

**Universidade Federal do Rio Grande do Sul**

Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais

Obtenção de método interativo para ajustar os parâmetros de  
solubilidade tridimensionais à tensão superficial

Claudio Eduardo Farias Nunes Pereira

Tese de Doutorado

Porto Alegre, setembro de 2023

**Universidade Federal do Rio Grande do Sul**

Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais

**Obtenção de um método interativo para ajustar os parâmetros  
de solubilidade tridimensionais à tensão superficial**

Claudio Eduardo Farias Nunes Pereira

Tese de doutorado realizada sob a orientação do Profa. Dra. Raquel Mauler e co-orientação do Prof. Dr. Otávio Bianchi, apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais da Universidade Federal do Rio Grande do Sul em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Ciência dos Materiais.

Porto Alegre, setembro de 2023

PEREIRA, CLAUDIO

Obtenção de método interativo para ajustar os parâmetros de solubilidade tridimensionais à tensão superficial / CLAUDIO PEREIRA. -- 2023.

164 f.

Orientadora: Raquel Santos Mauler.

Coorientador: Otávio Bianchi.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Química, Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais, Porto Alegre, BR-RS, 2023.

1. parâmetros de solubilidade. 2. tensão superficial. 3. físico-química. 4. dispersibilidade. 5. nanopartículas de carbono. I. Mauler, Raquel Santos, orient. II. Bianchi, Otávio, coorient. III. Título.

Dedico esse trabalho a minha família

## **AGRADECIMENTOS**

Quero expressar minha gratidão à minha orientadora, Prof. Dra. Raquel Mauler, do Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais (PGCIMAT) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, pela oportunidade de ter desenvolvido essa tese.

Gostaria de expressar minha gratidão ao Prof. Dr. professor Otávio Bianchi, por seu grande apoio e incentivo ao longo deste projeto. Tive a sorte de trabalhar sob sua supervisão e aprender muito com ele e seu grupo, do Laboratório de Materiais Poliméricos (LAPOL), UFRGS. Gostaria de agradecer aos colegas Lucas Paim, Dr. Lucas Agnol, MSc. Josiel Cruz auxílio no desenvolvimento dos testes realizados durante o desenvolvimento da tese.

Agradecimento especial ao colega e amigo Prof. MSc. Guilherme Vebber, da Universidade Estadual do Rio Grande do Sul (UERGS), Bento Gonçalves, que ajudou na formulação e conferência da base matemática e física das teorias desenvolvidas.

Agradeço a meus pais Claudio e Nide, e a minha esposa Patricia e filhos Henrique e Gabriela por me proporcionarem condições, compreensão, carinho e incentivo durante o desenvolvimento da tese.

## LISTA DE TRABALHOS GERADOS

Publicação de dois (2) artigos como primeiro autor com o orientador e co-orientador, referentes à tese de doutorado:

### **I. DiPEVa, an interactive method for adjusting the three-dimensional solubility parameters to surface tension.**

Autores: Claudio Nunes Pereira <sup>1</sup>, Guilherme Cañete Vebber<sup>2</sup>, Raquel S. Mauler<sup>1</sup> and Otávio Bianchi<sup>3</sup>

Julho de 2021, Journal of Molecular Liquids 339(1):116799.

DOI:10.1016/j.molliq.2021.116799

Publicado em Journal of Molecular Liquids – Fator de impacto 6,633

### **II. Liquid partial surface tensions obtained by an adapted Good-Girifalco approach from interfacial tensions and DiPEVa solubility parameters**

Autores: Claudio Nunes Pereira <sup>\*1</sup>, Guilherme Cañete Vebber<sup>2</sup>, Raquel S. Mauler<sup>1</sup> and Otávio Bianchi<sup>3</sup>

Fevereiro de 2022. Journal of Molecular Liquids 351(20)

DOI:10.1016/j.molliq.2022.118625

Publicado em Journal of Molecular Liquids – Fator de impacto 6,633

### **III. Determination of carbon nanoparticles dispersion solubility parameters using the classic Hansen and the DiPEVa method**

Autores: Claudio Nunes Pereira<sup>1</sup>, Lucas Paim<sup>3</sup>, Lucas Agnol, Josiel Cruz<sup>3</sup>, Raquel S. Mauler<sup>1</sup>, Otávio Bianchi<sup>3,\*</sup>

Aceito e publicado on line 10/11/ 2023, na Journal of Molecular Liquids

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0167732223023462>

## RESUMO

Os Parâmetros de Solubilidade Tridimensionais (3DSP), entre os quais se destacam os Parâmetros de Solubilidade de Hansen (HSP), desempenham um papel crucial na avaliação da afinidade entre diferentes substâncias líquidas. Originados a partir da Teoria da Solução Regular e determinados com base em propriedades físico-químicas, esses parâmetros constituem um dos modelos termodinâmicos mais amplamente empregados globalmente. Sua utilidade abrange a previsão da solubilidade de sólidos, incluindo polímeros, assim como a avaliação da capacidade de dispersão de partículas inorgânicas. Uma característica recentemente incorporada aos 3DSP é a consideração da tensão superficial e da energia de superfície, que foi originalmente incorporada por meio do método DiPEVa, detalhado no Capítulo 2 desta tese. Esses parâmetros são particularmente relevantes na formulação de emulsões, no estabelecimento de interfaces compatíveis e no processo de encapsulação de materiais, uma vez que tais processos são sensíveis às discrepâncias interfaciais. Notavelmente, uma correlação substancial entre os 3DSP e a constante dielétrica também foi identificada desde sua concepção original. No Capítulo 3, este trabalho segmentou a tensão superficial em componentes dispersivos e polares, utilizando uma adaptação da técnica Good-Girifalco em conjunto com o método DiPEVa. Os resultados desse enfoque têm implicações na determinação da adesão entre moléculas, na compreensão do espalhamento superficial e no contexto da encapsulação molecular. O Capítulo 4 concentrou-se na determinação dos parâmetros de solubilidade para a dispersão de cinco nanopartículas de carbono, comparando o método clássico de Hansen com a inovação do método DiPEVa. O novo método demonstrou, em geral, eficácia superior ou comparável na previsão da dispersão das nanopartículas, com destaque para solventes miscíveis com água e para a água em si. A análise dos parâmetros de solubilidade tridimensionais também foi estendida aos polímeros, com vistas a explorar a compatibilidade entre as nanopartículas de carbono investigadas e diferentes tipos de materiais, visando compósitos e compósitos híbridos. Essa abordagem visou fomentar o desenvolvimento de nanocompósitos e otimização de soluções com potenciais aplicações práticas.

*Palavras-chave:* Líquidos, parâmetros de solubilidade, tensão superficial, físico-química, método termodinâmico.

## ABSTRACT

The Three-Dimensional Solubility Parameters (3DSP), among which the Hansen Solubility Parameters (HSP) stand out, are crucial in assessing the affinity between different liquid substances. Originating from the Theory of the Regular Solution and determined based on physical-chemical properties, these parameters constitute one of the most widely used thermodynamic models globally. Its usefulness encompasses predicting the solubility of solids, including polymers, and evaluating the dispersion capacity of inorganic particles. A feature recently incorporated into 3DSP is the consideration of surface tension and surface energy, which was initially incorporated through the DiPEVa method, detailed in Chapter 2 of this thesis. These parameters are particularly relevant in the formulation of emulsions, in the establishment of compatible interfaces, and in the process of encapsulating materials since such methods are sensitive to interfacial discrepancies. A substantial correlation between 3DSP and dielectric constant has also been identified since its inception. In Chapter 3, this work segmented surface tension into dispersive and polar components, using an adaptation of the Good-Girifalco technique in conjunction with the DiPEVa method. The results of this approach have implications for determining adhesion between molecules, understanding surface scattering, and in the context of molecular encapsulation. Chapter 4 focused on determining the solubility parameters for the dispersion of five carbon nanoparticles, comparing the classic Hansen method with the innovative DiPEVa method. The new method demonstrated, in general, superior or comparable effectiveness in predicting the dispersion of nanoparticles, with emphasis on water-miscible solvents and water itself. The analysis of three-dimensional solubility parameters will also be extended to polymers to explore the compatibility between the investigated carbon nanoparticles and different materials. This approach aims to promote the development of nanocomposites and the optimization of solutions with potential practical applications.

*Keywords:* Liquids, solubility parameters, surface tension, physical chemistry, thermodynamic method.



# Lista de Figuras, Tabelas, Equações e Abreviaturas

## Lista de Figuras:

Figura 1	Exemplo de esfera de solubilidade de um polímero, solvente e não solvente numa projeção 2D da esfera de Hansen.	21
Figura 2	Detalhamento do processo de otimização DiPEVa de ajuste dos 3DSP à tensão superficial.	35
Figura 3	Correlação entre a soma dos quadrados de dois componentes do parâmetro de solubilidade ( $\delta_D^2 + \delta_P^2$ ) e o produto de volume da tensão superficial ( $7.87\sigma_L V^{-1/3}$ ), Eq. [11].	36
Figura 4	O componente dispersivo do parâmetro de solubilidade do DiPEVa ( $\delta_D$ , este estudo) é comparado com o mesmo parâmetro previsto a partir da tensão superficial dispersiva, da literatura, a razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) e volume molar (Eq. [14]).	37
Figura 5	O componente de associação do parâmetro de solubilidade DiPEVa ( $\delta_a$ , este trabalho) é comparado com o parâmetro polar previsto a partir da tensão superficial polar, da literatura, a razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) e volume molar (Eqs. [15-16]).	38
Figura 6	Correlação entre o produto $7,87 \cdot Z_s \cdot Z^{-1} \cdot DiP \#^{-1}$ e a tensão superficial dispersiva ( $\sigma_D$ ) para vários grupos de compostos alifáticos, Eq. [17].	40
Figura 7	Número de log DiPEVa (DiP #) vs. log $\sigma_L$ da literatura, Eq. [19].	41
Figura 8	Relação entre o componente polar do parâmetro de solubilidade ( $\delta_P$ ) e o produto de momento dipolar e volume quadrado ( $\mu \cdot V^{-1/2}$ ). $\delta_P = 19,98\mu \cdot V^{-1/2}$ , $R^2 = 0,9975$ .	42
Figura 9	Relação entre o componente de associação do parâmetro de solubilidade ( $\delta_a$ ) e a raiz quadrada da constante dielétrica ( $\epsilon_r$ ) ajustada pelo produto da razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) e a raiz quadrada de volume ( $\frac{\epsilon_R^{1/2}}{\frac{Z_s}{Z} \cdot V^{1/2}}$ ).	44
Figura 10	O processo de otimização para correlacionar o coeficiente entre o Good-Girifalco $i^{th}$ , parâmetro de interação ( $\phi_i$ ), e os parâmetros de interação calculados de Bulou e colegas $\phi_j$ para cada $j^{th}$ molécula.	54
Figura 11	Comparação entre o parâmetro de interação total ( $\phi$ ) obtido tanto do método de Good-Girifalco adaptado quanto dos resultados originais de Bulou e colaboradores.	55
Figura 12	Comparação entre os valores de tensão superficial dispersiva obtidos pelo método de otimização DiPEVa e aqueles obtidos pelo método Good-Girifalco adaptado (este estudo) usando o banco de dados Good & Elbing [52].	57
Figura 13	Comparação entre os valores de tensão superficial dispersiva obtidos pelo método de otimização DiPEVa e aqueles obtidos pelo método	59

	Good-Girifalco adaptado (este estudo) usando o banco de dados Apostoluk & Drzymala [57].	
Figura 14	Comparação entre os valores de tensão superficial dispersiva obtidos pelo método de otimização DiPEVa e aqueles obtidos pelo método Good-Girifalco adaptado (este estudo) usando a base de dados Demond & Lindner [58].	60
Figura 15	Comparação entre os valores de tensão superficial polar obtidos pelo método de otimização DiPEVa e aqueles obtidos pelo método Good-Girifalco adaptado (este estudo) usando o banco de dados Good & Elbing [52].	61
Figura 16	Comparação entre os valores de tensão superficial polar obtidos pelo método de otimização DiPEVa e aqueles obtidos pelo método adaptado de Good-Girifalco (este estudo) usando medidas interfaciais de esqualeno por dados de Fowkes e colaboradores [56].	62
Figura 17	Comparação entre o parâmetro de solubilidade dispersiva ajustado ( $\delta_D = 7.87 \cdot Z_s \cdot Z^{-1} \cdot DIP \#^1$ ) e a tensão superficial dispersiva ( $\sigma_D$ ) obtido neste estudo.	63
Figura 18	Relação entre o valor do número DiPEVa e a correspondente tensão superficial total do líquido.	64
Figura 19	O componente de associação do parâmetro de solubilidade DiPEVa ( $\delta_a$ , este trabalho) é comparado com o parâmetro polar previsto a partir da tensão superficial polar, a razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) e volume [19].	65
Figura 20	Relação entre o parachor obtido na literatura e seu cálculo a partir da teoria dos estados correspondentes. (Hugill & van Welsenens). $[P]_{\text{Literatura}} = 1,0066 HVW[P]$ , $[P] = 40,1684(0,151 - 0,0464 \cdot \Omega) \cdot T_C^{13/12} \cdot P_C^{-5/6}$ , no qual $\Omega$ = parâmetro ômega, $T_C$ (K), $P_C$ (bar), $R^2 = 98,76\%$ [59], [60].	66
Figura 21	Aplicações potenciais de nanopartículas de carbono [63]. Legenda das figuras. (a) Óxido de grafeno (GO), (b) nanotubos de carbono, (c) Nanoplaquetas de grafeno, (d) & (e) Pontos quânticos de carbono, CQDs (1)&(2).	71
Figura 22	Dispersão de nanopartículas de carbono no processo de solventes orgânicos [63].	75
Figura 23	Correlação entre o componente de associação do parâmetro de solubilidade ( $\delta_a$ ) do método DiPEVa e a constante dielétrica ao quadrado, ajustada pela razão entre o número de coordenação e o produto de volume ao quadrado ( $\frac{\epsilon_R^{1/2}}{Z_s \cdot V^{1/2}}$ ) [63].	78
Figura 24	(a) Projeção 3D e (b) 2D da esfera de dispersibilidade de NPs de carbono usando o método HSP. (c) Projeção 3D e (d) 2D da esfera de dispersibilidade de NPs de carbono usando o método DiPEVa. Cada NPs de carbono é representado em cores diferentes [63].	84
Figura 25	(a) Projeção 3D e (b) 2D da esfera de dispersibilidade da GNP. Esfera vermelha e solventes = HSP, esfera azul e solventes = DiPEVa [63].	85

Figura 26	(a) Projecção 3D e (b) 2D da esfera de dispersibilidade de CQD(1) e CQD(2) usando o método HSP. Solventes vermelhos = HSP, solventes azuis = DiPEVa [63].	87
Figura 27	Projecção 3D e 2D da esfera de dispersibilidade de CQD(1) e CQD(2) usando o método DiPEVa. Solventes vermelhos = HSP, solventes azuis = DiPEVa [63].	88

### Lista de Tabelas:

Tabela 1	Molécula, volume molar ( $m^3.mole^{-1}$ ), parâmetros de solubilidade de DiPEVa (este estudo, $MPa^{1/2}$ ), soma dos quadrados dos componentes dispersivos e polares de DiPEVa ( $\delta_D^2 + \delta_P^2$ ), número de DiPEVa (DiP #), tensão superficial experimental ( $mN.m^{-1}$ ), razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_S}{Z}$ ), estimativa da tensão superficial $\sigma_L \approx 10^{DiP\#} . Z_S . Z^{-1} . \delta_T^2 * V^{1/3}$ , superfície produto de volume de tensão ( $7.87 \sigma_L . V^{-1/3}$ ), soma dos quadrados dos componentes dispersivos e polares de Hansen ( $\delta_D^2 + \delta_P^2$ ), parâmetros de solubilidade de Hansen ( $MPa^{1/2}$ ). [3]	104
Tabela 2	Molécula, volume molar ( $m^3.mole^{-1}$ ), parâmetros de solubilidade de DiPEVa (este estudo, $MPa^{1/2}$ ), número de DiPEVa (DiP #), tensão superficial experimental ( $mN.m^{-1}$ ), razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_S}{Z}$ ), componente dispersivo DiPEVa ajustado ( $\sigma_D = 7.87(Z_S . Z^{-1} . DIP \#^{-1})$ , Eq. [17]), componentes de tensão superficial polar e dispersiva otimizados ( $\sigma_D, \sigma_P$ ), componente dispersivo estimado DiPEVa ( $\delta_D$ ) calculado pela Eq. [14], componente polar estimado DiPEVa ( $\delta_D$ ) calculado pela Eq. [14]. Temperatura crítica ( $T_C$ ; K), pressão crítica ( $P_C$ ; bar) e parâmetro ômega, parâmetro $[P]$ calculado a partir do método Huggill & van Welsenens (HVW): $[P] = 40,1684(0,151 - 0,0464 * \Omega) . T_C^{13/12} . P_C^{-5/6}$ , onde $\Omega =$ parâmetro ômega, $[P]$ da literatura, $R^2 = 99.56\%$ .	115
Tabela 3	Nomes de compostos, volume molar ( $m^3.mole^{-1}$ ), parâmetros de solubilidade de DiPEVa (este estudo, $MPa^{1/2}$ ), parâmetro de solubilidade de associação ( $\delta_a$ ), número de DiPEVa (DiP #), tensão superficial experimental ( $\sigma_L, mN.m^{-1}$ ), obtido do banco de dados de Jasper, razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_S}{Z}$ ), momento dipolar e produto de volume quadrado ( $\mu . V^{-1/2}$ ), constante dielétrica ( $\epsilon_R$ , literatura), constante dielétrica ajustada para razão dos números de coordenação e volume molar, momento dipolar ( $\mu, D$ ), obtido de Gharagheizi et al., entalpia de vaporização no ponto de ebulição ( $\Delta H_{vap} at Tb; kJ.mol^{-1}$ ), parâmetros de temperatura crítica e de ebulição (K) e entalpia de vaporização a 25 °C ( $\Delta H_{vap} at 25; kJ.mol^{-1}$ ), calculada pela Eq. [21].	132
Tabela 4	Moléculas, volume molar ( $m^3.mol^{-1}$ ), parâmetros de solubilidade do DiPEVa (este estudo, $MPa^{1/2}$ ), tensão superficial da literatura ( $\gamma_1, mN.m^{-1}$ ), literatura e tensão interfacial da água estimada ( $\gamma_{12}, mN.m^{-1}$ ), parâmetros de interação calculados e previstos ( $\Phi_{calc}, \Phi_{pred}$ ), valor alfa otimizado ( $\alpha$ ), componente dispersivo do	142

	parâmetro de interação ( $\Phi_D$ ), valor beta otimizado ( $\beta$ ), parâmetro de interação de associação ( $\Phi_a$ ) [52].	
Tabela 5	Dados de tensão interfacial e valores de parâmetros de interação $\phi$ para água em contato com líquidos apolares e afins.	145
Tabela 6	Nomes de líquidos, volume molar ( $m^3.mol^{-1}$ ), número CAS (CAS #), parâmetros de solubilidade DiPEVa (este estudo, $MPa^{1/2}$ ), parâmetro de solubilidade de associação ( $\delta_a$ ), número DiPEVa (DiP#), tensão superficial experimental ( $mN.m^{-1}$ ) retirada de Good & Elbing, Apostoluk & Drzymała, Demond & Lindner ou Fowkes e banco de dados de colegas [1]–[4], a razão dos números de coordenação ( $Z_S/Z$ ), a razão de números de coordenação e razão DiP# ( $7.87 Z_S.Z^{-1}.DiP\#^{-1}$ ), momento dipolar ( $\mu$ , D), retirado de Gharageize et al., entalpia de vaporização no ponto de ebulição ( $\Delta H_{vap}$ at Tb; $kJ.mol^{-1}$ ), parâmetros de temperatura crítica e de ebulição (K) e entalpia de vaporização a 25 °C ( $\Delta H_{vap}$ at 298.15; $kJ.mol^{-1}$ ), calculado pela Eq. [21].	147
Tabela 7	Moléculas, número CAS (CAS #), volume molar ( $m^3.mol^{-1}$ ), parâmetros de solubilidade DiPEVa (este estudo, $MPa^{1/2}$ ), tensão superficial parcial estimada ( $mN.m^{-1}$ ) calculada neste estudo a partir do método adaptado de Good-Girifalco. Os parâmetros de tensão superficial foram calculados a partir de cada estudo referenciado: Good& Elbing, Apostoluk & Drzymała's e Demond & Lindner, no caso das medições da tensão interfacial da água e colegas de Fowkes para a estimativa da tensão interfacial do esqualeno.	151
Tabela 8	Solventes orgânicos, volume molar (V) e parâmetros de solubilidade de Hansen ( $\delta_D$ , $\delta_P$ , $\delta_H$ ) retirado do manual de parâmetros de solubilidade de Hansen [3]. A tensão superficial experimental foi retirada do estudo de Jasper [46]. Os parâmetros DiPEVa são retirados de estudos anteriores ou calculados para o presente estudo usando o método descrito [19].	158
Tabela 9	Os fatores de dispersibilidade ( $D_i = 0, 1$ ), dispersíveis ou não, tensão superficial a 25 °C ( $mN.m^{-1}$ ), momento dipolar ( $\mu$ ), constante dielétrica experimental ( $\epsilon_r$ ), razão do número de coordenação ( $Z_S.Z^{-1}$ ) calculado a partir da Eq. [7], produto momento-volume dipolar ( $\mu.V^{-1}$ ) e constante dielétrica ao quadrado, ajustado pela razão entre o número de coordenação e o produto volume ao quadrado ( $\epsilon_r^{1/2}/(Z_S.Z^{-1}.V^{1/2})$ ).	160
Tabela 10	Esfera de dispersibilidade* de Hansen, raio de interação ( $R_0$ ), DataFit e outliers (%) determinados pelo algoritmo genético para os métodos HSP e DiPEVa.	162
Tabela 11	Avaliação da dissolução de vários polímeros presentes em “Parâmetros de solubilidade de Hansen: um manual do usuário” em 86 solventes [3]. A avaliação da esfera de solubilidade e os parâmetros de ajuste dos solventes com a esfera foram realizados com o algoritmo evolutivo descrito anteriormente [4]. Centro da esfera, em parâmetros de solubilidade ( $MPa^{1/2}$ ), raio de interação da esfera ( $R_0$ ), valor DataFit e porcentagem de outliers (%).	163

## Lista de Equações:

Equação 1-2	19
Equação 3-5	20-21
Equação 6	22
Equação 7-10	23
Equação 11	30
Equação 12	31
Equação 13 -15	32
Equação 16	33
Equação 17	38
Equação 18a,18b, 19	39
Equação 20	40
Equação 21	42
Equação 22-23	43
Equação 24	48
Equação 25-27	49
Equação 28-29	50
Equação 30-31	51
Equação 32-33	50
Equação 34, 37	68

### Símbolos, unidades e temperatura padrão:

As unidades dos valores HSP e do raio de interação da esfera de solubilidade são como  $(\text{Joules} \cdot \text{cm}^{-3})^{1/2}$  que são iguais a  $\text{MPa}^{1/2}$ .  $\delta_T$  é o símbolo de parâmetro de solubilidade ( $\text{MPa}^{1/2}$ ). A derivação da unidade em termos matemáticos é o seguinte:

$$\delta_T = \left( \frac{\Delta H_{vap}}{V} \right)^{1/2} = \left( \frac{\frac{j}{\text{mol}}}{\frac{\text{mol}}{\text{m}^3}} \right)^{1/2} = \frac{j^{1/2}}{\text{m}^{3/2}} = \frac{\left( \frac{\text{J}}{\text{mol}} \right)^{1/2}}{10^3} = \text{MPa}^{1/2} \quad [2]$$

Onde  $\sigma_L$  = tensão superficial da fase líquida, medida em  $25^\circ\text{C}$  ( $\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$ ),  $V$  = volume molar ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ ),  $N_A$  = número de Avogadro ( $6,02 \times 10^{23}$ ),  $Z_S$  e  $Z$  são os números de coordenação da superfície e do volume para as moléculas do líquido e  $\Delta H_{vap}$  = entalpia de vaporização em  $25^\circ\text{C}$  ( $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ ).

A temperatura padrão para os valores HSP citados é de  $25^\circ\text{C}$ .

$$\frac{Z_S}{Z} = \left( \frac{\sigma_L V^{2/3} N_A^{1/3}}{\Delta H_{vap}} \right) \quad [7]$$

Onde  $\sigma_L$  = tensão superficial da fase líquida, medida em  $25^\circ\text{C}$  ( $\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$ ),  $V$  = volume molar ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ ),  $N_A$  = número de Avogadro ( $6,02 \times 10^{23}$ ),  $Z_S$  e  $Z$  são os números de coordenação da superfície e do volume para as moléculas do líquido e  $\Delta H_{vap}$  = entalpia de vaporização em  $25^\circ\text{C}$  ( $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ ).

As unidades da Eq. [7], ver adiante, são as seguintes:

$$\frac{Z_S}{Z} = \left( \frac{\sigma_L V^{2/3} N_A^{1/3}}{\Delta H_{vap}} \right) = (\text{mN} \cdot \text{m}^{-1}) * (\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1})^{2/3} * (\text{mol} \cdot \text{kJ}^{-1}) = 10^{-6} \text{mol}^{1/3} \quad [7]$$

Nome	Símbolo	Unidade SI	Definição
Constante de Avogadro	L, N <sub>A</sub>	<i>mol</i> <sup>-1</sup>	
Massa molar	<i>M</i>	<i>kg·mol</i> <sup>-1</sup>	<i>M</i> <sub>B</sub> = <i>m</i> / <i>n</i> <sub>B</sub>
Volume molar	<i>V</i> , <i>V<sub>m</sub></i>	<i>m</i> <sup>3</sup> · <i>mol</i> <sup>-1</sup>	<i>V<sub>m,B</sub></i> = <i>V</i> / <i>n</i> <sub>B</sub>
Densidade (massa)	<i>ρ</i> , <i>γ</i>	<i>kg·m</i> <sup>-3</sup>	<i>ρ</i> = <i>m</i> <sub>B</sub> / <i>V</i>
Quantidade (de substância)	<i>n</i>	<i>mol</i>	<i>n</i> <sub>B</sub> = <i>N</i> <sub>B</sub> / <i>L</i>
Massa (molecular por unidade de fórmula)	<i>m</i> , <i>m<sub>f</sub></i>	<i>kg</i>	
Refração molar	<i>R</i> , <i>R<sub>m</sub></i>	<i>m</i> <sup>3</sup> · <i>mol</i> <sup>-1</sup>	<i>R<sub>m</sub></i> = (( <i>n</i> <sub>D</sub> <sup>2</sup> - 1)/( <i>n</i> <sub>D</sub> <sup>2</sup> + 2)) * <i>V<sub>m</sub></i>
Refração específica	<i>r<sub>D</sub></i>		<i>R<sub>D</sub></i> = (( <i>n</i> <sub>D</sub> <sup>2</sup> - 1)/( <i>n</i> <sub>D</sub> <sup>2</sup> + 2)) * (1/ <i>ρ</i> )
Parâmetros de solubilidade de Hansen	<i>δ<sub>t</sub></i>	<i>MPa</i> <sup>1/2</sup>	
Índice de refração a 20 °c	<i>n<sub>D</sub></i>		
Momento do dipolo	<i>μ</i>	<i>D</i>	
Constante dielétrica	<i>ε</i>		
Tensão superficial	<i>mN·m</i> <sup>-1</sup>		
Energia ou entalpia de vaporização a 25 °c ( <i>ΔH<sub>vap</sub></i> )	<i>kJ·mol</i> <sup>-1</sup>		
Temperaturas crítica	<i>K</i>		
Temperaturas de ebulição	<i>K</i>		

# SUMÁRIO

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO GERAL.....	16
1.1. Definição e uso de parâmetros de solubilidade .....	19
1.2. Parâmetro de solubilidade como medida de semelhança entre moléculas líquidas	21
1.3. Introdução do parâmetro de tensão superficial no conceito dos parâmetros de solubilidade.....	23
1.4. Correlacionando parâmetros de solubilidade e tensão superficial.....	24
1.5. Histórico .....	27
1.6. OBJETIVOS .....	28
CAPÍTULO 2. Obtenção de parâmetros de solubilidade ajustados à tensão superficial, DiPEVa.....	30
2.1. INTRODUÇÃO DO CAPÍTULO 2. ....	30
2.1.1. Ajuste de parâmetros de solubilidade à tensão superficial.....	30
2.1.2. O componente dispersivo dos parâmetros de superfície e solubilidade.....	33
2.2. EXPERIMENTAL.....	34
2.3. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	37
2.3.1. Fórmula de ajuste dos 3DSP à tensão superficial .....	40
2.4. CONCLUSÃO .....	48
CAPÍTULO 3. Tensões superficiais parciais de líquidos obtidas por uma abordagem de Good-Girifalco adaptada usando tensões superficiais individuais e interfaciais e parâmetros de solubilidade do DiPEVa .....	49
3.1. INTRODUÇÃO DO CAPÍTULO 3 .....	49
3.1.1 Método Good-Girifalco adaptado .....	51
3.2. EXPERIMENTAL.....	53
3.3. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	56
3.4. CONCLUSÃO .....	68
3.5. APÊNDICE DO CAPÍTULO 3 .....	69
3.5.1. Entalpia de mistura ( $\Delta H$ ).....	69



3.5.2. Parâmetros de solubilidade tridimensional ajustados para tensão superficial.....	70
CAPÍTULO 4. Determinação dos parâmetros de solubilidade da dispersão de nanopartículas de carbono usando o clássico Hansen e o novo método DiPEVa .....	71
4.1. INTRODUÇÃO DO CAPÍTULO 4 .....	71
4.2. EXPERIMENTAL.....	74
4.2.1. Materiais .....	74
4.2.2. Avaliação da dispersão das nanopartículas de carbono .....	76
4.2.3 Otimização por algoritmo genético.....	77
4.3. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	78
4.4. CONCLUSÃO.....	92
CAPÍTULO 5. CONCLUSÃO GERAL DA TESE .....	93
5.1 CONCLUSÕES .....	93
CAPÍTULO 6. SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS .....	95
CAPÍTULO 7. REFERÊNCIAS .....	96
CAPÍTULO 8. MATERIAL SUPLEMENTAR.....	105
8.1. ANEXO 1 .....	105
CAPÍTULO 2. DiPEVa, parâmetros de solubilidade ajustados à tensão superficial. ....	105
8.1.1. TABELA 1.....	105
8.1.2. TABELA 2.....	116
8.1.3. TABELA 3.....	133
8.2. ANEXO 2 .....	143
CAPÍTULO 3. Tensões superficiais parciais de líquidos obtidas por uma abordagem adaptada de Good-Girifalco a partir de tensões interfaciais e parâmetros de solubilidade do DiPEVa.....	143
8.2.1. TABELA 4.....	143
8.2.2. TABELA 5.....	146
8.2.3. TABELA 6.....	148
8.2.4. TABELA 7.....	152
8.3. ANEXO 3 .....	159
CAPÍTULO 4. Determinação dos parâmetros de solubilidade da dispersão de nanopartículas de carbono usando o clássico Hansen e o novo método DiPEVa. ....	159
8.3.1. TABELA 8.....	159
8.3.2. TABELA 9.....	161
8.3.3. TABELA 10.....	163

8.3.4. TABELA 11..... 164

# CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO GERAL

## 1.1. Definição e uso de parâmetros de solubilidade

A formulação de soluções químicas é uma etapa básica e fundamental para a indústria química e quaisquer outras indústrias que envolvam processamento químico de materiais. Como são várias as propriedades físico-químicas envolvidas (viscosidade, polaridade, tensão superficial, densidade...), a seleção de um conjunto de solventes (ou combinações de solventes) capaz de solubilizar o(s) soluto(s) de interesse representa um enorme passo rumo à definição da solução ideal.

Entre os modelos de solubilidade ou de miscibilidade envolvendo substâncias químicas, destaca-se o modelo de parâmetros de solubilidade [1]–[5]. Os parâmetros de solubilidade da Hildebrand são valores numéricos atribuídos a substâncias e representam sua energia de coesão, Eq. [1] [1]. O primeiro parâmetro de solubilidade desenvolvido foi o modelo de Hildebrand, o qual é calculado a partir de energia ou entalpia de vaporização e do volume molar. Os parâmetros de solubilidade totais ( $\delta_T$ ), ou de Hildebrand, são aplicáveis às moléculas que compõem soluções regulares, o que implica em sistemas estritamente não polares. Como este não é o caso da maioria dos sistemas reais, pesquisadores subsequentemente tentaram ampliar a ideia original da Hildebrand, dividindo o parâmetro de solubilidade da Hildebrand em dois ou mais componentes. Blanks & Prausnitz (1964) propuseram a divisão da energia coesiva em dois componentes: um devido à interação de dispersão ( $\delta_D$ ) e o outro devido a todos os outros tipos de forças ( $\delta_a$ ) [6].

O modelo de parâmetro de solubilidade foi, posteriormente, estendido para um modelo tridimensional que é mais completo e se adaptou melhor à prática química. Esse modelo é denominado de parâmetros de solubilidade de Hansen (HSP). Os HSP tornaram-se o modelo padrão para avaliação compatibilidade química, ou energia de mistura de líquidos [3], [4], [7].

Esse modelo de HSP tem sido usado muito na indústria há mais de 50 anos, sendo amplamente utilizado para a avaliação da compatibilidade entre tintas, dispersões minerais e outras preparações de óleos e polímeros. No entanto, há poucas décadas estabeleceu-se também como o modelo termodinâmico padrão na Academia [3], [4].

Os parâmetros de solubilidade de Hansen são constantes numéricas ( $\delta_D$ ,  $\delta_P$ ,  $\delta_H$ ) associadas aos diferentes tipos de energia que forçam a coesão intermolecular existente entre as moléculas de uma substância. Eles representam dispersão não polar ou forças induzidas por dipolo ( $\delta_D$ ), forças de dipolo polar ou permanente ( $\delta_P$ ) e ligações de hidrogênio ( $\delta_H$ ). Qualquer substância ou material molecular pode ser representado por um ponto ( $x, y, z$ ) = ( $\delta_D, \delta_P, \delta_H$ ) em um espaço tridimensional, cujos eixos são os HSPs ortogonais, denominados de “espaço de Hansen”. Um soluto é representado dentro da abordagem de Hansen, não apenas por seus HSPs, mas também por uma raio de interação ( $R_0$ ) definindo assim uma "esfera de solubilidade", dentro da qual devem ser incluídas as substâncias consideradas "bons solventes" e as substâncias consideradas "não solventes" devem estar fora da esfera [4].

Todos os parâmetros de solubilidade de Hansen ( $\delta_D$ ,  $\delta_P$ ,  $\delta_H$ ) estão relacionados às propriedades físico-químicas através de relações estabelecidas. Os componentes dispersivos e polares ( $\delta_D$  e  $\delta_P$ ) dos HSPs são normalmente calculados a partir do índice de refração ( $n_D$ ), volume molar ( $V$ ), momento dipolar ( $\mu$ ) e constante dielétrica ( $\epsilon$ ) ou usando a equação de Böttcher [3], [8]–[10].

O termo “parâmetro de solubilidade”, conforme descrito anteriormente foi usado pela primeira vez por Hildebrand em 1949 [5]. O parâmetro de solubilidade de Hildebrand ( $\delta_T$ ) é definido como a raiz quadrada da densidade de energia coesiva total ( $CED \equiv \frac{E}{V} \equiv \frac{\text{Energia de vaporização}}{\text{Volume molar}}$ ) [1], [5]:

$$\delta_T = \sqrt{C \cdot E \cdot D} \quad [1]$$

O parâmetro de solubilidade de Hildebrand corrigido, Eq. [2], é definido abaixo [11]:

$$\delta_T = \left( \frac{\Delta H_{vap} - RT}{V_m} \right)^{1/2} \quad [2]$$

Onde  $\delta_T$  = é o parâmetro de solubilidade de Hildebrand ( $MPa^{1/2}$ ),  $\Delta H_{vap}$  = entalpia de vaporização aos 25 °C ( $J.mol^{-1}$ ),  $R$  = constante de gás universal ( $8.31 \times J.mol^{-1}.K^{-1}$ ),  $T$  = temperatura absoluta (298 K) e  $V_m$  = volume molar ( $cm^3.mol^{-1}$ ).

O parâmetro de solubilidade é uma grandeza termodinâmica relacionada à energia de coesão em líquidos. Com os dados de entalpia de vaporização indisponíveis, existem alguns métodos mais ou menos empíricos, para determinação do parâmetro de solubilidade. O parâmetro de solubilidade total ( $\delta_T$ ) foi dividido da seguinte forma, a partir da soma do quadrado dos parâmetros parciais [2]:

$$\delta_D^2 + \delta_P^2 + \delta_H^2 = \delta_T^2 \quad [3]$$

## 1.2. Parâmetro de solubilidade como medida de semelhança entre moléculas líquidas

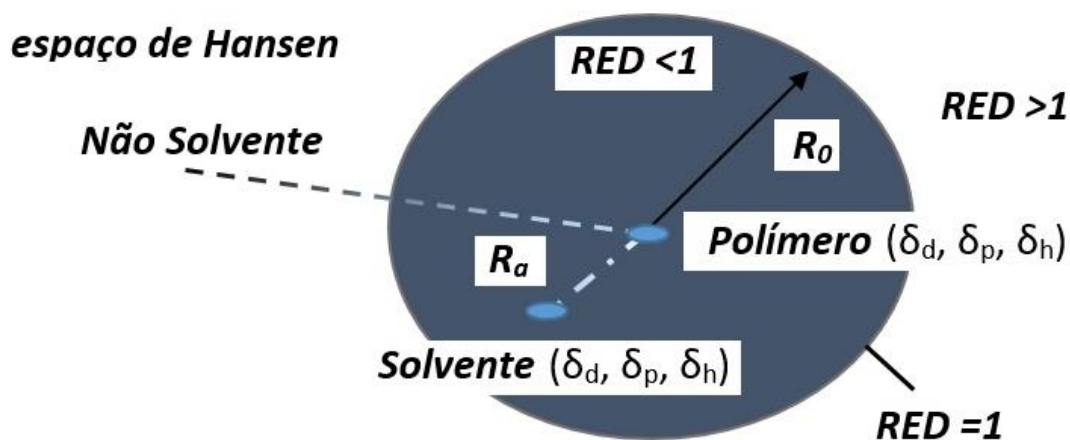
O parâmetro de solubilidade pode ser usado para comparar a semelhança entre duas moléculas. Para isso é feito uma medida geométrica no espaço tridimensional de Hansen (espaço 3D de Hansen). Um parâmetro útil para comparar duas substâncias é a distância relativa do parâmetro de solubilidade ( $R_a$ ), com base em seus respectivos componentes HSP's [2]–[4]:

$$R_a = \sqrt{4(\delta_{D2} - \delta_{D1})^2 + (\delta_{P2} - \delta_{P1})^2 + (\delta_{H2} - \delta_{H1})^2} \quad [4]$$

Quanto menor a distância  $R_a$ , mais parecidas serão duas moléculas, de acordo com a regra que “semelhante dissolve o semelhante” ou, nas palavras de Paracelso: “*similia similibus solvuntur*”. Esse princípio continua verdadeiro desde a Grécia Antiga até hoje e é, cada vez, mais usado na indústria para desenvolver produtos de alta tecnologia e desempenho. Portanto com esses quatro parâmetros,  $\delta_D$ ,  $\delta_P$ ,  $\delta_H$  e  $R_0$ , pode-se classificar tanto os solutos quanto os solventes num espaço tridimensional. A partir da distância do parâmetro de solubilidade ( $R_a$ ), pode-se calcular também diferença relativa de energia (RED) conforme a fórmula a seguir:

$$RED = R_a / R_0 \quad [5]$$

Quando a diferença relativa de energia (RED) for menor que 1, o solvente dissolverá o polímero, enquanto for maior que 1, não dissolverá e será considerado como um não solvente (Figura 1) [3], [4], [7]. Para um conjunto de solventes ( $n > 30$ ) cujas coordenadas não devam estar muito próximas um do outro e de um determinado polímero, o modelo HSP pode ser usado para determinar uma esfera com raio de interação  $R_0$  (Figura 1) [12].



**Figura 1.** Exemplo de esfera de solubilidade de um polímero, solvente e não solvente numa projeção 2D da esfera de Hansen [12].

O número de solventes ( $n > 30$ ) de teste é arbitrário, mas quanto maior o valor, e mais diferentes sejam os solventes, em termos de diferença de polaridade, ligação de hidrogênio, ramificação ou ciclização na molécula, mais preciso será o cálculo da esfera de solubilidade e, conseqüentemente, o valor da distância do parâmetro de solubilidade ( $R_a$ ) e da diferença relativa de energia (RED).

Essa mesma analogia de dissolução de polímero se aplica também para dispersão de cargas inorgânicas, ou para intercalação de moléculas orgânicas em argilas e alumino silicatos, por exemplo [13]. Os cálculos são basicamente os mesmos e podem-se determinar esferas de dispersibilidade e prever a capacidade de dispersão da carga inorgânica numa

gama variada de solventes. As aplicações acadêmicas dessa metodologia são recentes. Os parâmetros de solubilidade de Hansen, associados à tensão superficial ou não, são cada vez mais propostos na Academia como elementos importantes para a dispersão de nanomateriais como o grafeno e seus derivados, nanotubos de carbono, pontos quânticos e outras espécies de NPs [13]–[21].

### **1.3. Introdução do parâmetro de tensão superficial no conceito dos parâmetros de solubilidade**

Stefan em 1886 demonstrou que havia uma relação entre a energia necessária para evaporar uma molécula do *bulk* de um líquido e aquela necessária para trazer uma molécula do *bulk* de um líquido para a superfície. Assim havia uma correlação entre a energia de evaporação e a tensão superficial. Posteriormente, Vavruch em 1985 propôs que a essa relação correspondia à relação entre energia de coesão de uma substância e a sua tensão superficial. Termodinamicamente, ele provou que a regra de Stefan corresponde a relação entre a superfície molar total e a entalpia de vaporização molar interna total de líquidos puros. A partir desse conceito, mostrou que os parâmetros de solubilidade, que estão relacionados à energia de coesão de líquidos, obedecem a regra de Stefan [22]. Simplificadamente, a regra de Stefan pode ser escrita assim [1]:

$$\sigma_L = 0,13\Delta H_{vap}V^{-2/3} \quad [6]$$

Posteriormente, com base em uma regressão computacional de um grande banco de dados, Beerbower (1971) mostrou que a relação entre o parâmetro de solubilidade de Hildebrand, tensão superficial e o volume molar se aplica tanto para moléculas orgânicas quanto para metais fundidos [23]. Mais recentemente, Strechan et al. (2006) introduziram uma relação entre a razão dos números de coordenação, tensão superficial, volume molar e entalpia de vaporização de moléculas orgânicas, usando a regra de Stefan como base físico-química [24]. A razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_S}{Z}$ ) de líquidos pode ser calculado a partir da seguinte expressão ou equação [24]:

$$\frac{Z_s}{Z} = \left( \frac{\sigma_L V^{2/3} N_A^{1/3}}{\Delta H_{vap}} \right) \quad [7]$$

Onde  $\sigma_L$  = tensão superficial da fase líquida, medida em 25 °C ( $J.m^{-2}$ ),  $V$ = volume molar ( $cm^3.mol^{-1}$ ),  $N_A$  = número de Avogadro ( $6,02 \times 10^{23}$ ),  $Z_s$  e  $Z$  são os números de coordenação da superfície e do volume para as moléculas do líquido e  $\Delta H_{vap}$  = entalpia de vaporização em 25 °C ( $J.mol^{-1}$ ).

#### 1.4. Correlacionando parâmetros de solubilidade e tensão superficial

Em artigos anteriores, mostrou-se que a tensão superficial ( $\sigma_L$ ) pode ser predita através da seguinte equação [25]:

$$\sigma_L = \frac{Z_s}{Z} \delta_T^2 V^{1/3} \quad [8]$$

Ou através da seguinte, adaptando a regra de Stefan, Eq. [6], e aproveitando o conceito de razão de número de coordenação:

$$\sigma_L = \frac{Z_s}{Z} \Delta H_{vap} V^{-2/3} \quad [6]$$

Dividindo a Eq. [8] pela Eq. [6], obtém-se:

$$\frac{Z_s}{Z} \Delta H_{vap} V^{-2/3} = \frac{Z_s}{Z} \delta_T^2 V^{1/3} \quad [9]$$

E rearranjando alguns termos, chega-se a:

$$\Delta H_{vap} V^{-2/3} = \delta_T^2 V^{1/3} \quad [10]$$

E isolando a densidade de energia coesiva ( $\delta_T^2$ ), ignorando a constante RT (=2,477 kJ.mol<sup>-1</sup>), e elevando ao quadrado ambos os lados da equação, chega-se ao conceito do parâmetro de solubilidade de Hildebrand, Eq. [2]:



$$\delta_T = \left( \frac{\Delta H_{vap}}{V} \right)^{1/2} \quad [2]$$

A partir desses estudos pioneiros, os autores aplicaram pioneiramente a equação de Strechan para o conceito de parâmetro de solubilidade. Os autores apresentaram uma nova relação semiempírica baseada na correlação entre as propriedades termodinâmicas de superfície e volume de metais fundidos (=“*liquid metals*”) e o parâmetro de solubilidade de Hildebrand. A seguir, a mesma equação de Strechan foi usada para líquidos orgânicos e novas correlações entre a tensão superficial e parâmetros de solubilidade foram desenvolvidas [25]–[27].

A partir dessa base teórica, os autores demonstraram diversas correlações entre os parâmetros de solubilidade e a tensão superficial usando esses conceitos para montar um banco de dados, incluindo esses parâmetros físico-químicos e os 3DSP, que possa ser utilizada por outros pesquisadores e tecnólogo e direcionar suas formulações. O Capítulo 2 da presente tese, aplica essas correlações para montar o banco de dados e apresenta o método DiPEVa, o qual originalmente correlaciona os 3 componentes do parâmetro de solubilidade com a tensão superficial. Para isso foi criado o número DiPEVa (DiP#).

O modelo HSP é privado, de propriedade do idealizador Charles Hansen, e é mantido como banco de dados proprietário. No entanto, como é muito difundido em publicações, então obtém-se os parâmetros para as moléculas comuns na literatura aberta, o que motiva seu uso generalizado.

Devido ao interesse do doutorando em nanotecnologia, com particular interesse em emulsões, encapsulação de materiais e nanodispersão, os autores da presente tese, estudaram os HSP e, em particular, sua relação com a tensão superficial, um parâmetro físico-químico de grande importância não só em encapsulação, mas também emulsões, catálise, nanodispersão etc. [13], [14], [16], [17], [20], [21], [28]–[30] [25]. Os parâmetros de solubilidade de HSP obtiveram grande êxito na predição de mistura de líquidos, solubilização de sólidos, dispersão de materiais inorgânicos, mas sua relação com a tensão superficial não estava bem elaborada [3], [7], [11].

Como será descrito nos capítulos seguintes, a partir de fórmulas físico-químicas, usando a álgebra e modelos semiempíricos, será demonstrada a relação entre os parâmetros

de solubilidade tridimensionais (3DSP) e a tensão superficial. Como será apresentado, o modelo de Hansen não abordou a questão da tensão superficial diretamente, como proposto nesse trabalho, e as relações descritas por Koenhen & Smolders, por exemplo, serão aperfeiçoadas [8], [11].

Como pode ser verificado nas Eqs. [8-10], a correlação entre os parâmetros de solubilidade e a tensão superficial é feita apenas a partir do parâmetro de solubilidade Hildebrand ( $\delta_T$ ), ou parâmetro de solubilidade total. Na presente tese, a teoria será avançada a incorporação de uma relação tridimensional, usando um novo termo chamado número de DiPEVa, que permitirá um melhor ajuste entre os dois parâmetros.

No Capítulo 3, obteve-se a divisão da tensão superficial em componentes dispersivos e polares, usando-se uma técnica adaptada de Good-Girifalco com o método DiPEVa. Esse é um método empírico, de fácil aplicação, que permite a classificação das moléculas nesses dois tipos de tensão superficial [31]–[35]. A partir dos tratamentos de Fowkes e Good-Girifalco para avaliação de tensões interfaciais e superficiais, Bulou e colaboradores propuseram uma nova abordagem de cálculo da tensão interfacial a partir da equação de Good-Girifalco. Nessa abordagem, o parâmetro de interação  $\phi$  é expresso em termos de interações moleculares usando o conceito de parâmetro de solubilidade tridimensional (3DSP) [35]. O ponto forte do método é a precisão e fácil aplicação, o qual é baseado em dados dos parâmetros de solubilidade de Hansen (HSP) que podem ser facilmente encontrados na literatura [3].

No Capítulo 3, o método adaptado de Good-Girifalco é aplicado usando o método DiPEVa e comparado com o original, cujos resultados foram equivalentes [35]. Foi observado que o método DiPEVa é bastante regular na divisão dos componentes do parâmetro de solubilidade e sua correlação com as tensões superficiais parciais. Seus resultados têm aplicações para cálculo de adesão entre moléculas, espalhamento em superfície e encapsulação de moléculas.

No Capítulo 4, será apresentada uma aplicação prática do uso da teoria desenvolvida. Será feita a determinação dos parâmetros de solubilidade da dispersão de 5 nanopartículas de carbono usando o método clássico Hansen e o novo DiPEVa. Serão apresentados os parâmetros de solubilidade tridimensionais de polímeros, propondo-se a compatibilidade

entre as NPs de carbono estudadas e polímeros, visando desenvolvimento de nanocompósitos e nanocompósitos híbridos.

## 1.5. Histórico

A seguir é apresentado o marco temporal da evolução das teorias em discussão nessa tese:

1886	1949	1967	1967	1971	1975
Regra de Stefan	Parâmetro de solubilidade. Hildebrand & Scott	Hansen solubility parameters (HSP)	Skaarup-Beerbower formula para prever $\sigma_L$	Equação de Beerbower para prever $\sigma_L$	Koehen & Smolders, relação entre $\Delta H_{vap}$ e $\sigma_L$
1984	1985	2006	2017	2018	2021
Bulou et al. Adaptação do método Good-Girifalco para HSP	Elucidação termodinâmica da regra de Stefan, Vavruch	Strechan et al. Razão do n° de coordenação ( $Z_s.Z^{-1}$ )	50º aniversário HSP	Aplicação de $Z_s.Z^{-1}$ no contexto dos SP Pereira & Vebber	Método DiPEVa, Pereira Et al.

A partir da descoberta dos parâmetros de solubilidade por Hildebrand e sua publicação, junto com Scott, em 1949, o conceito foi evoluindo. Esses autores propuseram, no seu livro, uma relação entre a densidade de energia coesiva (CED, que corresponde ao parâmetro de solubilidade ao quadrado) com a tensão superficial, baseada na regra de Stefan, de 1886. Em 1967, Hansen propôs os parâmetros de solubilidade tridimensionais, em que dividia o parâmetro total de Hildebrand,  $\delta_T$ , em 3 parâmetros: dispersível ( $\delta_D$ ), polar ( $\delta_P$ ) e ligação de hidrogênio ( $\delta_H$ )- e sugeriu trocar a unidade de medida de *calorias por centímetro cúbico*, unidade usada por Hildebrand, para *megapascals*.

Em paralelo a essa modificação no conceito, novas relações empíricas foram propostas por Skaarup, Beerbower e Hansen, entre 1967 e 1971 na relação entre o parâmetro de solubilidade e a tensão superficial. Mas todas usavam o parâmetro de solubilidade total (dito de Hildebrand,  $\delta_T$ ) e tensão superficial, fazendo basicamente relações empíricas mais completas devido ao uso pioneiro de computadores. Foram Skaarup & Beerbower que

propuseram em 1967, pela primeira vez, fazer-se a estimativa da tensão superficial a partir dos parâmetros tridimensionais (HSP). Porém, essa fórmula não chegou a ser utilizada devido à baixa eficácia.

Em 1975, Koenhen & Smolders, destrincharam a relação do parâmetro de solubilidade e a tensão superficial, propondo ineditamente a estimativa da divisão da tensão superficial nos seus dois componentes, dispersivo ( $\sigma_D$ ) e polar ( $\sigma_P$ ). Em outra abordagem, Bulou e colaboradores, em 1984, propuseram a estimativa das componentes da tensão superficial à partir dos HSP (parâmetros tridimensionais de Hansen). Nesse período, a regra de Stefan, empírica, foi elucidada do ponto de vista da termodinâmica, dando um caráter científico formal por Vavruch.

Em 2006, Strechan e colaboradores propuseram a razão do número de coordenação ( $Z_s.Z^{-1}$ ), que ajustava a correlação a entalpia de vaporização, volume molar e tensão superficial. Em 2018, Pereira & Vebber, ineditamente, aplicaram o conceito da razão do número de coordenação para os parâmetros de solubilidade. Em 2021, novamente, pela primeira vez, foi proposta uma fórmula para ajustar os parâmetros de solubilidade tridimensionais à tensão superficial, chamada DiPEVa, que será descrita nessa tese. Em 2022, essa técnica foi usada, usando conceitos de Koenhen & Smolders e de Bulou e colaboradores, na divisão das parciais da tensão superficial: dispersiva ( $\sigma_D$ ) e polar ( $\sigma_P$ ).

## **1.6. OBJETIVOS**

### **Objetivo geral**

➤ Desenvolver e validar uma metodologia denominada DiPEVa, para obtenção de parâmetros de solubilidade tridimensionais (3DSP), compatíveis com os tradicionais HSP, mas ajustados para a tensão superficial, que sejam aplicados a líquidos e materiais sólidos solúveis ou dispersáveis.

### **Objetivos específicos**

➤ Publicar um banco de dados inicial com os valores 3DSP do método DiPEVa, ajustados à tensão superficial, com mais de 500 moléculas de vários tamanhos, formatos, polaridade e outras características distintas (capítulo 2).

➤ Demonstrar as relações entre os valores 3DSP do método DiPEVa com os parâmetros físico-químicos que lhe deram origem e comparar com os usados no HSP tradicional (volume molar, momento do dipolo, constante dielétrica), ressaltando semelhanças e diferenças (capítulo 3).

- Discriminar os valores 3DSP do método DiPEVa, ajustados à tensão superficial total ( $\sigma_T$ ), descritos nos objetivos anteriores, nos seus componentes parciais-dispersivos ( $\sigma_D$ ) e polares, ( $\sigma_p$ ), demonstrando o grau de correlação (capítulo 3).
- Determinar os 3DSP do método DiPEVa de nanopartículas carbônicas e de vários polímeros de potencial uso com essas nanopartículas, comparando com o método de Hansen (capítulo 4).
- Demonstrar a aplicação prática dos 3DSP do método DiPEVa no desenvolvimento de materiais compósitos e compósitos híbridos (capítulo 4).

## **CAPÍTULO 2. Obtenção de parâmetros de solubilidade ajustados à tensão superficial, DiPEVa**

### **2.1. INTRODUÇÃO DO CAPÍTULO 2.**

Após a introdução do conceito dos parâmetros de solubilidade de Hildebrand e de Hansen, nesse capítulo será apresentada a metodologia de obtenção parâmetros de solubilidade tridimensionais (3DSP) compatíveis com os tradicionais HSP, mas ajustados para a tensão superficial aplicados a líquidos e materiais sólidos. A metodologia, incluindo a derivação matemática e físico-química, será detalhada. Serão comparados os resultados com os parâmetros físico-químicos utilizados na derivação dos 3DSP.

#### **2.1.1. Ajuste de parâmetros de solubilidade à tensão superficial**

Os autores publicaram recentemente um novo método de parâmetro de solubilidade chamado DiPEVa, que significa valores de forças dispersivas, polares e eletrostáticas (**d**ispersive, **p**olar, and **e**lectrostatic forces **v**alues), ajustando-os à tensão superficial. O método é relevante para aplicações que dependem não apenas de fenômenos superficiais ou interfaciais, mas também de propriedades dielétricas, como processamento de micro-ondas [36], [37]. Como será mostrado, o método DiPEVa prevê com fidelidade essas propriedades e então espera-se que seja útil no desenvolvimento das aplicações citadas.

O método DiPEVa é um esquema de parâmetros de solubilidade tridimensional (3DSP) que se diferencia do HSP principalmente pelo componente de ligação de hidrogênio, calculado de modo à partir de metodologia distinta, que será explicitada e, portanto, rearranja os outros dois componentes para se ajustarem todos à tensão superficial [19]. Recentemente, tem aumentado o interesse por estudos nanotecnológicos que usam o parâmetro de tensão superficial para prever o comportamento de dispersão de líquidos, enquanto a metodologia do parâmetro de solubilidade é usada para avaliar a compatibilidade dessas misturas líquidas [13], [14], [16], [17], [20], [21], [28]–[30] [25]. Embora haja uma inter-relação entre esses dois parâmetros físico-químicos, parâmetros de solubilidade e tensão superficial, a maioria

dos estudos não os associa e, de fato, prefere analisá-los separadamente. Isso se devia à falta de um ajuste razoável entre ambos os parâmetros, o que iremos discutir nessa tese.

No presente estudo, a partir da proposta de novos parâmetros de solubilidade ajustados, a interação entre a tensão superficial e os parâmetros de solubilidade é analisada por meio de relações estabelecidas, como as desenvolvidas por Koenhen & Smolders ou pela equação de Beerbower [8], [23], [25], [27]. Novas relações entre esses parâmetros físico-químicos são apresentadas, incluindo uma que prevê o componente dispersivo da tensão superficial.

O advento de novas abordagens para relacionar os parâmetros de solubilidade tridimensional (3DSP) à tensão superficial pode ser vantajoso também para analisar processos que dependem fortemente da tensão superficial, comportamento de dispersões e emulsões, seleção de solventes e cossolventes e processos de encapsulação, entre outras aplicações [8], [38]–[40]. Os parâmetros de solubilidade ( $\delta_T$ ) e tensão superficial ( $\sigma_L$ ) dos sólidos não podem ser medidos diretamente, então os parâmetros de solubilidade do solvente são usados para predizê-los a partir da medição do ângulo de contato. Assim, há também uma demanda pela obtenção de equações confiáveis para serem utilizadas na previsão da tensão superficial de sólidos nestes casos [11]. Dessa forma, é importante notar que os dados 3DSP são gerados a partir de dados físico-químicos de moléculas líquidas, cujas informações também podem ser adaptadas para avaliar sólidos e materiais inorgânicos.

Uma das relações primárias entre os parâmetros de solubilidade e a tensão superficial é a seguinte relação, que compara os componentes dispersivos e polares dos parâmetros de solubilidade com a tensão superficial total do líquido, como segue [8]<sup>1</sup>:

$$\delta_D^2 + \delta_P^2 = 7,87 \left( \frac{\sigma_L}{V^{1/3}} \right)^{1/2} \quad [11]$$

onde  $\sigma_L$  = tensão superficial ( $mN.m^{-1}$ ),  $\delta_D$ ,  $\delta_P$  = parâmetros de solubilidade dispersivos e polares ( $MPa^{1/2}$ ),  $V$  = Volume Molecular ( $m^3.mol^{-1}$ ).

---

<sup>1</sup> Deve-se notar que a constante aplicada ao produto de volume de tensão superficial para a terceira potência é adaptada do original porque no estudo original de Koenhen & Smolders, os parâmetros de solubilidade foram representados em calorias por centímetro cúbico em vez de expressos em megapascals, que é a unidade utilizada no presente estudo. A constante também pode ser derivada da teoria, e é equivalente a  $7,87=2,806^2$ .

Nesta relação, o componente de ligação de hidrogênio do parâmetro de solubilidade ( $\delta_H$ ) não é considerado. De acordo com Koenhen & Smolders, a ausência de um componente de ligação de hidrogênio, provavelmente, se deveria ao fato de que as interações responsáveis pela energia interfacial líquido-vapor não envolveriam a quebra da ligação de hidrogênio [8]. Esse conceito será questionado a seguir, com uma nova abordagem proposta.

Em um estudo anterior, os autores da presente tese, incluíram a razão dos números de coordenação ( $\frac{Z}{Z_s}$ ), descrita por Strechan e colaboradores (2006), na equação de Beerbower, que foi derivada matematicamente da regra de Stefan [24], [27]. A adaptação da equação de Beerbower seria a seguinte [25], [27]:

$$\delta_T = 2,806 \left( \frac{Z}{Z_s} \frac{\sigma_L}{V^{1/3}} \right)^{1/2} \quad [12]$$

Onde ( $\frac{Z}{Z_s}$ ) é o inverso da razão dos números de coordenação,  $\delta_T$  é o parâmetro de solubilidade ( $MPa^{1/2}$ ) e 2,806 é derivado matematicamente da equação de Beerbower [27].

O número de coordenação de um sólido é definido como o número de átomos ligados a um átomo central. No estado líquido, o número de coordenação pode ser relacionado à teoria do estado sólido, porque sólidos e líquidos têm densidades e distâncias de separação intermoleculares comparáveis [41]–[43]. O número de coordenação é útil para fazer aproximações de primeira ordem do comportamento macroscópico de líquidos e prever propriedades de materiais [41], [44]. Em uma escala microscópica, o número de coordenação tem sido útil para estimar a contribuição para a função potencial efetiva do par intermolecular de líquidos apolares. Para líquidos simples, a ordem de curto alcance foi observada a partir das curvas de distribuição radial disponíveis, particularmente, para a primeira e segunda conchas de coordenação [41], [43].

O presente estudo propõe um método para ajustar os parâmetros de solubilidade à tensão superficial e descreve sua relação com os parâmetros físico-químicos, com base nas propostas de parâmetros de solubilidade de Hansen ou de Hoy [3], [45]. Esses novos 3DSP são chamados de DiPEVa que significam valores de forças dispersivas, polares e eletrostáticas.



### 2.1.2. O componente dispersivo dos parâmetros de superfície e solubilidade

Supondo que os termos da Eq. [12] podem ser divididos em componentes dispersivos ( $\delta_D$ ,  $\sigma_D$ ) e polares ( $\delta_a$ ,  $\sigma_P$ ), seguindo uma sugestão de Koenhen & Smolders, propomos estas novas relações [8]:

$$\delta_D + \delta_a = 2,806 \left[ \left( \frac{\sigma_D}{\frac{Z_s}{Z} \cdot V^{1/3}} \right)^{1/2} + \left( \frac{\sigma_P}{\frac{Z_s}{Z} \cdot V^{1/3}} \right)^{1/2} \right] \quad [13]$$

Para fins de diferenciação de notação, a letra grega delta refere-se ao parâmetro de solubilidade, enquanto sigma refere-se à tensão superficial. Com a divisão da equação Eq. [13] em dois componentes, novas relações são obtidas. A primeira relação é entre o componente de dispersão do parâmetro de solubilidade ( $\delta_D$ ) e o componente dispersivo da tensão superficial, como segue:<sup>2</sup>

$$\delta_D = 2,806 \left( \frac{\sigma_D}{\frac{Z_s}{Z} \cdot V^{1/3}} \right)^{1/2} \quad [14]$$

Para a avaliação do parâmetro polar, após testes empíricos, decidiu-se que seria mais adequado associar os parâmetros polares e ligações de hidrogênio em um parâmetro de associação ( $\delta_a$ ), segundo Blanks & Prausnitz [6], [11]:

$$\delta_a = (\delta_P^2 + \delta_H^2)^{1/2} \quad [15]$$

---

<sup>2</sup> Para permitir a distinção, optou-se por manter diferentes denominações para as componentes parciais da tensão superficial, utilizando-se sigma para os valores propostos neste estudo e gama para os valores empíricos da literatura.

Este parâmetro de solubilidade de associação está relacionado ao componente de tensão superficial polar, como segue [27]:

$$\delta_a = 2,806 \left( \frac{\sigma_p}{\frac{Z_s}{Z} \cdot V^{\frac{1}{3}}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad [16]$$

As Eqs. [14-16] foram definidas neste estudo como uma parte somativa do parâmetro de solubilidade de Hildebrand e da tensão superficial líquida mostrada na Eq. [13], onde o lado esquerdo da equação corresponde à divisão do parâmetro de solubilidade e o lado direito, entre parênteses, a divisão da tensão superficial. Ambos são divididos em componentes dispersivos e polares. Vale ressaltar que uma divisão equivalente foi proposta por Koenhen & Smolders, enquanto a inovação neste estudo foi a introdução da razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) e a utilização do parâmetro de solubilidade de associação ( $\delta_a$ ) ao invés de utilizar apenas o parâmetro de solubilidade polar [8]. Através desta abordagem, todos os 3DSP estão envolvidos no processo, não apenas dois deles, como na proposta de Koenhen.

## 2.2. EXPERIMENTAL

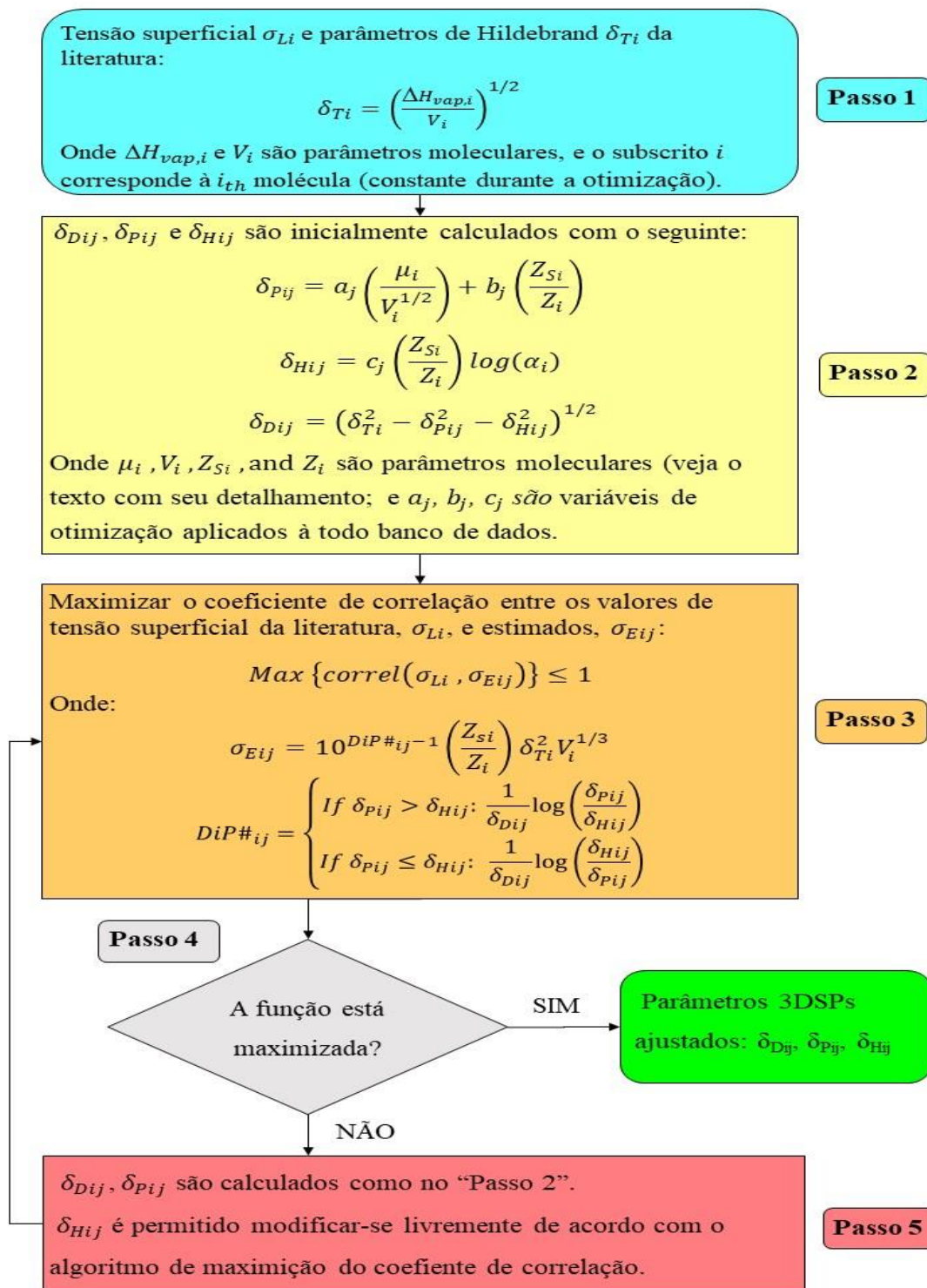
Para essa etapa, foi construído um banco de dados diversificado, reunindo os dados dos parâmetros de tensão superficial existentes nos estudos clássicos de Jasper, para os quais os parâmetros físico-químicos necessários para o cálculo do DiPEVa 3DSP (entalpia de vaporização, temperaturas críticas e de ebulição e momento do dipolo) estavam disponíveis [19], [46]. O banco de dados utilizado inclui moléculas lineares a ramificadas, próticas a aprólicas, cíclicas, aromáticas, moléculas pequenas e grandes, água e álcoois poli-hídricos.

Os parâmetros de solubilidade de Hansen e os parâmetros ajustados DiPEVa propostos neste estudo são comparados usando a relação apresentada na Eq. [1]. Os dados são apresentados junto com as tensões superficiais e demais relações na **Tabela 1** (VER MATERIAL SUPLEMENTAR- ANEXO 1).

Para gerar os 3DSP, calculou-se, primeiramente, o parâmetro de solubilidade polar ( $\delta_p$ ) a partir do produto de momento dipolar e volume quadrado ( $\mu \cdot V^{-1/2}$ ), ajustado pela razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ), como descrito nessa sessão a seguir, como mostrado na

Figura 3. O parâmetro de solubilidade de ligações de hidrogênio ( $\delta_H$ ) foi adaptado a partir do número de agregação ( $\alpha$ ) do método de Hoy, descrito na Eq. [22] e também houve um ajuste a partir da razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_S}{Z}$ ), como descrito. O componente dispersivo do parâmetro de solubilidade ( $\delta_D$ ) foi calculado algebricamente a partir da subtração do quadrado de cada componente do parâmetro de solubilidade, conforme a Eq. [3] e do parâmetro de Hildebrand ( $\delta_T$ ). O parâmetro de Hildebrand foi calculado a partir de dados da literatura usando a entalpia de vaporização, Eq. [2] e o volume molar [2]–[4], [7].

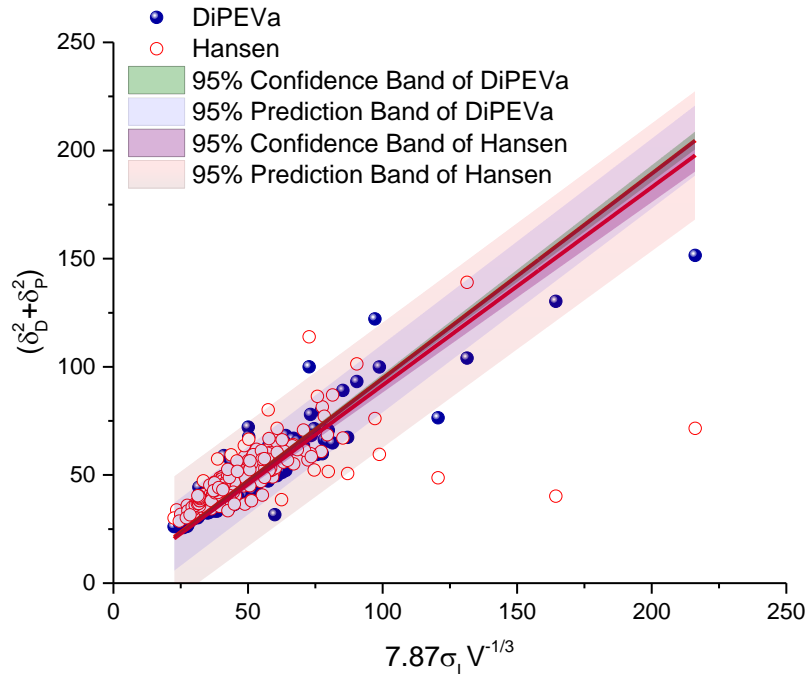
Por fim, um processo de otimização foi realizado na ferramenta de otimização integrada do Excel™ chamada Solver, que empregou o modelo não linear de gradiente reduzido generalizado (GRG) para ajustar os 3DSP à tensão superficial [47]. Buscou-se a maximização da função objetivo da correlação do coeficiente entre o número DiPEVa e a tensão superficial empírica, Eqs. [18-19], mantendo-se o parâmetro de solubilidade total ( $\delta_T$ ), ou parâmetro de Hildebrand, constante. O processo de otimização é detalhado na Figura 2 a seguir e, posteriormente, na seção de resultados e discussão:



**Figura 2.** Detalhamento do processo de otimização DiPEVa de ajuste dos 3DSP à tensão superficial.

### 2.3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

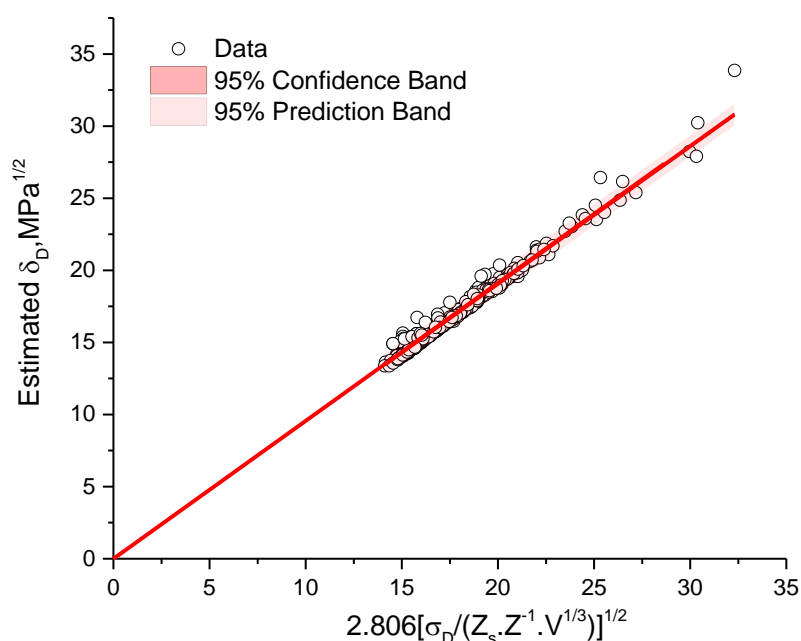
Na Figura 3, a tensão superficial total e os parâmetros de solubilidade foram correlacionados por meio da aplicação da Eq. [11], permitindo a comparação entre os dois diferentes modelos de parâmetros de solubilidade tridimensionais. Observa-se que os parâmetros de solubilidade ajustados do DiPEVa apresentam uma forte correlação entre a soma dos quadrados ( $\delta_D^2 + \delta_P^2$ ) e o produto de volume da tensão superficial ( $7,87\sigma_L V^{1/3}$ ), seguindo a proposta de Koenhen & Smolders. Em contraste, não se observa essa forte correlação usando os parâmetros de solubilidade de Hansen [8].



