

CARRERA DE PETROQUÍMICA

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

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

AUTOR:

Chiluisa Cando, Jessica Patricia

TUTOR:

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.



INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

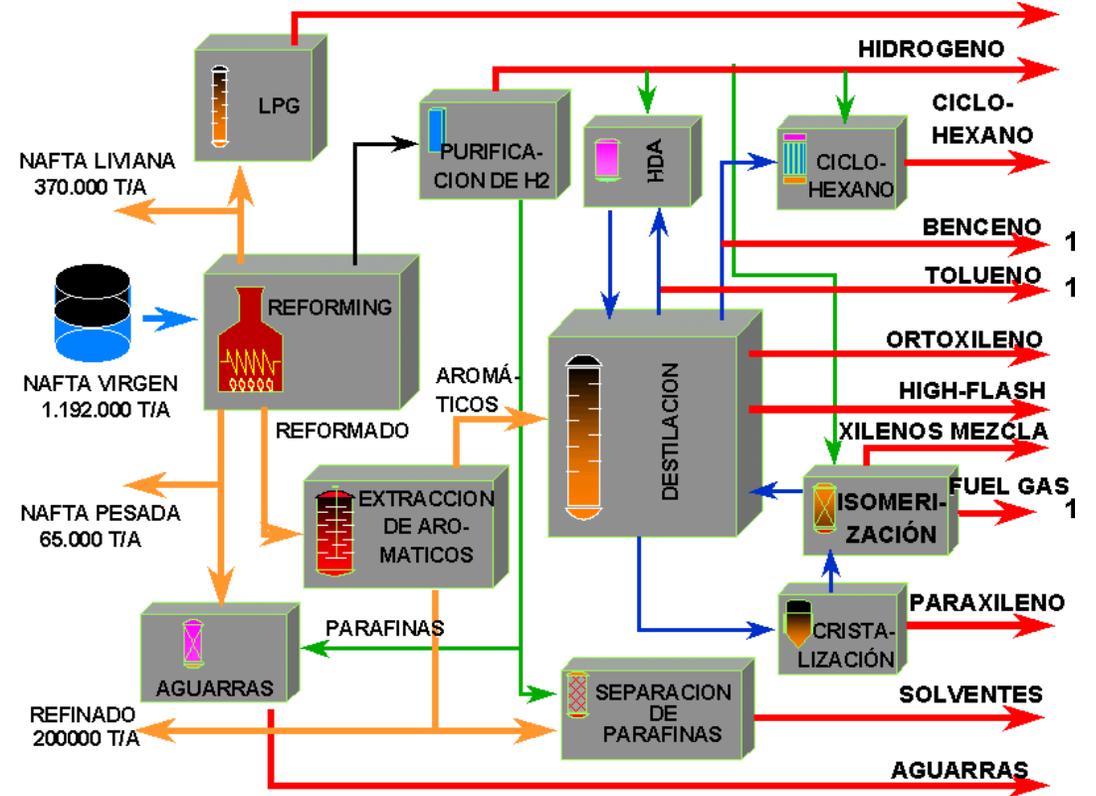
ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

