



Estudio in silico, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “desasfaltado” con énfasis en las estructuras químicas individuales para cada flujo, y el análisis de sus propiedades fisicoquímicas intrínsecas, configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intermoleculares entre sí

Jácome Shigui, Juan Andrés y Sánchez Morales, Rafael Eduardo

Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

Trabajo de Unidad de Integración Curricular, previo a la obtención del título de
Petroquímico

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio, Ph.D.

12 de abril del 2021



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
CARRERA DE PETROQUÍMICA

CERTIFICACIÓN

Certifico que el trabajo de la Unidad de Integración Curricular, ***“Estudio in silico, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “Desasfaltado” con énfasis en las estructuras químicas individuales para cada flujo, y el análisis de sus propiedades fisicoquímicas intrínsecas, configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intermoleculares entre sí”*** fue realizado por los señores Jácome Shigui, Juan Andrés y Sánchez Morales, Rafael Eduardo, el mismo que ha sido revisado en su totalidad, analizado por la herramienta de verificación de similitud de contenido; por lo tanto, cumple con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que lo sustente públicamente.

Latacunga, abril de 2021.



Firmado electrónicamente por:

FABIAN
MAURICIO
SANTANA ROMO

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio, Ph.D.

C.C.:180292513-9

Análisis Urkund



Document Information

Analyzed document	Proyecto_UIC_Desasfaltado.pdf (D101194156)
Submitted	4/10/2021 3:39:00 PM
Submitted by	Fabián Santana
Submitter email	fmsantana@espe.edu.ec
Similarity	2%
Analysis address	fmsantana.espe@analysis.orkund.com



Firmado electrónicamente por:
**FABIAN
 MAURICIO
 SANTANA ROMO**

Sources included in the report

SA	Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE / tesis_Santiago_Clavijo-ok_final.pdf Document tesis_Santiago_Clavijo-ok_final.pdf (D54170097) Submitted by: edluna@espe.edu.ec Receiver: edluna.espe@analysis.orkund.com		1
SA	1574179201_161__Quimica_la_Ciencia_Central_Capitulo_11.pdf Document 1574179201_161__Quimica_la_Ciencia_Central_Capitulo_11.pdf (D59548693)		3
W	URL: https://core.ac.uk/download/pdf/77278413.pdf Fetched: 1/22/2021 9:24:39 PM		2
SA	TFGEQ_2008_xbalague.pdf Document TFGEQ_2008_xbalague.pdf (D75748183)		2
W	URL: https://doi.org/10.2118/994-PA Fetched: 4/10/2021 3:40:00 PM		1
W	URL: https://www.theses.fr/2012PAUU3008.pdf Fetched: 3/9/2020 11:19:19 PM		1
W	URL: https://eciencia.urjc.es/bitstream/handle/10115/5558/08-09_D%C3%ADez%2CGal%C3%A1n_ ... Fetched: 7/5/2020 10:33:00 PM		1



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE PETROQUÍMICA

RESPONSABILIDAD DE AUTORÍA

Nosotros, Jácome Shigui, Juan Andrés y Sánchez Morales, Rafael Eduardo con cédulas de ciudadanía 0503640021, 0503470379, declaramos que el contenido, ideas y criterios del trabajo de la Unidad de Integración Curricular: “Estudio in silico, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “Desasfaltado” con énfasis en las estructuras químicas individuales para cada flujo, y el análisis de sus propiedades fisicoquímicas intrínsecas, configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intermoleculares entre sí” es de nuestra autoría y responsabilidad, cumpliendo con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, respetando los derechos intelectuales de terceros y referenciando las citas bibliográficas.

Latacunga, abril de 2021.

Jácome Shigui, Juan Andrés

C.C.: 0503640021

Sánchez Morales, Rafael Eduardo

C.C.:0503470379



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
CARRERA DE PETROQUÍMICA

AUTORIZACIÓN DE PUBLICACIÓN

Nosotros, Jácome Shigui, Juan Andrés y Sánchez Morales, Rafael Eduardo con cédulas de ciudadanía 0503640021, 0503470379 autorizamos a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el trabajo de la Unidad de Integración Curricular: Estudio in sillico, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “Desasfaltado” con énfasis en las estructuras químicas individuales para cada flujo, y el análisis de sus propiedades fisicoquímicas intrínsecas, configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intermoleculares entre sí: en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de nuestra autoría y de nuestra responsabilidad.

Latacunga, abril de 2021.

Jácome Shigui, Juan Andrés

C.C.: 0503640021

Sánchez Morales, Rafael Eduardo

C.C.:0503470379

DEDICATORIA

A nuestros padres y entrañados familiares quienes con su compañía e interés nos dan valor para continuar y servir al prójimo.

A mis queridos docentes de la Unidad Educativa “Hermano Miguel”, quienes con el ejemplo plasmaron en cada uno de sus alumnos el deseo de ser mejor cada día.

“Ser más para servir mejor”; con mi corazón henchido de alegría, Rafael.

A Dios, a mi madre Elisa Shigui, a mi abuelito Fernando Shigui, a mis hermanos, que me apoyaron y me alentaron en todo momento durante mis estudios, Juan Andrés.

AGRADECIMIENTO

Queremos expresar nuestro profundo agradecimiento al Doctor Fabián Santana por su interés, apoyo y motivación para con nosotros al dirigir este proyecto, viendo en él valores nos impulsan a seguir en adelante en el maravilloso camino de la ingeniería.

Agradecer además la dedicación mostrada por cada uno de los docentes de la carrera de Ingeniería Petroquímica para con nosotros como estudiantes fortaleciendo los valores fundamentales de la persona dentro y fuera de las aulas, a todos ustedes muchas gracias.

Rafael Eduardo

Agradezco a Dios por darme la vida y la confianza para realizar este trabajo, a mi madre por ser la persona que siempre me brinda su apoyo para que pueda cumplir con éxito esta etapa de mi vida, a mis hermanos por todo el cariño y comprensión que me brindan y de igual manera a mis amigos por su apoyo y ánimo y apoyo incondicional

Juan Andrés

Tabla de Contenido

Carátula	1
Certificación	2
Análisis Urkund	3
Responsabilidad de autoría	4
Autorización de publicación	5
Dedicatoria	6
Agradecimiento	7
Tabla de Contenido.....	8
Índice de Tablas.....	11
Índice de Figuras	15
Resumen.....	17
Abstract.....	18
Generalidades.....	19
Introducción	19
Antecedentes	19
Planteamiento del problema	20
Justificación e Importancia.....	21
Objetivos	22
<i>Objetivo General</i>	22
<i>Objetivos Específicos</i>	22
Variables de investigación	23

Variables independientes	23
Variables dependientes	23
Hipótesis	23
Fundamentación Teórica	24
Los Asfaltenos.....	24
Deposición de asfaltenos	27
Una práctica solución en el campo Hassi Messaoud, Algeria	28
Propiedades Fisicoquímicas del crudo de Oriente.....	30
Clasificación del aceite residual.....	32
Desasfaltado con disolventes (SDA).....	33
Especificaciones del proceso de desasfaltado por propano	34
Moléculas presentes en las corrientes de la unidad de desasfaltado	37
El proceso ROSE	38
<i>Costos de operación del proceso ROSE</i>	<i>39</i>
<i>El proceso de desasfaltado convencional frente al proceso ROSE</i>	<i>40</i>
<i>El proceso de desasfaltado en el campo de la invención.....</i>	<i>42</i>
<i>Tensión superficial del disolvente (n-heptano).....</i>	<i>44</i>
<i>Aceite desasfaltado por medio de GLP</i>	<i>45</i>
<i>SwissParam: Una herramienta de generación de campos de fuerza</i>	<i>46</i>
<i>MMFF94 frente a la simulación de sistemas de fase condensada</i>	<i>47</i>
Metodología	51

	10
Caracterización del crudo ecuatoriano, Aspen Hysys V10	51
Obtención de propiedades básicas	52
Cálculo de las estructuras 3D	56
Obtención de la geometría de Angstrom	59
Obtención de la molécula en 3D optimizada por medio de Chemcraft	60
Cálculo de las propiedades fisicoquímicas	62
Resultados y discusión	64
Conclusiones y recomendaciones	113
Conclusiones	113
Recomendaciones	115
Abreviaturas	116
Bibliografía	117
Anexos	120

Índice de Tablas

Tabla 1 Propiedades fisicoquímicas del crudo de Oriente.	30
Tabla 2 Rendimiento y propiedades del desasfaltado por propano	36
Tabla 3 Condiciones de operación de desasfaltado por propano	36
Tabla 4 Composición de la precipitación de asfaltenos.....	37
Tabla 5 Energías (kcal/mol) y densidades (g cm ⁻³) calculadas.	49
Tabla 6 Cp's (cal/mol K) y k (10 ⁻⁶ atm ⁻¹) calculadas.	50
Tabla 7 Alquilbencenos.....	66
Tabla 8 Alquilnaftalenos.	66
Tabla 9 Benzotiofenos.	66
Tabla 10 Hidrocarburos alifáticos	67
Tabla 11 Molécula N° 1. tolueno.....	68
Tabla 12 Molécula N° 2. o-Xileno.	68
Tabla 13 Molécula N° 5. etilbenceno.	69
Tabla 14 Molécula N° 6. isopropilbenceno.	69
Tabla 15 Molécula N° 8. naftaleno.....	70
Tabla 16 Molécula N°16. 2,7-dimetilnaftaleno.	70
Tabla 17 Molécula N°22. 2,3,6-Trimetilnaftaleno.	71
Tabla 18 Molécula N°23. tiofano.	71
Tabla 19 Molécula N°26. metil-3,4,5-trimetil-2-sulfuro de tienilo.....	72
Tabla 20 Molécula N°29. tiofeno.....	72
Tabla 21 Molécula N°33. naftenodibenzotiofeno.....	73

Tabla 22 Molécula N°38. fenantrotiofeno.....	73
Tabla 23 Molécula N°43. fenantreno.	74
Tabla 24 Molécula N°44. criseno.	74
Tabla 25 Molécula N°49. 2-metilpropano	75
Tabla 26 Molécula N°56. 2,3-dimetilbutano.	75
Tabla 27 Molécula N°59. 2-metilhexano.....	76
Tabla 28 Molécula N°62. 2,2,3-trimetilpentano	76
Tabla 29 Molécula N° 1. tolueno.....	77
Tabla 30 Molécula N° 2. o-Xileno.	78
Tabla 31 Molécula N° 5. etilbenceno.	79
Tabla 32 Molécula N° 6. isopropilbenceno.	80
Tabla 33 Molécula N° 8. naftaleno.....	81
Tabla 34 Molécula N°16. 2,7-dimetilnaftaleno.	82
Tabla 35 Molécula N° 22. 2,3,6-trimetilnaftaleno	83
Tabla 36 Molécula N° 23. tiofano	84
Tabla 37 Molécula N°26. 2,3,4-trimetil-5-(metiltio)tiofeno	85
Tabla 38 Molécula N°29. tiofeno	86
Tabla 39 Molécula N°33. naftenodibenzotiofeno	87
Tabla 40 Molécula N°38. fenantrotiofeno.....	88
Tabla 41 Molécula N° 43. fenantreno	89
Tabla 42 Molécula N°44. criseno	90

Tabla 43 Molécula N°49 2-metilpropano.....	91
Tabla 44 Molécula N°56. 2,3-dimetilbutano	92
Tabla 45 Molécula N° 59. 2-metilhexano	93
Tabla 46 Molécula N°62. 2,2,3-trimetilpentano.....	94
Tabla 47 Molécula N°1. tolueno.....	95
Tabla 48 Molécula N° 2. o-Xileno.	96
Tabla 49 Molécula N° 5. etilbenceno.	97
Tabla 50 Molécula N° 6. isopropilbenceno.	98
Tabla 51 Molécula N° 8. naftaleno.....	99
Tabla 52 Molécula N° 16. 2,7-dimetilnaftaleno.	100
Tabla 53 Molécula N° 22. 2,3,6-trimetilnaftaleno	101
Tabla 54 Molécula N° 23. tiofano.....	102
Tabla 55 Molécula N° 26. 2,3,4-trimetil-5-(metiltio)tiofeno.	103
Tabla 56 Molécula N° 29. tiofeno.....	104
Tabla 57 Molécula N° 33. naftenodibenzotiofeno.	105
Tabla 58 Molécula N° 38. fenantrotiofeno.	106
Tabla 59 Molécula N° 43. fenantreno.	107
Tabla 60 Molécula N° 44. criseno.....	108
Tabla 61 Molécula N° 49. 2-metilpropano.	109
Tabla 62 Molécula N° 56. 2,3-dimetilbutano,.....	110
Tabla 63 Molécula N° 59. 2-metilhexano.....	111

Tabla 64 Molécula N° 62 2,2,3-trimetilpentano.	112
---	-----

Índice de Figuras

Figura 1 Descomposición de los asfaltenos por colisión con el gas helio	25
Figura 2 Modelado de la molécula de asfaltenos	25
Figura 3 Asfaltenos residuales	26
Figura 4 Región envolvente de la deposición de asfaltenos	28
Figura 5 Método simplificado de fraccionamiento de petróleo	33
Figura 6 Desasfaltado por propano	34
Figura 7 Isoterma del desasfaltado convencional	40
Figura 8 Isoterma del desasfaltado por el método ROSE	41
Figura 9 Crudo de Oriente, Aspen Hysys	51
Figura 10 Convertir el nombre de la molécula a estructura	52
Figura 11 Ingreso del nombre de la molécula	53
Figura 12 Dibujo de la molécula de Cumeno.....	54
Figura 13 Análisis de las propiedades generales de la molécula.....	54
Figura 14 Molécula en la extensión .mol	55
Figura 15 Archivo .mol en Avogadro.....	56
Figura 16 Construcción de la geometría 3D en Avogadro.....	56
Figura 17 Isopropilbenceno sin optimizar su energía de conformación	57
Figura 18 Auto optimización	57
Figura 19 Selección del campo de fuerza	58
Figura 20 Guardar el archivo .mol optimizada.....	58
Figura 21 La opción Gamess-UK y las direcciones 3D	59

Figura 22 Geometría Angstrom	59
Figura 23 Abrir el fichero .mol optimizada en Chemcraft	60
Figura 24 Selección de la vista #3.....	60
Figura 25 Molécula optimizada en 3D.	61
Figura 26 Código SMILES en SwissADME	62
Figura 27 Propiedades fisicoquímicas en SwissADME	63

Resumen

El estudio in silico computacional de los componentes orgánicos de la unidad de desasfaltado adquiere importancia en los campos de la ciencia moderna al acercarse al modelamiento de su comportamiento, evitando incluso la extracción de los petróleos crudos más pesados apoyados en el fundamento del craqueo catalítico, viscorreducción entre otros, logrando así disminuir los problemas ocasionados por la floculación y sedimentación de los asfaltenos. La incertidumbre ocasionada por el desconocimiento de la composición de las corrientes asfálticas ha impedido que se disponga de un enfoque que normalice los parámetros del posible comportamiento de las moléculas orgánicas inmersas en el proceso de desasfaltado por disolventes sin embargo, muchos son los estudios que abalan una ciencia predictiva en desarrollo basados en los campos de fuerza, el modelo Yen-Mullins y su representación gráfica, viéndose apoyados en la química analítica en el campo de la espectroscopia de masas de resonancia de ciclotrón iónico por medio de la transformada de Fourier (FT-ICR MS) que ha logrado proporcionar una composición de hasta 100.000 componentes de petróleo crudo. La caracterización del crudo ecuatoriano de oriente ha permitido conocer la proporción en que se encuentran los componentes saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos mediante el análisis en laboratorio basados en la norma ASTM D4124, más aún en simuladores como Aspen Hysys que gracias a sus bases de datos es posible conocer las propiedades fisicoquímicas de este crudo al punto que sean un referente en investigaciones en desarrollo y apoyen iniciativas de investigación en laboratorio.

Palabras clave:

- **MECÁNICA MOLECULAR**
- **QUÍMICA COMPUTACIONAL**
- **DESASFALTADO DE CRUDO PESADO**

Abstract

The computational in silico study of the organic components of the deasphalting unit acquires importance in the fields of modern science by approaching the modeling of their behavior, even avoiding the extraction of the heaviest crude oils supported on the basis of catalytic cracking, viscoreduction among others, thus reducing the problems caused by flocculation and sedimentation of asphaltenes. The uncertainty caused by the lack of knowledge of the composition of the asphaltic streams has prevented the availability of an approach that normalizes the parameters of the possible behavior of the organic molecules immersed in the process of deasphalting by solvents, however, there are many studies that support the idea that the asphaltenes are not asphaltenes, many are the studies that support a developing predictive science based on force fields, the Yen-Mullins model and its graphical representation, supported by analytical chemistry in the field of Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectroscopy (FT-ICR MS) that has been able to provide a composition of up to 100.000 crude oil components. The characterization of Ecuadorian crude oil from the east has allowed to know the proportion of saturated components, aromatics, resins and asphaltenes through laboratory analysis based on the ASTM D4124 standard, even more in simulators such as Aspen Hysys that thanks to its databases it is possible to know the physicochemical properties of this crude to the point that they are a reference in research in development and support laboratory research initiatives.

Keywords:

- **MOLECULAR MECHANICS**
- **COMPUTATIONAL CHEMISTRY**
- **HEAVY CRUDE OIL DEASPHALTING**

CAPÍTULO I

Generalidades

1. Introducción

1.1 Antecedentes

Los problemas que surgen de la presencia de asfaltenos han aumentado debido a la necesidad de extraer incluso los componentes de crudo más pesados, así como la tendencia a extraer grandes cantidades de fracciones ligeras del petróleo mediante craqueo y viscorreducción, ejemplos de dichos problemas son: el taponamiento de pozos y deposición de tuberías durante las operaciones de recuperación y transporte, la contaminación del agua durante el almacenamiento en la boca del pozo y en la tubería puede conducir a la formación de emulsiones debido a que los constituyentes de los asfaltenos son muy polares y tensoactivos. (Mohamed, Al-Sahhaf, & Elkilani, 2010)

Los constituyentes de asfaltenos térmicamente degradados son más aromáticos y menos solubles y aparecen como sedimentos durante los procesos de viscorreducción y craqueo. Un alto contenido de componentes asfalténicos ($\geq 6\%$) en el fueloil a menudo provoca un retraso en la ignición y una combustión deficiente que conduce a la contaminación de la caldera, la transferencia de calor disminuido, las emisiones de partículas en la chimenea y la corrosión.

Por medio del proceso de desasfaltado de los fondos de vacío se producen crudos sintéticos. Si se parte de fondos de vacío parafínicos, el producto que se obtiene se denomina DAO y a partir de él se fabrica la base parafínica denominada bright stock. Cuando el fondo de vacío corresponde a un crudo mezcla, el producto se denomina DMO y se emplea, previo tratamiento con hidrógeno, para la producción de gasolinas. El desasfaltado

se realiza a contracorriente en columnas de extracción líquido-líquido o en mezcladores decantadores.

El desasfaltado es un proceso de refinación para la extracción de asfaltenos y resinas de residuos atmosféricos o fondos de vacío, para producir aceite desasfaltado y desmineralizado. El proceso de desasfaltado genera una fracción de asfaltenos y una fracción de aceite desasfaltado esencialmente libre de asfaltenos que está lista para refinado adicional y la fracción de disolvente que puede ser recuperada y reciclada como solvente de extracción. (Adams, 2014)

1.2 Planteamiento del problema

En la actualidad, los procesos de refinación de petróleo mantienen a la conversión del crudo pesado en aceites y productos finales mucho más útiles como uno de los principales pilares en la producción de tecnología de vanguardia, sin embargo, el desconocimiento de los componentes orgánicos presentes en la entrada y salida del proceso de desasfaltado por solvente presenta problemas de procesamiento debido a la presencia de sales, metales y ácidos orgánicos extremadamente viscosos

Al aun considerar la composición del asfalteno como hipotético, y desconocer la fracción insoluble que varía dependiendo de la fuente Hidrocarburífera, es necesario indagar las propiedades fisicoquímicas de sus componentes conocidos y delinear el posible comportamiento de los componentes hipotéticos generados a partir de los fundamentos de la química computacional.

Si bien la unidad de desasfaltado es la encargada de la eliminación de los materiales asfálticos del crudo reducido proveniente de la destilación al vacío, es fundamental la caracterización del crudo ecuatoriano por medio del análisis SARA ayudado de la norma ASTM D4124 que permite determinar el contenido de aromáticos saturados, resinas y

asfaltenos en el petróleo, sus cortes pesados y residuos siendo esta información de gran utilidad para el diseño y operatividad de las refinerías.

El crudo de oriente Auca por ejemplo, se caracteriza por sus 24° API, 19% de asfaltenos y 11% más de resinas II respectivamente en comparación con los crudos de Sacha Central y Coca Paraíso, demostrando así su mayor peso molecular de alrededor de 2740.509 g/mol (Clavijo, 2019)

1.3 Justificación e Importancia

Los problemas que surgen del desconocimiento de los constituyentes asfálticos han aumentado debido a la necesidad de extraer incluso los petróleos crudos más pesados y sus fracciones ligeras, mediante craqueo catalítico, viscorreducción entre otros; entre los problemas surgidos de la floculación y sedimentación de los asfaltenos están: taponamiento de pozos, deposición de tuberías, contaminación de agua y al ser térmicamente degradados son más aromáticos de menor solubilidad apareciendo como sedimentos en el proceso de refinado de crudo.

La tendencia de los constituyentes de los asfaltenos a que hacen variar el parámetro de la solubilidad del hidrocarburo está relacionada con la aromaticidad y polaridad de dichos componentes en mayor proporción que con el tamaño o dimensiones moleculares, es así que al conocer su composición es posible predecir el comportamiento global en una mezcla respecto a las propiedades fisicoquímicas disponibles en *SwissADME*, capaz de generar para una molécula pequeña parámetros basados en el campo de fuerza *Merckmolecular*.

Las incertidumbres fundamentales respecto a la composición de las corrientes asfálticas han impedido un enfoque que normalice los primeros parámetros del posible comportamiento de los asfaltenos hasta ahora que por medio del modelo Yen modificado (Yen – Mullins) desarrolla una ciencia predictiva de los asfaltenos apoyada de la química

analítica en el campo de la espectroscopia de masas de resonancia de ciclotrón iónico por transformada de Fourier (FT-ICR MS) ha revolucionado el análisis petrolero al proporcionar una composición elemental explícita de hasta 100.000 componentes del petróleo crudo, dejando un nuevo futuro para la investigación in silico computacional en lo que a temas de composición y comportamiento del crudo se refiere. (Mullins, 2011).

