

Trabajo Fin de Grado

ESTUDIO VOLUMÉTRICO DE MEZCLAS EUTÉCTICAS BASADAS EN ALCOHOL ANISÍLICO

VOLUMETRIC STUDY OF EUTECTIC MIXTURES BASED ON P-ANISYL ALCOHOL

AUTOR

Roberto Martín Ramo

DIRECTOR

Héctor Artigas Lafaja

Grado en Química

Departamento de Química Física

Zaragoza, Enero 2025

RESUMEN

En la actualidad hay una tendencia a reemplazar el uso de disolventes orgánicos tradicionales por compuestos o mezclas de compuestos consideradas menos nocivas para la salud y el medio ambiente. Los disolventes eutécticos profundos naturales (NaDES) se caracterizan por su sencillez de obtención, bajo impacto ambiental y amplio espectro de propiedades químicas. Como su obtención no involucra una reacción química obtenemos un rendimiento completo sin productos secundarios. Entre las propiedades más interesantes se encuentra la disminución del punto de fusión de sus mezclas, que son considerablemente más bajos que el punto de fusión de cada uno de los componentes individuales. Además, su capacidad para actuar como catalizadores y estereodirectores es de gran importancia debido a la presencia de centros quirales que se encuentran típicamente en los alcoholes.

Este trabajo se enfoca en las propiedades volumétricas (densidad, velocidad de propagación del sonido e índice de refracción) en mezclas de NaDES de citronelol, citronelal y linalool con alcohol anisílico en proporción equimolar. Posteriormente se obtendrán diversas propiedades derivadas utilizando las medidas experimentales. En cada medición se han utilizado técnicas e instrumentación que serán explicadas a lo largo del trabajo. Los resultados obtenidos se insertan en el contexto de la importancia para la Química Verde, puesto que plantean nuevas oportunidades de disolventes, medios de reacción y catalizadores en procesos de sostenibilidad industrial.

ABSTRACT

Currently, there is a growing trend to replace traditional organic solvents with compounds or mixtures of compounds considered less harmful to human's health and the environment. Natural Deep Eutectic Solvents (NaDES) are characterized by their easy preparation, low environmental impact, and wide range of chemical properties. Since their preparation does not involve a chemical reaction, they achieve 100% product with no by-products. One of their most remarkable properties is the significant depression of the melting point in their mixtures, which are substantially lower than the melting points of the individual components. Additionally, their ability to act as catalysts and stereodirectors¹ is of great importance, particularly due to the presence of chiral centers, typically found in alcohols.

This work focuses on the volumetric properties (density, speed of sound propagation, and refractive index) of NaDES mixtures composed of citronellol, citronellal, and linalool with an equimolar proportion of anisyl alcohol. Subsequently, derived properties will be determined based on experimental measurements. Each measurement employs techniques and instrumentation that will be detailed throughout the study. The results obtained are positioned within the framework of Green Chemistry importance, as they highlight new opportunities for solvents, reaction media, and catalysts in sustainable industrial processes.

ACRÓNIMOS Y ABREVIATURAS

- DES: Disolvente Eutéctico Profundo
 - NaDES: Disolvente Eutéctico Profundo Natural
 - IL: Líquido Iónico
 - COV: Compuesto Orgánico Volátil
 - Co: Citronelol
 - Ca: Citronelal
 - L: Linalool
 - Aa: Alcohol Anisílico
 - Co:Aa: Mezcla eutéctica (Citronelol:Alcohol anisílico) (1:1)
 - Ca:Aa: Mezcla eutéctica (Citronelal:Alcohol anisílico) (1:1)
 - L:Aa: Mezcla eutéctica (Linalool:Alcohol anisílico) (1:1)
 - ρ : Densidad
 - u: Velocidad de propagación del sonido
 - n_D : Índice de refracción
 - α_p : Coeficiente de expansión isobárico
 - κ_S : Compresibilidad isentrópica
 - L_f : Distancia libre intermolecular
 - R_m : Refractividad molar
 - f_m : Volumen libre
-

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	1
2. OBJETIVOS	5
2.1. OBJETIVOS ACADÉMICOS	5
2.2. OBJETIVOS CIENTÍFICOS	5
3. PARTE EXPERIMENTAL	6
3.1. COMPUESTOS	6
3.2. PREPARACIÓN NaDES	6
3.3. CARACTERIZACIÓN VOLUMÉTRICA	7
3.3.1. Densidad	7
3.3.2. Velocidad de propagación del sonido	7
3.3.3. Índice de refracción	7
3.3.4. Propiedades derivadas	7
3.4. INSTRUMENTACIÓN	8
4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	9
4.1. DENSIDAD	11
4.2. VELOCIDAD DE PROPAGACIÓN DEL SONIDO	13
4.3. ÍNDICE DE REFRACCIÓN	15
5. CONCLUSIONES	17
6. BIBLIOGRAFÍA	18
ANEXOS	20

1. INTRODUCCIÓN

La gran mayoría de industrias químicas utilizan COVs para la síntesis de productos u obtención de materias primas, esto se debe a la gran variedad de compuestos orgánicos que podemos adquirir haciendo posible adaptar cualquier proceso a un disolvente específico. Las propiedades de estos compuestos son muy amplias y juegan un papel crucial en variedad de aplicaciones como la disolución y purificación de materias primas, fabricación de desinfectantes y conservantes...

Sin embargo, este tipo de componentes poseen la desventaja de ser tóxicos y contaminantes, presentando riesgos para el medio ambiente y las personas que los emplean. Para minimizar el impacto de los COVs es esencial tomar precauciones y aportar medidas de seguridad adecuadas durante todo el proceso, así como evitar posibles fugas e implementar protocolos de manejo, transporte, almacenamiento y posibles fugas de material.

Este tipo de compuestos tienen una procedencia limitada, ya que su producción depende de recursos no renovables (como el petróleo) y usualmente está sujeta a restricciones ambientales, dificultando su acceso y disponibilidad. Se puede optar por reciclar y recuperar este tipo de compuestos con técnicas como la destilación; sin embargo, son técnicas poco eficientes, costosas y generan otros residuos que requieren de manejo especializado, y en muchos casos no conservan las mismas propiedades que el compuesto inicial.

A largo plazo, la dependencia de recursos no renovables y la búsqueda de alternativas más sostenibles, menos tóxicas y más seguras desplazarán el uso de COVs. Esto incrementa la necesidad de buscar soluciones más sostenibles que reduzcan el impacto ambiental y aseguren un futuro más verde, sostenible y viable en el ámbito químico e industrial. En este trabajo se va a estudiar el uso de los DES (Deep Eutectic Solvent), una química emergente que está ganando terreno a los más conocidos líquidos iónicos.

El término DES viene acompañado de los objetivos *Green Chemistry* y *Sustainability Management* cuyo compromiso consiste en realizar el diseño de procesos y productos eliminando la producción o el uso de elementos nocivos, así como la gestión de los conceptos de la sostenibilidad para el medio ambiente para generaciones futuras y presentes. Teniendo en cuenta las propiedades y características de estos compuestos, los DES disminuyen el uso de catalizadores (comúnmente metales pesados) debido a que ellos mismos actúan como tales, y en muchos de los casos en reacciones regioselectivas¹. Los NaDES, conocidos como *DES* de origen *Natural*, son componentes presentes en sistemas biológicos en grandes cantidades y de fácil extracción. Al proceder de fuentes naturales, existen organismos vivos que poseen vías para metabolizar estos compuestos y ser fácilmente degradados en el medio ambiente; además minimizan el riesgo de accidentes químicos; son compuestos seguros, no inflamables y no tóxicos, por lo tanto su uso y manipulación no representa un peligro.

Los DES son una clase de disolventes que se obtienen tras la mezcla de dos o más componentes típicamente de origen renovable. Estas mezclas tienen la peculiaridad de presentar un punto de fusión más bajo cuando se mezclan con otros compuestos que cuando están por separado.² Observando las principales ventajas frente a los COVs, los DES permiten jugar con su proporción para modificar las características y propiedades de la mezcla. En cuanto al punto de fusión se puede representar el porcentaje de un componente frente a la temperatura (**Figura 1**). De esta manera obtenemos un diagrama que nos marca un punto (mínimo) en el que la temperatura es menor a una proporción de componente dada. Esta temperatura corresponde al punto eutéctico.

Hacer este tipo de estudios es de vital importancia debido a que cada DES se comporta de forma muy diferente con la temperatura, como se verá más adelante.

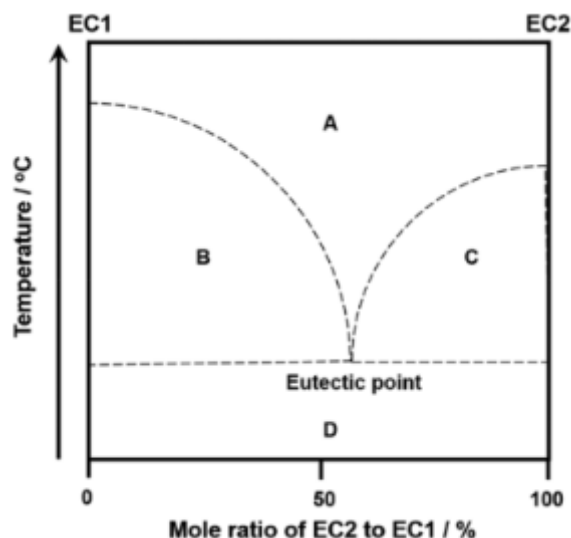


Figura 1. Diagrama de fases sólido- líquido para una mezcla eutéctica³

El descubrimiento de los NaDES se debe al interés por la Química Verde y Sostenible. El primero fue usado en 2003, compuesto por cloruro de colina y urea, donde el anión cloruro interacciona con dos moléculas de urea formando puentes de hidrógeno con los hidrógenos del grupo amino⁴, como se observa en la (Figura 2). En este caso la proporción debe ser: 1 mol de colina y 2 de urea, debido a la capacidad de formar puentes de hidrógeno de cada componente.

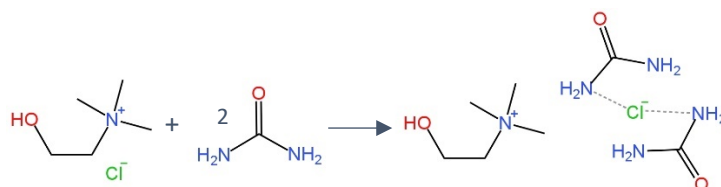


Figura 2. Interacción cloruro de colina: 2 urea

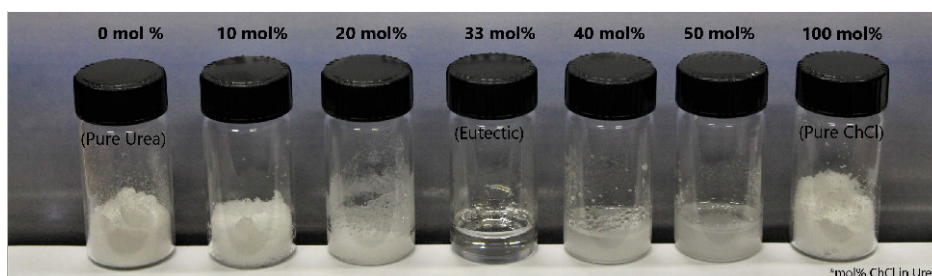


Figura 3. Mezcla eutéctica colina: 2 urea.⁴

El uso de los NaDES también se vio inspirado por ciertos organismos vivos que utilizan mezclas eutécticas naturales para disolver y transportar metabolitos esenciales en condiciones extremas de frío, sequía o salinización del suelo. Un ejemplo de esto es la combinación de glucosa con ácido málico que permite a las plantas almacenar compuestos bioactivos sin perder la funcionalidad⁵

No solo lo utilizan como fuente de “protección” si no que la solubilidad en estos NaDES es mucho más eficiente que en agua “*Por ejemplo, encontramos que la solubilidad de algunos flavonoides comunes en NaDES fue entre 50 y 100 veces mayor que en agua*”⁵

Ocurre lo mismo en semillas: el almacenamiento de componentes bioactivos es esencial frente a la sequía y el calor, por lo que muchos de estos biocomponentes se encapsulan en moléculas de NaDES para su posterior uso.

