



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

Estudio *in silico*, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “craqueo catalítico” 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.

Chiluisa Cando, Jessica Patricia

Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de petroquímica

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

Petroquímica

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.

04 de mayo del 2021

Latacunga



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
CARRERA DE PETROQUÍMICA

Certificación

Certifico que el trabajo de 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 “craqueo catalítico” 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 la señorita Chiluisa Cando, Jessica Patricia 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.

04 de mayo de 2021.



Firmado electrónicamente por:

FABIAN
MAURICIO
SANTANA ROMO

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.

C.C.: 1802925139

Reporte de verificación

Original

Document Information

Analyzed document	CHILUISA PATRICIA CRAQUEO CATALITICO.pdf (D101194251)
Submitted	4/10/2021 3:40:00 PM
Submitted by	Fabián Santana
Submitter email	fmsantana@espe.edu.ec
Similarity	5%
Analysis address	fmsantana.espe@analysis.arkund.com



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

Sources included in the report

W	URL: https://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2099.1/21742/PROYECTO%20FINAL%20DE%20CA... Fetched: 3/25/2020 6:23:30 AM		1
W	URL: http://anyflip.com/xqubm/ucby/basic/101-150 Fetched: 12/12/2020 5:02:59 AM		7
W	URL: https://docplayer.es/79479017-Siempre-que-sea-posible-estudiaremos-la-quimica-orga... Fetched: 12/12/2020 5:49:42 AM		1
SA	Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE / Catota_Geovanny_Tarea 2_ Unidad 1.pdf Document Catota_Geovanny_Tarea 2_ Unidad 1.pdf (D89043335) Submitted by: egcatotal@espe.edu.ec Receiver: nydugarte.espe@analysis.arkund.com		1
W	URL: http://www.softwareactivo.com.mx/portfolio/chemdraw/ Fetched: 4/10/2021 3:41:00 PM		1
W	URL: https://es.wikipedia.org/wiki/Hidrocarburo_saturado Fetched: 10/27/2020 7:09:52 AM		3
SA	Tema.03.Quimica.Industrial.docx Document Tema.03.Quimica.Industrial.docx (D54722786)		3
W	URL: https://alcanos-quimica.blogspot.com/2012/05/alcanos.html Fetched: 1/23/2020 4:21:47 AM		2
W	URL: https://jurescort.ru/es/uslugi/nazvat-alkan-po-strukturnoi-formule-organicheskaya-... Fetched: 12/12/2020 5:48:32 AM		2
W	URL: http://cdigital.dgb.uanl.mx/la/1020124208/1020124208.PDF Fetched: 1/5/2021 4:38:22 AM		1
W	URL: https://mcaballero.jimdofree.com/app/download/10672239983/m%C3%B3dulo+2%C3%93+Qm+118... Fetched: 1/12/2021 4:40:22 AM		2

URL: <http://www.swissarma.ch/>

1/36



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

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.

C.C.: 1802925139



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE PETROQUÍMICA

Responsabilidad de autoría

Yo, Chiluisa Cando, Jessica Patricia con cedula de ciudadanía N° **0503611691** declaro que el contenido, ideas y criterios del trabajo de Unidad de Integración Curricular: ***“Estudio insilico, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “craqueo catalítico” 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 mi 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.

04 mayo de 2021

Una firma manuscrita en tinta azul que parece decir 'Jessica Cando'.

Chiluisa Cando, Jessica Patricia

C. C.: 0503611691



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE PETROQUÍMICA

Autorización de publicación

Yo, Chiluisa Cando, Jessica Patricia con cedula de ciudadanía N° **0503611691**, autorizo a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el trabajo de 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 “craqueo catalítico” 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 mi autoría son de mi responsabilidad.

04 mayo de 2021.

Una firma manuscrita en tinta azul que parece decir 'Jessica Cando'.

Chiluisa Cando, Jessica Patricia

C. C.:0503611691

Dedicatoria

Este trabajo, está dedicado con todo cariño e infinito amor para mi mami Etelvina, quien ha sido mi guía, mi pilar, mi ejemplo para seguir, quien en los momentos más difíciles ha estado a mi lado, su apoyo ha sido fundamental para el logro de mis objetivos. Por enseñarme los valores y principios que hacen que no pierda mí rumbo y que aún en los momentos más difíciles mantenga mi ancla fuerte y firme.

Agradecimiento

A Dios por permitirme llegar hasta este momento tan especial en mi vida, por los buenos y malos momentos que me enseñan a valorar cada día más todo lo que me rodea.

A mi mami Etelvina, por ser la mujer fuerte, noble y luchadora que jamás se rinde y aun estando cansada su esfuerzo y lucha no termina, por ser mi madre y padre, por ser juez y parte.

A mi hermano por su apoyo incondicional y por sus consejos.

A mis profesores que con infinita paciencia me han enseñado no solo conocimientos técnicos si no también humanos, especialmente a la Ing. Catherine Donoso.

Tabla de contenido

Carátula	1
Certificación	2
Reporte de verificación	3
Responsabilidad de autoría	4
Autorización de publicación	5
Dedicatoria	6
Agradecimiento.....	7
Tabla de contenido	8
Índice de tablas	14
Índice de figuras	17
Resumen.....	18
Abstract	19
Introducción	20
Antecedentes	20
Justificación e Importancia	21
Objetivos.....	21
<i>Objetivo General.....</i>	21
<i>Objetivos Específicos</i>	21
Hipótesis.....	22
Variables de Investigación	22

<i>Variables independientes</i>	22
Fundamentación teórica	23
Petróleo	23
<i>Refinería</i>	23
<i>Craqueo Catalítico Fluidizado</i>	23
<i>Alimentación al precalentador</i>	26
<i>Boquillas de alimentación: elevador</i>	27
Separación del catalizador	28
<i>Sección de despojamiento</i>	29
<i>Materia prima</i>	31
Cálculos insílico	36
Simulación computacional	36
Química Computacional	37
Química orgánica	38
<i>Estructura del átomo</i>	39
<i>Estructura electrónica del átomo</i>	39
Regla del octeto	40
<i>Enlace iónico</i>	40
<i>Enlace covalente</i>	40
<i>Formulas estructurales</i>	40
<i>Fórmulas moleculares</i>	41

	10
Cálculo de la Fórmula empírica	41
Isómeros	42
<i>Isómeros constitucionales.....</i>	<i>42</i>
<i>Estereoisómeros</i>	<i>43</i>
<i>Propiedades Físicas.....</i>	<i>44</i>
<i>Propiedades químicas</i>	<i>44</i>
<i>Solubilidad.....</i>	<i>45</i>
Lipofilia	46
Peso molecular.....	46
Hidrocarburos	46
Alcanos	46
Reacciones	47
<i>Combustión.....</i>	<i>47</i>
<i>Craqueo e hidro craqueo</i>	<i>48</i>
<i>Hidrocraqueo Catalítico</i>	<i>48</i>
<i>Craqueo Catalítico.....</i>	<i>48</i>
<i>Halogenación.....</i>	<i>48</i>
Alquenos.....	49
Metodología	50
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de craqueo catalítico.....	50

	11
<i>Búsqueda de datos internacionales</i>	51
<i>Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano</i>	51
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	52
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de craqueo catalítico	52
<i>Búsqueda de datos internacionales</i>	53
<i>Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano</i>	53
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	53
Procesamiento y obtención de estructuras químicas 1D, 2D y propiedades químicas básicas	53
<i>Generación de estructuras químicas en 2D</i>	54
<i>Procesamiento de propiedades básicas</i>	55
<i>Generación automática de nomenclatura IUPAC</i>	56
<i>Generación automática del código SMILES</i>	57
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	58
Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas	58
<i>Estudio de la interfaz de la plataforma SwissADME</i>	58
<i>Procesamiento a través del código SMILES</i>	60
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	60
Cálculo y obtención de estructuras 3D	61
<i>Avogadro</i>	61

	12
<i>Chemcraft</i>	62
<i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D sin optimizar</i>	62
<i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D sin optimizar</i>	62
<i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D optimizadas</i>	63
<i>Elaboración de imágenes con coordenadas 3D optimizadas</i>	64
<i>Elaboración de imágenes con coordenadas 3D sin optimizar</i>	65
<i>Reporte la energía de optimización</i>	66
Análisis y discusión de los resultado	67
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de craqueo catalítico	67
<i>Búsqueda de datos internacionales</i>	71
<i>Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano</i>	73
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de craqueo catalítico	75
<i>Búsqueda de datos internacionales</i>	76
<i>Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano</i>	77
Procesamiento y obtención de estructuras químicas 1D, 2D y propiedades químicas básicas	79
<i>Generación de estructuras químicas en 2D</i>	79
<i>Procesamiento de propiedades básicas</i>	83
<i>Generación automática de nomenclatura IUPAC</i>	97

<i>Generación automática del código SMILES</i>	99
Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas	103
Cálculo y obtención de estructuras 3D	110
<i>Reporte de Energías de minimización</i>	123
Conclusiones y recomendaciones	128
Conclusiones	128
Recomendaciones	129
Bibliografía	130
Anexos	133

Índice de tablas

Tabla 1 <i>Materia prima de la unidad FCC</i>	32
Tabla 2 <i>Reacciones en la unidad FCC</i>	36
Tabla 3 <i>Materia prima unidad FCC Aceite de gas al vacío</i>	67
Tabla 4 <i>Materia prima unidad FCC Residuo Atmosférico</i>	67
Tabla 5 <i>Parafinas, alimentación: VGO-B / Catalizador: E-Cat D / Temperatura: 500°C. ..</i>	68
Tabla 6 <i>Parafinas, alimentación: VGO-B / Catalizador: E-Cat D / Temperatura: 500°.....</i>	68
Tabla 7 <i>Olefinas, alimentación: VGO-B / Catalizador: E-Cat D / Temperatura: 500°C.</i>	69
Tabla 8 <i>Olefinas, alimentación: VGO-B / Catalizador: E-Cat D / Temperatura: 500°C.</i>	69
Tabla 9 <i>Aromáticos, alimentación: VGO-B / Catalizador: E-Cat D /Temperatura: 500°C.</i>	69
Tabla 10 <i>Alimentaciones del FCC (LCO, VGO).</i>	70
Tabla 11 <i>Alimentación a la unidad de FCC, VGO.</i>	71
Tabla 12 <i>Parafinas alimentación a la unidad FCC Parafinas desde el carbono 20-40</i>	71
Tabla 13 <i>Naftenos compuestos de alimentación a la unidad FCC</i>	72
Tabla 14 <i>Aromáticos compuestos de entrada a la unidad FCC</i>	73
Tabla 15 <i>Materia prima unidad FCC Aceite de gas al vacío</i>	74
Tabla 16 <i>Alimentaciones del FCC (LCO, VGO).</i>	74
Tabla 17 <i>Naftenos compuestos de alimentación a la unidad FCC.</i>	75
Tabla 18 <i>Productos de salida de la unidad FCC</i>	75
Tabla 19 <i>Distribución de productos (% p) en la conversión de decalina sobre catalizadores preparados en planta piloto (conversión 16 %). Cat/Oil: 2,23. Temperatura 450 °C.</i>	76
Tabla 20 <i>Composiciones (wt %) GLP craqueado de la unidad de FCC.</i>	76
Tabla 21 <i>Composiciones (wt %) GLP craqueado de la unidad de FCC.</i>	77

Tabla 22 <i>Distribución de productos (% p) en la conversión de decalina sobre catalizadores preparados en planta piloto (conversión 16 %). Cat/Oil: 2,23. Temperatura 450 °C.</i>	77
Tabla 23 <i>Productos de salida de la unidad FCC de la Refinería Esmeraldas</i>	78
Tabla 24 <i>Productos de salida de la unidad FCC</i>	78
Tabla 25 <i>Estructuras químicas en 2D</i>	79
Tabla 26 <i>Propiedades Químicas Básica del buta-1,3-diene</i>	84
Tabla 27 <i>Propiedades Químicas Básicas del 9,10-dihidrofenantreno</i>	85
Tabla 28 <i>Propiedades químicas básicas del Benceno</i>	86
Tabla 29 <i>Propiedades químicas básicas del tetrafenol</i>	87
Tabla 30 <i>Propiedades químicas básica del 1,1-bifenilo</i>	88
Tabla 31 <i>Propiedades químicas básica del butano</i>	89
Tabla 32 <i>Propiedades químicas básicas del But-1-ene</i>	89
Tabla 33 <i>Propiedades químicas básicas del Carbón</i>	90
Tabla 34 <i>Propiedades químicas básica del ciclohexano</i>	91
Tabla 35 <i>Propiedades químicas básica del Decahidronaftaleno</i>	92
Tabla 36 <i>Propiedades químicas básica del decano</i>	92
Tabla 37 <i>Propiedades químicas básica del Dodecano</i>	93
Tabla 38 <i>Propiedades químicas básica del Dodecano</i>	94
Tabla 39 <i>Propiedades químicas básica del etano</i>	94
Tabla 40 <i>Propiedades químicas básica del eteno</i>	95
Tabla 41 <i>Propiedades químicas básica del fenantreno</i>	96
Tabla 42 <i>Propiedades básicas del 9H-fluoreno</i>	96
Tabla 43 <i>Nomenclatura IUPAC</i>	97
Tabla 44 <i>Código SMILES de los compuestos de la corriente de entrada y salida de la unidad craqueo catfítico</i>	99

Tabla 45 <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de octilbenceno</i>	104
Tabla 46 <i>Reporte de Lipofilia para la molécula de octilbenceno</i>	104
Tabla 47 <i>Solubilidad en agua de la molécula de octilbenceno</i>	105
Tabla 48 <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de Buta-1,3-dieno</i>	106
Tabla 49 <i>Reporte de Lipofilia para la molécula de Buta-1,3-dieno</i>	106
Tabla 50 <i>Solubilidad en agua de la molécula de Buta-1,3-dieno</i>	107
Tabla 51 <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 9,10-dihidrofenantreno</i>	107
Tabla 52 <i>Reporte de Lipofilia para la molécula 9,10-dihidrofenantreno</i>	108
Tabla 53 <i>Solubilidad en agua de la molécula 9,10-dihidrofenantreno</i>	108
Tabla 54 <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de Benceno</i>	109
Tabla 55 <i>Reporte de Lipofilia para la molécula Benceno</i>	109
Tabla 56 <i>Solubilidad en agua de la molécula Benceno</i>	110
Tabla 57 <i>Estructuras moleculares en 3D</i>	110
Tabla 58 <i>Energía de optimización</i>	123

Índice de figuras

Figura 1 <i>Esquema simplificado de la unidad FCC</i>	25
Figura 2 <i>Alimentación al precalentador, FC control de flujo, LC control de nivel, TC control de temperatura, LCO aceite de ciclo ligero</i>	26
Figura 3 <i>Sección típica de alimentación</i>	27
Figura 4 <i>Separador de catalizador</i>	30
Figura 5 <i>Pasos sistemáticos para graficar una molécula en ChemDraw</i>	54
Figura 6 <i>Pasos para obtener las propiedades básicas en ChemDraw</i>	55
Figura 7 <i>Pasos para obtener la nomenclatura IUPAC</i>	56
Figura 8 <i>Pasos para obtener el código SMILES</i>	57
Figura 9 <i>Presentación de la plataforma SwissADME</i>	59
Figura 10 <i>Pasos para obtener los resultados en la plataforma SwissADME</i>	60
Figura 11 <i>Pasos para realizar la representación en 3D</i>	62
Figura 12 <i>Pasos para obtener la molécula optimizada</i>	64
Figura 13 <i>Pasos para obtener la imagen optimizada en 3D</i>	65
Figura 14 <i>Pasos para obtener la imagen en 3D sin optimizar</i>	66
Figura 15 <i>Reporte de la energía de optimización</i>	66
Figura 16 <i>Radar de biodisponibilidad del octilbenceno</i>	103
Figura 17 <i>Radar de biodisponibilidad del buta-1,3-diene</i>	105
Figura 18 <i>Radar de biodisponibilidad del 3,9,10-dihidrofenantreno</i>	107
Figura 19 <i>Radar de biodisponibilidad del benceno</i>	109

Resumen

El petróleo es un combustible fósil compuesto por largas cadena de hidrocarburos que también pueden contener pequeñas moléculas de azufre, nitrógeno entre otros. Esta composición depende de su origen, en su estado natural no tiene ningún valor económico, debido a esto, se emplea una transformación en una instalación industrial denominada refinería, misma que está compuesta por varias unidades que tienen por objetivo tratar al petróleo crudo y convertirlo en un producto útil con alto valor económico y energético. La unidad de craqueo catalítico denominada FCC es el corazón de la refinería, esta unidad permite obtener compuestos con mayor valor energético y económico, convirtiendo materiales de alto peso molecular en productos más livianos, por ejemplo alquenos ligeros , gasolina y destilados aromáticos a partir de gasóleo y residuos útiles para la industria petroquímica, por esta razón se realizó la investigación bibliográfica de los compuestos que pertenecen tanto a las corrientes de entrada como de salida de la unidad de la FCC, para posteriormente procesar las moléculas de forma individual usando programas químicos computacionales, como *Chemdraw*, *Avogadro*, *Chemcraft* y la plataforma virtual denominada *SwissADME* que permitieron obtener las propiedades químicas, propiedades fisicoquímicos y estructuras moleculares en 3D para cada uno de dichos compuestos.

Palabras Clave

- **CRAQUEO CATALÍTICO**
- **REFINERÍA**
- **UNIDAD FCC**
- **DESTILADOS AROMÁTICOS**

Abstract

Petroleum is a fossil fuel composed of long chains of hydrocarbons that may also contain small molecules of sulfur, nitrogen, and others. This composition depends on its origin, in its natural state it has no economic value, because of this a transformation is used in an industrial facility called refinery, which is composed of several units that aim to treat crude oil and convert it into a useful product with high economic and energy value. The catalytic cracking unit called FCC is the heart of the refinery, this unit allows obtaining compounds with higher energetic and economic value, converting high molecular weight materials into lighter products, for example light alkenes, gasoline and aromatic distillates from diesel oil and useful residues for the petrochemical industry, For this reason, bibliographic research was carried out on the compounds that belong to both the input and output streams of the FCC unit, to later process the molecules individually using chemical computational programs such as *ChemDraw*, *Avogadro*, *Chemcraft* and the virtual platform called *Swissadme*, which allowed obtaining the chemical properties, physicochemical properties and molecular structures in 3D for each of these compounds.

Key words

- **CATALYTIC CRACKING**
- **REFINERY**
- **FCC UNIT**
- **AROMATIC DISTILLATES**

Capítulo I

Introducción

1.1. Antecedentes

En la refinería existen diversas unidades que se encargan del refinado del petróleo para obtener productos con alto valor económico y energético, entre las unidades más importantes se destaca la unidad de craqueo catalítico, misma que es el corazón de la refinería debido a que tiene por objetivo convertir moléculas de alto peso molecular en moléculas más livianas, es decir se encarga de la ruptura de cadenas largas de hidrocarburos en cadenas más cortas, para obtener productos como la gasolina, butano, propano estos dos últimos son los componentes del Gas licuado de petróleo.

Para llevar a cabo la ruptura de moléculas se usan catalizadores que aceleran o retardan la velocidad de una reacción, estos catalizadores tienen la capacidad de regenerarse en el regenerador de la unidad FCC, y recircular al proceso.

Las corrientes que ingresan y las corrientes que salen de la unidad FCC, tienen diversas características que en gran parte depende del tipo de crudo que ingrese a la refinería, por esta razón es indispensable determinar los compuestos que ingresan y los productos que se obtienen, para poder determinar sus propiedades fisicoquímicas, químicas, estructuras en 2D,3D, dichas propiedades se pueden conocer usando programas químicos computacionales como *ChemDraw*, *Avogadro*, *Chemcraft*, entre otros.

1.2. Planteamiento del problema

A nivel mundial existen una variedad de refinerías que están adaptadas a las características del petróleo, debido a esto se establece que existen diversos compuestos que forman parte de las corrientes de que ingresan a diferentes unidades de la refinería.

Entre las unidades que se destacan se encuentra la unidad FCC, en la que ocurren reacciones que tienen por objetivo disminuir el tamaño de las cadenas obteniendo moléculas más pequeñas con mayor valor comercial.

Por esto es necesario caracterizar los flujos que ingresen y que salgan de la unidad FCC, para poder realizar un diseño adecuado del proceso y optimizar los recursos empleando cálculos *insilico*, y de este modo garantizar la efectividad de refinación del crudo.

1.3. Justificación e Importancia

Este trabajo se realiza con el objetivo de recopilar la información referente a los principales compuestos presentes en las corrientes de entrada y salida de la unidad FCC, a través de la investigación bibliográfica minuciosa, mediante el uso de programas químicos computacionales para obtener datos de propiedades químicas, fisicoquímicas, solubilidad y lipofilia en consecuencia se podrá determinar el comportamiento de una mezcla que contenga dichos compuestos.

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 craqueo catalítico” mediante cálculos teóricos computacionales.

1.4.2. Objetivos Específicos

1. Establecer una lista de potenciales moléculas químicas de origen orgánico presentes en el flujo de entrada en el proceso de craqueo catalítico.
2. Establecer una lista de potenciales moléculas químicas de origen orgánico presentes en el flujo de salida en el proceso de craqueo catalítico

3. 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.
4. Calcular las propiedades fisicoquímicas básicas de cada molécula de origen orgánico, mediante la plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática *SwissADME*.
5. Calcular las estructuras 3D de cada una las moléculas orgánicas, mediante el software Avogadro, para la obtención de las configuraciones y conformaciones finales.
6. Reportar mediante tablas los datos obtenidos para cada molécula química procesada en los pasos anteriores.

1.5. Hipótesis

¿Se puede determinar mediante un estudio *insilico* propiedades químicas básicas, y propiedades fisicoquímicas básicas de los principales compuestos de las corrientes de entrada y salida de la unidad de craqueo catalítico?

1.6. Variables de Investigación

Las variables de investigación que se presentan en este trabajo están relacionadas a las propiedades químicas y propiedades fisicoquímicas de cada uno de los compuestos que pertenecen a la unidad FCC.

1.6.1. Variables independientes

Compuestos de la corriente de entrada y salida de la unidad FCC

Capítulo II

Fundamentación teórica

2.1. Petróleo

El petróleo y de manera en general los hidrocarburos sean estos en estado líquido o gaseoso se originan de materia orgánica acumulada por el proceso de sedimentación, que sufre varias transformaciones que ocurren en el subsuelo. Estas transformaciones reciben el nombre de maduración controladas por el aumento de temperatura que es proporcional al aumento de profundidad, las transformaciones consisten en la pérdida de O y N en forma de H_2O , CO_2 y NH_3 , a la vez que ocurre en enriquecimiento en H y C. (Meléndez Hevia, 1982).

2.1.1. Refinería

Las refinerías son el lugar donde el petróleo crudo que hasta ese momento no tiene aplicaciones industriales, es convertido en productos con características bien definidas que, si tienen un valor económico, estos productos son la base de diversas industrias, dichas refinerías forman parte del sector estratégico para satisfacer la demanda de energía (Cortés, 2014).

Como se describe una refinería es una mega industria que tiene por objetivo obtener un partido económico a partir del petróleo crudo, adaptándose diariamente a las necesidades del mercado, para lo cual requiere inversiones millonarias para que esta industria sea sosteniblemente viable y se emplee tecnología de punta para evitar la contaminación en sectores aledaños (Cortés, 2014)

2.1.2. Craqueo Catalítico Fluidizado

La invención del craqueo catalítico de Houdry revolucionó el refinado de petróleo, se identificó los catalizadores de sílice-alúmina como efectivos para convertir gasóleo en

gasolina, se probaron varias variaciones de catalizadores hasta que Houdry se conformó con una arcilla activada en ácido y estableció la generación de aire para quemar el coque del catalizador. Más adelante Houdry, se unió a Vacuum, y fundó una fábrica industrial con 70BPD en la refinería denominada Paulsboro y para el año 1931 creó Houdry Process Company, con el pasar del tiempo se unieron otras compañías para el desarrollo de craqueo catalítico esto condujo a una ampliación y se fundó la primera unidad comercial de craqueo de 2000BPD, de ahí que muchas innovaciones técnicas se han implementado después del primer craqueador catalítico de lecho fijo (Avidan, 1993).

