



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 “reforma catalítica” 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

García Solano, María Camila y Ortega Gallegos, Myriam Lizeth

Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

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

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.

Latacunga, 14 de Abril del 2021



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 la Unidad de Integración Curricular, ***“Estudio in silico, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “reforma catalítica” 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 las señoritas García Solano, María Camila y Ortega Gallegos, Myriam Lizeth, el mismo que ha sido revisado en su totalidad, analizado por la herramienta de verificación de similitud de contenido; por lo tanto, cumple con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que lo sustente públicamente.

Latacunga, 14 de Abril de 2021.



Firmado electrónicamente por:
FABIAN
MAURICIO
SANTANA ROMO

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio, PhD.

C.C.: 180292513-9



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

Certificación urkund

Original

Document Information

Analyzed document	REFORMA CATALITICA.pdf (D101192829)
Submitted	4/10/2021 3:24:00 PM
Submitted by	Fabián Santana
Submitter email	fmsantana@espe.edu.ec
Similarity	0%
Analysis address	fmsantana.espe@analysis.urkund.com



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

Sources included in the report

W	URL: https://www.iasj.net/iasj/download/e1b9f84fa96c1f59 Fetched: 4/10/2021 3:25:00 PM		1
W	URL: https://doi.org/10.15517/ri.v27i2.27854 Fetched: 4/10/2021 3:25:00 PM		1
W	URL: http://www.scielo.org/bo/scielo.php?script=sci_abstract&pid=S2310-0265201900010000 ... Fetched: 4/10/2021 3:25:00 PM		2
W	URL: http://portal.amelica.org/ameli/jatsRepo/88/88868007/88868007.pdf Fetched: 4/10/2021 3:25:00 PM		1
W	URL: https://amazoniainvestiga.info/index.php/amazonia/article/view/596/563 Fetched: 4/10/2021 3:25:00 PM		1
W	URL: https://doi.org/10.18667/cienciaypoderaereo.643 Fetched: 4/10/2021 3:25:00 PM		1
W	URL: https://doi.org/10.1186/s13321-014-0037-3 Fetched: 4/10/2021 3:25:00 PM		1
W	URL: https://www.researchgate.net/publication/339721380_HISTORIA_DE_LOS_PROCESOS_DEL_RE ... Fetched: 3/30/2020 6:50:45 AM		2
W	URL: http://scielo.senescyt.gob.ec/pdf/ing/n19/1390-650X-ing-19-00051.pdf Fetched: 4/10/2021 3:25:00 PM		1
W	URL: http://www.indexmundi.com/commodities/?commodity=crude-oil-west-texas-intermediate ... Fetched: 4/10/2021 3:25:00 PM		1
W	URL: https://doi.org/10.1088/1742-6596/1060/1/012092 Fetched: 4/10/2021 3:25:00 PM		1



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
CARRERA DE PETROQUÍMICA

Responsabilidad de autoría

Nosotras, García Solano, María Camila y Ortega Gallegos, Myriam Lizeth, declaramos que el contenido, ideas y criterios del trabajo de la Unidad de Integración Curricular: ***“Estudio in silico, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “reforma catalítica” con énfasis en las estructuras químicas individuales para cada flujo, y el análisis de sus propiedades fisicoquímicas intrínsecas, configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intermoleculares entre sí”*** es de nuestra autoría y responsabilidad, cumpliendo con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, respetando los derechos intelectuales de terceros y referenciando las citas bibliográficas.

Consecuentemente el contenido de la investigación mencionado es veraz.

Latacunga, 14 de Abril de 2021.

Firma manuscrita en azul de María Camila García Solano.

García Solano, María Camila

C. C.:1718702143

Firma manuscrita en azul de Myriam Lizeth Ortega Gallegos.

Ortega Gallegos, Myriam Lizeth

C. C.:1718863887



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
CARRERA DE PETROQUÍMICA

Autorización de publicación

Nosotras, **García Solano, María Camila** con cédula de ciudadanía N° **1718702143** y **Ortega Gallegos, Myriam Lizeth** con cédula de ciudadanía N°**1718863887**, autorizamos a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el trabajo de la Unidad de Integración Curricular ***“Estudio in silico, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “reforma catalítica” con énfasis en las estructuras químicas individuales para cada flujo, y el análisis de sus propiedades fisicoquímicas intrínsecas, configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intermoleculares entre sí”***: en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de nuestra autoría son de nuestra responsabilidad.

Latacunga, 14 de Abril 2021.

Firma manuscrita en azul de María Camila García Solano.

García Solano, María Camila
C. C.:1718702143

Firma manuscrita en azul de Myriam Lizeth Ortega Gallegos.

Ortega Gallegos, Myriam Lizeth
C. C.:1718863887



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA CARRERA DE PETROQUÍMICA

Dedicatoria

Dedico esta tesis primeramente a Dios por darme la fortaleza para enfrentarme a la vida universitaria, de igual manera quiero dedicarla a mis padres Rocío Solano y Mario García, mi hermano Juancho y mi tía Eugenia, por su paciencia, esfuerzo, su apoyo incondicional y por ser el soporte durante toda mi carrera, y como último pero no menos importante a mis profesores, por compartir todos sus conocimientos, consejos y experiencias que me ayudaron a cumplir este sueño, y poder decir: ¡Lo logré!. Sin la ayuda de cada uno de ustedes no habría podido haber llegado tan lejos, gracias por su paciencia y amor. ¡Esto es para todos ustedes!

María Camila García

Este trabajo, está dedicado con todo mi cariño a mis padres Víctor Ortega, Rita Gallegos y a mi difunta madrina Elizabeth Briones por haberme cuidado desde pequeña, aunque hoy en día ya no esté con nosotros todo lo que me enseñó lo llevo en mi corazón, por haberme forjado como la persona que soy en la actualidad. Por todos los consejos, las enseñanzas y sobre todo por el amor que me han brindado. Por enseñarme que lo más importante es el estudio y los valores. Por darme la oportunidad de estudiar y obtener una carrera profesional.

A mis hermanos Maritza, Jhonny, Bryan, Mykel, Nahia y a mis sobrinos. A toda mi familia por estar incondicionalmente en cada momento de mi vida. A mi padrino Carlos Alberto por amarme como una hija y a toda la familia Puca por abrirme las puertas de su hogar.

Myriam Ortega



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS

INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE PETROQUÍMICA

Agradecimientos

A Dios por nuestras familias y amigos.

Agradecemos a nuestros padres por habernos apoyado en todo momento.

A la Universidad de las Fuerzas Armadas por darnos la oportunidad de estudiar y por ser nuestro segundo hogar. A nuestro director de Carrera PhD. Román Rodríguez por forjar nuestro carácter y por todos sus sabios consejos. A nuestro director de tesis Ing. Fabián Mauricio Santana Romo, PhD, por todo su esfuerzo, dedicación y paciencia; estamos agradecidas de todo corazón por habernos guiado durante el desarrollo del presente trabajo. A todos nuestros profesores que nos han brindado sus conocimientos durante toda la carrera, especialmente a la Ingeniera Catherine Donoso, a la Ingeniera Isabel Pazmiño, Químico Carlos Orbea, PhD. Román Rodríguez, por impulsarnos amar la carrera de Petroquímica.

A Karina Condolo por su amistad sincera, consejos, por brindarnos protección, amor y apoyo incondicional en la universidad.

A todas las personas que han sido parte de nuestra vida, a nuestros compañeros de universidad por enseñarnos el significado de la palabra compañerismo; gracias por el apoyo moral lo cual nos ha impulsado a culminar nuestra carrera profesional.

Todos los recuerdos de estos 5 años se quedarán en nuestros corazones.

Gracias a Todos.

Tabla de contenidos

Carátula	1
Certificación.....	2
Certificación urkund.....	3
Responsabilidad de autoría	4
Autorización de publicación	5
Dedicatoria.....	6
Agradecimientos	7
Tabla de contenidos	8
Índice de tablas	13
Índice de figuras.....	23
Resumen	44
Abstract.....	45
Generalidades.....	46
Introducción	46
Planteamiento del problema	46
Justificación e importancia	47
Objetivos	48
<i>Objetivo general</i>	48
<i>Objetivos específicos</i>	48
Variables.....	49
<i>Variables independientes</i>	49
<i>Variables dependientes</i>	49
Fundamentación teórica	50
Química Computacional.....	50
Propiedades fisicoquímicas de los compuestos químicos	50
<i>Alcanos</i>	50
<i>Hidrocarburos aromáticos</i>	51
<i>Peso molecular</i>	51
<i>Código SMILES</i>	51
<i>Fórmula molecular</i>	51
<i>Solubilidad</i>	52
<i>Lipofilia</i>	52
Nomenclatura.....	52
<i>Nomenclatura común</i>	52

<i>Nomenclatura IUPAC o sistemática</i>	52
<i>Nomenclatura Tradicional</i>	53
Optimización de estructuras por métodos computacionales	53
Bases de cálculo para cálculos teóricos	53
Configuración química	54
Conformación química	54
Fuerzas intermoleculares	55
<i>Fuerzas de van der Waals</i>	55
<i>Fuerzas dipolo-dipolo</i>	55
<i>Fuerzas de dispersión de London</i>	55
<i>Enlace por puente de hidrógeno</i>	56
Refinería de petróleo	56
Materia prima para refinerías	57
<i>Composición del petróleo crudo</i>	57
<i>Parafinas</i>	57
<i>Oleofinas</i>	57
<i>Naftenos</i>	58
<i>Aromáticos</i>	58
<i>Compuestos de azufre</i>	58
<i>Compuestos de oxígeno</i>	58
<i>Compuestos de nitrógeno</i>	59
<i>Compuestos metálicos</i>	59
<i>Asfaltenos</i>	59
<i>Resinas</i>	59
Composición de los productos	60
<i>Gas licuado de petróleo</i>	60
<i>Gasolina</i>	60
<i>Queroseno</i>	60
<i>Jet Fuel</i>	60
<i>Combustible diésel</i>	61
<i>Gasolina</i>	61
<i>Aceite combustible residual</i>	61
<i>Aceite lubricante</i>	61
<i>Asfalto</i>	62
<i>Coque de petróleo</i>	62
Principales procesos	62
<i>Procesos de separación física</i>	62

Destilación de crudo.....	62
Desasfaltado con disolvente.....	63
Extracción con disolvente.....	63
Desparafinado con solvente	63
<i>Procesos de conversión catalítica química.</i>	63
Reforma catalítica	63
Hidrotratamiento	64
Hidrocraqueo catalítico	64
Craqueo catalítico.....	64
Alquilación	64
Isomerización.....	65
<i>Procesos de conversión química térmica.</i>	65
Coquización retardada	65
Flexicoking.....	65
Visbreaking	65
Historia del reformado catalítico	66
Condiciones del proceso	66
<i>Presión</i>	66
<i>Temperatura</i>	67
<i>Velocidad espacial</i>	67
<i>Relación de hidrógeno a hidrocarburo</i>	67
Alimentación del reformado catalítico.	68
Pretratamiento de la Alimentación.	69
Separación y estabilización del producto	69
Reacciones del reformado	69
<i>Deshidrogenación de nafteno</i>	70
<i>Isomerización de naftenos y parafinas</i>	70
<i>Deshidrociclización de parafina</i>	70
<i>Hidrocraqueo de parafina</i>	71
<i>Hidrodesalquilación de alquil aromáticos</i>	71
Propiedades del reformado.....	71
<i>El número de octanos</i>	71
<i>Otras propiedades</i>	72
Catalizadores utilizados	72
<i>Metal</i>	72
<i>Soporte de alúmina</i>	72
<i>Catalizadores para unidades semiregenerativas</i>	73

