)] - [(-812.7008)+(-117.4407)] = 0.0028 * 627.51 = 1.7570$						

<b>MOLÉCULA 33</b>						
REACCIÓN 1						
$C_{11}H_{10}S$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_{12}H_{12}S$	+	$CH_4$
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR						
E= -812.7008		E= -78.6841		E= -851.4546		E= -39.9288

$\Delta E_1 = [(-39.9288)+(-851.4546)] - [(-812.7008)+(-78.6841)] = 0.0015 * 627.51 = 0.9413$							
REACCIÓN 2							
$C_{12}H_{12}S$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_{11}H_{10}S$	+	$C_4H_{10}$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -851.4546		E= -117.4407		E= -812.6945		E=-156.1974	
$\Delta E_2 = [(-156.1974)+(-812.6945)]- [(-851.4546)+(-117.4407)] = 0.0034 * 627.51 = 2.1335$							
REACCIÓN 3							
$C_{13}H_{14}S$	+	$CH_4$	$\longrightarrow$	$C_{12}H_{12}S$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -890.2082		E= -39.9288		E= -851.4546		E= -78.6841	
$\Delta E_3 = [(-78.6841)+(-851.4546)] - [(-890.2082)+(-39.9288)] = -0.0017 * 627.51 = -1.0667$							

<b>MOLÉCULA 34</b>							
REACCIÓN 1							
$C_5H_{12}S_4$	+	$CH_4$	$\longrightarrow$	$C_4H_{10}S_4$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1769.4152		E= -39.9288		E= -1730.6581		E= -78.6841	
$\Delta E_1 = [(-78.6841)+(-1730.6581)]- [(-1769.4152)+(-39.9288)] = 0.0018 * 627.51 = 1.1295$							
REACCIÓN 2							
$C_5H_{12}S_4$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_4H_{10}S_4$	+	$C_3H_8$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1769.4133		E= -78.6841		E= -1730.6581		E= -117.4407	
$\Delta E_2 = [(-117.4407)+(-1730.6581)]- [(-1769.4133)+(-78.6841)] = -0.0014 * 627.51 = -0.8785$							
REACCIÓN 3							
$C_4H_{10}S_4$	+	$C_4H_{10}$	$\longrightarrow$	$C_6H_{14}S_4$	+	$C_2H_6$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -1730.6581		E= -156.1974		E= -1808.1703		E= -78.6841	
$\Delta E_3 = [(-78.6841)+(-1808.1703)]- [(-1730.6581)+(-156.1974)] = 0.0011 * 627.51 = 0.6903$							

MOLECULA 35							
REACCIÓN 1							
$C_2H_6S_5$	+	$C_2H_6$	$\longrightarrow$	$C_3H_8S_5$	+	$CH_4$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -2046.7664		E= -78.6841		E= -2085.5215		E= -39.9288	
$\Delta E_1 = [(-39.9288)+(-2085.5215)] - [(-2046.7664)+(-78.6841)] = 0.0002*627.51 = 0.1255$							
REACCIÓN 2							
$C_2H_6S_5$	+	$C_3H_8$	$\longrightarrow$	$C_4H_{10}S_5$	+	$CH_4$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -2046.7664		E= -117.4407		E= -2124.2765		E= -39.9288	
$\Delta E_2 = [(-39.9288)+(-2124.2765)]-[(-2046.7664)+(-117.4407)] = 0.0018*627.51 = 1.1295$							
REACCIÓN 3							
$C_3H_8S_5$	+	$CH_4S$	$\longrightarrow$	$C_2H_6S_5$	+	$C_2H_6S$	
ENERGIA DEL PUNTO SINGULAR							
E= -2085.5303		E= -433.5472		E= -2046.7664		E= -472.3115	
$\Delta E_3 = [(-472.3115)+(-2046.7664)]-[(-2085.5303)+(-433.5472)] = -0.0002*627.51 = -0.2510$							