Alrededor del mundo funcionan más 400 unidades de FCC con una capacidad que supera 20 millones de BPD entre los países más destacados están: Estados Unidos, China, India, Japón y Brasil tienen la mayor cantidad de unidades operativas, para satisfacer las demandas anuales de productos con un valor económico alto. En el futuro el proceso FCC se utilizará para biocombustibles y posiblemente para reducir las emisiones de gases contaminantes como el CO₂. Para varias refinerías el craqueo catalítico es la clave para la rentabilidad y operación exitosa y determina si la refinería puede seguir siendo competitiva en el mercado actual (Sadeghbeigi, 2012).

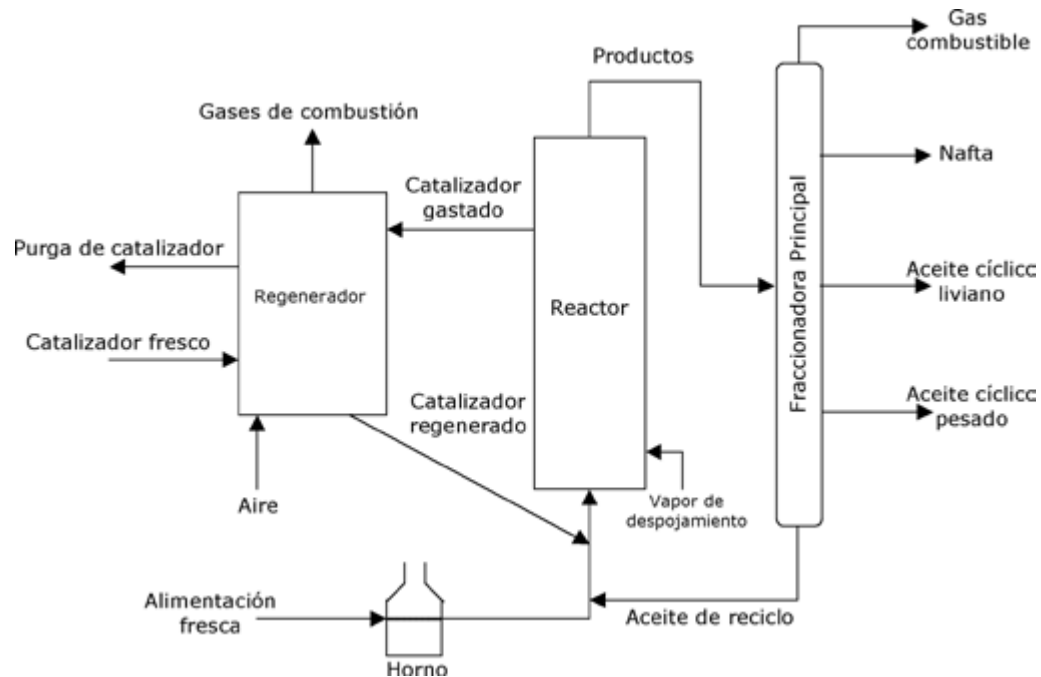
Una unidad de craqueo catalítico FCC es la unidad de conversión más importante dentro de una refinería, este proceso de conversión se puede aplicar a una gran variedad de materias primas que van desde gasóleo al vacío hasta crudo pesado y residuos para obtener gasolina, alquenos ligeros u otros hidrocarburos de bajo peso molecular. Este proceso tiene como objetivo producir 45% del total de gasolina de manera directa o indirecta. (Mohammed & Esgair, 2010).

La unidad FCC se fundamenta en pasar un catalizador de zeolita con el vapor de la alimentación en un reactor vertical durante uno segundos, los productos de craqueo se separan de los sólidos y se envían a una columna de destilación para separar los

productos deseados, y el catalizador se hace circular de regreso al regenerador donde se quema el coque y se regenera el catalizador. (Fahim, AL-sahhaf, & Elkilani, 2010)

Figura 1

Esquema simplificado de la unidad FCC



Nota. Unidad FCC, recuperado de (Sadeghbeigi's, 2020)

El proceso de la FCC se ha dividido en la siguiente manera:

1. Alimentación al precalentador
2. Boquillas de alimentación: elevador
3. Separación de catalizadores
4. Sección de pelado
5. Regenerador: recuperación de calor / catalizador
6. Combustión parcial versus completa
7. Válvula corredera / tubo vertical de catalizador regenerado

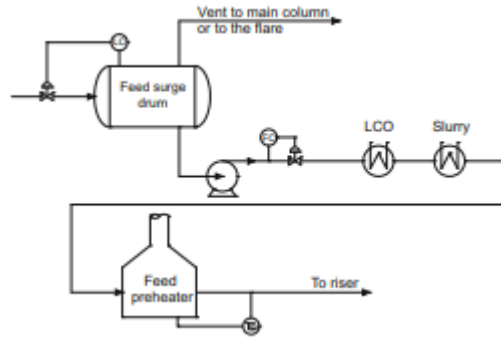
8. Esquemas de recuperación de presión y calor de los gases de combustión.
9. Instalaciones de manipulación de catalizadores
10. Fraccionador principal
11. Planta de gas
12. Tratamiento de instalaciones

2.1.3 Alimentación al precalentador

El gasóleo producto de la refinería y cualquier materia prima complementaria de FCC, se combinan y se envía aún tambor de separación, mismo que proporciona un flujo cortante de alimentación a las bombas de caja, el tambor también separa el agua o vapor presente en la materia prima. El gasóleo y otras unidades de alimentación se precalienta antes de llegar al tubo ascendente, las fuentes de precalentamiento son las corrientes de bombeo del fraccionador principal y un horno de gas especial. La alimentación pasa por intercambiadores de calor que usa las corrientes del fraccionador principal, para calentar la alimentación y eliminar el calor del fraccionador, este precalentador tiene ventajas como a mayor temperatura mayor rendimiento de la capacidad del soplador de aire y la circulación del catalizador (Sadeghbeigi's, 2020).

Figura 2

Alimentación al precalentador, FC control de flujo, LC control de nivel, TC control de temperatura, LCO aceite de ciclo ligero



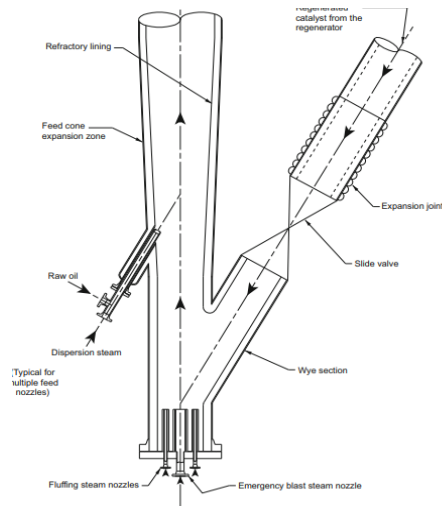
Nota. Precalentador recuperado de (Sadeghbeigi, 2012)

2.1.3. Boquillas de alimentación: elevador

El reactor es el corazón del proceso FCC, en el craqueo del catalizador el tubo ascendente es el reactor, el contacto entre el catalizador y el regenerador es necesario para conseguir las reacciones de craqueo.

Figura 3

Sección típica de alimentación



Nota. Elevador recuperado de (Sadeghbeigi, 2012).

Las boquillas de alimentación se usan para dispersar y atomizar la alimentación, las gotas de aceite más pequeñas aumentan la disponibilidad del alimento y de sitios activos del catalizador. Para este caso se usa el catalizador de zeolita de alta actividad,

todas las reacciones tienen lugar en un tiempo de 3 segundos o menos. En la gran parte de unidades de FCC las boquillas de alimentación se encuentran a 512 m o 1540 ft por encima del tubo ascendente, el número de boquillas puede variar entre 1 o 15. Las reacciones ocurren en fase de vapor, la alimentación es vaporizada por el catalizador regenerado, la fuerza impulsora es el volumen de expansión que se usa para llevar al catalizador por el tubo ascendente. El catalizador regenerado brinda el calor necesario para vaporizar la alimentación, sino que también compensará el enfriamiento que tiene lugar en el tubo ascendente debido a que la reacción es endotérmica. La relación del catalizador está en una razón de proporción de 4:1 a 10:1 en peso, todo esto depende del precalentamiento de la alimentación, del lecho del regenerador, y temperatura de salida del tubo ascendente. La temperatura del catalizador está en un rango de (1250 a 1350°F), la temperatura de craqueo está en un rango de (925-1050°F).

El tubo ascendente puede ser un tubo vertical, estos elevadores tienen una dimensión de 2 a 7 ft de diámetro y del 75 a 120 ft de largo, el tubo ascendente es similar a un reactor de flujo pistón en cuyo interior circula el catalizador y el vapor con un mínimo de retromezcla. Estos elevadores pueden ser externos con una pared fría de 4 a 5 in de material refractario interno con el fin de aislar y aumentar la resistencia a la abrasión. Los elevadores están diseñados para una velocidad de 40 a 60 ft/s, el tiempo de residencia es de aproximadamente de 2 a 3 s. Las reacciones que se ejecutan generan como subproducto coque que se deposita en el catalizador disminuyendo la actividad del mismo. (Sadeghbeigi, 2012)

2.2. Separación del catalizador

Cuando el catalizador sale de la zona del elevador entra en un recipiente del reactor, que sirve como alojamiento para los ciclones que tienen como objetivo separar la mayor parte del catalizador de los vapores. Algunos utilizan deflectores para direccionar al

catalizador hacia la zona inferior, en ciertas unidades el elevador está conectado a un conjunto de ciclones que tienen una efectividad de separación de 75 a 99.99%. La mayoría de las unidades de FCC usan ciclones para separar partículas del catalizador restantes de los vapores, estos ciclones recogen y devuelven el catalizador al separador a través de diplegs y válvulas.

El catalizador debe ser separado de los vapores tan pronto como entra al reactor si la temperatura es de 950°F, si esto no se lleva a cabo el contacto por un tiempo prolongado del catalizador y los vapores generará algunos productos no deseables, el tiempo de residencia prolongado promueve el agrietamiento de productos deseables.

2.2.1 Sección de despojamiento

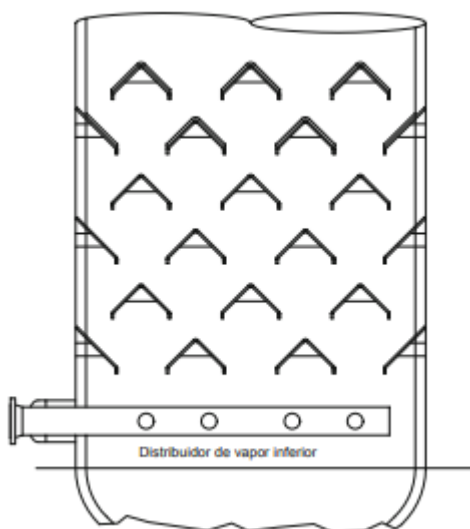
El catalizador gastado que entra al separador de catalizador tiene hidrocarburos que se adsorben en la superficie del catalizador, así mismo hay vapores que llenan los poros del catalizador y vapores de hidrocarburos que son arrastrados por el catalizador, el vapor de arrastre se utiliza para eliminar los hidrocarburos restantes que se quedan en el catalizador, el vapor de arrastre no provoca desorción de los hidrocarburos que están en los poros del catalizador, sin embargo las reacciones de agrietamiento siguen dentro del recipiente, estas reacciones tienen lugar debido a la temperatura y el tiempo de residencia del catalizador en el separador, existe una relación entre la temperatura más alta y el tiempo de residencia más extenso permiten una conversión de hidrocarburos más limpios y ligeros (Sadeghbeigi's, 2020).

Un diseño eficiente de separador del catalizador brinda un contacto íntimo entre el catalizador y el vapor, los separadores están diseñados para una velocidad de vapor de 0.75ft/s una tasa de flujo masico del catalizador de 700lb/min, si la tasa de flujo masico es demasiado alto el catalizador puede arrastrar vapor, esto reduce la eficacia del vapor de arrastre, un valor típico de vapor de arrastre está en el rango de 2.5 lb de vapor por 1000

lb de catalizador en circulación, pero es importante minimizar los hidrocarburos transportados al regenerador, sin embargo no todos los vapores de hidrocarburos pueden moverse a los poros del catalizador en el separador, una parte de ellos se transporta con el catalizador gastado al regenerador (Sadeghbeigi, 2012).

Figura 4

Separador de catalizador



Nota. Separador del catalizador, recuperado de (Sadeghbeigi's, 2020).

Los hidrocarburos líquidos tienen una relación de C/H más alta con relación al coque duro del catalizador, lo contratiempos de permitir que hidrocarburos ricos en hidrogeno ingresen al regenerador son:

- Pérdida de producto líquido: en lugar de quemarse en el regenerador podrían recuperarse como producto líquido.
- Pérdida de rendimiento: La combustión de hidrogeno en agua en comparación con la de CO₂ en agua produce 3.7 veces más calor, y este aumento de temperatura del regenerador causado por el exceso de hidrocarburos podría

exceder el límite de temperatura de las partes internas del regenerador y por lo tanto obligara reducir la alimentación.

- Pérdida de la actividad del catalizador: La temperatura elevada en el regenerador con la presencia de vapor en el regenerador disminuye la actividad del catalizador al destruir la estructura cristalina del mismo (Sadeghbeigi's, 2020).

En la mayoría de las unidades FCC, el catalizador usado precipita hacia el regenerador y en otras unidades se emplea aire de elevación o de transporte para llevar al catalizador al regenerador, una distribución uniforme del catalizador gastado es crítica para lograr una combustión eficiente que disminuya la postcombustión y emisiones de NOx.

2.2.2 Materia prima

Los tipos de hidrocarburos en la alimentación de FCC se clasifican ampliamente como parafinas, olefinas, naftenos y aromáticos (PONA) (Sadeghbeigi, 2012).

Tabla 1*Materia prima de la unidad FCC*

Compuestos	Fórmula	Concepto	Características
Parafinas	C_nH_{2n+2}	Son hidrocarburos de cadena lineal o ramificada q	Las reservas de parafina son fáciles de romper y normalmente producen la mayor cantidad de productos líquidos totales. Las parafinas normales se agrietan principalmente en olefinas y otras moléculas de parafina. El contenido de carbono parafínico está típicamente entre 50% en peso y 65% en peso de la alimentación total.
Olefinas	C_nH_{2n}	Son compuestos insaturados	Olefinas en la alimentación de FCC indican aceite producido térmicamente. El contenido típico de olefinas de la alimentación de FCC es inferior al 5% en peso, a menos que se carguen gasóleos de coquización sin hidro tratar.
Naftenos	C_nH_{2n}	Son cualquier grupo de compuestos de anillo de hidrocarburo	Son una clase de cicloalcanos principalmente derivados del ciclopentano. Los naftenos son parafinas que han sido "dobladas" en un anillo o una forma cíclica. Los naftenos son materias primas deseables para la FCC porque producen gasolina de alto octanaje

Compuestos	Fórmula	Concepto	Características
Aromáticos	C_nH_{2n-6}	Son similares a los naftenos, pero contienen un núcleo de anillo insaturado estabilizado por resonancia.	Compuestos que contienen al menos un anillo de benceno. El anillo de benceno es muy estable y no se agrieta en componentes más pequeños. Los aromáticos no son una materia prima preferida porque pocas de las moléculas se agrietan.
Compuestos de azufre	-SH al final (R – SH) _n (R–S–R ₀ or R–S–S–R ₀).	CH ₃ CH ₂ CH ₂ C H ₂ SH	El contenido de azufre de los petróleos crudos varía de menos de 0.05 a más de 10% en peso, pero generalmente cae en el rango de 1 a 4% en peso. El petróleo crudo con menos de 1% en peso de azufre se denomina bajo en azufre o dulce, y el que tiene más de 1% en peso de azufre se denomina alto en azufre o ácido.
Compuestos oxigenados	Alcoholes - R – OH Fenoles hidrógeno del anillo aromático se reemplaza por un grupo hidroxilo (–OH) Éteres (R – O – R ₀) Acido carboxílicos	Estos incluyen alcoholes, éteres, ácidos carboxílicos, compuestos fenólicos, ésteres y anhídridos de cetonas.	El contenido de oxígeno del petróleo crudo suele ser inferior al 2% en peso. Un contenido de oxígeno extraordinariamente alto indica que el aceite ha sufrido una exposición prolongada a la atmósfera. El oxígeno en el petróleo crudo puede presentarse en una variedad de formas.

Compuestos	Fórmula	Concepto	Características
Compuestos nitrogenados	Las piridinas son compuestos heteroaromáticos de seis miembros que contienen un átomo de nitrógeno		En general, cuanto más asfáltico es el aceite, mayor es su contenido de nitrógeno. Los compuestos de nitrógeno son más estables que los compuestos de azufre y, por lo tanto, son más difíciles de eliminar, aunque estén en concentraciones bajas
Compuestos metálicos			Los metales afectan muchos procesos de mejora. Causan envenenamiento a los catalizadores usados para el hidro procesamiento y craqueo. Incluso pequeñas cantidades de metales (hierro, níquel y vanadio) en la materia prima del craqueador catalítico afectan la actividad del catalizador y dan como resultado una mayor formación de gas y coque y una reducción de los rendimientos de gasolina.

Compuestos	Fórmula	Concepto	Características
Asfáltenos y resinas		<p>Los asfáltenos son sólidos friables de color marrón oscuro que no tienen un punto de fusión definido y generalmente dejan residuos carbonosos al calentarlos</p> <p>Las resinas son moléculas polares en el rango de peso molecular de 500 a 1000, que son insolubles en propano líquido pero solubles en n-heptano</p>	<p>Están formados por capas aromáticas polinucleares condensadas unidas por enlaces saturados. Estas capas se pliegan, creando una estructura sólida conocida como micela. Sus pesos moleculares abarcan una amplia gama, desde unos pocos cientos hasta varios millones.</p> <p>Las moléculas de resina rodean los racimos de asfáltenos (micelas) y los suspenden en aceite líquido. Porque cada asfálteno es rodeado por una serie de moléculas de resina, el contenido de resinas en los petróleos crudos es mayor que el de los asfáltenos.</p>

Tabla 2*Reacciones en la unidad FCC*

Compuestos	Reacciones
Parafinas	$C_{10}H_{22} \rightarrow C_4H_{10} + C_6H_{12}$
Olefinas	$C_9H_{18} \rightarrow C_4H_8 + C_5H_{10}$
Aromáticos	$ArC_{10}H_{21} \rightarrow ArC_5H_9 + C_5H_{12}$
Naftenos	$Ciclo-C_{10}H_{20} \rightarrow C_6H_{12} + C_4H_8$

2.3. Cálculos insílico

Término moderno para referirse a la experimentación realizada por computadora, describiendo el potencial de las herramientas computacionales tanto para química, biología y farmacología, más rápidamente define el uso de la información para la creación de modelos por computadora, misma que se puede utilizar para hacer predicciones, sugerir hipótesis y en último caso mostrar resultados, sin desperdiciar materia prima y reactivos. (S Ekins, 2007)

2.4. Simulación computacional

Permite estudios más flexibles y dinámicos debido a que permiten varios cambios en diversos aspectos, facilitando así diversos tipos de evaluación sin necesidad que exista la fase de desarrollo del experimento (Bonsignore, 2012).

Dicha flexibilidad permite ajustar parámetros en estudio con el objeto de mejorar el rendimiento del sistema y optimizar costos. Las simulaciones computacionales son cada vez más poderosas cuando se ejecutan de manera correcta, debido a que proporcionan

información sobre las características de rendimientos de diseños potenciales (Bonsignore, 2012).

La construcción del modelo es el resultado de una combinación de pasos teóricos y experimentales hasta lograr la precisión requerida del modelo. La técnica de diseño experimental en base a modelos es un artificio eficaz para la construcción y refinamiento de modelos de procesos en estado dinámico (Baran, 2012).

La estrategia óptima de diseño experimental permite seleccionar las condiciones experimentales para las cuales los datos resultantes permiten obtener la máxima información con respecto a los parámetros analizados (Baran, 2012).

2.5. Química Computacional

Es una ciencia que se aplica en muchas de las áreas químicas bioquímicas y ciencia de los materiales, utiliza herramientas para modelar una amplia variedad de procesos químicos que van desde estudios precisos de moléculas pequeñas en fase gas con aplicaciones en astronomía, hasta simulaciones complejas de sistemas macromoleculares, cristales y soluciones. Para las moléculas pequeñas se usan modelos sofisticados y muy precisos de la ecuación de Shorodinger, y las macromoléculas se tratan con modelos aproximados como la teoría funcional de la densidad. (Gunnar Karlstrom, 2003)

Los efectos de un entorno de disolvente o cristal se pueden modelar usando campos de reacción hamiltonianos y potenciales de modelo. Los sistemas macromoleculares se tratan desde un nivel más simple donde el centro reactivo es estudiado por la química cuántica mientras que sus alrededores son modelados por la mecánica cuántica (simulaciones de Monte-Carlo (MC) o dinámica molecular (MD)) (Gunnar Karlstrom, 2003).

La química computacional se usa de dos formas la primera es modelar un sistema molecular antes de sintetizar esa molécula en el laboratorio, aun cuando los modelos no son perfectos, pero son necesarios para descartar el 90% de posibles compuestos inadecuados para su uso previo. La información que se obtiene es muy útil porque evitaría el uso de mano de obra, materias primas y a su vez generar desechos toxico (Young, 2001).

Otra forma de usar la química computacional es comprender un problema de manera completa, debido a que hay ciertas propiedades de una molécula que pueden obtenerse fácilmente por métodos computacionales que por medios experimentales (Young, 2001).

Muchos químicos experimentales están usando modelos computacionales para obtener información extra de los compuestos que examinan en el laboratorio. A medida que evoluciona la química computacional los químicos computacionales han centrado su atención en modelados más difíciles (Young, 2001).

2.6. Química orgánica

Es el estudio de los compuestos que contienen en su estructura átomos de carbono formando enlaces covalentes C-C o a su vez C-H y otros heteroátomos debido a que existen más de 30 millones de compuestos químicos que se conocen en la actualidad, debido a la presencia de carbono también se denomina química del carbono (McMurry, 2008).

A diferencia de otros elementos el carbono forma enlaces fuertes con otros átomos de carbono y esto le pide formar una amplia variedad infinita de compuestos de carbono, misma que se representa la base de la tierra. Los seres vivos están formados de

compuestos orgánicos complejos, los cuales se ocupan de las funciones estructurales, químicas o genéticas (Wade, 2010).

Los químicos han desarrollado la habilidad para sintetizar o simular diversas moléculas complejas, los productos sintéticos sirven como fármacos, medicamentos, plásticos, pesticidas, pinturas y fibras (Wade, 2010).

2.6.1 Estructura del átomo

El átomo está constituido por protones, neutrones y electrones. Los protones están cargados de manera positiva y los neutrones no tienen carga y están juntos dentro del núcleo. Los electrones tienen carga negativa de igual magnitud que los protones y estos se encuentran alrededor del núcleo (Wade, 2010).

Los protones y neutrones se asemejan en su masa que es aproximadamente 180 veces la masa de un electrón, la masa del átomo se concentra en el núcleo, pero los electrones participan en los enlaces y reacciones químicas.

Los elementos se diferencian por el número de protones en el núcleo que se conoce como el número atómico, muchas veces el número de neutrones es igual al número de protones, aunque el número de neutrones puede variar, los átomos con el mismo número de protones y diferente número de neutrones se denominan isótopos. Por ejemplo, el carbono C tiene 6 protones y 6 neutrones en su núcleo, su número de masa corresponde a la suma de ambos por lo tanto es 12 unidades de masa atómica (Wade, 2010).