PETRÓLEO



REFINERÍA

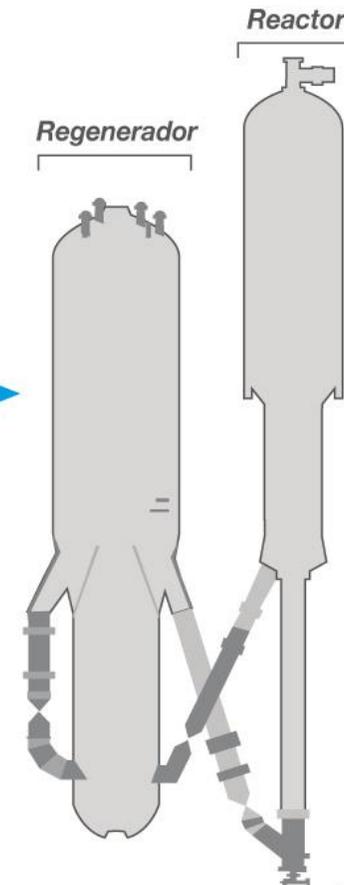


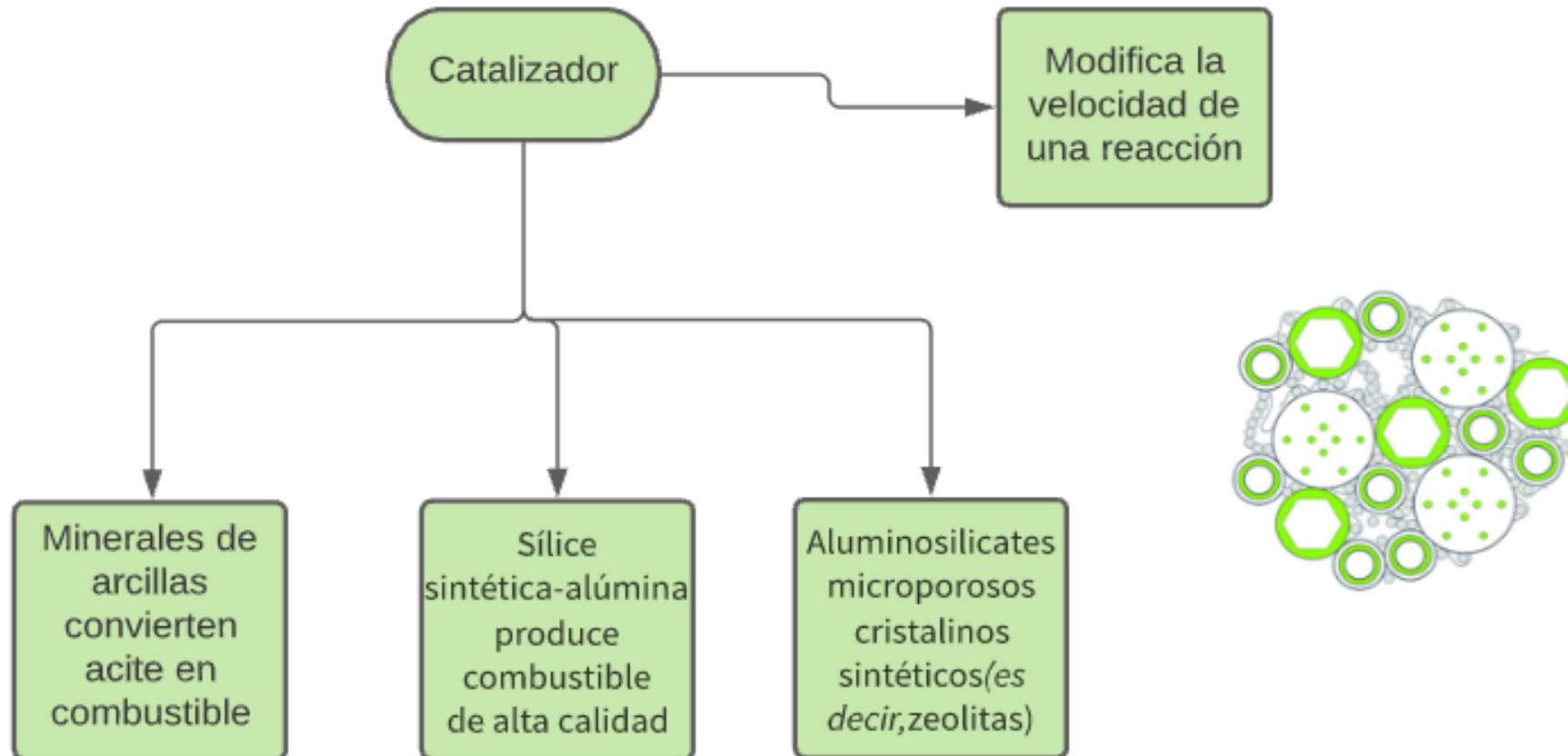


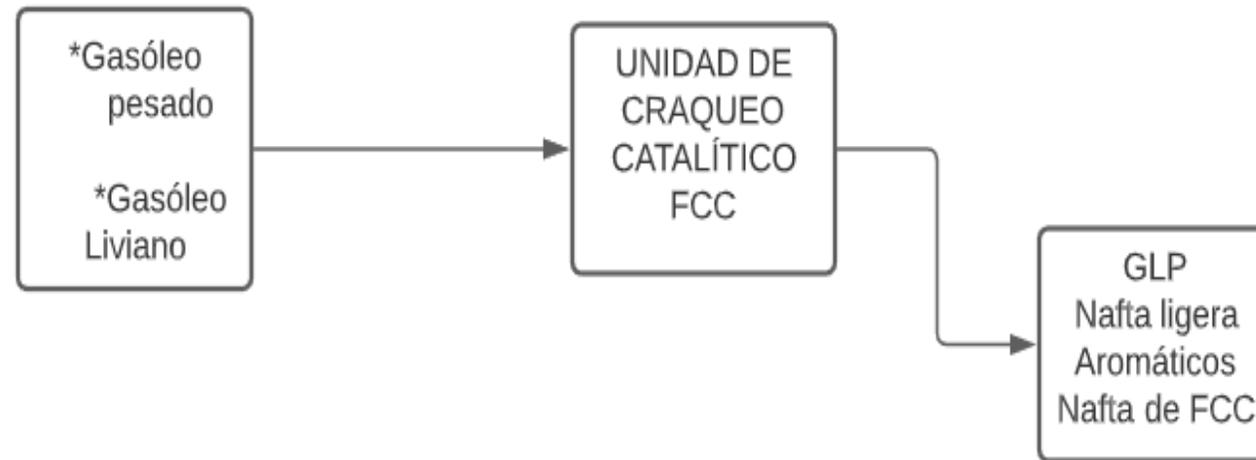
Refinería Esmeraldas



Unidad FCC





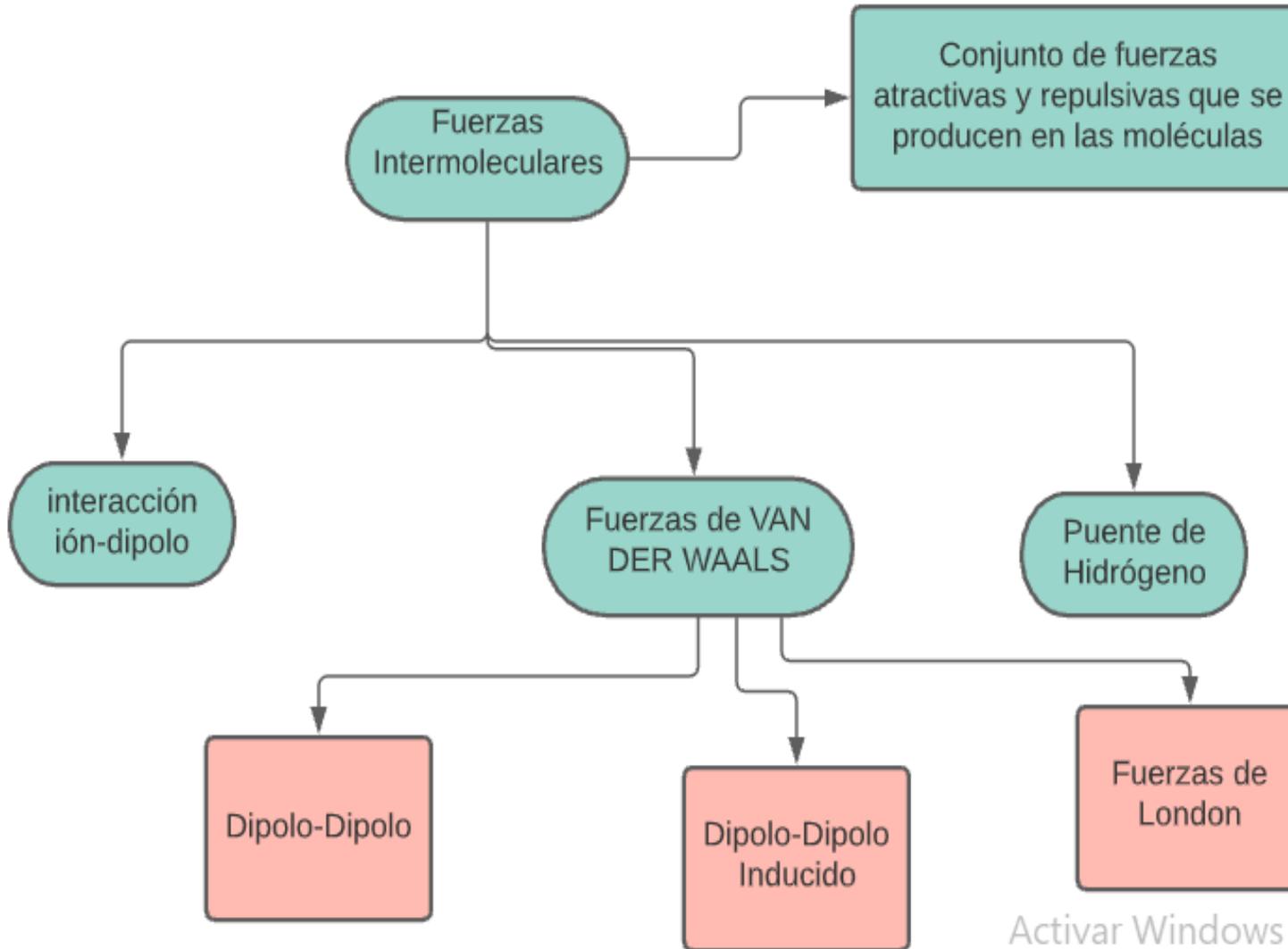




in silico

Taller autómeta celular 1989
en México

Simulaciones bilógicas
llevadas a cabo en un
computador



Activar Windows



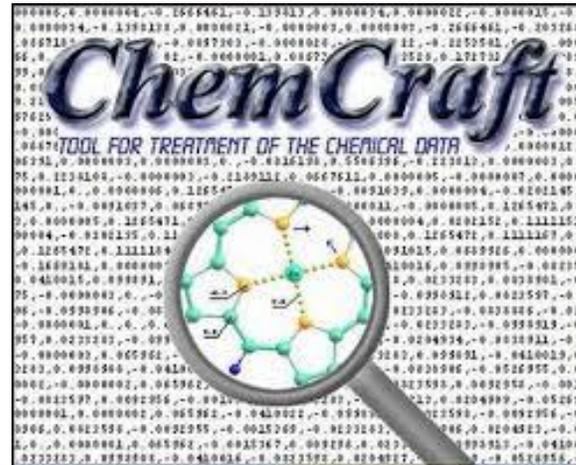
INTRODUCCIÓN



ChemDraw®



Swiss Institute of
Bioinformatics





INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

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 “craqueo catalítico” mediante cálculos teóricos computacionales.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Establecer una lista de potenciales moléculas químicas de origen orgánico presentes en el flujo de entrada en el proceso de craqueo catalítico.
- Establecer una lista de potenciales moléculas químicas de origen orgánico presentes en el flujo de salida en el proceso de craqueo catalítico.
- Procesar cada una de las moléculas químicas de origen orgánico, desde su nomenclatura, estructura química 2D, código SMILES y reporte de propiedades básicas como fórmula, peso molecular y composición elemental.
- Calcular las propiedades fisicoquímicas básicas de cada molécula de origen orgánico, mediante la plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática *SwissADME*.
- Calcular las estructuras 3D de cada una las moléculas orgánicas, mediante el software Avogadro, para la obtención de las configuraciones y conformaciones finales.
- Reportar mediante tablas los datos obtenidos para cada molécula química procesada en los pasos anteriores.