**Figura 3.** Correlação entre a soma dos quadrados de dois componentes do parâmetro de solubilidade ( $\delta_D^2 + \delta_P^2$ ) e o produto de volume da tensão superficial ( $7,87\sigma_L V^{1/3}$ ), Eq. [11]. Os círculos vermelhos não preenchidos representam os parâmetros de solubilidade de Hansen ( $(\delta_D^2 + \delta_P^2) = 7,20\sigma_L V^{-1/3}$ ,  $R^2=0,9148$ ), enquanto os círculos azuis preenchidos representam os DiPEVa ( $(\delta_D^2 + \delta_P^2) = 7,44\sigma_L V^{-1/3}$ ,  $R^2=0,9748$ ) parâmetros de solubilidade ajustados.

Apesar de 3 valores dos parâmetros de solubilidade de Hansen não seguirem a relação de Koenhen & Smolders, exceções que confirmam a regra, essas moléculas foram grandes discrepantes em relação à reta conforme mostrado na figura 3 [8]. Devido a esses casos de solventes desajustados (*outliers*), preferiu-se usar no restante do estudo apenas os parâmetros de solubilidade ajustados DiPEVa, ao invés de ambos os parâmetros, de acordo com a banda de confiança dos dados.

Nas figuras e cálculos a seguir, os 3DSP usados serão os parâmetros de solubilidade ajustados DiPEVa, incluídos nas tabelas de estudo, enquanto os parâmetros de solubilidade de Hansen correspondentemente serão incluídos na Tabela 1 para fins de comparação.



**Figura 4.** O componente dispersivo do parâmetro de solubilidade do DiPEVa ( $\delta_D$ , este estudo) é comparado com o mesmo parâmetro previsto a partir da tensão superficial dispersiva, da literatura, a razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) e volume molar (Eq. [14]).

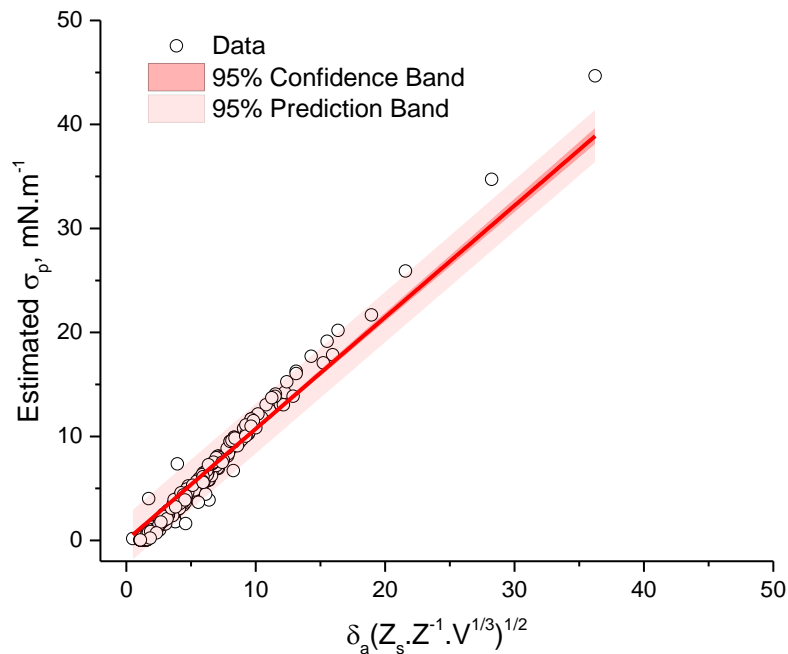
$$\delta_D = 2,675 \left[ \frac{\sigma_D}{Z_s \cdot Z^{-1} \cdot V^{\frac{1}{3}}} \right]^{1/2}, R^2 = 0,9995.$$

Um coeficiente de determinação muito forte foi obtido na Figura 4 ( $R^2=99,95\%$ ). Isso significa que a relação entre os parâmetros de solubilidade do DiPEVa e a tensão superficial

é muito forte para o componente dispersivo da tensão superficial ( $\sigma_D$ ). É importante notar que as tensões superficiais estimadas nas Figuras 4 e 5 são otimizadas através do uso das Eqs. [14-16]. Esta relação foi testada para assegurar que as relações fundamentais entre os parâmetros de solubilidade e tensão superficial são válidas após o processo de otimização, tanto a tensão superficial total quando as componentes parciais. Uma relação semelhante, comparando-se os parâmetros de solubilidade de associação DiPEVa ( $\delta_a$ ) e o mesmo parâmetro de solubilidade calculado a partir da tensão superficial, volume molar e razão dos números de coordenação, menos precisa conforme Figura 5.

Um rearranjo algébrico da Eq. [16] foi preferido para calcular o componente de tensão superficial polar na forma de:

$$\sigma_p \cong \left( \frac{\delta_a}{\frac{Z_s}{Z} \cdot V^{\frac{1}{3}}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad [17]$$



**Figura 5.** O componente de associação do parâmetro de solubilidade DiPEVa ( $\delta_a$ , este trabalho) é comparado com o parâmetro polar previsto a partir da tensão superficial polar, da literatura, a razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) e volume molar (Eqs. [15-16]).  $\sigma_p = 1,073\delta_a(Z_s \cdot Z^{-1} \cdot V^{\frac{1}{3}})^{1/2}$ ,  $R^2 = 0,9609$ ).

Um coeficiente de determinação muito forte foi obtido entre o parâmetro de solubilidade do DiPEVa e o parâmetro polar previsto a partir da tensão superficial polar, a razão dos números de coordenação e volume ( $R^2= 96,09$ ). Ressalta-se que houve alguns líquidos discrepantes (*outliers*), mas que podem ser minimizados a partir do processo de otimização, o que não é o objetivo deste estudo. Nesse aspecto, a Figura 4 foi mais uniforme, pois havia apenas alguns *outliers*.

### 2.3.1. Fórmula de ajuste dos 3DSP à tensão superficial

Como forma de integrar os 3DSP aos componentes de tensão superficial, os autores propõem a utilização de um número DiPEVa (DIP #), que é um número resultante de uma fórmula que correlaciona parâmetros de solubilidade parcial na seguinte expressão:

$$\delta_P > \delta_H \rightarrow DiP\# = (1 + (\log \delta_P / \delta_H) * \delta_D^{-1}) \quad [18a]$$

$$\delta_H \leq \delta_P \rightarrow DiP\# = (1 + (\log \delta_H / \delta_P) * \delta_D^{-1}) \quad [18b]$$

Por definição, o número DiPEVa é inversamente correlacionado com a tensão superficial.

$$DIP \# \approx \left( \frac{1}{\sigma_L} \right) \quad [19]$$

As equações [18-19] são usadas para ajustar os parâmetros de solubilidade parcial à tensão superficial total ( $\sigma_L$ ) usando um processo de otimização, como descrito na metodologia. Ambas as equações foram encontradas empiricamente.

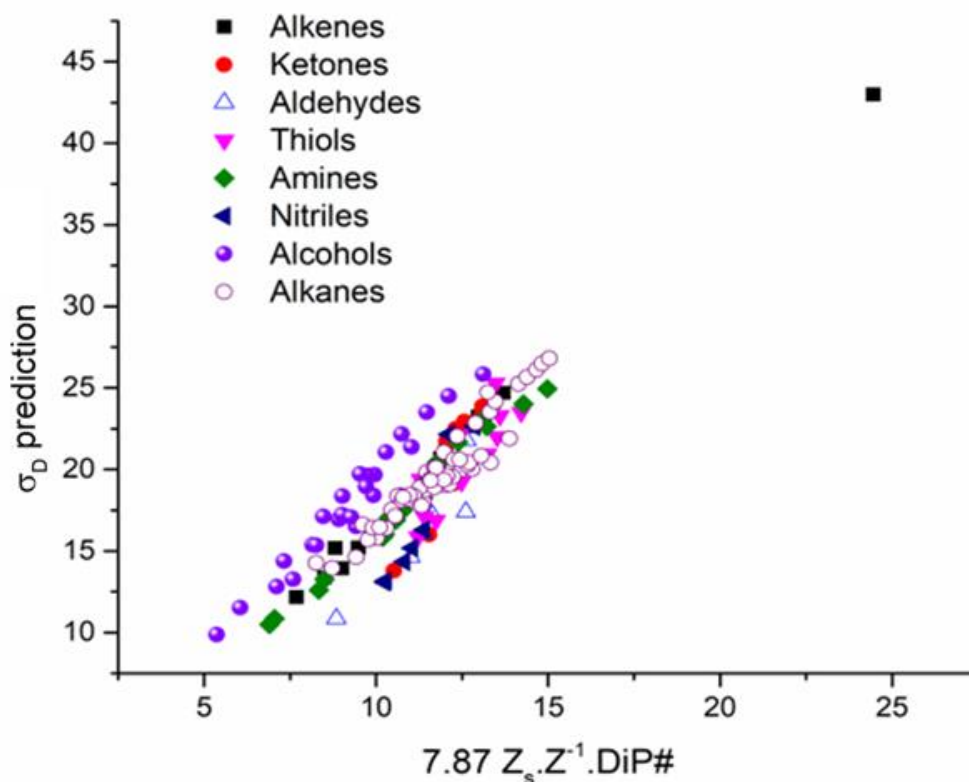
Os dados para o cálculo dos componentes de tensão superficial parcial ( $\sigma_D, \sigma_P$ ), usando as Eqs. [14, 15-16], são apresentados na **Tabela 2**, além dos dados de tensão superficial parcial otimizados obtidos neste estudo (VER MATERIAL SUPLEMENTAR-ANEXO 1).

As Figuras 6 a 7 mostram que o componente dispersivo da tensão superficial pode ser estimado a partir da razão entre a razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) e o número



DiPEVa dentro dos mesmos grupos químicos. O componente dispersivo da tensão superficial pode ser estimado como:

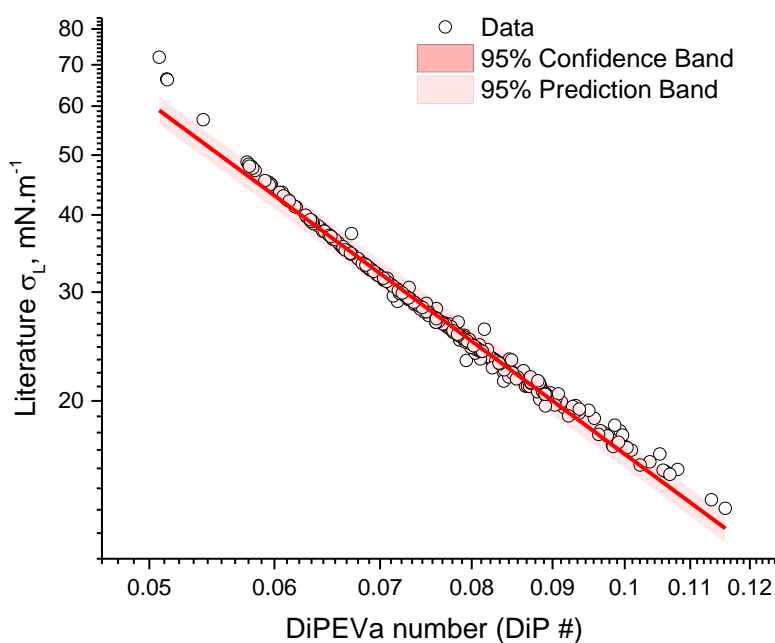
$$\sigma_D \approx 7,87 \frac{Z_s}{Z} / DiP\# \quad [20]$$



**Figura 6.** Correlação entre o produto  $7,87.Z_s.Z^{-1}.DiP\#^{-1}$  e a tensão superficial dispersiva ( $\sigma_D$ ) para vários grupos de compostos alifáticos, Eq. [17].

Foram encontradas correlações lineares entre o componente dispersivo da tensão superficial e a expressão  $7,87.Z_s.Z^{-1}.DiP\#^{-1}$  para os seguintes grupos químicos alifáticos: hidrocarbonetos, olefinas, álcoois, nitrilas, aminas, tióis, cetonas e moléculas de aldeído. Essas correlações foram fortes dentro de cada grupo químico avaliado. Este resultado é de grande relevância porque, embora a definição da razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) seja utilizada no processo de otimização das componentes de tensão superficial parcial ( $\sigma_D$ ), o número DiPEVa não foi utilizado. Como será discutido mais adiante, a Eq. [20] pode ser considerada equivalente ao conceito do homomorfo do parâmetro de solubilidade dispersiva, que afirma que os parâmetros de solubilidade dispersivos dos demais grupos químicos são

derivados de sua contraparte de alcano, tornando-os assim proporcionais. A relação representada na Figura 6 demonstra que o número DiPEVa (*DiP #*) é importante para o cálculo do componente dispersivo da tensão superficial, que foi antecipado no que se refere aos componentes dos parâmetros de solubilidade com a tensão superficial por definição: Eqs. [18a, 18b]. A relação inversa entre o número DiPEVa (*DIP #*) e a tensão superficial total ( $\sigma_L$ ), correspondente à Eq. [19], é apresentado na Figura 7, como segue:



**Figura 7.** Número de log DiPEVa (*DiP #*) vs. log  $\sigma_L$  da literatura, Eq. [19].  $\text{Log } \sigma_L = -1,887 \text{ LogDiP\#} - 0,6726, R^2 = 0,9896$ .

A Figura 7 mostra que as Eqs. [18-19] são válidas para o presente estudo. Um coeficiente de determinação muito forte foi obtido para o logaritmo do *DiP #* ( $R^2=98,96\%$ ). Portanto, os 3DSP do DiPEVa foram ajustados de acordo com a tensão superficial, usando os parâmetros parciais como variáveis, que foram alteradas durante a otimização. Essa otimização foi feita usando as Eqs. [18-19], enquanto o parâmetro de solubilidade total ( $\delta_D$ ), de Hildebrand, foi mantido constante, como descrito na metodologia.

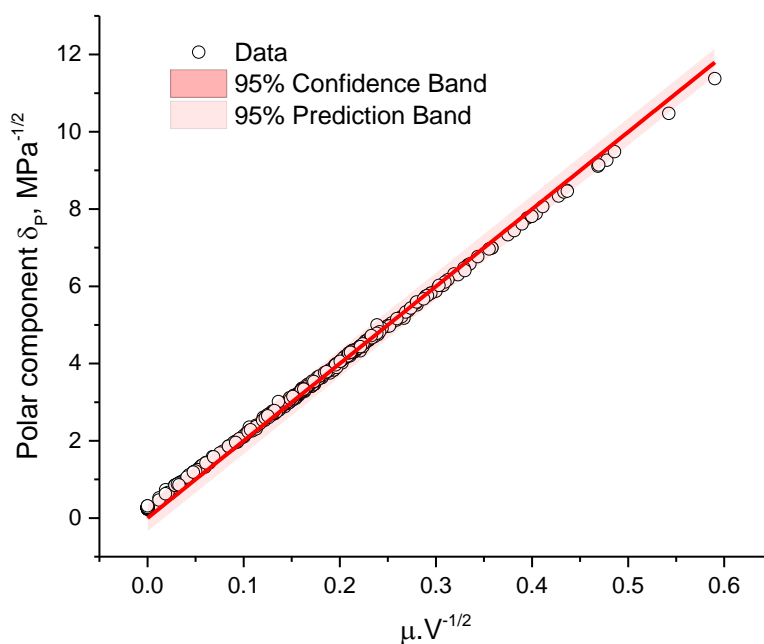
As entalpias de vaporização a 25 °C ( $\Delta H_{vap}$  at 25;  $kJ.mol^{-1}$ ) de cada molécula na **Tabela 3** foram calculadas usando os parâmetros críticos com a seguinte fórmula (aproximação de *Fishtine*) [3], [48] (VER MATERIAL SUPLEMENTAR- ANEXO 1).

):

$$\Delta H_{vap}(kJ.mol^{-1}) = \Delta H_{vap} \text{ at } T_b \left( \frac{1 - 298,15/T_c}{1 - T_b/T_c} \right)^{0.38} \quad [21]$$

onde  $\Delta H_{vap}$  at  $T_b$  = entalpia de vaporização no ponto de ebulição ( $kJ.mol^{-1}$ ),  $T_c$  é a temperatura crítica (K) e  $T_b$  é a temperatura de ebulição (K).

No método DiPEVa, para o cálculo do componente polar do parâmetro de solubilidade ( $\delta_p$ ), manteve-se a proposta de Hansen de relacioná-lo ao produto do momento de dipolo - volume quadrado ( $\mu.V^{1/2}$ ) com uma ajuste (ver nota de rodapé).<sup>3</sup>



**Figura 8.** Relação entre o componente polar do parâmetro de solubilidade ( $\delta_p$ ) e o produto de momento dipolar e volume quadrado ( $\mu.V^{-1/2}$ ).  $\delta_p = 19,98\mu.V^{-1/2}$ ,  $R^2 = 0,9975$ .

<sup>3</sup> Mais precisamente, o parâmetro de solubilidade polar ( $\delta_p$ ) foi proporcional à expressão:  $x\mu.V^{-1/2} + y(Z_s.Z^{-1/0.135})$ , onde  $x$  e  $y$  são variáveis na otimização. A constante 0,135 é a média  $Z_s.Z^{-1}$ .

No método de Hoy, este parâmetro polar é calculado a partir de uma abordagem de grupo, o que dá margem à erros de método. Por isso, optou-se pela metodologia de Hansen, baseada em parâmetros físico-químicos, mas introduziu-se a razão do número de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ), inexistente no modelo de HSP. Com essa modificação, no presente banco de dados, a otimização convergiu empiricamente para o resultado final mais facilmente com sua aplicação dentro do teste.

Com relação ao parâmetro de solubilidade das ligações de hidrogênio ( $\delta_H$ ), ou parâmetro eletrostático, a primeira etapa foi testar o número de agregação ( $\alpha$ ) do método de Hoy, devido à sua simplicidade e facilidade de encontrar os parâmetros físico-químicos necessários na literatura [11]:

$$\log(\alpha) = 3,39066 \frac{T_b}{T_c} - 0,15848 - \log(V) \quad [22]$$

onde  $T_b$  = ponto de ebulição,  $T_c$  é a temperatura crítica e  $V$  = volume molar.

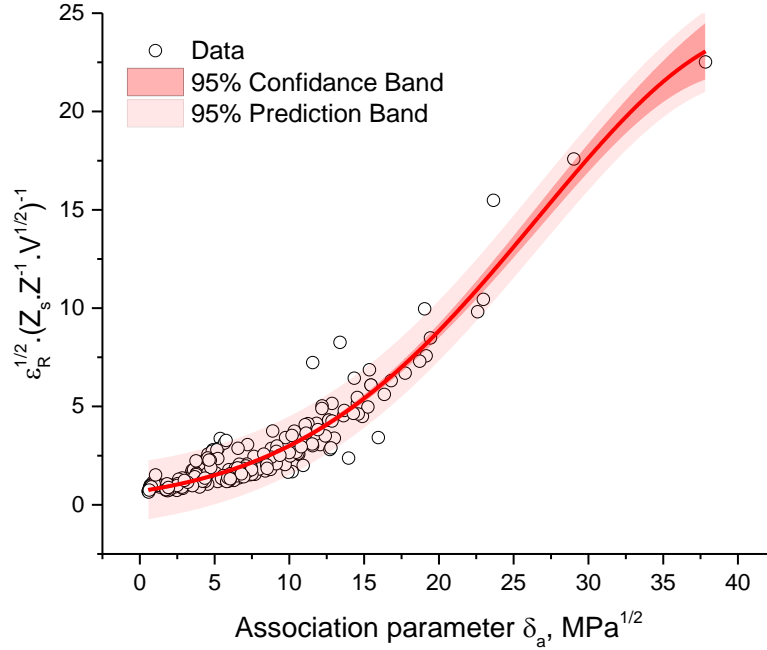
O componente de ligação de hidrogênio ( $\delta_H$ ) foi proporcional ao número de agregação ( $\alpha$ ) como uma primeira aproximação.<sup>4</sup> Neste caso, a abordagem de Hoy é mais uniforme que a de Hansen, que sugere a aplicação de três abordagens diferentes: o cálculo da medida de grupos hidroxila em moléculas hidrofílicas, a subtração de componentes dispersivos e polares do parâmetro de solubilidade total, ou o método de grupo em ausência de dados físico-químicos [3], [11]. Além disso, também é derivada de parâmetros físico-químicos, uma premissa do sistema DiPEVa que é relacionar os 3DSP com parâmetros reais.

Após a otimização, foi encontrada uma relação entre o parâmetro de solubilidade de associação ( $\delta_a$ ) otimizado e a constante dielétrica ( $\epsilon_R$ ), Eq. [23]. Esse resultado importante não era esperado pois essa constante não foi usada em nenhum cálculo dos 3DSP.

$$\frac{\epsilon_R^{1/2}}{\frac{Z_s}{Z} \cdot V^{1/2}} \approx \delta_a \quad [23]$$

---

<sup>4</sup> O parâmetro de solubilidade da ligação de hidrogênio ( $\delta_H$ ) foi proporcional à expressão:  $x \log(\alpha) / y (Z_s \cdot Z^{-1/0.135})$ , onde  $x$  e  $y$  são variáveis na otimização. A constante 0,135 é a média  $Z_s \cdot Z^{-1}$ .



**Figura 9.** Relação entre o componente de associação do parâmetro de solubilidade ( $\delta_a$ ) e a raiz quadrada da constante dielétrica ( $\epsilon_r$ ) ajustada pelo produto da razão dos números de coordenação  $\left(\frac{Z_s}{Z}\right)$  e a raiz quadrada de volume  $\left(\frac{\epsilon_R^{1/2}}{Z_s \cdot V^{1/2}}\right)$ .  $\left(\frac{\epsilon_R^{1/2}}{Z_s \cdot V^{1/2}}\right) = e^{-0,373+0,166\delta_a-0,0019\delta_a^2}$ ,  $R^2 = 0,9141$ .

Uma curva sigmoide foi obtida como correlação entre o componente de associação do parâmetro de solubilidade ( $\delta_a$ ) e a raiz quadrada da constante dielétrica ( $\epsilon_r$ ). O coeficiente de determinação obtido foi forte ( $R^2=91,41\%$ ).

Concluindo, o ajuste dos achados obtidos até então, como pode ser visto na Figura 2, o ajuste dos 3DSP à tensão superficial total resultou em um melhor ajuste dos parâmetros dispersivos e polar com o produto de tensão superficial e do volume molar, obtendo-se uma linha reta. Isso é desejável porque o objetivo é uma melhor correspondência entre os dados teóricos e os parâmetros físico-químicos dos quais o 3DSP foram derivados, o que reforça a tensão superficial como um elemento importante neste estudo. Essa uniformidade significa que o processo resulta na uniformização dos dados do solvente e contribui para a autoconsistência do banco de dados, tornando-o mais fidedigno.

Foram propostas duas correlações entre o 3DSP e os componentes de tensões superficiais parciais (Figuras 4 e 5). Essas correlações obtidas foram mais fortes em comparação às propostas por Koenhen & Smolders, após a inclusão a razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) e uso do parâmetro de solubilidade de associação ( $\delta_a$ ) [8]. Esses valores foram obtidos comparando, empregando a Eq. [14], o parâmetro de solubilidade dispersivo com o componente dispersivo da tensão superficial, obtido na literatura, ou comparando o parâmetro de solubilidade de associação com a tensão superficial polar, Eqs. [15-16].

Em relação ao componente dispersivo do parâmetro de solubilidade ( $\delta_D$ ), vale notar que, à partir da Eq. [20], a expressão  $7,87.Z_s.Z^{-1}.DiP \#^{-1}$  pode ser entendida como o componente dispersivo do parâmetro de solubilidade ajustado, devido a proporcionalidade obtida. O número DiPEVa ( $DiP \#$ ) inclui os três parâmetros 3DSP, além do componente dispersivo, inclui os componentes polar e de ligações de hidrogênio, de forma que estes também interferem no componente dispersivo, como deveria ser racionalmente esperado. E nisso se diferencia da proposta original de Koenhen & Smolders [8]. O conceito do componente dispersivo DiPEVa ajustado ( $\sigma_D = 7.87.Z_s.Z^{-1}.DIP \#^{-1}$ ) comparado com o homomorfo de seu equivalente alcanço, um postulado do parâmetro de solubilidade, é mais correto devido a essa influência das forças polares e de ligação de hidrogênio, não prevista naquele modelo. Em outras palavras, aceita-se que as diversas forças que atuam através das moléculas não são isoladas, mas inter-relacionadas.

O componente polar do parâmetro de solubilidade ( $\delta_P$ ), embora utilizado com pequenas modificações, como o ajuste da razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ), conforme citado, concordou com o componente polar obtido a partir do conceito do HSP. Para o cálculo da parcial polar da tensão superficial, o componente de ligação de hidrogênio do parâmetro de solubilidade foi associado ao parâmetro de solubilidade polar ( $\delta_P$ ), resultando no parâmetro de solubilidade de associação ( $\delta_a$ ). Esse parâmetro associado correspondeu melhor aos dados analisados. Este componente também foi associado à constante dielétrica, como foi demonstrado neste estudo. Esses achados apoiam a consistência de tais relações e sua associação com fundamentos físico-químicos.

Em resumo, os três parâmetros de solubilidade obtidos pelo método original DiPEVa foram derivados de parâmetros físico-químicos e apresentam um grau de concordância com

esses parâmetros ainda não encontrado em outros modelos de parâmetro de solubilidade. Algumas equações e relações não foram introduzidas no processo de otimização, no entanto, dela resultaram, como a relação entre a tensão superficial dispersiva e a razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) associado ao número DiPEVa (*DiP #*) e as relações das constantes dielétricas ( $\epsilon_R$ ) e componente de associação do parâmetro de solubilidade. A razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) é importante porque correlaciona o parâmetro de solubilidade, ou entalpia de vaporização, e a tensão superficial, conforme descrito anteriormente [25]–[27]. Apesar dessa base físico-química, até então nunca fora utilizado no contexto dos parâmetros de solubilidade Hansen.

Para elucidar alguns aspectos, foi demonstrada a divisão da tensão superficial em um componente dispersivo e polar, embora uma otimização refinada dos dados não tenha sido buscada. Os autores consideram o presente estudo uma importante contribuição para o método dos parâmetros de solubilidade. Usando as várias relações apresentadas, os dados de uma molécula podem ser comparados com outras moléculas, usando dados empíricos físico-químicos como entalpias, volume molar, momento dipolar, constante dielétrica, tensão superficial e seus componentes. Assim, a presença de uniformidade entre moléculas dos mesmos grupos químicos pode ser verificada entre si no próprio banco de dados. Desvios do padrão significariam que os dados das moléculas deveriam ser verificados para obter a depuração progressiva de todas as moléculas presentes no banco de dados.

A Figura 7 é digna de nota porque mostra que tanto a razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) quanto o número DiPEVa desempenham um papel no componente dispersivo da tensão superficial de moléculas apolares ou polares. Este produto  $7,87 \cdot Z_s \cdot Z^{-1} \cdot DIP \#^{-1}$  também pode ser utilizado dentro de grupos químicos, principalmente em moléculas alifáticas e ramificadas, para testar a autoconsistência dos dados moleculares utilizados, dada a regularidade apresentada. Essa figura também pode ser vista como uma variante do conceito homomorfo, que até os dias atuais tem sido mais um conceito do que uma demonstração prática.

O foco do presente estudo foi mostrar o uso das Eqs. [18-19] para ajustar os 3DSP à tensão superficial, assim como a derivação dos 3DSP a partir de parâmetros físico-químicos conhecidos. No quesito de relação entre a tensão superficial e o número DiPEVa, a Figura 5

mostra que foi alcançado um coeficiente de determinação muito forte ( $R^2=98,96\%$ ). Demonstra que a otimização entre o valor da tensão superficial total e o 3DSP foi alcançada com sucesso.

A Figura 8 mostra a concordância entre o conceito de componente polar HSP e o componente polar do parâmetro de solubilidade DiPEVa. Essa relação era uma premissa do método, com as diferenças já descritas. A Figura 9 também mostra a correlação entre o componente de associação do parâmetro de solubilidade ( $\delta_a$ ) e a constante dielétrica quadrada ajustada pelo produto da razão do número de coordenação ( $\frac{Z_S}{Z}$ ) e a raiz quadrada do volume  $\left(\frac{\epsilon_R^{1/2}}{\frac{Z_S}{Z} \cdot V^{1/2}}\right)$ .

Para os autores, esses resultados aumentam a precisão dos dados dos 3DSP e sua correlação com as tensões superficiais parciais correspondentes. Além disso, eles são em sua maioria derivados matematicamente e de acordo com a literatura estabelecida, conferindo novos fundamentos confiáveis para este importante tópico.

## 2.4. CONCLUSÃO

Parâmetros de solubilidade tridimensionais ajustados para a tensão superficial foram obtidos e usados para calcular de modo preditivo os componentes parciais da tensão superficial de diversas moléculas orgânicas. Os resultados são relevantes para aplicações que dependem de fenômenos superfície ou interfaciais. Os 3DSP DiPEVa podem ser usados para as mesmas aplicações de mistura de líquidos, dissolução de polímeros e outras aplicações tradicionais em que são aplicados os HSP. Além das relações entre os 3DSP e os parâmetros de tensão superficial parciais descritos, foi obtida outra relação que relaciona os 3DSP, razão do número de coordenação ( $\frac{Z_S}{Z}$ ), e volume molar à constante dielétrica ( $\epsilon_R$ ). As relações apresentadas podem ser aplicadas para a uniformização dos dados de moléculas químicas, o que contribui para a autoconsistência do banco de dados de parâmetros de solubilidade.



# **CAPÍTULO 3. Tensões superficiais parciais de líquidos obtidas por uma abordagem de Good-Girifalco adaptada usando tensões superficiais individuais e interfaciais e parâmetros de solubilidade do DiPEVa**

## **3.1. INTRODUÇÃO DO CAPÍTULO 3**

Recentemente, tem aumentado o interesse por estudos nanotecnológicos que usam o parâmetro de tensão superficial para prever o comportamento de dispersão de líquidos, ao mesmo tempo em que o conceito de parâmetro de solubilidade é usado para avaliar a compatibilidade de misturas líquidas [13]–[21]. Embora haja uma inter-relação entre esses dois parâmetros físico-químicos, a maioria dos estudos não os associa e prefere analisá-los separadamente. Isso se devia à falta de um ajuste razoável entre ambos os parâmetros.

No capítulo anterior foi apresentado um método de obtenção de parâmetros de solubilidade tridimensionais (3DSP) chamado DiPEVa. O método é relevante para aplicações que se relacionam com fenômenos de superfície ou interfaciais, mas também de propriedades dielétricas, como processamento de micro-ondas [36], [37]. O DiPEVa é um método 3DSP que se diferencia do HSP principalmente pelo componente de ligação de hidrogênio, aqui chamado de parâmetro de solubilidade eletrostática, e, portanto, rearranja os outros dois componentes para se ajustarem todos à tensão superficial [19].

Em química e ciência de materiais, existem muitas situações que envolvem tanto a necessidade de medição acurada de propriedades de interface e superfície, quanto avaliação da solubilidade ou miscibilidade entre materiais. Assim, há a necessidade de obter-se as tensões superficiais parciais estimadas a partir de uma propriedade conhecida, no caso, a tensão interfacial empírica. Good e Girifalco propuseram a seguinte equação para calcular a tensão interfacial ( $\sigma_{12}$ ) entre dois líquidos ( $\sigma_{12}$ ) [31]:

$$\sigma_{12} = \sigma_1 + \sigma_2 - 2\phi(\sigma_1\sigma_2)^{1/2} \quad [24]$$

Onde  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$  são as tensões superficiais individuais do líquido e  $\phi$  é um parâmetro de interação, que é característico do sistema.

O parâmetro de interação  $\phi$  é a razão entre o trabalho de adesão reversível ( $\sigma_1 + \sigma_2 - \sigma_{12}$ ) e a média geométrica dos trabalhos de coesão dos dois componentes ( $2(\sigma_1\sigma_2)^{1/2}$ ). Muitas vezes é possível estimar o valor do parâmetro de interação  $\phi$ . Pode ser maior que a unidade se as duas fases forem parcialmente miscíveis, caso contrário  $\leq 1$  [49].

Em resumo, o trabalho de adesão foi expresso por Good e Girifalco pela média geométrica das tensões superficiais. Eles propuseram o uso de um parâmetro de interação  $\phi$ ,  $0,5 < \phi < 1,15$  [31]. A partir de valores de interações líquido/líquido em sistemas de polaridade semelhante é possível calcular valores empíricos para  $\phi$ . A partir do uso tanto da tensão superficial total empírica quanto das tensões interfaciais de líquidos, este método permite a estimativa das tensões superficiais parciais de líquidos.

Considerando que para que qualquer processo ocorra espontaneamente, a termodinâmica exige que a variação de energia livre de Gibbs no processo de mistura seja negativa. Em uma descrição simplificada, a energia livre de Gibbs  $\Delta G^M$  pode ser dividida em duas partes [4]:

$$\Delta G^M = \Delta G_{comb}^M + \Delta G_{noncomb}^M \quad [25]$$

onde a parte combinatória  $\Delta G_{comb}^M$  está relacionada à mudança de entropia combinatória  $\Delta S_{comb}^M$  (que resulta da simples mistura de componentes) por [4]:

$$\Delta G_{comb}^M = -T\Delta S_{comb}^M \quad [26]$$

A parte não combinatória  $\Delta G_{noncomb}^M$  refere-se a todos os outros efeitos de energia livre, incluindo o calor de mistura, e pode ser calculada por:

$$\Delta G_{noncomb}^M = \varphi_1\varphi_2V(\delta_1-\delta_2)^2 \quad [27]$$

Nas equações acima, T é a temperatura absoluta,  $\varphi_1$  e  $\varphi_2$  são frações de volume do líquido 1 e líquido 2, V é o volume da mistura, e  $\delta_1$  e  $\delta_2$  são chamados de parâmetros de solubilidade dos líquidos.

A partir desse *background* da termodinâmica, mostrado nas Eqs. [26-27], quando dois líquidos são misturados, Scatchard e Hildebrand assumem que a regra da média geométrica se aplica e portanto a entalpia de mistura torna-se [1], [50]:

$$\Delta H^M = V_1 \varphi_2^2 (\delta_1 - \delta_2)^2 \quad [28]$$

Onde  $V_1$  é o volume molar do solvente 1 e  $\varphi_2$  é a fração volumétrica do soluto 2.

Uma expressão mais geral foi sugerida por Walker, que propôs uma correção para os desvios da regra da média geométrica em termos de um parâmetro de interação  $\phi$  [51]. Portanto, a Eq. de Hildebrand-Scatchard. (5) torna-se:<sup>5</sup>

$$\Delta H^M = V_1 \varphi_2^2 [(\delta_1 - \delta_2)^2 + 2(1 - \phi)\delta_1\delta_2] \quad [29]$$

### 3.1.1 Método Good-Girifalco adaptado

A partir dos tratamentos de Fowkes e Good-Girifalco para avaliação de tensões interfaciais e superficiais, Bulou e colaboradores propuseram uma nova abordagem de cálculo da tensão interfacial a partir da equação de Good-Girifalco. Nessa abordagem, o parâmetro de interação  $\phi$  é expresso em termos de interações moleculares usando o conceito de parâmetro de solubilidade tridimensional (3DSP) [35]. O ponto forte do método é a precisão e fácil aplicação baseado em, baseado em dados dos parâmetros de solubilidade de Hansen (HSP), que podem ser facilmente encontrados na literatura [3].

Bulou e colaboradores propuseram a aplicação da equação de Hildebrand-Scatchard, dividindo os parâmetros de solubilidade em um componente dispersivo e polar, utilizando

---

<sup>5</sup> Essa entalpia de mistura pode ser dividida em dois termos, que são descritos na seção do apêndice.

para isso os parâmetros de solubilidade de Hansen, conforme será descrito nos parágrafos seguintes [3], [35]:

$$\delta_T^2 = \delta_D^2 + \delta_P^2 + \delta_H^2 \quad [3]$$

onde  $\delta_T$  é o parâmetro de solubilidade total ou Hildebrand, e  $\delta_D$ ,  $\delta_P$ ,  $\delta_H$  são os parâmetros de solubilidade tridimensional parcial (3DSP).

De uma forma alternativa, um novo método de Good-Girifalco adaptado, que calcula a tensão superficial parcial de líquidos a partir de parâmetros de solubilidade, usando nesse caso os dados DiPEVa e a tensão interfacial empírica, é descrito abaixo. Assim, para a avaliação do parâmetro polar, decidiu-se, após testes empíricos realizados no decorrer desse estudo pelos autores, que seria mais adequado combinar os parâmetros polares e de ligação de hidrogênio nos parâmetros de solubilidade de associação, seguindo Blanks & Prausnitz [6], [11]:

$$\delta_a = (\delta_P^2 + \delta_H^2)^{1/2} \quad [15]$$

Ambas as interações competem quando interações específicas são introduzidas, e a equação de Good-Girifalco deve agora ser generalizada a partir das Eqs. [30-33]:

$$\sigma_{12} = \sigma_1 + \sigma_2 - 2(\alpha\phi_D + \beta\phi_a)(\sigma_1\sigma_2)^{1/2} \quad [30]$$

O parâmetro de interação Girifalco  $\phi$  é ainda dividido nas seguintes partes dispersivas e polares (ou associação):

$$\phi = \alpha\phi_D + \beta\phi_a \quad [31]$$

Onde  $\phi_D$  and  $\phi_a$  são os parâmetros de interação dispersiva parcial e de associação, respectivamente, enquanto  $\alpha$  e  $\beta$  são variáveis de ajuste. O parâmetro de interação total ( $\phi$ ) é calculado a partir de valores empíricos de tensão superficial usando uma operação algébrica da Eq. (1).

$$\phi = \frac{(\sigma_1 + \sigma_2 - \sigma_{12})}{2(\sigma_1\sigma_2)^{1/2}} \quad [32]$$

enquanto:

$$\alpha = \frac{\delta_{D1}\delta_{D2}}{\delta_1\delta_2} \text{ e } \beta = \frac{\delta_{a1}\delta_{a2}}{\delta_1\delta_2} \quad [33]$$

Os  $\alpha$  e  $\beta$  são calculados a partir de parâmetros de solubilidade dispersiva, de associação e de solubilidade total, seguindo a equação acima. Portanto esse capítulo tem dois objetivos: os autores propõem uma adaptação do método Good-Girifalco baseado no 3DSP do DiPEVa e comparação entre as tensões superficiais parciais obtidas com a estimativa da tensão superficial parcial obtida pelo método DiPEVa, usando 3DSP, a razão entre o número de coordenação e o volume, conforme descrito em um estudo anterior [19].

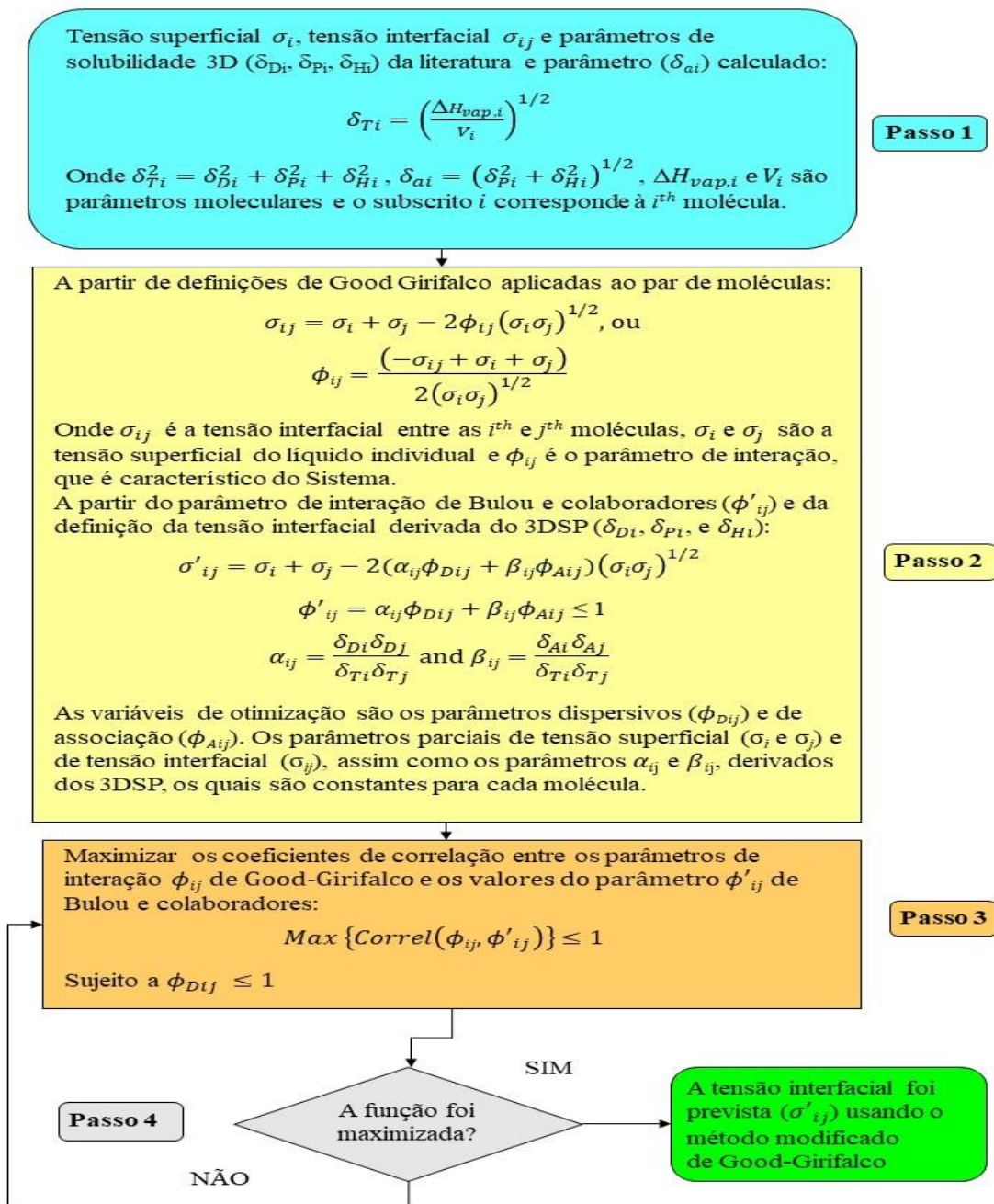
### 3.2. EXPERIMENTAL

A base de dados Good & Elbing foi utilizada para validar o método proposto de Good-Girifalco adaptado, comparando os resultados obtidos originalmente por Bulou e colaboradores [35], [52]. Os parâmetros de solubilidade do DiPEVa e os parâmetros ajustados propostos em nosso estudo foram comparados usando a relação apresentada na Eq. [20] [19]. Os dados são mostrados na **Tabela 4** (VER MATERIAL SUPLEMENTAR-ANEXO 2).

As variáveis de entrada foram os parâmetros de solubilidade do DiPEVa, tensões superficiais individuais e interfaciais e o parâmetro de solubilidade de associação calculado, através da Eq. [15]. Após a tensão interfacial calculada entre a água e cada molécula orgânica, o método Good-Girifalco adaptado, através da equação Eq. [30], foi aplicado. A Tabela 4 mostra as variáveis de entrada e os parâmetros resultantes após a otimização.

O processo de otimização foi realizado na ferramenta de otimização integrada do Excel™ chamada Solver, que empregou o modelo não linear de gradiente reduzido generalizado (GRG) [47]. Buscou-se a maximização da função objetivo da correlação do coeficiente entre o parâmetro de interação Good-Girifalco ( $\phi_i$ ) e o parâmetro de interação Bulou calculado  $\phi_j$ , sujeito a  $\phi_{Di} \leq 1$ . As variáveis de otimização são os componentes de

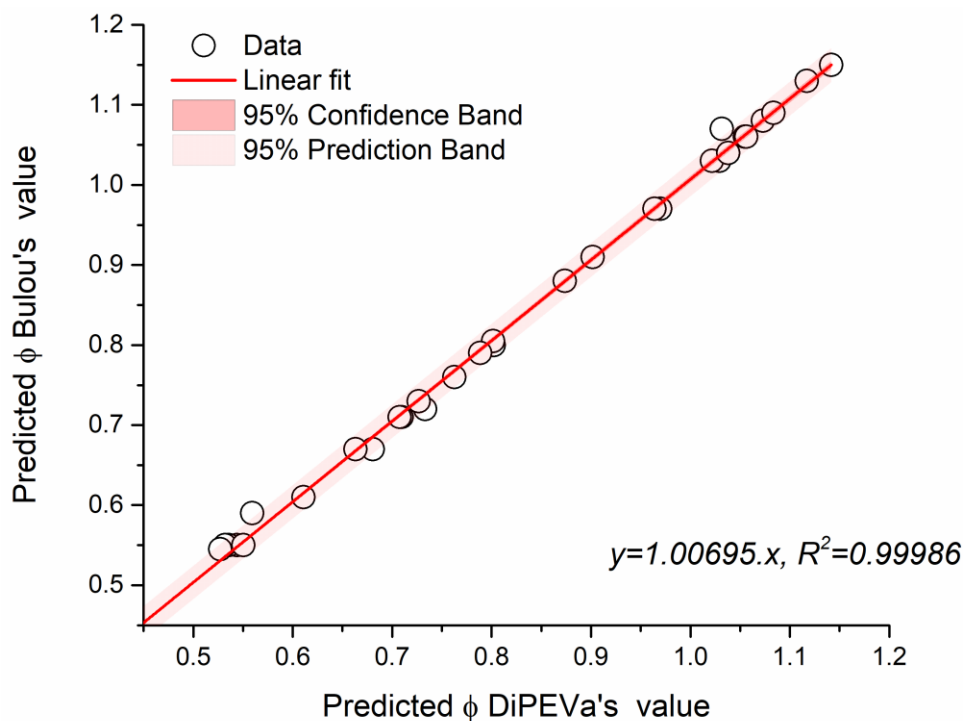
interação dispersivo da energia de superfície ( $\phi_{Di}$ ) e parâmetros de associação ( $\phi_{ai}$ ). As tensões superficiais parciais ( $\sigma_{Li1}$  e  $\sigma_{Li2}$ ) e tensões interfaciais ( $\sigma_{i12}$ ), junto com os parâmetros  $\alpha_i$  e  $\beta_i$ , derivados dos 3DSP, e os 3DSP são constantes para cada  $i^{\text{th}}$  molécula. O procedimento de otimização é mostrado na Figura [10]. Neste procedimento, o coeficiente entre o  $i^{\text{th}}$  parâmetro de interação de Good-Girifalco ( $\phi_i$ ) e o parâmetro de interação de Bulou calculado  $\phi_j$  para cada  $j^{\text{th}}$  molécula. Abaixo é apresentado o fluxograma mostrando o algoritmo do método de correlação.



**Figura 10.** O processo de otimização para correlacionar o coeficiente entre o Good-Girifalco  $i^{th}$ , parâmetro de interação ( $\phi_i$ ), e os parâmetros de interação calculados de Bulou e colegas  $\phi_j$  para cada  $j^{th}$  molécula.

### 3.3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados obtidos com a otimização do método Good-Girifalco adaptado são comparados aos obtidos por Bulou e colaboradores na **Tabela 5** [35] (VER MATERIAL SUPLEMENTAR- ANEXO 2). Os resultados obtidos neste trabalho estão em excelente concordância com os encontrados na literatura. Os valores de  $\phi$  foram comparados e mostrados na Figura 11. É possível observar que houve um coeficiente de determinação excelente,  $R^2 > 0,999$ .



**Figura 11.** Comparação entre o parâmetro de interação total ( $\phi$ ) obtido tanto do método de Good-Girifalco adaptado quanto dos resultados originais de Bulou e colaboradores.

O primeiro objetivo foi validado na Fig. 11, na qual houve uma correlação linear robusta entre o método original de Good-Girifalco, de Bulou e colaboradores, e o método derivado proposto no presente estudo [35]. Além disso, os resultados do cálculo do parâmetro de interação  $\phi$  foram equivalentes em ambos os métodos.

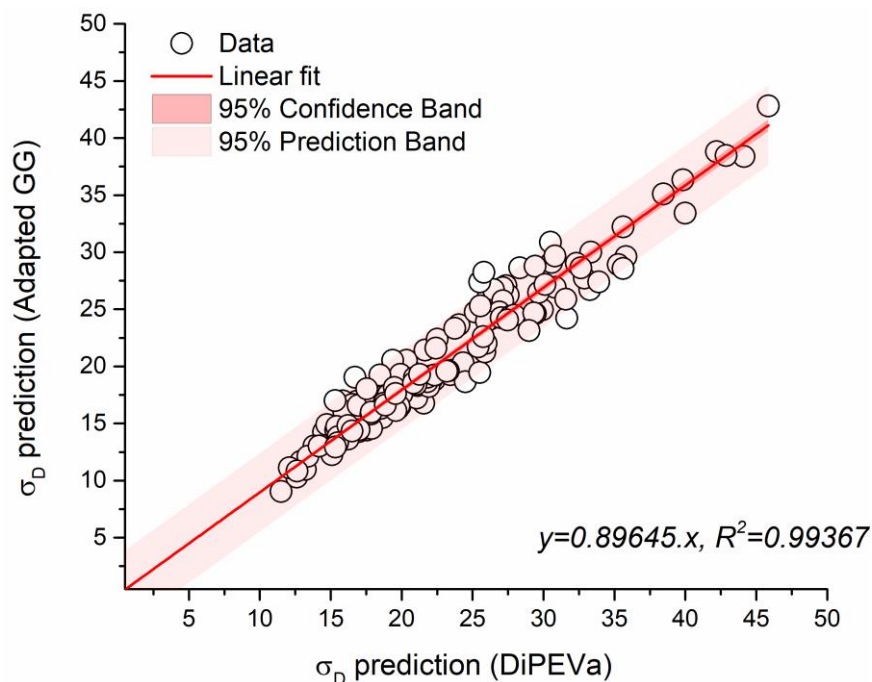
De acordo com Gardon, o valor do parâmetro de interação  $\phi$  depende da natureza das forças de interação nas duas fases líquidas. Por exemplo, se as interações em cada fase são apenas devido a forças de dispersão, haveria quase unidade. Por outro lado, haverá valor



menor que a unidade se os dois líquidos forem de polaridade diferentes. Para o caso extremo da tensão interfacial entre água e líquidos orgânicos apolares, o menor valor de  $\phi$  é aproximadamente 0,5 [49].

O parâmetro de interação  $\phi$  de hidrocarbonetos obtido foi de  $\sim 0,5$ , conforme previsto. Além disso, o parâmetro de interação entre os líquidos polares e a água foi encontrado em torno de 1, enquanto alguns valores de  $\phi$  também foram ligeiramente superiores à unidade (ver Tabela 5). Na visão dos autores, outros tratamentos estatísticos foram desnecessários para validar o método de Bulou e colaboradores devido à robusta correlação encontrada [35]. Os resultados de cada valor do parâmetro de interação  $\phi$  dentro de cada grupo químico foram qualitativa e quantitativamente compatíveis com a teoria, conforme os resultados da Tabela 5. [35], [49]

Depois de validar o método de Bulou e colaboradores, três estudos adicionais de avaliação de tensão interfacial contra água são analisados [35]. Primeiramente, os valores de tensão superficial parcial e interfacial obtidos por Good& Elbing foram utilizados para o método derivado de Good-Girifalco [49]. Primeiramente, após a comparação dos valores dos parâmetros de interação  $\phi$ , os valores de tensões superficiais parciais obtidos pelo método de otimização DiPEVa (este estudo) foram comparados com o método adaptado de Good-Girifalco proposto. Os resultados são mostrados na **Tabela 6** e na Figura 12 (VER MATERIAL SUPLEMENTAR- ANEXO 2).



**Figura 12.** Comparação entre os valores de tensão superficial dispersiva obtidos pelo método de otimização DiPEVa e aqueles obtidos pelo método Good-Girifalco adaptado (este estudo) usando o banco de dados Good & Elbing [52].

O parâmetro de associação ( $\delta_a$ ), Eq. [15], introduzido por Blanks & Prausnitz, também é usado para descrever a compatibilidade entre fibras, solventes e corantes em processos de tingimento [6], [36], [53], [54]. De acordo com Ingamells e Thomas, como as forças de dispersão e associação não existem independentemente, é mais realista supor que ambas influenciam o comportamento do tingimento. Os autores citados sugeriram que a contribuição relativa das forças de dispersão e associação para os parâmetros de solubilidade é essencial na adsorção de corantes dispersos em fibras sintéticas [55].

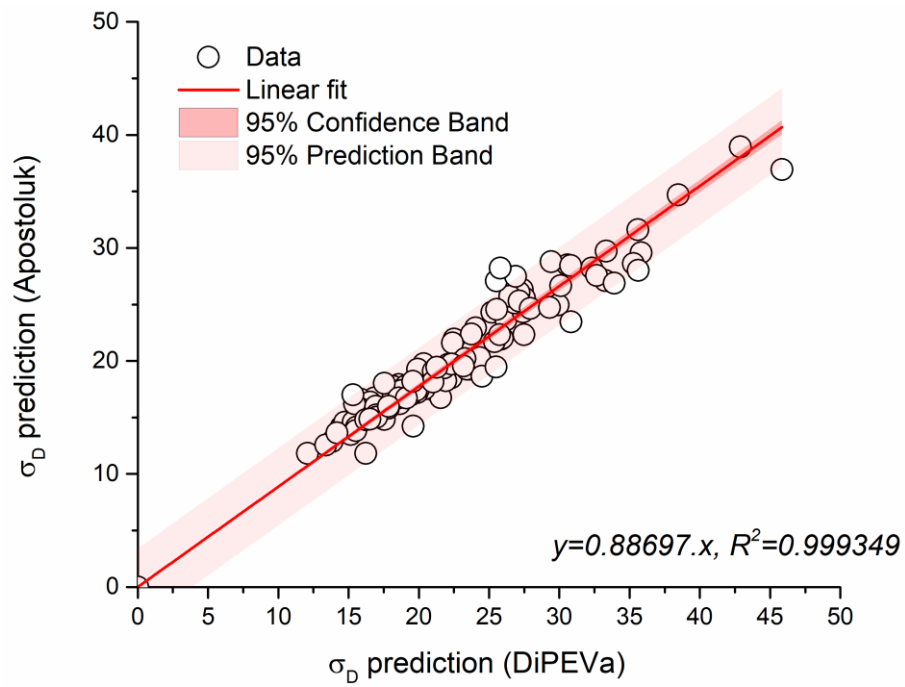
Em um estudo anterior desses autores, cada um dos valores de 3DSP foi avaliado a partir de diferentes parâmetros físico-químicos. O componente da tensão superficial dispersivo foi correlacionado com o parâmetro de solubilidade dispersiva ( $\delta_D$ ) através do seguinte produto  $7.87 \cdot Z_S \cdot Z^1 \cdot DIP \#^1$ , incluindo tanto a razão dos números de coordenação ( $Z_S \cdot Z^1$ ) quanto o número DiPEVa ( $DIP \#$ ), que é uma razão entre os valores de 3DSP. O parâmetro de solubilidade polar ( $\delta_P$ ) foi derivado da razão entre os números de coordenação,

o momento dipolar ( $\mu$ ) e o volume molar, correlacionando-se com o componente polar original da HSP. Finalmente, o componente de associação do parâmetro de solubilidade ( $\delta_a$ ) foi correlacionada com a constante dielétrica quadrada, ajustada pelo número de coordenação e produto de volume quadrado ( $\frac{\epsilon_R^{1/2}}{Z \cdot V^{1/2}}$ ) [19].

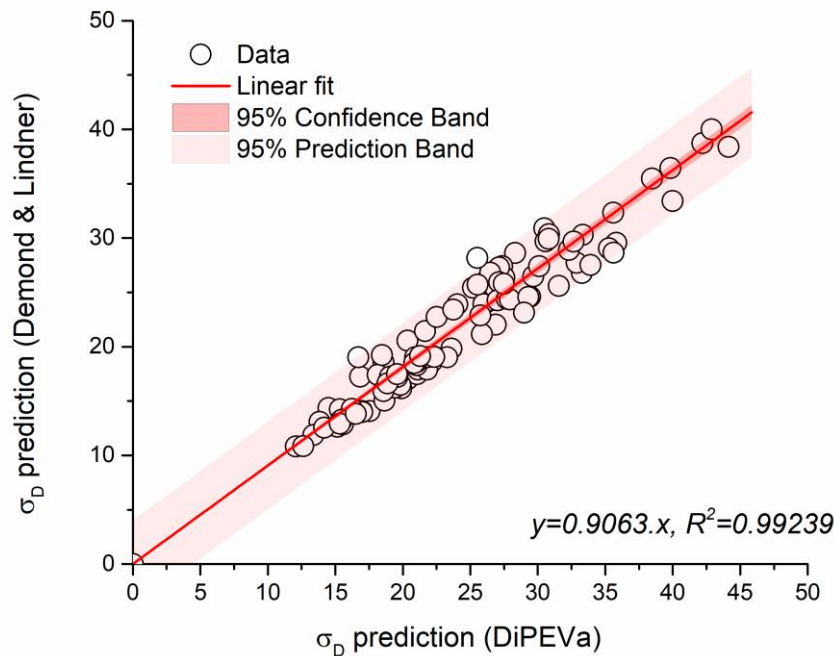
A **Tabela 7** mostra as tensões superficiais parciais calculadas a partir de medições de tensão interfacial dentro de cada banco de dados diferente citado (VER MATERIAL SUPLEMENTAR- ANEXO 2). As Figuras 12-16 detalham os resultados obtidos pelo método adaptado de Good-Girifalco.

As Figuras 12, 13 e 14 mostram uma forte correlação entre os valores de tensão superficial parcial DiPEVa obtidos e aqueles obtidos pelo método de Good-Girifalco adaptado, demonstrado neste estudo. Isto é especialmente verdadeiro para o caso do valor de tensão interfacial entre líquido orgânico e água quando aplicado à estimativa da tensão superficial dispersiva e ao parâmetro de tensão superficial polar. Uma forte correlação foi encontrada nas três bases de dados, com pequena variação em uma delas (Figura 13). Deve-se notar que a seleção dos solventes, sendo mais alifáticos ou aromáticos, polaridade e a proporção de líquidos polares e apolares, interfeririam nos resultados, que devem, portanto, ser avaliados a partir dessa extensão de características dos solventes usados. Apesar disso, percebe-se que a previsão da componente de tensão superficial dispersiva foi acurada nos três casos, apesar da possibilidade de ter havido uma sobre-representação de moléculas apolares, e talvez predominantemente alifáticas, como será discutido mais adiante.

Uma tensão interfacial entre moléculas orgânicas e líquidos apolares deve ser usada para melhorar a previsão do componente de tensão superficial polar. Isso ocorre porque muitos líquidos polares são miscíveis com água, portanto, uma molécula apolar e imiscível em água deve ser usada. Assim, o modelo de estimativa de tensão interfacial de moléculas orgânicas contra esqualeno de Fowkes foi selecionado [56].

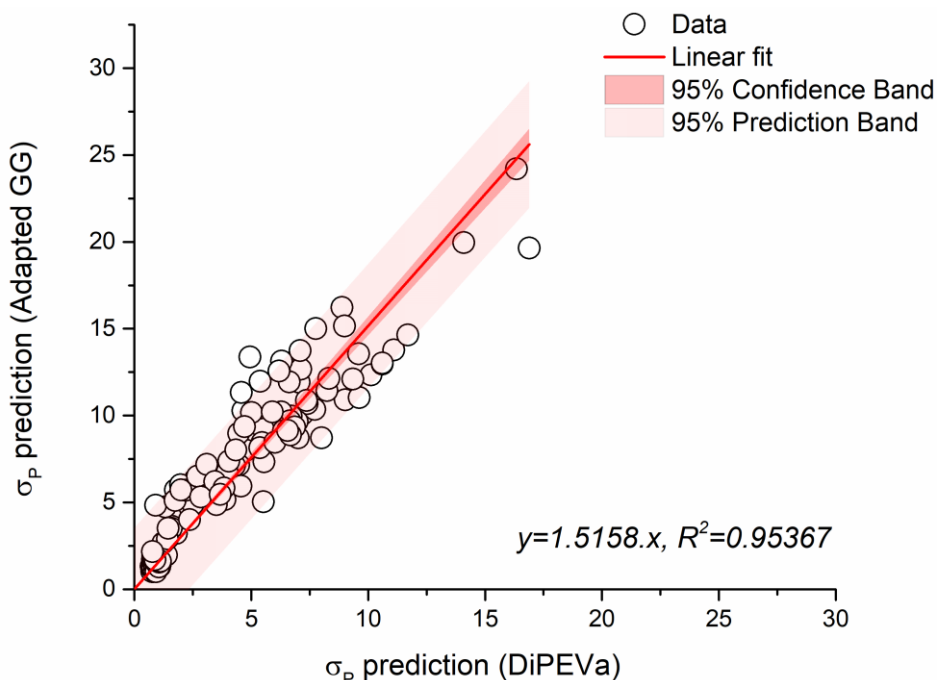


**Figura 13.** Comparação entre os valores de tensão superficial dispersiva obtidos pelo método de otimização DiPEVa e aqueles obtidos pelo método Good-Girifalco adaptado (este estudo) usando o banco de dados Apostoluk & Drzymała [57].



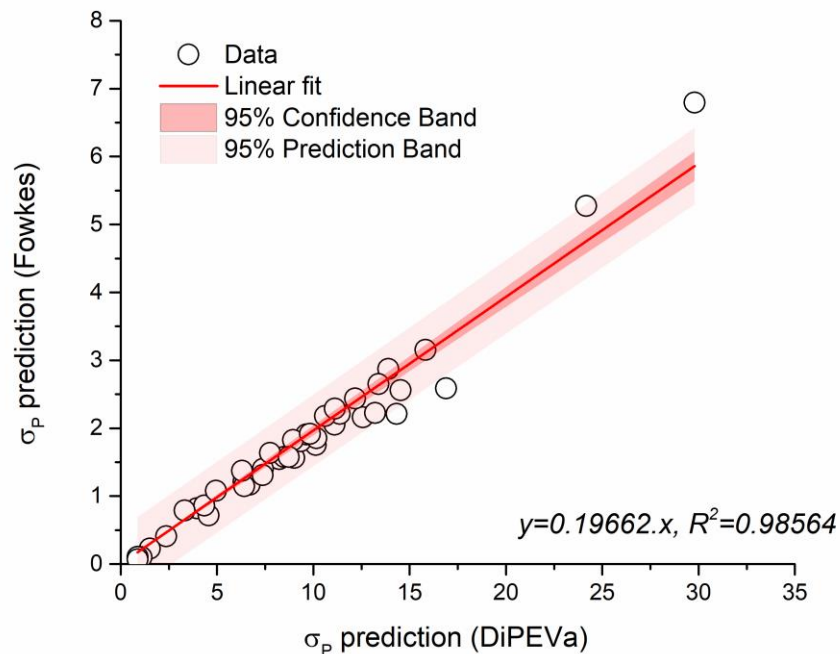
**Figura 14.** Comparação entre os valores de tensão superficial dispersiva obtidos pelo método de otimização DiPEVa e aqueles obtidos pelo método Good-Girifalco adaptado (este estudo) usando a base de dados Demond & Lindner [58].

A Figura 15 mostra a comparação entre os  $\sigma_p$  valores obtidos pelo método Good-Girifalco e a estimativa do método DIPEVa, incluindo as três bases de dados, já descritas [52], [57], [58]. Foi possível obter um forte coeficiente de determinação,  $R^2 > 0,95$ . No entanto, os valores para a água não são suficientemente bem previstos porque a tensão interfacial não pode ser calculada acuradamente em caso de líquidos miscíveis. Por outro lado, o estudo mostra que houve uma tendência geral que é satisfatória.



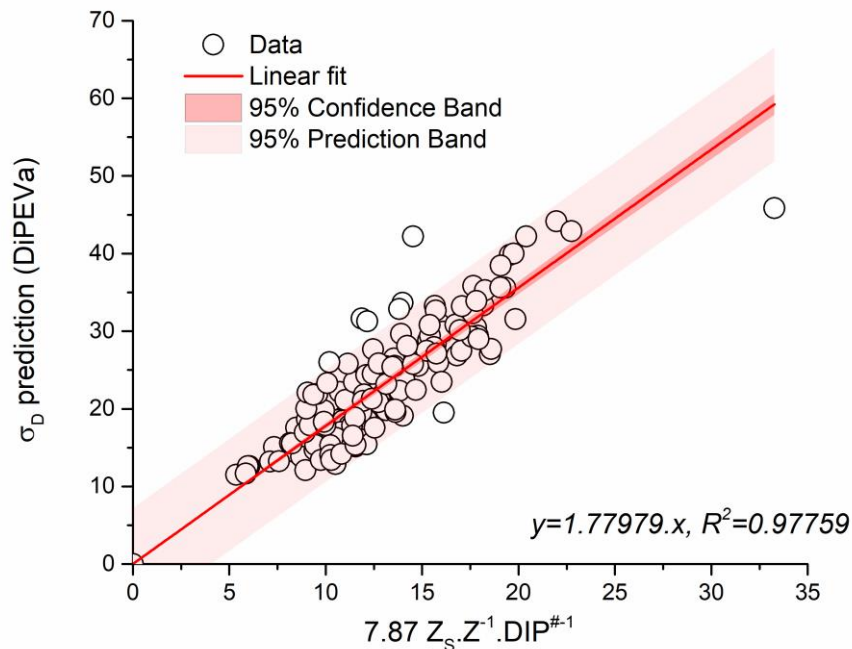
**Figura 15.** Comparação entre os valores de tensão superficial polar obtidos pelo método de otimização DiPEVA e aqueles obtidos pelo método Good-Girifalco adaptado (este estudo) usando o banco de dados Good & Elbing [52].

Em contraste, uma correlação robusta foi obtida, conforme mostrado na Figura 16, a partir da comparação entre o componente de tensão superficial polar entre os dois métodos usando tensão interfacial de esqualeno dos dados de Fowkes e colaboradores [56]. Neste caso, houve uma correlação robusta entre os valores de tensão superficial polar obtidos pelo método de otimização DiPEVA e aqueles obtidos pelo método de Good-Girifalco adaptado (este estudo). Conforme mencionado anteriormente, líquidos não miscíveis devem ser preferencialmente utilizados para que a tensão interfacial seja medida com precisão; portanto, este banco de dados, baseado em medições de tensão interfacial de esqualeno, é mais conveniente para calcular o componente de tensão superficial polar.



**Figura 16.** Comparação entre os valores de tensão superficial polar obtidos pelo método de otimização DiPEVa e aqueles obtidos pelo método adaptado de Good-Girifalco (este estudo) usando medidas interfaciais de esqualeno por dados de Fowkes e colaboradores [56].

Para avaliar os resultados do DiPEVa 3DSP ajustado para tensão superficial no banco de dados deste estudo, algumas correlações adicionais foram aplicadas. O parâmetro de solubilidade dispersiva ajustado ( $7.87.Z_s.Z^{-1}.DIP \#^{-1}$ ), proposto em um estudo anterior do grupo, é comparado com o componente dispersivo da tensão superficial calculado neste estudo na Figura 17.

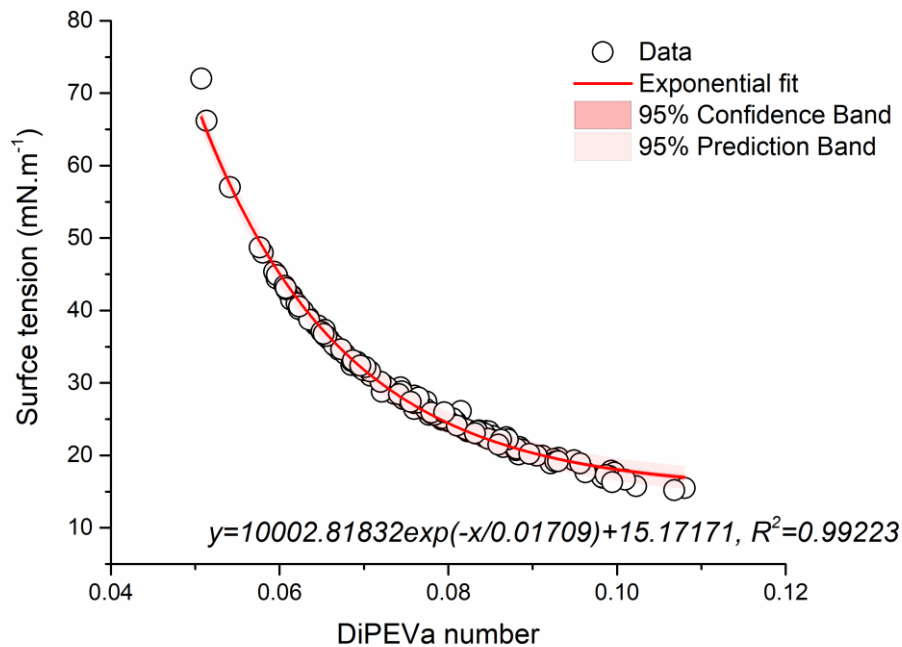


**Figura 17.** Comparação entre o parâmetro de solubilidade dispersiva ajustado ( $\delta_D = 7.87 \cdot Z_s \cdot Z^{-1} \cdot \text{DIP} \#^{-1}$ ) e a tensão superficial dispersiva ( $\sigma_D$ ) obtido neste estudo.

Uma forte correlação foi encontrada na Figura 17, porém na figura pode-se observar um maior espalhamento em torno da média. Em um estudo anterior, este produto foi proposto como exemplo do conceito homomorfo do parâmetro de solubilidade dispersivo ( $\delta_D$ ), que afirma que os parâmetros de solubilidade dispersivos de outros grupos químicos são derivados de seus equivalentes homomórficos de alcanos, tornando-os proporcionais [19]. Isso é verificado porque essa linha reta foi encontrada em vários grupos químicos alifáticos lineares e ramificados. Neste estudo, os grupos não foram individualizados, mas todos os líquidos, em sua totalidade, seguiram essas regras, conforme indicado pela Figura 17.

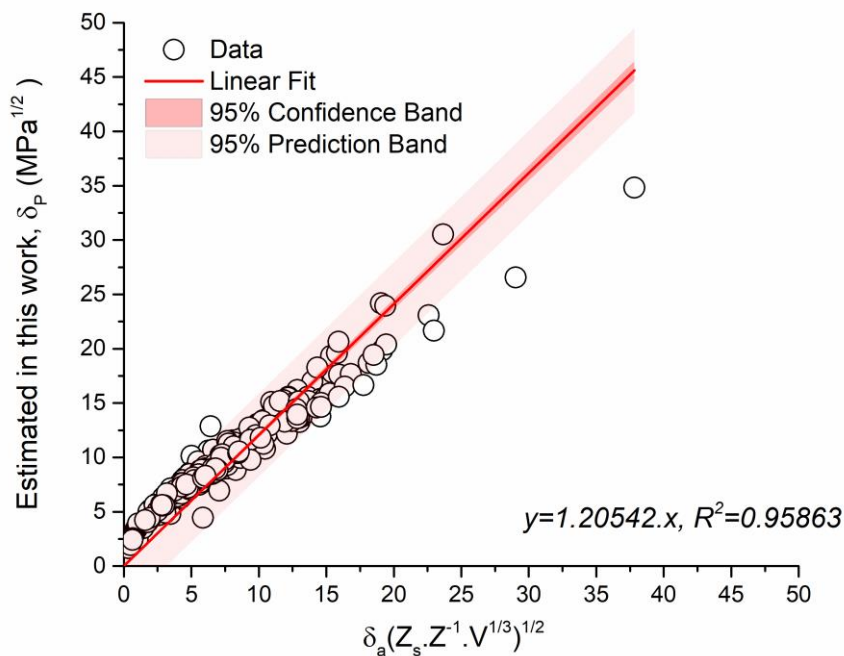
A Figura 18 mostra que após a otimização do 3DSP para tensão superficial, conforme proposto em um estudo anterior desses autores, há uma concordância completa do número DiPEVa, que representa uma relação entre cada um dos 3DSP (ver apêndice, Eqs. [30-32], e a tensão superficial total.





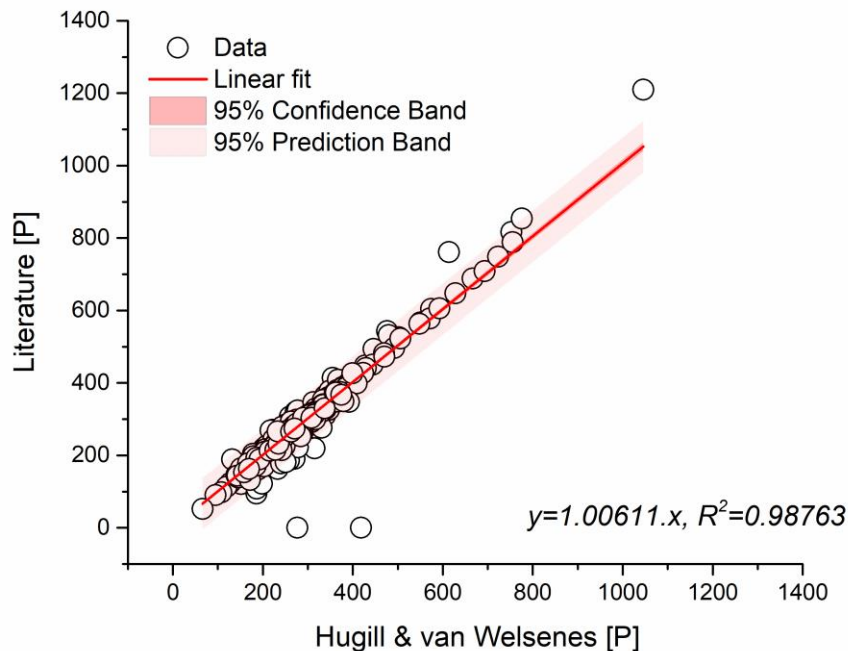
**Figura 18.** Relação entre o valor do número DiPEVa e a correspondente tensão superficial total do líquido.

Por fim, as tensões superficiais parciais são comparadas com os parâmetros previstos pelo método DiPEVa de 3DSP após a otimização, conforme descrito em estudo anterior [19]. O parâmetro de solubilidade polar é comparado com componente de associação do parâmetro de solubilidade DiPEVa ( $\delta_a$ , este trabalho) na Figura 19.



**Figura 19.** O componente de associação do parâmetro de solubilidade DiPEVa ( $\delta_a$ , este trabalho) é comparado com o parâmetro polar previsto a partir da tensão superficial polar, a razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ) e volume [19].

Seguindo uma contribuição subsidiária para o presente estudo, a tensão superficial de compostos orgânicos foi estimada usando o método de Hugill & van Welsenens [59]. A Figura 20 mostra a relação entre o valor de Parachor obtido na literatura e sua estimativa a partir da teoria do estado correspondente (CST). Essa abordagem foi utilizada para avaliar a consistência do banco de dados utilizado neste trabalho.