2.6.2 Estructura electrónica del átomo

Las propiedades químicas de un elemento se determinan por el número de protones en el núcleo y por el número de electrones alrededor del mismo. Los electrones forman enlaces y determinan las estructuras de las moléculas, por su tamaño y ligereza los electrones presentan propiedades tanto de partículas como de ondas (Wade, 2010).

Los electrones se encuentran alrededor del núcleo en orbitales, según el principio de incertidumbre de Heisenberg no podemos determinar exactamente en donde ese encuentra el electrón, pero si podemos determinar la densidad de electrónica, definida como la probabilidad de hallar un electrón en una parte específica del orbital (Wade, 2010).

2.7. Regla del octeto

Establece que una capa llena de electrones es muy estable y que los átomos transfieren comparten electrones para lograr tener una capa llena de electrones, una capa llena de electrones simplemente es la configuración de un gas noble. (Wade, 2010)

2.7.1 Enlace iónico

Existen dos formas para que los átomos alcancen la configuración de los gases nobles, esto se logra mediante la transferencia de electrones de uno a otro átomo para formar un enlace denominado enlace iónico.

2.7.2 Enlace covalente

Los electrones se comparten, es el tipo de enlace en los compuestos orgánicos. Por ejemplo, si dos átomos de hidrógeno se unen, estos comparten sus electrones y ahora cada átomo tiene dos electrones es su capa de valencia (Wade, 2010).

2.7.3 Formulas estructurales

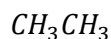
Estas fórmulas indican que átomos están enlazados entre sí, para lo mismo se describe dos tipos de fórmulas estructurales que son:

- Las estructuras de Lewis completa

Usa como símbolo un par de puntos para representar un par de electrones de enlace o como un guion, los electrones no enlazados se muestran como un par de puntos. (Wade, 2010)

- Las fórmulas estructurales condensadas.

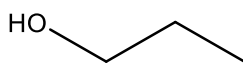
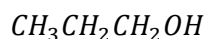
Se escriben sin indicar los enlaces individuales este tipo de fórmulas se caracteriza porque cada átomo central se indica junto a los átomos unidos a él. Los átomos enlazados se muestran luego del átomo central. Por ejemplo:



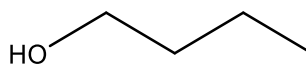
Si hay más de dos grupos idénticos se utilizan paréntesis y un subíndice para representarlos. (Wade, 2010)

2.7.4 Fórmulas moleculares

Proporciona el número de átomos de cada elemento en una molécula del compuesto. Por ejemplo: la fórmula molecular del butan-1-ol es $C_4H_{10}O$. (Wade, 2010)



butan-1-ol, fórmula molecular $C_4H_{10}O$



2.8. Cálculo de la Fórmula empírica

La fórmula molecular se puede determinar las fórmulas moleculares siguiendo los siguientes pasos:

Primero determinar la fórmula empírica.

Ejemplo

Un análisis cuantitativo elemental y que contiene 40% de carbono 6.67 % de hidrogeno, asumimos que el resto es 53.3% de oxígeno, para convertir estos datos en fórmula empírica, siguiendo el siguiente procedimiento:

Suponemos una muestra de 100g, por lo que el valor en porcentaje indica la cantidad den gramos de cada elemento. Divida la cantidad en gramos de cada elemento

entre la masa atómica del elemento correspondiente para obtener la cantidad de sustancia en moles de ese átomo en los 100 g de muestra (Wade, 2010).

Divida cada una de las cantidades en moles entre el valor más pequeño.

$$\frac{40 \text{ g C}}{12 \text{ g/mol}} = 3.33; \quad \frac{3.33 \text{ mol}}{3.33 \text{ mol}} = 1$$

$$\frac{6.67 \text{ g H}}{1.01 \text{ g/mol}} = 6.60; \quad \frac{6.60 \text{ mol}}{3.33 \text{ mol}} = 1.98 = 2$$

$$\frac{53.3 \text{ g O}}{16 \text{ g/mol}} = 3.33; \quad \frac{3.33 \text{ mol}}{3.33 \text{ mol}} = 1$$

Este resultado arroja la fórmula empírica $C_1H_2O_1$. (Wade, 2010).

Cálculo de la fórmula molecular

En el caso de la fórmula empírica $C_1H_2O_1$ la masa por unidad es de 30, supongamos la masa molecular es aproximadamente 60. Por lo tanto, nuestro compuesto desconocido debe tener el doble de esta cantidad de átomos (Sadeghbeigi's, 2020).

La fórmula molecular es $C_2H_4O_2$, mismo que podría ser ácido acético (Wade, 2010)

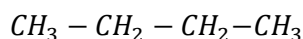
2.9. Isómeros

Son compuestos distintos, pero con la misma fórmula molecular, existen diversos tipos de isomería en los compuestos orgánicos (Wade, 2010).

Las clases de isómeros más grande son:

2.9.1 Isómeros constitucionales

También conocidos como isómeros estructurales son isómeros que se diferencian en su secuencia de enlace, es decir sus átomos están conectados de manera totalmente distinta. Por ejemplo, el butano (Wade, 2010).



n-butano



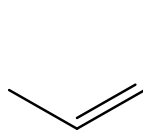
Estos compuestos son isómeros porque tienen la misma fórmula molecular.

(Wade, 2010)

2.10. Estereoisómeros

Son isómeros que se diferencian en cómo se orientan sus átomos en el espacio, pero sus átomos unidos en el mismo orden. Por ejemplo, el cis- y el trans-but-2-eno tienen las mismas conexiones de enlace, por lo que no son isómeros constitucionales (Wade, 2010).

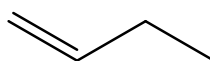
Son estereoisómeros porque se diferencian en la orientación espacial de los grupos unidos al doble enlace (Wade, 2010).



Cis-but-2-eno



trans-but-2-eno



But-2-eno

Los isómeros cis y trans se conocen como isómeros geométricos, debido a que se diferencian en la geometría de los grupos de un enlace doble. El isómero cis tiene los grupos iguales en el mismo lado del enlace doble y el isómero trans tiene grupos iguales en lados opuestos del doble enlace.

2.11. Fuerzas Intermoleculares

Se refiere a las fuerzas de atracción cuando las moléculas se atraen o se repelen, atraen o se repelen entre sí. Las fuerzas de atracción se convierten rápidamente en una gran fuerza de repulsión y las moléculas se rechazan entre sí (Wade, 2010).

Para el caso de las moléculas orgánicas estas fuerzas de atracción y repulsión son más fáciles de predecir. La naturaleza de las fuerzas de atracción afecta las propiedades físicas de los compuestos orgánico. Estas fuerzas de atracción son muy importantes en los sólidos y en los líquidos, en dichas fases condensadas las moléculas están en contacto continuo una con otra y podemos ver reflejas en los puntos de fusión, de ebullición y las solubilidades de los compuestos orgánicos (Wade, 2010).

2.12 Propiedades Físicas

Las propiedades físicas se pueden medir y observar sin modificar su composición o identidad de una sustancia. Por ejemplo, es posible medir el punto de fusión del hielo, al calentar un bloque de este y registrar la temperatura a la cual se convierte en agua, el agua es diferente del hielo solo en su aspecto, mas no en su composición, por lo tanto, se trata de un cambio físico, se puede congelar el agua para obtener nuevamente hielo. De esta manera se determina que el punto de fusión de una sustancia es una propiedad física (Wade, 2010).

2.12.1 Propiedades químicas

Las propiedades químicas de un elemento están determinadas por el número de protones y electrones de sus átomos, en condiciones normales los neutrones no forman parte de los cambios químicos. Por lo tanto, los isótopos del mismo elemento tienen un comportamiento químico parecido, forman el mismo tipo de compuestos y presentan reactividades parecidas (Wade, 2010).

Las propiedades químicas de cualquier átomo se determinan a partir de la configuración de los electrones de valencia de sus átomos. Por ejemplo, el hidrogeno en presencia de oxígeno se quema con el objetivo de formar agua, esto describe una propiedad química del hidrogeno ya que para observar esta propiedad debe ocurrir un cambio químico, en este caso se denomina combustión. Una vez ocurrido el cambio queda el agua y desaparece la sustancia química original y queda otra sustancia química distinta, el agua (Wade, 2010).

Las propiedades de la materia corresponden a dos categorías adicionales, puede ser propiedades extensivas y propiedades intensivas. El valor medido de una propiedad extensiva depende de la cantidad de materia que se esté evaluando. Las propiedades intensivas no dependen de la cantidad de materia, por ejemplo, la densidad se define como la cantidad de masa dividida entre un volumen es una propiedad intensiva, también lo es la temperatura (Wade, 2010).

2.13. Solubilidad

Cuando una sustancia se disuelve sus iones o moléculas se dispersan entre las moléculas del solvente dentro de las cuales hay espacios para las partículas del soluto, la separación de las partículas del solvente y del soluto deben vencer las fuerzas que mantienen unido a cada compuesto. La energía necesaria para superar la atracción intermolecular proviene de la formación de nuevas formas de atracción entre el soluto y el solvente. Estas fuerzas son las fuerzas de Van de Waals, las interacciones dipolo-dipolo o puentes de hidrogeno todo depende del tipo de partículas(Núñez, 2018).

Los compuestos polares se disuelven en disolventes polares y los compuestos no polares se disuelven en disolventes no polares, aquí aplica lo igual disuelve a lo igual, esto se debe a que un disolvente polar como el agua tiene cargas parciales que puede interactuar con cargas parciales de otro compuesto(Núñez, 2018).

2.14. Lipofilia

Es una propiedad molecular que determina la correlación con los procedimientos como la permeabilidad, solubilidad, volumen de distribución, estabilidad metabólica, la misma se expresa mediante $\log P$ (coeficiente de partición octanol-agua) para especies neutrales o $\log D$ (coeficiente de distribución octanol-agua) para moléculas cargadas (Fischer, Kansy, Manfred y Wagner, &, 2006).

2.15. Peso molecular

Es la suma de las masas atómicas en una molécula en una (unidades de masa atómica), por ejemplo, la masa molecular del agua H_2O . (Wade, 2010)

$$2(\text{masa atómica del H}) + (\text{masa atómica del O})$$

$$2(1.008 \text{ uma}) + (16.00 \text{ uma O}) = 18.012 \text{ uma}$$

El cálculo es de la siguiente manera se multiplica la masa atómica de cada elemento por el número de átomos de ese elemento presente en una molécula y sumar todos los resultados

2.14. Hidrocarburos

Son compuestos formados totalmente por carbono e hidrogeno. Las clases principales de hidrocarburos son alcanos, alquenos, alquinos e hidrocarburos aromáticos (Wade, 2010).

2.15. Alcanos

Son la forma más sencilla y con menos reactividad de los compuestos orgánicos debido a que solo tienen enlaces sencillos. Los alcanos no tienen enlaces dobles o triples y no tienen heteroátomos (diferentes átomos de carbono e hidrogeno). Aunque si experimentan reacciones como craqueo térmico y la combustión a elevadas temperaturas,

son menos reactivos en comparación a otra clase de compuestos que tienen otros grupos funcionales. (Wade, 2010)

Los alcanos se utilizan como combustible, disolventes y lubricantes. Los alcanos forman parte del gas natural, el aceite de calefacción y la cera de parafina, tienen propiedades diferentes que son el resultado de los distintos intervalos de masas moleculares (Wade, 2010)

Los alcanos son hidrofóbicos por lo tanto no se disuelven en agua, son excelentes lubricantes y preservan los metales ya que evitan que el agua llegue al metal y evita su corrosión (Wade, 2010).

Los puntos de fusión y ebullición de los alcanos no ramificados aumentan poco a poco conforme va aumentando el número de átomos de carbono por ende aumentan sus masas moleculares (Wade, 2010).

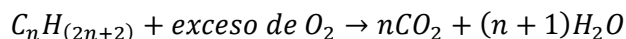
2.16. Reacciones

Las parafinas son muy poco reactivas, las reacciones más útiles se llevan a cabo en condiciones drásticas o temperaturas elevadas, por lo tanto, no se puede realizar en un laboratorio, sino que más bien necesita un equipo especializado. Las mezclas que forman las reacciones de los alcanos son difíciles de separar, pero son muy útiles a niveles de industria (Wade, 2010).

2.16.1 Combustión

Es una reacción de oxidación que ocurre en condiciones elevadas de temperatura, reacción que da como producto carbono y agua (Wade, 2010).

Reacción de combustión

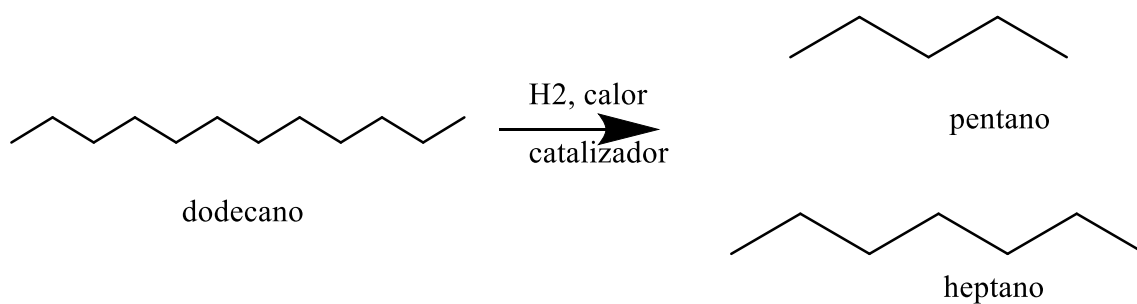


2.16.2 Craqueo e hidrocraqueo

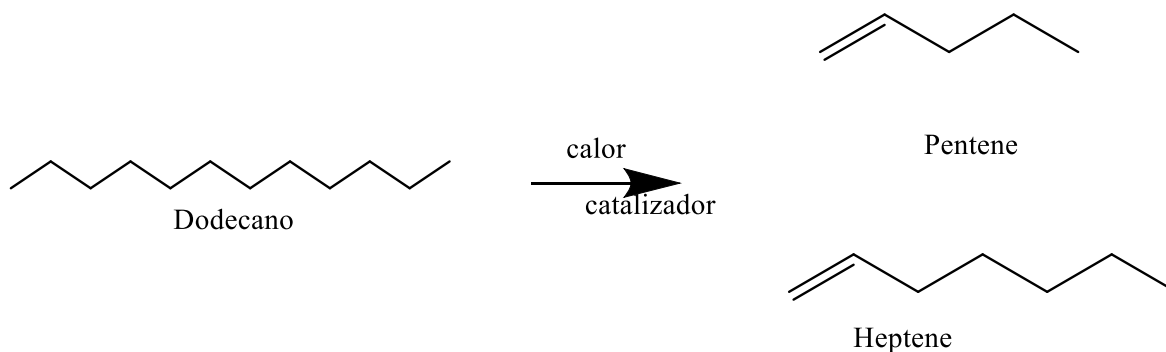
Reacción que se ejecuta en condiciones que generan los rendimientos máximos de gasolina (Wade, 2010).

Para el caso de hidro craqueo se añade hidrogeno para producir hidrocarburos saturados, el craqueo sin hidrógeno da como resultado una mezcla de alcanos y alquenos (Wade, 2010).

2.16.3 Hidrocraqueo Catalítico



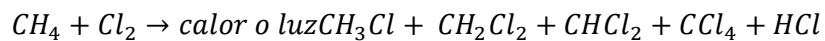
2.16.4 Craqueo Catalítico



2.16.5 Halogenación

Los alcanos pueden reaccionar con los halógenos como F_2, Cl_2, Br_2, I_2 para dar como resultado haluros de alquilo (Wade, 2010).

Por ejemplo:



2.17. Alquenos

Se caracteriza por que tiene dobles enlaces entre carbono, también conocidos como olefinas, cuyo último nombre significa gas formador de aceite. Los alquenos se encuentran entre los compuestos industriales más importantes. (Wade, 2010).

El doble enlace carbono-carbono es muy reactivo por lo tanto se lo considera como un grupo funcional. (Wade, 2010).

Los alquenos son intermediarios para la síntesis de polímeros, medicamentos, pesticidas y otros productos químicos. Por ejemplo, el etileno que se produce a mayor volumen, en cantidades de millones de libras por año a nivel mundial, mismo que la mayor parte se polimeriza para producir millones de libras de polietileno, y la otra parte se utiliza para sintetizar etanol, ácido acético, etilenglicol y cloruro de vinilo. (Wade, 2010)

2.18. Alquinos

Son la clase de hidrocarburos que tienen triple enlace carbono-carbono, también conocidos como acetilenos, estos alquinos también están presentes en la naturaleza y son útiles para las plantas para protegerse contra enfermedades o depredadores. El acetileno es un gran representante de este grupo, comercialmente muy importante su principal función es como combustible de sopletes en una mezcla de acetileno-oxígeno (Wade, 2010).

Capítulo III

Metodología

La metodología del presente trabajo está dividida en dos etapas:

Investigación exhaustiva de los compuestos de entrada y salida de la unidad de craqueo catalítico.

Procesamiento *insilico* de cada uno de los compuestos en programas químicos como: *Chemdraw*, *Avogadro*, *Chemcraft* y la plataforma virtual *SwissADME*.

Para lo cual se realizan las siguientes actividades.

3.1. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de craqueo catalítico.

Para dar solución a la problemática planteada se realiza una serie de investigaciones consultando diferentes fuentes de información entre las que se destacan artículos científicos de revistas como JPT, *Journal of Chemical and Petroleum Engineering*. Libros, *handbook*, tesis doctorales, página de internet como *One Petro*, toda esta fuente de información hace referencia a temas como refinería, origen del petróleo, avances de tecnología en refinación, unidad de craqueo catalítico FCC, componentes químicos en la entrada de la unidad de craqueo catalítico, alimentación a la unidad de craqueo catalítico, almacenamiento de hidrocarburos, manual de productos, esto se realiza con el objetivo de recopilar toda la información referente a compuestos químicos, análisis químico cuantitativo que hace referencia a las corrientes de entrada que va permitir establecer de forma clara y concisa cuales son los componentes que ingresan a una unidad de craqueo catalítico.

3.1.1 Búsqueda de datos internacionales

En un contexto internacional donde en la internet se encuentra una amplia variedad de información, se realiza la investigación de información para satisfacer el objetivo propuesto en este trabajo, dicha investigación se realiza en artículos científicos, libros, patentes de procesos de países como Estados Unidos, manuales de productos de empresas petroleras como RECOPE, todo esto enfocado en un contexto internacional, por lo que se evidencia datos de diversas refinerías a nivel del mundo.

Es importante mencionar que como el límite de búsqueda es el mundo se encuentra una amplia información del proceso en estudio. Es así que se puede establecer que según (Speight, 2013), que normalmente las materias primas que ingresan a craqueo catalítico son mezcla de gasóleo de destilación directa, gasóleo al vacío al vacío, petróleo pesado, vacíos de residuo, estas mezclas de compuestos están formadas principalmente por compuestos como parafinas, olefinas, naftenos, aromáticos , entre otros.

3.1.2 Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano

En el Ecuador para objetos de este estudio se realiza la investigación en tesis, artículos científicos específicamente relacionados al área de refinería, es importante recalcar que hay una limitante y no se encuentra suficiente información relacionado al área, sino que más bien según esta investigación se reportan datos de análisis químico cuantitativo de forma general, con la argumentación de que la refinería que posee el país es básica, en comparación a las refinerías que existen en el mundo.

Es importante mencionar que de acuerdo con la revisión bibliográfica coinciden ciertos autores que la corriente de alimentación a la unidad FCC, son gasóleo de vacío, gasóleo destilación y residuos.

3.1.3 Obtención, organización y reporte de resultados

Realizada la investigación bibliográfica con una amplia información tanto a nivel internacional como nacional se selecciona la información que permita satisfacer los objetivos del estudio, para lo cual se recopilan datos de análisis químicos que involucra compuestos de entrada a la unidad de craqueo catalítico, como la información fue recabada de varias partes del mundo en donde la tecnología, presupuesto, tipo de refinería son diferentes se encontraran diversos componentes para una mejor comprensión todos estos datos se registran en una tabla en la que se especifica el nombre del compuesto, % en peso, % en volumen, hasta recoger todos los datos obtenidos en la investigación bibliográfica.

3.2. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de craqueo catalítico

Para satisfacer los objetivos de este proyecto de investigación se realiza la búsqueda de información en artículos científicos, libros, revistas, libros y handbooks, manual de productos de diversas empresas alrededor del mundo, que hacen mención específica a temas como, unidad de craqueo catalítico, tecnología aplicada a refinación, compuestos de salida de la unidad de craqueo catalítico, aplicación de los productos de la unidad de craqueo catalítico en otros procesos de la refinería como isomerización, estudio de las condiciones de operación de la unidad FCC, todo esto para recopilar la máxima información referente a los productos de la unidad FCC en diversas condiciones sea de tecnología, inversión, equipos, y parámetros de proceso.

Los productos de salida que se repiten en varias investigaciones son nafta de FCC, propano, butanos, ciertos aromáticos y compuestos lineales que son la base de petroquímica.

3.2.1 Búsqueda de datos internacionales

A nivel mundial se realizan muchas investigaciones para mejorar y aportar, al desarrollo de la unidad de craqueo catalítico, es por esto que se realiza una investigación en fuentes internacionales para poder encontrar los compuestos de salida de la unidad de FCC, la información a nivel internacional que tiene diversas variantes de acuerdo a las condiciones de proceso de cada país.

Es indispensable mencionar que en países más desarrollados y con una alta tecnología en el sector de hidrocarburos la información será más detallada pues se encontraron ciertos análisis químicos de alta gama que reporta la base química de las corrientes de salida.

3.2.2 Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano

La revisión bibliográfica reportó que la unidad FCC de la refinería del Ecuador tiene productos básicos en comparación con la producción de otros países, sus productos son naftas de FCC, propano y butano, el resto de los derivados el país lo compra.

3.2.3 Obtención, organización y reporte de resultados

La amplia información encontrada a nivel nacional e internacional se clasifica en orden para que sean capaz de satisfacer los objetivos de este proyecto, es decir se clasifica se coteja y se reportan en una tabla todos los compuestos de salida de la unidad FCC, se reportan diversos componentes debido a la variedad de la información.

3.2.4 Procesamiento y obtención de estructuras químicas 1D, 2D y propiedades químicas básicas

Los átomos pueden tener una, dos o tres dimensiones, pero los enlaces que realizan con cada átomo para formar una molécula pueden tener regiones tridimensionales, bidimensionales y unidimensionales (3D,2D,1D) respectivamente, dichos

modelos permiten establecer relaciones intramoleculares, la base del análisis conformacional, y la estereoquímica. (Darling, 2006)

Las propiedades fisicoquímicas que se calculan a partir de métodos computacionales han sido clasificados como 1D que especifican el tipo atómico, 2D que implica la conectividad del átomo con otros para formar una molécula. Para aplicar estos métodos computacionales se emplean programas como el “ChemDraw 18.2”, de PerkinElmer Inc.