INTRODUCCIÓN

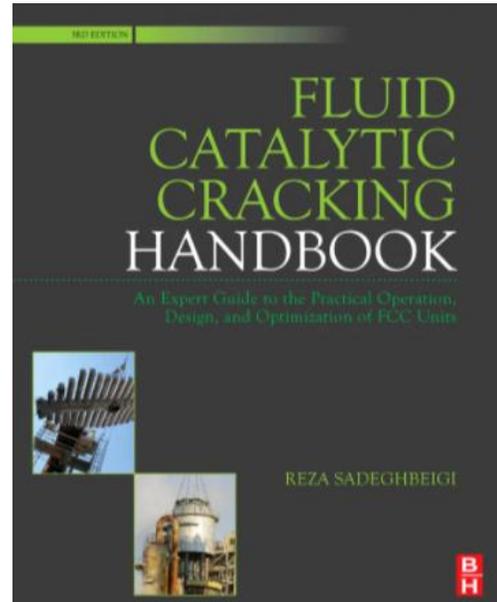
OBJETIVOS

METODOLOGÍA

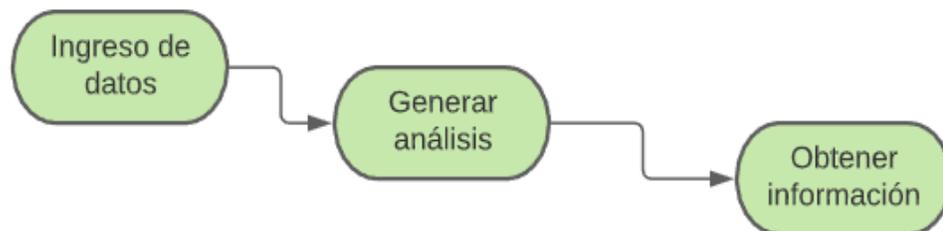
ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

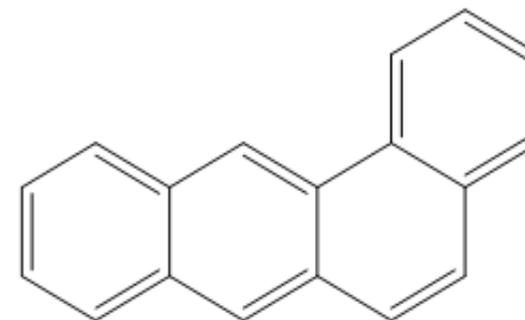
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de craqueo catalítico



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



tetraphene
Chemical Formula: $C_{18}H_{12}$
Exact Mass: 228,09
Molecular Weight: 228,29
m/z: 228.09 (100.0%), 229.10 (19.5%), 230.10 (1.8%)
Elemental Analysis: C, 94.70; H, 5.30