<i>Catalizadores para unidades cíclicas</i>	73
Desactivación y regeneración de catalizadores	73
<i>Rejuvenecimiento del catalizador</i>	73
Energía MMFF94.	74
Hipótesis	74
Metodología de desarrollo del proyecto	75
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de reforma catalítica.....	75
<i>Búsqueda de datos internacionales</i>	75
<i>Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano</i>	75
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	75
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de reforma catalítica	76
<i>Búsqueda de datos internacionales</i>	76
<i>Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano</i>	76
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	76
Procesamiento y obtención de estructuras químicas 1D, 2D y propiedades químicas básicas	76
<i>Generación de estructuras químicas en 2D</i>	77
<i>Procesamiento de propiedades básicas</i>	80
<i>Generación automática de nomenclatura IUPAC</i>	82
<i>Generación automática del código SMILES</i>	84
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	85
Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas	86
<i>Estudio de la interfaz de la plataforma SwissADME</i>	86
<i>Procesamiento a través del código SMILES</i>	87
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	92
Cálculo y obtención de estructuras 3D	92
<i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D sin optimizar</i>	92
<i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D optimizadas</i>	94
<i>Elaboración de las imágenes con coordenadas 3D sin optimizar</i>	97
<i>Elaboración de las imágenes con coordenadas 3D optimizadas.</i>	99
<i>Reporte la energía de optimización</i>	101
Resultados y discusión.....	102
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de reforma catalítica.....	102

Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de reforma catalítica	108
Procesamiento y obtención de estructuras químicas 1D, 2D y propiedades químicas básicas	114
<i>Generación de estructuras químicas en 2D</i>	114
<i>Procesamiento de propiedades básicas</i>	128
<i>Generación automática de nomenclatura IUPAC</i>	175
<i>Generación automática del código SMILES</i>	182
Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas	189
<i>Tablas de las propiedades fisicoquímicas de moléculas</i>	189
<i>Tablas de la lipofilia de las moléculas</i>	202
<i>Tablas de la solubilidad del agua de las moléculas</i>	209
<i>Radar de biodisponibilidad de las moléculas</i>	222
Cálculo y obtención de estructuras 3D	302
<i>Figuras con coordenadas 3D sin optimizar</i>	302
<i>Figuras con coordenadas 3D optimizadas</i>	381
<i>Reporte la energía de optimización</i>	460
Conclusiones	467
Recomendaciones	469
Lista abreviaciones	470
Bibliografía	472
Anexos	478

Índice de tablas

Tabla 1 <i>Composición elemental de los crudos</i>	57
Tabla 2 <i>Componentes nafta pesada</i>	102
Tabla 3 <i>Componentes del reformado</i>	108
Tabla 4 <i>Componentes del Fuel Gas</i>	113
Tabla 5 <i>Componentes de GLP</i>	114
Tabla 6 <i>Generación de estructuras químicas en 2D</i>	114
Tabla 7 <i>Datos de las propiedades básicas del benceno</i>	128
Tabla 8 <i>Datos de las propiedades básicas del tolueno</i>	128
Tabla 9 <i>Datos de las propiedades básicas del etilbenceno</i>	129
Tabla 10 <i>Datos de las propiedades básicas del 1,4-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno</i> .	129
Tabla 11 <i>Datos de las propiedades básicas del 1,3-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno</i> .	129
Tabla 12 <i>Datos de las propiedades básicas del 1,2-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno</i> .	129
Tabla 13 <i>Datos de las propiedades básicas del 1,2,4-trimetilbenceno</i>	129
Tabla 14 <i>Datos de las propiedades básicas del 1,3,5-trimetilbenceno</i>	130
Tabla 15 <i>Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2-metilbenceno</i>	130
Tabla 16 <i>Datos de las propiedades básicas del 1-etil-3-metilbenceno</i>	130
Tabla 17 <i>Datos de las propiedades básicas del 1-etil-4-metilbenceno</i>	130
Tabla 18 <i>Datos de las propiedades básicas del propano</i>	130
Tabla 19 <i>Datos de las propiedades básicas del isobutano</i>	130
Tabla 20 <i>Datos de las propiedades básicas del n-butano</i>	131
Tabla 21 <i>Datos de las propiedades básicas del isopentano</i>	131
Tabla 22 <i>Datos de las propiedades básicas del n-Pentano</i>	131
Tabla 23 <i>Datos de las propiedades básicas del ciclopentano</i>	131
Tabla 24 <i>Datos de las propiedades básicas del hexano</i>	131
Tabla 25 <i>Datos de las propiedades básicas del 2-metilpentano</i>	132
Tabla 26 <i>Datos de las propiedades básicas del 2,3-dimetilbutano</i>	132
Tabla 27 <i>Datos de las propiedades básicas del 2,2-dimetilbutano</i>	132
Tabla 28 <i>Datos de las propiedades básicas del 3-metilpentano</i>	132
Tabla 29 <i>Datos de las propiedades básicas del n-hexano</i>	132
Tabla 30 <i>Datos de las propiedades básicas del metilciclopentano</i>	133
Tabla 31 <i>Datos de las propiedades básicas del ciclohexano</i>	133
Tabla 32 <i>Datos de las propiedades básicas del heptano</i>	133
Tabla 33 <i>Datos de las propiedades básicas del 2,4-dimetilpentano</i>	133
Tabla 34 <i>Datos de las propiedades básicas del 2,3-dimetilpentano</i>	133

Tabla 35 Datos de las propiedades básicas del 3-etilpentano.....	134
Tabla 36 Datos de las propiedades básicas del 2-metilhexano.....	134
Tabla 37 Datos de las propiedades básicas del 3-metilhexano.....	134
Tabla 38 Datos de las propiedades básicas del 2,2,3-trimetilbutano.....	134
Tabla 39 Datos de las propiedades básicas del 2,2-dimetilpentano.....	134
Tabla 40 Datos de las propiedades básicas del 3,3-dimetipentano.....	135
Tabla 41 Datos de las propiedades básicas del n-heptano.....	135
Tabla 42 Datos de las propiedades básicas del 1,2-dimetilciclopentano.....	135
Tabla 43 Datos de las propiedades básicas del 1,3-dimetilciclopentano.....	135
Tabla 44 Datos de las propiedades básicas del 1-etilciclopentano.....	135
Tabla 45 Datos de las propiedades básicas del metilciclohexano.....	136
Tabla 46 Datos de las propiedades básicas del octano.....	136
Tabla 47 Datos de las propiedades básicas del tetrametilbutano.....	136
Tabla 48 Datos de las propiedades básicas del 2,2,3-trimetilpentano.....	136
Tabla 49 Datos de las propiedades básicas del 2,2,4-trimetilpentano.....	136
Tabla 50 Datos de las propiedades básicas del 2,3,3-trimetilpentano.....	137
Tabla 51 Datos de las propiedades básicas del 2,3,4-trimetilpentano.....	137
Tabla 52 Datos de las propiedades básicas del 3-etil-2-metilpentano.....	137
Tabla 53 Datos de las propiedades básicas del 3-etil-3-metilpentano.....	137
Tabla 54 Datos de las propiedades básicas del 2,2-dimetilhexano.....	137
Tabla 55 Datos de las propiedades básicas del 2,3-dimetilhexano.....	138
Tabla 56 Datos de las propiedades básicas del 2,4-dimetilhexano.....	138
Tabla 57 Datos de las propiedades básicas del 2,5-dimetilhexano.....	138
Tabla 58 Datos de las propiedades básicas del 3,3-dimetilhexano.....	138
Tabla 59 Datos de las propiedades básicas del 3,4-dimetilhexano.....	138
Tabla 60 Datos de las propiedades básicas del etilhexano.....	139
Tabla 61 Datos de las propiedades básicas del 2-metilheptano.....	139
Tabla 62 Datos de las propiedades básicas del 3-metilheptano.....	139
Tabla 63 Datos de las propiedades básicas del 4-metilheptano.....	139
Tabla 64 Datos de las propiedades básicas del n-octano.....	139
Tabla 65 Datos de las propiedades básicas del 1,2,3-trimetilciclopentano.....	140
Tabla 66 Datos de las propiedades básicas del 1,2,4-trimetilciclopentano.....	140
Tabla 67 Datos de las propiedades básicas del 1-propilciclopentano.....	140
Tabla 68 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-3metilciclopentano.....	140
Tabla 69 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2-metilciclopentano.....	140
Tabla 70 Datos de las propiedades básicas del 1,2-dimetilciclohexano.....	141
Tabla 71 Datos de las propiedades básicas del 1,3-dimetilciclohexano.....	141

Tabla 72 Datos de las propiedades básicas del 1,4-dimetilciclohexano	141
Tabla 73 Datos de las propiedades básicas del 1-etilciclohexano	141
Tabla 74 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2-trimetilciclohexano	141
Tabla 75 Datos de las propiedades básicas del 1,1,3-trimetilciclohexano	142
Tabla 76 Datos de las propiedades básicas del 1,1,4-trimetilciclohexano	142
Tabla 77 Datos de las propiedades básicas del 1,2,3-trimetilciclohexano	142
Tabla 78 Datos de las propiedades básicas del 1,2,4-trimetilciclohexano	142
Tabla 79 Datos de las propiedades básicas del 1,3,5-trimetilciclohexano	142
Tabla 80 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2-metilciclohexano	143
Tabla 81 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-3-metilciclohexano	143
Tabla 82 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-4-metilciclohexano	143
Tabla 83 Datos de las propiedades básicas del 1-propilciclohexano	143
Tabla 84 Datos de las propiedades básicas del 1,2,3,4-tetrametilciclopentano	143
Tabla 85 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2-tetrametilciclopentano	144
Tabla 86 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,3-tetrametilciclopentano	144
Tabla 87 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,4-tetrametilciclopentano	144
Tabla 88 Datos de las propiedades básicas del 1,1,3,3-tetrametilciclopentano	144
Tabla 89 Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietilciclopentano	144
Tabla 90 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,3-dimetilciclopentano	145
Tabla 91 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,4-dimetilciclopentano	145
Tabla 92 Datos de las propiedades básicas del 1,3-dietilciclopentano	145
Tabla 93 Datos de las propiedades básicas del 2-metil-1-propilciclopentano	145
Tabla 94 Datos de las propiedades básicas del 3-metil-1-propilciclopentano	145
Tabla 95 Datos de las propiedades básicas del 1-butilciclopentano	146
Tabla 96 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,5-tetrametilciclopentano	146
Tabla 97 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2-metilciclopentano	146
Tabla 98 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-3-metilciclopentano	146
Tabla 99 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metilpropil)ciclopentano	146
Tabla 100 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-3,4-dimetilciclopentano	147
Tabla 101 Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)ciclopentano	147
Tabla 102 Datos de las propiedades básicas del nonano	147
Tabla 103 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,2-dimetilciclohexano	147
Tabla 104 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2-tetrametilciclohexano	147
Tabla 105 Datos de las propiedades básicas del 1,1,3,3-tetrametilciclohexano	148
Tabla 106 Datos de las propiedades básicas del 1,1,4,4-tetrametilciclohexano	148
Tabla 107 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-3,3-dimetilciclohexano	148
Tabla 108 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-4,4-dimetilciclohexano	148

Tabla 109 Datos de las propiedades básicas del 1,2,3,4-tetrametilciclohexano	148
Tabla 110 Datos de las propiedades básicas del 2-metil-1-propilciclohexano	149
Tabla 111 Datos de las propiedades básicas del 3-metil-1-propilciclohexano	149
Tabla 112 Datos de las propiedades básicas del 4-metil-1-propilciclohexano	149
Tabla 113 Datos de las propiedades básicas del butilciclohexano	149
Tabla 114 Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietilciclohexano	149
Tabla 115 Datos de las propiedades básicas del 1,3-dietilciclohexano	150
Tabla 116 Datos de las propiedades básicas del 1,4-dietilciclohexano	150
Tabla 117 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2- metilciclohexano	150
Tabla 118 Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)ciclohexano	150
Tabla 119 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-3- metilciclohexano	150
Tabla 120 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-4-metilciclohexano	151
Tabla 121 Datos de las propiedades básicas del 1,2,3,4,5- pentametilciclopentano	151
Tabla 122 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,3-pentametilciclopentano	151
Tabla 123 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,4-pentametilciclopentano	151
Tabla 124 Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-3-metilciclopentano	151
Tabla 125 Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-4-metilciclopentano	152
Tabla 126 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,3,3- pentametilciclopentano	152
Tabla 127 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,4,4- pentametilciclopentano	152
Tabla 128 Datos de las propiedades básicas del 1,3-dietil-4-metilciclopentano	152
Tabla 129 Datos de las propiedades básicas del 1,3-dietil-2-metilciclopentano	152
Tabla 130 Datos de las propiedades básicas del pentilciclopentano	153
Tabla 131 Datos de las propiedades básicas del 1-butil-2-metilciclopentano	153
Tabla 132 Datos de las propiedades básicas del 1-butil-3-metilciclopentano	153
Tabla 133 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,3,5-trimetilciclopentano .	153
Tabla 134 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,3,4-trimetilciclopentano .	153
Tabla 135 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2-etilciclopentano	154
Tabla 136 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-3-etilciclopentano	154