ChemDraw

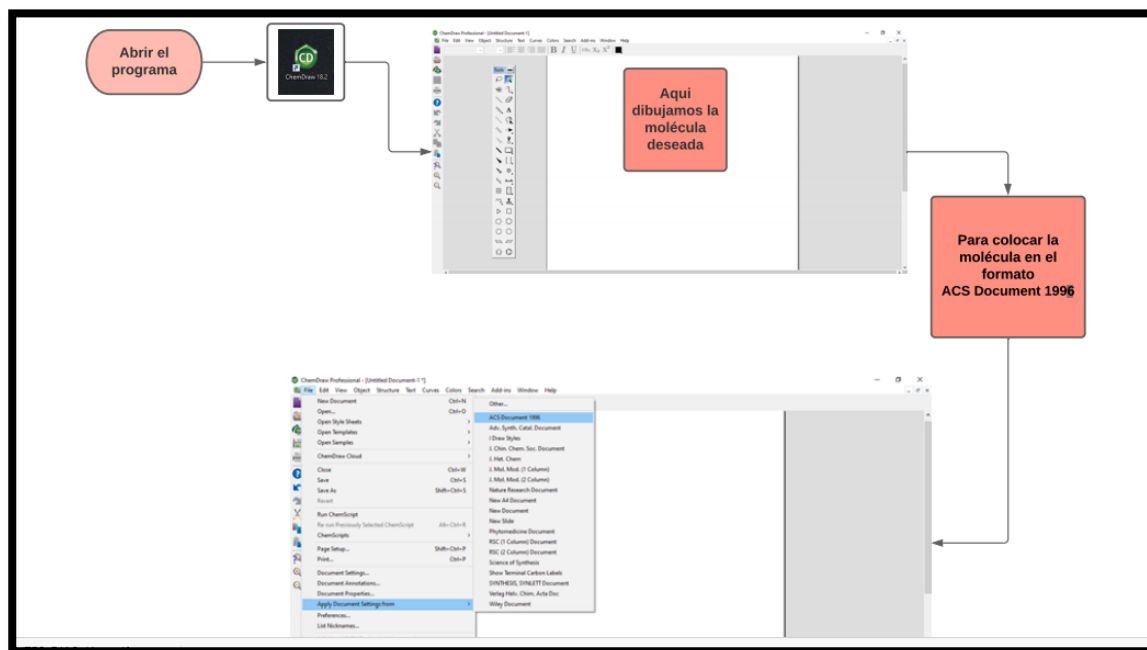
Es un graficador químico utilizada por químicos y biólogos para dibujar estructuras moleculares de gran calidad, esta herramienta permite a los investigadores comunicar de forma rápida y efectiva ya que dispone de una amplia gama de plantillas para el dibujo de las estructuras moleculares. Además permite determinar las propiedades básicas, generar espectros, nombres en la nomenclatura IUPAC, calcular reacciones estequiométricas, si se conoce el nombre del compuesto predice la estructura molecular del mismo, para que pueda determinar el error mientras se realiza la gráfica la estructura se pone color rojo, una vez realizada la gráfica de interés esta se puede guardar en varios formatos comunes para estructuras como 2D, (MDL MolFiles, ISIS SKC, cadenas SMILES y SLN, y los formatos CDX, CDXML). (“ChemDraw - Software Activo,” n.d.)

3.3.1 Generación de estructuras químicas en 2D

La geometría molecular de un compuesto puede representarse usando modelo 2D, para lo cual se utiliza el programa ChemDraw, este programa permite obtener las estructuras moleculares de diversos compuestos químicos, así como también un análisis de propiedades químicas básicas como peso molecular, fórmula química, y el análisis elemental.

Figura 5

Pasos sistemáticos para graficar una molécula en ChemDraw



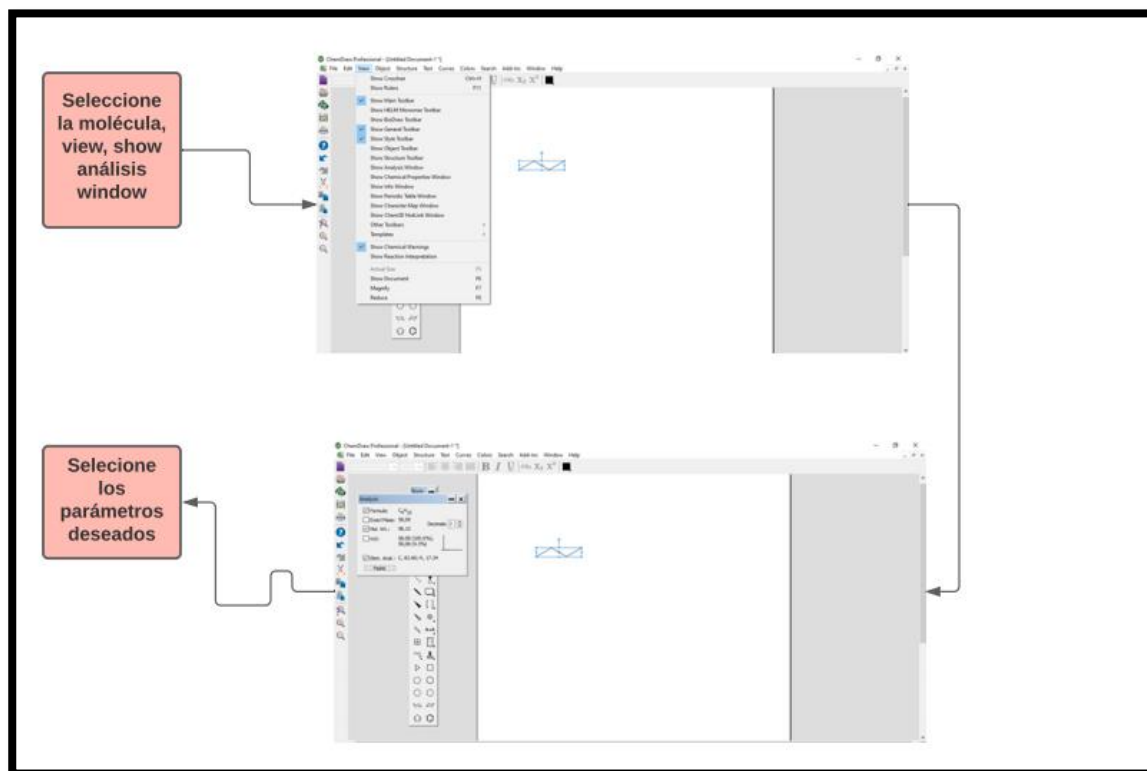
3.3.2 Procesamiento de propiedades básicas

Las moléculas están constituidas por diversos átomos a los cuales se les atribuye las propiedades que tendrá la molécula, dichas propiedades se deben al número de átomos que conforman la misma, las estructuras químicas, el tipo de enlace que los mantiene unidos.

Con el programa *ChemDraw*, se puede obtener las propiedades químicas básicas de los compuestos químicos, dichas propiedades son peso molecular, análisis elemental y la fórmula química que son diferentes para cada compuesto, dicha diferencia mismo va permitir reacciones diversas por la composición de los componentes de la molécula.

Figura 6

Pasos para obtener las propiedades básicas en ChemDraw

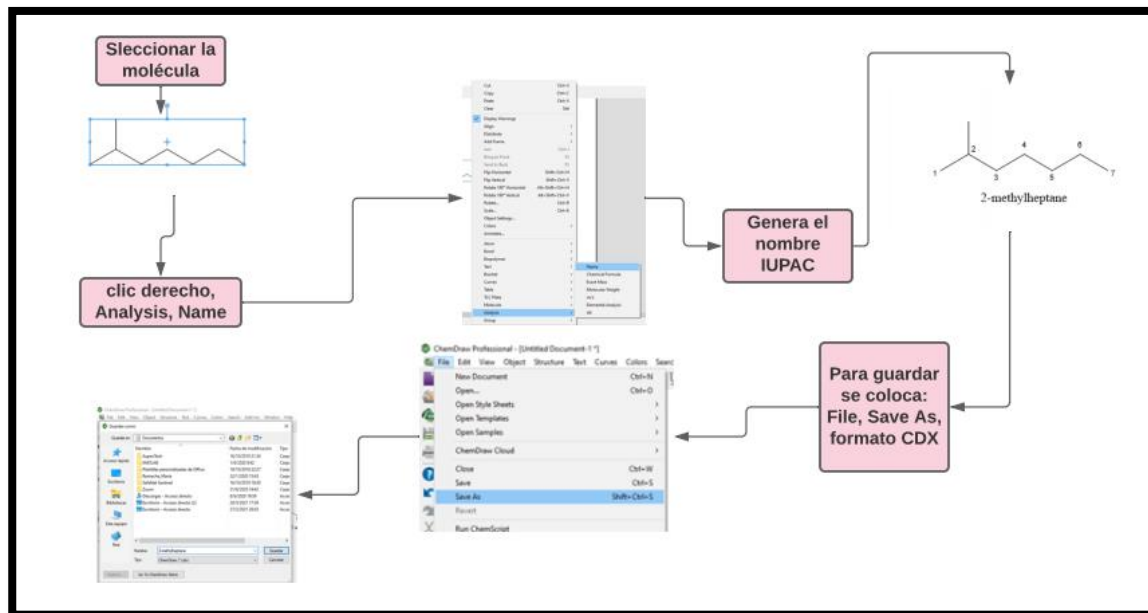


3.3.3 Generación automática de nomenclatura IUPAC

Las moléculas orgánicas pueden ser nombradas usando diferentes nomenclaturas como por ejemplo la nomenclatura IUPAC, para generar dicha nomenclatura de manera automática se usa el programa *ChemDraw*, una vez con el nombre en nomenclatura IUPAC se procede a guardar el archivo en formato MolFiles, y CDX , esto se realiza de forma individual para cada compuesto perteneciente a las moléculas de la corrientes de entrada y de salida.

Figura 7

Pasos para obtener la nomenclatura IUPAC



3.3.4 Generación automática del código SMILES

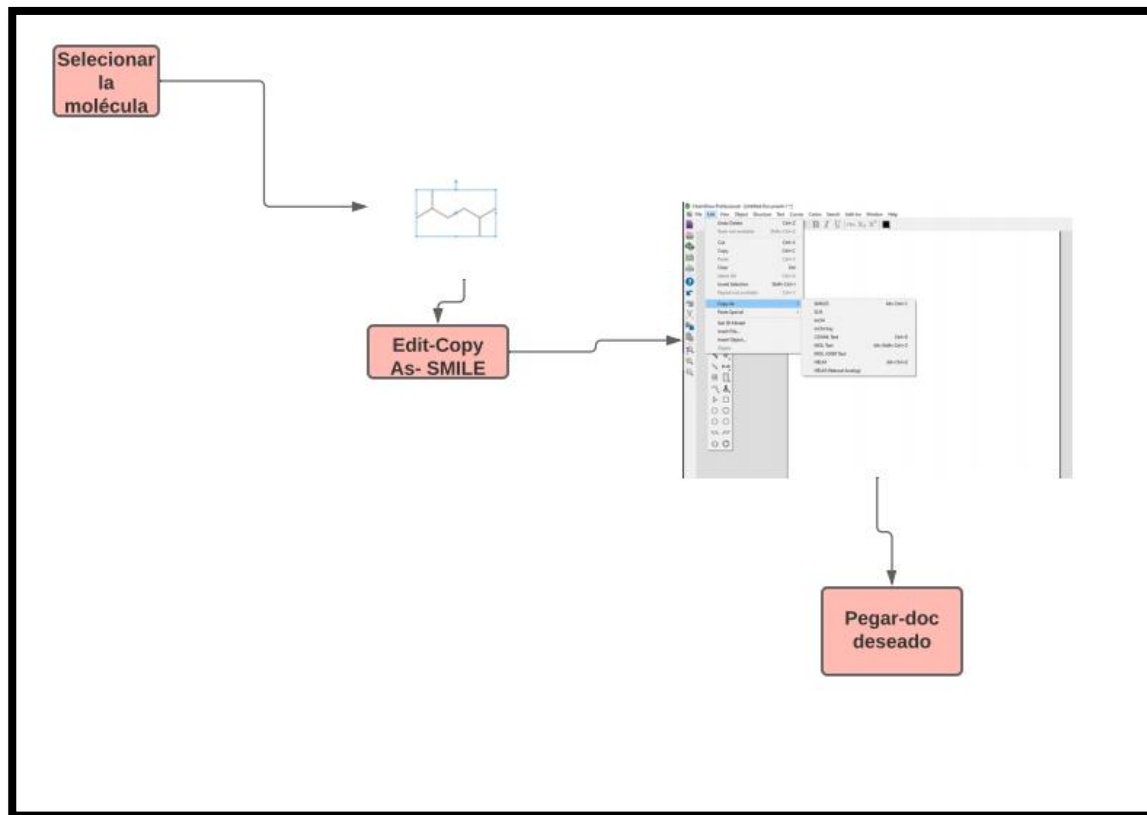
Código SMILES denominado así por sus siglas en inglés *Simplified Molecular Input Line Entry Specification*, es una notación que se utiliza para representar linealmente una estructura química usando caracteres alfanuméricos. ("Tutorial de SONRISAS | Investigación | EPA de EE. UU.," n.d.)

Sistema molecular de entrada lineal simplificado es una representación lineal de las moléculas, toma en cuenta las cargas es decir los aniones y cationes se pueden distinguir, además solo permite los enlaces posibles que acepta cada átomo. Para obtener el código SMILES se utiliza el programa graficador químico "ChemDraw 18.2".

Para obtener el código SMILES se procede de la siguiente manera:

Figura 8

Pasos para obtener el código SMILES



3.3.5 Obtención, organización y reporte de resultados

La investigación bibliográfica aporta una variedad de resultados, que para una mejor comprensión se reporta los datos en una tabla en la que se coloca el nombre del compuesto, fórmula, y el porcentaje en peso o volumen de los compuestos, dicha tabla se realiza tanto para las corrientes de salida como para las de entrada a la unidad FCC.

3.4. Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas

La herramienta que permite obtener estas propiedades es la plataforma

3.4.1 Estudio de la interfaz de la plataforma SwissADME

La herramienta “SwissADME” es de libre acceso y tiene un análisis sencillo de los resultados, dispone de diversos métodos de entrada, realiza cálculos para una infinidad de moléculas, tiene posibilidad de mostrar, guardar y compartir resultados de forma individual o usando gráficos globales intuitivos e interactivos. Finalmente, *SwissADME*

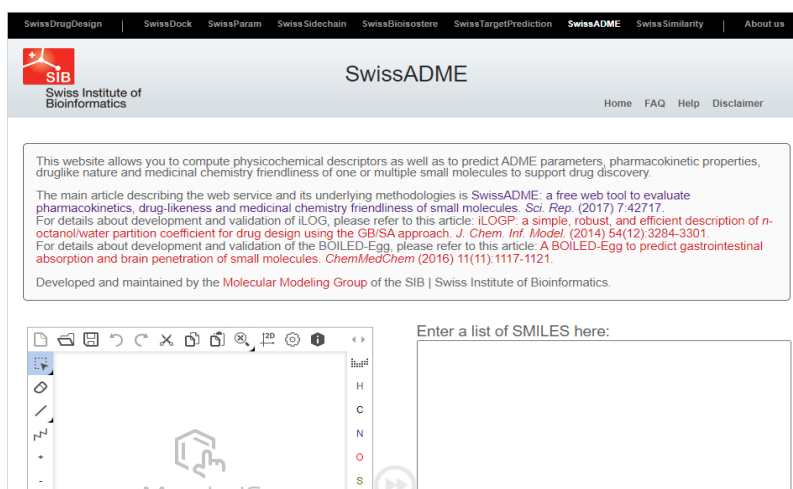
está integrado en el espacio de trabajo de SwissDrugDesign, con un solo clic permite el acceso a varias herramientas desarrolladas por Grupo de Modelado Molecular del Instituto Suizo de Bioinformática SIB.(Daina, Michielin, & Zoete, 2017).

Al acceder al navegador web, se muestra directamente la página de SwissADME donde se debe ingresar la lista de sonrisas de las moléculas, para estimar las propiedades fisicoquímicas, dicha lista debe contener una molécula por línea definida como una sonrisa y un nombre separado por un espacio, si se omite el nombre SwissADME, proporcionará automáticamente un nombre para su identificación.(Daina et al., 2017).

Es importante mencionar que los botones para transferir la lista de sonrisas y para ejecutar los cálculos correspondientes, son dinámicos es decir se activan solo cuando la acción es posible.(Daina et al., 2017).

Figura 9

Presentación de la plataforma SwissADME



The screenshot shows the SwissADME web interface. At the top, there is a navigation bar with links for various tools: SwissDrugDesign, SwissDock, SwissParam, SwissSidechain, SwissBioisostere, SwissTargetPrediction, SwissADME, SwissSimilarity, and About us. The main header area contains the SwissADME logo and the text "SwissADME" and "Swiss Institute of Bioinformatics". Below this, there is a paragraph of text describing the tool's purpose: "This website allows you to compute physicochemical descriptors as well as to predict ADME parameters, pharmacokinetic properties, druglike nature and medicinal chemistry friendliness of one or multiple small molecules to support drug discovery." It also includes references to scientific articles. At the bottom of the page, there is a text input field labeled "Enter a list of SMILES here:" and a chemical structure editor on the left side.

Nota. Recuperado de <http://www.swissadme.ch>

3.5. Cálculo y obtención de estructuras 3D

Los átomos que forman las moléculas determinan las propiedades de las mismas, sin embargo, la composición química no es el único factor que determina sus cualidades, la distribución de dicha molécula en el espacio marca una gran diferencia, cabe recalcar que dos moléculas que estén formados por los mismos átomos y enlaces pueden tener propiedades totalmente distintas, para observar de mejor manera esta diferencia se deben obtener estructuras tridimensionales.

La condición en la que dos moléculas constituidas por los mismos átomos y enlace, pero los átomos no tienen la misma posición espacial, se conoce como estereoisómeros. Por ejemplo, si la molécula espacial tiene la forma de una persona se tendría distinto estereoisómeros según si la persona tiene levantado un brazo, levantado los dos brazos. (“La importancia de la estructura tridimensional de las moléculas,” n.d.)

En la actualidad existen diversas aplicaciones informáticas que permiten desarrollar estructuras moleculares en 3D, que permiten destacar ciertas características de la molécula en función de la necesidad del usuario.

Aplicaciones informáticas denominadas “Avogadro”, y “*Chemcraft*”.

3.5.1 Avogadro

Es un constructor y visualizador de moléculas en 3D, en la interfaz del mismo es posible disminuir tamaño, mover, girar, todo con ayuda del mouse, tiene ciertas características entre las que destacan, acceso libre y es muy fácil de instalar esta disponibles para varios sistemas en Windows, dispone de un gran conjunto de herramientas, admite varios formatos, permite ver propiedades espectrales, herramientas para colorear, se encuentra en idiomas como el español e inglés. (Torres Quezada, Varela Gangas, Frías, & Flores-Morales, 2017).

3.5.2. Chemcraft

Es un programa gráfico que puede realizar cálculos de química cuántica para representar moléculas en 3D, que muestran coordenadas atómicas de entrada, el programa ofrece la facilidad de cambiar todos los elementos como la distancia y el ángulo. (“Chemcraft: programa gráfico para la visualización de cálculos de química cuántica,” n.d.-a).

El programa permite representación de imágenes en 3D, de las moléculas mediante coordenadas atómicas, representación de geometrías individuales de archivo (estructura optimizada, geometría en cada paso de optimización), animación de modos vibracionales, visualización de orbitales moleculares en forma de isosuperficies o planos coloreados. (“Chemcraft: programa gráfico para la visualización de cálculos de química cuántica,” n.d.-b).

3.5.1 Elaboración de archivos con coordenadas 3D sin optimizar

Los archivos obtenidos en el graficador químico ChemDraw, que se guardó en formato “. MOL”, se va utilizar para graficar las estructuras moleculares en 3D, esta es una ordenación o representación de la molécula tridimensionalmente, que muestran adecuadamente dicha estructura en el espacio.

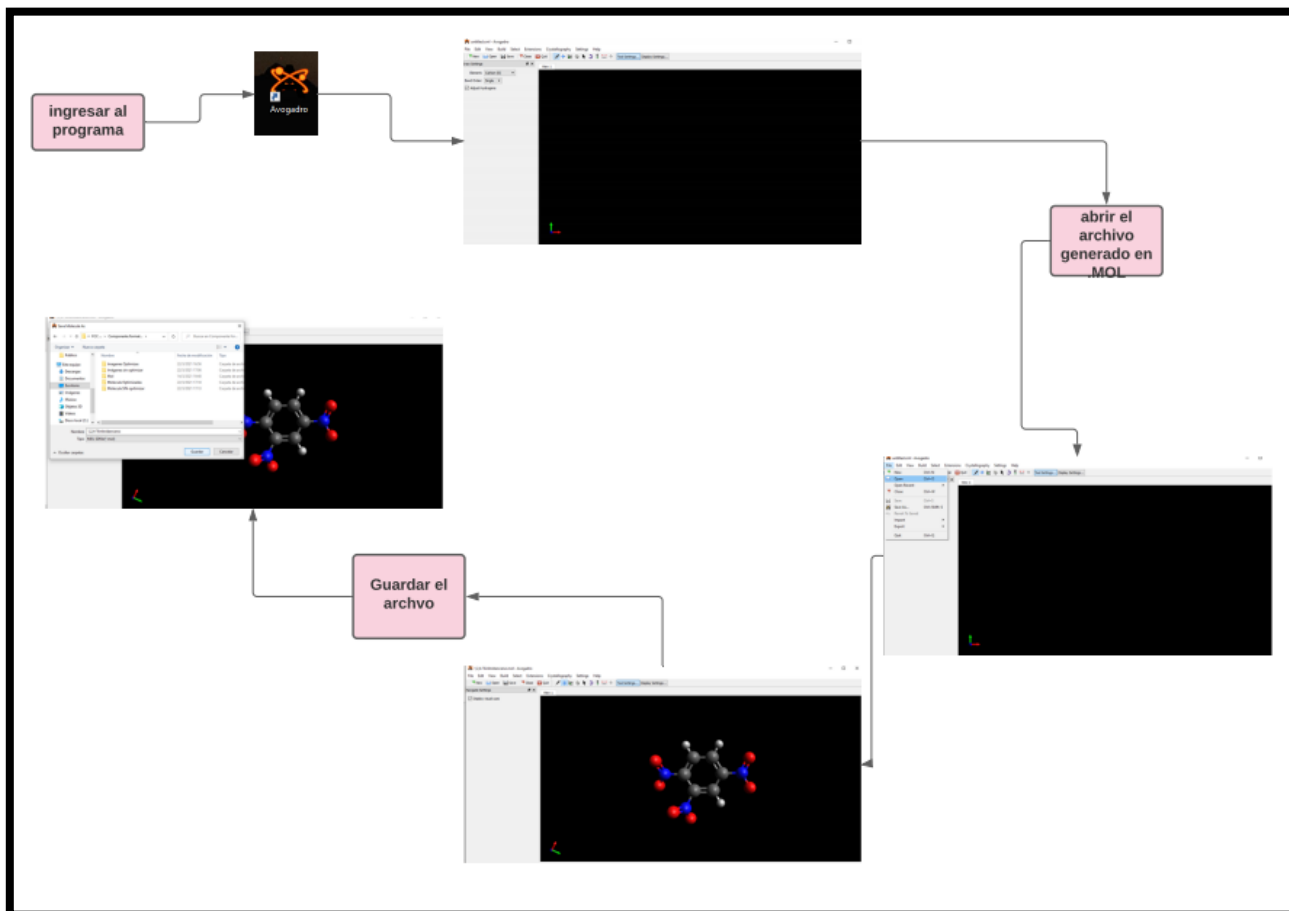
Para obtener estas moléculas en 3D se utilizó dos softwares el primero denominado Avogadro y con los datos obtenidos de este programa se utilizó *Chemcraft*.

3.5.2 Elaboración de archivos con coordenadas 3D sin optimizar

Para obtener las moléculas en 3D desde el programa Avogadro se abre las moléculas guardadas en formato. MOL generadas en el *ChemDraw*, para lo cual se realiza lo siguiente:

Figura 11

Pasos para realizar la representación en 3D.