**Figura 20.** Relação entre o parachor obtido na literatura e seu cálculo a partir da teoria dos estados correspondentes. (Hugill & van Welsenens).  $[P]_{\text{Literatura}} = 1,0066 HVW[P]$ ,  $[P] = 40,1684(0,151 - 0,0464*\Omega), T_C^{13/12}, P_C^{-5/6}$ , no qual  $\Omega$  = parâmetro ômega,  $T_C$  (K),  $P_C$  (bar),  $R^2=98,76\%$  [59], [60].

Uma correlação linear foi encontrada entre os parachores estimados e os valores da literatura [59], [60]. Uma objeção a este estudo seria a suposição de que a teoria dos estados correspondentes de Hugill & van Welsenens foi concebida para moléculas apolares e não poderia ser aplicada a este banco de dados, contendo também moléculas polares. Embora os autores aceitem essa preocupação, o método foi utilizado sem alterações e os resultados foram satisfatórios. No entanto, a fórmula de Hugill & van Welsenens poderia ser melhor ajustada para moléculas polares usando um banco de dados completo, o que está além do escopo deste estudo.

Esses resultados mostram uma correlação robusta; portanto, este estudo ajustou os bancos de dados de moléculas contendo 3DSP para tensão superficial. Este ajuste fino do 3DSP à tensão superficial é a diferença mais relevante com os parâmetros de solubilidade de Hansen, cujos valores não são otimizados para tensão superficial. Um resumo de alguns

aspectos do método, previamente descritos pelos autores, também é descrito na seção 5.3 do Apêndice.

### **3.4. CONCLUSÃO**

As tensões superficiais parciais de líquidos foram obtidas através de uma abordagem refinada com base na metodologia de Good-Girifalco, utilizando tanto as tensões interfaciais quanto os parâmetros de solubilidade tridimensionais DiPEVa. Essa estratégia é empregada com o propósito de antever os componentes individuais das tensões superficiais em moléculas orgânicas. O método adaptado de Good-Girifalco permitiu a decomposição das tensões superficiais em seus elementos constituintes, e os resultados foram submetidos a comparação utilizando quatro bases de dados distintas. Três dessas bases envolveram medições de tensões interfaciais em relação à água, enquanto a quarta considerou a interação com o esqualeno, uma molécula predominantemente apolar.

Avaliando os resultados, percebeu-se que os dados de tensão interfacial relacionados à água foram apropriados para estimar o componente dispersivo das tensões superficiais. Em contraste, quando se tratava de líquidos polares, a preferência recaía sobre os dados de tensão interfacial em relação ao esqualeno, uma escolha fundamentada no comportamento de miscibilidade desses líquidos. A abordagem delineada revelou-se precisa e de aplicação descomplicada. Além das informações das tensões superficiais e interfaciais, ela requer apenas os parâmetros de solubilidade tridimensionais, que podem ser obtidos na literatura ou calculados diretamente. Por esse motivo, ela se configura como uma ferramenta versátil, encontrando aplicabilidade em diversas áreas da ciência dos materiais, abrangendo, por exemplo, o processamento de materiais bidimensionais

### 3.5. APÊNDICE DO CAPÍTULO 3

#### 3.5.1. Entalpia de mistura ( $\Delta H$ )

De acordo com Bulou e colaboradores, a entalpia de mistura de Scatchard e Hildebrand, Eq. [24], pode ainda ser dividido em um componente dispersivo, apolar, ( $\Delta H_D$ ) e polar, ou de ligação de hidrogênio, ( $\Delta H_h$ ), resultando no seguinte [35]:

$$\Delta H = \Delta H_D + \Delta H_h \quad [34]$$

Onde:

$$\Delta H_D = V_1 \varphi_2^2 [(\delta_{D1} - \delta_{D2})^2] \quad [35]$$

E:

De acordo com Walker, sendo  $\phi_D \leq 1$ , então  $\Delta H_D \geq 0$  [51].

$$\Delta H_h = V_1 \varphi_2^2 [\sigma_{h1}^2 + \sigma_{h2}^2 - 2\phi_h \sigma_{h1} \sigma_{h2}] \quad [36]$$

Onde  $\phi_D$  e  $\phi_h$  são os parâmetros de interação dispersiva parcial e ligação de hidrogênio, respectivamente. Isolando o parâmetro  $\phi_h$  ( $\phi_h$ ) desta equação, e tendo o termo entre parênteses sempre menor que zero, para que a entalpia da ligação de hidrogênio seja negativa, os resultados são:

$$\phi_h > 1 + \frac{\delta_{h1} \left(1 - \frac{\delta_{h2}}{\delta_{h1}}\right)^2}{2\delta_{h2}} \quad [37]$$

Para obter-se  $\Delta H_h < 0$ .

Equalizando a Eq. [29], a entalpia de mistura total, com a divisão das entalpias de mistura, Eqs. [34-37], obtém os parâmetros  $\phi_h$ .

Para os objetivos deste estudo, o parâmetro de solubilidade da dispersão foi calculado sozinho e não associado à solubilidade do componente polar, como no estudo de referência de Bulou e colaboradores [35]. Portanto, o componente polar, que foi fundido com o componente dispersivo da solubilidade ( $\delta_v$ ) no estudo citado, aqui se une ao parâmetro de ligação de hidrogênio, dando origem ao parâmetro de associação ( $\delta_a$ ), conforme descrito no

texto. Este arranjo mostrou-se mais compatível para os dados de entalpia em um estudo anterior dos autores [19]. Portanto, as equações desta seção também usam essas definições.

### 3.5.2. Parâmetros de solubilidade tridimensional ajustados para tensão superficial

Como forma de ajustar os 3DSP aos componentes de tensão superficial parcial, estamos propondo a utilização de um número DiPEVa (DIP #), que é um número resultante de uma fórmula que correlaciona parâmetros de solubilidade parcial na seguinte expressão:

$$\delta_p > \delta_H \rightarrow DiP\# = 1 + \frac{1}{\delta_D} \log\left(\frac{\delta_p}{\delta_H}\right) \quad [18a]$$

$$\delta_H \leq \delta_p \rightarrow DiP\# = 1 + \frac{1}{\delta_D} \log\left(\frac{\delta_H}{\delta_p}\right) \quad [18b]$$

Por definição, o número DiPEVa é inversamente correlacionado com a tensão superficial:[16

$$DIP\# \approx \left(\frac{1}{\sigma_L}\right) \quad [19]$$

As equações [18a, 18b, 19] são usadas para ajustar os parâmetros de solubilidade parcial à tensão superficial total ( $\sigma_L$ ) usando um processo de otimização, que é elucidado mais adiante. Ambas as equações foram encontradas empiricamente. A otimização foi realizada no aplicativo Excel Solver™. Foi aplicado o processo de otimização “Generalized Reduced Gradient - GRG”.

# **CAPÍTULO 4. Determinação dos parâmetros de solubilidade da dispersão de nanopartículas de carbono usando o clássico Hansen e o novo método DiPEVa<sup>6</sup>**

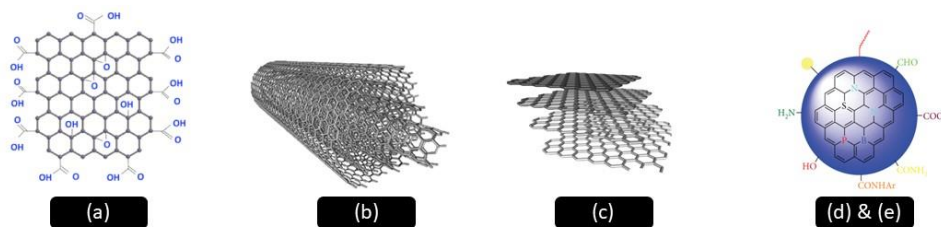
## **4.1. INTRODUÇÃO DO CAPÍTULO 4**

Os parâmetros de solubilidade de Hansen (HSP) são o método padrão para avaliar a compatibilidade da fase dispersa com a fase contínua, sejam moléculas ou cargas inorgânicas. Recentemente, o método DiPEVa, que é um método de parâmetros de solubilidade tridimensional (3DSP) ajustado à tensão superficial, foi proposto na literatura [19], [34]. Devido à existência de dois métodos semelhantes, o presente estudo visa realizar uma comparação entre ambos os métodos usando NPs de carbono, como óxido de grafeno, pontos quânticos de carbono (obtidos por pirólise por micro-ondas de microalgas espirulina e reação entre ácido cítrico e etilenodiamina), nanoplaquetas de grafeno e nanotubos de carbono. Vai ser feita a avaliação da dispersibilidade pelo métodos de Hansen e DiPEVa.

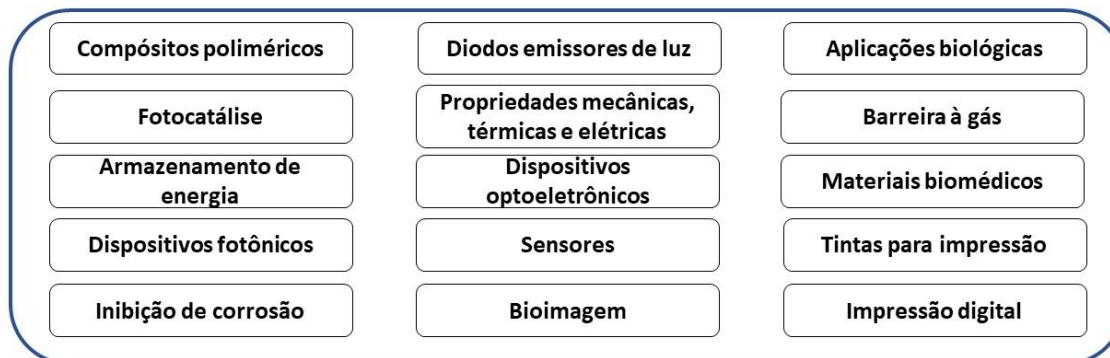
Existem muitos tipos diferentes de nanopartículas disponíveis no mercado. Dentre elas, as NPs de carbono ganharam considerável destaque nos últimos anos. O grafeno, por exemplo, tem gerado nos últimos anos grande interesse em diversos grupos de pesquisa ao redor do mundo devido às suas propriedades térmicas, elétricas, reológicas, tribológicas distintas. As aplicações potenciais deste material são amplas, variando de compósitos poliméricos, armazenamento de energia, inibição de corrosão, aplicações biológicas, barreira à gases e dispositivos fotônicos [13], [14], [16], [18], [30], [61], [62].

---

<sup>6</sup> Artigo sob revisão na revista Molliq/ 2023 intitulado: “Comparison of methods for determination of carbon nanoparticles solubility parameters using the classic Hansen and the DiPEVa methods” [63].



## APLICAÇÕES DE NANOPARTÍCULAS DE CARBONO



**Figura 21.** Aplicações potenciais de nanopartículas de carbono [63]. Legenda das figuras. (a) Óxido de grafeno (GO), (b) nanotubos de carbono, (c) Nanoplaquetas de grafeno, (d) & (e) Pontos quânticos de carbono, CQDs (1)&(2) .

As NPs são utilizadas em aplicações, resumidamente, que objetivam:

- Nanotubos de carbono: propriedades mecânicas, térmicas e elétricas excepcionais.
- Pontos quânticos de carbono (CQDs): fluorescência e e fotoestabilidade.
- Grafeno: térmicas, elétricas, reológicas, tribológicas.

Essas partículas podem ser utilizadas em compósitos com diversos polímeros, tais quais acrílicos, acrilonitrila, vinílicos, poliéter cetona (PEEK), poliuretano, epóxi, poliestireno, policarbonato e poliamida, entre outros [14], [64]. Os nanotubos de carbono (CNTs) possuem propriedades mecânicas, térmicas e elétricas excepcionais. No entanto, dispersar homogeneamente os CNTs na maioria dos solventes orgânicos, ou em água, é muito desafiador [21], [65]. Entre os outros NPs de carbono, os pontos quânticos de carbono (CQDs) exibem fluorescência e outras propriedades únicas, o que permite seu uso em aplicações como bioimageamento, dispositivos optoeletrônicos, materiais biomédicos, sensores, tintas de impressão, impressões digitais, fotocatalise e diodos emissores de luz [66],



[67]. Já o grafeno também é aplicado na forma de compósito em aplicações de revestimentos, bioimageamento, dispositivos optoeletrônicos, materiais biomédicos, sensores, tintas de impressão e supercapacitores [68]. Em geral, são pretendidas melhorias nas propriedades mecânicas, térmicas, elétricas ou ópticas. Não há dúvida de que as propriedades alcançadas estão relacionadas ao grau de dispersão e distribuição da carga na matriz composta. Para cada uma dessas NPs, o conhecimento dos 3DSP e da tensão superficial é um pré-requisito, como será discutido no presente estudo.

Uma das formas mais difundidas de se obter esses materiais com boa qualidade é a esfoliação e a dispersão em fase líquida (relevante para métodos de sonicação e cisalhamento), que requerem a seleção de solventes [68]. O grafeno pode ser obtido em larga escala através do uso de moinho de bolas, esfoliando nanoplaquetas de carbono por meio da sua interação com solventes. Por conta disso, diversos estudos têm sido direcionados para definir os parâmetros de solubilidade do grafeno a fim de selecionar o solvente ou carga ideal a ser aplicada no processo ou no produto final [16], [29], [69].

As interações do solvente com o grafeno têm sido racionalizadas nos estudos na literatura em termos de energias de superfície e parâmetros de solubilidade de Hansen; no entanto, há problemas com ambas as abordagens [29], [69], [70]. Algumas moléculas consideradas como bons solventes para dispersão de grafeno são: n-metil pirrolidona (NMP), dimetil sulfóxido, N,N-dimetilformamida (DMF), gama-butirolactona (GBL) e H<sub>2</sub>O, em ordem decrescente de eficácia [29]. Alguns estudos referem o uso do moinho de bolas para esfoliamento de grafite em uma ampla variedade de solventes orgânicos, incluindo moléculas como etanol, formamida, acetona, tetrahydrofurano (THF), tetrametil uréia (TMU), DMF e NMP. Esses autores propuseram que os solventes DMF, NMP e TMU são solventes desejáveis, tendo as tensões superficiais correspondentes às das folhas de grafeno [69]. Além disso, solventes ecológicos podem ser usados para fins de dispersão e esfoliação do grafeno, como a molécula Cyrene®. Segundo a literatura, nem os parâmetros de solubilidade nem a tensão superficial podem ser usados exclusivamente para selecionar solventes para uso em NPs de carbono [30], [71]. Assim, no presente estudo, pretendemos usar os 3DSP ajustados à tensão superficial para descobrir o valor preditivo desse método em avaliar a dispersibilidade de NPs de carbono em solventes.

Do ponto de vista da termodinâmica, a compatibilidade da carga e da matriz polimérica domina a dispersão da carga e as interações carga-matriz. O solvente dissolve o polímero e dispersa a carga, assim é um elo de ligação entre ambos. Como consequência, é importante estudarmos a compatibilidade do grafeno, ou outras NPs, com cada possível polímero aplicado a compósitos [62].

O objetivo do presente estudo é comparar a dispersão de nanopartículas de carbono usando dois métodos de 3DSP diferentes. Cinco representantes de NPs de carbono foram selecionados: óxido de grafeno, pontos quânticos de carbono (obtidos por pirólise em microondas da microalga espirulina ou por reação entre ácido cítrico e etilenodiamina), nanoplaquetas de grafeno e nanotubos de carbono. Os métodos selecionados para avaliar a dispersão foram o HSP, considerado o padrão-ouro, e a nova alternativa chamada de parâmetros de solubilidade DiPEVa. Os resultados obtidos por cada método incluíram o centro da esfera de dispersão, em valores de parâmetros de solubilidade, o raio de interação da esfera, o DataFit, que é a medida de precisão tradicional do HSP e dados percentuais de mal ajustados (*outliers*). A otimização dos parâmetros de solubilidade, utilizando o clássico HSP e o método DiPEVa, foi realizado com o método descrito na literatura, visando a maximização do DataFit [2]–[4], [19], [34].

Espera-se que seja possível comparar a precisão dos resultados de cada método em termos de dispersibilidade das NPs de carbono. Uma melhor dispersibilidade de NPs de carbono em solventes pode ser útil no projeto de rotas de preparação aprimoradas para nanocompósitos e outras aplicações usando NPs de carbono.

## **4.2. EXPERIMENTAL**

### **4.2.1. Materiais**

Foram analisados cinco NPs de carbono (óxido de grafeno, nanotubos de carbono, nanoplaquetas de grafeno e pontos quânticos de carbono -obtidos por pirólise por microondas da microalga espirulina ou pela reação entre ácido cítrico e etilenodiamina). As três primeiras foram utilizadas conforme obtidas dos fornecedores e estão descritas a seguir, enquanto as duas últimas foram produzidas pelos autores e o processo será detalhado a seguir.

(a) Óxido de grafeno (GO) foi sintetizado com baixa densidade de defeitos a partir de grafite natural pelo método de Hummer modificado [72], [73]. O material foi obtido no Center for Advanced 2D Materials (CA2DM), National University of Singapore, 6 Science Drive 2, Singapore 117546.

(b) Nanotubos de carbono de múltiplas paredes (CNTs - número CAS 308068-56-6, produzidos em arco, diâmetro = 2–50 nm, comprimento  $\geq 2$  micras (nanotubos de 55–65% em peso). Fornecido por Strem Chemicals, Inc. 7 Mulliken Way, Newburyport, MA 01950, EUA.

(c) Nanoplaquetas de grafeno (número CAS 1034343-98-0, com 6–8 nm de espessura e 25  $\mu\text{m}$  de diâmetro, densidade aparente 0,3–1  $\text{g}/\text{cm}^3$ , área de superfície dentro de 120–150  $\text{m}^2/\text{g}$ , com  $> 99,5\%$  C,  $<1\%$  O e conteúdo ácido residual de 0,5%, de acordo com as informações do fabricante) foram obtidos da Strem Chemicals, Inc. 7 Mulliken Way, Newburyport, MA 01950, EUA.

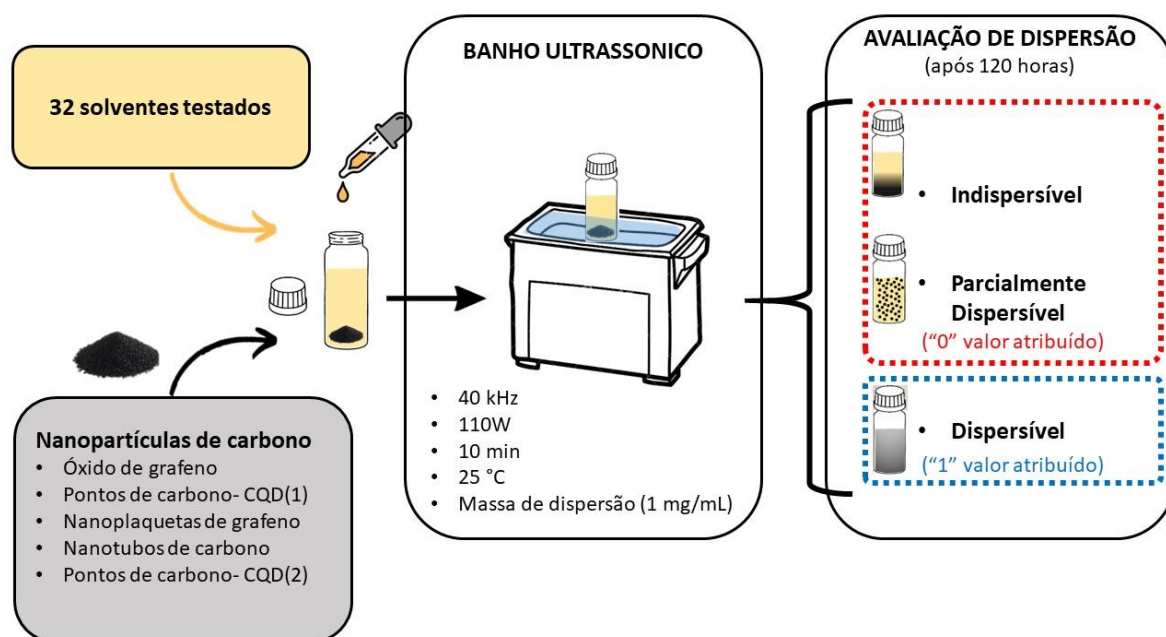
(d) Os CQDs (1) foram sintetizados por pirólise assistida por micro-ondas de ácido cítrico na presença de etilenodiamina [67]. Resumidamente, CA e EDA na proporção molar de 1:1 foram dissolvidos em 10 mL de água destilada. A mistura foi sonicada por 2 min para formar uma solução transparente. A solução foi então irradiada por 6 min em forno de micro-ondas doméstico (650 W). O sólido marrom avermelhado resultante foi dissolvido e dialisado contra água ultrapura através de uma membrana de diálise (MWCO de 100 kDa) por 3 dias. Após a diálise, a solução obtida foi liofilizada para produzir CQDs em pó.

(e) Os CQDs (2) foram sintetizados por pirólise da biomassa espirulina, na forma de pó seco, comprada da Galena Química e Farmacêutica Ltda, Campinas, Brasil, a 300 °C por 2 h sob uma taxa de aquecimento de 10 °C.min<sup>-1</sup> em forno tubular convencional [66]. Após a carbonização, o pó fino foi disperso em água (20 mL) e então centrifugado a 13.000 rpm por 15 min para remover as impurezas sólidas suspensas. Finalmente, os CQDs foram obtidos por evaporação do solvente.

Todos os solventes utilizados eram de grau analítico e todos os outros produtos químicos foram usados como recebidos. Água ultrapura ( $\geq 18,25 \text{ M}\Omega \text{ cm}$ ) foi utilizada em todos os experimentos.

#### 4.2.2. Avaliação da dispersão das nanopartículas de carbono

O pó de nanopartículas de carbono foi disperso em 32 solventes orgânicos, cobrindo uma ampla faixa de polaridade (ver Figura 22). Em todos os casos, 4 mg de pó de NPs de carbono foi colocado em frasco de vidro transparente (5 mL) com tampa de rosca e depois adicionado 4 mL de solvente para diluição (concentração de massa = 1 mg/mL). As amostras de dispersão de nanocarbono foram então submetidas a banho ultrassônico à temperatura ambiente (25 °C) durante 10 minutos. Equipamento de ultrassom: Unique®, modelo Ultracleaner 1400A, frequência de trabalho 40 kHz, potência 110 W. Se o solvente fosse incompatível, o pó permanecia como sedimento mesmo após 120 h de agitação. Para avaliação da dispersibilidade do pó nanoparticulado, o estado final da dispersão foi classificado como: não dispersível, parcialmente dispersível ou dispersível.



**Figura 22.** Dispersão de nanopartículas de carbono no processo de solventes orgânicos [63].

A **Tabela 8** mostra os compostos orgânicos selecionados para o estudo. O volume molar ( $V$ ) e os parâmetros de solubilidade de Hansen ( $\delta_D$ ,  $\delta_P$ ,  $\delta_H$ ) foram retirados do manual de parâmetros de solubilidade de Hansen [3] (VER MATERIAL SUPLEMENTAR- ANEXO 3). A tensão superficial experimental foi retirada do estudo clássico de Jasper [46]. Os

parâmetros DiPEVa foram retirados de estudos anteriores ou calculados para o presente estudo usando o método descrito na literatura [19].

### 4.2.3 Otimização por algoritmo genético

A dispersibilidade das NPs de carbono foi avaliada pelo método de avaliação de solubilidade de Hansen, mas adaptado para estudo da dispersão da nanocarga. O estado de dispersibilidade de cada NP de carbono em cada solvente avaliado foi usado para construir a esfera de dispersibilidade 3D usando um método de algoritmo de otimização previamente validado [4]. A seleção do melhor 3DSP individual após vários ciclos de iteração do algoritmo (a evolução), é guiada de acordo com o objetivo da maximização do DataFit. Portanto, o valor DataFit foi o parâmetro escolhido de aptidão individual. Este processo evolutivo se repete ciclicamente até que o DataFit seja superior a um fator de tolerância (baseado em testes anteriores). Ao final, o melhor indivíduo fornece os parâmetros ideais de solubilidade, raio da esfera e porcentagem de *outliers* para a dispersão das NPs carbono. Para manter o raio da esfera de dispersibilidade o menor possível, foi multiplicado um fator de tamanho pequeno ao DataFit, que atua diminuindo-o em função de  $R_0$ , conforme descrito no estudo citado [4].

Os dados de entrada para os processos de otimização são apresentados na **Tabela 9** (VER MATERIAL SUPLEMENTAR- ANEXO 3). Uma lista de 32 solventes com seus 3DSPs conhecidos ( $\delta_{Di}$ ,  $\delta_{Pi}$ ,  $\delta_{Hi}$ ), sejam parâmetros de solubilidade de Hansen ou de DiPEVa, para os quais existam dados experimentais, denominados numericamente ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) e a correlação com seus fatores de dispersibilidade ( $D_i = 0, 1$ ). Os estados de dispersibilidade são dispersíveis, parcialmente dispersíveis ou não dispersáveis, o que indica o grau de interação entre a NP e cada solvente foi selecionado. Zero é atribuído a não dispersante ou parcialmente dispersante, enquanto 1 é atribuído a solventes dispersantes. Essa estratégia, corroborado pelo grupo de Hansen, ao restringir o número de solventes com valor 1, diminui o tamanho da esfera e melhora a acurácia [3]. Ao restringir aos melhores solventes (e dispersantes), pode reduzir a sensibilidade, por não pegar alguns solventes verdadeiros, mas melhora a especificidade, ou a certeza que os bons solventes estão dentro e os maus solventes estão fora. Mas se poderia também optar por considerar como solventes (=1) tanto os

dispersáveis e os parcialmente dispersáveis e estaria correto também. Para a dispersibilidade das NPs de carbono, uma concentração constante do soluto foi diluída nos solventes dispersantes, compreendendo 32 solventes orgânicos diferentes, de várias classes químicas distintas. O banco de dados inclui moléculas próticas a aprólicas, lineares a ramificadas, cíclicas, aromáticas, moléculas pequenas e maiores, água e álcoois polihídricos. Os parâmetros físico-químicos de cada solvente utilizados para calcular os 3DSP das moléculas foram a tensão superficial a 25 °C ( $\text{mN}\cdot\text{m}^{-1}$ ), momento dipolar ( $\mu$ ), constante dielétrica experimental ( $\epsilon_r$ ), razão do número de coordenação ( $Z_s\cdot Z^{-1}$ ) e os parâmetros derivados deles.

### 4.3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

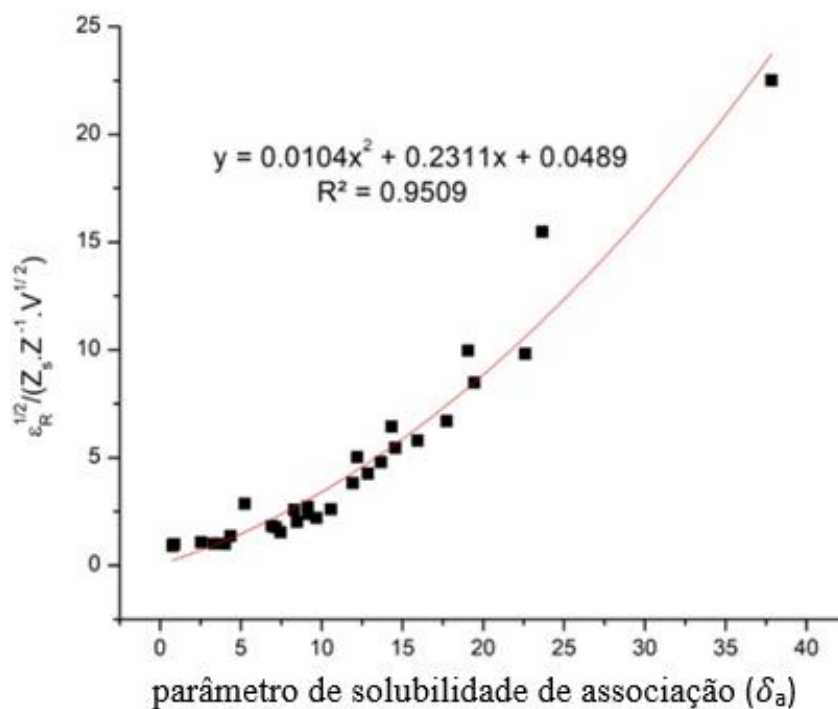
De acordo com a literatura, o óxido de grafeno possui vários grupos funcionais tais quais hidroxila, epóxi, carboxila e carbonila [72], [73]. Não há descrição do fabricante do CNT sobre os grupos funcionais presentes. Em relação às nanoplaquetas de grafeno, segundo o fornecedor, estão presentes os seguintes grupos funcionais: amina, imina, carbonila, hidroxila, carboxila, pirona e lactona. De acordo com a literatura, os CQDs possuem grupos funcionais hidroxila, carboxila, amino e amida [66], [67]. Sabe-se que os grupos funcionais de superfície podem determinar as propriedades de dispersibilidade das NPs [74], [75]. Muitos tipos de técnicas de modificação de superfície, tais quais moagem mecânica, ligação covalente de grupos funcionais ou adsorção não covalente de moléculas mediadoras, têm sido sugeridas para melhorar a dispersibilidade de NPs, principalmente, em meios solventes [75]. Os 3DSP das NPs de carbono são, portanto, dependentes dos grupos funcionais presentes nas partículas. Grupos funcionais podem ser caracterizados e quantificados por técnicas como xps, ftir, nmr e espectroscopia, que, no entanto, são limitadas ao fornecer informações sobre o comportamento da solubilidade em ambientes reais. A determinação dos 3DSP das NPs de carbono é uma forma prática e qualitativa de explorar a presença de grupos funcionais, que respondem proporcionalmente à presença deles.

Após 50 iterações do algoritmo evolutivo, os melhores valores do centro das esferas 3DSPs foram determinados juntamente com o maior DataFit e o menor  $R_0$ . Os resultados alcançados com o método de otimização são apresentados na **Tabela 10** (VER MATERIAL SUPLEMENTAR- ANEXO 3).

Como tendência geral, o raio de interação tendeu a ser menor no método HSP. Isso era esperado devido ao fato de que solventes miscíveis com água geralmente possuem parâmetros polares ( $\delta_P$ ) e de ligação de hidrogênio ( $\delta_H$ ) maiores no método DiPEVa quando comparados ao HSP. Em muitos casos, como no caso dos solventes apróticos polares, como dimetilsulfóxido e dimetilformamida ou nos glicóis e na água, o componente dispersivo ( $\delta_D$ ) do 3DSP também é maior quando comparado às moléculas apolares e de álcool. Por essa particularidade desse método, esses raios de interação tendem a ser maiores.

Os 3DSP são conceitualmente derivados de uma base físico-química. Estão relacionados a dados empíricos como entalpias, volume molar, momento de dipolo, constante dielétrica, tensão superficial e seus componentes [3], [4], [19], [34]. Os 3DSP derivados do método DiPEVa estão relacionados a esses parâmetros físico-químicos com alto grau de precisão.

Na figura a seguir, o componente associativo ( $\delta_a$ ) do parâmetro de solubilidade DiPEVa é comparado à constante dielétrica ( $\epsilon_r$ ) usando o banco de dados do presente estudo.



**Figura 23.** Correlação entre o componente de associação do parâmetro de solubilidade ( $\delta_a$ ) do método DiPEVa e a constante dielétrica ao quadrado, ajustada pela razão entre o número de coordenação e o produto de volume ao quadrado ( $\frac{\epsilon_R^{1/2}}{Z \cdot V^{1/2}}$ ) [63].

Conforme a figura 23, no método DiPEVa, o componente de associação do parâmetro de solubilidade ( $\delta_a$ ) foi altamente correlacionado com a constante dielétrica. Essa relação foi descrita pela primeira vez para o HSP na equipe de Hansen, mas não foi ajustada para a razão do número de coordenação [76].

Por outro lado, o componente polar do parâmetro de solubilidade ( $\delta_P$ ) está linearmente correlacionado com o momento de dipolo e o produto de volume ao quadrado ( $\mu \cdot V^{-1/2}$ ). A fórmula linear é:  $y = 0,0531x - 0,0137$ .  $R_2 = 0,9998$  (98,98%). Essa correlação é equivalente àquela obtida no método HSP, mas nesse caso também é ajustado para a razão do número de coordenação.

Ambos os parâmetros físico-químicos, momento de dipolo e a constante dielétrica, estão relacionados com a polaridade do solvente e são importantes para a dispersão das NPs de carbono, conforme será discutido a seguir. A utilização do método DiPEVa reforça a precisão da avaliação da polaridade nesses casos, tendo em vista a maior correlação dos dois parâmetros de solubilidade ( $\delta_P$  e  $\delta_H$ ) com a constante dielétrica.

Os parâmetros físico-químicos citados são relevantes para métodos de processamento por micro-ondas pois alta constante dielétrica é pré-requisito para aquecimento no método [37], [76]. Esses parâmetros também são importantes para a esfoliação de nanoplaquetas, por exemplo [16]. Assim, um método que tenha uma melhor correlação com a constante dielétrica e o momento de dipolo é importante nessas aplicações.

A tensão superficial não foi comparada porque, devido ao processo de otimização do método DiPEVa, a correlação aproxima-se de 100% [19], [34]. Sabe-se que a tensão superficial também é importante para aplicações de nanodispersão [13]–[21]. Portanto, espera-se que estudos de dispersão de cargas, como esse, principalmente visando aplicações que utilizam solventes à base de água, confirmem esses bons resultados, sabendo-se que os HSPs foram originalmente desenvolvidos para aplicações em tintas à base de solventes oleosos. Os autores, portanto, propõem que o método seja relevante para aplicações que dependam não apenas de fenômenos de tensão superficial ou interfacial, mas também de



propriedades dielétricas, como processamento de micro-ondas e esfoliação de nanoplaquetas. [36], [37].

Os parâmetros de solubilidade de Hansen variam não só para cada NP de carbono produzidas por diferentes métodos de produção, mas também devido à modificação química e funcionalização [75]. Portanto, é importante calcular os valores de HSP do material usado em cada pesquisa específica, embora as tendências gerais também sejam valiosas. Existem poucos artigos que incluem o HSP calculado experimentalmente para NPs de carbono.

Através de um levantamento da literatura, foram obtidos os seguintes valores de HSP: O HSP para o óxido de grafeno foi encontrado como ( $\delta_D = 16,50$ ,  $\delta_P = 13,50$ ,  $\delta_H = 26,60$ ,  $\delta_T = 34,10$ ) e para o rGO ( $\delta_D = 17,60$ ,  $\delta_P = 9,17$ ,  $\delta_H = 9,05$ ,  $\delta_T = 21,90$ ) em  $\text{MPa}^{1/2}$  [77]. No presente estudo, apenas o óxido de grafeno foi testado. Os resultados obtidos pelos métodos de Hansen e DiPEVa foram bastante compatíveis. Os resultados também foram comparáveis com a literatura, embora o artigo citado proponha um valor maior para o parâmetro de ligação de hidrogênio ( $\delta_H = 26,60$  Vs  $10,15$  or  $7,14 \text{ MPa}^{1/2}$ , respectivamente). O resultado obtido neste estudo foi mais compatível com o da literatura sobre o rGO, em ambos métodos. (Ver Tabela 10), o que pode significar que os NPs testados neste estudo tinham menos grupos funcionais polares. Neste caso específico, o DiPEVa obteve um DataFit maior (0,83 contra 0,95), o que significa que é mais preciso neste banco de dados específico. Ao contrário do grafeno puro, o óxido de grafeno (GO) é capaz de formar dispersões estáveis em água e alguns solventes orgânicos, o que é possível graças à forte ligação de hidrogênio estabelecida entre grupos funcionais do GO e as moléculas dos solventes. A energia da ligação de hidrogênio entre os grupos funcionais do GO e as moléculas do solvente diminui na sequência: água > metanol > etanol [15]. Neste caso, o melhor ajuste dos álcoois e da molécula de água no modelo DiPEVa pode ter beneficiado este modelo, que alcançou um valor DataFit maior.

Após um amplo estudo, compreendendo a análise de 40 solventes, foi sugerido que os bons solventes para grafeno deveriam ter um HSP próximo a  $\delta_D = 18,0 \text{ MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_P = 9,3 \text{ MPa}^{1/2}$ , e  $\delta_H = 7,7 \text{ MPa}^{1/2}$ . Usando esses parâmetros de solubilidade, a ciclopentanona e a ciclohexanona foram sugeridas como bons solventes para a dispersibilidade do grafeno [61]. Mas também clorofórmio e isopropanol, que têm baixos pontos de ebulição, podem ser usados [70]. Vale ressaltar que esse valor para o grafeno é semelhante ao citado anteriormente

para o rGO [77]. Isso era esperado, pois o rGO possui menos grupos funcionais devido ao processo aplicado em sua produção. Claramente, bons solventes para grafeno têm  $15 \text{ MPa}^{1/2} < \delta_D < 21 \text{ MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_P \sim 12 \text{ MPa}^{1/2}$  e  $\delta_H \sim 9 \text{ MPa}^{1/2}$ , respectivamente. Apesar de sua aparente natureza não polar prevista pela base teórica, os bons solventes para esfoliação de grafeno têm valores de  $\delta_P$  e de  $\delta_H$  diferentes de zero [70], [78]. Essa premissa de que as moléculas apolares possuem  $\delta_P$  e  $\delta_H$  nulos, como é o caso dos alcanos no caso do método HSP, não se aplica ao conceito DiPEVa. Os autores Coleman e Hernandez e colegas também apontaram essa aparente contradição e sugeriram que havia inadequação dos HSP a esse respeito [70], [78]. Além disso, tanto Son e colaboradores quanto Park e colegas relataram que a dispersão do grafeno estava relacionada com os valores de  $\delta_P$  e  $\delta_H$  [79], [80]. Os resultados das nanoplaquetas de grafeno, calculados neste estudo com o método de HSP, foram muito semelhantes:  $\delta_D = 18,08 \text{ MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_P = 9,66 \text{ MPa}^{1/2}$  e  $\delta_H = 8,48 \text{ MPa}^{1/2}$ . Fora esses, os valores obtidos no método DiPEVa foram diferentes:  $\delta_D = 18,26 \text{ MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_P = 19,91 \text{ MPa}^{1/2}$ , e  $\delta_H = 1,0 \text{ MPa}^{1/2}$ . Esses resultados merecem algumas considerações. Em primeiro lugar, o DataFit do DiPEVa é maior que o do HSP (0,69 Vs 0,90), enquanto os *outliers* são menores (18 Vs 15,6 %). Ambos os resultados são melhores no caso do método DiPEVa; portanto, neste caso, o DiPEVa foi mais preciso. Por outro lado, o raio de interação é menor no caso HSP (5,38 Vs 17,95). Qual poderia ser a razão para este achado? Os parâmetros de solubilidade DiPEVa de moléculas miscíveis com água, moléculas com alto momento de dipolo e constante dielétrica, são maiores do que do tradicional HSP. Isso é particularmente verdadeiro para os parâmetros polares ( $\delta_P$ ) e de ligação de hidrogênio ( $\delta_H$ ) de moléculas polares. O componente dispersivo ( $\delta_D$ ) nas moléculas miscíveis com água, como álcoois poliidrícos, água, solventes apróticos polares, como DMF e DMSO, e glicóis também são maiores. O maior raio de interação é, portanto, devido a esses 3DSP individuais mais altos. Neste caso, a precisão do método, o DataFit e *outliers* são os fatores desejáveis, pois são medidas de precisão do método e não o menor raio de interação.

Em muitas aplicações que requerem a combinação de propriedades funcionais que cada NP de carbono possui, é possível combiná-las. Por exemplo, CQDs podem ser usados para obter dispositivos antifraude, enquanto o óxido de grafeno resulta em boas propriedades mecânicas em polímeros polares. Os CNT podem resultar em boas propriedades elétricas. Assim, a combinação de múltiplas NPs pode resultar em materiais funcionais com

propriedades ajustáveis. Nesse contexto, o método DiPEVa é mais um método que pode ser utilizado para prever a miscibilidade entre os componentes de uma formulação.

Conhecer os 3DSP que dissolvem um polímero, ou que dispersam uma carga inorgânica, é fundamental porque esse conhecimento pode ser usado para selecionar os solventes aplicados na formulação ou método de produção. Além disso, um aditivo, como um plastificante, um antioxidante, um compatibilizante ou um protetor UV pode ser melhor selecionado com o conhecimento dos 3DSP do polímero, da carga e do aditivo polimérico. Portanto, para produzir um compósito polimérico, o conhecimento correto desses 3DSP é essencial.

Isso vale também para a obtenção de um material híbrido, composto por duas diferentes cargas de NPs, em que o conhecimento dos 3DSP de cada material também é benéfico. Por exemplo, a esfera de dispersibilidade de Hansen apresentada na Tabela 10 pode ser aplicada para prever esta combinação de NPs híbridas. Com base nos valores de DiPEVa obtidos, pode ser uma combinação de óxido de grafeno e CQDs de espirulina, ou nanoplaquetas de grafeno e CNT. Em ambos os materiais híbridos, em teoria, uma boa miscibilidade pode ser prevista pela semelhança dos 3DSP calculados.

Para o propósito desta discussão, vamos nos concentrar nas duas NPs de carbono com os resultados 3DSP mais díspares. Em relação aos falsos solventes obtidos na otimização, no caso dos CQDs, o HSP obteve os seguintes solventes: éter dietílico, acetato de butila, acetato de etila, tolueno, acetato de metila, fenilmetanol e água. Por outro lado, o método DiPEVa julgou mal o 1,2-dicloroetano, mas não julgou mal nem fenilmetanol nem a água. Nos demais solventes houve concordância. A indicação correta da água é importante por ser considerado o solvente universal e também porque, atualmente, há uma migração para tecnologias à base de água na indústria, devido a preocupações ambientais. O solvente água tem pelo menos três valores de HSP oficiais diferentes, e esse solvente é tão problemático que merece um capítulo separado no manual de parâmetros de solubilidade de Hansen [3], [7]. Por esta razão, para o cálculo da esfera de solubilidade, o grupo de Hansen sugere-se não incluir H<sub>2</sub>O no cálculo [3], [81]. Por outro lado, no método DiPEVa pode-se incluir a água em vários cálculos sem distorções de resultados..

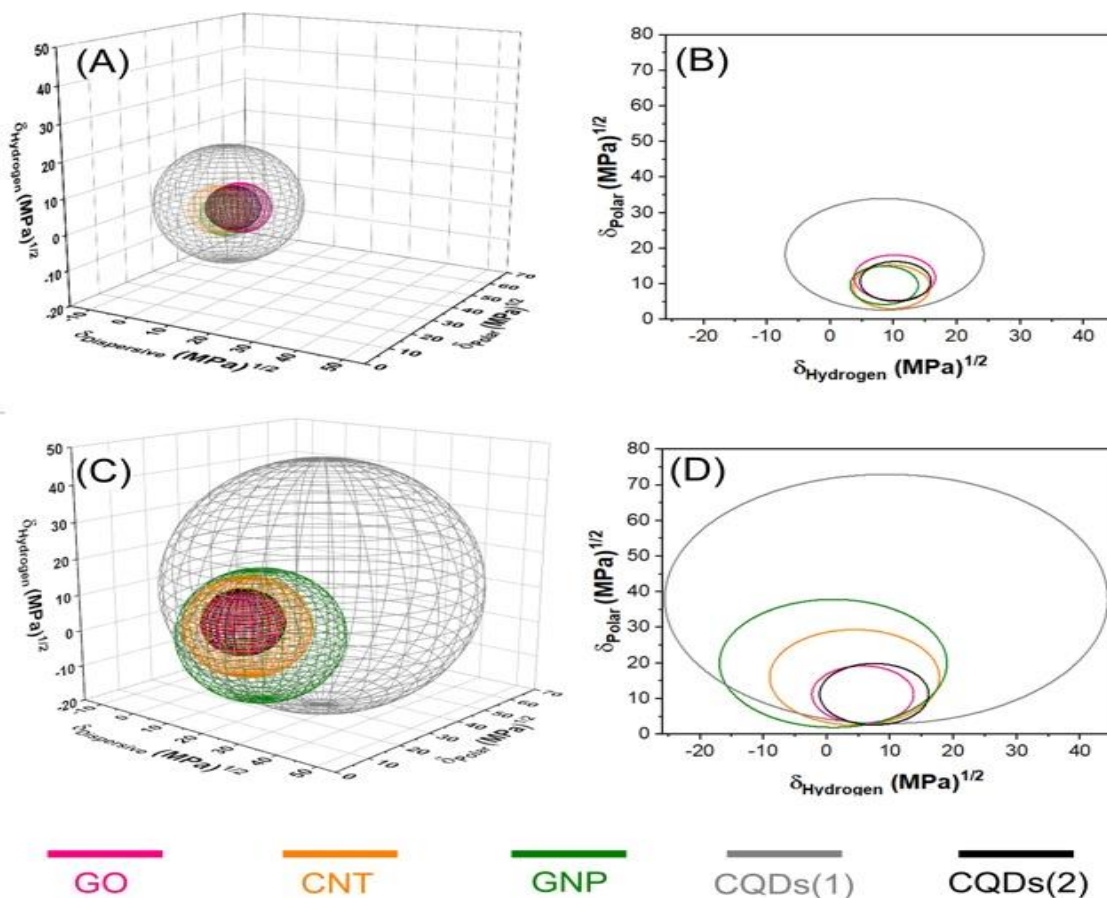
Em relação às nanoplaquetas de grafeno, o método de Hansen julgou mal o dietilenoglicol e o 1,2-dicloroetano, enquanto o método DiPEVa julgou mal a metiletilcetona.

Nos demais solventes houve concordância. Neste segundo caso, vale observar também a correta indicação do solvente dietileno glicol, que também é miscível em água.

Por esses motivos, o presente estudo apontou o método DiPEVa como mais preciso na avaliação de solventes miscíveis com água e na própria água do que o HSP, tendo um valor de DataFit maior nesses casos. Os solventes miscíveis com água têm maiores parâmetros de solubilidade polar ( $\delta_P$ ) e de ligação de hidrogênio ( $\delta_H$ ) do que os miscíveis em óleo, como já ressaltado. Isto também justifica o maior raio de interação para incluir esses solventes.

Devido a essas considerações, o presente estudo demonstrou que o método de parâmetros de solubilidade DiPEVa, além de apresentar uma excelente correlação com os parâmetros físico-químicos, incluindo constante dielétrica e tensão superficial, classifica melhor os solventes de métodos à base d'água em suas otimizações [19], [34]. Como esses solventes tendem a ser preferidos devido à preservação do meio ambiente, o método é relevante para a ciência e para a indústria.

Com o objetivo de elucidar as esferas 3D geradas a partir de diversas NPs de carbono, várias figuras são apresentadas a seguir. As esferas de dispersibilidade 3D e 2D de todas as NPs de carbono são apresentadas na figura 4 abaixo para se ter um panorama comparativo entre todas elas.



**Figura 24.** (a) Projção 3D e (b) 2D da esfera de dispersibilidade de NPs de carbono usando o método HSP. (c) Projção 3D e (d) 2D da esfera de dispersibilidade de NPs de carbono usando o método DiPEVa. Cada NPs de carbono é representado em cores diferentes [63].

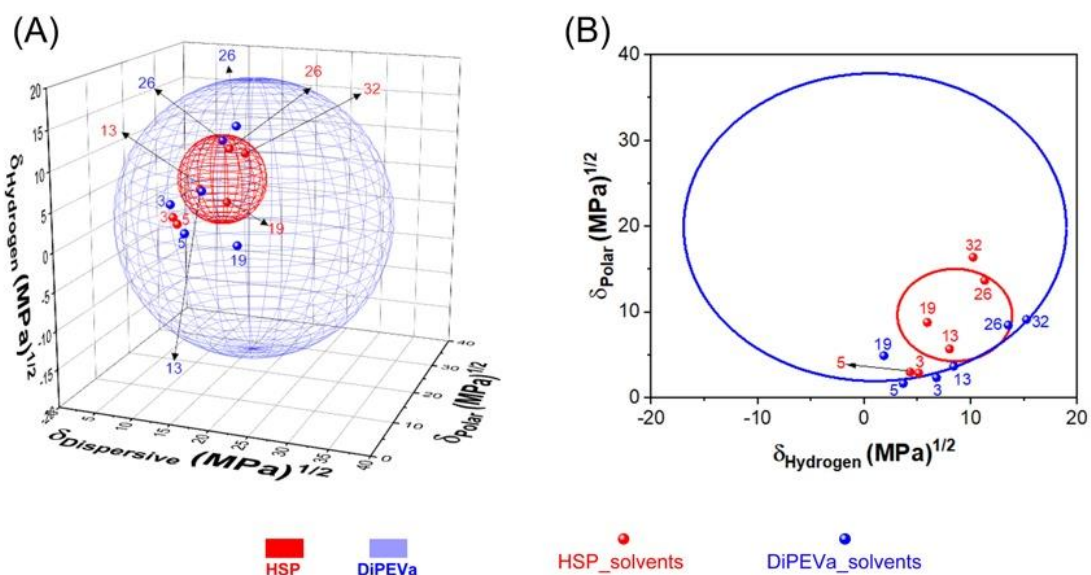
A figura 24 mostra que nas esferas de dispersibilidade, obtidas tanto com o uso dos HSP quanto dos parâmetros DiPEVa, os CQDs (1) possuem um raio de interação muito maior que as demais NPs de carbono. Nas demais NPs de carbono, o método HSP gerou esferas muito semelhantes. No método DiPEVa, tanto GO e CQD (2), quanto CNT e GNP, possuem esferas mais próximas uma da outra.

As esferas de dispersibilidade das NPs de carbono obtidas neste estudo estão de acordo com a literatura, que também mostrou resultados de HSP muito polares, tanto nos componentes polares ( $\delta_P$ ) quanto nas ligações de hidrogênio ( $\delta_H$ ). Bergin e colegas

propuseram os seguintes HSP para dispersão de CNT:  $\delta_D = 17,8 \text{ MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_P = 7,5 \text{ MPa}^{1/2}$  e  $\delta_H = 7,6 \text{ MPa}^{1/2}$  [20].

Agora vamos discutir os casos específico das NPs de carbono. Para a dispersão de nanotubos de carbono, Detrich e colaboradores encontraram os seguintes HSP:  $\delta_D = 19 \text{ MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_P = 8 \text{ MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_H = 4 \text{ MPa}^{1/2}$ , respectivamente [65]. Devido à dificuldade em dispersar CNT, a solubilidade dos CNTs é muitas vezes realizada por modificação de superfície, o que leva a diferentes valores de HSPs dependendo do tipo de modificação [75]. No presente estudo, o método DiPEVa encontrou um DataFit maior em comparação com o método HSP, com os seguintes resultados dos 3DSP:  $\delta_D = 18,15 \text{ MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_P = 16,01 \text{ MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_H = 4,38 \text{ MPa}^{1/2}$  (Tabela 10).

Os resultados das demais NPs de carbono serão também avaliados graficamente.



**Figura 25.** (a) Projeção 3D e (b) 2D da esfera de dispersibilidade da GNP. Esfera vermelha e solventes = HSP, esfera azul e solventes = DiPEVa [63].

A Figura 25 compara as esferas de dispersibilidade da GNP com ambos os métodos. Neste caso específico, a esfera de dispersibilidade do método DiPEVa também foi maior que a do HSP. Por outro lado, o DataFit foi maior, o que mostra maior precisão. Na projeção 2D, pode-se observar dois bons solventes fora da esfera HSP (solvente 3 e 5), os quais são falsos-negativos do método. Os mesmos solventes estão praticamente sobrepostos na borda da esfera DiPEVa, mostrando seu melhor posicionamento. Sendo este posicionamento o que resultou em um DataFit maior.

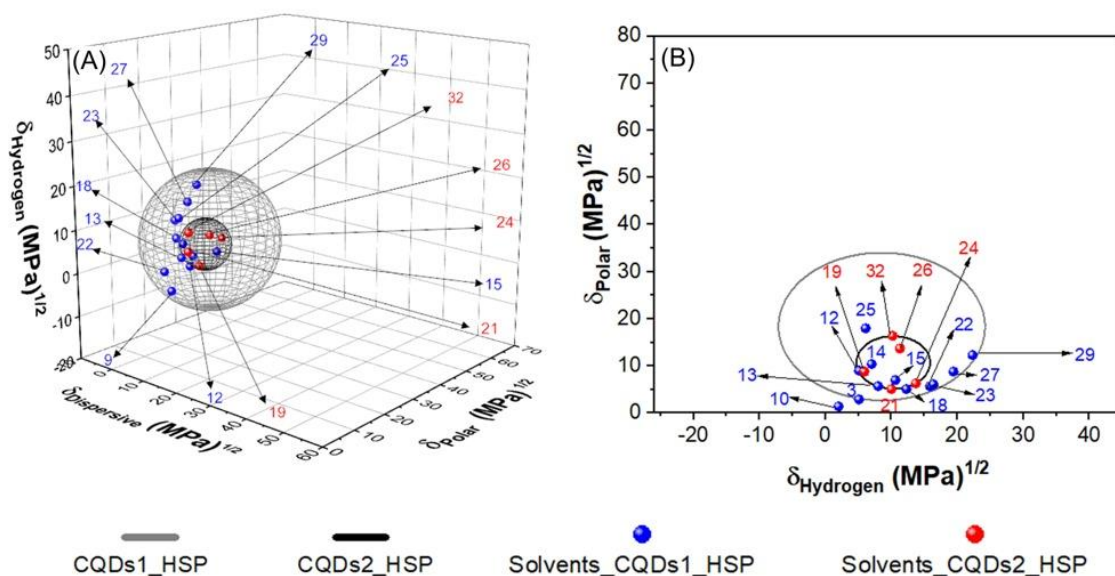
No presente estudo, assim como no caso do CNT, a literatura também aponta que solventes polares são bons solventes para NPs de grafeno. Em relação a isso, sabe-se que as esferas de dispersibilidade geradas dependem dos solventes utilizados. Um grande grupo de solventes foi usado, o que é positivo. Apesar disso, existem estudos com um número maior de solventes testados. Por exemplo, o grande estudo citado, com 40 solventes, sugeriu que os bons solventes para grafeno devem ter um HSP próximo a  $\delta_D = 18,0 \text{MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_P = 9,3 \text{MPa}^{1/2}$  e  $\delta_H = 7,7 \text{MPa}^{1/2}$  [61]. Outros estudos mostram resultados semelhantes. Claramente, bons solventes para grafeno têm  $15 \text{MPa}^{1/2} < \delta_D < 21 \text{MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_P \sim 12 \text{MPa}^{1/2}$  e  $\delta_H \sim 9 \text{MPa}^{1/2}$ , respectivamente. Apesar de sua aparente natureza não polar, os bons solventes para esfoliação de grafeno têm valores diferentes de zero de  $\delta_P$  e  $\delta_H$  [70], [78].

Para o caso específico da dispersão de nanofibras de grafeno, após testar um grande conjunto de solventes, um valor do parâmetro de ligação de hidrogênio ( $\delta_H \sim 14\text{--}16 \text{MPa}^{1/2}$ ) de HSP foi proposto [82]. Também foi proposto que solventes eficazes para o grafeno tinham tensões superficiais próximas a  $40 \text{mN.m}^{-1}$  [70], ou entre  $25\text{--}35 \text{mN.m}^{-1}$  no caso de nanofibras de grafite do tipo plaquetas [82]. Para dispersão de nanofibras de grafite do tipo plaquetas, também podem ser aplicados os solventes 1-butanol, etanol, álcool alílico ou ciclohexanol. Esses resultados da literatura mostram que as NPs do grafeno são muito polares, compatível com o presente estudo, e que geram esferas maiores de dispersibilidade.

Apesar da utilização de uma extensa base de dados no presente estudo, infelizmente, não foram testados alguns solventes polares importantes, como alguns dos álcoois citados nos referidos estudos, e principalmente solventes como gama-butirolactona e n-metil pirrolidona, que são considerados bons solventes para dispersão de grafeno. Da mesma forma, os solventes ciclopentanona ou ciclohexanona, descritos na literatura, também poderiam ter sido testados. A inclusão desses solventes provavelmente modificaria as esferas de dispersibilidade.

Decidiu-se também considerar como dispersantes apenas os solventes que dispersam completamente a NP e não os que os dispersam parcialmente. Estes foram considerados não dispersantes. Isso pode ter interferido na composição da esfera de dispersibilidade, mas é uma abordagem consolidada na técnica HSP. Portanto, acreditamos que os presentes resultados, de ambos os métodos, são compatíveis com a literatura.

As Figuras 26 e 27 apresentam os resultados da avaliação dos CQDs, comparando-se as esferas 3D e 2D de tanto CQD (1) quanto CQD (2). O caso do método HSP é mostrado na Figura 26.

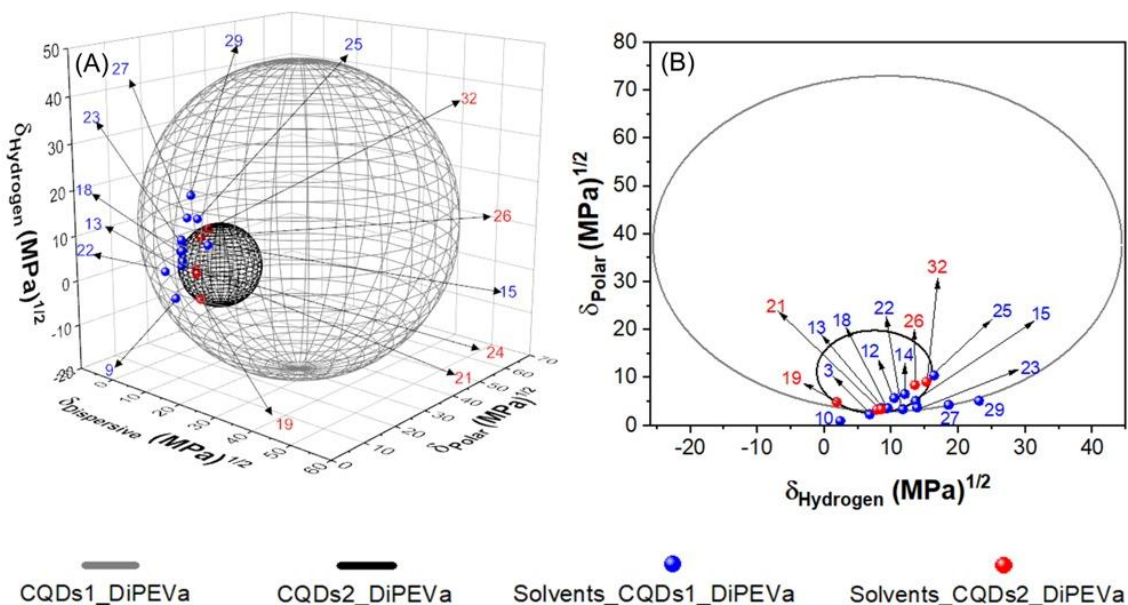


**Figura 26.** (a) Projeção 3D e (b) 2D da esfera de dispersibilidade de CQD(1) e CQD(2) usando o método HSP. Solventes vermelhos = HSP, solventes azuis = DiPEVa [63].

CQDs(1) tem um raio de interação muito maior no método HSP, o que significa que ele tem maior dispersibilidade em solventes polares, como miscíveis com água, que possuem altos componentes  $\delta_P$  e/ou  $\delta_H$ .



O mesmo padrão é encontrado nos parâmetros DiPEVa, conforme mostra a figura 27.



**Figura 27.** Projeção 3D e 2D da esfera de dispersibilidade de CQD(1) e CQD(2) usando o método DiPEVa. Solventes vermelhos = HSP, solventes azuis = DiPEVa [63].

Em ambos os casos, os valores de CQD (2) obtidos tem alta precisão (DataFit= 1). E os valores dos 3DSP também são semelhantes em ambos os métodos. No caso do CQD (1), o DataFit foi maior no caso do método HSP. Com relação à literatura, no caso do CQD (2), também foram obtidas características de 3DSP de solventes polares.

Para o caso dos pontos quânticos da espirulina, os valores obtidos na literatura foram  $\delta_D = 19,21 \text{ MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_P = 9,76 \text{ MPa}^{1/2}$ ,  $\delta_H = 7,43 \text{ MPa}^{1/2}$  e  $R_0 = 7,619$ , respectivamente [66]. Esses resultados têm boa concordância com os obtidos no presente estudo (ver Tabela 10). Os resultados de HSP e DiPEVa foram quase equivalentes. O CQD (2) foi feito a partir de espirulina porque é um material diferenciado. Compõe uma biomassa rica em proteínas (~65%, peso seco) e pobre em lipídios e carboidratos (cerca de 10–20%). Curiosamente, o teor de azoto da espirulina (9,6%, peso seco) é significativamente superior ao encontrado noutras biomassas e espécies de macroalgas. Esse aumento da relação N:C (nitrogênio: carbono) é o ponto distintivo.

seu maior teor de nitrogênio, componentes inorgânicos e cinzas são vantajosos para o equilíbrio do solo na agricultura.

Nesse caso, espera-se que o CQD (1) tenha maior dispersibilidade em solventes polares, enquanto o CQD (2) seria mais interessante para materiais híbridos usando polímeros não solúveis em água e ativos químicos menos polares.

Em resumo, os dados obtidos estão de acordo com a literatura. As esferas de maior dispersibilidade no caso do DiPEVa podem ser devidas aos fatores citados anteriormente. Com exceção de CQD (1), as NPs de carbono obtiveram esferas de dispersibilidade muito semelhantes no caso de HSP, o que mostra uma falta de distinção entre elas. O método DiPEVa separou as 4 NPs de carbono em dois grupos distintos, ou um grupo e duas NPs distintas das demais.

Os resultados do GNP estão em linha com a literatura. Como aponta a literatura, apesar do senso comum de se esperar a dispersibilidade das NPs de grafeno em solventes pouco polares, também não foi o que se obteve no presente estudo. Assim, essas informações podem ser confirmadas como empíricas. Não há produção padrão de NPs de carbono; portanto, os grupos funcionais de um mesmo tipo de NP, mas de diferentes origens, devem ser diferentes. Este é mais um fator para mostrar distinção entre diferentes trabalhos, além dos diferentes solventes testados. Essa distinção que o DiPEVa apresentou para essas NPs de carbono com os solventes testados é importante para apontar possíveis formulações de materiais híbridos com uma ou duas cargas de NPs diferentes. Destaca-se o maior resultado DataFit e, em vários casos, menor percentual de *outliers*, obtidos com a abordagem DiPEVa.

Pelas figuras 24-27, pode-se observar que a esfera de dispersibilidade pelo método DIPEVa é maior. No entanto, solventes importantes, como os miscíveis com água, e até mesmo os apróticos polares, como o dimetilsulfóxido e a dimetilformamida, são corretamente classificados mais próximos das esferas de dispersibilidade. Esses solventes são importantes para dissolver polímeros polares como poliuretano, policarbonatos, vinílicos etc. Isso corrobora graficamente a importância desses solventes.

O mesmo algoritmo de otimização para obtenção dos valores de 3DSP foi utilizado para estimar os parâmetros de solubilidade de vários polímeros de interesse na literatura com os dados do Manual de Hansen. Esses dados serão comparados com os valores de NPs de

carbono apresentados neste estudo. Os dados da esfera 3D da dissolução do polímero são mostrados na **Tabela 11** (VER MATERIAL SUPLEMENTAR- ANEXO 3).

De acordo com a literatura, dispersões estáveis de grafeno podem ser preparadas apenas se a tensão superficial e os parâmetros de solubilidade de Hildebrand dos solventes, aditivos e diluentes corresponderem aos parâmetros do grafeno. Surfactantes também são adicionados para preparar dispersões estáveis de grafeno. Dispersões de grafeno foram preparadas com vários surfactantes e solventes diferentes, como NMP, EtOH, IPA, água e DCM, com um curto tempo de sonicação (3 h)[68].

Para se obter dispersões estáveis de grafeno em polímeros, técnicas de dispersão de solventes e/ou surfactantes, funcionalização de polímeros ou associação de copolímeros em bloco podem ser usadas. Os copolímeros usados incluem monômeros polares como PVP, PEG ou PEO. Nestes casos, também são utilizados solventes como EtOH, NMP, DCM e THF e/ou vários surfactantes. Os surfactantes podem ser usados sozinhos, mas geralmente são associados a um co-surfactante [68]. Nesses casos, os HSPs podem ser usados para calcular a esfera de dispersibilidade de NPs, como rGO, funcionalizadas com surfactantes [81]. Em todos estes casos de compósitos ou compósitos híbridos, é fundamental avaliar e compatibilizar os 3DSP e a tensão superficial de cada composto compósito, demonstrando assim a importância do presente estudo.

Os seguintes polímeros são descritos na literatura formando compósitos com o grafeno: acrílicos, acrilonitrila, vinílicos, poliéter cetona (PEEK), poliuretano, epóxi, poliestireno, poliéster, elastômero, policarbonato, etilcelulose e poliamida [14], [62], [64], [68], [79]. Corroborando dados da literatura, a Tabela 11 mostra que PMMA, epóxi, PVC, PS, poliamida ou elastômeros, contendo grupos nitrila ou estireno, são compatíveis com o grafeno. Elastômeros menos polares, como os grupos butil, isopreno e isobutileno, não associados à monômero polar, supostamente não seriam compatíveis com o grafeno. A Tabela 11 mostra também que o PMMA, epóxi, PVC, PS e NBR são os polímeros mais polares, enquanto o PCL e a poliamida são polímeros intermediários, sendo que isopreno, butileno e borracha butílica são considerados não polares. Luo e colaboradores estudaram a dinâmica molecular entre o elastômero SBR e o grafeno [62]. Através do presente estudo, espera-se que o teor de estireno do copolímero seja o fator de solubilidade.

Vale ressaltar que os 3DSP calculados dependem de outros fatores além do tipo de monômero. Os resultados da dispersão de NPs em PCL, dissolvidos em solvente, mostram que os parâmetros 3DSP também dependem do peso molecular do polímero e da concentração da dispersão (ver Tabela 11).

Conforme discutido anteriormente, com base nos valores de DiPEVa obtidos, poderia ser feita uma mistura de óxido de grafeno com CQD (2) de espirulina, ou de nanoplaquetas de grafeno com CNT. Para o primeiro compósito híbrido, combinando óxido de grafeno e CQD(2) de espirulina, os polímeros poliestireno e PVC podem ser boas escolhas. Para o segundo híbrido, nanoplaquetas de grafeno com CNT, poderiam ser testados polímeros altamente polares como PMMA, epóxi e NBR. Os CQD's também podem ser compatíveis com polímeros polares, como epóxi ou PMMA. Os elastômeros de baixa polaridade podem ser usados para aumentar a compatibilidade com o óxido de grafeno e, especialmente, com óxido de grafeno reduzido (não testado no presente estudo, mas menos polar que o óxido de grafeno) e CQD(2) de espirulina. Deve-se ressaltar que as sugestões são preliminares porque agentes de acoplamento, surfactantes, funcionalização de polímeros e copolimerização podem ser usados para aumentar a compatibilidade do polímero.

#### **4.4. CONCLUSÃO**

A capacidade de dispersão das nanopartículas de carbono foi meticulosamente examinada em 32 solventes diversos, por meio da aplicação de dois distintos métodos dos parâmetros de solubilidade tridimensionais (3DSP): o método HSP e o método DiPEVa. No tocante à avaliação da esfera de dispersão das nanopartículas de carbono, incluindo os pontos quânticos de Carbono (CQD - 1), as nanoplaquetas de grafeno e os nanotubos de carbono, os resultados indicaram que o método DiPEVa se destacou em proporcionar uma avaliação mais precisa dos valores dos parâmetros de solubilidade, em comparação com o esquema de Hansen.

Quanto à dispersão do óxido de grafeno e dos pontos quânticos de carbono (CQD - 2) derivados da espirulina, os dois métodos demonstraram resultados equivalentes, ressaltando a equivalência na eficácia de ambos os enfoques para essa classe de materiais.

# CAPÍTULO 5. CONCLUSÃO GERAL DA TESE

## 5.1 CONCLUSÕES

Nesta tese foram obtidos parâmetros de solubilidade tridimensionais (3DSP) cuidadosamente ajustados para incorporar a influência da tensão superficial. Esses parâmetros foram então empregados para efetuar cálculos preditivos dos componentes individuais da tensão superficial em moléculas orgânicas. Os resultados obtidos têm implicações significativas para aplicações que repousam sobre fenômenos superficiais ou interfaciais. Destaca-se a apresentação de várias relações originais entre parâmetros físico-químicos e os 3DSP, incluindo uma relação inédita que conecta os 3DSP à constante dielétrica. Merece menção a introdução da razão entre os números de coordenação de moléculas orgânicas, uma contribuição pioneira que associa esse conceito aos parâmetros de solubilidade. Adicionalmente, foram propostas outras relações que podem ser aplicadas para homogeneizar os dados de 3DSP em substâncias líquidas, contribuindo para a coesão do banco de dados utilizado.

Através dos artigos publicados, foi possível detalhar mais de 650 moléculas, incluindo seus parâmetros físico-químicos associados. De acordo com o conhecimento do autor, este é o mais abrangente banco de dados completo do gênero já publicado. Enquanto os dados de Hansen são completos apenas para aproximadamente 200 moléculas nucleares, chamadas de moléculas "core" pela equipe de pesquisa, as demais foram derivadas de forma preditiva a partir dessas moléculas iniciais.

O método proposto, uma adaptação da abordagem de Good-Girifalco, para calcular as componentes parciais da tensão superficial, tanto dispersiva ( $\sigma_D$ ) quanto polar ( $\sigma_P$ ), foi submetido a testes em quatro bases de dados distintas presentes na literatura. Três dessas bases de dados consistiam em medições de tensão interfacial em relação à água, enquanto a quarta considerava interações com esqualeno. Os resultados indicaram que os dados de tensão interfacial em relação à água foram ideais para estimar a componente dispersiva da tensão superficial, ao passo que os dados de tensão interfacial em relação ao esqualeno revelaram-se mais apropriados para avaliar o componente polar.

A precisão e a simplicidade de aplicação são atributos notáveis desse método, que requer apenas informações sobre as tensões superficiais e interfaciais, bem como os valores de 3DSP, amplamente disponíveis na literatura ou passíveis de cálculo direto. Os componentes totais e parciais da tensão superficial derivados deste estudo foram altamente correlacionados com os valores DiPEVa, o que os torna valiosos para a determinação das tensões superficiais e/ou interfaciais entre materiais.

As aplicações práticas deste método são diversas e abrangentes, estendendo-se desde a avaliação de polímeros fundidos, com o cálculo da hidrofobicidade, até o entendimento do espalhamento de tintas em superfícies, adesividade e mesmo no campo dos cosméticos, onde pode ser utilizado para avaliar a umectação na pele.

Em última análise, os dois métodos de 3DSP - o tradicional HSP e o inovador DiPEVa - foram empregados para avaliar a dispersibilidade de NPs de carbono em 32 solventes distintos. A criação de esferas de dispersibilidade para cada tipo de nanopartícula permitiu comparações criteriosas entre elas, utilizando parâmetros de precisão do método. Em termos gerais, os parâmetros DiPEVa demonstraram ser mais precisos ou equiparáveis, especialmente nas situações em que a dispersibilidade ocorre em solventes miscíveis com água ou na própria água. Isso possui relevância particular para polímeros à base de água, assim como para seus tensoativos ou aditivos.

Essa aplicação prática em um domínio de vanguarda, como a Nanotecnologia, e em tecnologias baseadas em água, oferece uma perspectiva promissora sobre as potencialidades desse novo método no campo da Ciência dos Materiais.

## CAPÍTULO 6. SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS

- Desenvolver uma teoria de contribuição de grupos para determinação de parâmetros de solubilidade a partir de fragmentos de moléculas.
- Expandir o banco de dados para mais moléculas;
- Mostrar num banco de dados novo que os parâmetros dispersivos ( $\delta_D$ ) são também derivados físico-quimicamente com precisão.
- Desenvolver matematicamente os parâmetros de solubilidade a partir da teoria dos estados correspondentes (“*corresponding states theory*”)
- Testar para ver se aplicam em moléculas gasosas e atribuir os valores a elas.
- Testar para ver se aplicam em metais fundidos e atribuir os valores a eles.

## CAPÍTULO 7. REFERÊNCIAS

- [1] J. H. Hildebrand and R. L. Scott, “The Solubility of Nonelectrolytes. 3rd ed.,” *Science* (80-. ), p. 488, Apr. 1950.
- [2] A. F. M. Barton, *CRC handbook of solubility parameters and other cohesion parameters, second edition*. 2017.
- [3] C. M. Hansen, *Hansen Solubility Parameters A User’s Handbook*. 2013.
- [4] G. C. Vebber, P. Pranke, and C. N. Pereira, “Calculating hansen solubility parameters of polymers with genetic algorithms,” *J. Appl. Polym. Sci.*, vol. 131, no. 1, p. n/a-n/a, Jan. 2014, doi: 10.1002/app.39696.
- [5] J. H. Hildebrand, “A Critique of the Theory of Solubility of Non-Electrolytes.,” *Chem. Rev.*, vol. 44, no. 1, pp. 37–45, Feb. 1949, doi: 10.1021/cr60137a003.
- [6] R. F. Blanks and J. M. Prausnitz, “Thermodynamics of polymer solubility in polar and nonpolar systems,” *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 1964, doi: 10.1021/i160009a001.
- [7] S. Abbott, C. M. Hansen, H. Yamamoto, and R. S. V. III, *Hansen Solubility Parameters in Practice - Complete with software, data, and examples. 5th edition*. 2015.
- [8] D. M. Koenhen and C. A. Smolders, “The determination of solubility parameters of solvents and polymers by means of correlations with other physical quantities,” *J. Appl. Polym. Sci.*, 1975, doi: 10.1002/app.1975.070190423.
- [9] A. Munafo, M. Buchmann, H. N. Tran, U. W. Kesselring, H. Ô. Nam-Tran, and U. W. Kesselring, “Determination of the Total and Partial Cohesion Parameters of Lipophilic Liquids by Gas-Liquid Chromatography and from Molecular Properties,” *J. Pharm. Sci.*, vol. 77, no. 2, pp. 169–174, Feb. 1988, doi: 10.1002/jps.2600770215.
- [10] J. Bermejo and M. D. Guillén, “The estimation of the solubility parameter of low volatile compounds from gas chromatography data,” *J. Chem. Technol. Biotechnol.*, 1987, doi: 10.1002/jctb.280370205.
- [11] A. F. M. Barton, “Solubility parameters,” *Chem. Rev.*, vol. 75, no. 6, pp. 731–753, 1975.
- [12] S. Herrlich, T. Lorenz, S. Spieth, S. Messner, and R. Zengerle, “Solvent bonding of polymer combinations for micromedical applications,” 2011.