Benzo(a)anthraceno

Estudio de la interfaz de la plataforma *SwissADME*



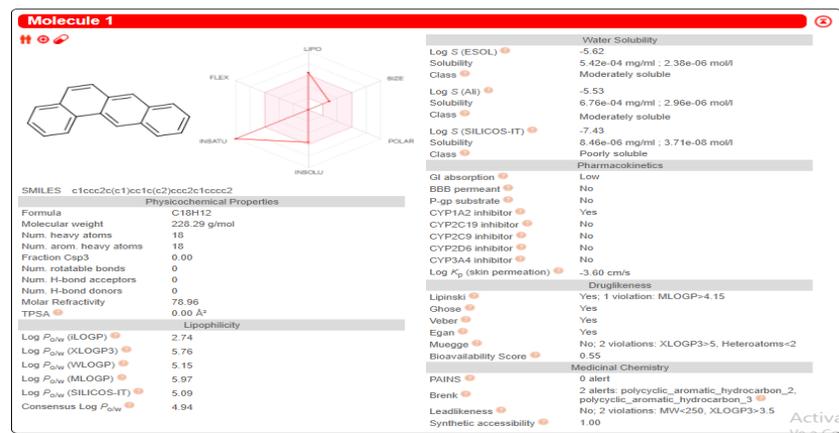
Swiss Institute of
Bioinformatics

Código
SMILES

Propiedades
físicoquímicas

Solubilidad

Lipofilia



SCIENTIFIC REPORTS

OPEN

SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules

Received: 05 October 2016

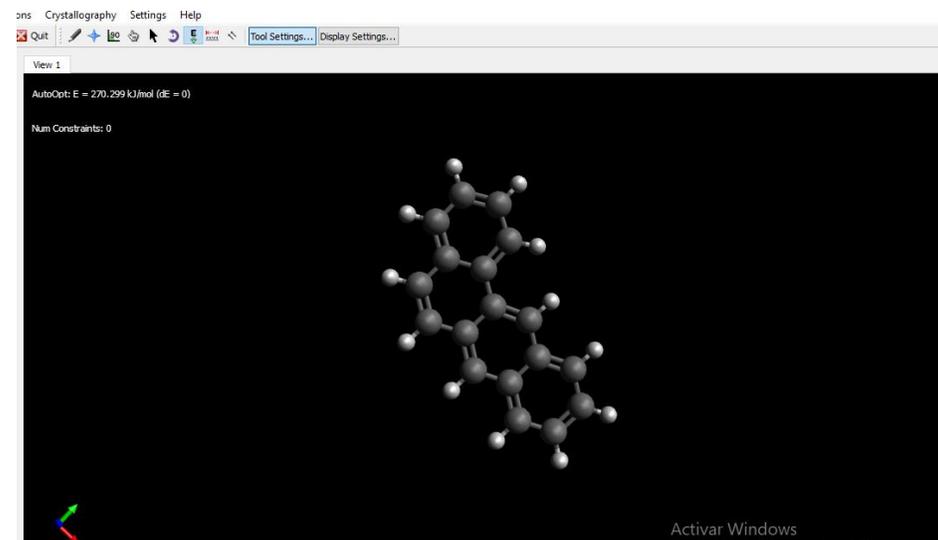
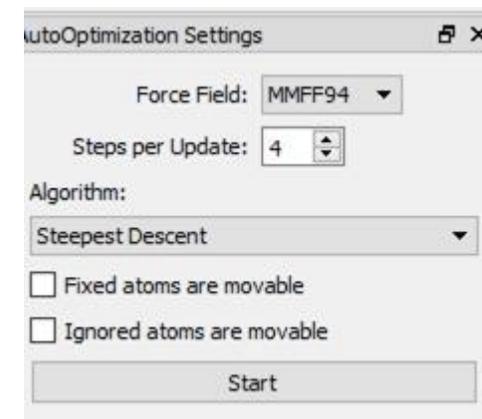
Accepted: 13 January 2017

Published: 03 March 2017

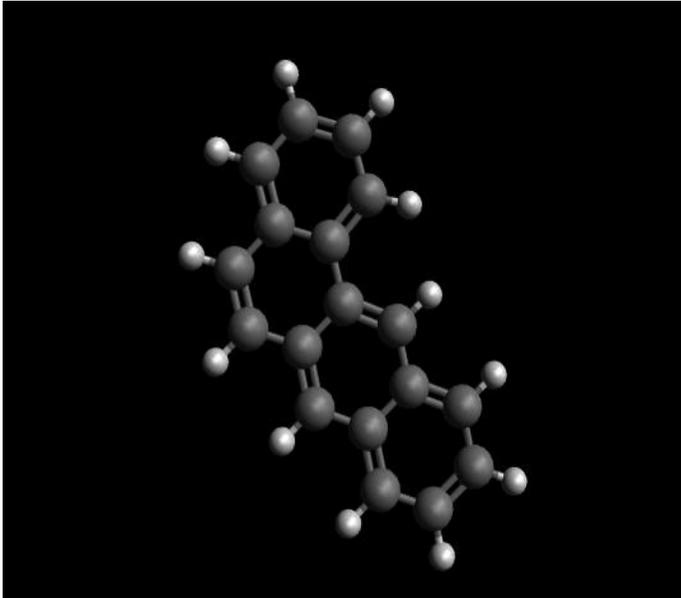
Antoine Daina¹, Olivier Michielin^{1,2,3} & Vincent Zoete¹