Nota. Recuperado de Avogadro

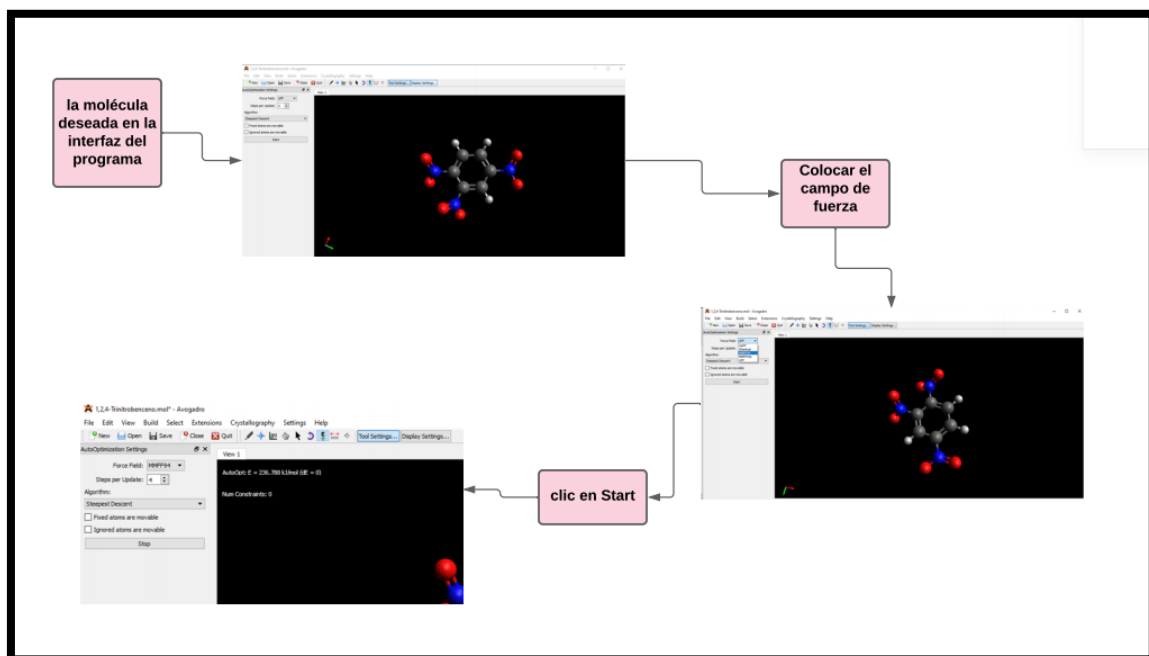
3.5.3 Elaboración de archivos con coordenadas 3D optimizadas

Para realizar las estructuras moleculares en 3D, se emplea un parámetro establecido como campos de fuerza, el mismo que es un método computacional que permite determinar la cantidad de fuerza dentro de los átomos y entre los átomos también hace referencia que se puede determinar la cantidad de fuerza entre las moléculas. Así mismo el campo de fuerza es utilizado para disminuir la cantidad de estiramiento del enlace que mantiene unido a los átomos.

Para realizar este tipo de estructuras en 3D se emplea el programa denominado Avogadro.

Figura 12

Pasos para obtener la molécula optimizada.



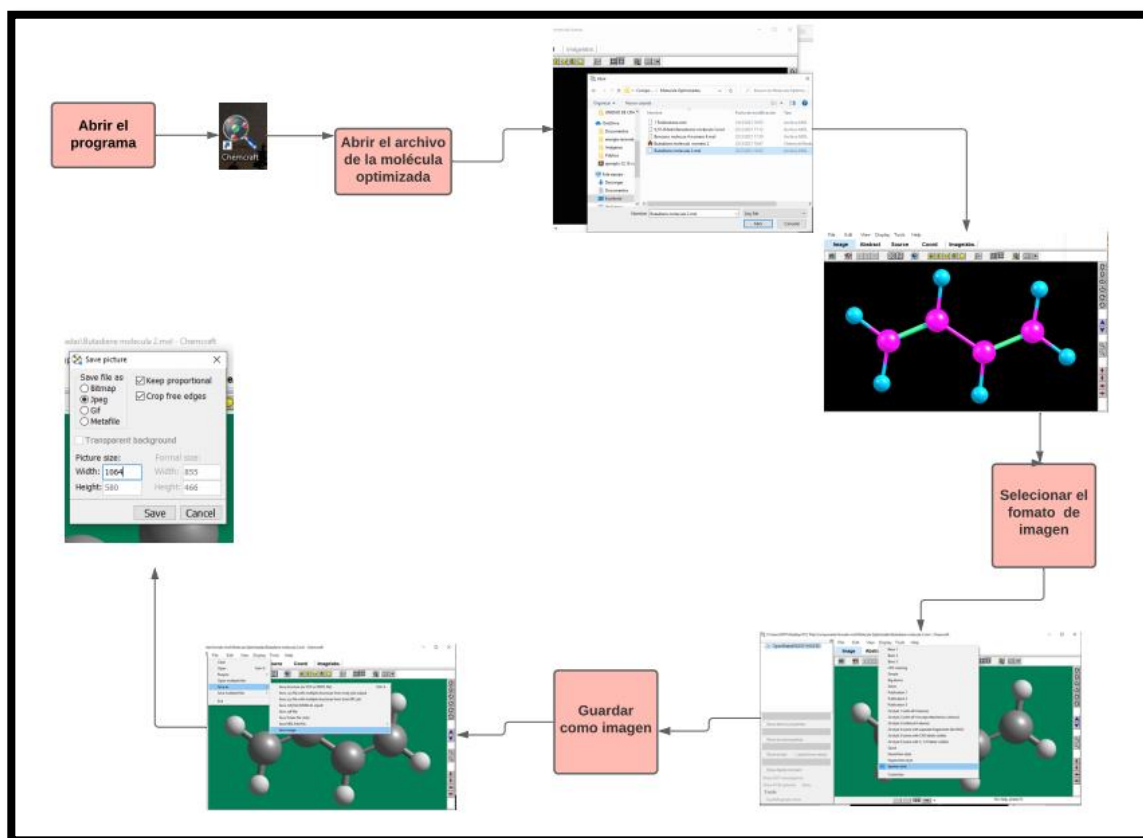
Nota. Recuperado de Avogadro

3.5.4 Elaboración de imágenes con coordenadas 3D optimizadas

El programa Avogadro permite obtener estructuras moleculares para cada una de las moléculas de las corrientes de entrada y salida en 3D, los archivos generados de forma automática en formato (*.mol), son utilizados por el programa *Chemcraft*, con el objetivo de obtener estructuras moleculares en 3D optimizadas, en formato (*.jpg), para realizar un análisis posterior de cada una de las moléculas que pertenecen a las corrientes de entrada y salida de la unidad de craqueo catalítico.

Figura 13

Pasos para obtener la imagen optimizada en 3D



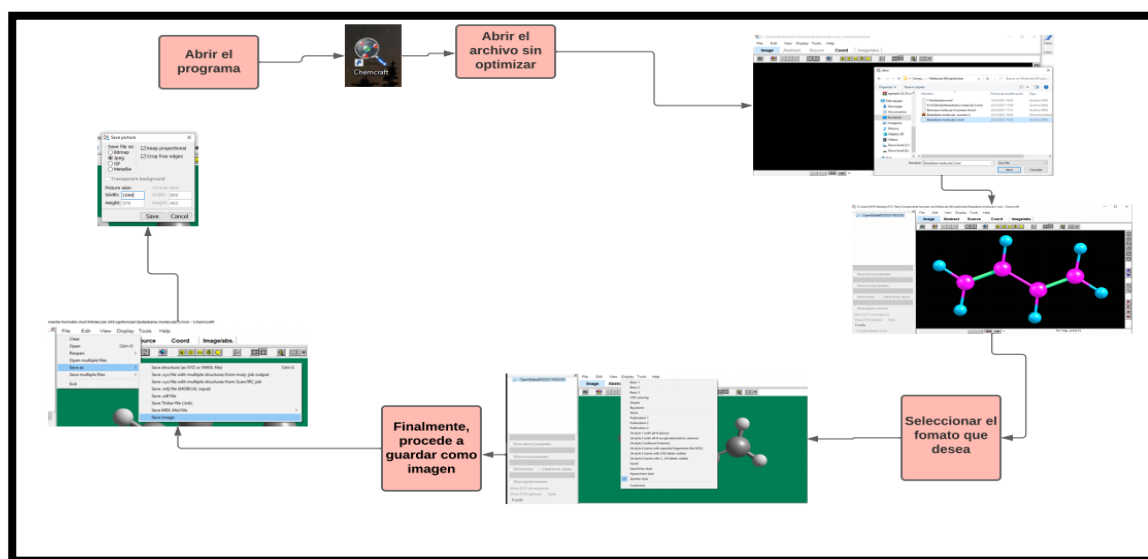
Nota. Recuperado de Chemcraft.

3.5.5 Elaboración de imágenes con coordenadas 3D sin optimizar

Las moléculas de las corrientes de entrada y salida se obtuvieron en formato *.mol, sin optimizar de manera automática en el programa Avogadro, este archivo generado se emplea para obtener la gráfica de las estructuras moleculares en 3D, para esto se empleó el programa Chemcraft, en el cual se puede visualizar las moléculas sin optimizar en 3D.

Figura 13

Pasos para obtener la imagen en 3D sin optimizar

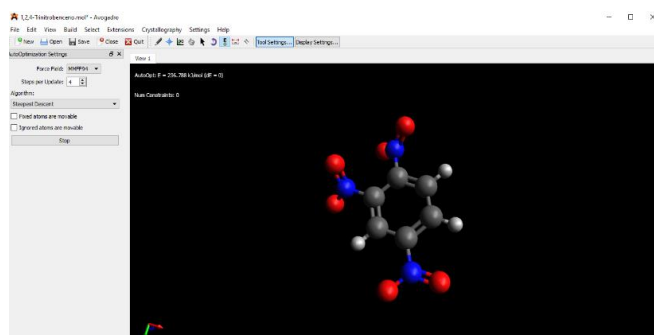


3.5.6 Reporte la energía de optimización

Para reportar la energía de optimización se dirige a la parte superior izquierda donde se registra el valor de la energía de optimización cuando $d(E)=0$.

Figura 14

Reporte de la energía de optimización.



Nota. Recuperado de Avogadro.

CAPÍTULO IV

ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE LOS RESULTADO

4.1. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de craqueo catalítico.

La mezcla de gasóleo liviano y pesado es lo que se conoce como Gasóleo de Vacío (VGO), el cual se obtiene de la torre de destilación de vacío, parte fundamental del bloque de separación del crudo. El VGO se utiliza como carga a las plantas catalíticas (FCC), permitiendo romper ciertas moléculas, obteniéndose gasolina con un alto octanaje (Arquitectura et al., 2015).

Tabla 3

Materia prima unidad FCC Aceite de gas al vacío

Nombre	Fórmula	% en peso
Residuo	C	0,2
Sulfuro	S ⁻¹	0,4
Nitrógeno	N	0,064
Nickel	Ni	0,26
Vanadio	V	0,15

Tabla 4

Materia prima unidad FCC Residuo Atmosférico

Nombre	Fórmula	% en peso
Residuo	C	4,2
Sulfuro	S ⁻¹	0,11
Nitrógeno	N	0,9
Nickel	Ni	1,7
Vanadio	V	0,5

Tabla 5

Parafinas, alimentación: VGO-B / Catalizador: E-Cat D / Temperatura: 500 °C.

Nombre	Fórmula	% peso
Metano	CH ₄	0,31
Etano	C ₂ H ₆	0,50
Propano	C ₃ H ₈	2,46
Butano	C ₄ H ₁₀	1,67
Pentano	C ₅ H ₁₂	0,54
Hexano	C ₆ H ₁₄	0,32
Heptano	C ₇ H ₁₆	0,25
Octano	C ₈ H ₁₈	0,18
Nonano	C ₉ H ₂₀	0,06
Decano	C ₁₀ H ₂₂	0,05
Undecano	C ₁₁ H ₂₄	0,24
Dodecano	C ₁₂ H ₂₆	0,23

Tabla 6

Parafinas, alimentación: VGO-B / Catalizador: E-Cat D / Temperatura: 500 °

Nombre	Fórmula	% peso
i-Butano	C ₄ H ₁₀	6,90
i-Pentano	C ₅ H ₁₂	7,19
i-Hexano	C ₆ H ₁₄	4,93
i-Heptano	C ₇ H ₁₆	2,39
i-Octano	C ₈ H ₁₈	1,38
i-Nonano	C ₉ H ₂₀	0,54
i-Decano	C ₁₀ H ₂₂	0,09

Tabla 7

Olefinas, alimentación: VGO-B / Catalizador: E-Cat D / Temperatura: 500 °C.

Nombre	Fórmula	% peso
eteno	C ₂ H ₄	0,84
Propano	C ₃ H ₆	2,46
Butano	C ₄ H ₈	2,37
Pentano	C ₅ H ₁₀	1,28
Hexano	C ₆ H ₁₂	0,89
Heptano	C ₇ H ₁₄	0,28
Octano	C ₈ H ₁₆	0,16
Nonano	C ₉ H ₁₈	0,14
Decano	C ₁₀ H ₂₀	0,16

Tabla 8

Olefinas, alimentación: VGO-B / Catalizador: E-Cat D / Temperatura: 500 °C.

Nombre	Fórmula	% peso
Etano	C ₂ H ₄	0,84
Propano	C ₃ H ₆	2,46
Butano	C ₄ H ₈	2,37
Pentano	C ₅ H ₁₀	1,28
Hexano	C ₆ H ₁₂	0,89
Heptano	C ₇ H ₁₄	0,28
Octano	C ₈ H ₁₆	0,16
Nonano	C ₉ H ₁₈	0,14
decano	C ₁₀ H ₂₀	0,16

Tabla 9

Aromáticos, alimentación: VGO-B / Catalizador: E-Cat D / Temperatura: 500 °C.

Nombre	Fórmula	% peso
Benceno	C_6H_6	0,23
Tolueno	C_7H_8	2,53
Aromáticos	C_8H_8	5,72
C8(estireno)	C_8H_8	3,72

Tabla 10

Alimentaciones del FCC (LCO, VGO).

Nombre	Fórmula	% peso
Benceno	C_6H_6	0,99
Decalina	$C_{10}H_{18}$	0,99
Tetralina	$C_{10}H_{12}$	0,99
Naftaleno	$C_{10}H_8$	0,99
1 Feniloctano	$C_{14}H_{22}$	0,98
Bifenil	$C_{12}H_{10}$	0,99
Fluoreno	$C_{13}H_{10}$	0,98
9,10, Dihidrofenantreno	$C_{14}H_{10}$	0,99
Fenantreno	$C_{14}H_{10}$	0,98
Pireno	$C_{20}H_{12}$	0,99
Benzo(a)antraceno	$C_{18}H_{12}$	0,98

4.1.1 Búsqueda de datos internacionales

Tabla 11

Alimentación a la unidad de FCC, VGO.

Nombre	Fórmula	% peso
Hidrógeno	H ₂	0,3
Metano	CH ₄	5,8
Etileno	C ₂ H ₄	17,8
Etano	C ₂ H ₆	2,3
Butadieno	C ₄ H ₆	4,2
i-butadieno	C ₄ H ₆	1,8
xileno	C ₆ H ₄ (CH ₃) ₂	0,6
Propileno	C ₃ H ₆	30,4

Tabla 12

Parafinas alimentación a la unidad FCC Parafinas desde el carbono 20-27

Nombre	Fórmula	%peso
n-icosano	C ₂₀ H ₄₂	0,05
n-henicosano	C ₂₁ H ₄₄	0,02
n-docosano	C ₂₂ H ₄₆	0,03
n-tricosano	C ₂₃ H ₄₈	0,05
n-tetracosano	C ₂₄ H ₅₀	0,03
n-pentacosano	C ₂₅ H ₅₂	0,06
n-hexacosano	C ₂₆ H ₅₄	0,08
n-heptacosano	C ₂₇ H ₅₆	0,3
n-octacosano	C ₂₈ H ₆₀	0,08
n-nonacosano	C ₂₉ H ₆₀	0,03

Nombre	Fórmula	% peso
n-triacontano	$C_{30}H_{612}$	0,02
n-hentriacontano	$C_{31}H_{64}$	0,01
n-dotriacontano	$C_{32}H_{66}$	0,08
n-tritriacontano	$C_{33}H_{68}$	0,003
n-tetratriacontano	$C_{34}H_{70}$	0,2
n-pentatriacontano	$C_{35}H_{72}$	0,03
n-hexatriacontano	$C_{36}H_{74}$	0,08
n-heptatriacontano	$C_{37}H_{76}$	0,02
n-icosano	$C_{38}H_{78}$	0,09
n-henicosano	$C_{39}H_{80}$	0,06
n-docosano	$C_{40}H_{82}$	0,02

Tabla 13

Naftenos compuestos de alimentación a la unidad FCC

Nombre	Fórmula	% peso
Ciclopentano	C_5H_{10}	4,3
Ciclohexano	C_6H_{12}	0,8
1,1,2-trimetilciclopentano	C_8H_{16}	7,8
Fenantreno	$C_{14}H_{12}$	0,3
Ciclopentil metil éter	$C_6H_{12}O$	5,2
Ciclohexano	C_6H_{12}	0,8
Metilciclohexano	C_7H_{14}	0,36

Tabla 14*Aromáticos compuestos de entrada a la unidad FCC.*

Nombre	Fórmula	% peso
Bromo benceno	C_6H_5Br	4,3
Fluoro benceno	C_6H_5F	0,8
Metilbenceno	C_7H_8	7,8
Nitrobenceno	C_6H_5N	0,3
Hidroxi benceno	C_6H_6O	5,2
Vinil benceno	C_8H_8	0,36
Ter-butil benceno	$C_{10}H_{14}$	2,3
1,2-Diclorobenceno	$C_6H_4Cl_2$	5,7
1-Bromo-3-Nitrobenceno	$C_6H_4BrNO_2$	2,3
1-Etil-4-Isopropilbenceno	$C_{11}H_{16}$	7,1
1-Etil-2-metilbencen	C_9H_{12}	0,03
1-Etil-3-metilbenceno	C_9H_{12}	0,04
1,4-Dimetilbenceno	C_8H_{10}	0,07
1-Bromo-2,3-Dimetilbenceno	C_8H_9Br	0,08
1,2,4-Trinitrobenceno	$C_6H_3N_3O_6$	3,7

4.1.2 Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano

Tabla 15*Materia prima unidad FCC Aceite de gas al vacío*

Nombre	Fórmula	% en peso
Residuo	C	0,2
Sulfuro	S ⁻¹	0,4
Nitrógeno	N	0,064
Nickel	Ni	0,26
Vanadio	V	0,15

Tabla 16*Alimentaciones del FCC (LCO, VGO).*

Nombre	Fórmula	% peso
Benceno	C ₆ H ₆	0,99
Decalina	C ₁₀ H ₁₈	0,99
Tetralina	C ₁₀ H ₁₂	0,99
Naftaleno	C ₁₀ H ₈	0,99
1 Feniloctamo	C ₁₄ H ₂₂	0,98
Bifenil	C ₁₂ H ₁₀	0,99
Fluoreno	C ₁₃ H ₁₀	0,98
9,10,Dihidrofenantreno	C ₁₄ H ₁₀	0,99
Fenantreno	C ₁₄ H ₁₀	0,98
Pireno	C ₂₀ H ₁₂	0,99
Benzo(a)antraceno	C ₁₈ H ₁₂	0,98

Tabla 17*Naftenos compuestos de alimentación a la unidad FCC.*

Nombre	Fórmula	% peso
Ciclopentano	C_5H_{10}	4,3
Ciclohexano	C_6H_{12}	0,8
1,1,2-trimetilciclopentano	C_8H_{16}	7,8
Fenantreno	$C_{14}H_{12}$	0,3
Ciclopentil metil éter	$C_6H_{12}O$	5,2
Ciclohexano	C_6H_{12}	0,8
Metilciclohexano	C_7H_{14}	0,36

4.2. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de craqueo catalítico.

Tabla 18*Productos de salida de la unidad FCC.*

Nombre	Fórmula	% volumen
Gas residual	CH_4, C_2H_8, C_2H_4	2
Propano	C_3H_8, C_3H_6	15
Butano	C_4H_{10}, C_4H_8	21
GO pesado	insaturado	5
Coque	insaturado	6
Pentano	C_5H_{12}	42

Tabla 19

Distribución de productos (% p) en la conversión de decalina sobre catalizadores preparados en planta piloto (conversión 16 %). Cat/Oil: 2,23. Temperatura 450 °C.

Nombre	Fórmula	% peso
Metano	CH_4	0,03
Etano	C_2H_6	0,03
Propano	C_3H_8	0,24
Butane	C_4H_8	0,12
Butano	C_4H_{10}	0,75
Pentane	C_5H_{10}	0,02
Pentano	C_5H_{12}	0,02
Hexane	C_6H_{12}	0,20
Hexano	C_6H_{14}	0,25
Ciclo hexano	C_6H_{12}	0,18
Benceno	C_6H_{12}	0,04

Tabla 20

Composiciones (wt %) GLP craqueado de la unidad de FCC.

Nombre	Fórmula	% peso
Propano	C_3H_8	0,06
Isobutano	C_4H_{10}	45,53
<i>n</i> -Butano	C_4H_{10}	11,36
Isopentano	C_5H_{12}	1,52
<i>n</i> -Pentano	C_5H_{12}	0,03
Buteno	C_4H_8	40,51
Penteno	C_5H_{10}	0,76
1,3- Butadieno	C_4H_6	0,23

4.2.1 Búsqueda de datos internacionales

Tabla 21

Composiciones (wt %) GLP craqueado de la unidad de FCC.

Nombre	Fórmula	% peso
Propano	C_3H_8	0,06
Isobutano	C_4H_{10}	45,53
<i>n</i> -Butano	C_4H_{10}	11,36
Isopentano	C_5H_{12}	1,52
<i>n</i> -Pentano	C_5H_{12}	0,03
Buteno	C_4H_8	40,51
Penteno	C_5H_{10}	0,76
1,3- Butadieno	C_4H_6	0,23

Tabla 22

Distribución de productos (% p) en la conversión de decalina sobre catalizadores preparados en planta piloto (conversión 16 %). Cat/Oil: 2,23. Temperatura 450 °C.

Nombre	Fórmula	% peso
Metano	CH_4	0,03
Etano	C_2H_6	0,03
Propano	C_3H_8	0,24
Butene	C_4H_8	0,12
Butano	C_4H_{10}	0,75
Pentene	C_5H_{10}	0,02
Pentano	C_5H_{12}	0,02
Hexene	C_6H_{12}	0,20
Hexano	C_6H_{14}	0,25
Ciclo hexano	C_6H_{12}	0,18
Benceno	C_6H_{12}	0,04

4.2.2 Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano

Tabla 23*Productos de salida de la unidad FCC de la Refinería Esmeraldas.*

Nombre	Fórmula	% volumen
Gas residual	CH_4, C_2H_8, C_2H_4	2
Propano	C_3H_8, C_3H_6	15
Butano	C_4H_{10}, C_4H_8	21
GO pesado	insaturado	5
Coque	insaturado	6
Pentano	C_5H_{12}	42

Tabla 24*Productos de salida de la unidad FCC*

Nombre	Fórmula	% peso
Metano	CH_4	0,03
Etano	C_2H_6	0,03
Propano	C_3H_8	0,24
Butene	C_4H_8	0,12
Butano	C_4H_{10}	0,75
Pentene	C_5H_{10}	0,02
Pentano	C_5H_{12}	0,02
Hexene	C_6H_{12}	0,20
Hexano	C_6H_{14}	0,25
Ciclo hexano	C_6H_{12}	0,18
Benceno	C_6H_{12}	0,04

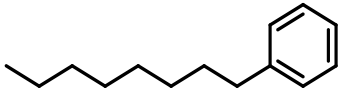
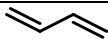
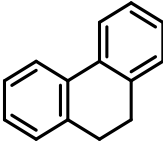

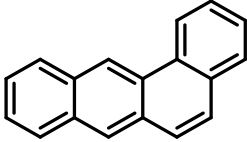
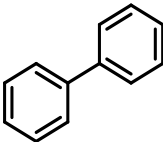



4.3. Procesamiento y obtención de estructuras químicas 1D, 2D y propiedades químicas básicas

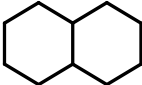

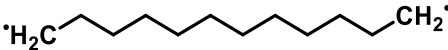
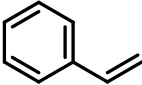


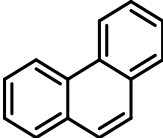
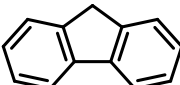




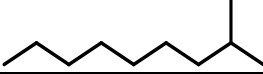
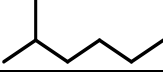
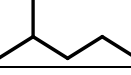
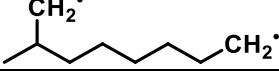
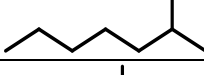


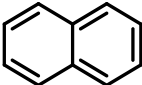
Para la generación de estructuras 2D se emplea el graficador químico ChemDraw en el cual se puede crear y representar estructuras químicas que permitirán conocer e identificar a las diversas estructuras de las corrientes de entrada y de salida de la unidad de craqueo catalítico.

