

**ESTIMACIÓN DE GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN PARA COMPUESTOS
NITROGENADOS TIPO IMINA UTILIZANDO REACCIONES ISODÉSMICAS Y
CÁLCULOS DFT**

**DIEGO ANDRÉS FORERO RODRÍGUEZ
CARLOS HUMBERTO SÁNCHEZ BELEÑO**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2016

**ESTIMACIÓN DE GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN PARA COMPUESTOS
NITROGENADOS TIPO IMINA UTILIZANDO REACCIONES ISODÉSMICAS Y
CÁLCULOS DFT**

**DIEGO ANDRÉS FORERO RODRÍGUEZ
CARLOS HUMBERTO SÁNCHEZ BELEÑO**

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de Ingeniero
Químico**

**DIRECTOR:
GIOVANNI MORALES MEDINA, Doctor en Ingeniería Química.**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2016

DEDICATORIA

Dedico esta investigación a dos mujeres que dejaron a un lado sus prioridades y metas, con el fin de permitirme ser alguien en la vida, a ti mami y ita gracias por enseñarme a caminar por la vida con valores y principios orientados a servir a los demás; a mi compañero de trabajo por su amistad y compromiso incondicional otorgado durante todo este tiempo; a mi padre que aun así estando tan lejos nunca me abandonó.

Diego Forero

A Dios que siempre está ahí cuidándome.

A mis padres y hermana por el apoyo incondicional en todos los momentos de mi vida, los amo con toda mi alma.

A toda mi familia que me ha brindado su apoyo durante mi crecimiento personal.

A mis amigos que estuvieron ahí con una palabra de aliento en los momentos de desesperación.

A cada una de las personas que de alguna forma me apoyaron en mi formación académica, gracias infinitas

A mi compañero de batalla Diego, que nunca desfalleció en este largo proceso.

Carlos H. Sánchez.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a la Universidad industrial de Santander por brindarnos un espacio para formarnos como personas integrales. A todas las personas que nos apoyaron en la ejecución de este trabajo muchas gracias. Igualmente, a nuestro director, el profesor Giovanni por depositar su confianza en nosotros.

CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	15
1. MARCO TEÓRICO	16
1.1 IMINAS	16
1.2 CALOR DE FORMACIÓN ESTANDAR (ΔH_f°)	16
1.3 GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DE BENSON	17
1.4 REACCIONES ISODÉSMICAS	18
1.5 CÁLCULOS DE QUÍMICA CUÁNTICA	19
1.6 PROGRAMA COMPUTACIONAL GAUSSIAN	20
1.7 REGRESIÓN LINEAL MÚLTIPLE	21
2. MARCO METODOLÓGICO	22
2.1 IDENTIFICACIÓN DE GRUPOS FALTANTES Y PROPOSICIÓN DE IMINAS	22
2.2 FORMULACIÓN DE REACCIONES ISODÉSMICAS	23
2.3 GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN CONOCIDOS Y DESCONOCIDOS	23
2.4 CÁLCULOS DE LAS ENERGÍAS	23
2.5 CÁLCULOS DE GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DESCONOCIDOS	24
2.6 ANÁLISIS DE DATOS	25
3. ANÁLISIS DE RESULTADOS	26
3.1 GEOMETRÍAS	26

3.2 GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN	27
3.3 REACCIONES ISODÉSMICAS	29
3.4 GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN	30
4. CONCLUSIONES	38
REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS	39
BIBLIOGRAFIA	43
ANEXOS	47

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Estructura general de las iminas	16
Figura 2. Etanimina	18
Figura 3. Reacción isodésmica para etenimina.	18
Figura 4. Representación matricial del modelo de regresión lineal múltiple.	21
Figura 5. Esquema de la metodología utilizada.	22
Figura 6. Proyección de Newman para las estructuras tipo imina, eclipsada (a), escalonada (b) y conformación Gauche (c).	27
Figura 7. (a) compuesto 60 y (b) compuesto 28.	35

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Especificaciones de funciones base	20
Tabla 2. Características estructurales de los compuestos 1-2-3.	26
Tabla 3. Grupos de contribución	28
Tabla 4. Grupos de contribución conocidos	28
Tabla 5. Grupos de contribución conocidos.	28
Tabla 6. Reacciones isodésmicas.	29
Tabla 7. Energía de productos y reactivos al nivel de teoría B3LYP/6311++G (d, p).*	29
Tabla 8. Matriz de compuestos nitrogenados expresados en sus grupos de contribución conocidos y desconocidos	31
Tabla 9. Reacciones isodésmicas expresadas en sus grupos de contribución desconocidos y el promedio de ΔH_{RXN} más grupos de contribución conocidos	31
Tabla 10. Valores de los grupos de contribución obtenidos por RLM.	32
Tabla 11. Reportes de error de energía de formación entre método cuántico y grupos de contribución.	33
Tabla 12. Valor de calor de formación estándar para los 74 compuestos nitrogenados tipo imina.	35
Tabla 13. Comparación de calor de formación estándar.	36
Tabla 14. Reporte de error	36

LISTA DE ANEXOS

	Pág.
ANEXO A. PAQUETE COMPUTACIONAL GAUSSIAN 03:	47
ANEXO B. COMPUESTOS NITROGENADOS TIPO IMINA	49
ANEXO C. REACCIONES ISODÉSMICAS	76
ANEXO D. ENERGÍA A CONDICIONES ESTÁNDAR	88
ANEXO E MATRIZ DE COMPUESTOS NITROGENADOS EXPRESADOS EN SUS GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DESCONOCIDOS Y CONOCIDOS.....	89
ANEXO F. REACCIONES ISODÉSMICAS EXPRESADAS EN SUS GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN	94
ANEXO G REPORTES DE ERROR DE ENERGÍA DE FORMACIÓN ENTRE MÉTODO CUÁNTICO Y GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN	100

RESUMEN

TITULO: ESTIMACIÓN DE GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN PARA COMPUESTOS NITROGENADOS TIPO IMINA UTILIZANDO REACCIONES ISODÉSMICAS Y CÁLCULOS DFT*

AUTORES: DIEGO ANDRÉS FORERO RODRÍGUEZ
CARLOS HUMBERTO SÁNCHEZ BELEÑO**

PALABRAS CLAVES: Simulación molecular, Grupos de aditividad de Benson, calor de formación, reacciones isodésmicas, cálculos DFT, regresión lineal múltiple, método B3LYP/6-311++G(d,p).

CONTENIDO:

El objetivo principal de este trabajo fue estimar los grupos de contribución desconocidos para el cálculo del calor de formación estándar de estructuras tipo imina. La metodología planteada utiliza 222 reacciones isodésmicas para la estimación del calor de formación de una base de datos de 74 moléculas y aplica cálculos DFT al nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p) para la estimación de las geometrías, las frecuencias y las energías moleculares. Los cálculos de estructura electrónica fueron aplicados según lo codificado en Gaussian03. La representación del calor de formación de las 74 moléculas y de las energías de reacción de las 222 reacciones isodésmicas en grupos de contribución condujo a una ecuación matricial para estimar los grupos desconocidos por medio de regresión lineal múltiple. Un total de 25 grupos de contribución fueron ajustados por el procedimiento propuesto en el presente trabajo. Los intervalos de confianza y los errores en las estimaciones de los calores de reacción fueron calculados para analizar la exactitud del proceso de regresión. Los anteriores estadísticos reportaron valores apreciables, los cuales fueron justificados por las interacciones entre átomos no enlazados en las estructuras tipo imina. Se recomienda que estas interacciones sean incluidas como un término adicional en la matriz de grupos desconocidos para reducir la incertidumbre en los valores reportados por el proceso de regresión.

* Trabajo de Grado

** Facultad de ingenierías Físico-Químicas, Escuela de Ingeniería Química, Director: Giovanni Morales Medina, I.Q., Dr.

ABSTRACT

TITLE: CONTRIBUTION GROUPS FOR IMINE COMPOUNDS FROM ISODESMIC REACTIONS AND DFT CALCULATIONS*

AUTHORS: DIEGO ANDRÉS FORERO RODRÍGUEZ
CARLOS HUMBERTO SÁNCHEZ BELEÑO**

KEYWORDS: Additivity contribution groups, heats of formation, isodesmic reactions, DFT, multiple lineal regression, B3LYP/6-311++G (d, p).

SUMMARY:

This work's main goal was to estimate the unknown contribution groups for the heat of formation of imine compounds. The proposed protocol utilized 222 isodesmic reactions for estimating the heat of formation of 74 molecules and geometry, frequency and energy calculations at the B3LYP/6-31++G(d,p) level of theory as codified in Gaussian03. The heat of formation for the 74 molecules as well as the heat for the 222 isodesmic reactions were represented using the contribution groups to obtain a matrix system. A total of 25 contribution groups were calculated through multivariate linear regression. Confidence intervals and residuals were calculated in order to analyze the performance of regression. The values for that statistics suggested missing interactions between non-neighboring atoms in the imine molecules. Such interactions weren't considered explicitly into the matrix of unknown contribution groups. As a recommendation, these interactions should be included in future works for reducing uncertainty in the calculated groups from the regression.

* Undergrade final work

** Facultad de ingenierías Físico-Químicas, Escuela de Ingeniería Química, Director: Giovanni Morales Medina, Ch.E., Ph.D.

INTRODUCCIÓN

Los métodos predictivos para las propiedades termoquímicas mediante grupos de contribución constituyen una herramienta útil para el análisis de los requerimientos energéticos en sistemas fisicoquímicos [1]. Entre estos métodos, el referente a los grupos de contribución o aditividad de Benson corresponde a una alternativa rápida y económica para la determinación del calor de formación de sustancias con una amplia variedad de átomos pesados [2]. La literatura reporta una base de datos completa para los grupos de contribución con estructuras comunes; sin embargo, para el caso de compuestos tipo imina, esta base de datos se encuentra incompleta, por lo que la estimación del calor de formación de este tipo de estructuras debe ser hecha a partir de mediciones experimentales.

El cálculo de nuevos grupos de contribución puede estar basado en estimaciones energéticas de reacciones isodésmicas utilizando la teoría de los funcionales de la densidad electrónica (DFT: *density functional theory*) [3]. Entre los métodos DFT utilizados para el cálculo energético se encuentra el funcional B3LYP/6-311++G(d,p), el cual ha reportado concordancia con mediciones experimentales en compuestos nitrogenados [4].

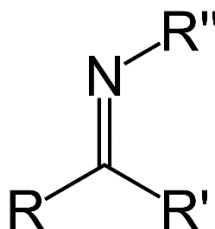
El presente documento propone una metodología para la estimación de nuevos grupos de contribución requeridos para el cálculo del calor de formación de compuestos nitrogenados tipo imina a partir de reacciones isodésmicas y cálculos energéticos al nivel B3LYP/6-311++G(d,p).

1. MARCO TEÓRICO

1.1 IMINAS

Las iminas son aquellos compuestos que presentan una estructura $RR'C=NR''$ en donde R, R' y R'' pueden ser hidrógenos (H) o grupos funcionales orgánicos (figura 1); por tanto, las iminas son compuestos análogos de aldehídos y cetonas [5].

Figura 1. Estructura general de las iminas



Las iminas se encuentran presentes en una gran variedad de procesos industriales (farmacéuticos, agroquímicos, etc.). Más aún, la formación de iminas corresponde a una de las reacciones importantes en la química orgánica [6]. Por consiguiente, el conocimiento de sus propiedades termoquímicas contribuye en el análisis de nuevas rutas de síntesis, velocidades de reacción y requerimientos energéticos de los procesos en donde participan [7].

1.2 CALOR DE FORMACIÓN ESTANDAR (ΔH_f°)

El calor de formación o entalpía de formación es un valor importante para la determinación de efectos calóricos de reacciones químicas, así como también para el cálculo de las constantes de equilibrio [8]. El calor de formación estándar se define

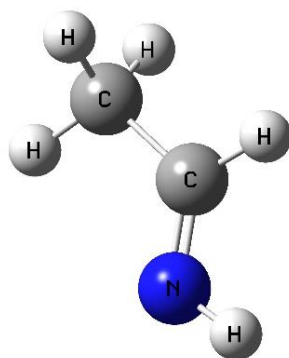
como el cambio en la entalpía asociado a la formación de un compuesto a partir de sus elementos a 298.15 K y 1 bar. La entalpía de formación estándar toma valores negativos, cuando en la formación de compuestos implica liberación de energía, ya que, a mayor calor liberado ($\Delta H_f^\circ < 0$), mayor será la estabilidad del compuesto [9].

La medición del calor de formación de algunos compuestos se realiza generalmente por métodos calorimétricos que pueden ser costosos y demorados. Debido a lo anterior, diferentes procedimientos matemáticos han sido propuestos para aproximar los calores de formación. Uno de estos procedimientos corresponde al método de grupos de contribución de Benson [10].

1.3 GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DE BENSON

El método de grupos de contribución determina una propiedad termoquímica de una molécula a partir de la representación de la misma en sus grupos estructurales constituyentes [11]–[12]. Un grupo está definido como un átomo polivalente (número de ligando ≥ 2) con sus ligandos. La nomenclatura utilizada para representar los grupos de contribución corresponde a identificar el átomo polivalente seguido de sus ligandos; *i.e.* el grupo de contribución $C_{DN}/C/H$ representa un átomo de carbono unido con un doble enlace nitrógeno, conectado a un carbono y a otro hidrógeno. La Figura 2 presenta la etanimina expresada en sus grupos de contribución, donde $C/C_{DN}/H_3$ es un átomo de carbono conectado a un carbono doble enlace nitrógeno y tres átomos de hidrógeno; N_{DC}/H es un átomo de nitrógeno conectado a un carbono doble enlace con un átomo de hidrógeno.

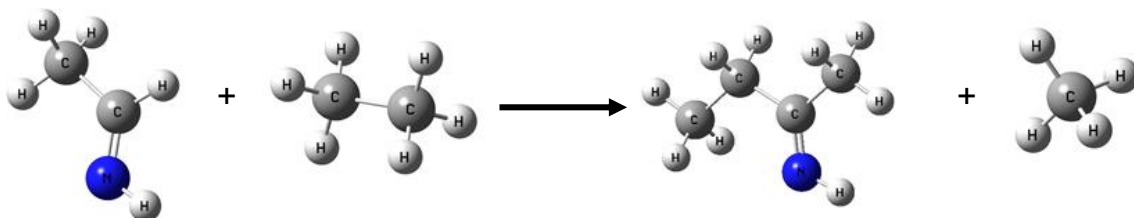
Figura 2. Etanimina



1.4 REACCIONES ISODÉSMICAS

Las reacciones isodésmicas corresponden a reacciones en donde los números y los tipos de enlaces se conservan en ambos lados de la reacción (reactivos y productos). La Figura 3 presenta una reacción isodésmica que relaciona la etanimina; en la reacción se evidencia que, tanto en los reactivos como en los productos se cuenta con tres enlaces C-C, 12 enlaces C-H, un enlace N-H y un enlace C=N.

Figura 3. Reacción isodésmica para etanimina.



El requerimiento en el número y tipo de enlaces conlleva a una cancelación de errores en las predicciones teóricas de las energías moleculares, con lo cual se obtienen valores confiables para el calor de reacción [13]. Las energías moleculares pueden ser obtenidas por medio de cálculos de química cuántica. La aplicación de

la ley de Hess en una reacción isodésmica conduce a la predicción de un calor de formación desconocido (1). La precisión y exactitud de este valor, depende de los métodos cuánticos y las herramientas computacionales que se utilicen.

$$\Delta H^{\circ}f_{PROD1} = \Delta H_{rxn} - \Delta H^{\circ}f_{PROD2} + (\Delta H^{\circ}f_{REAC1} + \Delta H^{\circ}f_{REAC2}) \quad (1)$$

1.5 CÁLCULOS DE QUÍMICA CUÁNTICA

Los métodos de química cuántica son utilizados para analizar las interacciones entre los núcleos, entre los electrones y entre núcleos y electrones. La química cuántica aproxima la solución de la ecuación de Schrödinger para obtener la energía y la función de onda que describen al sistema molecular. A partir de la función de onda se calculan propiedades moleculares y electrónicas del sistema. Los procedimientos de solución de la ecuación de Schrödinger se clasifican en semiempíricos, *ab initio* y el método de los funcionales de la densidad electrónica (DFT: *density functional theory*) [14].

El principio de los métodos DFT asume que la energía de una molécula es determinada por la densidad de los electrones, en lugar de utilizar la función de onda, según los teoremas de Hohenberg y Khon [15]. La precisión de los resultados de los cálculos por DFT varía, dependiendo del funcional y la base que se elijan. El funcional híbrido *B3LYP* es el más usado en cálculos moleculares debido a la precisión de sus resultados para una gran variedad de compuestos, particularmente moléculas orgánicas [16].

De otro lado, la función base representa a los orbitales moleculares y atómicos. Las aproximaciones comúnmente utilizadas para las bases corresponden a las de tipo STO (“*Slater type Orbitals*”) o tipo GTO (“*Gaussian Type Orbitals*”). La tabla 1 describe dos funciones base utilizadas en cálculos DFT. Un cálculo molecular

utilizando el funcional B3LYP y la base 6-31G(d) se especifica con B3LYP/6-311++G(d,p).

Tabla 1. Especificaciones de funciones base

Función base	Descripción
6-31G (d)	Es una base con doble-zeta para los orbitales de valencia, con 6 funciones Gaussianas para los electrones internos, y para los electrones de valencia dos conjuntos de funciones, una de 3 gaussianas contraídas y 1 Gaussiana sin contraer, incluyendo además funciones de polarización sobre los elementos de la segunda fila.
6-311++G (d, p)	Es una base con triple-zeta para los orbitales de valencia, con 6 funciones Gaussianas para los electrones internos, y para los electrones de valencia tres conjuntos de funciones, una de 3 gaussianas contraídas y dos (11) Gaussianas sin contraer, con funciones difusas sobre los átomos (++) y funciones de polarización <i>d</i> sobre los elementos de la segunda fila y <i>p</i> sobre los hidrógenos.

1.6 PROGRAMA COMPUTACIONAL GAUSSIAN

El programa computacional *Gaussian* permite el cálculo de propiedades de átomos y moléculas, fundamentalmente mediante métodos de química cuántica [13]. *Gaussian* ha sido utilizado en diferentes artículos para el cálculo de geometrías y energías moleculares [17][18][19]. Este programa comercialmente se presenta como:

- 1- Paquete de cálculo: *Gaussian 03*, *Gaussian 09*.
- 2- Paquete graficador: *GaussView*, que se utiliza para el diseño de las moléculas y la ejecución del paquete computacional *Gaussian*.

En el anexo A se presenta una descripción más detallada del paquete *Gaussian*.

1.7 REGRESIÓN LINEAL MÚLTIPLE

El análisis de regresión lineal múltiple permite establecer la relación entre una variable dependiente “Y” y un conjunto de variables independientes (X_1, X_2, \dots, X_i). Una manera de representar el modelo de regresión lineal múltiple corresponde a:

Figura 4. Representación matricial del modelo de regresión lineal múltiple.

$$\begin{array}{l} Y_1 = \beta_0 + \beta_1 x_1 + e_1 \\ Y_2 = \beta_0 + \beta_1 x_2 + e_2 \\ \vdots \\ Y_n = \beta_0 + \beta_1 x_n + e_n \end{array} \longrightarrow \begin{array}{l} \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix} \end{array}$$

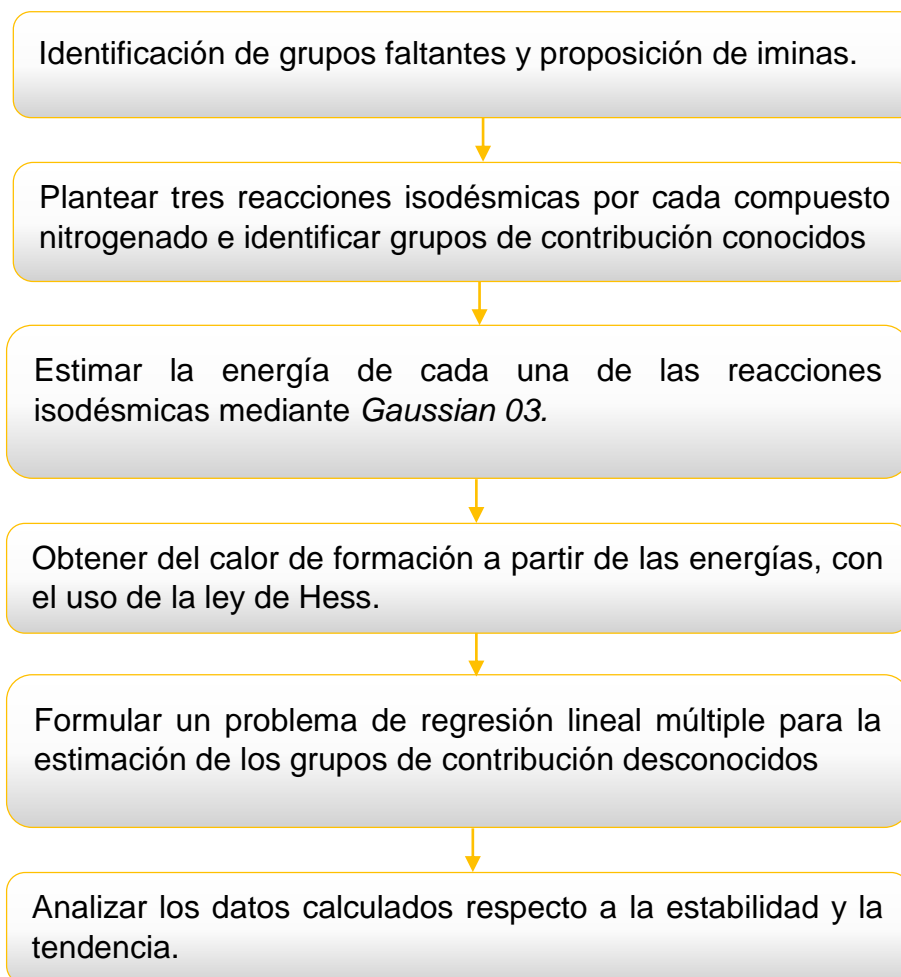
$Y = X\beta + \varepsilon$ (2)

Para hallar los parámetros desconocidos β , se aplica el algoritmo de mínimos cuadrados, el cual puede ser expresado en notación matricial, según [20],

$$\beta = (X^T X)^{-1} X^T Y \quad (3)$$

2. MARCO METODOLÓGICO

Figura 5. Esquema de la metodología utilizada.



2.1 IDENTIFICACIÓN DE GRUPOS FALTANTES Y PROPOSICIÓN DE IMINAS

Los grupos de contribución faltantes para las iminas fueron identificados según una consulta realizada en diferentes artículos y libros [4]-[21]-[22]. Seguidamente, se propusieron iminas (74 en total) con las estructuras correspondientes a los grupos

desconocidos. Con esto, una matriz inicial, en la cual se expresa la cantidad de veces que se repite cada grupo de contribución en cada compuesto formulado, fue establecida para el proceso de regresión lineal múltiple.