La realización de los NaDES no involucra una reacción química, sino que se trata de un proceso físico en el que aumenta la interacción entre las moléculas, por lo que no se puede considerar un proceso de síntesis. Por ello, a presión y temperatura constante, la energía libre es cero⁶; $\Delta G=0$. Sin embargo lo que sí que cambia es la entropía, que tiende a incrementarse cuando las interacciones son más fuertes. Si se analiza la ecuación de Gibbs con $\Delta G=0$ (ecuación (1)), obtenemos que a mayor entropía la temperatura de fusión del eutéctico es menor⁷:

$$T_e = \frac{\Delta H_e}{\Delta S_e} \quad (1)$$

Para obtener estas mezclas necesitaremos de un “HBD” (Hydrogen Bond Donor) y de un “HBA” (Hydrogen Bond Acceptor), aunque no solo dependerá de la cantidad de puentes de hidrógeno si no también de las posibles interacciones de tipo van der Waals que estabilizan y dan fortaleza a la mezcla⁴. Para obtener el punto eutéctico hay que pensar en la capacidad de formar puentes de hidrógeno de cada uno de los componentes. En nuestras mezclas, al presentar un solo grupo alcohol capaz de ello, la proporción en moles es 1:1. La realización es directa, basta con pesar la cantidad adecuada de cada componente y mezclar vigorosamente. En el caso de tener compuestos sólidos o que no se mezclen con facilidad se puede optar por un leve calentamiento o el uso de microondas. Estos procedimientos se deben realizar con sumo control, ya que al tratarse de sustancias naturales un exceso de calor puede llegar a degradar u oxidar la molécula, perdiendo parte de sus propiedades y obteniendo un falso eutéctico.

El uso de los NaDES se incrementará en el futuro debido a todas las propiedades y beneficios comentados anteriormente. Al ser una química relativamente nueva se continúan investigando posibles campos y aplicaciones. A día de hoy se encuentran en una amplia gama de sectores:

- En el sector cosmético los NaDES se utilizan como disolventes para la extracción de compuestos, también para la estabilización de principios activos naturales (antioxidantes, flavonoides, vitaminas...) y para la solubilización de compuestos poco solubles en agua, así como aceites esenciales para perfumes y fragancias⁸.
- En la industria farmacéutica cabe destacar que los propios NaDES presentan unas características muy interesantes: algunos son antiinflamatorios, antioxidantes, anti-alérgicos, antibacterianos y con propiedades antitumorales. Por ello estos compuestos se encuentran en la formulación de cremas solares, conservantes alimentarios y diversos fármacos. En concreto, el linalool inhibe la multiplicación de algunas células cancerígenas interviniendo en las fases G1 y G2 de la división celular reduciendo la expresión de ciclinas y proteínas del tipo p53.⁹
- En la industria alimentaria ofrecen una alternativa sostenible y eficiente para la estabilización y formulación de compuestos bioactivos, desempeñando un papel crucial en la demanda de compuestos naturales y respetuosos con el medio ambiente. Los NaDES, al ser de origen vegetal y presentar las propiedades citadas anteriormente, son excelentes enriquecedores, conservantes y aromatizantes de alimentos como yogures y bebidas.¹⁰

- Sin embargo, es en la industria química donde podemos encontrar una gran amplitud de usos. En procesos de extracción y purificación los NaDES han demostrado ser altamente eficaces para la obtención de compuestos bioactivos, como polifenoles y alcaloides, a partir de materiales vegetales, preservando su funcionalidad.¹¹
En el ámbito de la síntesis, los NaDES facilitan reacciones en condiciones más seguras y sostenibles, eliminando la necesidad de disolventes volátiles. Además, en catálisis enzimática mejoran la estabilidad y actividad de las enzimas, ampliando su aplicación en la producción de biopolímeros y productos farmacéuticos.
- Por último, en procesos de remediación ambiental, los NaDES destacan por su capacidad para eliminar contaminantes orgánicos de suelos y aguas y capturar dióxido de carbono en sistemas de emisión industrial, contribuyendo a la sostenibilidad global. Un ejemplo de esto son las mezclas eutécticas basadas en L-mentol capaces de solubilizar moléculas que en agua no son solubles o con baja permeabilidad.¹²

Los componentes de aceites esenciales con los que vamos a trabajar tienen una amplia gama de aplicaciones. Anteriormente se ha mencionado el linalool como agente anticancerígeno al intervenir en procesos celulares, aunque también, por su aroma y sabor, se utiliza en perfumes y bebidas. En el caso del citronelol y el citronelal actúan como agentes antimicrobianos, pero se utilizan extensamente como repelentes e insecticidas, ya que son neurotóxicos para los insectos al alterar sus vías neuronales.¹³ El alcohol anisílico presenta propiedades más variadas, desde aromatizante o saborizante, hasta aplicaciones industriales debido a su fácil oxidación. Todos ellos son componentes de diferentes aceites esenciales (aceite de citronela, rosa, bergamota, etc.). A pesar de que los aceites esenciales son realmente mezclas multicomponentes, es habitual denominar a los compuestos individuales con el apelativo de “*aceite esencial*”. A lo largo del trabajo, se ha mantenido esta nomenclatura para simplificar el texto.

Estas aplicaciones posicionan a los NaDES como sustancias químicas clave para avanzar hacia procesos químicos más ecológicos y eficientes. No cabe ninguna duda que los DES y NaDES jugarán un papel importante en el futuro y serán foco de investigación en múltiples sectores. Por ello en este trabajo se miden las propiedades volumétricas de los compuestos equimolares (alcohol anisílico:linalool), (alcohol anisílico:citronelol), (alcohol anisílico:citronelal). Todos ellos en un rango de temperaturas amplio, de esta forma podremos observar su variación en este intervalo, obtener cómo varían las propiedades, formular unas conclusiones concretas y valorar el comportamiento de cada NaDES. Se medirá la densidad, velocidad de propagación del sonido e índice de refracción. A partir de estas se calcularán propiedades derivadas como: compresibilidad isentrópica, distancia libre intermolecular, coeficiente de expansión isobárico, refractividad molar y volumen libre.

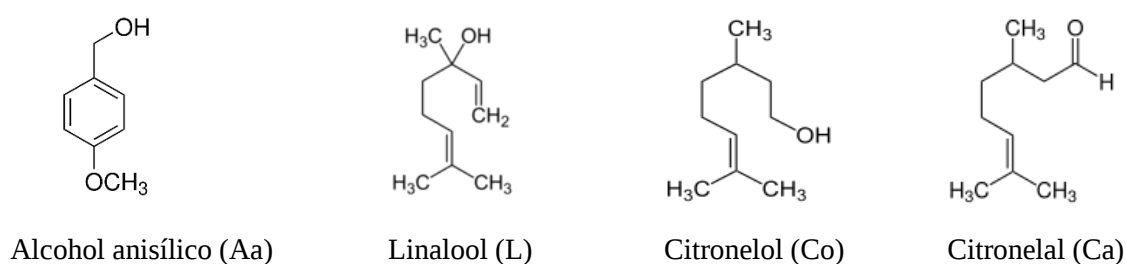


Figura 4. Estructuras de los compuestos estudiados

2. OBJETIVOS

2.1 OBJETIVOS ACADEMICOS

- Aplicar todos los conocimientos de termodinámica y quimicofísica adquiridos en el grado para el estudio de mezclas eutécticas basadas en DES.
- Manejar y optimizar el uso de instrumentación compleja, como el DSA y DMA que posteriormente se describirán, para medir propiedades físicas como la velocidad del sonido y la densidad.
- Relacionar los resultados obtenidos con hipótesis coherentes acerca de la estructura e interacciones establecidas entre los componentes del NaDES.
- Adquirir las destrezas necesarias para el uso de programas para estudios de correlación.
- Realizar una búsqueda bibliográfica enfocada en la caracterización de propiedades fisicoquímicas de sistemas DES y sus aplicaciones.
- Redacción de un Trabajo Fin de Grado en base a la normativa establecida, destacando la importancia de los DES en aplicaciones industriales y científicas.

2.2 OBJETIVOS CIENTÍFICOS

- Preparación de NaDES para su caracterización químico-física, optimizando las condiciones de preparación para obtener mezclas estables.
- Obtención de propiedades derivadas en base a la caracterización termofísica realizada, adquiriendo un perfil del comportamiento en función de la temperatura.
- Relacionar las propiedades con la estructura y grupos funcionales de las moléculas en cada NaDES.
- Contribuir con la investigación científica, aportando información de rigor y contrastada para un posterior uso.

3. PARTE EXPERIMENTAL

3.1 COMPUESTOS

Tabla 1. Compuestos puros utilizados.

Compuestos ^a (Acrónimo)	Nombre IUPAC (Fórmula química)	Nº CAS	Pureza	M_i /(g/mol)
Alcohol anisílico (Aa)	(4-Methoxyfenyl)metanol (C ₈ H ₁₀ O ₂)	105-13-5	>98%	138,17
Linalool (L)	2,6-Dimetil-2,7-octadien-6-ol (C ₁₀ H ₁₈ O)	78-70-6	≥98.9%	154,25
Citronelol (Co)	3,7-Dimetiloct-6-en-1-ol (C ₁₀ H ₂₀ O)	106-22-9	>95%	156,27
Citronelal (Ca)	3,7-Dimetiloct-6-en-1-al (C ₁₀ H ₁₈ O)	106-23-0	≥93.5%	154,25

^aTodos los compuestos se encuentran en estado puro, no se han purificado posteriormente.

3.2 PREPARACION DE LOS NaDES

La preparación de las mezclas se realizó con el objetivo de conseguir una fracción molar 1:1 y a un volumen final de 8mL. Para ello se calculó el volumen exacto de aceite esencial componente 1 que posteriormente se pesó en la balanza analítica y fue depositado en un contenedor protegido del aire y de la luz. Una vez añadido el primer componente, se calcula la cantidad exacta a añadir del componente 2. En nuestro caso, como todos los aceites esenciales utilizados se encuentran en estado líquido no fue necesario calentar, bastó con una agitación vigorosa durante un par de minutos.

Tabla 2. Descripción de las mezclas eutécticas estudiadas: acrónimo, composición, masa molar calculada (M)^a, y apariencia a $T = 298.15$ K y $p = 0.1$ MPa.

Acrónimo	Compuesto 1	Compuesto 2	Relación molar	M / g/mol	Apariencia
L:Aa	Linalool	Alcohol anisílico	(1:1)	146,21	Líquido incoloro transparente
Co:Aa	Citronelol	Alcohol anisílico	(1:1)	147,22	Líquido incoloro transparente
Ca:Aa	Citronelal	Alcohol anisílico	(1:1)	146,21	Líquido incoloro transparente

$$^aM = \sum_i M_i x_i,$$

3.3 CARACTERIZACIÓN VOLUMÉTRICA

3.3.1. Densidad

Es una propiedad física que se define como unidad de masa por unidad de volumen. En el caso de las mezclas eutécticas la densidad va a depender de la composición y proporción de cada uno de los componentes. A consecuencia de las fuerzas intermoleculares que se establezcan y de la ordenación molecular, podremos obtener una densidad mayor o menor. También efectos como la geometría molecular tendrán su peso en el valor de esta propiedad.