Tabla 137 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metilpropil)-2-metilciclopentano	154
Tabla 138 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metilpropil)-3-metilciclopentano	154
Tabla 139 Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)-2-metilciclopentano	154
Tabla 140 Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)-3-metilciclopentano	155
Tabla 141 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metilbutil)ciclopentano	155
Tabla 142 Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilbutil)ciclopentano	155
Tabla 143 Datos de las propiedades básicas del 1-(3-metilbutil)ciclopentano	155
Tabla 144 Datos de las propiedades básicas del 2-etil-1-propilciclopentano	155
Tabla 145 Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-2-metilciclopentano	156
Tabla 146 Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-3-metilciclopentano	156
Tabla 147 Datos de las propiedades básicas del 3-etil-1-propilciclopentano	156
Tabla 148 Datos de las propiedades básicas del decano	156
Tabla 149 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,2,6-trimetilciclohexano ..	156
Tabla 150 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-1,2,2-trimetilciclohexano ..	157
Tabla 151 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,3,3-trimetilciclohexano ..	157
Tabla 152 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,4,4-trimetilciclohexano ..	157
Tabla 153 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-3,4,4-trimetilciclohexano ..	157
Tabla 154 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-1,3,3-trimetilciclohexano ..	157
Tabla 155 Datos de las propiedades básicas del 1-etil-1,4,4-trimetilciclohexano ..	158
Tabla 156 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2,2-dimetilciclohexano	158
Tabla 157 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-4,4-dimetilciclohexano	158
Tabla 158 Datos de las propiedades básicas 1-(1-metiletil)-3,4-dimetilciclohexano	158
Tabla 159 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2,4-dimetilciclohexano	158
Tabla 160 Datos de las propiedades básicas del 1,2,3,4,5-pentametilciclohexano	159
Tabla 161 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,3,4-pentametilciclohexano	159
Tabla 162 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,4,5-pentametilciclohexano	159
Tabla 163 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,3-pentametilciclohexano	159

Tabla 164	<i>Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,5,5-pentametilciclohexano</i>	159
Tabla 165	<i>Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,3,3-pentametilciclohexano</i>	160
Tabla 166	<i>Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,4,4-pentametilciclohexano</i>	160
Tabla 167	<i>Datos de las propiedades básicas del 2,6-dimetil-1-propilciclohexano</i>	160
Tabla 168	<i>Datos de las propiedades básicas del 2,5-dimetil-1-propilciclohexano</i>	160
Tabla 169	<i>Datos de las propiedades básicas del 2,3-dimetil-1-propilciclohexano</i>	160
Tabla 170	<i>Datos de las propiedades básicas del 3,4-dimetil-1-propilciclohexano</i>	161
Tabla 171	<i>Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-3-metilciclohexano.....</i>	161
Tabla 172	<i>Datos de las propiedades básicas del 1,3-dietil-2-metilciclohexano.....</i>	161
Tabla 173	<i>Datos de las propiedades básicas del 1,4-dietil-3-metilciclohexano.....</i>	161
Tabla 174	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-4-etilciclohexano</i>	161
Tabla 175	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2-etilciclohexano</i>	162
Tabla 176	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-3-etilciclohexano</i>	162
Tabla 177	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2,3-dimetilciclohexano.....</i>	162
Tabla 178	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-2-metilciclohexano</i>	162
Tabla 179	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-3-metilciclohexano</i>	162
Tabla 180	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-4-metilciclohexano</i>	163
Tabla 181	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-3,3-dimetilciclohexano.....</i>	163
Tabla 182	<i>Datos de las propiedades básicas del pentilciclohexano</i>	163
Tabla 183	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metilbutil)ciclohexano</i>	163
Tabla 184	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilbutil)ciclohexano</i>	163
Tabla 185	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(3-metilbutil)ciclohexano</i>	164
Tabla 186	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(1,2-dimetilpropil)ciclohexano.....</i>	164
Tabla 187	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetilpropil)ciclohexano.....</i>	164
Tabla 188	<i>Datos de las propiedades básicas del 1-(2,2-dimetilpropil)ciclohexano.....</i>	164
Tabla 189	<i>Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,3,4,5-hexametilciclopentan</i>	164
Tabla 190	<i>Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,3,3-hexametilciclopentano</i>	165

Tabla 191 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,4,5-hexametilciclopentano	165
Tabla 192 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,3,4-hexametilciclopentano	165
Tabla 193 Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,3,5-hexametilciclopentano	165
Tabla 194 Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-3,4-dimetilciclopentano	165
Tabla 195 Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-1,2-dimetilciclopentano	166
Tabla 196 Datos de las propiedades básicas del 1,3-dietil-1,3-dimetilciclopentano	166
Tabla 197 Datos de las propiedades básicas del 1,2-dipropilciclopentano	166
Tabla 198 Datos de las propiedades básicas del 1,3-dipropilciclopentano	166
Tabla 199 Datos de las propiedades básicas del 3-etil-2-metil-1-propilciclopentano	166
Tabla 200 Datos de las propiedades básicas del 2-etil-3-metil-1-propilciclopentano	167
Tabla 201 Datos de las propiedades básicas del 2-etil-4-metil-1-propilciclopentano	167
Tabla 202 Datos de las propiedades básicas del 2-metil-1-pentilciclopentano	167
Tabla 203 Datos de las propiedades básicas del hexilciclopentano	167
Tabla 204 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metilpentil)ciclopentano	167
Tabla 205 Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpentil)ciclopentano	168
Tabla 206 Datos de las propiedades básicas del 1-(3-metilpentil)ciclopentano	168
Tabla 207 Datos de las propiedades básicas del 1-(4-metilpentil)ciclopentano	168
Tabla 208 Datos de las propiedades básicas del 1-(1,2-dimetilbutil)ciclopentano .	168
Tabla 209 Datos de las propiedades básicas del 1-(1,3-dimetilbutil)ciclopentano .	168
Tabla 210 Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetilbutil)ciclopentano .	169
Tabla 211 Datos de las propiedades básicas del 1-(2,2-dimetilbutil)ciclopentano .	169
Tabla 212 Datos de las propiedades básicas del 1-(3,3-dimetilbutil)ciclopentano .	169
Tabla 213 Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)-2,3-dimetilciclopentano	169
Tabla 214 Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)-2,4-dimetilciclopentano	169
Tabla 215 Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)-2,2-dimetilciclopentano	170

Tabla 216 Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)-3,3-dimetilciclopentano	170
Tabla 217 Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-2,2-dimetilciclopentano	170
Tabla 218 Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-3,3-dimetilciclopentano	170
Tabla 219 Datos de las propiedades básicas del 1,2,3-trietilciclopentano	170
Tabla 220 Datos de las propiedades básicas del 1,2,4-trietilciclopentano	171
Tabla 221 Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-4,4-dimetilciclopentano	171
Tabla 222 Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-3,3-dimetilciclopentano	171
Tabla 223 Datos de las propiedades básicas del 1-(1,2-dimetilpropil)-3-metilciclopentano	171
Tabla 224 Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2,3,5-trimetilciclopentano	171
Tabla 225 Datos de las propiedades básicas del 1-(1,2-dimetilpropil)-2-metilciclopentano	172
Tabla 226 Datos de las propiedades básicas del undecano	172
Tabla 227 Datos de las propiedades básicas del monóxido de carbono	172
Tabla 228 Datos de las propiedades básicas del dióxido de carbono	172
Tabla 229 Datos de las propiedades básicas del hidrógeno	172
Tabla 230 Datos de las propiedades básicas del nitrógeno	173
Tabla 231 Datos de las propiedades básicas del oxígeno	173
Tabla 232 Datos de las propiedades básicas del metano	173
Tabla 233 Datos de las propiedades básicas del etano	173
Tabla 234 Datos de las propiedades básicas del etileno	173
Tabla 235 Datos de las propiedades básicas del propileno	174
Tabla 236 Datos de las propiedades básicas del trans-buteno	174
Tabla 237 Datos de las propiedades básicas del cis-buteno	174
Tabla 238 Datos de las propiedades básicas del neopentano	174
Tabla 239 Datos de las propiedades básicas del Sulfuro de hidrógeno	174
Tabla 240 Nomenclatura IUPAC molécula 1-33.	175
Tabla 241 Nomenclatura IUPAC molécula 34-70.	176
Tabla 242 Nomenclatura IUPAC molécula 71-106.	177
Tabla 243 Nomenclatura IUPAC molécula 107-142.	178
Tabla 244 Nomenclatura IUPAC molécula 143-178.	179

Tabla 245 <i>Nomenclatura IUPAC molécula 179-214</i>	180
Tabla 246 <i>Nomenclatura IUPAC molécula 215-238</i>	181
Tabla 247 <i>Nomenclatura código SMILES molécula 1-33</i>	182
Tabla 248 <i>Nomenclatura código SMILES molécula 34-70</i>	183
Tabla 249 <i>Nomenclatura código SMILES molécula 71-106</i>	184
Tabla 250 <i>Nomenclatura código SMILES molécula 107-142</i>	185
Tabla 251 <i>Nomenclatura código SMILES molécula 143-178</i>	186
Tabla 252 <i>Nomenclatura código SMILES molécula 179-214</i>	187
Tabla 253 <i>Nomenclatura código SMILES molécula 215-238</i>	188
Tabla 254. <i>Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 1-20</i>	190
Tabla 255. <i>Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 21-40</i>	191
Tabla 256. <i>Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 41-60</i>	192
Tabla 257. <i>Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 61-80</i>	193
Tabla 258. <i>Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 81-100</i>	194
Tabla 259. <i>Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 101-119</i>	195
Tabla 260. <i>Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 120-139</i>	196
Tabla 261. <i>Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 140-158</i>	197
Tabla 262. <i>Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 159-178</i>	198
Tabla 263. <i>Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 179-198</i>	199
Tabla 264. <i>Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 199-218</i>	200
Tabla 265. <i>Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 219-238</i>	201
Tabla 266. <i>Lipofilia de las moléculas 1-40</i>	202
Tabla 267. <i>Lipofilia de las moléculas 41-80</i>	204
Tabla 268. <i>Lipofilia de las moléculas 81-119</i>	205
Tabla 269. <i>Lipofilia de las moléculas 120-158</i>	206
Tabla 270. <i>Lipofilia de las moléculas 159-198</i>	207
Tabla 271. <i>Lipofilia de las moléculas 199-235</i>	208
Tabla 272. <i>Solubilidad del agua de las moléculas 1-20</i>	210
Tabla 273. <i>Solubilidad del agua de las moléculas 21-40</i>	211
Tabla 274. <i>Solubilidad del agua de las moléculas 41-60</i>	212
Tabla 275. <i>Solubilidad del agua de las moléculas 61-80</i>	213
Tabla 276. <i>Solubilidad del agua de las moléculas 81-100</i>	214
Tabla 277. <i>Solubilidad del agua de las moléculas 101-119</i>	215
Tabla 278. <i>Solubilidad del agua de las moléculas 120-139</i>	216
Tabla 279. <i>Solubilidad del agua de las moléculas 140-158</i>	217
Tabla 280. <i>Solubilidad del agua de las moléculas 159-178</i>	218
Tabla 281. <i>Solubilidad del agua de las moléculas 179-198</i>	219

Tabla 282. <i>Solubilidad del agua de las moléculas 199-218</i>	220
Tabla 283. <i>Solubilidad del agua de las moléculas 219-238</i>	221
Tabla 284 <i>Reporte de la energía de optimización molécula 1-33</i>	460
Tabla 285 <i>Reporte de la energía de optimización molécula 34-70</i>	461
Tabla 286 <i>Reporte de la energía de optimización molécula 71-106</i>	462
Tabla 287 <i>Reporte de la energía de optimización molécula 107-142</i>	463
Tabla 288 <i>Reporte de la energía de optimización molécula 143-178</i>	464
Tabla 289 <i>Reporte de la energía de optimización molécula 179-214</i>	465
Tabla 290 <i>Reporte de la energía de optimización molécula 215-238</i>	466