## ANEXO D. MATRIZ BNC

**Tabla 11.** Matriz desconocida reacciones isodesmicas.

MOLECULA	C/S3/H	C/C2/S2	C/S3/C	C/S2/C/H	C/S2/H2	Ct/S	Cd/S/Cd	Cd/S/Ct	C/S4	Cd/S2	C/S/H3	S/Cd/H	S/Ct/H	S/Ct/C	Cd/S/C <sub>b</sub>	C/Cd/H <sub>3</sub>	S/Ct/Cd	C/S3/C <sub>d</sub>	Ct/Ct
1	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	- 0.66666 667	0	0	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	- 0.66666 667	- 0.33333 33	0	0	0	- 0.33333 33	0	0	0
5	0	0	0	- 0.66666 667	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	0	0	0
6	- 0.66666 67	0	- 0.33333 33	0	0	0	0	0	0	0	- 0.66666 667	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	0	0	0	- 0.33333 333	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	- 0.33333 333	0	- 0.33333 333	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	- 0.66666 667	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	- 0.33333 33	0	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	- 0.33333 33	0	0	0	- 0.66666 667	0	0	0	0	0	- 0.66666 667	0	0	0	0	0	0	0	0
12	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14	0	0	- 0.66666 67	0	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	0	- 0.33333 33	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	0	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	0	0	0
16	0	- 0.33333 333	- 0.66666 67	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	- 0.66666 667	0	0	0	0	0	0	0	0

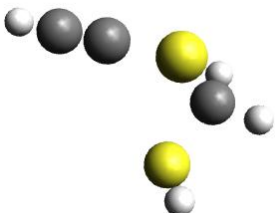
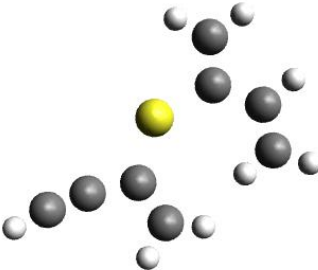
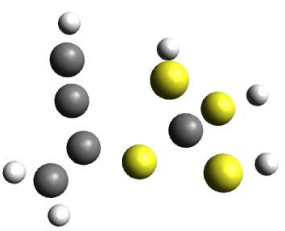
19	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	-1	0	0	0	1.33333 33	0	0	0
20	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0.66666 67	0	0	0
21	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0.33333 333	0	0	0	0	0	0	0	0
22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0.33333 333	1.33333 33	0	0	0	0.66666 67	0	0	0
23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0.33333 333	-1	0	0	0	0.66666 67	0	0	0
24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	-1	0	0	0	0	0.66666 67	0	0	0
25	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0.33333 333	0	0	-1	0	0	0	0	0
26	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0
27	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0.33333 333	0	0	-1	0	0	0	0	0
28	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0.33333 33	0	0	0
29	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	-1	0	0	0	0.66666 67	0	0	0
30	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0.66666 67	0	0	0
31	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	-1	0	0	0
32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0
33	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0.66666 67	0	0	0
34	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
35	0	0.66666 667	-1	0.33333 333	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
36	0	0	0	0	0.33333 333	0.66 67	0	0	0	0	-1	0	0.33333 33	0.33333 33	0	0	0	0	0
37	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0.33333 333	0	0	0	0	0	0	0	0
38	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0.33333 333	0	0	0	0	0.33333 33	0	0	0

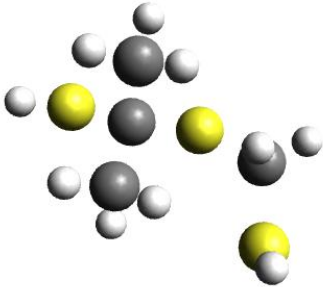
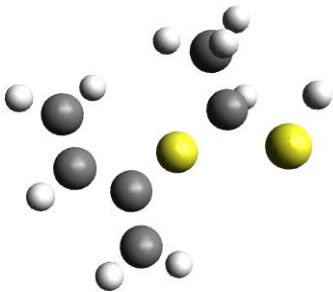