4.3.1 Generación de estructuras químicas en 2D


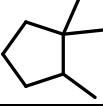
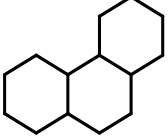
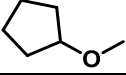
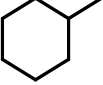
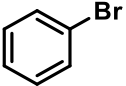
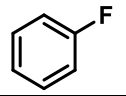
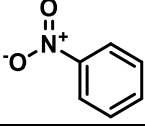
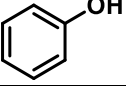
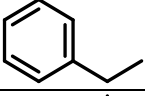
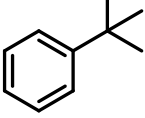
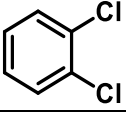
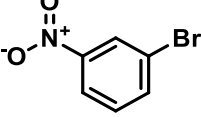
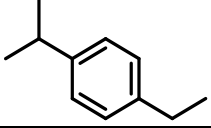
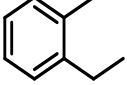
Tabla 25

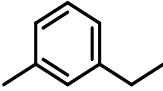
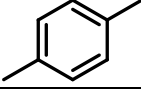
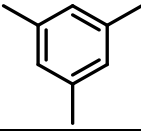
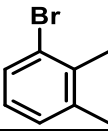
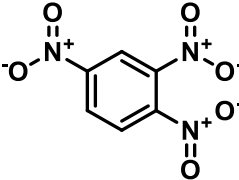
Estructuras químicas en 2D

Nombre IUPAC	Estructura 2D
octilbenceno	
buta-1,3-diene	
9,10-dihidrofenantreno	
Benceno	
tetrafeno	
1,1-bifenilo	
Butano	
But-1-ene	
Carbón	C
ciclohexano	

Nombre IUPAC	Estructura 2D
Decahidronaftaleno	
Decano	
Dodecano	
estireno	
Etano	
eteno	
Fenantreno	
9H-fluoreno	
Heptano	
Hexano	
Hex-1-ene	
Hidrógeno	H-H
i-Butano	
2-metilnonano	
2-metilhexano	
2-metilpentano	
i-Nonano	
2-metilheptano	
i-Pentano	
isopreno	
metano	CH ₄
Naftalina	
Níquel	Ni

Nombre IUPAC	Estructura 2D
Nitrógeno	N≡N
Nonano	*H ₂ C—(CH ₂) ₇ —CH ₂ *
Pentano	
Octano	
Pent-1-ene	
Pireno	
Propano	
Prop-1-eno	
Sulfuro	S ²⁻
1,2,3,4-tetrahidronaftaleno	
Tolueno	
Undecano	*H ₂ C—(CH ₂) ₉ —CH ₂ *
Vanadio	V
o-xileno	
icosano	
hencosano	
docosano	*H ₂ C—(CH ₂) ₁₀ —CH ₂ *
tricosano	
tetracosano	
pentacosano	
hexacosano	
heptacosano	
octacosano	
nonacosano	
triacontano	
hentriacontano	
dotriacontano	
tritriacontano	
tetratriacontano	
pentatriacontano	
hexatriacontano	
heptatriacontano	

Nombre IUPAC	Estructura 2D
Ciclopentano	
1,1,2-trimetilciclopentano	
tetradecahidrofenantr eno	
Metoxi ciclopentano	
Metilciclohexano	
Bromobenceno	
Fluorobenceno	
Nitrobenceno	
fenol	
Etilbencina	
Terc-butilbenceno	
1,2-diclorobenceno	
1-bromo-3-nitrobenceno	
1-etil-4-isopropilbenceno	
1-etil-2-metilbenceno	

Nombre IUPAC	Estructura 2D
1-etil-3-metilbenceno	
p-xileno	
mesitileno	
1-bromo-2,3-dimetilbenceno	
1,2,4-trinitrobenceno	

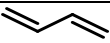
Nota. Obtenido de ChemDraw Professional

4.3.2 Procesamiento de propiedades básicas

Las propiedades químicas básicas se obtuvieron empleando el graficador químico denominado "ChemDraw". Este programa permite realizar el reporte de fórmula química, el peso molecular, el análisis elemental y el nombre IUPAC de cada una de las moléculas que corresponden a las corrientes tanto de entrada como de salida de la unidad de craqueo catalítico FCC.

Tabla 26

Propiedades Químicas Básica del buta-1,3-diene.

	
Fórmula química	C ₄ H ₆
Peso Molecular	54,0920
Análisis Elemental	C, 88.82; H, 11.18
Nombre Común	1,3-Butadiene
Nombre IUPAC	buta-1,3-diene

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades Químicas Básica del buta-1,3-diene.

En la tabla 26, se reporta las propiedades químicas básicas, para el buta-1,3-diene, que en su fórmula química especifica que está constituida por 4 átomos de carbono y 6 átomos de hidrogeno, y en su estructura molecular se puede ver que tiene 2 dobles enlaces, por lo tanto, pertenece a los alquenos cuya fórmula general es C_nH_{2n}.

El peso molecular está definido de la siguiente manera:

$$C=12.0107 \text{ uma} * 4 \text{ átomos de C}=48,0428$$

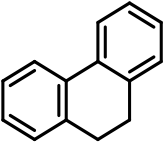
$$H=1.00784 \text{ uma} * 6 \text{ átomos de H}=6,04704$$

Por lo tanto, el peso molecular es 54,08984 unidades de masa atómica que es similar al obtenido por el programa. El análisis elemental es cualitativo (determina qué elementos están presentes) y cuantitativo (determina qué cantidad de cada uno está

presente), es así que tenemos que esta molécula está compuesta por un 88,82 por ciento de carbono y 11,18 por ciento de hidrógeno.

Tabla 27

Propiedades Químicas Básicas del 9,10-dihidrofenantreno.

	
Fórmula química	C ₁₄ H ₁₂
Masa Molecular	180,2500
Análisis Elemental	C, 93.29; H, 6.71
Nombre Común	9,10-dihidrofenantreno
Nombre IUPAC	9,10-dihidrofenantreno

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades Químicas Básica del 9,10-dihidrofenantreno.

Como se puede observar en la tabla 27, se reportan las propiedades de la molécula 9,10-dihidrofenantreno que es un hidrocarburo policíclico aromático cuyas fuentes pueden ser los incendios forestales y la actividad volcánica que como se observa en la tabla está formado por 14 átomos de carbono y 12 átomos, cuyo peso molecular se puede calcular de la siguiente manera:

$$C=12.0107 \text{ uma} * 14 \text{ átomos de C} = 168,1498$$


$$H=1.00784 \text{ uma} * 12 \text{ átomos de H} = 12,09408$$

Se obtiene un valor de 180,24388 unidades de masa atómica, que como se puede ver hay una ligera variación que se atribuye a las consideraciones de los pesos moleculares de los átomos empleados en el cálculo.

El análisis elemental determina que está compuesto por 93,29 por ciento de carbono y 6,71 por ciento de hidrógeno.

Tabla 28

Propiedades químicas básicas del Benceno.

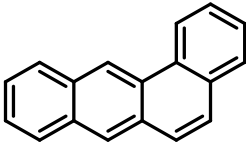
	
Fórmula química	C ₆ H ₆
Peso Molecular	78,1140
Análisis Elemental	C, 92.26; H, 7.74
Nombre Común	Benceno
Nombre IUPAC	Benceno

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades químicas básicas del Benceno.

Como se puede observar en la tabla 28, se reporta que el benceno que es un hidrocarburo aromático que en algunas industrias lo utilizan como materia prima para producir detergentes, plásticos, entre otros, cuya molécula está compuesta por 6 átomos de carbono y 6 átomos de hidrogeno y tiene un peso molecular de 78,1140 unidades de masa atómica, y su análisis elemental según la tabla 19 reporta que tiene 92,26 por ciento de carbono, y 7,74 por ciento de hidrogeno.

Tabla 29*Propiedades químicas básicas del tetrafeno*



Fórmula química	C ₁₈ H ₁₂
Peso Molecular	228,2940
Análisis Elemental	C, 94.70; H, 5.30
Nombre Común	Benzo(a)antraceno
Nombre IUPAC	tetrafeno

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

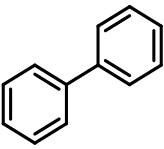
Propiedades químicas básicas del tetrafeno

El tetrafeno es un hidrocarburo policíclico aromático constituido por 4 núcleos aromáticos que se forman durante la combustión incompleta, que como se observa en la tabla 29, está formada por 18 átomos de carbono y 12 átomos de hidrógeno por lo tanto su fórmula molecular es C₁₈H₁₂ y tiene un peso molecular de 228,2940 unidades de masa atómica.

El análisis elemental que se muestra en la anterior establece que tiene 94,70 por ciento de carbono y 5,30 por ciento de hidrógeno.

Tabla 30

Propiedades químicas básicas del 1,1-bifenilo.

	
Fórmula química	C ₁₂ H ₁₀
Peso Molecular	154,2120
Análisis Elemental	C, 93.46; H, 6.54
Nombre Común	Bifenilo
Nombre IUPAC	1,1-bifenilo

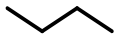
Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades químicas básicas del 1,1-bifenilo. El 1,1-bifenilo es un sólido que adquiere tonalidades que van desde cristalino hasta amarillo claro, es un hidrocarburo aromático en cuya fórmula molecular tiene 12 átomos de carbono y 10 átomos de hidrógeno con un peso molecular de 154,2120 unidades de masa atómica.

Es empleado como fluido dieléctrico y agente de transferencia de calor, también es intermediario en la producción de insecticidas y plásticos.

La fuente natural para el 1,1-bifenilo es el crudo y el gas natural es producido por medio de destilación a partir de estas materias primas, en la tabla 30, se observa que según el análisis elemental está formado por 93,46 por ciento de carbono y 6,54 por ciento de hidrogeno.

Tabla 31*Propiedades químicas básicas del butano*


	
Fórmula química	C ₄ H ₁₀
Peso Molecular	58,1240
Análisis Elemental	C, 82.66; H, 17.34
Nombre Común	Butano
Nombre IUPAC	Butano

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades químicas básicas del butano

Es un hidrocarburo saturado parafínico o alifático, es inflamable está en estado gaseoso que se obtiene por destilación, está formado por 4 átomos de carbono y 10 átomos de hidrogeno, por lo tanto su fórmula molecular es C₄H₁₀, que según la tabla 31, tiene un peso molecular de 58,1240 unidades de masa atómica y el análisis elemental indica que está constituido por 82,66 por ciento de carbono y 17,34 por ciento de hidrógeno.

Tabla 32*Propiedades químicas básicas del But-1-ene*

	
Fórmula química	C ₄ H ₈
Peso Molecular	56,1080
Análisis Elemental	C, 85.63; H, 14.37
Nombre Común	Buteno
Nombre IUPAC	But-1-ene

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades químicas básicas del But-1-ene.

Es un compuesto orgánico que pertenece a los alquenos cuya fórmula general es C_nH_{2n} , se encuentra en estado gaseoso es incoloro e inflamable es de fácil condensación, según la tabla 32, está formado por 4 átomos de carbono y 8 átomos de hidrogeno y tiene un peso molecular de 56,1080 unidades de masa atómica, y su análisis elemental indica que contiene 85,63 por ciento de carbono y 14,37 por ciento de hidrogeno.

Tabla 33

Propiedades químicas básicas del Carbón


	C
Fórmula química	C
Peso Molecular	12,0110
Análisis Elemental	C, 100.00
Nombre Común	Carbón
Nombre IUPAC	Carbón

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades químicas básicas del Carbón

El carbón es una roca de color negro rica en carbono, utilizada como combustible fósil que tiene un peso molecular de 12,0110 unidades de masa atómica y su análisis elemental en la tabla 33, indica que tiene 100 por ciento de carbono.

Tabla 34*Propiedades químicas básicas del ciclohexano.*

	
Fórmula química	C ₆ H ₁₂
Peso Molecular	84,1620
Análisis Elemental	C, 85.63; H, 14.37
Nombre Común	ciclohexano
Nombre IUPAC	ciclohexano

Nota. Obtenido de *ChemDraw* Professional

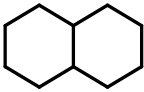
Propiedades químicas básicas del ciclohexano.

Es un ciclo alcano que como indica la tabla 34 está formado por 6 átomos de carbono y 12 átomos de hidrógeno y su fórmula estructural es C₆H₁₂, se emplea en la obtención de caprolactama, ácido adípico que son los precursores del nylon, su peso molecular es de 84,1620 unidades de masa atómica.

El análisis elemental determina según la tabla 25, que está formado por 85,63 por ciento de carbono y 14,37 por ciento de hidrógeno.

Tabla 35

Propiedades químicas básicas del Decahidronaftaleno.

	
Fórmula química	C ₁₀ H ₁₈
Peso Molecular	138,2540
Análisis Elemental	C, 86.88; H, 13.12
Nombre Común	Decalina
Nombre IUPAC	Decahidronaftaleno

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*


Propiedades químicas básicas del Decahidronaftaleno

Es un hidrocarburo bicíclico que está formado por 10 átomos de carbono y 18 átomos de hidrogeno y que su fórmula estructural según la tabla 35 es C₁₀H₁₈, tiene un peso molecular de 138,2540 unidades de masa atómica.

Es empleado como solvente orgánico y el análisis elemental según la tabla 26

Establece que tiene 86,88 por ciento de carbono y 13,12 por ciento de hidrógeno.

Tabla 36 *Propiedades químicas básica del decano*

	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₂
Masa Molecular	142,2860
Análisis Elemental	C, 84.41; H, 15.59
Nombre Común	Decano
Nombre IUPAC	Decano

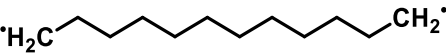
Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades químicas básicas del decano

El decano es un alcano que está compuesto por 10 átomos de carbono y 22 átomos de hidrógeno, es uno de los componentes de la gasolina, según la tabla 36 tiene un peso molecular de 142,2860 y su análisis elemental establece que tiene 84,41 por ciento de carbono y 15,59 por ciento de hidrógeno.

Tabla 37

Propiedades químicas básicas del Dodecano.

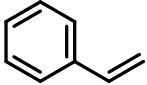
	
Fórmula química	$C_{12}H_{24}$
Peso Molecular	168,3240
Análisis Elemental	C, 85.63; H, 14.37
Nombre Común	Dodecano
Nombre IUPAC	Dodecano

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades químicas básicas del Dodecano

El dodecano es un hidrocarburo líquido que pertenece a los alcanos y que según la tabla 37 tiene 12 átomos de carbono y 24 átomos de hidrogeno y tiene dos radicales por lo tanto su fórmula química es $C_{12}H_{24}$ y tiene un peso molecular de 168,3240 unidades de masa atómica, se puede emplear como un disolvente en la destilación, su análisis elemental establece que tiene 85,63 por ciento de carbono y 14,37 por ciento de hidrógeno.

Tabla 38*Propiedades químicas básicas del Dodecano.*




Fórmula química	C ₈ H ₈
Peso Molecular	104,1520
Análisis Elemental	C, 92.26; H, 7.74
Nombre Común	vinil benceno
Nombre IUPAC	estireno

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades químicas básicas del estireno.

El estireno es un hidrocarburo aromático, incoloro de aroma dulce que tiene en su estructura un benceno con un sustituyente etileno, este compuesto molecular también tiene otro nombre como etilbenceno, vinil benceno, cinameno, que está formado por 8 átomos de carbono y 8 átomos de hidrógeno y tiene un peso molecular de 104,1520 unidades de masa atómica, según la tabla 38, su análisis elemental establece que tiene 92,26 por ciento de carbono y 7,74 por ciento de hidrógeno.

Tabla 39*Propiedades químicas básicas del etano.*



Fórmula química	C ₂ H ₆
Peso Molecular	30,0700
Análisis Elemental	C, 79.89; H, 20.11
Nombre Común	Etano
Nombre IUPAC	Etano

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades químicas básicas del etano.

El etano es un hidrocarburo alifático alcano que tiene 2 átomos de carbono y 6 átomos hidrógeno en condiciones normales de presión y temperatura está en estado gaseoso, es un excelente combustible, según la tabla 39 tiene un peso molecular de 30.0700 unidades de masa atómica y su análisis elemental establece que en su composición porcentual tiene 79.879 por ciento de carbono y 20.11 por ciento de hidrógeno.

Tabla 40

Propiedades químicas básicas del eteno.

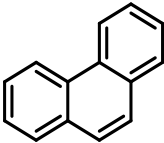
	=
Fórmula química	C ₂ H ₄
Peso Molecular	28,0540
Análisis Elemental	C, 85.63; H, 14.37
Nombre Común	eteno
Nombre IUPAC	eteno

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades químicas básicas del eteno

El eteno se usa para la producción de polímeros principalmente el polietileno, está formado por 2 átomos de carbono unidos por un doble enlace, es uno de los compuestos orgánicos más usados en todo el mundo, según la tabla 40 su fórmula química es C₂H₄, tiene un peso molecular de 28,0540 unidades de masa atómica.

Tabla 41*Propiedades químicas básicas del fenantreno.*

	
Fórmula química	C ₁₄ H ₁₀
Peso Molecular	178,2340
Análisis Elemental	C, 94.34; H, 5.66
Nombre Común	Fenantreno
Nombre IUPAC	Fenantreno

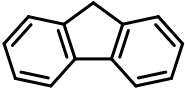
Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades químicas básicas del fenantreno

Es un compuesto policíclico formado por 3 anillos de benceno fusionados, según la tabla 41, está compuesto por 14 átomos de carbono y 10 átomos de hidrógeno, tiene un peso molecular de 178,2340 unidades de masa atómica.

En su forma pura se puede encontrar en el humo del tabaco y su análisis elemental establece que tiene 94,34 por ciento de carbono y 5,66 por ciento de hidrógeno.

Tabla 42*Propiedades básicas del 9H-fluoreno.*

	
Fórmula química	C ₁₃ H ₁₀
Peso Molecular	166,2230
Análisis Elemental	C, 93.94; H, 6.06
Nombre Común	Fluoreno
Nombre IUPAC	9H-fluoreno

Nota. Obtenido de *ChemDraw Professional*

Propiedades químicas básicas del 9 H-fluoreno

Es un hidrocarburo aromático policíclico posee un olor similar al naftaleno, se caracteriza por su fluorescencia violeta al que se le tribuye su nombre. Su fórmula química es $C_{13}H_{10}$, está formado por 13 átomos de carbono y 10 átomos de hidrógeno, su peso molecular es de 166,2230 unidades de masa atómica.

El análisis elemental establece que tiene 93,94 por ciento de carbono y 6,06 por ciento de hidrógeno.

4.3.3 Generación automática de nomenclatura IUPAC

Tabla 43

Nomenclatura IUPAC

Número de Molécula	Nombre IUPAC	Número de Molécula	Nombre IUPAC
1	octilbenceno	44	Tolueno
2	buta-1,3-diene	45	Undecano
3	9,10-dihidrofenantreno	46	Vanadio
4	Benceno	47	o-xileno
5	tetrafeno	48	icosano
6	1,1-bifenilo	49	henicosano
7	Butano	50	docosano
8	But-1-ene	51	tricosano
9	Carbón	52	tetracosano
10	ciclohexano	53	pentacosano

Número	de	Nombre IUPAC	Número	de	Nombre IUPAC
Molécula			Molécula		
11		Decahidronaftaleno	54		hexacosano
12		Decano	55		heptacosano
13		Dodecano	56		octacosano
14		estireno	57		nonacosano
15		Etano	58		triacontano
16		eteno	59		hentriacontano
17		Fenantreno	60		dotriacontano
18		9H-fluoreno	61		tritriacontano
19		Heptano	62		tetratriacontano
20		Hexano	63		pentatriacontano
21		Hex-1-ene	64		hexatriacontano
22		Hidrógeno	65		heptatriacontano
23		i-Butano	66		Ciclopentano
24		2-metilnonano	67		1,1,2-trimetilciclopentano
25		2-metilhexano	68		tetradecahidrofenantreno
26		2-metilpentano	69		Metoxi ciclopentano
27		i-Nonano	70		Metilciclohexano
28		2-metilheptano	71		Bromo benceno
29		i-Pentano	72		Fluorobenceno
30		isopreno	73		Nitrobenceno
31		metano	74		fenol
32		Naftalina	75		Etilbencina
33		Níquel	76		Terc-butilbenceno

Número de Molécula	Nombre IUPAC	Número de Molécula	Nombre IUPAC
34	Nitrógeno	77	1,2-diclorobenceno
35	Nonano	78	1-bromo-3-nitrobenceno
36	Pentano	79	1-etil-4-isopropilbenceno
37	Octano	80	1-etil-2-metilbenceno
38	Pent-1-ene	81	1-etil-3-metilbenceno
39	Pireno	82	p-xileno
40	Propano	83	mesitileno
41	Prop-1-eno	84	1-bromo-2,3-dimetilbenceno
42	Sulfuro	85	1,2,4-trinitrobenceno
43	1,2,3,4-tetrahidronaftaleno		

Nota. Obtenido de Chemdraw

4.3.4 Generación automática del código SMILES

Tabla 44

Código SMILES de los compuestos de la corriente de entrada y salida de la unidad craqueo catódico.

