

CEU
*Universidad
San Pablo*

Determinación del diagrama de fases del benceno mediante simulación en ordenador

Computer simulation of phase diagram for benzene

Trabajo Fin de Grado. Grado en Biotecnología Bilingüe. Facultad de
Farmacia.

Autor: Markel Rebollo Irusta

Profesor: Benito Garzón Sánchez

Fecha: 19 de Junio 2025

ÍNDICE

1. Resumen/Abstract.....	3
2. Introducción.....	4
2.1. ¿Qué es el equilibrio líquido-vapor?.....	4
2.2. Simulación Computacional.....	4
3. Objetivo.....	5
4. Materiales y métodos.....	5
4.1. Modelo para el benceno.....	5
4.2. Condiciones de Simulación.....	9
5. Resultados.....	11
6. Discusión.....	13
7. Conclusiones.....	18
8. Referencias bibliográficas.....	19

1. RESUMEN

En este estudio se realizan simulaciones computacionales de tipo GEMC para obtener el equilibrio líquido-vapor de benceno. Se proponen dos modelos de benceno. El primero, un benceno apolar con un diámetro reducido de 1.338, y el segundo, un benceno polar con un diámetro reducido de 1.338 y un cuadrupolo cuadrado reducido de 3. Estos modelos se comparan con un modelo de benceno establecido en un trabajo previo (diámetro reducido de 1.2 y apolar). Los parámetros críticos y diagramas de fases de todos los modelos se comparan con los resultados experimentales del benceno. Se concluye que el modelo de benceno que mejor se ajusta a los puntos experimentales es el benceno polar con diámetro reducido 1.338 y cuadrupolo cuadrado reducido 3, ya que ajusta mejor a las propiedades reales del benceno que los modelos de benceno apolar de diámetro reducido 1.2 y 1.338.

ABSTRACT

This study uses GEMC computational simulations to find the liquid-vapour equilibrium of benzene. Two benzene models are proposed. The first is an apolar benzene with a reduced diameter of 1.338, and the second is a polar benzene with a reduced diameter of 1.338 and a reduced squared quadrupole of 3. These models are compared to a benzene model that had been established in a previous study. The previously established model is an apolar benzene with a reduced diameter of 1.2. The phase diagrams and critical parameters of every model are compared with the experimental values of benzene. We conclude that the benzene model that best fits the experimental results was the quadrupole benzene model with a reduced diameter of 1.338 and a reduced squared quadrupole of 3. This model demonstrated superior alignment to both the apolar benzene models.

PALABRAS CLAVES

Monte Carlo en el Colectivo de Gibbs, Benceno, Equilibrio Líquido-Vapor, Fluidos Oblatos

2. INTRODUCCIÓN

2.1. ¿Qué es el equilibrio líquido-vapor?

Cuando se encierra un líquido en un recipiente cerrado, dentro del recipiente coexisten dos fases: el líquido y el vapor. Ambas fases están en equilibrio, y eso significa que en ambas fases existe la misma temperatura, la misma presión y el mismo valor del potencial químico. La descripción microscópica de este sistema nos mostraría cómo hay un continuo intercambio de moléculas desde una fase a otra, pero la velocidad de transferencia en un sentido es igual a la velocidad de transferencia en el otro sentido.

2.2. Simulación Computacional

En este trabajo vamos a emplear una simulación computacional para obtener el equilibrio líquido-vapor del benceno. El tipo de simulación computacional que vamos a usar es un programa de Monte Carlo en el Colectivo de Gibbs (GEMC) (Panagiotopoulos, A.Z. 1987). Este método considera un sistema compuesto por dos recipientes (cajas). Una caja representa la fase líquida y la otra caja representa la fase gaseosa. De acuerdo con las condiciones termodinámicas de equilibrio de fases, la temperatura de cada recipiente se mantiene constante e igual en ambos. Para garantizar que se cumple la igualdad de temperatura, presión y potencial químico, durante la simulación se realizan tres tipos de movimientos:

- Un cambio (aleatorio) en la configuración interna (posición y orientación) de las moléculas en cada caja.
- Un cambio (aleatorio) del volumen de la cajas (manteniendo el volumen total constante).
- Un intercambio de moléculas (elegidas al azar) de una caja a otra (barrera permeable, esencial para la definición de potencial químico).

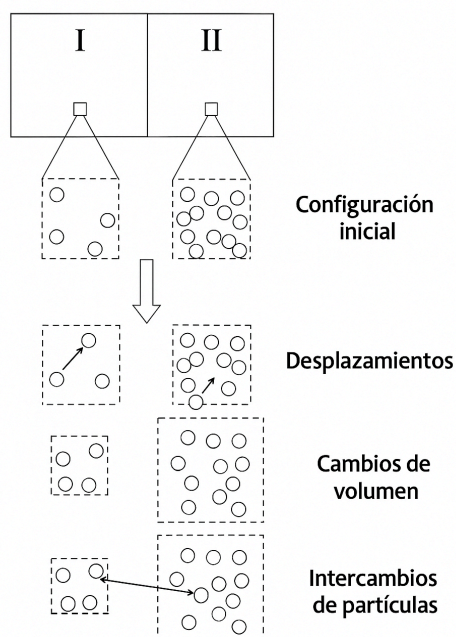


Figura 1. Los tres tipos de cambios de configuración que son posibles en una simulación GEMC. (Panagiotopoulos, A.Z. 1987)

El programa calcula, para cada ciclo, los valores de la energía, presión, volumen, potencial químico, número de partículas, etc. De cada recipiente. Después de un periodo de equilibrado estos parámetros se toman en cuenta para obtener los valores medios y su error estadístico.

El programa GEMC específico para este modelo fue desarrollado en Fortran.