- [13] P. May, U. Khan, J. M. Hughes, and J. N. Coleman, "Role of solubility parameters in understanding the steric stabilization of exfoliated two-dimensional nanosheets by adsorbed polymers," *J. Phys. Chem. C*, 2012, doi: 10.1021/jp302365w.
- [14] M. Ayán-Varela *et al.*, "Investigating the Dispersion Behavior in Solvents, Biocompatibility, and Use as Support for Highly Efficient Metal Catalysts of Exfoliated Graphitic Carbon Nitride," *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2015, doi: 10.1021/acsami.5b06974.
- [15] V. V. Neklyudov, N. R. Khafizov, I. A. Sedov, and A. M. Dimiev, "New insights into the solubility of graphene oxide in water and alcohols," *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 19, no. 26, pp. 17000–17008, 2017, doi: 10.1039/C7CP02303K.
- [16] A. E. Del Rio-Castillo, C. Merino, E. Díez-Barra, and E. Vázquez, "Selective suspension of single layer graphene mechanochemically exfoliated from carbon nanofibres," *Nano Res.*, 2014, doi: 10.1007/s12274-014-0457-4.
- [17] H. J. Lim, K. Lee, Y. S. Cho, Y. S. Kim, T. Kim, and C. R. Park, "Experimental consideration of the Hansen solubility parameters of as-produced multi-walled carbon nanotubes by inverse gas chromatography," *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2014, doi: 10.1039/c4cp02319f.
- [18] J. M. Hughes, D. Aherne, and J. N. Coleman, "Generalizing solubility parameter theory to apply to one- and two-dimensional solutes and to incorporate dipolar interactions," *J. Appl. Polym. Sci.*, 2013, doi: 10.1002/app.38051.
- [19] C. Nunes Pereira, G. Cañete Vebber, R. S. Mauler, and O. Bianchi, "DiPEVa, an interactive method for adjusting the three-dimensional solubility parameters to surface tension," *J. Mol. Liq.*, vol. 339, p. 116799, Oct. 2021, doi: 10.1016/j.molliq.2021.116799.
- [20] S. D. Bergin, Z. Sun, D. Rickard, P. V. Streich, J. P. Hamilton, and J. N. Coleman, "Multicomponent solubility parameters for single-walled carbon nanotube-solvent mixtures," *ACS Nano*, 2009, doi: 10.1021/nn900493u.
- [21] J. Ma and R. M. Larsen, "Comparative Study on Dispersion and Interfacial Properties of Single Walled Carbon Nanotube/Polymer Composites Using Hansen Solubility Parameters," *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2013, doi: 10.1021/am302407z.

- [22] I. Vavrch, "Stefan's rule as a consequence of cohesive forces," *Colloids and Surfaces*, vol. 15, pp. 57–62, Jan. 1985, doi: 10.1016/0166-6622(85)80055-X.
- [23] A. Beerbower, "Surface free energy: A new relationship to bulk energies," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 35, no. 1, pp. 126–132, Jan. 1971, doi: 10.1016/0021-9797(71)90192-5.
- [24] A. A. Strechan, G. J. Kabo, and Y. U. Paulechka, "The correlations of the enthalpy of vaporization and the surface tension of molecular liquids," *Fluid Phase Equilib.*, vol. 250, no. 1–2, pp. 125–130, Dec. 2006, doi: 10.1016/j.fluid.2006.10.007.
- [25] C. N. Pereira and G. C. Vebber, "A Relationship Between the Heat of Vaporization, Surface Tension, and the Solubility Parameters, Which Includes the Ratio of the Coordination Numbers, Based on Stefan's Rule," *Polym. Eng. Sci.*, 2018, doi: 10.1002/pen.24956.
- [26] C. N. Pereira and G. C. Vebber, "An innovative model for correlating surface tension, solubility parameters, molar volume and ratio of the coordination numbers of liquid metals, based on Stefan's rule," *Surfaces and Interfaces*, vol. 13, pp. 51–57, Dec. 2018, doi: 10.1016/j.surfin.2018.07.004.
- [27] C. N. Pereira and G. C. Vebber, "A novel semi-empirical method for adjusting solubility parameters to surface tension based on the use of Stefan's rule," *J. Mol. Liq.*, Sep. 2018, doi: 10.1016/j.molliq.2018.09.116.
- [28] D. Konios, M. M. Stylianakis, E. Stratakis, and E. Kymakis, "Dispersion behaviour of graphene oxide and reduced graphene oxide," *J. Colloid Interface Sci.*, 2014, doi: 10.1016/j.jcis.2014.05.033.
- [29] D. W. Johnson, B. P. Dobson, and K. S. Coleman, "A manufacturing perspective on graphene dispersions," *Current Opinion in Colloid and Interface Science*. 2015, doi: 10.1016/j.cocis.2015.11.004.
- [30] H. J. Salavagione *et al.*, "Identification of high performance solvents for the sustainable processing of graphene," *Green Chem.*, vol. 19, no. 11, pp. 2550–2560, 2017, doi: 10.1039/C7GC00112F.
- [31] L. A. Girifalco and R. J. Good, "A theory for the estimation of surface and interfacial energies. I. Derivation and application to interfacial tension," *J. Phys. Chem.*, 1957, doi: 10.1021/j150553a013.

- [32] R. J. Good and L. a. Girifalco, "A theory for estimation of surface and interfacial energies.," *J. Phys. Chem.*, 1960, doi: 10.1021/j150553a013.
- [33] R. J. Good and L. A. Girifalco, "A theory for estimation of surface and interfacial energies. III. Estimation of surface energies of solids from contact angle data," *J. Phys. Chem.*, 1960, doi: 10.1021/j100834a012.
- [34] C. N. Pereira, G. C. Vebber, R. S. Mauler, and O. Bianchi, "Liquid partial surface tensions obtained by an adapted Good-Girifalco approach from interfacial tensions and DiPEVa solubility parameters," *J. Mol. Liq.*, vol. 351, p. 118625, Apr. 2022, doi: 10.1016/j.molliq.2022.118625.
- [35] J. Bulou, J. M. Raynal, and J. Vial, "An interfacial tension treatment with an improved good-Girifalco equation using solubility parameters," *J. Colloid Interface Sci.*, 1984, doi: 10.1016/0021-9797(84)90491-0.
- [36] S. S. Kim, S. G. Leem, H. Do Ghim, J. H. Kim, and W. S. Lyoo, "Microwave heat dyeing of polyester fabric," *Fibers Polym.*, 2003, doi: 10.1007/BF02908280.
- [37] Y. Luo, T. Liao, X. Yu, J. Li, L. Zhang, and Y. Xi, "Dielectric properties and microwave heating behavior of neutral leaching residues from zinc metallurgy in the microwave field," *Green Process. Synth.*, vol. 9, no. 1, pp. 97–106, Jan. 2020, doi: 10.1515/gps-2020-0011.
- [38] M. C. A. Stuart, J. C. Van De Pas, and J. B. F. N. Engberts, "Phase behavior of laundry surfactants in polar solvents," *J. Surfactants Deterg.*, 2006, doi: 10.1007/s11743-006-0385-8.
- [39] J. L. Gardon, "Critical review of concepts common to cohesive energy density, surface tension, tensile strength, heat of mixing, interfacial tension, and butt joint strength," *J. Colloid Interface Sci.*, 1977, doi: 10.1016/0021-9797(77)90053-4.
- [40] L. Paseta, G. Potier, S. Abbott, and J. Coronas, "Using Hansen solubility parameters to study the encapsulation of caffeine in MOFs," *Org. Biomol. Chem.*, 2015, doi: 10.1039/c4ob01898b.
- [41] P. G. Mikolaj and C. J. Pings, "The Use of the Coordination Number in the Interpretation of Fluid Structure," *Phys. Chem. Liq.*, 1968, doi: 10.1080/00319106808083789.
- [42] S. Swaminathan and D. L. Beveridge, "A Theoretical Study of the Structure of

- Liquid Water Based on Quasi-Component Distribution Functions,” *J. Am. Chem. Soc.*, 1977, doi: 10.1021/ja00468a003.
- [43] C. A. Coulson and G. S. Rushbrooke, “On the interpretation of atomic distribution curves for liquids,” *Phys. Rev.*, 1939, doi: 10.1103/PhysRev.56.1216.
- [44] T. Gu and Y. Qi, “First-principles simulation on pressure-dependent local structure change of AsS melt,” *J. Mol. Liq.*, 2016, doi: 10.1016/j.molliq.2016.10.033.
- [45] J. B. Durkee, “Appendix C10. Hoy solubility parameters.,” in *Cleaning with Solvents: Science and technology.*, 2013, pp. 653–674.
- [46] J. J. Jasper, “The surface tension of pure liquid compounds.,” *J. Phys. Chem. Ref. Data*, vol. 1, pp. 841–1009, 1972.
- [47] L. . Lasdon, A. Warren, A. Jain, and M. Ratner, “Design and testing of a generalized reduced gradient code for mnlnear programming,” *ACM Trans. Math. Softw.*, vol. 4, no. 1, pp. 34–50, 1978.
- [48] F. Gharagheizi, O. Babaie, and S. Mazdeyasna, “Prediction of vaporization enthalpy of pure compounds using a group contribution-based method,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2011, doi: 10.1021/ie2001764.
- [49] J. L. Gardon, “Relationship between cohesive energy densities of polymers and Zisman’s critical surface tensions,” *Journal of Physical Chemistry*. 1963, doi: 10.1021/j100803a515.
- [50] G. Scatchard, “Equilibria in non-electrolyte solutions in relation to the vapor pressures and densities of the components,” *Chem. Rev.*, 1931, doi: 10.1021/cr60030a010.
- [51] E. E. Walker, “The solvent action of organic substances on polyacrylonitrile,” *J. Appl. Chem.*, vol. 2, no. 8, pp. 470–481, May 2007, doi: 10.1002/jctb.5010020808.
- [52] R. J. Good and E. R. J. Elbing, “Generalization of Theory for Estimation of Interfacial Energies,” *Ind. Eng. Chem.*, 1970, doi: 10.1021/ie50723a009.
- [53] W. Ingamells and R. H. Peters, “The carrier dyeing of synthetic fibers,” *Polym. Eng. Sci.*, 1980, doi: 10.1002/pen.760200409.
- [54] R. B. Chavan, R. C. D. Kaushik, and S. D. Deshpande, “Dyeing of polyacrylonitrile fibres with monoazo disperse dyes--adsorption studies,” 1989.
- [55] W. Ingamells and M. N. Thomas, “The mechanism of carrier dyeing,” 1984.

- [56] F. M. Fowkes, F. L. Riddle, W. E. Pastore, and A. A. Weber, "Interfacial interactions between self-associated polar liquids and squalane used to test equations for solid—liquid interfacial interactions," *Colloids and Surfaces*, vol. 43, no. 2, pp. 367–387, Jan. 1990, doi: 10.1016/0166-6622(90)80298-I.
- [57] W. Apostoluk and J. Drzymała, "An improved estimation of water-organic liquid interfacial tension based on linear solvation energy relationship approach," *J. Colloid Interface Sci.*, 2003, doi: 10.1016/S0021-9797(03)00115-2.
- [58] A. H. Demond and A. S. Lindner, "Estimation of Interfacial Tension between Organic Liquids and Water," *Environ. Sci. Technol.*, 1993, doi: 10.1021/es00048a004.
- [59] J. A. Hugill and A. J. Van Welsenens, "Surface tension: a simple correlation for natural gas + condensate systems," *Fluid Phase Equilib.*, 1986, doi: 10.1016/0378-3812(86)85038-5.
- [60] J. Escobedo and A. Mansoori, "Surface Tension Prediction for Pure Fluids," *AIChE J.*, vol. 42, no. 5, pp. 1425–1433, 1996, [Online]. Available: <https://doi.org/10.1002/aic.690420523>.
- [61] H. J. Salavagione *et al.*, "Identification of high performance solvents for the sustainable processing of graphene," *Green Chem.*, vol. 19, no. 11, pp. 2550–2560, 2017, doi: 10.1039/C7GC00112F.
- [62] Y. Luo, R. Wang, W. Wang, L. Zhang, and S. Wu, "Molecular Dynamics Simulation Insight Into Two-Component Solubility Parameters of Graphene and Thermodynamic Compatibility of Graphene and Styrene Butadiene Rubber," *J. Phys. Chem. C*, vol. 121, no. 18, pp. 10163–10173, May 2017, doi: 10.1021/acs.jpcc.7b01583.
- [63] C. Nunes Pereira, L. Paim, J. Cruz, R. Mauler, and O. Bianchi, "Comparison of methods for determination of carbon nanoparticles solubility parameters using the classic Hansen and the DiPEVa methods," 2023.
- [64] S. Villar-Rodil, J. I. Paredes, A. Martínez-Alonso, and J. M. D. Tascón, "Preparation of graphene dispersions and graphene-polymer composites in organic media," *J. Mater. Chem.*, vol. 19, no. 22, p. 3591, 2009, doi: 10.1039/b904935e.
- [65] S. Detriche, J. B. Nagy, Z. Mekhalif, and J. Delhalle, "Surface State of Carbon

- Nanotubes and Hansen Solubility Parameters,” *J. Nanosci. Nanotechnol.*, vol. 9, no. 10, pp. 6015–6025, Oct. 2009, doi: 10.1166/jnn.2009.1568.
- [66] L. D. Agnol *et al.*, “Green synthesis of Spirulina-based carbon dots for stimulating agricultural plant growth,” *Sustain. Mater. Technol.*, vol. 30, p. e00347, Dec. 2021, doi: 10.1016/j.susmat.2021.e00347.
- [67] Y. Zhang *et al.*, “One-step microwave synthesis of N-doped hydroxyl-functionalized carbon dots with ultra-high fluorescence quantum yields,” *Nanoscale*, vol. 8, no. 33, pp. 15281–15287, 2016, doi: 10.1039/C6NR03125K.
- [68] S. Perumal, R. Atchudan, and I. W. Cheong, “Recent Studies on Dispersion of Graphene–Polymer Composites,” *Polymers (Basel)*, vol. 13, no. 14, p. 2375, Jul. 2021, doi: 10.3390/polym13142375.
- [69] W. Zhao, F. Wu, H. Wu, and G. Chen, “Preparation of Colloidal Dispersions of Graphene Sheets in Organic Solvents by Using Ball Milling,” *J. Nanomater.*, vol. 2010, pp. 1–5, 2010, doi: 10.1155/2010/528235.
- [70] Y. Hernandez, M. Lotya, D. Rickard, S. D. Bergin, and J. N. Coleman, “Measurement of Multicomponent Solubility Parameters for Graphene Facilitates Solvent Discovery,” *Langmuir*, vol. 26, no. 5, pp. 3208–3213, Mar. 2010, doi: 10.1021/la903188a.
- [71] J. Fernandes, S. S. Nemala, G. De Bellis, and A. Capasso, “Green Solvents for the Liquid Phase Exfoliation Production of Graphene: The Promising Case of Cyrene,” *Front. Chem.*, vol. 10, Apr. 2022, doi: 10.3389/fchem.2022.878799.
- [72] N. I. Zaaba, K. L. Foo, U. Hashim, S. J. Tan, W.-W. Liu, and C. H. Voon, “Synthesis of Graphene Oxide using Modified Hummers Method: Solvent Influence,” *Procedia Eng.*, vol. 184, pp. 469–477, 2017, doi: 10.1016/j.proeng.2017.04.118.
- [73] S. N. Alam, N. Sharma, and L. Kumar, “Synthesis of Graphene Oxide (GO) by Modified Hummers Method and Its Thermal Reduction to Obtain Reduced Graphene Oxide (rGO)\*,” *Graphene*, vol. 06, no. 01, pp. 1–18, 2017, doi: 10.4236/graphene.2017.61001.
- [74] L. Li, S. Chakrabarty, J. Jiang, B. Zhang, C. Ober, and E. P. Giannelis, “Solubility studies of inorganic–organic hybrid nanoparticle photoresists with different surface

- functional groups,” *Nanoscale*, vol. 8, no. 3, pp. 1338–1343, 2016, doi: 10.1039/C5NR07334K.
- [75] J. Qin, X. Wang, Q. Jiang, and M. Cao, “Optimizing Dispersion, Exfoliation, Synthesis, and Device Fabrication of Inorganic Nanomaterials Using Hansen Solubility Parameters,” *ChemPhysChem*, vol. 20, no. 9, pp. 1069–1097, May 2019, doi: 10.1002/cphc.201900110.
- [76] H. Yamamoto, “Hansen Solubility Parameter (HSP) and MicroWave,” 2010. <https://pirika.com/NewHP/PirikaE2/MicroWave.html>.
- [77] K. Anagnostou *et al.*, “An extensive case study on the dispersion parameters of HI-assisted reduced graphene oxide and its graphene oxide precursor,” *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 580, pp. 332–344, Nov. 2020, doi: 10.1016/j.jcis.2020.07.040.
- [78] J. N. Coleman, “Liquid-Phase Exfoliation of Nanotubes and Graphene,” *Adv. Funct. Mater.*, vol. 19, no. 23, pp. 3680–3695, Dec. 2009, doi: 10.1002/adfm.200901640.
- [79] D. R. Son, A. V. Raghu, K. R. Reddy, and H. M. Jeong, “Compatibility of Thermally Reduced Graphene with Polyesters,” *J. Macromol. Sci. Part B*, vol. 55, no. 11, pp. 1099–1110, Nov. 2016, doi: 10.1080/00222348.2016.1242529.
- [80] S. Park *et al.*, “Colloidal Suspensions of Highly Reduced Graphene Oxide in a Wide Variety of Organic Solvents,” *Nano Lett.*, vol. 9, no. 4, pp. 1593–1597, Apr. 2009, doi: 10.1021/nl803798y.
- [81] J. Ma, J. Liu, W. Zhu, and W. Qin, “Solubility study on the surfactants functionalized reduced graphene oxide,” *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.*, vol. 538, pp. 79–85, Feb. 2018, doi: 10.1016/j.colsurfa.2017.10.071.
- [82] L. Guardia, J. I. Paredes, S. Villar-Rodil, J.-N. Rouzaud, A. Martínez-Alonso, and J. M. D. Tascón, “Discovery of effective solvents for platelet-type graphite nanofibers,” *Carbon N. Y.*, vol. 53, pp. 222–230, Mar. 2013, doi: 10.1016/j.carbon.2012.10.052.
- [83] T. Gaudin and H. Ma, “A molecular contact theory for simulating polarization: Application to dielectric constant prediction,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, doi: 10.1039/c9cp02358e.
- [84] F. Gharagheizi, A. Eslamimanesh, M. Sattari, A. H. Mohammadi, and D. Richon, “Corresponding States Method for Determination of the Viscosity of Gases at

- Atmospheric Pressure,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 51, no. 7, pp. 3179–3185, Feb. 2012, doi: 10.1021/ie202591f.
- [85] F. Gharagheizi, “New procedure to calculate the Hansen solubility parameters of polymers,” *J. Appl. Polym. Sci.*, 2007, doi: 10.1002/app.23874.
- [86] O. R. Quayle, “The Parachors of Organic Compounds. An Interpretation and Catalogue.,” *Chem. Rev.*, vol. 53, no. 3, pp. 439–589, Dec. 1953, doi: 10.1021/cr60166a003.
- [87] N. C. Deno and H. E. Berkherimer, “Activity Coefficients as a Function of Structure and Media.,” *J. Chem. Eng. Data*, vol. 5, no. 1, pp. 1–5, Jan. 1960, doi: 10.1021/je60005a001.
- [88] I. MORIGUCHI, “Quantitative structure-activity studies. I. Parameters relating to hydrophobicity.,” *Chem. Pharm. Bull.*, vol. 23, no. 2, pp. 247–257, 1975, doi: 10.1248/cpb.23.247.
- [89] T. W. Gibling, “101. Molecular volume and structure. Parts VII and VIII,” *J. Chem. Soc.*, p. 380, 1944, doi: 10.1039/jr9440000380.
- [90] S. A. Mumford and J. W. C. Phillips, “CCLXXIV.—The evaluation and interpretation of parachors,” *J. Chem. Soc.*, pp. 2112–2133, 1929, doi: 10.1039/JR9290002112.
- [91] M. Roseman and W. P. Jencks, “Interactions of urea and other polar compounds in water,” *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 97, no. 3, pp. 631–640, Feb. 1975, doi: 10.1021/ja00836a027.
- [92] C. Bordes *et al.*, “Determination of poly( $\epsilon$ -caprolactone) solubility parameters: Application to solvent substitution in a microencapsulation process,” *Int. J. Pharm.*, 2010, doi: 10.1016/j.ijpharm.2009.09.023.



## CAPÍTULO 8. MATERIAL SUPLEMENTAR

### 8.1. ANEXO 1

CAPÍTULO 2. DiPEVa, parâmetros de solubilidade ajustados à tensão superficial.

#### 8.1.1. TABELA 1.

**Tabela 1.** Molécula, volume molar ( $m^3.mole^{-1}$ ), parâmetros de solubilidade de DiPEVa (este estudo,  $MPa^{1/2}$ ), soma dos quadrados dos componentes dispersivos e polares de DiPEVa ( $\delta_D^2 + \delta_P^2$ ), número de DiPEVa (DiP #), tensão superficial experimental ( $mN.m^{-1}$ ), razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_S}{Z}$ ), estimativa da tensão superficial  $\sigma_L \approx 10^{DiP\#} . Z_S . Z^{-1} . \delta_T^2 . V^{1/3}$ , superfície produto de volume de tensão ( $7.87\sigma_L . V^{1/3}$ ), soma dos quadrados dos componentes dispersivos e polares de Hansen ( $\delta_D^2 + \delta_P^2$ ), parâmetros de solubilidade de Hansen ( $MPa^{1/2}$ ). [3]

Moléculas	V, $cm^3.mol^{-1}$	Parâmetros de solubilidade de DiPEVa (este estudo, $MPa^{1/2}$ )						$\sigma_L$ , $mN.m^{-1}$	$Z_S.Z^{-1}$ calcul. Eq. [7]	$\sigma_L \approx$ $10^{DiP\#}$ $Z_S.Z^{-1}$ $\delta_T^2.V^{1/3}$	$7.87\sigma_L.V^{1/3}$ Eq. [20]	Parâmetros de solubilidade de Hansen				
		$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	$\delta_T$	$(\delta_D^2 + \delta_P^2)$ Eq. [11]	DiP # Eqs. [18a, 18b]					$(\delta_D^2 + \delta_P^2)$ Eq. [11]	$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	$\delta_T$
Methanol	40,70	19,33	5,17	23,08	30,55	400,29	0,09	22,12	0,06	227,29	50,60	379,30	15,10	12,30	22,30	29,61
Ethanol	58,50	18,99	4,33	18,55	26,90	379,49	0,09	21,97	0,07	226,11	44,54	327,08	15,80	8,80	19,40	26,52
1-Propanol	75,20	19,31	3,83	14,87	24,67	387,55	0,08	23,32	0,08	238,01	43,48	302,24	16,00	6,80	17,40	24,60
2-Propanol	76,80	17,78	3,76	13,84	22,85	330,25	0,09	20,93	0,08	216,43	38,74	286,85	15,80	6,10	16,40	23,58
1-butanol	91,50	19,50	3,47	12,38	23,35	392,13	0,08	24,95	0,09	253,04	43,57	288,49	16,00	5,70	15,80	23,20
2-methyl-1-propanol	92,80	18,22	3,41	11,71	21,93	343,68	0,08	22,54	0,09	231,11	39,18	260,50	15,10	5,70	15,90	22,66
2-methyl-2-propanol	95,80	16,81	3,41	11,32	20,55	294,13	0,09	19,96	0,09	207,59	34,33	257,05	15,20	5,10	14,70	21,75
2-butanol	92,00	18,12	3,46	11,68	21,83	340,36	0,08	22,54	0,09	231,11	39,29	282,13	15,80	5,70	14,50	22,19
1-pentanol	108,60	19,21	3,28	10,77	22,27	379,90	0,08	25,36	0,09	256,78	41,82	273,06	15,90	4,50	13,90	21,59
3-methyl-1-butanol	109,40	18,12	3,45	10,51	21,23	340,36	0,08	23,71	0,09	241,75	39,02	276,68	15,80	5,20	13,30	21,30
2-methyl-1-butanol	108,20	18,32	3,63	10,00	21,19	348,89	0,08	25,10	0,10	254,00	41,45	282,01	16,00	5,10	14,30	22,06
2-pentanol	109,60	18,20	3,12	9,86	20,93	340,79	0,08	23,45	0,09	239,41	38,56	284,32	15,60	6,40	13,30	21,48
2-methyl-2-butanol	108,20	17,27	3,30	9,22	19,85	309,07	0,08	22,31	0,10	228,45	36,85	271,30	15,30	6,10	13,30	21,17
1-hexanol	124,90	19,13	2,99	9,29	21,48	375,08	0,08	25,81	0,09	260,82	40,64	286,45	15,90	5,80	12,50	21,04
2-hexanol	126,84	18,24	2,80	8,31	20,24	340,50	0,08	24,27	0,10	246,83	38,02					
3-methyl-1-pentanol	127,20	18,67	2,70	8,28	20,60	355,94	0,08	24,95	0,10	253,08	39,04					
3-methyl-3-pentanol	124,00	17,27	3,20	7,50	19,09	308,34	0,08	23,26	0,11	235,80	36,71					
4-methyl-2-pentanol	127,20	17,28	3,06	8,69	19,58	307,90	0,08	22,62	0,10	231,83	35,40	248,05	15,40	3,30	12,30	19,98
1,3-dimethyl-1-butanol	124,00	18,59	2,73	8,18	20,49	352,99	0,08	24,93	0,10	252,79	39,35	273,65	15,80	4,90	13,50	21,35

<b>1-heptanol</b>	141,90	18,78	2,97	8,28	20,74	361,47	0,08	26,71	0,10	269,27	40,30	284,09	16,00	5,30	11,70	20,52
<b>1-octanol</b>	157,70	18,69	2,70	7,15	20,19	356,55	0,08	27,10	0,10	272,68	39,48	299,89	17,00	3,30	11,90	21,01
<b>2-octanol</b>	159,10	17,84	2,70	6,63	19,23	325,72	0,08	25,91	0,11	261,79	37,63	283,22	16,10	4,90	11,00	20,11
<b>1-nonanol</b>	174,40	18,48	2,53	6,15	19,64	347,96	0,07	27,89	0,11	279,89	39,29	279,04	16,00	4,80	10,60	19,78
<b>1-necanol</b>	191,80	18,18	2,45	5,43	19,13	336,56	0,07	28,51	0,11	285,51	38,91	313,01	17,50	2,60	10,00	20,32
<b>1-Dodecanol</b>	224,30	17,62	2,38	4,56	18,35	316,04	0,07	29,40	0,12	293,55	38,08	272,00	16,00	4,00	9,30	18,93
<b>Cyclohexanol</b>	106,00	20,56	3,65	9,51	22,94	436,02	0,07	32,92	0,11	325,75	54,74	319,57	17,40	4,10	13,50	22,40
<b>Allyl alcohol</b>	68,40	20,26	3,83	15,32	25,68	425,06	0,08	25,28	0,08	256,05	48,64	379,08	16,20	10,80	16,80	25,72
<b>Benzyl alcohol</b>	103,60	22,16	3,44	8,47	23,97	502,81	0,06	39,96	0,13	389,94	66,96	378,25	18,40	6,30	13,70	23,79
<b>2-Cresol</b>	103,30	21,96	2,95	7,96	23,55	491,09	0,07	36,90	0,12	362,04	61,89					
<b>3-Cresol</b>	104,70	21,68	3,18	8,61	23,54	479,98	0,07	35,69	0,12	350,91	59,59	350,01	18,00	5,10	12,90	22,72
<b>2-Methoxyphenol (guaiacol)</b>	97,00	22,19	4,98	11,41	25,45	517,28	0,06	42,20	0,12	410,37	72,28	391,24	18,00	8,20	13,30	23,84
<b>2-Chlorophenol</b>	102,30	21,82	2,77	6,53	22,94	483,67	0,06	39,70	0,14	387,49	66,80	442,34	20,30	5,50	13,90	25,21
<b>3-Chlorophenol</b>	105,50	20,86	4,29	8,42	22,90	453,64	0,06	41,18	0,14	401,06	68,59					
<b>Methyl salicylate</b>	129,60	20,49	4,37	8,69	22,68	439,04	0,06	39,21	0,13	383,12	60,98	391,61	18,10	8,00	13,90	24,18
<b>3-Amino-1-propanol</b>	76,50	24,40	6,02	17,11	30,40	631,45	0,06	44,70	0,10	432,97	82,87					
<b>2-propanone</b>	74,00	15,14	6,58	11,99	20,40	272,62	0,08	23,03	0,11	235,50	43,16	348,41	15,50	10,40	7,00	19,94
<b>2-butanone</b>	90,10	15,54	5,76	10,43	19,58	274,53	0,08	24,18	0,12	246,04	42,45	337,00	16,00	9,00	5,10	19,05
<b>2-pentanone</b>	106,70	18,27	5,33	1,90	19,13	362,40	0,08	24,92	0,12	252,56	41,35	313,76	16,00	7,60	4,70	18,33
<b>3-pentanone</b>	106,40	18,08	5,44	1,95	18,98	356,35	0,08	24,74	0,12	251,12	41,09	307,40	15,80	7,60	4,70	18,15
<b>2-hexanone</b>	123,60	18,05	4,82	1,85	18,77	349,04	0,08	25,52	0,12	258,15	40,32	271,30	15,30	6,10	4,10	16,97
<b>3-hexanone</b>	122,70	17,74	5,16	2,03	18,59	341,44	0,08	25,10	0,12	254,35	39,75					
<b>2-Heptanone</b>	139,80	17,84	4,45	1,90	18,48	337,96	0,08	26,81	0,13	270,09	40,65	294,93	16,20	5,70	4,10	17,66
<b>3-Heptanone</b>	139,00	17,51	4,78	2,09	18,27	329,35	0,08	26,37	0,13	266,30	40,07	287,44	16,20	5,00	4,10	17,44
<b>4-Heptanone</b>	140,80	15,84	4,25	7,71	18,12	269,00	0,08	25,02	0,12	253,69	37,85	282,13	15,80	5,70	4,90	17,50
<b>3-Octanone</b>	156,00	17,43	3,97	1,80	17,96	319,49	0,08	26,61	0,13	268,28	38,90	282,69	16,20	4,50	4,10	17,31
<b>2-nonanone</b>	173,30	17,12	4,20	1,95	17,73	310,64	0,08	25,83	0,12	260,91	36,45					
<b>5-nonanone</b>	173,40	17,11	4,21	2,05	17,74	310,35	0,08	26,66	0,13	268,60	37,62	315,29	16,00	7,70	4,40	18,29
<b>6-Undecanone (dipentyl ketone)</b>	206,40	16,66	3,79	2,03	17,21	292,00	0,08	26,88	0,13	270,56	35,80					
<b>Acetophenone</b>	117,40	18,90	5,59	8,85	21,60	388,47	0,06	39,04	0,14	381,47	62,74	458,12	19,60	8,60	3,70	21,72
<b>Benzophenone</b>	164,20	19,20	4,72	6,84	20,92	390,89	0,06	43,49	0,15	422,09	62,50	258,92	13,60	8,60	5,70	17,07
<b>cyclopentanone</b>	89,10	20,83	6,77	2,48	22,05	479,87	0,07	32,80	0,13	324,60	57,79	462,02	17,90	11,90	5,20	22,11
<b>cyclohexanone</b>	104,00	20,24	6,02	2,65	21,28	445,72	0,07	34,57	0,14	340,66	57,85	356,53	17,80	6,30	5,10	19,56
<b>n-methyl formate</b>	62,20	17,58	4,48	11,74	21,61	328,98	0,08	24,36	0,11	247,70	48,39	304,65	15,30	8,40	10,20	20,22
<b>n-ethyl formate</b>	80,20	16,82	4,31	10,72	20,41	301,54	0,08	23,18	0,11	236,94	42,30	310,81	15,50	8,40	8,40	19,53
<b>n-propyl formate</b>	97,90	16,69	3,90	8,91	19,32	293,76	0,08	23,97	0,12	244,14	40,93					
<b>n-butyl formate</b>	114,80	16,41	3,84	8,02	18,67	284,16	0,08	24,52	0,12	249,12	39,70	288,74	15,70	6,50	9,20	19,32
<b>i-butyl formate</b>	117,40	17,49	3,56	1,28	17,89	318,47	0,08	23,34	0,13	238,34	37,51					
<b>n-hexyl formate</b>	148,10	17,55	3,19	1,41	17,89	317,98	0,08	26,37	0,13	266,02	39,23					
<b>n-amyl formate</b>	131,30	17,94	3,40	1,32	18,31	333,42	0,08	25,53	0,13	258,35	39,53					
<b>Methyl acetate</b>	79,70	17,67	3,80	9,87	20,60	326,82	0,08	24,72	0,11	250,93	45,20	292,09	15,50	7,20	7,60	18,70
<b>Ethyl acetate</b>	98,50	16,87	3,63	8,97	19,44	297,64	0,08	23,39	0,11	238,86	39,86	277,73	15,80	5,30	7,20	18,15
<b>n-propyl acetate</b>	115,30	16,60	3,40	7,74	18,63	287,05	0,08	23,80	0,12	242,59	38,48	252,58	15,30	4,30	7,60	17,62

<b>Isopropyl acetate</b>	117,10	15,54	3,32	7,20	17,45	252,56	0,09	21,76	0,12	223,99	35,00	242,26	14,90	4,50	8,20	17,59
<b>n-butyl acetate</b>	132,50	16,41	3,29	6,70	18,03	280,11	0,08	24,88	0,13	252,44	38,41	263,33	15,80	3,70	6,30	17,41
<b>i-butyl acetate</b>	133,50	15,82	3,32	6,90	17,58	261,36	0,08	23,06	0,12	235,83	35,50	241,70	15,10	3,70	6,30	16,77
<b>tert-Butyl acetate</b>	134,10	16,25	3,41	1,39	16,67	275,80	0,09	21,94	0,13	225,49	33,73	275,60	15,40	6,20	6,20	17,72
<b>sec-butyl acetate</b>	133,60	15,59	3,31	6,56	17,24	254,09	0,08	23,09	0,13	236,08	35,54	238,69	15,00	3,70	7,60	17,22
<b>n-pentyl acetate</b>	148,00	16,37	2,94	5,93	17,66	276,75	0,08	24,93	0,13	252,90	37,09	260,53	15,80	3,30	6,10	17,26
<b>Isopentyl acetate</b>	150,26	15,92	3,04	5,89	17,24	262,65	0,08	24,28	0,13	246,92	35,94	243,70	15,30	3,10	7,00	17,11
<b>n-hexyl acetate</b>	165,00	16,22	3,01	5,53	17,40	272,05	0,08	26,02	0,13	262,87	37,33	258,05	15,80	2,90	5,90	17,11
<b>Methyl propionate</b>	96,80	16,95	3,53	8,19	19,15	299,75	0,08	24,44	0,12	248,39	41,88	282,50	15,50	6,50	7,70	18,49
<b>Ethyl propionate</b>	115,50	16,24	3,30	7,86	18,34	274,66	0,08	22,30	0,11	228,91	36,04	277,46	15,50	6,10	4,90	17,36
<b>n-propyl propionate</b>	131,70	17,56	3,21	1,22	17,89	318,62	0,08	24,21	0,13	246,31	37,45					
<b>n-butyl propionate</b>	149,70	16,11	3,05	5,88	17,42	269,00	0,08	24,89	0,13	252,48	36,88	276,74	15,70	5,50	5,90	17,65
<b>n-Methyl butyrate</b>	113,70	18,19	3,31	1,15	18,52	341,69	0,08	24,62	0,13	250,02	39,99					
<b>Methyl-i-butyrate</b>	113,70	17,64	3,45	1,19	18,01	323,08	0,08	23,17	0,12	236,79	37,63					
<b>n-ethyl butyrate</b>	132,90	16,13	3,23	6,66	17,75	270,53	0,08	23,94	0,13	243,82	36,91	271,61	15,50	5,60	5,00	17,22
<b>Ethyl isobutyrate</b>	133,70	16,94	3,65	1,38	17,38	300,29	0,08	22,72	0,12	232,66	34,96					
<b>n-propyl butyrate</b>	149,30	17,11	2,98	1,26	17,41	301,51	0,08	24,56	0,13	249,51	36,43					
<b>Propyl isobutyrate</b>	150,70	16,53	3,18	1,37	16,88	283,20	0,08	23,29	0,13	237,93	34,44					
<b>n-butyl butyrate</b>	166,70	16,73	3,28	1,56	17,12	290,71	0,08	25,24	0,13	255,63	36,09	251,77	15,60	2,90	5,60	16,83
<b>Isobutyl isobutyrate</b>	167,70	16,72	3,17	1,76	17,11	289,53	0,08	27,75	0,15	278,55	39,60	236,42	15,10	2,90	5,90	16,47
<b>Ethyl isovalerate</b>	150,50	16,71	3,30	1,37	17,08	289,98	0,08	23,28	0,13	237,79	34,44					
<b>n-butyl valerate</b>	182,30	16,69	3,17	1,57	17,07	288,78	0,08	25,72	0,13	260,04	35,70					
<b>Methyl decanoate</b>	213,40	17,53	2,95	1,45	17,83	315,90	0,07	28,05	0,12	281,30	36,94					
<b>Methyl dodecanoate</b>	246,40	16,84	2,32	1,35	17,06	289,06	0,07	29,10	0,13	290,86	36,52					
<b>Ethyl hexanoate</b>	165,90	16,39	2,61	5,14	17,37	275,44	0,08	25,32	0,13	256,44	36,27					
<b>Methyl acetoacetate</b>	107,80	20,47	8,34	3,20	22,33	488,42	0,07	32,62	0,12	323,01	53,94					
<b>Ethyl acetoacetate</b>	125,60	22,65	5,21	1,36	23,28	540,20	0,07	31,88	0,10	316,26	50,10	388,89	16,50	10,80	8,30	21,40
<b>Methyl benzoate</b>	124,90	20,36	4,58	2,18	20,98	435,51	0,06	37,18	0,14	364,54	58,53	356,24	17,00	8,20	4,70	19,45
<b>Ethyl benzoate</b>	144,30	19,56	3,44	1,66	19,93	394,51	0,07	34,51	0,14	340,23	51,78	358,85	17,90	6,20	6,00	19,87
<b>Propyl benzoate</b>	144,30	20,23	3,15	1,33	20,51	418,99	0,07	33,88	0,13	334,44	50,83					
<b>Butyl benzoate</b>	178,00	18,11	2,85	4,98	19,00	336,23	0,07	33,19	0,14	328,16	46,43	343,30	18,30	2,90	5,50	19,33
<b>Benzyl benzoate</b>	191,20	20,19	3,64	2,15	20,63	420,82	0,06	42,82	0,15	416,01	58,50	426,01	20,00	5,10	5,20	21,28
<b>Dimethyl maleate</b>	125,80	19,81	4,46	8,45	21,99	412,23	0,06	37,68	0,13	369,13	59,18	334,58	16,30	8,30	9,80	20,75
<b>Diethyl maleate</b>	161,20	18,00	4,08	7,34	19,86	340,54	0,07	32,07	0,13	317,99	46,38					
<b>Dibutyl maleate</b>	230,40	17,34	3,61	6,34	18,82	313,84	0,07	30,30	0,12	301,81	38,89	309,46	16,50	6,10	7,20	19,01
<b>Diethyl malonate</b>	152,50	17,96	4,15	7,70	19,98	339,79	0,07	31,31	0,12	311,02	46,11	318,50	16,10	7,70	8,30	19,68
<b>Diethyl succinate</b>	167,20	18,44	3,41	6,77	19,93	351,60	0,07	31,37	0,12	311,50	44,81					
<b>Diethyl phthalate</b>	198,00	18,60	3,94	6,62	20,13	361,33	0,07	36,06	0,13	354,37	48,69	401,92	17,60	9,60	4,50	20,55
<b>Diethyl oxalate</b>	136,60	18,54	4,28	8,64	20,90	362,19	0,07	31,52	0,12	312,98	48,17	326,44	16,20	8,00	8,80	20,10
<b>Ethyl lactate</b>	115,00	19,08	4,44	11,68	22,81	383,78	0,07	28,26	0,09	283,25	45,73	313,76	16,00	7,60	12,50	21,68
<b>Diethyl carbonate</b>	122,00	18,27	2,13	5,66	19,24	338,18	0,08	25,87	0,12	261,43	41,05	285,17	16,60	3,10	6,10	17,95
<b>Dimethyl carbonate</b>	84,20	21,03	2,08	7,46	22,41	446,59	0,07	28,58	0,11	286,13	51,32	255,46	15,50	3,90	9,70	18,70
<b>Acetaldehyde</b>	56,50	14,54	6,99	13,79	21,22	260,22	0,09	20,50	0,10	212,51	42,04					

<b>Acetaldehyde</b>	56,50	14,54	6,99	13,79	21,22	260,39	0,09	20,50	0,10	212,48	42,04					
<b>Propanal</b>	73,40	15,40	5,82	11,22	19,93	271,17	0,08	22,97	0,12	235,01	43,17	272,90	15,10	6,70	10,00	19,31
<b>Propanal</b>	73,40	15,41	5,82	11,21	19,93	271,38	0,08	22,97	0,12	234,98	43,17	272,90	15,10	6,70	10,00	19,31
<b>Butanal</b>	88,50	15,76	5,74	10,02	19,53	281,26	0,08	25,44	0,13	257,51	44,92	244,18	14,70	5,30	7,00	17,12
<b>Butanal</b>	88,50	15,76	5,74	10,01	19,53	281,45	0,08	25,44	0,13	257,47	44,92	244,18	14,70	5,30	7,00	17,12
<b>Pentanal</b>	106,40	15,84	4,97	9,40	19,08	275,58	0,08	24,36	0,12	247,61	40,45	334,85	15,70	9,40	5,80	19,20
<b>3-Methylbutanal</b>	106,00	15,26	5,05	9,33	18,59	258,43	0,08	23,18	0,12	236,95	38,55	306,34	14,70	9,50	5,00	18,20
<b>Hexanal</b>	122,50	16,13	4,67	8,61	18,87	281,94	0,08	25,60	0,12	258,99	40,57	321,89	15,80	8,50	5,40	18,74
<b>Heptanal</b>	139,80	16,20	4,38	8,00	18,59	281,62	0,08	25,96	0,12	262,26	39,37					
<b>Paraldehyde</b>	132,40	17,22	2,61	5,84	18,37	303,36	0,08	25,63	0,13	259,17	39,57	331,81	16,60	7,50	7,30	19,62
<b>Benzaldehyde</b>	101,50	18,85	6,32	10,28	22,38	395,12	0,06	38,00	0,14	372,03	64,10	431,12	19,40	7,40	5,30	21,43
<b>2-hydroxybenzaldehyde</b>	104,60	21,03	5,98	11,56	24,73	478,13	0,06	42,28	0,12	410,96	70,61	490,85	19,40	10,70	14,70	26,59
<b>Limonene</b>	162,90	17,47	1,22	2,58	17,70	306,53	0,08	27,18	0,13	273,35	39,16	299,08	17,20	1,80	4,30	17,82
<b>alfa-Pinene</b>	159,50	16,07	0,85	1,51	16,16	258,96	0,08	25,99	0,15	262,55	37,72	288,85	16,90	1,80	3,10	17,28
<b>alfa-Pinene</b>	158,80	16,10	0,85	1,55	16,20	260,02	0,08	25,63	0,15	259,23	37,25	288,85	16,90	1,80	3,10	17,28
<b>beta-Pinene</b>	156,20	16,98	0,88	1,71	17,09	289,10	0,08	26,82	0,14	269,75	39,19					
<b>Diethyl ether</b>	104,80	14,43	2,36	6,77	16,11	213,72	0,10	16,65	0,11	177,39	27,79	218,66	14,50	2,90	5,10	15,64
<b>Dibutyl ether</b>	170,30	15,65	1,96	4,10	16,30	248,82	0,08	22,44	0,13	230,15	31,86	245,65	15,30	3,40	3,30	16,02
<b>methyl t-butyl ether</b>	119,80	15,57	2,63	0,99	15,82	249,24	0,09	19,53	0,13	203,58	31,18	237,53	14,80	4,30	5,00	16,20
<b>methyl pentyl ether</b>	134,30	16,47	2,29	0,86	16,65	276,56	0,09	21,39	0,13	220,45	32,87					
<b>ethyl methyl ether</b>	84,10	14,15	2,75	8,88	16,93	207,83	0,11	15,27	0,10	164,82	27,43	240,10	14,70	4,90	6,20	16,69
<b>ethyl propyl ether</b>	119,30	15,13	2,26	5,65	16,31	234,07	0,09	19,28	0,12	201,36	30,82					
<b>ethyl butyl ether</b>	136,40	16,13	2,23	0,80	16,30	265,08	0,09	20,13	0,12	208,98	30,78					
<b>dipropyl ether</b>	137,70	15,19	2,21	5,21	16,21	235,76	0,09	19,98	0,12	207,74	30,45	245,65	15,10	4,20	3,70	16,10
<b>diisopropyl ether</b>	140,90	14,12	2,05	5,07	15,14	203,54	0,10	17,27	0,12	183,03	26,12	202,90	13,70	3,90	2,30	14,43
<b>dipentyl ether</b>	203,20	15,89	1,86	3,54	16,38	255,82	0,08	24,35	0,13	247,55	32,60	252,97	15,60	3,10	3,00	16,19
<b>1,1-Dimethoxyethane</b>	106,70	16,48	2,65	7,42	18,27	278,62	0,09	21,00	0,11	217,07	34,84	252,02	15,10	4,90	4,90	16,61
<b>1,1-Diethoxymethane</b>	125,30	17,10	2,26	7,73	18,91	297,63	0,09	20,15	0,10	209,14	31,68					
<b>1,1-Diethoxyethane</b>	143,90	16,14	1,94	5,10	17,03	264,19	0,09	20,89	0,12	215,95	31,37	236,56	15,00	3,40	4,00	15,89
<b>Methyl phenyl ether (Anisole)</b>	119,10	19,56	2,67	1,33	19,79	389,85	0,07	35,10	0,15	345,48	56,15	333,65	17,80	4,10	6,70	19,46
<b>Ethyl Phenyl Ether (Phenetole)</b>	127,30	18,93	2,65	5,44	19,88	365,53	0,07	32,41	0,14	321,07	50,70	358,81	18,40	4,50	4,00	19,36
<b>Anethole</b>	150,00	20,13	2,59	1,16	20,33	411,93	0,07	34,69	0,13	341,82	51,38	379,49	19,00	4,30	8,70	21,33
<b>Diphenyl ether</b>	160,40	18,67	1,96	5,27	19,50	352,33	0,08	26,75	0,11	269,47	38,75	394,40	19,60	3,20	5,80	20,69
<b>Chloromethane</b>	55,40	17,71	4,97	0,66	18,41	338,38	0,11	15,40	0,10	165,99	31,79	271,30	15,30	6,10	3,90	16,93
<b>Dichloromethane</b>	63,90	18,33	4,05	10,01	21,28	352,58	0,08	27,20	0,13	273,54	53,54	370,93	18,20	6,30	6,10	20,20
<b>Trichloromethane</b>	80,70	18,64	2,40	6,47	19,88	353,23	0,08	26,67	0,13	268,76	48,57	326,45	17,80	3,10	5,70	18,95
<b>Tetrachloromethane</b>	97,10	18,25	0,29	0,75	18,27	333,31	0,08	26,43	0,15	266,67	45,25	316,84	17,80	0,00	0,60	17,81
<b>1,1-Dichloroethane</b>	84,73	15,97	4,51	8,93	18,84	275,37	0,08	24,07	0,13	245,01	43,12	333,09	16,50	7,80	3,00	18,50
<b>1,2-Dichloroethane</b>	79,40	19,39	3,35	7,59	21,09	387,05	0,07	31,86	0,14	316,01	58,33	415,76	19,00	7,40	4,10	20,80
<b>1,1,1-Trichloroethane</b>	99,30	16,17	3,67	7,04	18,02	275,09	0,08	25,14	0,14	254,81	42,73	300,73	16,80	4,30	2,00	17,46
<b>1,1,2-Trichloroethane</b>	92,90	19,45	2,76	5,75	20,47	385,87	0,07	34,02	0,15	335,77	59,12	359,33	18,20	5,30	6,80	20,14
<b>1-Chloropropane</b>	88,10	17,67	4,39	1,27	18,25	331,51	0,09	21,27	0,12	219,52	37,62	316,84	16,00	7,80	2,00	17,91
<b>2-Chloropropane</b>	91,70	16,51	4,55	1,34	17,18	293,35	0,09	19,16	0,12	200,27	33,44	321,70	15,90	8,30	2,10	18,06

<b>1,2-Dichloropropane</b>	97,80	17,01	3,11	5,76	18,23	299,09	0,07	28,32	0,16	283,86	48,38					
<b>1,3-Dichloropropane</b>	95,10	20,02	4,34	1,86	20,57	419,52	0,07	33,32	0,15	329,30	57,44	413,20	18,60	8,20	3,00	20,55
<b>1,4-Dichlorobutane</b>	109,50	19,68	4,33	2,09	20,25	405,86	0,07	34,83	0,15	343,13	57,30	394,18	18,30	7,70	2,80	20,05
<b>1,5-Dichloropentane</b>	127,50	19,02	4,27	2,32	19,64	380,16	0,07	35,17	0,15	346,17	55,00	421,84	19,00	7,80	1,50	20,59
<b>1-Chlorobutane</b>	104,50	17,46	4,06	1,45	17,99	321,49	0,08	23,18	0,13	236,92	38,73	292,69	16,20	5,50	2,00	17,22
<b>2-Chlorobutane</b>	106,80	16,66	4,00	1,46	17,20	293,56	0,09	21,61	0,13	222,57	35,84	307,40	15,80	7,60	2,00	17,65
<b>1-Chloropentane</b>	120,90	17,27	3,99	1,61	17,80	314,26	0,08	24,40	0,13	248,10	38,83	303,61	16,00	6,90	1,90	17,53
<b>1-Chlorohexane</b>	137,40	17,13	3,76	1,72	17,62	307,52	0,08	25,73	0,14	260,18	39,24					
<b>3-Chloropropene</b>	82,30	17,84	4,32	1,43	18,41	337,01	0,08	23,14	0,13	236,47	41,86	327,44	17,00	6,20	2,30	18,24
<b>Dibromomethane</b>	69,80	22,86	3,55	1,27	23,17	535,13	0,06	39,05	0,15	381,45	74,64	357,80	17,80	6,40	7,00	20,17
<b>Tribromomethane</b>	87,50	22,09	2,35	1,13	22,24	493,46	0,06	44,87	0,17	434,70	79,54	474,77	21,40	4,10	6,10	22,63
<b>Bromoethane</b>	74,60	18,88	4,71	1,33	19,51	378,80	0,08	23,62	0,12	240,93	44,16	342,81	16,50	8,40	2,30	18,66
<b>1,1,2,2-Tetrabromoethane</b>	117,00	22,17	2,60	4,94	22,86	498,11	0,06	48,71	0,16	469,73	78,38	536,77	22,60	5,10	8,20	24,58
<b>1-Bromopropane</b>	90,90	18,51	4,60	1,58	19,14	363,92	0,08	25,26	0,13	255,84	44,20	331,37	16,40	7,90	4,80	18,83
<b>2-Bromopropane</b>	93,60	17,48	4,60	1,64	18,15	326,75	0,08	23,25	0,13	237,57	40,30	328,10	16,10	8,30	4,70	18,71
<b>1-Bromobutane</b>	107,60	18,28	4,07	1,53	18,79	350,64	0,08	25,90	0,13	261,68	42,85					
<b>iodomethane</b>	62,30	20,60	4,18	1,39	21,07	441,89	0,07	30,36	0,15	302,40	60,27	365,54	17,50	7,70	5,30	19,84
<b>iodoethane</b>	81,20	19,60	4,30	1,51	20,13	402,77	0,07	28,46	0,14	285,02	51,71	361,70	17,30	7,90	7,20	20,34
<b>1-iodopropane</b>	97,50	19,82	4,18	1,45	20,31	410,26	0,07	28,80	0,13	288,18	49,25					
<b>2-Iodopropane</b>	99,80	18,54	3,97	1,49	19,02	359,65	0,08	26,59	0,13	267,98	45,11					
<b>Diiodomethane</b>	80,50	23,72	3,01	4,97	24,42	571,56	0,05	66,18	0,22	628,91	120,62	332,05	17,80	3,90	5,50	19,03
<b>Trichlorosilane</b>	101,10	16,01	1,87	0,52	16,12	259,67	0,10	17,74	0,12	187,30	29,97	214,60	14,20	3,60	3,80	15,13
<b>1-Methylnaphthalene</b>	139,00	20,19	1,12	2,24	20,35	408,95	0,06	37,63	0,15	368,62	57,16	425,00	20,60	0,80	4,70	21,14
<b>cis-decahydronaphthalene</b>	156,90	17,61	0,31	0,55	17,62	310,33	0,07	31,59	0,15	313,72	46,10*	353,44	18,8	0	0	18,8
<b>1,2,3,4-Tetrahydronaphthalene</b>	136,00	19,92	0,63	1,46	19,98	397,26	0,07	33,17	0,14	328,00	50,76	388,16	19,60	2,00	2,90	19,91
<b>4-cymene</b>	155,50	17,68	0,27	0,62	17,69	312,56	0,08	26,64	0,13	268,89	38,99					
<b>1-Pentene</b>	110,40	14,79	1,15	4,21	15,42	220,06	0,11	15,45	0,11	166,43	25,35	195,17	13,90	1,40	3,80	14,48
<b>cis-2-pentene</b>	107,80	15,43	0,79	2,80	15,70	238,73	0,10	16,80	0,12	178,72	27,78					
<b>trans-2-pentene</b>	107,40	15,69	0,23	1,05	15,72	246,08	0,11	16,41	0,12	176,56	27,17					
<b>2-Methyl-1-butene</b>	108,70	14,84	1,16	4,03	15,42	221,46	0,10	15,94	0,12	170,90	26,29	204,88	14,20	1,80	2,30	14,50
<b>2-Methyl-2-butene</b>	106,70	15,68	0,86	3,08	16,01	246,75	0,10	17,15	0,12	181,93	28,46	208,49	14,30	2,00	3,90	14,96
<b>3-Methyl-1-Butene</b>	112,90	14,36	0,79	3,38	14,77	206,78	0,11	13,84	0,11	151,75	22,54	197,96	14,00	1,40	3,80	14,57
<b>1-Hexene</b>	126,10	15,44	1,00	3,10	15,78	239,51	0,10	17,90	0,12	188,77	28,09	217,30	14,70	1,10	0,00	14,74
<b>1-Heptene</b>	141,90	15,64	1,25	3,30	16,03	246,05	0,09	19,80	0,12	206,10	29,88	226,21	15,00	1,10	2,60	15,26
<b>1-Octene</b>	158,00	16,01	0,89	2,20	16,18	256,97	0,09	21,28	0,13	219,59	30,98	235,09	15,30	1,00	2,40	15,52
<b>1-Nonene</b>	170,50	16,20	1,12	2,60	16,44	263,65	0,08	22,56	0,13	231,26	32,02	238,16	15,40	1,00	2,20	15,59
<b>1-Decene</b>	190,60	16,18	0,84	1,79	16,30	262,41	0,08	23,54	0,13	240,19	32,19	250,64	15,80	1,00	2,20	15,98
<b>1-Undecene</b>	202,20	16,32	0,98	2,02	16,48	267,43	0,08	24,41	0,13	248,11	32,73					
<b>1-Dodecene</b>	222,06	16,16	0,92	1,78	16,28	262,00	0,08	24,95	0,13	253,05	32,43					
<b>1-Tridecene</b>	237,70	16,14	0,89	1,63	16,25	261,28	0,08	25,80	0,13	260,81	32,78					
<b>1-Tetradecene</b>	253,40	16,08	0,88	1,53	16,18	259,43	0,08	26,36	0,13	265,90	32,78	259,46	16,10	0,50	1,90	16,22
<b>Eicosene</b>	363,60	16,48	0,73	0,73	16,52	272,27	0,06	43,49	0,19	422,30	47,95					
<b>cyclopentene</b>	89,00	17,92	0,66	2,19	18,07	321,68	0,08	22,20	0,13	227,93	39,13	293,33	16,70	3,80	1,70	17,21

<b>cyclohexene</b>	101,30	18,37	0,90	0,34	18,40	338,26	0,08	26,17	0,14	264,17	44,18						
<b>fluorobenzene</b>	94,70	18,81	3,39	1,22	19,16	365,42	0,08	26,66	0,13	268,58	46,03	386,90	18,70	6,10	2,00	19,77	
<b>chlorobenzene</b>	102,10	19,72	3,47	1,54	20,08	400,95	0,07	33,00	0,15	326,29	55,56	379,49	19,00	4,30	2,00	19,58	
<b>4-chlorotoluene</b>	118,20	19,24	4,14	1,90	19,77	387,36	0,07	32,23	0,14	319,38	51,68	403,25	19,10	6,20	2,60	20,25	
<b>bromobenzene</b>	105,30	20,23	3,44	1,56	20,58	421,24	0,07	35,24	0,15	346,76	58,73	450,50	20,50	5,50	4,10	21,62	
<b>Iodobenzene</b>	112,00	20,52	3,36	1,67	20,86	432,33	0,06	38,71	0,16	378,35	63,20	416,25	19,50	6,00	6,10	21,29	
<b>1,2-Dichlorobenzene</b>	112,60	20,08	4,69	1,25	20,66	425,13	0,08	26,84	0,11	271,51	43,74	408,33	19,20	6,30	3,30	20,47	
<b>1,3-Dichlorobenzene</b>	114,80	20,14	3,34	1,55	20,47	416,59	0,07	35,44	0,15	348,54	57,38	414,10	19,70	5,10	2,70	20,53	
<b>Benzene</b>	89,40	19,69	0,27	0,86	19,71	387,92	0,08	28,22	0,14	283,86	49,67	338,56	18,40	0,00	2,00	18,51	
<b>Toluene</b>	106,80	18,71	0,94	2,36	18,88	350,84	0,07	27,93	0,14	280,13	46,32	325,96	18,00	1,40	2,00	18,16	
<b>2-Ethyl toluene</b>	136,00	18,45	1,20	0,55	18,49	341,75	0,07	29,68	0,14	296,13	45,42						
<b>3-Ethyl toluene</b>	138,50	18,33	0,81	0,37	18,35	336,54	0,07	29,27	0,14	292,38	44,52						
<b>4-Ethyl toluene</b>	139,60	18,25	0,28	0,65	18,27	333,26	0,07	28,77	0,14	288,62	43,64						
<b>Ethylbenzene</b>	123,00	18,52	1,31	0,57	18,57	344,70	0,07	28,75	0,14	287,56	45,49	317,20	17,80	0,60	1,40	17,87	
<b>1,2-Dimethylbenzene</b>	121,20	18,55	1,37	3,02	18,84	345,97	0,07	29,76	0,14	296,88	47,33	317,84	17,80	1,00	3,10	18,10	
<b>1,3-Dimethylbenzene</b>	123,44	18,55	0,79	1,86	18,66	344,81	0,07	28,47	0,14	285,09	45,00	303,76	17,40	1,00	3,10	17,70	
<b>1,4-Dimethylbenzene</b>	123,30	18,65	0,27	0,68	18,66	347,92	0,08	28,01	0,14	281,13	44,29	310,76	17,60	1,00	3,10	17,90	
<b>1,2-Diethylbenzene</b>	153,50	17,98	1,19	0,60	18,03	324,80	0,07	29,78	0,14	297,00	43,76	313,30	17,70	0,10	1,00	17,73	
<b>1,3-Diethylbenzene</b>	155,90	17,79	0,83	1,69	17,89	317,20	0,07	28,65	0,14	286,56	41,89						
<b>1,4-Diethylbenzene</b>	156,90	17,90	0,28	0,58	17,91	320,55	0,07	28,49	0,14	285,22	41,56	324,00	18,00	0,00	0,60	18,01	
<b>Propylbenzene</b>	138,80	18,23	0,87	1,95	18,35	333,11	0,07	28,44	0,14	284,83	43,23						
<b>Isopropylbenzene</b>	139,10	17,65	0,91	1,94	17,78	312,44	0,08	27,69	0,14	277,97	42,05	329,05	18,10	1,20	1,20	18,18	
<b>1,2,3-Trimethylbenzene</b>	134,44	18,71	1,18	2,87	18,96	351,35	0,07	28,31	0,13	283,57	43,49						
<b>1,2,4-Trimethylbenzene</b>	133,60	18,91	0,76	1,81	19,02	358,29	0,07	29,20	0,13	291,60	44,94	317,00	17,80	0,40	1,00	17,83	
<b>1,3,5-Trimethylbenzene (mesitylene)</b>	139,80	18,58	0,26	0,65	18,59	345,27	0,08	27,55	0,13	276,69	41,78	324,00	18,00	0,00	0,60	18,01	
<b>1-Butylbenzene</b>	157,00	17,94	0,83	1,75	18,04	322,44	0,07	28,72	0,14	287,35	41,89	302,77	17,40	0,10	1,10	17,44	
<b>Isobutylbenzene</b>	154,00	17,57	0,75	1,63	17,66	309,18	0,08	26,99	0,14	271,63	39,63						
<b>sec-Butylbenzene</b>	156,00	17,35	0,88	1,72	17,46	301,88	0,07	28,34	0,15	284,04	41,44						
<b>tert-Butylbenzene</b>	156,10	16,77	1,36	2,53	17,02	283,12	0,08	27,30	0,15	274,45	39,90						
<b>n-Pentylbenzene</b>	171,80	17,93	0,27	0,53	17,94	321,56	0,07	28,99	0,14	288,76	41,03						
<b>Hexylbenzene</b>	188,47	17,72	0,28	0,51	17,73	314,18	0,07	29,58	0,14	294,39	40,60						
<b>n-Decylbenzene</b>	255,10	16,99	0,28	0,49	17,00	288,76	0,07	30,53	0,14	304,97	37,88						
<b>Styrene</b>	115,60	19,33	0,52	1,16	19,37	373,90	0,07	32,00	0,15	317,25	51,70	346,96	18,60	1,00	4,10	19,07	
<b>a-Methylstyrene</b>	130,20	18,70	1,59	0,81	18,78	352,11	0,07	32,56	0,15	322,33	50,56						
<b>Methylal</b>	88,80	17,03	1,73	5,59	18,01	293,04	0,09	20,59	0,12	213,21	36,32	228,24	15,00	1,80	8,60	17,38	
<b>Nitromethane</b>	54,30	19,13	9,11	16,36	26,77	449,02	0,07	36,48	0,11	358,18	75,81	603,08	15,80	18,80	5,10	25,08	
<b>Nitroethane</b>	71,50	17,50	8,44	14,01	23,96	377,59	0,07	32,08	0,11	318,05	60,83	496,25	16,00	15,50	4,50	22,73	
<b>1-Nitropropane</b>	88,40	16,87	7,61	12,47	22,32	342,57	0,07	30,13	0,11	300,23	53,22	426,85	16,60	12,30	5,50	21,38	
<b>2-Nitropropane</b>	86,90	16,23	7,81	11,96	21,62	324,27	0,07	29,28	0,12	292,48	52,02	408,85	16,20	12,10	4,10	20,63	
<b>1-Nitrobutane</b>	106,20	16,88	6,47	11,12	21,23	326,93	0,07	29,23	0,12	292,05	48,57						
<b>Ethylene Glycol</b>	55,80	26,49	6,30	21,70	34,82	741,49	0,06	47,99	0,09	463,12	98,83	410,00	17,00	11,00	26,00	32,95	
<b>Diethylene Glycol</b>	94,90	23,85	5,13	13,62	27,94	594,86	0,06	44,77	0,11	433,80	77,25	419,56	16,60	12,00	20,70	29,12	

<b>Triethylene Glycol</b>	114,00	23,50	5,52	13,83	27,82	582,89	0,06	45,13	0,10	437,08	73,25	412,25	16,00	12,50	18,60	27,54
<b>Trimethylene Glycol</b>	72,50	25,07	5,87	18,23	31,55	663,20	0,06	45,17	0,09	437,44	85,25	464,49	16,80	13,50	23,20	31,67
<b>Ethylene Glycol Monomethyl Ether</b>	79,10	20,09	4,75	12,77	24,27	426,09	0,07	30,84	0,10	306,79	56,54	347,08	16,20	9,20	16,40	24,82
<b>Ethylene Glycol Monoethyl Ether</b>	97,80	19,10	4,20	10,97	22,43	382,56	0,07	28,35	0,10	283,98	48,43	347,08	16,20	9,20	14,30	23,49
<b>Ethylene glycol Monobutyl ether</b>	131,60	18,22	3,64	9,45	20,85	345,29	0,08	26,14	0,10	263,92	40,44	282,01	16,00	5,10	12,30	20,82
<b>Diethylene Glycol Dimethyl Ether</b>	142,00	17,51	3,40	6,38	18,95	318,27	0,07	29,56	0,13	295,06	44,59	283,70	15,70	6,10	6,50	18,05
<b>Diethylene Glycol Diethyl Ether</b>	179,80	16,69	3,02	5,73	17,91	287,83	0,08	26,80	0,13	269,93	37,37	284,45	15,80	5,90	5,60	17,77
<b>Bis[2-(2-methoxyethoxy) ethyl] ether</b>	225,40	18,45	2,72	4,96	19,30	347,76	0,07	33,41	0,12	330,19	43,20					
<b>Dichloroethyl Ether</b>	117,20	14,89	5,00	5,00	16,49	246,83	0,07	37,31	0,24	367,70	60,00	434,44	18,80	9,00	5,70	21,61
<b>1,4-Dioxane</b>	85,70	20,81	5,56	2,05	21,64	463,94	0,07	32,76	0,13	324,11	58,47	364,24	19,00	1,80	7,40	20,47
<b>Water</b>	18,00	32,31	8,46	36,88	49,76	1115,57	0,05	71,99	0,09	683,22	216,18	496,25	15,50	16,00	42,30	47,81
<b>Acetonitrile</b>	52,60	15,80	10,48	16,37	25,05	359,42	0,08	27,40	0,10	275,33	57,55	558,09	15,30	18,00	6,10	24,40
<b>Propionitrile</b>	70,90	15,05	9,26	14,03	22,57	312,43	0,08	25,60	0,10	258,89	48,67	438,58	15,30	14,30	5,50	21,65
<b>Butyronitrile</b>	87,30	15,06	8,48	12,68	21,43	298,67	0,08	25,88	0,11	261,53	45,91	387,85	15,30	12,40	5,10	20,34
<b>Valeronitrile</b>	103,80	15,10	7,88	11,75	20,69	290,00	0,08	26,00	0,11	262,58	43,54	355,09	15,30	11,00	4,80	19,45
<b>Capronitrile</b>	120,05	15,24	7,33	10,96	20,15	285,95	0,08	26,47	0,11	266,88	42,22					
<b>Caprylonitrile</b>	154,20	17,57	6,55	3,04	19,00	351,61	0,08	26,80	0,12	269,54	39,33					
<b>Nonanenitrile</b>	177,15	16,81	6,17	3,29	18,21	320,81	0,08	27,28	0,12	274,18	38,22					
<b>Benzonitrile</b>	103,00	20,67	8,06	3,76	22,51	492,44	0,06	37,63	0,13	368,54	63,18	383,76	17,40	9,00	3,30	19,87
<b>Glutaronitrile</b>	95,30	26,35	7,81	2,29	27,58	755,46	0,06	47,59	0,12	459,42	81,99					
<b>Adiponitrile</b>	111,50	25,54	6,96	2,14	26,56	700,82	0,06	45,45	0,11	439,77	74,31					
<b>Lactonitrile</b>	71,90	30,33	6,41	0,60	31,00	960,87	0,07	34,95	0,07	344,23	66,15					
<b>3-Butenenitrile</b>	80,50	21,27	7,44	1,86	22,61	507,82	0,08	27,60	0,11	277,16	50,31	460,49	16,00	14,30	5,60	22,18
<b>Formamide</b>	39,80	25,33	11,38	26,70	38,53	771,27	0,05	57,02	0,10	545,37	131,43	982,28	17,20	26,20	19,00	36,65
<b>Hydrazine</b>	32,10	30,40	6,11	22,15	38,11	961,40	0,05	66,39	0,12	630,90	164,40	270,53	14,20	8,30	8,90	18,70
<b>Methylamine</b>	44,40	17,23	3,90	15,41	23,44	312,01	0,09	19,15	0,08	200,17	42,56	222,29	13,00	7,30	17,30	22,84
<b>Ethylamine</b>	65,60	16,68	3,06	10,70	20,05	287,70	0,09	19,20	0,10	200,62	37,47	256,36	15,00	5,60	10,70	19,26
<b>n-Propylamine</b>	83,00	17,27	2,66	8,13	19,27	305,42	0,09	21,75	0,11	223,85	39,24	309,62	16,90	4,90	8,60	19,59
<b>n-Butylamine</b>	99,00	17,13	2,89	7,44	18,89	301,64	0,08	23,44	0,12	239,21	39,87	282,69	16,20	4,50	8,00	18,62
<b>Isobutylamine</b>	99,60	16,67	2,65	7,19	18,35	284,96	0,09	21,75	0,12	223,86	36,93					
<b>sec-butylamine</b>	100,90	16,34	2,65	7,16	18,04	274,20	0,09	21,11	0,12	218,07	35,69					
<b>tert-butylamine</b>	105,08	14,74	2,60	7,78	16,87	224,07	0,10	16,87	0,11	179,38	28,13					
<b>n-Pentylamine</b>	115,49	17,05	2,98	6,89	18,63	299,58	0,08	24,69	0,12	250,64	39,90					
<b>tert-pentylamine</b>	116,84	15,47	2,71	6,81	17,12	246,60	0,09	19,91	0,12	207,09	32,05					
<b>Hexylamine</b>	132,10	17,11	2,87	6,25	18,44	301,05	0,08	25,75	0,13	260,30	39,79					
<b>Heptylamine</b>	148,59	16,82	2,81	6,57	18,28	290,97	0,08	24,00	0,11	244,38	35,66					
<b>Dimethylamine</b>	66,20	17,97	2,70	6,60	19,34	330,31	0,08	26,34	0,15	265,65	51,23	257,13	15,30	4,80	11,20	19,56
<b>Diethylamine</b>	103,20	16,18	1,96	5,73	17,28	265,57	0,09	19,85	0,12	206,52	33,30	227,30	14,90	2,30	6,10	16,26
<b>Di-n-propylamine</b>	136,90	16,36	1,98	4,82	17,17	271,45	0,08	22,31	0,12	228,92	34,06	236,05	15,30	1,40	4,10	15,90

<b>Diisopropylamine</b>	136,90	15,03	2,18	5,40	16,12	230,61	0,09	19,14	0,12	200,07	29,23	236,05	15,30	1,40	4,10	15,90
<b>Di-n-butylamine</b>	170,00	16,49	1,68	3,65	16,98	274,88	0,08	24,12	0,13	245,45	34,27	234,00	15,00	3,00	4,30	15,89
<b>Trimethylamine</b>	90,30	14,31	1,42	6,46	15,76	206,76	0,12	13,41	0,10	147,77	23,52	224,72	14,60	3,40	1,80	15,10
<b>Triethylamine</b>	138,60	15,56	1,32	3,28	15,96	243,89	0,09	20,22	0,13	209,87	30,75					
<b>Tripopylamine</b>	189,60	15,84	1,27	2,78	16,13	252,53	0,08	22,39	0,13	229,64	30,67					
<b>Tributylamine</b>	239,50	15,46	1,23	2,16	15,66	240,65	0,08	24,40	0,14	247,97	30,92					
<b>Dipentylamine</b>	202,40	16,34	1,86	3,54	16,82	270,55	0,08	25,71	0,13	259,92	34,46					
<b>Tripentylamine</b>	287,50	15,05	1,44	2,15	15,27	228,53	0,08	25,82	0,14	260,91	30,78					
<b>Ethylene diamine</b>	67,30	22,53	4,66	11,50	25,72	529,22	0,06	41,28	0,13	401,84	79,86	353,00	16,60	8,80	17,00	25,34
<b>Aniline</b>	91,50	22,40	3,31	7,82	23,95	512,55	0,06	42,12	0,14	409,61	73,56	402,37	19,40	5,10	10,20	22,50
<b>N-Methylaniline</b>	108,40	21,04	3,34	7,84	22,70	453,98	0,07	36,90	0,13	362,04	60,91	416,25	19,50	6,00	11,50	23,42
<b>Dimethylaniline</b>	123,70	19,52	3,15	6,20	20,72	390,91	0,07	35,52	0,14	349,42	56,10	395,68	19,20	5,20	8,70	21,71
<b>Ethanolamine</b>	59,80	29,97	2,11	11,37	32,13	902,70	0,06	48,30	0,10	465,91	97,20	529,25	17,00	15,50	21,20	31,28
<b>Triethanolamine</b>	133,20	27,18	1,97	7,59	28,28	742,36	0,06	47,20	0,10	455,89	72,74	801,05	17,30	22,40	23,30	36,66
<b>Benzylamine</b>	109,20	21,32	2,78	6,20	22,37	462,09	0,06	39,30	0,14	383,88	64,71	389,80	19,20	4,60	11,70	22,95
<b>Cyclohexylamine</b>	113,80	18,44	2,62	5,27	19,35	346,78	0,07	31,22	0,15	310,23	50,70	305,45	17,20	3,10	6,50	18,65
<b>Allylamine</b>	74,90	18,58	3,09	9,78	21,23	354,88	0,08	24,28	0,11	246,87	45,32	272,74	15,50	5,70	10,60	19,62
<b>Carbon disulfide</b>	60,00	22,16	0,28	1,02	22,19	491,25	0,07	31,58	0,14	313,82	63,48	420,25	20,50	0,00	0,60	20,51
<b>N,N-Dimethyl sulfoxide</b>	71,30	20,09	9,14	15,22	26,81	487,09	0,06	42,92	0,12	416,89	81,46	607,52	18,40	16,40	10,20	26,68
<b>Dimethyl sulfide</b>	88,60	16,05	3,31	6,67	17,69	268,51	0,08	24,06	0,15	244,96	42,47	360,13	17,30	7,80	6,50	20,06
<b>Diethyl sulfide</b>	107,40	16,75	3,08	6,81	18,35	290,22	0,08	24,57	0,13	249,58	40,68	291,85	16,80	3,10	2,00	17,20
<b>Dimethyl disulfide</b>	88,60	20,37	4,29	1,75	20,89	433,19	0,07	33,39	0,14	329,90	58,94					
<b>Furfural</b>	83,20	19,76	7,76	12,31	24,54	450,63	0,06	43,08	0,14	418,34	77,65	567,97	18,60	14,90	5,10	24,37
<b>Thiophene</b>	79,00	20,49	1,43	4,12	20,95	421,70	0,07	30,68	0,14	305,27	56,27	362,97	18,90	2,40	7,80	20,59
<b>2-methyl thiophene</b>	96,25	19,53	1,58	4,02	20,00	384,06	0,07	30,19	0,14	300,83	51,85					
<b>2-ethylthiophene</b>	113,10	18,95	1,06	2,56	19,15	360,16	0,07	29,35	0,14	293,15	47,76					
<b>2,5-Dimethyl thiophene</b>	114,01	18,93	1,19	2,78	19,17	359,66	0,07	29,91	0,14	298,29	48,54					
<b>Pyridine</b>	80,90	21,82	4,91	1,84	22,44	500,23	0,07	36,56	0,14	358,83	66,52	438,44	19,00	8,80	5,90	21,75
<b>2-Methylpyridine</b>	98,00	20,21	4,19	1,72	20,71	426,05	0,07	33,05	0,14	326,84	56,42	395,37	17,93	8,60	3,80	20,24
<b>Pyridazine</b>	72,60	24,55	9,48	3,60	26,56	692,64	0,06	47,96	0,14	462,70	90,48	710,80	20,20	17,40	11,70	29,12
<b>Piperidine</b>	98,90	18,99	2,53	6,30	20,17	367,05	0,07	28,91	0,13	289,11	49,19	330,01	17,60	4,50	8,90	20,23
<b>Pyrimidine</b>	74,20	25,13	5,37	1,23	25,72	660,27	0,07	36,56	0,11	358,81	68,47					
<b>Quinoline</b>	118,00	21,78	4,30	2,02	22,29	492,73	0,06	42,59	0,15	413,86	68,34	425,36	19,40	7,00	7,60	21,98
<b>Pyrrole</b>	69,20	22,03	4,44	11,99	25,47	505,05	0,06	37,06	0,12	363,46	71,04	423,40	19,20	7,40	6,70	21,64
<b>Pyrrolidine</b>	83,50	19,02	3,53	8,68	21,21	374,28	0,07	29,23	0,13	292,02	52,62	362,66	17,90	6,50	7,40	20,43
<b>Methanethiol</b>	54,10	17,35	4,17	10,89	20,91	318,54	0,08	23,85	0,12	243,04	49,63	334,85	16,60	7,70	8,60	20,22
<b>1-Ethanethiol (ethyl mercaptan)</b>	74,30	16,83	3,72	9,34	19,60	297,04	0,08	23,08	0,12	235,98	43,20	288,74	15,70	6,50	7,10	18,42
<b>1-Propanethiol</b>	90,50	18,54	3,33	1,05	18,86	354,69	0,08	24,20	0,13	246,23	42,42	292,85	16,10	5,80	5,70	18,04
<b>2-Propanethiol</b>	94,10	17,51	3,28	1,00	17,85	317,53	0,09	21,33	0,12	219,80	36,90	311,93	16,30	6,80	6,50	18,82
<b>1-Butanethiol</b>	107,80	16,84	3,06	6,58	18,33	292,79	0,08	25,22	0,13	255,49	41,70	293,78	16,30	5,30	4,50	17,72
<b>2-Methyl-1-propanethiol</b>	108,10	16,28	3,05	6,69	17,86	274,44	0,08	23,50	0,13	239,85	38,82					
<b>2-Methyl-2-propanethiol</b>	112,90	14,73	3,10	6,65	16,45	226,42	0,09	19,97	0,13	207,67	32,52					
<b>1-Pentanethiol</b>	124,40	16,84	2,84	5,86	18,06	291,70	0,08	25,86	0,13	261,37	40,77					