39	0	- 0.33333 333	0	0	- 0.66666 667	- 0.33 33	0	0	0	0	- 0.33333 333	0	0	- 0.33333 33	0	0	0	0	0
40	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
41	0	0	- 0.66666 67	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	- 0.33333 33	0	- 0.33333 33	0
42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	3	0	0	0	0	0	0	0
43	- 0.33333 33	0	- 0.33333 33	0	-1	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	- 0.33333 33	0
44	0	- 0.33333 333	0	0	0	- 0.66 67	0	0	0	0	-1	0	0	- 0.33333 33	0	0	0	0	- 0.666 67
45	0	0	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	- 0.33333 33	0	0	0
46	0	0	0	0	0	0	- 0.66666 667	- 0.66666 667	0	0	0	- 1.66666 67	0	0	0	0	- 0.33333 33	0	0
47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	-3	0	0	0	- 0.33333 33	0	0	0
48	- 0.33333 33	0	- 0.33333 33	- 0.666666 667	- 0.33333 333	- 0.33 33	- 0.33333 333	0	0	0	- 0.33333 333	0	0	- 0.33333 33	0	0	0	0	- 0.666 67
49	0	- 0.33333 333	0	0	0	- 0.33 33	0	0	- 0.666 67	0	- 0.66666 667	0	0	- 0.33333 33	0	0	0	- 0.33333 33	0
50	0	0	0	0	0	-1	- 0.33333 333	0	0	0	- 0.66666 667	- 0.33333 33	0	- 0.66666 67	0	0	- 0.33333 33	0	0
51	0	0	0	0	0	0	-0.33	0	0	-1	0	-3	0	0	0	- 0.33333 33	0	0	0
52	0	- 0.33333 333	0	- 0.666666 667	-1	-1	0	0	0	0	- 0.33333 333	0	0	-1	0	0	0	0	0
53	0	0	0	0	0	0	- 0.33333 333	0	0	0	0	-2	0	0	- 0.33333 33	0	0	0	0
54	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	- 0.6666 67	0	-1	0	0	0	- 0.33333 33	0	0	0
55	- 0.66666 67	0	- 0.33333 33	-1	0	0	0	0	- 0.333 33	0	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	0	- 0.33333 33	0
56	0	0	- 0.33333 33	- 0.666666 667	0	-1	0	0	0	- 0.6666 67	- 0.33333 333	-1	0	- 0.66666 67	0	0	- 0.33333 33	0	0
57	0	0	-1	0	-1	-0.33	0	0	0	0	- 0.33333 333	0	0	- 0.33333 33	0	0	0	0	0

58	0	0	0	- 0.333333 333	- 1.66666 667	-1.33	0	0	0	0	- 0.33333 333	0	0	- 1.33333 33	0	0	0	0	- 0.666 67
59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	0	-1	0
60	0	0.66666 667	0	0	0.33333 333	0.33 33	0	0	0	0	- 0.33333 333	0	0	- 0.33333 33	0	0	0	0	0
61	0	-1	0	0	0	0	0	0.33333 333	-1	0	- 0.33333 333	0	0	0	- 0.33333 33	0	0	0	0
62	0	0	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
63	0	0	0	0	0	-1	0	0.66666 667	0	- 0.3333 33	-0.33	0	0	0	0	0	-1	0	0
64	0	-1	0	0.66666 667	0.33333 333	0	0	0.33333 333	0	0	- 0.33333 333	0	0	0	0	0	0	0	0
65	-1	0	0	0.66666 667	0	0	0	0	-1	0	-0.67	0	0	0	0	0	0	0	0
66	0	0	-1	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	- 0.666 67
67	0	0	0	0	0	- 1.66 67	0	0	0	0	0	- 0.33333 33	0.66666 67	- 0.33333 33	0	0	0.66666 67	0	- 1.333 33
68	0	0	0.66666 67	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	- 0.33333 33	0	0	0
69	0	0	0.66666 67	0.33333 333	-1	0	0	0	0	0	1.66666 667	0	0	-2	0	0	0	0	0
70	0	0	0	0.33333 333	0	- 0.33 33	0.00	0	0	0	-1	0	0	- 0.33333 33	0	0	0	0.66666 67	0
71	0	0	0	0	0	- 0.33 33	0	0	0	0	0	- 0.33333 33	- 0.33333 33	0	0	0	0	0	0

## ANEXO E. OPTIMIZACIÓN Y FRECUENCIA

**Tabla 12.** Optimización y Frecuencia.

MOLÉCULA	OPTIMIZACIÓN	FRECUENCIA
(etinilsulfanil)metanotiol		0.49408
2-(but-1-eno-3-ilosulfanil)buta-1,3-dieno		447.79195
(but-1-eno-3-ilo-2-ilosulfanil)metanotritiol		40.58582