3. OBJETIVO

El objetivo de este trabajo es determinar las propiedades físicas del benceno. Para hacer esto vamos a proponer un modelo sencillo de benceno que considera que la molécula es un esferocilindro oblató con un diámetro reducido D^* y un cuadrupolo reducido Q^{*2} . Vamos a realizar simulaciones computacionales para encontrar el equilibrio líquido-vapor de nuestro modelo y posteriormente compararemos el diagrama de fases de nuestro modelo con el de los resultados experimentales, para verificar cómo de bien se ajusta nuestro modelo de benceno a la realidad. En un trabajo previo se encontró que el modelo de benceno apolar con $D^*=1.2$ y $Q^*=0$ se ajustaba bastante bien a la realidad. Este trabajo tiene el objetivo de ver si se pueden proponer modelos de benceno alternativos que mejoren estos resultados.

Realizamos un cálculo cuántico con el programa Spartan para una molécula de benceno. Obtuvimos un diámetro reducido de $D^*=1.338$. Además, el benceno es una molécula polar específicamente con cuadrupolo, debido a eso propusimos un modelo de benceno con cuadrupolo reducido $Q^{*2}=3$. Por lo tanto, vamos a proponer un modelo de benceno polar con $D^*=1.338$ y $Q^{*2}=3$. Para analizar adecuadamente el efecto de los cambios propuestos en el modelo, también vamos a proponer un modelo de benceno apolar con $D^*=1.338$ y $Q^{*2}=0$.

4. MATERIALES Y MÉTODOS

4.1. Modelo para el benceno

En este experimento consideramos, como modelo geométrico para el benceno, el de un disco infinitamente fino de diámetro D .

Las moléculas interaccionan por pares mediante el siguiente potencial, que depende de la distancia entre los centros de masa de las dos moléculas (r_{12}) y su orientación relativa (expresado como ω_1, ω_2),

$$u(r_{12}, \omega_1, \omega_2) = u^K(r_{12}, \omega_1, \omega_2) + u^{\mu\mu}(r_{12}, \omega_1, \omega_2) + u^{QQ}(r_{12}, \omega_1, \omega_2)$$

Donde u^K es el llamado potencial de Kihara, potencial que depende de la distancia más corta entre los dos discos (ρ).

$$u^K(r_{12}, \omega_1, \omega_2) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{\rho} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{\rho} \right)^6 \right]$$

σ es el valor de la distancia mínima entre dos moléculas para la cual el potencial es cero.

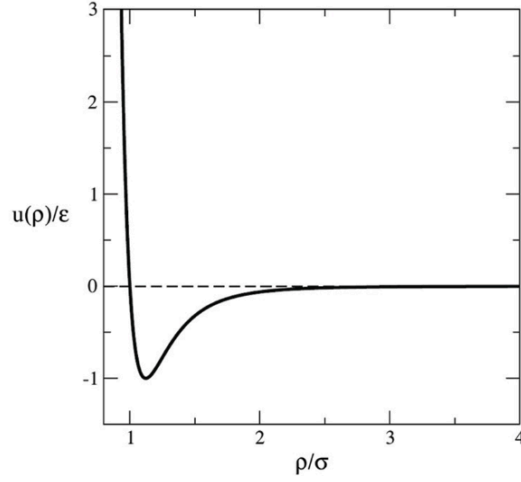


Figura 2. Representación gráfica del modelo de Kihara. (Trejos, V. M., et al. 2023)

Si la molécula presenta polaridad, hay que tener en cuenta alguno de los otros términos del potencial, es decir, el potencial dipolo-dipolo,

$$u^{\mu\mu}(r_{12}, \omega_1, \omega_2) = \frac{\mu^2}{r_{12}^3} \left(e_{\mu 1} \cdot e_{\mu 2} - 3 \cdot \frac{r_{12} \cdot e_{\mu 1}}{r_{12}} \cdot \frac{r_{12} \cdot e_{\mu 2}}{r_{12}} \right)$$

o el potencial cuadrupolo-cuadrupolo,

$$u^{QQ}(r_{12}, \omega_1, \omega_2) = \frac{3Q^2}{4r_{12}^5} \left[1 + 2(e_1 \cdot e_2)^2 - \frac{5(r_{12} \cdot e_1)^2}{r_{12}^2} - \frac{5(r_{12} \cdot e_2)^2}{r_{12}^2} + \frac{35(r_{12} \cdot e_1)^2(r_{12} \cdot e_2)^2}{r_{12}^4} - \frac{20(e_1 \cdot e_2)(r_{12} \cdot e_1)^2(r_{12} \cdot e_2)^2}{r_{12}^4} \right]$$

La descripción visual del modelo es la siguiente: alrededor del disco infinitamente fino que representa al benceno, existe una zona de exclusión que rodea al benceno formada por fuerzas de repulsión electrostáticas. σ representa la anchura de la zona de exclusión. El tamaño de esta zona de exclusión es de $\sigma/2$ en todas las direcciones, es decir que el diámetro total igualaría $D + \sigma$.

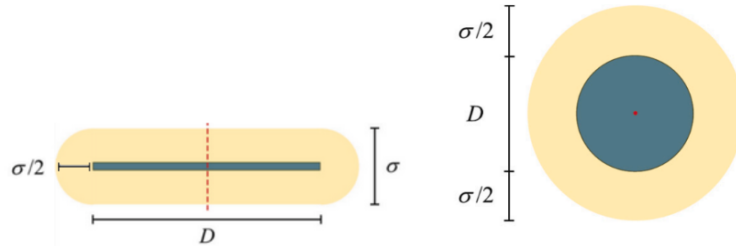
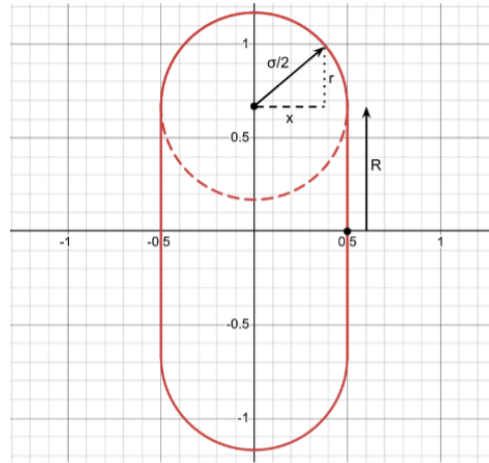