2.2 FORMULACIÓN DE REACCIONES ISODÉSMICAS

La predicción de los calores de formación de los compuestos, fue realizada a partir de tres reacciones isodésmicas para cada uno (222 reacciones). El calor de formación para cada estructura fue promediado según estas reacciones (con la ayuda de la ley de Hess). A partir de esto, una segunda matriz, en la cual se expresa el promedio de grupos de contribución, que fue planteada para relacionar el calor de formación desconocido con otras estructuras.

2.3 GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN CONOCIDOS Y DESCONOCIDOS

El desglose de los compuestos nitrogenados en sus grupos de contribución reportó grupos de contribución desconocidos y conocidos. Estos grupos a su vez se encuentran presentes en cada una de las reacciones isodésmicas por lo que los calores de formación fueron expresados en dos matrices.

2.4 CÁLCULOS DE LAS ENERGÍAS

El software *Gaussian03* y su visualizador *GaussView* fueron utilizados para la construcción de las moléculas y el cálculo de las geometrías y las energías de los compuestos implicados en las reacciones isodésmicas. Los cálculos fueron aplicados al nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p) [23]–[24]. Es importante

mencionar que la estabilidad de las estructuras fue verificada por medio del cálculo de frecuencias vibracionales (positivas) al mismo nivel de teoría.

2.5 CÁLCULOS DE GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DESCONOCIDOS

Con los valores de las energías y las matrices de las actividades 2.1 y 2.2, se procede a ajustar el valor de cada grupo de contribución mediante una regresión lineal múltiple.

Matriz compuestos nitrogenados:

$$\Delta H_M^0 = A_{1D} (X_D) + b_1 \quad (4)$$

$$\begin{bmatrix} \Delta H_{M1}^0 \\ \Delta H_{M2}^0 \\ \vdots \\ \Delta H_{Mi}^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 1 & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} GC_{D1} \\ GC_{D2} \\ \vdots \\ GC_{Di} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} GC_{c1} \\ GC_{c2} \\ \vdots \\ GC_{ci} \end{bmatrix}$$

Donde A_{1D} es la matriz de número de veces que se repiten los X_D (grupos de contribución desconocidos) y b_1 son aquellos grupos de contribución conocidos.

Matriz reacciones isodésmicas:

$$\Delta H_M^0 = A_{2D} (X_D) + b_2 \quad (5)$$

$$\begin{bmatrix} \Delta H_{M1}^0 \\ \Delta H_{M2}^0 \\ \vdots \\ \Delta H_{Mi}^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/3 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 2 & \dots & 2/3 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 2 & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} GC_{D1} \\ GC_{D2} \\ \vdots \\ GC_{Di} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \overline{\Delta H}_{rxn1} + GC_{c1} \\ \overline{\Delta H}_{rxn2} + GC_{c2} \\ \vdots \\ \overline{\Delta H}_{rxni} + GC_{ci} \end{bmatrix}$$

Donde A_{2D} es el número de repeticiones de los X_D (grupos de desconocidos) en las reacciones isodésmicas promediadas de cada compuesto y b_2 corresponde a la

suma del promedio de la energía de cada reacción (ΔH_{rxn}) y los grupos de contribución conocidos. Igualando 4 y 5 se obtiene el sistema para aplicar la regresión lineal múltiple, según:

$$A_{1D}(X_D) + b_1 = A_{2D}(X_D) + b_2$$

$$(A_{2D} - A_{1D})X_D = b_1 - b_2$$

$$A(X_D) = Y$$

$$X_D = (A^T A)^{-1} A^T Y$$

2.6 ANÁLISIS DE DATOS

Los intervalos de confianza de los grupos de contribución calculados, fueron estimados para obtener el rango de confianza respectivo [25]. Para cualquier parámetro, el intervalo de confianza de $(1-\alpha)$ 100 % está dado por

$$\hat{\beta}_j - t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{MSE \cdot C_{jj}} \leq \beta_j \leq \hat{\beta}_j + t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{MSE \cdot C_{jj}} \quad (7)$$

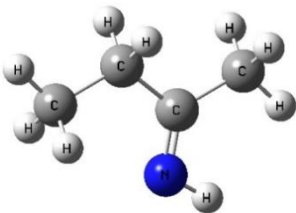

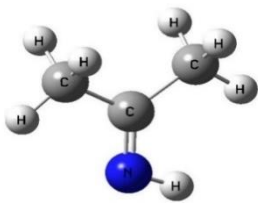
En este caso se utilizó la tabla de distribución *t-student*, con un nivel de confianza del 95 %.

3. ANÁLISIS DE RESULTADOS

3.1 GEOMETRÍAS

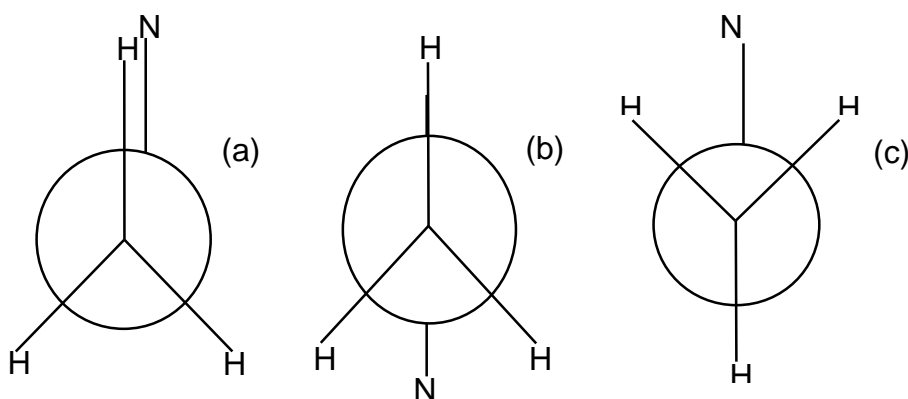
Se plantearon 74 compuestos tipo imina, de los cuales la Tabla 2 expone los tres primeros para explicar algunas características estructurales obtenidas al nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p); la lista completa de los compuestos formulados se encuentra en el anexo B.

Tabla 2. Características estructurales de los compuestos 1-2-3.

Estructura y nombre	Características
<p>1. Butan-2-imina</p> 	<p>El compuesto nitrogenado presenta una estructura estable debido a que exhibe frecuencias vibracionales positivas (entre 67.2 y 3435.3) y ángulos entre los átomos constituyentes en un rango de 107.67° y 135.69°.</p>
<p>2. 4-metilpentan-2-imina</p> 	<p>El compuesto nitrogenado presenta una estructura estable debido a que exhibe frecuencias vibracionales positivas (entre 46.9 y 3424.8) y ángulos entre los átomos constituyentes en un rango de 66.36° y 124.68°.</p>
<p>3. Propan-2-imina</p> 	<p>El compuesto nitrogenado presenta una estructura estable debido a que exhibe frecuencias vibracionales positivas (entre 114.7 y 3428.6) y ángulos entre los átomos constituyentes en un rango de 52.96° y 125.11°.</p>

La mayoría de los 74 compuestos planteados presentaron estructuras estables (mínima energía local y frecuencias vibracionales positivas), exhibiendo posiciones eclipsadas con el grupo funcional NH (Figura 6); en tales estructuras, las cargas de cada uno de los átomos constituyentes se mantuvieron equilibradas debido a interacciones entre átomos no enlazados. Asimismo, pocas estructuras reportaron estabilidad en posición escalonada o *gauche* con el grupo NH (Figura 6). De otro lado, los cálculos reportaron que moléculas que presentaban en su estructura la configuración $R-C\equiv C-R'$, presentaban pocas posiciones de estabilidad.

Figura 6. Proyección de Newman para las estructuras tipo imina, eclipsada (a), escalonada (b) y conformación *Gauche* (c).



3.2 GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN

Las 74 moléculas fueron expresadas en sus respectivos grupos de contribución; con esto se encontraron un total de 42 grupos de contribución, de los cuales, 17 se encontraron conocidos y 25 desconocidos o no reportados en la literatura. En la tabla 3, se expresa el calor de formación para los tres primeros compuestos nitrogenados en términos de sus grupos de contribución.

Tabla 3. Grupos de contribución

Molécula	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
1	$\Delta H_f^\circ = C_{DN}/C_2 + C/C_{DN}/H_3 + C/C_{DN}/C/H_2 + N_{DC}/H + C/C/H_3$
2	$\Delta H_f^\circ = C/C_{DN}/H_3 + C_{DN}/C_2 + N_{DC}/H + C/C_{DN}/C/H_2 + C/C_3/H + 2(C/C/H_3)$
3	$\Delta H_f^\circ = 2(C/C_{DN}/H_3) + C_{DN}/C_2 + N_{DC}/H$

En las Tablas 3 y 4, se pueden observar los grupos de contribución desconocidos y conocidos, respectivamente.

Tabla 4. Grupos de contribución conocidos

Grupos de contribución			
1	C_{DN}/C_2	13	$C/(C_{DN})_2/H_2$
2	$C/C_{DN}/H_3$	14	$C_{DN}/C_{DN}/C$
3	$C/C_{DN}/C/H_2$	15	$C/N_{DC}/C/H_2$
4	$C/N_{DC}/H_3$	16	$C_{DN}/C_T/C_d$
5	$C_d/C_{DN}/H$	17	$C_d/C_{DN}/C$
6	$C_{DN}/C_d/C$	18	$C/N_{DC}/C_D/H_2$
7	C_T/C_{DN}	19	$C_{DN}/C_D/H$
8	$C_{DN}/C_T/C$	20	$C_{DN}/C_T/H$
9	N_{DC}/C_d	21	C_{DN}/H_2
10	$C_d/N_{DC}/H$	22	$C_{DN}/C/H$
11	$N_{DC}/C_T + C_T/N_{DC}$	23	$C/C_{DN}/C_D/H_2$
12	$C_{DN}/C_{DN}/H$	24	$C/C_{DN}/C_T/H_2$
		25	$C_{DN}/(C_D)_2$

Tabla 5. Grupos de contribución conocidos.

Grupos de contribución		ΔH_f° [kcal/mol]
26	$C/C_T/H_3$	-10.1
27	C_T/C	27.6
28	$C/C/H_3$	-10.1
29	C_d/H_2	6.3
30	C_T/H	26.9
31	$C/C_3/H$	-1.9
32	$C/C_2/H_2$	-4.95
33	N_{DC}/H	16.3
34	N_{DC}/C	21.3
35	$C_d/C/H$	8.6
36	$C/C_d/H_3$	-10.1
37	$C/C_T/C/H_2$	-4.7
38	$C/C_d/C/H_2$	-4.8
39	$C_d/C_d/H$	6.8
40	$C/C_T/C/H_2$	-4.7
41	$C_D/C_T/H$	6.8
42	C_T/C_D	29.2

Durante esta etapa del trabajo, los dos grupos ($N_{DC}/C_T + C_T/N_{DC}$) fueron encontrados al mismo tiempo en compuestos similares con triple enlace $C\equiv C$ unido a N; estos dos grupos considerados por aparte condujeron a un proceso de regresión sin matriz invertible. Con lo cual, los dos grupos fueron expresados como uno solo.

3.3 REACCIONES ISODÉSMICAS

Tres reacciones isodésmicas fueron planteadas por cada compuesto nitrogenado; la Tabla 6 presenta las tres reacciones isodésmicas para los tres primeros compuestos. Luego de formular las reacciones isodésmicas, se calcularon las energías de los reactivos y productos al nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p); la Tabla 7 reporta algunos de los valores de las energías para las reacciones isodésmicas de las tres primeras estructuras (el Anexo C presenta los resultados para los compuestos restantes). El valor de la energía reportada en esta tabla corresponde a la energía en condiciones estándar; *i.e.* la energía incluye las contribuciones por vibración, rotación y traslación.

Tabla 6. Reacciones isodésmicas.

MOLÉCULA 1					
	REACTIVOS			PRODUCTOS	
Reacción 1	(CH ₃) ₂ CNH	+	(CH ₃) ₂	→	CH ₃ (CH ₂ CH ₃)CNH + CH ₄
Reacción 2	CH ₃ (H)CNH	+	(CH ₃) ₂ CH ₂	→	CH ₃ (CH ₂ CH ₃)CNH + CH ₄
Reacción 3	CH ₂ CH ₃ (H)CNH	+	(CH ₃) ₂	→	CH ₃ (CH ₂ CH ₃)CNH + CH ₄
MOLÉCULA 2					
	REACTIVOS			PRODUCTOS	
Reacción 1	(CH ₃) ₂ CH ₂	+	CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₃	→	CH ₃ CH(CH ₃)CH ₂ (CH ₃)CNH + CH ₄
Reacción 2	CH ₃ (CH ₂) ₂ (CH ₃)CNH	+	(CH ₃) ₂	→	CH ₃ CH(CH ₃)CH ₂ (CH ₃)CNH + CH ₄
Reacción 3	CH ₃ CH(CH ₃)CH ₂ (H)CNH	+	(CH ₃) ₂	→	CH ₃ CH(CH ₃)CH ₂ (CH ₃)CNH + CH ₄
MOLÉCULA 3					
	REACTIVOS			PRODUCTOS	
Reacción 1	CH ₃ (H)CNH	+	(CH ₃) ₂	→	(CH ₃) ₂ CNH + CH ₄
Reacción 2	(H) ₂ CNH	+	(CH ₃) ₂ CH ₂	→	(CH ₃) ₂ CNH + CH ₄
Reacción 3	CH ₃ CH ₂ (CH ₃)CNH	+	CH ₄	→	(CH ₃) ₂ CNH + CH ₄

Tabla 7. Energía de productos y reactivos al nivel de teoría B3LYP/6311++G (d, p).*

		REACCIÓN	ENERGÍA	REACTIVOS		PRODUCTOS		ΔH_{RXN} [hartrees]	ΔH_{RXN} [kcal/mol]
MOLÉCULA 1	1	$\Delta E1$		C ₃ H ₇ N	C ₂ H ₆	C ₄ H ₉ N	CH ₄	-0.00206	-1.29
				-173.23	-79.78	-212.52	-40.49		
	2	$\Delta E2$		C ₂ H ₅ N	C ₃ H ₈	C ₄ H ₉ N	CH ₄	-0.01001	-6.28
				-133.93	-119.07	-212.52	-40.49		
	3	$\Delta E3$		C ₃ H ₇ N	C ₂ H ₆	C ₄ H ₉ N	CH ₄	-0.010908	-6.84
				-173.22	-79.78	-212.52	-40.49		

		REACCIÓN	ENERGÍA	REACTIVOS		PRODUCTOS		ΔH_{RXN} [hartrees]	ΔH_{RXN} [kcal/mol]
MOLÉCULA 2	1	$\Delta E1$		C ₃ H ₇ N	C ₄ H ₁₀	C ₆ H ₁₃ N	CH ₄	-0.00131	-0.82
				-173.23	-158.37	-291.11	-40.49		
	2	$\Delta E2$		C ₅ H ₁₁ N	C ₂ H ₆	C ₆ H ₁₃ N	CH ₄	-0.00345	-2.17
				-251.82	-79.78	-291.11	-40.49		
	3	$\Delta E3$		C ₅ H ₁₁ N	C ₂ H ₆	C ₆ H ₁₃ N	CH ₄	-0.01157	-7.26
				-251.81	-79.78	-291.11	-40.49		

		REACCIÓN	ENERGÍA	REACTIVOS		PRODUCTOS		ΔH_{RXN} [hartrees]	ΔH_{RXN} [kcal/mol]
MOLÉCULA 3	1	$\Delta E1$		C ₂ H ₅ N	C ₂ H ₆	C ₃ H ₇ N	CH ₄	-0.010623	-6.67
				-133.93	-79.78	-173.23	-40.49		
	2	$\Delta E2$		CH ₃ N	C ₃ H ₈	C ₃ H ₇ N	CH ₄	-0.022457	-14.09
				-94.62	-119.07	-173.23	-40.49		
	3	$\Delta E3$		C ₄ H ₉ N	CH ₄	C ₃ H ₇ N	C ₂ H ₆	0.001875	1.18
				-212.52	-40.49	-173.23	-79.78		

* 1 Hartree=627.51 kcal/mol.

3.4 GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN

Parte de las matrices correspondientes a la expresión de los calores de formación de las 74 moléculas y a los calores de formación para las mismas obtenidos de las reacciones isodésmicas son reportadas en las Tablas 8 y 9, respectivamente; en el Anexo E y F se presentan las matrices completas. El proceso de regresión considerando estas matrices (metodología) condujo a la obtención de los grupos desconocidos; sus respectivos valores junto con los intervalos de confianza (95 %)

son presentados en la Tabla 10. Asimismo, la Tabla 11 presenta algunas de las energías de reacción halladas al nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p), las calculadas utilizando los grupos de contribución obtenidos por RLM y su respectivo porcentaje de error considerando la estimación cuántica como la exacta (la tabla completa se reporta en el anexo G).

Tabla 8. Matriz de compuestos nitrogenados expresados en sus grupos de contribución conocidos y desconocidos

MOLECULA	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
C_{DN}/C_2	1	1	1	1			1	1	1	1	1	1
$C/C_{DN}/H_3$	1	1	2	2	1	1	2	1	1	1	2	1
$C/C_{DN}/C/H_2$	1	1		1	1	1			1	1		1
$C/N_{DC}/H_3$				1	1	1						
$C_d/C_{DN}/H$					1			1				
$C_{DN}/C_d/C$					1							
C_T/C_{DN}						1						
$C_{DN}/C_T/C$						1						
N_{DC}/C_d							1		1			
$C_d/N_{DC}/H$							1	1	1			
N_{DC}/C_T+										1	1	1
$C_{DN}/C_{DN}/H$												
$C/(C_{DN})_2/H_2$												
$C_{DN}/C_{DN}/C$												
$C/N_{DC}/C/H_2$												
$C_{DN}/C_T/C_d$												
$C_d/C_{DN}/C$												
$C/N_{DC}/C_d/H_2$												
$C_{DN}/C_d/H$												
$C_{DN}/C_T/H$												
C_{DN}/H_2												
$C_{DN}/C/H$												
$C/C_{DN}/C_d/H_2$												
$C/C_{DN}/C_T/H_2$												
$C_{DN}/(C_d)_2$												
Suma de	0.7	-5.0	0.5	8.1	24.6	41.2	-6.5	0.4	-4.9	9.1	-8.4	-4.2

Tabla 9. Reacciones isodésmicas expresadas en sus grupos de contribución desconocidos y el promedio de ΔH_{RXN} más grupos de contribución conocidos

MOLÉCULA	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
----------	---	---	---	---	---	---	---	---	---	----	----	----

$\Delta H^{\circ}_{f_{MDES}}$ [kcal/mol]												
C_{DN}/C_2	1/3					1/3						
$(C/C_{DN}/H_3)$	2/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	2/3	1/3	1/3
$C/C_{DN}/C/H_2$	1/3	2/3			1/3							
$C/N_{DC}/H_3$				1/3	2/3	1/3						
$C_D/C_{DN}/H$					2/3				2/3			
$C_{DN}/C_D/C$					2/3				1/3			
C_T/C_{DN}						2/3						
$C_{DN}/C_T/C$						1/3						
N_{DC}/C_D							2/3	2/3	2/3			
$C_D/N_{DC}/H$							2/3	2/3	2/3			
$N_{DC}/C_T + C_T/N_{DC}$										1	2/3	1
$C_{DN}/C_{DN}/H$												
$C/(C_{DN})_2/H_2$												
$C_{DN}/C_{DN}/C$												
$C/N_{DC}/C/H_2$						1/3						
$C_{DN}/C_T/C_D$												
$C_D/C_{DN}/C$												
$C/N_{DC}/C_D/H_2$												
$C_{DN}/C_D/H$									1/3			
$C_{DN}/C_T/H$						1/3						
C_{DN}/H_2							1/3			1/3	1/3	2/3
$C_{DN}/C/H$	1/3	1/3	1/3	1/3			1/3		1/3	2/3	1/3	1/3
$C/C_{DN}/C_D/H_2$												
$C/C_{DN}/C_T/H_2$												
$C_{DN}/(C_D)_2$												
Promedio de ΔH_{RXN} [kcal/mol]	-5.3	-9.2	5.8	5.0	24.6	41.1	-8.5	1.1	-9.8	9.2	-10.5	-4.2

Tabla 10. Valores de los grupos de contribución obtenidos por RLM.

Grupos de contribución					
1	C_{DN}/C_2	-46.41 ± 5.94		14	$C_{DN}/C_{DN}/C$ -24.00 ± 3.43

2	(C/C _{DN} /H ₃)	14.75 ± 3.17	15	C/ N _{DC} /C/H ₂	-8.11 ± 2.81
3	C/C _{DN} /C/H ₂	21.51 ± 3.36	16	C _{DN} /C _T /C _D	87.60 ± 15.41
4	C/N _{DC} /H ₃	-12.34 ± 2.84	17	C _D /C _{DN} /C	-9.85 ± 5.33
5	C _D /C _{DN} /H	-5.85 ± 3.12	18	C/N _{DC} /C _D /H ₂	-1.48 ± 3.35
6	C _{DN} /C _D /C	-8.54 ± 3.87	19	C _{DN} /C _D /H	-0.36 ± 2.78
7	C _T /C _{DN}	-61.89 ± 12.75	20	C _{DN} /C _T /H	82.15 ± 15.08
8	C _{DN} /C _T /C	50.50 ± 14.06	21	C _{DN} /H ₂	5.95 ± 3.08
9	N _{DC} /C _D	0.14 ± 5.43	22	C _{DN} /C/H	-23.57 ± 4.33
10	C _D /N _{DC} /H	8.58 ± 5.52	23	C/C _{DN} /C _D /H ₂	20.42 ± 4.78
11	N _{DC} /C _T + C _T /N _{DC}	25.36 ± 3.64	24	C/C _{DN} /C _T /H ₂	18.58 ± 4.25
12	C _{DN} /C _{DN} /H	-20.18 ± 2.90	25	C _{DN} /(C _D) ₂	14.42 ± 6.48
13	C/(C _{DN}) ₂ /H ₂	53.28 ± 7.09			

Tabla 11. Reportes de error de energía de formación entre método cuántico y grupos de contribución.