<b>1-Hexanethiol</b>	142,12	16,82	2,71	5,20	17,82	290,37	0,08	27,02	0,14	271,91	40,74						
<b>1-Heptanethiol</b>	156,71	16,87	2,63	5,14	17,83	291,54	0,08	26,84	0,13	270,31	39,18						
<b>1-Octanethiol</b>	168,80	17,72	2,61	1,19	17,96	320,99	0,08	27,36	0,13	275,04	38,96						
<b>Benzenethiol</b>	102,40	21,31	2,60	1,13	21,50	461,11	0,06	38,41	0,15	375,75	64,60	420,25	20,00	4,50	10,30	22,94	
<b>Acetic anhydride</b>	94,50	18,74	5,67	11,54	22,73	383,23	0,07	31,93	0,11	316,66	55,17	392,89	16,00	11,70	10,20	22,29	
<b>Formic acid</b>	37,80	22,00	4,66	12,55	25,76	505,91	0,07	37,13	0,14	364,09	87,06	346,10	14,30	11,90	16,60	24,93	
<b>Acetic acid</b>	57,10	18,57	4,60	11,85	22,50	365,86	0,08	27,10	0,12	272,53	55,38	274,25	14,50	8,00	13,50	21,37	
<b>1-Propanoic acid</b>	75,00	19,63	4,02	13,37	24,09	401,42	0,08	26,20	0,09	264,44	48,88	244,18	14,70	5,30	12,40	19,95	
<b>1-Butanoic acid</b>	110,00	19,08	3,18	9,68	21,63	374,20	0,08	26,05	0,10	263,10	42,79	238,82	14,90	4,10	10,60	18,74	
<b>Isobutanoic acid</b>	93,40	20,75	2,31	10,68	23,45	435,76	0,08	24,58	0,08	249,69	42,64						
<b>1-Pentanoic acid</b>	109,20	20,17	3,10	10,96	23,17	416,51	0,08	26,69	0,09	268,90	43,94	241,81	15,00	4,10	10,30	18,65	
<b>Isopentanoic acid</b>	111,00	21,04	1,32	6,14	21,96	444,59	0,08	25,07	0,09	254,04	41,05	285,77	16,40	4,10	10,70	20,01	
<b>1-Heptanoic acid</b>	138,70	20,19	2,88	9,49	22,49	415,91	0,08	27,76	0,09	278,70	42,21						
<b>Dichloroacetic acid</b>	82,50	22,01	5,24	15,07	27,18	511,70	0,07	35,45	0,09	348,73	64,09	396,85	18,20	8,10	12,20	23,36	
<b>pentane</b>	116,20	15,34	0,23	1,03	15,37	235,30	0,11	15,50	0,11	167,79	24,99	210,25	14,50	0,00	0,00	14,50	
<b>Isopentane</b>	116,46	14,79	0,46	1,77	14,90	219,00	0,11	15,21	0,12	164,27	24,52	187,69	13,70	0,00	0,00	13,70	
<b>Hexane</b>	131,40	15,63	0,24	0,86	15,65	244,21	0,10	17,89	0,12	189,88	27,69	222,01	14,90	0,00	0,00	14,90	
<b>2-Methylpentane</b>	132,88	15,11	0,24	0,74	15,13	228,31	0,10	16,88	0,12	178,75	26,03						
<b>3-Methylpentane</b>	130,62	15,26	0,25	0,83	15,29	233,07	0,10	17,61	0,13	187,06	27,31						
<b>2,2-Dimethylbutane</b>	133,73	14,55	0,24	0,75	14,57	211,77	0,10	15,75	0,12	168,28	24,24						
<b>2,3-Dimethylbutane</b>	131,17	14,99	0,25	0,74	15,01	224,68	0,10	16,96	0,13	179,58	26,27						
<b>Heptane</b>	147,40	15,79	0,25	0,74	15,81	249,30	0,09	19,66	0,13	205,65	29,28	234,09	15,30	0,00	0,00	15,30	
<b>2,2-Dimethylpentane</b>	149,67	14,77	0,25	0,70	14,79	218,33	0,10	17,55	0,13	185,49	26,01						
<b>2,3-Dimethylpentane</b>	145,05	15,27	0,27	0,69	15,29	233,36	0,09	19,47	0,13	203,43	29,16						
<b>2,4-Dimethylpentane</b>	146,71	15,11	0,25	0,70	15,12	228,27	0,10	17,66	0,12	186,12	26,35						
<b>3,3-Dimethylpentane</b>	145,40	15,04	0,27	0,69	15,06	226,21	0,09	19,10	0,14	200,05	28,59						
<b>2,2,3-Trimethylbutane</b>	146,15	14,86	0,26	0,77	14,88	220,78	0,10	18,27	0,13	193,57	27,30						
<b>2-Methylhexane</b>	148,60	15,31	0,25	0,74	15,33	234,58	0,10	18,74	0,13	197,28	27,85						
<b>3-Methylhexane</b>	146,71	15,42	0,26	0,75	15,44	237,83	0,09	19,31	0,13	202,87	28,81						
<b>3-Ethylpentane</b>	144,40	15,55	0,26	0,69	15,56	241,78	0,09	19,94	0,13	207,70	29,91						
<b>Octane</b>	163,50	15,90	0,26	0,65	15,91	252,76	0,09	21,15	0,13	218,88	30,43	240,25	15,50	0,00	0,00	15,50	
<b>2-Methylheptane</b>	164,63	15,46	0,26	0,65	15,48	239,17	0,09	20,15	0,13	209,54	28,93						
<b>3-Methylheptane</b>	162,78	15,55	0,26	0,63	15,56	241,85	0,09	20,82	0,13	215,62	30,00						
<b>4-methylheptane</b>	163,06	15,53	0,26	0,65	15,54	241,12	0,09	20,60	0,13	213,92	29,68						
<b>2,3-Dimethylhexane</b>	161,31	15,37	0,27	0,67	15,38	236,24	0,09	20,54	0,13	213,76	29,70						
<b>2,2,3-Trimethylpentane</b>	160,43	15,09	0,27	0,61	15,10	227,72	0,09	20,22	0,14	209,71	29,29						
<b>2,2,4-Trimethylpentane</b>	165,10	14,80	0,26	0,61	14,82	219,13	0,09	18,91	0,13	197,45	27,13	198,81	14,10	0,00	0,00	14,10	
<b>2,3,3-Trimethylpentane</b>	157,40	15,26	0,28	0,60	15,27	232,94	0,09	21,12	0,14	217,91	30,78						
<b>2,3,4-Trimethylpentane</b>	158,80	15,34	0,27	0,61	15,35	235,25	0,09	20,70	0,14	214,09	30,08						
<b>3-Ethylhexane</b>	161,01	15,62	0,27	0,60	15,63	243,99	0,09	21,13	0,13	217,76	30,57						
<b>2,2-Dimethylheptane</b>	177,10	15,32	0,25	0,61	15,33	234,77	0,09	19,70	0,13	204,79	27,61						
<b>2,2,4-Trimethylhexane</b>	177,50	15,11	0,28	0,58	15,12	228,38	0,09	21,36	0,14	220,50	29,91						
<b>2,2,5-Trimethylhexane</b>	178,20	15,06	0,28	0,60	15,08	226,95	0,09	21,54	0,14	222,77	30,12						

<b>2,4,4-Trimethylhexane</b>	177,50	15,13	0,27	0,59	15,15	229,06	0,09	20,75	0,14	214,91	29,06						
<b>3,3-Diethylpentane</b>	170,40	15,63	0,24	0,60	15,64	244,32	0,09	19,63	0,12	203,49	27,87						
<b>3-Ethyl-2,2-dimethylpentane</b>	177,50	15,13	0,29	0,58	15,14	228,99	0,09	21,92	0,14	225,90	30,70						
<b>2,2,3,3-tetramethylpentane</b>	170,34	15,32	0,30	0,58	15,34	234,92	0,08	22,94	0,15	235,16	32,57						
<b>2,2,3,4-Tetramethylpentane</b>	177,90	15,05	0,27	0,59	15,06	226,60	0,09	20,52	0,14	212,81	28,72						
<b>Nonane</b>	179,67	15,96	0,26	0,62	15,97	254,72	0,09	22,38	0,13	230,51	31,21	246,49	15,70	0,00	0,00	15,70	
<b>2-Methyloctane</b>	180,75	15,59	0,26	0,62	15,60	243,12	0,09	21,41	0,13	221,55	29,80						
<b>3-Methyloctane</b>	177,90	15,68	0,27	0,58	15,69	245,93	0,09	21,87	0,13	224,88	30,60						
<b>4-Methyloctane</b>	177,60	15,68	0,27	0,56	15,69	245,95	0,08	21,87	0,13	224,31	30,62						
<b>3-Ethylheptane</b>	176,70	15,72	0,26	0,61	15,73	247,04	0,09	21,41	0,13	221,01	30,03						
<b>2,6-Dimethylheptane</b>	180,70	15,29	0,26	0,60	15,30	233,88	0,09	20,55	0,13	212,99	28,61						
<b>Decane</b>	195,90	15,99	0,26	0,59	16,00	255,62	0,08	23,37	0,13	239,74	31,67	246,49	15,70	0,00	0,00	15,70	
<b>Undecane</b>	212,70	15,96	0,27	0,54	15,98	254,91	0,08	24,21	0,13	246,84	31,92	256,00	16,00	0,00	0,00	16,00	
<b>Dodecane</b>	228,60	15,96	0,27	0,50	15,97	254,73	0,08	24,91	0,13	252,77	32,06	256,00	16,00	0,00	0,00	16,00	
<b>Tridecane</b>	243,90	15,96	0,27	0,49	15,97	254,68	0,08	25,55	0,14	258,88	32,18						
<b>Tetradecane</b>	261,30	15,85	0,27	0,53	15,86	251,28	0,08	26,13	0,14	266,14	32,16	262,44	16,20	0,00	0,00	16,20	
<b>2,2-Dimethylhexane</b>	165,29	14,98	0,26	0,65	15,00	224,57	0,09	19,21	0,13	201,03	27,55						
<b>2,4-Dimethylhexane</b>	164,08	15,19	0,26	0,67	15,21	230,81	0,09	19,59	0,13	204,77	28,16						
<b>2,5-Dimethylhexane</b>	165,70	15,13	0,26	0,67	15,15	228,97	0,09	19,40	0,13	203,21	27,80						
<b>3,3-Dimethylhexane</b>	161,81	15,16	0,27	0,60	15,18	230,04	0,09	20,20	0,14	209,36	29,18						
<b>3,4-Dimethylhexane</b>	159,73	15,45	0,27	0,60	15,47	238,82	0,09	21,14	0,14	217,98	30,66						
<b>2-Methyl-3-Ethylpentane</b>	159,72	15,43	0,26	0,60	15,44	238,07	0,09	20,13	0,13	208,29	29,19						
<b>3-Methyl-3-Ethylpentane</b>	157,88	15,38	0,28	0,55	15,39	236,57	0,08	21,53	0,14	220,54	31,36						
<b>Pentadecane</b>	277,70	15,79	0,27	0,45	15,80	249,38	0,08	26,64	0,14	268,52	32,14						
<b>Hexadecane</b>	294,10	15,71	0,28	0,43	15,72	246,87	0,08	27,05	0,14	272,08	32,01	265,69	16,30	0,00	0,00	16,30	
<b>Heptadecane</b>	309,90	15,65	0,28	0,42	15,66	245,10	0,08	27,50	0,14	276,06	31,98						
<b>Octadecane</b>	326,90	15,58	0,28	0,41	15,59	242,82	0,07	27,87	0,14	279,49	31,84	268,96	16,40	0,00	0,00	16,40	
<b>Nonadecane</b>	345,60	15,45	0,28	0,20	15,46	238,90	0,07	28,17	0,14	282,22	31,59						
<b>Eicosane</b>	363,70	15,37	0,28	0,39	15,38	236,29	0,07	28,46	0,14	285,06	31,37	272,25	16,50	0,00	0,00	16,50	
<b>Cyclopentane</b>	94,90	17,19	0,27	0,86	17,21	295,61	0,09	21,88	0,14	225,82	37,75	268,96	16,40	0,00	1,80	16,50	
<b>Methylcyclopentane</b>	112,10	16,82	0,27	0,73	16,83	282,86	0,09	21,72	0,13	223,25	35,45						
<b>1,1-Dimethylcyclopentane</b>	130,50	16,24	0,27	0,73	16,26	263,82	0,09	21,56	0,14	222,99	33,45						
<b>Cyclohexane</b>	108,70	17,34	0,29	0,73	17,36	300,67	0,08	24,65	0,14	250,78	40,65	282,24	16,80	0,00	0,20	16,80	
<b>Methylcyclohexane</b>	128,30	16,80	0,27	0,73	16,81	282,18	0,08	23,29	0,14	239,06	36,34	256,00	16,00	0,00	1,00	16,03	
<b>1,1-Dimethylcyclohexane</b>	143,70	16,63	0,28	0,61	16,64	276,47	0,08	24,22	0,14	246,20	36,40						
<b>Cis-1,2-Dimethylcyclohexane</b>	140,90	16,67	0,30	0,60	16,69	278,08	0,08	25,75	0,15	260,30	38,95						
<b>Trans-1,2-Dimethylcyclohexane</b>	144,60	16,46	0,28	0,61	16,47	270,94	0,08	24,07	0,14	244,92	36,10						
<b>Cis-1,3-Dimethylcyclohexane</b>	146,40	16,33	0,28	0,62	16,34	266,72	0,08	23,20	0,14	237,07	34,64						
<b>Trans-1,3-Dimethylcyclohexane</b>	146,40	16,51	0,26	0,64	16,52	272,64	0,08	22,46	0,13	230,05	33,53						
<b>Cis-1,4-Dimethylcyclohexane</b>	143,40	16,53	0,29	0,60	16,54	273,34	0,08	24,43	0,14	247,93	36,73						
<b>Trans-1,4-Dimethylcyclohexane</b>	147,97	16,40	0,27	0,60	16,41	268,90	0,08	22,62	0,13	230,94	33,66						
<b>Ethylcyclopentane</b>	128,83	16,68	0,28	0,63	16,70	278,43	0,08	23,38	0,14	237,96	36,44						
<b>Ethylcyclohexane</b>	143,90	16,76	0,29	0,62	16,77	280,89	0,08	25,15	0,14	255,16	37,77						

<b>2-Propylcyclopentane</b>	142,80	16,76	0,28	0,62	16,78	281,08	0,08	24,40	0,14	248,03	36,74
<b>Isopropylcyclopentane</b>	140,80	16,46	0,28	0,60	16,48	271,14	0,08	23,90	0,14	242,88	36,16
<b>Propylcyclohexane</b>	160,50	16,63	0,28	0,59	16,64	276,69	0,08	25,42	0,14	257,54	36,82
<b>Isobutylcyclohexane</b>	176,40	16,42	0,29	0,55	16,43	269,78	0,08	25,84	0,14	261,12	36,26
<b>Sec-butylcyclohexane</b>	173,00	16,96	0,29	0,54	16,97	287,80	0,07	27,87	0,15	279,67	39,37
<b>Tert-butylcyclohexane</b>	168,80	18,08	0,28	0,56	18,09	326,81	0,07	29,88	0,14	297,80	42,55
<b>Cyclooctane</b>	134,90	17,63	0,31	0,60	17,65	311,05	0,07	29,30	0,15	292,72	44,95

## 8.1.2. TABELA 2.

**Tabela 2.** Molécula, volume molar ( $m^3.mole^{-1}$ ), parâmetros de solubilidade de DiPEVa (este estudo,  $MPa^{1/2}$ ), número de DiPEVa (DiP #), tensão superficial experimental ( $mN.m^{-1}$ ), razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_s}{Z}$ ), componente dispersivo DiPEVa ajustado ( $\sigma_D = 7.87(Z_s.Z^{-1}.DIP \#^{-1})$ , Eq. [17]), componentes de tensão superficial polar e dispersiva otimizados ( $\sigma_D$ ,  $\sigma_P$ ), componente dispersivo estimado DiPEVa ( $\delta_D$ ) calculado pela Eq. [14], componente polar estimado DiPEVa ( $\delta_P$ ) calculado pela Eq. [14]. Temperatura crítica ( $T_C$ ; K), pressão crítica ( $P_C$ ; bar) e parâmetro ômega, parachor [P] calculado a partir do método Hugill & van Welsenens (HVW):  $[P] = 40,1684(0,151 - 0,0464*\Omega).T_C^{13/12}.P_C^{-5/6}$ , onde  $\Omega$ = parâmetro ômega, [P] da literatura,  $R^2=99.56\%$ . [59], [60] [83][48], [84], [85]

Moléculas	V, $cm^3.mo$ $l^{-1}$	Parâmetros de solubilidade de DiPEVa (este estudo, $MPa^{1/2}$ )				DiP # Eqs. [18a, 18b]	$\sigma_L$ , $mN.m^{-1}$	$Z_s.Z^{-1}$ calcul. Eq. [7]	$\sigma_D =$ $7.87Z_s.Z^{-1}.DIP \#^{-1}$ , Eq. [20]	Otimização, esse estudo			$\delta_D$ , Eq. [14]	$\delta_P$ , Eqs. [15- 16]	$T_C$ (K)	$P_C$ (bar)	$\Omega$	[P] HVW	Literatura [P]*
		$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	$\delta_T$					$\sigma_D$	$\sigma_P$	$\sigma_T$							
<b>Methanol</b>	40,70	19,33	5,17	23,08	30,55	0,09	22,12	0,058	5,37	9,9	12,2	22,1	19,7	21,9	512,50	80,8	0,5 77	110,6	88,0
<b>Ethanol</b>	58,50	18,99	4,33	18,55	26,90	0,09	21,97	0,066	6,05	11, 5	10,4	22,0	18,8	17,9	514,00	61,4	0,6 51	135,8	126,0
<b>1-Propanol</b>	75,20	19,31	3,83	14,87	24,67	0,08	23,32	0,077	7,33	14, 4	8,9	23,3	18,7	14,8	536,80	51,7	0,6 28	165,7	165,0
<b>2-Propanol</b>	76,80	17,78	3,76	13,84	22,85	0,09	20,93	0,080	7,11	12, 8	8,1	20,9	17,3	13,7	508,30	47,6	0,6 66	164,7	161,6
<b>1-butanol</b>	91,50	19,50	3,47	12,38	23,35	0,08	24,95	0,086	8,47	17, 1	7,8	24,9	18,7	12,6	563,00	44,1	0,5 94	201,5	205,3
<b>2-methyl-1-propanol</b>	92,80	18,22	3,41	11,71	21,93	0,08	22,54	0,087	8,16	15, 4	7,2	22,5	17,5	11,9	547,80	43,0	0,5 90	200,5	201,6
<b>2-methyl-2-propanol</b>	95,80	16,81	3,41	11,32	20,55	0,09	19,96	0,087	7,59	13, 3	6,7	20,0	16,2	11,5	506,20	39,7	0,6 12	194,8	201,0
<b>2-butanol</b>	92,00	18,12	3,46	11,68	21,83	0,08	22,54	0,088	8,26	15, 4	7,2	22,5	17,4	11,9	536,20	42,0	0,5 80	200,2	201,6
<b>1-pentanol</b>	108,60	19,21	3,28	10,77	22,27	0,08	25,36	0,091	9,02	18, 4	7,0	25,4	18,3	11,3	588,10	39,0	0,5 76	236,0	245,3
<b>3-methyl-1-butanol</b>	109,40	18,12	3,45	10,51	21,23	0,08	23,71	0,093	8,92	16, 9	6,8	23,7	17,3	11,0	577,20	39,3	0,5 93	228,2	241,6
<b>2-methyl-1-butanol</b>	108,20	18,32	3,63	10,00	21,19	0,08	25,10	0,099	9,92	18, 4	6,7	25,1	17,5	10,6	575,40	39,4	0,5 78	228,2	241,6
<b>2-pentanol</b>	109,60	18,20	3,12	9,86	20,93	0,08	23,45	0,094	9,02	17, 2	6,2	23,5	17,3	10,4	560,30	36,8	0,5 59	236,6	241,6
<b>2-methyl-2-butanol</b>	108,20	17,27	3,30	9,22	19,85	0,08	22,31	0,100	9,43	16, 5	5,8	22,3	16,5	9,8	543,70	37,1	0,4 92	232,9	237,9
<b>1-hexanol</b>	124,90	19,13	2,99	9,29	21,48	0,08	25,81	0,095	9,54	19, 7	6,1	25,8	18,1	10,1	610,30	34,2	0,5 68	274,9	285,3
<b>2-hexanol</b>	126,84	18,24	2,80	8,31	20,24	0,08	24,27	0,100	9,71	18, 9	5,3	24,3	17,3	9,1	585,90	33,1	0,5 51	271,8	281,6
<b>3-methyl-1-pentanol</b>	127,20	18,67	2,70	8,28	20,60	0,08	24,95	0,099	9,75	19, 6	5,3	25,0	17,6	9,2	588,00	34,0	0,7 13	250,8	284,9
<b>3-methyl-3-pentanol</b>	124,00	17,27	3,20	7,50	19,09	0,08	23,26	0,108	10,71	18, 4	4,9	23,3	16,4	8,4	575,60	35,2	0,4 33	264,4	277,9

<b>4-methyl-2-pentanol</b>	127,20	17,28	3,06	8,69	19,58	0,08	22,62	0,099	9,27	17,1	5,5	22,6	16,4	9,4	574,40	34,7	0,570	254,0	277,9
<b>1,3-dimethyl-1-butanol</b>	124,00	18,59	2,73	8,18	20,49	0,08	24,93	0,101	9,96	19,7	5,2	24,9	17,6	9,1	604,40	34,5	0,509	275,8	278,0
<b>1-heptanol</b>	141,90	18,78	2,97	8,28	20,74	0,08	26,71	0,101	10,29	21,0	5,7	26,7	17,8	9,2	632,60	30,6	0,556	314,9	327,3
<b>1-octanol</b>	157,70	18,69	2,70	7,15	20,19	0,08	27,10	0,104	10,74	22,2	4,9	27,1	17,6	8,3	652,50	27,8	0,567	351,5	365,3
<b>2-octanol</b>	159,10	17,84	2,70	6,63	19,23	0,08	25,91	0,109	11,03	21,4	4,5	25,9	16,9	7,8	629,60	27,5	0,576	339,3	364,5
<b>1-nonanol</b>	174,40	18,48	2,53	6,15	19,64	0,07	27,89	0,109	11,47	23,5	4,4	27,9	17,4	7,5	670,70	25,3	0,578	390,0	406,9
<b>1-necanol</b>	191,80	18,18	2,45	5,43	19,13	0,07	28,51	0,114	12,12	24,5	4,0	28,5	17,1	6,9	687,30	23,2	0,602	427,0	447,7
<b>1-Dodecanol</b>	224,30	17,62	2,38	4,56	18,35	0,07	29,40	0,121	13,12	25,8	3,6	29,4	16,6	6,2	719,40	19,9	0,632	502,4	526,3
<b>Cyclohexanol</b>	106,00	20,56	3,65	9,51	22,94	0,07	32,92	0,112	12,75	25,9	7,1	32,9	19,6	10,3	650,10	42,6	0,398	260,5	255,1
<b>Allyl alcohol</b>	68,40	20,26	3,83	15,32	25,68	0,08	25,28	0,079	7,87	15,8	9,4	25,3	19,6	15,2	545,10	56,2	0,582	159,8	153,4
<b>Benzyl alcohol</b>	103,60	22,16	3,44	8,47	23,97	0,06	39,96	0,125	15,67	33,4	6,6	40,0	21,2	9,4	720,15	45,5	0,397	275,6	259,4
<b>2-Cresol</b>	103,30	21,96	2,95	7,96	23,55	0,07	36,90	0,120	14,46	31,1	5,8	36,9	20,9	9,0	697,55	50,1	0,444	241,6	259,9
<b>3-Cresol</b>	104,70	21,68	3,18	8,61	23,54	0,07	35,69	0,115	13,74	29,3	6,3	35,7	20,6	9,6	705,85	45,6	0,462	263,0	259,9
<b>2-Methoxyphenol (guaiacol)</b>	97,00	22,19	4,98	11,41	25,45	0,06	42,20	0,120	15,38	32,2	10,0	42,2	21,5	12,0	697,00	47,3	0,563	242,6	278,9
<b>2-Chlorophenol</b>	102,30	21,82	2,77	6,53	22,94	0,06	39,70	0,136	17,04	34,9	4,8	39,7	20,8	7,7	675,00	50,0	0,428	234,9	
<b>3-Chlorophenol</b>	105,50	20,86	4,29	8,42	22,90	0,06	41,18	0,140	17,82	34,1	7,0	41,2	20,1	9,1	729,00	53,2	0,484	237,7	
<b>Methyl salicylate</b>	129,60	20,49	4,37	8,69	22,68	0,06	39,21	0,127	15,80	31,7	7,5	39,2	19,7	9,6	709,00	40,9	0,580	277,1	323,7
<b>3-Amino-1-propanol</b>	76,50	24,40	6,02	17,11	30,40	0,06	44,70	0,096	12,71	29,5	15,2	44,7	23,8	17,1	649,00	55,0	0,818	179,2	197,2
<b>2-propanone</b>	74,00	15,14	6,58	11,99	20,40	0,08	23,03	0,111	10,52	13,8	9,2	23,0	15,2	12,5	508,20	47,0	0,316	189,0	160,9
<b>2-butanone</b>	90,10	15,54	5,76	10,43	19,58	0,08	24,18	0,119	11,55	16,0	8,2	24,2	15,4	11,0	535,50	41,5	0,334	220,6	198,9
<b>2-pentanone</b>	106,70	18,27	5,33	1,90	19,13	0,08	24,92	0,121	12,04	21,7	3,2	24,9	17,2	6,6	561,08	36,9	0,354	253,9	238,9
<b>3-pentanone</b>	106,40	18,08	5,44	1,95	18,98	0,08	24,74	0,122	12,06	21,5	3,3	24,7	17,1	6,7	560,95	37,4	0,356	251,1	238,9
<b>2-hexanone</b>	123,60	18,05	4,82	1,85	18,77	0,08	25,52	0,123	12,31	22,5	3,0	25,5	17,0	6,3	587,61	32,9	0,388	290,8	278,9
<b>3-hexanone</b>	122,70	17,74	5,16	2,03	18,59	0,08	25,10	0,123	12,26	21,9	3,2	25,1	16,8	6,4	582,82	33,2	0,384	286,2	278,9
<b>2-Heptanone</b>	139,80	17,84	4,45	1,90	18,48	0,08	26,81	0,128	13,10	23,9	2,9	26,8	16,8	5,9	611,40	29,4	0,420	329,4	318,9
<b>3-Heptanone</b>	139,00	17,51	4,78	2,09	18,27	0,08	26,37	0,129	13,06	23,3	3,1	26,4	16,6	6,1	606,60	29,2	0,414	329,2	318,9

<b>4-Heptanone</b>	140,80	15,84	4,25	7,71	18,12	0,08	25,02	0,124	12,25	19,1	5,9	25,0	15,3	8,5	602,00	29,2	0,4	326,7	318,9
<b>3-Octanone</b>	156,00	17,43	3,97	1,80	17,96	0,08	26,61	0,129	13,21	23,9	2,7	26,6	16,4	5,5	627,70	27,0	0,4	360,9	355,4
<b>2-nonanone</b>	173,30	17,12	4,20	1,95	17,73	0,08	25,83	0,124	12,57	22,9	2,9	25,8	16,1	5,7	652,50	24,1	0,4	407,3	
<b>5-nonanone</b>	173,40	17,11	4,21	2,05	17,74	0,08	26,66	0,128	13,16	23,7	2,9	26,7	16,2	5,7	640,00	23,2	0,5	408,6	398,9
<b>6-Undecanone (dipentyl ketone)</b>	206,40	16,66	3,79	2,03	17,21	0,08	26,88	0,130	13,39	24,1	2,8	26,9	15,7	5,3	678,50	20,5	0,5	470,4	472,2
<b>Acetophenone</b>	117,40	18,90	5,59	8,85	21,60	0,06	39,04	0,144	17,89	30,6	8,4	39,0	18,5	9,7	709,60	40,1	0,3	302,3	293,8
<b>Benzophenone</b>	164,20	19,20	4,72	6,84	20,92	0,06	43,49	0,153	19,94	36,9	6,6	43,5	18,6	7,9	830,00	33,5	0,5	399,1	426,9
<b>cyclopentanone</b>	89,10	20,83	6,77	2,48	22,05	0,07	32,80	0,128	14,57	28,3	4,5	32,8	19,8	7,9	624,50	46,0	0,2	242,0	214,2
<b>cyclohexanone</b>	104,00	20,24	6,02	2,65	21,28	0,07	34,57	0,137	16,09	30,4	4,1	34,6	19,3	7,1	653,00	40,0	0,3	284,6	252,2
<b>n-methyl formate</b>	62,20	17,58	4,48	11,74	21,61	0,08	24,36	0,111	10,84	16,6	7,8	24,4	17,2	11,8	487,20	60,0	0,2	149,7	140,2
<b>n-ethyl formate</b>	80,20	16,82	4,31	10,72	20,41	0,08	23,18	0,109	10,33	16,0	7,2	23,2	16,4	11,0	508,40	47,4	0,2	189,2	177,3
<b>n-propyl formate</b>	97,90	16,69	3,90	8,91	19,32	0,08	23,97	0,118	11,37	17,9	6,1	24,0	16,1	9,4	538,00	40,2	0,3	228,9	216,9
<b>n-butyl formate</b>	114,80	16,41	3,84	8,02	18,67	0,08	24,52	0,122	11,96	18,9	5,6	24,5	15,8	8,6	559,00	35,1	0,3	260,5	256,2
<b>i-butyl formate</b>	117,40	17,49	3,56	1,28	17,89	0,08	23,34	0,126	11,97	21,1	2,2	23,3	16,4	5,3	551,35	38,8	0,3	235,5	256,5
<b>n-hexyl formate</b>	148,10	17,55	3,19	1,41	17,89	0,08	26,37	0,132	13,40	24,2	2,2	26,4	16,5	5,0	607,00	28,0	0,4	332,6	337,4
<b>n-amyl formate</b>	131,30	17,94	3,40	1,32	18,31	0,08	25,53	0,127	12,67	23,2	2,3	25,5	16,9	5,3	576,00	31,3	0,5	283,4	296,9
<b>Methyl acetate</b>	79,70	17,67	3,80	9,87	20,60	0,08	24,72	0,114	11,24	18,2	6,5	24,7	17,1	10,2	506,55	47,5	0,3	185,2	177,1
<b>Ethyl acetate</b>	98,50	16,87	3,63	8,97	19,44	0,08	23,39	0,113	10,78	17,5	5,9	23,4	16,2	9,4	523,30	38,8	0,3	224,5	216,0
<b>n-propyl acetate</b>	115,30	16,60	3,40	7,74	18,63	0,08	23,80	0,119	11,46	18,6	5,2	23,8	15,9	8,4	549,73	33,6	0,3	265,0	255,3
<b>Isopropyl acetate</b>	117,10	15,54	3,32	7,20	17,45	0,09	21,76	0,123	11,29	17,1	4,7	21,8	14,9	7,8	532,00	32,9	0,3	262,1	251,0
<b>n-butyl acetate</b>	132,50	16,41	3,29	6,70	18,03	0,08	24,88	0,127	12,51	20,3	4,6	24,9	15,7	7,5	575,40	30,9	0,4	293,6	295,6
<b>i-butyl acetate</b>	133,50	15,82	3,32	6,90	17,58	0,08	23,06	0,123	11,65	18,4	4,7	23,1	15,2	7,6	560,80	30,1	0,4	292,2	293,9
<b>tert-Butyl acetate</b>	134,10	16,25	3,41	1,39	16,67	0,09	21,94	0,130	12,00	19,9	2,1	21,9	15,3	5,0	545,00	31,7	0,3	280,4	291,7
<b>sec-butyl acetate</b>	133,60	15,59	3,31	6,56	17,24	0,08	23,09	0,128	12,15	18,6	4,4	23,1	15,0	7,3	561,00	31,7	0,4	283,4	293,9
<b>n-pentyl acetate</b>	148,00	16,37	2,94	5,93	17,66	0,08	24,93	0,128	12,61	20,9	4,0	24,9	15,6	6,9	599,90	27,7	0,4	335,4	335,0
<b>Isopentyl acetate</b>	150,26	15,92	3,04	5,89	17,24	0,08	24,28	0,130	12,62	20,2	4,0	24,3	15,2	6,8	586,10	27,6	0,4	323,0	331,0

<b>n-hexyl acetate</b>	165,00	16,22	3,01	5,53	17,40	0,08	26,02	0,132	13,36	22,1	3,9	26,0	15,5	6,5	618,00	25,4	0,538	360,8	375,4
<b>Methyl propionate</b>	96,80	16,95	3,53	8,19	19,15	0,08	24,44	0,122	11,97	19,0	5,4	24,4	16,3	8,7	530,60	40,0	0,356	223,3	215,3
<b>Ethyl propionate</b>	115,50	16,24	3,30	7,86	18,34	0,08	22,30	0,115	10,66	17,2	5,1	22,3	15,6	8,5	546,00	33,6	0,396	262,8	254,4
<b>n-propyl propionate</b>	131,70	17,56	3,21	1,22	17,89	0,08	24,21	0,126	12,21	22,1	2,1	24,2	16,5	5,1	568,60	30,6	0,451	291,3	293,9
<b>n-butyl propionate</b>	149,70	16,11	3,05	5,88	17,42	0,08	24,89	0,130	12,86	20,8	4,1	24,9	15,4	6,8	594,60	28,0	0,465	327,6	334,0
<b>n-Methyl butyrate</b>	113,70	18,19	3,31	1,15	18,52	0,08	24,62	0,125	12,27	22,4	2,2	24,6	17,1	5,3	554,50	34,7	0,385	261,1	254,5
<b>Methyl-i-butyrate</b>	113,70	17,64	3,45	1,19	18,01	0,08	23,17	0,124	11,80	21,0	2,2	23,2	16,6	5,3	540,70	34,3	0,367	258,2	253,7
<b>n-ethyl butyrate</b>	132,90	16,13	3,23	6,66	17,75	0,08	23,94	0,126	12,15	19,4	4,5	23,9	15,4	7,4	571,00	29,5	0,404	306,8	293,9
<b>Ethyl isobutyrate</b>	133,70	16,94	3,65	1,38	17,38	0,08	22,72	0,124	11,65	20,4	2,3	22,7	15,9	5,3	553,15	30,4	0,425	286,9	293,1
<b>n-propyl butyrate</b>	149,30	17,11	2,98	1,26	17,41	0,08	24,56	0,129	12,64	22,5	2,1	24,6	16,1	4,9	593,70	27,2	0,432	339,0	334,8
<b>Propyl isobutyrate</b>	150,70	16,53	3,18	1,37	16,88	0,08	23,29	0,130	12,33	21,2	2,1	23,3	15,6	4,9	579,40	28,4	0,485	312,5	332,7
<b>n-butyl butyrate</b>	166,70	16,73	3,28	1,56	17,12	0,08	25,24	0,132	13,15	23,0	2,3	25,2	15,8	4,9	616,00	25,4	0,477	367,6	373,8
<b>Isobutyl isobutyrate</b>	167,70	16,72	3,17	1,76	17,11	0,08	27,75	0,145	15,20	25,6	2,2	27,7	15,9	4,6	602,00	26,1	0,403	359,9	369,9
<b>Ethyl isovalerate</b>	150,50	16,71	3,30	1,37	17,08	0,08	23,28	0,127	12,04	21,1	2,2	23,3	15,7	5,0	587,95	28,4	0,400	327,3	332,3
<b>n-butyl valerate</b>	182,30	16,69	3,17	1,57	17,07	0,08	25,72	0,132	13,23	23,5	2,3	25,7	15,7	4,9	629,00	23,3	0,584	388,5	412,3
<b>Methyl decanoate</b>	213,40	17,53	2,95	1,45	17,83	0,07	28,05	0,125	13,14	25,6	2,4	28,1	16,5	5,1	671,00	19,9	0,686	457,0	489,0
<b>Methyl dodecanoate</b>	246,40	16,84	2,32	1,35	17,06	0,07	29,10	0,135	14,46	27,0	2,1	29,1	15,9	4,4	712,00	17,4	0,661	550,4	567,0
<b>Ethyl hexanoate</b>	165,90	16,39	2,61	5,14	17,37	0,08	25,32	0,129	12,85	21,8	3,5	25,3	15,6	6,3	615,00				373,1
<b>Methyl acetoacetate</b>	107,80	20,47	8,34	3,20	22,33	0,07	32,62	0,116	13,21	26,6	6,0	32,6	19,5	9,2	642,00	37,1	0,512	276,8	260,8
<b>Ethyl acetoacetate</b>	125,60	22,65	5,21	1,36	23,28	0,07	31,88	0,099	11,16	28,1	3,8	31,9	21,1	7,8	643,00	32,7	0,553	303,4	300,6
<b>Methyl benzoate</b>	124,90	20,36	4,58	2,18	20,98	0,06	37,18	0,143	17,29	33,9	3,3	37,2	19,3	6,0	693,00	35,9	0,424	319,0	310,0
<b>Ethyl benzoate</b>	144,30	19,56	3,44	1,66	19,93	0,07	34,51	0,140	16,36	31,9	2,6	34,5	18,5	5,3	698,00	31,8	0,476	349,1	350,0
<b>Propyl benzoate</b>	144,30	20,23	3,15	1,33	20,51	0,07	33,88	0,130	15,03	31,3	2,6	33,9	19,0	5,5	710,00	28,5	0,521	383,3	391,6
<b>Butyl benzoate</b>	178,00	18,11	2,85	4,98	19,00	0,07	33,19	0,138	15,83	29,3	3,9	33,2	17,2	6,3	724,00	25,9	0,571	416,3	
<b>Benzyl benzoate</b>	191,20	20,19	3,64	2,15	20,63	0,06	42,82	0,148	19,07	39,8	3,1	42,8	19,2	5,3	820,00	25,8	0,607	471,5	485,0
<b>Dimethyl maleate</b>	125,80	19,81	4,46	8,45	21,99	0,06	37,68	0,131	16,02	30,4	7,2	37,7	19,1	9,3	675,00	32,2	0,564	322,7	312,0

<b>Diethyl maleate</b>	161,20	18,00	4,08	7,34	19,86	0,07	32,07	0,126	14,23	26,0	6,1	32,1	17,3	8,4	680,00	26,1	0,656	374,2	386,6
<b>Dibutyl maleate</b>	230,40	17,34	3,61	6,34	18,82	0,07	30,30	0,118	12,92	25,0	5,3	30,3	16,5	7,6	716,00	19,0	0,853	476,5	542,6
<b>Diethyl malonate</b>	152,50	17,96	4,15	7,70	19,98	0,07	31,31	0,124	13,82	25,0	6,3	31,3	17,2	8,6	653,00	27,8	0,608	346,1	359,0
<b>Diethyl succinate</b>	167,20	18,44	3,41	6,77	19,93	0,07	31,37	0,121	13,53	26,1	5,3	31,4	17,5	7,9	663,00	25,3	0,698	367,6	399,0
<b>Diethyl phthalate</b>	198,00	18,60	3,94	6,62	20,13	0,07	36,06	0,129	15,41	30,2	5,9	36,1	17,8	7,9	757,00	23,3	0,743	446,5	494,0
<b>Diethyl oxalate</b>	136,60	18,54	4,28	8,64	20,90	0,07	31,52	0,118	13,23	24,6	7,0	31,5	17,8	9,5	618,00	30,9	0,830	273,5	320,3
<b>Ethyl lactate</b>	115,00	19,08	4,44	11,68	22,81	0,07	28,26	0,094	9,97	19,7	8,6	28,3	18,4	12,1	588,00	38,6	0,807	217,3	268,5
<b>Diethyl carbonate</b>	122,00	18,27	2,13	5,66	19,24	0,08	25,87	0,119	12,01	22,3	3,6	25,9	17,2	6,9	576,00	33,9	0,484	268,1	275,4
<b>Dimethyl carbonate</b>	84,20	21,03	2,08	7,46	22,41	0,07	28,58	0,110	11,67	24,0	4,6	28,6	19,8	8,7	548,00	45,0	0,390	207,4	195,9
<b>Acetaldehyde</b>	56,50	14,54	6,99	13,79	21,22	0,09	20,50	0,100	8,85	10,8	9,7	20,5	14,9	14,1	466,00	55,5	0,274	152,0	120,6
<b>Acetaldehyde</b>	56,50	14,54	6,99	13,79	21,22	0,09	20,50	0,100	8,85	10,9	9,6	20,5	14,9	14,1	466,00	55,5	0,274	152,0	120,6
<b>Propanal</b>	73,40	15,40	5,82	11,22	19,93	0,08	22,97	0,117	11,00	14,6	8,3	23,0	15,4	11,6	504,40	49,2	0,267	183,5	165,4
<b>Propanal</b>	73,40	15,41	5,82	11,21	19,93	0,08	22,97	0,117	11,01	14,6	8,3	23,0	15,4	11,6	504,40	49,2	0,267	183,5	165,4
<b>Butanal</b>	88,50	15,76	5,74	10,02	19,53	0,08	25,44	0,126	12,61	17,4	8,0	25,4	15,6	10,6	537,20	43,2	0,284	217,7	200,1
<b>Butanal</b>	88,50	15,76	5,74	10,01	19,53	0,08	25,44	0,126	12,62	17,4	8,0	25,4	15,6	10,6	537,20	43,2	0,284	217,7	200,1
<b>Pentanal</b>	106,40	15,84	4,97	9,40	19,08	0,08	24,36	0,119	11,64	17,2	7,1	24,4	15,5	10,0	566,10	39,7	0,352	241,6	239,9
<b>3-Methylbutanal</b>	106,00	15,26	5,05	9,33	18,59	0,08	23,18	0,120	11,36	16,1	7,1	23,2	15,0	9,9	543,20	38,3	0,392	234,8	237,3
<b>Hexanal</b>	122,50	16,13	4,67	8,61	18,87	0,08	25,60	0,122	12,26	18,9	6,7	25,6	15,7	9,3	591,00	34,6	0,392	280,0	280,0
<b>Heptanal</b>	139,80	16,20	4,38	8,00	18,59	0,08	25,96	0,122	12,35	19,7	6,2	26,0	15,7	8,8	616,80	31,6	0,429	312,2	318,0
<b>Paraldehyde</b>	132,40	17,22	2,61	5,84	18,37	0,08	25,63	0,126	12,63	21,8	3,8	25,6	16,4	6,9	579,00	35,0	0,440	266,7	299,0
<b>Benzaldehyde</b>	101,50	18,85	6,32	10,28	22,38	0,06	38,00	0,137	16,81	28,0	9,9	38,0	18,6	11,1	695,00	46,5	0,324	267,0	254,0
<b>2-hydroxybenzaldehyde</b>	104,60	21,03	5,98	11,56	24,73	0,06	42,28	0,124	15,94	31,2	11,1	42,3	20,5	12,2	680,00	49,9	0,619	221,2	270,3
<b>Limonene</b>	162,90	17,47	1,22	2,58	17,70	0,08	27,18	0,134	13,89	25,2	2,0	27,2	16,5	4,6	653,00	28,2	0,378	371,7	375,2
<b>alfa-Pinene</b>	159,50	16,07	0,85	1,51	16,16	0,08	25,99	0,155	15,66	24,8	1,2	26,0	15,2	3,4	644,00	27,6	0,230	392,0	347,5
<b>alfa-Pinene</b>	158,80	16,10	0,85	1,55	16,20	0,08	25,63	0,152	15,29	24,4	1,3	25,6	15,3	3,5	644,00	27,6	0,230	392,0	347,5
<b>beta-Pinene</b>	156,20	16,98	0,88	1,71	17,09	0,08	26,82	0,144	14,92	25,3	1,5	26,8	16,0	3,9	643,00	27,6	0,325	379,0	349,0



<b>Diethyl ether</b>	104,80	14,43	2,36	6,77	16,11	0,10	16,65	0,115	8,96	13,0	3,6	16,7	13,7	7,3	466,70	36,4	0,289	215,3	210,8
<b>Dibutyl ether</b>	170,30	15,65	1,96	4,10	16,30	0,08	22,44	0,129	11,99	19,8	2,6	22,4	14,8	5,4	584,10	24,6	0,447	360,3	370,0
<b>methyl t-butyl ether</b>	119,80	15,57	2,63	0,99	15,82	0,09	19,53	0,134	11,50	18,0	1,6	19,5	14,6	4,3	497,10	34,3	0,276	243,3	243,0
<b>methyl pentyl ether</b>	134,30	16,47	2,29	0,86	16,65	0,09	21,39	0,127	11,57	19,7	1,7	21,4	15,4	4,5	546,49	30,4	0,350	290,5	
<b>ethyl methyl ether</b>	84,10	14,15	2,75	8,88	16,93	0,11	15,27	0,103	7,58	10,6	4,7	15,3	13,6	9,0	437,80	44,0	0,252	173,7	
<b>ethyl propyl ether</b>	119,30	15,13	2,26	5,65	16,31	0,09	19,28	0,124	10,60	16,1	3,2	19,3	14,4	6,4	500,23	33,7	0,347	242,6	250,8
<b>ethyl butyl ether</b>	136,40	16,13	2,23	0,80	16,30	0,09	20,13	0,124	10,90	18,5	1,6	20,1	15,1	4,5	531,00	29,9	0,389	281,9	
<b>dipropyl ether</b>	137,70	15,19	2,21	5,21	16,21	0,09	19,98	0,124	10,82	16,9	3,1	20,0	14,4	6,1	530,60	30,3	0,372	280,3	290,8
<b>diisopropyl ether</b>	140,90	14,12	2,05	5,07	15,14	0,10	17,27	0,122	9,75	14,4	2,8	17,3	13,4	5,9	500,05	28,8	0,341	277,1	
<b>dipentyl ether</b>	203,20	15,89	1,86	3,54	16,38	0,08	24,35	0,130	12,72	21,9	2,5	24,4	15,0	5,0	622,00	20,9	0,598	418,0	
<b>1,1-Dimethoxyethane</b>	106,70	16,48	2,65	7,42	18,27	0,09	21,00	0,112	10,04	16,6	4,4	21,0	15,7	8,1	507,80	37,7	0,334	225,5	231,0
<b>1,1-Diethoxymethane</b>	125,30	17,10	2,26	7,73	18,91	0,09	20,15	0,095	8,34	15,7	4,4	20,1	16,1	8,6	524,00	32,8	0,429	253,6	271,0
<b>1,1-Diethoxyethane</b>	143,90	16,14	1,94	5,10	17,03	0,09	20,89	0,116	10,38	17,8	3,0	20,9	15,2	6,3	539,70	32,2	0,487	260,5	307,0
<b>Methyl phenyl ether (Anisole)</b>	119,10	19,56	2,67	1,33	19,79	0,07	35,10	0,154	18,19	33,2	1,9	35,1	18,6	4,4	645,60	42,5	0,356	262,8	265,6
<b>Ethyl Phenyl Ether (Phenetole)</b>	127,30	18,93	2,65	5,44	19,88	0,07	32,41	0,138	15,62	28,6	3,8	32,4	18,0	6,6	647,15	34,2	0,423	308,5	303,5
<b>Anethole</b>	150,00	20,13	2,59	1,16	20,33	0,07	34,69	0,133	15,66	32,4	2,3	34,7	19,0	5,1	723,00	29,0	0,479	391,2	
<b>Diphenyl ether</b>	160,40	18,67	1,96	5,27	19,50	0,08	26,75	0,109	11,23	23,2	3,6	26,8	17,5	6,9	766,80	30,8	0,435	402,9	398,3
<b>Chloromethane</b>	55,40	17,71	4,97	0,66	18,41	0,11	15,40	0,101	7,47	13,2	2,2	15,4	16,5	6,7	416,25	66,8	0,160	119,7	113,0
<b>Dichloromethane</b>	63,90	18,33	4,05	10,01	21,28	0,08	27,20	0,127	13,14	20,5	6,7	27,2	17,8	10,2	510,00	60,8	0,210	158,7	153,0
<b>Trichloromethane</b>	80,70	18,64	2,40	6,47	19,88	0,08	26,67	0,132	13,52	22,8	3,8	26,7	17,8	7,3	536,40	54,7	0,228	181,9	193,0
<b>Tetrachloromethane</b>	97,10	18,25	0,29	0,75	18,27	0,08	26,43	0,145	14,80	25,2	1,2	26,4	17,2	3,8	556,35	45,6	0,200	222,3	233,0
<b>1,1-Dichloroethane</b>	84,73	15,97	4,51	8,93	18,84	0,08	24,07	0,130	12,63	17,7	6,4	24,1	15,6	9,3	523,00	50,7	0,250	187,2	191,0
<b>1,2-Dichloroethane</b>	79,40	19,39	3,35	7,59	21,09	0,07	31,86	0,141	15,84	26,7	5,1	31,9	18,7	8,2	561,60	53,7	0,285	190,5	191,0
<b>1,1,1-Trichloroethane</b>	99,30	16,17	3,67	7,04	18,02	0,08	25,14	0,141	14,01	20,3	4,8	25,1	15,6	7,6	545,00	43,0	0,225	226,4	231,0
<b>1,1,2-Trichloroethane</b>	92,90	19,45	2,76	5,75	20,47	0,07	34,02	0,151	17,59	30,3	3,7	34,0	18,6	6,6	602,00	44,8	0,269	240,2	231,0
<b>1-Chloropropane</b>	88,10	17,67	4,39	1,27	18,25	0,09	21,27	0,121	10,94	18,9	2,4	21,3	16,6	5,9	503,15	45,8	0,236	196,3	191,0

<b>2-Chloropropane</b>	91,70	16,51	4,55	1,34	17,18	0,09	19,16	0,122	10,32	16,8	2,4	19,2	15,5	5,8	489,00	45,4	0,2	193,2	191,0
<b>1,2-Dichloropropane</b>	97,80	17,01	3,11	5,76	18,23	0,07	28,32	0,156	16,51	24,6	3,7	28,3	16,4	6,4	572,00	42,4	0,2	238,0	231,0
<b>1,3-Dichloropropane</b>	95,10	20,02	4,34	1,86	20,57	0,07	33,32	0,146	16,77	30,6	2,7	33,3	19,0	5,7	603,00	41,5	0,2	254,0	231,0
<b>1,4-Dichlorobutane</b>	109,50	19,68	4,33	2,09	20,25	0,07	34,83	0,150	17,63	32,0	2,8	34,8	18,7	5,6	641,00	36,1	0,3	300,6	
<b>1,5-Dichloropentane</b>	127,50	19,02	4,27	2,32	19,64	0,07	35,17	0,153	18,11	32,3	2,9	35,2	18,2	5,4	668,00	31,9	0,3	343,2	
<b>1-Chlorobutane</b>	104,50	17,46	4,06	1,45	17,99	0,08	23,18	0,128	12,19	20,8	2,4	23,2	16,5	5,5	537,00	38,2	0,2	241,4	231,0
<b>2-Chlorobutane</b>	106,80	16,66	4,00	1,46	17,20	0,09	21,61	0,130	11,85	19,4	2,3	21,6	15,7	5,4	520,60	39,0	0,2	228,5	
<b>1-Chloropentane</b>	120,90	17,27	3,99	1,61	17,80	0,08	24,40	0,132	12,83	22,0	2,4	24,4	16,3	5,4	568,00	33,5	0,3	281,3	
<b>1-Chlorohexane</b>	137,40	17,13	3,76	1,72	17,62	0,08	25,73	0,136	13,63	23,3	2,4	25,7	16,2	5,2	594,60				
<b>3-Chloropropene</b>	82,30	17,84	4,32	1,43	18,41	0,08	23,14	0,132	12,57	20,8	2,3	23,1	16,9	5,7	514,15	47,1	0,1	201,2	
<b>Dibromomethane</b>	69,80	22,86	3,55	1,27	23,17	0,06	39,05	0,149	18,56	36,7	2,3	39,1	21,7	5,4	611,00	71,7	0,2	167,8	178,0
<b>Tribromomethane</b>	87,50	22,09	2,35	1,13	22,24	0,06	44,87	0,173	22,75	43,5	1,4	44,9	21,1	3,8	696,00	60,9	0,1	224,3	225,7
<b>Bromoethane</b>	74,60	18,88	4,71	1,33	19,51	0,08	23,62	0,124	11,94	21,0	2,6	23,6	17,8	6,2	503,80	62,3	0,2	151,8	164,0
<b>1,1,2,2-Tetrabromoethane</b>	117,00	22,17	2,60	4,94	22,86	0,06	48,71	0,161	21,97	45,1	3,6	48,7	21,2	6,0	824,00	46,0	0,1	338,4	309,5
<b>1-Bromopropane</b>	90,90	18,51	4,60	1,58	19,14	0,08	25,26	0,129	12,88	22,6	2,7	25,3	17,5	6,0	544,00	53,9	0,2	184,2	204,0
<b>2-Bromopropane</b>	93,60	17,48	4,60	1,64	18,15	0,08	23,25	0,131	12,47	20,7	2,6	23,3	16,5	5,8	532,00	55,1	0,2	178,5	204,0
<b>1-Bromobutane</b>	107,60	18,28	4,07	1,53	18,79	0,08	25,90	0,130	13,14	23,4	2,5	25,9	17,2	5,6	577,00	45,4	0,3	223,7	244,0
<b>iodomethane</b>	62,30	20,60	4,18	1,39	21,07	0,07	30,36	0,146	15,98	28,0	2,3	30,4	19,6	5,6	528,00	73,7	0,1	141,5	145,8
<b>iodoethane</b>	81,20	19,60	4,30	1,51	20,13	0,07	28,46	0,137	14,53	25,9	2,5	28,5	18,5	5,8	561,00	59,9	0,2	177,7	185,8
<b>1-iodopropane</b>	97,50	19,82	4,18	1,45	20,31	0,07	28,80	0,128	13,68	26,1	2,7	28,8	18,7	6,0	593,00	50,3	0,2	215,5	225,8
<b>2-Iodopropane</b>	99,80	18,54	3,97	1,49	19,02	0,08	26,59	0,134	13,69	24,2	2,4	26,6	17,5	5,5	578,00	51,2	0,2	208,4	226,0
<b>Diiodomethane</b>	80,50	23,72	3,01	4,97	24,42	0,05	66,18	0,217	33,27	64,4	1,7	66,2	23,3	3,8	747,00	54,7	0,1	266,5	223,0
<b>Trichlorosilane</b>	101,10	16,01	1,87	0,52	16,12	0,10	17,74	0,124	10,03	16,4	1,4	17,7	15,0	4,3	479,00	41,7	0,2	202,8	
<b>1-Methylnaphthalene</b>	139,00	20,19	1,12	2,24	20,35	0,06	37,63	0,148	18,07	35,7	2,0	37,6	19,1	4,5	772,00	36,0	0,3	366,6	348,7
<b>cis-decahydronaphthalene</b>	156,90	17,61	0,32	0,55	17,62	0,07	31,60	0,159	17,81	30,5	1,1	31,6	16,7	3,2	703,60	32,0	0,2	374,6	366,9
<b>1,2,3,4-Tetrahydronaphthalene</b>	136,00	19,92	0,63	1,46	19,98	0,07	33,17	0,136	15,65	31,3	1,8	33,2	18,8	4,6	720,00	36,5	0,3	337,5	330,0

<b>4-cymene</b>	155,50	17,68	0,27	0,62	17,69	0,08	26,64	0,134	13,58	25,2	1,5	26,6	16,6	4,0	652,00	28,0	0,379	373,2	358,8
<b>1-Pentene</b>	110,40	14,79	1,15	4,21	15,42	0,11	15,45	0,114	8,51	13,4	2,1	15,5	13,9	5,5	464,80	35,6	0,243	221,7	219,0
<b>cis-2-pentene</b>	107,80	15,43	0,79	2,80	15,70	0,10	16,80	0,121	9,48	15,2	1,6	16,8	14,4	4,7	475,00	36,4	0,253	222,1	218,2
<b>trans-2-pentene</b>	107,40	15,69	0,23	1,05	15,72	0,11	16,41	0,118	8,82	15,2	1,2	16,4	14,6	4,2	474,20	36,6	0,254	220,6	218,2
<b>2-Methyl-1-butene</b>	108,70	14,84	1,16	4,03	15,42	0,10	15,94	0,119	9,00	13,9	2,0	15,9	13,9	5,3	465,00	34,5	0,243	227,9	216,0
<b>2-Methyl-2-butene</b>	106,70	15,68	0,86	3,08	16,01	0,10	17,15	0,119	9,46	15,4	1,7	17,2	14,7	4,9	470,00	34,2	0,290	228,4	215,0
<b>3-Methyl-1-Butene</b>	112,90	14,36	0,79	3,38	14,77	0,11	13,84	0,111	7,69	12,2	1,7	13,8	13,4	4,9	452,70	35,3	0,215	219,0	218,7
<b>1-Hexene</b>	126,10	15,44	1,00	3,10	15,78	0,10	17,90	0,121	9,86	16,1	1,8	17,9	14,5	4,8	504,00	32,1	0,294	259,4	259,1
<b>1-Heptene</b>	141,90	15,64	1,25	3,30	16,03	0,09	19,80	0,125	10,81	17,8	2,0	19,8	14,7	4,9	537,40	29,2	0,345	295,7	299,1
<b>1-Octene</b>	158,00	16,01	0,89	2,20	16,18	0,09	21,28	0,127	11,47	19,6	1,7	21,3	15,0	4,4	566,90	26,6	0,391	333,0	339,0
<b>1-Nonene</b>	170,50	16,20	1,12	2,60	16,44	0,08	22,56	0,127	11,87	20,7	1,9	22,6	15,2	4,6	593,10	24,3	0,435	371,9	379,2
<b>1-Decene</b>	190,60	16,18	0,84	1,79	16,30	0,08	23,54	0,130	12,45	21,9	1,6	23,5	15,2	4,1	616,60	22,2	0,476	411,4	419,0
<b>1-Undecene</b>	202,20	16,32	0,98	2,02	16,48	0,08	24,41	0,129	12,64	22,6	1,8	24,4	15,3	4,3	637,80	20,4	0,515	451,2	
<b>1-Dodecene</b>	222,06	16,16	0,92	1,78	16,28	0,08	24,95	0,131	12,98	23,2	1,7	25,0	15,2	4,1	657,10	18,9	0,548	491,9	496,6
<b>1-Tridecene</b>	237,70	16,14	0,89	1,63	16,25	0,08	25,80	0,133	13,42	24,1	1,7	25,8	15,2	4,0	674,80	17,5	0,589	531,4	
<b>1-Tetradecene</b>	253,40	16,08	0,88	1,53	16,18	0,08	26,36	0,134	13,70	24,7	1,7	26,4	15,1	3,9	691,00	16,3	0,625	571,3	578,1
<b>Eicosene</b>	363,60	16,48	0,73	0,73	16,52	0,06	43,49	0,189	24,46	43,0	0,5	43,5	15,9	1,7	771,00	12,2	0,834	752,7	816,8
<b>cyclopentene</b>	89,00	17,92	0,66	2,19	18,07	0,08	22,20	0,129	11,92	20,6	1,6	22,2	16,8	4,7	507,00	48,0	0,202	192,5	193,0
<b>cyclohexene</b>	101,30	18,37	0,90	0,34	18,40	0,08	26,17	0,140	14,22	24,8	1,4	26,2	17,3	4,0	560,40	43,5	0,220	231,5	228,9
<b>fluorobenzene</b>	94,70	18,81	3,39	1,22	19,16	0,08	26,66	0,135	13,82	24,5	2,1	26,7	17,7	5,2	560,09	45,5	0,253	220,4	215,7
<b>chlorobenzene</b>	102,10	19,72	3,47	1,54	20,08	0,07	33,00	0,148	16,96	30,7	2,3	33,0	18,7	5,1	632,35	45,2	0,258	252,4	244,8
<b>4-chlorotoluene</b>	118,20	19,24	4,14	1,90	19,77	0,07	32,23	0,142	16,05	29,5	2,8	32,2	18,3	5,6	660,00	39,1	0,320	292,1	
<b>bromobenzene</b>	105,30	20,23	3,44	1,56	20,58	0,07	35,24	0,149	17,62	32,9	2,3	35,2	19,2	5,1	670,15	45,2	0,259	268,7	257,6
<b>Iodobenzene</b>	112,00	20,52	3,36	1,67	20,86	0,06	38,71	0,156	19,31	36,4	2,3	38,7	19,5	4,9	721,15	45,2	0,257	291,2	281,0
<b>1,2-Dichlorobenzene</b>	112,60	20,08	4,69	1,25	20,66	0,08	26,84	0,110	11,04	23,8	3,0	26,8	18,8	6,7	705,00	40,7	0,240	311,7	284,5
<b>1,3-Dichlorobenzene</b>	114,80	20,14	3,34	1,55	20,47	0,07	35,44	0,147	17,45	33,1	2,3	35,4	19,1	5,1	683,95	40,7	0,290	296,7	284,5

<b>Benzene</b>	89,40	19,69	0,27	0,86	19,71	0,08	28,22	0,137	14,20	26,7	1,5	28,2	18,5	4,4	562,05	49,0	0,2	210,4	206,0
<b>Toluene</b>	106,80	18,71	0,94	2,36	18,88	0,07	27,93	0,139	14,67	26,2	1,8	27,9	17,6	4,6	591,75	41,1	0,2	253,2	246,0
<b>2-Ethyl toluene</b>	136,00	18,45	1,20	0,55	18,49	0,07	29,68	0,142	15,48	28,2	1,5	29,7	17,4	4,0	650,00	32,9	0,3	329,4	319,4
<b>3-Ethyl toluene</b>	138,50	18,33	0,81	0,37	18,35	0,07	29,27	0,142	15,31	27,8	1,4	29,3	17,3	3,9	637,15	31,5	0,3	330,8	322,8
<b>4-Ethyl toluene</b>	139,60	18,25	0,28	0,65	18,27	0,07	28,77	0,140	14,75	27,3	1,4	28,8	17,2	3,9	640,20	32,3	0,3	326,0	324,2
<b>Ethylbenzene</b>	123,00	18,52	1,31	0,57	18,57	0,07	28,75	0,141	15,12	27,2	1,5	28,7	17,5	4,1	617,15	36,1	0,3	291,4	286,0
<b>1,2-Dimethylbenzene</b>	121,20	18,55	1,37	3,02	18,84	0,07	29,76	0,143	15,55	27,7	2,1	29,8	17,6	4,8	630,30	37,3	0,3	289,1	283,0
<b>1,3-Dimethylbenzene</b>	123,44	18,55	0,79	1,86	18,66	0,07	28,47	0,139	14,73	26,8	1,7	28,5	17,5	4,4	617,00	35,4	0,3	293,8	286,0
<b>1,4-Dimethylbenzene</b>	123,30	18,65	0,27	0,68	18,66	0,08	28,01	0,136	14,31	26,5	1,5	28,0	17,5	4,2	616,20	35,1	0,3	295,9	286,0
<b>1,2-Diethylbenzene</b>	153,50	17,98	1,19	0,60	18,03	0,07	29,78	0,144	15,71	28,3	1,5	29,8	17,0	3,9	668,00	28,8	0,3	378,5	360,4
<b>1,3-Diethylbenzene</b>	155,90	17,79	0,83	1,69	17,89	0,07	28,65	0,140	15,02	27,0	1,6	28,6	16,8	4,1	663,00	28,8	0,3	374,1	360,6
<b>1,4-Diethylbenzene</b>	156,90	17,90	0,28	0,58	17,91	0,07	28,49	0,139	14,78	27,0	1,5	28,5	16,9	3,9	657,90	28,0	0,4	373,1	361,4
<b>Propylbenzene</b>	138,80	18,23	0,87	1,95	18,35	0,07	28,44	0,138	14,62	26,7	1,7	28,4	17,2	4,4	638,35	32,0	0,3	329,7	326,0
<b>Isopropylbenzene</b>	139,10	17,65	0,91	1,94	17,78	0,08	27,69	0,143	14,93	26,1	1,6	27,7	16,7	4,1	631,00	32,1	0,3	326,7	322,0
<b>1,2,3-Trimethylbenzene</b>	134,44	18,71	1,18	2,87	18,96	0,07	28,31	0,130	13,77	26,1	2,2	28,3	17,6	5,1	664,50	34,5	0,3	320,7	320,2
<b>1,2,4-Trimethylbenzene</b>	133,60	18,91	0,76	1,81	19,02	0,07	29,20	0,133	14,39	27,4	1,8	29,2	17,8	4,6	649,10	32,3	0,3	329,3	322,0
<b>1,3,5-Trimethylbenzene (mesitylene)</b>	139,80	18,58	0,26	0,65	18,59	0,08	27,55	0,130	13,55	25,9	1,6	27,6	17,4	4,3	637,30	31,3	0,4	329,4	324,0
<b>1-Butylbenzene</b>	157,00	17,94	0,83	1,75	18,04	0,07	28,72	0,138	14,74	27,0	1,7	28,7	16,9	4,2	660,50	28,9	0,3	366,5	362,7
<b>Isobutylbenzene</b>	154,00	17,57	0,75	1,63	17,66	0,08	26,99	0,136	14,08	25,4	1,6	27,0	16,5	4,2	650,00	30,5	0,3	345,6	360,4
<b>sec-Butylbenzene</b>	156,00	17,35	0,88	1,72	17,46	0,07	28,34	0,146	15,44	26,8	1,5	28,3	16,4	3,9	664,54	29,5	0,2	376,6	360,0
<b>tert-Butylbenzene</b>	156,10	16,77	1,36	2,53	17,02	0,08	27,30	0,148	15,35	25,5	1,8	27,3	15,9	4,2	660,00	29,7	0,2	372,8	358,0
<b>n-Pentylbenzene</b>	171,80	17,93	0,27	0,53	17,94	0,07	28,99	0,137	14,99	27,5	1,5	29,0	16,9	4,0	679,90	26,0	0,4	406,5	402,8
<b>Hexylbenzene</b>	188,47	17,72	0,28	0,51	17,73	0,07	29,58	0,139	15,28	28,1	1,5	29,6	16,7	3,9	698,00	23,8	0,4	444,5	450,3
<b>n-Decylbenzene</b>	255,10	16,99	0,28	0,49	17,00	0,07	30,53	0,141	15,15	29,0	1,5	30,5	16,0	3,6	753,00	17,7	0,6	574,3	604,1
<b>Styrene</b>	115,60	19,33	0,52	1,16	19,37	0,07	32,00	0,148	16,69	30,5	1,5	32,0	18,3	4,0	636,00	38,4	0,3	286,9	274,0
<b>a-Methylstyrene</b>	130,20	18,70	1,59	0,81	18,78	0,07	32,56	0,154	17,53	31,1	1,4	32,6	17,7	3,8	654,00	33,6	0,3	327,4	310,0

<b>Methylal</b>	88,80	17,03	1,73	5,59	18,01	0,09	20,59	0,120	10,67	17,6	3,0	20,6	16,1	6,6	480,60	39,5	0,297	207,0	190,3
<b>Nitromethane</b>	54,30	19,13	9,11	16,36	26,77	0,07	36,48	0,114	13,63	21,0	15,5	36,5	19,6	16,9	588,15	63,1	0,346	171,5	132,2
<b>Nitroethane</b>	71,50	17,50	8,44	14,01	23,96	0,07	32,08	0,114	12,84	18,9	13,1	32,1	17,8	14,8	593,00	51,6	0,377	202,5	169,0
<b>1-Nitropropane</b>	88,40	16,87	7,61	12,47	22,32	0,07	30,13	0,115	12,54	18,6	11,5	30,1	16,9	13,3	605,00	43,5	0,410	235,8	209,0
<b>2-Nitropropane</b>	86,90	16,23	7,81	11,96	21,62	0,07	29,28	0,119	12,86	18,0	11,2	29,3	16,4	12,9	594,00	44,5	0,381	229,1	205,0
<b>1-Nitrobutane</b>	106,20	16,88	6,47	11,12	21,23	0,07	29,23	0,116	12,44	19,4	9,8	29,2	16,7	11,9	623,00	37,6	0,454	270,6	247,6
<b>Ethylene Glycol</b>	55,80	26,49	6,30	21,70	34,82	0,06	47,99	0,087	11,86	29,0	18,9	48,0	26,2	21,1	720,00	82,0	0,542	160,1	148,9
<b>Diethylene Glycol</b>	94,90	23,85	5,13	13,62	27,94	0,06	44,77	0,106	13,99	32,6	12,1	44,8	23,0	14,0	744,60	46,0	0,623	260,7	248,4
<b>Triethylene Glycol</b>	114,00	23,50	5,52	13,83	27,82	0,06	45,13	0,102	13,42	32,2	12,9	45,1	22,7	14,4	769,50	33,2	0,753	337,0	350,9
<b>Trimethylene Glycol</b>	72,50	25,07	5,87	18,23	31,55	0,06	45,17	0,092	12,15	29,2	16,0	45,2	24,5	18,1	724,00	95,0	0,743	131,9	189,3
<b>Ethylene Glycol Monomethyl Ether</b>	79,10	20,09	4,75	12,77	24,27	0,07	30,84	0,103	11,39	21,4	9,5	30,8	19,5	13,0	564,00	50,1	0,733	172,2	186,9
<b>Ethylene Glycol Monoethyl Ether</b>	97,80	19,10	4,20	10,97	22,43	0,07	28,35	0,103	10,96	20,5	7,9	28,4	18,4	11,4	569,00	42,4	0,764	197,3	
<b>Ethylene glycol Monobutyl ether</b>	131,60	18,22	3,64	9,45	20,85	0,08	26,14	0,100	10,12	19,5	6,6	26,1	17,4	10,1	633,90	32,7	0,517	302,8	307,2
<b>Diethylene Glycol Dimethyl Ether</b>	142,00	17,51	3,40	6,38	18,95	0,07	29,56	0,133	14,43	24,8	4,7	29,6	16,8	7,3	608,00	28,6	0,571	317,2	329,4
<b>Diethylene Glycol Diethyl Ether</b>	179,80	16,69	3,02	5,73	17,91	0,08	26,80	0,125	12,86	22,6	4,2	26,8	15,9	6,8	624,00	23,7	0,675	366,8	408,9
<b>Bis[2-(2-methoxyethoxy) ethyl] ether</b>	225,40	18,45	2,72	4,96	19,30	0,07	33,41	0,125	14,34	29,3	4,1	33,4	17,4	6,5	705,00	19,4	0,933	445,1	
<b>Dichloroethyl Ether</b>	117,20	14,89	5,00	5,00	16,49	0,07	37,31	0,237	27,76	33,4	4,0	37,3	15,1	5,2	666,00	35,9	0,399	308,3	291,6
<b>1,4-Dioxane</b>	85,70	20,81	5,56	2,05	21,64	0,07	32,76	0,134	15,31	29,2	3,5	32,8	19,7	6,9	587,20				202,0
<b>Water</b>	18,00	32,31	8,46	36,88	49,76	0,05	71,99	0,094	14,53	35,8	36,2	72,0	33,9	34,1	647,10	220,6	0,365	66,6	52,5
<b>Acetonitrile</b>	52,60	15,80	10,48	16,37	25,05	0,08	27,40	0,098	10,25	13,1	14,3	27,4	16,7	17,5	545,50	48,3	0,338	198,1	122,0
<b>Propionitrile</b>	70,90	15,05	9,26	14,03	22,57	0,08	25,60	0,103	10,29	13,2	12,4	25,6	15,6	15,2	564,40	41,8	0,323	233,0	162,6
<b>Butyronitrile</b>	87,30	15,06	8,48	12,68	21,43	0,08	25,88	0,107	10,82	14,3	11,5	25,9	15,4	13,8	582,25	37,9	0,375	256,9	200,0
<b>Valeronitrile</b>	103,80	15,10	7,88	11,75	20,69	0,08	26,00	0,109	11,05	15,2	10,8	26,0	15,3	12,9	603,00	32,6	0,420	297,7	
<b>Capronitrile</b>	120,05	15,24	7,33	10,96	20,15	0,08	26,47	0,112	11,39	16,3	10,2	26,5	15,3	12,1	622,05	29,2	0,474	331,1	276,6
<b>Caprylonitrile</b>	154,20	17,57	6,55	3,04	19,00	0,08	26,80	0,117	12,12	22,2	4,6	26,8	16,7	7,6	674,35				356,0
<b>Nonanenitrile</b>	177,15	16,81	6,17	3,29	18,21	0,08	27,28	0,124	12,85	22,6	4,6	27,3	16,0	7,3	700,00				