Figura 3. Diagrama representado la molécula de benceno (azul) y su zona de exclusión (amarillo).
(Trejos, V. M., et al. (2023))

El volumen del benceno más su zona de exclusión tiene forma de esferocilindro oblatado. Para encontrar el volumen total consideramos el área transversal de un esferocilindro oblatado en posición horizontal. Si hacemos un corte paralelo al plano, el área transversal es la superficie de un círculo. El área transversal del esferocilindro cambia con x , si x es el valor máximo el radio del área transversal es $D/2$, si x es cero el radio del área transversal es $D/2 + \sigma/2$. ($D/2 = R$).



Con este diagrama podemos ver que el radio del área transversal es $R + r$. Donde

$$r = \sqrt{\left(\left(\frac{\sigma}{2}\right)^2 - x^2\right)} \quad Area = \pi \cdot \left(R + \sqrt{\left(\left(\frac{\sigma}{2}\right)^2 - x^2\right)}\right)^2$$

Con esto obtenemos una ecuación que demuestra cómo varía el área transversal del esferocilindro con x (representa la posición del corte transversal). Para obtener el volumen haremos la integral del área transversal con respecto a dx entre los parámetros $-\sigma/2$ y $\sigma/2$.

$$\begin{aligned}
V &= \int_b^a A(x) dx \\
V &= 2 \int_0^{\frac{\sigma}{2}} A(x) dx \\
V &= 2\pi \int_0^{\frac{\sigma}{2}} \left(R + \sqrt{\frac{\sigma^2}{4} - x^2} \right)^2 dx \\
V &= \int_0^{\frac{\sigma}{2}} \left[2\pi \left(2R \left(\frac{\sigma^2 \sin^{-1}\left(\frac{2x}{\sigma}\right)}{8} - \frac{x \sqrt{\frac{\sigma^2}{4} - x^2}}{2} \right) - \frac{x^3}{3} + \frac{\sigma^2 x}{4} + R^2 x \right) + C \right] \\
V &= \frac{R\sigma^2\pi^2}{4} + \frac{\sigma^3\pi}{6} + R^2\sigma\pi \quad R = D/2 \\
V &= \frac{D\sigma^2\pi^2}{8} + \frac{\sigma^3\pi}{6} + \frac{D^2\sigma\pi}{4} \quad D = D^*\sigma \\
V &= \frac{D^*\sigma^3\pi^2}{8} + \frac{\sigma^3\pi}{6} + \frac{D^{*2}\sigma^3\pi}{4} \\
V &= \frac{\pi\sigma^3}{6} (0.75D^*\pi + 1 + 1.5D^{*2})
\end{aligned}$$

Usaremos la constante $D^* = D/\sigma$ que representa el diámetro reducido para definir la forma de nuestro benceno (esferocilindro oblat). El volumen de la molécula más su zona de exclusión viene dado por,

$$V_m = \frac{\pi\sigma^3}{6} \left(\frac{3}{2}D^{*2} + \frac{3}{4}D^*\pi + 1 \right)$$

De manera similar, se obtiene una expresión para la superficie esféricilíndrica que rodea al disco plano,

$$S_c = \frac{\pi\sigma^2}{2} (D^{*2} + \pi D^* + 2)$$

En paralelo, utilizando el programa comercial Spartan (Copyright © 1991-2023 by Wavefunction Inc.), realizamos un cálculo cuántico para obtener el volumen y el área de la nube electrónica de la molécula de benceno. Al igualar las expresiones anteriores a los valores proporcionados por el programa, se obtiene un valor para $D^* = D/\sigma = 1,338$, y $\sigma = 3,025$ Angstrom.

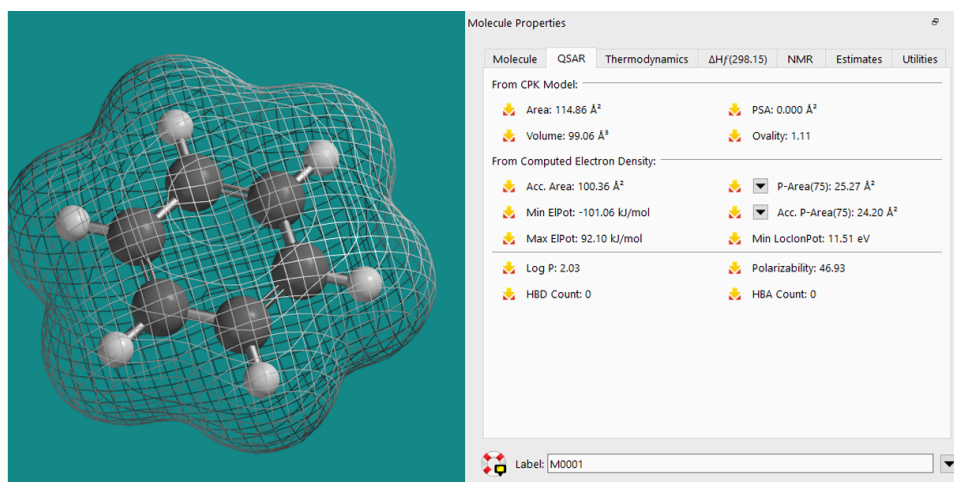


Figura 4. Resultado del cálculo cuántico realizado con Spartan.