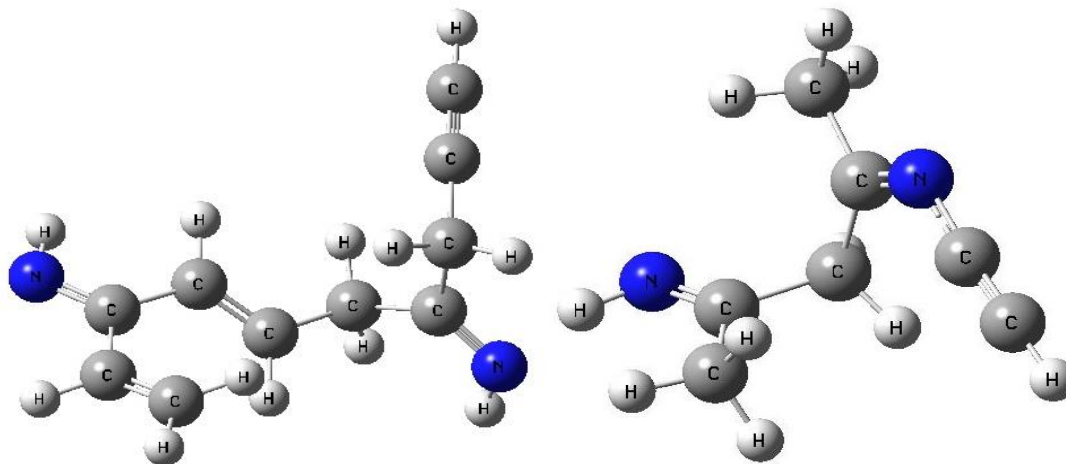
Molécula	Reacción	Energía por método DFT [kcal/mol]	Energía por grupos de contribución [kcal/mol]	ERROR %
1	2	-6.28	-4.22	33%
	3	-6.84	-5.84	15%
2	2	-2.17	-4.79	121%
	3	-7.26	-5.84	20%
3	1	-6.67	-5.84	12%
	2	-14.09	-15.66	11%
4	1	-2.81	-5.84	108%
	2	-9.50	-15.66	65%
5	2	6.15	-5.84	10%
	3	1.20	-15.66	10%
6	1	-7.35	-14.65	99%
	2	3.12	3.61	16%
7	1	-12.61	-15.66	24%
	2	-7.55	-5.84	23%

Varios errores presentados en la Tabla 11 son apreciables, lo cual refiere que los valores para ciertos grupos de contribución deben ser corregidos; los grupos que deben ser corregidos pueden corresponder a los que reportan tamaños apreciables

en sus intervalos de confianza (Tabla 10). Los errores reportados por los grupos de contribución obtenidos en el presente trabajo se deben a que, para ciertos compuestos, las estructuras pueden ser diferentes a las de sus isómeros más estables (*i.e.* la estructura de mínima global). Asimismo, aunque los métodos DFT presentan un grado de exactitud apreciable para compuestos orgánicos [14], en sistemas con átomos pesados, sistemas altamente cargados o sistemas muy sensibles a la correlación electrónica, sus resultados pueden no ser satisfactorios [24].

También, los errores obtenidos en los grupos de contribución calculados se deben a las interacciones entre átomos no enlazados [19], las cuales no fueron consideradas de forma explícita en las matrices del proceso RLM. La Figura 7 ilustra las geometrías para las moléculas 28 y 60, en donde es posible apreciar interacciones entre átomos no enlazados referentes a eclipses entre el H del nitrógeno y un H cercano (Figura 7a) y eclipse entre C del nitrógeno y el C del carbono doble enlace de la imina (Figura 7b). Estas interacciones pueden contener valores apreciables que afectan significativamente los valores de los grupos de contribución calculados [19]. Por lo anterior, un trabajo posterior que corrija los valores de los grupos de contribución calculados para las iminas debería considerar estas interacciones entre átomos no enlazados.

Figura 7. (a) compuesto 60 y (b) compuesto 28.



En la tabla 12 se muestran los calores de formación estándar obtenidos mediante la suma de los grupos de contribución calculados en el presente trabajo (Tabla 10).

Los calores de formación experimentales para tres iminas fueron encontrados en el Webbook Nist [25] La Tabla 13 y 14 presentan la comparación para el calor de formación reportado en la literatura y el obtenido en el presente trabajo por medio de los grupos de contribución y por medio de las reacciones isodésmicas. De esta tabla es posible inferir que el valor obtenido por grupos de contribución y por reacciones isodésmicas difiere de los reportados por el Nist [25] y presentan una diferencia considerable (porcentajes de error entre el 9 % y 30 %). Estos errores corresponden a la carencia de términos de interacciones entre átomos no enlazados en los grupos de contribución de las moléculas respectivas [19]. La inclusión de estas interacciones conllevaría a la consecución de errores inferiores al 0.5%.

Tabla 12. Valor de calor de formación estándar para los 74 compuestos nitrogenados tipo imina.

Molécula	Calor de formación [kcal/mol]	Molécula	Calor de formación [kcal/mol]	Molécula	Calor de formación [kcal/mol]
1	-3.93	26	57.26	51	28.57
2	-15.92	27	35.96	52	55.28
3	-0.61	28	58.57	53	2.26
4	-7.93	29	45.40	54	61.72
5	15.60	30	57.26	55	126.01
6	39.29	31	73.28	56	9.08
7	-1.92	32	37.27	57	4.12
8	4.92	33	19.14	58	20.94
9	-5.24	34	35.96	59	101.66
10	32.08	35	73.28	60	97.29
11	25.94	36	15.16	61	80.56
12	22.61	37	11.84	62	100.17
13	-15.07	38	37.14	63	31.55
14	-20.93	39	38.33	64	65.43
15	14.10	40	69.37	65	40.65
16	15.24	41	46.61	66	84.24
17	11.00	42	22.92	67	81.90
18	48.32	43	-6.61	68	34.75
19	29.95	44	33.38	69	9.88
20	4.44	45	-31.96	70	14.93
21	13.93	46	42.47	71	117.48
22	51.25	47	55.17	72	50.85
23	29.95	48	47.39	73	94.70
24	21.25	49	37.70	74	65.83
25	13.93	50	37.70		

Tabla 13. Comparación de calor de formación estándar.

Molécula	Grupos de contribución	ΔH_f° Webbook Nist [kcal/mol]	ΔH_f° grupos de contribución [kcal/mol]	ΔH_f° reacciones isodésmicas [kcal/mol]
Acetaldimina	$\Delta H_f^\circ = C/C_{DN}/H_3 + C_{DN}/C/H + N_{DC}/H$	5.74	7.48 ± 2.74	7.48 ± 2.77
Metanimina	$\Delta H_f^\circ = C_{DN}/H_2 + N_{DC}/H$	26.29	22.25 ± 3.08	24.10 ± 7.5
N-Metilmetanimina	$\Delta H_f^\circ = C_{DN}/H_2 + N_{DC}/C + C/N_{DC}/H_3$	10.52	14.93 ± 2.43	14.68 ± 10.34

Tabla 14. Reporte de error

% ERROR (grupos de contribución)	% ERROR (reacciones isodésmicas)
23 %	23 %
18 %	9 %
30 %	28 %

4. CONCLUSIONES

La metodología propuesta en el presente trabajo para la consecución de los grupos de contribución desconocidos para los compuestos tipo imina utilizando reacciones isodésmicas y valores de energía obtenidos al nivel de teoría B3LYP/6-31++G(d,p) conlleva a la estimación de calores de formación útiles en aplicaciones semicuantitativas. Asimismo, los errores en las estimaciones de los calores de reacción y en los intervalos de confianza de los grupos calculados sugieren la inclusión de interacciones entre átomos no enlazados para la estimación adecuada de los respectivos calores de formación.

Los resultados obtenidos en el presente trabajo recomiendan la inclusión de términos de contribución relacionados con las interacciones entre átomos no enlazados en la metodología propuesta. También, la metodología propuesta puede ser aplicada a otros tipos de estructuras con el objetivo de ampliar la base de datos disponible para la estimación de calores de formación por medio de los grupos de contribución.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- [1] Benson, S. W., Cruickshank, F. R., Golden, D. M., Haugen, G. R., O'neal, H. E., Rodgers, A. S. & Walsh, R. (1969). Additivity rules for the estimation of thermochemical properties. *Chemical Reviews*, 69(3), 279-324.
- [2] Cohen, N. (1996). Revised group additivity values for enthalpies of formation (at 298 K) of carbon–hydrogen and carbon–hydrogen–oxygen compounds. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 25(6), 1411-1481.
- [3] Elioff, M. S., Hoy, J., & Bumpus, J. A. (2016). Calculating Heat of Formation Values of Energetic Compounds: A Comparative Study. *Advances In Physical Chemistry*, 1-11.
- [4] Benson, S. W. (1968). *Thermochemical Kinetics, Methods for the Estimation of Thermochemical Data and Rate Parameters*.
- [5] IUPAC. *Compendium of Chemical Terminology*, 2nd edition (the Gold Book) Compiled by A.D. McNaught and A. Wilkinson, Oxford, Great Britain, 1997, XML on-line corrected version, <http://goldbook.iupac.org>
- [6] Ali, E., Naimi-Jamal, M., & Dekamin, M. (2013). Highly efficient and rapid synthesis of imines in the presence of nano-ordered MCM-41- SO₃H heterogeneous catalyst. *Scientia Iranica*, 20592-597. Págs 592-593.
- [7] Layer, R.W. (1963) "The chemistry of imines", *Chem. Rev.*, 63(5). Págs 489-510.

- [8] Jafari, M., & Keshavarz, M. (2016). Simple approach for predicting the heats of formation of high nitrogen content materials. *Fluid Phase Equilibria*, 415166-175.
- [9] Primo Yúfera, E., Jiménez, M. E., Hernández, M. R., H Zambrano, M. L., Mateus, N., Machado, S Ribiero, P. (1995). Química orgánica básica y aplicada: de la molécula a la industria. *Información Tecnológica* Vol. 12, no. 6 (2001), p. 47-50.
- [10] Bagheri, M., Yerramsetty, K., Gasem, K., & Neely, B. (2013). Molecular modeling of the standard state heat of formation. *Energy Conversion and Management*, 65587-596. doi: 10.1016/j.enconman.2012.07.014. Pág. 587.
- [11] HarsBook, A technical guide for the assessment of highly reactive chemical systems, Nomen, R. (coordinator), Dechema, Frankfurt 2003 (ISBN 3-89 746-0378).
- [12] Nomen, R., Bartra, M., Sempere, J., Serra, E., Sales, J., & Romero, X. (2005). The estimation of reaction enthalpy for complex molecules using Benson groups. *Journal of Thermal Analysis & Calorimetry*, 82(3), 581. doi:10.1007/s10973-005-0937-6. Págs. 581-582
- [13] Li, W., Yanjie, L., Hongqing, H., & Jinglai, Z. (2012). Hydrogen abstraction reactions of OH radicals with CH₃CH₂CH₂Cl and CH₃CHClCH₃: A mechanistic and kinetic study. *Journal Of Computational Chemistry*, 33(1), 66-75. doi:10.1002/jcc.21944. Págs. 68-69
- [14] Rocha, P. (2006). Modelamiento y simulación molecular utilizando paquetes computacionales como instrumento de cálculo de diferentes propiedades energéticas y eléctricas para la predicción del comportamiento de diferentes clases de moléculas. Universidad industrial de Santander. Págs. 15-16.

[15] Meneses, L. (2015). *Estudio espectroscópico computacional de resonancia magnética nuclear del ibuprofeno y sus principales precursores químicos*. Revista Tecnológica-ESPOL, 28(2). Págs. 110-111.

[16] Young, D. (2001). *Computational Chemistry A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*, John Wiley & Sons Inc., USA, pp 1, 3, 19, 86, 113.

[17], [22] Shuhua, H., Ying, T., Xiuchan, X., Lijuan, Z., Yanzhi, G., Menglong, L., & ... Ning-Bew, W. (2010). Substituent effects on electronic character of the C=N group and trans/cis isomerization in the C-substituted imine derivatives: A computational study. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 951(1). Págs.8-9

[18], [23] Kaur, D., Kaur, R., & Kohli, R. (2009). Substituent effect on N-H bond dissociation enthalpies of amines and amides: a theoretical study. *International Journal of Quantum Chemistry*, 109(3). Págs. 560-561.

[19] Morales, G., & Martínez, R. (2009). Thermochemical Properties and Contribution Groups for Ketene Dimers and Related Structures from Theoretical Calculations. *The Journal of Physical Chemistry A*, 113(30), 8683-8703. Págs 8684-8685

[20] Pérez, Á. A. J., Kizys, R., & Manzanedo, L. (2015). *Regresión lineal múltiple*. Barcelona. Universidad Abierta de Cataluña. Págs.3-5

[21] Poling, B. E., Prausnitz, J. M., John Paul, O. C., & Reid, R. C. (2001). *The properties of gases and liquids (Vol. 5)*. New York: McGraw-Hill.

[22] Joback, K. G., & Reid, R. C. (1987). Estimation of pure-component properties from group-contributions. *Chemical Engineering Communications*, 57(1-6), 233-243.

[23], [25] Walpole, R. E., Myers, R. H., Myers, S. L., & Ye, K. (2007). *Probabilidad y estadística para ingeniería y ciencias* (No. TA430. P76 2012.). Pearson Education. Págs.263-265.

[24] Balbuena, P. Jorge M. Seminario, Density functional theory: Further applications, In: J.M. Seminario and P. Politzer, Editor(s), *Theoretical and Computational Chemistry*, Elsevier, 1995, Volume 2, Págs 383-401.

[25] NIST chemistry webbook [electronic resource]. (1997). Washington, D.C.: National Institute of Standards and Technology.

BIBLIOGRAFIA

ALI, E., NAIMI-JAMAL, M., y DEKAMIN, M. Highly efficient and rapid synthesis of imines in the presence of nano-ordered MCM-41- SO₃H heterogeneous catalyst. *Scientia Iranica*, 20592-597. 2013 Págs 592-593.

BAGHERI, M., YERRAMSETTY, K., GASEM, K., t NEELY, B. Molecular modeling of the standard state heat of formation. *Energy Conversion and Management*, 65587-596. doi: 10.1016/j.enconman.2012.07.014. 2013 Pág. 587.

BALBUENA, P. Jorge M. Seminario, Density functional theory: Further applications, In: J.M. Seminario and P. Politzer, Editor(s), *Theoretical and Computational Chemistry*, Elsevier, Volume 2, 1995 Págs 383-401.

BENSON, S. W. *Thermochemical Kinetics, Methods for the Estimation of Thermochemical Data and Rate Parameters*. 1968

BENSON, S. W., CRUICKSHANK, F. R., GOLDEN, D. M., HAUGEN, G. R., O'NEAL, H. E., RODGERS, A. S. y WALSH, R. (). Additivity rules for the estimation of thermochemical properties. *Chemical Reviews*, 69(3), 279-324. 1969

COHEN, N. Revised group additivity values for enthalpies of formation (at 298 K) of carbon–hydrogen and carbon–hydrogen–oxygen compounds. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 25(6), 1411-1481. 1996

ELIOFF, M. S., HOY, J., y BUMPUS, J. A. Calculating Heat of Formation Values of Energetic Compounds: A Comparative Study. *Advances In Physical Chemistry*, 1-11. 2016

HARSBOOK, A technical guide for the assessment of highly reactive chemical systems, Nomen, R. (coordinator), Dechema, Frankfurt 2003 ISBN 3-89 746-0378

IUPAC. Compendium of Chemical Terminology, 2nd edition (the Gold Book) Compiled by A.D. McNaught and A. Wilkinson, Oxford, Great Britain, 1997, XML on-line corrected version, <http://goldbook.iupac.org>

JAFARI, M., y KESHAVARZ, M. Simple approach for predicting the heats of formation of high nitrogen content materials. *Fluid Phase Equilibria*, 415166-175. 2016

JOBACK, K. G., y REID, R. C. (). Estimation of pure-component properties from group-contributions. *Chemical Engineering Communications*, 57(1-6), 233-243. 1987

KAUR, D., KAUR, R., y KOHLI, R. Substituent effect on N-H bond dissociation enthalpies of amines and amides: a theoretical study. *International Journal of Quantum Chemistry*, 109(3). 2009 Págs. 560-561.

LAYER, R.W. "The chemistry of imines", *Chem. Rev.*, 63(5). 1963 Págs 489-510.

LI, W., YANJIE, L., HONGQING, H., y JINGLAI, Z. Hydrogen abstraction reactions of OH radicals with CH₃CH₂CH₂Cl and CH₃CHClCH₃: A mechanistic and kinetic study. *Journal Of Computational Chemistry*, 33(1), 66-75. doi:10.1002/jcc.21944. 2012 Págs. 68-69

MENESES, L. *Estudio espectroscópico computacional de resonancia magnética nuclear del ibuprofeno y sus principales precursores químicos*. *Revista Tecnológica-ESPOL*, 28(2). 2015 Págs. 110-111.

MORALES, G., y MARTÍNEZ, R. Thermochemical Properties and Contribution Groups for Ketene Dimers and Related Structures from Theoretical Calculations. *The Journal of Physical Chemistry A*, 113(30), 8683-8703. 2009 Págs 8684-8685

NIST CHEMISTRY WEBBOOK [electronic resource]. Washington, D.C.: National Institute of Standards and Technology. 1997

NOMEN, R., BARTRA, M., SEMPERE, J., SERRA, E., SALES, J., y ROMERO, X. The estimation of reaction enthalpy for complex molecules using Benson groups. *Journal of Thermal Analysis & Calorimetry*, 82(3), 581. doi:10.1007/s10973-005-0937-6. 2005 Págs. 581-582

PÉREZ, Á. A. J., KIZYS, R., y MANZANEDO, L. Regresión lineal múltiple. Barcelona. Universidad Abierta de Cataluña. 2015 Págs.3-5

POLING, B. E., PRAUSNITZ, J. M., JOHN PAUL, O. C., y REID, R. C. The properties of gases and liquids (Vol. 5). New York: McGraw-Hill. 2001

PRIMO YÚFERA, E., JIMÉNEZ, M. E., HERNÁNDEZ, M. R., H ZAMBRANO, M. L., MATEUS, N., MACHADO, S RIBIERO, P. Química orgánica básica y aplicada: de la molécula a la industria. *Información Tecnológica* Vol. 12, no. 6 (2001), 1995 p. 47-50.

ROCHA, P. Modelamiento y simulación molecular utilizando paquetes computacionales como instrumento de cálculo de diferentes propiedades energéticas y eléctricas para la predicción del comportamiento de diferentes clases de moléculas. Universidad industrial de Santander. 2006 Págs. 15-16.

SHUHUA, H., YING, T., XIUCHAN, X., LIJUAN, Z., YANZHI, G., MENGLONG, L., y ... NING-BEW, W. Substituent effects on electronic character of the C=N group and

trans/cis isomerization in the C-substituted imine derivatives: A computational study.
Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, 951(1). 2010 Págs.8-9

WALPOLE, R. E., MYERS, R. H., MYERS, S. L., y YE, K. *Probabilidad y estadística para ingeniería y ciencias* (No. TA430. P76 2012.). Pearson Education. 2007 Págs. 263-265.

YOUNG, D. *Computational Chemistry A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*, John Wiley & Sons Inc., USA, 2001 pp 1, 3, 19, 86, 113.

ANEXOS

ANEXO A. PAQUETE COMPUTACIONAL GAUSSIAN 03:

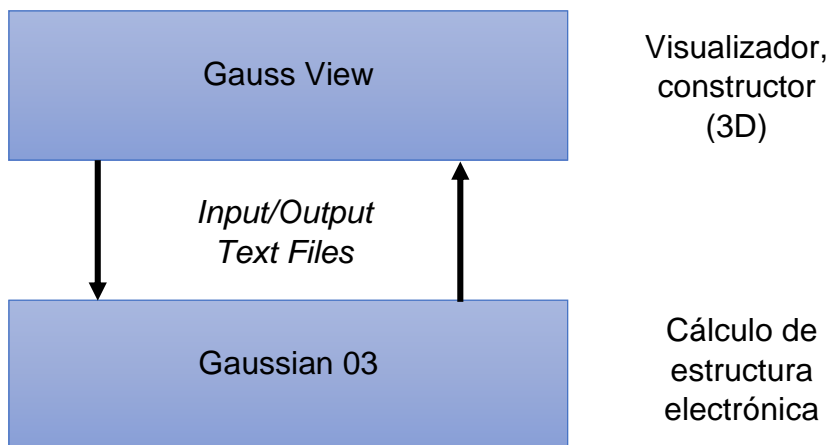
La versión Gaussian 03, hace parte de una serie de herramientas computacionales, que es utilizada por químicos, ingenieros químicos, bioquímicos, físicos y otros científicos de cualquier parte del mundo. Es un programa que permite realizar cálculos *Ad initio*, a partir de los principios básicos de la mecánica cuántica, este facilita la estimación de energías y estructuras moleculares, además, permite otros cálculos tales como frecuencias vibracionales de sistemas moleculares. Llegando si es posible a una geometría óptima. Este programa permite el modelamiento de moléculas grandes mediante diversos niveles de precisión, solucionando las funciones de onda electrónica mediante paquetes de funciones bases que son de tipo Gaussianas (s, p, d, f, g, h y i). Dependiendo de la exactitud, precisión y tipo de cálculo, se puede utilizar un conjunto de funciones de base según sea el caso: STO-3G, 3-21G, 6-311G, entre otros. Además, permite realizar cálculos semi-empíricos, utilizando modelos Hamiltonianos del tipo CNDO, INDO y MNDO. Las evaluaciones de las energías de campo autoconsistente (SCF), se realiza utilizando funciones de ondas de Hartree-Fock y/o la teoría del funcional de la densidad (DFT), también incluye procedimiento perturbativos.

Los modelos empleados en esta herramienta, se aplican a especies estables y compuestos difíciles de observar experimentalmente (estados de transición, intermedios y de vidas cortas).

PAQUETE COMPUTACIONAL GAUSS VIEW

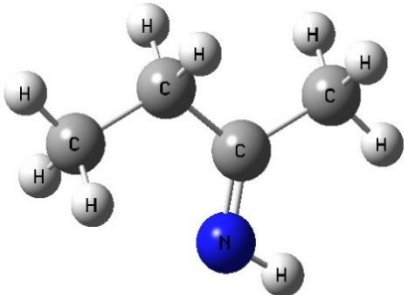
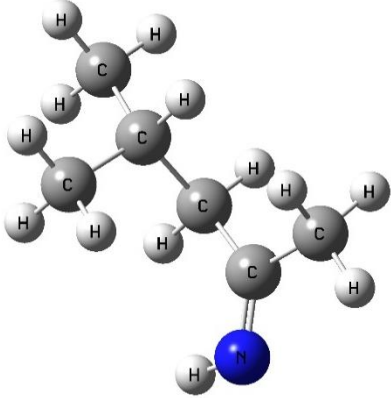
El programa *Gauss View* es un constructor y visualizador molecular (3D) para los archivos de entrada y salida de Gaussian. Este permite obtener las coordenadas moleculares y ejecutar los cálculos moleculares correspondientes. Adicionalmente se puede abrir los archivos de las diferentes moléculas en sus respectivos formatos, adherir hidrógenos automáticamente con una excelente exactitud, examinar y modificar gráficamente todos los parámetros estructurales (distancias entre moléculas, ángulos, etc.), ajustar la orientación de las moléculas y permite visualizar el resultado de las diferentes propiedades calculadas por Gaussian 03.