3.3.2. Velocidad de propagación del sonido

La velocidad de propagación en un medio es un parámetro físico que está relacionado con la densidad y la compresibilidad de una sustancia. Al medir esta propiedad en mezclas eutécticas se obtiene información sobre las interacciones intermoleculares de la disolución y su comportamiento ante diferentes condiciones térmicas y de presión. Esta medida puede ser utilizada para procesos industriales, esencial para la optimización de procesos como la extracción y la destilación, donde las propiedades del disolvente son críticas para la eficiencia del proceso.

3.3.3 Índice de refracción

Se describe como el cambio en velocidad que experimenta la luz al pasar de un medio a otro. En mezclas eutécticas tiene gran relevancia porque observamos comportamientos muy distintos a los de los componentes por separado o la media de ellos. Además, nos permite saber la pureza y las interacciones entre los componentes del NaDES. El índice de refracción está también relacionado con la solubilidad de ciertos compuestos, esto es crucial para su uso como disolventes en reacciones en estado líquido.

3.3.4. Propiedades derivadas

- Coeficiente de expansión isobárico (α_p): mide cuanto varía el volumen de una mezcla con respecto a la temperatura y se rige por la ecuación (2). Cuanto mayores sean las fuerzas intermoleculares este coeficiente será menor debido a que las moléculas se encuentran más restringidas en sus posiciones dificultando un cambio de volumen.

$$\alpha_p = -\frac{1}{V_m} \left(\frac{\partial V_m}{\partial T} \right)_p \quad (2)$$

- La compresibilidad isentrópica (κ_s): se define como el cambio relativo de volumen de una sustancia respecto a la presión en condiciones de entropía constante. Se calcula con la ecuación de Newton-Laplace¹⁴ (3) que está relacionada con la densidad y la velocidad del sonido cuando la absorción ultrasónica es despreciable. Una compresibilidad baja indica que las moléculas están ligadas fuertemente entre sí, es decir, que sus fuerzas intermoleculares son mayores; el caso contrario indica que la mezcla es más “elástica” y fácil de comprimir en estas condiciones.

$$\kappa_s = \frac{1}{\rho \cdot u^2} \quad (3)$$

- Se puede calcular la distancia libre intermolecular con la siguiente fórmula (4) que involucra la constante de Jacobson¹⁵ $K = (91.368 + 0.3565T) \cdot 10^{-8}$

$$L_f = K \sqrt{\kappa_s} \quad (4)$$

- Refracción molar: cuantifica la capacidad de una sustancia para polarizarse bajo la influencia de un campo eléctrico, en este caso la luz. Está relacionada con la densidad y

la masa molar de la mezcla mediante la ecuación de Lorentz-Lorenz¹⁶ (5). También implica la facilidad de los electrones de fluir por la molécula, que a su vez depende del peso, longitud y dobles enlaces que presente. Los enlaces dobles tienen electrones pi; más libres y desplazables, aumentando así la polarizabilidad y con esto disminuyendo la refracción molar.

$$R_m = V_m \left(\frac{n_D^2 - 1}{n_D^2 + 2} \right) \quad (5)$$

- Volumen libre (6): Describe el espacio no ocupado por las moléculas dentro del sistema. En una mezcla se obtiene un mayor volumen libre cuanto mayor sea el tamaño de las moléculas que la componen, menos interacciones intermoleculares y densidad más alta.

$$f_m = V_m - R_m = V_m \left(\frac{3}{n_D^2 + 2} \right) \quad (6)$$

3.4 INSTRUMENTACIÓN

Balanza analítica: Modelo *Sartorius CP225D* cuyo límite máximo son 220 g y cuya incertidumbre es 0.1 mg. Su funcionamiento está basado en un electroimán cuya función es generar una fuerza que contrarreste el peso que está midiendo, obteniendo así un resultado óptimo.

La densidad se ha medido con el equipo *Anton Paar DMA 5000*. Este se encuentra termostatzado mediante dos termómetros de platino 100%, dotando al aparato de una elevada precisión ($\pm 0,005K$). En cuanto a la celda donde se inyecta la muestra, está formada por un tubo en forma de “U” de borosilicato que es excitado a una frecuencia característica para que vibre. Los cambios en dicha vibración dependen de la densidad de la muestra. La incertidumbre asociada a la determinación de las densidades mediante este instrumento es de $\pm 0,05 \text{ kg} \cdot \text{cm}^{-3}$.



Figura 5. Equipo Anton Paar DMA 5000

La velocidad de propagación del sonido se midió con el equipo *Anton Paar DSA 48*. La muestra viene insertada en un tubo en “U”, sobre ella viene aplicada un pulso ultrasónico de manera longitudinal a lo largo de una determinada distancia dentro del equipo, de tal manera que la velocidad corresponde con el tiempo medio de tránsito de la señal ultrasónica en diferentes ciclos en un interferómetro de trayectoria fija. La cámara interna está termostatzada con una precisión de $\pm 0,005 K$, siendo la incertidumbre en la medida igual a $\pm 0,5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$.



Figura 6. Anton Paar DSA 48

Para el índice de refracción se ha utilizado el equipo *Dr. Kernchen Abbemat* cuya temperatura viene controlada de manera precisa con una sonda Peltier con una precisión de $\pm 0,002$ K. El funcionamiento de este instrumento se basa en el cambio de la dirección y la velocidad de la luz al atravesar distintos medios. Lo componen una fuente de luz, (un prisma o superficie refractiva) y un detector. El prisma es el que desvía la luz dependiendo del índice de refracción del compuesto. Cuando la luz pasa entre el prisma y la muestra, una parte se refracta y otra se refleja. El refractómetro mide el ángulo de desviación de la luz refractada. La incertidumbre asociada a este instrumento es de $\pm 2 \cdot 10^{-5}$ unidades.



Figura 7. Dr. Kernchen Abbemat

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este apartado se discuten todos los resultados obtenidos. Los valores de densidad, velocidad del sonido e índice de refracción se comentarán tanto para los componentes puros como para las mezclas, sin embargo, las propiedades derivadas quedan exclusivamente determinadas y discutidas para los NaDES. La toma de datos se ha llevado a cabo a presión atmosférica ($p = 0,1$ MPa) y en un intervalo de temperaturas entre 278,15 K y 338,15 K, a excepción del índice de refracción, cuya temperatura mínima de funcionamiento es igual a 283,15 K. Los intervalos de medida tienen un incremento de 2,5 K.

Para asegurarnos de que cada instrumento se encuentra en condiciones adecuadas de uso y que no se han deteriorado a lo largo del tiempo, se hace una comprobación con un compuesto del que

sabemos, por bibliografía o por otros datos experimentales previos, sus constantes y propiedades. En este caso se ha usado 2-butanol. En el momento en el que se verifica y asume que los instrumentos están listos para medir, se realiza la parte experimental.

Todos los valores obtenidos pueden encontrarse en los Anexos adjuntos en forma de tabla, desde la tabla A1 hasta la A16. A continuación, a modo de resumen se adjuntan todas las propiedades obtenidas en condiciones estándar para los tres componentes puros y los tres NaDES utilizados.

Tabla 3. Propiedades termodinámicas experimentales y calculadas^a de los compuestos puros y mezclas estudiadas a 298,15 K y 0,1 MPa. Densidad (ρ), velocidad del sonido (u), índice de refracción (n_D), coeficiente de expansión isobárico (α_p), compresibilidad isentrópica (κ_s), distancia libre intermolecular, (L_f), refractividad molar (R_m), y volumen libre (f_m).

Propiedad	L	Co	Ca	L:Aa ^b	Co:Aa ^c	Ca:Aa ^d
$\rho/(\text{kg/m}^3)$	860,44	852,36	847,12	965,52	958,47	969,34
$u/(\text{m/s})$	1311,93	1374,24	1331,12	1426,07	1454,84	1442,50
n_D	1,45947	1,45460	1,44290	1,49730	1,49140	1,49230
$\alpha_p/(\text{K}^{-1})$	0,98	0,830	0,952	0,835	0,775	1,064
$\kappa_s/(\text{TPa}^{-1})$	675,23	621,22	666,22	509,28	492,93	495,78
$L_f/(\text{\AA})$	0,260	0,250	0,259	0,226	0,222	0,223
$R_m/(\text{cm}^3/\text{mol})$	49,05	49,06	48,26	46,77	46,64	46,19
$f_m/(\text{cm}^3/\text{mol})$	130,21	131,90	133,82	112,89	114,29	112,93

^aIncertidumbres standard y combinadas expandidas (0.95 nivel de confianza, $k=2$): $u(T)=0.005$ K, $u(p)=0.5$ KPa, $U_c(\rho)=0.05$ kg/m³; $U_c(u)=0.5$ m/s; $U_c(n_D)=2 \cdot 10^{-5}$; $U_c(\alpha_p)=0.04$ K⁻¹; $U_c(\kappa_s)=0.22$ TPa⁻¹; $U_c(R_m)=0.004$ cm³/mol; $U_c(f_m)=0.03$ cm³/mol. ^bLinalool+ alcohol anisílico; ^cCitronelol+ alcohol anisílico; ^d Citronelal+ alcohol anisílico.

En general y en el caso de este trabajo las propiedades termodinámicas en los sistemas líquidos siguen una tendencia lineal (7) con la temperatura, por ello podemos escribir las propiedades con la siguiente ecuación:

$$Y = A_Y + B_Y \cdot T \quad (7)$$

Tabla 4. Parámetros de ajuste (A_Y , B_Y) y coeficientes de regresión (R^2) en el ajuste lineal ^a de las propiedades termodinámicas experimentales (Y) con la temperatura (T). Y =densidad (ρ), velocidad del sonido (u), índice de refracción (n_D).

Propiedad	Sistema	A_Y	B_Y	R^2
$\rho/(\text{kg/m}^3)$	L	881,62	-0,847	0,9999
	Co	870,04	-0,707	0,9999
	Ca	867,26	-0,806	0,9999

$u/(m/s)$	L:Aa ^b	984,68	-0,807	1,0000
	Co:Aa ^c	977,06	-0,743	1,0000
	Ca:Aa ^d	995,13	-1,032	1,0000
	L	1408,4	-3,803	0,9993
	Co	1467,7	-3,73	0,9999
	Ca	1433,4	-4,087	0,9999
	L:Aa ^b	1527,28	-3,979	0,9993
	Co:Aa ^c	1543,6	-3,664	0,9999
	Ca:Aa ^d	1542,3	-4,031	0,9997
n_D	L	1,4716	-0,0005	1,0000
	Co	1,4646	-0,0004	1,0000
	Ca	1,4554	-0,0004	1,0000
	L:Aa ^b	1,5073	-0,0004	1,0000
	Co:Aa ^c	1,5014	-0,0004	1,0000
	Ca:Aa ^d	1,5048	-0,0005	1,0000

^a $Y = A_Y + B_Y T$; ^bLinalool+ alcohol anisílico; ^cCitronelol+ alcohol anisílico; ^d Citronelal+ alcohol anisílico.