Número de Molécula	Código SMILES
1	<chem>CCCCCCCCC1=CC=CC=C1</chem>
2	<chem>C=CC=C</chem>
3	<chem>C12=CC=CC=C1CCC3=C2C=CC=C3</chem>

Número de Molécula	Código SMILES
4	<chem>C1=CC=CC=C1</chem>
5	<chem>C12=CC=CC=C1C=CC3=CC4=CC=CC=C4C=C32</chem>
6	<chem>C1(C2=CC=CC=C2)=CC=CC=C1</chem>
7	<chem>CCCC</chem>
8	<chem>C=CCC</chem>
9	<chem>[C]</chem>
10	<chem>C1CCCCC1</chem>
11	<chem>C12CCCCC1CCCC2</chem>
12	<chem>CCCCCCCCC</chem>
13	<chem>[CH2]CCCCCCCCC[CH2]</chem>
14	<chem>C=CC1=CC=CC=C1</chem>
15	<chem>CC</chem>
16	<chem>C=C</chem>
17	<chem>C12=CC=CC=C1C=CC3=CC=CC=C23</chem>
18	<chem>C1(CC2=C3C=CC=C2)=C3C=CC=C1</chem>
19	<chem>CCCCCCC</chem>
20	<chem>CCCCCC</chem>
21	<chem>C=CCCCCC</chem>
22	<chem>[H][H]</chem>
23	<chem>CC(C)C</chem>
24	<chem>CCCCCCC(C)C</chem>
25	<chem>CCCC(C)C</chem>
26	<chem>CCCC(C)C</chem>
27	<chem>[CH2]CCCCC([CH2])C</chem>

Número de Molécula	Código SMILES
28	<chem>CCCCC(C)C</chem>
29	<chem>CCC(C)C</chem>
30	<chem>C=C(C)C=C</chem>
31	<chem>C</chem>
32	<chem>C12=CC=CC=C1C=CC=C2</chem>
33	<chem>[Ni]</chem>
34	<chem>N#N</chem>
35	<chem>[CH2]CCCCCCC[CH2]</chem>
36	<chem>CCCCC</chem>
37	<chem>CCCCCCCC</chem>
38	<chem>C=CCCC</chem>
39	<chem>C12=CC=C3C=CC=C4C=CC(C2=C34)=CC=C1</chem>
40	<chem>CCC</chem>
41	<chem>C=CC</chem>
42	<chem>[S-2]</chem>
43	<chem>C12=C(CCCC2)C=CC=C1</chem>
44	<chem>CC1=CC=CC=C1</chem>
45	<chem>[CH2]CCCCCCCC[CH2]</chem>
46	<chem>[V]</chem>
47	<chem>CC1=CC=CC=C1C</chem>
48	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC</chem>
49	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC</chem>
50	<chem>[CH2]CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC[CH2]</chem>
51	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC</chem>

Número de Molécula	Código SMILES
52	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
53	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
54	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
55	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
56	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
57	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
58	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
59	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
60	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
61	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
62	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
63	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
64	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
65	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
66	C1CCCC1
67	CC1C(C)(C)CCC1
68	C12CCCCC1CCC3CCCCC23
69	COC1CCCC1
70	CC1CCCCC1
71	BrC1=CC=CC=C1
72	FC1=CC=CC=C1
73	O=[N+](C1=CC=CC=C1)[O-]
74	OC1=CC=CC=C1
75	CCC1=CC=CC=C1

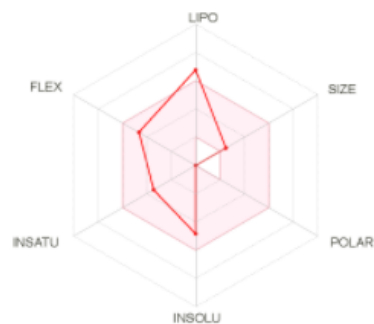
Número de Molécula	Código SMILES
76	<chem>CC(C1=CC=CC=C1)(C)C</chem>
77	<chem>ClC1=CC=CC=C1Cl</chem>
78	<chem>O=[N+](C1=CC(Br)=CC=C1)[O-]</chem>
79	<chem>CC(C1=CC=C(CC)C=C1)C</chem>
80	<chem>CC1=CC=CC=C1CC</chem>
81	<chem>CC1=CC(CC)=CC=C1</chem>
82	<chem>CC1=CC=C(C)C=C1</chem>
83	<chem>CC1=CC(C)=CC(C)=C1</chem>
84	<chem>CC1=C(C)C(Br)=CC=C1</chem>
85	<chem>O=[N+](C1=CC=C([N+][O-])=O)C([N+][O-])=O=C1)[O-]</chem>

Nota. Obtenido de ChemDraw Profesional

4.4. Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas

Figura 15

Radars de biodisponibilidad del octilbenceno



Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Tabla 45

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de octilbenceno.

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C ₁₄ H ₂₂
Peso molecular	190.32g/mol
Número de átomos pesados	14
Número de Átomos aromáticos pesados	6
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	0.57
Número de enlaces notables	7
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	65.06
PSA	0.00 Å ²

Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Tabla 46

Reporte de Lipofilia para la molécula de octilbenceno.

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	3.47
Log P _{o/w} (XLOGP3)	6.30
Log P _{o/w} (WLOGP)	4.59
Log P _{o/w} (MLOGP)	5.58
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	4.80
Promedio Log P _{o/w}	4.95

Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Tabla 47

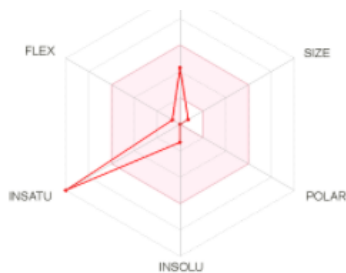
Solubilidad en agua de la molécula de octilbenceno.

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-4.84
Solubilidad	2,72e-03 mg/ml; 1,43e-05 mol/l
Clase	Moderadamente soluble
Log S (Ali)	-6.09
Solubilidad	1,55e-04 mg/ml; 8.15e-07 mol/l
Clase	Poco soluble
Log S (SILICOS-IT)	-5.62
Solubilidad	4,57e-04 mg/ml; 2.40e-06 mol/l
Clase	Moderadamente soluble

Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Figura 16

Radar de biodisponibilidad del buta-1,3-diene



Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Tabla 48

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de Buta-1,3-dieno.

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C ₄ H ₆
Peso molecular	54,09g/mol
Número de átomos pesados	4
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	0,00
Número de enlaces rotables	1
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	20.39
PSA	0.00 Å ²

Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Tabla 49

Reporte de Lipofilia para la molécula de Buta-1,3-dieno.

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	1.68
Log P _{o/w} (XLOGP3)	1.99
Log P _{o/w} (WLOGP)	1.36
Log P _{o/w} (MLOGP)	1.56
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	0.88
Promedio Log P _{o/w}	1.49

Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Tabla 50

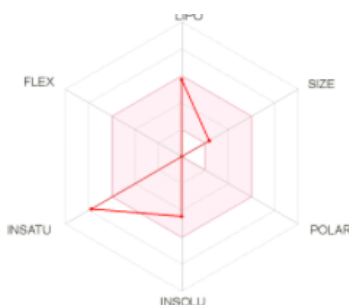
Solubilidad en agua de la molécula de Buta-1,3-dieno.

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-1.36
Solubilidad	2,34e + 00 mg/ml; 4.33e-02 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (Ali)	-1.62
Solubilidad	1,31e + 00mg/ml; 2.42e-02 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (SILICOS-IT)	-0.58
Solubilidad	1,43e + 01mg/ml; 2,65e-01mol/l
Clase	Soluble

Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Figura 17

Radar de biodisponibilidad del 3,9,10-dihidrofenantreno



Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Tabla 51

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 9,10-dihidrofenantreno

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C ₁₄ H ₁₂
Peso molecular	180.25g/mol
Número de átomos pesados	14
Número de Átomos aromáticos pesados	12
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	0.14
Número de enlaces rotables	0

Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	59.70
PSA	0.00 Å ²

Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Tabla 52

Reporte de Lipofilia para la molécula 9,10-dihidrofenantreno.

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.45
Log P _{o/w} (XLOGP3)	4.52
Log P _{o/w} (WLOGP)	3.45
Log P _{o/w} (MLOGP)	4.93
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	4.27
Promedio Log P _{o/w}	3.93

Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Tabla 53

Solubilidad en agua de la molécula 9,10-dihidrofenantreno

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-4.44
Solubilidad	6.44e-03 mg/ml; 3.6e-05 mol/l
Clase	Moderadamente soluble
Log S (Ali)	-4.24
Solubilidad	1,03e-02 mg/ml; 5.73e-05 mol/l
Clase	Moderadamente soluble
Log S (SILICOS-IT)	-5.46
Solubilidad	6.21e-04 mg/ml; 3.44e-06 mol/l

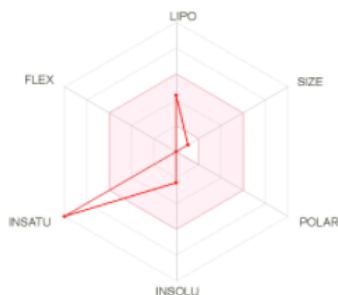
Clase

Moderadamente soluble

Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Figura 18

Radar de biodisponibilidad del benceno



Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Tabla 54 Propiedades fisicoquímicas para la molécula de Benceno

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_6H_6
Peso molecular	78.11g/mol
Número de átomos pesados	6
Número de Átomos aromáticos pesados	6
Fracción de carbonos con hibridación sp3	0
Número de enlaces rotables	0
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	26.44
PSA	0.00 Å ²

Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Tabla 55

Reporte de Lipofilia para la molécula Benceno.

Lipofilia	
Log P _{ow} (iLOGP)	1.58

Log P _{o/w} (XLOGP3)	2.13
Log P _{o/w} (WLOGP)	1.69
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.17
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	2.12
Promedio Log P _{o/w}	2.14

Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

Tabla 56

Solubilidad en agua de la molécula Benceno.

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.41
Solubilidad	3.07e-01 mg/ml; 3.92e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-1.76
Solubilidad	1,35e-00 mg/ml; 1.73e-02 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (SILICOS-IT)	-2.27
Solubilidad	4.18e-01mg/ml; 5.35e-03mol/l
Clase	Soluble

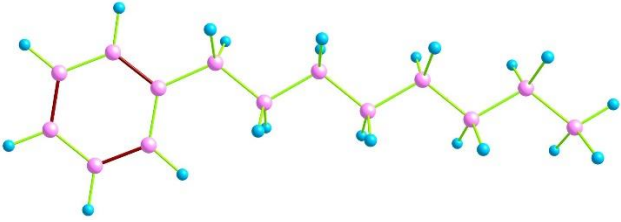
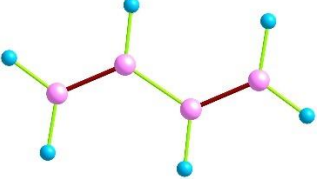
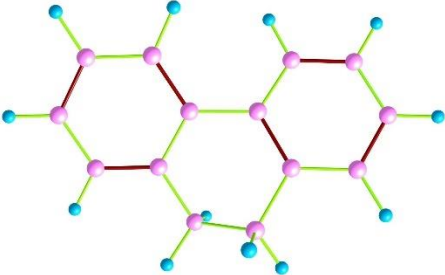
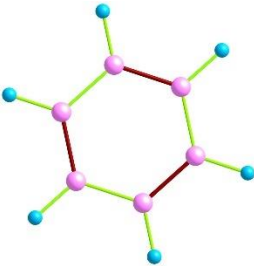
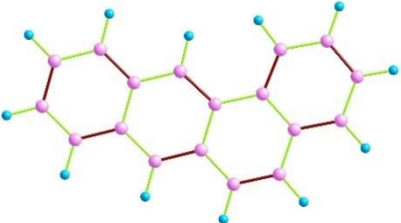

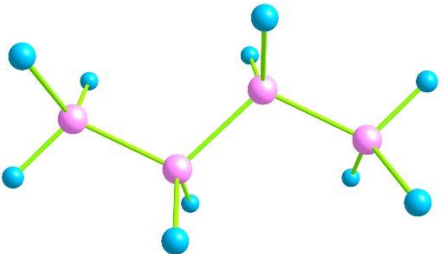
Nota. Obtenido de <http://www.swissadme.ch>

4.5. Cálculo y obtención de estructuras 3D

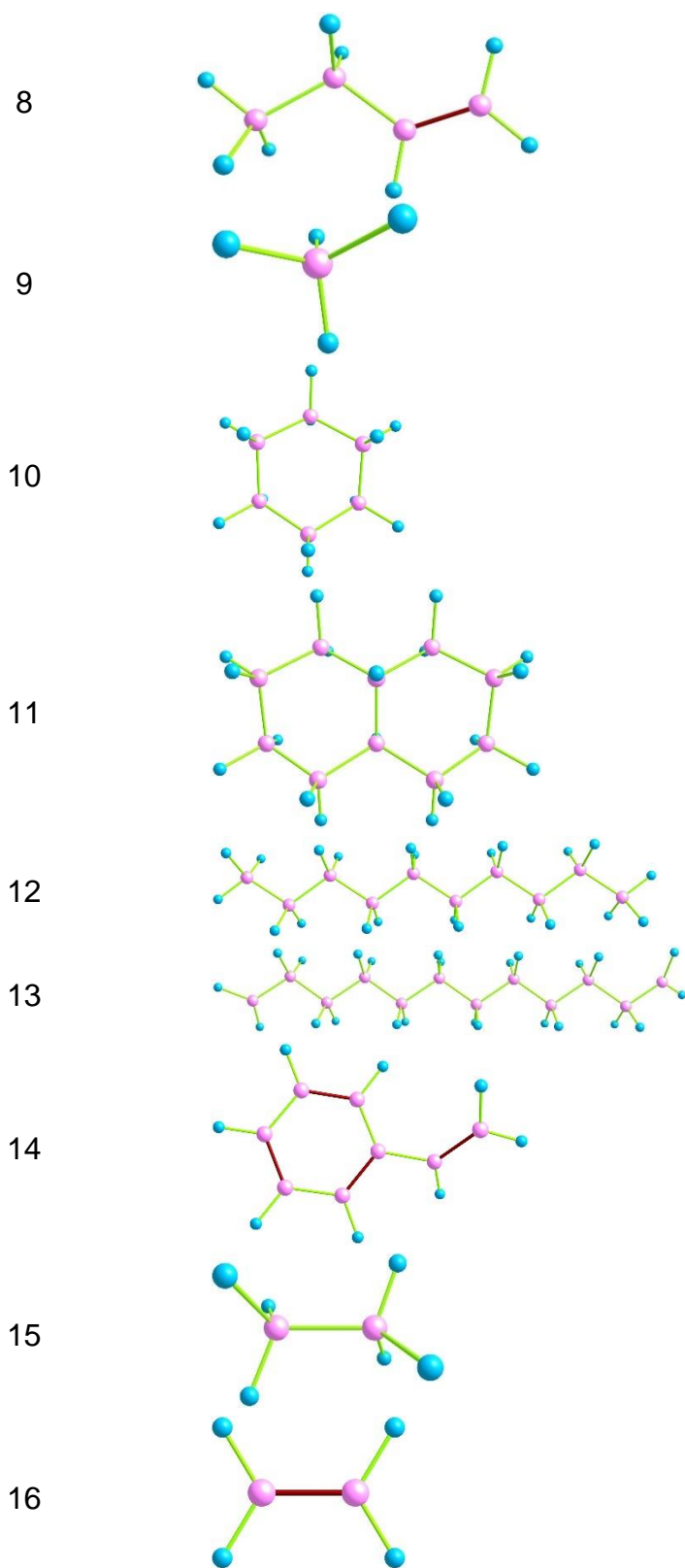
En la actualidad existen varias aplicaciones informáticas que permiten obtener estructuras moleculares tridimensionales, que permiten resaltar ciertas características de las moléculas, para lo cual se usa el programa *Chemcraft*.

Tabla 57

Estructuras moleculares en 3D

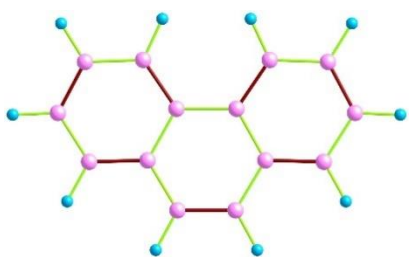
Número de Molécula	Estructura molecular en 3D
1	
2	
3	
4	
5	
6	
7	