1.4 Objetivos

1.4.1 Objetivo General

Determinar computacionalmente las características fisicoquímicas de todos los posibles componentes químicos de los flujos de entrada y salida en una refinería de petróleo “proceso de desasfaltado” mediante cálculos teóricos computacionales.

1.4.2 Objetivos Específicos

- Establecer una lista de potenciales moléculas químicas de origen orgánico presentes en el flujo de entrada en el proceso de desasfaltado.
- Establecer una lista de potenciales moléculas químicas de origen orgánico presentes en el flujo de salida en el proceso de desasfaltado.
- Procesar cada una de las moléculas químicas de origen orgánico, desde su nomenclatura, estructura química 2D, código SMILES y reporte de propiedades básicas como fórmula, peso molecular y composición elemental.
- Calcular las propiedades fisicoquímicas básicas de cada molécula de origen orgánico, mediante la plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME.

- Calcular las estructuras 3D de cada una de las moléculas orgánicas, mediante el software Avogadro, para la obtención de las configuraciones y conformaciones finales.
- Reportar mediante tablas los datos obtenidos para cada molécula química procesada en los pasos anteriores.

1.5 Variables de investigación

1.5.1 Variables independientes

Campo de Fuerza MMFF94

1.5.2 Variables dependientes

Propiedades fisicoquímicas de los hidrocarburos aromáticos policíclicos asfálticos dependientes de SwissADME y este a su vez del campo de Fuerza MMFF94.

1.6 Hipótesis

El estudio *in silico* de moléculas orgánicas presentes en los flujos de entrada y salida del proceso de “desasfaltado” en una refinería de petróleo proveerá información importante acerca de las configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intermoleculares que pueden presentar en mezcla, proyectando así propiedades globales como: puntos ebullición, volatilidad; y será evaluado por simulaciones computacionales de propiedades fisicoquímicas y energéticas, generando el nexo entre la teoría química aplicada y los experimentos medibles *in situ*.

CAPÍTULO II

2. Fundamentación Teórica

2.1 Los Asfaltenos

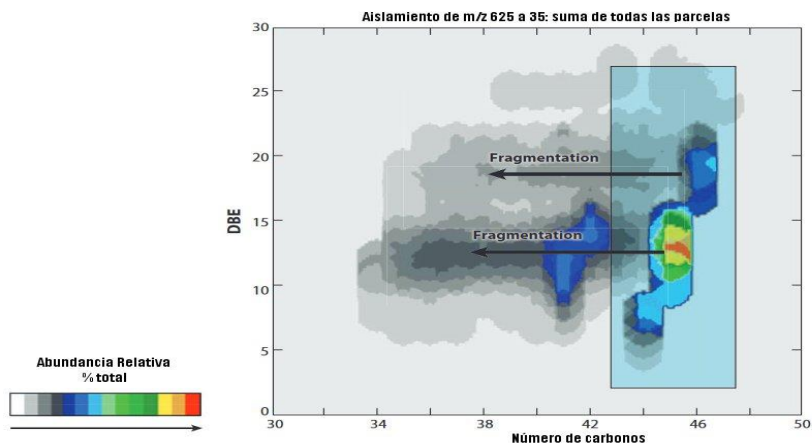
Los asfaltenos se definen como la parte soluble en BTX, más polarizable del crudo y sin un punto de fusión determinado en un enfoque técnico de solubilidad Fig. 1 sin embargo, la obtención de imágenes moleculares directas de las moléculas de asfaltenos mediante microscopía de barrido en túnel ha establecido que los hidrocarburos aromáticos policíclicos asfálticos (PAHs) tienen aproximadamente siete anillos fusionados clasificados en las tipologías “Isla” y “Archipiélago” de la figura 2, con atributos cruciales a la hora de definir la alta viscosidad, estabilidad de la emulsión y rendimiento de los destilados que se ve disminuido por la inapropiada separación de fases (Mullins, 2011).

La figura 1 muestra los resultados de un experimento en el que se utilizó la EM FT-ICR para analizar la descomposición molecular de los asfaltenos por colisión con el gas helio, en esta figura se representan fragmentos de alcanos, en lugar de alcanos con algún carbono aromático en el modelo de isla como referente al modelo de archipiélago.

Dentro del estudio de los asfaltenos insolubles en hidrocarburos ligeros el método de análisis SARA es el más común de identificación de los compuestos saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos de la base de petróleo crudo por medio de la norma petrolera IP-143 en donde se lleva a cabo una dilución de 40cm^3 de alcano por un gramo de aceite separando además el sobrenadante denominado malteno por medio de HPLC dejando un residuo que se lo observa en la Figura 3. (Seitmaganbetov, 2020).

Figura 1

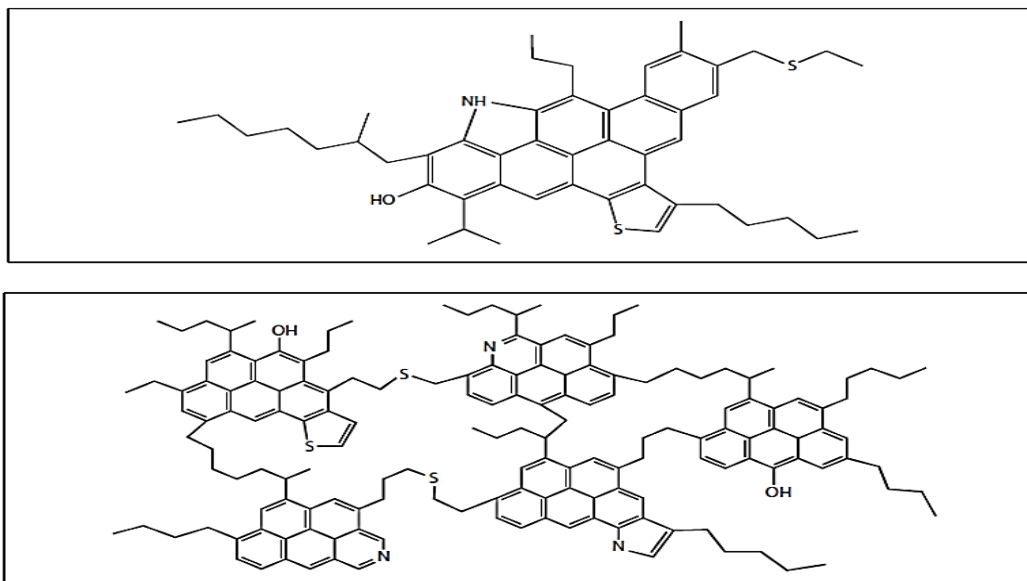
Descomposición de los asfaltenos por colisión con el gas helio



Nota. El gráfico permite observar una mayor abundancia en 44 carbonos. Tomado de Seitmaganbetov, 2020.

Figura 2

Modelado de la molécula de asfaltenos



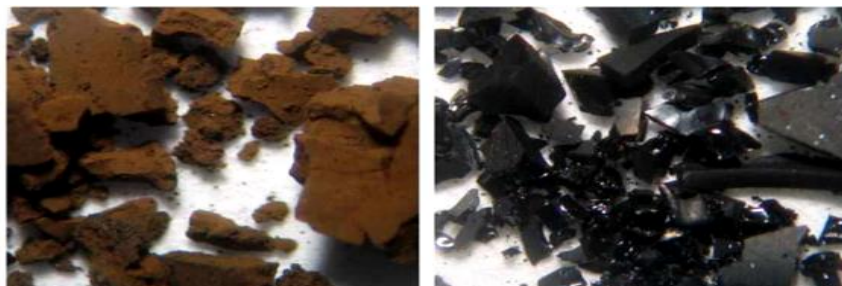
Nota. El modelo de isla y archipiélago de los asfaltenos. Tomado de Seitmaganbetov, 2020.

Respecto al estudio de los asfaltenos insolubles en hidrocarburos ligeros el método de análisis SARA es el más común de identificación de las compuestos saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos de la base de petróleo crudo por medio de la norma petrolera IP-143 en donde se lleva a cabo una dilución de 40cm^3 de alcano por un gramo de aceite separando además el sobrenadante denominado malteno por medio de HPLC dejando un residuo que se lo observa en la Figura 3. (Seitmaganbetov, 2020).

Por otro lado, el residuo proveniente de la columna de destilación entra en contacto con una dilución de alcanos ligeros y acetato de etilo en donde se consigue dos corrientes: asfaltenos y maltenos, este último que por medio de una columna de alúmina para cromatografía y dependiendo del disolvente a utilizar es posible extraer compuestos saturados, aromáticos y resinas con n-hexano, tolueno y metanol en una dilución con cloruro de metileno. Caso particular es la extracción de mono aromáticos, di aromáticos y poliaromáticos por medio de una columna de sílice para cromatografía al utilizar disolventes como n-pentano: benceno (95:05), (85:15) y benceno respectivamente (El-Bassoussi, Ahmed, Sayed, Basta, & Attia, 2010).

Figura 3

Asfaltenos residuales



Nota. Residuo del proceso de desasfaltado por $n\text{C}_5$ y $n\text{C}_7$. Tomado de Seitmaganbetov, 2020.

2.2 Deposición de asfaltenos

Incluso aquellos crudos que tienen poco contenido de asfaltenos son sujetos de graves daños deposicionales generando pérdidas económicas debido a la disminución de la producción o incluso el cese de las mismas relacionados con el bloque de los poros de la roca por depósitos y reducción de la permeabilidad en la zona cercana al pozo (Seitmaganbetov, 2020).

Un claro ejemplo respecto al potencial problema que se puede ocasionar, surgió en el yacimiento de los Prinos en el Mar Egeo septentrional en Julio de 1981, donde la deposición de asfaltenos produjo en la tubería como en los equipos de superficie un riesgo para la viabilidad del proyecto desde el primer día de su operación en que se observaron depósitos de asfalto en la tubería, separadores, bombas y coladores entre otros lugares.

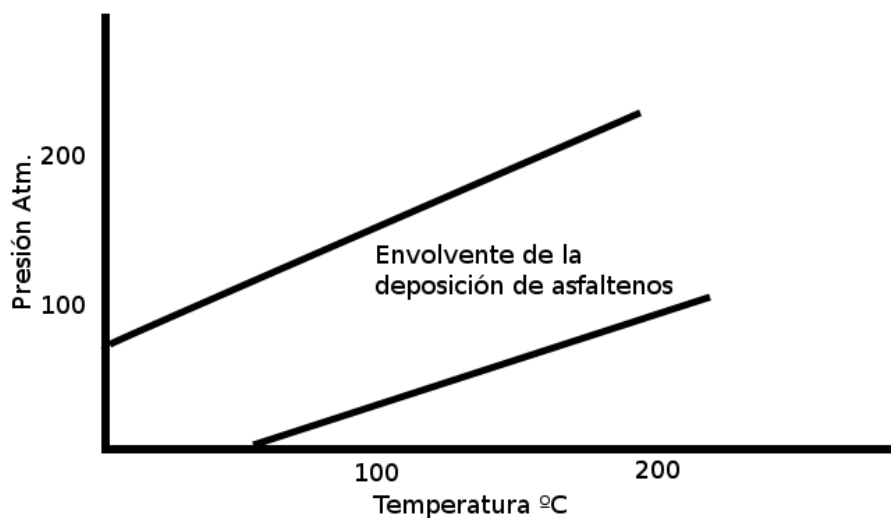
Las medidas que acertadamente tomo la empresa para evitar este problema y evitar que se termine el proyecto fueron: utilizar una segunda tubería con el fin de inyectar disolventes en favor de aumentar la circulación y evitar los taponamientos al igual que utilizar una segunda serie de tuberías para cumplir con los requerimientos de producción, mientras el primer conjunto se cerraba para mantenimiento, todo esto sucedía con un crudo caracterizado por 28°API y un 4.5% de asfaltenos en peso, con un alto contenido de Ácido Sulfhídrico (35.64%) en mol (Leontaritis & Ali Mansoori, 1988)

Se realizó un arduo trabajo de laboratorio con el fin de desarrollar métodos de producción de disolventes especiales para combatir el problema generado construyendo la Fig. 4 que indica los rangos de temperatura y presión en los que el crudo del yacimiento de pinos floclula los compuestos asfálticos, mientras que el xileno fue el disolvente usado en

estimulaciones de pozos, inhibición y limpieza de asfalto ayudando a minimizar la deposición de asfaltenos.

Figura 4

Región envolvente de la deposición de asfaltenos



Nota. Datos representativos del Campo de Prinos. Tomado de Leontaritis & Ali Mansoori, 1988.

2.3 Una práctica solución en el campo Hassi Messaoud, Algeria

El yacimiento de Hassi Messaoud en Argelia tiene su formación productora en la arenisca del Cámbrico a una profundidad de 11.000 pies, con una zona productiva que varía de 100 a 300 pies de grosor, cubriendo un área de aproximadamente 600 millas cuadradas. La presión original del yacimiento era de 6.825 psi, y el punto de burbuja del crudo varía entre 2800 psi y 2130 psi en un recorrido este-oeste. El petróleo es un crudo de base intermedia según los estándares del Bureau of Miles, de 42.3° API, extremadamente rico en gasolinas (40% en peso) y de color verde claro.

El contenido de asfaltenos según el método de Louis es de 500mg/litro de aceite de tanque. Hay tres tamaños de tubería para la terminación: tubería de 2 7/5 pulgada para pozos que producen menos de 2400 BOPD, tubería de 3 1/2 pulgadas para 2400 a 4800 BOPD y tubería de 4 1/2 pulgadas para pozos que fluyen más de 4800 BOPD. La tubería se coloca justo por encima de la formación, que se completa a pozo abierto.

La deposición de asfaltenos en la tubería de Hassi Messaoud no se produce después de que la presión caiga por debajo del punto de burbuja, y los depósitos depositados previamente son repetidos por el crudo bifásico. La deposición inicial se produce rápidamente, pero el proceso se vuelve más lento con el tiempo, dando lugar a una línea recta cuando se traza la presión contra el logaritmo del tiempo.

El punto de la tubería más propicio para la deposición se encuentra justo cuando la temperatura se sitúa debajo del punto de burbuja. El depósito termina antes del fondo del tubo, lo que indica que deben cumplirse ciertas condiciones (desconocidas) de presión y temperatura (y quizás de tiempo de tránsito y grado de turbulencia) antes de que pueda comenzar el depósito.

Estas condiciones conducen a un depósito que adopta la forma de un estrangulamiento cónico, que alcanza una forma estable dependiendo de las condiciones de velocidad de flujo y temperatura. Si se consigue que se acumule a una profundidad suficiente, reduciendo la profundidad a la que se produce la presión del punto de burbuja en la tubería, esta condición de estabilidad permitirá la producción a caudales razonables sin necesidad de lavados o, en el peor de los casos, con un número de lavados muy reducido (Haskett & Tartera, 1965).

2.4 Propiedades Fisicoquímicas del crudo de Oriente

El petróleo se caracteriza por sus propiedades físicas y químicas que los distinguen entre sí, Estas características son: su color, olor, densidad, índice de refracción, coeficiente de expansión, punto de ebullición, punto de congelación, punto de deflagración, punto de quema, poder calorífico, calor latente de vaporización y viscosidad.

Los grados API son la medida de una escala de gravedad específica que fue desarrollada por el Instituto Americano del Petróleo que permite medir la densidad relativa de varios petroleros líquidos, en donde la mayoría de los petróleos a nivel mundial alcanzan de 10° a 70° API. El crudo ecuatoriano de Oriente alcanza una 24°API entre otras características fisicoquímicas presentes en la librería de crudos de Aspen Hysys en su versión 10

Tabla 1

Propiedades fisicoquímicas del crudo de Oriente.

PROPIEDAD	VALOR
Densidad estándar del líquido (Kg/m^3)	903,9816
Viscosidad Cinemática (cSt) @ 37.78 °C	20,897
Pour Point (°C)	41,486
Cantidad de azufre en peso %	1,599
Número de acidez total (mg KOH/g)	0,120
Factor de Watson K	11,405
Viscosidad Cinemática (cSt) @ 20°C	39,516
Viscosidad Cinemática (cSt) @ 40°C	19,435

PROPIEDAD	VALOR
Viscosidad Cinemática (cSt) @ 50°C	14,268
Viscosidad Cinemática (cSt) @ 60°C	10,734
Viscosidad Cinemática (cSt) @ 80°C	6,564
Viscosidad Cinemática (cSt) @ 100°C	4,265
NaCl en peso %	0,002
Azufre de mercaptano en peso %	0,000
Carbón de Conradson en peso%	10,976
Cenizas en peso %	0,060
Asfaltenos en peso %	8,262
Níquel en peso %	0,008
Vanadio en peso %	0,023
Hierro en peso %	0,000
Valor calorífico bruto (kJ/kg)	44062,097
Valor calorífico Neto (kJ/kg)	41471,906
Rendimiento del corte en peso %	100,00
Rendimiento del corte en volumen %	100,00
Nitrógeno en peso %	0,354
Parafinas en volumen %	14,499
Naftenos en volumen %	49,385
Aromáticos en volumen	36,115

PROPIEDAD	VALOR
N+2^a % Octanaje del reformado resultante	121,616
Altura de la llama sin humo (m)	0,00
Punto de congelación (°C)	15,370
Compuestos básicos de Nitrógeno %	2,573
Punto de turbidez (°C)	66,451
Penetración (m)	0,020
Peptizabilidad Pvalue	0,000
Molibdeno en peso %	0,000
Relación carbono hidrógeno en peso %	7,397

Nota. Crudo de Oriente. Tomado de Aspen Hysys V.10,2021

2.5 Clasificación del aceite residual

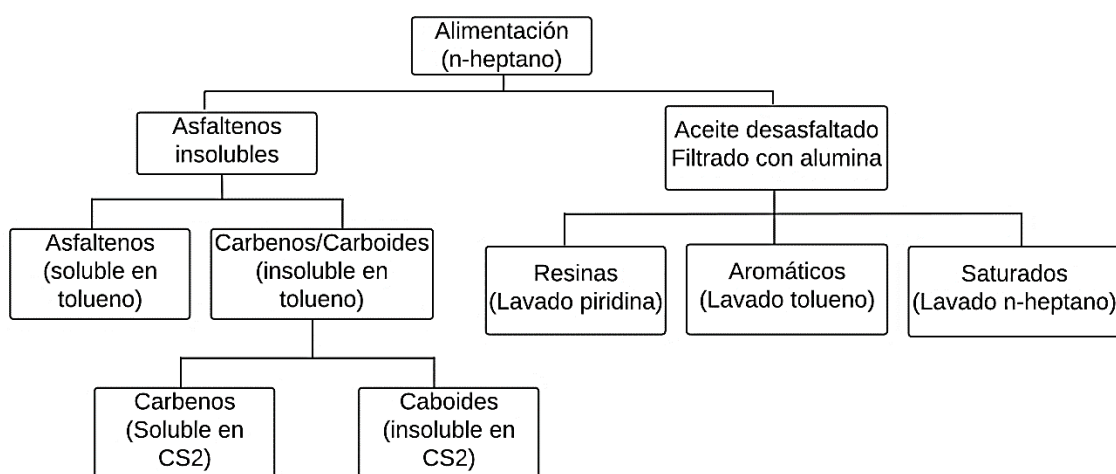
El número de moléculas específicas que componen el aceite residual es demasiado grande para ser clasificado, es así que se han desarrollado técnicas analíticas para separar dichas moléculas y comprenderlas de mejor manera; la separación más común está dividida en asfaltenos y maltenos, producto de la dilución de los aceites residuales con grandes cantidades de parafinas como n-heptano o n-pentano (Meyers, 2016).

Durante el refinado del petróleo los asfaltenos no son compuestos destilables y permanecen en los combustibles residuales a medida que se eliminan las fracciones destilables debido a que son los componentes de mayor pesos molecular y los más polares del petróleo crudo; de color marrón oscuro sin un punto definido de fusión capaz de dejar un residuo carbonoso al calentarse (Speight, 2004).

Al ser los asfaltenos una fracción del petróleo que no se disuelve en alcanos ligeros como el heptano y el pentano, pero si son solubles en aromáticos del tipo BTX, por medio de la Fig. 5 se muestra un modelo simplificado de fraccionamiento del petróleo crudo (Seitmaganbetov, 2020).

Figura 5

Método simplificado de fraccionamiento de petróleo



Nota. Diagrama del proceso simplificado, Tomado de Speight, 2004.

2.6 Desasfaltado con disolventes (SDA)

La conversión de las moléculas de asfalto en moléculas no asfálticas se ha convertido en un reto para la industria en la refinación del petróleo crudo, ya que la alta concentración de heteroátomos requiere que al menos algunas de las moléculas sean hidrotratadas con la necesidad de aumentar el contenido de hidrogeno que permita transformarle en combustibles para el transporte. La fracción de maltenos permanece en solución con la fase parafínica escogida con fines extractivos mientras que la fracción de asfaltenos formará una fase separada que precipita en un material pegajoso capaz de obstruir los equipos conocido como lodo seco (Meyers, 2016).

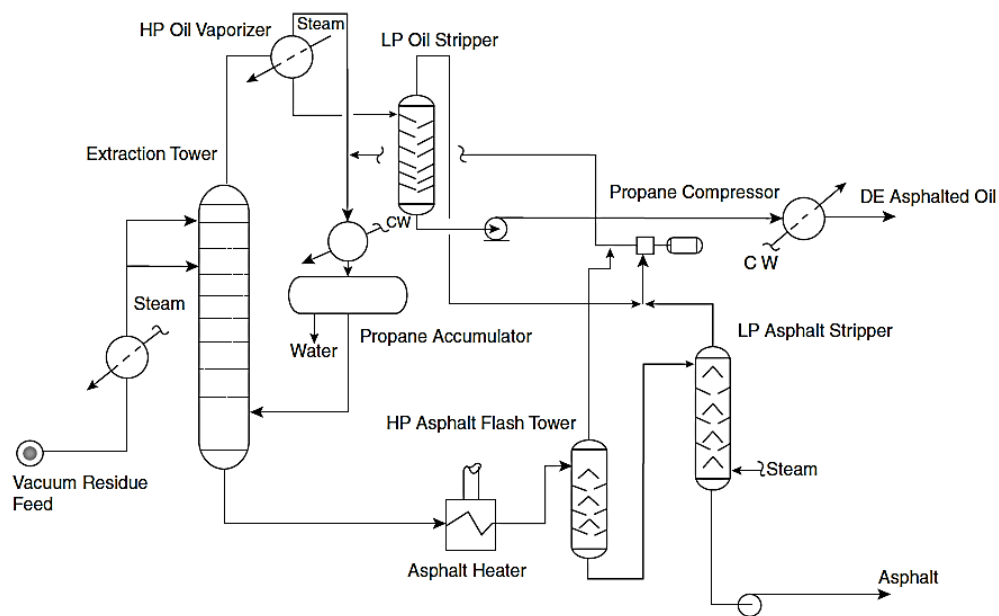
Este proceso se combina con la coquización retardada para que una mezcla de asfalto y disolvente del proceso de desasfaltado se envíe como materia prima al proceso de coquización retardada para formar coque y productos intermedios de hidrocarburos en forma de vapor y líquido (Patent No. US4686027A, 1985).