4.1 DENSIDAD

En la densidad vamos a encontrar influencia tanto en la capacidad de formar puentes de hidrógeno como en la flexibilidad de la molécula. El grafico nos indica que para todo el rango de temperaturas $\rho(L > Co > Ca)$. Estos resultados son de esperar, el Co y el L son alcoholes, compuestos capaces de formar puentes de hidrógeno. Este tipo de interacciones son muy fuertes respecto a otro tipo de fuerzas intermoleculares, por lo tanto, incrementa la cantidad de moléculas por unidad de volumen, es decir, la densidad es mayor. En cuanto a la comparación entre L y Co, cabría esperar una menor densidad para el L ya que se trata de un alcohol terciario y por lo tanto la capacidad para formar puentes de hidrógeno es menor (mayor impedimento estérico). Sin embargo, la molécula es más pequeña al presentar mayor número de insaturaciones, y además se compacta mejor al ser más flexible. El Co presenta una única insaturación y una menor ramificación, limitando la flexibilidad y por lo tanto tiene menor densidad. Con el Ca pasa lo contrario, las únicas fuerzas presentes son de tipo dipolo - dipolo, menos intensas que los puentes de hidrógeno, por lo que su densidad es menor.

En cuanto a los NaDES, vemos que $\rho(Ca:Aa > L:Aa > Co:Aa)$. Además, la mezcla de Ca presenta una variación significativa con la temperatura, siendo esta la más acentuada a causa de la débil interacción que ofrece el grupo aldehído. A la vez que aumenta la temperatura también lo hace la agitación entre moléculas; una interacción fuerte hará que la variación de densidad a lo largo del todo el rango de temperaturas sea menor. La mezcla Ca:Aa puede formar puentes de hidrógeno entre ambos componentes, siendo su intensidad menor que en el caso alcohol-alcohol. Con las dos mezclas restantes tenemos que el L ofrece una mayor densidad en todo el rango, presentando una menor variación con la temperatura respecto al Co.

El aumento de energía cinética molecular al aumentar la temperatura produce una mayor agitación térmica, lo que debilita las fuerzas intermoleculares. Por ello, en todos los casos se encuentra una pendiente negativa en la representación de la densidad a diferentes temperaturas (Figuras 8 y 9)

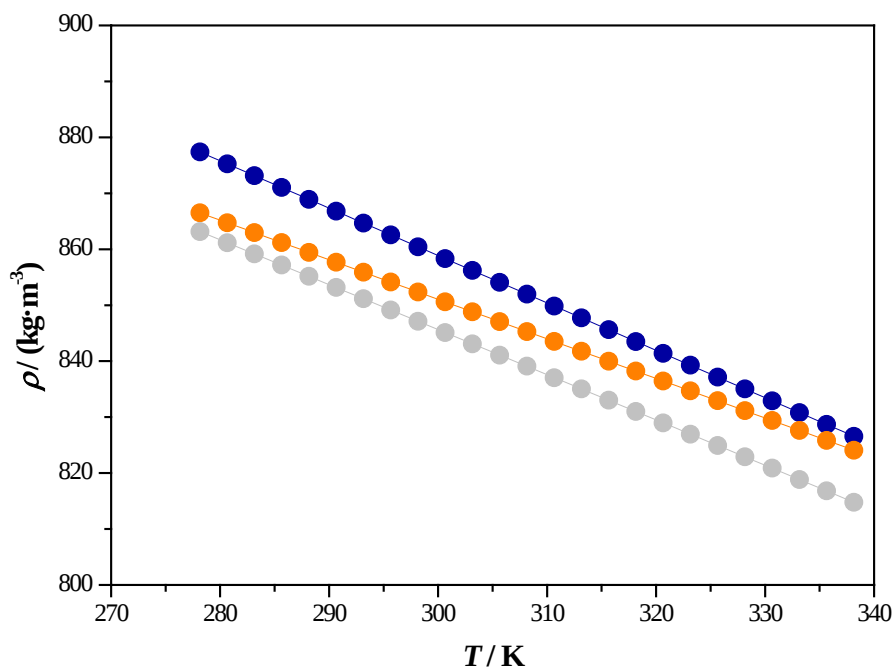


Figura 8. Densidad, ρ , en función de la temperatura, T , a $p = 0,1$ MPa: (●) Linalool, (●) Citronelol, (●) Citronelal.

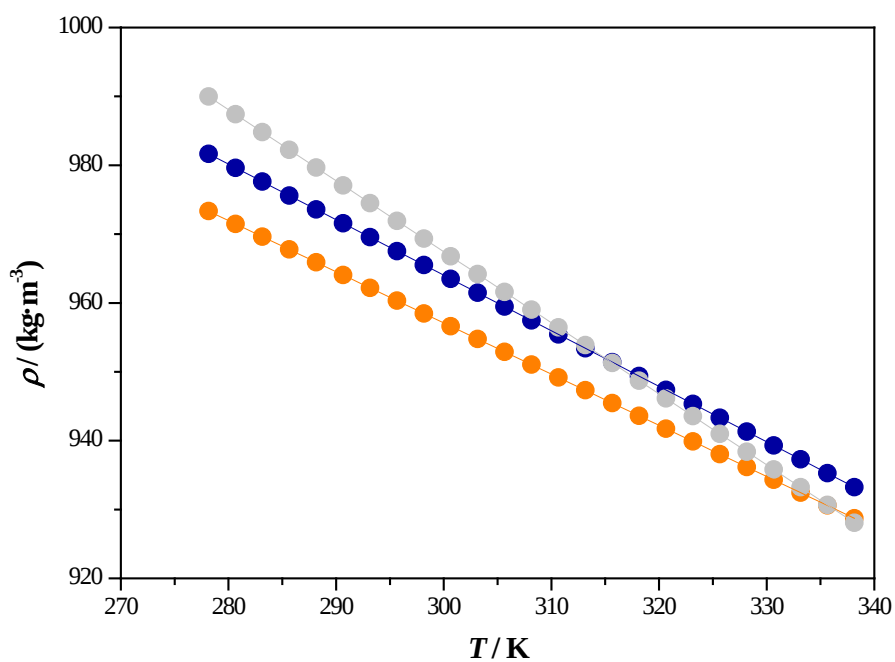


Figura 9. Densidad, ρ , en función de la temperatura, T , a $p = 0,1$ MPa: (●) L:Aa, (●) Co:Aa, (●) Ca:Aa

El **coeficiente isobárico (ec.2)** mide la resistencia de un material a expandirse cuando se calienta. Calculado a partir de la densidad en función de la temperatura, podemos sacar la siguiente conclusión de las mezclas. El Ca:Aa tiene mayor coeficiente isobárico porque sus interacciones con el Aa son menores que en el caso de los alcoholes, lo que le permite expandirse más fácilmente con el aumento de la temperatura. En el caso de L:Aa el coeficiente tiene un valor intermedio, lo que puede interpretarse teniendo en cuenta que la flexibilidad y la ramificación de la molécula le permite expandirse, pero sus interacciones no son tan intensas como para generar una resistencia frente a la expansión causada por la agitación térmica creciente. En cambio, el Co-Aa, con su empaquetamiento denso e interacciones fuertes, presenta el coeficiente más bajo.

La figura 10 muestra la evolución de α_p con la temperatura, indicando que a mayores temperaturas la capacidad de expansión del fluido es menor.

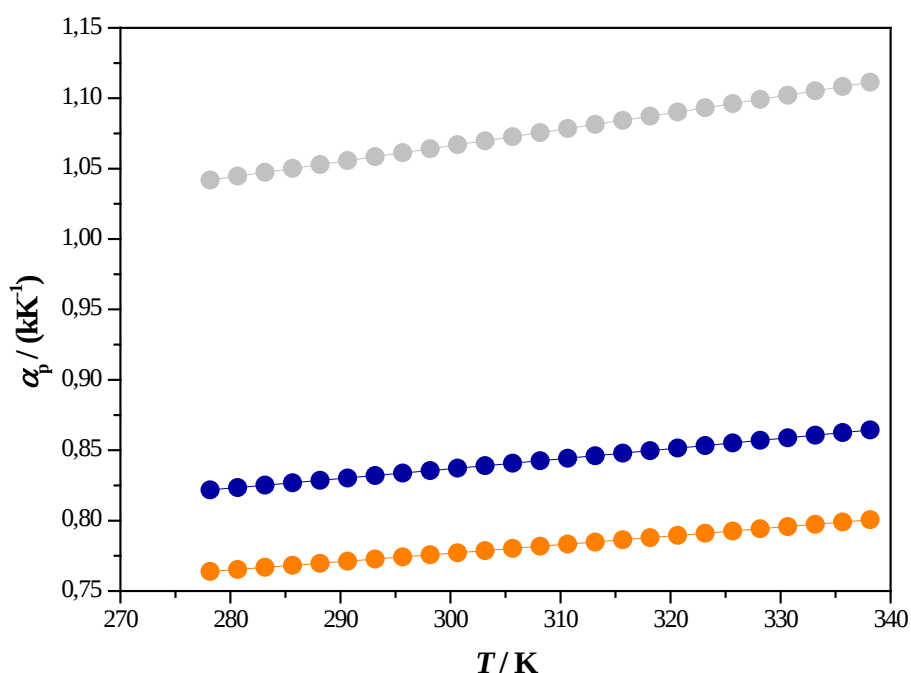


Figura 10. Coeficiente de expansión isobárico, α_p , en función de la temperatura, T , a $p = 0,1$ MPa: (●) L:Aa, (●) Co:Aa, (●) Ca:Aa.

4.2 VELOCIDAD DE PROPAGACIÓN DEL SONIDO

Los valores de la velocidad de propagación representan la facilidad del líquido para transmitir el impulso sónico. Esta facilidad dependerá de lo “unidas” o “separadas” que se encuentren las moléculas. En cuanto a los compuestos puros, observamos en la (Figura 1) que $Co > Ca > L$ y que tienen un comportamiento similar a efectos de la temperatura. Si bien el L es el que mayor densidad tenía y es capaz de formar puentes de hidrógeno, genera una red flexible y dinámica introduciendo una mayor movilidad entre moléculas, lo que reduce la velocidad en la propagación de ondas sonoras. El Co:Aa tiene una estructura más compacta y menos flexible, facilitando la velocidad de propagación del sonido. En el caso del Ca:Aa el empaquetamiento es compacto pero sus interacciones son débiles, por ello tiene un comportamiento intermedio.

En los NaDES se observa un comportamiento muy similar a los compuestos puros. La interacción con el Aa para el caso de los alcoholes es mayor que para el caso del aldehído, sin embargo en la

velocidad del sonido el empaquetamiento y el tamaño de la molécula ganan importancia haciendo que mezclas como las del Ca:Aa, que se encuentra por debajo del Co:Aa en la (Figura 12), tenga mayor u .

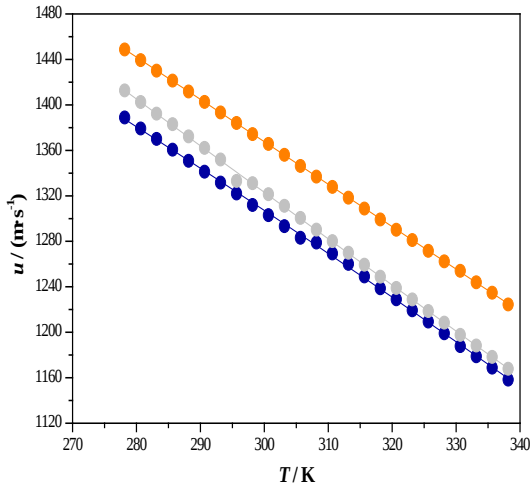


Figura 11. Velocidad del sonido, u , en función de la temperatura, T , a $p = 0,1$ MPa: (●) Linalool, (●) Citronelol, (●) Citronelal.