Índice de figuras

Figura 1 Refinería moderna de petróleo.	56
Figura 2. Pestaña de "Structure".....	77
Figura 3. Pestaña "Apply Document Setting From".....	78
Figura 4. Pestaña de "File".	78
Figura 5. Ventana "Document Setting" opción "Drawing".....	79
Figura 6. Ventana "Document Setting" opción "Atom Labels".....	79
Figura 7. Pestaña "Atom".....	80
Figura 8. Estructura en 2D.....	80
Figura 9. Ventana "View".....	81
Figura 10. Pestaña "Analysis".....	81
Figura 11. Estructura en 2D.....	82
Figura 12. Ventana "Analysis".....	82
Figura 13. Estructura en 2D con nombre IUPAC.....	83
Figura 14. Ventana "File".....	83
Figura 15. Ventana para guardar.....	83
Figura 16. Pestaña "Edit".....	84
Figura 17. Ventana "Copy As" opción "SMILES".....	84
Figura 18. Block de notas con los códigos "SMILES".....	85
Figura 19. Ventana para guardar el archivo de los códigos "SMILES".....	85
Figura 20. Ventana de cada molécula procesada.	87
Figura 21. Ventana de SwissADME.....	88
Figura 22. Ventana "Retrive data".....	89
Figura 23. Ventana "Obtener datos externos".....	89
Figura 24. Ventana para importar el archivo descargado de "SwissADME".....	89
Figura 25. Ventana de Asistente para importar texto.....	90
Figura 26. Ventana Asistente para importar texto opción.....	90
Figura 27. Ventana Importar datos.....	91
Figura 28. Ventana de Excel.....	91
Figura 29. Ícono del software Avogadro.....	93
Figura 30. Ventana "Open file".....	93
Figura 31. Ventana para agregar coordenadas en 3D.....	94
Figura 32. Benceno en 3D sin optimizar.....	94
Figura 33. Ícono del software Avogadro.....	95
Figura 34. Ventana Open file.....	95
Figura 35. Ventana para agregar las coordenadas en 3D.....	96
Figura 36. Benceno en 3D optimizado.....	96

Figura 37. <i>Ícono para obtener la energía de optimización</i>	96
Figura 38. <i>Ventana "Auto Optimization Settings"</i>	97
Figura 39. <i>Ventana con el valor de la energía de optimización.</i>	97
Figura 40. <i>Ícono de chemcraft</i>	98
Figura 41. <i>Ventana "File" opción "Open"</i>	98
Figura 42. <i>Ventana "File" opción Save as imagen"</i>	99
Figura 43. <i>Ventana "Save file" opción "Jpeg"</i>	99
Figura 44. <i>Ícono de Chemcraft</i>	100
Figura 45. <i>Ventana "Display" opción "Spartan Style"</i>	100
Figura 46. <i>Ventana "File" opción "Save imagen"</i>	101
Figura 47. <i>Ventana "Save picture" opción "Jpeg"</i>	101
Figura 48. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 1</i>	222
Figura 49. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 2</i>	222
Figura 50. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 3</i>	223
Figura 51. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 4</i>	223
Figura 52. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 5</i>	223
Figura 53. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 6</i>	224
Figura 54. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 7</i>	224
Figura 55. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 8</i>	224
Figura 56. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 9</i>	225
Figura 57. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 10</i>	225
Figura 58. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 11</i>	225
Figura 59. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 12</i>	226
Figura 60. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 13</i>	226
Figura 61. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 14</i>	226
Figura 62. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 15</i>	227
Figura 63. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 16</i>	227
Figura 64. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 17</i>	227
Figura 65. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 18</i>	228
Figura 66. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 19</i>	228
Figura 67. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 20</i>	228
Figura 68. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 21</i>	229
Figura 69. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 22</i>	229
Figura 70. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 23</i>	229
Figura 71. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 24</i>	230
Figura 72. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 25</i>	230
Figura 73. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 26</i>	230

Figura 74. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 27</i>	231
Figura 75. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 28</i>	231
Figura 76. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 29</i>	231
Figura 77. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 30</i>	232
Figura 78. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 31</i>	232
Figura 79. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 32</i>	232
Figura 80. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 33</i>	233
Figura 81. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 34</i>	233
Figura 82. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 35</i>	233
Figura 83. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 36</i>	234
Figura 84. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 37</i>	234
Figura 85. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 38</i>	234
Figura 86. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 39</i>	235
Figura 87. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 40</i>	235
Figura 88. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 41</i>	235
Figura 89. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 42</i>	236
Figura 90. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 43</i>	236
Figura 91. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 44</i>	236
Figura 92. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 45</i>	237
Figura 93. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 46</i>	237
Figura 94. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 47</i>	237
Figura 95. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 48</i>	238
Figura 96. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 49</i>	238
Figura 97. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 50</i>	238
Figura 98. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 51</i>	239
Figura 99. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 52</i>	239
Figura 100. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 53</i>	239
Figura 101. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 54</i>	240
Figura 102. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 55</i>	240
Figura 103. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 56</i>	240
Figura 104. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 57</i>	241
Figura 105. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 58</i>	241
Figura 106. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 59</i>	241
Figura 107. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 60</i>	242
Figura 108. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 61</i>	242
Figura 109. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 62</i>	242
Figura 110. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 63</i>	243

Figura 111. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 64</i>	243
Figura 112. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 65</i>	243
Figura 113. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 66</i>	244
Figura 114. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 67</i>	244
Figura 115. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 68</i>	244
Figura 116. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 69</i>	245
Figura 117. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 70</i>	245
Figura 118. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 71</i>	245
Figura 119. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 72</i>	246
Figura 120. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 73</i>	246
Figura 121. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 74</i>	246
Figura 122. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 75</i>	247
Figura 123. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 76</i>	247
Figura 124. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 77</i>	247
Figura 125. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 78</i>	248
Figura 126. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 79</i>	248
Figura 127. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 80</i>	248
Figura 128. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 81</i>	249
Figura 129. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 82</i>	249
Figura 130. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 83</i>	249
Figura 131. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 84</i>	250
Figura 132. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 85</i>	250
Figura 133. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 86</i>	250
Figura 134. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 87</i>	251
Figura 135. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 88</i>	251
Figura 136. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 89</i>	251
Figura 137. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 90</i>	252
Figura 138. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 91</i>	252
Figura 139. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 92</i>	252
Figura 140. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 93</i>	253
Figura 141. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 94</i>	253
Figura 142. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 95</i>	253
Figura 143. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 96</i>	254
Figura 144. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 97</i>	254
Figura 145. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 98</i>	254
Figura 146. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 99</i>	255
Figura 147. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 100</i>	255

Figura 148. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 101</i>	255
Figura 149. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 102</i>	256
Figura 150. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 103</i>	256
Figura 151. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 104</i>	256
Figura 152. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 105</i>	257
Figura 153. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 106</i>	257
Figura 154. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 107</i>	257
Figura 155. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 108</i>	258
Figura 156. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 109</i>	258
Figura 157. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 110</i>	258
Figura 158. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 111</i>	259
Figura 159. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 112</i>	259
Figura 160. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 113</i>	259
Figura 161. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 114</i>	260
Figura 162. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 115</i>	260
Figura 163. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 116</i>	260
Figura 164. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 117</i>	261
Figura 165. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 118</i>	261
Figura 166. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 119</i>	261
Figura 167. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 120</i>	262
Figura 168. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 121</i>	262
Figura 169. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 122</i>	262
Figura 170. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 123</i>	263
Figura 171. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 124</i>	263
Figura 172. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 125</i>	263
Figura 173. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 126</i>	264
Figura 174. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 127</i>	264
Figura 175. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 128</i>	264
Figura 176. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 129</i>	265
Figura 177. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 130</i>	265
Figura 178. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 131</i>	265
Figura 179. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 132</i>	266
Figura 180. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 133</i>	266
Figura 181. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 134</i>	266
Figura 182. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 135</i>	267
Figura 183. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 136</i>	267
Figura 184. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 137</i>	267

Figura 185. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 138</i>	268
Figura 186. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 139</i>	268
Figura 187. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 140</i>	268
Figura 188. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 141</i>	269
Figura 189. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 142</i>	269
Figura 190. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 143</i>	269
Figura 191. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 144</i>	270
Figura 192. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 145</i>	270
Figura 193. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 146</i>	270
Figura 194. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 147</i>	271
Figura 195. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 148</i>	271
Figura 196. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 149</i>	271
Figura 197. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 150</i>	272
Figura 198. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 151</i>	272
Figura 199. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 152</i>	272
Figura 200. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 153</i>	273
Figura 201. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 154</i>	273
Figura 202. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 155</i>	273
Figura 203. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 156</i>	274
Figura 204. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 157</i>	274
Figura 205. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 158</i>	274
Figura 206. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 159</i>	275
Figura 207. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 160</i>	275
Figura 208. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 161</i>	275
Figura 209. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 162</i>	276
Figura 210. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 163</i>	276
Figura 211. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 164</i>	276
Figura 212. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 165</i>	277
Figura 213. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 166</i>	277
Figura 214. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 167</i>	277
Figura 215. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 168</i>	278
Figura 216. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 169</i>	278
Figura 217. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 170</i>	278
Figura 218. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 171</i>	279
Figura 219. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 172</i>	279
Figura 220. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 173</i>	279
Figura 221. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 174</i>	280

Figura 222. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 175</i>	280
Figura 223. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 176</i>	280
Figura 224. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 177</i>	281
Figura 225. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 178</i>	281
Figura 226. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 179</i>	281
Figura 227. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 180</i>	282
Figura 228. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 181</i>	282
Figura 229. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 182</i>	282
Figura 230. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 183</i>	283
Figura 231. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 184</i>	283
Figura 232. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 185</i>	283
Figura 233. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 186</i>	284
Figura 234. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 187</i>	284
Figura 235. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 188</i>	284
Figura 236. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 189</i>	285
Figura 237. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 190</i>	285
Figura 238. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 191</i>	285
Figura 239. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 192</i>	286
Figura 240. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 193</i>	286
Figura 241. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 194</i>	286
Figura 242. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 195</i>	287
Figura 243. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 196</i>	287
Figura 244. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 197</i>	287
Figura 245. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 198</i>	288
Figura 246. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 199</i>	288
Figura 247. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 200</i>	288
Figura 248. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 201</i>	289
Figura 249. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 202</i>	289
Figura 250. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 203</i>	289
Figura 251. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 204</i>	290
Figura 252. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 205</i>	290
Figura 253. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 206</i>	290
Figura 254. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 207</i>	291
Figura 255. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 208</i>	291
Figura 256. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 209</i>	291
Figura 257. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 210</i>	292
Figura 258. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 211</i>	292

Figura 259. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 212</i>	292
Figura 260. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 213</i>	293
Figura 261. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 214</i>	293
Figura 262. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 215</i>	293
Figura 263. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 216</i>	294
Figura 264. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 217</i>	294
Figura 265. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 218</i>	294
Figura 266. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 219</i>	295
Figura 267. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 220</i>	295
Figura 268. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 221</i>	295
Figura 269. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 222</i>	296
Figura 270. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 223</i>	296
Figura 271. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 224</i>	296
Figura 272. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 225</i>	297
Figura 273. <i>nRadar de biodisponibilidad de la molécula 226</i>	297
Figura 274. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 227</i>	297
Figura 275. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 228</i>	298
Figura 276. Radar <i>de biodisponibilidad de la molécula 229</i>	298
Figura 277. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 230</i>	298
Figura 278. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 231</i>	299
Figura 279. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 232</i>	299
Figura 280. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 233</i>	299
Figura 281. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 234</i>	300
Figura 282. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 235</i>	300
Figura 283. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 236</i>	300
Figura 284. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 237</i>	301
Figura 285. <i>Radar de biodisponibilidad de la molécula 238</i>	301
Figura 286. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 1.</i>	302
Figura 287. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 2.</i>	302
Figura 288. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 3.</i>	303
Figura 289. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 4.</i>	303
Figura 290. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 5.</i>	303
Figura 291. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 6.</i>	304
Figura 292. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 7.</i>	304
Figura 293. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 8.</i>	304
Figura 294. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 9.</i>	305
Figura 295. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 10.</i>	305