2.7 Especificaciones del proceso de desasfaltado por propano

El proceso de desasfaltado convencional por propano se utiliza para preparar una materia prima adecuada para las unidades de conversión catalítica en donde el rendimiento del catalizador se vería sumamente afectado por metales pesados residuales, además de verse afectado por un alto contenido de carbono de Conradson, dichos metales están contenidos en los compuestos asfálticos que constituyen la mayor parte de la porción asfáltica del residuo; el aceite desasfaltado denominado bright stock es una base para el caite de lubricación y se lo puede seguir refinando en procesos posteriores (Jones, 2015).

Figura 6

Desasfaltado por propano



Nota. Esquema del proceso simplificado. Tomado de Jones, 2015.

La configuración mostrada en la Fig. 6 es la unidad de desasfaltado del crudo Arabian American Oil Co. (Aramco) en donde la alimentación de residuos al vacío entra en directamente desde la torre de destilación al vacío y se calienta a una temperatura de entrada de 140°F antes de entrar por la parte superior de la torre de extracción con de platos a una presión de 485 psig. El propano líquido se introduce en el fondo de la torre.

El propano sube por la torre en contracorriente hasta el asfalto precipitado mientras que el asfalto extraído se retira del fondo de la torre y se conduce a través de un calentador para entrar en el plato superior de un separador con deflectores.

Parte del propano arrastrado en la fase asfáltica se retira de la parte superior de la torre. La fase asfáltica sale de la parte inferior de la torre y se reduce su presión antes de entrar en la torre de despojo de asfalto por encima del plato superior con deflectores.

Se introduce vapor en la parte inferior de la torre y el propano restante arrastrado se separa del asfalto despojado que sale de la parte inferior de la torre y se enfría hasta las condiciones atmosféricas dirigiéndose al almacenamiento o a la planta de mezcla de asfalto mientras que el despojo de propano entra en el lado de aspiración de un compresor de propano y en la descarga se dirige al acumulador de propano.

La fase de aceite desasfaltado de la torre de extracción entra en un vaporizador de aceite de alta presión que elimina la mayor parte del propano arrastrado, la corriente de propano sale del vaporizador para ser enfriada y entra en el acumulador de propano y al salir del vaporizador, la fase de aceite entra en la fila superior de deflectores de una torre de extracción de baja presión. El vapor se introduce en los platos inferiores de la torre y asciende por ella en contracorriente hacia la fase de aceite. El propano residual se separa de la fase de aceite y sale por la parte superior de la torre de separación.

Esta corriente de vapor superior se une a la corriente del separador de asfalto de baja presión en la aspiración del compresor de propano que se enfría y se drena sin el agua del vapor de despojo en el acumulador, el propano seco se recicla para entrar en la torre de extracción. Los datos típicos de desasfaltado del residuo de crudo Arabian American Oil Co. (Aramco) para aceite lubricante con un tratamiento de propano del 600 % de volumen en la alimentación se muestra en la tabla 2 (Jones, 2015).

Tabla 2

Rendimiento y propiedades del desasfaltado por propano

	Alimentación	Aceite Desasfaltado	Extracto
Rendimiento vol%	100	52	48
Gravedad °API	11	21	1,5
Viscosidad, SSU a 210 °F	1,150	175	-
Viscosidad, SSU a 275 °F	-	-	250
Carbón de Conradson peso%	10	2.7	-
Color TR diluido	-	9	-
Punto de ablandamiento, R&B, °F	-	-	135

Nota. El aceite desasfaltado es pobre en Carbón de Conradson en peso. Tomado de Jones, 2015.

Tabla 3

Condiciones de operación de desasfaltado por propano

Torre de desasfaltado	
Temperatura del tope (°F)	140
Temperatura del fondo (°F)	105
Presión de la torre (psig)	485
Vaporizador de aceite desasfaltado (°F)	315
Extractor de aceite desasfaltado (°F)	310
Presión del vaporizador (psig)	220

Presión del extractor (psig)	5
Torre de vaporización de asfalto (°F)	525
Extractor de asfalto (°F)	515
Presión flash de la torre (psig)	220
Presión del extractor (psig)	5

Nota. Condiciones de operación de Aramco, Arabia Saudita. Tomado de Jones, 2015.

2.8 Moléculas presentes en las corrientes de la unidad de desasfaltado

En el campo de la investigación moderna, varios son los pozos analizados en cuanto a su contenido de saturados, aromáticas, resinas y asfaltenos; sin embargo, el contenido molecular tanto de las corrientes de entrada como de salida de dicho proceso no confiere una amplia variabilidad en torno a la fuente petrolífera, en este apartado se estudiarán los componentes expuestos en el 2017 por Rastgoo y Kharrat quienes examinaron por medio del software WinProp el yacimiento de Fahlian y la posibilidad de precipitación de asfaltenos a varias presiones y temperaturas utilizando además la ecuación de estado Peng – Robinson que permitieron definir los siguientes moléculas y su composición porcentual en peso.

Tabla 4

Composición de la precipitación de asfaltenos

Componente	Composición en peso %
N2	0,07
CO2	2,26
H2S	0,22
C1	50,81
C2	8,8
C3	5,73
i-C4	1,07
n-C4	2,94
i-C5	1,22
n-C5	1,78
C6	2,19
C7	2,33
C8	2,52

Componente	Composición en peso %
C9	2,09
C10	1,8
C11	1,34
C12	1,18
C13	1,02
C14	0,9
C15	0,86
C16	0,72
C17	0,6
C18	0,6
C19	0,56
C20	0,52
C21	0,47
C22	0,44
C23	0,4
C24	0,37
C25	0,34
C26	0,37
C27	0,32
C28	0,29
C29	0,33
C30	0,29
C31	0,3
C32	0,26
C33	0,23
C34	0,23
C35	0,21
C36+	1,02
TOTAL	100%

Nota. Datos del yacimiento Fahlian, Irán. Tomado de Rastgoo & Kharrat, 2017.

2.9 El proceso ROSE

El proceso de extracción supercrítica de aceite residual (ROSE) es la principal tecnología de desasfaltado en la industria hoy en día, capaz de obtener aceite desasfaltado a partir de los residuos atmosféricos o de vacío convirtiéndose en una excelente materia prima para el proceso de craqueo catalítico fuente de un producto rico en compuestos

aromáticos de alto octanaje y valiosos subproductos como el hidrogeno de grado químico, gas ligero y gas licuado de petróleo (Meyers, 2016).

Ofrece varias ventajas operativas y económicas sobre los sistemas de la competencia, que incluyen procesos catalíticos, uso de una mezcla de hidrocarburos (GLP) e incluso desasfaltado por medio de metano (Patent No. US4324651, 1982).

Estas ventajas son:

- Mayor rendimiento y calidad del producto desasfaltado (DAO).
- Reducción significativa de la producción de fueloil para las refinerías que mezclan el residuo de vacío con el combustible.
- Flexibilidad para procesar residuos provenientes de las destilaciones atmosféricas y de vacío como fuentes de crudo con poca dificultad.
- Recuperación de disolvente supercrítico que reduce los costos operativos en comparación con otros procesos de desasfaltado utilizando disolventes.
- Costos de capital y de explotación más bajos en comparación con otros procesos.

2.10 Costos de operación del proceso ROSE

Los costos del proceso de extracción supercrítica de aceite residual relacionados con el gasto energético, combustibles y agua de refrigeración suelen estar entre el 40% y 70% de los costos alcanzados en el proceso convencional de desasfaltado con disolventes, producto de al menos el 90% de recuperación del disolvente de extracción como fluido supercrítico. La ventaja es operativa recordando que en el proceso de desasfaltado convencional se elimina el disolvente de la mezcla DAO - Disolvente por medio de un flasheo a baja presión, comprimiendo y condensando el disolvente antes de ser reutilizado en el proceso (Meyers, 2016).

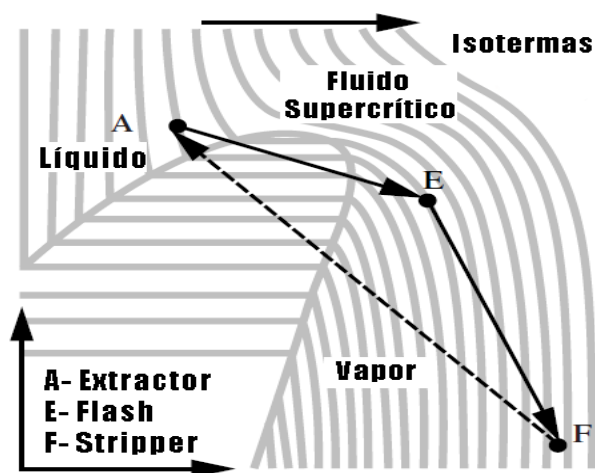
2.11 El proceso de desasfaltado convencional frente al proceso ROSE

Por medio de la Fig. 7 se ilustra la energía necesaria para recuperar el disolvente de la mezcla DAO- disolvente (n-pentano) afluente del extractor a una temperatura baja y presión alta en el punto A que calentarse alcanza una temperatura más alta y una presión reducida en el punto E y en estas condiciones la mayor parte del disolvente sale de la solución y se condensa, capaz de llegar al punto F en donde la temperatura es aún más alta y entra en el separador de productos a una presión muy reducida, en donde el disolvente se condensa a mayor medida (Speight, 2004).

En este esquema todo el disolvente se evapora y se condensa antes de lograr ser reciclado en las condiciones de extracción, este último, caracterizado por una relación proporcional entre los requisitos energéticos y la cantidad de disolvente utilizado.

Figura 7

Isoterma del desasfaltado convencional

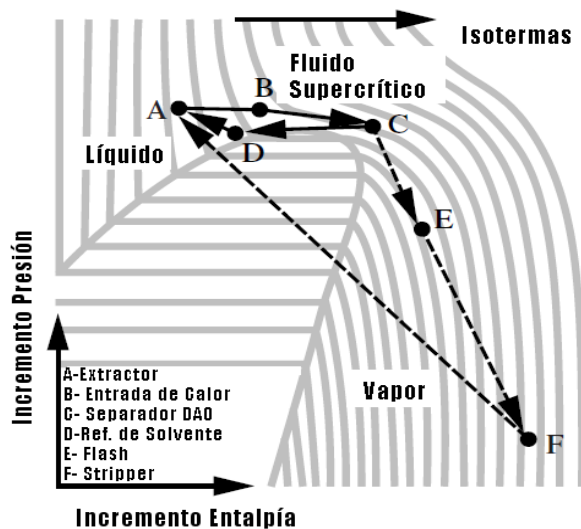


Nota. El paso desde y hasta el punto A no permite una recuperación adecuada del solvente.

Tomado de Jones, 2015.

Figura 8

Isoterma del desasfaltado por el método ROSE



Nota. El proceso ROSE permite un mayor rendimiento en la recuperación del solvente.

Tomado de Jones, 2015.

Mientras que en la Fig. 8 se muestra los requisitos de energía para recuperar el disolvente de la mezcla DAO- disolvente en un proceso de recuperación supercrítico. Todo el disolvente sale del extractor como una solución DAO – disolvente en una situación similar al punto A de la Fig. 7 y al fluir a través del intercambiador ROSE va ganando calor del disolvente supercrítico reciclado ubicándose en el punto B. La solución se calienta aún más obteniendo calor del DAO despojado y del vapor o aceite caliente en el precalentador del separador DAO en el punto C, en donde se recupera entre el 85% y 93% del disolvente supercrítico.

A medida que la mezcla se enfría del punto C al punto D la mayor parte del calor para la solución DAO- disolvente es proporcionado por el disolvente supercrítico, que se enfría a la temperatura necesaria para la extracción en un enfriador de disolventes (Punto A) y se

recupera por intermitencia y extracción; en el esquema de recuperación de disolvente supercrítico sólo se calienta entre el 7 y el 15 por ciento del disolvente de extracción hasta los puntos E y F en comparación con el 100 por ciento del disolvente en el esquema convencional (Speight, 2004).

2.12 El proceso de desasfaltado en el campo de la invención

En el campo de la invención e innovación moderna del proceso de desasfaltado se han desarrollado patentes como la de Devotta Irudayaraj de Faridabad en el estado Indio de Haryana por medio de la Indian Oil Corporation y sus colaboradores en la patente estadounidense 238903 A1 del año 2014 en donde se compara los métodos anteriores para desasfaltar aceites pesados con hidrocarburos utilizando disolventes múltiples y bastante costosos que requieren unidades complejas y que no se ocupan de ninguna variación del rendimiento de la unidad de desasfaltado con la calidad del alimento de los procesos de craqueo secundario o la producción de aceites base.

La invención propuesta por Irudayaraj tiene como objetivo proporcionar un proceso de desasfaltado mejorado y flexible que pueda producir aceite desasfaltado con una menor proporción de carbono de Conradson (CCR) y una mayor proporción de saturados respecto a los aromáticos adecuado para la producción de la base de aceites lubricantes (LOBS), cualidad que caracteriza el crudo ecuatoriano de Oriente al tener una relación de Conradson de 10.976% abriendo así paso a un nuevo proceso de desasfaltado ecuatoriano (Patent No. US2014/0238903A1, 2014).

Una ventaja adicional propuesta de este novedoso proceso de desasfaltado es la recuperación y reciclado del disolvente utilizado (GLP C3-C5) a diferencia del proceso convencional marcando un nuevo camino de estudio al comparar su rendimiento con el proceso ROSE de condiciones supercríticas capaz de proporcionar un proceso mejorado

para desasfaltar aceite residual en contacto con su disolvente en un único aparato de extracción y en condiciones de desasfaltado predeterminado para producir una fase de productos de aceite desasfaltado con contenido parafínico de alta relación hidrogeno carbono y una fase de producción de asfalto con una relativamente baja relación de hidrogeno carbono dejando así un aceite capaz de utilizarse como materia prima en la elaboración de aceites lubricantes o en los procesos de craqueo secundario.

El poder de disolución o la solubilidad del aceite depende de la tensión superficial del disolvente de desasfaltado. A medida que aumenta la tensión superficial del disolvente , aumenta la solubilidad del aceite, lo que se traduce en un mayor rendimiento del aceite desasfaltado (Patent No. US2014/0238903A1, 2014).

Una ventaja adicional propuesta de este novedoso proceso de desasfaltado es la recuperación y reciclado del disolvente utilizado (GLP C3-C5) a diferencia del proceso convencional marcando un nuevo camino de estudio al comparar su rendimiento con el proceso ROSE de condiciones supercríticas capaz de proporcionar un proceso mejorado para desasfaltar aceite residual en contacto con su disolvente en un único aparato de extracción y en condiciones de desasfaltado predeterminado para producir una fase de productos de aceite desasfaltado con contenido parafínico de alta relación hidrogeno carbono y una fase de producción de asfalto con una relativamente baja relación de hidrogeno carbono dejando así un aceite capaz de utilizarse como materia prima en la elaboración de aceites lubricantes o en los procesos de craqueo secundario.

El poder de disolución o la solubilidad del aceite depende de la tensión superficial del disolvente de desasfaltado. A medida que aumenta la tensión superficial del disolvente , aumenta la solubilidad del aceite, lo que se traduce en un mayor rendimiento del aceite desasfaltado (Patent No. US2014/0238903A1, 2014).

2.13 Tensión superficial del disolvente (n-heptano)

Debido a las diferencias en las interacciones intermoleculares, las moléculas de la interfase DAO - disolvente tienen una energía promedio de su interacción intermolecular distinta a la de las moléculas que se encuentran en el interior de cada una de las fases, es así que un cambio de adiabático en el área de la superficie interfacial cambiaría la energía interna del sistema. Para ejemplificar su definición se considera un líquido en equilibrio con su vapor, en donde las moléculas que están situadas en la superficie del líquido experimentan menos atracciones en comparación con las que se encuentran en el seno del líquido con una energía media menor que las moléculas aledañas a la superficie. (Patent No. US2014/0238903A1, 2014)

Es necesario considerar una gota del tipo esférico ya que es la forma tridimensional con menor relación superficie/volumen; debido que la concentración de las moléculas en la fase vapor es tan baja se puede ignorar las interacciones entre moléculas de la fase vapor con las de la superficie del líquido, siendo necesario realizar un trabajo que se invierte en aumentar el área de la superficie interfacial entre dos fases que involucra un área superficial mínima como la que ofrece la gota esférica.

Cuando mayores son las interacciones entre las moléculas de un líquido, mayor es el trabajo necesario para trasladar las moléculas desde el interior del líquido hasta la superficie generándose un valor mayor de proporcionalidad entre el área superficial interfacial y el aumento de moléculas en la región de la interfase, dicha proporcionalidad es conocida como tensión interfacial o tensión superficial, esta última definición utilizada mayormente en gases. (Levin, 2004)

2.14 Aceite desasfaltado por medio de GLP

Según la invención de Devotta Irudayaraj en su patente 38903A1, 2014, en donde se propone el proceso de desasfaltado por medio de la interacción DAO - GLP, el rendimiento del aceite desasfaltado puede controlarse opcionalmente entre el 15 y el 60 % en peso para un disolvente fijo, variando las condiciones de desasfaltado. Se obtiene un porcentaje relativamente más alto de rendimiento de aceite desasfaltado a una temperatura de funcionamiento más baja o viceversa en condiciones de desasfaltado dadas.

En su primera experimentación propuesta, el aceite desasfaltado se obtiene con un rendimiento del 15 al 30 % en peso, con un residuo de carbono Conradson más bajo, del 1,5 al 2,5 % en peso, y una relación entre saturados y aromáticos relativamente más alta, del 0,4 al 0,7, adecuada para la producción de aceites base para lubricantes.

En una segunda experimentación, el aceite desasfaltado se obtiene con un rendimiento de 30-60 % en peso, con un residuo de carbono Conradson relativamente más alto pero aceptable, de 2,5 a 6 % en peso, y una relación baja entre saturados y aromáticos del orden de 0,15 a 0,4, adecuada como materia prima para procesos de craqueo secundarios.

En una realización específica, el aceite desasfaltado con diferentes rendimientos y calidad adecuados para ambas aplicaciones se consigue variando únicamente la temperatura de funcionamiento. La variación del rendimiento del aceite desasfaltado de 15 a 60 % en peso puede lograrse variando la temperatura en unos 10-20° C. dentro del intervalo de temperatura de funcionamiento de 70-130° C. preferentemente en el intervalo de 90-120° C. manteniendo el resto de las condiciones de desasfaltado, incluida la relación entre el disolvente y la alimentación. 0030 La dosis de disolvente utilizado puede estar en el rango de 200-800 vol%, preferiblemente en el rango de 300-500 vol% de la alimentación.

Otro desarrollo del proceso de desasfaltado inventado implica la recuperación del disolvente de la fase de aceite desasfaltado mediante el modo supercrítico para ahorrar energía en la recuperación del disolvente utilizando tecnología conocida. El disolvente recuperado puede reciclarse en el proceso y según esta invención, el aceite de hidrocarburo pesado residual contiene saturados, aromáticos, resinas, asfaltenos junto con azufre, nitrógeno y metales. En otra realización se trata de residuo reducido para generar más destilados para los procesos de craqueo. El proceso inventado puede realizarse en una extracción por lotes o continua a contracorriente.

2.15 SwissParam: Una herramienta de generación de campos de fuerza

SwissParam es una herramienta de generación rápida de campos de fuerza capaz de generar para una molécula orgánica pequeña y arbitraria parámetros basados en el campo de fuerza molecular de Merck MMFF94; utilizado mayormente en el estudio predictivo del acoplamiento ligando-proteína y su efecto en la diana sobre la cual va a actuar el medicamento a descubrir convirtiéndose así en un importante recurso de la investigación farmacéutica y con ello una puerta al estudio de la interacción molecular en la química y afines (Zoete, Cuendet, Grosdidier, & Michielin, 2011).

La tecnología de fármacos asistido por ordenador (CADD) se ha convertido en un conjunto de herramientas in silico que ayudan en el proceso de diseño de fármacos, esta tecnología puede dividirse en dos, tanto en el enfoque basados en los ligandos que utilizan los conocimientos obtenidos de compuestos bioactivos conocidos para intuir en otros nuevos; además de un enfoque basado en estructuras tridimensionales para modelar las interacciones de las moléculas de carácter orgánico entre sí.(Zoete et al., 2011).

El campo de fuerza molecular de Merck MMFF94 fue desarrollado para proporcionar una mayor transferibilidad, permitiendo la aplicación de moléculas no incluidas

explícitamente en la optimización de los parámetros basados en datos teóricos al carecer de datos experimentales relevantes para muchas de las estructuras químicas que deben ser manejadas por un campo de fuerza para su uso general por medio de la aplicación de tecnologías de fármacos y afines (Zoete et al., 2011).

La parametrización de MMFF94 utilizó una gran cantidad de datos computacionales de alta calidad, alrededor de 2500 estructuras optimizadas por medio de la química cuántica, abarcando casi todas las moléculas orgánicas estables como los alcanos, alquenos, alcoholes, cetonas, ácidos carboxílicos, ésteres, grupos SO₂, fosfatos, hidrocarburos aromáticos, entre otros generando así con alta precisión las longitudes de enlace experimentales, ángulos de enlace y frecuencias vibraciones tal como es de esperarse dada la incertidumbre de los resultados experimentales.

2.16 MMFF94 frente a la simulación de sistemas de fase condensada

La investigación desarrollada por Kaminski y Jorgesen en 1996 pone a prueba el campo de fuerza MMFF94 frente a AMBER94, y OPLS-AA afirmando que los tres campos de fuerza están pensados para su uso en simulaciones de Monte Carlo (MC) de fase condensada en el modelado de líquidos orgánicos y biomoleculares en solución eligiendo butano líquido, metanol y N-metilacetamida (NMA) por su polaridad y su representación de las interacciones típicas encontradas en las proteínas.