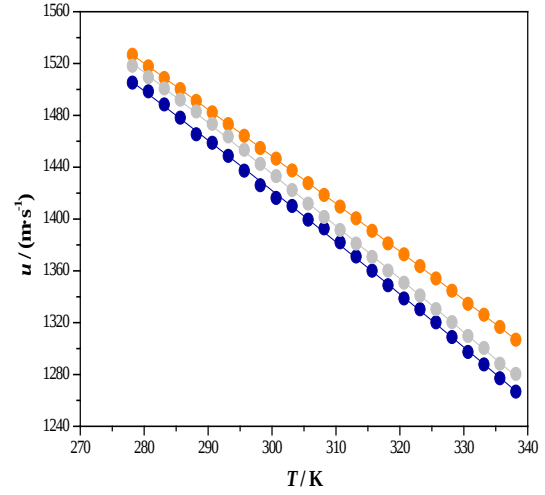


Figura 12. Velocidad del sonido, u , en función de la temperatura, T , a $p = 0,1$ MPa: (●) L:Aa, (●) Co:Aa, (●) Ca:Aa.

La **compresibilidad isentrópica (ec.3)** se relaciona con la resistencia de un material para ser comprimido en condiciones adiabáticas. En el caso de Ca:Aa y L:Aa tenemos comportamientos similares (Figura 13) siendo estos los valores más altos, indicando que presentan menor fuerza para comprimirse bien porque las fuerzas intermoleculares son débiles con el Aa (caso del Ca) o bien por la ramificación y flexibilidad (L:Aa). El Co:Aa hace que su estructura lineal y los puentes de hidrógeno accesibles compacten más la mezcla, dificultando la compresión y disminuyendo κ_S .

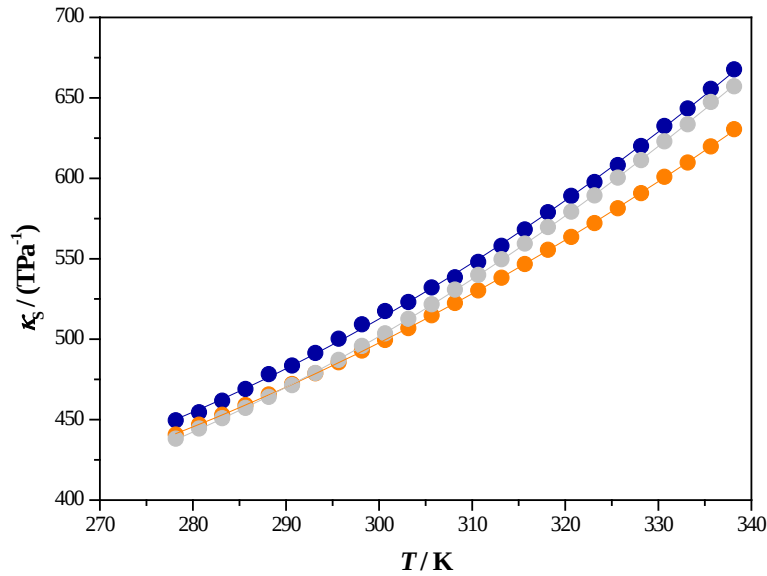


Figura 13. Compresibilidad isoentrópica, κ_s , en función de la temperatura, T , a $p = 0,1$ MPa: (●) L:Aa, (●) Co:Aa, (●) Ca:Aa.

Si observamos la **distancia libre intermolecular (ec.4)** en la Figura 14 se aprecia la siguiente tendencia: L:Aa > Ca:Aa > Co:Aa. Es decir, las moléculas que están más “unidas” corresponden a la mezcla Co:Aa, debido a que es una molécula lineal y compacta que genera un mayor empaquetamiento con el Aa, además de su capacidad para formar puentes de hidrógeno. La mezcla L:Aa es la que presenta mayor distancia: a pesar de tener un grupo -OH, su estructura ramificada y más flexible hace que la distancia intermolecular sea mayor.

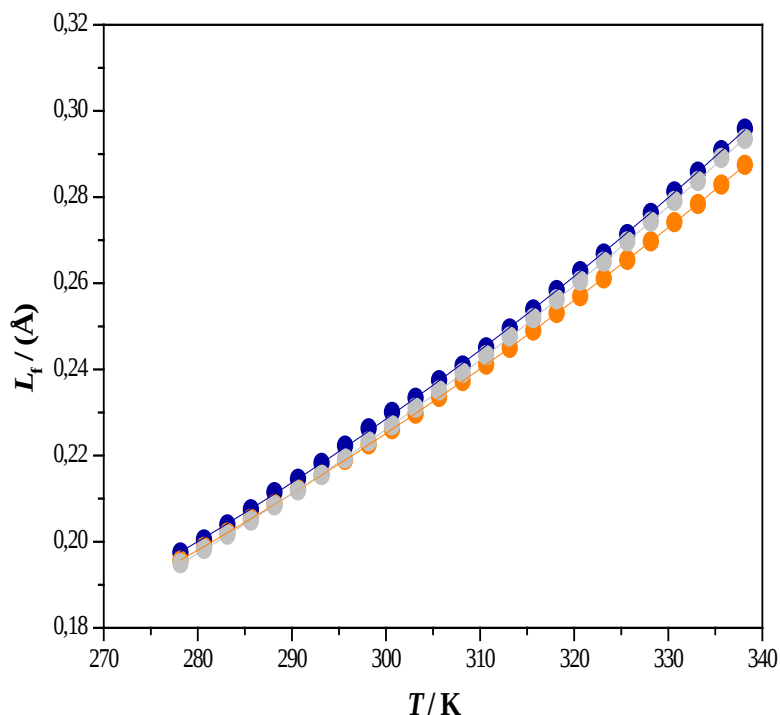


Figura 14. Distancia libre intermolecular, L_f , en función de la temperatura, T , a $p = 0,1$ MPa: (●) L:Aa, (●) Co:Aa, (●) Ca:Aa

4.3 ÍNDICE DE REFRACCIÓN

Cuando la luz pasa por nuestros líquidos sufre un cambio en la velocidad de propagación, cambio más notable cuando la compactación del líquido sea menor. En la (Figura 15) de los compuestos puros obtenemos lo siguiente L>Co>Ca lo cual refuerza la idea que se mencionaba anteriormente. El Co, por su estructura más rígida y menos polar, presenta una baja interacción con la luz que el L, resultando en un índice de refracción intermedio. La discusión con el Ca se resume a su nula capacidad de formar puentes de hidrógeno consigo mismo y estabilizarse por fuerzas menos intensas como lo son las dipolo-dipolo. Con las mezclas, conforme aumenta la temperatura la tendencia es similar L:Aa > Co:Aa > Ca:Aa, sin embargo, la Figura 16 indica que a temperaturas más bajas el Co:Aa a ventaja al Ca:Aa, indicando que cuando aumenta la temperatura los términos de rigidez y flexibilidad pierden importancia y las interacciones intermoleculares ganan peso.

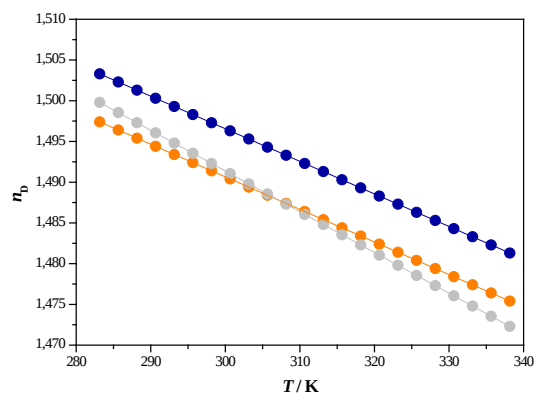
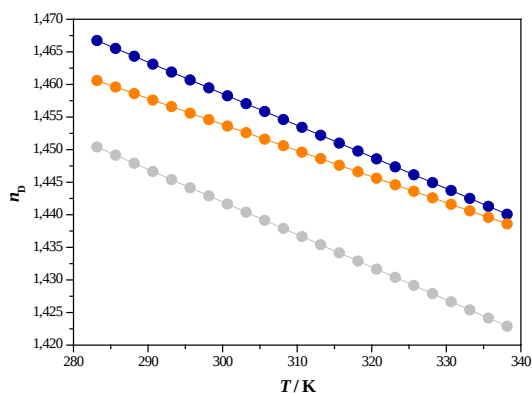


Figura 15. Índice de refracción, n_D , en función de la temperatura, T , a $p = 0,1$ MPa: (●) Linalool, (●) Citronelol, (●) Citronelal. **Figura 16.** Índice de refracción, n_D , en función de la temperatura, T , a $p = 0,1$ MPa: (●) L:Aa, (●) Co:Aa, (●) Ca:Aa.

La **refractividad molar (ec.5)** está relacionada con la capacidad de una sustancia para polarizarse frente a un campo magnético, como lo es la luz. En la gráfica de nuestros NaDES (Figura 17) se ve como el L:Aa, por tener una estructura más ramificada y dos dobles enlaces, interacciona de mejor manera con el Aa. Además, la presencia de grupo -OH capaz de formar puentes de hidrógeno hace que la mezcla sea más polarizable, resultando en un mayor R_m . El Co:Aa también forma interacciones intermoleculares fuertes, pero su estructura menos ramificada y más lineal disminuyen su polarizabilidad. Finalmente se encuentran los valores del Ca:Aa, cuyas fuerzas intermoleculares dipolo-dipolo son menores, disminuyendo su interacción con el Aa.

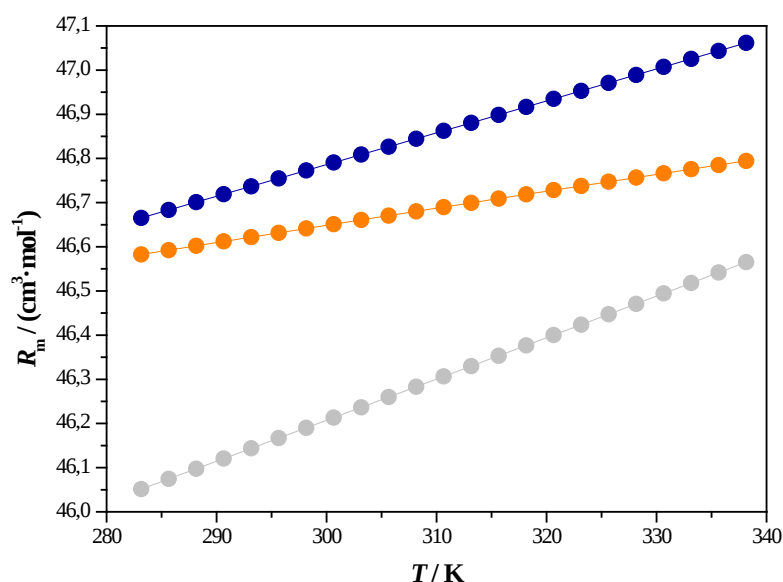


Figura 17. Refracción molar, R_m , en función de la temperatura, T , a $p = 0,1$ MPa: (●) L:Aa, (●) Co:Aa, (●) Ca:Aa.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo, se han estudiado las propiedades volumétricas de NaDES formadas por citronelol, citronelal y linalool en combinación con alcohol aníslico en proporciones equimolares. Las medidas experimentales de densidad, velocidad de propagación del sonido e índice de refracción a diferentes temperaturas han permitido no solo caracterizar estas mezclas, sino también calcular propiedades derivadas como el coeficiente de expansión isobárico, y evidenciar la influencia de las interacciones moleculares y la geometría de las moléculas sobre las propiedades macroscópicas. Si bien las hipótesis podrían parecer intuitivas, al tener en cuenta la influencia de puentes de hidrógeno y factores como la flexibilidad los resultados experimentales nos advierten que el comportamiento de cada molécula dentro de la mezcla es altamente específico y no necesariamente predecible a partir de las propiedades individuales de los componentes.

Para finalizar, este estudio aporta nuevos conocimientos sobre las propiedades y el comportamiento de mezclas eutécticas profundas naturales, reforzando su relevancia tanto en investigación fundamental como en aplicaciones prácticas, y sentando las bases para futuros desarrollos en el diseño de sistemas más eficientes y sostenibles.