Figura 296. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 11.</i>	305
Figura 297. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 12.</i>	306
Figura 298. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 13.</i>	306
Figura 299. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 14.</i>	306
Figura 300. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 15.</i>	307
Figura 301. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 16.</i>	307
Figura 302. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 17.</i>	307
Figura 303. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 18.</i>	308
Figura 304. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 19.</i>	308
Figura 305. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 20.</i>	308
Figura 306. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 21</i>	309
Figura 307. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 22.</i>	309
Figura 308. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 23.</i>	309
Figura 309. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 24.</i>	310
Figura 310. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 25.</i>	310
Figura 311. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 26.</i>	310
Figura 312. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 27.</i>	311
Figura 313. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 28.</i>	311
Figura 314. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 29.</i>	311
Figura 315. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 30.</i>	312
Figura 316. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 31.</i>	312
Figura 317. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 32.</i>	312
Figura 318. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 33.</i>	313
Figura 319. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 34.</i>	313
Figura 320. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 35.</i>	313
Figura 321. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 36.</i>	314
Figura 322. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 37.</i>	314
Figura 323. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 38.</i>	314
Figura 324. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 39.</i>	315
Figura 325. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 40.</i>	315
Figura 326. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 41.</i>	315
Figura 327. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 42.</i>	316
Figura 328. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 43.</i>	316
Figura 329. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 44</i>	316
Figura 330. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 45.</i>	317
Figura 331. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 46.</i>	317
Figura 332. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 47.</i>	317

Figura 333. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 48.</i>	318
Figura 334. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 49.</i>	318
Figura 335. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 50.</i>	318
Figura 336. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 51.</i>	319
Figura 337. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 52.</i>	319
Figura 338. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 53.</i>	319
Figura 339. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 54.</i>	320
Figura 340. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 55.</i>	320
Figura 341. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 56.</i>	320
Figura 342. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 57.</i>	321
Figura 343. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 58.</i>	321
Figura 344. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 59.</i>	321
Figura 345. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 60.</i>	322
Figura 346. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 61.</i>	322
Figura 347. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 62.</i>	322
Figura 348. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 63.</i>	323
Figura 349. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 64.</i>	323
Figura 350. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 65.</i>	323
Figura 351. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 66.</i>	324
Figura 352. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 67.</i>	324
Figura 353. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 68.</i>	324
Figura 354. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 69.</i>	325
Figura 355. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 70.</i>	325
Figura 356. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 71.</i>	325
Figura 357. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 72.</i>	326
Figura 358. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 73.</i>	326
Figura 359. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 74.</i>	326
Figura 360. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 75.</i>	327
Figura 361. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 76.</i>	327
Figura 362. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 77.</i>	327
Figura 363. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 78.</i>	328
Figura 364. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 79.</i>	328
Figura 365. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 80.</i>	328
Figura 366. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 81.</i>	329
Figura 367. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 82.</i>	329
Figura 368. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 83.</i>	329
Figura 369. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 84.</i>	330

Figura 370. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 85.</i>	330
Figura 371. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 86.</i>	330
Figura 372. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 87.</i>	331
Figura 373. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 88.</i>	331
Figura 374. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 89.</i>	331
Figura 375. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 90.</i>	332
Figura 376. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 91.</i>	332
Figura 377. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 92.</i>	332
Figura 378. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 93.</i>	333
Figura 379. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 94.</i>	333
Figura 380. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 95.</i>	333
Figura 381. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 96.</i>	334
Figura 382. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 97.</i>	334
Figura 383. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 98.</i>	334
Figura 384. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 99.</i>	335
Figura 385. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 100.</i>	335
Figura 386. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 101.</i>	335
Figura 387. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 102.</i>	336
Figura 388. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 103.</i>	336
Figura 389. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 104.</i>	336
Figura 390. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 105.</i>	337
Figura 391. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 106.</i>	337
Figura 392. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 107.</i>	337
Figura 393. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 108.</i>	338
Figura 394. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 109.</i>	338
Figura 395. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 110.</i>	338
Figura 396. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 111.</i>	339
Figura 397. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 112.</i>	339
Figura 398. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 113.</i>	339
Figura 399. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 114.</i>	340
Figura 400. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 115.</i>	340
Figura 401. <i>Enestructura en 3D sin optimizar de la molécula 116.</i>	340
Figura 402. Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 117.	341
Figura 403. Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 118.	341
Figura 404. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 119.</i>	341
Figura 405. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 120.</i>	342
Figura 406. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 121.</i>	342

Figura 407. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 122</i>	342
Figura 408. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 123</i>	343
Figura 409. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 124</i>	343
Figura 410. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 125</i>	343
Figura 411. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 126</i>	344
Figura 412. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 127</i>	344
Figura 413. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 128</i>	344
Figura 414. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 129</i>	345
Figura 415. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 130</i>	345
Figura 416. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 131</i>	345
Figura 417. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 132</i>	346
Figura 418. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 133</i>	346
Figura 419. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 134</i>	346
Figura 420. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 135</i>	347
Figura 421. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 136</i>	347
Figura 422. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 137</i>	347
Figura 423. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 138</i>	348
Figura 424. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 139</i>	348
Figura 425. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 140</i>	348
Figura 426. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 141</i>	349
Figura 427. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 142</i>	349
Figura 428. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 143</i>	349
Figura 429. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 144</i>	350
Figura 430. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 145</i>	350
Figura 431. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 146</i>	350
Figura 432. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 147</i>	351
Figura 433. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 148</i>	351
Figura 434. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 149</i>	351
Figura 435. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 150</i>	352
Figura 436. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 151</i>	352
Figura 437. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 152</i>	352
Figura 438. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 153</i>	353
Figura 439. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 154</i>	353
Figura 440. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 155</i>	353
Figura 441. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 156</i>	354
Figura 442. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 157</i>	354
Figura 443. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 158</i>	354

Figura 444. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 159</i>	355
Figura 445. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 160</i>	355
Figura 446. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 161</i>	355
Figura 447. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 162</i>	356
Figura 448. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 163</i>	356
Figura 449. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 164</i>	356
Figura 450. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 165</i>	357
Figura 451. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 166</i>	357
Figura 452. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 167</i>	357
Figura 453. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 168</i>	358
Figura 454. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 169</i>	358
Figura 455. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 170</i>	358
Figura 456. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 171</i>	359
Figura 457. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 172</i>	359
Figura 458. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 173</i>	359
Figura 459. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 174</i>	360
Figura 460. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 175</i>	360
Figura 461. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 176</i>	360
Figura 462. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 177</i>	361
Figura 463. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 178</i>	361
Figura 464. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 179</i>	361
Figura 465. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 180</i>	362
Figura 466. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 181</i>	362
Figura 467. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 182</i>	362
Figura 468. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 183</i>	363
Figura 469. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 184</i>	363
Figura 470. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 185</i>	363
Figura 471. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 186</i>	364
Figura 472. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 187</i>	364
Figura 473. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 188</i>	364
Figura 474. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 189</i>	365
Figura 475. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 190</i>	365
Figura 476. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 191</i>	365
Figura 477. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 192</i>	366
Figura 478. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 193</i>	366
Figura 479. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 194</i>	366
Figura 480. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 195</i>	367

Figura 481. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 196.....</i>	367
Figura 482. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 197.....</i>	367
Figura 483. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 198.....</i>	368
Figura 484. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 199.....</i>	368
Figura 485. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 200.....</i>	368
Figura 486. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 201.....</i>	369
Figura 487. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 202.....</i>	369
Figura 488. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 203.....</i>	369
Figura 489. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 204.....</i>	370
Figura 490. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 205.....</i>	370
Figura 491. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 206.....</i>	370
Figura 492. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 207.....</i>	371
Figura 493. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 208.....</i>	371
Figura 494. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 209.....</i>	371
Figura 495. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 210.....</i>	372
Figura 496. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 211.....</i>	372
Figura 497. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 212.....</i>	372
Figura 498. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 213.....</i>	373
Figura 499. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 214.....</i>	373
Figura 500. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 215.....</i>	373
Figura 501. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 216.....</i>	374
Figura 502. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 217.....</i>	374
Figura 503. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 218.....</i>	374
Figura 504. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 219.....</i>	375
Figura 505. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 220.....</i>	375
Figura 506. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 221.....</i>	375
Figura 507. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 222.....</i>	375
Figura 508. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 223.....</i>	376
Figura 509. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 224.....</i>	376
Figura 510. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 225.....</i>	376
Figura 511. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 226.....</i>	376
Figura 512. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 227.....</i>	377
Figura 513. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 228.....</i>	377
Figura 514. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 229.....</i>	377
Figura 515. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 230.....</i>	378
Figura 516. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 231.....</i>	378
Figura 517. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 232.....</i>	378

Figura 518. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 233.</i>	379
Figura 519. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 234.</i>	379
Figura 520. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 235.</i>	379
Figura 521. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 236.</i>	380
Figura 522. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 237.</i>	380
Figura 523. <i>Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 238.</i>	380
Figura 524 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 1.</i>	381
Figura 525 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 2.</i>	381
Figura 526 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 3.</i>	382
Figura 527 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 4.</i>	382
Figura 528 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 5.</i>	382
Figura 529 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 6.</i>	383
Figura 530 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 7.</i>	383
Figura 531 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 8.</i>	383
Figura 532 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 9.</i>	384
Figura 533 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 10.</i>	384
Figura 534 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 11.</i>	384
Figura 535 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 12.</i>	385
Figura 536 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 13.</i>	385
Figura 537 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 14.</i>	385
Figura 538 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 15.</i>	386
Figura 539 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 16.</i>	386
Figura 540 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 17.</i>	386
Figura 541 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 18.</i>	387
Figura 542 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 19.</i>	387
Figura 543 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 20.</i>	387
Figura 544 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 21.</i>	388
Figura 545 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 22.</i>	388
Figura 546 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 23.</i>	388
Figura 547 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 24.</i>	389
Figura 548 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 25.</i>	389
Figura 549 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 26.</i>	389
Figura 550 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 27.</i>	390
Figura 551 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 28.</i>	390
Figura 552 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 29.</i>	390
Figura 553 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 30.</i>	391
Figura 554 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 31.</i>	391

Figura 555 Estructura en 3D optimizada de la molécula 32.	391
Figura 556 Estructura en 3D optimizada de la molécula 33.	392
Figura 557 Estructura en 3D optimizada de la molécula 34.	392
Figura 558 Estructura en 3D optimizada de la molécula 35.	392
Figura 559 Estructura en 3D optimizada de la molécula 36.	393
Figura 560 Estructura en 3D optimizada de la molécula 37.	393
Figura 561 Estructura en 3D optimizada de la molécula 38.	393
Figura 562 Estructura en 3D optimizada de la molécula 39.	394
Figura 563 Estructura en 3D optimizada de la molécula 40.	394
Figura 564 Estructura en 3D optimizada de la molécula 41.	394
Figura 565 Estructura en 3D optimizada de la molécula 42.	395
Figura 566 Estructura en 3D optimizada de la molécula 43.	395
Figura 567 Estructura en 3D optimizada de la molécula 44.	395
Figura 568 Estructura en 3D optimizada de la molécula 45.	396
Figura 569 Estructura en 3D optimizada de la molécula 46.	396
Figura 570 Estructura en 3D optimizada de la molécula 47.	396
Figura 571 Estructura en 3D optimizada de la molécula 48.	397
Figura 572 Estructura en 3D optimizada de la molécula 49.	397
Figura 573 Estructura en 3D optimizada de la molécula 50.	397
Figura 574 Estructura en 3D optimizada de la molécula 51.	398
Figura 575 Estructura en 3D optimizada de la molécula 52.	398
Figura 576 Estructura en 3D optimizada de la molécula 53.	398
Figura 577 Estructura en 3D optimizada de la molécula 54.	399
Figura 578 Estructura en 3D optimizada de la molécula 55.	399
Figura 579 Estructura en 3D optimizada de la molécula 56.	399
Figura 580 Estructura en 3D optimizada de la molécula 57.	400
Figura 581 Estructura en 3D optimizada de la molécula 58.	400
Figura 582 Estructura en 3D optimizada de la molécula 59.	400
Figura 583 Estructura en 3D optimizada de la molécula 60.	401
Figura 584 Estructura en 3D optimizada de la molécula 61.	401
Figura 585 Estructura en 3D optimizada de la molécula 62.	401
Figura 586 Estructura en 3D optimizada de la molécula 63.	402
Figura 587 Estructura en 3D optimizada de la molécula 64.	402
Figura 588 Estructura en 3D optimizada de la molécula 65.	402
Figura 589 Estructura en 3D optimizada de la molécula 66.	403
Figura 590 Estructura en 3D optimizada de la molécula 67.	403
Figura 591 Estructura en 3D optimizada de la molécula 68.	403