En un trabajo anterior se encontraron los resultados para un modelo de benceno no polar con $D^* = 1.2$. Con el objetivo de mejorar el modelo del trabajo anterior y basándonos en el resultado del cálculo cuántico vamos a usar el diámetro reducido $D^* = 1.338$ en nuestros próximos modelos. Además, sabemos que el benceno en realidad es polar y tiene un cuadrupolo igual a $3.9 \cdot 10^{-26}$ esu. Con esto en mente, hemos realizado simulaciones para dos modelos, ambos con $D^* = 1.338$. El primero, no polar, y el segundo, con un cuadrupolo de $Q^2 = 3$.

4.2. Condiciones de Simulación

Esta simulación se llevó a cabo usando 512 moléculas restringidas a dos cajas con 256 moléculas en cada caja. La configuración inicial de las moléculas corresponde a una red cúbica centrada en las caras.

El volumen de la cajas se calcula para que se ajusten a su densidad experimental. Cada simulación consiste en 110000 ciclos. En cada ciclo se realizan 512 intentos de cambio de posición y orientación de las partículas, un intento de cambio del volumen de ambas cajas (manteniendo constante el volumen total) y un número elevado de intentos de intercambio de partículas entre ambas cajas. La tasa de aceptación de cada tipo de movimiento se controla para que sea de un 40% de movimientos del primer y segundo tipo y alrededor de un 1-3% para el intercambio.

Después de cada simulación se obtienen los valores de la densidad reducida del gas (ρ_g^*), del líquido (ρ_l^*) y la presión de vapor reducida (P_v^*) a una temperatura reducida fija (T^*).

Se ajustan las siguientes ecuaciones a los datos obtenidos por simulaciones. (Garzón, B., et al. 1994)

$$(\rho_l^* + \rho_g^*) / 2 = a + bT^*$$

$$\rho_l^* - \rho_g^* = c \left(1 - \frac{T^*}{T_c^*} \right)^\beta$$

La primera ecuación (izquierda) corresponde a la ley de diámetros rectilíneos (Guggenheim, E. A. 1945). Esta ecuación describe cómo varía el punto medio entre las densidades reducidas de ambas fases con respecto a la temperatura reducida. Representa la asimetría en el diagrama de fases.

La segunda ecuación (derecha) describe cómo varía la diferencia entre las densidades reducidas de ambas fases con respecto a la temperatura reducida. El parámetro crítico β se iguala a 1/3 que es típico de muchos fluidos. (Pfeuty, P., et al. 1978). Nosotros vamos a usar esta ecuación pero expresada alternativamente.

$$\rho_l^* - \rho_g^* = (f - gT^*)^\beta$$

También se ajustó la ecuación de Clausius-Clapeyron para aproximar los resultados de la presión de vapor reducida y la temperatura reducida.

$$\ln(P^*) = d - \frac{e}{T^*} \quad P^* = \exp\left(d - \frac{e}{T^*}\right)$$

Con un programa de análisis de datos se ajustan los resultados obtenidos en cada experimento de simulación y se obtienen los valores de los parámetros de ajuste a, b, d, e, f y g. Con estos parámetros obtendremos los valores de la temperatura crítica, la densidad crítica y la presión de vapor crítica.

$$T_c^* = \frac{f}{g} \quad \rho_c^* = a + bT_c^* \quad P_c^* = \exp\left(d - \frac{e}{T_c^*}\right)$$

Una vez obtenida la temperatura crítica y densidad crítica en unidades reducidas suponemos que la temperatura y densidad crítica del modelo son iguales que los del fluido real, el benceno.

$$T_c^{GEMC} = T_c^* \cdot (\epsilon/k) = T_c^{exp} \quad \rho_c^{GEMC} = \rho_c^* / \sigma^3 = \rho_c^{exp}$$

Los parámetros ϵ/k y σ que son necesarios para convertir unidades reducidas a unidades reales se pueden obtener mediante la siguientes ecuaciones.

$$\epsilon/k(K) = \frac{T_c^{exp}(K)}{T_c^*} \quad \sigma(A) = \left(\frac{\rho_c^* \cdot 10000}{\rho_c^{exp}(mol/L) \cdot 6.023} \right)^{1/3}$$

Se cambian las unidades de reducidas a unidades absolutas con las siguientes ecuaciones,

$$T = T^*(\epsilon/k) \quad \rho = \frac{\rho^* \cdot 10000}{\sigma^3 \cdot 6.023} \quad P = \frac{138.05 \cdot P^* \cdot (\epsilon/k)}{\sigma^3}$$

$$Q^2 = Q^{*2} \cdot (\epsilon/k) \cdot 1.3805 \times 10^{-4} \cdot (\sigma(A))^5 \cdot 10^{-26}$$

5. RESULTADOS

Usando los datos del trabajo anterior obtuvimos los resultados para el modelo de benceno apolar con diámetro $D^*=1.200$ y $Q^*=0$. Además, se llevaron a cabo dos simulaciones GEMC. La primera simulación GEMC es para un modelo de benceno apolar con diámetro $D^*=1.338$ y $Q^*=0$. La segunda simulación GEMC es para modelo de benceno polar con diámetro $D^*=1.338$ y cuadrupolo reducido $Q^*=3$. Una vez obtenidos los resultados de las simulaciones, se obtienen los diagramas de fases para cada modelo. El objetivo es ver cuál de estos modelos de benceno se ajusta mejor a los diagramas de fases obtenidos experimentalmente. Podemos asumir que el modelo que mejor se ajusta a los datos experimentales es el modelo que mejor representa al benceno. De esta manera podemos averiguar las propiedades físicas del benceno.

Tabla 1. Modelo de benceno con diámetro reducido $D^*=1.200$ y cuadrupolo reducido $Q^*=0$.

Los valores entre paréntesis representan el error estadístico de cada dato.