<b>Benzonitrile</b>	103,00	20,67	8,06	3,76	22,51	0,06	37,63	0,134	16,36	31,4	6,3	37,6	19,8	8,9	699,35	42,2	0,369	287,3	252,7
<b>Glutaronitrile</b>	95,30	26,35	7,81	2,29	27,58	0,06	47,59	0,116	15,65	41,5	6,1	47,6	24,9	9,6	782,00	31,5	0,605	379,5	
<b>Adiponitrile</b>	111,50	25,54	6,96	2,14	26,56	0,06	45,45	0,113	15,03	39,9	5,6	45,4	24,0	9,0	781,00	28,3	0,654	406,7	
<b>Lactonitrile</b>	71,90	30,33	6,41	0,60	31,00	0,07	34,95	0,074	8,69	30,4	4,6	35,0	27,9	10,8	643,00	50,3	0,786	193,7	
<b>3-Butenenitrile</b>	80,50	21,27	7,44	1,86	22,61	0,08	27,60	0,106	11,04	23,2	4,4	27,6	20,0	8,7	584,00	38,8	0,382	252,1	
<b>Formamide</b>	39,80	25,33	11,38	26,70	38,53	0,05	57,02	0,095	13,82	28,8	28,2	57,0	26,4	26,2	771,00	78,0	0,434	186,9	108,0
<b>Hydrazine</b>	32,10	30,40	6,11	22,15	38,11	0,05	66,39	0,121	18,64	44,8	21,6	66,4	30,2	21,0	653,15	147,0	0,344	95,0	90,2
<b>Methylamine</b>	44,40	17,23	3,90	15,41	23,44	0,09	19,15	0,083	7,05	10,9	8,3	19,2	17,0	14,9	430,05	74,6	0,308	107,7	98,0
<b>Ethylamine</b>	65,60	16,68	3,06	10,70	20,05	0,09	19,20	0,100	8,50	13,3	5,9	19,2	16,1	10,8	456,15	56,2	0,301	145,6	139,0
<b>n-Propylamine</b>	83,00	17,27	2,66	8,13	19,27	0,09	21,75	0,113	10,38	17,0	4,7	21,8	16,5	8,7	496,95	47,4	0,306	183,9	179,0
<b>n-Butylamine</b>	99,00	17,13	2,89	7,44	18,89	0,08	23,44	0,120	11,45	18,8	4,6	23,4	16,3	8,1	531,90	42,0	0,340	216,4	218,0
<b>Isobutylamine</b>	99,60	16,67	2,65	7,19	18,35	0,09	21,75	0,118	10,77	17,5	4,3	21,8	15,9	7,8	513,73	42,2	0,368	205,8	217,0
<b>sec-butylamine</b>	100,90	16,34	2,65	7,16	18,04	0,09	21,11	0,118	10,57	16,9	4,2	21,1	15,6	7,8	514,30	40,0	0,291	220,9	218,0
<b>tert-butylamine</b>	105,08	14,74	2,60	7,78	16,87	0,10	16,87	0,106	8,34	12,6	4,3	16,9	14,1	8,2	483,90	38,4	0,291	214,0	
<b>n-Pentylamine</b>	115,49	17,05	2,98	6,89	18,63	0,08	24,69	0,123	12,14	20,2	4,5	24,7	16,3	7,7	555,00	35,8	0,413	252,3	258,0
<b>tert-pentylamine</b>	116,84	15,47	2,71	6,81	17,12	0,09	19,91	0,117	10,20	15,8	4,1	19,9	14,7	7,5	526,00	36,6	0,328	240,7	
<b>Hexylamine</b>	132,10	17,11	2,87	6,25	18,44	0,08	25,75	0,126	12,64	21,6	4,2	25,8	16,3	7,2	584,00	31,8	0,461	289,4	
<b>Heptylamine</b>	148,59	16,82	2,81	6,57	18,28	0,08	24,00	0,115	11,09	19,6	4,4	24,0	16,0	7,5	607,00	28,5	0,509	324,9	
<b>Dimethylamine</b>	66,20	17,97	2,70	6,60	19,34	0,08	26,34	0,147	14,98	25,0	1,4	26,3	18,2	4,3	437,20	53,4	0,315	144,5	139,6
<b>Diethylamine</b>	103,20	16,18	1,96	5,73	17,28	0,09	19,85	0,120	10,39	16,7	3,1	19,9	15,3	6,6	496,60	37,1	0,311	225,0	219,2
<b>Di-n-propylamine</b>	136,90	16,36	1,98	4,82	17,17	0,08	22,31	0,124	11,52	19,4	2,9	22,3	15,5	6,0	550,00	31,4	0,453	274,8	298,8
<b>Diisopropylamine</b>	136,90	15,03	2,18	5,40	16,12	0,09	19,14	0,121	10,25	16,0	3,1	19,1	14,2	6,3	523,10	32,0	0,382	262,7	293,5
<b>Di-n-butylamine</b>	170,00	16,49	1,68	3,65	16,98	0,08	24,12	0,128	12,39	21,7	2,4	24,1	15,5	5,2	602,30	25,7	0,527	348,9	378,6
<b>Trimethylamine</b>	90,30	14,31	1,42	6,46	15,76	0,12	13,41	0,102	6,90	10,5	2,9	13,4	13,5	7,1	433,25	40,7	0,207	186,0	177,6
<b>Triethylamine</b>	138,60	15,56	1,32	3,28	15,96	0,09	20,22	0,130	11,38	18,3	1,9	20,2	14,6	4,8	535,15	30,4	0,323	286,8	296,6
<b>Tripropylamine</b>	189,60	15,84	1,27	2,78	16,13	0,08	22,39	0,126	11,77	20,4	2,0	22,4	14,9	4,6	577,50	22,3	0,672	355,2	413,6

<b>Tributylamine</b>	239,50	15,46	1,23	2,16	15,66	0,08	24,40	0,135	13,21	22,6	1,8	24,4	14,6	4,1	644,00	18,0	0,663	479,5	532,0
<b>Dipentylamine</b>	202,40	16,34	1,86	3,54	16,82	0,08	25,71	0,131	13,13	23,2	2,5	25,7	15,4	5,1	639,00	21,2	0,655	416,2	
<b>Tripentylamine</b>	287,50	15,05	1,44	2,15	15,27	0,08	25,82	0,142	14,28	24,0	1,8	25,8	14,2	3,9	660,00	15,0	0,800	543,0	
<b>Ethylene diamine</b>	67,30	22,53	4,66	11,50	25,72	0,06	41,28	0,130	16,49	32,0	9,3	41,3	21,9	11,8	593,00	62,9	0,481	165,5	
<b>Aniline</b>	91,50	22,40	3,31	7,82	23,95	0,06	42,12	0,138	17,66	36,2	5,9	42,1	21,4	8,7	699,00	53,1	0,393	234,9	232,1
<b>N-Methylaniline</b>	108,40	21,04	3,34	7,84	22,70	0,07	36,90	0,127	15,31	31,0	5,9	36,9	20,1	8,8	701,55	52,0	0,478	232,9	266,1
<b>Dimethylaniline</b>	123,70	19,52	3,15	6,20	20,72	0,07	35,52	0,140	16,64	30,9	4,6	35,5	18,7	7,2	687,15	36,3	0,410	314,7	311,7
<b>Ethanolamine</b>	59,80	29,97	2,11	11,37	32,13	0,06	48,30	0,101	13,76	40,0	8,3	48,3	28,2	12,8	678,20	71,2	0,492	171,8	159,8
<b>Triethanolamine</b>	133,20	27,18	1,97	7,59	28,28	0,06	47,20	0,098	13,16	40,8	6,4	47,2	25,4	10,1	772,10	27,4	1,284	312,4	346,7
<b>Benzylamine</b>	109,20	21,32	2,78	6,20	22,37	0,06	39,30	0,139	17,26	34,8	4,5	39,3	20,3	7,3	684,00	43,2	0,412	270,7	273,7
<b>Cyclohexylamine</b>	113,80	18,44	2,62	5,27	19,35	0,07	31,22	0,145	16,17	27,7	3,5	31,2	17,6	6,3	615,00	42,0	0,363	251,2	
<b>Allylamine</b>	74,90	18,58	3,09	9,78	21,23	0,08	24,28	0,108	10,52	18,3	6,0	24,3	17,8	10,2	505,00	51,7	0,338	172,1	
<b>Carbon disulfide</b>	60,00	22,16	0,28	1,02	22,19	0,07	31,58	0,138	15,40	30,0	1,6	31,6	20,9	4,9	552,00	79,0	0,113	143,4	143,6
<b>N,N-Dimethyl sulfoxide</b>	71,30	20,09	9,14	15,22	26,81	0,06	42,92	0,122	15,74	26,6	16,4	42,9	20,4	16,0	729,00	56,5	0,310	240,2	178,0
<b>Dimethyl sulfide</b>	88,60	16,05	3,31	6,67	17,69	0,08	24,06	0,146	14,10	19,8	4,2	24,1	15,5	7,2	503,04	55,3	0,200	169,7	162,3
<b>Diethyl sulfide</b>	107,40	16,75	3,08	6,81	18,35	0,08	24,57	0,130	12,71	20,2	4,4	24,6	16,0	7,5	557,15	39,6	0,299	242,3	240,0
<b>Dimethyl disulfide</b>	88,60	20,37	4,29	1,75	20,89	0,07	33,39	0,145	16,72	30,7	2,7	33,4	19,3	5,7	615,00	53,6	0,219	215,2	213,0
<b>Furfural</b>	83,20	19,76	7,76	12,31	24,54	0,06	43,08	0,138	17,92	29,9	13,1	43,1	19,8	13,1	670,15	56,6	0,384	213,5	206,3
<b>Thiophene</b>	79,00	20,49	1,43	4,12	20,95	0,07	30,68	0,138	15,19	28,2	2,5	30,7	19,4	5,8	579,35	56,9	0,206	192,8	189,3
<b>2-methyl thiophene</b>	96,25	19,53	1,58	4,02	20,00	0,07	30,19	0,139	15,21	27,7	2,5	30,2	18,5	5,6	609,00	49,1	0,248	226,9	228,0
<b>2-ethylthiophene</b>	113,10	18,95	1,06	2,56	19,15	0,07	29,35	0,140	15,07	27,5	1,9	29,3	17,9	4,7	626,60	44,1	0,303	251,3	267,0
<b>2,5-Dimethyl thiophene</b>	114,01	18,93	1,19	2,78	19,17	0,07	29,91	0,142	15,43	27,9	2,0	29,9	17,9	4,7	629,90	44,6	0,313	249,4	265,7
<b>Pyridine</b>	80,90	21,82	4,91	1,84	22,44	0,07	36,56	0,142	17,07	33,4	3,1	36,6	20,7	6,4	619,95	56,3	0,254	206,0	198,3
<b>2-Methylpyridine</b>	98,00	20,21	4,19	1,72	20,71	0,07	33,05	0,141	16,19	30,3	2,7	33,1	19,2	5,7	621,00	46,0	0,309	239,7	236,7
<b>Pyridazine</b>	72,60	24,55	9,48	3,60	26,56	0,06	47,96	0,138	18,71	40,5	7,4	48,0	23,6	10,1	774,00	54,9	0,221	270,5	190,6
<b>Piperidine</b>	98,90	18,99	2,53	6,30	20,17	0,07	28,91	0,130	13,89	24,9	4,0	28,9	18,1	7,3	594,05	46,5	0,260	230,2	233,0

<b>Pyrimidine</b>	74,20	25,13	5,37	1,23	25,72	0,07	36,56	0,111	13,37	32,8	3,8	36,6	23,5	8,0	638,00	54,9	0,2	219,3	
<b>Quinoline</b>	118,00	21,78	4,30	2,02	22,29	0,06	42,59	0,148	19,05	39,4	3,1	42,6	20,7	5,9	782,15	48,6	0,3	289,7	303,6
<b>Pyrrole</b>	69,20	22,03	4,44	11,99	25,47	0,06	37,06	0,117	14,22	27,8	9,2	37,1	21,3	12,3	639,75	65,3	0,3	184,2	171,3
<b>Pyrrolidine</b>	83,50	19,02	3,53	8,68	21,21	0,07	29,23	0,126	13,51	23,3	5,9	29,2	18,3	9,2	568,55	56,1	0,2	186,0	193,3
<b>Methanethiol</b>	54,10	17,35	4,17	10,89	20,91	0,08	23,85	0,122	11,74	16,9	7,0	23,9	17,0	10,9	469,95	72,3	0,1	127,7	123,7
<b>1-Ethanethiol (ethyl mercaptan)</b>	74,30	16,83	3,72	9,34	19,60	0,08	23,08	0,121	11,41	17,1	6,0	23,1	16,3	9,6	499,15	54,9	0,1	169,4	160,0
<b>1-Propanethiol</b>	90,50	18,54	3,33	1,05	18,86	0,08	24,20	0,128	12,43	22,1	2,1	24,2	17,4	5,3	536,60	46,3	0,2	208,4	202,4
<b>2-Propanethiol</b>	94,10	17,51	3,28	1,00	17,85	0,09	21,33	0,124	11,30	19,4	1,9	21,3	16,4	5,2	517,00	47,5	0,2	197,2	200,7
<b>1-Butanethiol</b>	107,80	16,84	3,06	6,58	18,33	0,08	25,22	0,133	13,23	20,9	4,3	25,2	16,1	7,3	570,10	39,7	0,2	249,7	241,5
<b>2-Methyl-1-propanethiol</b>	108,10	16,28	3,05	6,69	17,86	0,08	23,50	0,131	12,48	19,2	4,3	23,5	15,6	7,4	559,00	40,6	0,2	241,4	
<b>2-Methyl-2-propanethiol</b>	112,90	14,73	3,10	6,65	16,45	0,09	19,97	0,129	11,22	15,9	4,1	20,0	14,2	7,2	530,00	40,6	0,2	232,1	
<b>1-Pentanethiol</b>	124,40	16,84	2,84	5,86	18,06	0,08	25,86	0,134	13,52	22,0	3,9	25,9	16,1	6,7	598,00	34,7	0,3	289,3	281,0
<b>1-Hexanethiol</b>	142,12	16,82	2,71	5,20	17,82	0,08	27,02	0,138	14,21	23,5	3,5	27,0	16,0	6,2	623,00	30,8	0,3	328,9	320,8
<b>1-Heptanethiol</b>	156,71	16,87	2,63	5,14	17,83	0,08	26,84	0,132	13,60	23,3	3,5	26,8	16,0	6,3	645,00	27,7	0,4	366,6	359,7
<b>1-Octanethiol</b>	168,80	17,72	2,61	1,19	17,96	0,08	27,36	0,130	13,48	25,3	2,1	27,4	16,7	4,8	667,30	25,2	0,4	407,7	400,1
<b>Benzenethiol</b>	102,40	21,31	2,60	1,13	21,50	0,06	38,41	0,150	18,45	36,4	2,0	38,4	20,2	4,7	689,00	47,4	0,2	264,0	255,7
<b>Acetic anhydride</b>	94,50	18,74	5,67	11,54	22,73	0,07	31,93	0,115	12,92	22,3	9,6	31,9	18,3	12,1	606,00	40,0	0,4	248,8	225,6
<b>Formic acid</b>	37,80	22,00	4,66	12,55	25,76	0,07	37,13	0,141	17,04	28,1	9,1	37,1	21,6	12,3	588,00	58,1	0,3	185,7	94,5
<b>Acetic acid</b>	57,10	18,57	4,60	11,85	22,50	0,08	27,10	0,117	12,15	19,0	8,1	27,1	18,2	11,9	591,95	57,9	0,4	178,1	131,2
<b>1-Propanoic acid</b>	75,00	19,63	4,02	13,37	24,09	0,08	26,20	0,090	9,17	17,4	8,7	26,2	19,0	13,4	600,81	46,2	0,5	209,5	169,0
<b>1-Butanoic acid</b>	110,00	19,08	3,18	9,68	21,63	0,08	26,05	0,098	9,93	19,7	6,4	26,1	18,2	10,3	615,70	40,6	0,6	230,8	208,8
<b>Isobutanoic acid</b>	93,40	20,75	2,31	10,68	23,45	0,08	24,58	0,083	8,16	18,3	6,2	24,6	19,6	11,4	605,00	37,0	0,6	250,4	207,8
<b>1-Pentanoic acid</b>	109,20	20,17	3,10	10,96	23,17	0,08	26,69	0,088	9,01	19,6	7,1	26,7	19,2	11,6	639,16	35,7	0,6	266,0	248,0
<b>Isopentanoic acid</b>	111,00	21,04	1,32	6,14	21,96	0,08	25,07	0,091	9,06	21,4	3,7	25,1	19,6	8,2	629,09	36,9	0,6	255,8	248,3
<b>1-Heptanoic acid</b>	138,70	20,19	2,88	9,49	22,49	0,08	27,76	0,089	9,37	21,3	6,4	27,8	19,0	10,4	677,30	30,4	0,7	318,0	327,2
<b>Dichloroacetic acid</b>	82,50	22,01	5,24	15,07	27,18	0,07	35,45	0,093	11,05	23,5	11,9	35,5	21,4	15,2	686,00	51,7	0,5	221,5	203,8



<b>pentane</b>	116,20	15,34	0,23	1,03	15,37	0,11	15,50	0,113	8,26	14,3	1,2	15,5	14,2	4,2	469,70	33,7	0,257	233,7	236,0
<b>Isopentane</b>	116,46	14,79	0,46	1,77	14,90	0,11	15,21	0,118	8,73	13,9	1,3	15,2	13,8	4,2	460,40	33,8	0,233	229,9	234,9
<b>Hexane</b>	131,40	15,63	0,24	0,86	15,65	0,10	17,89	0,121	9,61	16,6	1,3	17,9	14,6	4,0	507,60	30,3	0,304	273,7	276,7
<b>2-Methylpentane</b>	132,88	15,11	0,24	0,74	15,13	0,10	16,88	0,122	9,77	15,7	1,2	16,9	14,1	3,9	497,70	30,4	0,285	268,6	276,9
<b>3-Methylpentane</b>	130,62	15,26	0,25	0,83	15,29	0,10	17,61	0,125	9,90	16,4	1,2	17,6	14,3	3,8	504,60	31,2	0,276	267,6	267,9
<b>2,2-Dimethylbutane</b>	133,73	14,55	0,24	0,75	14,57	0,10	15,75	0,122	9,42	14,6	1,1	15,7	13,6	3,8	489,00	31,0	0,238	263,3	272,2
<b>2,3-Dimethylbutane</b>	131,17	14,99	0,25	0,74	15,01	0,10	16,96	0,125	10,03	15,8	1,2	17,0	14,0	3,8	500,00	31,5	0,254	264,8	272,1
<b>Heptane</b>	147,40	15,79	0,25	0,74	15,81	0,09	19,66	0,126	10,63	18,4	1,3	19,7	14,8	3,9	540,20	27,4	0,352	312,8	318,4
<b>2,2-Dimethylpentane</b>	149,67	14,77	0,25	0,70	14,79	0,10	17,55	0,128	10,30	16,4	1,1	17,6	13,8	3,7	520,50	27,7	0,290	304,1	314,8
<b>2,3-Dimethylpentane</b>	145,05	15,27	0,27	0,69	15,29	0,09	19,47	0,134	11,39	18,3	1,2	19,5	14,3	3,6	537,30	29,1	0,301	301,0	310,5
<b>2,4-Dimethylpentane</b>	146,71	15,11	0,25	0,70	15,12	0,10	17,66	0,124	10,10	16,5	1,2	17,7	14,1	3,8	519,80	27,4	0,306	304,8	310,5
<b>3,3-Dimethylpentane</b>	145,40	15,04	0,27	0,69	15,06	0,09	19,10	0,135	11,38	18,0	1,1	19,1	14,1	3,5	536,40	29,5	0,272	300,0	309,6
<b>2,2,3-Trimethylbutane</b>	146,15	14,86	0,26	0,77	14,88	0,10	18,27	0,132	10,57	17,1	1,1	18,3	13,9	3,6	531,10	29,5	0,255	298,4	309,5
<b>2-Methylhexane</b>	148,60	15,31	0,25	0,74	15,33	0,10	18,74	0,127	10,46	17,5	1,2	18,7	14,3	3,8	530,40	27,4	0,333	308,7	316,3
<b>3-Methylhexane</b>	146,71	15,42	0,26	0,75	15,44	0,09	19,31	0,130	10,76	18,1	1,2	19,3	14,4	3,7	535,20	28,1	0,326	306,0	314,8
<b>3-Ethylpentane</b>	144,40	15,55	0,26	0,69	15,56	0,09	19,94	0,132	11,44	18,7	1,2	19,9	14,6	3,7	540,60	28,9	0,314	303,4	311,5
<b>Octane</b>	163,50	15,90	0,26	0,65	15,91	0,09	21,15	0,129	11,48	19,8	1,3	21,1	14,9	3,8	568,70	24,9	0,399	352,4	359,3
<b>2-Methylheptane</b>	164,63	15,46	0,26	0,65	15,48	0,09	20,15	0,130	11,28	18,9	1,2	20,1	14,5	3,7	559,70	25,0	0,381	347,4	356,9
<b>3-Methylheptane</b>	162,78	15,55	0,26	0,63	15,56	0,09	20,82	0,133	11,79	19,6	1,2	20,8	14,6	3,6	563,60	25,5	0,372	345,3	355,6
<b>4-methylheptane</b>	163,06	15,53	0,26	0,65	15,54	0,09	20,60	0,132	11,56	19,4	1,2	20,6	14,6	3,7	561,70	25,4	0,372	345,2	355,5
<b>2,3-Dimethylhexane</b>	161,31	15,37	0,27	0,67	15,38	0,09	20,54	0,135	11,67	19,4	1,2	20,5	14,4	3,6	563,50	26,3	0,348	339,3	351,9
<b>2,2,3-Trimethylpentane</b>	160,43	15,09	0,27	0,61	15,10	0,09	20,22	0,138	12,14	19,1	1,1	20,2	14,2	3,4	563,50	27,3	0,301	334,2	340,7
<b>2,2,4-Trimethylpentane</b>	165,10	14,80	0,26	0,61	14,82	0,09	18,91	0,133	11,33	17,8	1,1	18,9	13,9	3,5	543,80	25,7	0,307	337,5	339,0
<b>2,3,3-Trimethylpentane</b>	157,40	15,26	0,28	0,60	15,27	0,09	21,12	0,142	12,80	20,0	1,1	21,1	14,4	3,4	573,50	28,2	0,294	332,4	339,0
<b>2,3,4-Trimethylpentane</b>	158,80	15,34	0,27	0,61	15,35	0,09	20,70	0,137	12,24	19,5	1,2	20,7	14,4	3,5	566,40	27,3	0,318	334,2	339,0
<b>3-Ethylhexane</b>	161,01	15,62	0,27	0,60	15,63	0,09	21,13	0,134	12,21	19,9	1,2	21,1	14,7	3,6	565,50	26,1	0,363	341,0	345,2

<b>2,2-Dimethylheptane</b>	177,10	15,32	0,25	0,61	15,33	0,09	19,70	0,126	10,98	18,4	1,3	19,7	14,3	3,8	576,70	23,5	0,390	376,6	385,5
<b>2,2,4-Trimethylhexane</b>	177,50	15,11	0,28	0,58	15,12	0,09	21,36	0,140	12,66	20,2	1,1	21,4	14,2	3,4	573,70				383,6
<b>2,2,5-Trimethylhexane</b>	178,20	15,06	0,28	0,60	15,08	0,09	21,54	0,142	12,71	20,4	1,1	21,5	14,2	3,3	569,80	23,3	0,343	380,5	383,6
<b>2,4,4-Trimethylhexane</b>	177,50	15,13	0,27	0,59	15,15	0,09	20,75	0,136	12,06	19,6	1,2	20,8	14,2	3,5	581,00	24,6	0,353	370,2	380,6
<b>3,3-Diethylpentane</b>	170,40	15,63	0,24	0,60	15,64	0,09	19,63	0,122	10,80	18,3	1,3	19,6	14,6	3,9	610,05	26,7	0,340	365,6	375,9
<b>3-Ethyl-2,2-dimethylpentane</b>	177,50	15,13	0,29	0,58	15,14	0,09	21,92	0,144	13,06	20,8	1,1	21,9	14,3	3,3	590,00	25,7	0,338	364,8	379,6
<b>2,2,3,3-tetramethylpentane</b>	170,34	15,32	0,30	0,58	15,34	0,08	22,94	0,149	13,88	21,9	1,0	22,9	14,5	3,2	607,50	27,4	0,308	360,5	372,8
<b>2,2,3,4-Tetramethylpentane</b>	177,90	15,05	0,27	0,59	15,06	0,09	20,52	0,136	11,98	19,4	1,2	20,5	14,1	3,5	592,60	26,0	0,316	365,7	376,0
<b>Nonane</b>	179,67	15,96	0,26	0,62	15,97	0,09	22,38	0,131	11,98	21,1	1,3	22,4	15,0	3,8	594,60	22,9	0,442	390,6	399,6
<b>2-Methyloctane</b>	180,75	15,59	0,26	0,62	15,60	0,09	21,41	0,131	11,70	20,1	1,3	21,4	14,6	3,7	582,87	23,1	0,456	377,6	388,9
<b>3-Methyloctane</b>	177,90	15,68	0,27	0,58	15,69	0,09	21,87	0,133	12,27	20,6	1,3	21,9	14,7	3,6	590,15	23,4	0,412	384,5	387,4
<b>4-Methyloctane</b>	177,60	15,68	0,27	0,56	15,69	0,08	21,87	0,133	12,43	20,6	1,3	21,9	14,7	3,6	587,65	23,4	0,411	382,9	387,2
<b>3-Ethylheptane</b>	176,70	15,72	0,26	0,61	15,73	0,09	21,41	0,130	11,75	20,1	1,3	21,4	14,7	3,7	590,00	23,9	0,411	377,8	386,6
<b>2,6-Dimethylheptane</b>	180,70	15,29	0,26	0,60	15,30	0,09	20,55	0,131	11,59	19,3	1,2	20,6	14,3	3,6	579,00	23,0	0,391	384,9	386,6
<b>Decane</b>	195,90	15,99	0,26	0,59	16,00	0,08	23,37	0,133	12,36	22,0	1,3	23,4	15,0	3,7	617,70	21,1	0,483	429,4	440,7
<b>Undecane</b>	212,70	15,96	0,27	0,54	15,98	0,08	24,21	0,134	12,90	22,9	1,4	24,2	15,0	3,7	639,00	19,5	0,519	469,5	482,0
<b>Dodecane</b>	228,60	15,96	0,27	0,50	15,97	0,08	24,91	0,135	13,31	23,5	1,4	24,9	15,0	3,6	658,00	18,2	0,561	505,5	522,3
<b>Tridecane</b>	243,90	15,96	0,27	0,49	15,97	0,08	25,55	0,135	13,47	24,2	1,4	25,6	15,0	3,6	675,00	16,8	0,598	547,9	563,8
<b>Tetradecane</b>	261,30	15,85	0,27	0,53	15,86	0,08	26,13	0,137	13,25	24,7	1,4	26,1	14,9	3,5	693,00	15,7	0,616	592,4	606,1
<b>2,2-Dimethylhexane</b>	165,29	14,98	0,26	0,65	15,00	0,09	19,21	0,131	11,10	18,0	1,2	19,2	14,0	3,6	549,80	25,3	0,340	342,2	353,9
<b>2,4-Dimethylhexane</b>	164,08	15,19	0,26	0,67	15,21	0,09	19,59	0,131	11,09	18,4	1,2	19,6	14,2	3,6	553,50	25,6	0,345	340,7	353,3
<b>2,5-Dimethylhexane</b>	165,70	15,13	0,26	0,67	15,15	0,09	19,40	0,130	10,93	18,2	1,2	19,4	14,2	3,6	550,00	24,9	0,358	344,7	355,1
<b>3,3-Dimethylhexane</b>	161,81	15,16	0,27	0,60	15,18	0,09	20,20	0,136	12,02	19,1	1,1	20,2	14,2	3,5	562,00	26,5	0,323	339,1	351,1
<b>3,4-Dimethylhexane</b>	159,73	15,45	0,27	0,60	15,47	0,09	21,14	0,138	12,48	20,0	1,2	21,1	14,5	3,5	568,80	26,9	0,341	337,2	350,8
<b>2-Methyl-3-Ethylpentane</b>	159,72	15,43	0,26	0,60	15,44	0,09	20,13	0,131	11,70	18,9	1,2	20,1	14,5	3,7	567,10	27,0	0,332	336,1	346,2
<b>3-Methyl-3-Ethylpentane</b>	157,88	15,38	0,28	0,55	15,39	0,08	21,53	0,142	13,33	20,4	1,1	21,5	14,5	3,4	576,50	28,1	0,308	333,7	352,4

<b>Pentadecane</b>	277,70	15,79	0,27	0,45	15,80	0,08	26,64	0,138	14,14	25,3	1,4	26,6	14,9	3,5	708,00	14,8	0,6	627,9	647,4
<b>Hexadecane</b>	294,10	15,71	0,28	0,43	15,72	0,08	27,05	0,139	14,39	25,7	1,4	27,0	14,8	3,4	723,00	14,0	0,6	666,1	688,5
<b>Heptadecane</b>	309,90	15,65	0,28	0,42	15,66	0,08	27,50	0,140	14,66	26,1	1,4	27,5	14,7	3,4	736,00	13,4	0,7	692,8	708,4
<b>Octadecane</b>	326,90	15,58	0,28	0,41	15,59	0,07	27,87	0,141	14,82	26,5	1,4	27,9	14,7	3,4	747,00	12,7	0,7	722,9	748,2
<b>Nonadecane</b>	345,60	15,45	0,28	0,20	15,46	0,07	28,17	0,142	15,04	26,8	1,4	28,2	14,6	3,3	758,00	12,1	0,7	755,4	788,0
<b>Eicosane</b>	363,70	15,37	0,28	0,39	15,38	0,07	28,46	0,142	15,10	27,1	1,4	28,5	14,5	3,3	768,00	11,6	0,8	775,6	853,7
<b>Cyclopentane</b>	94,90	17,19	0,27	0,86	17,21	0,09	21,88	0,137	12,34	20,7	1,2	21,9	16,2	3,9	511,70	45,1	0,2	204,7	210,1
<b>Methylcyclopentane</b>	112,10	16,82	0,27	0,73	16,83	0,09	21,72	0,134	12,37	20,5	1,3	21,7	15,8	3,9	532,70	37,9	0,2	244,3	243,0
<b>1,1-Dimethylcyclopentane</b>	130,50	16,24	0,27	0,73	16,26	0,09	21,56	0,136	12,13	20,3	1,2	21,6	15,2	3,7	547,00	34,5	0,2	269,0	281,1
<b>Cyclohexane</b>	108,70	17,34	0,29	0,73	17,36	0,08	24,65	0,145	14,08	23,5	1,2	24,7	16,4	3,7	553,80	40,8	0,2	241,3	247,9
<b>Methylcyclohexane</b>	128,30	16,80	0,27	0,73	16,81	0,08	23,29	0,138	12,80	22,0	1,3	23,3	15,8	3,8	572,10	34,8	0,2	283,0	289,0
<b>1,1-Dimethylcyclohexane</b>	143,70	16,63	0,28	0,61	16,64	0,08	24,22	0,141	13,79	23,0	1,2	24,2	15,7	3,6	591,15	29,4	0,2	337,9	326,2
<b>Cis-1,2-Dimethylcyclohexane</b>	140,90	16,67	0,30	0,60	16,69	0,08	25,75	0,150	15,11	24,6	1,1	25,8	15,8	3,4	606,15	29,4	0,2	346,9	325,3
<b>Trans-1,2-Dimethylcyclohexane</b>	144,60	16,46	0,28	0,61	16,47	0,08	24,07	0,143	13,88	22,9	1,2	24,1	15,5	3,5	596,15	29,4	0,2	340,5	328,3
<b>Cis-1,3-Dimethylcyclohexane</b>	146,40	16,33	0,28	0,62	16,34	0,08	23,20	0,139	13,22	22,0	1,2	23,2	15,4	3,6	591,15	29,4	0,2	337,4	
<b>Trans-1,3-Dimethylcyclohexane</b>	146,40	16,51	0,26	0,64	16,52	0,08	22,46	0,132	12,36	21,1	1,3	22,5	15,5	3,9	598,00	29,4	0,2	341,7	
<b>Cis-1,4-Dimethylcyclohexane</b>	143,40	16,53	0,29	0,60	16,54	0,08	24,43	0,144	14,18	23,2	1,2	24,4	15,6	3,5	598,15	29,4	0,2	342,2	
<b>Trans-1,4-Dimethylcyclohexane</b>	147,97	16,40	0,27	0,60	16,41	0,08	22,62	0,134	12,80	21,3	1,3	22,6	15,4	3,8	587,70	29,4	0,2	333,3	
<b>Ethylcyclopentane</b>	128,83	16,68	0,28	0,63	16,70	0,08	23,38	0,140	13,62	22,2	1,2	23,4	15,7	3,7	569,50	34,0	0,2	283,9	279,0
<b>Ethylcyclohexane</b>	143,90	16,76	0,29	0,62	16,77	0,08	25,15	0,144	14,22	23,9	1,2	25,2	15,8	3,6	609,15	30,4	0,2	337,7	328,7
<b>2-Propylcyclopentane</b>	142,80	16,76	0,28	0,62	16,78	0,08	24,40	0,140	13,68	23,1	1,3	24,4	15,8	3,7	596,00	30,2	0,3	323,2	315,0
<b>Isopropylcyclopentane</b>	140,80	16,46	0,28	0,60	16,48	0,08	23,90	0,143	13,98	22,7	1,2	23,9	15,5	3,5	593,00	30,4	0,3	322,2	320,3
<b>Propylcyclohexane</b>	160,50	16,63	0,28	0,59	16,64	0,08	25,42	0,143	14,20	24,2	1,3	25,4	15,7	3,6	639,15	28,1	0,2	378,3	361,0
<b>Isobutylcyclohexane</b>	176,40	16,42	0,29	0,55	16,43	0,08	25,84	0,144	14,52	24,6	1,2	25,8	15,5	3,5	659,00				407,7
<b>Sec-butylcyclohexane</b>	173,00	16,96	0,29	0,54	16,97	0,07	27,87	0,147	15,40	26,6	1,3	27,9	16,0	3,5	646,40	26,3	0,4	385,1	407,8
<b>Tert-butylcyclohexane</b>	168,80	18,08	0,28	0,56	18,09	0,07	29,88	0,140	15,25	28,4	1,5	29,9	17,0	3,9	659,00				

<b>Cyclooctane</b>	134,90	17,63	0,31	0,60	17,65	0,07	29,30	0,155	16,67	28, 2	1,1	29,3	16,7	3,3	647,20	35,6	0,2 61	315,5	320,3
--------------------	--------	-------	------	------	-------	------	-------	-------	-------	----------	-----	------	------	-----	--------	------	-----------	-------	-------

\* Several sources from parachor data were used: [58], [86]–[91] In the absence of the literature data, the parameter was searched at the following site: <http://www.thegoodscentscompany.com/search2.html>

## 8.1.3. TABELA 3.

**Tabela 3.** Nomes de compostos, volume molar ( $m^3.mole^{-1}$ ), parâmetros de solubilidade de DiPEVa (este estudo,  $MPa^{1/2}$ ), parâmetro de solubilidade de associação ( $\delta_a$ ), número de DiPEVa (DiP #), tensão superficial experimental ( $\sigma_L, mN.m^{-1}$ ), obtido do banco de dados de Jasper, razão dos números de coordenação ( $\frac{Z_S}{Z}$ ), momento dipolar e produto de volume quadrado ( $\mu.V^{-1/2}$ ), constante dielétrica ( $\epsilon_R$ , literatura), constante dielétrica ajustada para razão dos números de coordenação e volume molar, momento dipolar ( $\mu, D$ ), obtido de Gharagheizi et al., entalpia de vaporização no ponto de ebulição ( $\Delta H_{vap}$  at  $T_b$ ;  $kJ.mol^{-1}$ ), parâmetros de temperatura crítica e de ebulição (K) e entalpia de vaporização a 25 °C ( $\Delta H_{vap}$  at 25;  $kJ.mol^{-1}$ ), calculada pela Eq. [21]. [83][48], [84], [85]

Moléculas	V, $cm^3.mol^{-1}$	Parâmetros de solubilidade de DiPEVa (este estudo, $MPa^{1/2}$ )				$\delta_a$ , Eq, [15]	DiP # Eqs. [18a, 18B]	$\sigma_L$ , $mN.m^{-1}$	$Z_S.Z^{-1}$ calcul. Eq. [7]	$\mu.V^{-1/2}$	$\epsilon_R$ , Literatura	$\epsilon_R^{1/2}/(Z_S.Z^{-1}.V^{1/2})$	$\mu$ , debye	$\Delta H_{vap}$ $T_B$ °C, $kJ.mol^{-1}$	$T_B$ (K)	$T_C$ (K)	$\Delta H_{vap}$ 25 °C, $kJ.mol^{-1}$ , Eq. [21]
		$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	$\delta_T$												
Methanol	40,7	19,3	5,2	23,1	30,5	23,7	0,09	22,12	0,058	0,27	33,00	15,48	1,70	35,1	337,9	512,5	38,0
Ethanol	58,5	19,0	4,3	18,6	26,9	19,1	0,09	21,97	0,066	0,22	25,30	9,96	1,69	38,0	351,4	514,0	42,3
1-Propanol	75,2	19,3	3,8	14,9	24,7	15,4	0,08	23,32	0,077	0,19	20,80	6,86	1,68	39,9	370,4	536,8	45,8
2-Propanol	76,8	17,8	3,8	13,8	22,8	14,3	0,09	20,93	0,080	0,19	20,18	6,44	1,66	35,5	355,4	508,3	40,1
1-butanol	91,5	19,5	3,5	12,4	23,4	12,9	0,08	24,95	0,086	0,17	17,84	5,15	1,66	42,4	390,8	563,0	49,9
2-methyl-1-propanol	92,8	18,2	3,4	11,7	21,9	12,2	0,08	22,54	0,087	0,17	17,93	5,03	1,64	38,3	380,8	547,8	44,6
2-methyl-2-propanol	95,8	16,8	3,4	11,3	20,5	11,8	0,09	19,96	0,087	0,17	12,47	4,14	1,67	35,8	355,6	506,2	40,5
2-butanol	92,0	18,1	3,5	11,7	21,8	12,2	0,08	22,54	0,088	0,17	17,26	4,90	1,66	38,0	372,7	536,2	43,9
1-pentanol	108,6	19,2	3,3	10,8	22,3	11,3	0,08	25,36	0,091	0,16	15,13	4,12	1,70	44,7	411,0	588,1	53,8
3-methyl-1-butanol	109,4	18,1	3,4	10,5	21,2	11,1	0,08	23,71	0,093	0,17	15,63	4,07	1,80	41,1	404,4	577,2	49,3
2-methyl-1-butanol	108,2	18,3	3,6	10,0	21,2	10,6	0,08	25,10	0,099	0,18	0,00	0,00	1,88	40,7	401,9	575,4	48,6
2-pentanol	109,6	18,2	3,1	9,9	20,9	10,3	0,08	23,45	0,094	0,15	13,71	3,74	1,62	40,6	392,2	560,3	48,0
2-methyl-2-butanol	108,2	17,3	3,3	9,2	19,9	9,8	0,08	22,31	0,100	0,16	5,78	2,30	1,70	37,0	375,2	543,7	42,6
1-hexanol	124,9	19,1	3,0	9,3	21,5	9,8	0,08	25,81	0,095	0,15	13,03	3,42	1,65	46,7	430,6	610,3	57,6
2-hexanol	126,8	18,2	2,8	8,3	20,2	8,8	0,08	24,27	0,100	0,14			1,54	42,8	413,0	585,9	51,9
3-methyl-1-pentanol	127,2	18,7	2,7	8,3	20,6	8,7	0,08	24,95	0,099	0,13			1,49	43,3	425,6	588,0	54,0
3-methyl-3-pentanol	124,0	17,3	3,2	7,5	19,1	8,2	0,08	23,26	0,108	0,16			1,75	38,5	394,1	575,6	45,2
4-methyl-2-pentanol	127,2	17,3	3,1	8,7	19,6	9,2	0,08	22,62	0,099	0,15			1,70	40,5	404,9	574,4	48,8
1,3-dimethyl-1-butanol	124,0	18,6	2,7	8,2	20,5	8,6	0,08	24,93	0,101	0,13			1,48	42,8	421,2	604,4	52,1
1-heptanol	141,9	18,8	3,0	8,3	20,7	8,8	0,08	26,71	0,101	0,15	11,75	2,86	1,74	48,5	449,5	632,6	61,0
1-octanol	157,7	18,7	2,7	7,1	20,2	7,6	0,08	27,10	0,104	0,13	10,30	2,46	1,65	50,1	468,4	652,5	64,3
2-octanol	159,1	17,8	2,7	6,6	19,2	7,2	0,08	25,91	0,109	0,13	8,13	2,07	1,65	46,3	453,0	629,6	58,8
1-nonanol	174,4	18,5	2,5	6,2	19,6	6,7	0,07	27,89	0,109	0,12	8,83	2,06	1,61	51,5	486,3	670,7	67,3
1-necanol	191,8	18,2	2,4	5,4	19,1	6,0	0,07	28,51	0,114	0,12	7,93	1,78	1,62	52,7	504,1	687,3	70,2
1-Dodecanol	224,3	17,6	2,4	4,6	18,4	5,2	0,07	29,40	0,121	0,11	5,82	1,33	1,69	55,0	537,0	719,4	75,6
Cyclohexanol	106,0	20,6	3,6	9,5	22,9	10,2	0,07	32,92	0,112	0,18	16,40	3,53	1,86	46,4	434,0	650,1	55,8
Allyl alcohol	68,4	20,3	3,8	15,3	25,7	15,8	0,08	25,28	0,079	0,19			1,60	39,6	370,2	545,1	45,1
Benzyl alcohol	103,6	22,2	3,4	8,5	24,0	9,1	0,06	39,96	0,125	0,17	11,92	2,71	1,71	48,2	477,9	720,2	59,5
2-Cresol	103,3	22,0	2,9	8,0	23,5	8,5	0,07	36,90	0,120	0,14	6,76	2,14	1,45	46,7	464,2	697,6	57,3
3-Cresol	104,7	21,7	3,2	8,6	23,5	9,2	0,07	35,69	0,115	0,16	12,44	2,99	1,59	46,7	475,4	705,9	58,0

<b>2-Methoxyphenol (guaiacol)</b>	97,0	22,2	5,0	11,4	25,4	12,4	0,06	42,20	0,120	0,25			2,46	50,0	478,2	697,0	62,8
<b>2-Chlorophenol</b>	102,3	21,8	2,8	6,5	22,9	7,1	0,06	39,70	0,136	0,13	7,40	1,97	1,33	44,4	447,5	675,0	53,8
<b>3-Chlorophenol</b>	105,5	20,9	4,3	8,4	22,9	9,4	0,06	41,18	0,140	0,21			2,17	44,4	487,0	729,0	55,3
<b>Methyl salicylate</b>	129,6	20,5	4,4	8,7	22,7	9,7	0,06	39,21	0,127	0,22	8,80	2,05	2,47	52,1	493,9	709,0	66,7
<b>3-Amino-1-propanol</b>	76,5	24,4	6,0	17,1	30,4	18,1	0,06	44,70	0,096	0,31			2,69	55,8	460,7	649,0	70,7
<b>2-propanone</b>	74,0	15,1	6,6	12,0	20,4	13,7	0,08	23,03	0,111	0,34	21,01	4,79	2,89	29,0	329,4	508,2	30,8
<b>2-butanone</b>	90,1	15,5	5,8	10,4	19,6	11,9	0,08	24,18	0,119	0,29	18,56	3,82	2,77	31,3	352,8	535,5	34,5
<b>2-pentanone</b>	106,7	18,3	5,3	1,9	19,1	5,7	0,08	24,92	0,121	0,27	15,45	3,14	2,77	34,2	375,5	561,1	39,1
<b>3-pentanone</b>	106,4	18,1	5,4	2,0	19,0	5,8	0,08	24,74	0,122	0,27	17,00	3,27	2,83	33,6	375,1	561,0	38,3
<b>2-hexanone</b>	123,6	18,0	4,8	1,8	18,8	5,2	0,08	25,52	0,123	0,24	14,56	2,80	2,68	36,9	400,7	587,6	43,6
<b>3-hexanone</b>	122,7	17,7	5,2	2,0	18,6	5,5	0,08	25,10	0,123	0,26			2,87	36,1	396,7	582,8	42,4
<b>2-Heptanone</b>	139,8	17,8	4,4	1,9	18,5	4,8	0,08	26,81	0,128	0,22	11,95	2,29	2,62	39,3	424,2	611,4	47,8
<b>3-Heptanone</b>	139,0	17,5	4,8	2,1	18,3	5,2	0,08	26,37	0,129	0,24	12,70	2,35	2,81	38,3	420,6	606,6	46,4
<b>4-Heptanone</b>	140,8	15,8	4,2	7,7	18,1	8,8	0,08	25,02	0,124	0,21	12,60	2,42	2,50	38,3	417,2	602,0	46,2
<b>3-Octanone</b>	156,0	17,4	4,0	1,8	18,0	4,4	0,08	26,61	0,129	0,20			2,44	40,6	440,7	627,7	50,3
<b>2-nonanone</b>	173,3	17,1	4,2	2,0	17,7	4,6	0,08	25,83	0,124	0,21			2,74	42,6	467,2	652,5	54,5
<b>5-nonanone</b>	173,4	17,1	4,2	2,0	17,7	4,7	0,08	26,66	0,128	0,21			2,74	42,6	461,6	640,0	54,5
<b>6-Undecanone (dipentyl ketone)</b>	206,4	16,7	3,8	2,0	17,2	4,3	0,08	26,88	0,130	0,19			2,68	45,8	500,6	678,5	61,1
<b>Acetophenone</b>	117,4	18,9	5,6	8,8	21,6	10,5	0,06	39,04	0,144	0,28	17,44	2,67	3,03	44,2	475,3	709,6	54,8
<b>Benzophenone</b>	164,2	19,2	4,7	6,8	20,9	8,3	0,06	43,49	0,153	0,23			2,99	54,0	579,2	830,0	71,9
<b>cyclopentanone</b>	89,1	20,8	6,8	2,5	22,0	7,2	0,07	32,80	0,128	0,34	13,58	3,06	3,24	37,3	403,8	624,5	43,3
<b>cyclohexanone</b>	104,0	20,2	6,0	2,6	21,3	6,6	0,07	34,57	0,137	0,30	16,10	2,87	3,09	39,6	428,6	653,0	47,1
<b>n-methyl formate</b>	62,2	17,6	4,5	11,7	21,6	12,6	0,08	24,36	0,111	0,22			1,77	28,6	304,9	487,2	29,0
<b>n-ethyl formate</b>	80,2	16,8	4,3	10,7	20,4	11,6	0,08	23,18	0,109	0,22	8,57	3,00	1,93	31,6	327,5	508,4	33,4
<b>n-propyl formate</b>	97,9	16,7	3,9	8,9	19,3	9,7	0,08	23,97	0,118	0,19	6,92	2,26	1,91	33,0	354,0	538,0	36,5
<b>n-butyl formate</b>	114,8	16,4	3,8	8,0	18,7	8,9	0,08	24,52	0,122	0,19			2,03	34,7	379,3	559,0	40,0
<b>i-butyl formate</b>	117,4	17,5	3,6	1,3	17,9	3,8	0,08	23,34	0,126	0,17	6,41	1,86	1,89	33,0	371,2	551,4	37,6
<b>n-hexyl formate</b>	148,1	17,5	3,2	1,4	17,9	3,5	0,08	26,37	0,132	0,15			1,88	38,5	428,7	607,0	47,4
<b>n-amyl formate</b>	131,3	17,9	3,4	1,3	18,3	3,6	0,08	25,53	0,127	0,17			1,90	36,6	405,5	576,0	44,0
<b>Methyl acetate</b>	79,7	17,7	3,8	9,9	20,6	10,6	0,08	24,72	0,114	0,19	7,07	2,61	1,68	31,7	330,1	506,6	33,8
<b>Ethyl acetate</b>	98,5	16,9	3,6	9,0	19,4	9,7	0,08	23,39	0,113	0,18	6,08	2,20	1,78	33,7	350,2	523,3	37,2
<b>n-propyl acetate</b>	115,3	16,6	3,4	7,7	18,6	8,5	0,08	23,80	0,119	0,17	5,62	1,85	1,79	34,9	374,7	549,7	40,0
<b>Isopropyl acetate</b>	117,1	15,5	3,3	7,2	17,4	7,9	0,09	21,76	0,123	0,16			1,75	31,6	361,7	532,0	35,7
<b>n-butyl acetate</b>	132,5	16,4	3,3	6,7	18,0	7,5	0,08	24,88	0,127	0,16	5,07	1,54	1,84	36,2	399,3	575,4	43,1
<b>i-butyl acetate</b>	133,5	15,8	3,3	6,9	17,6	7,7	0,08	23,06	0,123	0,16	5,07	1,58	1,87	35,0	389,8	560,8	41,2
<b>tert-Butyl acetate</b>	134,1	16,3	3,4	1,4	16,7	3,7	0,09	21,94	0,130	0,17			1,92	32,7	369,2	545,0	37,2
<b>sec-butyl acetate</b>	133,6	15,6	3,3	6,6	17,2	7,3	0,08	23,09	0,128	0,16	5,14	1,53	1,86	34,1	385,2	561,0	39,7
<b>n-pentyl acetate</b>	148,0	16,4	2,9	5,9	17,7	6,6	0,08	24,93	0,128	0,14	4,79	1,41	1,72	37,8	421,2	599,9	46,2
<b>Isopentyl acetate</b>	150,3	15,9	3,0	5,9	17,2	6,6	0,08	24,28	0,130	0,15	4,72	1,37	1,80	36,7	415,2	586,1	44,7
<b>n-hexyl acetate</b>	165,0	16,2	3,0	5,5	17,4	6,3	0,08	26,02	0,132	0,14	4,42	1,24	1,86	39,6	444,7	618,0	49,9
<b>Methyl propionate</b>	96,8	16,9	3,5	8,2	19,2	8,9	0,08	24,44	0,122	0,17	6,20	2,07	1,71	32,1	352,6	530,6	35,5
<b>Ethyl propionate</b>	115,5	16,2	3,3	7,9	18,3	8,5	0,08	22,30	0,115	0,16	5,76	1,94	1,74	34,0	372,3	546,0	38,9
<b>n-propyl propionate</b>	131,7	17,6	3,2	1,2	17,9	3,4	0,08	24,21	0,126	0,16	5,25	1,59	1,79	35,6	395,7	568,6	42,2
<b>n-butyl propionate</b>	149,7	16,1	3,1	5,9	17,4	6,6	0,08	24,89	0,130	0,15			1,80	37,3	418,3	594,6	45,5

<b>n-Methyl butyrate</b>	113,7	18,2	3,3	1,2	18,5	3,5	0,08	24,62	0,125	0,16	5,48	1,76	1,72	34,0	375,9	554,5	39,0
<b>Methyl-i-butyrate</b>	113,7	17,6	3,5	1,2	18,0	3,6	0,08	23,17	0,124	0,17			1,80	32,6	365,5	540,7	36,9
<b>n-ethyl butyrate</b>	132,9	16,1	3,2	6,7	17,7	7,4	0,08	23,94	0,126	0,16	6,20	1,72	1,81	35,5	394,7	571,0	41,9
<b>Ethyl isobutyrate</b>	133,7	16,9	3,6	1,4	17,4	3,9	0,08	22,72	0,124	0,18			2,07	34,6	383,0	553,2	40,4
<b>n-propyl butyrate</b>	149,3	17,1	3,0	1,3	17,4	3,2	0,08	24,56	0,129	0,14	4,30	1,32	1,75	37,3	415,9	593,7	45,3
<b>Propyl isobutyrate</b>	150,7	16,5	3,2	1,4	16,9	3,5	0,08	23,29	0,130	0,15			1,89	35,5	408,7	579,4	43,0
<b>n-butyl butyrate</b>	166,7	16,7	3,3	1,6	17,1	3,6	0,08	25,24	0,132	0,16			2,05	39,2	438,2	616,0	48,9
<b>Isobutyl isobutyrate</b>	167,7	16,7	3,2	1,8	17,1	3,6	0,08	27,75	0,145	0,15			1,97	40,3	420,7	602,0	49,1
<b>Ethyl isovalerate</b>	150,5	16,7	3,3	1,4	17,1	3,6	0,08	23,28	0,127	0,16			1,97	36,7	407,5	588,0	43,9
<b>n-butyl valerate</b>	182,3	16,7	3,2	1,6	17,1	3,5	0,08	25,72	0,132	0,15			2,07	41,2	459,7	629,0	53,1
<b>Methyl decanoate</b>	213,4	17,5	3,0	1,4	17,8	3,3	0,07	28,05	0,125	0,14			2,08	49,9	505,0	671,0	67,9
<b>Methyl dodecanoate</b>	246,4	16,8	2,3	1,4	17,1	2,7	0,07	29,10	0,135	0,11			1,70	51,3	540,0	712,0	71,7
<b>Ethyl hexanoate</b>	165,9	16,4	2,6	5,1	17,4	5,8	0,08	25,32	0,129	0,12			1,60	40,4	435,0	615,0	50,1
<b>Methyl acetoacetate</b>	107,8	20,5	8,3	3,2	22,3	8,9	0,07	32,62	0,116	0,43			4,44	43,5	444,9	642,0	53,8
<b>Ethyl acetoacetate</b>	125,6	22,7	5,2	1,4	23,3	5,4	0,07	31,88	0,099	0,26	14,00	3,37	2,97	54,2	454,0	643,0	68,1
<b>Methyl benzoate</b>	124,9	20,4	4,6	2,2	21,0	5,1	0,06	37,18	0,143	0,23	6,64	1,62	2,53	44,1	472,7	693,0	55,0
<b>Ethyl benzoate</b>	144,3	19,6	3,4	1,7	19,9	3,8	0,07	34,51	0,140	0,17	5,18	1,35	2,00	45,0	486,6	698,0	57,3
<b>Propyl benzoate</b>	144,3	20,2	3,1	1,3	20,5	3,4	0,07	33,88	0,130	0,15			1,83	46,7	504,2	710,0	60,7
<b>Butyl benzoate</b>	178,0	18,1	2,9	5,0	19,0	5,7	0,07	33,19	0,138	0,14	5,52	1,28	1,81	48,3	523,2	724,0	64,3
<b>Benzyl benzoate</b>	191,2	20,2	3,6	2,1	20,6	4,2	0,06	42,82	0,148	0,18			2,44	58,9	596,4	820,0	81,3
<b>Dimethyl maleate</b>	125,8	19,8	4,5	8,5	22,0	9,6	0,06	37,68	0,131	0,22			2,48	47,5	478,2	675,0	60,8
<b>Diethyl maleate</b>	161,2	18,0	4,1	7,3	19,9	8,4	0,07	32,07	0,126	0,20	7,56	1,72	2,56	48,0	498,2	680,0	63,6
<b>Dibutyl maleate</b>	230,4	17,3	3,6	6,3	18,8	7,3	0,07	30,30	0,118	0,18			2,70	57,0	553,2	716,0	81,6
<b>Diethyl malonate</b>	152,5	18,0	4,2	7,7	20,0	8,7	0,07	31,31	0,124	0,21	7,55	1,79	2,54	47,1	472,1	653,0	60,9
<b>Diethyl succinate</b>	167,2	18,4	3,4	6,8	19,9	7,6	0,07	31,37	0,121	0,17			2,16	50,0	490,2	663,0	66,4
<b>Diethyl phthalate</b>	198,0	18,6	3,9	6,6	20,1	7,7	0,07	36,06	0,129	0,19	7,86	1,54	2,74	57,4	567,2	757,0	80,2
<b>Diethyl oxalate</b>	136,6	18,5	4,3	8,6	20,9	9,6	0,07	31,52	0,118	0,21	8,27	2,08	2,50	45,8	458,6	618,0	59,7
<b>Ethyl lactate</b>	115,0	19,1	4,4	11,7	22,8	12,5	0,07	28,26	0,094	0,22			2,40	47,8	427,7	588,0	59,8
<b>Diethyl carbonate</b>	122,0	18,3	2,1	5,7	19,2	6,0	0,08	25,87	0,119	0,10	2,82	1,28	1,10	38,0	400,0	576,0	45,2
<b>Dimethyl carbonate</b>	84,2	21,0	2,1	7,5	22,4	7,7	0,07	28,58	0,110	0,10			0,90	37,7	363,4	548,0	42,3
<b>Acetaldehyde</b>	56,5	14,5	7,0	13,8	21,2	15,5	0,09	20,50	0,100	0,36	21,00	6,09	2,69	25,7	294,0	466,0	25,5
<b>Acetaldehyde</b>	56,5	14,5	7,0	13,8	21,2	15,5	0,09	20,50	0,100	0,36	21,00	6,09	2,69	25,7	294,0	466,0	25,5
<b>Propanal</b>	73,4	15,4	5,8	11,2	19,9	12,6	0,08	22,97	0,117	0,29	18,52	4,31	2,53	27,9	321,2	504,4	29,1
<b>Propanal</b>	73,4	15,4	5,8	11,2	19,9	12,6	0,08	22,97	0,117	0,29	18,52	4,31	2,53	27,9	321,2	504,4	29,1
<b>Butanal</b>	88,5	15,8	5,7	10,0	19,5	11,5	0,08	25,44	0,126	0,29	13,45	3,09	2,72	30,9	348,0	537,2	33,8
<b>Butanal</b>	88,5	15,8	5,7	10,0	19,5	11,5	0,08	25,44	0,126	0,29	13,45	3,09	2,72	30,9	348,0	537,2	33,8
<b>Pentanal</b>	106,4	15,8	5,0	9,4	19,1	10,6	0,08	24,36	0,119	0,25	10,00	2,57	2,57	34,0	376,2	566,1	38,7
<b>3-Methylbutanal</b>	106,0	15,3	5,0	9,3	18,6	10,6	0,08	23,18	0,120	0,25			2,61	32,4	365,7	543,2	36,6
<b>Hexanal</b>	122,5	16,1	4,7	8,6	18,9	9,8	0,08	25,60	0,122	0,23			2,58	37,0	401,5	591,0	43,6
<b>Heptanal</b>	139,8	16,2	4,4	8,0	18,6	9,1	0,08	25,96	0,122	0,22	9,07	2,08	2,58	39,8	426,0	616,8	48,3
<b>Paraldehyde</b>	132,4	17,2	2,6	5,8	18,4	6,4	0,08	25,63	0,126	0,12			1,43	37,9	397,2	579,0	44,7
<b>Benzaldehyde</b>	101,5	18,8	6,3	10,3	22,4	12,1	0,06	38,00	0,137	0,32	17,85	3,05	3,21	42,2	451,9	695,0	50,8
<b>2-hydroxybenzaldehyde</b>	104,6	21,0	6,0	11,6	24,7	13,0	0,06	42,28	0,124	0,30	18,35	3,38	3,09	51,0	469,7	680,0	64,0
<b>Limonene</b>	162,9	17,5	1,2	2,6	17,7	2,9	0,08	27,18	0,134	0,05			0,64	41,2	450,6	653,0	51,0

<b>alfa-Pinene</b>	159,5	16,1	0,8	1,5	16,2	1,7	0,08	25,99	0,155	0,03	2,18	0,75	0,36	34,8	429,3	644,0	41,7
<b>alfa-Pinene</b>	158,8	16,1	0,8	1,5	16,2	1,8	0,08	25,63	0,152	0,03	2,18	0,77	0,36	34,8	429,3	644,0	41,7
<b>beta-Pinene</b>	156,2	17,0	0,9	1,7	17,1	1,9	0,08	26,82	0,144	0,03	2,50	0,88	0,39	37,4	439,2	643,0	45,6
<b>Diethyl ether</b>	104,8	14,4	2,4	6,8	16,1	7,2	0,10	16,65	0,115	0,11	4,27	1,76	1,15	26,6	307,6	466,7	27,2
<b>Dibutyl ether</b>	170,3	15,7	2,0	4,1	16,3	4,5	0,08	22,44	0,129	0,09	3,08	1,05	1,17	37,1	414,2	584,1	45,2
<b>methyl t-butyl ether</b>	119,8	15,6	2,6	1,0	15,8	2,8	0,09	19,53	0,134	0,12			1,36	28,2	328,4	497,1	30,0
<b>methyl pentyl ether</b>	134,3	16,5	2,3	0,9	16,7	2,4	0,09	21,39	0,127	0,11			1,24	32,6	372,0	546,5	37,2
<b>ethyl methyl ether</b>	84,1	14,2	2,7	8,9	16,9	9,3	0,11	15,27	0,103	0,13			1,23	25,2	280,5	437,8	24,1
<b>ethyl propyl ether</b>	119,3	15,1	2,3	5,6	16,3	6,1	0,09	19,28	0,124	0,11			1,16	29,3	337,0	500,2	31,7
<b>ethyl butyl ether</b>	136,4	16,1	2,2	0,8	16,3	2,4	0,09	20,13	0,124	0,10			1,22	31,8	365,4	531,0	36,2
<b>dipropyl ether</b>	137,7	15,2	2,2	5,2	16,2	5,7	0,09	19,98	0,124	0,10	3,38	1,26	1,21	32,0	363,2	530,6	36,2
<b>diisopropyl ether</b>	140,9	14,1	2,1	5,1	15,1	5,5	0,10	17,27	0,122	0,10	3,81	1,34	1,13	29,5	341,5	500,1	32,3
<b>dipentyl ether</b>	203,2	15,9	1,9	3,5	16,4	4,0	0,08	24,35	0,130	0,08	2,80	0,90	1,20	41,9	459,9	622,0	54,5
<b>1,1-Dimethoxyethane</b>	106,7	16,5	2,6	7,4	18,3	7,9	0,09	21,00	0,112	0,13			1,32	32,9	337,5	507,8	35,6
<b>1,1-Diethoxymethane</b>	125,3	17,1	2,3	7,7	18,9	8,1	0,09	20,15	0,095	0,11			1,22	39,6	360,7	524,0	44,8
<b>1,1-Diethoxyethane</b>	143,9	16,1	1,9	5,1	17,0	5,5	0,09	20,89	0,116	0,09			1,08	36,0	376,7	539,7	41,8
<b>Methyl phenyl ether (Anisole)</b>	119,1	19,6	2,7	1,3	19,8	3,0	0,07	35,10	0,154	0,12	4,30	1,24	1,36	39,1	426,7	645,6	46,6
<b>Ethyl Phenyl Ether (Phenetole)</b>	127,3	18,9	2,6	5,4	19,9	6,1	0,07	32,41	0,138	0,13	4,22	1,32	1,41	41,0	443,2	647,2	50,3
<b>Anethole</b>	150,0	20,1	2,6	1,2	20,3	2,8	0,07	34,69	0,133	0,12			1,50	47,8	508,5	723,0	62,0
<b>Diphenyl ether</b>	160,4	18,7	2,0	5,3	19,5	5,6	0,08	26,75	0,109	0,09			1,16	46,9	531,5	766,8	61,0
<b>Chloromethane</b>	55,4	17,7	5,0	0,7	18,4	5,0	0,11	15,40	0,101	0,25			1,87	21,4	248,9	416,3	18,8
<b>Dichloromethane</b>	63,9	18,3	4,1	10,0	21,3	10,8	0,08	27,20	0,127	0,20	8,93	2,95	1,60	28,2	312,9	510,0	28,9
<b>Trichloromethane</b>	80,7	18,6	2,4	6,5	19,9	6,9	0,08	26,67	0,132	0,11	4,81	1,85	1,01	30,0	334,3	536,4	31,9
<b>Tetrachloromethane</b>	97,1	18,3	0,3	0,7	18,3	0,8	0,08	26,43	0,145	0,00	2,24	1,04	0,00	29,8	349,8	556,4	32,4
<b>1,1-Dichloroethane</b>	84,7	16,0	4,5	8,9	18,8	10,0	0,08	24,07	0,130	0,22	10,10	2,65	2,06	28,4	330,5	523,0	30,1
<b>1,2-Dichloroethane</b>	79,4	19,4	3,3	7,6	21,1	8,3	0,07	31,86	0,141	0,16	10,42	2,57	1,44	32,1	356,6	561,6	35,3
<b>1,1,1-Trichloroethane</b>	99,3	16,2	3,7	7,0	18,0	7,9	0,08	25,14	0,141	0,18	7,24	1,91	1,78	29,6	347,2	545,0	32,2
<b>1,1,2-Trichloroethane</b>	92,9	19,4	2,8	5,7	20,5	6,4	0,07	34,02	0,151	0,13	7,19	1,84	1,25	34,1	387,0	602,0	38,9
<b>1-Chloropropane</b>	88,1	17,7	4,4	1,3	18,3	4,6	0,09	21,27	0,121	0,22	8,59	2,58	2,05	28,1	319,7	503,2	29,3
<b>2-Chloropropane</b>	91,7	16,5	4,5	1,3	17,2	4,7	0,09	19,16	0,122	0,23			2,17	26,5	308,9	489,0	27,1
<b>1,2-Dichloropropane</b>	97,8	17,0	3,1	5,8	18,2	6,5	0,07	28,32	0,156	0,15	8,37	1,87	1,46	29,0	369,5	572,0	32,5
<b>1,3-Dichloropropane</b>	95,1	20,0	4,3	1,9	20,6	4,7	0,07	33,32	0,146	0,21	10,27	2,26	2,08	34,9	393,6	603,0	40,2
<b>1,4-Dichlorobutane</b>	109,5	19,7	4,3	2,1	20,3	4,8	0,07	34,83	0,150	0,21			2,23	37,5	428,3	641,0	44,9
<b>1,5-Dichloropentane</b>	127,5	19,0	4,3	2,3	19,6	4,9	0,07	35,17	0,153	0,21			2,36	39,8	456,2	668,0	49,2
<b>1-Chlorobutane</b>	104,5	17,5	4,1	1,4	18,0	4,3	0,08	23,18	0,128	0,20	7,28	2,05	2,05	30,7	351,6	537,0	33,8
<b>2-Chlorobutane</b>	106,8	16,7	4,0	1,5	17,2	4,3	0,09	21,61	0,130	0,20	8,56	2,18	2,04	29,1	341,3	520,6	31,6
<b>1-Chloropentane</b>	120,9	17,3	4,0	1,6	17,8	4,3	0,08	24,40	0,132	0,20	6,65	1,78	2,16	33,3	381,5	568,0	38,3
<b>1-Chlorohexane</b>	137,4	17,1	3,8	1,7	17,6	4,1	0,08	25,73	0,136	0,18			2,16	35,8	407,7	594,6	42,7
<b>3-Chloropropene</b>	82,3	17,8	4,3	1,4	18,4	4,6	0,08	23,14	0,132	0,21	8,20	2,38	1,94	26,9	318,3	514,2	27,9
<b>Dibromomethane</b>	69,8	22,9	3,5	1,3	23,2	3,8	0,06	39,05	0,149	0,17	7,77	2,24	1,43	33,9	370,1	611,0	37,5
<b>Tribromomethane</b>	87,5	22,1	2,4	1,1	22,2	2,6	0,06	44,87	0,173	0,11	4,40	1,30	0,99	37,6	422,4	696,0	43,3
<b>Bromoethane</b>	74,6	18,9	4,7	1,3	19,5	4,9	0,08	23,62	0,124	0,24	9,01	2,79	2,03	27,7	311,5	503,8	28,4
<b>1,1,2,2-Tetrabromoethane</b>	117,0	22,2	2,6	4,9	22,9	5,6	0,06	48,71	0,161	0,12	6,72	1,49	1,30	49,9	516,7	824,0	61,1
<b>1-Bromopropane</b>	90,9	18,5	4,6	1,6	19,1	4,9	0,08	25,26	0,129	0,23	8,09	2,30	2,18	30,8	344,2	544,0	33,3



<b>2-Bromopropane</b>	93,6	17,5	4,6	1,6	18,2	4,9	0,08	23,25	0,131	0,23	9,46	2,42	2,21	29,0	332,6	532,0	30,8
<b>1-Bromobutane</b>	107,6	18,3	4,1	1,5	18,8	4,3	0,08	25,90	0,130	0,20	7,32	2,00	2,08	33,6	374,8	577,0	38,0
<b>iodomethane</b>	62,3	20,6	4,2	1,4	21,1	4,4	0,07	30,36	0,146	0,21	6,97	2,30	1,62	26,8	315,6	528,0	27,7
<b>iodoethane</b>	81,2	19,6	4,3	1,5	20,1	4,6	0,07	28,46	0,137	0,21	7,82	2,27	1,91	30,5	345,5	561,0	32,9
<b>1-iodopropane</b>	97,5	19,8	4,2	1,4	20,3	4,4	0,07	28,80	0,128	0,21	7,07	2,10	2,04	35,8	375,6	593,0	40,2
<b>2-Iodopropane</b>	99,8	18,5	4,0	1,5	19,0	4,2	0,08	26,59	0,134	0,20	8,19	2,14	1,95	32,7	362,7	578,0	36,1
<b>Diiodomethane</b>	80,5	23,7	3,0	5,0	24,4	5,8	0,05	66,18	0,217	0,14	5,32	1,18	1,22	40,8	455,2	747,0	48,0
<b>Trichlorosilane</b>	101,1	16,0	1,9	0,5	16,1	1,9	0,10	17,74	0,124	0,09			0,86	25,9	305,0	479,0	26,3
<b>1-Methylnaphthalene</b>	139,0	20,2	1,1	2,2	20,3	2,5	0,06	37,63	0,148	0,04	2,92	0,98	0,51	45,4	517,8	772,0	57,5
<b>cis-decahydronaphthalene</b>	156,9	17,6	0,3	0,6	17,6	0,6	0,07	31,60	0,159	0,00	2,22	0,75	0,00	39,6	469,0	703,6	48,7
<b>1,2,3,4-Tetrahydronaphthalene</b>	136,0	19,9	0,6	1,5	20,0	1,6	0,07	33,17	0,136	0,02			0,22	43,8	480,8	720,0	54,3
<b>4-cymene</b>	155,5	17,7	0,3	0,6	17,7	0,7	0,08	26,64	0,134	0,00	2,23	0,90	0,00	39,3	450,3	652,0	48,7
<b>1-Pentene</b>	110,4	14,8	1,1	4,2	15,4	4,4	0,11	15,45	0,114	0,05	2,01	1,18	0,51	25,9	303,2	464,8	26,3
<b>cis-2-pentene</b>	107,8	15,4	0,8	2,8	15,7	2,9	0,10	16,80	0,121	0,03			0,30	25,9	310,1	475,0	26,6
<b>trans-2-pentene</b>	107,4	15,7	0,2	1,1	15,7	1,1	0,11	16,41	0,118	0,00			0,00	25,9	309,5	474,2	26,6
<b>2-Methyl-1-butene</b>	108,7	14,8	1,2	4,0	15,4	4,2	0,10	15,94	0,119	0,05	2,18	1,19	0,51	25,5	304,3	465,0	25,8
<b>2-Methyl-2-butene</b>	106,7	15,7	0,9	3,1	16,0	3,2	0,10	17,15	0,119	0,03	1,98	1,14	0,34	26,5	311,7	470,0	27,3
<b>3-Methyl-1-Butene</b>	112,9	14,4	0,8	3,4	14,8	3,5	0,11	13,84	0,111	0,03			0,32	24,9	293,2	452,7	24,6
<b>1-Hexene</b>	126,1	15,4	1,0	3,1	15,8	3,3	0,10	17,90	0,121	0,04	2,08	1,06	0,45	29,0	336,6	504,0	31,4
<b>1-Heptene</b>	141,9	15,6	1,3	3,3	16,0	3,5	0,09	19,80	0,125	0,05	2,09	0,97	0,63	32,1	366,8	537,4	36,5
<b>1-Octene</b>	158,0	16,0	0,9	2,2	16,2	2,4	0,09	21,28	0,127	0,03	2,11	0,91	0,42	35,0	394,4	566,9	41,4
<b>1-Nonene</b>	170,5	16,2	1,1	2,6	16,4	2,8	0,08	22,56	0,127	0,05	2,18	0,89	0,60	37,7	420,0	593,1	46,1
<b>1-Decene</b>	190,6	16,2	0,8	1,8	16,3	2,0	0,08	23,54	0,130	0,03	2,14	0,81	0,42	40,1	443,8	616,6	50,6
<b>1-Undecene</b>	202,2	16,3	1,0	2,0	16,5	2,2	0,08	24,41	0,129	0,04			0,54	42,4	465,8	637,8	54,9
<b>1-Dodecene</b>	222,1	16,2	0,9	1,8	16,3	2,0	0,08	24,95	0,131	0,03	2,15	0,75	0,52	44,4	486,2	657,1	58,9
<b>1-Tridecene</b>	237,7	16,1	0,9	1,6	16,2	1,9	0,08	25,80	0,133	0,03	2,14	0,71	0,51	46,2	506,0	674,8	62,7
<b>1-Tetradecene</b>	253,4	16,1	0,9	1,5	16,2	1,8	0,08	26,36	0,134	0,03			0,51	47,9	524,3	691,0	66,3
<b>Eicosene</b>	363,6	16,5	0,7	0,7	16,5	1,0	0,06	43,49	0,189	0,02			0,36	65,0	615,5	771,0	99,2
<b>cyclopentene</b>	89,0	17,9	0,7	2,2	18,1	2,3	0,08	22,20	0,129	0,02			0,20	28,0	317,4	507,0	29,1
<b>cyclohexene</b>	101,3	18,4	0,9	0,3	18,4	1,0	0,08	26,17	0,140	0,03	2,22	1,06	0,33	31,2	356,1	560,4	34,3
<b>fluorobenzene</b>	94,7	18,8	3,4	1,2	19,2	3,6	0,08	26,66	0,135	0,16	5,47	1,78	1,60	31,5	357,9	560,1	34,7
<b>chlorobenzene</b>	102,1	19,7	3,5	1,5	20,1	3,8	0,07	33,00	0,148	0,17	5,69	1,60	1,69	35,6	404,9	632,4	41,2
<b>4-chlorotoluene</b>	118,2	19,2	4,1	1,9	19,8	4,6	0,07	32,23	0,142	0,20	6,25	1,62	2,21	38,5	435,7	660,0	46,2
<b>bromobenzene</b>	105,3	20,2	3,4	1,6	20,6	3,8	0,07	35,24	0,149	0,17	5,45	1,53	1,70	37,8	429,2	670,2	44,6
<b>Iodobenzene</b>	112,0	20,5	3,4	1,7	20,9	3,8	0,06	38,71	0,156	0,16	4,59	1,30	1,70	40,5	461,6	721,2	48,7
<b>1,2-Dichlorobenzene</b>	112,6	20,1	4,7	1,2	20,7	4,9	0,08	26,84	0,110	0,24	10,12	2,73	2,50	40,0	453,6	705,0	48,0
<b>1,3-Dichlorobenzene</b>	114,8	20,1	3,3	1,5	20,5	3,7	0,07	35,44	0,147	0,16	5,02	1,42	1,72	40,0	446,2	684,0	48,1
<b>Benzene</b>	89,4	19,7	0,3	0,9	19,7	0,9	0,08	28,22	0,137	0,00	2,28	1,17	0,00	31,8	353,2	562,1	34,7
<b>Toluene</b>	106,8	18,7	0,9	2,4	18,9	2,5	0,07	27,93	0,139	0,03	2,38	1,07	0,36	33,4	383,8	591,8	38,1
<b>2-Ethyl toluene</b>	136,0	18,4	1,2	0,6	18,5	1,3	0,07	29,68	0,142	0,05			0,56	38,4	438,3	650,0	46,5
<b>3-Ethyl toluene</b>	138,5	18,3	0,8	0,4	18,3	0,9	0,07	29,27	0,142	0,03			0,33	38,4	434,5	637,2	46,6
<b>4-Ethyl toluene</b>	139,6	18,3	0,3	0,6	18,3	0,7	0,07	28,77	0,140	0,00			0,00	38,4	435,2	640,2	46,6
<b>Ethylbenzene</b>	123,0	18,5	1,3	0,6	18,6	1,4	0,07	28,75	0,141	0,05	2,45	1,00	0,60	36,1	409,4	617,2	42,4
<b>1,2-Dimethylbenzene</b>	121,2	18,5	1,4	3,0	18,8	3,3	0,07	29,76	0,143	0,06	2,56	1,02	0,63	36,3	417,6	630,3	43,0