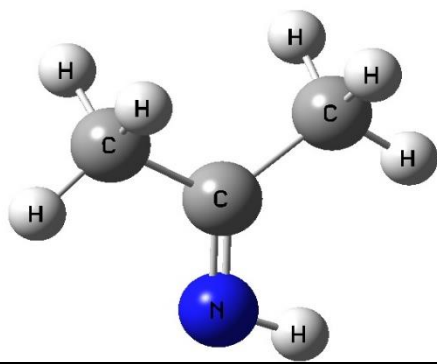
Figura. Relación entre Gaussian 03 y Gauss View.



ANEXO B. COMPUESTOS NITROGENADOS TIPO IMINA

Tabla de compuestos nitrogenados tipo imina

Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
1. Butan-2-imina	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C_2 + C/C_{DN}/H_3 + C/C_{DN}/C/H_2 + N_{DC}/H + C/C/H_3$
	
2. 4-metilpentan-2-imina	$\Delta H^{\circ}_f = C/C_{DN}/H_3 + C_{DN}/C_2 + N_{DC}/H + C/C_{DN}/C/H_2 + C/C_3/H + 2(C/C/H_3)$
	
3. Propan-2-imina	$\Delta H^{\circ}_f = 2(C/C_{DN}/H_3) + C_{DN}/C_2 + N_{DC}/H$



Continuación

Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
4. N-metilpropan-2-imina	$\Delta H_f^\circ = 2(C/C_{DN}/H_3) + C_{DN}/C_2 + N_{DC}/C + C/N_{DC}/H_3$
5. N-metilbut-3-en-2-imina	$\Delta H_f^\circ = C_d/H_2 + C_d/C_{DN}/H + C_{DN}/C_d/C + N_{DC}/C + C/N_{DC}/H_3 + C/C_{DN}/H_3$
6. N-metilbut-3-en-imina	$\Delta H_f^\circ = C_t/H + C_t/C_{DN} + C_{DN}/C_t/C + N_{DC}/C + C/N_{DC}/H_3 + C/C_{DN}/H_3$

Continuación

Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
7. N-vinilpropan-2-imina	$\Delta H^{\circ}_f = C_d/H_2 + C_d/ N_{DC}/H + N_{DC}/C_d + C_{DN}/C_2 + 2(C/C_{DN}/H_3)$
8. N-vinilbut-3-en-2-imina	$\Delta H^{\circ}_f = C_d/ N_{DC}/H + N_{DC}/C + C_{DN}/C_2 + C/C_{DN}/H_3 + C_d/C_{DN}/H + 2(C_d/H_2)$
9. N-vinilbut-2-imina	$\Delta H^{\circ}_f = C_d/H_2 + C_d/ N_{DC}/H + N_{DC}/C_d + C_{DN}/C_2 + C/C_{DN}/H_3 + C/C_{DN}/C/H_2 + C/C/H_3$

Continuación

Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
10. N-etinilbut-2-imina	
	$\Delta H^{\circ}_f = C_t/H + (C_t/N_{DC} + N_{DC}/C_t) + C_{DN}/C_2 + C/C_{DN}/H_3 + C/C_{DN}/C/H_2 + C/C/H_3$
11. N-(prop-en-1-il)-propan-2-imina	
	$\Delta H^{\circ}_f = C/C_t/H_3 + C_t/C + (C_t/N_{DC} + N_{DC}/C_t) + C_{DN}/C_2 + 2(C/C_{DN}/H_3)$
12. N-(prop-1-en-1-il) butan-2-imina	
	$\Delta H^{\circ}_f = C/C_t/H_3 + C_t/C + C_t/N_{DC} + N_{DC}/C_t + C_{DN}/C_2 + C/C_{DN}/H_3 + C/C_{DN}/C/H_2 + C/C/H_3$

Continuación

Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
13. N-metiletano-1,2-diimina	$\Delta H^{\circ}_f = C/N_{DC}/H_3 + N_{DC}/C + 2(C_{DN}/C_{DN}/H) + N_{DC}/H$
14. N-etiletano-1,2-diimina	$\Delta H^{\circ}_f = C/C/H_3 + C/N_{DC}/C/H_2 + N_{DC}/C + 2(C_{DN}/C_{DN}/C/H) + N_{DC}/H$
15. Butano-2,3-diimina	$\Delta H^{\circ}_f = 2(C/C_{DN}/H_3) + 2(C_{DN}/C_{DN}/C) + 2(N_{DC}/H)$

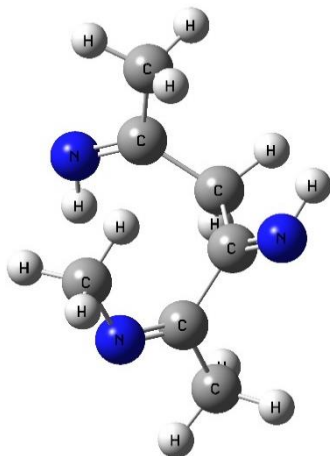
Continuación

Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
16. N-metilpentano-2,4-diimina	
	$\Delta H^{\circ}_f = 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H}_3) + 2(\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_2) + \text{N}_{\text{DC}}/\text{H} + \text{C}/(\text{C}_{\text{DN}})_2/\text{H}_2 + \text{N}_{\text{DC}}/\text{C} + \text{C}/\text{N}_{\text{DC}}/\text{H}_3$
17. N-vinilohexano-2,5-diimina	
	$\Delta H^{\circ}_f = 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H}_3) + 2(\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_2) + \text{N}_{\text{DC}}/\text{H} + 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}/\text{H}_2) + \text{N}_{\text{DC}}/\text{C}_d + \text{C}_d/\text{N}_{\text{DC}}/\text{H} + \text{C}_d/\text{H}_2$
18. N-etilhexano-2,5-diimina	
	$\Delta H^{\circ}_f = 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H}_3) + 2(\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_2) + \text{N}_{\text{DC}}/\text{H} + 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}/\text{H}_2) + (\text{N}_{\text{DC}}/\text{C}_t + \text{C}_t/\text{N}_{\text{DC}}) + \text{C}_t/\text{H}$

Continuación

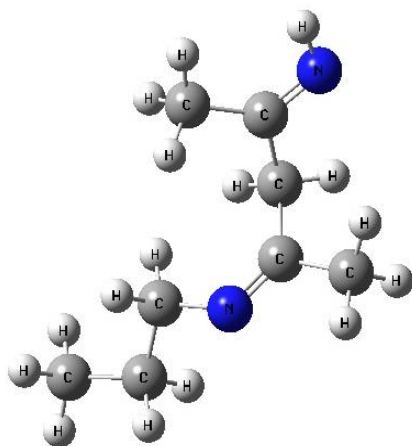
Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
---------------------	--

19. N²-metilhexano-2,3,5-triimina



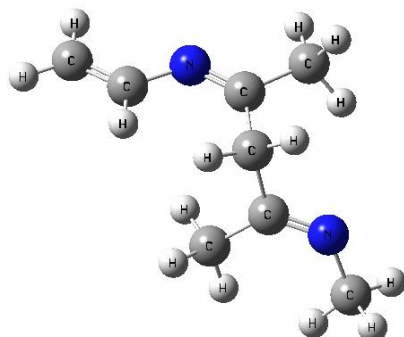
$$\Delta H_f^\circ = 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H}_3) + \text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_2 + 2(\text{N}_{\text{DC}}/\text{H}) + \text{C}/(\text{C}_{\text{DN}})_2/\text{H}_2 + 2(\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}) + \text{N}_{\text{DC}}/\text{C} + \text{C}/\text{N}_{\text{DC}}/\text{H}_3$$

20. N-propilpentano-2,4-diimina



$$\Delta H_f^\circ = 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H}_3) + 2(\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_2) + \text{N}_{\text{DC}}/\text{H} + \text{C}/(\text{C}_{\text{DN}})_2/\text{H}_2 + \text{N}_{\text{DC}}/\text{C} + \text{C}/\text{N}_{\text{DC}}/\text{C}/\text{H}_2 + \text{C}/\text{C}_2/\text{H}_2 + \text{C}/\text{C}/\text{H}_3$$

21. N-vinilo-N'-metilpentano-2,4-diimina



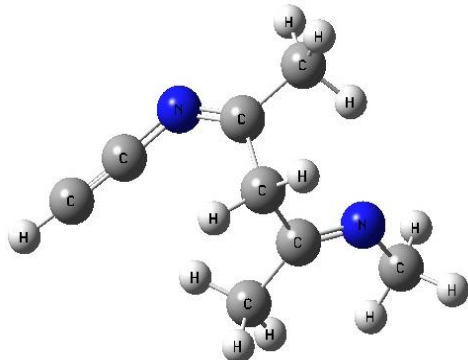
$$\Delta H^{\circ}_f = 2(C/C_{DN}/H_3) + 2(C_{DN}/C_2) + N_{DC}/C + C/C_{DN}/H_3 + C/(C_{DN})_2/H_2 + N_{DC}/C_d + C_d/N_{DC}/H + C_d/H_2$$

Continuación

Estructura y nombre

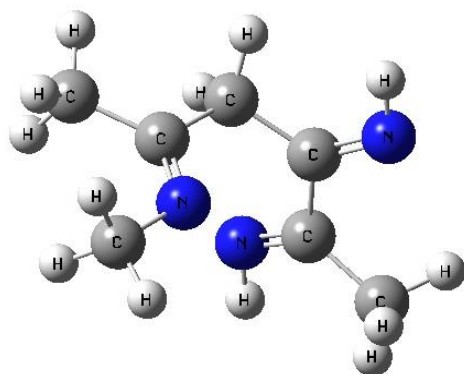
Calor de formación expresado en sus grupos de contribución

22. N-etinil-N'-metilpentano-2,4-diimina



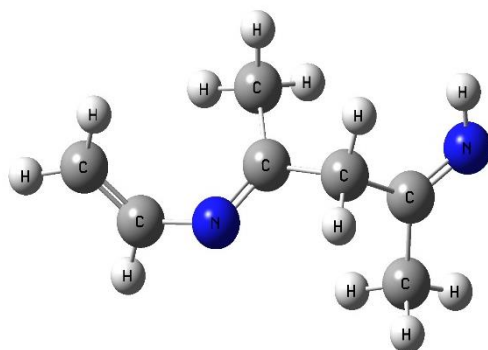
$$\Delta H^{\circ}_f = 2(C/C_{DN}/H_3) + 2(C_{DN}/C_2) + N_{DC}/C + C/N_{DC}/H_3 + C/(C_{DN})_2/H_2 + (N_{DC}/C_t + C_t/N_{DC}) + C_t/H$$

23. N⁵-metilhexano-2,3,5-triimina



$$\Delta H^{\circ}_f = 2(C/C_{DN}/H_3) + C_{DN}/C_2 + N_{DC}/C + C/N_{DC}/H_3 + C/(C_{DN})_2/H_2 + 2(C_{DN}/C_{DN}/C) + 2(N_{DC}/H)$$

24. N-vinilopentano-2,4-diimina



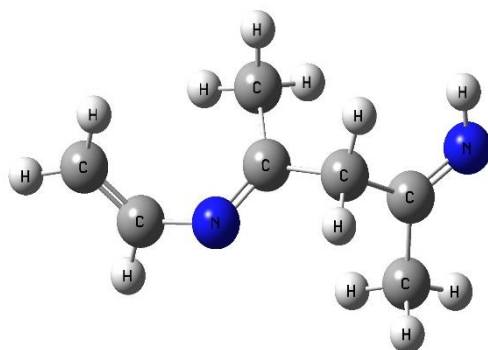
$$\Delta H^{\circ}_f = 2(C/C_{DN}/H_3) + 2(C_{DN}/C_2) + N_{DC}/C_d + C_d/N_{DC}/H + C_d/H_2 + C/(C_{DN})_2/H_2 + N_{DC}/H$$

Continuación

Estructura y nombre

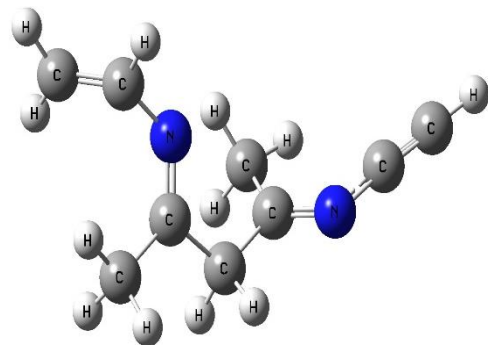
Calor de formación expresado en sus grupos de contribución

25. N-vinilopentano-2,4-diimina



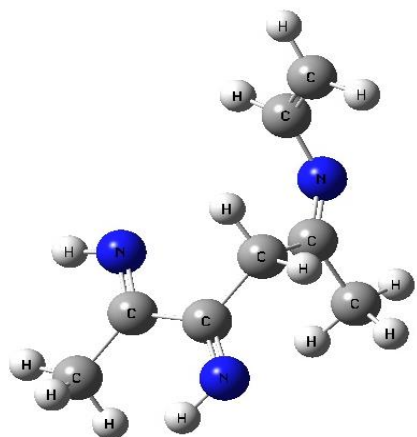
$$\Delta H^{\circ}_f = 2(C/C_{DN}/H_3) + 2(C_{DN}/C_2) + N_{DC}/C_d + C_d/N_{DC}/H + C_d/H_2 + C/(C_{DN})_2/H_2 + N_{DC}/C + C/N_{DC}/H_3$$

26. N-vinilo-N'-etilpentano-2,4-diimina



$$\Delta H^{\circ}_f = 2(C/C_{DN}/H_3) + 2(C_{DN}/C_2) + N_{DC}/C_d + C_d/H_2 + C/(C_{DN})_2/H_2 + (N_{DC}/C_t + C_t/N_{DC}) + C_t/H + C_d/N_{DC}/H$$

27. N⁵-vinilohexano-2,3,5-triimina



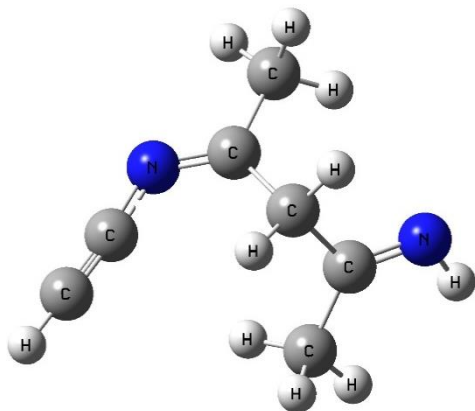
$$\Delta H^{\circ}_f = 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H}_3) + \text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_2 + \text{N}_{\text{DC}}/\text{C}_d + \text{C}_d/\text{N}_{\text{DC}}/\text{H} + \text{C}_d/\text{H}_2 + \text{C}/(\text{C}_{\text{DN}})_2/\text{H}_2 + 2(\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}) + 2(\text{N}_{\text{DC}}/\text{H})$$

Continuación

Estructura y nombre

Calor de formación expresado en sus grupos de contribución

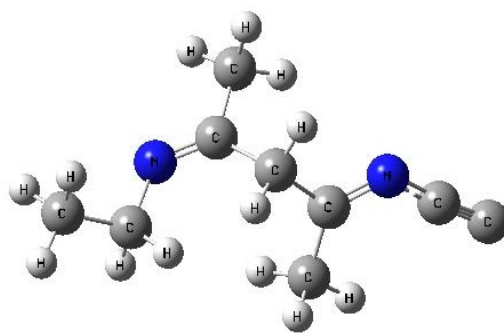
28. N-etilpentano-2,4-diimina



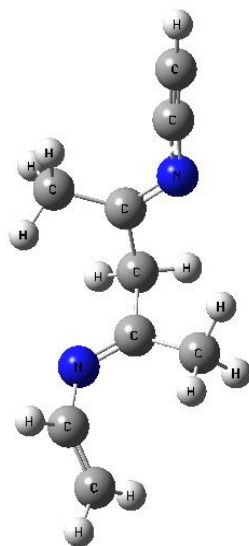
$$\Delta H^{\circ}_f = 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H}_3) + 2(\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_2) + \text{N}_{\text{DC}}/\text{H} + \text{C}/(\text{C}_{\text{DN}})_2/\text{H}_2 + (\text{N}_{\text{DC}}/\text{C}_t + \text{C}_t/\text{N}_{\text{DC}}) + \text{C}_t/\text{H}$$

29. N-etil-N'-etilpentano-2,4-diimina

$$\Delta H^{\circ}_f = 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H}_3) + 2(\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_2) + \text{C}/\text{N}_{\text{DC}}/\text{C}/\text{H}_2 + \text{C}/\text{C}/\text{H}_3 + (\text{N}_{\text{DC}}/\text{C}_t + \text{C}_t/\text{N}_{\text{DC}}) + \text{C}_t/\text{H} + \text{C}/(\text{C}_{\text{DN}})_2/\text{H}_2 + \text{N}_{\text{DC}}/\text{C}$$



30. N-vinilo-N'-etilpiperano-2,4-diimina



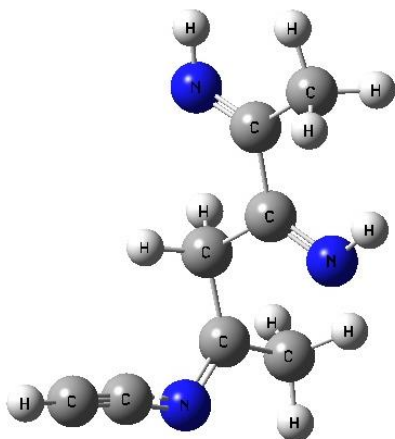
$$\Delta H^{\circ}_f = 2(C/C_{DN}/H_3) + 2(C_{DN}/C_2) + (N_{DC}/C_t + C_t/N_{DC}) + C_t/H + C/(C_{DN})_2/H_2 + N_{DC}/C_d + C_d/N_{DC}/H + C_d/H_2$$

Continuación

Estructura y nombre

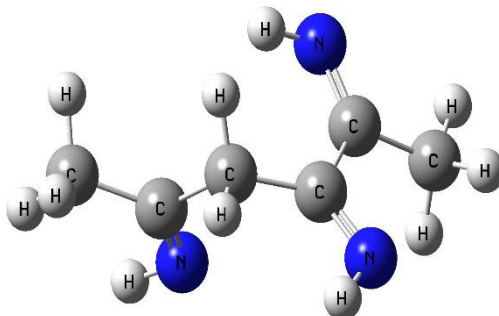
Calor de formación expresado en sus grupos de contribución

31. N⁵-etinilhexano-2,3,5-trimina



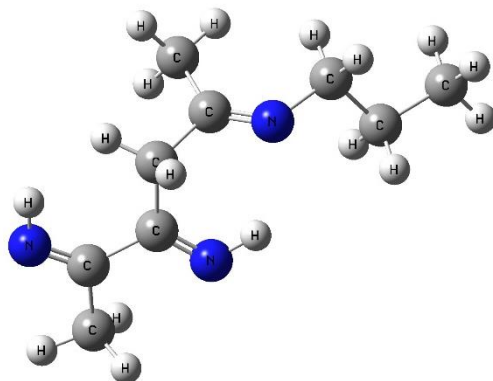
$$\Delta H^{\circ}_f = 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H}_3) + 2(\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}) + 2(\text{N}_{\text{DC}}/\text{H}) + \text{C}/(\text{C}_{\text{DN}})_2/\text{H}_2 + \text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_2 + (\text{N}_{\text{DC}}/\text{C}_t + \text{C}_t/\text{N}_{\text{DC}}) + \text{C}_t/\text{H}$$

32. Hexano-2,3,5-triimina



$$\Delta H^{\circ}_f = 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H}_3) + 2(\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}) + 3(\text{N}_{\text{DC}}/\text{H}) + \text{C}/(\text{C}_{\text{DN}})_2/\text{H}_2 + \text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_2$$

33. N⁵-propilhexano-2,3,5-triimina



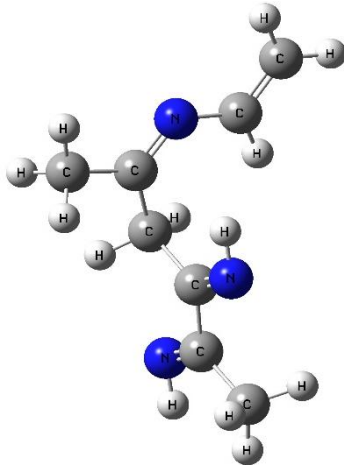
$$\Delta H^{\circ}_f = 2(\text{C}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H}_3) + 2(\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_{\text{DN}}/\text{C}) + 2(\text{N}_{\text{DC}}/\text{H}) + \text{C}/(\text{C}_{\text{DN}})_2/\text{H}_2 + \text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_2 + \text{N}_{\text{DC}}/\text{C} + \text{C}/\text{N}_{\text{DC}}/\text{C}/\text{H}_2 + \text{C}/(\text{C})_2/\text{H}_2 + \text{C}/\text{C}/\text{H}_3$$

Continuación

Estructura y nombre

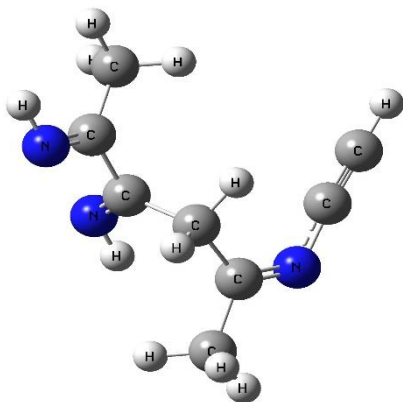
Calor de formación expresado en sus grupos de contribución

34. N⁵-vinilo-hexano-2,3,5-triimina



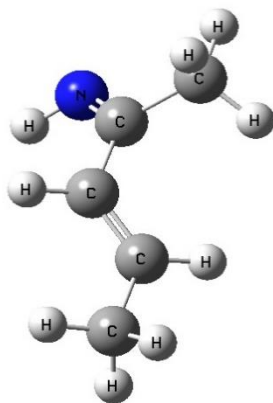
$$\Delta H^{\circ}_f = 2(C/C_{DN}/H_3) + 2(C_{DN}/C_{DN}/C) + 2(N_{DC}/H) + C/(C_{DN})_2/H_2 + C_{DN}/C_2 + N_{DC}/C_d + C_d/N_{DC}/H + C_d/H_2$$

35. N⁵-etilhexano-2,3,5-triimina



$$\Delta H^{\circ}_f = 2(C/C_{DN}/H_3) + 2(C_{DN}/C_{DN}/C) + 2(N_{DC}/H) + C/(C_{DN})_2/H_2 + C_{DN}/C_2 + (N_{DC}/C_t + C_t/N_{DC}) + C_t/H$$