Los errores medios en las densidades y calores de vaporización a temperatura constante y 1 atm. de presión fueron: 3,8% y 5,1% con AMBER94, del 1,5% y 1,3% con OPLS-AA, mientras que con el campo de fuerza MMFF94 son demasiado bajos en un 21%-27% respecto a los métodos restantes y al utilizar butano con su densidad fijada en el valor experimental arroja un error del 32% en el cálculo de la energía de vaporización. La calidad de los resultados depende de las expresiones de la energía potencial denominado “campo

de fuerza” y surge la necesidad de incluir dichos campos en las simulaciones de fluidos con un buen rendimiento relacionadas con la fase gaseosa, estructuras moleculares y la energía de conformación.

La densidad y el ΔH_{vap} proporciona confianza tanto en el tamaño de las moléculas como en la fuerza de las interacciones intermoleculares, cantidades obtenidas a partir del experimento como de la simulación con gran precisión en espera de que los campos de fuerza de segunda generación tengan un buen rendimiento en la fase gaseosa respecto a las estructuras moleculares, energía de conformación y propiedades de fluidos.

Cada simulación de los líquidos consistió en al menos cuatro millones de configuraciones de equilibrio seguido de cuatro millones de configuraciones de promedio con muestreo de Metrópolis en donde las funciones de distribución radial y las propiedades termodinámicas clave como el calor de vaporización y la densidad de los líquidos convergen bien con simulaciones de Monte Carlo (MC) reportando una incertidumbre de 1σ en la desviación típica respecto a la gráfica de distribución normal o curva de Gauss.

Gracias a su estructura 3D las moléculas individuales son totalmente flexibles permitiendo el estiramiento de los enlaces, la flexión de los ángulos y los cambios de ángulos diedros, con la única excepción de que el carbono trigonal y el nitrógeno del N-metilacetamida fueron restringidos a ser planares en los cálculos OPLS-AA, siendo cubierto con un término de flexión cuadrática fuera del plano por medio del campo de fuerza MMFF94.

En cuanto a los resultados de la investigación realizada por Kaminski y Jorgesen en 1996 los calores de vaporización y las densidades de las simulaciones de Monte Carlo son reportados en la tabla 4. en donde se observa que el butano líquido se expandió durante la ejecución de la simulación de Monte Carlo representando con un súper índice (a) sin permitir el cálculo de ΔH_{vap} conseguid por medio de la ecuación:

$$\Delta H_{\text{vap}} = E(\text{g}) - (E_{\text{intra}}(\text{l}) + E_{\text{inter}}(\text{l})) + RT$$

En donde $E_{\text{intra}}(\text{l})$ es la energía interna media determinada en las simulaciones del líquido que es igual a la energía potencial del líquido E total; $E_{\text{inter}}(\text{l})$ es igual a la energía intermolecular del líquido y sus fluctuaciones son las que permiten calcular el C_p (cal/ mol K). Añadiendo el gas ideal C_p^0 obtenido del experimento (menos R para eliminar la contribución de PV en fase gaseosa) da $C_p(\text{l})$, que puede compararse con el valor de la literatura. La compresibilidad isotérmica k de la tabla 5 se calcula a partir de las fluctuaciones del volumen (Kaminski & Jorgensen, 1996).

En donde $E_{\text{intra}}(\text{l})$ es la energía interna media determinada en las simulaciones del líquido que es igual a la energía potencial del líquido E total; $E_{\text{inter}}(\text{l})$ es igual a la energía intermolecular del líquido y sus fluctuaciones son las que permiten calcular el C_p (cal/ mol K). Añadiendo el gas ideal C_p^0 obtenido del experimento (menos R para eliminar la contribución de PV en fase gaseosa) da $C_p(\text{l})$, que puede compararse con el valor de la literatura. La compresibilidad isotérmica k de la tabla 5 se calcula a partir de las fluctuaciones del volumen (Kaminski & Jorgensen, 1996).

Tabla 5.

Energías (kcal/mol) y densidades (g cm⁻³) calculadas.

Líquido/ Campo de Fuerza	$E_{\text{total}}(\text{l})$	$E(\text{g})$	ΔH_{vap}
Butano (t=-0.5 °C)			
AMBER94	6,29 ± 0,02	11,25 ± 0,06	5,50 ± 0,06
MMFF94	4,74 ^a	4,91 ± 0,08	N/A
OPLS - AA	7,05 ± 0,04	11.95 ± 0,07	5,44 ± 0,07
Metanol (t=25 °C)			
AMBER94	0,03 ± 0,02	8,85 ± 0,02	9,41 ± 0,03
MMFF94	-2,16 ± 0,03	4,27 ± 0,03	7,02 ± 0,04

Líquido/ Campo de Fuerza	E _{total} (l)	E (g)	ΔH _{vap}
OPLS - AA	-1,28 ± 0,02	7,08 ± 0,02	8,95 ± 0,02
NMA (t=100 °C)			
AMBER94	-2,40 ± 0,03	11,20 ± 0,04	14,34 ± 0,05
MMFF94	-23,24 ± 0,03	-14,17 ± 0,08	9,81 ± 0,09
OPLS - AA	-19,44 ± 0,04	-6,58 ± 0,05	13,61 ± 0,06

Nota. Tomado de Kaminski & Jorgensen, 1996

Tabla 6

Cp's (cal/mol K) y k (10⁻⁶ atm⁻¹) calculadas.

Líquido/ Campo de Fuerza	Cp (l)	k (l)
Butano (t=-0.5 °C)		
AMBER94	38,7 ± 3,0	254 ± 39
MMFF94	N/A	N/A
OPLS - AA	31,0 ± 1,3	179 ± 23
Experimental	31,8	165
Metanol (t=25 °C)		
AMBER94	29,2 ± 2,7	97 ± 13
MMFF94	27,8 ± 2,5	576 ± 93
OPLS - AA	26,0 ± 1,8	77 ± 8
Experimental	19,5	118
NMA (t=100 °C)		
AMBER94	35,5 ± 1,2	48 ± 5
MMFF94	39,4 ± 1,7	326 ± 43
OPLS - AA	39,7 ± 1,2	47 ± 4
Experimental	36,2	N/A

Nota. Tomado de Kaminski & Jorgensen, 1996

CAPÍTULO III

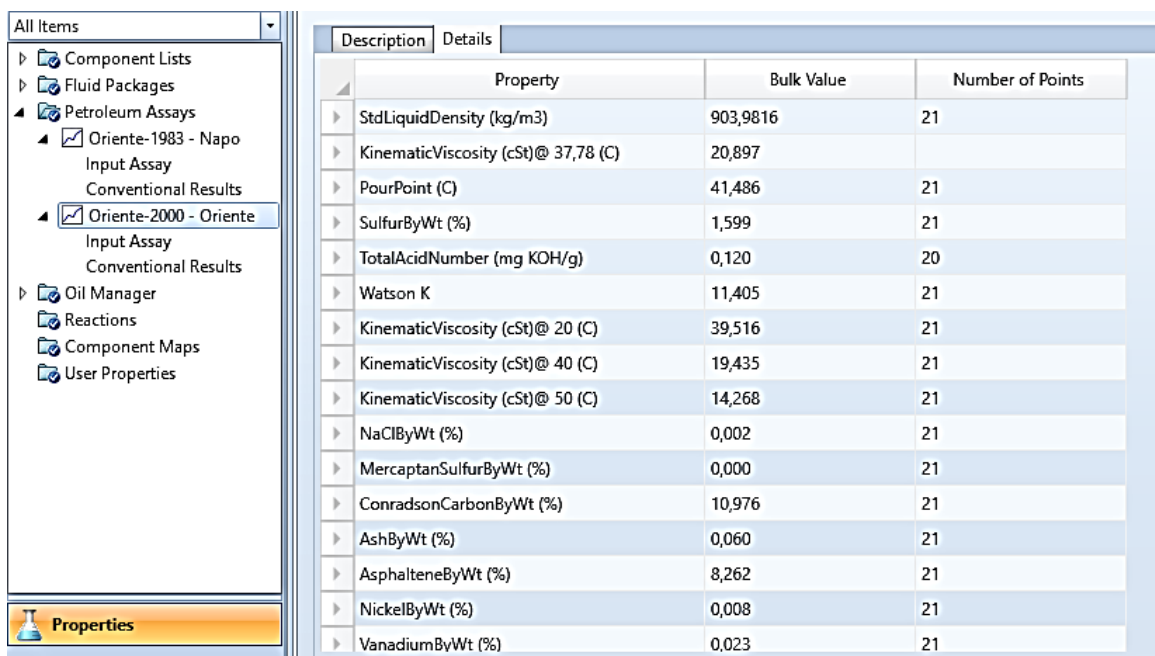
3. Metodología

3.1 Caracterización del crudo ecuatoriano, Aspen Hysys V10

Por medio de las librerías que dispone Aspen Hysys en su versión 10, es posible identificar con facilidad los porcentajes en peso y volumen de los principales componentes del crudo ecuatoriano de Oriente por medio de la elaboración de una corriente y la selección de la naturaleza y origen del crudo, es necesario recordar que el Ecuador dispone de dos variedades, el crudo Napo y el Crudo Oriente CON 17 Y 24° API respectivamente.

Figura 9

Crudo de Oriente, Aspen Hysys



Property	Bulk Value	Number of Points
StdLiquidDensity (kg/m3)	903,9816	21
KinematicViscosity (cSt)@ 37,78 (C)	20,897	
PourPoint (C)	41,486	21
SulfurByWt (%)	1,599	21
TotalAcidNumber (mg KOH/g)	0,120	20
Watson K	11,405	21
KinematicViscosity (cSt)@ 20 (C)	39,516	21
KinematicViscosity (cSt)@ 40 (C)	19,435	21
KinematicViscosity (cSt)@ 50 (C)	14,268	21
NaClByWt (%)	0,002	21
MercaptanSulfurByWt (%)	0,000	21
ConradsonCarbonByWt (%)	10,976	21
AshByWt (%)	0,060	21
AsphalteneByWt (%)	8,262	21
NickelByWt (%)	0,008	21
VanadiumByWt (%)	0,023	21

Nota. El proceso ROSE permite un mayor rendimiento en la recuperación del solvente.

Tomado de Jones, 2015.

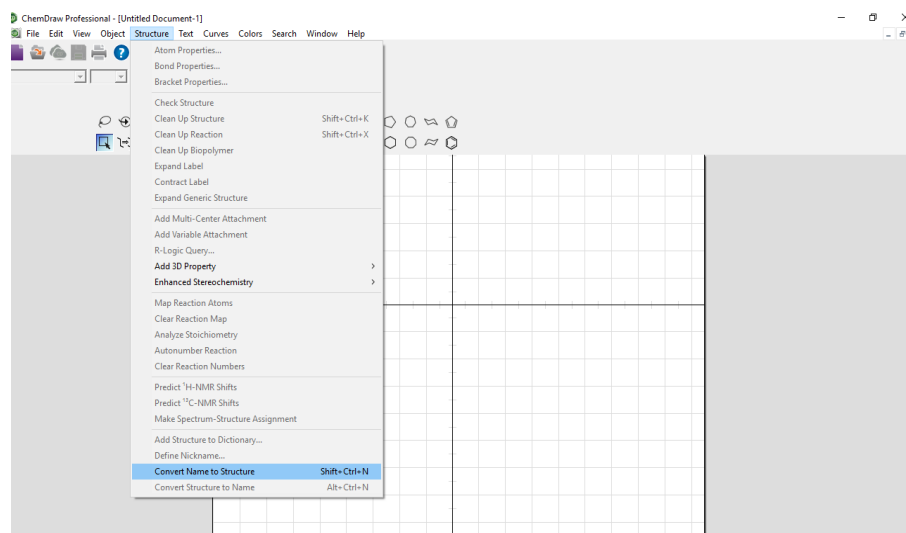
3.2 Obtención de propiedades básicas

Las propiedades básicas de las moléculas presentes en las corrientes del proceso de desasfaltado provienen de ChemDraw, programa diseñado para el dibujo y el análisis de las propiedades básicas de los compuestos químicos tanto orgánicos e inorgánicos, permite por medio de sus librerías generar de manera rápida y oportuna la figura del compuesto deseado, en el presente apartado se reporta la manera en que se obtiene la representación gráfica de las moléculas presentes en la unidad de desasfaltado.

Acceder por medio de la barra de herramientas a la pestaña Structure, una vez ahí, seleccionar la opción Convert Name to Structure Fig. 10 opción que permite ingresar el nombre del compuesto ya sea en nomenclatura IUPAC o su nombre común si así fuese el caso.

Figura 10

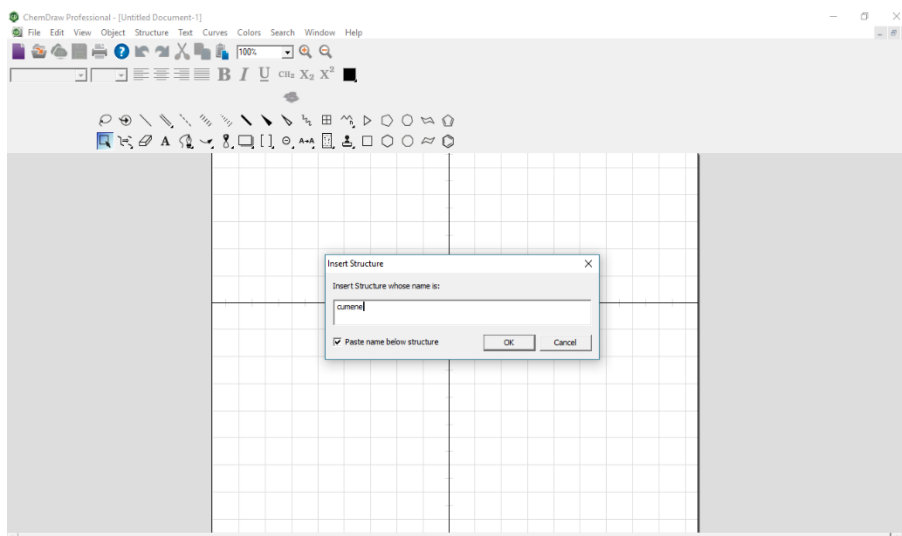
Convertir el nombre de la molécula a estructura



El ejemplo de la (Fig.11) permite dibujar la estructura del isopropilbenceno en su nombre común (cumeno), seleccionar la opción Paste name below structure en el caso de necesitar escribir el nombre en la parte inferior de la figura.

Figura 11

Ingreso del nombre de la molécula



ChemDraw ofrece una barra de herramientas que permite diseñar el dibujo de una molécula por medio de sus enlaces simples, dobles y triples, además de permitir acceder al dibujo del ciclo alcanos más representativos como son: ciclopropano, ciclobutano y clciclohexáno Fig.12

Para el análisis de las propiedades básicas de cada molécula es necesario desplegar la opción Analysis, seleccionar All al necesitar las siguientes propiedades: Nombre IUPAC, fórmula química, masa exacta, peso molecular, m/z relación de masa-carga, análisis de composición porcentual Fig. 13

Figura 12

Dibujo de la molécula de Cumeno

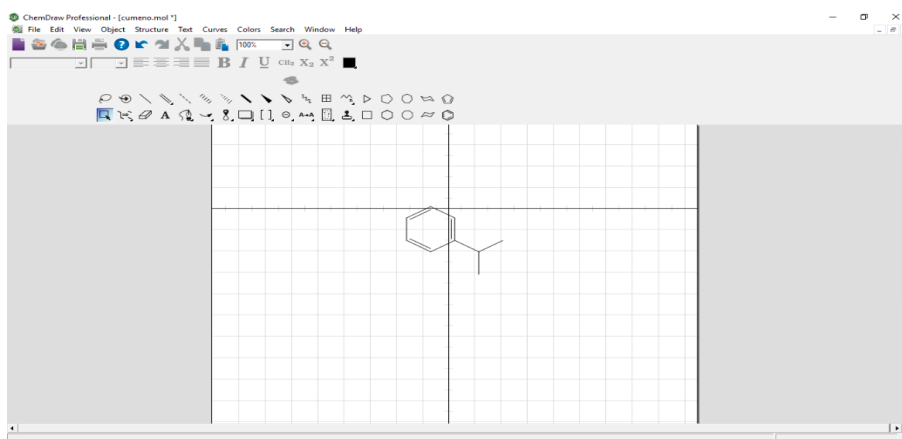
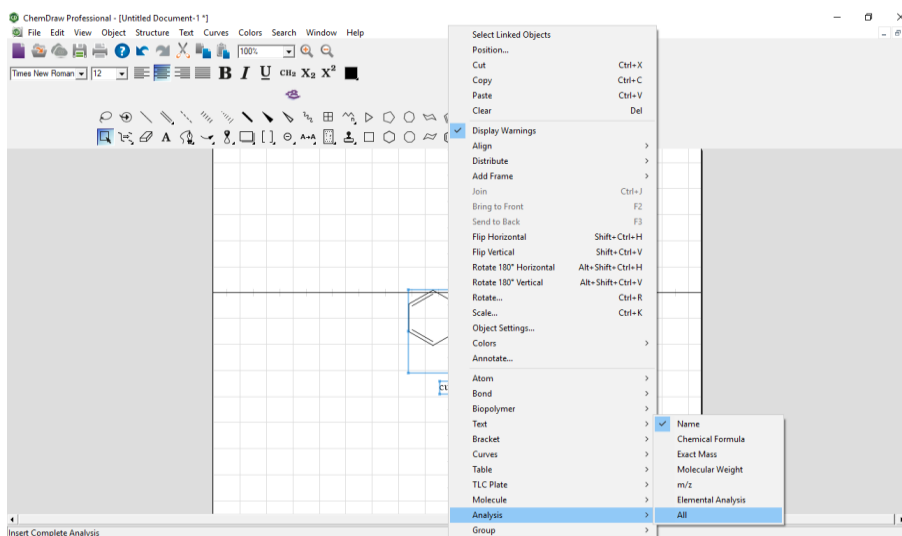


Figura 13

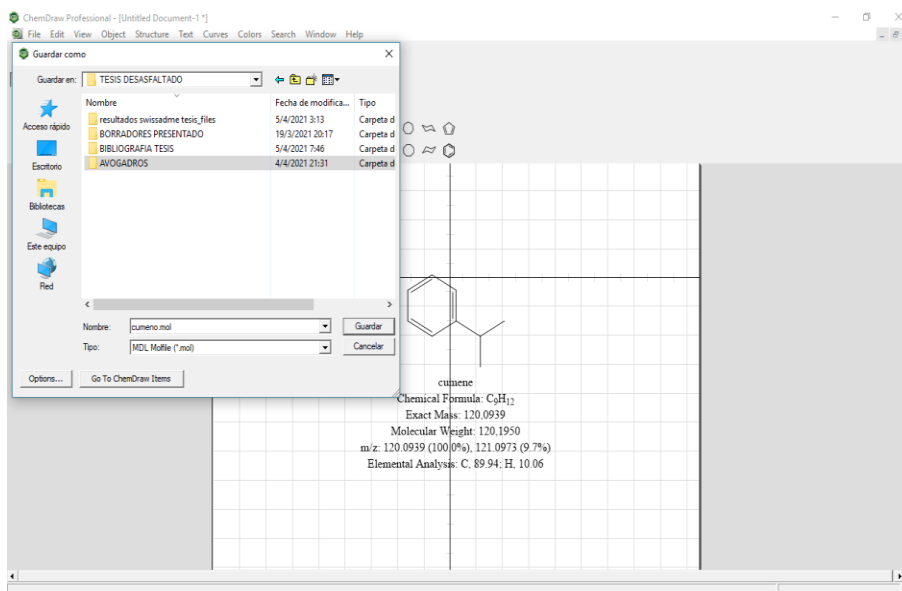
Análisis de las propiedades generales de la molécula



Para terminar, es necesario guardar la figura con el formato. mol que permite editar químicamente un compuesto y luego guardarlo sin cambiar su formato, permitiendo así continuar con el proceso por medio de Avogadro como editor en 3D.

Figura 14

Molécula en la extensión. mol



3.3 Cálculo de las estructuras 3D

Avogadro es una aplicación de código abierto que diseña moléculas tridimensionales en función de los sistemas Q-Chem, de ChemDraw, permitiéndole así dar a la molécula coordenadas 3D., por medio del llamado de alerta al abrir los documentos de la extensión. mol provenientes de ChemDraw Fig.15,16.