6. BIBLIOGRAFÍA

- [1] Muhammad Faizan, Hao Li, Yumei Liu, Kexin Li, Shuang Wei, Ruirui Zhang, Ruixia Liu *Copper-based deep eutectic solvents (Cu-DES) assisted the VPO catalyst as a structural and electronic promoter for n-butane selective oxidation*. Elsevier 25 October 2022. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2022.07.041>
- [2] Emma L. Smith, Andrew P. Abbott and Karl S. Ryder. *Deep Eutectic Solvents (DESs) and Their Applications*. Department of Chemistry, School of Science and Technology, Nottingham Trent University, Nottingham NG11 8NS, United Kingdom. *Chem. Rev.* **2014**, 114, 21, 11060–11082. <https://doi.org/10.1021/cr300162p>
- [3] Yang Liu, J. Brent Friesen, James B. McAlpine, David C. Lankin, Shao-Nong Chen, Guido F. Pauli. *Natural Deep Eutectic Solvents: Properties, Applications, and Perspectives*. *J. Nat. Prod.* **2018**, 81, 3, 679–690. <https://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.7b00945>
- [4] Benworth B. Hansen, Stephanie Spittle, Brian Chen, Derrick Poe, Yong Zhang, Jeffrey M. Klein, Alexandre Horton, Laxmi Adhikari, Tamar Zelovich, Brian W. Doherty, Burcu Gurkan, Edward J. Maginn, Arthur Ragauskas, Mark Dadmun, Thomas A. Zawodzinski, Gary A. Baker, Mark E. Tuckerman, Robert F. Savinell, and Joshua R. Sangoro. *Deep Eutectic Solvents: A Review of Fundamentals and Applications*. *Chem. Rev.* **2021**, 121, 3, 1232–1285. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.0c00385>
- [5] Young Hae Choi¹, Jaap van Spronsen¹, Yuntao Dai, Marianne Verberne, Frank Hollmann, Isabel W.C.E. Arends, Geert-Jan Witkamp, and Robert Verpoorte. *Natural deep eutectic solvents as new potential media for green technology*. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2012.12.019>
- [6] *Disolventes eutécticos hidrofóbicos, caracterización y aplicaciones*. Fernando Bergua Peña
- [7] Dongkun Yu, Zhimin Xue and Tiancheng Mu. *Eutectics: formation, properties, and applications*. *Chem. Soc. Rev.*, **2021**, 50, 8596–8638. <https://doi.org/10.1039/D1CS00404B>
- [8] Carla Villa, Debora Caviglia, Francesco Saverio Robustelli della Cuna, Guendalina Zuccari and Eleonora Russo. *NaDES Application in Cosmetic and Pharmaceutical Fields: An Overview*. <https://doi.org/10.3390/gels10020107>
- [9] Qi An, Jing-Nan Ren, Xiao Li, Gang Fan, Sha-Sha Qu, Yue Song, Yang Li and Si-Yi Pan. *Recent updates on bioactive properties of linalool*. *Food Funct.*, **2021**, 12, 10370–10389. <https://doi.org/10.1039/D1FO02120F>
- [10] Caputi L, Aprea E. *Use of terpenoids as natural flavouring compounds in food industry*. *Recent Pat Food Nutr Agric.* 2011 Jan;3(1):9–16. doi: 10.2174/2212798411103010009. PMID: 21114471.
- [11] Maninder Meenu, Vasudha Bansal, Sudha Rana, Nitya Sharma, Vinod Kumar, Vaishali Arora, Monika Garg. *Deep eutectic solvents (DESs) and natural deep eutectic solvents (NADESs): Designer solvents for green extraction of anthocyanin*. <https://doi.org/10.1016/j.scp.2023.101168>
- [12] Fernando Bergua, Miguel Castro, José Muñoz-Embid, Carlos Lafuente, Manuela Artal. *L-menthol-based eutectic solvents: Characterization and application in the removal of drugs from water*. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.118754>

- [13] FARIAS, Bruno, GUSTINELLI, Gustavo, NASCIMENTO, Josefa, GONZALES, Leandro, GONZALES, Rafael, BEZERRA, Mariel, SANTOS, Maycon. *Óleo bifásico com ação repelente*. <https://ric.cps.sp.gov.br/handle/123456789/22215>
- [14] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtis y R. B. Bird, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, Nueva York, impresión corregida 1964, capítulos 5 y 11.
- [15] Saravanakumar Krishnan, R. Baskaran. *Thermophysical Properties of Acetophenone with Ethylchloroacetate at Temperatures of 303.15, 313.15 and 323.15 K*. 10.5012/jkcs.2012.56.4.424
- [16] H. A. Lorentz, *Über die Beziehung zwischen der Fortpflanzungsgeschwindigkeit des Lichtes und der Körperdichte* [On the relation between the propagation speed of light and density of a body], *Ann. Phys.* vol. **9**, pp. 641-665 (1880).
- [17] Shakira A. Shakila, R. Raju, T. Srinivasa Krishna, Ranjan Dey & V. Pandiyan (2020) Molecular interaction studies in binary mixtures of tetrahydrofuran with arene-substituted alcohols: acoustic and volumetric study, *Physics and Chemistry of Liquids*, 58:2, 263-279, DOI:10.1080/00319104.2018.1564752

ANEXOS

ALCOHOL ANISÍLICO

Nombre		(4-Metoxyphenyl)metanol
Fórmula		C ₈ H ₁₀ O ₂
Masa Molar		138,16 g/mol
Propiedades	Estado físico	Líquido
	Color	Incoloro
	Forma	Líquida
	Inflamabilidad	Combustible pero no fácilmente inflamable
Usos pertinentes		Reactivos para laboratorio, Fabricación de sustancias
Seguridad		Llevar guantes y gafas de protección
Almacenamiento		Almacenar en lugar seco
Indicaciones peligro		H315 Provoca irritación cutánea H319 Provoca irritación ocular grave H317: Puede provocar una reacción alérgica en la piel.
Pictogramas		 GHS07  GHS05
Primeros auxilios		• Inhalación: proporcionar aire fresco. • Contacto con la piel: aclararse la piel/ ducharse. • Contacto con los ojos: separar los párpados y enjuagar con abundante agua limpia y fresca. Retirar lentillas • Ingestión: Hacer beber agua inmediatamente
Eliminación		No tirar los residuos por el desagüe. Eliminar el producto y su recipiente como residuo peligroso.

LINALOOL

Nombre		2,6-Dimetil-2,7-octadien-6-ol
Fórmula		C ₁₀ H ₁₈ O
Masa Molar		154,25 g/mol
Propiedades	Estado físico	Líquido
	Color	Incoloro
	Forma	Líquido claro y aceitoso
	Inflamabilidad	Inflamable; mantener alejado de fuentes de calor, chispas y llamas abiertas.
Usos pertinentes		Reactivos para laboratorio, Fabricación de sustancias
Seguridad		Llevar guantes y gafas de protección
Almacenamiento		Almacenar en lugar seco y fresco
Indicaciones peligro		H315 Provoca irritación cutánea H319 Provoca irritación ocular grave H317: Puede provocar una reacción alérgica en la piel
Pictogramas		 GHS07
Primeros auxilios		• Inhalación: proporcionar aire fresco. • Contacto con la piel: aclararse la piel/ ducharse. • Contacto con los ojos: separar los párpados y enjuagar con abundante agua limpia y fresca. Retirar las lentillas. • Ingestión: hacer beber agua inmediatamente
Eliminación		No tirar los residuos por el desagüe. Eliminar el producto y su recipiente como residuo peligroso.

CITRONELAL

Nombre		3,7-Dimetilooct-6-en-1-al
Fórmula		C ₁₀ H ₁₈ O
Masa Molar		154,25 g/mol
Propiedades	Estado físico	Líquido
	Color	Incoloro
	Forma	Líquido claro y aceitoso
	Inflamabilidad	Inflamable; mantener alejado de fuentes de calor, chispas y llamas abiertas.
Usos pertinentes		Producto químico para síntesis
Seguridad		Llevar guantes y gafas de protección
Almacenamiento		Almacenar en lugar seco y fresco
Indicaciones peligro		H315 Provoca irritación cutánea H319 Provoca irritación ocular grave H317: Puede provocar una reacción alérgica en la piel
Pictogramas		 GHS07
Primeros auxilios		• Inhalación: proporcionar aire fresco. • Contacto con la piel: aclararse la piel/ ducharse. • Contacto con los ojos: separar los párpados y enjuagar con abundante agua limpia y fresca. Retirar las lentillas. • Ingestión: hacer beber agua inmediatamente.
Eliminación		No tirar los residuos por el desagüe. Eliminar el producto y su recipiente como residuo peligroso.

CITRONELOL

Nombre		3,7-Dimetilooct-6-en-1-ol
Fórmula		C ₁₀ H ₂₀ O
Masa Molar		156,27 g/mol
Propiedades	Estado físico	Líquido
	Color	Incoloro
	Forma	Líquido claro y aceitoso
	Inflamabilidad	Inflamable; mantener alejado de fuentes de calor, chispas y llamas abiertas.
Usos pertinentes		Reactivos para laboratorio, Fabricación de sustancias
Seguridad		Llevar guantes y gafas de protección
Almacenamiento		Almacenar en lugar seco y fresco
Indicaciones peligro		H315 Provoca irritación cutánea H319 Provoca irritación ocular grave H317: Puede provocar una reacción alérgica en la piel
Pictogramas		 GHS07
Primeros auxilios		• Inhalación: proporcionar aire fresco. • Contacto con la piel: aclararse la piel/ ducharse. • Contacto con los ojos: separar los párpados y enjuagar con abundante agua limpia y fresca. Retirar las lentillas. • Ingestión: hacer beber agua inmediatamente.
Eliminación		No tirar los residuos por el desagüe. Eliminar el producto y su recipiente como residuo peligroso.

Tabla A1. Densidad (ρ) ^a de los compuestos puros estudiados a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	$\rho/(kg/m^3)$			
	Alcohol anisílico ¹⁷	Linalool	Citronelol	Citronelal
	Aa	L	Co	Ca
278,15	1113,93	877,38	866,51	863,15
280,65	1113,08	875,27	864,74	861,17
283,15	1112,23	873,15	862,97	859,17
285,65	1111,38	871,03	861,20	857,17
288,15	1110,53	868,91	859,43	855,17
290,65	1109,68	866,80	857,67	853,16
293,15	1108,83	864,68	855,90	851,15
295,65	1107,98	862,56	854,13	849,14
298,15	1107,13	860,44	852,36	847,12
300,65	1106,28	858,32	850,59	845,11
303,15	1105,43	856,21	848,83	843,09
305,65	1104,58	854,09	847,06	841,06
308,15	1103,73	851,97	845,29	839,11
310,65	1102,88	849,85	843,52	837,04
313,15	1102,03	847,74	841,76	835,03
315,65	1101,18	845,62	839,99	833,01
318,15	1100,33	843,50	838,22	830,99
320,65	1099,48	841,38	836,45	828,97
323,15	1098,63	839,27	834,68	826,95
325,65	1097,78	837,15	832,92	824,92
328,15	1096,93	835,03	831,15	822,90
330,65	1096,08	832,91	829,38	820,87
333,15	1095,23	830,79	827,61	818,84
335,65	1094,38	828,68	825,84	816,81
338,15	1093,53	826,56	824,08	814,77

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$): $u(T)=0,005$ K, $u(p)=0,5$ kPa, $(\rho)=0.05$ kg/m³.

