



OpenWBC: Programa de código abierto para calcular las correcciones de Washburn

Luis Alfredo Nuñez-Meneses¹, Julio M. Hernández-Pérez¹, J. M. Solano-Altamirano¹
Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla,
14 Sur y Av. San Claudio, Col. San Manuel, 72530 Puebla, México
e-mail: luis.alfredo.nu@gmail.com

Las correcciones de Washburn constituyen una serie de consideraciones fisicoquímicas que se llevan a cabo durante la estimación de algunas propiedades termodinámicas en condiciones estándar, cuando se tienen datos experimentales en diferentes condiciones de temperatura y presión [1]. Esta serie de pasos se utiliza comúnmente, y casi en calidad de método obligatorio, para reportar valores experimentales de energías y entalpías de combustión.

En este trabajo presentamos OpenWBC, el cual es un programa que realiza las correcciones de Washburn, a partir de la interacción con el usuario mediante una interfaz gráfica. La aplicación tiene como público objetivo a la comunidad de termoquímicos experimentales y constituye un intento para proveer una herramienta accesible y multiplataforma para uso común y, con fortuna, de referencia (benchmark). También nos servirá, localmente, de punto de partida para intentar mejorar el método en sí. Es decir, idealmente nos permitirá proponer mejoras a las correcciones de Washburn para casos especiales. Por ejemplo, en la última versión, incluimos métodos numéricos para interpolar algunos de los datos que se obtienen de tablas experimentales y que se utilizan durante el cómputo de las correcciones.

OpenWBC está desarrollado en C++ junto con Qt (para la interfaz gráfica), y al seguir la ideología de OpenSource, permite que el proyecto pudiera incluir posteriormente a nuevos desarrolladores de otras instituciones. Actualmente el programa puede ejecutarse en Linux, MacOSX y Windows y, como resultado del diseño con programación orientada a objetos, se tienen versiones disponibles con interfaz gráfica y desde línea de comando.

[1] Cox, J.D.; Pilcher, G., Thermochemistry of Organic and Organometallic Compounds, Academic Press, New York, 1970, 1-636.