<b>1,3-Dimethylbenzene</b>	123,4	18,6	0,8	1,9	18,7	2,0	0,07	28,47	0,139	0,03	2,36	1,00	0,30	36,3	412,3	617,0	43,0
<b>1,4-Dimethylbenzene</b>	123,3	18,7	0,3	0,7	18,7	0,7	0,08	28,01	0,136	0,00	2,27	1,00	0,00	36,3	411,5	616,2	43,0
<b>1,2-Diethylbenzene</b>	153,5	18,0	1,2	0,6	18,0	1,3	0,07	29,78	0,144	0,05	2,59	0,90	0,59	40,4	456,6	668,0	49,9
<b>1,3-Diethylbenzene</b>	155,9	17,8	0,8	1,7	17,9	1,9	0,07	28,65	0,140	0,03	2,37	0,88	0,36	40,4	454,3	663,0	49,9
<b>1,4-Diethylbenzene</b>	156,9	17,9	0,3	0,6	17,9	0,6	0,07	28,49	0,139	0,00	2,26	0,86	0,00	40,4	456,9	657,9	50,4
<b>Propylbenzene</b>	138,8	18,2	0,9	1,9	18,4	2,1	0,07	28,44	0,138	0,03	2,37	0,95	0,37	38,6	432,4	638,4	46,8
<b>Isopropylbenzene</b>	139,1	17,7	0,9	1,9	17,8	2,1	0,08	27,69	0,143	0,03	2,38	0,92	0,39	36,6	425,6	631,0	44,0
<b>1,2,3-Trimethylbenzene</b>	134,4	18,7	1,2	2,9	19,0	3,1	0,07	28,31	0,130	0,05	2,66	1,08	0,56	39,5	449,3	664,5	48,3
<b>1,2,4-Trimethylbenzene</b>	133,6	18,9	0,8	1,8	19,0	2,0	0,07	29,20	0,133	0,03	2,38	1,00	0,30	39,5	442,5	649,1	48,3
<b>1,3,5-Trimethylbenzene (mesitylene)</b>	139,8	18,6	0,3	0,6	18,6	0,7	0,08	27,55	0,130	0,00	2,28	0,98	0,00	39,5	437,9	637,3	48,3
<b>1-Butylbenzene</b>	157,0	17,9	0,8	1,8	18,0	1,9	0,07	28,72	0,138	0,03	2,36	0,89	0,37	41,1	456,5	660,5	51,1
<b>Isobutylbenzene</b>	154,0	17,6	0,7	1,6	17,7	1,8	0,08	26,99	0,136	0,03	2,32	0,90	0,31	39,0	445,9	650,0	48,0
<b>sec-Butylbenzene</b>	156,0	17,4	0,9	1,7	17,5	1,9	0,07	28,34	0,146	0,03			0,39	39,0	446,5	664,5	47,6
<b>tert-Butylbenzene</b>	156,1	16,8	1,4	2,5	17,0	2,9	0,08	27,30	0,148	0,06	2,36	0,83	0,70	37,3	442,3	660,0	45,2
<b>n-Pentylbenzene</b>	171,8	17,9	0,3	0,5	17,9	0,6	0,07	28,99	0,137	0,00			0,00	43,4	478,6	679,9	55,3
<b>Hexylbenzene</b>	188,5	17,7	0,3	0,5	17,7	0,6	0,07	29,58	0,139	0,00			0,00	45,4	499,3	698,0	59,3
<b>n-Decylbenzene</b>	255,1	17,0	0,3	0,5	17,0	0,6	0,07	30,53	0,141	0,00			0,00	52,0	571,0	753,0	73,7
<b>Styrene</b>	115,6	19,3	0,5	1,2	19,4	1,3	0,07	32,00	0,148	0,01	2,47	0,99	0,13	36,7	418,3	636,0	43,4
<b>a-Methylstyrene</b>	130,2	18,7	1,6	0,8	18,8	1,8	0,07	32,56	0,154	0,07	2,28	0,86	0,77	38,0	438,7	654,0	45,9
<b>Methylal</b>	88,8	17,0	1,7	5,6	18,0	5,9	0,09	20,59	0,120	0,08	2,64	1,44	0,74	27,8	315,0	480,6	28,8
<b>Nitromethane</b>	54,3	19,1	9,1	16,4	26,8	18,7	0,07	36,48	0,114	0,47	37,27	7,30	3,45	34,7	374,4	588,2	38,9
<b>Nitroethane</b>	71,5	17,5	8,4	14,0	24,0	16,4	0,07	32,08	0,114	0,43	29,11	5,61	3,66	35,8	387,2	593,0	41,0
<b>1-Nitropropane</b>	88,4	16,9	7,6	12,5	22,3	14,6	0,07	30,13	0,115	0,39	24,70	4,61	3,66	37,5	404,3	605,0	44,0
<b>2-Nitropropane</b>	86,9	16,2	7,8	12,0	21,6	14,3	0,07	29,28	0,119	0,40	26,74	4,65	3,72	35,0	393,4	594,0	40,6
<b>1-Nitrobutane</b>	106,2	16,9	6,5	11,1	21,2	12,9	0,07	29,23	0,116	0,33			3,39	39,6	425,9	623,0	47,9
<b>Ethylene Glycol</b>	55,8	26,5	6,3	21,7	34,8	22,6	0,06	47,99	0,087	0,32	41,10	9,81	2,41	55,4	470,5	720,0	67,6
<b>Diethylene Glycol</b>	94,9	23,8	5,1	13,6	27,9	14,6	0,06	44,77	0,106	0,26	31,82	5,45	2,53	57,2	518,0	744,6	74,1
<b>Triethylene Glycol</b>	114,0	23,5	5,5	13,8	27,8	14,9	0,06	45,13	0,102	0,28	23,69	4,49	2,99	64,7	561,5	769,5	88,3
<b>Trimethylene Glycol</b>	72,5	25,1	5,9	18,2	31,6	19,1	0,06	45,17	0,092	0,30	35,10	7,57	2,56	57,7	487,6	724,0	72,2
<b>Ethylene Glycol Monomethyl Ether</b>	79,1	20,1	4,7	12,8	24,3	13,6	0,07	30,84	0,103	0,24	17,20	4,53	2,13	39,0	397,5	564,0	46,6
<b>Ethylene Glycol Monoethyl Ether</b>	97,8	19,1	4,2	11,0	22,4	11,7	0,07	28,35	0,103	0,21	13,38	3,58	2,08	40,3	408,2	569,0	49,2
<b>Ethylene glycol Monobutyl ether</b>	131,6	18,2	3,6	9,5	20,8	10,1	0,08	26,14	0,100	0,18			2,08	46,0	444,5	633,9	57,2
<b>Diethylene Glycol Dimethyl Ether</b>	142,0	17,5	3,4	6,4	18,9	7,2	0,07	29,56	0,133	0,17	7,23	1,69	1,97	40,8	435,7	608,0	51,0
<b>Diethylene Glycol Diethyl Ether</b>	179,8	16,7	3,0	5,7	17,9	6,5	0,08	26,80	0,125	0,15			1,96	44,2	462,2	624,0	57,6
<b>Bis[2-(2-methoxyethoxy) ethyl] ether</b>	225,4	18,4	2,7	5,0	19,3	5,7	0,07	33,41	0,125	0,13			1,96	58,3	549,0	705,0	83,9
<b>Dichloroethyl Ether</b>	117,2	14,9	5,0	5,0	16,5	7,1	0,07	37,31	0,237	0,24			2,59	25,9	451,7	666,0	31,9
<b>1,4-Dioxane</b>	85,7	20,8	5,6	2,1	21,6	5,9	0,07	32,76	0,134	0,28	2,22	1,20	2,59	35,7	374,2	587,2	40,1
<b>Water</b>	18,0	32,3	8,5	36,9	49,8	37,8	0,05	71,99	0,094	0,44	80,10	22,52	1,85	40,7	373,2	647,1	44,6
<b>Acetonitrile</b>	52,6	15,8	10,5	16,4	25,0	19,4	0,08	27,40	0,098	0,54	36,64	8,48	3,93	29,9	354,8	545,5	33,0
<b>Propionitrile</b>	70,9	15,1	9,3	14,0	22,6	16,8	0,08	25,60	0,103	0,48	29,70	6,31	4,02	32,0	370,5	564,4	36,1
<b>Butyronitrile</b>	87,3	15,1	8,5	12,7	21,4	15,3	0,08	25,88	0,107	0,44	24,83	4,97	4,08	34,5	390,8	582,3	40,1
<b>Valeronitrile</b>	103,8	15,1	7,9	11,8	20,7	14,2	0,08	26,00	0,109	0,40			4,12	37,0	414,5	603,0	44,4
<b>Capronitrile</b>	120,1	15,2	7,3	11,0	20,2	13,2	0,08	26,47	0,112	0,38			4,11	39,4	436,8	622,1	48,8

Caprylonitrile	154,2	17,6	6,6	3,0	19,0	7,2	0,08	26,80	0,117	0,33		4,14	43,7	474,9	674,4	55,6	
Nonanenitrile	177,2	16,8	6,2	3,3	18,2	7,0	0,08	27,28	0,124	0,31		4,16	45,6	494,2	700,0	58,8	
Benzonitrile	103,0	20,7	8,1	3,8	22,5	8,9	0,06	37,63	0,134	0,41	25,90	3,75	4,17	42,6	464,2	699,4	52,2
Glutaronitrile	95,3	26,4	7,8	2,3	27,6	8,1	0,06	47,59	0,116	0,40		3,90	54,0	559,2	782,0	72,5	
Adiponitrile	111,5	25,5	7,0	2,1	26,6	7,3	0,06	45,45	0,113	0,36		3,75	57,6	568,2	781,0	78,7	
Lactonitrile	71,9	30,3	6,4	0,6	31,0	6,4	0,07	34,95	0,074	0,33		2,80	54,7	457,0	643,0	69,1	
3-Butenenitrile	80,5	21,3	7,4	1,9	22,6	7,7	0,08	27,60	0,106	0,38		3,42	35,4	391,7	584,0	41,2	
Formamide	39,8	25,3	11,4	26,7	38,5	29,0	0,05	57,02	0,095	0,59	111,00	17,58	3,72	48,3	493,0	771,0	59,1
Hydrazine	32,1	30,4	6,1	22,1	38,1	23,0	0,05	66,39	0,121	0,31	51,70	10,45	1,75	41,8	386,7	653,2	46,6
Methylamine	44,4	17,2	3,9	15,4	23,4	15,9	0,09	19,15	0,083	0,20		1,31	26,5	266,8	430,1	24,4	
Ethylamine	65,6	16,7	3,1	10,7	20,1	11,1	0,09	19,20	0,100	0,15	8,70	3,64	1,22	26,9	289,7	456,2	26,4
n-Propylamine	83,0	17,3	2,7	8,1	19,3	8,6	0,09	21,75	0,113	0,13	5,08	2,18	1,17	29,4	321,0	497,0	30,8
n-Butylamine	99,0	17,1	2,9	7,4	18,9	8,0	0,08	23,44	0,120	0,14	4,71	1,82	1,39	32,1	350,6	531,9	35,3
Isobutylamine	99,6	16,7	2,7	7,2	18,3	7,7	0,09	21,75	0,118	0,13		1,27	30,8	340,9	513,7	33,5	
sec-butylamine	100,9	16,3	2,7	7,2	18,0	7,6	0,09	21,11	0,118	0,13		1,28	30,5	336,2	514,3	32,8	
tert-butylamine	105,1	14,7	2,6	7,8	16,9	8,2	0,10	16,87	0,106	0,13		1,29	28,7	317,6	483,9	29,9	
n-Pentylamine	115,5	17,0	3,0	6,9	18,6	7,5	0,08	24,69	0,123	0,14	4,27	1,56	1,55	34,8	377,7	555,0	40,1
tert-pentylamine	116,8	15,5	2,7	6,8	17,1	7,3	0,09	19,91	0,117	0,13		1,41	31,0	350,1	526,0	34,2	
Hexylamine	132,1	17,1	2,9	6,2	18,4	6,9	0,08	25,75	0,126	0,14		1,59	37,5	405,9	584,0	44,9	
Heptylamine	148,6	16,8	2,8	6,6	18,3	7,1	0,08	24,00	0,115	0,14		1,66	40,2	430,1	607,0	49,6	
Dimethylamine	66,2	18,0	2,7	6,6	19,3	7,1	0,08	26,34	0,147	0,13		1,03	25,9	280,0	437,2	24,8	
Diethylamine	103,2	16,2	2,0	5,7	17,3	6,1	0,09	19,85	0,120	0,09	3,68	1,58	0,92	28,9	328,6	496,6	30,8
Di-n-propylamine	136,9	16,4	2,0	4,8	17,2	5,2	0,08	22,31	0,124	0,09	2,92	1,18	1,07	34,6	382,0	550,0	40,3
Diisopropylamine	136,9	15,0	2,2	5,4	16,1	5,8	0,09	19,14	0,121	0,10		1,20	31,7	357,1	523,1	35,6	
Di-n-butylamine	170,0	16,5	1,7	3,6	17,0	4,0	0,08	24,12	0,128	0,08	2,77	1,00	0,98	39,3	432,0	602,3	49,0
Trimethylamine	90,3	14,3	1,4	6,5	15,8	6,6	0,12	13,41	0,102	0,06		0,61	23,8	276,0	433,3	22,4	
Triethylamine	138,6	15,6	1,3	3,3	16,0	3,5	0,09	20,22	0,130	0,06	2,42	1,02	0,66	31,3	361,9	535,2	35,3
Tripopylamine	189,6	15,8	1,3	2,8	16,1	3,1	0,08	22,39	0,126	0,05		0,74	38,7	429,7	577,5	49,3	
Tributylamine	239,5	15,5	1,2	2,2	15,7	2,5	0,08	24,40	0,135	0,05	2,34	0,73	0,78	43,5	487,2	644,0	58,8
Dipentylamine	202,4	16,3	1,9	3,5	16,8	4,0	0,08	25,71	0,131	0,08		1,20	43,3	476,2	639,0	57,3	
Tripentylamine	287,5	15,0	1,4	2,1	15,3	2,6	0,08	25,82	0,142	0,06		1,03	47,2	516,2	660,0	67,0	
Ethylene diamine	67,3	22,5	4,7	11,5	25,7	12,4	0,06	41,28	0,130	0,23	13,82	3,50	1,90	38,6	390,4	593,0	44,5
Aniline	91,5	22,4	3,3	7,8	24,0	8,5	0,06	42,12	0,138	0,16	7,06	2,02	1,53	43,3	457,2	699,0	52,5
N-Methylaniline	108,4	21,0	3,3	7,8	22,7	8,5	0,07	36,90	0,127	0,16	5,96	1,85	1,69	45,3	469,0	701,6	55,9
Dimethylaniline	123,7	19,5	3,1	6,2	20,7	6,9	0,07	35,52	0,140	0,15	4,90	1,42	1,68	42,8	466,7	687,2	53,1
Ethanolamine	59,8	30,0	2,1	11,4	32,1	11,6	0,06	48,30	0,101	0,10	31,94	7,23	0,78	51,4	443,2	678,2	61,7
Triethanolamine	133,2	27,2	2,0	7,6	28,3	7,8	0,06	47,20	0,098	0,09		1,08	71,1	608,5	772,1	106,6	
Benzylamine	109,2	21,3	2,8	6,2	22,4	6,8	0,06	39,30	0,139	0,13	5,18	1,57	1,38	44,6	457,7	684,0	54,7
Cyclohexylamine	113,8	18,4	2,6	5,3	19,4	5,9	0,07	31,22	0,145	0,12	4,55	1,38	1,31	36,3	407,7	615,0	42,6
Allylamine	74,9	18,6	3,1	9,8	21,2	10,3	0,08	24,28	0,108	0,15		1,31	31,9	326,5	505,0	33,8	
Carbon disulfide	60,0	22,2	0,3	1,0	22,2	1,1	0,07	31,58	0,138	0,00	2,63	1,51	0,00	28,6	319,4	552,0	29,5
N,N-Dimethyl sulfoxide	71,3	20,1	9,1	15,2	26,8	17,7	0,06	42,92	0,122	0,47	47,24	6,69	3,96	42,6	464,0	729,0	51,2
Dimethyl sulfide	88,6	16,0	3,3	6,7	17,7	7,5	0,08	24,06	0,146	0,16	6,70	1,89	1,50	27,1	310,5	503,0	27,7
Diethyl sulfide	107,4	16,8	3,1	6,8	18,3	7,5	0,08	24,57	0,130	0,15	5,72	1,78	1,54	32,3	365,3	557,2	36,2

<b>Dimethyl disulfide</b>	88,6	20,4	4,3	1,8	20,9	4,6	0,07	33,39	0,145	0,21	9,60	2,27	1,99	34,3	382,9	615,0	38,7
<b>Furfural</b>	83,2	19,8	7,8	12,3	24,5	14,6	0,06	43,08	0,138	0,40	42,12	5,14	3,60	42,1	434,9	670,2	50,1
<b>Thiophene</b>	79,0	20,5	1,4	4,1	20,9	4,4	0,07	30,68	0,138	0,06	2,74	1,35	0,54	31,7	357,3	579,4	34,7
<b>2-methyl thiophene</b>	96,2	19,5	1,6	4,0	20,0	4,3	0,07	30,19	0,139	0,07			0,68	34,0	385,7	609,0	38,5
<b>2-ethylthiophene</b>	113,1	18,9	1,1	2,6	19,1	2,8	0,07	29,35	0,140	0,04			0,44	35,6	407,2	626,6	41,5
<b>2,5-Dimethyl thiophene</b>	114,0	18,9	1,2	2,8	19,2	3,0	0,07	29,91	0,142	0,05			0,51	35,8	410,0	629,9	41,9
<b>Pyridine</b>	80,9	21,8	4,9	1,8	22,4	5,2	0,07	36,56	0,142	0,24	13,26	2,86	2,20	36,0	388,4	620,0	40,7
<b>2-Methylpyridine</b>	98,0	20,2	4,2	1,7	20,7	4,5	0,07	33,05	0,141	0,21	10,18	2,28	2,04	36,2	402,6	621,0	42,0
<b>Pyridazine</b>	72,6	24,6	9,5	3,6	26,6	10,1	0,06	47,96	0,138	0,49			4,14	42,6	481,2	774,0	51,2
<b>Piperidine</b>	98,9	19,0	2,5	6,3	20,2	6,8	0,07	28,91	0,130	0,12	4,33	1,61	1,19	35,6	379,6	594,1	40,2
<b>Pyrimidine</b>	74,2	25,1	5,4	1,2	25,7	5,5	0,07	36,56	0,111	0,27			2,34	43,1	396,9	638,0	49,1
<b>Quinoline</b>	118,0	21,8	4,3	2,0	22,3	4,7	0,06	42,59	0,148	0,21	9,16	1,89	2,29	47,1	510,3	782,2	58,6
<b>Pyrrole</b>	69,2	22,0	4,4	12,0	25,5	12,8	0,06	37,06	0,117	0,22	8,00	2,89	1,84	39,1	403,0	639,8	44,9
<b>Pyrrolidine</b>	83,5	19,0	3,5	8,7	21,2	9,4	0,07	29,23	0,126	0,17	8,30	2,51	1,58	34,0	359,7	568,6	37,6
<b>Methanethiol</b>	54,1	17,4	4,2	10,9	20,9	11,7	0,08	23,85	0,122	0,21			1,52	24,6	279,1	470,0	23,6
<b>1-Ethanethiol (ethyl mercaptan)</b>	74,3	16,8	3,7	9,3	19,6	10,1	0,08	23,08	0,121	0,18	6,67	2,48	1,58	28,0	308,2	499,2	28,6
<b>1-Propanethiol</b>	90,5	18,5	3,3	1,1	18,9	3,5	0,08	24,20	0,128	0,16			1,54	29,9	340,9	536,6	32,2
<b>2-Propanethiol</b>	94,1	17,5	3,3	1,0	17,8	3,4	0,09	21,33	0,124	0,16			1,55	28,5	325,7	517,0	30,0
<b>1-Butanethiol</b>	107,8	16,8	3,1	6,6	18,3	7,3	0,08	25,22	0,133	0,15	5,20	1,65	1,53	32,2	371,6	570,1	36,2
<b>2-Methyl-1-propanethiol</b>	108,1	16,3	3,1	6,7	17,9	7,3	0,08	23,50	0,131	0,15			1,53	31,0	361,6	559,0	34,5
<b>2-Methyl-2-propanethiol</b>	112,9	14,7	3,1	6,6	16,4	7,3	0,09	19,97	0,129	0,15	5,48	1,71	1,59	28,5	337,4	530,0	30,6
<b>1-Pentanethiol</b>	124,4	16,8	2,8	5,9	18,1	6,5	0,08	25,86	0,134	0,14	4,85	1,47	1,51	34,7	399,8	598,0	40,6
<b>1-Hexanethiol</b>	142,1	16,8	2,7	5,2	17,8	5,9	0,08	27,02	0,138	0,13			1,53	37,3	425,8	623,0	45,1
<b>1-Heptanethiol</b>	156,7	16,9	2,6	5,1	17,8	5,8	0,08	26,84	0,132	0,12			1,56	40,0	450,1	645,0	49,8
<b>1-Octanethiol</b>	168,8	17,7	2,6	1,2	18,0	2,9	0,08	27,36	0,130	0,12			1,61	42,7	472,2	667,3	54,4
<b>Benzenethiol</b>	102,4	21,3	2,6	1,1	21,5	2,8	0,06	38,41	0,150	0,12	4,26	1,36	1,23	39,8	442,3	689,0	47,4
<b>Acetic anhydride</b>	94,5	18,7	5,7	11,5	22,7	12,9	0,07	31,93	0,115	0,29	22,45	4,25	2,79	40,9	412,7	606,0	48,8
<b>Formic acid</b>	37,8	22,0	4,7	12,6	25,8	13,4	0,07	37,13	0,141	0,23	51,10	8,26	1,42	22,4	373,7	588,0	25,1
<b>Acetic acid</b>	57,1	18,6	4,6	11,8	22,5	12,7	0,08	27,10	0,117	0,23	6,20	2,81	1,74	25,0	391,1	592,0	28,9
<b>1-Propanoic acid</b>	75,0	19,6	4,0	13,4	24,1	14,0	0,08	26,20	0,090	0,20	3,44	2,37	1,75	36,2	414,3	600,8	43,5
<b>1-Butanoic acid</b>	110,0	19,1	3,2	9,7	21,6	10,2	0,08	26,05	0,098	0,16	2,98	1,68	1,65	41,4	436,4	615,7	51,5
<b>Isobutanoic acid</b>	93,4	20,7	2,3	10,7	23,4	10,9	0,08	24,58	0,083	0,11	2,58	2,00	1,09	41,7	427,7	605,0	51,4
<b>1-Pentanoic acid</b>	109,2	20,2	3,1	11,0	23,2	11,4	0,08	26,69	0,088	0,15			1,61	46,0	459,0	639,2	58,6
<b>Isopentanoic acid</b>	111,0	21,0	1,3	6,1	22,0	6,3	0,08	25,07	0,091	0,06			0,63	42,4	449,7	629,1	53,5
<b>1-Heptanoic acid</b>	138,7	20,2	2,9	9,5	22,5	9,9	0,08	27,76	0,089	0,14	3,04	1,65	1,68	53,0	496,2	677,3	70,2
<b>Dichloroacetic acid</b>	82,5	22,0	5,2	15,1	27,2	16,0	0,07	35,45	0,093	0,27	8,33	3,41	2,42	49,0	467,2	686,0	61,0
<b>pentane</b>	116,2	15,3	0,2	1,0	15,4	1,0	0,11	15,50	0,113	0,00	1,84	1,11	0,00	26,8	309,2	469,7	27,5
<b>Isopentane</b>	116,5	14,8	0,5	1,8	14,9	1,8	0,11	15,21	0,118	0,01	1,85	1,06	0,13	25,7	301,0	460,4	25,9
<b>Hexane</b>	131,4	15,6	0,2	0,9	15,7	0,9	0,10	17,89	0,121	0,00	1,89	0,99	0,00	29,4	341,9	507,6	32,2
<b>2-Methylpentane</b>	132,9	15,1	0,2	0,7	15,1	0,8	0,10	16,88	0,122	0,00	1,89	0,98	0,00	28,2	333,4	497,7	30,4
<b>3-Methylpentane</b>	130,6	15,3	0,2	0,8	15,3	0,9	0,10	17,61	0,125	0,00	1,89	0,96	0,00	28,2	336,4	504,6	30,5
<b>2,2-Dimethylbutane</b>	133,7	14,6	0,2	0,8	14,6	0,8	0,10	15,75	0,122	0,00	1,87	0,97	0,00	26,9	322,9	489,0	28,4
<b>2,3-Dimethylbutane</b>	131,2	15,0	0,2	0,7	15,0	0,8	0,10	16,96	0,125	0,00	1,89	0,96	0,00	27,6	331,1	500,0	29,5
<b>Heptane</b>	147,4	15,8	0,3	0,7	15,8	0,8	0,09	19,66	0,126	0,00	1,92	0,91	0,00	32,1	371,6	540,2	36,8

<b>2,2-Dimethylpentane</b>	149,7	14,8	0,3	0,7	14,8	0,7	0,10	17,55	0,128	0,00		0,00	29,5	352,3	520,5	32,8	
<b>2,3-Dimethylpentane</b>	145,1	15,3	0,3	0,7	15,3	0,7	0,09	19,47	0,134	0,00		0,00	30,1	362,9	537,3	33,9	
<b>2,4-Dimethylpentane</b>	146,7	15,1	0,2	0,7	15,1	0,7	0,10	17,66	0,124	0,00		0,00	30,1	353,6	519,8	33,6	
<b>3,3-Dimethylpentane</b>	145,4	15,0	0,3	0,7	15,1	0,7	0,09	19,10	0,135	0,00		0,00	29,5	359,2	536,4	33,0	
<b>2,2,3-Trimethylbutane</b>	146,2	14,9	0,3	0,8	14,9	0,8	0,10	18,27	0,132	0,00		0,00	29,2	354,0	531,1	32,4	
<b>2-Methylhexane</b>	148,6	15,3	0,3	0,7	15,3	0,8	0,10	18,74	0,127	0,00		0,00	30,8	363,2	530,4	34,9	
<b>3-Methylhexane</b>	146,7	15,4	0,3	0,8	15,4	0,8	0,09	19,31	0,130	0,00		0,00	30,8	365,0	535,2	35,0	
<b>3-Ethylpentane</b>	144,4	15,5	0,3	0,7	15,6	0,7	0,09	19,94	0,132	0,00		0,00	30,8	366,6	540,6	35,0	
<b>Octane</b>	163,5	15,9	0,3	0,7	15,9	0,7	0,09	21,15	0,129	0,00	1,95	0,85	0,00	34,7	398,8	568,7	41,4
<b>2-Methylheptane</b>	164,6	15,5	0,3	0,6	15,5	0,7	0,09	20,15	0,130	0,00		0,00	33,4	390,8	559,7	39,4	
<b>3-Methylheptane</b>	162,8	15,5	0,3	0,6	15,6	0,7	0,09	20,82	0,133	0,00		0,00	33,4	392,1	563,6	39,4	
<b>4-methylheptane</b>	163,1	15,5	0,3	0,6	15,5	0,7	0,09	20,60	0,132	0,00		0,00	33,4	390,9	561,7	39,4	
<b>2,3-Dimethylhexane</b>	161,3	15,4	0,3	0,7	15,4	0,7	0,09	20,54	0,135	0,00		0,00	32,6	388,8	563,5	38,2	
<b>2,2,3-Trimethylpentane</b>	160,4	15,1	0,3	0,6	15,1	0,7	0,09	20,22	0,138	0,00		0,00	31,6	383,0	563,5	36,6	
<b>2,2,4-Trimethylpentane</b>	165,1	14,8	0,3	0,6	14,8	0,7	0,09	18,91	0,133	0,00	1,94	0,82	0,00	31,6	372,4	543,8	36,2
<b>2,3,3-Trimethylpentane</b>	157,4	15,3	0,3	0,6	15,3	0,7	0,09	21,12	0,142	0,00	1,98	0,79	0,00	31,6	387,9	573,5	36,7
<b>2,3,4-Trimethylpentane</b>	158,8	15,3	0,3	0,6	15,4	0,7	0,09	20,70	0,137	0,00		0,00	32,1	386,6	566,4	37,4	
<b>3-Ethylhexane</b>	161,0	15,6	0,3	0,6	15,6	0,7	0,09	21,13	0,134	0,00		0,00	33,4	391,7	565,5	39,3	
<b>2,2-Dimethylheptane</b>	177,1	15,3	0,3	0,6	15,3	0,7	0,09	19,70	0,126	0,00		0,00	34,6	405,8	576,7	41,6	
<b>2,2,4-Trimethylhexane</b>	177,5	15,1	0,3	0,6	15,1	0,6	0,09	21,36	0,140	0,00		0,00	34,1	399,7	573,7	40,6	
<b>2,2,5-Trimethylhexane</b>	178,2	15,1	0,3	0,6	15,1	0,7	0,09	21,54	0,142	0,00		0,00	34,1	397,2	569,8	40,5	
<b>2,4,4-Trimethylhexane</b>	177,5	15,1	0,3	0,6	15,1	0,7	0,09	20,75	0,136	0,00		0,00	34,1	403,8	581,0	40,7	
<b>3,3-Diethylpentane</b>	170,4	15,6	0,2	0,6	15,6	0,6	0,09	19,63	0,122	0,00		0,00	34,6	419,3	610,1	41,7	
<b>3-Ethyl-2,2-dimethylpentane</b>	177,5	15,1	0,3	0,6	15,1	0,6	0,09	21,92	0,144	0,00		0,00	34,1	407,0	590,0	40,7	
<b>2,2,3,3-tetramethylpentane</b>	170,3	15,3	0,3	0,6	15,3	0,6	0,08	22,94	0,149	0,00		0,00	33,6	413,4	607,5	40,1	
<b>2,2,3,4-Tetramethylpentane</b>	177,9	15,1	0,3	0,6	15,1	0,7	0,09	20,52	0,136	0,00		0,00	33,9	406,2	592,6	40,4	
<b>Nonane</b>	179,7	16,0	0,3	0,6	16,0	0,7	0,09	22,38	0,131	0,00	1,97	0,80	0,00	37,2	424,0	594,6	45,8
<b>2-Methyloctane</b>	180,8	15,6	0,3	0,6	15,6	0,7	0,09	21,41	0,131	0,00		0,00	35,9	416,5	582,9	44,0	
<b>3-Methyloctane</b>	177,9	15,7	0,3	0,6	15,7	0,6	0,09	21,87	0,133	0,00		0,00	35,9	417,4	590,2	43,8	
<b>4-Methyloctane</b>	177,6	15,7	0,3	0,6	15,7	0,6	0,08	21,87	0,133	0,00		0,00	35,9	415,6	587,7	43,7	
<b>3-Ethylheptane</b>	176,7	15,7	0,3	0,6	15,7	0,7	0,09	21,41	0,130	0,00		0,00	35,9	416,4	590,0	43,7	
<b>2,6-Dimethylheptane</b>	180,7	15,3	0,3	0,6	15,3	0,7	0,09	20,55	0,131	0,00		0,00	35,0	408,4	579,0	42,3	
<b>Decane</b>	195,9	16,0	0,3	0,6	16,0	0,6	0,08	23,37	0,133	0,00	1,99	0,76	0,00	39,5	447,3	617,7	50,1
<b>Undecane</b>	212,7	16,0	0,3	0,5	16,0	0,6	0,08	24,21	0,134	0,00	2,00	0,72	0,00	41,7	469,1	639,0	54,3
<b>Dodecane</b>	228,6	16,0	0,3	0,5	16,0	0,6	0,08	24,91	0,135	0,00	2,01	0,70	0,00	43,7	489,5	658,0	58,3
<b>Tridecane</b>	243,9	16,0	0,3	0,5	16,0	0,6	0,08	25,55	0,135	0,00	2,02	0,67	0,00	45,6	508,6	675,0	62,2
<b>Tetradecane</b>	261,3	15,8	0,3	0,5	15,9	0,6	0,08	26,13	0,137	0,00	2,03	0,64	0,00	47,3	526,7	693,0	65,7
<b>2,2-Dimethylhexane</b>	165,3	15,0	0,3	0,7	15,0	0,7	0,09	19,21	0,131	0,00		0,00	32,0	380,0	549,8	37,2	
<b>2,4-Dimethylhexane</b>	164,1	15,2	0,3	0,7	15,2	0,7	0,09	19,59	0,131	0,00		0,00	32,6	382,6	553,5	37,9	
<b>2,5-Dimethylhexane</b>	165,7	15,1	0,3	0,7	15,1	0,7	0,09	19,40	0,130	0,00		0,00	32,6	382,3	550,0	38,0	
<b>3,3-Dimethylhexane</b>	161,8	15,2	0,3	0,6	15,2	0,7	0,09	20,20	0,136	0,00		0,00	32,0	385,1	562,0	37,3	
<b>3,4-Dimethylhexane</b>	159,7	15,5	0,3	0,6	15,5	0,7	0,09	21,14	0,138	0,00		0,00	32,6	390,9	568,8	38,2	
<b>2-Methyl-3-Ethylpentane</b>	159,7	15,4	0,3	0,6	15,4	0,7	0,09	20,13	0,131	0,00		0,00	32,6	388,8	567,1	38,1	
<b>3-Methyl-3-Ethylpentane</b>	157,9	15,4	0,3	0,6	15,4	0,6	0,08	21,53	0,142	0,00		0,00	32,0	391,4	576,5	37,4	

<b>Pentadecane</b>	277,7	15,8	0,3	0,4	15,8	0,5	0,08	26,64	0,138	0,00			0,00	49,0	543,8	708,0	69,3
<b>Hexadecane</b>	294,1	15,7	0,3	0,4	15,7	0,5	0,08	27,05	0,139	0,00			0,00	50,5	560,0	723,0	72,7
<b>Heptadecane</b>	309,9	15,7	0,3	0,4	15,7	0,5	0,08	27,50	0,140	0,00			0,00	51,9	575,3	736,0	76,0
<b>Octadecane</b>	326,9	15,6	0,3	0,4	15,6	0,5	0,07	27,87	0,141	0,00			0,00	53,3	589,9	747,0	79,4
<b>Nonadecane</b>	345,6	15,5	0,3	0,2	15,5	0,3	0,07	28,17	0,142	0,00			0,00	54,6	603,1	758,0	82,6
<b>Eicosane</b>	363,7	15,4	0,3	0,4	15,4	0,5	0,07	28,46	0,142	0,00			0,00	55,9	616,9	768,0	86,0
<b>Cyclopentane</b>	94,9	17,2	0,3	0,9	17,2	0,9	0,09	21,88	0,137	0,00	1,97	1,05	0,00	26,9	322,4	511,7	28,1
<b>Methylcyclopentane</b>	112,1	16,8	0,3	0,7	16,8	0,8	0,09	21,72	0,134	0,00	1,99	0,99	0,00	29,2	345,0	532,7	31,8
<b>1,1-Dimethylcyclopentane</b>	130,5	16,2	0,3	0,7	16,3	0,8	0,09	21,56	0,136	0,00			0,00	30,9	361,0	547,0	34,5
<b>Cyclohexane</b>	108,7	17,3	0,3	0,7	17,4	0,8	0,08	24,65	0,145	0,00	2,02	0,94	0,00	29,8	353,9	553,8	32,7
<b>Methylcyclohexane</b>	128,3	16,8	0,3	0,7	16,8	0,8	0,08	23,29	0,138	0,00	2,02	0,91	0,00	32,1	374,1	572,1	36,3
<b>1,1-Dimethylcyclohexane</b>	143,7	16,6	0,3	0,6	16,6	0,7	0,08	24,22	0,141	0,00			0,00	34,3	392,7	591,2	39,8
<b>Cis-1,2-Dimethylcyclohexane</b>	140,9	16,7	0,3	0,6	16,7	0,7	0,08	25,75	0,150	0,00			0,00	33,5	402,9	606,2	39,2
<b>Trans-1,2-Dimethylcyclohexane</b>	144,6	16,5	0,3	0,6	16,5	0,7	0,08	24,07	0,143	0,00			0,00	33,7	396,6	596,2	39,2
<b>Cis-1,3-Dimethylcyclohexane</b>	146,4	16,3	0,3	0,6	16,3	0,7	0,08	23,20	0,139	0,00			0,00	33,7	393,2	591,2	39,1
<b>Trans-1,3-Dimethylcyclohexane</b>	146,4	16,5	0,3	0,6	16,5	0,7	0,08	22,46	0,132	0,00			0,00	34,3	397,6	598,0	40,0
<b>Cis-1,4-Dimethylcyclohexane</b>	143,4	16,5	0,3	0,6	16,5	0,7	0,08	24,43	0,144	0,00			0,00	33,7	397,5	598,2	39,3
<b>Trans-1,4-Dimethylcyclohexane</b>	148,0	16,4	0,3	0,6	16,4	0,7	0,08	22,62	0,134	0,00			0,00	34,3	392,5	587,7	39,8
<b>Ethylcyclopentane</b>	128,8	16,7	0,3	0,6	16,7	0,7	0,08	23,38	0,140	0,00			0,00	31,6	376,6	569,5	35,9
<b>Ethylcyclohexane</b>	143,9	16,8	0,3	0,6	16,8	0,7	0,08	25,15	0,144	0,00			0,00	34,5	404,9	609,2	40,5
<b>2-Propylcyclopentane</b>	142,8	16,8	0,3	0,6	16,8	0,7	0,08	24,40	0,140	0,00			0,00	34,0	404,1	596,0	40,2
<b>Isopropylcyclopentane</b>	140,8	16,5	0,3	0,6	16,5	0,7	0,08	23,90	0,143	0,00			0,00	32,6	399,6	593,0	38,2
<b>Propylcyclohexane</b>	160,5	16,6	0,3	0,6	16,6	0,7	0,08	25,42	0,143	0,00			0,00	36,9	429,9	639,2	44,5
<b>Isobutylcyclohexane</b>	176,4	16,4	0,3	0,5	16,4	0,6	0,08	25,84	0,144	0,00			0,00	39,1	444,5	659,0	47,6
<b>Sec-butylcyclohexane</b>	173,0	17,0	0,3	0,5	17,0	0,6	0,07	27,87	0,147	0,00			0,00	39,9	452,5	646,4	49,8
<b>Tert-butylcyclohexane</b>	168,8	18,1	0,3	0,6	18,1	0,6	0,07	29,88	0,140	0,00			0,00	45,3	444,7	659,0	55,2
<b>Cyclooctane</b>	134,9	17,6	0,3	0,6	17,6	0,7	0,07	29,30	0,155	0,00			0,00	35,4	424,3	647,2	42,0

## 8.2. ANEXO 2

CAPÍTULO 3. Tensões superficiais parciais de líquidos obtidas por uma abordagem adaptada de Good-Girifalco a partir de tensões interfaciais e parâmetros de solubilidade do DiPEVa

### 8.2.1. TABELA 4.

**Tabela 4.** Moléculas, volume molar ( $m^3 \cdot mol^{-1}$ ), parâmetros de solubilidade do DiPEVa (este estudo,  $MPa^{1/2}$ ), tensão superficial da literatura ( $\gamma_1, mN \cdot m^{-1}$ ), literatura e tensão interfacial da água estimada ( $\gamma_{12}, mN \cdot m^{-1}$ ), parâmetros de interação calculados e previstos ( $\Phi_{calc}$ ,  $\Phi_{pred}$ ), valor alfa otimizado ( $\alpha$ ), componente dispersivo do parâmetro de interação ( $\Phi_D$ ), valor beta otimizado ( $\beta$ ), parâmetro de interação de associação ( $\Phi_a$ ) [52].

Moléculas	V	$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	$\delta_T$	$\gamma_1, mN \cdot m^{-1}$	$\gamma_{12}, mN \cdot m^{-1}$	Estim. $\gamma_{12}, mN \cdot m^{-1}$	$\Phi_{calc}$	$\Phi_{pred}$	$\alpha$	$\Phi_D$	$\beta$	$\Phi_a$
Water	18,0	32,31	8,46	36,88	49,76	71,8								
n-Hexane	131,6	15,63	0,24	0,86	15,65	18,0	50,7	50,70	0,54	0,54	0,65	0,77	0,04	0,99
n-Heptane	147,4	15,79	0,25	0,74	15,81	19,7	51,2	51,20	0,54	0,54	0,65	0,77	0,04	0,99
n-Octane	163,5	15,90	0,26	0,65	15,91	21,4	51,5	51,50	0,53	0,53	0,65	0,77	0,03	0,99
n-Decane	195,9	15,99	0,26	0,59	16,00	23,5	52,0	52,00	0,53	0,53	0,65	0,77	0,03	0,99
n-Dodecane	228,6	15,96	0,27	0,50	15,97	25,1	52,8	52,80	0,52	0,52	0,65	0,76	0,03	0,99
n-Tetradecane	261,3	15,85	0,27	0,53	15,86	25,6	52,2	52,20	0,53	0,53	0,65	0,77	0,03	0,99
n-Hexadecane	294,1	15,71	0,28	0,43	15,72	27,3	53,3	53,30	0,52	0,52	0,65	0,76	0,02	0,99
2-Methylbutane	117,4	14,79	0,46	1,77	14,90	15,0	50,1	50,10	0,56	0,56	0,64	0,73	0,09	0,96
2,2-Dimethylbutane	132,8	14,55	0,24	0,75	14,57	16,2	49,7	49,70	0,56	0,56	0,65	0,80	0,04	0,99
2,3-Dimethylbutane	130,2	14,99	0,25	0,74	15,01	17,4	49,8	49,80	0,56	0,56	0,65	0,80	0,04	0,99
2-Methylpentane	132,9	15,11	0,24	0,74	15,13	18,4	48,9	48,90	0,57	0,57	0,65	0,82	0,04	0,99
3-Methylpentane	130,6	15,26	0,25	0,83	15,29	18,1	49,9	49,90	0,55	0,55	0,65	0,79	0,04	0,99
3-Ethylpentane	143,4	15,55	0,26	0,69	15,56	20,2	50,5	50,50	0,54	0,54	0,65	0,79	0,04	0,99
2,4-Dimethylpentane	148,9	15,11	0,25	0,70	15,12	18,1	50,0	50,00	0,55	0,55	0,65	0,80	0,04	0,99
3-Methylhexane	146,7	15,42	0,26	0,75	15,44	19,6	50,4	50,40	0,55	0,55	0,65	0,78	0,04	0,99
3-Ethylhexane	160,4	15,62	0,27	0,60	15,63	21,5	50,8	50,80	0,54	0,54	0,65	0,78	0,03	0,99
3-Methylheptane	161,9	15,55	0,26	0,63	15,56	21,3	50,5	50,50	0,54	0,54	0,65	0,79	0,03	0,99
2-Methyl-3-ethyl pentane	158,7	15,43	0,26	0,60	15,44	21,5	50,2	50,20	0,55	0,55	0,65	0,80	0,03	0,99
2,2,4-Trimethylpentane	166,1	14,80	0,26	0,61	14,82	18,9	50,0	50,00	0,55	0,55	0,65	0,80	0,03	0,99
Cyclohexane	108,7	17,34	0,29	0,73	17,36	25,5	50,2	50,20	0,55	0,55	0,65	0,80	0,03	0,99
cis-Decalin	156,9	17,61	0,32	0,55	17,62	32,2	51,2	51,24	0,55	0,55	0,65	0,80	0,03	0,99
trans-Decalin	156,9	17,59	0,30	0,60	17,60	29,9	50,7	50,70	0,55	0,55	0,65	0,80	0,03	0,99
Benzene	89,4	19,69	0,27	0,86	19,71	28,9	33,9	33,90	0,73	0,73	0,65	1,00	0,03	2,44
Toluene	106,8	18,71	0,94	2,36	18,88	28,5	36,1	36,10	0,71	0,71	0,64	0,95	0,10	0,99
o-Xylene	121,2	18,55	1,37	3,02	18,84	30,1	36,1	36,10	0,71	0,71	0,64	0,90	0,13	0,98
m-Xylene	123,4	18,55	0,79	1,86	18,66	28,9	37,9	37,90	0,69	0,69	0,65	0,94	0,08	0,99
p-Xylene	123,3	18,65	0,27	0,68	18,66	28,6	37,8	37,80	0,69	0,69	0,65	1,00	0,03	1,40

Mesitylene	139,8	18,58	0,26	0,65	18,59	28,8	38,7	38,70	0,68	0,68	0,65	1,00	0,03	1.11
p-Cymene	155,5	17,68	0,27	0,62	17,69	28,1	34,6	34,60	0,73	0,73	0,65	1,00	0,03	2.68
Ethyl benzene	123,1	18,52	1,31	0,57	18,57	29,2	38,4	38,40	0,68	0,68	0,65	0,97	0,06	1.00
n-Propyl benzene	139,4	18,23	0,87	1,95	18,35	29,0	39,6	39,60	0,67	0,67	0,64	0,90	0,09	0.99
n-Butyl benzene	157,0	17,94	0,83	1,75	18,04	29,2	41,4	41,40	0,65	0,65	0,65	0,88	0,08	0.99
Carbon tetrachloride	97,1	18,25	0,29	0,75	18,27	27,0	45,0	45,00	0,61	0,61	0,65	0,89	0,03	0.99
Bromoform	87,5	22,09	2,35	1,13	22,24	41,5	40,9	40,90	0,66	0,66	0,64	0,89	0,09	0.99
Diiodomethane	80,5	23,72	3,01	4,97	24,42	50,8	48,5	48,50	0,61	0,61	0,63	0,71	0,18	0.92
Chloroform	80,7	18,70	2,41	6,50	19,94	27,2	31,6	31,60	0,76	0,76	0,61	0,85	0,26	0.94
1,1,2,2-Tetrabromoethane	116,8	22,17	2,60	4,94	22,86	49,7	38,8	38,80	0,69	0,69	0,63	0,82	0,19	0.95
1,2,3-Tribromopropane	116,9	21,93	3,00	6,00	22,93	45,4	38,5	38,50	0,69	0,69	0,62	0,78	0,22	0.92
Dichloromethane	63,9	18,33	4,05	10,01	21,28	26,5	28,3	28,30	0,80	0,80	0,56	0,83	0,39	0.88
Isoamyl chloride	122,2	16,75	3,49	1,40	17,16	23,5	15,4	15,40	0,97	0,97	0,63	1,00	0,17	2.03
Ethyl bromide	74,6	18,88	4,71	1,33	19,51	24,2	31,2	31,20	0,78	0,78	0,63	0,94	0,19	0.98
tert-Butyl chloride	109,4	15,56	4,12	1,34	16,15	19,6	23,8	23,75	0,90	0,90	0,63	1,00	0,20	1.35
Isobutyl chloride	106,3	16,89	3,96	1,34	17,40	21,9	24,4	24,40	0,87	0,87	0,63	1,00	0,18	1.33
Iodobenzene	112,0	20,52	3,36	1,67	20,86	39,7	41,8	41,80	0,65	0,65	0,64	0,82	0,14	0.96
a-Bromonaphthalene	140,0	21,45	2,38	1,25	21,62	44,6	42,1	42,10	0,66	0,66	0,64	0,87	0,09	0.98
a-Chloronaphthalene	136,2	21,06	2,47	1,25	21,24	41,8	40,7	40,70	0,67	0,67	0,64	0,88	0,10	0.98
Bromobenzene	105,3	20,23	3,44	1,56	20,58	36,5	38,1	38,10	0,69	0,69	0,64	0,86	0,14	0.97
Chlorobenzene	102,1	19,72	3,47	1,54	20,08	33,6	37,4	37,40	0,69	0,69	0,64	0,87	0,14	0.97
o-Nitrotoluene	118,0	21,03	6,83	3,50	22,39	41,5	27,2	27,20	0,79	0,79	0,61	0,89	0,26	0.95
Nitromethane	54,3	19,13	9,11	16,36	26,77	36,8	9,5	9,50	0,96	0,96	0,46	0,97	0,53	0.97
Nitrobenzene	102,7	21,15	8,23	4,30	23,09	43,9	25,7	25,70	0,80	0,80	0,59	0,87	0,31	0.93
m-Nitrotoluene	118,2	20,67	7,66	4,00	22,40	41,4	27,7	27,70	0,78	0,78	0,60	0,85	0,29	0.93
Isovaleronitrile	105,5	15,11	6,91	11,00	19,93	26,0	14,1	14,10	0,97	0,97	0,49	0,98	0,50	0.98
Butyronitrile	87,3	15,06	8,48	12,68	21,43	28,1	10,4	10,40	1,00	1,00	0,46	1,00	0,54	1.00
Carbon disulfide	60,0	22,16	0,28	1,02	22,19	32,3	48,4	48,40	0,58	0,58	0,65	0,84	0,04	0.99
Phenyl isothiocyanate	119,8	18,80	5,25	7,80	21,02	41,5	39,0	39,00	0,68	0,68	0,58	0,69	0,34	0.82
water	18,0	32,31	8,46	36,88	49,76	71,8		0,00	1,00	1,00	0,42	1,00	0,58	1.00
Methyl alcohol	40,7	19,33	5,17	23,08	30,55	22,0		0,00	1,18	1,18	0,41	1,00	0,59	1.31
Ethyl alcohol	58,5	18,99	4,33	18,55	26,90	22,4		0,00	1,17	1,17	0,46	1,00	0,54	1.33
n-propyl alcohol	75,2	19,31	3,83	14,87	24,67	23,7		0,00	1,16	1,16	0,51	1,00	0,47	1.37
i-propyl alcohol	76,8	17,78	3,76	13,84	22,85	21,3		0,00	1,19	1,19	0,51	1,00	0,48	1.43
1-Butanol	91,5	19,50	3,47	12,38	23,35	25,4	1,8	1,80	1,12	1,12	0,54	1,00	0,42	1.37
Isobutyl alcohol	92,8	18,22	3,41	11,71	21,93	23,0	2,0	2,00	1,14	1,14	0,54	1,00	0,42	1.42
n-Amyl alcohol	108,6	19,21	3,28	10,77	22,27	25,7	4,4	4,40	1,08	1,08	0,56	1,00	0,38	1.36
Isoamyl alcohol	109,4	18,12	3,45	10,51	21,23	23,2	4,8	4,80	1,11	1,11	0,55	1,00	0,40	1.39
n-Hexyl alcohol	124,9	19,13	2,99	9,29	21,48	25,8	6,8	6,80	1,05	1,05	0,58	1,00	0,35	1.38
n-Heptyl alcohol	141,4	18,78	2,97	8,28	20,74	24,5	7,7	7,70	1,06	1,06	0,59	1,00	0,32	1.45
n-Octyl alcohol	157,7	18,69	2,70	7,15	20,19	27,5	8,5		1,02	1,02	0,60	1,00	0,29	1.46
benzyl alcohol	103,6	22,16	3,44	8,47	23,97	39,0			1,05	1,05	0,60	1,00	0,29	1.54
Ethylene glycol	55,8	26,49	6,30	21,70	34,82	48,4		0,00	1,02	1,02	0,49	1,00	0,49	1.06
Cyclohexanol	106,0	20,56	3,65	9,51	22,94	32,7	3,9	3,90	1,04	1,04	0,58	1,00	0,34	1.35
Diethyl ether	104,8	14,43	2,36	6,77	16,11	17,0	11,0	11,00	1,11	1,11	0,58	1,00	0,34	1.57



<b>Diisopropyl ether</b>	140,9	14,12	2,05	5,07	15,14	17,3	17,9		1,01	1,01	0,61	1,00	0,27	1.47
<b>isopentyl ether</b>	200,7	13,51	1,82	2,50	13,86	23,0		0,00	1,17	1,17	0,63	1,00	0,17	3.14
<b>Ethyl acetate</b>	98,5	16,87	3,63	8,97	19,44	23,9	6,8	6,80	1,07	1,07	0,56	1,00	0,38	1.35
<b>n-Butyl acetate</b>	132,5	16,41	3,29	6,70	18,03	25,2	14,5		0,97	0,97	0,59	1,00	0,31	1.20
<b>acetone</b>	74,0	15,14	6,58	11,99	20,40	24,0		0,00	1,15	1,15	0,48	1,00	0,51	1.32
<b>Methyl-n-propyl ketone</b>	106,7	18,27	5,33	1,90	19,13	24,7	9,6	9,60	1,03	1,03	0,62	1,00	0,23	1.83
<b>Methyl-n-butyl ketone</b>	123,6	18,05	4,82	1,85	18,77	25,0	9,6	9,60	1,03	1,03	0,62	1,00	0,21	1.94
<b>Methyl-n-amyl ketone</b>	139,8	17,84	4,45	1,90	18,48	26,2	12,4		0,99	0,99	0,63	1,00	0,20	1.81
<b>propionic acid</b>	75,0	19,63	4,02	13,37	24,09	26,7			1,12	1,12	0,53	1,00	0,44	1.35
<b>butyric acid</b>	110,0	19,08	3,18	9,68	21,63	26,5		0,00	1,13	1,13	0,57	1,00	0,36	1.55
<b>Isovaleric acid</b>	111,0	21,04	1,32	6,14	21,96	25,5	2,7	2,70	1,11	1,11	0,62	1,00	0,22	2.22
<b>Aniline</b>	91,5	22,40	3,31	7,82	23,95	42,9	5,8	5,80	0,98	0,98	0,61	1,00	0,27	1.39

## 8.2.2. TABELA 5.

**Tabela 5.** Dados de tensão interfacial e valores de parâmetros de interação  $\phi$  para água em contato com líquidos apolares e afins [35], [52].

Liquids	$\sigma_{L,1}$ , $mN.m^{-1}$ [49]	$\sigma_{L,1,2}$ , $mN.m^{-1}$ [49]	Literat. $\Phi$ (Bulou) [48]	Calc. $\Phi$ (esse estudo)
<b>Saturated aliphatic hydrocarbons</b>				
i-Pentane	13,4	48,7	0,59	0,56
n-Pentane	15,8	49	0,58	
n-Hexane	18,4	51,1	0,55	0,54
n-Heptane	20,4	50,2	0,55	0,54
n-Octane	21,8	50,8	0,55	0,53
n-Decane	23,9	51,2	0,545	0,53
Cyclohexane	25,5	50,2	0,55	0,55
<b>Aromatic hydrocarbons</b>				
Benzene	28,85	35	0,72	0,73
Toluene	28,5	36,1	0,71	0,71
o-Xylene	30,1	36,1	0,71	0,71
Mesitylene	28,8	37,7	0,67	0,68
p-Cymene	28,1	34,6	0,73	0,73
<b>Other compounds</b>				
Carbon tetrachloride	26,95	45	0,61	0,61
1,1,2,2-tetrachloroethylene	31,7	47,5	0,59	
<b>Halocarbons</b>				
Bromoform	41,5	40,9	0,67	0,66
Chloroform	27,15	31,6	0,76	0,76
Dichloromethane	26,5	28,3	0,8	0,80
Isobutyl chloride	21,9	24,4	0,88	0,87
tert-Butyl chloride	19,6	23,75	0,91	0,90
<b>Ketones</b>				
Methyl-n-propyl ketone	24,7	6,3	1,07	1,03
Methyl-n-butyl ketone	25	9,6	1,03	1,03
<b>Esters</b>				
Ethyl acetate	23,9	6,8	1,08	1,07
n-Butyl acetate	25,2	14,5	0,97	0,97
<b>Nitro compounds</b>				
Nitromethane	36,8	9,5	0,97	0,96
Nitrobenzene	43,9	25,7	0,805	0,80
o-Nitrotoluene	41,5	27,2	0,79	0,79
<b>Alcohols</b>				
n-Butanol	24,6	1,8	1,13	1,12
n-Pentanol	25,7	4,4	1,09	1,08
n-Hexanol	25,8	6,8	1,06	1,05

<b>n-Heptan-ol</b>	24,5	7,7	1,06	1,06
<b>n-Octanol</b>	27,5	8,5	1,03	1,02
<b>Isobutanol</b>	23	2	1,15	1,14
<b>Cyclohexanol</b>	32,7	3,9	1,04	1,04

## 8.2.3. TABELA 6.

**Tabela 6.** Nomes de líquidos, volume molar ( $m^3.mol^{-1}$ ), número CAS (CAS #), parâmetros de solubilidade DiPEVa (este estudo,  $MPa^{1/2}$ ), parâmetro de solubilidade de associação ( $\delta_a$ ), número DiPEVa (DiP#), tensão superficial experimental ( $mN.m^{-1}$ ) retirada de Good & Elbing, Apostoluk & Drzymala, Demond & Lindner ou Fowkes e banco de dados de colegas [1]–[4], a razão dos números de coordenação ( $Z_S/Z$ ), a razão de números de coordenação e razão DiP# ( $7.87 Z_S.Z^{-1}.DiP\#^{-1}$ ), momento dipolar ( $\mu$ , D), retirado de Gharageize et al., entalpia de vaporização no ponto de ebulição ( $\Delta H_{vap}$  at  $T_b$ ;  $kJ.mol^{-1}$ ), parâmetros de temperatura crítica e de ebulição (K) e entalpia de vaporização a 25 °C ( $\Delta H_{vap}$  at 298.15;  $kJ.mol^{-1}$ ), calculado pela Eq. [21]. (MATERIAL SUPLEMENTAR) [83][48], [84], [85].

Moléculas	CAS #	V, $cm^3.mo$ $t^{-1}$	Parâmetros de solubilidade DiPEVa's (este estudo)				$\delta_a$ , Eq, [15]	DiP # Eqs. [18a] & [18b]	$\sigma_L$ , $mN.m^{-1}$	$Z_S.Z^{-1}$ calcul. Eq. [7]	$\delta_D^{DiP} =$ $7.87(Z_S.Z^{-1}.DIP\#^{-1})$	Otimização, este estudo			$\mu$ , debye	$\Delta H_{vap}$ $T_B$ °C, $kJ.mol^{-1}$	$T_B$ (K)	$T_C$ (K)	$\Delta H_{vap}$ 25 °C, $kJ.mol^{-1}$
			$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	$\delta_T$						$\sigma_D$	$\sigma_P$	$\sigma_T$					
n-pentane	109-66-0	116,2	15,34	0,23	1,03	15,37	1,05	0,108	<b>15,50</b>	0,113	8,26	<b>14,49</b>	<b>1,00</b>	<b>15,49</b>	0,00	26,78	309,2	469,7	27,47
2-Methylbutane	78-78-4	116,5	14,79	0,46	1,77	14,90	1,83	0,107	<b>15,21</b>	0,118	8,73	<b>13,84</b>	<b>1,38</b>	<b>15,21</b>	0,13	25,70	301,0	460,4	25,87
n-Hexane	110-54-3	131,4	15,63	0,24	0,86	15,65	0,89	0,099	<b>17,89</b>	0,121	9,61	<b>16,84</b>	<b>1,05</b>	<b>17,89</b>	0,00	29,45	341,9	507,6	32,19
2-Methylpentane	107-83-5	132,9	15,11	0,24	0,74	15,13	0,78	0,098	<b>16,88</b>	0,122	9,77	<b>15,86</b>	<b>1,02</b>	<b>16,88</b>	0,00	28,25	333,4	497,7	30,41
3-Methylpentane	96-14-0	130,6	15,26	0,25	0,83	15,29	0,87	0,100	<b>17,61</b>	0,125	9,90	<b>16,54</b>	<b>1,07</b>	<b>17,61</b>	0,00	28,25	336,4	504,6	30,54
2,2-Dimethylbutane	75-83-2	133,7	14,55	0,24	0,75	14,57	0,79	0,102	<b>15,75</b>	0,122	9,42	<b>14,72</b>	<b>1,03</b>	<b>15,75</b>	0,00	26,94	322,9	489,0	28,40
2,3-Dimethylbutane	79-29-8	131,2	14,99	0,25	0,74	15,01	0,78	0,098	<b>16,96</b>	0,125	10,03	<b>15,93</b>	<b>1,04</b>	<b>16,96</b>	0,00	27,61	331,1	500,0	29,55
n-Heptane	142-82-5	147,4	15,79	0,25	0,74	15,81	0,78	0,093	<b>19,66</b>	0,126	10,63	<b>18,57</b>	<b>1,08</b>	<b>19,65</b>	0,00	32,10	371,6	540,2	36,83
3-Methylhexane	589-34-4	146,7	15,42	0,26	0,75	15,44	0,79	0,095	<b>19,31</b>	0,130	10,76	<b>18,19</b>	<b>1,12</b>	<b>19,31</b>	0,00	30,84	365,0	535,2	34,98
3-Ethylpentane	617-78-7	144,4	15,55	0,26	0,69	15,56	0,74	0,091	<b>19,94</b>	0,132	11,44	<b>19,17</b>	<b>0,77</b>	<b>19,94</b>	0,00	30,84	366,6	540,6	34,98
2,3-dimethylpentane	565-59-3	145,1	15,27	0,27	0,69	15,29	0,74	0,092	<b>19,47</b>	0,134	11,39	<b>18,70</b>	<b>0,77</b>	<b>19,47</b>	0,00	30,08	362,9	537,3	33,92
2,4-Dimethylpentane	108-08-7	146,7	15,11	0,25	0,70	15,12	0,74	0,096	<b>17,66</b>	0,124	10,10	<b>16,94</b>	<b>0,72</b>	<b>17,66</b>	0,00	30,08	353,6	519,8	33,56
n-Octane	111-65-9	163,5	15,90	0,26	0,65	15,91	0,70	0,088	<b>21,15</b>	0,129	11,48	<b>20,36</b>	<b>0,79</b>	<b>21,15</b>	0,00	34,69	398,8	568,7	41,40
3-Methylheptane	589-81-1	162,8	15,55	0,26	0,63	15,56	0,69	0,089	<b>20,82</b>	0,133	11,79	<b>20,03</b>	<b>0,78</b>	<b>20,82</b>	0,00	33,41	392,1	563,6	39,44
3-Ethylhexane	619-99-8	161,0	15,62	0,27	0,60	15,63	0,66	0,087	<b>21,13</b>	0,134	12,21	<b>20,35</b>	<b>0,78</b>	<b>21,13</b>	0,00	33,41	391,7	565,5	39,34
2-Methyl-3-ethyl pentane	609-26-7	159,7	15,43	0,26	0,60	15,44	0,66	0,088	<b>20,13</b>	0,131	11,70	<b>19,38</b>	<b>0,75</b>	<b>20,13</b>	0,00	32,58	388,8	567,1	38,09
2,2,4-Trimethylpentane	540-84-1	165,1	14,80	0,26	0,61	14,82	0,66	0,092	<b>18,91</b>	0,133	11,33	<b>18,14</b>	<b>0,78</b>	<b>18,91</b>	0,00	31,61	372,4	543,8	36,24
2,3,4-trimethylpentane	565-75-3	158,8	15,34	0,27	0,61	15,35	0,67	0,088	<b>20,70</b>	0,137	12,24	<b>19,92</b>	<b>0,78</b>	<b>20,70</b>	0,00	32,14	386,6	566,4	37,42
2,7-dimethyloctane	1072-16-8	195,4	15,43	0,27	0,60	15,45	0,66	0,087	<b>22,49</b>	0,137	12,43	<b>21,65</b>	<b>0,84</b>	<b>22,49</b>	0,00	37,38	433,0	604,0	46,62
Squalane	111-01-3	522,1	16,27	0,79	1,20	16,33	1,44	0,073	<b>29,20</b>	0,115	12,46	<b>27,68</b>	<b>1,52</b>	<b>29,20</b>	0,00	82,60	720,0	863,0	139,22
n-Decane	124-18-5	195,9	15,99	0,26	0,59	16,00	0,65	0,085	<b>23,37</b>	0,133	12,36	<b>22,52</b>	<b>0,85</b>	<b>23,37</b>	0,00	39,49	447,3	617,7	50,15
n-Dodecane	112-40-3	228,6	15,96	0,27	0,50	15,97	0,57	0,080	<b>24,91</b>	0,135	13,31	<b>24,03</b>	<b>0,88</b>	<b>24,91</b>	0,00	43,69	489,5	658,0	58,29
n-Tetradecane	629-59-4	261,3	15,85	0,27	0,53	15,86	0,60	0,081	<b>26,13</b>	0,137	13,25	<b>25,20</b>	<b>0,93</b>	<b>26,12</b>	0,00	47,32	526,7	693,0	65,74
n-Hexadecane	544-76-3	294,1	15,71	0,28	0,43	15,72	0,51	0,076	<b>27,05</b>	0,139	14,39	<b>26,12</b>	<b>0,92</b>	<b>27,05</b>	0,00	50,49	560,0	723,0	72,66
Cyclohexane	110-82-7	108,7	17,34	0,29	0,73	17,36	0,78	0,081	<b>24,65</b>	0,145	14,08	<b>23,75</b>	<b>0,90</b>	<b>24,65</b>	0,00	29,82	353,9	553,8	32,74
Methyl cyclohexane	108-87-2	128,3	16,80	0,27	0,73	16,81	0,78	0,085	<b>23,29</b>	0,138	12,80	<b>22,41</b>	<b>0,88</b>	<b>23,29</b>	0,00	32,07	374,1	572,1	36,27
1-heptyne	628-71-7	131,2	16,16	1,67	4,00	16,73	4,34	0,085	<b>22,68</b>	0,135	12,42	<b>19,06</b>	<b>3,62</b>	<b>22,68</b>	0,85	32,07	372,9	547,0	36,74
cis-Decalin	493-01-6	156,9	17,61	0,32	0,55	17,62	0,63	0,070	<b>31,60</b>	0,159	17,81	<b>30,50</b>	<b>1,10</b>	<b>31,60</b>	0,00	39,59	469,0	703,6	48,74
trans-Decalin	493-02-7	156,9	17,59	0,30	0,60	17,60	0,67	0,074	<b>29,38</b>	0,148	15,72	<b>28,34</b>	<b>1,04</b>	<b>29,38</b>	0,00	39,59	460,5	687,0	48,62
2-methyl-2-butene	513-35-9	106,7	15,68	0,86	3,08	16,01	3,20	0,099	<b>17,15</b>	0,119	9,46	<b>15,35</b>	<b>1,80</b>	<b>17,15</b>	0,34	26,50	311,7	470,0	27,34
Benzene	71-43-2	89,4	19,69	0,27	0,86	19,71	0,90	0,076	<b>28,22</b>	0,137	14,20	<b>27,37</b>	<b>0,85</b>	<b>28,22</b>	0,00	31,79	353,2	562,1	34,75