Tabla A2. Densidad (ρ) ^a de las mezclas eutécticas basadas en alcohol anisílico (Aa) estudiadas a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	$\rho/(kg/m^3)$		
	L:Aa	Co:Aa	Ca:Aa
278,15	981,65	973,34	989,98
280,65	979,63	971,48	987,40
283,15	977,62	969,63	984,82
285,65	975,60	967,77	982,24
288,15	973,58	965,91	979,66
290,65	971,57	964,05	977,08
293,15	969,55	962,19	974,50
295,65	967,53	960,33	971,92
298,15	965,52	958,47	969,34
300,65	963,50	956,61	966,77
303,15	961,48	954,76	964,19
305,65	959,47	952,90	961,61
308,15	957,45	951,04	959,03
310,65	955,43	949,18	956,45
313,15	953,42	947,32	953,87
315,65	951,40	945,46	951,29
318,15	949,38	943,60	948,71
320,65	947,37	941,74	946,14
323,15	945,35	939,89	943,56
325,65	943,33	938,03	940,98
328,15	941,32	936,17	938,40
330,65	939,30	934,31	935,82
333,15	937,28	932,45	933,24
335,65	935,27	930,59	930,66
338,15	933,25	928,73	928,08

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$): $u(T)=0,005$ K, $u(p)=0,5$ kPa, $U_c(\rho)= 0,05$ kg/m³.

Tabla A3. Velocidad de propagación del sonido (u) ^a de los compuestos puros estudiados a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	$u/(m/s)$			
	Alcohol anisílico ¹⁷	Linalool	Citronelol	Citronelal
	Aa	L	Co	Ca
278,15	1652,46	1388,96	1448,78	1412,75
280,65	1646,16	1379,24	1439,35	1402,53
283,15	1639,86	1370,07	1430,14	1392,28
285,65	1633,56	1360,57	1421,32	1383,03
288,15	1627,26	1350,79	1411,79	1372,31
290,65	1620,96	1341,20	1402,57	1362,15
293,15	1614,66	1331,59	1393,37	1351,92
295,65	1608,36	1322,03	1384,03	1333,07
298,15	1602,06	1311,93	1374,24	1331,12
300,65	1595,76	1303,02	1365,66	1321,43
303,15	1589,46	1293,31	1356,11	1311,21
305,65	1583,16	1283,09	1346,31	1300,58
308,15	1576,86	1278,93	1336,89	1290,22
310,65	1570,56	1269,32	1327,83	1280,18
313,15	1564,26	1260,10	1318,42	1269,93
315,65	1557,96	1249,13	1308,84	1259,38
318,15	1551,66	1238,70	1299,17	1248,87
320,65	1545,36	1228,95	1290,20	1238,94
323,15	1539,06	1219,24	1281,08	1228,92
325,65	1532,76	1209,36	1271,67	1218,70
328,15	1526,46	1199,05	1262,36	1208,43
330,65	1520,16	1187,86	1254,03	1197,68
333,15	1513,86	1178,87	1243,92	1188,32
335,65	1507,56	1168,86	1234,79	1178,38
338,15	1501,26	1158,30	1224,45	1167,92

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$): $u(T)=0,005$ K, $u(p)=0,5$ kPa, $U_c(u)=0,5$ m/s.

Tabla A4. Velocidad del sonido (u) ^a de las mezclas eutécticas basadas en alcohol anisílico (Aa) estudiadas a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	$u/(m/s)$		
	L:Aa	Co:Aa	Ca:Aa
278,15	1505,28	1526,77	1518,26
280,65	1498,54	1517,77	1509,46
283,15	1488,36	1508,80	1500,74
285,65	1478,20	1500,27	1492,03
288,15	1465,41	1491,16	1482,96
290,65	1458,85	1482,27	1473,45
293,15	1448,72	1473,27	1463,68
295,65	1437,29	1464,25	1453,35
298,15	1426,07	1454,84	1442,50
300,65	1416,25	1446,61	1433,13
303,15	1410,04	1437,49	1422,36
305,65	1399,44	1427,70	1411,82
308,15	1392,77	1418,62	1401,53
310,65	1381,99	1409,56	1391,49
313,15	1371,01	1400,47	1381,03
315,65	1360,10	1390,87	1370,76
318,15	1348,83	1381,15	1360,17
320,65	1338,62	1372,71	1350,77
323,15	1330,32	1363,66	1341,03
325,65	1320,24	1354,11	1330,43
328,15	1308,91	1344,68	1320,37
330,65	1297,35	1334,57	1309,70
333,15	1287,69	1326,14	1300,47
335,65	1277,05	1316,69	1288,26
338,15	1266,76	1306,84	1280,46

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$):

$u(T)=0,005$ K, $u(p)=0,5$ kPa, $U_c(u)=0,5$ m/s.

Tabla A5. Índice de refracción (n_D)^a de los compuestos puros estudiados a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	n_D		
	Linalool L	Citronelol Co	Citronelal Ca
283,15	1,46674	1,46060	1,45040
285,65	1,46553	1,45960	1,44915
288,15	1,46432	1,45860	1,44790
290,65	1,46311	1,45760	1,44665
293,15	1,46190	1,45660	1,44540
295,65	1,46068	1,45560	1,44415
298,15	1,45947	1,45460	1,44290
300,65	1,45826	1,45360	1,44165
303,15	1,45705	1,45260	1,44040
305,65	1,45584	1,45160	1,43915
308,15	1,45462	1,45060	1,43790
310,65	1,45341	1,44960	1,43665
313,15	1,45220	1,44860	1,43540
315,65	1,45099	1,44760	1,43415
318,15	1,44978	1,44660	1,43290
320,65	1,44857	1,44560	1,43165
323,15	1,44735	1,44460	1,43040
325,65	1,44614	1,44360	1,42915
328,15	1,44493	1,44260	1,42790
330,65	1,44372	1,44160	1,42665
333,15	1,44251	1,44060	1,42540
335,65	1,44130	1,43960	1,42415
338,15	1,44008	1,43860	1,42290

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$):

$u(T)=0,005$ K, $u(p)=0,5$ kPa, $U_c(n_D)= 2 \cdot 10^{-5}$.

Tabla A6. Índice de refracción (n_D) ^a de las mezclas eutécticas basadas en alcohol anisílico (Aa) estudiadas a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	n_D		
	L:Aa	Co:Aa	Ca:Aa
283,15	1,5033	1,4974	1,4998
285,65	1,5023	1,4964	1,49855
288,15	1,5013	1,4954	1,4973
290,65	1,5003	1,4944	1,49605
293,15	1,4993	1,4934	1,4948
295,65	1,4983	1,4924	1,49355
298,15	1,4973	1,4914	1,4923
300,65	1,4963	1,4904	1,49105
303,15	1,4953	1,4894	1,4898
305,65	1,4943	1,4884	1,48855
308,15	1,4933	1,4874	1,4873
310,65	1,4923	1,4864	1,48605
313,15	1,4913	1,4854	1,4848
315,65	1,4903	1,4844	1,48355
318,15	1,4893	1,4834	1,4823
320,65	1,4883	1,4824	1,48105
323,15	1,4873	1,4814	1,4798
325,65	1,4863	1,4804	1,47855
328,15	1,4853	1,4794	1,4773
330,65	1,4843	1,4784	1,47605
333,15	1,4833	1,4774	1,4748
335,65	1,4823	1,4764	1,47355
338,15	1,4813	1,4754	1,4723

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$):

$u(T)=0,002$ K, $u(p)=0,5$ kPa, $U_c(n_D)= 2 \cdot 10^{-5}$.

Tabla A7. Coeficiente de expansión isobárico ^a (α_p) de los compuestos puros estudiados a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	$\alpha_p(kK^{-1})$			
	Alcohol anisílico	Linalool	Citronelol	Citronelal
	Aa	L	Co	Ca
278,15	0,3052	0,9655	0,8161	0,9344
280,65	0,3055	0,9678	0,8178	0,9365
283,15	0,3057	0,9702	0,8194	0,9387
285,65	0,3059	0,9725	0,8211	0,9409
288,15	0,3062	0,9749	0,8228	0,9431
290,65	0,3064	0,9773	0,8245	0,9453
293,15	0,3066	0,9797	0,8262	0,9475
295,65	0,3069	0,9821	0,8279	0,9498
298,15	0,3071	0,9845	0,8296	0,9520
300,65	0,3073	0,9869	0,8314	0,9543
303,15	0,3076	0,9894	0,8331	0,9566
305,65	0,3078	0,9918	0,8348	0,9589
308,15	0,3080	0,9943	0,8366	0,9611
310,65	0,3083	0,9968	0,8383	0,9635
313,15	0,3085	0,9992	0,8401	0,9658
315,65	0,3088	1,0018	0,8419	0,9682
318,15	0,3090	1,0043	0,8436	0,9705
320,65	0,3092	1,0068	0,8454	0,9729
323,15	0,3095	1,0093	0,8472	0,9753
325,65	0,3097	1,0119	0,8490	0,9777
328,15	0,3100	1,0145	0,8508	0,9801
330,65	0,3102	1,0170	0,8526	0,9825
333,15	0,3104	1,0196	0,8544	0,9849
335,65	0,3107	1,0222	0,8563	0,9874
338,15	0,3109	1,0249	0,8581	0,9898

^a Incertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$):
 $u(T)=0,002$ K, $u(p)=0,5$ kPa, $U_c(\alpha_p)=0.04$ kK⁻¹

Tabla A8. Coeficiente de expansión isobárico ^a (α_p) de las mezclas eutécticas basadas en alcohol anisílico (Aa) estudiadas a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	$\alpha_p(kK^{-1})$		
	L:Aa	Co:Aa	Ca:Aa
278,15	0,8218	0,7639	1,0419
280,65	0,8235	0,7653	1,0447
283,15	0,8252	0,7668	1,0474
285,65	0,8269	0,7683	1,0502
288,15	0,8286	0,7697	1,0529
290,65	0,8303	0,7712	1,0557
293,15	0,8320	0,7727	1,0585
295,65	0,8338	0,7742	1,0613
298,15	0,8355	0,7757	1,0641
300,65	0,8373	0,7772	1,0670
303,15	0,8390	0,7787	1,0698
305,65	0,8408	0,7803	1,0727
308,15	0,8425	0,7818	1,0756
310,65	0,8443	0,7833	1,0785
313,15	0,8461	0,7848	1,0814
315,65	0,8479	0,7864	1,0843
318,15	0,8497	0,7879	1,0873
320,65	0,8515	0,7895	1,0902
323,15	0,8533	0,7911	1,0932
325,65	0,8552	0,7926	1,0962
328,15	0,8570	0,7942	1,0992
330,65	0,8588	0,7958	1,1022
333,15	0,8607	0,7974	1,1053
335,65	0,8625	0,7990	1,1083
338,15	0,8644	0,8006	1,1114

^a Incertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$):
 $u(T)=0,002$ K, $u(p)=0,5$ kPa, $U_c(\alpha_p)=0.04$ kK⁻¹

Tabla A9. Compresibilidad isentrópica ^a (κ_s) de los compuestos puros estudiados a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	$\kappa_s/(TPa^{-1})$			
	Alcohol anisílico	Linalool	Citronelol	Citronelal
	Aa	L	Co	Ca
278,15	328,76	590,79	549,82	580,48
280,65	331,54	600,60	558,19	590,32
283,15	334,34	610,14	566,56	600,43
285,65	337,18	620,19	574,80	609,91
288,15	340,06	630,74	583,78	620,93
290,65	342,97	641,35	592,70	631,71
293,15	345,92	652,24	601,79	642,83
295,65	348,90	663,33	611,20	655,85
298,15	351,92	675,24	621,22	666,22
300,65	354,98	686,19	630,36	677,65
303,15	358,07	698,26	640,61	689,89
305,65	361,20	711,18	651,32	702,91
308,15	364,38	717,60	661,91	715,90
310,65	367,59	730,32	672,39	728,97
313,15	370,84	742,90	683,45	742,58
315,65	374,14	757,89	694,95	756,89
318,15	377,47	772,65	706,82	771,56
320,65	380,85	786,93	718,20	785,89
323,15	384,27	801,54	730,00	800,70
325,65	387,74	816,75	742,42	816,20
328,15	391,25	832,96	755,02	832,17
330,65	394,80	850,88	766,71	849,26
333,15	398,40	866,12	780,89	864,83
335,65	402,05	883,27	794,18	881,68
338,15	405,75	901,74	809,38	899,78