Figura 15

Archivo. mol en Avogadro

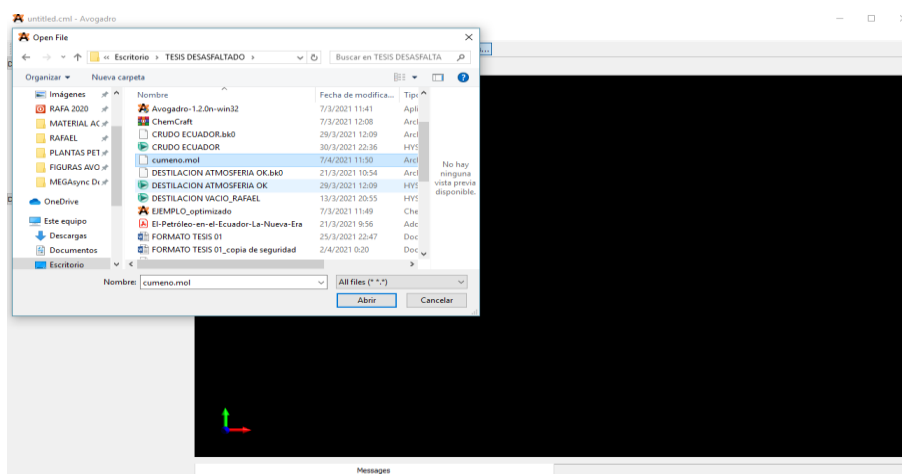
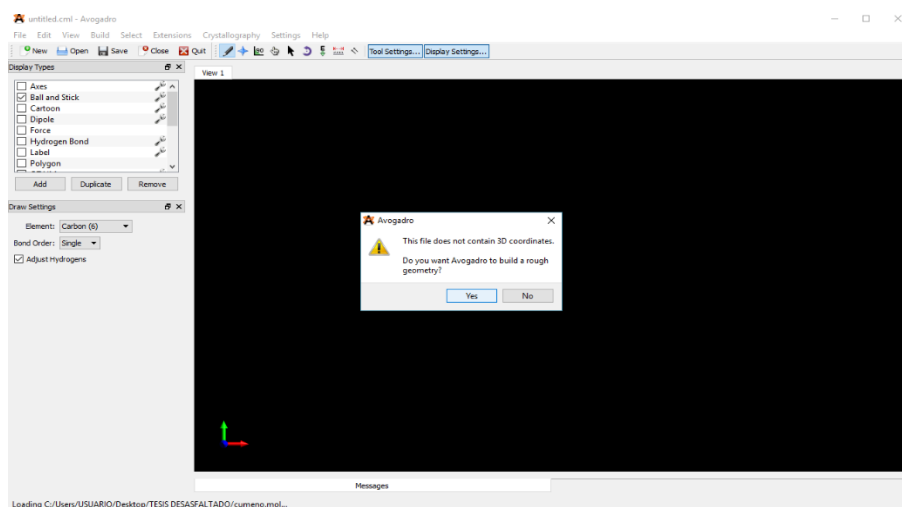


Figura 16

Construcción de la geometría 3D en Avogadro



Avogadro permite por medio de sus tipos de visualización identificar el nombre de cada átomo con la opción label, al igual que identificar por medio de un color de superficie un anillo aromático al seleccionar la opción Ring. Fig. 17, seleccionar además el ícono de Auto optimización previo a la selección del campo de fuerza adecuado

Figura 17

Isopropilbenceno sin optimizar su energía de conformación

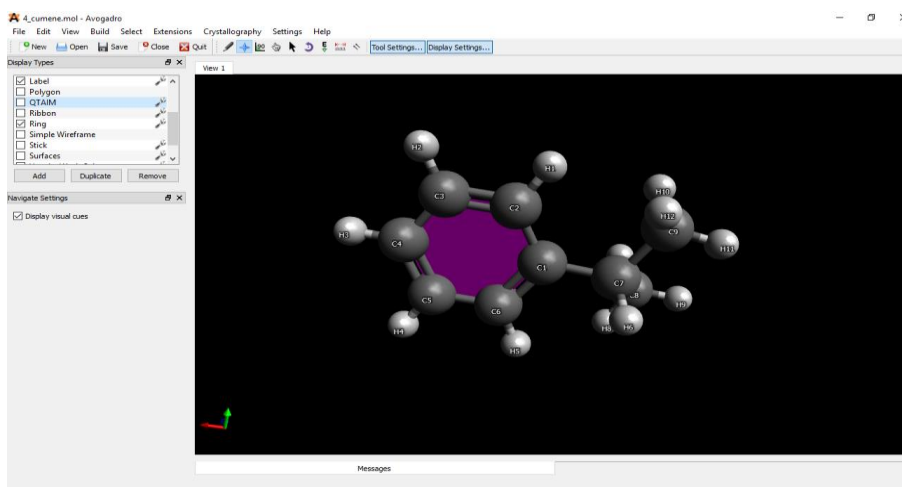
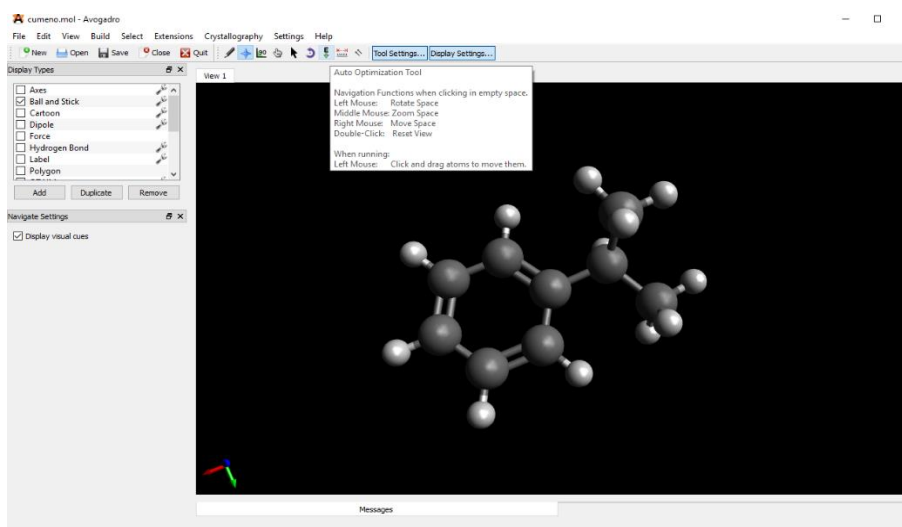


Figura 18

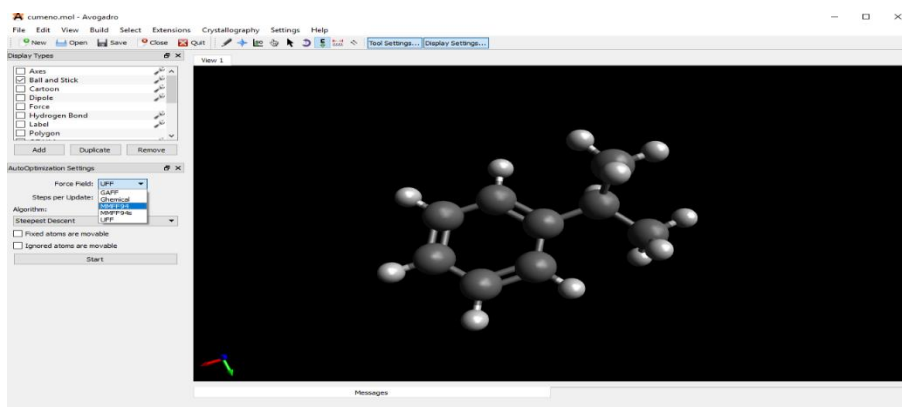
Auto optimización



Las moléculas orgánicas son optimizadas por el campo de fuerza MMFF94 de Merck a diferencia del campo de fuerza universal UFF Fig. 19

Figura 19

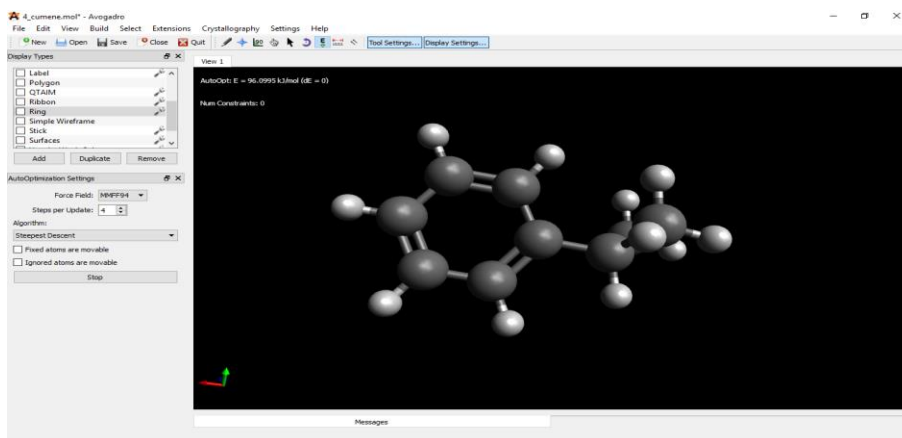
Selección del campo de fuerza



Al presionar *Start* empieza el cálculo de la energía de optimización por medio del campo de fuerza seleccionado, nótese la variabilidad de la molécula no optimizada y la expuesta en la Fig. 21., guardar la molécula con la extensión. mol identificándola como optimizada.

Figura 20

Guardar el archivo. mol optimizada



3.4 Obtención de la geometría de Angstrom

En la barra de herramientas acceder a la opción *Extensions* y dentro del submenú a la opción *GAMMESS-UK*, opción que permite conocer la dirección de cada uno de los átomos en 3D Fig. 21,22

Figura 21

La opción *Gamess-UK* y las direcciones 3D

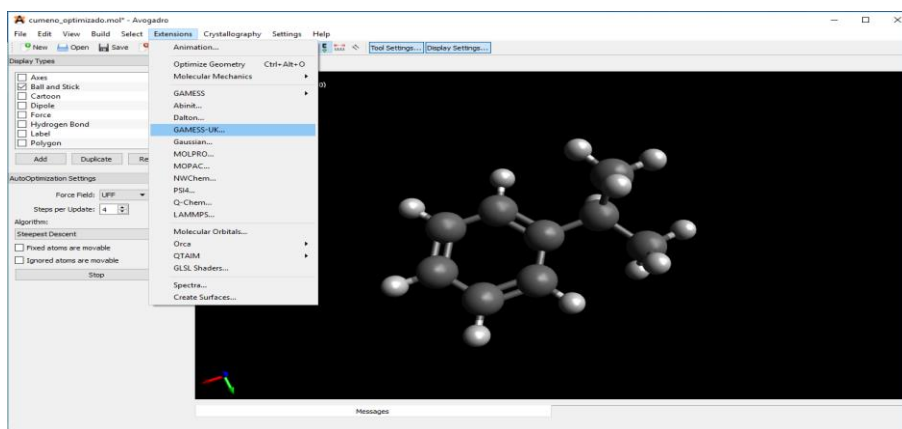
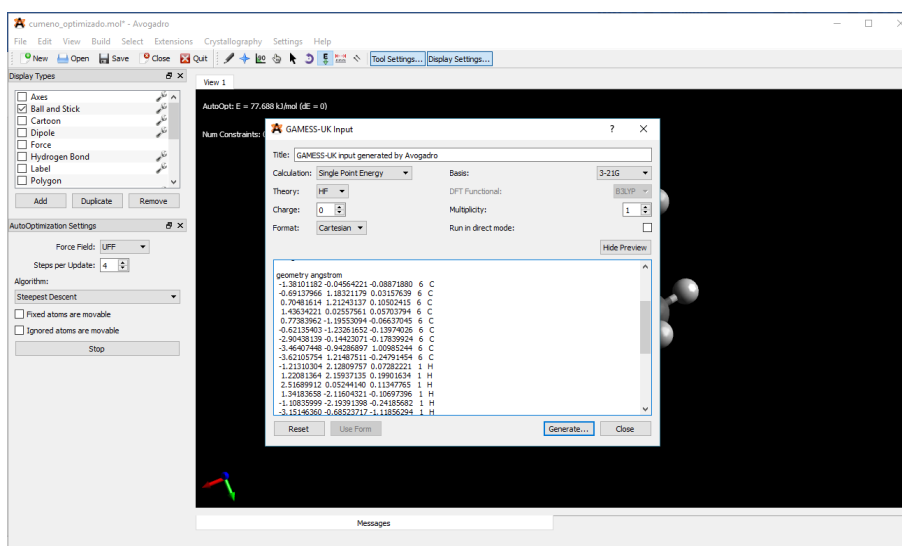


Figura 22

Geometría Angstrom



3.5 Obtención de la molécula en 3D optimizada por medio de Chemcraft

Luego de optimizar la molécula por medio de Avogadro, abrir el archivo. mol en Chemcraft, para luego por medio de la vista #3 *publication 3* extraer su figura en 3D. Fig. 24

Figura 23

Abrir el fichero. mol optimizada en Chemcraft

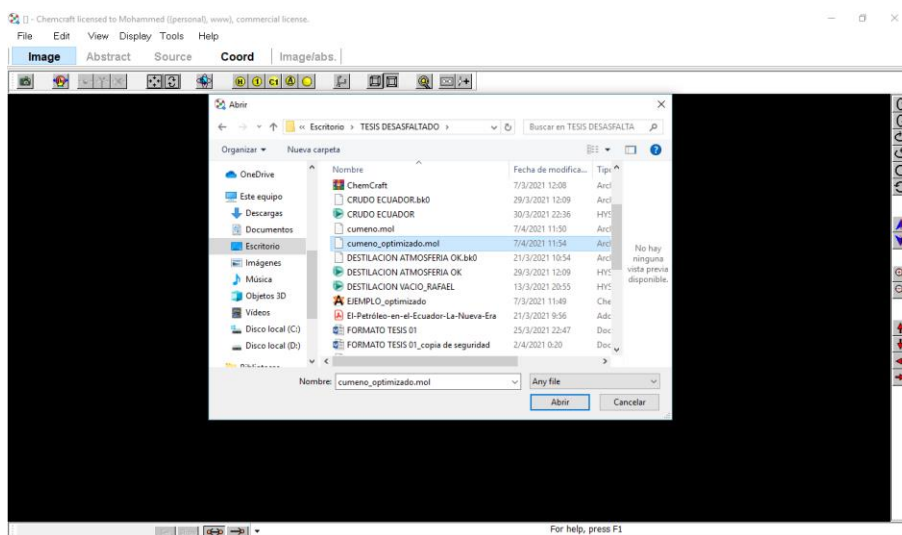


Figura 24

Selección de la vista #3

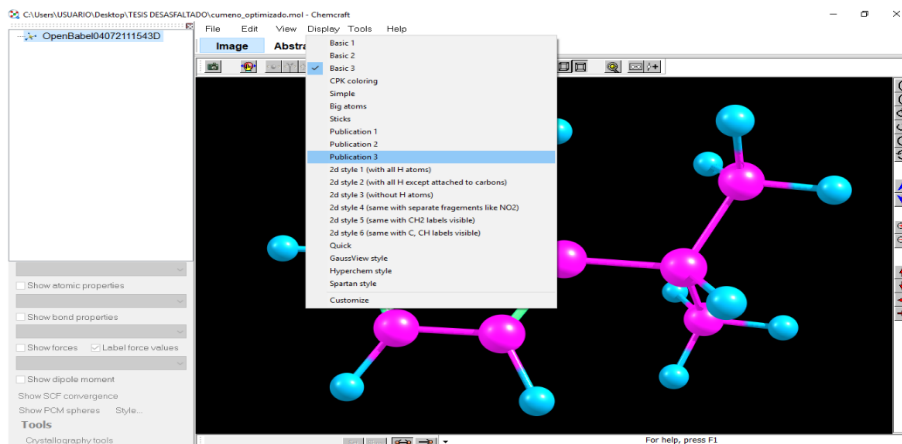
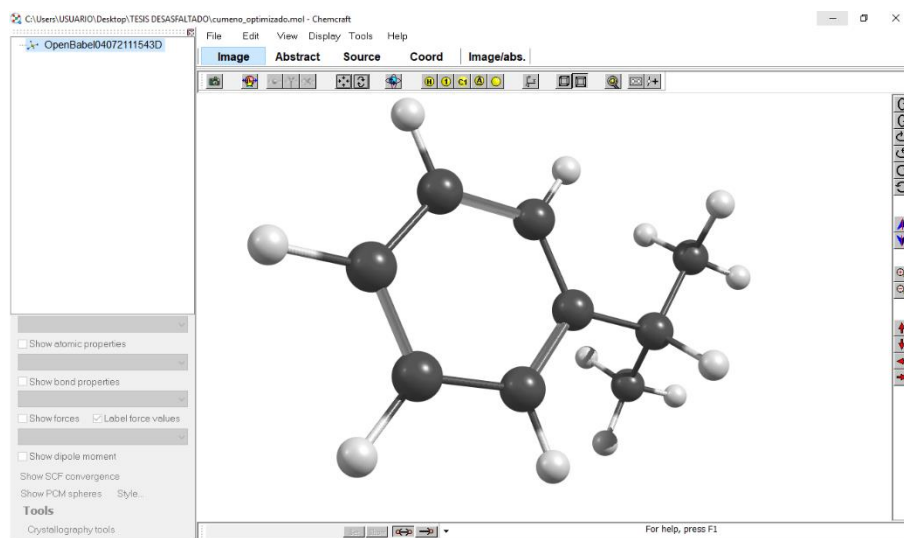


Figura 25

Molécula optimizada en 3D

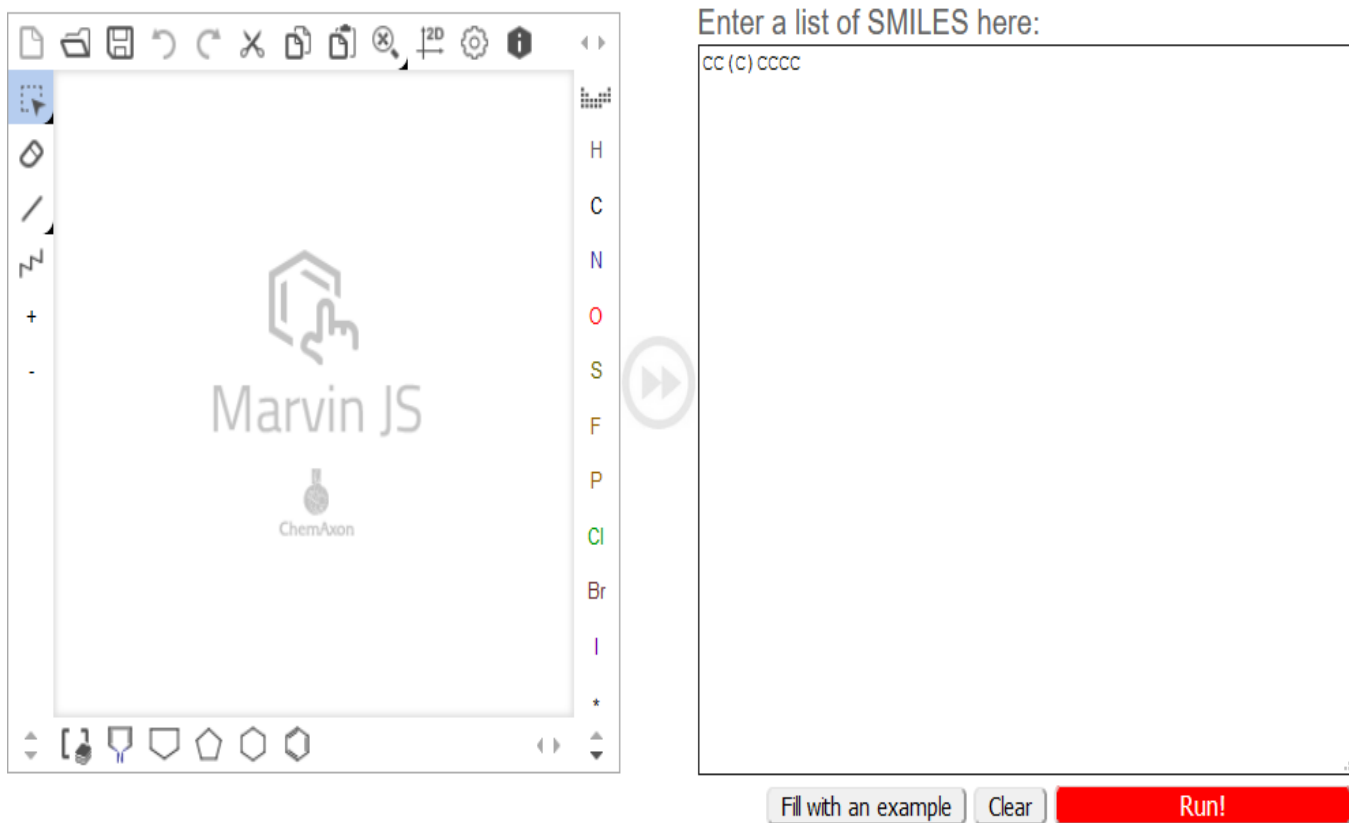


3.6 Cálculo de las propiedades fisicoquímicas

SwissADME al ser una herramienta de generación rápida de campos de fuerza capaz de generar para una molécula orgánica pequeña y arbitraria parámetros basados en el campo de fuerza molecular de Merck MMFF94, necesita únicamente el código SMILE generado al inicio de la metodología con la ayuda de ChemDraw, a este sitio web se lo puede acceder por medio de www.swissadme.ch Fig. 26

Figura 26

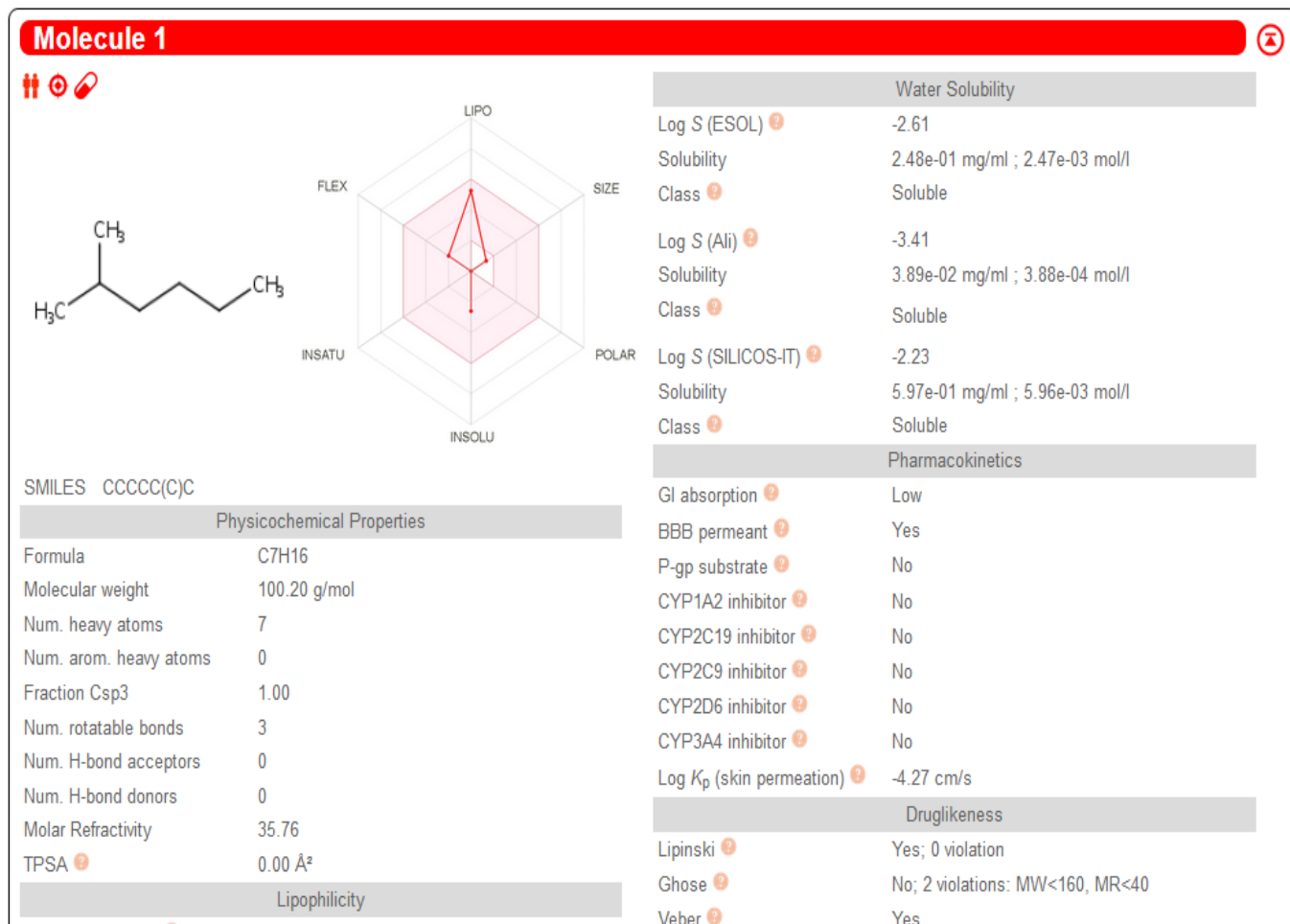
Código SMILES en SwissADME



The image shows a screenshot of the SwissADME web interface. On the left, there is a window for MarvIn JS, a ChemAxon tool, with a toolbar and a list of chemical elements (H, C, N, O, S, F, P, Cl, Br, I, *). A large play button is positioned between the MarvIn JS window and the SwissADME input field. The SwissADME interface features a text input field labeled "Enter a list of SMILES here:" containing the SMILES string CC(C)CCCC. Below the input field are three buttons: "Fill with an example", "Clear", and "Run!".