<p>2-[(sulfanilmetil)sulfanil]propano-2-tiol</p>		<p>1.01599</p>
<p>1-(buta-1,3-dieno-2-ilosulfanil)etanotiol</p>		<p>173.18020</p>
<p>propano-1,1,1,2,2-pentatiol</p>		<p>29.65551</p>

## ANEXO F. ENERGÍA TEORICA, EXPERIMENTAL Y ERROR.

**Tabla 13.** Error en los datos obtenidos.

Molécula	Reacciones Isodesmicas	$\Delta E$ teórica [kcal/mol]	$\Delta E$ experimental [kcal/mol]	ERROR [%]
1	Reacción 1	-0.81	0.58	171,52
	Reacción 2	-0.31	0.58	285,11
	Reacción 3	-0.62	1.66	365,48
2	Reacción 1	1.75	-1.64	193,85
	Reacción 2	-2.51	-6.87	173,82
	Reacción 3	0.69	1.64	138,28
3	Reacción 1	-3.45	-2.32	32,73
	Reacción 2	-2.63	0.37	114,38
	Reacción 3	1.81	-2.32	227,73
4	Reacción 1	-7.09	-1.15	83,71
	Reacción 2	-2.38	12.87	639,80
	Reacción 3	5.83	-17.69	403,30
5	Reacción 1	1.69	6.32	273,26
	Reacción 2	-0.18	-2.68	1.327,41
	Reacción 3	-2.19	-0.06	97,05
6	Reacción 1	-0.18	23.71	12.700,05
	Reacción 2	-0.18	-4.33	2.201,56
	Reacción 3	9.66	-30.35	414,08
7	Reacción 1	-0.25	-4.38	1.647,92
	Reacción 2	-4.26	-1.77	58,43
	Reacción 3	4.32	-2.29	153,11
8	Reacción 1	1.06	12.70	1.090,74
	Reacción 2	0.56	-9.94	1.861,43
	Reacción 3	2.25	3.38	49,72
9	Reacción 1	1.06	-9.52	993,18
	Reacción 2	2.94	5.56	88,74
	Reacción 3	7.71	16.05	108,02
10	Reacción 1	-4.58	-22.05	381,40

	Reacción 2	-7.02	5.02	171,50
	Reacción 3	11.48	6.06	47,18
11	Reacción 1	1.00	12.42	1.137,48
	Reacción 2	-7.21	-7.37	2,26
	Reacción 3	3.95	15.21	284,75
12	Reacción 1	1.44	0.26	81,30
	Reacción 2	0.62	0.31	49,80
	Reacción 3	-1.50	-2.99	98,66
13	Reacción 1	-3.70	-2.96	19,96
	Reacción 2	0.75	0.09	86,97
	Reacción 3	2.19	3.59	63,47
14	Reacción 1	-0.12	-7.60	5.960,50
	Reacción 2	-0.37	-7.60	1.920,88
	Reacción 3	7.15	-7.55	205,67
15	Reacción 1	-0.31	-23.08	7.259,80
	Reacción 2	6.71	-7.67	214,33
	Reacción 3	10.04	1.65	83,49
16	Reacción 1	-4.39	-8.78	99,94
	Reacción 2	4.64	9.37	101,80
	Reacción 3	9.47	0.35	96,22
17	Reacción 1	-3.07	-3.86	25,85
	Reacción 2	-2.25	-1.16	48,26
	Reacción 3	3.57	3.87	8,26
18	Reacción 1	-1.31	2.49	289,17
	Reacción 2	1.31	7.05	435,30
	Reacción 3	2.13	0.20	90,25
19	Reacción 1	-0.25	4.35	1.836,68
	Reacción 2	32.06	7.05	77,98
	Reacción 3	0.50	-19.89	4.062,92
20	Reacción 1	5.39	0.67	87,52
	Reacción 2	0.56	11.48	1.933,60