Cálculo y obtención de estructuras 3D

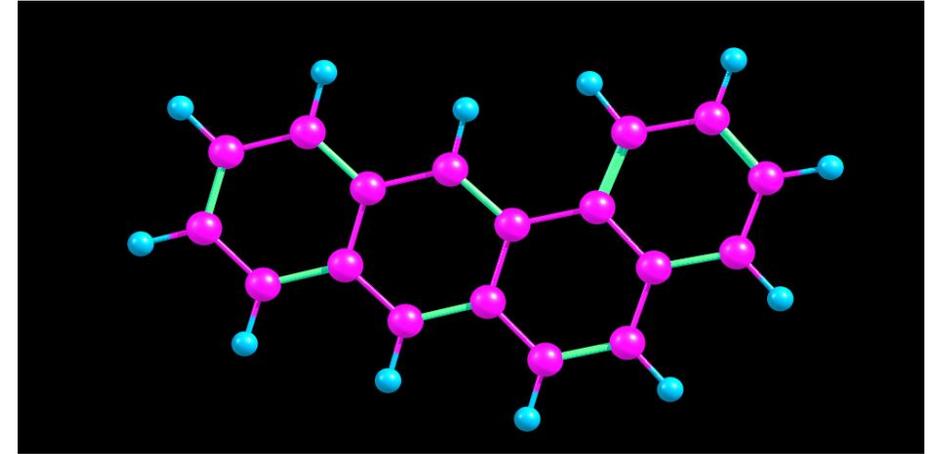
Formato .mol



Cálculo y obtención de estructuras 3D



ChemCraft





INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Tabla 1
Moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada

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

Nota. Compuestos orgánicos obtenidos de (Garcia-Montoto et al., 2020; Liu et al., 2018; Pevneva et al., 2020)

Tabla 2

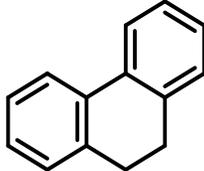
Moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida

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

Nota. Compuestos orgánicos obtenidos de (Sardar et al., 2012; Srinivas et al., 2019; Wang et al., 2016)

Tabla 3

Datos de 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. La tabla muestra propiedades químicas básicas del 9,10-dihidrofenantreno obtenido del programa ChemDraw Professional.

Tabla 4

Datos de propiedades químicas básicas de 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. La tabla muestra propiedades químicas básicas decano obtenido del programa ChemDraw Professional

Tabla 5

Datos de propiedades fisicoquímicas básicas

Propiedades fisicoquímicas				
Nombre	9,10- dihidrofenantreno	benceno	Buta-1,3-dieno	ciclohexano
Fórmula	$C_{14}H_{12}$	C_6H_6	C_4H_6	C_6H_{12}
Masa molecular	180,25	78,11	54,09	84,16
Número de átomos pesados	14	6	4	6
Número de átomos aromáticos pesados	12	6	0	0