Figura 592 Estructura en 3D optimizada de la molécula 69.	404
Figura 593 Estructura en 3D optimizada de la molécula 70.	404
Figura 594 Estructura en 3D optimizada de la molécula 71.	404
Figura 595 Estructura en 3D optimizada de la molécula 72.	405
Figura 596 Estructura en 3D optimizada de la molécula 73.	405
Figura 597 Estructura en 3D optimizada de la molécula 74.	405
Figura 598 Estructura en 3D optimizada de la molécula 75.	406
Figura 599 Estructura en 3D optimizada de la molécula 76.	406
Figura 600 Estructura en 3D optimizada de la molécula 77.	406
Figura 601 Estructura en 3D optimizada de la molécula 78.	407
Figura 602 Estructura en 3D optimizada de la molécula 79.	407
Figura 603 Estructura en 3D optimizada de la molécula 80.	407
Figura 604 Estructura en 3D optimizada de la molécula 81.	408
Figura 605 Estructura en 3D optimizada de la molécula 82.	408
Figura 606 Estructura en 3D optimizada de la molécula 83.	408
Figura 607 Estructura en 3D optimizada de la molécula 84.	409
Figura 608 Estructura en 3D optimizada de la molécula 85.	409
Figura 609 Estructura en 3D optimizada de la molécula 86.	409
Figura 610 Estructura en 3D optimizada de la molécula 87.	410
Figura 611 Estructura en 3D optimizada de la molécula 88.	410
Figura 612 Estructura en 3D optimizada de la molécula 89.	410
Figura 613 Estructura en 3D optimizada de la molécula 90.	411
Figura 614 Estructura en 3D optimizada de la molécula 91.	411
Figura 615 Estructura en 3D optimizada de la molécula 92.	411
Figura 616 Estructura en 3D optimizada de la molécula 93.	412
Figura 617 Estructura en 3D optimizada de la molécula 94.	412
Figura 618 Estructura en 3D optimizada de la molécula 95.	412
Figura 619 Estructura en 3D optimizada de la molécula 96.	413
Figura 620 Estructura en 3D optimizada de la molécula 97.	413
Figura 621 Estructura en 3D optimizada de la molécula 98.	413
Figura 622 Estructura en 3D optimizada de la molécula 99.	414
Figura 623 Estructura en 3D optimizada de la molécula 100.	414
Figura 624 Estructura en 3D optimizada de la molécula 101.	414
Figura 625 Estructura en 3D optimizada de la molécula 102.	415
Figura 626 Estructura en 3D optimizada de la molécula 103.	415
Figura 627 Estructura en 3D optimizada de la molécula 104.	415
Figura 628 Estructura en 3D optimizada de la molécula 105.	416

Figura 629 Estructura en 3D optimizada de la molécula 106.	416
Figura 630 Estructura en 3D optimizada de la molécula 107.	416
Figura 631 Estructura en 3D optimizada de la molécula 108.	417
Figura 632 Estructura en 3D optimizada de la molécula 109.	417
Figura 633 Estructura en 3D optimizada de la molécula 110.	417
Figura 634 Estructura en 3D optimizada de la molécula 111.	418
Figura 635 Estructura en 3D optimizada de la molécula 112.	418
Figura 636 Estructura en 3D optimizada de la molécula 113.	418
Figura 637 Estructura en 3D optimizada de la molécula 114.	419
Figura 638 Estructura en 3D optimizada de la molécula 115.	419
Figura 639 Estructura en 3D optimizada de la molécula 116.	419
Figura 640 Estructura en 3D optimizada de la molécula 117.	420
Figura 641 Estructura en 3D optimizada de la molécula 118.	420
Figura 642 Estructura en 3D optimizada de la molécula 119.	420
Figura 643 Estructura en 3D optimizada de la molécula 120.	421
Figura 644 Estructura en 3D optimizada de la molécula 121.	421
Figura 645 Estructura en 3D optimizada de la molécula 122.	421
Figura 646 Estructura en 3D optimizada de la molécula 123.	422
Figura 647 Estructura en 3D optimizada de la molécula 124.	422
Figura 648 Estructura en 3D optimizada de la molécula 125.	422
Figura 649 Estructura en 3D optimizada de la molécula 126.	423
Figura 650 Estructura en 3D optimizada de la molécula 127.	423
Figura 651 Estructura en 3D optimizada de la molécula 128.	423
Figura 652 Estructura en 3D optimizada de la molécula 129.	424
Figura 653 Estructura en 3D optimizada de la molécula 130.	424
Figura 654 Estructura en 3D optimizada de la molécula 131.	424
Figura 655 Estructura en 3D optimizada de la molécula 132.	425
Figura 656 Estructura en 3D optimizada de la molécula 133.	425
Figura 657 Estructura en 3D optimizada de la molécula 134.	425
Figura 658 Estructura en 3D optimizada de la molécula 135.	426
Figura 659 Estructura en 3D optimizada de la molécula 136.	426
Figura 660 Estructura en 3D optimizada de la molécula 137.	426
Figura 661 Estructura en 3D optimizada de la molécula 138.	427
Figura 662 Estructura en 3D optimizada de la molécula 139.	427
Figura 663 Estructura en 3D optimizada de la molécula 140.	427
Figura 664 Estructura en 3D optimizada de la molécula 141.	428
Figura 665 Estructura en 3D optimizada de la molécula 142.	428

Figura 666 Estructura en 3D optimizada de la molécula 143.	428
Figura 667 Estructura en 3D optimizada de la molécula 144.	429
Figura 668 Estructura en 3D optimizada de la molécula 145.	429
Figura 669 Estructura en 3D optimizada de la molécula 146.	429
Figura 670 Estructura en 3D optimizada de la molécula 147.	430
Figura 671 Estructura en 3D optimizada de la molécula 148.	430
Figura 672 Estructura en 3D optimizada de la molécula 149.	430
Figura 673 Estructura en 3D optimizada de la molécula 150.	431
Figura 674 Estructura en 3D optimizada de la molécula 151.	431
Figura 675 Estructura en 3D optimizada de la molécula 152.	431
Figura 676 Estructura en 3D optimizada de la molécula 153.	432
Figura 677 Estructura en 3D optimizada de la molécula 154.	432
Figura 678 Estructura en 3D optimizada de la molécula 155.	432
Figura 679 Estructura en 3D optimizada de la molécula 156.	433
Figura 680 Estructura en 3D optimizada de la molécula 157.	433
Figura 681 Estructura en 3D optimizada de la molécula 158.	433
Figura 682 Estructura en 3D optimizada de la molécula 159.	434
Figura 683 Estructura en 3D optimizada de la molécula 160.	434
Figura 684 Estructura en 3D optimizada de la molécula 161.	434
Figura 685 Estructura en 3D optimizada de la molécula 162.	435
Figura 686 Estructura en 3D optimizada de la molécula 163.	435
Figura 687 Estructura en 3D optimizada de la molécula 164.	435
Figura 688 Estructura en 3D optimizada de la molécula 165.	436
Figura 689 Estructura en 3D optimizada de la molécula 166.	436
Figura 690 Estructura en 3D optimizada de la molécula 167.	436
Figura 691 Estructura en 3D optimizada de la molécula 168.	437
Figura 692 Estructura en 3D optimizada de la molécula 169.	437
Figura 693 Estructura en 3D optimizada de la molécula 170.	437
Figura 694 Estructura en 3D optimizada de la molécula 171.	438
Figura 695 Estructura en 3D optimizada de la molécula 172.	438
Figura 696 Estructura en 3D optimizada de la molécula 173.	438
Figura 697 Estructura en 3D optimizada de la molécula 174.	439
Figura 698 Estructura en 3D optimizada de la molécula 175.	439
Figura 699 Estructura en 3D optimizada de la molécula 176.	439
Figura 700 Estructura en 3D optimizada de la molécula 177.	440
Figura 701 Estructura en 3D optimizada de la molécula 178.	440
Figura 702 Estructura en 3D optimizada de la molécula 179.	440

Figura 703 Estructura en 3D optimizada de la molécula 180.	441
Figura 704 Estructura en 3D optimizada de la molécula 181.	441
Figura 705 Estructura en 3D optimizada de la molécula 182.	441
Figura 706 Estructura en 3D optimizada de la molécula 183.	442
Figura 707 Estructura en 3D optimizada de la molécula 184.	442
Figura 708 Estructura en 3D optimizada de la molécula 185.	442
Figura 709 Estructura en 3D optimizada de la molécula 186.	443
Figura 710 Estructura en 3D optimizada de la molécula 187.	443
Figura 711 Estructura en 3D optimizada de la molécula 188.	443
Figura 712 Estructura en 3D optimizada de la molécula 189.	444
Figura 713 Estructura en 3D optimizada de la molécula 190.	444
Figura 714 Estructura en 3D optimizada de la molécula 191.	444
Figura 715 Estructura en 3D optimizada de la molécula 192.	445
Figura 716 Estructura en 3D optimizada de la molécula 193.	445
Figura 717 Estructura en 3D optimizada de la molécula 194.	445
Figura 718 Estructura en 3D optimizada de la molécula 195.	446
Figura 719 Estructura en 3D optimizada de la molécula 196.	446
Figura 720 Estructura en 3D optimizada de la molécula 197.	446
Figura 721 Estructura en 3D optimizada de la molécula 198.	447
Figura 722 Estructura en 3D optimizada de la molécula 199.	447
Figura 723 Estructura en 3D optimizada de la molécula 200.	447
Figura 724 Estructura en 3D optimizada de la molécula 201.	448
Figura 725 Estructura en 3D optimizada de la molécula 202.	448
Figura 726 Estructura en 3D optimizada de la molécula 203.	448
Figura 727 Estructura en 3D optimizada de la molécula 204.	449
Figura 728 Estructura en 3D optimizada de la molécula 205.	449
Figura 729 Estructura en 3D optimizada de la molécula 206.	449
Figura 730 Estructura en 3D optimizada de la molécula 207.	450
Figura 731 Estructura en 3D optimizada de la molécula 208.	450
Figura 732 Estructura en 3D optimizada de la molécula 209.	450
Figura 733 Estructura en 3D optimizada de la molécula 210.	451
Figura 734 Estructura en 3D optimizada de la molécula 211.	451
Figura 735 Estructura en 3D optimizada de la molécula 212.	451
Figura 736 Estructura en 3D optimizada de la molécula 213.	452
Figura 737 Estructura en 3D optimizada de la molécula 214.	452
Figura 738 Estructura en 3D optimizada de la molécula 215.	452
Figura 739 Estructura en 3D optimizada de la molécula 216.	453

Figura 740 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 217.</i>	453
Figura 741 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 218.</i>	453
Figura 742 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 219.</i>	454
Figura 743 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 220.</i>	454
Figura 744 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 221.</i>	454
Figura 745 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 222.</i>	454
Figura 746 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 223.</i>	455
Figura 747 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 224.</i>	455
Figura 748 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 225.</i>	455
Figura 749 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 226.</i>	455
Figura 750 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 227.</i>	456
Figura 751 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 228.</i>	456
Figura 752 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 229.</i>	456
Figura 753 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 229.</i>	457
Figura 754 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 231.</i>	457
Figura 755 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 232.</i>	457
Figura 756 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 233.</i>	458
Figura 757 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 234.</i>	458
Figura 758 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 235.</i>	458
Figura 759 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 236.</i>	459
Figura 760 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 237.</i>	459
Figura 761 <i>Estructura en 3D optimizada de la molécula 238.</i>	459

Resumen

Esta investigación nace del estudio de la refinación del petróleo, el cual es tratado mediante diferentes procesos para la producción de los derivados comerciales, uno de estos procesos es la reforma catalítica, su objetivo principal es aumentar el número de octano de la nafta pesada. Esta investigación está orientada a contribuir a la ciencia, a la ingeniería y a toda la sociedad por medio de un estudio teórico computacional de las corrientes tanto de ingreso y de salida de una refinería de petróleo, abordando principalmente el proceso de “reforma catalítica”, tomando en cuenta las estructuras químicas individuales para cada uno de los flujos, análisis de sus propiedades fisicoquímicas intrínsecas, configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intermoleculares entre sí. Se estableció una lista de las potenciales moléculas químicas de origen orgánico presentes en la nafta pesada, el reformado, *fuel gas* y *GLP*. A través de la utilización de programas computacionales de simulación y proyección, se pudo obtener las propiedades básicas, estructura química 2D, código SMILES, propiedades fisicoquímicas, lipofilia, solubilidad con el agua, radar de biodisponibilidad, las estructuras 3D optimizadas y sin optimizar y la energía de optimización para todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica.