	Reacción 3	4.70	-1.49	131,70
21	Reacción 1	1.44	5.13	255,76
	Reacción 2	2.88	-1.71	159,28
	Reacción 3	5.39	4.49	16,80
22	Reacción 1	-4.58	-19.56	327,04
	Reacción 2	0.31	-4.10	1.408,64
	Reacción 3	6.58	-12.81	294,44
23	Reacción 1	-0.75	-11.88	1.478,18
	Reacción 2	1.25	3.67	192,83
	Reacción 3	0.94	-7.76	925,47
24	Reacción 1	-1.88	-9.96	429,33
	Reacción 2	-2.76	3.04	210,39
	Reacción 3	3.20	0.92	71,03
25	Reacción 1	-0.62	2.81	548,34
	Reacción 2	1.63	0.82	49,32
	Reacción 3	5.64	0.23	95,89
26	Reacción 1	-1.50	-2.23	48,60
	Reacción 2	0.69	-0.46	167,05
	Reacción 3	1.81	2.24	23,13
27	Reacción 1	-1.50	-5.48	264,20
	Reacción 2	1.12	4.06	259,57
	Reacción 3	0.31	1.36	333,74
28	Reacción 1	2.13	17.15	703,85
	Reacción 2	-0.25	-3.69	1.371,83
	Reacción 3	1.12	6.44	470,41
29	Reacción 1	-5.96	-0.94	84,18
	Reacción 2	-5.64	-16.36	189,83
	Reacción 3	5.96	0.94	84,18
30	Reacción 1	3.70	6.50	75,61
	Reacción 2	3.32	8.92	168,33

	Reacción 3	-3.70	-6.50	75,61
31	Reacción 1	0.18	-5.40	2.973,49
	Reacción 2	-2.94	-2.70	8,21
	Reacción 3	1.06	-2.65	349,31
	Reacción 3	1.06	-2.65	4,49
32	Reacción 1	0.94	0.89	68,26
	Reacción 2	2.82	0.89	104,87
	Reacción 3	1.75	3.59	1.014,94
33	Reacción 1	0.94	-8.61	174,85
	Reacción 2	2.13	5.86	1.245,34
	Reacción 3	-1.06	12.21	154,14
34	Reacción 1	1.12	-0.61	85,81
	Reacción 2	-0.87	-1.63	143,00
	Reacción 3	0.69	1.67	5.476,78
35	Reacción 1	0.12	-6.74	697,66
	Reacción 2	1.12	-6.75	5.877,85
	Reacción 3	-0.25	-15.00	7.612,34
36	Reacción 1	-1.25	-96.79	14.127,85
	Reacción 2	0.81	116.06	4.673,54
	Reacción 3	-2.88	-137.79	972,10
37	Reacción 1	-17.31	151.04	41,21
	Reacción 2	229.16	134.73	92,84
	Reacción 3	-146.39	-10.48	146,29
38	Reacción 1	9.977	-4.61	50,30
	Reacción 2	-18.69	-9.29	68,95
	Reacción 3	7.53	2.33	882,65
39	Reacción 1	-4.83	37.81	454,21
	Reacción 2	-8.15	28.89	122,97
	Reacción 3	-7.21	1.65	22,54
40	Reacción 1	-10.79	-13.22	50,49
	Reacción 2	-5.64	-2.79	3,28
	Reacción 3	12.80	13.22	

41	Reacción 1	-4.76	18.39	485,78
	Reacción 2	6.21	-20.61	431,91
	Reacción 3	3.70	-24.76	768,97
42	Reacción 1	730.54	236.68	67,60
	Reacción 2	0.50	233.12	46.337,68
	Reacción 3	-6.02	246.22	4.187,26
43	Reacción 1	5.08	-14.56	386,48
	Reacción 2	6.71	17.05	153,95
	Reacción 3	15.43	24.74	60,30
44	Reacción 1	3.63	-18.51	608,68
	Reacción 2	-0.69	11.75	1.802,77
	Reacción 3	13.49	37.12	175,20
45	Reacción 1	2.00	61.31	2.953,28
	Reacción 2	-183.92	-57.05	68,98
	Reacción 3	-2.25	65.30	2.990,78
46	Reacción 1	6.90	-8.29	220,13
	Reacción 2	-23.53	-56.51	140,19
	Reacción 3	-22.77	-36.78	61,48
47	Reacción 1	4.20	-53.72	1.377,79
	Reacción 2	13.36	-4.19	131,41
	Reacción 3	-10.22	-20.64	101,83
48	Reacción 1	6.40	0.57	90,98
	Reacción 2	7.78	-36.43	568,21
	Reacción 3	-5.08	-24.77	387,35
49	Reacción 1	8.65	29.32	238,62
	Reacción 2	10.29	63.68	518,83
	Reacción 3	5.52	67.83	1.128,50
50	Reacción 1	1.56	-4.76	403,95
	Reacción 2	3.70	1.90	48,42
	Reacción 3	1.75	9.88	462,69
51	Reacción 1	-1.88	18.28	1.071,23