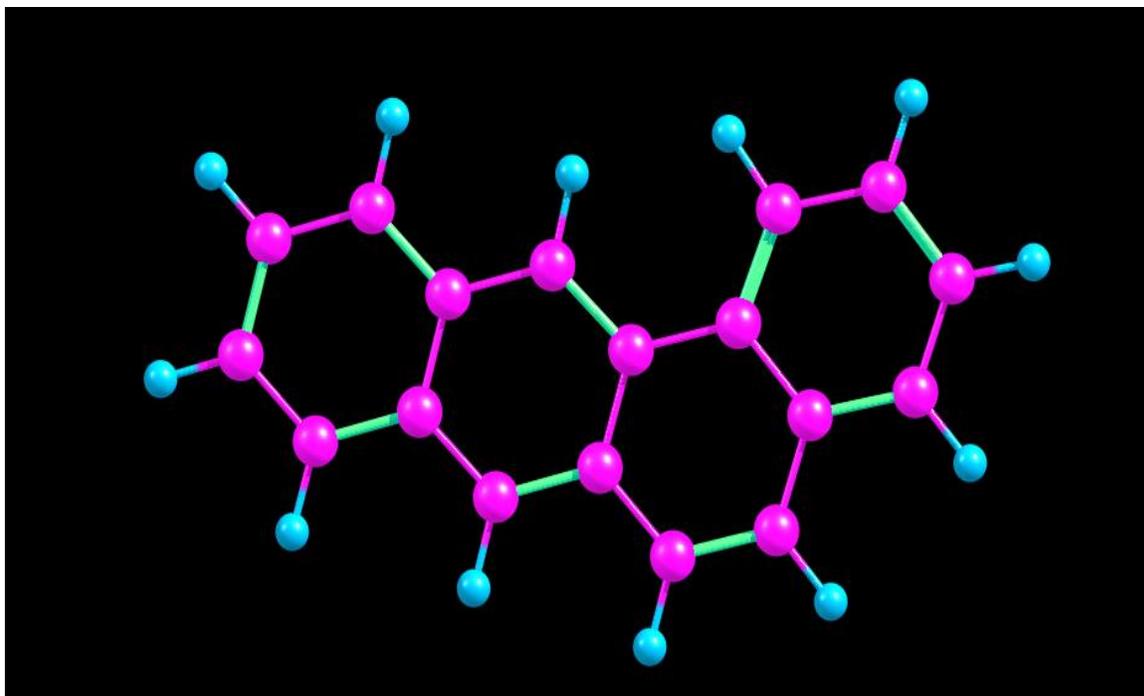
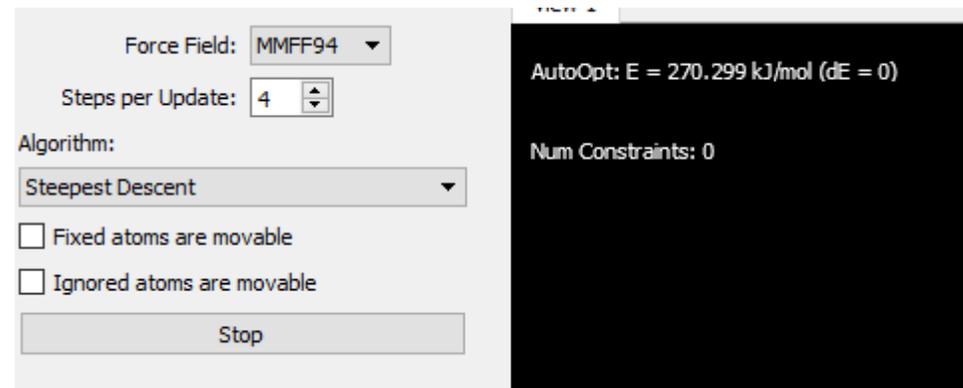


Tabla 7

Estructura 3D y energía de optimización del Benzoantraceno



Force Field: MMFF94

Steps per Update: 4

Algorithm:
Steepest Descent

Fixed atoms are movable

Ignored atoms are movable

Stop

AutoOpt: E = 270.299 kJ/mol (dE = 0)

Num Constraints: 0



INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

- 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

- 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.

GRACIAS POR SU ATENCIÓN



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

AUTOR:

Jessica Patricia Chiluisa Cando

TUTOR:

Ing. Fabián Mauricio Santana Romo, PhD.