Figura 27

Propiedades físicoquímicas en SwissADME



CAPÍTULO IV

4. Resultados y discusión

A lo largo de las corrientes que caracterizan a la unidad de desasfaltado por propano se encuentran compuestos alifáticos y aromáticos del tipo: alquilbencenos, alquilnaftalenos, benzotiofenos, en una composición mayoritaria de C1 con un 50,81% determinado en la precipitación de asfaltenos del yacimiento Fahlian en Irán, valores mostrados en la Tabla 4.

El isoterma de desasfaltado convencional frente al isoterma de desasfaltado por medio del proceso ROSE muestra la deficiencia en torno a la recuperación del hidrocarburo utilizado en el proceso frente a las condiciones supercríticas, situación que contrasta con la fig. 8 en donde el calentar el afluente del separador del A al D, permite una recuperación del 85% - 93% de disolvente en condiciones supercríticas desarrollando un proceso rentable en cuanto al gasto de solvente con leve incremento en el gasto energético de operación debido al calentamiento entre el 7 y el 15% de disolvente.

El crudo ecuatoriano al tener una relación de Conradson de 10,976% mostrado en la tabla 1 respecto a sus propiedades fisicoquímicas muestra que es un crudo apto para ser analizado por medio de la propuesta de Irudayaraj, quien tuvo como principal objetivo de su investigación lograr un proceso de desasfaltado mejorado y flexible que pueda producir aceite desasfaltado con una mayor proporción de saturados respecto a los aromáticos como base para la producción de LOBs

El proceso de desasfaltado de la corriente residual de destilación atmosférica del petróleo crudo ecuatoriano es propenso a presentar menores inconvenientes respecto a la deposición de estos en la tubería en contraste con las características fisicoquímicas expuestas por Jones en el crudo Arabian American Oil de Aramco que alcanza un 2,7% de Carbón de Conradson expuesto en la tabla 2.

Respecto a las propiedades fisicoquímicas de las principales moléculas que conforman tanto las corrientes de entrada como de salida de la unidad de desasfaltado es notoria la superioridad en cuanto al porcentaje que ocupa el carbono y presentan una ligera composición respecto al azufre en el caso del tiofano y tiofeno expuestos en la tabla 18 y 19 del presente apartado. En cuanto a la energía de optimización prevista por Avogadro se observa un mayor valor de energía de optimización en aquellos de carácter nafténico, tal es el caso de 2,3,6-trimetilnaftleno expuesto en la tabla 35 diferencia de tiofano con 2,1991 kJ/mol como el valor minoritario expuesto

Gracias a SwissADME se definió la Lipofilia promedio de los hidrocarburos presentes en el proceso de desasfaltado en un rango de 1 a 5 según el Consenso Log Po/w (iLOGP), mostrando como era de esperarse un comportamiento mayoritario en cuanto a la presencia de insaturados en el radar expuesto en cada uno de las siguientes moléculas (1-65)

Tabla 7*Alquilbencenos.*

# Orden	Nombre
1	Tolueno
2	o-Xileno
3	m-Xileno
4	p-Xileno
5	Etilbenceno
6	Isopropilbenceno
7	p-Isopropilbenceno

Tabla 8*Alquilnaftalenos.*

# Orden	Nombre
8	Naftaleno
9	1-metilnaftaleno
10	2-metilnaftaleno
11	1,3-dimetilnaftaleno
12	1,4-dimetilnaftaleno
13	1,5-dimetilnaftaleno
14	1,6-dimetilnaftaleno
15	2,6-dimetilnaftaleno
16	2,7-dimetilnaftaleno
17	1,4,6-trimetilnaftaleno
18	1,3,5- trimetilnaftaleno
19	1,3,7- trimetilnaftaleno
20	1,2,5- trimetilnaftaleno
21	1,3,6- trimetilnaftaleno
22	2,3,6- trimetilnaftaleno

Tabla 9*Benzotiofenos.*

# Orden	Nombre
23	Tiofano
24	Tiociclohexano
25	1,1,4,6,9-Pentametil- 1,2,3,4,4,9- hexahidrodibenzotiofeno
27	1,4,4-trimetil-4,5,6,7- tetrahidroisotiofeno

# Orden	Nombre
28	2,3-dimetil-5-(2,6,10-trimetilundecil)tiofeno
29	Tiofeno
30	Benzotiofeno
31	Naftenobenzotiofeno
32	Dibenzotiofeno
33	Naftenodibenzotiofeno
34	Nafto[1,2]tiofeno
35	Benzonaftógeno[1,2]tiofeno
36	Benzonaftógeno[2,1]tiofeno
37	Benzonaftógeno[2,3]tiofeno
38	Fenantrotiofeno
39	Crisotiofeno
40	Dinaftotiofeno
41	2,2-Bitiofeno
42	Tienodibenzotiofeno
43	Fenantreno
44	Criseno

Tabla 10

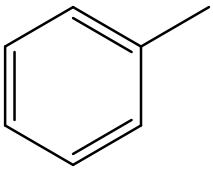
Hidrocarburos alifáticos

# Orden	Nombre
45	Metano
46	Etano
47	Propano
48	Butano
49	2-metilpropano
50	Pentano
51	2-metilpentano
52	2,2-dimetilpropano
53	Hexano
54	2-metilpentano
55	3-Metilpentano
56	2,3-Dimetilbutano
57	2,2 Dimetilbutano
58	3-etilpentano
59	2-metilhexano
60	2,2,3 trimetilbutano
61	2-metilheptano
62	2,2,3-trimetilpentano
63	3-etil-3-metilhexano
64	3,5-dimetilheptano
65	2,2-dimetiloctano

Principales moléculas del proceso de desasfaltado (ChemDraw)

Tabla 11

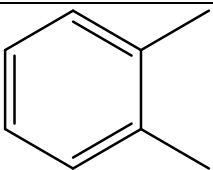
Molécula N° 1. tolueno.

Tolueno – Alquilbenceno	
	
Nomenclatura IUPAC	Metilbenceno
Código SMILES	<chem>CC1=CC=CC=C1</chem>
Fórmula Química	C_7H_8
Peso Molecular	92.1410
Análisis Elemental	C: 91,25%, H: 8,75%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

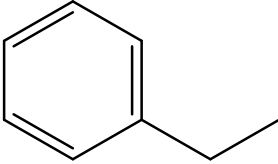
Tabla 12

Molécula N° 2. o-Xileno.

m-Xileno - Alquilbenceno	
	
Nomenclatura IUPAC	m-xileno
Código SMILES	<chem>CC1=CC=CC=C1C</chem>
Fórmula Química	C_8H_{10}
Peso Molecular	106,1680
Análisis Elemental	C: 90,51%, H: 9,49%

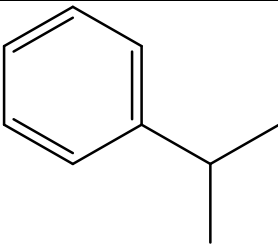
Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 13Molécula N° 5. *etilbenceno*.

Etilbenceno – Alquilbenceno	
	
Nomenclatura IUPAC	etilbenceno
Código SMILES	<chem>CCC1=CC=CC=C1</chem>
Fórmula Química	C_8H_{10}
Peso Molecular	106,1680
Análisis Elemental	C: 90,51%, H: 9,49%

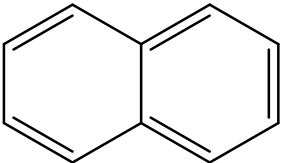
Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 14Molécula N° 6. *isopropilbenceno*.

Isopropilbenceno - Alquilbenceno	
	
Nomenclatura IUPAC	Isopropilbenceno
Código SMILES	<chem>CC(C1=CC=CC=C1)C</chem>
Fórmula Química	C_9H_{12}
Peso Molecular	120,0939
Análisis Elemental	C: 89,94%, H: 10,06%

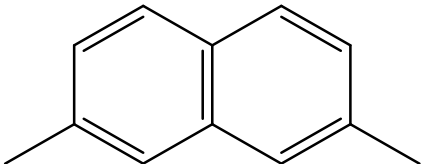
Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 15Molécula N° 8. *naftaleno*

Naftaleno - Alquilnaftalenos	
	
Nomenclatura IUPAC	naftaleno
Código SMILES	<chem>C1=CC=CC=C1C=CC=C2</chem>
Fórmula Química	$C_{10}H_8$
Peso Molecular	128,1740
Análisis Elemental	C: 93,71%, H: 6,29%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

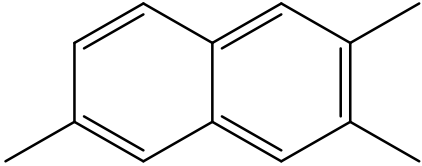
Tabla 16Molécula N°16. *2,7-dimetilnaftaleno*.

2,7-Dimetilnaftaleno – Alquilnaftalenos	
	
Nomenclatura IUPAC	2,7-dimetilnaftaleno
Código SMILES	<chem>CC(C=C1)=CC2=C1C=CC(C)=C2</chem>
Fórmula Química	$C_{12}H_{12}$
Peso Molecular	156,0939
Análisis Elemental	C: 92,26%, H: 7,74%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 17

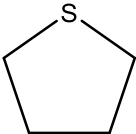
Molécula N°16. 2,7-dimetilnaftaleno.

2,3,6-Trimetilnaftaleno - Alquilnaftalenos	
	
Nomenclatura IUPAC	2,3,6-trimetilnaftaleno
Código SMILES	<chem>CC1=CC2=CC(C)=C(C)C=C2C=C1</chem>
Fórmula Química	$C_{13}H_{14}$
Peso Molecular	170,2550
Análisis Elemental	C: 91,71%, H: 8,29%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 18

Molécula N°23. tiofano.

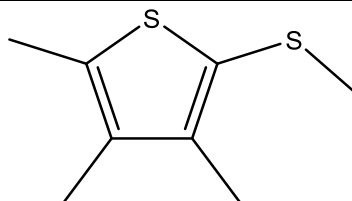
Tiofano - Benzotiofenos	
	
Nomenclatura IUPAC	tiofano
Código SMILES	<chem>S1CCCC1</chem>
Fórmula Química	C_4H_4S
Peso Molecular	88,1680
Análisis Elemental	C: 54,49%, H: 9,15%, S:36,36%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 19

Molécula N°26. metil-3,4,5-trimetil-2-sulfuro de tienilo.

2,3,4-trimetil-5-(metiltio)tiofeno - Benzotiofenos



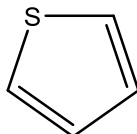
Nomenclatura IUPAC	2,3,4-trimetil-5-(metiltio)tiofeno
Código SMILES	<chem>CC1=C(C)C(C)=C(SC)S1</chem>
Fórmula Química	$C_8H_{12}S_2$
Peso Molecular	172,3040
Análisis Elemental	C: 55,77%, H: 7,02%, S:37,21%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 20

Molécula N°29. tiofeno.

Tiofeno – Benzotiofenos

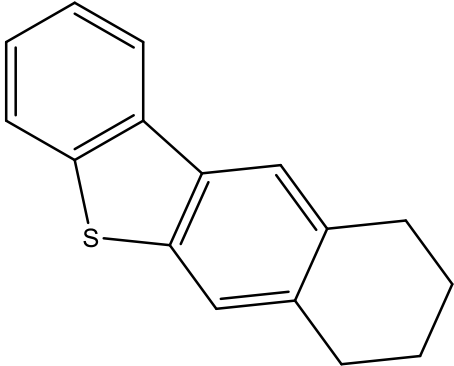


Nomenclatura IUPAC	Tiofeno
Código SMILES	<chem>C1=CC=CS1</chem>
Fórmula Química	C_4H_4S
Peso Molecular	84,1360
Análisis Elemental	C: 57,10%, H: 4,79%, S:38,10%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 21

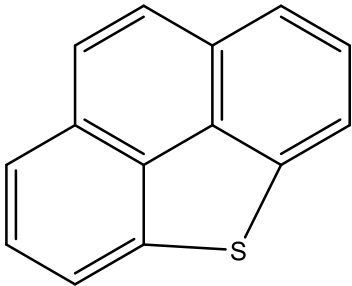
Molécula N°33. naftenodibenzotiofeno.

Naftenodibenzotiofeno - Benzotiofenos	
	
Nomenclatura IUPAC	naftenodibenzotiofeno
Código SMILES	<chem>C1(SC2=C3C=C4C(CCCC4)=C2)=C3C=CC=C1</chem>
Fórmula Química	$C_{16}H_{14}S$
Peso Molecular	238,0816
Análisis Elemental	C: 80,63%, H: 5,92%, S:13,45%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 22

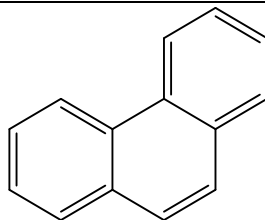
Molécula N°38. fenantrotiofeno.

Fenantrotiofeno – Benzotiofenos	
	
Nomenclatura IUPAC	Fenantrotiofeno
Código SMILES	<chem>C12=CC=CC3=C1C4=C(C=C3)C=CC=C4S2</chem>
Fórmula Química	$C_{14}H_8S$
Peso Molecular	208,2780
Análisis Elemental	C: 80,74%, H: 3,87%, S:15,39%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 23

Molécula N°43. fenantreno.

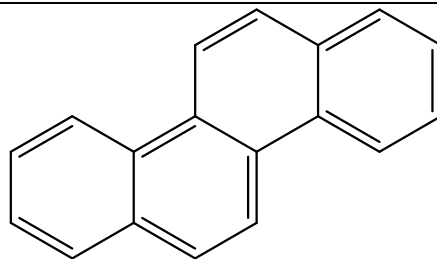
Fenantreno - Benzotiofenos

Nomenclatura IUPAC	fenantreno
Código SMILES	<chem>C12=CC=CC=C1C=CC3=CC=CC=C23</chem>
Fórmula Química	$C_{14}H_{10}$
Peso Molecular	178,2340
Análisis Elemental	C: 94,34%, H: 5,66%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 24

Molécula N°44. criseno.

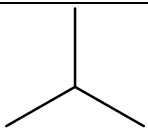
Criseno – Benzotiofenos

Nomenclatura IUPAC	Criseno
Código SMILES	<chem>C12=CC=CC=C1C=CC3=C4C=CC=CC4=CC=C23</chem>
Fórmula Química	$C_{18}H_{12}$
Peso Molecular	228,2940
Análisis Elemental	C: 94,70%, H: 5,30%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 25

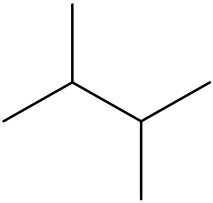
Molécula N°49. 2-metilpropano

2-Metilpropano - Hidrocarburo alifático	
	
Nomenclatura IUPAC	Isobutano
Código SMILES	CC(C)C
Fórmula Química	C ₄ H ₁₀
Peso Molecular	58,0783
Análisis Elemental	C: 82,66%, H: 17,34%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 26

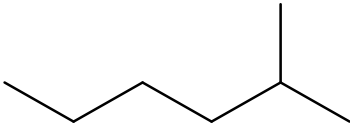
Molécula N°56. 2,3-dimetilbutano.

2,3-Dimetilbutano - Hidrocarburo alifático	
	
Nomenclatura IUPAC	2,3-dimetilbutano
Código SMILES	CC(C)C(C)C
Fórmula Química	C ₆ H ₁₄
Peso Molecular	86,1780
Análisis Elemental	C: 83,62%, H: 16,38%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 27

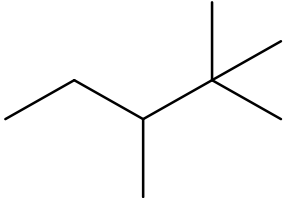
Molécula N°59. 2-metilhexano.

2-metilhexano - Hidrocarburo alifático	
	
Nomenclatura IUPAC	2-metilhexano
Código SMILES	<chem>CC(C)CCCC</chem>
Fórmula Química	C_7H_{16}
Peso Molecular	100,2050
Análisis Elemental	C: 83,90%, H: 16,10%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Tabla 28

Molécula N°62. 2,2,3-trimetilpentano

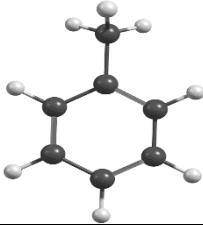
2,2,3-Trimetilpentano - Hidrocarburo alifático	
	
Nomenclatura IUPAC	2,2,3-trimetilpentano
Código SMILES	<chem>CC(C)(C)C(C)CC</chem>
Fórmula Química	C_8H_{18}
Peso Molecular	114,2320
Análisis Elemental	C: 84,12%, H:15,88%

Nota: ChemDraw Professional v. 17.0

Geometría de Angstrom (Avogadro)

Tabla 29

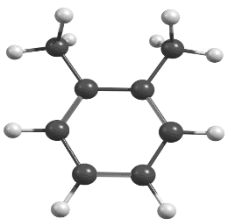
Molécula N° 1. tolueno.

TOLUENO			
			
Energía de optimización (kJ/mol)	77,1107		
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	-1.41	-0.08	-0.06
C	1.38	0.06	0.05
C	-0.76	1.16	-0.10
C	-0.64	-1.24	0.01
C	0.62	1.23	-0.04
C	0.74	-1.17	0.08
C	-2.90	-0.16	-0.16
H	2.46	0.12	0.09
H	-1.34	2.07	-0.18
H	-1.12	-2.22	0.03
H	1.11	2.20	-0.07
H	1.33	-2.08	0.14
H	-3.38	0.72	0.27
H	-3.29	-1.03	0.37
H	-3.20	-0.24	-1.21

Nota: Avogadro 1.2.0

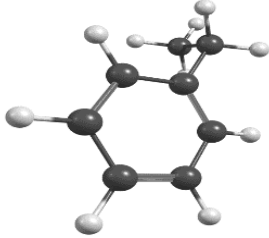
Tabla 30

Molécula N° 2. *o*-Xileno.

o-xileno			
			
Energía de optimización (kJ/mol)		97,0877	
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	-1.41	-0.08	-0.06
C	1.38	0.06	0.05
C	-0.76	1.16	-0.10
C	-0.64	-1.24	0.01
C	0.62	1.23	-0.04
C	0.74	-1.17	0.08
C	-2.90	-0.16	-0.16
H	2.46	0.12	0.09
H	-1.34	2.07	-0.18
H	-1.12	-2.22	0.03
H	1.11	2.20	-0.07
H	1.33	-2.08	0.14
H	-3.38	0.72	0.27
H	-3.29	-1.03	0.37
H	-3.20	-0.24	-1.21

Nota: Avogadro 1.2.0

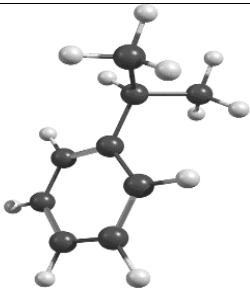
Tabla 31Molécula N° 5. *etilbenceno*.

Etilbenceno			
			
Energía de optimización (kJ/mol)	75,6023		
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	-1.34	0.10	-0.40
C	-0.51	1.16	-0.79
C	0.84	1.14	-0.49
C	1.39	0.05	0.18
C	0.58	-0.99	0.58
C	-0.78	-0.97	0.29
C	-2.82	0.13	-0.70
C	-3.60	0.80	0.41
H	-0.93	2.01	-1.32
H	1.48	1.96	-0.80
H	2.45	0.04	0.41
H	1.00	-1.84	1.12
H	-1.40	-1.80	0.61
H	-2.99	0.66	-1.64
H	-3.18	-0.88	-0.85
H	-3.28	1.84	0.56
H	-3.48	0.27	1.36
H	-4.67	0.813	0.168

Nota: Avogadro 1.2.0

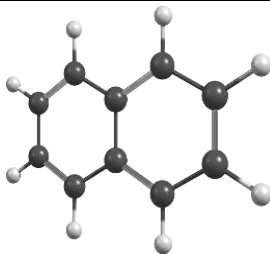
Tabla 32

Molécula N° 6. *isopropilbenceno*.

Isopropilbenceno			
			
Energía de optimización (kJ/mol)	96,0995		
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	-1.39	-0.15	-0.01
C	-0.74	0.90	0.64
C	0.64	1.00	0.64
C	1.41	0.04	-0.01
C	0.79	-1.01	-0.65
C	-0.60	-1.11	-0.65
C	-2.90	-0.28	-0.02
C	-3.46	-0.45	1.39
C	-3.56	0.90	-0.73
H	-1.32	1.67	1.15
H	1.12	1.83	1.15
H	2.49	0.12	0.01
H	1.38	-1.77	-1.15
H	-1.06	-1.95	-1.16
H	-3.17	-1.18	-0.58
H	-3.29	0.43	2.01
H	-4.55	-0.63	1.35
H	-3.39	1.84	-0.20
H	-4.64	0.75	-0.81
H	-3.16	1.01	-1.75

Nota: Avogadro 1.2.0

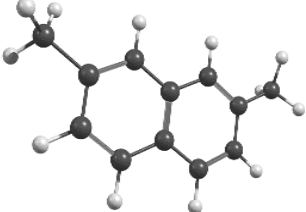
Tabla 33Molécula N° 8. *naftaleno*.