Palabras clave:

- **REFINACIÓN DE PETRÓLEO**
- **REFORMA CATALÍTICA**
- **IN SILICO**
- **OPTIMIZACIÓN**
- **INTERACCIONES INTERMOLECULARES**

Abstract

This research arises from the study of petroleum refining, which is refined by means of different processes for the production of commercial derivatives, one of these processes is the catalytic reforming, its objective is to increase the octane number of heavy naphtha. This research is oriented to contribute to science, engineering and society by means of a theoretical computational study of the inlet and outlet streams of a petroleum refinery, mainly addressing the process of "catalytic reforming", considering the individual chemical structures for each flow, analysis of their intrinsic physicochemical properties, configurations, conformations and potential intermolecular interactions with each other. A list of potential chemical molecules of organic origin present in heavy naphtha, reforming, fuel gas and GLP was established. In addition, through the use of computer simulation and projection programs, it was possible to obtain the basic properties, 2D chemical structure, SMILES code, physicochemical properties, lipophilicity, water solubility, bioavailability radar, optimized and unoptimized 3D structures and the optimization energy for all the molecules present in the input and output flow of the catalytic reforming process.

Keywords:

- **OIL REFINING**
- **CATALYTIC REFORMING**
- **IN SILICO**
- **OPTIMIZATION**
- **INTERMOLECULAR INTERACTIONS**

Capítulo I

1.Generalidades

1.1 Introducción

La refinería es una instalación industrial en donde el petróleo es tratado a través de diferentes procesos para producir productos derivados comerciales. Las refinerías deben lidiar con el mantenimiento de plantas, equipos, consumo de energía, combustible y electricidad, sin embargo, para tener una operación exitosa y segura es necesario personal calificado. Todas las refinerías de petróleo efectúan tres pasos: separación, conversión y tratamiento (Materán, 2018).

El reformado catalítico transforma C_7 - C_{10} hidrocarburos de bajo octanaje a aromáticos e isoparafinas con alto número de octano. El reformado catalítico es un proceso endotérmico que necesita cantidades grandes de energía, puede operar de dos maneras: a severidad alta para la producción de aromáticos de 80-90 % en volumen, y a severidad media para la producción de gasolina de alto octanaje con 70 % de contenido de compuestos aromáticos (Fahim et al., 2010).

1.2 Planteamiento del problema

Mediante esta investigación se quiere aportar a la química pura usando conocimientos teóricos computacionales que permitan interpretar los resultados obtenidos. Por ende, se logrará predecir la conducta de una mezcla al mismo tiempo exponer sus comportamientos como es la solubilidad del agua, la Lipofilia, energía de optimización, todo esto basado en el proceso de reforma catalítica.

Se sabe que la industria petrolera es fundamental para la economía del país, pero dichas empresas contaminan en grandes cantidades, por tal motivo las leyes y normas que rigen el cuidado del medio ambiente son severas con estas industrias, consecuentemente una parte de las ganancias son destinadas para implementar con nuevos procesos para reducir la contaminación que producen.

1.3 Justificación e importancia

En el presente trabajo se recomienda realizar un estudio bibliográfico detallado, centrándose en los componentes orgánicos presentes en el flujo que ingresan al proceso de reforma catalítica, y todas las salidas de productos obtenidas después de todos los procesos internos que involucran dicho proceso.

Se propone estudiar cada molécula de origen orgánico, partiendo desde su nomenclatura IUPAC, propiedades básicas (fórmula química, peso molecular y análisis elemental), mediante un sencillo proceso de cálculo en los diferentes programas de aplicación libre, y software de análisis científico especializado como son Avogadro, ChemDraw, ChemCraft y la Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME).

Por tanto, es necesario organizarlos, tabularlos, procesarlos, discutirlos y luego resumir las conclusiones extraídas sobre el comportamiento y características de estas moléculas orgánicas tanto en los flujos de entrada y como en los de salida del proceso de reforma catalítica.

Cabe destacar que todas las investigaciones y experimentos se realizarán utilizando cálculos de simulación por computadora, que son lo mismo que promover el uso de la tecnología para desarrollar y aplicar los conocimientos teóricos adquiridos en el aula. Al generar resultados (como los gráficos en 3D, la conformación y configuración de cada compuesto orgánico), también es posible comprender mejor cómo cada característica contribuye al comportamiento general en la mezcla, y los posibles comportamientos de interacción intermolecular que pueden existir entre ellos. Como solubilidad y lipofilia.

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 reforma catalítica” 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 reforma catalítica.
2. Establecer una lista de potenciales moléculas químicas de origen orgánico presentes en el flujo de salida en el proceso de reforma catalítica.
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 Variables

1.5.1 Variables independientes

Compuesto de entrada

Compuesto de salida

1.5.2 Variables dependientes

Fórmula química

Peso molecular

Análisis elemental

Nombre UIPAC

Lipofilia

Solubilidad del agua

Radar de biodisponibilidad

Estructura en 2D, 3D

Energía de Optimización

Capítulo II

2. Fundamentación teórica

2.1 Química Computacional

La química computacional es un guía muy importante para predecir el comportamiento de las moléculas. En la mecánica cuántica los cálculos han evolucionado al punto de obtener una variedad importante de resultados acerca de la geometría molecular, características de la molécula, energía de las reacciones, estabilidad de sistema químicos, propiedades electrónicas, para efectuar los cálculos mecanocuánticos. Se puede utilizar programas en los computadores, sin embargo, las ecuaciones matemáticas de la mecánica cuántica no se pueden resolver analíticamente por ende se realizan aproximaciones para obtener un resultado, por ende, no proporciona información precisa (Andrés & Beltrán, 2000; Engel & Reid, 2006).

El reformado catalítico transforma C₇-C₁₀ hidrocarburos de bajo octanaje a aromáticos e isoparafinas con alto número de octano. El reformado catalítico es un proceso endotérmico que necesita cantidades grandes de energía, puede operar de dos maneras: a severidad alta para la producción de aromáticos de 80-90 % en volumen, y a severidad media para la producción de gasolina de alto octanaje con 70 % de contenido de compuestos aromáticos (Fahim et al., 2010).

2.2 Propiedades fisicoquímicas de los compuestos químicos

2.2.1 Alcanos

Las propiedades fisicoquímicas de los alcanos se deben a las fuerzas de cohesión y a la baja polaridad de las moléculas. El átomo de carbono e hidrogeno poseen electronegatividad en donde predomina el enlace covalente no polar; algunas propiedades fisicoquímico son los puntos de ebullición, punto de fusión, densidad, estado físico, solubilidad (Botello et al., 2005).

2.2.2 Hidrocarburos aromáticos

Los hidrocarburos están compuestos por carbono e hidrógeno; se clasifican en hidrocarburos saturados e hidrocarburos insaturados, están en estado líquido o sólido a temperatura ambiente; algunas de las propiedades son: punto de fusión, punto de ebullición, densidad, solubilidad, olor, color, volatilidad, viscosidad o resistencia al flujo, tensión superficial, fluorescencia, fuerza capilar, composición química (Botello et al., 2005).

2.2.3 Peso molecular

El peso molecular es la sumatoria de todas las masas atómicas de los átomos de un compuesto, se puede calcular con la masa media ponderada de todos los isótopos; se utiliza para encontrar la estequiometría de las reacciones y las ecuaciones químicas. Se puede expresar en unidades de masa atómica. En las proteínas, polímeros sintéticos y naturales el peso molecular es un indicador de desempeño y actividad (McMurry, 2008).

2.2.4 Código SMILES

El código SMILES (*Simplified Molecular Input Line Entry Specification*), es un formato lineal que sirve para representar las estructuras moleculares bidimensionales o tridimensionales de las moléculas en forma de una cadena de dimensión cero. EL código SMILES es único para cada molécula (Maslehat et al., 2018).

2.2.5 Fórmula molecular

La fórmula molecular se encuentra al analizar la composición básica y la masa molecular de un compuesto. Las masas moleculares se pueden determinar relacionando la disminución del punto de congelación o elevando el punto de ebullición de un disolvente hasta obtener la concentración molar. Se puede elegir el múltiplo apropiado de la fórmula empírica si se conoce la masa molecular (Wade, 2012).

2.2.6 Solubilidad

Es la capacidad que tiene una sustancia para disolverse en el disolvente, las fuerzas intermoleculares afectan el punto de ebullición y fusión, además sirven para determinar las propiedades de solubilidad de compuestos orgánicos. Una sustancia polar se disuelve en un disolvente polar, y una sustancia no polar se disuelve en un disolvente no polar (McMurry, 2008).

2.2.7 Lipofilia

Las propiedades lipofílicas se determinan de dos distintas maneras: experimental, computacional. La lipofilia es la afinidad que presenta una molécula para el entorno lipofílico, se mide por el comportamiento de la distribución en un sistema bifásico ya sea líquido-líquido o sólido-líquido, además describe el equilibrio entre la hidrofobicidad y polaridad. El término de hidrófobo es la tendencia de los compuestos apolares a preferir un entorno que no es acuoso a uno acuoso. La lipofilia comprende las interacciones soluto-disolvente que ayudan a la distribución de un soluto en dos medios, disolventes orgánicos y agua (Kempińska et al., 2019).

2.3 Nomenclatura

2.3.1 Nomenclatura común

Son nombres históricos que se usan de manera común, como isobutano, neopentano, etc. No es recomendable para moléculas grandes y complejas con muchos isómeros estructurales de posición, por ende, es necesario una nomenclatura que permita dar el nombre a moléculas complejas sin necesidad de memorizar nombres históricos o triviales (Wade, 2012).

2.3.2 Nomenclatura IUPAC o sistemática

Es una nomenclatura estándar para nombrar compuestos orgánicos complejos. La primera regla es identificar la cadena más larga de carbonos llamada cadena principal la cual da el nombre base. La segunda regla es numerar la cadena

más larga de carbonos para identificar los lugares de los sustituyentes. La tercera regla es nombrar a los grupos alquilo (Wade, 2012).

2.3.3 Nomenclatura Tradicional

La nomenclatura tradicional o clásica indica la valencia del elemento con prefijos y sufijos con algunas reglas como; si un elemento tiene una valencia termina en el sufijo ico. Si un elemento tiene dos valencias diferentes se utiliza los sufijos oso e ico, si tiene tres valencias se utiliza hipo-oso, oso, ico. Si un elemento tiene cuatro valencias se utiliza hipo-oso, oso, ico, per-ico (Dávila, 2019).

2.4 Optimización de estructuras por métodos computacionales

La Química Computacional nace como una evolución de la Química Teórica con el propósito de investigar la conducta de la materia a nivel molecular mediante computadoras, es decir, la Química Computacional es semejante de modelización molecular. Específicamente, la implementación y aplicación de las técnicas de la Química Computacional nos otorga investigar diferentes propiedades y comportamientos moleculares (Choque & Nogales, 2019).

El método de mecánica molecular (MM) es un método muy rápido para establecer la geometría, energías moleculares, espectros vibracionales y entalpías de formación de moléculas estables en su estado basal. Tiene una gran velocidad de cálculo, se puede usar tanto para moléculas grandes. El método MM es un método empírico, que incluye un gran número de parámetros, obtenido experimentalmente, llamados, colectivamente, parámetros de campo de fuerza. Su principal reto es encontrar cuando uno o más de los parámetros necesarios para solucionar un problema (Choque & Nogales, 2019).