36. Pent-3-en-imina



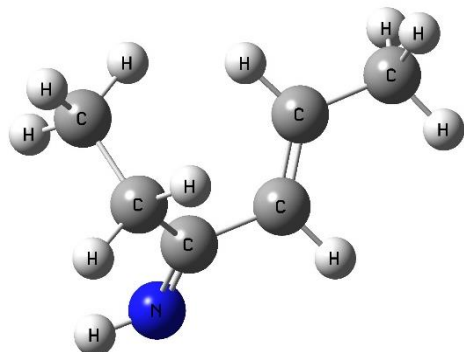
$$\Delta H^{\circ}_f = C/C_{DN}/H_3 + C_{DN}/C_d/C + N_{DC}/H + C_d/C_{DN}/H + C_d/C/H + C/C_d/H_3$$

Continuación

Estructura y nombre

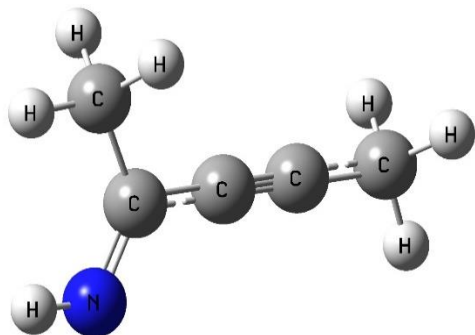
Calor de formación expresado en sus grupos de contribución

37. Hex-4-en-3-imina



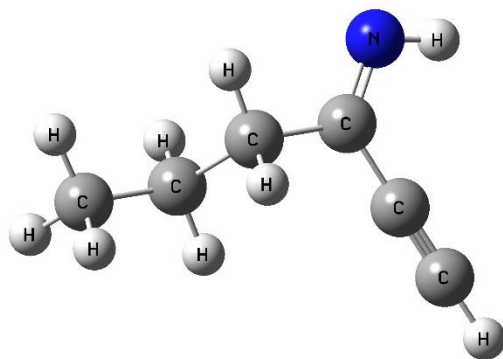
$$\Delta H_f^\circ = C/C/H_3 + C/C_{DN}/C/H_2 + C_{DN}/C_d/C + N_{DC}/H + C_d/C_{DN}/H + C_d/C/H + C/C_d/H_3$$

38. Pent-3-yn-2-imina



$$\Delta H_f^\circ = C/C_{DN}/H_3 + C_{DN}/C_t/C + N_{DC}/H + C_t/C_{DN} + C_t/C + C/C_t/H_3$$

39. Hex-1-yn-3-imina



$$\Delta H_f^\circ = C/C/H_3 + C/C_2/H_2 + C/C_{DN}/C/H_2 + C_{DN}/C_t/C + N_{DC}/H + C_t/C_{DN} + C_t/H$$

Continuación

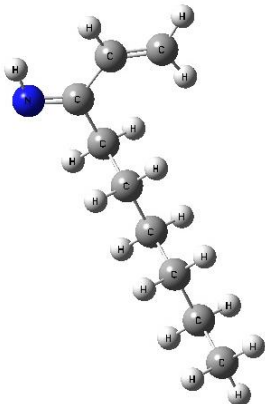
Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
40. pent-1-en-4-in-3-imina	
	$\Delta H^{\circ}_f = C_d/H_2 + C_d/C_{DN}/H + C_{DN}/C_t/C_d + N_{DC}/H + C_t/C_{DN} + C_t/H$
41. but-3-in-2-imina	
	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C_t/C + C/C_{DN}/H_3 + N_{DC}/H + C_t/C_{DN} + C_t/H$
42. but-3-en-2-imina	
	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C_d/C + N_{DC}/H + C_d/C_{DN}/H + C_d/H_2 + C/C_{DN}/H_3$

Continuación

Estructura y nombre

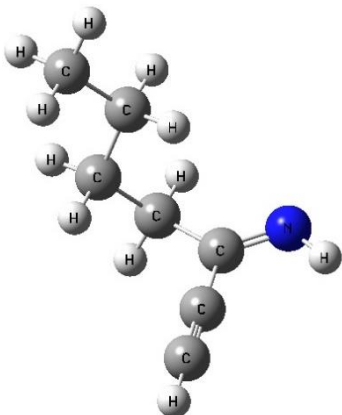
Calor de formación expresado en sus grupos de contribución

43. hept-1-en-3-imina



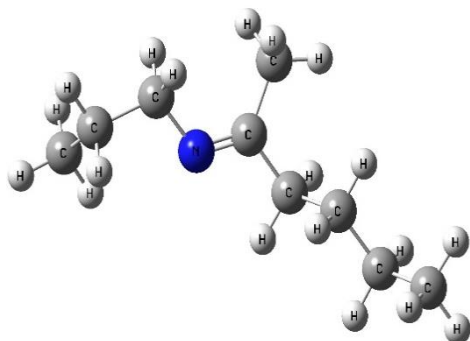
$$\Delta H^{\circ}_f = C_d/H_2 + C_d/C_{DN}/H + C_{DN}/C_d/C + C/C_{DN}/C/H_2 + 2(C/(C)_2/H_2) + C/C/H_3$$

44. hept-1-in-3-imina



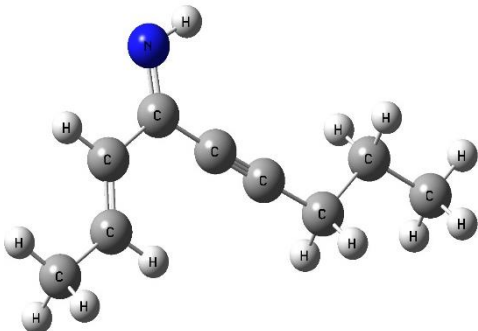
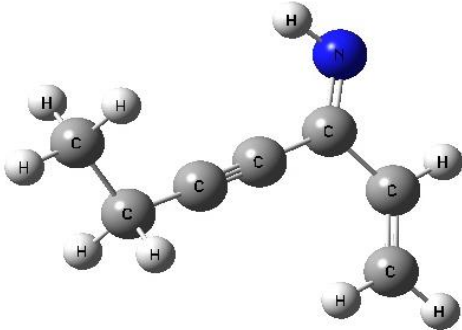
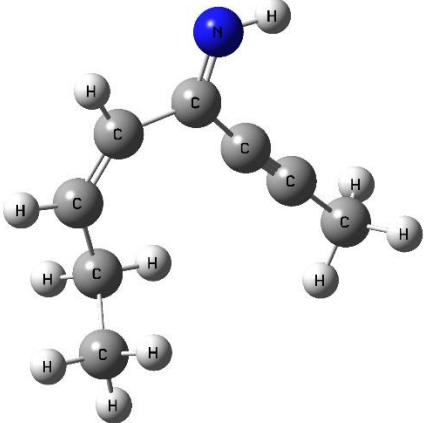
$$\Delta H^{\circ}_f = C/C/H_3 + 2(C/(C)_2/H_2) + C/C_{DN}/C/H_2 + C_{DN}/C_t/C + N_{DC}/H + C_t/C_{DN} + C_t/H$$

45. N-propil hexan-2-imina



$$\Delta H^{\circ}_f = C/C_{DN}/H_3 + C_{DN}/(C)_2 + N_{DC}/C + C/N_{DC}/C/H_2 + 3(C/(C)_2/H_2) + C/C_{DN}/C/H_2 + 2(C/C/H_3)$$

Continuación

Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
46. non-2-en-5-in-4-imina	$\Delta H^{\circ}_f = C/C_d/H_3 + C_d/C/H + C_d/C_{DN}/H + C_{DN}/C_t/C_d + N_{DC}/H + C_t/C_{DN} + C_t/C + C/C_t/C/H_2 + C/C_2/H_2 + C/C/H_3$
	
47. hept-1-en-4-in-3-imina	$\Delta H^{\circ}_f = C_d/H_2 + C_d/C_{DN}/H + C_{DN}/C_t/C_d + N_{DC}/H + C_t/C_{DN} + C_t/C + C/C_t/C/H_2 + C/C/H_3$
	
48. oct-5-en-2-in-4-imina	$\Delta H^{\circ}_f = C/C/H_3 + C/C_d/C/H_2 + C_d/C/H + C_d/C_{DN}/H + C_{DN}/C_t/C_d + N_{DC}/H + C_t/C_{DN} + C_t/C + C/C_t/H_3$
	

Continuación

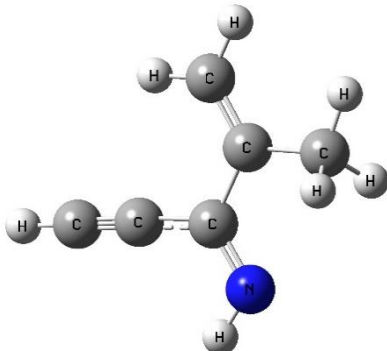
Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
49. undec-6-en-3-in-5-imina	$\Delta H^{\circ}_f = 2(\text{C/C/H}_3) + 2(\text{C}/(\text{C})_2/\text{H}_2) + \text{C/C}_d/\text{C/H}_2 + \text{C}_d/\text{C/H} + \text{C}_d/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H} + \text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_t/\text{C}_d + \text{N}_{\text{DC}}/\text{H} + \text{C}_t/\text{C}_{\text{DN}} + \text{C}_t/\text{C} + \text{C/C}_t/\text{C/H}_2$
50. dec-6-en-3-in-5-imina	$\Delta H^{\circ}_f = 2(\text{C/C/H}_3) + \text{C}/(\text{C})_2/\text{H}_2 + \text{C/C}_d/\text{C/H}_2 + \text{C}_d/\text{C/H} + \text{C}_d/\text{C}_{\text{DN}}/\text{H} + \text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_t/\text{C}_d + \text{N}_{\text{DC}}/\text{H} + \text{C}_t/\text{C}_{\text{DN}} + \text{C}_t/\text{C} + \text{C/C}_t/\text{H}_2$
51. 4-metilpent-3-en-6-in-5-imina	$\Delta H^{\circ}_f = 2(\text{C/C/H}_3) + \text{C/C}_d/\text{C/H}_2 + \text{C}_d/\text{C/H} + \text{C}_d/\text{C}_{\text{DN}}/\text{C} + \text{C}_{\text{DN}}/\text{C}_t/\text{C}_d + \text{N}_{\text{DC}}/\text{H} + \text{C}_t/\text{C}_{\text{DN}} + \text{C}_t/\text{C} + \text{C/C}_t/\text{C/H}_2 + \text{C/C}_d/\text{H}_3$

Continuación

Estructura y nombre

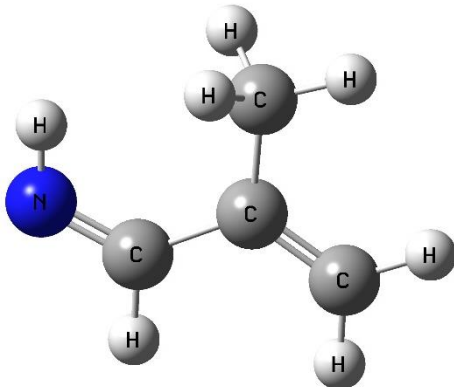
Calor de formación expresado en sus grupos de contribución

52. 2-metilpent-1-en-4-in-3-imina



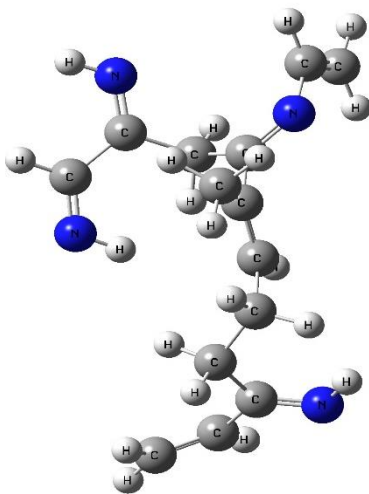
$$\Delta H^{\circ}_f = C_d/H_2 + C_d/C_{DN}/C + C/C_d/H_3 + C_{DN}/C_t/C_d + N_{DC}/H + C_t/C_{DN} + C_t/H$$

53. 2-methylprop-2-en-1-imine



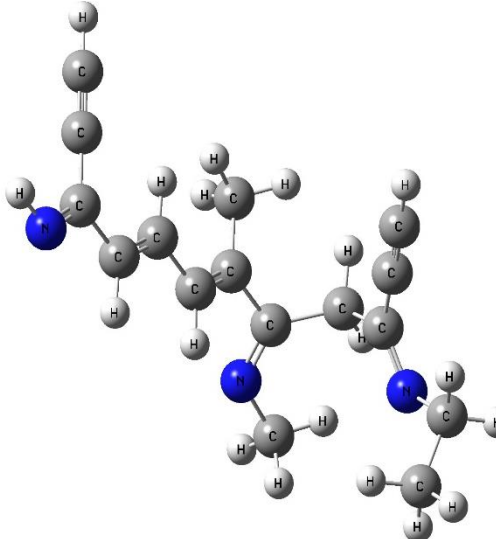
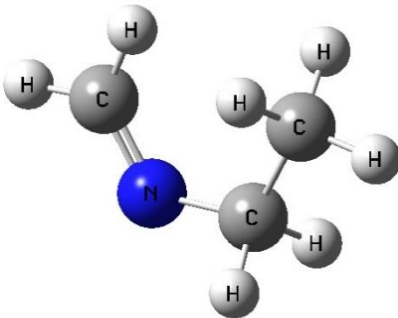
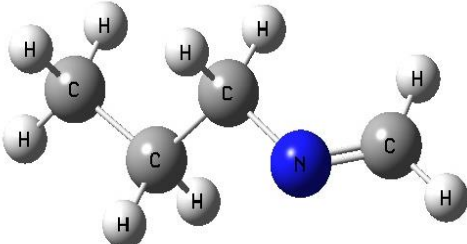
$$\Delta H^{\circ}_f = 2(C/C/H_3) + C/(C)_2/H_2 + C/C_d/C/H_2 + C_d/C/H + C_d/C_{DN}/C + C/C_d/H_3 + C_{DN}/C_t/C_d + N_{DC}/H + C_t/C_{DN} + C_t/C + C/C_t/C/H_2$$

54. N⁴-etenil-5-metil undecano-5,10-dieno-1,2,4,9-tetramina



$$\Delta H^{\circ}_f = 2(C_d/H_2) + C_d/C_{DN}/H + 2(C_{DN}/C_d/C) + C/C_{DN}/C/H_2 + C/C_d/C/H_2 + C_d/C/H + C_d/C_{DN}/C + C/C_d/H_3 + N_{DC}/C_d + C_d/N_{DC}/H + C/(C_{DN})_2/H_2 + C_{DN}/C_{DN}/C + 3(N_{DC}/H) + C_{DN}/C_{DN}/H$$

Continuación

Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
55. N ³ -etil-N ⁵ ,6-dimetilocta-6,8-dieno-1,11-diino-3,5,10-triimina	$\Delta H^{\circ}_f = 2(C_i/H) + 2(C_i/C_{DN}) + C_{DN}/C_i/C_d + (N_{DC}/H) + C_d/C_{DN}/H + 2(C_d/C_d/H) + C_d/C_{DN}/C + C/C_d/H_3 + C_{DN}/C_d/C + C/N_{DC}/H_3 + C/(C_{DN})_2/H_2 + C_{DN}/C_i/C + N_{DC}/C$
	
56. N-metilmetanimina	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/H_2 + N_{DC}/C + C/N_{DC}/C/H_2 + C/C/H_3$
	
57. N-propilmetanimina	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/H_2 + N_{DC}/C + C/N_{DC}/C/H_2 + C/C_2/H_2 + C/C/H_3$
	

Continuación

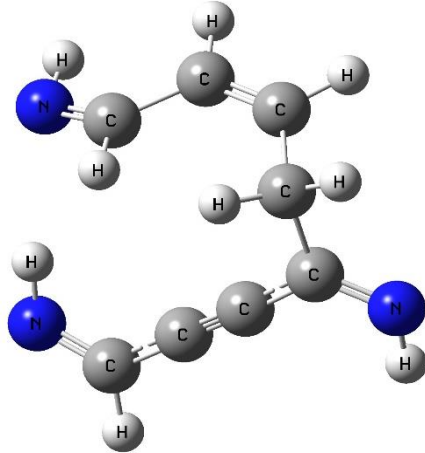
Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
58. N-etenilmethanimina	
	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/H_2 + N_{DC}/C_D + C_D/N_{DC}/H + C_D/H_2$
59. Nona-2,5-dien-7-yne-1,4,9-triimina	
	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C_D/H + 3*(N_{DC}/H) + 3*(C_D/C_{DN}/H) + C_{DN}/(C_D)_2 + C_D/C_T/H + C_T/C_D + C_T/C_{DN} + C_{DN}/C_T/H$
60. Deca-1,4-dien-9-yne-3,7-diimina	
	$\Delta H^{\circ}_f = C_D/H_2 + 2*(C_D/C_{DN}/H) + C_{DN}/(C_D)_2 + C_D/C/H + C/C_{DN}/C_D/H_2 + 2*(N_{DC}/H) + C_{DN}/C_2 + C/C_{DN}/C_T/H_2 + C_T/C + C_T/H$

Continuación

Estructura y nombre

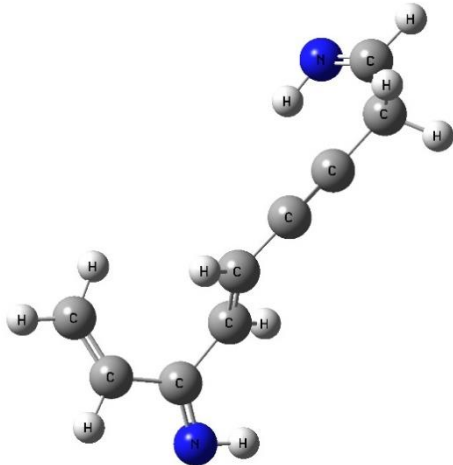
Calor de formación expresado en sus grupos de contribución

61. Oct-6-en-2-yne-1,4,8-triimina



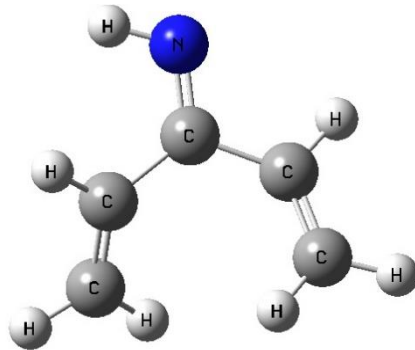
$$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C_T/H + 3*(N_{DC}/H) + 2*(C_T/C_{DN}) + C_{DN}/C_T/C + C/C_{DN}/C_D/H_2 + C_D/C/H + C_D/C_{DN}/H + C_{DN}/C_D/H$$

62. Nona-5,8-dien-3-yne-1,7-diimina



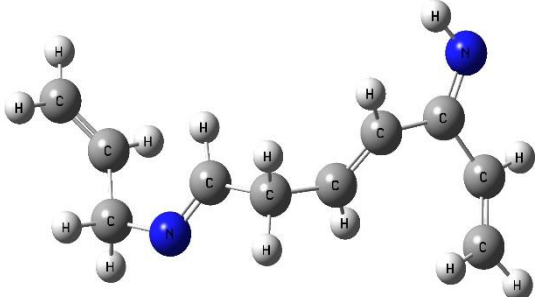
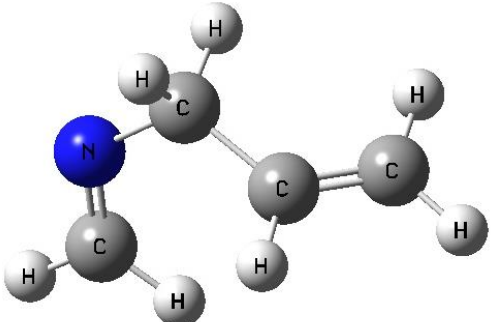
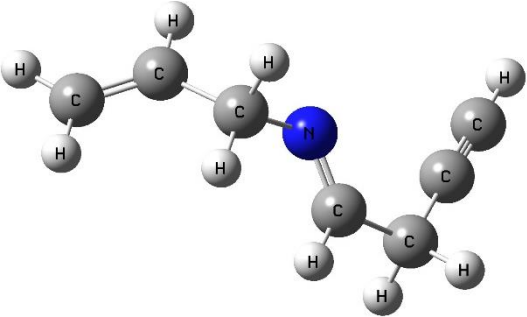
$$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C/H + 2*(N_{DC}/H) + C/C_{DN}/C_T/H_2 + C_T/C + C_T/C_D + C_D/C_T/H + 2*(C_D/C_{DN}/H) + C_{DN}/(C_D)_2 + C_D/H_2$$

63. Penta-1,4-dien-3-imina



$$\Delta H^{\circ}_f = 2*(C_D/H_2) + 2*(C_D/C_{DN}/H) + C_{DN}/(C_D)_2 + N_{DC}/H$$

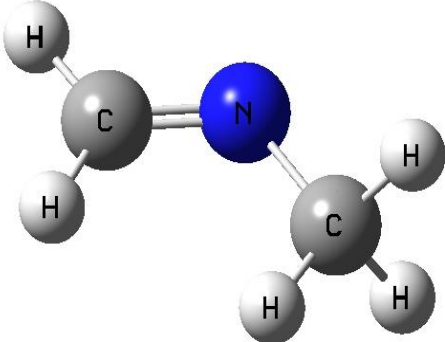
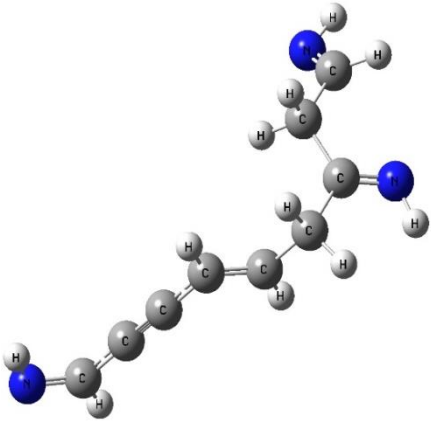
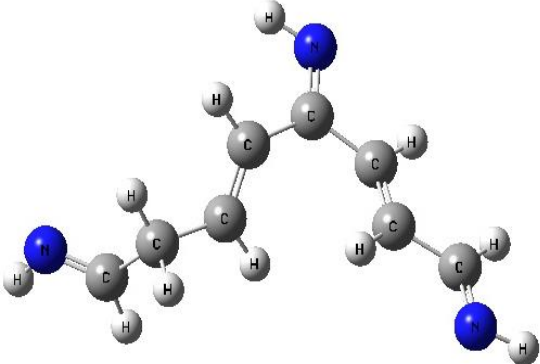
Continuación

Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
64. N ¹ -(prop-2-en-1-yl) hepta-3,6-diene-1,5-diimina	$\Delta H^{\circ}_f = 2*(C_D/H_2) + 2*(C_D/C_{DNH}) + C_{DN}/(C_D)_2 + N_{DC}/H + C_D/C/H + C/C_{DN}/C_D/H_2 + C_{DN}/C/H + N_{DC}/C + C/N_{DC}/C_D/H_2 + C_D/C/H$
	
65. N-(prop-2-en-1-yl) metanimina	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/H_2 + N_{DC}/C + C/N_{DC}/C_D/H_2 + C_D/C/H + C_D/H_2$
	
66. N-(prop-2-en-1-yl) but-3-yn-1-imina	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C/H + N_{DC}/C + C/N_{DC}/C_D/H_2 + C_D/C/H + C_D/H_2 + C/C_{DN}/C_T/H_2 + C_T/C + C_T/H$
	
imina	

Continuación

Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
67. N-(prop-2-en-1-yl) prop-2-yn-1-imina	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C_T/H + C_T/C_{DN} + C_T/H + N_{DC}/C + C/N_{DC}/C_D/H_2 + C_D/C/H + C_D/H_2$
68. N-(prop-2-en-1-yl) prop-2-en-1-imina	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C_D/H + N_{DC}/C + C/N_{DC}/C_D/H_2 + C_D/C/H + 2*(C_D/H_2) + C_D/C_{DN}/H$
69. N-propylbut-3-en-1-imina	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C/H + N_{DC}/C + C/N_{DC}/C/H_2 + C/C_2/H_2 + C/C/H_3 + C/C_{DN}/C_D/H_2 + C_D/C/H + C_D/H_2$

Continuación

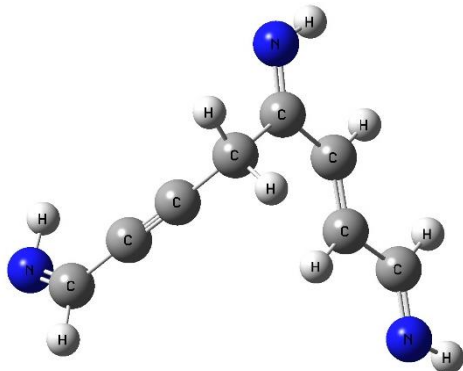
Estructura y nombre	Calor de formación expresado en sus grupos de contribución
70. N-metilmetanimina	
	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/H_2 + N_{DC}/C + C/N_{DC}/H_3$
71. Non-5-en-7-yne-1,3,9-triimina	
	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C_T/H + 3*(N_{DC}/H) + C_T/C_{DN} + C_T/C_D + C_D/C_T/H + C_D/C/H + C/C_{DN}/C_D/H_2 + C_{DN}/C_2 + C/(C_{DN})_2/H_2 + C_{DN}/C/H$
72. Octa-2,5-diene-1,4,8-triimina	
	$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C_D/H + 3*(N_{DC}/H) + 3*(C_D/C_{DN}/H) + C_{DN}/(C_D)_2 + C_D/C/H + C/C_{DN}/C_D/H_2 + C_{DN}/C/H$

Continuación

Estructura y nombre

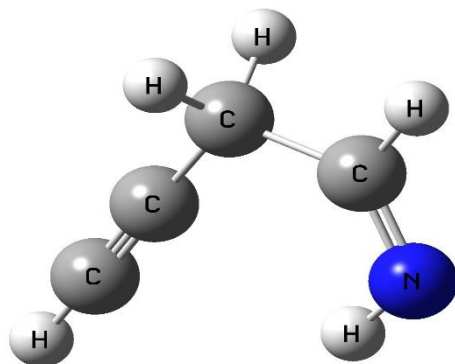
Calor de formación expresado en sus grupos de contribución

73. Oct-2-en-6-yne-1,4,8-triimina



$$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN/C_T/H} + 3*(N_{DC/H}) + C_T/C_{DN} + C_T/C + C/C_{DN}/C_T/H_2 + C_{DN}/C_D/C + 2*(C_D/C_{DN}/H) + C_{DN}/C_D/H$$

74. but-3-yn-1-imina



$$\Delta H^{\circ}_f = C_{DN}/C/H + N_{DC}/H + C/C_{DN}/C_T/H_2 + C_T/C + C_T/H$$

ANEXO C. REACCIONES ISODÉSMICAS

Tabla reacciones isodésmicas.

MOLÉCULA 1						
	REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$(\text{CH}_3)_2\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	CH_4
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{H})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	CH_4
Reacción 3	$\text{CH}_2\text{CH}_3(\text{H})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	CH_4
MOLÉCULA 2						
	REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	+	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	CH_4
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2(\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2$	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	CH_4
Reacción 3	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2(\text{H})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2$	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	CH_4
MOLÉCULA 3						
	REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{H})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2$	$(\text{CH}_3)_2\text{CNH}$	+	CH_4
Reacción 2	$(\text{H})_2\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	$(\text{CH}_3)_2\text{CNH}$	+	CH_4
Reacción 3	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	CH_4	$(\text{CH}_3)_2\text{CNH}$	+	CH_4
MOLÉCULA 4						
	REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{H})\text{CN}-\text{CH}_3$	+	CH_3	$(\text{CH}_3)_2\text{CN}-\text{CH}_3$	+	CH_4
Reacción 2	$(\text{H})_2\text{CN}-\text{CH}_3$	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	$(\text{CH}_3)_2\text{CN}-\text{CH}_3$	+	CH_4
Reacción 3	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CH}_3$	+	CH_4	$(\text{CH}_3)_2\text{CN}-\text{CH}_3$	+	$(\text{CH}_3)_2$
MOLÉCULA 5						
	REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{H})\text{CN}-\text{CH}_3$	+	$(\text{CH}_3)_2$	$(\text{CH}_3)(\text{CHCH}_2)\text{CN}-\text{CH}_3$	+	CH_4
Reacción 2	$(\text{CH}_3)((\text{CH})_2\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CH}_3$	+	CH_4	$(\text{CH}_3)(\text{CHCH}_2)\text{CN}-\text{CH}_3$	+	$(\text{CH}_3)_2$
Reacción 3	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CHCH}_2)\text{CN}-\text{CH}_3$	+	CH_4	$(\text{CH}_3)(\text{CHCH}_2)\text{CN}-\text{CH}_3$	+	$(\text{CH}_3)_2$
MOLÉCULA 6						
	REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CCH}(\text{H})\text{CN}-\text{CH}_3$	+	$(\text{CH}_3)_2$	$(\text{CH}_3)(\text{CCH})\text{CN}-\text{CH}_3$	+	CH_4
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CCH})\text{CN}-\text{CH}_2\text{CH}_3$	+	CH_4	$(\text{CH}_3)(\text{CCH})\text{CN}-\text{CH}_3$	+	$(\text{CH}_3)_2$
Reacción 3	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CCH})\text{CN}-\text{CH}_3$	+	CH_4	$(\text{CH}_3)(\text{CCH})\text{CN}-\text{CH}_3$	+	$(\text{CH}_3)_2$
MOLÉCULA 7						
	REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$(\text{H})_2\text{CN}-\text{CHCH}_2$	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	$(\text{CH}_3)_2\text{CN}-\text{CHCH}_2$	+	CH_4
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{H})\text{CN}-\text{CHCH}_2$	+	$(\text{CH}_3)_2$	$(\text{CH}_3)_2\text{CN}-\text{CHCH}_2$	+	CH_4
Reacción 3	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CHCH}_2$	+	CH_4	$(\text{CH}_3)_2\text{CN}-\text{CHCH}_2$	+	$(\text{CH}_3)_2$
MOLÉCULA 8						
	REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$(\text{CHCH}_2)\text{CN}-\text{CHCH}_2$	+	$(\text{CH}_3)_2$	$(\text{CH}_3)(\text{CHCH}_2)\text{CN}-\text{CHCH}_2$	+	CH_4
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CHCH}_2)\text{CN}-(\text{CH})_2\text{CH}_3$	+	CH_4	$(\text{CH}_3)(\text{CHCH}_2)\text{CN}-\text{CHCH}_2$	+	CH_4
Reacción 3	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CHCH}_2)\text{CN}-\text{CHCH}_2$	+	CH_4	$(\text{CH}_3)(\text{CHCH}_2)\text{CN}-\text{CHCH}_2$	+	$(\text{CH}_3)_2$

Continuación

MOLÉCULA 9					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	H(CH ₃)CN-CHCH ₂	+ (CH ₃) ₂ CH ₂	CH ₃ CH ₂ (CH ₃)CN-CHCH ₂	+ CH ₃	
Reacción 2	(CH ₃) ₂ CN-CHCH ₂	+ (CH ₃) ₂	CH ₃ CH ₂ (CH ₃)CN-CHCH ₂	+ CH ₄	
Reacción 3	(H) ₂ CN-CHCH ₂	+ (CH ₃) ₂ (CH ₂) ₂	CH ₃ CH ₂ (CH ₃)CN-CHCH ₂	+ CH ₄	
MOLÉCULA 10					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	H(CH ₃)CN-CHCH	+ (CH ₃) ₂ CH ₂	CH ₃ CH ₂ (CH ₃)CN-CHCH	+ CH ₃	
Reacción 2	(H) ₂ CN-CCH	+ (CH ₃) ₂ (CH ₂) ₂	CH ₃ CH ₂ (CH ₃)CN-CHCH	+ (CH ₃) ₂	
Reacción 3	H(CH ₃)CN-CC(CH ₂) ₂ CH ₃	+ CH ₄	CH ₃ CH ₂ (CH ₃)CN-CHCH	+ CH ₄	
MOLÉCULA 11					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	H(CH ₃)CN-CCCH ₃	+ (CH ₃) ₂	(CH ₃) ₂ CN-CCCH ₃	+ CH ₄	
Reacción 2	(H) ₂ CN-CCCH ₃	+ (CH ₃) ₂ CH ₂	(CH ₃) ₂ CN-CCCH ₃	+ CH ₄	
Reacción 3	CH ₃ CH ₂ (H)CN-CCCH ₂ CH ₃	+ CH ₄	(CH ₃) ₂ CN-CCCH ₃	+ CH ₄	
MOLÉCULA 12					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	CH ₃ (H)CN-CCCH ₃	+ (CH ₃) ₂ CH ₂	CH ₃ CH ₂ (CH ₃)CN-CCCH ₃	+ CH ₄	
Reacción 2	(H) ₂ CN-CCCH ₃	+ (CH ₃) ₂ CH ₂	CH ₃ CH ₂ (CH ₃)CN-CCCH ₃	+ CH ₄	
Reacción 3	CH ₃ CH ₂ (H)CN-CCCH ₂ CH ₃	+ CH ₄	CH ₃ CH ₂ (CH ₃)CN-CCCH ₃	+ CH ₄	
MOLÉCULA 13					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	H ((H)CNH)CN-CH ₂ CH ₃	+ CH ₄	H ((H)CNH)CN-CH ₃	+ (CH ₃) ₂	
Reacción 2	H ((H)CNH)CN-CH ₂ CHCH ₂	+ CH ₄	H ((H)CNH)CN-CH ₃	+ CH ₄	
Reacción 3	H ((CH ₃)CNH)CN-CH ₃	+ CH ₄	H ((H)CNH)CN-CH ₃	+ CH ₄	
MOLÉCULA 14					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	H ((H)CNH)CN-CH ₃	+ (CH ₃) ₂	H ((H)CNH)CN-CH ₂ CH ₃	+ CH ₄	
Reacción 2	H ((H)CNH)CN-CHCH ₂	+ (CH ₃) ₂	H ((H)CNH)CN-CH ₂ CH ₃	+ (CH ₃) ₂	
Reacción 3	H ((H)CNH)CN-CCH	+ (CH ₃) ₂	H ((H)CNH)CN-CH ₂ CH ₃	+ (CH) ₂	
MOLÉCULA 15					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	CH ₃ ((H)CNH)CNH	+ (CH ₃) ₂	CH ₃ ((CH ₃)CNH)CNH	+ CH ₄	
Reacción 2	H((H)CNH)CNH	+ (CH ₃) ₂ CH ₂	CH ₃ ((CH ₃)CNH)CNH	+ CH ₄	
Reacción 3	CH ₃ ((CH ₂ CH ₃)CNH)CNH	+ CH ₄	CH ₃ ((CH ₃)CNH)CNH	+ (CH ₃) ₂	
MOLÉCULA 16					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	CH ₃ ((CH ₂ (H)CN-CH ₃)CNH	+ (CH ₃) ₂	CH ₃ ((CH ₂ (CH ₃)CN-CH ₃)CNH	+ CH ₄	
Reacción 2	CH ₃ (CH ₂ (CHCH ₂)CN-CH ₃)CNH	+ CH ₄	CH ₃ ((CH ₂ (CH ₃)CN-CH ₃)CNH	+ CH ₄	
Reacción 3	CH ₃ (CH ₂ (CH ₃)CN-CH ₂ CH ₃)CNH	+ CH ₄	CH ₃ ((CH ₂ (CH ₃)CN-CH ₃)CNH	+ (CH ₃) ₂	

Continuación

MOLÉCULA 31					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{CH}_2((\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CCH})\text{CN}-\text{CCH})$	+ $(\text{CH}_3)_2\text{CNH}$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH_4	
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CN}(\text{CH}_3))\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2\text{CN}-\text{CCH}$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH_4	
Reacción 3	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ $(\text{CH})_2$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH_4	
MOLÉCULA 32					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{H})\text{CNH})\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{CNH}$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CNH})\text{CNH}$	+ CH_4	
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{H})\text{CN}-\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CNH})\text{CNH}$	+ CH_4	
Reacción 3	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CNH})\text{CNH}$	+ CH_4	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CNH})\text{CNH}$	+ CH_4	
MOLÉCULA 33					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{H})\text{CNH})\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{CNH}$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CNH})\text{CNH}$	+ CH_4	
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{H})\text{CN}-\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CNH})\text{CNH}$	+ CH_4	
Reacción 3	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CNH})\text{CNH}$	+ CH_4	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CNH})\text{CNH}$	+ CH_4	
MOLÉCULA 34					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3((\text{CH}_3)\text{CNH})\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2\text{CN}-\text{CHCH}_2$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	+ CH_4	
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{H})\text{CN}-\text{CHCH}_3)\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	+ CH_4	
Reacción 3	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_2)_2$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	+ CH_4	
MOLÉCULA 35					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3((\text{CH}_3)\text{CNH})\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2\text{CN}-\text{CCH}$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH_4	
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{H})\text{CN}-\text{CCH})\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH_4	
Reacción 3	$(\text{CH}_3)_2\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_2)_2$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH_4	
MOLÉCULA 36					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{H})\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)(\text{CH})_2\text{CH}_3$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2(\text{CH}_3))\text{CNH}$	+ CH_4	
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2(\text{CH}_3))\text{CNH}$	+ CH_4	
Reacción 3	$(\text{CH}_3)_2\text{CNH}$	+ CH_2CHCH_3	$\text{CH}_3(\text{CH}_2(\text{CH}_3))\text{CNH}$	+ CH_4	

Continuación

MOLÉCULA 37						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	CH_2CHCH_3	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\underset{\text{H}}{\text{CH}_2})(\text{CH}_3)\text{CN}$	+ CH_4
Reacción 2	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\underset{\text{H}}{\text{CH}_2})(\text{CH}_3)\text{CN}$	+ CH_4
Reacción 3	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\underset{\text{CNH}}{(\text{CH})_2}\text{CH}_2\text{CH}_3)$	+	CH_4	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\underset{\text{H}}{\text{CH}_2})(\text{CH}_3)\text{CN}$	+ $(\text{CH}_3)_2$

MOLÉCULA 38						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{CCH})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2$	→	$\text{CH}_3(\text{CCCH}_3)\text{CNH}$	+ CH_4
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{H})\text{CNH}$	+	CH_3CCCH_3	→	$\text{CH}_3(\text{CCCH}_3)\text{CNH}$	+ CH_4
Reacción 3	$\text{CH}_3(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	CH_4	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\underset{\text{H}}{\text{CH}_2})(\text{CH}_3)\text{CN}$	+ $(\text{CH}_3)_2$

MOLÉCULA 39						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)$	+	$\text{CH}_3(\text{CCH})\text{CNH}$	→	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)(\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH_4
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2(\text{CCCH}_3)\text{CNH}$	+	CH_4	→	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)(\text{CCH})\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2$
Reacción 3	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2(\text{CCH})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2$	→	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)(\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH_4

MOLÉCULA 40						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2(\text{CCH})\text{CNH}$	+	CH_4	→	$\text{CH}_2(\text{CH})(\text{CCH})\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2$
Reacción 2	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\underset{\text{H}}{\text{CH}_2})(\text{CCH})\text{CN}$	+	CH_4	→	$\text{CH}_2(\text{CH})(\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH_4
Reacción 3	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2(\text{CCH})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2$	→	$\text{CH}_2(\text{CH})(\text{CCH})\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2$

MOLÉCULA 41						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)(\text{CCH})\text{CNH}$	+	CH_4	→	$\text{CH}_3(\text{CCH})\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2$
Reacción 2	$\text{CH}_2\text{CH}(\underset{\text{H}}{(\text{CH}_2)\text{CCH}})(\text{CN}$	+	CH_4	→	$\text{CH}_3(\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH_4
Reacción 3	$\text{CHCCH}_2(\text{CCH})(\text{CNH}$	+	CH_4	→	$\text{CH}_3(\text{CCH})\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2$

MOLÉCULA 42						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3(\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	+	CH_4	→	$\text{CH}_3(\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_2)(\text{CH}_2)_2$
Reacción 2	$\text{CH}_2\text{CHCH}_2(\underset{\text{H}}{\text{CHCH}_2})(\text{CN}$	+	CH_4	→	$\text{CH}_3(\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	+ $\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)$
Reacción 3	$\text{CHCCH}_2(\text{CHCH}_2)(\text{CNH}$	+	CH_4	→	$\text{CH}_3(\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2$

MOLÉCULA 43						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2)_4(\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	CH_4	→	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH}_2)_4\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_2)(\text{CH}_3)_2$
Reacción 2	$\text{CH}_2((\text{CH}_2)(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3)(\text{C}$	+	CH_4	→	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH}_2)_4\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ $\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)$
Reacción 3	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{H})(\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_3$	→	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH}_2)_4\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ $(\text{CH}_3)_2$

Continuación

MOLECULA 44					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	CCH(H)CNH	+	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_3$	→	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3(\text{CCH})\text{CNH} + \text{CH}_4$
Reacción 2	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	+	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CCH})\text{C}$ NH	→	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3(\text{CCH})\text{CNH} + \text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)$)
Reacción 3	$\text{CH}_2(\text{CH}_2)_2(\text{CCH})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2$	→	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3(\text{CCH})\text{CNH} + (\text{CH}_3)_2$
MOLECULA 45					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CH}_3$	+	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_3$	→	$\text{CH}_3((\text{CH}_2)_3\text{CH}_3)\text{CN}-$ $(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$ + CH_4
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2(\text{H})\text{CN}-$ CH_2CH_3	+	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_3$	→	$\text{CH}_3((\text{CH}_2)_3\text{CH}_3)\text{CN}-$ $(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$ + $\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)$)
Reacción 3	$(\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CH}_3$	+	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_4$	→	$\text{CH}_3((\text{CH}_2)_3\text{CH}_3)\text{CN}-$ $(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$ + $(\text{CH}_3)_2$
MOLECULA 46					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CCN})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_3$	→	$\text{CH}_3((\text{CH}_2)(\text{CC}(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3)$ $)\text{CNH} + \text{CH}_4$
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2(\text{CCH})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_2$	→	$\text{CH}_3((\text{CH}_2)(\text{CC}(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3)$ $)\text{CNH} + \text{CH}_4$
Reacción 3	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)-$ CNH	+	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)$	→	$\text{CH}_3((\text{CH}_2)(\text{CC}(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3)$ $)\text{CNH} + \text{CH}_4$
MOLECULA 47					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	+	CCH(H)CNH	→	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH} + \text{CH}_4$
Reacción 2	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CCH})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	→	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH} + \text{CH}_4$
Reacción 3	$\text{CCCH}_2\text{CH}_3(\text{H})\text{CNH}$	+	CH_3CHCH_3	→	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH} + \text{CH}_4$
MOLECULA 48					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	CCCH ₃ (H)CNH	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2(\text{CH})_2$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_2)(\text{CCCH}_3)\text{CNH} + \text{CH}_4$
Reacción 2	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CCCH})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_2)(\text{CCCH}_3)\text{CNH} + \text{CH}_4$
Reacción 3	$\text{C}(\text{CH}_2)(\text{CCH})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_2)(\text{CCCH}_3)\text{CNH} + \text{CH}_4$
MOLECULA 49					
REACTIVOS			PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{CH}_2(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CN}$ H	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_2)_3(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CN}$ H + CH_4
Reacción 2	$\text{CCCH}_2\text{CH}_3(\text{H})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_3(\text{CH})_2$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_2)_3(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CN}$ H + CH_4
Reacción 3	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH})_2$ $(\text{CCCH}_3)\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_2)_3(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CN}$ H + CH_4

Continuación

MOLÉCULA 50						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2(\text{CH})_2(\text{CCH})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_2)_2(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CN}$ H	+ CH ₄
Reacción 2	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_2$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_2)_2(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CN}$ H	+ CH ₄
Reacción 3	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CCH})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_4$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_2)_2(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CN}$ H	+ CH ₄
MOLÉCULA 51						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_2$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ CH ₄
Reacción 2	$\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ CH ₄
Reacción 3	$\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)(\text{H})\text{CNH}$	+	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CC}(\text{CH}_2)_2\text{C}_3\text{H}_3$	→	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ CH ₄
MOLÉCULA 52						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	CH_2CHCH_3	+	$\text{CCCH}_3(\text{H})\text{CNH}$	→	$\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)(\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH ₄
Reacción 2	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CCH})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2$	→	$\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)(\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH ₄
Reacción 3	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CCH}$	+	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{H})\text{CNH}$	→	$\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)(\text{CCH})\text{CNH}$	+ CH ₄
MOLÉCULA 53						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)(\text{CCH})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_4$	→	$(\text{CH}_2)_2(\text{CHC})(\text{CH}_3)(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ CH ₄
Reacción 2	$(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_4$	+	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CCH}_3)\text{CNH}$	→	$(\text{CH}_2)_2(\text{CHC})(\text{CH}_3)(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ CH ₄
Reacción 3	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CCCH}_3)$	+	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	→	$(\text{CH}_2)_2(\text{CHC})(\text{CH}_3)(\text{CCCH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+ CH ₄
MOLÉCULA 54						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	$\text{CH}_3(\text{CH})_2(\text{CH}_2)_3\text{CNH}$	+	$\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CH}_2\text{CNH}(\text{H})\text{CNH})\text{CN-CHCH}_2$	→	$((\text{CH})_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CH}_2)\text{CN-CHCH}_2\text{CNH}(\text{H})\text{CNH})\text{CN-CHCH}_2$	+ CH ₄
Reacción 2	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$	+	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH})_2(\text{CH}_2)\text{CN-CHCH}_2\text{CNH}(\text{H})\text{CNH})\text{CNH}$	→	$((\text{CH})_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CH}_2)\text{CN-CHCH}_2\text{CNH}(\text{H})\text{CNH})\text{CN-CHCH}_2$	+ CH ₄
Reacción 3	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH}_2)_3)_3\text{CNH}$	+	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2(\text{H})(\text{CNH})\text{CNH})\text{CN-CHCH}_2$	→	$((\text{CH})_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CH}_2)\text{CN-CHCH}_2\text{CNH}(\text{H})\text{CNH})\text{CN-CHCH}_2$	+ CH ₄