	Reacción 2	-35.26	-16.06	54,44
	Reacción 3	-5.33	-8.13	52,44
52	Reacción 1	6.27	11.92	90,12
	Reacción 2	2.63	-1.91	172,63
	Reacción 3	10.10	35.14	247,91
53	Reacción 1	-152.54	82.03	153,78
	Reacción 2	-156.50	100.76	164,39
	Reacción 3	572.03	84.81	85,17
54	Reacción 1	3.57	14.55	307,02
	Reacción 2	3.57	-1.75	149,00
	Reacción 3	3.30	-2.35	171,20
55	Reacción 1	0.81	-4.69	675,66
	Reacción 2	8.59	6.10	28,96
	Reacción 3	5.52	13.51	144,72
56	Reacción 1	4.51	-11.26	349,42
	Reacción 2	8.78	-4.77	154,36
	Reacción 3	0.69	30.03	4.251,79
57	Reacción 1	7.46	-234.79	3.244,31
	Reacción 2	8.72	-241.98	2.874,26
	Reacción 3	-770.20	-294.81	61,72
58	Reacción 1	0.31	-25.25	8.149,74
	Reacción 2	-5.08	31.17	713,34
	Reacción 3	0.56	-51.26	9.177,85
59	Reacción 1	-2.25	-205.36	8.990,70
	Reacción 2	-3.89	-198.40	4.999,59
	Reacción 3	-6.08	-197.73	3.148,56
60	Reacción 1	4.20	0.43	89,77
	Reacción 2	7.40	0.61	91,72
	Reacción 3	11.67	22.23	90,52
61	Reacción 1	14.80	-22.94	254,92
	Reacción 2	4.83	-51.17	1.159,03

	Reacción 3	5.45	-22.05	504,02
62	Reacción 1	-3.57	-5.26	47,13
	Reacción 2	-1.81	0.01	100,08
	Reacción 3	-2.44	-2.58	5,53
	Reacción 3	-2.44	-2.58	326,33
63	Reacción 1	-11.35	-48.42	1.998,30
	Reacción 2	4.58	-86.95	1.260,81
	Reacción 3	-23.34	-317.65	66,27
64	Reacción 1	-149.59	-50.45	1.969,62
	Reacción 2	3.63	-68.04	162,02
	Reacción 3	23.46	-14.55	62,20
65	Reacción 1	16.44	6.21	7,19
	Reacción 2	17.88	16.59	132,96
	Reacción 3	8.65	20.17	770,06
66	Reacción 1	16.81	-112.68	1.549,34
	Reacción 2	-4.76	-78.65	4.590,54
	Reacción 3	-1.56	-73.58	2.183,30
67	Reacción 1	-2.07	-47.28	32,24
	Reacción 2	-13.24	-17.50	80,47
	Reacción 3	-3.26	-0.63	106,08
68	Reacción 1	14.99	30.90	134,60
	Reacción 2	14.49	34.00	27,15
	Reacción 3	10.16	7.40	365,64
69	Reacción 1	25.53	-67.84	33,03
	Reacción 2	20.08	26.71	82,24
	Reacción 3	20.83	3.69	244,16
70	Reacción 1	3.32	-4.79	116,75
	Reacción 2	-3.89	0.65	74,05
	Reacción 3	4.83	8.40	1.262,10
71	Reacción 1	-6.21	-84.61	74,94
	Reacción 2	-196.84	-49.32	15.735,98
	Reacción 3	-0.43	-69.56	