Número de Molécula Estructura molecular en 3D



Número de Molécula Estructura molecular en 3D

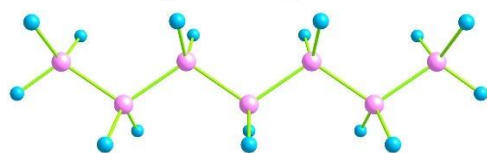
17



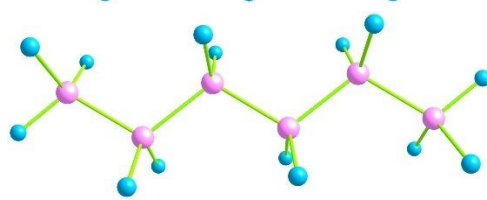
18



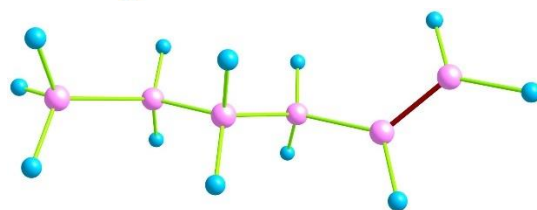
19



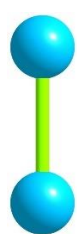
20



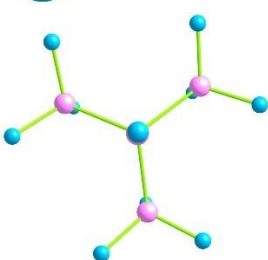
21



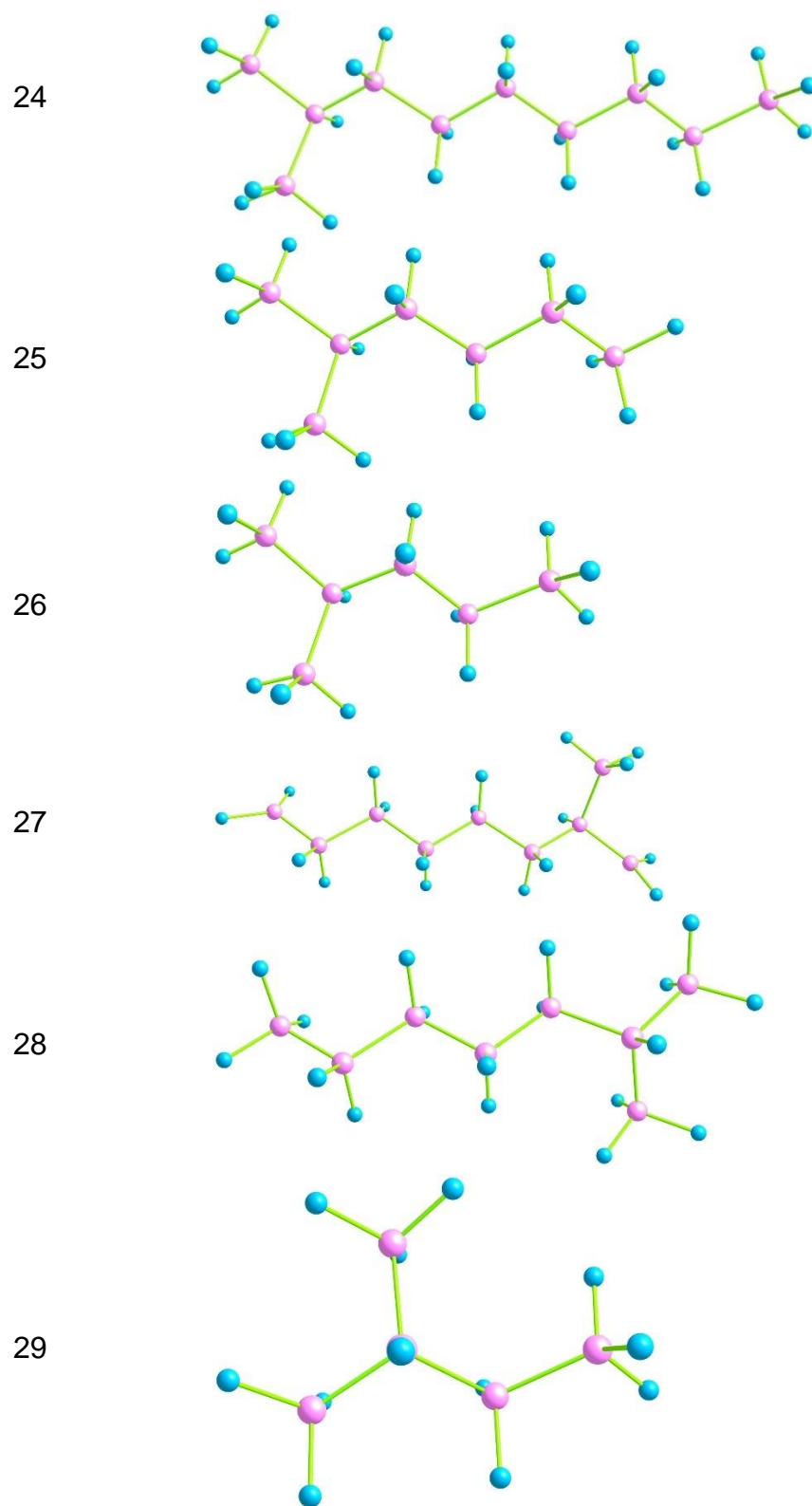
22



23

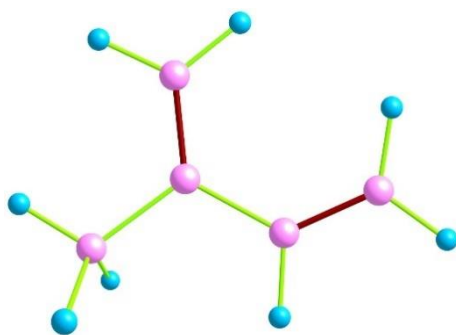


Número de Molécula Estructura molecular en 3D

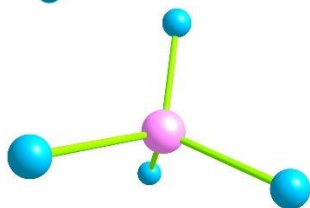


Número de Molécula Estructura molecular en 3D

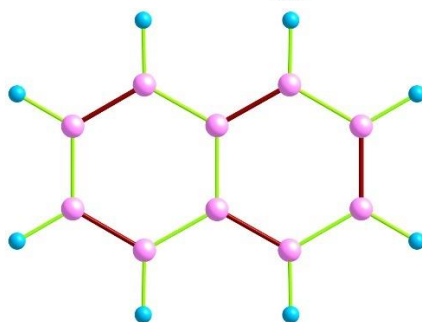
30



31



32



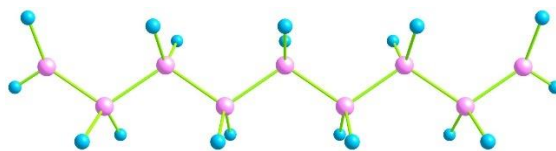
33



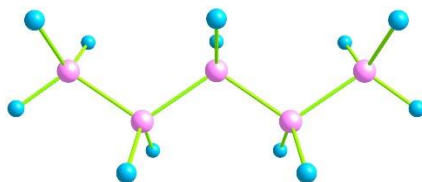
34



35

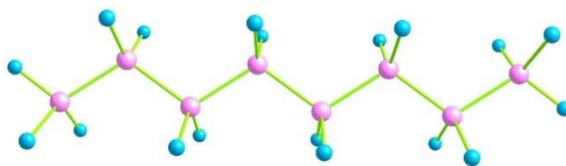


36

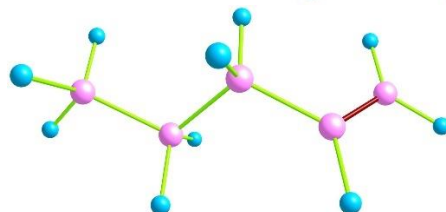


Número de Molécula Estructura molecular en 3D

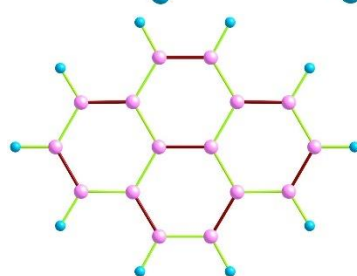
37



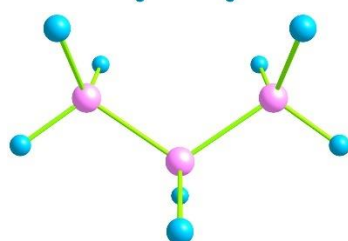
38



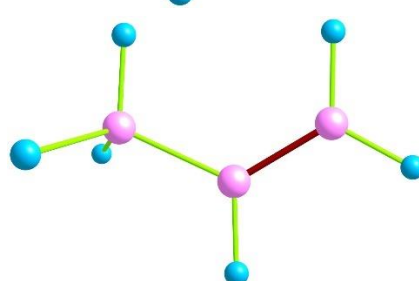
39



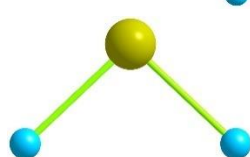
40



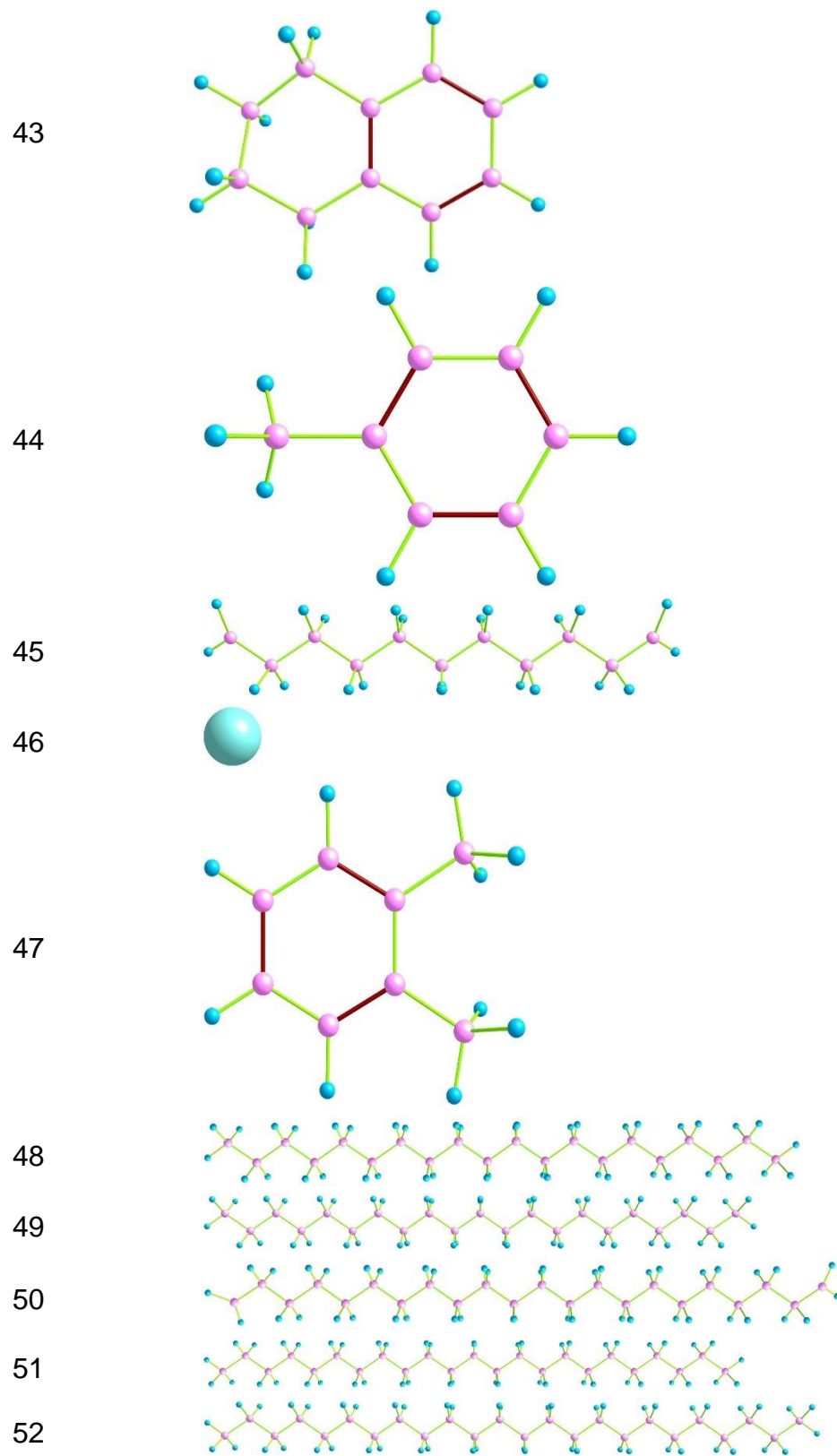
41



42

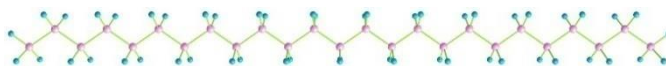


Número de Molécula Estructura molecular en 3D

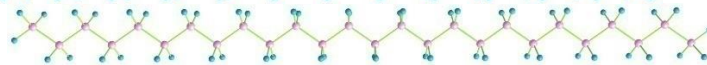


Número de Molécula Estructura molecular en 3D

53



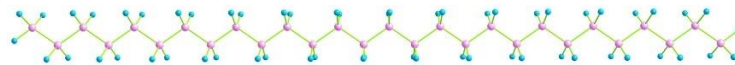
54



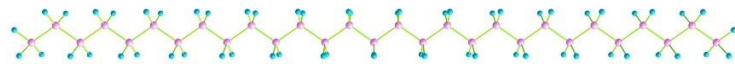
55



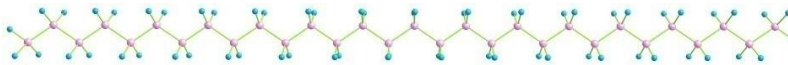
56



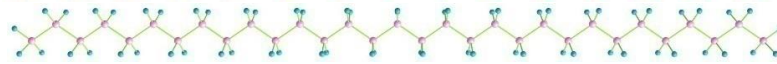
57



58



59



60



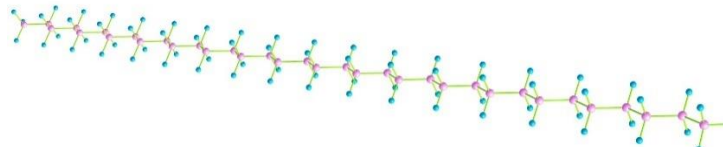
61



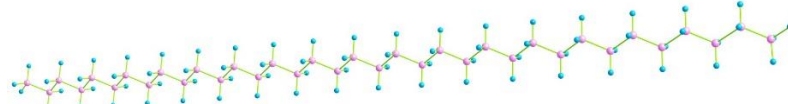
62



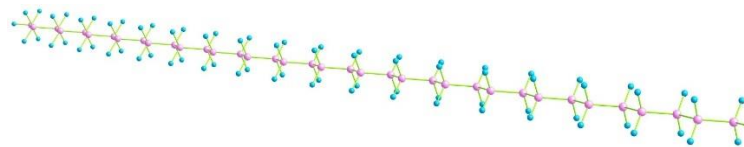
63



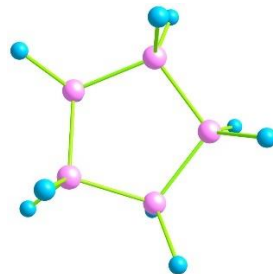
64



65

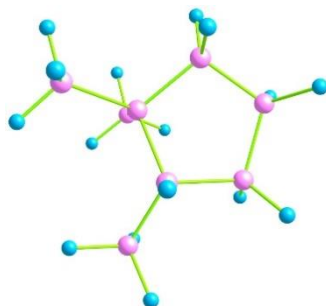


66

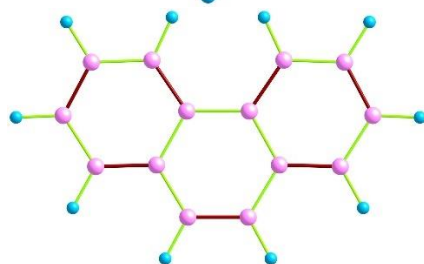


Número de Molécula Estructura molecular en 3D

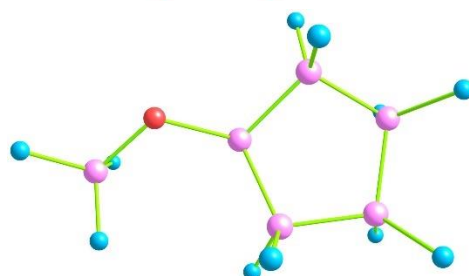
67



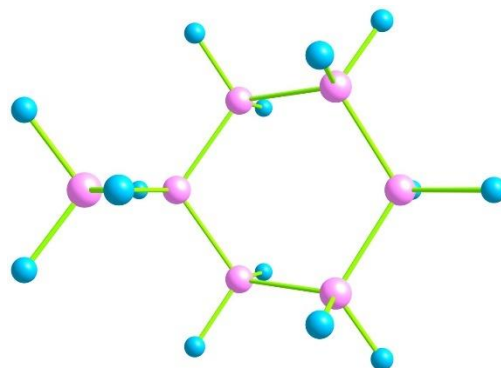
68



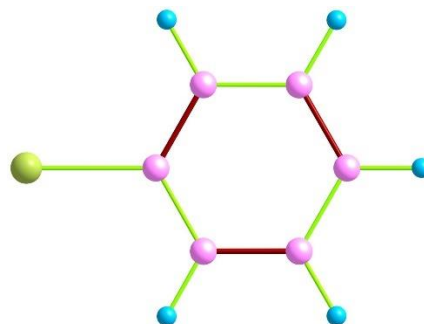
69



70

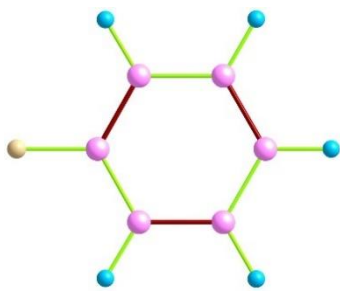


71

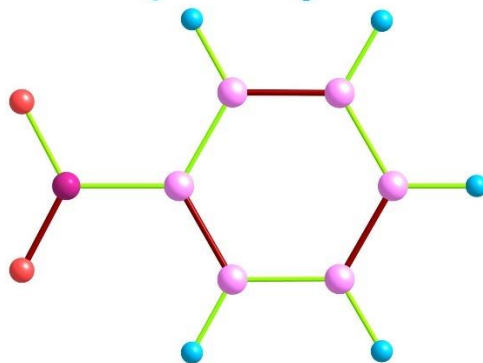


Número de Molécula Estructura molecular en 3D

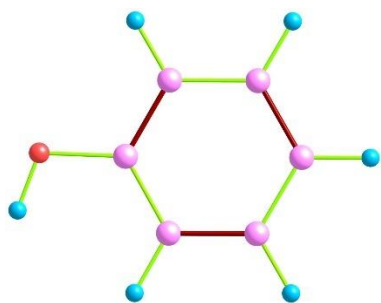
72



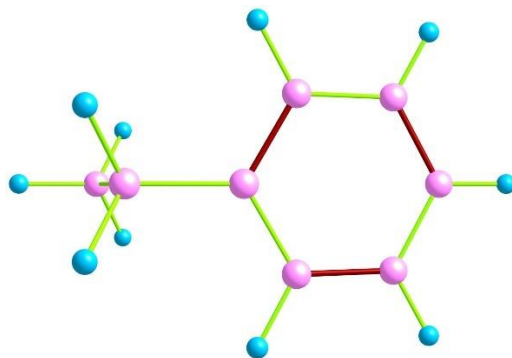
73



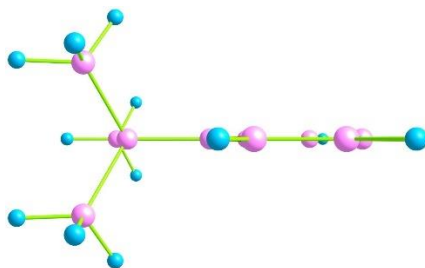
74



75

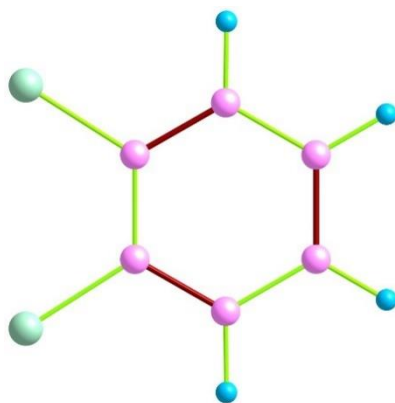


76

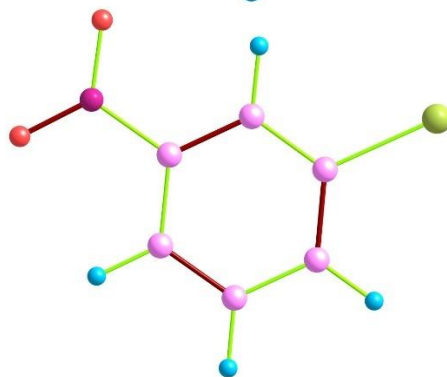


Número de Molécula Estructura molecular en 3D

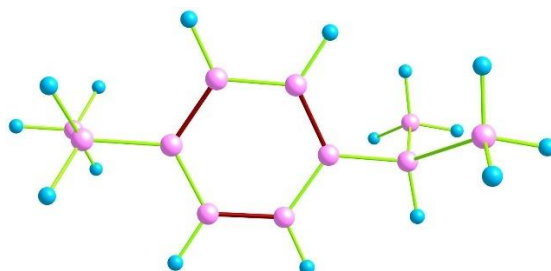
77



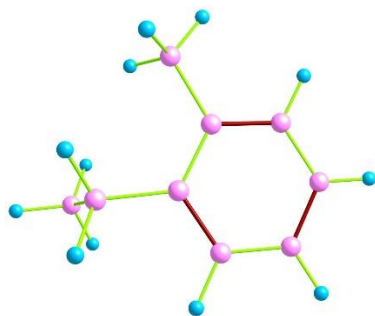
78



79

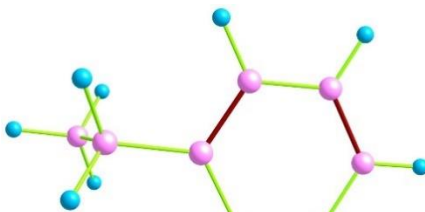


80

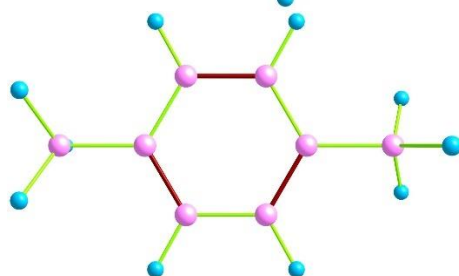


Número de Molécula Estructura molecular en 3D

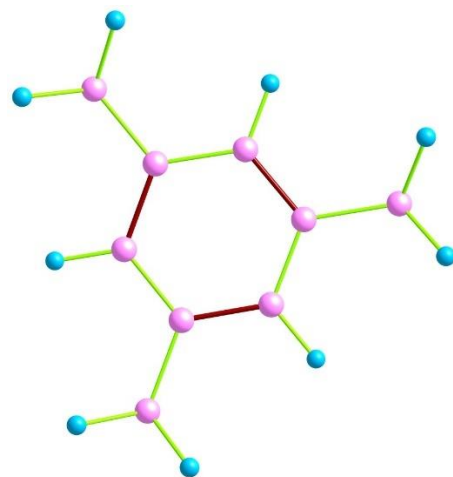
81



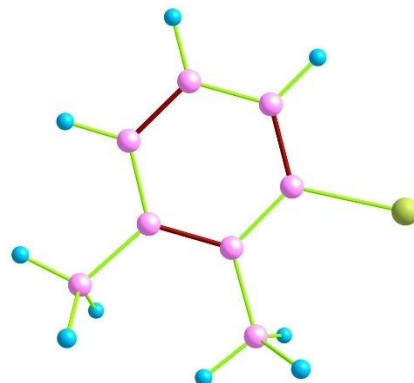
82



83



84



Nota. Obtenido de Chemcraft

4.5.4 Reporte de Energías de minimización

La energía de minimización se encuentra con el software Avogadro, que permite encontrar la configuración espacial de los núcleos de mínima energía de la molécula, este procedimiento calcula la función de onda y la energía a partir de la geometría inicial y enseguida procede a buscar la geometría con menor energía, esto se repite varias veces hasta encontrar la geometría de menor energía para esto se emplea los campos de fuerza denominado MMFF94 que han sido diseñados especialmente para las moléculas orgánicas y para otros elementos como el níquel, vanadio, e hidrogeno se emplea el campo de fuerza denominado UFF que funciona perfectamente con materiales inorgánicos.

En la tabla se reporta las energías de minimización para cada compuesto, que, según esto, la estructura que requiere mayor energía de optimización es la molécula denominada Fluoreno con una energía de minimización de 299,198 y la molécula que requiere menor energía de minimización es -48,9001 que corresponde a la molécula de n-hexatriacontano.

Tabla 58

Energía de optimización

Número	Energía de Optimización
1	75,4621
2	200.432
3	197.468
4	67,9391
5	270,299
6	164,664
7	21,2521

Número	Energía de Optimización
8	32,6231
9	0,110457
10	14,909
11	29,2119
12	26,3734
13	7,94898
14	93,031
15	19,8218
16	34,3322
17	220,899
18	299,198
19	23,7798
20	22,9204
21	21,0993
22	1,50E-18
23	1,99924
24	2,72734
25	-0,107135
26	0,378895
27	15,8567
28	-0,987215
29	1,38367
30	45,0953
31	0,110457

Número	Energía de Optimización
32	130,347
33	0
34	1,58E-19
35	5,31444
36	22,0718
37	24,6469
38	21,9505
39	249,279
40	20,504
41	27,1439
42	1,53472
43	85,8233
44	77,1107
45	7,06886
46	0
47	92,0877
48	35,0367
49	35,9032
50	16,594
51	37,6361
52	38,5026
53	39,3689
54	11,2733
55	-41,1018

Número	Energía de Optimización
56	-41,9684
57	-42,8347
58	-43,1073
59	-44,5677
60	-45,4343
61	-46,3007
62	-47,1671
63	-48,0336
64	-48,9001
65	-46,7666
66	6,48041
67	87,5296
68	220,899
69	57,291
70	8,67533
71	66,3062
72	58,8638
73	207,128
74	23,92
75	75,6023
76	144,38
77	104,534
78	166,847
79	103,67

Número	Energía de Optimización
80	92,0469
81	92,0469
82	86,3219
83	95,5611
84	104,289
85	236,788

Nota. Obtenido de Avogadro

CAPÍTULO V

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1. Conclusiones

La investigación bibliográfica minuciosa a nivel nacional e internacional permite obtener una lista de compuestos que pertenecen a las corrientes de entrada y salida de la unidad de craqueo catalítico.

Para que sea posible el correcto diseño de un proceso, sistema y estructura se usan programas computacionales que permitan obtener datos de diversas propiedades de las moléculas para establecer cuál es el mejor método de llevar a cabo la interacción entre las moléculas evitando gastos innecesarios, optimizando los recursos.

El procesamiento de cada molécula en el *ChemDraw* permite obtener información referente a propiedades químicas básicas tales como: nombre IUPAC, fórmula química, análisis elemental, porcentaje en masa y la estructura 2D para cada uno de los componentes de las corrientes de entrada y salida de la unidad FCC.

La plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática *SwissADME* permite obtener propiedades físico químicas básicas datos de lipófila y solubilidad en agua, para cada molécula en análisis.

Mediante el programa Avogadro y usando el campo de fuerzas MMFF94 diseñados para hidrocarburos se han obtenido las estructuras en 3D optimizadas, para cada uno de los compuestos presentes en las corrientes de entrada y salida de la unidad FCC, con esto y en base a los resultados se puede establecer que existen una relación directamente proporcional entre la energía de optimización y el tamaño de la molécula.

5.2. Recomendaciones

Se recomienda guardar el archivo creados en *ChemDraw* en formato MDL mol file (*.mol) para usar posteriormente usar este archivo en el programa Avogadro.

Para tomar el valor de la energía de optimización se recomienda esperar hasta que $dE=0$, y anotar el valor generado por el programa Avogadro.

Se recomienda usar el programa *Chemcraft* con el archivo optimizado de la molécula para obtener la estructura en 3D.

Bibliografía

- Silviculturae Mendeliana Brunensis* (Vol. 53). Recuperado el 17 de Febrero de 2021
<http://publications.lib.chalmers.se/records/fulltext/245180/245180.pdf>
<https://hdl.handle.net/20.500.12380/245180>
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jsames.2011.03.003>
<https://doi.org/10.1016/j.gr.2017.08.001>
<http://dx.doi.org/10.1016/j.precamres.2014.12>
- Avidan, A. A. (1993). *had a longer history, or more of an impact on the industry than cracking of heavy No other petroleum refining process, except for physical separation by distillation*,. 76, 1–39.
- Chemcraft: programa gráfico para la visualización de cálculos de química cuántica. (n.d.-a). Retrieved March 8, 2021, from <https://www.chemcraftprog.com/>
- Chemcraft: programa gráfico para la visualización de cálculos de química cuántica. (n.d.-b). Retrieved March 29, 2021, from <https://www.chemcraftprog.com>. Recuperado 15 de diciembre del 2020 ChemDraw - Software Activo. (n.d.).
<http://www.softwareactivo.com.mx/portfolio/chemdraw/>
- Cortés, A. (2014). *La obtención de combustibles marinos*.
- Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2017). SwissADME: A free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific Reports*, 7(October 2016), 42717. Recuperado el 21 de Enero de 2021. <https://doi.org/10.1038/srep42717>
- Darling, S. D. *El uso y construcción de modelos moleculares*. , (2006).
- Fahim, M., AL-sahhaf, T., & Elkilani, A. (2010). *Fundamentals of petroleum refining*.

Fischer, H., Kansy, Manfred y Wagner, B., & ? (2006). *Método de determinación de la lipofilia*.

La importancia de la estructura tridimensional de las moléculas. (n.d.). Recuperado el 11 de Enero de 2021 <https://www.mheducation.es/blog/la-importancia-de-la-estructura-tridimensional-de-las-moleculas>

Meléndez Hevia, F. (1982). El origen del petróleo. *El Origen Del Petróleo*, 37(37), 61–66. Recuperado el 21 de Febrero de 2021 https://doi.org/10.5209/rev_COPA.1982.v37.35549

Mohammed, A. H. A.-K., & Esgair, K. K. (2010). Fluid Catalytic Cracking of Petroleum Fraction (Vacuum Gas Oil) To Produce Gasoline. *Iraqi Journal of Chemical and Petroleum Engineering*, 11(4), 33–45.

Núñez, C. (2018). Guía de Laboratorio Química Orgánica. *Solubilidad De Compuestos Organicos*, 34.

Sadeghbeigi, R. (2012). FCC Feed Characterization. In *Fluid Catalytic Cracking Handbook* (Tercera, pp. 51–86). Recuperado el 17 de Enero de 2021 <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-386965-4.00003-3>

Speight, J. G. (2013). Catalytic Cracking. In *Heavy and Extra-heavy Oil Upgrading Technologies* (pp. 39–67). Recuperado el 11 de Marzo de 2021 <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-404570-5.00003-x>

Torres Quezada, C., Varela Gangas, P., Frías, M. V., & Flores-Morales, P. (2017). Recuperado el 15 de enero del 2021 Implementación de Avogadro como visualizador y constructor de moléculas con alumnos de primer año de Odontología

en la asignatura Química General y Orgánica. *Educacion Quimica*, Vol. 28, pp. 91–98. <https://doi.org/10.1016/j.eq.2016.08.004>

Recuperado el 27 de enero de 2021 Tutorial de SONRISAS | Investigación | EPA de EE. UU. (n.d.). Retrieved March 25, 2021, from https://archive.epa.gov/med/med_archive_03/web/html/smiles.html

A.Avidan, A. (s.f.). Origin,development and scop.En A.A. Avidan,Origin,development and scope. (pág. 38).

Baran, N. (2012). Model-based design of experiments for model. 5.

Bonsignore, C. (2012). Device Design and Computational. 22.

Esgair, A. H.-K. (2010).Fluid Catalytic Cracking of petroleum fraction (Vacuum. Iraqi Journal of Chemical and Petroleum Engineering, 13.

Gunnar Karlstrom, R. L.-A. (2003). MOLCAS: a program package for computational chemistry. 18.

McMurry, J. (2008). Química orgánica.

S Ekins, , J. (2007). In silico pharmacology for drug discovery: methods. British Journal of Pharmacology , 12.

Sadeghbeigi, R. (2012). Fluid Catalytic Cracking Handbook.

Sadeghbeigi's. (2020). Fluid Catalytic Cracking Handbook. Butterworth-Heinemann.

Wade, L. (2010). Química Orgánica.

Young, D. C. (2001). Computational Chemistry.

Anexos