Continuación

MOLÉCULA 55						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	CHC(H)CNH	+	CH ₂ (CH ₂)CH(CH ₃)C(CH ₂ (CCH)CN-CH ₂ CH ₃)CN-CH ₃	→	CHC(CH ₂)CH(CH ₃)C(CH ₂ (CCH)CN-CH ₂ CH ₃)CN-CH ₃ CNH	+ CH ₄
Reacción 2	CCH((CH) ₂ CH ₃)CNH	+	CH ₂ CH(CH ₂ (CCH)CN-CH ₂ CH ₃)CN-CH ₃	→	CHC(CH ₂)CH(CH ₃)C(CH ₂ (CCH)CN-CH ₂ CH ₃)CN-CH ₃ CNH	+ CH ₄
Reacción 3	CCH((CH) ₄ (CH ₂ (CCH)CN-CH ₂ CH ₃)CN-CH ₃)CNH	+	(CH ₃) ₂	→	CHC(CH ₂)CH(CH ₃)C(CH ₂ (CCH)CN-CH ₂ CH ₃)CN-CH ₃ CNH	+ CH ₄
MOLÉCULA 56						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	(H) ₂ CN-CH ₃	+	(CH ₃) ₂	→	(H) ₂ CN-CH ₂ CH ₃	+ CH ₄
Reacción 2	(H) ₂ CN-CH ₂ CH ₃	+	CH ₄	→	(H) ₂ CN-CH ₂ CH ₃	+ (CH ₃) ₂
Reacción 3	(H) ₂ CN-(CH ₂)CH ₃	+	CH ₄	→	(H) ₂ CN-CH ₂ CH ₃	+ (CH ₃) ₂ CH ₂
MOLÉCULA 57						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	(H) ₂ CN-CH ₃	+	(CH ₃) ₂ CH ₂	→	(H) ₂ CN-(CH ₂) ₂ CH ₃	+ CH ₄
Reacción 2	(H) ₂ CN-CH ₂ CH ₃	+	(CH ₃) ₂	→	(H) ₂ CN-(CH ₂) ₂ CH ₃	+ (CH ₃) ₂
Reacción 3	(H) ₂ CN-(CH ₂) ₃ CH ₃	+	CH ₄	→	(H) ₂ CN-(CH ₂) ₂ CH ₃	+ (CH ₃) ₂ CH ₂
MOLÉCULA 58						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	(H) ₂ CN-(CH ₂)CH ₃	+	CH ₄	→	(H) ₂ CN-CHCH ₂	+ (CH ₃) ₂
Reacción 2	(H) ₂ CN-(CH) ₂ CH ₂ CH ₃	+	CH ₄	→	(H) ₂ CN-CHCH ₂	+ (CH ₃) ₂ CH ₂
Reacción 3	CH ₃ (H)CN-CHCH ₂	+	CH ₄	→	(H) ₂ CN-CHCH ₂	+ (CH ₃) ₂
MOLÉCULA 59						
REACTIVOS				PRODUCTOS		
Reacción 1	CH ₃ (CH) ₂ ((CH) ₂ (H)CNH)CNH	+	CHC(H)CNH	→	H((CH) ₂ ((CH) ₂ CC(H)CNH)C(NH)CNH)	+ CH ₄
Reacción 2	H((CH) ₂ (CH ₃)CNH)CNH	+	CH ₂ CHCC(H)CNH	→	H((CH) ₂ ((CH) ₂ CC(H)CNH)C(NH)CNH)	+ CH ₄
Reacción 3	H((CH) ₂ CH ₃)CNH	+	H(CH ₂ CC(H)CNH)CNH	→	H((CH) ₂ ((CH) ₂ CC(H)CNH)C(NH)CNH)	+ CH ₄
MOLÉCULA 60						
REACTIVOS				PRODUCTOS		

Reacción 1	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH})_2(\text{CH}_3)\text{CNH})$	+	$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CCH})\text{C}$ NH	→	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH})_2\text{CH}_2(\text{CH}_2\text{CCH})\text{CNH})\text{CNH}$	+	CH_4
Reacción 2	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	$\text{CH}_2\text{CHCH}_2(\text{CH}_2\text{CCH})\text{CNH}$	→	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH})_2\text{CH}_2(\text{CH}_2\text{CCH})\text{CNH})\text{CNH}$	+	CH_4
Reacción 3	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH})_2\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{CNH})\text{C}$ NH	+	CH_3CCH	→	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH})_2\text{CH}_2(\text{CH}_2\text{CCH})\text{CNH})\text{CNH}$	+	CH_4

Continuación

MOLECULA 61

	REACTIVOS			PRODUCTOS			
Reacción 1	$\text{H}(\text{CC}(\text{CH}_3)\text{CNH})\text{CNH}$	+	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)(\text{H})\text{CNH}$	→	$\text{H}(\text{CC}(\text{CH}_2(\text{CH})_2(\text{H})\text{CNH})\text{C}$ NH)CNH	+	CH_4
Reacción 2	$\text{H}(\text{CC}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CNH})\text{CN}$ H	+	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{H})\text{CNH}$	→	$\text{H}(\text{CC}(\text{CH}_2(\text{CH})_2(\text{H})\text{CNH})\text{C}$ NH)CNH	+	CH_4
Reacción 3	$\text{H}(\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	$\text{CHC}(\text{CH}_2(\text{CH}_2)(\text{H})\text{CNH})\text{CNH}$	→	$\text{H}(\text{CC}(\text{CH}_2(\text{CH})_2(\text{H})\text{CNH})\text{C}$ NH)CNH	+	CH_4

MOLECULA 62

	REACTIVOS			PRODUCTOS			
Reacción 1	$\text{H}(\text{CH}_2\text{CCCH}_3)\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_2\text{CH})_2\text{CNH}$	→	$\text{H}(\text{CH}_2\text{CC})(\text{CH})_2(\text{CHCH}_2)\text{C}$ NH)CNH	+	CH_4
Reacción 2	$\text{H}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	$\text{CHC}(\text{CH})_2(\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	→	$\text{H}(\text{CH}_2\text{CC})(\text{CH})_2(\text{CHCH}_2)\text{C}$ NH)CNH	+	CH_4
Reacción 3	$\text{H}(\text{CH}_2\text{CC}(\text{CH})_2\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	$\text{H}(\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	→	$\text{H}(\text{CH}_2\text{CC})(\text{CH})_2(\text{CHCH}_2)\text{C}$ NH)CNH	+	CH_4

MOLECULA 63

	REACTIVOS			PRODUCTOS			
Reacción 1	CH_2CHCH_3	+	$\text{H}(\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	→	$(\text{CH}_2\text{CH}_2)\text{CNH}$	+	CH_4
Reacción 2	$\text{CH}_3(\text{CH})_2(\text{CHCH}_2)\text{CNH}$	+	CH_4	→	$(\text{CH}_2\text{CH}_2)\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_3)_2$
Reacción 3	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{H})\text{CNH}$	+	$(\text{CH}_2)\text{CHCH}_3$	→	$(\text{CH}_2\text{CH}_2)\text{CNH}$	+	CH_4

MOLECULA 64

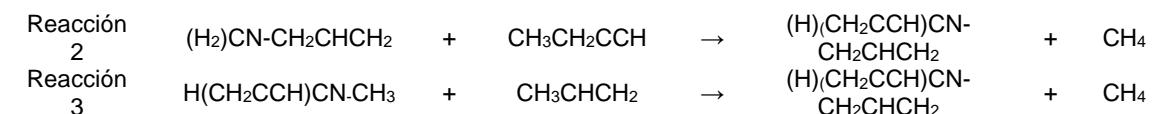
	REACTIVOS			PRODUCTOS			
Reacción 1	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{H})\text{CNH}$	+	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)\text{CH}_2(\text{H})\text{C}$ NH	→	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH})_2\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CN}$ H	+	CH_4
Reacción 2	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH})_2\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{C}$ NH	+	$(\text{H})_2\text{CNH}-\text{CH}_2$ CHCH ₂	→	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH})_2\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CN}$ H	+	CH_4
Reacción 3	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH})_2\text{CH}_2(\text{H})\text{CN}-\text{CH}_3)\text{CNH}$	+	CH_3CHCH_2	→	$\text{CH}_2\text{CH}((\text{CH})_2\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CN}$ H	+	CH_4

MOLECULA 65

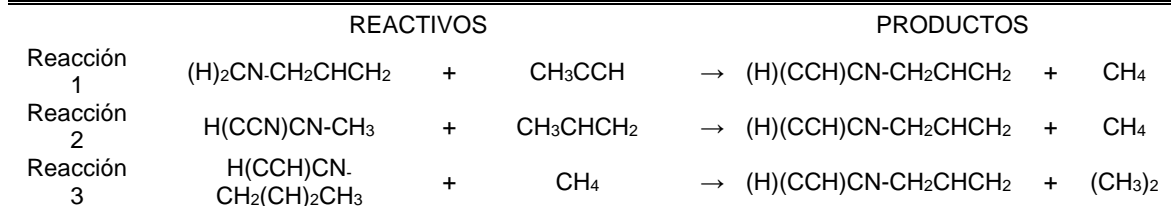
	REACTIVOS			PRODUCTOS			
Reacción 1	$(\text{H})_2\text{CN}-\text{CH}_3$	+	CH_3CHCH_2	→	$(\text{H})_2\text{CN}-\text{CH}_2\text{CHCH}_3$	+	CH_4
Reacción 2	$(\text{H})_2\text{CN}-\text{CH}_2(\text{CH})_2\text{CH}_3$	+	CH_4	→	$(\text{H})_2\text{CN}-\text{CH}_2\text{CHCH}_3$	+	$(\text{CH}_3)_2$
Reacción 3	$(\text{H})_2\text{CN}-\text{CH}_2\text{CH}_3$	+	$(\text{CH}_2)_2$	→	$(\text{H})_2\text{CN}-\text{CH}_2\text{CHCH}_3$	+	CH_4

MOLECULA 66

	REACTIVOS			PRODUCTOS			
Reacción 1	$(\text{H})(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CN}-\text{CH}_2\text{CHCH}_2$	+	$(\text{CH})_2$	→	$(\text{H})(\text{CH}_2\text{CCH})\text{CN}-\text{CH}_2\text{CHCH}_2$	+	CH_4

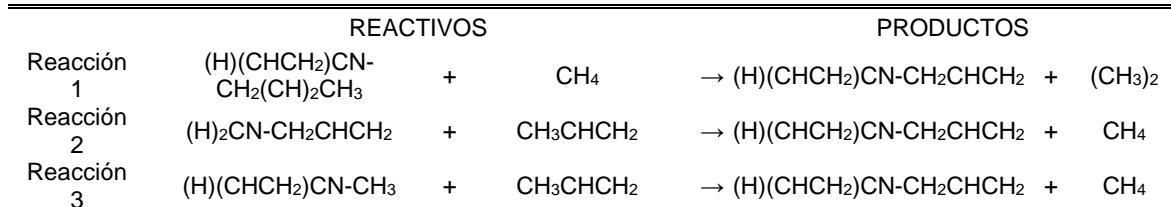


MOLÉCULA 67

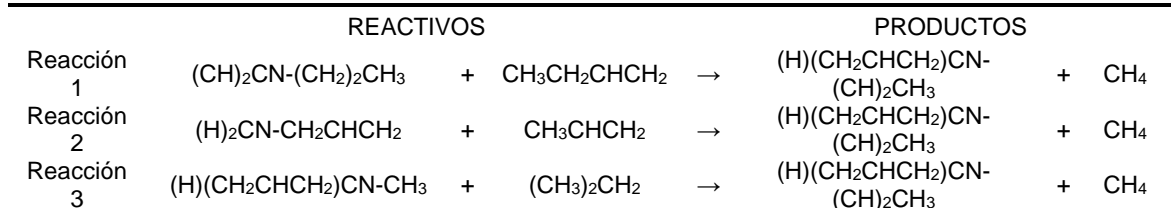


Continuación

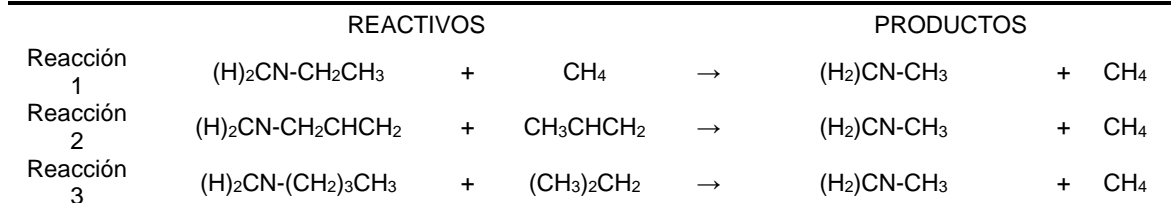
MOLÉCULA 68



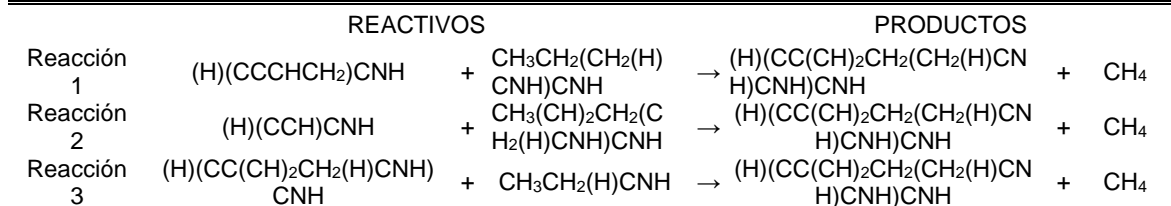
MOLÉCULA 69



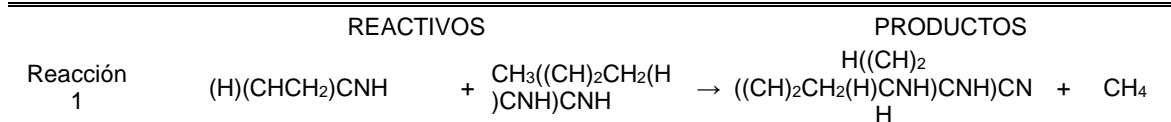
MOLÉCULA 70

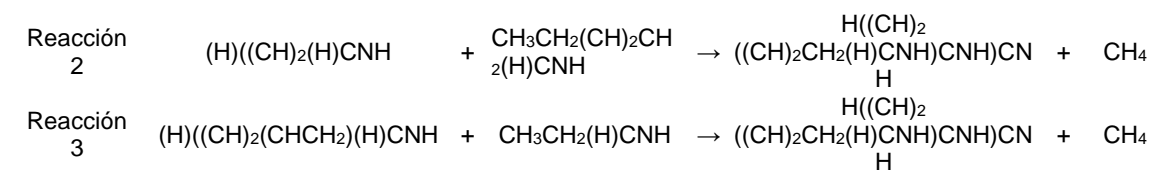


MOLÉCULA 71

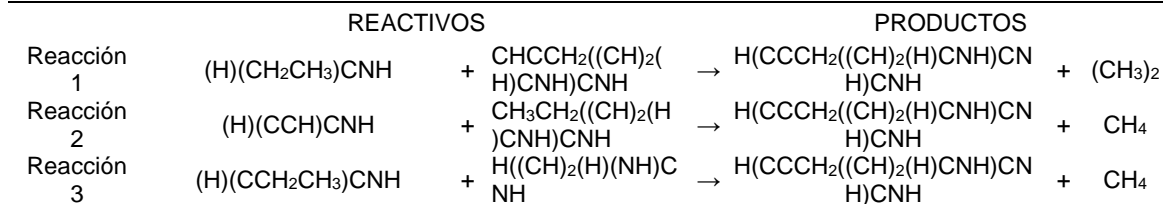


MOLÉCULA 72



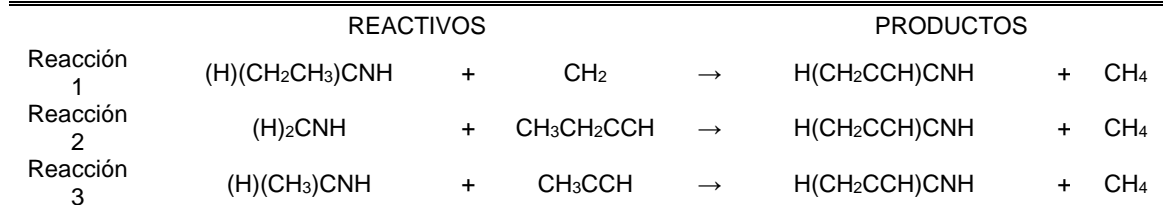


MOLECULA 73



Continuación

MOLECULA 74



ANEXO D. ENERGÍA A CONDICIONES ESTÁNDAR

El archivo con los resultados calculados por Gaussian, tiene la extensión *.out, donde es posible encontrar la energía en condiciones estándar. El ítem resaltado “*Sum of electronic and thermal Energies*” corresponde al valor a emplear en los cálculos de energía de reacción de las reacciones isodésmicas descritas en los apartados 2.2 y 2.4 del marco metodológico.

```
-----  
- Thermochemistry -  
-----  
Temperature    298.150 Kelvin.  Pressure    1.00000 Atm.  
  
Zero-point correction=                0.074315 (Hartree/Particle)  
Thermal correction to Energy=         0.077797  
Thermal correction to Enthalpy=       0.078741  
Thermal correction to Gibbs Free Energy= 0.051201  
Sum of electronic and zero-point Energies= -79.782263  
Sum of electronic and thermal Energies= -79.778781  
Sum of electronic and thermal Enthalpies= -79.777837  
Sum of electronic and thermal Free Energies= -79.805376
```

ANEXO E MATRIZ DE COMPUESTOS NITROGENADOS EXPRESADOS EN SUS GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN DESCONOCIDOS Y CONOCIDOS

Tabla matriz de compuestos nitrogenados expresados en sus grupos de contribución desconocidos y conocidos.

MOLECULA	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
C_{DN}/C_2	1	1	1	1			1	1	1	1	1	1		
$C/C_{DN}/H_3$	1	1	2	2	1	1	2	1	1	1	2	1		
$C/C_{DN}/C/H_2$	1	1							1	1		1		
$C/N_{DC}/H_3$				1	1	1								1
$C_d/C_{DN}/H$					1			1						
$C_{DN}/C_d/C$					1									
C_T/C_{DN}						1								
$C_{DN}/C_T/C$						1								
N_{DC}/C_d							1		1					
$C_d/N_{DC}/H$							1	1	1					
$N_{DC}/C_T + C_T/N_{DC}$										1	1	1		
$C_{DN}/C_{DN}/H$													2	2
$C/(C_{DN})_2/H_2$														
$C_{DN}/C_{DN}/C$														
$C/N_{DC}/C/H_2$														1
$C_{DN}/C_T/C_d$														
$C_d/C_{DN}/C$														
$C/N_{DC}/C_d/H_2$														
$C_{DN}/C_d/H$														
$C_{DN}/C_T/H$														
C_{DN}/H_2														
$C_{DN}/C/H$														
$C/C_{DN}/C_d/H_2$														
$C/C_{DN}/C_T/H_2$														
$C_{DN}/(C_d)_2$														
Suma de grupos de contribución conocidos	0.7	-5.0	0.5	8.1	24.6	41.2	-6.5	0.4	-4.9	9.1	-8.4	-4.2	15.5	0.7

Continuación

MOLECULA	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	30
C_{DN}/C_2		2	2	2	1	2	2	2	1	2	2	2	1	2	2
$C/ C_{DN}/H_3$	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
$C/ C_{DN}/C/H_2$			2	2											
$C/ N_{DC}/ H_3$		1			1		1	1	1		1				
$C_d/ C_{DN}/ H$															
$C_{DN}/ C_d / C$															
C_T/ C_{DN}															
$C_{DN} / C_T/ C$															
N_{DC}/ C_d			1				1			1	1	1	1		
$C_d/ N_{DC}/ H$			1				1			1	1	1	1		
$N_{DC} / C_T + C_T/N_{DC}$				1				1				1		1	1
$C_{DN}/ C_{DN}/ H$															
$C/ (C_{DN})_2 / H_2$		1			1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$C_{DN}/ C_{DN}/ C$	2				2				2				2		
$C/ N_{DC}/ C/H_2$						1									1
$C_{DN}/ C_T/ C_d$															
$C_d/ C_{DN}/ C$															
$C/ N_{DC}/ C_D/ H_2$															
$C_{DN}/ C_D/ H$															
$C_{DN}/ C_T/ H$															
C_{DN}/ H_2															
$C_{DN}/ C/ H$															
$C/ C_{DN}/ C_D/ H_2$															
$C/ C_{DN}/ C_T/ H_2$															
$C_{DN}/ (C_D)_2$															
Suma de grupos de contribución conocidos	21.1	27.3	35.3	61.1	60.2	20.1	42.0	52.9	62.1	26.8	37.8	41.6	48.7	63.8	44.6

Continuación

MOLECULA	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45
C_{DN}/C_2	1	1	1	1	1										1
$C/ C_{DN}/H_3$	2	2	2	2	2	1		1			1	1			1
$C/ C_{DN}/C/H_2$							1		1				1	1	1
$C/ N_{DC}/ H_3$															
$C_d/ C_{DN}/ H$						1	1			1		1	1		
$C_{DN}/ C_d / C$						1	1					1	1		
C_T/ C_{DN}								1	1	1	1				1
$C_{DN} / C_T/ C$								1	1			1			1
N_{DC}/ C_d				1											
$C_d/ N_{DC}/ H$				1											
$N_{DC} / C_T + C_T/N_{DC}$	1				1										
$C_{DN}/ C_{DN}/ H$															
$C/ (C_{DN})_2/ H_2$	1	1	1	1	1										
$C_{DN}/ C_{DN}/ C$	2	2	2	2	2										
$C/ N_{DC}/C/H_2$			1												1
$C_{DN}/C_T/C_d$										1					
$C_d/C_{DN}/C$															
$C/N_{DC}/C_D/H_2$															
$C_{DN}/C_D/H$															
$C_{DN}/C_T/H$															
C_{DN}/H_2															
$C_{DN}/C/H$															
$C/C_{DN}/C_D/H_2$															
$C/C_{DN}/C_T/H_2$															
$C_{DN}/(C_D)_2$															
Suma de grupos de contribución conocidos	51.8	85.7	47.2	52.4	56.2	81.8	20.1	12.4	39.2	31.9	47.2	35.0	14.0	10.4	22.3