<b>Toluene</b>	108-88-3	106,8	18,71	0,94	2,36	18,88	2,54	0,075	<b>27,93</b>	0,139	14,67	<b>26,20</b>	<b>1,72</b>	<b>27,92</b>	0,36	33,39	383,8	591,8	38,06
<b>Ethyl benzene</b>	100-41-4	123,0	18,52	1,31	0,57	18,57	1,43	0,074	<b>28,75</b>	0,141	15,12	<b>27,52</b>	<b>1,22</b>	<b>28,75</b>	0,60	36,06	409,4	617,2	42,44
<b>o-Xylene</b>	95-47-6	121,2	18,55	1,37	3,02	18,84	3,31	0,072	<b>29,76</b>	0,143	15,55	<b>27,41</b>	<b>2,35</b>	<b>29,76</b>	0,63	36,33	417,6	630,3	43,04
<b>m-Xylene</b>	108-38-3	123,4	18,55	0,79	1,86	18,66	2,02	0,074	<b>28,47</b>	0,139	14,73	<b>26,97</b>	<b>1,50</b>	<b>28,47</b>	0,30	36,33	412,3	617,0	43,00
<b>p-Xylene</b>	106-42-3	123,3	18,65	0,27	0,68	18,66	0,73	0,075	<b>28,01</b>	0,136	14,31	<b>27,13</b>	<b>0,88</b>	<b>28,01</b>	0,00	36,33	411,5	616,2	42,96
<b>n-Propyl benzene</b>	103-65-1	138,8	18,23	0,87	1,95	18,35	2,13	0,074	<b>28,44</b>	0,138	14,62	<b>26,82</b>	<b>1,62</b>	<b>28,44</b>	0,37	38,64	432,4	638,4	46,76
<b>Mesitylene</b>	108-67-8	139,8	18,58	0,26	0,65	18,59	0,70	0,075	<b>27,55</b>	0,130	13,55	<b>26,49</b>	<b>1,06</b>	<b>27,55</b>	0,00	39,50	437,9	637,3	48,33
<b>n-Butyl benzene</b>	104-51-8	157,0	17,94	0,83	1,75	18,04	1,94	0,074	<b>28,72</b>	0,138	14,74	<b>27,14</b>	<b>1,58</b>	<b>28,71</b>	0,37	41,09	456,5	660,5	51,11
<b>p-Cymene</b>	99-87-6	155,5	17,68	0,27	0,62	17,69	0,68	0,077	<b>26,64</b>	0,134	13,58	<b>25,52</b>	<b>1,12</b>	<b>26,64</b>	0,00	39,31	450,3	652,0	48,67
<b>Styrene</b>	100-42-5	115,6	19,33	0,52	1,16	19,37	1,28	0,070	<b>32,00</b>	0,148	16,69	<b>30,58</b>	<b>1,42</b>	<b>32,00</b>	0,13	36,71	418,3	636,0	43,38
<b>Heptanal</b>	111-71-7	139,8	16,20	4,38	8,00	18,59	9,12	0,078	<b>25,96</b>	0,122	12,35	<b>18,76</b>	<b>7,20</b>	<b>25,96</b>	2,58	39,77	426,0	616,8	48,32
<b>Benzaldehyde</b>	100-52-7	101,5	18,85	6,32	10,28	22,38	12,07	0,064	<b>38,00</b>	0,137	16,81	<b>26,90</b>	<b>11,10</b>	<b>38,00</b>	3,21	42,20	451,9	695,0	50,84
<b>Salicylaldehyde</b>	90-02-8	104,6	21,03	5,98	11,56	24,73	13,01	0,061	<b>42,28</b>	0,124	15,94	<b>30,89</b>	<b>11,38</b>	<b>42,28</b>	3,09	51,02	469,7	680,0	63,99
<b>1,4-Dioxane</b>	123-91-1	85,7	20,81	5,56	2,05	21,64	5,93	0,069	<b>32,76</b>	0,134	15,31	<b>28,80</b>	<b>3,95</b>	<b>32,76</b>	2,59	35,73	374,2	587,2	40,12
<b>Acetone</b>	67-64-1	74,0	15,14	6,58	11,99	20,40	13,68	0,083	<b>23,03</b>	0,111	10,52	<b>12,89</b>	<b>10,13</b>	<b>23,03</b>	2,89	28,98	329,4	508,2	30,81
<b>Methyl ethyl ketone</b>	78-93-3	90,1	15,54	5,76	10,43	19,58	11,92	0,081	<b>24,18</b>	0,119	11,55	<b>15,17</b>	<b>9,02</b>	<b>24,18</b>	2,77	31,28	352,8	535,5	34,55
<b>4-methyl-2-pentanone</b>	108-10-1	125,8	17,19	4,81	2,03	17,96	5,22	0,080	<b>25,10</b>	0,131	12,89	<b>21,56</b>	<b>3,53</b>	<b>25,10</b>	2,69	34,88	389,2	574,6	40,59
<b>Ethyl propyl ketone</b>	589-38-8	122,7	17,74	5,16	2,03	18,59	5,55	0,079	<b>25,10</b>	0,123	12,26	<b>21,35</b>	<b>3,75</b>	<b>25,10</b>	2,87	36,08	396,7	582,8	42,40
<b>Methyl-n-propyl ketone</b>	107-87-9	106,7	18,27	5,33	1,90	19,13	5,66	0,079	<b>24,92</b>	0,121	12,04	<b>21,24</b>	<b>3,68</b>	<b>24,92</b>	2,77	34,22	375,5	561,1	39,06
<b>Methyl isobutyl ketone</b>	108-10-1	125,8	17,19	4,81	2,03	17,96	5,22	0,080	<b>25,10</b>	0,131	12,89	<b>21,56</b>	<b>3,53</b>	<b>25,10</b>	2,69	34,88	389,2	574,6	40,59
<b>Methyl-n-butyl ketone</b>	591-78-6	123,6	18,05	4,82	1,85	18,77	5,16	0,078	<b>25,52</b>	0,123	12,31	<b>22,30</b>	<b>3,21</b>	<b>25,52</b>	2,68	36,90	400,7	587,6	43,57
<b>Methyl-n-amyl ketone</b>	110-43-0	139,8	17,84	4,45	1,90	18,48	4,84	0,077	<b>26,81</b>	0,128	13,10	<b>23,60</b>	<b>3,20</b>	<b>26,81</b>	2,62	39,27	424,2	611,4	47,76
<b>Methyl t-butyl ketone</b>	75-97-8	124,1	14,65	4,94	8,30	17,55	9,66	0,084	<b>23,43</b>	0,129	12,12	<b>15,42</b>	<b>8,01</b>	<b>23,43</b>	2,75	33,27	379,5	564,0	38,21
<b>Cyclohexanone</b>	108-94-1	104,0	20,24	6,02	2,65	21,28	6,58	0,067	<b>34,57</b>	0,137	16,09	<b>29,92</b>	<b>4,65</b>	<b>34,57</b>	3,09	39,56	428,6	653,0	47,09
<b>Methyl n-hexyl ketone</b>	111-13-7	156,8	16,30	3,99	6,90	18,14	7,97	0,076	<b>26,79</b>	0,127	13,20	<b>20,41</b>	<b>6,38</b>	<b>26,79</b>	2,47	41,33	446,2	632,7	51,60
<b>Acetophenone</b>	98-86-2	117,4	18,90	5,59	8,85	21,60	10,47	0,063	<b>39,04</b>	0,144	17,89	<b>29,41</b>	<b>9,62</b>	<b>39,04</b>	3,03	44,24	475,3	709,6	54,79
<b>1,1-dichloroacetone</b>	513-88-2	108,2	17,40	3,61	9,10	19,96	9,79	0,081	<b>25,10</b>	0,112	10,90	<b>18,47</b>	<b>6,63</b>	<b>25,10</b>	1,86	37,40	392,0	598,4	43,13
<b>chloroacetone</b>	78-95-5	82,4	17,83	4,94	12,00	22,05	12,98	0,078	<b>25,60</b>	0,102	10,35	<b>16,71</b>	<b>8,89</b>	<b>25,60</b>	2,27	33,40	393,2	547,8	40,07
<b>Methanol</b>	67-56-1	40,7	19,33	5,17	23,08	30,55	23,66	0,085	<b>22,12</b>	0,058	5,37	<b>11,51</b>	<b>10,60</b>	<b>22,11</b>	1,70	35,14	337,9	512,5	37,98
<b>Ethanol</b>	64-17-5	58,5	18,99	4,33	18,55	26,90	19,05	0,086	<b>21,97</b>	0,066	6,05	<b>12,62</b>	<b>9,35</b>	<b>21,97</b>	1,69	38,02	351,4	514,0	42,34
<b>1-Propanol</b>	71-23-8	75,2	19,31	3,83	14,87	24,67	15,36	0,082	<b>23,32</b>	0,077	7,33	<b>15,08</b>	<b>8,24</b>	<b>23,32</b>	1,68	39,92	370,4	536,8	45,78
<b>Isopropanol</b>	67-63-0	76,8	17,78	3,76	13,84	22,85	14,34	0,088	<b>20,93</b>	0,080	7,11	<b>13,21</b>	<b>7,72</b>	<b>20,92</b>	1,66	35,52	355,4	508,3	40,09
<b>1-Butanol</b>	71-36-3	91,5	19,50	3,47	12,38	23,35	12,85	0,080	<b>24,95</b>	0,086	8,47	<b>17,56</b>	<b>7,39</b>	<b>24,95</b>	1,66	42,37	390,8	563,0	49,90
<b>Isobutanol</b>	78-83-1	92,8	18,22	3,41	11,71	21,93	12,20	0,084	<b>22,54</b>	0,087	8,16	<b>15,57</b>	<b>6,97</b>	<b>22,54</b>	1,64	38,30	380,8	547,8	44,62
<b>2-butanol</b>	78-92-2	92,0	18,12	3,46	11,68	21,83	12,18	0,084	<b>22,54</b>	0,088	8,26	<b>15,52</b>	<b>7,02</b>	<b>22,54</b>	1,66	38,02	372,7	536,2	43,86
<b>tert-Butanol</b>	75-65-0	95,8	16,81	3,41	11,32	20,55	11,82	0,090	<b>19,96</b>	0,087	7,59	<b>13,26</b>	<b>6,70</b>	<b>19,96</b>	1,67	35,79	355,6	506,2	40,46
<b>1-Pentanol</b>	71-41-0	108,6	19,21	3,28	10,77	22,27	11,25	0,079	<b>25,36</b>	0,091	9,02	<b>18,64</b>	<b>6,71</b>	<b>25,36</b>	1,70	44,65	411,0	588,1	53,85
<b>1-Hexanol</b>	111-27-3	124,9	19,13	2,99	9,29	21,48	9,75	0,078	<b>25,81</b>	0,095	9,54	<b>19,89</b>	<b>5,92</b>	<b>25,81</b>	1,65	46,72	430,6	610,3	57,62
<b>Isoamyl alcohol</b>	123-51-3	109,4	18,12	3,45	10,51	21,23	11,06	0,082	<b>23,71</b>	0,093	8,92	<b>16,98</b>	<b>6,73</b>	<b>23,71</b>	1,80	41,12	404,4	577,2	49,33
<b>1-Heptanol</b>	111-70-6	141,9	18,78	2,97	8,28	20,74	8,80	0,077	<b>26,71</b>	0,101	10,29	<b>21,06</b>	<b>5,65</b>	<b>26,71</b>	1,74	48,54	449,5	632,6	61,02
<b>1-Octanol</b>	111-87-5	157,7	18,69	2,70	7,15	20,19	7,64	0,076	<b>27,10</b>	0,104	10,74	<b>22,15</b>	<b>4,95</b>	<b>27,10</b>	1,65	50,13	468,4	652,5	64,28
<b>2-Octanol</b>	123-96-6	159,1	17,84	2,70	6,63	19,23	7,16	0,078	<b>25,91</b>	0,109	11,03	<b>21,13</b>	<b>4,78</b>	<b>25,91</b>	1,65	46,32	453,0	629,6	58,83
<b>1-Nonanol</b>	143-08-8	174,4	18,48	2,53	6,15	19,64	6,65	0,075	<b>27,89</b>	0,109	11,47	<b>23,42</b>	<b>4,47</b>	<b>27,89</b>	1,61	51,51	486,3	670,7	67,29
<b>1-Decanol</b>	112-30-1	191,8	18,18	2,45	5,43	19,13	5,96	0,074	<b>28,51</b>	0,114	12,12	<b>24,34</b>	<b>4,17</b>	<b>28,51</b>	1,62	52,74	504,1	687,3	70,22
<b>1-Undecanol</b>	112-42-5	207,7	17,84	2,43	5,00	18,69	5,56	0,074	<b>28,51</b>	0,116	12,45	<b>24,50</b>	<b>4,01</b>	<b>28,51</b>	1,67	53,88	518,2	703,6	72,53
<b>1-Dodecanol</b>	112-53-8	224,3	17,62	2,38	4,56	18,35	5,15	0,073	<b>29,40</b>	0,121	13,12	<b>25,50</b>	<b>3,90</b>	<b>29,40</b>	1,69	54,98	537,0	719,4	75,56
<b>Cyclohexanol</b>	108-93-0	106,0	20,56	3,65	9,51	22,94	10,19	0,069	<b>32,92</b>	0,112	12,75	<b>25,87</b>	<b>7,05</b>	<b>32,92</b>	1,86	46,37	434,0	650,1	55,81

<b>Benzyl alcohol</b>	100-51-6	103,6	22,16	3,44	8,47	23,97	9,14	0,063	<b>39,96</b>	0,125	15,67	<b>33,27</b>	<b>6,69</b>	<b>39,96</b>	1,71	48,21	477,9	720,2	59,53
<i>Phenol</i>	108-95-2	87,5	22,43	3,14	11,20	25,27	11,63	0,069	<b>32,92</b>	0,098	11,15	<b>25,80</b>	<b>7,12</b>	<b>32,92</b>	1,45	46,12	455,0	694,3	55,86
<b>Ethylene glycol</b>	107-21-1	55,8	26,49	6,30	21,70	34,82	22,59	0,058	<b>47,99</b>	0,087	11,86	<b>31,64</b>	<b>16,35</b>	<b>47,98</b>	2,41	55,41	470,5	720,0	67,65
<b>Diethylene glycol</b>	111-46-6	94,9	23,85	5,13	13,62	27,94	14,55	0,060	<b>44,77</b>	0,106	13,99	<b>33,65</b>	<b>11,12</b>	<b>44,77</b>	2,53	57,24	518,0	744,6	74,06
<b>1,3-Propanediol</b>	504-63-2	72,5	25,07	5,87	18,23	31,55	19,15	0,060	<b>45,17</b>	0,092	12,15	<b>31,27</b>	<b>13,90</b>	<b>45,17</b>	2,56	57,71	487,6	724,0	72,17
<b>Formic acid</b>	64-18-6	37,8	22,00	4,66	12,55	25,76	13,39	0,065	<b>37,13</b>	0,141	17,04	<b>27,49</b>	<b>9,64</b>	<b>37,12</b>	1,42	22,36	373,7	588,0	25,08
<b>Acetic acid</b>	64-19-7	57,1	18,57	4,60	11,85	22,50	12,71	0,076	<b>27,10</b>	0,117	12,15	<b>18,60</b>	<b>8,49</b>	<b>27,09</b>	1,74	25,02	391,1	592,0	28,91
<b>propionic acid</b>	79-09-4	75,0	19,63	4,02	13,37	24,09	13,96	0,078	<b>26,20</b>	0,090	9,17	<b>17,88</b>	<b>8,32</b>	<b>26,20</b>	1,75	36,20	414,3	600,8	43,52
<b>butyric acid</b>	107-92-6	110,0	19,08	3,18	9,68	21,63	10,19	0,078	<b>26,05</b>	0,098	9,93	<b>19,76</b>	<b>6,29</b>	<b>26,05</b>	1,65	41,43	436,4	615,7	51,48
<b>pentanoic acid</b>	109-52-4	109,2	20,17	3,10	10,96	23,17	11,39	0,077	<b>26,69</b>	0,088	9,01	<b>20,04</b>	<b>6,65</b>	<b>26,68</b>	1,61	45,99	459,0	639,2	58,60
<b>Isovaleric acid</b>	503-74-2	111,0	21,04	1,32	6,14	21,96	6,28	0,079	<b>25,07</b>	0,091	9,06	<b>22,09</b>	<b>2,98</b>	<b>25,06</b>	0,63	42,42	449,7	629,1	53,53
<i>hexanoic acid</i>	142-62-1	125,9	20,41	2,84	9,49	22,69	9,91	0,075	<b>27,76</b>	0,091	9,57	<b>21,92</b>	<b>5,84</b>	<b>27,76</b>	1,57	49,85	478,9	660,2	64,83
<b>heptanoic acid</b>	111-14-8	138,7	20,19	2,88	9,49	22,49	9,92	0,075	<b>27,76</b>	0,089	9,37	<b>21,81</b>	<b>5,95</b>	<b>27,76</b>	1,68	53,01	496,2	677,3	70,19
<i>octanoic acid</i>	124-07-2	158,6	19,86	2,75	8,30	21,70	8,74	0,074	<b>28,82</b>	0,095	10,09	<b>23,30</b>	<b>5,52</b>	<b>28,82</b>	1,70	55,51	512,9	694,3	74,68
<i>oleic acid</i>	112-80-1	315,6	17,91	1,78	3,00	18,25	3,49	0,068	<b>32,50</b>	0,121	13,91	<b>29,67</b>	<b>2,83</b>	<b>32,50</b>	1,44	67,06	633,0	781,0	105,10
<b>Acetic anhydride</b>	108-24-7	94,5	18,74	5,67	11,54	22,73	12,86	0,070	<b>31,93</b>	0,115	12,92	<b>21,77</b>	<b>10,16</b>	<b>31,93</b>	2,79	40,90	412,7	606,0	48,81
<b>methyl acetate</b>	79-20-9	79,7	17,67	3,80	9,87	20,60	10,58	0,080	<b>24,72</b>	0,114	11,24	<b>17,85</b>	<b>6,86</b>	<b>24,72</b>	1,68	31,74	330,1	506,6	33,81
<b>Ethyl acetate</b>	141-78-6	98,5	16,87	3,63	8,97	19,44	9,67	0,083	<b>23,39</b>	0,113	10,78	<b>17,01</b>	<b>6,38</b>	<b>23,39</b>	1,78	33,70	350,2	523,3	37,24
<b>n-Butyl acetate</b>	123-86-4	132,5	16,41	3,29	6,70	18,03	7,46	0,080	<b>24,88</b>	0,127	12,51	<b>19,42</b>	<b>5,46</b>	<b>24,88</b>	1,84	36,24	399,3	575,4	43,06
<b>isopropyl acetate</b>	108-21-4	117,1	15,54	3,32	7,20	17,45	7,93	0,086	<b>21,76</b>	0,123	11,29	<b>16,22</b>	<b>5,54</b>	<b>21,76</b>	1,75	31,61	361,7	532,0	35,66
<b>isobutyl acetate</b>	110-19-0	133,5	15,82	3,32	6,90	17,58	7,66	0,083	<b>23,06</b>	0,123	11,65	<b>17,54</b>	<b>5,51</b>	<b>23,06</b>	1,87	35,04	389,8	560,8	41,25
<b>Ethyl-n-butyrate</b>	105-54-4	132,9	16,13	3,23	6,66	17,75	7,41	0,081	<b>23,94</b>	0,126	12,15	<b>18,57</b>	<b>5,37</b>	<b>23,93</b>	1,81	35,46	394,7	571,0	41,86
<b>Ethyl isovalerate</b>	108-64-5	150,5	16,71	3,30	1,37	17,08	3,57	0,083	<b>23,28</b>	0,127	12,04	<b>20,92</b>	<b>2,36</b>	<b>23,28</b>	1,97	36,69	407,5	588,0	43,93
<b>ethyl n-hexanoate</b>	123-66-0	165,9	16,39	2,61	5,14	17,37	5,77	0,079	<b>25,32</b>	0,129	12,85	<b>21,04</b>	<b>4,28</b>	<b>25,32</b>	1,60	40,40	435,0	615,0	50,08
<i>Ethyl n-octanoate</i>	106-32-1	198,2	19,75	2,37	0,70	19,91	2,47	0,077	<b>27,44</b>	0,100	10,20	<b>25,99</b>	<b>1,45</b>	<b>27,44</b>	1,61	59,50	480,0	649,0	78,54
<i>Ethyl oleate</i>	111-62-6	356,9	14,48	2,36	2,50	14,89	3,44	0,071	<b>31,00</b>	0,167	18,51	<b>27,02</b>	<b>3,98</b>	<b>31,00</b>	2,02	69,23	479,7	911,9	79,10
<b>Diethyl phthalate</b>	84-66-2	198,0	18,60	3,94	6,62	20,13	7,70	0,066	<b>36,06</b>	0,129	15,41	<b>29,43</b>	<b>6,63</b>	<b>36,06</b>	2,74	57,36	567,2	757,0	80,21
<i>Trans-ethyl cinnamate</i>	4192-77-2	168,0	19,38	2,97	5,30	20,31	6,08	0,065	<b>37,90</b>	0,141	17,14	<b>32,89</b>	<b>5,01</b>	<b>37,90</b>	1,84	51,47	558,2	777,0	69,32
<b>Diethyl carbonate</b>	105-58-8	122,0	18,27	2,13	5,66	19,24	6,05	0,078	<b>25,87</b>	0,119	12,01	<b>21,83</b>	<b>4,04</b>	<b>25,87</b>	1,10	37,98	400,0	576,0	45,17
<b>Diethyl ether</b>	60-29-7	104,8	14,43	2,36	6,77	16,11	7,17	0,101	<b>16,65</b>	0,115	8,96	<b>12,09</b>	<b>4,56</b>	<b>16,65</b>	1,15	26,61	307,6	466,7	27,20
<b>Diisopropyl ether</b>	108-20-3	140,9	14,12	2,05	5,07	15,14	5,47	0,099	<b>17,27</b>	0,122	9,75	<b>13,39</b>	<b>3,88</b>	<b>17,27</b>	1,13	29,47	341,5	500,1	32,31
<i>isopentyl ether</i>	544-01-4	200,7	13,51	1,82	2,50	13,86	3,09	0,084	<b>23,00</b>	0,173	16,13	<b>19,49</b>	<b>3,51</b>	<b>23,00</b>	1,10	35,10	342,2	500,3	38,54
<b>2,2'-dichlorodiethyl ether</b>	111-44-4	117,2	19,68	4,83	2,50	20,42	5,44	0,065	<b>37,31</b>	0,154	18,59	<b>27,71</b>	<b>9,60</b>	<b>37,31</b>	2,59	39,80	451,7	666,0	48,87
<b>anisole</b>	100-66-3	119,1	19,56	2,67	1,33	19,79	2,99	0,067	<b>35,10</b>	0,154	18,19	<b>33,35</b>	<b>1,75</b>	<b>35,10</b>	1,36	39,13	426,7	645,6	46,65
<b>phenetole</b>	103-73-1	127,3	18,93	2,65	5,44	19,88	6,05	0,069	<b>32,41</b>	0,138	15,62	<b>27,94</b>	<b>4,47</b>	<b>32,41</b>	1,41	41,02	443,2	647,2	50,30
<i>Tetrahydrofuran</i>	109-99-9	81,7	17,87	3,68	8,38	20,08	9,15	0,076	<b>26,40</b>	0,127	13,20	<b>19,98</b>	<b>6,42</b>	<b>26,40</b>	1,63	30,71	339,1	540,2	32,95
<b>Carbon tetrachloride</b>	56-23-5	97,1	18,25	0,29	0,75	18,27	0,80	0,077	<b>26,43</b>	0,145	14,80	<b>25,55</b>	<b>0,88</b>	<b>26,43</b>	0,00	29,78	349,8	556,4	32,42
<b>Dichloromethane</b>	75-09-2	63,9	18,33	4,05	10,01	21,28	10,80	0,076	<b>27,20</b>	0,127	13,14	<b>19,83</b>	<b>7,37</b>	<b>27,20</b>	1,60	28,15	312,9	510,0	28,94
<b>Chloroform</b>	67-66-3	80,2	18,70	2,41	6,50	19,94	6,93	0,077	<b>27,32</b>	0,135	13,83	<b>22,33</b>	<b>4,34</b>	<b>26,67</b>	1,01	29,96	334,3	536,4	31,89
<b>1,2-dichloroethane</b>	107-06-2	79,4	19,39	3,35	7,59	21,09	8,30	0,070	<b>31,86</b>	0,141	15,84	<b>25,96</b>	<b>5,90</b>	<b>31,86</b>	1,44	32,10	356,6	561,6	35,31
<b>1,1,2-trichloroethane</b>	79-00-5	92,9	19,45	2,76	5,75	20,47	6,38	0,068	<b>34,02</b>	0,151	17,59	<b>29,31</b>	<b>4,71</b>	<b>34,02</b>	1,25	34,12	387,0	602,0	38,92
<b>1,1,1-trichloroethane</b>	71-55-6	99,3	16,17	3,67	7,04	18,02	7,94	0,079	<b>25,14</b>	0,141	14,01	<b>19,12</b>	<b>6,02</b>	<b>25,14</b>	1,78	29,64	347,2	545,0	32,24
<i>Isobutyl chloride</i>	513-36-0	105,1	16,89	3,96	1,34	17,40	4,18	0,087	<b>22,20</b>	0,131	11,85	<b>19,60</b>	<b>2,60</b>	<b>22,20</b>	2,00	29,37	342,0	528,0	31,83
<i>tert-Butyl chloride</i>	507-20-0	109,4	15,56	4,12	1,34	16,15	4,33	0,096	<b>18,91</b>	0,128	10,54	<b>16,24</b>	<b>2,67</b>	<b>18,91</b>	2,13	27,14	323,8	507,0	28,53
<i>Isoamyl chloride</i>	107-84-6	122,2	16,75	3,49	1,40	17,16	3,76	0,083	<b>23,36</b>	0,135	12,73	<b>20,84</b>	<b>2,52</b>	<b>23,36</b>	1,88	31,75	372,0	560,0	36,01
<i>trichloroethylene</i>	79-01-6	89,7	19,63	1,82	0,70	19,72	1,95	0,072	<b>28,80</b>	0,140	15,24	<b>27,47</b>	<b>1,33</b>	<b>28,80</b>	0,77	31,64	360,1	571,0	34,90
<i>1,1,2,2-tetrachloroethylene</i>	127-18-4	101,7	19,63	0,30	0,70	19,65	0,76	0,070	<b>31,74</b>	0,149	16,73	<b>30,83</b>	<b>0,91</b>	<b>31,74</b>	0,00	34,30	394,4	620,0	39,26

<b>Chlorobenzene</b>	108-90-7	102,1	19,72	3,47	1,54	20,08	3,80	0,069	<b>33,00</b>	0,148	16,96	<b>30,11</b>	<b>2,89</b>	<b>33,00</b>	1,69	35,58	404,9	632,4	41,18
<i>1-chloronaphthalene</i>	90-13-1	136,5	21,06	2,47	1,25	21,24	2,76	0,061	<b>42,05</b>	0,153	19,56	<b>39,84</b>	<b>2,21</b>	<b>42,05</b>	1,33	47,99	532,5	785,0	61,59
<b>Ethyl bromide</b>	74-96-4	74,6	18,88	4,71	1,33	19,51	4,89	0,082	<b>23,62</b>	0,124	11,94	<b>21,02</b>	<b>2,60</b>	<b>23,62</b>	2,03	27,68	311,5	503,8	28,39
<b>1,1,2,2-tetrabromoethane</b>	79-27-6	117,0	22,17	2,60	4,94	22,86	5,59	0,058	<b>48,71</b>	0,161	21,97	<b>44,13</b>	<b>4,58</b>	<b>48,71</b>	1,30	49,85	516,7	824,0	61,14
<i>1,2,3-Tribromopropane</i>	96-11-7	116,9	21,93	3,00	6,00	22,93	6,71	0,059	<b>45,36</b>	0,149	19,75	<b>39,98</b>	<b>5,38</b>	<b>45,36</b>	1,54	47,57	495,3	699,9	61,48
<i>1-chloro-3-methylbutane</i>	107-84-6	122,2	16,75	3,49	1,40	17,16	3,76	0,083	<b>23,36</b>	0,135	12,73	<b>20,84</b>	<b>2,52</b>	<b>23,36</b>	1,88	31,75	372,0	560,0	36,01
<b>1-bromobutane</b>	109-65-9	107,6	18,28	4,07	1,53	18,79	4,34	0,078	<b>25,90</b>	0,130	13,14	<b>23,18</b>	<b>2,71</b>	<b>25,90</b>	2,08	33,62	374,8	577,0	37,98
<i>1,2-dibromoethane</i>	106-93-4	86,1	22,42	2,37	0,95	22,56	2,55	0,062	<b>40,21</b>	0,151	19,08	<b>38,47</b>	<b>1,74</b>	<b>40,21</b>	1,01	38,24	404,5	650,2	43,84
<i>1-bromohexane</i>	111-25-1	140,5	18,24	3,55	1,43	18,64	3,83	0,076	<b>28,00</b>	0,131	13,47	<b>25,39</b>	<b>2,61</b>	<b>28,00</b>	2,06	38,81	429,0	586,6	48,83
<b>Bromobenzene</b>	108-86-1	105,3	20,23	3,44	1,56	20,58	3,78	0,066	<b>35,24</b>	0,149	17,62	<b>32,32</b>	<b>2,92</b>	<b>35,24</b>	1,70	37,82	429,2	670,2	44,61
<i>o-bromotoluene</i>	95-46-5	120,0	20,79	2,76	1,10	21,00	2,97	0,067	<b>34,63</b>	0,134	15,72	<b>32,65</b>	<b>1,98</b>	<b>34,63</b>	1,44	40,55	496,0	691,1	52,91
<i>1-bromonaphthalene</i>	90-11-9	139,5	21,45	2,38	1,25	21,62	2,69	0,060	<b>44,40</b>	0,155	20,40	<b>42,20</b>	<b>2,20</b>	<b>44,40</b>	1,29	50,59	554,3	824,0	65,20
<b>Bromoform</b>	75-25-2	87,5	22,09	2,35	1,13	22,24	2,61	0,060	<b>44,87</b>	0,173	22,75	<b>42,88</b>	<b>1,99</b>	<b>44,87</b>	0,99	37,55	422,4	696,0	43,29
<b>iodoethane</b>	75-03-6	81,2	19,60	4,30	1,51	20,13	4,55	0,074	<b>28,46</b>	0,137	14,53	<b>25,76</b>	<b>2,70</b>	<b>28,46</b>	1,91	30,50	345,5	561,0	32,89
<b>Iodobenzene</b>	591-50-4	112,0	20,52	3,36	1,67	20,86	3,75	0,064	<b>38,71</b>	0,156	19,31	<b>35,61</b>	<b>3,10</b>	<b>38,71</b>	1,70	40,48	461,6	721,2	48,74
<b>Diiodomethane</b>	75-11-6	80,5	23,72	3,01	4,97	24,42	5,82	0,051	<b>66,18</b>	0,217	33,27	<b>45,86</b>	<b>4,94</b>	<b>50,80</b>	1,22	40,76	455,2	747,0	48,00
<b>Triethylamine</b>	121-44-8	138,6	15,56	1,32	3,28	15,96	3,54	0,090	<b>20,22</b>	0,130	11,38	<b>17,85</b>	<b>2,37</b>	<b>20,22</b>	0,66	31,33	361,9	535,2	35,30
<b>dipropylamine</b>	142-84-7	136,9	16,36	1,98	4,82	17,17	5,21	0,085	<b>22,31</b>	0,124	11,52	<b>18,86</b>	<b>3,44</b>	<b>22,31</b>	1,07	34,59	382,0	550,0	40,35
<i>diisobutylamine</i>	110-96-3	173,3	14,24	4,14	7,00	16,40	8,13	0,086	<b>22,18</b>	0,125	11,40	<b>15,50</b>	<b>6,68</b>	<b>22,18</b>	2,70	38,26	412,3	580,0	46,60
<b>disopropylamine</b>	108-18-9	136,9	15,03	2,18	5,40	16,12	5,82	0,093	<b>19,14</b>	0,121	10,25	<b>15,31</b>	<b>3,83</b>	<b>19,14</b>	1,20	31,69	357,1	523,1	35,56
<b>di-n-butylamine</b>	111-92-2	170,0	16,49	1,68	3,65	16,98	4,02	0,081	<b>24,12</b>	0,128	12,39	<b>21,28</b>	<b>2,84</b>	<b>24,12</b>	0,98	39,31	432,0	602,3	49,00
<b>Pyrrole</b>	109-97-7	69,2	22,03	4,44	11,99	25,47	12,79	0,065	<b>37,06</b>	0,117	14,22	<b>28,11</b>	<b>8,95</b>	<b>37,06</b>	1,84	39,06	403,0	639,8	44,90
<b>Pyridine</b>	110-86-1	80,9	21,82	4,91	1,84	22,44	5,24	0,065	<b>36,56</b>	0,142	17,07	<b>33,23</b>	<b>3,32</b>	<b>36,56</b>	2,20	35,95	388,4	620,0	40,74
<b>Aniline</b>	62-53-3	91,5	22,40	3,31	7,82	23,95	8,49	0,061	<b>42,12</b>	0,138	17,66	<b>35,82</b>	<b>6,30</b>	<b>42,12</b>	1,53	43,32	457,2	699,0	52,49
<b>Nitromethane</b>	75-52-5	54,3	19,13	9,11	16,36	26,77	18,72	0,066	<b>36,48</b>	0,114	13,63	<b>19,59</b>	<b>16,89</b>	<b>36,47</b>	3,45	34,66	374,4	588,2	38,91
<b>1-Nitropropane</b>	108-03-2	88,4	16,87	7,61	12,47	22,32	14,61	0,072	<b>30,13</b>	0,115	12,54	<b>17,56</b>	<b>12,57</b>	<b>30,13</b>	3,66	37,47	404,3	605,0	44,03
<i>o-Nitrotoluene</i>	88-72-2	118,0	21,03	6,83	3,50	22,39	7,68	0,061	<b>41,46</b>	0,142	18,26	<b>35,27</b>	<b>6,19</b>	<b>41,46</b>	3,75	46,54	495,6	720,0	59,16
<i>m-Nitrotoluene</i>	99-08-1	118,4	20,67	7,66	4,00	22,40	8,64	0,062	<b>40,99</b>	0,140	17,82	<b>33,90</b>	<b>7,09</b>	<b>40,99</b>	4,23	46,54	505,0	734,0	59,43
<b>Acetonitrile</b>	75-05-8	52,6	15,80	10,48	16,37	25,05	19,44	0,076	<b>27,40</b>	0,098	10,25	<b>14,02</b>	<b>13,38</b>	<b>27,40</b>	3,93	29,90	354,8	545,5	33,01
<b>Propionitrile</b>	107-12-0	70,9	15,05	9,26	14,03	22,57	16,82	0,078	<b>25,60</b>	0,103	10,29	<b>13,42</b>	<b>12,17</b>	<b>25,60</b>	4,02	32,02	370,5	564,4	36,12
<b>Butyronitrile</b>	109-74-0	87,3	15,06	8,48	12,68	21,43	15,26	0,078	<b>25,88</b>	0,107	10,82	<b>14,18</b>	<b>11,70</b>	<b>25,88</b>	4,08	34,53	390,8	582,3	40,11
<i>3-Methylbutanenitrile</i>	625-28-5	105,5	15,11	6,91	11,00	19,93	12,99	0,080	<b>25,93</b>	0,117	11,55	<b>15,33</b>	<b>10,60</b>	<b>25,93</b>	3,62	36,03	400,5	610,6	41,89
<b>ethyl mercaptan</b>	75-08-1	74,3	16,83	3,72	9,34	19,60	10,06	0,083	<b>23,08</b>	0,121	11,41	<b>16,52</b>	<b>6,56</b>	<b>23,07</b>	1,58	28,01	308,2	499,2	28,56
<b>Dimethyl sulfoxide</b>	67-68-5	71,3	20,09	9,14	15,22	26,81	17,75	0,061	<b>42,92</b>	0,122	15,74	<b>27,10</b>	<b>15,82</b>	<b>42,92</b>	3,96	42,60	464,0	729,0	51,24
<b>Carbon disulfide</b>	75-15-0	60,0	22,16	0,28	1,02	22,19	1,05	0,071	<b>31,58</b>	0,138	15,40	<b>30,80</b>	<b>0,78</b>	<b>31,58</b>	0,00	28,58	319,4	552,0	29,54
<i>Dimethylformamide</i>	68-12-2	77,0	19,84	6,50	12,80	24,48	14,35	0,065	<b>36,76</b>	0,122	14,68	<b>22,44</b>	<b>14,32</b>	<b>36,76</b>	3,81	38,93	425,2	649,6	46,16
<b>Nitrobenzene</b>	98-95-3	102,3	21,15	8,23	4,30	23,09	9,28	0,061	<b>43,38</b>	0,147	19,07	<b>35,62</b>	<b>7,76</b>	<b>43,38</b>	4,23	43,73	484,0	719,0	54,56
<b>furfural</b>	98-01-1	83,2	19,76	7,76	12,31	24,54	14,56	0,061	<b>43,08</b>	0,138	17,92	<b>28,98</b>	<b>14,09</b>	<b>43,08</b>	3,60	42,10	434,9	670,2	50,11
<b>Water</b>	7732-18-5	18,0	32,31	8,46	36,88	49,76	37,84	0,051	<b>71,99</b>	0,094	14,53	<b>42,20</b>	<b>29,79</b>	<b>71,99</b>	1,85	40,65	373,2	647,1	44,57
<i>Phosphoryl chloride</i>	10025-87-3	91,3	17,77	5,09	9,00	20,56	10,34	0,070	<b>32,20</b>	0,143	16,01	<b>23,47</b>	<b>8,73</b>	<b>32,20</b>	2,42	34,35	378,7	602,2	38,61
<b>Formamide</b>	75-12-7	39,8	25,33	11,38	26,70	38,53	29,03	0,054	<b>57,02</b>	0,095	13,82	<b>32,86</b>	<b>24,16</b>	<b>57,02</b>	3,72	48,28	493,0	771,0	59,08
<i>Dimethyl acetamide</i>	127-19-5	92,5	17,51	7,76	12,39	22,81	14,61	0,069	<b>33,10</b>	0,119	13,61	<b>19,90</b>	<b>13,20</b>	<b>33,10</b>	3,82	39,83	439,3	658,0	48,12
<i>N-Methyl acetamide</i>	79-16-3	84,0	19,09	7,88	16,76	26,59	18,52	0,070	<b>32,40</b>	0,088	9,99	<b>17,87</b>	<b>14,53</b>	<b>32,40</b>	3,72	48,02	478,2	718,0	59,40
<i>Phenyl isothiocyanate</i>	103-72-0	119,8	18,80	5,25	7,80	21,02	9,40	0,062	<b>40,56</b>	0,157	19,85	<b>31,57</b>	<b>8,99</b>	<b>40,56</b>	2,85	43,89	493,0	798,0	52,95
<i>perfluorobutylamine</i>	311-89-7	356,2	14,73	2,06	6,00	16,04	6,34	0,099	<b>16,30</b>	0,075	5,98	<b>12,63</b>	<b>3,67</b>	<b>16,30</b>	1,90	60,30	452,0	528,6	91,63
<i>Perfluorodecalin</i>	306-94-5	238,6	14,92	0,23	0,57	14,94	0,62	0,093	<b>19,20</b>	0,117	9,91	<b>18,31</b>	<b>0,89</b>	<b>19,20</b>	0,00	41,50	415,0	541,2	53,24
<i>Trifluoroethanol</i>	75-89-8	71,8	17,53	5,76	18,50	26,13	19,38	0,086	<b>21,50</b>	0,064	5,86	<b>11,67</b>	<b>9,83</b>	<b>21,50</b>	2,52	43,97	348,0	498,6	49,02

## 8.2.4. TABELA 7.

**Tabela 7.** Moléculas, número CAS (CAS #), volume molar ( $m^3.mol^{-1}$ ), parâmetros de solubilidade DiPEVa (este estudo,  $MPa^{1/2}$ ), tensão superficial parcial estimada ( $mN.m^{-1}$ ) calculada neste estudo a partir do método adaptado de Good-Girifalco. Os parâmetros de tensão superficial foram calculados a partir de cada estudo referenciado: Good& Elbing, Apostoluk & Drzymala's e Demond & Lindner, no caso das medições da tensão interfacial da água e colegas de Fowkes para a estimativa da tensão interfacial do esqualeno. (MATERIAL SUPLEMENTAR) [52], [56]–[58].

Moléculas	CAS #	V, $cm^3.mol^{-1}$	Parâmetros de solubilidade DiPEVa (este estudo, $MPa^{1/2}$ )				Tensão superficial parcial estimada ( $mN.m^{-1}$ )										
			$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	$\delta_T$	Good & Elbing		Apostoluk & Drzymala's		Demond & Lindner		Average				
						$\sigma_D$	$\sigma_P$	$\sigma_D$	$\sigma_P$	$\sigma_D$	$\sigma_P$	$\sigma_D$	$\sigma_P$	$\sigma_D$	$\sigma_P$	$\sigma_D$	
<b>n-pentane</b>	109-66-0	116,2	15,34	0,23	1,03	15,37			14,17	1,63	14,35	1,15	14,26	1,39			
<b>2-Methylbutane</b>	78-78-4	116,5	14,79	0,46	1,77	14,90	13,08	1,89	12,87	2,12	13,10	1,89	13,02	1,97			
<b>n-Hexane</b>	110-54-3	131,4	15,63	0,24	0,86	15,65	16,87	1,13	16,72	1,69	17,24	1,16	16,94	1,33			
<b>2-Methylpentane</b>	107-83-5	132,9	15,11	0,24	0,74	15,13	17,36	1,05	16,61	1,80			16,98	1,43			
<b>3-Methylpentane</b>	96-14-0	130,6	15,26	0,25	0,83	15,29	16,98	1,13	16,34	1,78			16,66	1,45			
<b>2,2-Dimethylbutane</b>	75-83-2	133,7	14,55	0,24	0,75	14,57	15,21	0,97	14,57	1,61			14,89	1,29			
<b>2,3-Dimethylbutane</b>	79-29-8	131,2	14,99	0,25	0,74	15,01	16,43	1,00	15,74	1,69			16,09	1,34			
<b>n-Heptane</b>	142-82-5	147,4	15,79	0,25	0,74	15,81	18,62	1,08	17,92	1,74	18,59	1,07	18,38	1,30			
<b>3-Methylhexane</b>	589-34-4	146,7	15,42	0,26	0,75	15,44	18,45	1,11	17,73	1,83			18,09	1,47			
<b>3-Ethylpentane</b>	617-78-7	144,4	15,55	0,26	0,69	15,56	19,10	1,06					19,10	1,06			
<b>2,3-dimethylpentane</b>	565-59-3	145,1	15,27	0,27	0,69	15,29			16,59	1,71			16,59	1,71			
<b>2,4-Dimethylpentane</b>	108-08-7	146,7	15,11	0,25	0,70	15,12	17,13	0,99	16,00	1,66			16,57	1,32			
<b>n-Octane</b>	111-65-9	163,5	15,90	0,26	0,65	15,91	20,35	1,05	19,76	1,86	20,56	1,06	20,22	1,33			
<b>3-Methylheptane</b>	589-81-1	162,8	15,55	0,26	0,63	15,56	20,25	1,05					20,25	1,05			
<b>3-Ethylhexane</b>	619-99-8	161,0	15,62	0,27	0,60	15,63	20,53	1,01					20,53	1,01			



<b>2-Methyl-3-ethyl pentane</b>	609-26-7	159,7	15,43	0,26	0,60	15,44	20,52	1,02					20,52	1,02
<b>2,2,4-Trimethylpentane</b>	540-84-1	165,1	14,80	0,26	0,61	14,82	17,91	0,94	16,65	1,68	17,41	0,92	17,32	1,18
<b>2,3,4-trimethylpentane</b>	565-75-3	158,8	15,34	0,27	0,61	15,35			19,28	1,92			19,28	1,92
<b>2,7-dimethyloctane</b>	1072-16-8	195,4	15,43	0,27	0,60	15,45					21,42	1,07	21,42	1,07
<b>Squalane</b>	111-01-3	522,1	16,27	0,79	1,20	16,33								
<b>n-Decane</b>	124-18-5	195,9	15,99	0,26	0,59	16,00	22,43	1,07	21,94	1,95	22,75	1,08	22,37	1,37
<b>n-Dodecane</b>	112-40-3	228,6	15,96	0,27	0,50	15,97	24,09	1,01	22,92	1,99	23,91	1,00	23,64	1,34
<b>n-Tetradecane</b>	629-59-4	261,3	15,85	0,27	0,53	15,86	24,51	1,09	24,30	2,26	25,43	1,13	24,75	1,49
<b>n-Hexadecane</b>	544-76-3	294,1	15,71	0,28	0,43	15,72	26,29	1,01			25,96	0,99	26,12	1,00
<b>Cyclohexane</b>	110-82-7	108,7	17,34	0,29	0,73	17,36	24,22	1,28	22,39	2,26	23,41	1,24	23,34	1,60
<b>Methyl cyclohexane</b>	108-87-2	128,3	16,80	0,27	0,73	16,81			21,60	2,08			21,60	2,08
<b>1-heptyne</b>	628-71-7	131,2	16,16	1,67	4,00	16,73			17,77	4,91	17,26	5,42	17,51	5,17
<b>cis-Decalin</b>	493-01-6	156,9	17,61	0,32	0,55	17,62	30,88	1,30			30,88	1,30	30,88	1,30
<b>trans-Decalin</b>	493-02-7	156,9	17,59	0,30	0,60	17,60	28,62	1,27			28,62	1,27	28,62	1,27
<b>2-methyl-2-butene</b>	513-35-9	106,7	15,68	0,86	3,08	16,01			14,60	3,04	14,24	3,40	14,42	3,22
<b>Benzene</b>	71-43-2	89,4	19,69	0,27	0,86	19,71	27,41	1,47	26,32	2,56	27,41	1,47	27,05	1,83
<b>Toluene</b>	108-88-3	106,8	18,71	0,94	2,36	18,88	24,60	3,90	23,64	4,29	24,10	3,83	24,11	4,01
<b>Ethyl benzene</b>	100-41-4	123,0	18,52	1,31	0,57	18,57	26,79	2,41	25,55	3,20	26,37	2,38	26,24	2,66
<b>o-Xylene</b>	95-47-6	121,2	18,55	1,37	3,02	18,84	24,89	5,21	24,33	5,43	24,61	5,15	24,61	5,26
<b>m-Xylene</b>	108-38-3	123,4	18,55	0,79	1,86	18,66	25,63	3,27	25,13	3,89	25,73	3,29	25,50	3,48
<b>p-Xylene</b>	106-42-3	123,3	18,65	0,27	0,68	18,66	27,29	1,26	26,06	2,49	27,29	1,26	26,88	1,67
<b>n-Propyl benzene</b>	103-65-1	138,8	18,23	0,87	1,95	18,35	25,50	3,49	25,13	3,85	25,49	3,49	25,37	3,61
<b>Mesitylene</b>	108-67-8	139,8	18,58	0,26	0,65	18,59	27,59	1,21	25,73	2,27	26,82	1,18	26,71	1,55
<b>n-Butyl benzene</b>	104-51-8	157,0	17,94	0,83	1,75	18,04	25,94	3,29	25,30	3,93	25,94	3,29	25,73	3,50
<b>p-Cymene</b>	99-87-6	155,5	17,68	0,27	0,62	17,69	26,89	1,21	27,07	2,37	28,18	1,26	27,38	1,61
<b>Styrene</b>	100-42-5	115,6	19,33	0,52	1,16	19,37			28,50	3,50	29,70	2,30	29,10	2,90
<b>Heptanal</b>	111-71-7	139,8	16,20	4,38	8,00	18,59			17,37	9,47	16,17	10,67	16,77	10,07
<b>Benzaldehyde</b>	100-52-7	101,5	18,85	6,32	10,28	22,38			27,49	11,05	22,02	16,52	24,76	13,78
<b>Salicylaldehyde</b>	90-02-8	104,6	21,03	5,98	11,56	24,73								
<b>1,4-Dioxane</b>	123-91-1	85,7	20,81	5,56	2,05	21,64								
<b>Acetone</b>	67-64-1	74,0	15,14	6,58	11,99	20,40	11,67	12,35					11,67	12,35

<b>Methyl ethyl ketone</b>	78-93-3	90,1	15,54	5,76	10,43	19,58			13,50	10,46	12,62	11,34	13,06	10,90
<i>4-methyl-2-pentanone</i>	108-10-1	125,8	17,19	4,81	2,03	17,96			16,76	6,63			16,76	6,63
<b>Ethyl propyl ketone</b>	589-38-8	122,7	17,74	5,16	2,03	18,59					18,58	6,81	18,58	6,81
<b>Methyl-n-propyl ketone</b>	107-87-9	106,7	18,27	5,33	1,90	19,13	18,12	6,58	17,30	6,85	17,72	6,43	17,72	6,62
<i>Methyl isobutyl ketone</i>	108-10-1	125,8	17,19	4,81	2,03	17,96			16,76	6,63			16,76	6,63
<b>Methyl-n-butyl ketone</b>	591-78-6	123,6	18,05	4,82	1,85	18,77	18,73	6,27	18,51	6,98	19,09	6,40	18,78	6,55
<b>Methyl-n-amyl ketone</b>	110-43-0	139,8	17,84	4,45	1,90	18,48	19,88	6,32	19,26	6,86	19,82	6,30	19,66	6,49
<i>Methyl t-butyl ketone</i>	75-97-8	124,1	14,65	4,94	8,30	17,55			16,22	7,21	13,22	10,21	14,72	8,71
<b>Cyclohexanone</b>	108-94-1	104,0	20,24	6,02	2,65	21,28			24,95	10,28			24,95	10,28
<i>Methyl n-hexyl ketone</i>	111-13-7	156,8	16,30	3,99	6,90	18,14			17,52	9,27	17,04	9,75	17,28	9,51
<b>Acetophenone</b>	98-86-2	117,4	18,90	5,59	8,85	21,60			28,77	11,03			28,77	11,03
<i>1,1-dichloroacetone</i>	513-88-2	108,2	17,40	3,61	9,10	19,96					19,23	12,68	19,23	12,68
<i>chloroacetone</i>	78-95-5	82,4	17,83	4,94	12,00	22,05					19,04	16,23	19,04	16,23
<b>Methanol</b>	67-56-1	40,7	19,33	5,17	23,08	30,55	9,04	12,96					9,04	12,96
<b>Ethanol</b>	64-17-5	58,5	18,99	4,33	18,55	26,90	10,30	12,09					10,30	12,09
<b>1-Propanol</b>	71-23-8	75,2	19,31	3,83	14,87	24,67	12,28	11,43					12,28	11,43
<b>Isopropanol</b>	67-63-0	76,8	17,78	3,76	13,84	22,85	10,96	10,36					10,96	10,36
<b>1-Butanol</b>	71-36-3	91,5	19,50	3,47	12,38	23,35	14,33	11,06	14,81	10,14	14,08	10,87	14,41	10,69
<b>Isobutanol</b>	78-83-1	92,8	18,22	3,41	11,71	21,93	12,89	10,11	14,15	8,79	12,86	10,08	13,30	9,66
<b>2-butanol</b>	78-92-2	92,0	18,12	3,46	11,68	21,83			13,82	8,72			13,82	8,72
<b>tert-Butanol</b>	75-65-0	95,8	16,81	3,41	11,32	20,55								
<b>1-Pentanol</b>	71-41-0	108,6	19,21	3,28	10,77	22,27	15,24	10,46	16,21	9,15	15,04	10,32	15,50	9,97
<b>1-Hexanol</b>	111-27-3	124,9	19,13	2,99	9,29	21,48	16,16	9,64	17,21	8,60	16,16	9,65	16,51	9,30
<b>Isoamyl alcohol</b>	123-51-3	109,4	18,12	3,45	10,51	21,23	13,53	9,67	15,21	8,91	14,06	10,06	14,27	9,54
<b>1-Heptanol</b>	111-70-6	141,9	18,78	2,97	8,28	20,74	15,82	8,68	18,35	8,71	17,47	9,59	17,21	8,99
<b>1-Octanol</b>	111-87-5	157,7	18,69	2,70	7,15	20,19	18,60	8,90	19,49	8,01	18,60	8,90	18,89	8,61
<b>2-Octanol</b>	123-96-6	159,1	17,84	2,70	6,63	19,23			18,74	7,58	17,90	8,42	18,32	8,00
<b>1-Nonanol</b>	143-08-8	174,4	18,48	2,53	6,15	19,64			19,26	7,15			19,26	7,15
<b>1-Decanol</b>	112-30-1	191,8	18,18	2,45	5,43	19,13			20,29	7,03			20,29	7,03
<i>1-Undecanol</i>	112-42-5	207,7	17,84	2,43	5,00	18,69			18,65	6,81			18,65	6,81
<b>1-Dodecanol</b>	112-53-8	224,3	17,62	2,38	4,56	18,35			19,46	6,60			19,46	6,60

<b>Cyclohexanol</b>	108-93-0	106,0	20,56	3,65	9,51	22,94	20,69	12,01	21,94	11,46	21,14	12,26	21,26	11,91
<b>Benzyl alcohol</b>	100-51-6	103,6	22,16	3,44	8,47	23,97	26,30	12,70	27,11	12,60	26,78	12,93	26,73	12,75
<i>Phenol</i>	<i>108-95-2</i>	87,5	22,43	3,14	11,20	25,27			28,22	12,68			28,22	12,68
<b>Ethylene glycol</b>	107-21-1	55,8	26,49	6,30	21,70	34,82	24,23	24,20					24,23	24,20
<b>Diethylene glycol</b>	111-46-6	94,9	23,85	5,13	13,62	27,94								
<b>1,3-Propanediol</b>	504-63-2	72,5	25,07	5,87	18,23	31,55								
<b>Formic acid</b>	64-18-6	37,8	22,00	4,66	12,55	25,76								
<b>Acetic acid</b>	64-19-7	57,1	18,57	4,60	11,85	22,50								
<b>propionic acid</b>	79-09-4	75,0	19,63	4,02	13,37	24,09	14,56	12,13					14,56	12,13
<b>butyric acid</b>	107-92-6	110,0	19,08	3,18	9,68	21,63	16,31	10,20					16,31	10,20
<b>pentanoic acid</b>	109-52-4	109,2	20,17	3,10	10,96	23,17			17,59	9,70			17,59	9,70
<b>Isovaleric acid</b>	503-74-2	111,0	21,04	1,32	6,14	21,96	18,90	6,60	19,70	5,81	18,90	6,61	19,17	6,34
<i>hexanoic acid</i>	<i>142-62-1</i>	125,9	20,41	2,84	9,49	22,69			18,24	9,25			18,24	9,25
<b>heptanoic acid</b>	111-14-8	138,7	20,19	2,88	9,49	22,49			19,39	8,76	17,89	10,29	18,64	9,53
<i>octanoic acid</i>	<i>124-07-2</i>	158,6	19,86	2,75	8,30	21,70			20,20	8,62	19,01	9,81	19,61	9,21
<i>oleic acid</i>	<i>112-80-1</i>	315,6	17,91	1,78	3,00	18,25					26,47	6,03	26,47	6,03
<b>Acetic anhydride</b>	108-24-7	94,5	18,74	5,67	11,54	22,73								
<b>methyl acetate</b>	79-20-9	79,7	17,67	3,80	9,87	20,60			15,82	9,35			15,82	9,35
<b>Ethyl acetate</b>	141-78-6	98,5	16,87	3,63	8,97	19,44	14,30	9,60	15,02	8,37	13,99	9,40	14,44	9,12
<b>n-Butyl acetate</b>	123-86-4	132,5	16,41	3,29	6,70	18,03	16,45	8,75	16,98	7,90	16,24	8,64	16,55	8,43
<b>isopropyl acetate</b>	108-21-4	117,1	15,54	3,32	7,20	17,45			14,80	7,34			14,80	7,34
<b>isobutyl acetate</b>	110-19-0	133,5	15,82	3,32	6,90	17,58			18,03	5,03			18,03	5,03
<b>Ethyl-n-butyrate</b>	105-54-4	132,9	16,13	3,23	6,66	17,75			16,72	7,74	15,91	8,55	16,31	8,15
<b>Ethyl isovalerate</b>	108-64-5	150,5	16,71	3,30	1,37	17,08					19,02	4,76	19,02	4,76
<b>ethyl n-hexanoate</b>	123-66-0	165,9	16,39	2,61	5,14	17,37			19,11	6,70	18,28	7,53	18,69	7,12
<i>Ethyl n-octanoate</i>	<i>106-32-1</i>	198,2	19,75	2,37	0,70	19,91					23,94	3,50	23,94	3,50
<i>Ethyl oleate</i>	<i>111-62-6</i>	356,9	14,48	2,36	2,50	14,89					24,26	6,74	24,26	6,74
<b>Diethyl phthalate</b>	84-66-2	198,0	18,60	3,94	6,62	20,13					24,61	11,93	24,61	11,93
<i>Trans-ethyl cinnamate</i>	<i>4192-77-2</i>	168,0	19,38	2,97	5,30	20,31					27,72	10,18	27,72	10,18
<b>Diethyl carbonate</b>	105-58-8	122,0	18,27	2,13	5,66	19,24					19,04	7,38	19,04	7,38
<b>Diethyl ether</b>	60-29-7	104,8	14,43	2,36	6,77	16,11	10,75	6,25	11,81	5,30	10,82	6,29	11,13	5,95

<b>Diisopropyl ether</b>	108-20-3	140,9	14,12	2,05	5,07	15,14	11,90	5,40	12,55	4,72	11,88	5,39	12,11	5,17
<i>isopentyl ether</i>	544-01-4	200,7	13,51	1,82	2,50	13,86	18,16	4,86					18,16	4,86
<b>2,2'-dichlorodiethyl ether</b>	111-44-4	117,2	19,68	4,83	2,50	20,42					24,40	13,56	24,40	13,56
<b>anisole</b>	100-66-3	119,1	19,56	2,67	1,33	19,79			29,70	6,00	30,28	5,42	29,99	5,71
<b>phenetole</b>	103-73-1	127,3	18,93	2,65	5,44	19,88			24,63	8,83	24,35	9,11	24,49	8,97
<i>Tetrahydrofuran</i>	109-99-9	81,7	17,87	3,68	8,38	20,08								
<b>Carbon tetrachloride</b>	56-23-5	97,1	18,25	0,29	0,75	18,27	25,63	1,32	24,55	2,49	25,72	1,32	25,30	1,71
<b>Dichloromethane</b>	75-09-2	63,9	18,33	4,05	10,01	21,28	15,68	10,82	17,40	10,44	16,47	11,37	16,52	10,87
<b>Chloroform</b>	67-66-3	80,2	18,70	2,41	6,50	19,94	18,93	8,22	19,74	7,58	19,05	8,27	19,24	8,03
<b>1,2-dichloroethane</b>	107-06-2	79,4	19,39	3,35	7,59	21,09			22,03	10,20			22,03	10,20
<b>1,1,2-trichloroethane</b>	79-00-5	92,9	19,45	2,76	5,75	20,47			24,74	9,28	24,58	9,44	24,66	9,36
<b>1,1,1-trichloroethane</b>	71-55-6	99,3	16,17	3,67	7,04	18,02			16,72	8,46			16,72	8,46
<i>Isobutyl chloride</i>	513-36-0	105,1	16,89	3,96	1,34	17,40	16,98	4,92	14,23	7,97	17,21	4,99	16,14	5,96
<i>tert-Butyl chloride</i>	507-20-0	109,4	15,56	4,12	1,34	16,15	14,78	4,82	11,83	7,08	14,26	4,65	13,62	5,52
<i>Isoamyl chloride</i>	107-84-6	122,2	16,75	3,49	1,40	17,16	18,61	4,89			18,49	4,87	18,55	4,88
<i>trichloroethylene</i>	79-01-6	89,7	19,63	1,82	0,70	19,72			22,34	6,46	25,79	3,01	24,07	4,73
<i>1,1,2-tetrachloroethylene</i>	127-18-4	101,7	19,63	0,30	0,70	19,65			23,45	8,29	30,36	1,38	26,91	4,83
<b>Chlorobenzene</b>	108-90-7	102,1	19,72	3,47	1,54	20,08	27,42	6,18	26,67	6,92	27,41	6,18	27,16	6,43
<i>1-chloronaphthalene</i>	90-13-1	136,5	21,06	2,47	1,25	21,24	36,23	5,57			36,45	5,60	36,34	5,59
<b>Ethyl bromide</b>	74-96-4	74,6	18,88	4,71	1,33	19,51	18,57	5,63	18,15	6,05	18,57	5,63	18,43	5,77
<b>1,1,2,2-tetrabromoethane</b>	79-27-6	117,0	22,17	2,60	4,94	22,86	38,38	11,32			38,38	11,32	38,38	11,32
<i>1,2,3-Tribromopropane</i>	96-11-7	116,9	21,93	3,00	6,00	22,93	33,43	11,97			33,40	11,96	33,41	11,97
<i>1-chloro-3-methylbutane</i>	107-84-6	122,2	16,75	3,49	1,40	17,16	18,61	4,89			18,49	4,87	18,55	4,88
<b>1-bromobutane</b>	109-65-9	107,6	18,28	4,07	1,53	18,79			19,56	6,17			19,56	6,17
<i>1,2-dibromoethane</i>	106-93-4	86,1	22,42	2,37	0,95	22,56			34,71	5,50	35,48	4,73	35,09	5,12
<i>1-bromohexane</i>	111-25-1	140,5	18,24	3,55	1,43	18,64			21,71	6,33			21,71	6,33
<b>Bromobenzene</b>	108-86-1	105,3	20,23	3,44	1,56	20,58	29,95	6,55	28,20	7,04	28,92	6,32	29,02	6,64
<i>o-bromotoluene</i>	95-46-5	120,0	20,79	2,76	1,10	21,00			27,57	7,06	29,67	4,96	28,62	6,01
<i>1-bromonaphthalene</i>	90-11-9	139,5	21,45	2,38	1,25	21,62	38,89	5,71			38,71	5,69	38,80	5,70

<b>Bromoform</b>	75-25-2	87,5	22,09	2,35	1,13	22,24	36,45	5,05	38,94	6,59	39,99	5,54	38,46	5,72
<b>iodoethane</b>	75-03-6	81,2	19,60	4,30	1,51	20,13			22,32	6,78	22,88	6,22	22,60	6,50
<b>Iodobenzene</b>	591-50-4	112,0	20,52	3,36	1,67	20,86	32,70	7,00	31,61	7,66	32,34	6,93	32,22	7,19
<b>Diiodomethane</b>	75-11-6	80,5	23,72	3,01	4,97	24,42	39,47	11,33	36,92	13,84	52,04	14,94	42,81	13,37
<b>Triethylamine</b>	121-44-8	138,6	15,56	1,32	3,28	15,96			15,98	4,01			15,98	4,01
<b>dipropylamine</b>	142-84-7	136,9	16,36	1,98	4,82	17,17					16,62	6,20	16,62	6,20
<i>diisobutylamine</i>	110-96-3	173,3	14,24	4,14	7,00	16,40					13,29	8,89	13,29	8,89
<b>disopropylamine</b>	108-18-9	136,9	15,03	2,18	5,40	16,12			17,00	5,82			17,00	5,82
<b>di-n-butylamine</b>	111-92-2	170,0	16,49	1,68	3,65	16,98			19,43	5,17	19,14	5,46	19,28	5,32
<b>Pyrrole</b>	109-97-7	69,2	22,03	4,44	11,99	25,47								
<b>Pyridine</b>	110-86-1	80,9	21,82	4,91	1,84	22,44								
<b>Aniline</b>	62-53-3	91,5	22,40	3,31	7,82	23,95	29,71	13,19	29,58	13,09	29,55	13,12	29,61	13,13
<b>Nitromethane</b>	75-52-5	54,3	19,13	9,11	16,36	26,77	17,15	19,65	18,21	19,27	17,47	20,01	17,61	19,65
<b>1-Nitropropane</b>	108-03-2	88,4	16,87	7,61	12,47	22,32								
<i>o-Nitrotoluene</i>	88-72-2	118,0	21,03	6,83	3,50	22,39	29,07	12,43	28,61	12,85	29,04	12,42	28,91	12,57
<i>m-Nitrotoluene</i>	99-08-1	118,4	20,67	7,66	4,00	22,40	27,82	13,62	26,87	14,12	27,52	13,47	27,41	13,73
<b>Acetonitrile</b>	75-05-8	52,6	15,80	10,48	16,37	25,05								
<b>Propionitrile</b>	107-12-0	70,9	15,05	9,26	14,03	22,57								
<b>Butyronitrile</b>	109-74-0	87,3	15,06	8,48	12,68	21,43	12,85	15,25	13,63	13,81	12,55	14,89	13,01	14,65
<i>3-Methylbutanenitrile</i>	625-28-5	105,5	15,11	6,91	11,00	19,93	12,95	13,05			12,92	13,01	12,94	13,03
<b>ethyl mercaptan</b>	75-08-1	74,3	16,83	3,72	9,34	19,60			14,85	8,62	13,81	9,66	14,33	9,14
<b>Dimethyl sulfoxide</b>	67-68-5	71,3	20,09	9,14	15,22	26,81								
<b>Carbon disulfide</b>	75-15-0	60,0	22,16	0,28	1,02	22,19	30,60	1,70	28,45	3,13	29,91	1,67	29,65	2,17
<i>Dimethylformamide</i>	68-12-2	77,0	19,84	6,50	12,80	24,48								
<i>Nitrobenzene</i>	98-95-3	102,3	21,15	8,23	4,30	23,09	29,02	14,92	28,01	15,37	28,65	14,73	28,56	15,01
<b>furfural</b>	98-01-1	83,2	19,76	7,76	12,31	24,54					23,12	19,95	23,12	19,95
<b>Water</b>	7732-18-5	18,0	32,31	8,46	36,88	49,76								
<i>Phosphoryl chloride</i>	10025-87-3	91,3	17,77	5,09	9,00	20,56								
<b>Formamide</b>	75-12-7	39,8	25,33	11,38	26,70	38,53								
<i>Dimethyl acetamide</i>	127-19-5	92,5	17,51	7,76	12,39	22,81								
<i>N-Methyl acetamide</i>	79-16-3	84,0	19,09	7,88	16,76	26,59								

<i>Phenyl isothiocyanate</i>	103-72-0	119,8	18,80	5,25	7,80	21,02	26,17	15,33		25,58	14,98	25,88	15,15
<i>perfluorobutylamine</i>	311-89-7	356,2	14,73	2,06	6,00	16,04				10,84	5,46	10,84	5,46
<i>Perfluorodecalin</i>	306-94-5	238,6	14,92	0,23	0,57	14,94							
<i>Trifluoroethanol</i>	75-89-8	71,8	17,53	5,76	18,50	26,13							

### 8.3. ANEXO 3

CAPÍTULO 4. Determinação dos parâmetros de solubilidade da dispersão de nanopartículas de carbono usando o clássico Hansen e o novo método DiPEVa.

#### 8.3.1. TABELA 8.

**Tabela 8.** Solventes orgânicos, volume molar (V) e parâmetros de solubilidade de Hansen ( $\delta_D$ ,  $\delta_P$ ,  $\delta_H$ ) retirado do manual de parâmetros de solubilidade de Hansen [3]. A tensão superficial experimental foi retirada do estudo de Jasper [46]. Os parâmetros DiPEVa são retirados de estudos anteriores ou calculados para o presente estudo usando o método descrito [19].

Solventes	V (m <sup>3</sup> ·mol <sup>-1</sup> )	Parâmetros de solubilidade de Hansen [3]				DiPEVa's 3DSP[19], [34]				$\sigma_L$ 25 °C (mN·m <sup>-1</sup> )[46]
		$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	$\delta_T$ (MPa <sup>1/2</sup> )	$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	$\delta_T$ (MPa <sup>1/2</sup> )	
Hexane	131,40	14,90	0,00	0,00	14,90	15,63	0,24	0,86	15,65	17,89
Heptane	147,40	15,30	0,00	0,00	15,30	15,79	0,25	0,74	15,81	19,66
Diethyl ether	104,80	14,50	2,90	5,10	15,64	14,43	2,36	6,77	16,11	16,65
Butyl acetate	132,50	15,00	4,00	2,40	15,71	16,41	3,29	6,70	18,03	24,88
Dibutylamine	170,00	15,00	3,00	4,30	15,89	16,49	1,68	3,65	16,98	24,12
Butyl Acetate	132,50	15,00	3,70	6,30	16,68	16,41	3,29	6,70	18,03	24,88
Cyclohexane	108,70	16,80	0,00	0,20	16,80	17,34	0,29	0,73	17,36	24,65
Ethyl acetate	98,50	15,70	5,30	7,20	18,07	16,87	3,63	8,97	19,44	23,39
O-xylene	121,20	17,80	1,00	3,10	18,10	18,55	1,37	3,02	18,84	29,76

<b>Toluene</b>	106,80	18,00	1,40	2,00	18,16	18,71	0,94	2,36	18,88	27,93
<b>Methyl acetate</b>	79,70	15,50	7,20	7,60	18,70	17,67	3,80	9,87	20,60	24,72
<b>Methyl ethyl ketone</b>	90,10	16,00	9,00	5,10	19,05	15,54	5,76	10,43	19,58	24,18
<b>Tetrahydrofuran</b>	81,70	16,80	5,70	8,00	19,46	17,87	3,68	8,38	20,08	26,40
<b>Acetone</b>	74,00	15,50	10,40	7,00	19,94	15,14	6,58	11,99	20,40	23,03
<b>Diethylene glycol</b>	94,90	16,00	7,00	10,60	20,43	23,85	5,13	13,62	27,94	44,77
<b>Thiophene</b>	79,00	18,90	2,40	7,80	20,59	20,49	1,43	4,12	20,95	30,68
<b>1,2-dichlorethane</b>	79,40	19,00	7,40	4,10	20,80	19,39	3,35	7,59	21,09	31,86
<b>Ethylene glycol monobutyl ether</b>	131,60	16,00	5,10	12,30	20,82	18,22	3,64	9,45	20,85	26,14
<b>Pyridine</b>	80,90	19,00	8,80	5,90	21,75	21,82	4,91	1,84	22,44	36,56
<b>Acetic anhydride</b>	94,50	16,00	11,70	10,20	22,29	18,74	5,67	11,54	22,73	31,93
<b>Aniline</b>	91,50	19,40	5,10	10,00	22,41	22,40	3,31	7,82	23,95	42,12
<b>2-Methyl-1-propanol</b>	92,80	15,10	5,70	15,90	22,66	18,22	3,41	11,71	21,93	22,54
<b>2-propanol</b>	76,80	15,80	6,10	16,40	23,58	17,78	3,76	13,84	22,85	20,93
<b>Phenylmethanol</b>	103,60	18,40	6,30	13,70	23,79	22,16	3,44	8,47	23,97	39,96
<b>Acetonitrile</b>	52,60	15,30	18,00	6,10	24,40	15,80	10,48	16,37	25,05	27,40
<b>Dimethylformamide</b>	77,00	17,40	13,70	11,30	24,86	18,58	8,48	13,50	24,48	36,76
<b>Ethanol</b>	58,50	15,80	8,80	19,40	26,52	18,99	4,33	18,55	26,90	21,97
<b>Water</b>	18,00	18,10	12,90	15,50	27,10	32,31	8,46	36,88	49,76	71,99
<b>Methanol</b>	40,70	15,10	12,30	22,30	29,61	19,33	5,17	23,08	30,55	22,12
<b>Ethylene glycol</b>	55,80	17,00	11,00	26,00	32,95	26,49	6,30	21,70	34,82	47,99
<b>Chloroform</b>	80,20	17,80	3,10	5,70	18,95	18,70	2,41	6,50	19,94	27,32
<b>Dimethyl sulfoxide</b>	71,30	18,40	16,40	10,20	26,68	20,09	9,14	15,22	26,81	42,92



### 8.3.2. TABELA 9.

**Tabela 9.** Os fatores de dispersibilidade ( $D_i = 0, 1$ ), dispersíveis ou não, tensão superficial a 25 °C ( $\text{mN.m}^{-1}$ ), momento dipolar ( $\mu$ ), constante dielétrica experimental ( $\epsilon_r$ ), razão do número de coordenação ( $Z_s.Z^{-1}$ ) calculado a partir da Eq. [7], produto momento-volume dipolar ( $\mu.V^{-1}$ ) e constante dielétrica ao quadrado, ajustado pela razão entre o número de coordenação e o produto volume ao quadrado ( $\epsilon_r^{1/2}/(Z_s.Z^{-1}.V^{1/2})$ ).

Solvente	Fatores de dispersibilidade de nanopartículas ( $D_i = 0, 1$ )					$\sigma_L$ at 25 °C ( $\text{mN, m}^{-1}$ )	Momen to Dipolar ( $\mu$ )	$\epsilon_r, \text{exp}$	$Z_s, Z^{-1}$ calcul , Eq, [2]	$\mu, V^{-1}$	$\epsilon_r^{1/2}/(Z_s, Z^{-1}, V^{1/2})$
	Graphene oxide	Carbon nanotubes	Graphene nanoplatelets	CQDs (1)	CQDs (2)						
Hexane	0	0	0	0	0	17,89	0,00	1,89	0,121	0,00	0,99
Heptane	0	0	0	0	0	19,66	0,00	1,92	0,126	0,00	0,91
diethyl ether	0	0	1	1	0	16,65	1,15	4,27	0,115	0,11	1,76
butyl acetate	0	0	0	0	0	24,88	1,84	5,07	0,127	0,16	1,54
dibutylamine	0	1	1	0	0	24,12	0,98	2,77	0,128	0,08	1,00
butyl Acetate	0	1	0	0	0	24,88	1,84	5,07	0,127	0,16	1,54
cyclohexane	0	0	0	0	0	24,65	0,00	2,02	0,145	0,00	0,94
ethyl acetate	0	1	0	0	0	23,39	1,78	6,08	0,113	0,18	2,20
o-xylene	0	0	0	0	0	29,76	0,63	2,56	0,143	0,06	1,02

<b>Toluene</b>	0	0	0	1	0	27,93	0,36	2,38	0,139	0,03	1,07
<b>methyl acetate</b>	0	1	0	0	0	24,72	1,68	7,07	0,114	0,19	2,61
<b>methyl ethyl ketone</b>	0	0	0	1	0	24,18	2,77	18,56	0,119	0,29	3,82
<b>tetrahydrofuran</b>	0	1	1	1	0	26,40	1,63	7,52	0,127	0,18	2,38
<b>acetone</b>	0	0	0	1	0	23,03	2,89	21,01	0,111	0,34	4,79
<b>diethylene glycol</b>	0	0	0	1	0	44,77	2,53	31,82	0,106	0,26	5,45
<b>thiophene</b>	0	0	0	0	0	30,68	0,54	2,74	0,138	0,06	1,35
<b>1,2-dichlorethane</b>	0	0	0	0	0	31,86	1,44	10,42	0,141	0,16	2,57
<b>ethylene glycol monobutyl ether</b>	0	0	0	1	0	26,14	2,08	-	0,100	0,18	-
<b>pyridine</b>	0	0	1	1	1	36,56	2,20	13,26	0,142	0,24	2,86
<b>acetic anhydride</b>	0	1	0	1	0	31,93	2,79	22,45	0,115	0,29	4,25
<b>aniline</b>	0	0	0	0	1	42,12	1,53	7,06	0,138	0,16	2,02
<b>2-Methyl-1-propanol</b>	0	0	0	1	0	22,54	1,64	17,93	0,087	0,17	5,03
<b>2-propanol</b>	0	0	0	1	0	20,93	1,66	20,18	0,080	0,19	6,44
<b>phenylmethanol</b>	0	0	0	1	1	39,96	1,71	11,92	0,125	0,17	2,71
<b>acetonitrile</b>	0	0	0	1	0	27,40	3,93	36,64	0,098	0,54	8,48
<b>dimethylformamide</b>	0	1	1	1	1	36,76	3,81	38,25	0,122	0,43	5,79
<b>Ethanol</b>	0	0	0	1	0	21,97	1,69	25,30	0,066	0,22	9,96
<b>Water</b>	0	0	0	0	0	71,99	1,85	80,10	0,094	0,44	22,52
<b>Methanol</b>	0	0	0	1	0	22,12	1,70	33,00	0,058	0,27	15,48
<b>ethylene glycol</b>	0	0	0	0	0	47,99	2,41	41,10	0,087	0,32	9,81
<b>Chloroform</b>	1	0	0	0	0	27,32	1,01	4,81	0,135	0,11	1,82
<b>dimethyl sulfoxide</b>	1	1	1	1	1	42,92	3,96	47,24	0,122	0,47	6,69

### 8.3.3. TABELA 10.

**Tabela 10.** Esfera de dispersibilidade\* de Hansen, raio de interação ( $R_0$ ), DataFit e outliers (%) determinados pelo algoritmo genético para os métodos HSP e DiPEVa.

	<b>HSP</b>					<b>DiPEVa</b>							
	Centro da esfera			Raio de interação		Datafit	Outliers	Centro da esfera			Raio de interação		Datafit
	$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	$R_0$		(%)	$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	$R_0$		(%)	
<b>Nanopartículas</b>	19,96	11,79	10,15	6,40	0,83	9,4	20,87	11,20	7,14	8,29	0,95	9,4	
<b>Óxido de grafeno</b>	16,33	9,22	9,67	6,10	0,63	21,9	18,15	16,01	4,38	13,40	0,94	25,0	
<b>Nanotubos de carbono</b>	18,08	9,66	8,48	5,38	0,69	18,8	18,26	19,91	1,00	17,95	0,90	15,6	
<b>Nanoplaquetas de grafeno</b>	12,96	18,38	8,54	15,65	0,64	21,9	19,73	38,00	10,98	34,99	0,82	18,8	
<b>CQDs (1)</b>	18,93	10,75	10,28	5,58	1,00	0,0	21,31	11,25	7,47	8,61	1,00	3,1	
<b>CQD2 (2)</b>													

\* É calculado da mesma forma que a tradicional “esfera de solubilidade de Hansen”.

## 8.3.4. TABELA 11.

**Tabela 11.** Avaliação da dissolução de vários polímeros presentes em “Parâmetros de solubilidade de Hansen: um manual do usuário” em 86 solventes [3]. A avaliação da esfera de solubilidade e os parâmetros de ajuste dos solventes com a esfera foram realizados com o algoritmo evolutivo descrito anteriormente [4]. Centro da esfera, em parâmetros de solubilidade ( $\text{MPa}^{1/2}$ ), raio de interação da esfera ( $R_0$ ), valor DataFit e porcentagem de outliers (%).

Polímeros	Código	$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	$R_0$	DataFit	Outliers (%)
PMMA	B	20,40	18,31	1,27	16,63	0,875	25,6
Epoxy	C	22,29	23,28	1,00	22,96	0,777	24,4
PVC	F	20,87	11,63	5,96	8,42	0,913	16,3
PS	G	19,08	13,32	1,00	12,66	0,776	27,9
SBR	T	18,61	5,78	0,90	6,78	0,811	16,3
NBR	U	20,04	16,22	0,93	15,21	0,871	24,4
Polyisoprene	V	18,31	1,14	1,12	6,66	0,804	17,4
Polyisobutylene	X	18,20	0,85	5,88	6,63	0,786	22,1
BR	Y	18,77	0,86	1,00	6,90	0,816	16,3
Polyamide	Z	19,74	1,18	8,43	4,73	0,832	15,1
PCL 14k	14 <sub>a</sub>	19,92	6,07	6,84	6,91	0,502	34,5
PCL 14k	14 <sub>b</sub>	18,19	7,75	6,22	6,38	0,528	40,4
PCL 65k	65 <sub>a</sub>	20,00	8,25	6,82	7,27	0,537	32,1
PCL 65k	65 <sub>b</sub>	16,38	3,11	12,06	3,54	0,818	13,1

**Nota:** Identificação do polímero pelos códigos B: Poly (metil metacrilato), Rohm and Haas Co; C: Epikote® 1001-epoxi, Shell Chemical Co; F: Vipla KR-poli (cloreto de vinila), K = 50, Montecatini; G: Polistireno LG, Badische Anilin- und Soda Fabrik; T: Polysar 5630 — elastômero bruto de estireno-butadieno (SBR), Polymer Corp; U: Elastômero bruto Hycar® 1052-acrilonitrila-butadieno, B, F, Goodrich Chemical Corp; V: Cariflex IR 305-isoprene elastômero bruto, Shell Chemical Co; X: Lutanol IC/123-polisobutileno), Badische Anilin- und Soda Fabrik; Y: Buna Huls CB 10, cis-poli butadieno elastômero bruto, Chemische Werke Huels; Z: Versamid® 930-poliâmida, General Mills, Inc. Dissolução de PCL em 84 solventes por Bordes et al., 14k ou 64k de peso molecular. O subscrito a ou b corresponde a: a) 0,5 g PCL em 5mL de solvente, ou b) 2,5 g PCL em 5mL de solvente [92].