^a Incertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$):

$u(T)=0,002$ K, $u(p)=0,5$ kPa, $U_c(\kappa_s)=0,22$ TPa⁻¹

Tabla A10. Compresibilidad isentrópica ^a (κ_s) de las mezclas eutécticas basadas en alcohol anisílico (Aa) estudiadas a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	$\kappa_s/(TPa^{-1})$		
	L:Aa	Co:Aa	Ca:Aa
278,15	449,58	440,75	438,21
280,65	454,57	446,84	444,49
283,15	461,76	453,04	450,85
285,65	469,09	459,08	457,33
288,15	478,31	465,61	464,16
290,65	483,62	472,11	471,41
293,15	491,43	478,82	478,99
295,65	500,32	485,68	487,11
298,15	509,28	492,93	495,78
300,65	517,45	499,53	503,62
303,15	523,11	506,87	512,65
305,65	532,18	514,85	521,73
308,15	538,42	522,48	530,84
310,65	548,01	530,26	539,98
313,15	558,01	538,22	549,67
315,65	568,19	546,75	559,45
318,15	578,95	555,56	569,74
320,65	589,07	563,52	579,27
323,15	597,72	572,15	589,33
325,65	608,18	581,40	600,40
328,15	620,08	590,76	611,25
330,65	632,53	600,94	622,96
333,15	643,43	609,81	633,59
335,65	655,61	619,84	647,44
338,15	667,75	630,47	657,17

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$): $u(T)=0,002$ K, $u(p)=0,5$ kPa, $U_c(\kappa_s)=0.22$ TPa⁻¹

Tabla A11. Distancia libre intermolecular ^a (L_f) de los compuestos puros estudiados a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	L_f (Å)			
	Alcohol anisílico (Aa)	Linalool (L)	Citronelol (Co)	Citronelal (Ca)
278,15	0,1689	0,2264	0,2184	0,2244
280,65	0,1712	0,2305	0,2222	0,2285
283,15	0,1736	0,2345	0,2260	0,2326
285,65	0,1759	0,2386	0,2297	0,2366
288,15	0,1783	0,2429	0,2337	0,2410
290,65	0,1807	0,2472	0,2376	0,2453
293,15	0,1832	0,2515	0,2416	0,2497
295,65	0,1856	0,2560	0,2457	0,2545
298,15	0,1881	0,2605	0,2499	0,2588
300,65	0,1906	0,2650	0,2540	0,2633
303,15	0,1931	0,2697	0,2583	0,2680
305,65	0,1956	0,2745	0,2627	0,2729
308,15	0,1982	0,2781	0,2671	0,2778
310,65	0,2008	0,2830	0,2715	0,2827
313,15	0,2034	0,2878	0,2761	0,2878
315,65	0,2060	0,2932	0,2807	0,2930
318,15	0,2086	0,2985	0,2855	0,2983
320,65	0,2113	0,3037	0,2902	0,3035
323,15	0,2140	0,3091	0,2950	0,3089
325,65	0,2167	0,3145	0,2999	0,3144
328,15	0,2195	0,3202	0,3049	0,3201
330,65	0,2222	0,3262	0,3097	0,3259
333,15	0,2250	0,3318	0,3150	0,3315
335,65	0,2278	0,3377	0,3202	0,3374
338,15	0,2307	0,3439	0,3258	0,3435

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$): $u(T)=0,002$ K, $u(p)=0,5$ kPa

Tabla A12. Distancia libre intermolecular ^a (L_f) de las mezclas eutécticas basadas en alcohol anisílico (Aa) estudiadas a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	L_f (Å)		
	L:Aa ^b	Co:Aa ^c	Ca:Aa ^d
278,15	0,1975	0,1956	0,1950
280,65	0,2005	0,1988	0,1983
283,15	0,2040	0,2021	0,2016
285,65	0,2075	0,2053	0,2049
288,15	0,2115	0,2087	0,2084
290,65	0,2146	0,2121	0,2119
293,15	0,2183	0,2155	0,2155
295,65	0,2223	0,2190	0,2193
298,15	0,2263	0,2226	0,2233
300,65	0,2301	0,2261	0,2270
303,15	0,2334	0,2297	0,2311
305,65	0,2375	0,2336	0,2351
308,15	0,2409	0,2373	0,2392
310,65	0,2451	0,2411	0,2433
313,15	0,2495	0,2450	0,2476
315,65	0,2539	0,2490	0,2519
318,15	0,2584	0,2531	0,2563
320,65	0,2628	0,2570	0,2606
323,15	0,2669	0,2611	0,2650
325,65	0,2714	0,2654	0,2697
328,15	0,2763	0,2697	0,2743
330,65	0,2813	0,2742	0,2791
333,15	0,2859	0,2784	0,2837
335,65	0,2909	0,2829	0,2891
338,15	0,2959	0,2875	0,2935

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$): $u(T)=0,002$ K, $u(p)=0,5$ kPa

Tabla A13. Refracción molar^a (R_m) de los compuestos puros estudiados a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	$R_m (cm^3 mol^{-1})$		
	Linalool (L)	Citronelol (Co)	Citronelal (Ca)
283,15	48,9948	49,0108	48,2846
285,65	49,0043	49,0195	48,2810
288,15	49,0138	49,0282	48,2776
290,65	49,0231	49,0369	48,2742
293,15	49,0325	49,0455	48,2708
295,65	49,0418	49,0540	48,2673
298,15	49,0510	49,0626	48,2639
300,65	49,0602	49,0711	48,2603
303,15	49,0693	49,0796	48,2566
305,65	49,0784	49,0880	48,2540
308,15	49,0874	49,0964	48,2464
310,65	49,0963	49,1048	48,2452
313,15	49,1052	49,1131	48,2412
315,65	49,1141	49,1215	48,2371
318,15	49,1229	49,1297	48,2329
320,65	49,1316	49,1380	48,2287
323,15	49,1403	49,1462	48,2243
325,65	49,1489	49,1544	48,2201
328,15	49,1575	49,1625	48,2158
330,65	49,1660	49,1706	48,2114
333,15	49,1745	49,1787	48,2070
335,65	49,1828	49,1867	48,2027
338,15	49,1912	49,1947	48,1985

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$): $u(T)=0,002$ K, $u(p)=0,5$ kPa, ; $U_c(R_m)=0.004$ cm³·mol⁻¹

Tabla A14. Refracción molar (R_m) de las mezclas eutécticas basadas en alcohol anisílico (Aa) estudiadas a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	$R_m (cm^3 mol^{-1})$		
	L:Aa ^b	Co:Aa ^c	Ca:Aa ^d
283,15	46,6655	46,5826	46,0514
285,65	46,6833	46,5924	46,0745
288,15	46,7012	46,6023	46,0975
290,65	46,7190	46,6121	46,1206
293,15	46,7369	46,6219	46,1438
295,65	46,7548	46,6317	46,1669
298,15	46,7728	46,6415	46,1901
300,65	46,7907	46,6512	46,2133
303,15	46,8087	46,6609	46,2366
305,65	46,8266	46,6706	46,2598
308,15	46,8446	46,6803	46,2832
310,65	46,8626	46,6899	46,3065
313,15	46,8806	46,6995	46,3299
315,65	46,8987	46,7091	46,3533
318,15	46,9167	46,7187	46,3767
320,65	46,9348	46,7283	46,4002
323,15	46,9529	46,7378	46,4237
325,65	46,9710	46,7473	46,4472
328,15	46,9891	46,7568	46,4708
330,65	47,0072	46,7663	46,4944
333,15	47,0254	46,7757	46,5181
335,65	47,0435	46,7851	46,5417
338,15	47,0617	46,7945	46,5654

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$): $u(T)=0,002$ K, $u(p)=0,5$ kPa, ; $U_c(R_m)=0.004$ cm³·mol⁻¹

Tabla A15. Volumen libre ^a (f_m) de los compuestos puros estudiados a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	$f_m (cm^3 mol^{-1})$		
	Linalool (L)	Citronelol (Co)	Citronelal (Ca)
283,15	127,6646	129,7324	131,2485
285,65	128,0846	130,0906	131,6711
288,15	128,5068	130,4504	132,0969
290,65	128,9311	130,8117	132,5248
293,15	129,3576	131,1746	132,9552
295,65	129,7863	131,5390	133,3880
298,15	130,2172	131,9051	133,8235
300,65	130,6504	132,2727	134,2610
303,15	131,0857	132,6419	134,7007
305,65	131,5234	133,0127	135,1459
308,15	131,9633	133,3852	135,5800
310,65	132,4055	133,7592	136,0344
313,15	132,8500	134,1349	136,4835
315,65	133,2968	134,5123	136,9351
318,15	133,7460	134,8913	137,3892
320,65	134,1975	135,2720	137,8459
323,15	134,6515	135,6544	138,3049
325,65	135,1078	136,0385	138,7668
328,15	135,5665	136,4242	139,2315
330,65	136,0277	136,8117	139,6986
333,15	136,4913	137,2009	140,1686
335,65	136,9574	137,5919	140,6416
338,15	137,4260	137,9846	141,1177

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$): $u(T)=0,002$ K, $u(p)=0,5$ kPa, ; $U_c(R_m)=0.004$ cm³·mol⁻¹, ; $U_c(f_m)=0.03$ cm³·mol⁻¹

Tabla A16. Volumen libre (f_m) de las mezclas eutécticas basadas en alcohol anisílico (Aa) estudiadas a diferentes temperaturas (T) y a $p = 0,1$ MPa.

$T/(K)$	$f_m (cm^3 mol^{-1})$		
	L:Aa ^b	Co:Aa ^c	Ca:Aa ^d
283,15	111,1161	112,4996	110,5765
285,65	111,4244	112,7952	110,9647
288,15	111,7340	113,0921	111,3550
290,65	112,0450	113,3902	111,7475
293,15	112,3574	113,6895	112,1421
295,65	112,6711	113,9900	112,5390
298,15	112,9861	114,2917	112,9380
300,65	113,3026	114,5947	113,3392
303,15	113,6204	114,8989	113,7427
305,65	113,9396	115,2043	114,1484
308,15	114,2603	115,5110	114,5565
310,65	114,5823	115,8190	114,9668
313,15	114,9058	116,1282	115,3794
315,65	115,2307	116,4387	115,7944
318,15	115,5570	116,7505	116,2117
320,65	115,8848	117,0636	116,6313
323,15	116,2141	117,3780	117,0534
325,65	116,5448	117,6937	117,4779
328,15	116,8770	118,0107	117,9048
330,65	117,2107	118,3291	118,3341
333,15	117,5459	118,6487	118,7660
335,65	117,8826	118,9697	119,2003
338,15	118,2208	119,2921	119,6371

^aIncertidumbres estándar y combinadas expandidas (0,95 nivel de confianza, $k=2$): $u(T)=0,002$ K, $u(p)=0,5$ kPa, ; $U_c(R_m)=0.004$ cm³·mol⁻¹, ; $U_c(f_m)=0.03$ cm³·mol⁻¹