Temperatura Reducida	Densidad Gas Reducida	Densidad Líquido Reducido	Presión Vapor Reducido
0.500	0.0012(0.0002)	0.1357(0.0016)	0.0006(0.0001)
0.550	0.0035(0.0004)	0.1276(0.0019)	0.0021(0.0003)
0.575	0.0055(0.0005)	0.1227(0.0023)	0.0031(0.0004)
0.600	0.0080(0.0008)	0.1162(0.0029)	0.0037(0.0003)
0.625	0.0122(0.0011)	0.1095(0.0040)	0.0053(0.0004)
0.650	0.0180(0.0022)	0.0989(0.0064)	0.0072(0.0007)
0.675	0.0322(0.0022)	0.0863(0.0148)	0.0098(0.0010)
0.680	0.0377(0.0104)	0.0754(0.0141)	0.0107(0.0018)

Tabla 2. Modelo de benceno con diámetro reducido $D^*=1.338$ y cuadrupolo reducido $Q^*=0$.

Temperatura Reducida	Densidad Gas Reducida	Densidad Líquido Reducido	Presión Vapor Reducido
0.450	0.000256(0.000027)	0.112380(0.002672)	0.000118(0.000020)
0.500	0.003475(0.000058)	0.108122(0.002581)	0.000577(0.000062)
0.525	0.001988(0.000173)	0.108561(0.002033)	0.000584(0.000095)
0.550	0.003475(0.000457)	0.105546(0.002298)	0.001972(0.000354)
0.575	0.005814(0.000322)	0.101969(0.003502)	0.002688(0.000401)
0.600	0.008585(0.000743)	0.094691(0.004211)	0.003858(0.000818)
0.610	0.010114(0.000769)	0.091466(0.004872)	0.004436(0.000977)
0.620	0.012894(0.001551)	0.088730(0.005109)	0.005321(0.001468)

0.630	0.015967(0.001890)	0.083685(0.006223)	0.006186(0.001970)
-------	--------------------	--------------------	--------------------

Tabla 3. Modelo de benceno con diámetro reducido $D^*=1.338$ y cuadrupolo reducido $Q^*=3$.

Temperatura Reducida	Densidad Gas Reducida	Densidad Líquido Reducido	Presión Vapor Reducido
0.450	0.000743(0.000941)	0.125880(0.001923)	0.000191(0.000347)
0.500	0.000642(0.000104)	0.121921(0.001788)	0.000328(0.000065)
0.525	0.001148(0.000052)	0.118362(0.002585)	0.000625(0.000070)
0.550	0.002118(0.000468)	0.113808(0.001963)	0.001202(0.000274)
0.575	0.005219(0.000377)	0.112388(0.002712)	0.002427(0.000394)
0.600	0.005330(0.000559)	0.103645(0.003110)	0.002891(0.000505)
0.620	0.008372(0.001201)	0.100030(0.003195)	0.003886(0.000960)
0.640	0.013243(0.001295)	0.096796(0.003783)	0.005513(0.001294)
0.660	0.016746(0.002114)	0.086219(0.005656)	0.006661(0.002170)
0.665	0.018639(0.003003)	0.080063(0.008100)	0.007121(0.002542)

6. DISCUSIÓN

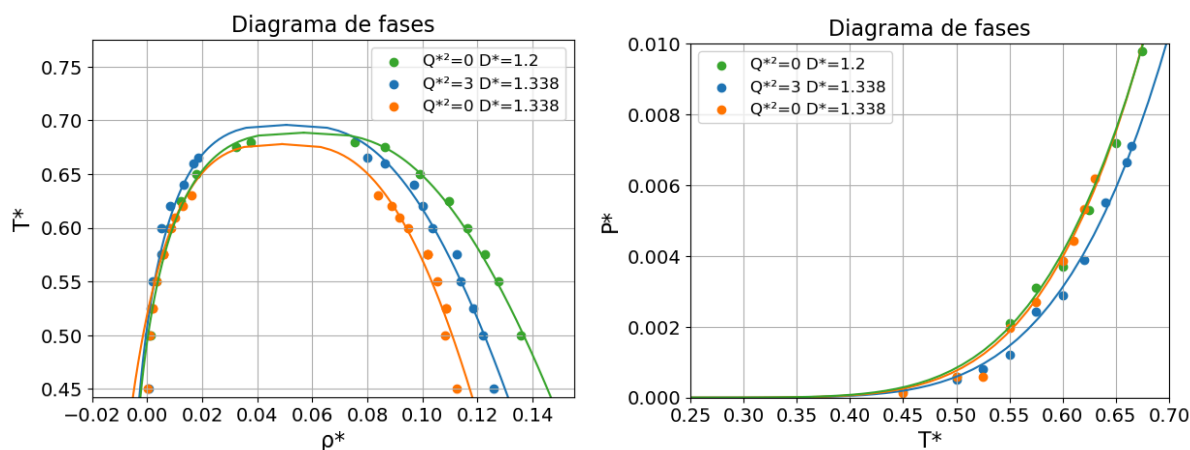


Figura 5. Los puntos de la simulación para los diferentes modelos de benceno con sus ecuaciones respectivas ajustadas. Izquierda. Diagrama de fases T^* - ρ^* (curva de coexistencia del benceno) con diferentes propiedades. Derecha. Diagrama de fases P^* - T^* (curva de presión de vapor) con diferentes propiedades. Las líneas sirven como guía visual, obtenidas a partir del ajuste de los datos a las tres ecuaciones mencionadas en el texto.

Parámetros críticos y de ajuste.