Naftaleno			
			
Energía de optimización (kJ/mol)	130,347		
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	1.24	-1.38	0.018
C	2.44	-0.67	0.02
C	2.42	0.71	0.02
C	1.20	1.40	0.01
C	-0.01	0.69	-0.01
C	-1.24	1.36	-0.02
C	-2.44	0.65	-0.03
C	-2.42	-0.73	-0.02
C	-1.20	-1.41	-0.01
C	0.01	-0.71	-0.02
H	1.27	-2.47	0.02
H	3.39	-1.20	0.04
H	3.35	1.27	0.03
H	1.21	2.48	0.01
H	-1.27	2.45	-0.02
H	-3.38	1.18	-0.04
H	-3.35	-1.29	-0.03
H	-1.21	-2.50	-0.01

Nota: Avogadro 1.2.0

Tabla 34

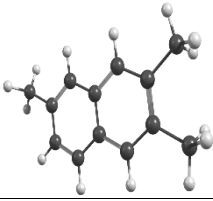
Molécula N°16. 2,7-dimetilnaftaleno

2,7-dimetilnaftaleno			
			
Energía de optimización (kJ/mol)	147,814		
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	2.42	0.75	-0.04
C	2.45	-0.64	-0.07
C	1.25	-1.35	-0.05
C	0.01	-0.69	-0.01
C	-0.01	0.71	0.01
C	1.20	1.42	-0.01
C	-1.20	-1.40	-0.01
C	-2.43	-0.73	0.04
C	-2.44	0.66	0.05
C	-1.24	1.37	0.03
C	-3.71	-1.50	0.02
C	3.76	-1.38	-0.10
H	3.34	1.32	-0.05
H	1.27	-2.44	-0.07
H	1.20	2.51	0.01
H	-1.18	-2.49	-0.03
H	-3.38	1.20	0.07
H	-1.28	2.46	0.05
H	-3.58	-2.51	0.43
H	-4.08	-1.59	-1.00
H	-4.47	-1.00	0.63
H	4.614	-0.69	-0.15
H	3.80	-2.02	-0.99
H	3.87	-2.00	0.79

Nota: Avogadro 1.2.0

Tabla 35

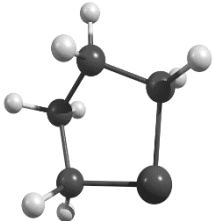
Molécula N°22. 2,3,6-trimetilnaftaleno

2,3,6-trimetilnaftaleno			
			
Energía de optimización (kJ/mol)	162,496		
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	1.19	1.40	-0.04
C	2.43	0.74	-0.07
C	2.46	-0.66	-0.07
C	1.25	-1.37	-0.04
C	0.01	-0.71	-0.01
C	-1.20	-1.42	0.01
C	-2.43	-0.76	0.04
C	-2.45	0.63	0.03
C	-1.25	1.35	0.01
C	-0.01	0.69	-0.01
C	-3.72	-1.52	0.04
C	3.73	-1.46	-0.11
C	3.69	1.56	-0.10
H	1.17	2.49	-0.01
H	1.27	-2.45	-0.01
H	-1.18	-2.51	0.01
H	-3.39	1.17	0.04
H	-1.29	2.44	0.01
H	-3.55	-2.58	0.25
H	-4.21	-1.44	0.81
H	-4.39	-1.14	0.81
H	4.63	-0.83	-0.13
H	3.75	-2.08	-1.01
H	3.80	-2.10	0.77
H	3.47	2.64	-0.07
H	4.25	1.37	-1.02
H	4.32	1.33	0.76

Nota: Avogadro 1.2.0

Tabla 36

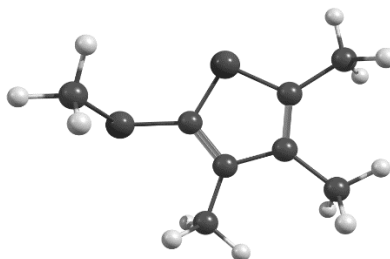
Molécula N°23. tiofano.

Tiofano			
			
Energía de optimización (kJ/mol)		2,1991	
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
S	-0.92	-1.22	0.27
C	0.85	-1.09	-0.04
C	-1.23	0.56	0.31
C	1.19	0.36	0.23
C	0.02	1.18	-0.27
H	1.04	-1.34	-1.09
H	1.41	-1.77	0.58
H	-1.37	0.87	1.35
H	-2.12	0.82	-0.25
H	2.13	0.64	-0.25
H	1.33	0.52	1.31
H	0.11	2.23	0.01
H	-0.01	1.15	-1.37

Nota: Avogadro 1.2.0

Tabla 37

Molécula N°26. 2,3,4-trimetil-5-(metiltio)tiofeno.

2,3,4-trimetil-5-(metiltio)tiofeno

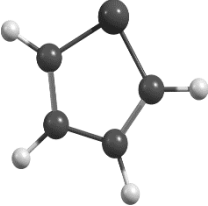
Energía de optimización (kJ/mol) 47,8198

Geometría Angstrom

	X	Y	Z
S	-0.48	-1.41	-0.61
C	1.05	-0.70	-0.52
C	-1.27	0.03	-0.19
C	0.99	0.64	-0.20
C	-0.38	1.08	-0.017
S	2.53	-1.61	-0.88
C	-2.76	0.056	-0.081
C	2.18	1.53	-0.07
C	-0.77	2.48	0.32
C	2.33	-3.05	0.19
H	-3.20	-0.94	-0.11
H	-3.19	0.63	-0.90
H	-3.06	0.51	0.86
H	2.94	1.08	0.57
H	1.93	2.50	0.37
H	2.62	1.72	-1.05
H	-1.85	2.63	0.26
H	-0.30	3.19	-0.37
H	-0.45	2.73	1.33
H	3.26	-3.62	0.19
H	1.53	-3.70	-0.17
H	2.11	-2.74	1.21

Nota: Avogadro 1.2.0

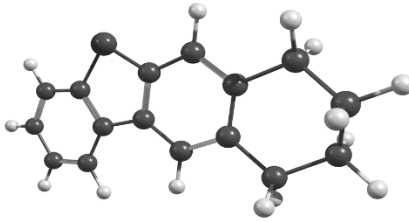
Tabla 38Molécula N°29. *tiofeno*.

Tiofeno			
			
Energía de optimización (kJ/mol)		18,3347	
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	-1.27	-0.01	-0.01
C	-0.38	-1.14	-0.00
C	0.96	-0.70	0.00
C	1.06	0.67	-0.00
S	-0.46	1.42	-0.00
H	-2.35	-0.12	-0.00
H	-0.69	-2.18	0.00
H	1.83	-1.36	0.00
H	1.96	1.27	0.00

Nota: Avogadro 1.2.0

Tabla 39

Molécula N°33. naftenodibenzotiofeno.

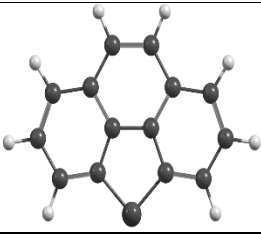
Naftenodibenzotiofeno			
			
Energía de optimización (kJ/mol)		182,077	
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	-4.70	0.57	-0.00
C	-4.04	-0.66	0.00
C	-2.63	-0.69	0.00
C	-1.87	0.47	-0.00
C	-2.57	1.71	-0.00
C	-3.97	1.75	-0.00
S	-1.64	-2.08	0.00
H	-0.19	-1.16	-0.00
H	-0.45	0.19	-0.00
H	1.12	-1.67	-0.00
H	2.21	-0.78	-0.01
H	1.97	0.59	0.00
H	0.65	1.08	-0.00
H	3.61	-1.34	0.00
H	4.68	-0.33	-0.38
H	4.46	0.98	0.35
H	3.11	1.59	-0.03
H	-5.78	0.60	-0.00
H	-4.61	-1.5	0.00
H	-2.02	2.64	-0.01
H	-4.48	2.70	-0.01
H	1.29	-2.74	-0.00
H	0.48	2.15	-0.00
H	3.67	-2.20	-0.66
H	3.80	-1.70	1.026
H	4.64	-0.15	-1.46
H	5.67	-0.73	-0.15

	X	Y	Z
H	5.26	1.68	0.11
H	4.49	0.80	1.43
H	3.18	1.99	-1.04
H	2.90	2.42	0.64

Nota: Avogadro 1.2.0

Tabla 40

Molécula N°38. *fenantrotiofeno*.

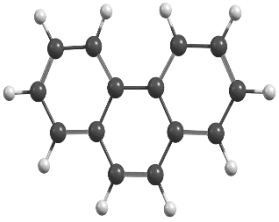
Fenantrotiofeno			
			
Energía de optimización (kJ/mol)	228,721		
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	1.39	-1.00	0.09
C	1.01	0.32	0.03
C	-0.39	0.51	0.06
C	-1.10	-0.67	0.13
S	-0.00	-2.01	0.17
C	3.33	1.01	-0.05
C	3.71	-0.33	0.00
C	2.75	-1.35	0.07
C	-2.50	-0.66	0.16
C	-3.16	0.57	0.12
C	-2.45	1.77	0.04
C	-1.04	1.76	0.01
C	-0.09	2.83	-0.06
C	1.32	2.65	-0.08
C	1.96	1.36	-0.03
H	4.09	1.78	-0.10
H	4.76	-0.59	-0.00
H	3.06	-2.39	0.12
H	-3.07	-1.58	0.22
H	-4.25	0.60	0.14

	X	Y	Z
H	-2.98	2.72	0.01
H	-0.47	3.85	-0.1
H	1.96	3.53	-0.14

Nota: Avogadro 1.2.0

Tabla 41

Molécula N°43. fenantreno.

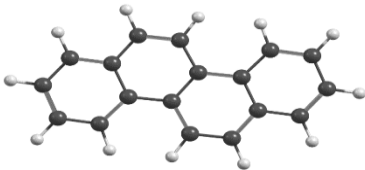
Fenantreno			
			
Energía de optimización (kJ/mol)	220,899		
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	2.81	0.87	2.9e-4
C	3.56	-0.29	-3.8e-5
C	2.91	-1.52	-2.6e-4
C	1.51	-1.56	-1.2e-4
C	0.71	-0.39	2.3e-4
C	-0.72	-0.39	4.0e-4
C	-1.51	-1.56	3.1e-4
C	-2.91	-1.51	4.9e-4
C	-3.56	-0.29	7.5e-4
C	-2.81	0.87	8.5e-4
C	-1.41	0.84	6.9e-4
C	-0.69	2.04	8.4e-4
C	0.69	2.04	7.2e-4
C	1.41	0.84	4.1e-4
H	3.34	1.82	4.6e-4
H	4.65	-0.25	1.3e-4
H	3.48	-2.44	5.4e-4
H	1.05	-2.55	3.2e-4
H	-1.06	-2.55	1.1e-4
H	-3.49	-2.44	4.2e-4
H	-4.65	-0.25	8.8e-4

	X	Y	Z
H	-3.34	1.83	1.0e-4
H	-1.21	2.99	1.0e-4
H	1.21	2.99	8.6e-4

Nota: Avogadro 1.2.0

Tabla 42

Molécula N°44. Criseno.

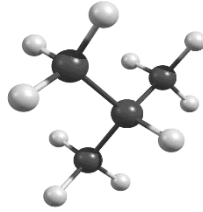
Criseno			
			
Energía de optimización (kJ/mol)	313,707		
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	3.80	1.13	4.0e-4
C	4.69	0.06	7.5e-4
C	4.19	-1.23	1.3e-3
C	2.81	-1.45	1.5e-3
C	1.87	-0.38	1.2e-3
C	0.43	-0.56	1.6e-3
C	-0.17	-1.8	2.6e-3
C	-1.55	-2.00	3.0e-3
C	-2.40	-0.91	2.3e-3
C	-3.79	-1.12	2.8e-3
C	-4.68	-0.05	2.0e-3
C	-4.19	1.24	6.8e-4
C	-2.81	1.45	2.1e-4
C	-1.86	0.39	1.1e-3
C	-0.43	0.56	9e-4
C	0.17	1.84	1.5e-4
C	1.55	2.01	9.5e-5
C	2.41	0.91	5.7e-4
H	4.20	2.14	-1e-5
H	5.76	0.24	5e-4
H	4.88	-2.07	1.5e-3
H	2.48	-2.07	1.5e-3

	X	Y	Z
H	0.42	-2.74	3.0e-3
H	-1.95	-3.02	4.0e-3
H	-4.20	-2.13	3.9e-3
H	-5.75	-0.23	2.4e-3
H	-4.87	2.08	6.5e-5
H	-2.48	2.49	-9.1e-4
H	-0.42	2.74	2.6e-4
H	1.95	3.02	-3.9e-4

Nota: Avogadro 1.2.0

Tabla 43

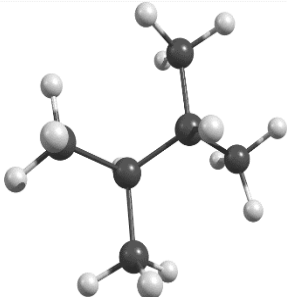
Molécula N°49. 2-metilpropano.

2-metilpropano			
			
Energía de optimización (kJ/mol)		1,99924	
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	1.06	-0.04	-0.05
C	2.59	-0.01	-0.01
C	3.11	0.66	-1.32
C	3.11	0.70	1.19
H	0.68	-0.57	-0.92
H	0.64	0.97	-0.07
H	0.68	-0.54	0.84
H	2.95	-1.04	-0.03
H	2.77	1.70	-1.38
H	2.76	0.13	-2.21
H	4.21	0.65	-1.33
H	2.77	1.74	1.22
H	4.20	0.70	1.20
H	2.76	0.21	2.10

Nota: Avogadro 1.2.0

Tabla 44

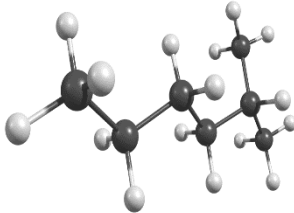
Molécula N°56. 2,3-dimetilbutano.

2,3-dimetilbutano			
			
Energía de optimización (kJ/mol)		27,7672	
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	1.01	0.12	-0.05
C	2.54	0.07	-0.08
C	3.08	-1.35	-0.33
C	4.62	-1.40	-0.36
C	2.58	-2.35	0.71
C	3.04	1.07	-1.13
H	0.61	-0.44	0.78
H	0.59	-0.29	-0.97
H	0.65	1.15	0.04
H	2.90	0.41	0.89
H	2.72	-1.70	-1.31
H	5.04	-0.99	0.55
H	5.02	-0.84	-1.21
H	4.97	-2.43	-0.46
H	2.83	-2.02	1.72
H	3.03	-3.34	0.55
H	1.50	-2.49	0.65
H	2.79	0.74	-2.14
H	4.13	1.21	-1.07
H	2.59	2.06	-0.98

Nota: Avogadro 1.2.0

Tabla 45

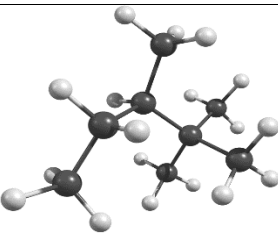
Molécula N°59. 2-metilhexano.

2-metilhexano			
			
Energía de optimización (kJ/mol)		-0,107135	
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	1.01	0.11	-0.00
C	2.53	-0.018	-0.05
C	2.99	-1.14	-1.00
C	2.54	-2.53	-0.56
C	3.13	-3.62	-1.46
C	2.69	-5.00	-1.033
C	3.14	1.31	-0.49
H	0.55	-0.78	0.43
H	0.58	0.26	-0.99
H	0.71	0.96	0.62
H	2.89	-0.24	0.95
H	4.09	-1.12	-1.06
H	2.62	-0.94	-2.02
H	1.45	-2.60	-0.58
H	2.86	-2.71	0.47
H	4.22	-3.57	-1.44
H	2.82	-3.45	-2.50
H	3.01	-5.22	-0.00
H	3.12	-5.76	-1.69
H	1.60	-5.10	-1.07
H	2.81	1.59	-1.50
H	4.24	1.25	-0.50
H	2.86	2.11	0.19

Nota: Avogadro 1.2.0

Tabla 46

Molécula N°62. 2,2,3-trimetilpentano.

2,2,3-trimetilpentano			
			
Energía de optimización (kJ/mol)		93,4867	
Geometría Angstrom			
	X	Y	Z
C	1.00	-0.05	-0.06
C	2.54	-0.06	0.05
C	3.16	1.23	-0.58
C	4.70	1.31	-0.67
C	5.44	1.47	0.64
C	2.62	1.51	-2.00
C	2.86	-0.16	1.56
C	3.06	-1.35	-0.62
H	0.58	0.87	0.33
H	0.55	-0.88	0.48
H	0.67	-0.15	-1.10
H	2.83	2.08	0.02
H	4.96	2.20	-1.27
H	5.11	0.46	-1.22
H	4.92	2.16	1.31
H	6.44	1.88	0.45
H	5.59	0.51	1.14
H	2.86	0.70	-2.69
H	3.04	2.43	-2.41
H	1.53	1.65	-2.00
H	2.67	0.79	2.06
H	3.89	-0.46	1.75
H	2.23	-0.92	2.049
H	2.83	-1.35	-1.69
H	2.59	-2.23	-0.19
H	4.14	-1.46	-0.50

Nota: Avogadro 1.2.0

**Propiedades fisicoquímicas de las moléculas presentes en el desasfaltado
(SwissADME)**

Tabla 47

Molécula N°1. tolueno.

Tolueno	
Nomenclatura IUPAC	Tolueno
Código SMILES	CC1=CC=CC=C1
Fórmula Química	C ₇ H ₈
Peso Molecular	92,14
Propiedades Fisicoquímicas	
Número de átomos pesados	7
Número de átomos pesados aromáticos	6
Fracción Csp ³	0,14
Número de enlaces rotativos	0
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	31,41
TPSA Å ²	0.00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	1,85
Log P _{o/w} (XLOGP3)	2,73
Log P _{o/w} (WLOGP)	2,00
Log P _{o/w} (MLOGP)	3,52
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	2,44
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	2,51
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2,77
Solubilidad	1,58e-01 mg/ml; 1,72e-03 mol/l
Clase soluble	Soluble
Log S (Ali)	-2,38
Solubilidad	3,80e-01 mg/ml; 4,13e-03 mol/l
Clase Soluble	Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-2,69
Solubilidad	1,88e-01 mg/ml; 2,04e-03 mol/l
Clase Soluble	Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 48

Molécula N° 2. o-Xileno.

o-Xileno	
Nomenclatura IUPAC	o-Xileno
Código SMILES	CC1=CC=CC=C1C
Fórmula Química	C ₈ H ₁₀
Peso Molecular	106,17
Propiedades Físicoquímicas	
Número de átomos pesados	8
Número de átomos pesados aromáticos	6
Fracción Csp ³	0,25
Número de enlaces rotativos	0
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	36,37
TPSA Å ²	0,00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2,03
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3,12
Log P _{o/w} (WLOGP)	2,30
Log P _{o/w} (MLOGP)	3,85
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	2,83
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	2,83
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-3,02
Solubilidad	1,02e-01 mg/ml; 9,58e-04 mol/l
Clase soluble	Soluble
Log S (Ali)	-2,79
Solubilidad	1,73e-01 mg/ml; 1,63e-03 mol/l
Clase Soluble	Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-3,10
Solubilidad	8,39e-02 mg/ml; 7,91e-04 mol/l
Clase Soluble	Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 49

Molécula N° 5. etilbenceno.

Etilbenceno	
Nomenclatura IUPAC	etilbenceno
Código SMILES	CCC1=CC=CC=C1
Fórmula Química	C ₈ H ₁₀
Peso Molecular	106,17
Propiedades Físicoquímicas	
Número de átomos pesados	8
Número de átomos pesados aromáticos	6
Fracción Csp ³	0,25
Número de enlaces rotativos	1
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	36,22
TPSA Å ²	0.00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2,06
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3,15
Log P _{o/w} (WLOGP)	2,25
Log P _{o/w} (MLOGP)	3,85
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	2,70
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	2,80
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2,97
Solubilidad	1,13e-01 mg/ml; 1,07e-03 mol/l
Clase soluble	Soluble
Log S (Ali)	-2,82
Solubilidad	1,61e-01 mg/ml; 1,51e-03 mol/l
Clase Soluble	Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-3,12
Solubilidad	8,05e-02 mg/ml; 7,59e-04 mol/l
Clase Soluble	Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 50

Molécula N° 6. isopropilbenceno.

Isopropilbenceno	
Nomenclatura IUPAC	isopropilbenceno
Código SMILES	CC(C1=CC=CC=C1)C
Fórmula Química	C ₉ H ₁₂
Peso Molecular	120,19
Propiedades Físicoquímicas	
Número de átomos pesados	9
Número de átomos pesados aromáticos	6
Fracción Csp ³	0,33
Número de enlaces rotativos	1
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	41,02
TPSA Å ²	0,00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2,25
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3,66
Log P _{o/w} (WLOGP)	2,81
Log P _{o/w} (MLOGP)	4,17
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	2,83
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	3,14
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-3,32
Solubilidad	5,78e-02 mg/ml; 4,80e-04 mol/l
Clase soluble	Soluble
Log S (Ali)	-3,35
Solubilidad	5,38e-02 mg/ml; 4,48e-04 mol/l
Clase Soluble	Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-3,17
Solubilidad	8,11e-02 mg/ml; 6,75e-04 mol/l
Clase Soluble	Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 51

Molécula N° 8. naftaleno.

Naftaleno	
Nomenclatura IUPAC	naftaleno
Código SMILES	C12=CC=CC=C1C=CC=C2
Fórmula Química	C ₁₀ H ₈
Peso Molecular	128,17
Propiedades Físicoquímicas	
Número de átomos pesados	10
Número de átomos pesados aromáticos	10
Fracción Csp3	0,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	43,95
TPSA Å ²	0.00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	1,99
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3,30
Log P _{o/w} (WLOGP)	2,84
Log P _{o/w} (MLOGP)	4,26
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	3,11
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	3,10
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-3,45
Solubilidad	4,51e-02 mg/ml; 3,52e-04 mol/l
Clase soluble	Soluble
Log S (Ali)	-2,98
Solubilidad	1,36e-01 mg/ml; 1,06e-03 mol/l
Clase Soluble	Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-4,03
Solubilidad	1,19e-02 mg/ml; 9,27e-05 mol/l
Clase Soluble	Moderadamente Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 52

Molécula N° 16. 2,7-dimetilnaftaleno.