Continuación

MOLECULA	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60
C_{DN}/C_2															1
$C/ C_{DN}/H_3$															
$C/ C_{DN}/C/H_2$									1						
$C/ N_{DC}/ H_3$										1					
$C_d/ C_{DN}/ H$	1	1	1	1	1				1	1				3	2
$C_{DN}/ C_d/ C$									2	1					
C_T/ C_{DN}	1	1	1	1	1	1	1	1		2				1	
$C_{DN} / C_T/ C$										1					
N_{DC}/ C_d									1				1		
$C_d/ N_{DC}/ H$									1				1		
$N_{DC} / C_T + C_T/N_{DC}$															
$C_{DN}/ C_{DN}/ H$									1						
$C/ (C_{DN})_2/ H_2$									1	1					
$C_{DN}/ C_{DN}/ C$									1						
$C/ N_{DC}/C/H_2$											1	1			
$C_{DN}/C_T/C_d$	1	1	1	1	1	1	1	1		1					
$C_d/C_{DN}/C$						1	1	1	1	1					
$C/N_{DC}/C_D/H_2$															
$C_{DN}/C_D/H$															1
$C_{DN}/C_T/H$															1
C_{DN}/H_2											1	1	1		
$C_{DN}/C/H$															
$C/C_{DN}/C_D/H_2$															1
$C/C_{DN}/C_T/H_2$															1
$C_{DN}/(C_D)_2$														1	1
Suma de grupos de contribución conocidos	-	18.	38.	30.	14.	20.	25.	55.	8.	55.	114.	10.	3.	9.	91.
	11.3	9	5	9	5	1	3	7	1	7	4	2	6	5	4

Continuación

MOLECULA	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	72	74
C_{DN}/C_2											1			
$C/ C_{DN}/H_3$														
$C/ C_{DN}/C/H_2$														
$C/ N_{DC}/ H_3$										1				
$C_d/ C_{DN}/ H$	1	2	2	2				1				3	2	
$C_{DN}/ C_d / C$														1
C_T/ C_{DN}	2						1				1		1	
$C_{DN} / C_T/ C$	1													
N_{DC}/ C_d														
$C_d/ N_{DC}/ H$														
$N_{DC} / C_T + C_T/N_{DC}$														
$C_{DN}/ C_{DN}/ H$														
$C/ (C_{DN})_2 / H_2$											1			
$C_{DN}/ C_{DN}/ C$														
$C/ N_{DC}/C/H_2$										1				
$C_{DN}/C_T/C_d$														
$C_d/C_{DN}/C$														
$C/N_{DC}/C_D/H_2$				1	1	1	1	1						
$C_{DN}/C_D/H$	1							1				1	1	
$C_{DN}/C_T/H$	1						1				1		1	
C_{DN}/H_2					1					1				
$C_{DN}/C/H$		1		1		1			1		1	1		1
$C/C_{DN}/C_D/H_2$	1			1					1		1	1		
$C/C_{DN}/C_T/H_2$		1				1							1	1
$C_{DN}/(C_D)_2$		1	1	1								1		
Suma de grupos de contribución conocidos	108.3	75.9	106.3	37.8	70.3	38.7	89.8	65.8	45.4	22.6	15.1	93.6	68.9	87.8

ANEXO F. REACCIONES ISODÉSMICAS EXPRESADAS EN SUS GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN

Tabla Reacciones isodésmicas expresadas en sus grupos de contribución desconocidos y el promedio de ΔH_{RXN} más grupos de contribución conocidos

<div style="display: flex; align-items: center;"> <div style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);"> MOLECULA $\Delta H^{\circ}f_{MDES}$ [kcal/mol] </div> <div style="margin-left: 10px;"> 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 </div> </div>												
C _{DN} /C ₂		1/3						1/3				
(C/ C _{DN} /H ₃)		2/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	2/3	1/3	1/3
C/ C _{DN} /C/H ₂	1/3	2/3			1/3							
C/N _{DC} /H ₃				1/3	2/3	1/3						
C _D /C _{DN} /H					2/3			2/3				
C _{DN} /C _D /C					2/3			1/3				
C _T /C _{DN}						2/3						
C _{DN} /C _T /C						1/3						
N _{DC} /C _D							2/3	2/3	2/3			
C _D /N _{DC} /H							2/3	2/3	2/3			
N _{DC} /C _T + C _T /N _{DC}										1	2/3	1
C _{DN} /C _{DN} /H												
C/(C _{DN}) ₂ /H ₂												
C _{DN} /C _{DN} /C												
C/ N _{DC} /C/H ₂						1/3						
C _{DN} /C _T /C _D												
C _D /C _{DN} /C												
C/N _{DC} /C _D /H ₂												
C _{DN} /C _D /H								1/3				
C _{DN} /C _T /H						1/3						
C _{DN} /H ₂							1/3			1/3	1/3	2/3
C _{DN} /C/H	1/3	1/3	1/3	1/3			1/3		1/3	2/3	1/3	1/3
C/C _{DN} /C _D /H ₂												
C/C _{DN} /C _T /H ₂												
C _{DN} /(C _D) ₂												
Promedio de ΔH_{RXN} más grupos de contribución conocidos	-5.3	-9.2	5.8	5.0	24.6	41.1	-8.5	1.1	-9.8	9.2	-10.5	-4.2

Continuación

MOLÉCULA	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
$\Delta H^{\circ}_{f_{MDES}}$ [kcal/mol]												
C _{DN} /C ₂				2/3	1	1	2/3	5/3	1	2/3	2/3	2/3
(C/ C _{DN} /H ₃)	1/3		1/3	1	1	1	5/3	7/3	1	1	5/3	4/3
C/ C _{DN} /C/H ₂					4/3	4/3				1/3		1/3
C/N _{DC} /H ₃	1/3			2/3	1/3	1/3	2/3	1/3	1	2/3	2/3	
C _D /C _{DN} /H				1/3								
C _{DN} /C _D /C				1/3								
C _T /C _{DN}												
C _{DN} /C _T /C												
N _{DC} /C _D		1/3			1/3				1/3			2/3
C _D /N _{DC} /H		1/3			1/3				1/3			2/3
N _{DC} /C _T + C _T /N _{DC}		1/3				1/3				2/3		
C _{DN} /C _{DN} /H	1	4/3	1				1/3				1/3	
C/(C _{DN}) ₂ /H ₂				2/3			1/3	2/3	2/3	1/3	1/3	1/3
C _{DN} /C _{DN} /C	1/3		1/3				1				1	
C/ N _{DC} /C/H ₂	1/3							2/3				
C _{DN} /C _T /C _D												
C _D /C _{DN} /C												
C/N _{DC} /C _D /H ₂												
C _{DN} /C _D /H												
C _{DN} /C _T /H												
C _{DN} /H ₂												
C _{DN} /C/H				1/3	1/3	1/3		1/3	1/3	2/3		2/3
C/C _{DN} /C _D /H ₂												
C/C _{DN} /C _T /H ₂												
C _{DN} /(C _D) ₂												
Promedio de ΔH_{RXN} más grupos de contribución conocidos	7.8	-15.8	18.6	25.2	37.8	66.3	66.0	20.1	40.4	46.4	59.1	19.7

Continuación

MOLÉCULA	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
$\Delta H^{\circ}_{f_{MDES}}$ [kcal/mol]												
C _{DN} /C ₂	1	1	2/3	1	1	4/3	1	1/3	2/3	2/3	1/3	1/3
(C/ C _{DN} /H ₃)	1	1	5/3	1	1	2	4/3	2/3	7/3	7/3	1	1
C/ C _{DN} /C/H ₂	1/3	1/3						1/3				
C/N _{DC} /H ₃	1/3	1/3		1/3	1/3	1/3	1/3		1/3	1/3	1/3	
C _D /C _{DN} /H												1/3
C _{DN} /C _D /C												1/3
C _T /C _{DN}												
C _{DN} /C _T /C												
N _{DC} /C _D	1/3	2/3	2/3			1/3				2/3		
C _D /N _{DC} /H	1/3	2/3	2/3			1/3				2/3		
N _{DC} /C _T + C _T /N _{DC}		1/3		1/3	2/3	2/3	1/3				1/3	
C _{DN} /C _{DN} /H			1/3									
C/(C _{DN}) ₂ /H ₂	1/3	1/3	1/3	2/3	2/3	1/3	2/3	2/3	2/3	2/3	2/3	
C _{DN} /C _{DN} /C			1				2/3	4/3	2	2	4/3	
C/ N _{DC} /C/H ₂					1/3				2/3			
C _{DN} /C _T /C _D												
C _D /C _{DN} /C												
C/N _{DC} /C _D /H ₂												
C _{DN} /C _D /H												
C _{DN} /C _T /H												
C _{DN} /H ₂												
C _{DN} /C/H	1/3	1/3		1/3	1/3			1/3	1/3	1/3	1/3	
C/C _{DN} /C _D /H ₂												
C/C _{DN} /C _T /H ₂												
C _{DN} /(C _D) ₂												
Promedio de ΔH_{RXN} más grupos de contribución conocidos	36.2	35.9	46.4	65.3	38.3	42.4	88.3	42.9	52.4	56.2	83.1	20.1

Continuación

MOLÉCULA	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48
$\Delta H^{\circ}_{f_{MDES}}$ [kcal/mol]												
C_{DN}/C_2									2/3			
$(C/C_{DN}/H_3)$		1/3							1			
$C/C_{DN}/C/H_2$	2/3		2/3		1/3		2/3		1/3			
$C/N_{DC}/H_3$									2/3			
$C_D/C_{DN}/H$	2/3			2/3		2/3	2/3			1	1/3	2/3
$C_{DN}/C_D/C$	2/3					2/3	2/3					
C_T/C_{DN}		1/3	2/3	2/3	2/3			1/3		1	1	1
$C_{DN}/C_T/C$		1/3	2/3		2/3							
N_{DC}/C_D												
$C_D/N_{DC}/H$												
$N_{DC}/C_T + C_T/N_{DC}$												
$C_{DN}/C_{DN}/H$												
$C/(C_{DN})_2/H_2$												
$C_{DN}/C_{DN}/C$												
$C/N_{DC}/C/H_2$												
$C_{DN}/C_T/C_D$				2/3						1	1/3	2/3
$C_D/C_{DN}/C$												
$C/N_{DC}/C_D/H_2$												
$C_{DN}/C_D/H$												
$C_{DN}/C_T/H$								1/3			2/3	1/3
C_{DN}/H_2												
$C_{DN}/C/H$												
$C/C_{DN}/C_D/H_2$							1/3					
$C/C_{DN}/C_T/H_2$					1/3	1/3						
$C_{DN}/(C_D)_2$												
Promedio de ΔH_{RXN} más grupos de contribución conocidos	4.1	42.7	30.1	47.6	35.1	13.6	15.3	21.3	-7.6	18.9	38.5	30.9

Continuación

MOLÉCULA	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60
ΔH°_{fMDES} [kcal/mol]												
C _{DN} /C ₂												1/3
(C/ C _{DN} /H ₃)										1/3		2/3
C/ C _{DN} /C/H ₂						1/3						
C/N _{DC} /H ₃							2/3					
C _D /C _{DN} /H	1/3	1	1/3	1/3	2/3	5/3	2/3				5/3	1
C _{DN} /C _D /C						1/3	2/3					1/3
C _T /C _{DN}	2/3	1	2/3	2/3			1 1/3				2/3	
C _{DN} /C _T /C							2/3					
N _{DC} /C _D							2/3			2/3		
C _D /N _{DC} /H							2/3			2/3		
N _{DC} /C _T + C _T /N _{DC}												
C _{DN} /C _{DN} /H							2/3					
C/(C _{DN}) ₂ /H ₂							2/3	2/3				
C _{DN} /C _{DN} /C							2/3					
C/ N _{DC} /C/H ₂								2/3	2/3	2/3		
C _{DN} /C _T /C _D	1/3	1	2/3	1/3			1/3					
C _D /C _{DN} /C			1/3		2/3	1/3	1/3					
C/N _{DC} /C _D /H ₂												
C _{DN} /C _D /H											1	
C _{DN} /C _T /H	1/3			1/3			1/3				2/3	
C _{DN} /H ₂								2/3	2/3	1/3		
C _{DN} /C/H										1/3		
C/C _{DN} /C _D /H ₂												1/3
C/C _{DN} /C _T /H ₂												2/3
C _{DN} /(C _D) ₂						1/3					1/3	2/3
Promedio de ΔH_{RXN} más grupos de contribución conocidos	14.6	20.1	15.9	47.0	4.2	47.0	113.3	11.8	5.3	11.8	86.0	55.7

Continuación

MOLÉCULA	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74
$\Delta H^{\circ}f_{\text{MDES}}$ [kcal/mol]														
C_{DN}/C_2											2/3			
$(C/C_{\text{DN}}/H_3)$	2/3											1/3		
$C/C_{\text{DN}}/C/H_2$	1/3	1/3									2/3	1/3	2/3	1/3
$C/N_{\text{DC}}/H_3$					1/3	1/3	1/3		1/3					
$C_{\text{D}}/C_{\text{DN}}/H$	1	4/3	4/3	1				1/3				5/3	4/3	
$C_{\text{DN}}/C_{\text{D}}/C$												1/3	2/3	
$C_{\text{T}}/C_{\text{DN}}$	5/3						1/3				1		1/3	
$C_{\text{DN}}/C_{\text{T}}/C$	1													
$N_{\text{DC}}/C_{\text{D}}$														
$C_{\text{D}}/N_{\text{DC}}/H$														
$N_{\text{DC}}/C_{\text{T}} +$ $C_{\text{T}}/N_{\text{DC}}$														
$C_{\text{DN}}/C_{\text{DN}}/H$														
$C/(C_{\text{DN}})_2/H_2$											2/3			
$C_{\text{DN}}/C_{\text{DN}}/C$														
$C/N_{\text{DC}}/C/H_2$					1/3				1/3	2/3				
$C_{\text{DN}}/C_{\text{T}}/C_{\text{D}}$														
$C_{\text{D}}/C_{\text{DN}}/C$														
$C/N_{\text{DC}}/C_{\text{D}}/H_2$				2/3		1/3	1/3	2/3						
$C_{\text{DN}}/C_{\text{D}}/H$	1		2/3	1/3				1/3				2/3	2/3	
$C_{\text{DN}}/C_{\text{T}}/H$	2/3						2/3				1		1/3	
C_{DN}/H_2				1/3	2/3	1/3		1/3	1/3	2/3				
$C_{\text{DN}}/C/H$	1/3	2/3		1/3		1/3			1/3		4/3	2/3	1/3	1/3
$C/C_{\text{DN}}/C_{\text{D}}/H_2$	1/3			1/3					1/3		2/3	1/3		
$C/C_{\text{DN}}/C_{\text{T}}/H_2$		1/3				1/3							1/3	
$C_{\text{DN}}/(C_{\text{D}})_2$		2/3	1/3	1/3								1/3		
Promedio de ΔH_{RXN} más grupos de contribución conocidos	75.9	101.5	37.8	68.0	40.5	88.3	52.4	43.9	19.7	15.7	93.6	68.6	92.9	68.7

ANEXO G REPORTES DE ERROR DE ENERGÍA DE FORMACIÓN ENTRE MÉTODO CUÁNTICO Y GRUPOS DE CONTRIBUCIÓN

Tabla de reportes de error de energía de formación entre método cuántico y grupos de contribución.

Molécula	Reacción	Energía de formación por método DFT (kcal/mol)	Energía de formación por grupos de contribución(kcal/mol)	ERROR %
1	2	-6.28	-4.22	33%
	3	-6.84	-5.84	15%
2	2	-2.17	-4.79	121%
	3	-7.26	-5.84	20%
3	1	-6.67	-5.84	12%
	2	-14.09	-15.66	11%
4	1	-2.81	-5.84	108%
	2	-9.50	-15.66	65%
5	2	6.15	-5.84	10%
	3	1.20	-15.66	10%
6	1	-7.35	-14.65	99%
	2	3.12	3.61	16%
7	1	-12.61	-15.66	24%
	2	-7.55	-5.84	23%
8	1	-3.18	-7.87	148%
	2	5.30	-10.86	305%
9	1	-4.94	-4.22	15%
	3	-10.14	-13.99	38%
10	1	-5.92	-4.22	29%
	2	-13.98	-13.99	0%
	3	2.80	5.49	96%
11	1	-6.83	-5.84	14%
	2	-14.26	-15.66	10%

Continuación

Molécula	Reacción	Energía de formación por método DFT (kcal/mol)	Energía de formación por grupos de contribución(kcal/mol)	ERROR %
12	1	-5.50	-4.22	23%
	2	-13.06	-13.99	7%
	3	-12.48	-11.54	7%
13	1	3.26	3.61	11%
	3	7.08	-13.17	286%
14	1	-1.58	-3.61	128%
	3	6.61	25.25	282%
15	1	-6.41	13.17	306%
	2	-12.13	29.05	339%
16	1	-3.45	-5.84	70%
	2	4.96	6.83	38%
17	1	-3.65	-5.84	60%
	2	-8.98	-24.34	171%
18	1	-0.50	-0.98	96%
	2	-5.67	-5.84	3%
19	2	4.88	5.95	22%
	3	2.79	5.85	110%
20	1	-14.29	-5.84	59%
	3	-9.66	-3.61	63%
21	1	-6.65	-5.53	17%
	3	-10.92	-5.53	123%
22	1	-6.84	-25.92	279%
	3	-2.46	1.18	148%

Continuación

Molécula	Reacción	Energía de formación por método DFT (kcal/mol)	Energía de formación por grupos de contribución(kcal/mol)	ERROR %
23	2	-1.01	-10.61	952%
	3	-4.67	13.17	382%
24	1	-6.61	-5.84	12%
	2	-4.64	1.18	125%
25	1	-6.61	18.60	381%
	2	-9.31	-31.66	240%
26	1	-5.80	25.92	547%
	3	-11.30	-28.85	155%
27	1	4.74	5.95	25%
	3	-3.21	-10.61	231%
28	1	-7.52	-5.84	22%
	3	-12.68	-28.85	128%
29	1	-2.20	-5.84	166%
	3	-3.24	-3.61	11%
30	1	-2.97	-5.84	97%
	2	5.74	5.95	4%
31	2	3.28	5.95	81%
	3	-13.62	-28.85	112%
32	2	-5.99	-5.84	2%
	3	4.05	3.32	18%
33	1	8.62	5.95	31%
	2	2.16	-5.84	370%
	3	6.24	-3.61	158%

Continuación

Molécula	Reacción	Energía de formación por método DFT (kcal/mol)	Energía de formación por grupos de contribución(kcal/mol)	ERROR %
34	1	2.45	5.95	143%
	2	-4.90	-5.84	19%
35	2	-7.00	-5.84	17%
	3	-10.27	-28.85	181%
36	1	-8.36	-7.57	9%
	3	-6.29	-6.94	10%
37	1	-4.84	-5.51	14%
	3	0.68	4.76	599%
38	1	-8.77	-7.22	18%
	2	-5.17	-22.93	343%
39	1	-0.57	-0.98	72%
	2	9.43	7.22	23%
40	1	1.45	5.51	280%
	2	5.50	5.33	3%
41	1	1.05	1.08	3%
	3	-1.81	3.79	310%
42	2	-0.72	2.18	401%
	3	-1.69	3.79	325%
43	2	2.50	-10.79	532%
	3	-4.67	-5.70	22%
44	1	-8.16	-12.87	58%
	3	-1.62	-2.71	68%

Continuación

Molécula	Reacción	Energía de formación por método DFT (kcal/mol)	Energía de formación por grupos de contribución(kcal/mol)	ERROR %
45	1	-3.83	-3.45	10%
	3	-4.66	-1.93	59%
46	1	-14.13	-9.65	32%
	2	-13.29	-6.96	48%
	3	-5.84	-5.51	6%
47	1	-16.92	-20.90	24%
	2	-8.77	-7.00	20%
	3	-8.71	-16.84	93%
48	2	-8.43	-9.79	16%
	3	-8.53	-7.03	18%
49	2	-9.80	-11.96	22%
	3	-5.72	2.50	144%
50	1	-3.50	-7.00	100%
	2	-4.07	-5.28	30%
	3	-7.50	-9.56	27%
51	2	-3.20	-5.33	66%
	3	-6.16	-11.32	84%
52	1	-5.00	-21.46	329%
	2	-4.71	-11.84	152%
53	1	-4.41	-11.84	168%
	2	-2.48	5.51	322%
54	1	-6.34	-2.42	62%
	3	-1.43	-14.36	906%
55	1	-11.13	-6.29	43%
	2	-5.42	-21.48	296%

Continuación

Molécula	Reacción	Energía de formación por método DFT (kcal/mol)	Energía de formación por grupos de contribución(kcal/mol)	ERROR %
56	1	3.417	2.706	21%
	2	3.141	2.710	14%
57	2	-3.42	-2.71	21%
	3	1.40	2.71	93%
58	1	7.52	5.51	27%
	2	6.75	12.52	86%
59	1	-19.76	10.55	153%
	2	-6.82	-3.59	47%
60	1	1.69	-2.08	223%
	2	-1.14	-21.10	1744%
61	1	3.31	-2.08	163%
	2	-1.47	-6.19	321%
62	1	-8.09	-5.57	31%
	2	-6.53	-10.05	54%
63	1	-3.074	-7.409	141%
	2	5.611	5.509	2%
64	1	-4.35	-7.41	70%
	2	-7.28	-12.08	66%
65	2	4.47	5.51	23%
	3	-4.22	1.22	129%
66	1	-5.35	-10.51	96%
	2	-6.40	-9.00	41%

Continuación

molécula	Reacción	Energía de formación por método DFT (kcal/mol)	Energía de formación por grupos de contribución(kcal/mol)	ERROR %
67	2	-1.75	3.01	272%
	3	4.85	-29.44	706%
68	1	4.33	5.51	27%
	2	-12.30	-21.98	79%
69	1	-7.44	-9.49	28%
	2	-3.61	-3.61	0%
70	1	1.380	3.608	161%
	2	2.969	3.569	20%
71	1	-4.50	-6.51	45%
	2	-5.06	7.97	258%
72	2	-1.91	-4.89	157%
	3	-4.35	-6.51	50%
73	1	-4.49	-14.63	226%
	2	-6.76	-10.05	49%
74	1	-7.33	-10.51	43%
	2	-7.39	-13.73	86%