	Benceno apolar ($D^*=1.200, Q^{*2}=0$)	Benceno apolar ($D^*=1.338, Q^{*2}=0$)	Benceno cuadrupolo ($D^*=1.338, Q^{*2}=3$)
T_c^*	0.6886	0.6770	0.6959
ρ_c^*	0.0569	0.0490	0.0507
P_c^*	0.0114	0.0103	0.0098
a	0.0994	0.0704	0.0874
b	-0.0618	-0.0315	-0.0528
f	0.00926	0.00539	0.00659
g	0.01345	0.00795	0.00947
d	2.4550	2.7550	2.5610
e	4.7700	4.9700	4.9990

Tabla 4. Parámetros críticos reducidos y parámetros de ajuste de los tres modelos de benceno.

Los parámetros de benceno obtenidos experimentalmente son $T_c=561.75$ K, $\rho_c=3.9$ mol/L, $P_c=48.76$ bar, $T_{eb}^\circ = 361.19$ K y $Q^{*2}=3.9 \cdot 10^{-26}$ esu (Goodwin, R. D. 1988). Se usa la temperatura crítica y la presión crítica para encontrar epsilon y sigma.

Epsilon y sigma.

	Benceno apolar ($D^*=1.200$, $Q^{*2}=0$)	Benceno apolar ($D^*=1.338$, $Q^{*2}=0$)	Benceno cuadrupolo ($D^*=1.338$, $Q^{*2}=3$)
ϵ/k (K)	815.74	829.30	807.25
σ (Å)	2.8929	2.7532	2.7837

Tabla 5. Epsilon/constante de boltzmann y sigma de los tres modelos de benceno.

Temperatura de ebullición y presión crítica.

	Benceno apolar ($D^*=1.200$, $Q^{*2}=0$)	Benceno apolar ($D^*=1.338$, $Q^{*2}=0$)	Benceno cuadrupolo ($D^*=1.338$, $Q^{*2}=3$)
P_c (bar)	52.99	56.52	49.94
P_c^{exp} (bar)	48.76	48.76	48.76
Error Absoluto (bar)	4.23	7.76	1.18
T_{eb}° (K)	357.56	363.08	364.16
T_{eb}^{exp} (K)	361.19	361.19	361.19
Error Absoluto (K)	3.63	1.89	2.97

Tabla 6. Comparación de la temperatura de ebullición y la presión crítica entre los resultados de los modelos de benceno y el benceno real.

La **Tabla 6** compara la presión crítica y temperatura de ebullición obtenidos mediante simulaciones para nuestros tres modelos con la presión crítica y temperatura de ebullición real. Esta comparación nos permite evaluar qué modelo se ajusta mejor a la realidad.

La presión crítica del benceno obtenida experimentalmente es $P_c=48.76$ bar.

El modelo de benceno con cuadrupolo ($D^*=1.338$, $Q^{*2}=3$) tiene una presión crítica de 49.94 bar. Es el mejor ajuste de todos los modelos con un error absoluto de 1.18 bar. El modelo de benceno apolar ($D^*=1.200$, $Q^{*2}=0$) tiene una presión crítica de 52.99 bar y un error absoluto de 4.23 bar. Finalmente el modelo de benceno apolar ($D^*=1.338$, $Q^{*2}=0$) tiene una presión crítica de 56.52 bar y un error absoluto de 7.76 bar.

La temperatura de ebullición del benceno obtenida experimentalmente es $T_{eb}^\circ = 361,19$ K.

El modelo de benceno apolar ($D^*=1.338$, $Q^{*2}=0$) tiene una temperatura de ebullición de 363.08 K. Es el mejor ajuste de todos los modelos con un error absoluto de 1.89 K. El modelo benceno con cuadrupolo ($D^*=1.338$, $Q^{*2}=3$) tiene una temperatura de ebullición de 364.16 K y un error absoluto de

2.97 bar. Finalmente el modelo de benceno apolar ($D^*=1.200$, $Q^{*2}=0$) tiene una temperatura de ebullición de 357.56 K y un error absoluto de 3.63 K.

Finalmente el valor del benceno del cuadrupolo cuadrado obtenido experimentalmente es $Q^2 = 3.900 \cdot 10^{-26}$ esu. Usando la ecuación mencionada anteriormente podemos obtener el cuadrupolo cuadrado de nuestro modelo en unidades reales. Para el modelo de benceno con cuadrupolo ($D^*=1.338$, $Q^{*2}=3$) hemos obtenido un cuadrupolo cuadrado de $5.588 \cdot 10^{-25}$ esu.