2,7-Dimetilnaftaleno	
Nomenclatura IUPAC	2,7-dimetilnaftaleno
Código SMILES	<chem>CC(C=C1)=CC2=C1C=CC(C)=C2</chem>
Fórmula Química	$C_{12}H_{12}$
Peso Molecular	156.22
Propiedades Físicoquímicas	
Número de átomos pesados	12
Número de átomos pesados aromáticos	10
Fracción Csp3	0,17
Número de enlaces rotativos	0
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	53,88
TPSA Å ²	0,00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2,51
Log P _{o/w} (XLOGP3)	4,31
Log P _{o/w} (WLOGP)	3,46
Log P _{o/w} (MLOGP)	4,83
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	3,97
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	3,81
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-4,14
Solubilidad	1,13e-02 mg/ml; 7,24e-05 mol/l
Clase soluble	Moderadamente Soluble
Log S (Ali)	-4,02
Solubilidad	1,48e-02 mg/ml; 9,47e-05 mol/l
Clase Soluble	Moderadamente Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-4,83
Solubilidad	2,29e-03 mg/ml; 1,47e-05 mol/l
Clase Soluble	Moderadamente Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 53

Molécula N° 22. 2,3,6-trimetilnaftaleno

2,3,6-Trimetilnaftaleno	
Nomenclatura IUPAC	2,3,6-trimetilnaftaleno
Código SMILES	CC1=CC2=CC(C)=C(C)C=C2C=C1
Fórmula Química	C ₁₃ H ₁₄
Peso Molecular	170,25
Propiedades Fisicoquímicas	
Número de átomos pesados	13
Número de átomos pesados aromáticos	10
Fracción Csp ³	0,23
Número de enlaces rotativos	0
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	58,85
TPSA Å ²	0,00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2,68
Log P _{o/w} (XLOGP3)	4,73
Log P _{o/w} (WLOGP)	3,77
Log P _{o/w} (MLOGP)	5,10
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	4,43
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	4,14
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-4,44
Solubilidad	6,12e-03 mg/ml; 3,59e-05 mol/l
Clase soluble	Moderadamente Soluble
Log S (Ali)	-4,46
Solubilidad	5,91e-03 mg/ml; 3,47e-05 mol/l
Clase Soluble	Moderadamente Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-5,23
Solubilidad	1,01e-03mg/ml; 5,92e-06 mol/l
Clase Soluble	Moderadamente Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 54

Molécula N° 23. tiofano.

Tiofano	
Nomenclatura IUPAC	Tiofano
Código SMILES	S1CCCC1
Fórmula Química	C ₄ H ₈ S
Peso Molecular	88.17
Propiedades Físicoquímicas	
Número de átomos pesados	5
Número de átomos pesados aromáticos	0
Fracción Csp ³	1,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	26,82
TPSA Å ²	25,30
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	1,64
Log P _{o/w} (XLOGP3)	1,36
Log P _{o/w} (WLOGP)	1,51
Log P _{o/w} (MLOGP)	1,42
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	2,43
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	1,67
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-1,24
Solubilidad	5,03e+00 mg/ml; 5,71e-02 mol/l
Clase soluble	Muy Soluble
Log S (Ali)	-1,49
Solubilidad	2,83e+00 mg/ml; 3,21e-02 mol/l
Clase Soluble	Muy Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-1,00
Solubilidad	8,86e+00 mg/ml; 1,00e-01 mol/l
Clase Soluble	Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 55

Molécula N° 26. 2,3,4-trimetil-5-(metiltio)tiofeno.

2,3,4-Trimetil-5-(metiltio)tiofeno	
Nomenclatura IUPAC	2,3,4-trimetil-5-(metiltio)tiofeno
Código SMILES	CC1=C(C)C(C)=C(SC)S1
Fórmula Química	C ₈ H ₁₂ S ₂
Peso Molecular	172.31
Propiedades Fisicoquímicas	
Número de átomos pesados	10
Número de átomos pesados aromáticos	5
Fracción Csp ³	0,50
Número de enlaces rotativos	1
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	50,94
TPSA Å ²	53,54
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2,61
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3,58
Log P _{o/w} (WLOGP)	3,40
Log P _{o/w} (MLOGP)	2,87
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	4,40
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	3,37
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-3,47
Solubilidad	5,87e-02 mg/ml; 3,41e-04 mol/l
Clase soluble	Soluble
Log S (Ali)	-4,39
Solubilidad	7,01e-03 mg/ml; 4,07e-05 mol/l
Clase Soluble	Moderadamente Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-3,32
Solubilidad	8,23e-02 mg/ml; 4,78e-04 mol/l
Clase Soluble	Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 56

Molécula N° 29. tiofeno.

Tiofeno	
Nomenclatura IUPAC	Tiofeno
Código SMILES	C1=CC=CS1
Fórmula Química	C ₄ H ₄ S
Peso Molecular	84.14
Propiedades Físicoquímicas	
Número de átomos pesados	5
Número de átomos pesados aromáticos	5
Fracción Csp ³	0,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	24,32
TPSA Å ²	28,24
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	0,00
Log P _{o/w} (XLOGP3)	1,81
Log P _{o/w} (WLOGP)	1,75
Log P _{o/w} (MLOGP)	1,12
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	2,85
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	1,51
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2,24
Solubilidad	4,82e-01 mg/ml; 5,73e-03 mol/l
Clase soluble	Soluble
Log S (Ali)	-2,02
Solubilidad	7,99e-01 mg/ml; 9,50e-03 mol/l
Clase Soluble	Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-1,56
Solubilidad	2,34e+00 mg/ml; 2,78e-02 mol/l
Clase Soluble	Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 57

Molécula N° 33. naftenodibenzotiofeno.

Naftenodibenzotiofeno	
Nomenclatura IUPAC	Naftenodibenzotiofeno
Código SMILES	<chem>C1(SC2=C3C=C4C(CCCC4)=C2)=C3C=CC=C1</chem>
Fórmula Química	$C_{16}H_{14}S$
Peso Molecular	238.35
Propiedades Físicoquímicas	
Número de átomos pesados	17
Número de átomos pesados aromáticos	13
Fracción Csp3	0,25
Número de enlaces rotativos	0
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	76,76
TPSA Å ²	28,24
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	3,09
Log P _{o/w} (XLOGP3)	5,66
Log P _{o/w} (WLOGP)	4,93
Log P _{o/w} (MLOGP)	4,94
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	6,08
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	4,94
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-5.45
Solubilidad	8,47e-04 mg/ml; 3,55e-06 mol/l
Clase soluble	Moderadamente Soluble
Log S (Ali)	-6,02
Solubilidad	2,29e-04 mg/ml; 9,60e-07 mol/l
Clase Soluble	Pobrementemente Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-6,13
Solubilidad	1,75e-04 mg/ml; 7,36e-07 mol/l
Clase Soluble	Pobrementemente Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 58

Molécula N° 38. fenantrotiofeno.

Fenantrotiofeno	
Nomenclatura IUPAC	fenantrotiofeno
Código SMILES	C12=CC=CC3=C1C4=C(C=C3)C=CC=C4S2
Fórmula Química	C ₁₄ H ₈ S
Peso Molecular	208,28
Propiedades Físicoquímicas	
Número de átomos pesados	15
Número de átomos pesados aromáticos	15
Fracción Csp ³	0,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	68,02
TPSA Å ²	28,24
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2,55
Log P _{o/w} (XLOGP3)	4,95
Log P _{o/w} (WLOGP)	4,65
Log P _{o/w} (MLOGP)	4,32
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	5,45
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	4,38
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-4,99
Solubilidad	2,13e-03 mg/ml; 1,02e-05 mol/l
Clase soluble	Moderadamente Soluble
Log S (Ali)	-5,58
Solubilidad	1,09e-03 mg/ml; 5,24e-06 mol/l
Clase Soluble	Moderadamente Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-5,86
Solubilidad	2,89e-04 mg/ml; 1,39e-06 mol/l
Clase Soluble	Moderadamente Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 59

Molécula N° 43. fenantreno.

Fenantreno	
Nomenclatura IUPAC	Fenantreno
Código SMILES	<chem>C12=CC=CC=C1C=CC3=CC=CC=C23</chem>
Fórmula Química	$C_{14}H_{10}$
Peso Molecular	178,23
Propiedades Físicoquímicas	
Número de átomos pesados	14
Número de átomos pesados aromáticos	14
Fracción Csp3	0,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	61,45
TPSA Å ²	0.00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2,35
Log P _{o/w} (XLOGP3)	4,46
Log P _{o/w} (WLOGP)	3,99
Log P _{o/w} (MLOGP)	5,17
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	4,10
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	4,01
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-4,49
Solubilidad	5,70e-03 mg/ml; 3,20e-05 mol/l
Clase soluble	Moderadamente Soluble
Log S (Ali)	-4,18
Solubilidad	1,18e-02 mg/ml; 6,62e-05 mol/l
Clase Soluble	Moderadamente Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-5,75
Solubilidad	3,20e-04 mg/ml; 1,79e-06 mol/l
Clase Soluble	Moderadamente Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 60

Molécula N° 44. criseno.

Criseno - Alquibencenos	
Nomenclatura IUPAC	Criseno
Código SMILES	<chem>C12=CC=CC=C1C=CC3=C4C=CC=CC4=CC=C23</chem>
Fórmula Química	$C_{18}H_{12}$
Peso Molecular	228.29
Propiedades Fisicoquímicas	
Número de átomos pesados	18
Número de átomos pesados aromáticos	18
Fracción Csp3	0.00
Número de enlaces rotativos	0
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	78,96
TPSA Å ²	0,00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2,69
Log P _{o/w} (XLOGP3)	5,81
Log P _{o/w} (WLOGP)	5,15
Log P _{o/w} (MLOGP)	5,97
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	5,09
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	4,94
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-5,66
Solubilidad	5,04e-04 mg/ml; 2,21e-06 mol/l
Clase soluble	Moderadamente Soluble
Log S (Ali)	-5,58
Solubilidad	6,00e-04 mg/ml; 2,63e-06 mol/l
Clase Soluble	Moderadamente Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-7,43
Solubilidad	8,46e-06 mg/ml; 3,71e-08 mol/l
Clase Soluble	Pobrementemente Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 61

Molécula N° 49. 2-metilpropano.

2-Metilpropano	
Nomenclatura IUPAC	2-Metilpropano
Código SMILES	CC(C)C
Fórmula Química	C ₄ H ₁₀
Peso Molecular	58.12
Propiedades Físicoquímicas	
Número de átomos pesados	4
Número de átomos pesados aromáticos	0
Fracción Csp3	1,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	21,34
TPSA Å ²	0,00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	1,91
Log P _{o/w} (XLOGP3)	2,09
Log P _{o/w} (WLOGP)	1,66
Log P _{o/w} (MLOGP)	2,73
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	0,72
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	1,82
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-1,52
Solubilidad	1,77e+00 mg/ml; 3,04e-02 mol/l
Clase soluble	Muy Soluble
Log S (Ali)	-1,72
Solubilidad	1,11e+00 mg/ml; 1,91e-02 mol/l
Clase Soluble	Muy Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-0,91
Solubilidad	7,17e+00 mg/ml; 1,23e-01 mol/l
Clase Soluble	Soluble

Nota SwissADME

Tabla 62

Molécula N° 56. 2,3-dimetilbutano

2,3-dimetilbutano	
Nomenclatura IUPAC	2,3-dimetilbutano
Código SMILES	CC(C)C(C)C
Fórmula Química	C ₆ H ₁₄
Peso Molecular	86,18
Propiedades Fisicoquímicas	
Número de átomos pesados	6
Número de átomos pesados aromáticos	0
Fracción Csp3	1,00
Número de enlaces rotativos	1
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	30,96
TPSA Å ²	0.00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2,27
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3,42
Log P _{o/w} (WLOGP)	2,30
Log P _{o/w} (MLOGP)	3,52
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	1,44
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	2,59
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2,46
Solubilidad	2,97e-01 mg/ml; 3,44e-03 mol/l
Clase soluble	Soluble
Log S (Ali)	-3,10
Solubilidad	6,84e-02 mg/ml; 7,94e-04 mol/l
Clase Soluble	Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-1,42
Solubilidad	3,28e+00 mg/ml; 3,80e-02 mol/l
Clase Soluble	Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 63

Molécula N° 59. 2-metilhexano.

2-metilhexano	
Nomenclatura IUPAC	2-metilhexano
Código SMILES	CC(C)CCCC
Fórmula Química	C ₇ H ₁₆
Peso Molecular	100.20
Propiedades Fisicoquímicas	
Número de átomos pesados	7
Número de átomos pesados aromáticos	0
Fracción Csp ³	1,00
Número de enlaces rotativos	3
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	35,76
TPSA Å ²	0.00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2,58
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3,72
Log P _{o/w} (WLOGP)	2,83
Log P _{o/w} (MLOGP)	3,87
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	2,05
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	3,01
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2,61
Solubilidad	2,48e-01 mg/ml; 2,47e-03 mol/l
Clase soluble	Soluble
Log S (Ali)	-3.41
Solubilidad	3,89e-02 mg/ml; 3,88e-04 mol/l
Clase Soluble	Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-2,23
Solubilidad	5,97e-01 mg/ml; 5,96e-03 mol/l
Clase Soluble	Soluble

Nota: SwissADME

Tabla 64

Molécula N° 62 2,2,3-trimetilpentano.

2,2,3-trimetilpentano	
Nomenclatura IUPAC	2,2,3-trimetilpentano
Código SMILES	CC(C)(C)C(C)CC
Fórmula Química	C ₈ H ₁₈
Peso Molecular	114.23
Propiedades Físicoquímicas	
Número de átomos pesados	8
Número de átomos pesados aromáticos	0
Fracción Csp ³	1,00
Número de enlaces rotativos	2
Número de enlaces H aceptados	0
Número de donantes de enlaces H	0
Refractividad Molar	40,31
TPSA Å ²	0.00
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2,60
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3,82
Log P _{o/w} (WLOGP)	3,08
Log P _{o/w} (MLOGP)	4,20
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	2,17
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	3,17
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2,82
Solubilidad	1,72e-01 mg/ml; 1,50e-03 mol/l
Clase soluble	Soluble
Log S (Ali)	-3,52
Solubilidad	3,49e-02 mg/ml; 3,05e-04 mol/l
Clase Soluble	Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-2,26
Solubilidad	6,26e-01 mg/ml; 5,48e-03 mol/l
Clase Soluble	Soluble

Nota: SwissADME

CAPÍTULO V

5. Conclusiones y recomendaciones

5.1 Conclusiones

El modelo de Yen – Mullins desarrolla una ciencia predictiva de los hidrocarburos aromáticos policíclicos asfálticos (PAHs) apoyada de la espectroscopia de masas de resonancia de ciclón iónico por transformada de Fourier, situación que valida la su simulación de su composición por medio del campo de fuerza MMFF94 al ser este adecuado para sistemas no condensables como es el caso de los componentes asfálticos de inapropiada separación de fases debido a su naturaleza aromática.

La deposición de los asfaltenos no se produce después de que la presión ha caído por debajo de su punto de burbuja, repartiendo así los depósitos existentes por el crudo bifásico permitiendo observar un comportamiento lineal en el trazado logarítmico de la presión y el tiempo.

El crudo ecuatoriano de oriente gracias a su bajo índice de carbono de Conradson es susceptible a ser analizado por medio del desasfaltado por GLP 1(0.976%), método propuesto por Devotta Irudayaraj en la patente USA 38903A1, 2014 permitiendo controlar el rendimiento del aceite desasfaltado entre el 15 y 60% para un disolvente fijo al variar la temperatura del funcionamiento del proceso.

El desarrollo de la estructura 3D de componentes orgánicos permite el estiramiento de los enlaces intermoleculares, la flexión de los ángulos y los cambios de los ángulos diedros observados en los componentes presentes en las corrientes de desasfaltado por medio del campo de fuerza MMFF94 en comparación con la limitación presentada para el carbono trigonal y el nitrógeno del N-metilacetamida que fueron restringidos a ser planares

en los cálculos con el campo de fuerza OPLS-AA, expuestos por Kaminski y Jorgesen en 1996.

La parametrización de MMFF94 utilizó una gran cantidad de datos computacionales de alta calidad, alrededor de 2500 estructuras optimizadas por medio de la química cuántica, abarcando casi todas las moléculas orgánicas estables lo que da certeza de las propiedades fisicoquímicas expuestas de las moléculas provenientes de los corrientes del proceso de desasfaltado., sin embargo, presenta un error del 32% al compararlo con los campos de fuerza AMBER94 y OPLS-AA en el modelado de líquidos orgánicos y biomoleculares condensables en solución.

5.1 Recomendaciones

Se recomienda analizar la recuperación del disolvente del aceite desasfaltado mediante el método de fluidos supercríticos (ROSE) con el afán de reciclarlo en el proceso que se puede desarrollar por lotes o continua a contracorriente permitiendo además una mejor identificación de los componentes saturados, aromáticos, resinas y asfálticos (SARA) presentes en el aceite residual.

De igual manera se recomienda indagar respecto al campo de fuerza UFF. propuesto en Avogadro frente a los hidrocarburos condensables presentes en las corrientes de refinación de petróleo y su utilidad en la determinación de las propiedades fisicoquímicas propuestas en SwissADME.

Validar la experimentación expuesta por Devotta Irudayaraj en su patente 38903A1, 2014 utilizando el petróleo crudo de oriente con el propósito de conocer el rendimiento del aceite desasfaltado y cuantificar el residuo del carbono de Conradson como fuente de futuras investigaciones relacionadas con la caracterización de aceites base para lubricantes.

5.2 Abreviaturas

ARCH:	Agencia de Control y Regulación Hidrocarburífero del Ecuador
BOPD:	Barriles de petróleo diarios.
C3-C5:	Hidrocarburos de 3,4 y 5 carbonos.
CADD:	Tecnología de fármacos asistido por computador.
CCR:	Carbono de Conradson
DAO:	Aceite desasfaltado.
DAO:	Aceite desmetalizado
EM FT-ICR:	Espectroscopia de masas de resonancia de ciclotrón iónico por transformada de Fourier
FCC:	Craqueo catalítico fluidizado.
GLP:	Gas licuado de Petróleo
GPU:	Unidades de procesamiento gráfico.
LOBS:	Base de aceites lubricantes
MC:	Simulaciones Monte Carlo
MMFF94:	Campos de fuerza moleculares de Merck.
PAHs:	Hidrocarburos aromáticos policíclicos
ROSE:	Extracción supercrítica de aceite residual.

5.3 Bibliografía

- Adams, J. J. (2014). Asphaltene Adsorption, a Literature Review. *Energy&fuels*, 28(1), 2831–2856. <https://doi.org/https://doi.org/10.1021/ef500282p>
- Bonilla, J., & Elliott, J. (1985). *Patent No. US4686027A*. United States: U.S Patent Office.
- Clavijo, S. J. (2019). *Obtención y caracterización de fracciones SARA de crudos Ecuatorianos de diferente procedencia* (Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE-L). Recuperado el 29 de marzo del 2021 de <http://repositorio.espe.edu.ec/jspui/bitstream/21000/20661/1/T-ESPEL-IPE-0031.pdf>
- El-Bassoussi, A. A., Ahmed, M. H. M., Sayed, S. M. El, Basta, J. S., & Attia, E.-S. K. (2010). Characterization of Some Local Petroleum Residues by Spectroscopic Techniques. *Petroleum Science and Technology*, 28(5), 430–444. <https://doi.org/10.1080/10916460902744554>
- Haskett, C. E., & Tartera, M. (1965). A Practical Solution to the Problem of Asphaltene Deposits-Hassi Messaoud Field, Algeria. *Journal of Petroleum Technology*, 17(04), 387–391. <https://doi.org/10.2118/994-PA>
- Irudayaraj, D., Raman, N. S., Kumar, B., & Rajagopal, S. (2014). *Patent No. US2014/0238903A1*. United States: U.S Patent Office.
- Jones, D. S. J. (2015). Introduction to Crude Oil and Petroleum Processing. In *Handbook of Petroleum Processing* (pp. 3–51). https://doi.org/10.1007/978-3-319-14529-7_24
- Kaminski, G., & Jorgensen, W. L. (1996). Performance of the AMBER94, MMFF94, and OPLS-AA Force Fields for Modeling Organic Liquids. *The Journal of Physical Chemistry*, 100(46), 18010–18013. <https://doi.org/10.1021/jp9624257>

- Leontaritis, K. J., & Ali Mansoori, G. (1988). Asphaltene deposition: a survey of field experiences and research approaches. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 1(3), 229–239. [https://doi.org/10.1016/0920-4105\(88\)90013-7](https://doi.org/10.1016/0920-4105(88)90013-7)
- Levin, I. N. (2004). *Fisicoquímica* (5th ed.). New York: McGraw-Hill Education.
- Meyers, R. (2016). *Handbook of Petroleum Refining Processes* (4th ed.). New York: McGraw-Hill Education.
- Mohamed, F., Al-Sahhaf, T., & Elkilani, A. (2010). *Fundamentals of Petroleum Refining* (1st ed.). Elsevier.
- Mullins, O. C. (2011). The Asphaltenes. *Annual Review of Analytical Chemistry*, 4(1), 393–418. <https://doi.org/10.1146/annurev-anchem-061010-113849>
- Rastgoo, A., & Kharrat, R. (2017). Investigation of Asphaltene Deposition and Precipitation in Production Tubing. *International Journal of Clean Coal and Energy*, 06(01), 14–29. <https://doi.org/10.4236/ijcce.2017.61002>
- Rollmann, L., & Walsh, D. (1982). *Patent No. US4324651*. United States: U.S Patent Office.
- Seitmaganbetov, N. (2020). *Thermodynamic Modelling of Asphaltene Phase Equilibria using PC-SAFT Equation of State* (Nazarbayev). Recuperado el 06 de marzo del 2021 de <https://nur.nu.edu.kz/bitstream/handle/123456789/4823/NurzhanSeitmaganbetov.pdf?sequence=1>
- Speight, J. G. (2004). Petroleum Asphaltenes - Part 1: Asphaltenes, Resins and the Structure of Petroleum. *Oil & Gas Science and Technology*, 59(5), 467–477. <https://doi.org/10.2516/ogst:2004032>

Zoete, V., Cuendet, M. A., Grosdidier, A., & Michielin, O. (2011). SwissParam: A fast force field generation tool for small organic molecules. *Journal of Computational Chemistry*, 32(11), 2359–2368. <https://doi.org/10.1002/jcc.21816>

ANEXOS