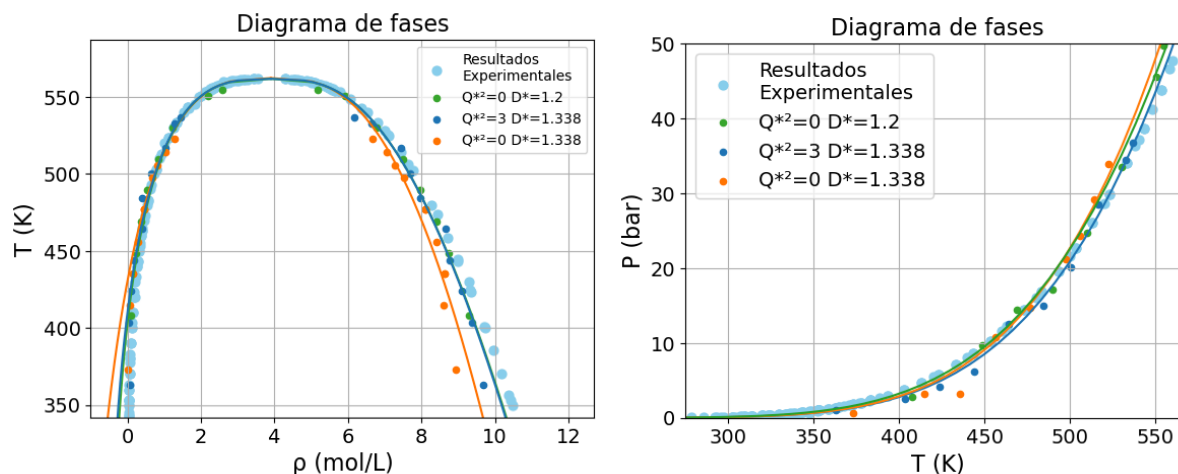
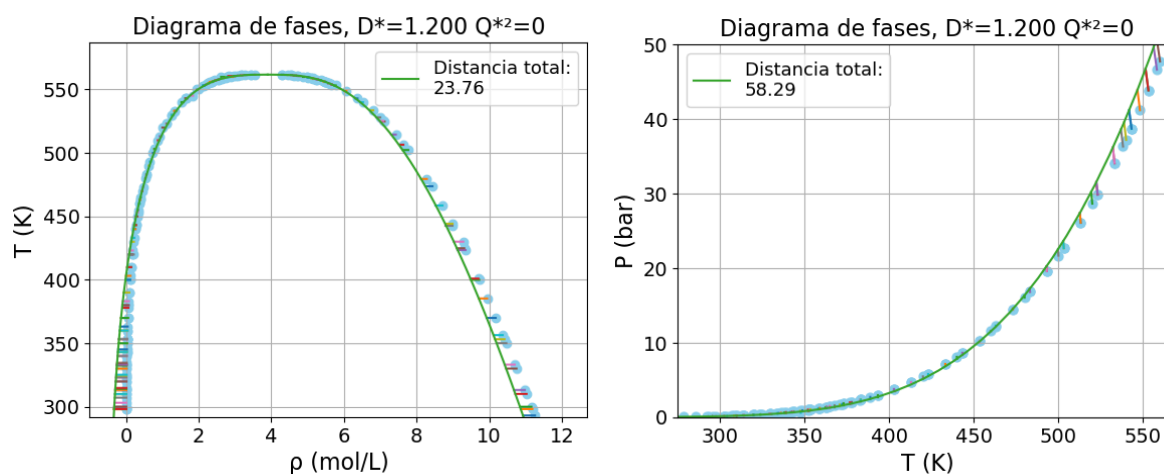


Figura 9. Izquierda. Diagrama de fases T-ρ (curva de coexistencia del benceno) con tres diferentes modelos comparado con los resultados experimentales. Derecha. Diagrama de fases P-T (curva de presión de vapor) con tres diferentes modelos comparado con los resultados experimentales.



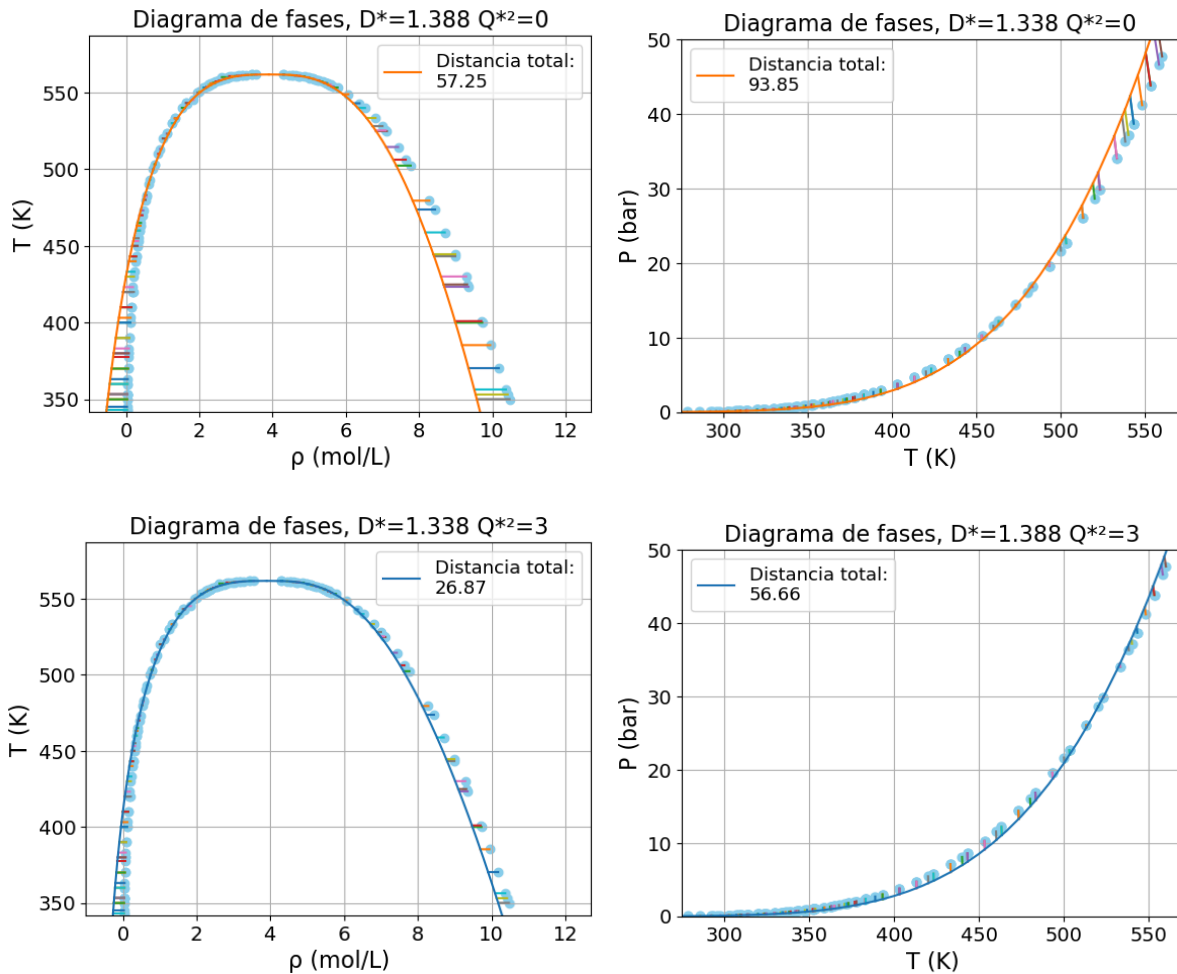


Figura 10. Estos gráficos enseñan el ajuste individual de cada modelo de benceno con los resultados experimentales. La distancia total entre los puntos y las ecuaciones, mide cómo de bien se ajustan las ecuaciones obtenidas a partir de la simulación GMEC a los resultados experimentales. La distancia total es una medida de error.

El modelo de benceno apolar ($D^*=1.200$, $Q^{*2}=0$) tiene el menor error en el diagrama de fases T- ρ , con un distancia total de 23.76 y una distancia total de 58.29 en el diagrama de fases P-T.

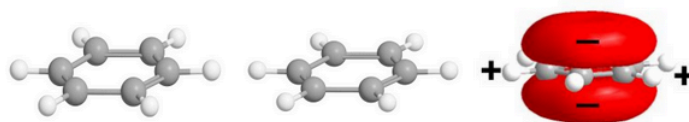
El modelo de benceno apolar ($D^*=1.338$, $Q^{*2}=0$) tiene el mayor error en ambos diagramas de fase. Con una distancia total de 57.25 en el diagrama de fases T- ρ y una distancia total de 93.85 en el diagrama de fases P-T.

El modelo de benceno con cuadrupolo ($D^*=1.338$, $Q^{*2}=3$) tiene el menor error en el diagrama de fases P-T, con un distancia total de 56.66 y una distancia total de 26.87 en el diagrama de fases T- ρ .

Usando la distancia total como heurística podemos determinar qué modelo de benceno se ajusta mejor a los resultados obtenidos experimentalmente.

Comparando el modelo de benceno apolar ($D^* = 1.200$, $Q^2 = 0$) establecido en el trabajo anterior con el modelo de benceno apolar ($D = 1.338$, $Q^2 = 0$), podemos concluir que el modelo nuevo no es adecuado, ya que muestra desviaciones significativamente mayores en ambos diagramas de fases que el modelo de benceno apolar ($D = 1.200$, $Q^{*2} = 0$) y tampoco da buenos resultados de presión crítica.

Comparando el modelo de benceno apolar ($D^* = 1.200$, $Q^2 = 0$) establecido en el trabajo anterior con el modelo de benceno con cuadrupolo ($D = 1.338$, $Q^{*2} = 3$), podemos concluir que el modelo con cuadrupolo mejora el modelo del trabajo anterior, ya que consistentemente muestra resultados próximos a los resultados experimentales. A pesar de dar un alineamiento ligeramente peor en el diagrama de fases T-p en comparación con el modelo original, el modelo con cuadrupolo da mejores resultados en el diagrama de fases P-T, y también ofrece mejores resultados de presión crítica y temperatura de ebullición. Este modelo da resultados con exactitud en todos los diagramas de fase y en todos los parámetros críticos.



	$D^*=1.2 \quad Q^{*2}=0$	$D^*=1.338 \quad Q^{*2}=0$	$D^*=1.338 \quad Q^{*2}=3$	Experimental
T-p	23.76	57.25	26.87	0
P-T	58.29	93.85	56.66	0
Presión crítica (bar)	52.99	56.52	49.94	48.76
Temperatura de ebullición (K)	357.56	363.08	364.16	361.19
Diferencia total	89.91	160.75	87.73	0

Figura 11. Esta tabla muestra el error de cada modelo de benceno. El modelo de benceno con menor error es el benceno $D^*=1.338$ y $Q^{*2} = 3$.

7. CONCLUSIONES

Este trabajo tenía el objetivo de crear un modelo de benceno que diera mejores resultados que el modelo de benceno establecido en el trabajo anterior. Podemos concluir que el modelo de benceno con cuadrupolo reducido 3 y diámetro reducido 1.338 mejora los resultados del modelo anterior y consecuentemente, es un modelo de benceno que representa las propiedades físicas del benceno mejor que el modelo propuesto en el trabajo anterior.

También podemos concluir que el modelo de benceno apolar con diámetro reducido 1.338 no es una representación adecuada de las propiedades físicas del benceno, ya que no consiguió superar los resultados del modelo del trabajo anterior.

8. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Panagiotopoulos, A.Z. 1987. 'Direct determination of phase coexistence properties of fluids by Monte Carlo simulation in a new ensemble'. *Molecular Physics* 61(4): 813-826.

<https://doi.org/10.1080/00268978700101491>

Goodwin, R.D. 1988. 'Benzene Thermophysical Properties from 279 to 900 K at Pressures to 1000 Bar'. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 17(4): 1541-1636.

<https://doi.org/10.1063/1.555813>

Trejos, V.M., Gámez, F. y Garzón, B. 2023. 'Monte Carlo simulations and molecular discrete perturbation theory of multipolar oblate Kihara fluids'. *Journal of Molecular Liquids* 383: 122177.

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122177>

Garzón, B., Lago, S., Vega, C., de Miguel, E. y Rull, L.F. 1994. 'Computer simulation of vapor-liquid equilibria of linear quadrupolar fluids. Departures from the principle of corresponding states'. *The Journal of Chemical Physics* 101(5): 4166-4176. <https://doi.org/10.1063/1.467467>

Guggenheim, E.A. 1945. 'The Principle of Corresponding States'. *The Journal of Chemical Physics* 13(7): 253-261. <https://doi.org/10.1063/1.1724035>

Pfeuty, P., Toulouse, G. y Domany, E. 1978. 'Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena'. *Physics Today* 31(4): 57-58. <https://doi.org/10.1063/1.2994997>