2.5 Bases de cálculo para cálculos teóricos

La Mecánica Cuántica: suministra una herramienta poderosa para entender los efectos de la simetría molecular. La mecánica molecular o también conocido como campo de fuerza están apoyados sobre modelos simples de mecánica clásica de estructura molecular. La mecánica molecular de ningún modo puede ser

estimada como una aproximación exacta a la estructura química de una molécula (Engel & Reid, 2006).

El método de Hartree-Fock admite calcular los mejores orbitales de un electrón y las correspondientes energías de dichos orbitales. La energía total del átomo en el estado básico es una consecuencia importante de los cálculos, porque suministran una medida de la precisión del cálculo. Con el objetivo de conseguir un total acuerdo con los experimentos, es necesario incluir términos relativistas y la interacción órbita-espín, importantes para átomos pesados (Engel & Reid, 2006).

En todos estos puntos de vista, es ineludible elegir un conjunto base. Dicho conjunto de bases, normalmente está centrado alrededor de los diferentes átomos de la molécula, los cuales son usados para propagar las órbitas moleculares con el ansatz CLOA. Además, los métodos ab initio necesitan definir un nivel de teoría (el método) y un conjunto base, pero no necesitan datos experimentales para poder desarrollar dicho método (Engel & Reid, 2006).

2.6 Configuración química

Es el término usado para aludir a la disposición de los átomos de una molécula, con independencia de las disposiciones relativas que puedan adoptar como resultado de la rotación alrededor de enlaces sencillos. Lo principal es que para cambiar de configuración hace falta romper enlaces químicos, en comparación con la conformación en la cual no es necesario romper dichos enlaces (Wade, 2012).

En consecuencia, el paso de una configuración *cis* a *trans*, de Z a E y de R a S involucra la ruptura de un enlace. Del mismo modo ocurre con las configuraciones D y L de los glúcidos. Se consideran estereoisómeros configuracionales los enantiómeros y los diastereómeros, también denominados diastereoisómeros, pero no es etimológico el término diasterómero (Wade, 2012).

2.7 Conformación química

Los diferentes arreglos que se crean por las rotaciones alrededor de un enlace sencillo se conocen como conformaciones, y a una conformación específica se le llama confórmero ("isómero conformacional"). Generalmente no es posible

aislar conformeros puros, ya que las moléculas giran rápido y constantemente entre todas las conformaciones posibles (Wade, 2012).

2.8 Fuerzas intermoleculares

Las fuerzas intermoleculares son de atracción hasta que las moléculas se aproximan a los radios de Van Der Waals, la fuerza de atracción se convierte en fuerza de repulsión provocando que las moléculas se repelan entre sí. Las fuerzas intermoleculares determinan las propiedades físicas, mientras que las fuerzas intramoleculares, es decir, los enlaces iónicos, covalentes; determinan las propiedades químicas (Wade, 2012).

2.8.1 Fuerzas de van der Waals

Las fuerzas de van der Waals son fuerzas de atracción que se da entre moléculas neutras y se convierte rápidamente en una fuerza de repulsión, se toma en cuenta a las fuerzas dipolo-dipolo, las fuerzas de dispersión de London y los enlaces por puente de hidrógeno. Las fuerzas de van der Waals forman un enlace no covalente (Wade, 2012).

2.8.2 Fuerzas dipolo-dipolo

La molécula tiene un momento dipolar permanente como resultado de los enlaces polares. Cada momento dipolar tiene un extremo positivo y negativo; son fuerzas intermoleculares que resulta de la atracción de los extremos positivos y negativos del momento dipolar de una molécula polar. Es más estable cuando tiene un extremo positivo de un dipolo que es cercano al extremo negativo de otro dipolo (Wade, 2012).

2.8.3 Fuerzas de dispersión de London

Para moléculas no polares las fuerzas de dispersión de London o fuerzas dipolo-dipolo inducido, son fuerzas intermoleculares que se da de momentos dipolares temporales inducidos en una molécula por moléculas que se encuentran cercanas. La intensidad de las fuerzas de dispersión de London depende de la cantidad de electrones presentes en la molécula (Wade, 2012).

2.8.4 Enlace por puente de hidrógeno

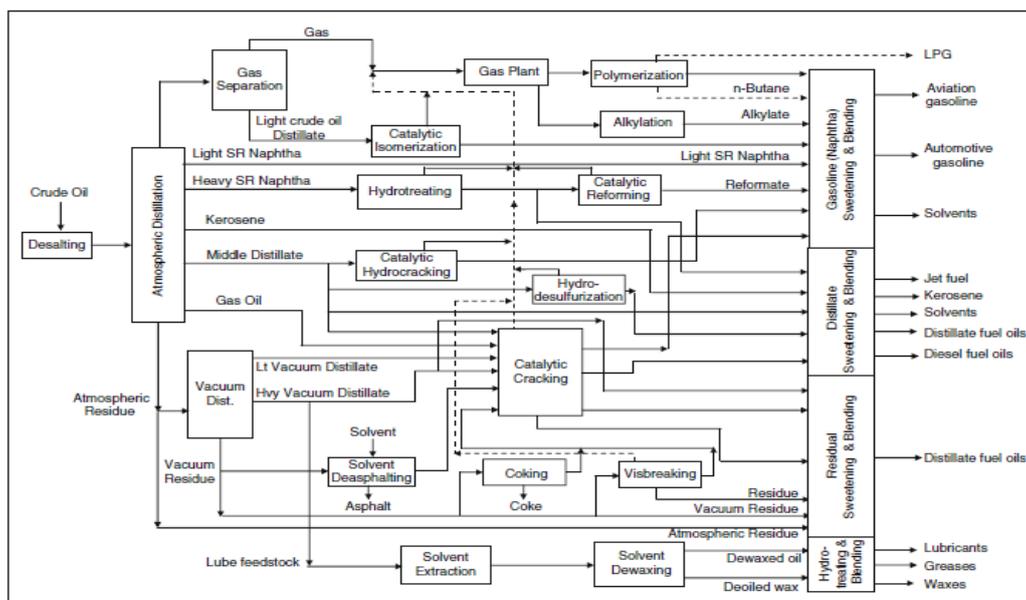
El enlace por puente de hidrógeno no es un verdadero enlace, es una atracción dipolo-dipolo fuerte; en donde el átomo de hidrogeno participa en un enlace por puente de hidrogeno si está unido a un átomo de oxígeno, flúor o nitrógeno. Se considera únicamente enlace por puente de hidrógeno a N-H y O-H, los compuestos orgánicos no poseen enlaces H-F (Wade, 2012).

2.9 Refinería de petróleo

A mediados del siglo XIX, la tecnología utilizada en el proceso de refino de petróleo ha evolucionado, se ha adaptado a las necesidades de la sociedad y a diversos petróleos crudos con diferentes composiciones. El petróleo sin ningún proceso de tratamiento no tiene usos importantes, a inicios de la industria el combustible crudo era utilizado como una *Nota* energética en los pozos de petróleo, sim embargo produce humo y gases tóxicos impidiendo su uso. Las instalaciones de refinería han evolucionado desde el proceso de destilación continua en recipientes de fundición hasta las actuales refinerías de alta complejidad (Larraz, 2019).

Figura 1

Refinería moderna de petróleo.



Nota. El gráfico representa una refinería moderna de petróleo. Tomado de (Mohamed et al., 2010)

2.10 Materia prima para refinerías

2.10.1 Composición del petróleo crudo

Tabla 1

Composición elemental de los crudos

Elemento	Composición (% en peso)
Carbón	83-87
Hidrógeno	10-14
Azufre	0.05-6
Nitrógeno	0.1-0.2
Oxígeno	0.05-2
Ni	< 120 ppm
V	< 1200 ppm

Nota. Esta tabla muestra la composición elemental de los crudos. Tomado de (Mohamed et al., 2010)

2.10.2 Parafinas

Parafinas o alcanos, las *n*-parafinas no tienen ramificaciones; las isoparafinas o isoalcanos son hidrocarburos ramificados que presentan isomerización en su estructura. Los alcanos acíclicos es decir de cadena abierta experimentan giros alrededor de los enlaces sencillo de carbono-carbono. Para alcanos de cadena lineal C_nH_{2n+2} (Mohamed et al., 2010; Wade, 2013).

2.10.3 Oleofinas

Oleofinas o alquenos, son hidrocarburos insaturados poseen enlaces dobles rígidos que evitan el giro, dando lugar a isómeros *cis-trans*; las oleofinas no se encuentran de forma natural en los aceites crudos, sin embargo, se forman durante el proceso de conversión. Las propiedades físicas de las oleofinas son muy similares a la de los alcanos, pero la presencia del doble enlace da características especiales como la acidez y la polaridad (McMurry, 2008; Mohamed et al., 2010; Wade, 2013).

2.10.4 Naftenos

Los cicloalcanos o naftenos son hidrocarburos cíclicos saturados que poseen al menos un anillo de átomos de carbono. Los naftenos presentes en el crudo son de cinco y seis átomos de carbono; dichos anillos pueden tener sustituyentes alquilo. En la naturaleza solo se encuentran naftenos con anillos de 5 y 6 átomos de carbono los cuales pueden tener o no sustituyentes (McMurry, 2008; Mohamed et al., 2010).

2.10.5 Aromáticos

Los compuestos aromáticos o arenos son derivados del benceno, poseen tres enlaces dobles conjugados en un anillo de seis carbonos; el petróleo crudo posee compuestos aromáticos en diferentes concentraciones, son más estables debido a los enlaces, poseen olores fuertes. Los compuestos aromáticos tienen una energía de resonancia grande (Wade, 2012).

2.10.6 Compuestos de azufre

En el petróleo crudo el contenido de azufre varía de menos 0.05 a más de 10 % en peso; si posee menos del % en peso de azufre es conocido como crudo dulce, más de 1% de peso en azufre es conocido como crudo ácido. Los compuestos de azufre son: tiofeno, tiol, dibenzotiofeno, naftodibenzotiofeno, benzotiofeno; su proporción varía en las corrientes del crudo (Mohamed et al., 2010).

2.10.7 Compuestos de oxígeno

El valor del contenido de oxígeno en el petróleo crudo es inferior al 2% en peso; alto contenido de oxígeno indica que el aceite ha estado expuesto continuamente a la atmósfera, la presencia de oxígeno hace que el crudo sea ácido provocando problemas como la corrosión en los equipos. Los compuestos que contienen oxígeno son: éteres, alcoholes, aldehídos, cetonas, derivador de ácidos y ácidos carboxílicos (Mohamed et al., 2010).

2.10.8 Compuestos de nitrógeno

El contenido de nitrógeno en el petróleo crudo es muy bajo, los compuestos de nitrógenos son más estables que los de azufre por ende son difíciles de eliminar; pueden causar el envenenamiento del catalizador y forman goma en los productos. Los compuestos más comunes con nitrógeno son: amidas, aminas y los nitrilos (Mohamed et al., 2010).

2.10.9 Compuestos metálicos

Los compuestos metálicos están presentes en el petróleo crudo en cantidades bajas, se debe reducir su concentración para evitar daños en los equipos y la contaminación de los productos. Existen la presencia de compuestos metálicos como hierro (Fe), plomo (Pb), níquel (Ni), sodio (Na) (Mohamed et al., 2010; Wade, 2013).

2.10.10 Asfaltenos

Los asfaltenos son los compuestos más pesados presentes en el crudo; la precipitación y la deposición de estos puede causar problemas serios y costosos; causan el envenenamiento del catalizador. Poseen puntos de ebullición muy altos, tienen una gran cantidad de anillos aromáticos que están unidos entre sí por cadenas parafínicas y polaridad alta (Bernal et al., 2017).

2.10.11 Resinas

Las resinas son moléculas polares insolubles en propano líquido, son las responsables de disolver y estabilizar las moléculas sólidas en el crudo. Son moléculas grandes y complejas, su estructura no es cristalina, se utilizan como aditivos para mejorar procesos de filtrado (Gonzalez et al., 2017; Mohamed et al., 2010).

2.11 Composición de los productos

2.11.1 Gas licuado de petróleo

El gas licuado de petróleo (GLP) es un grupo de gases a base de hidrocarburos derivados del proceso de refinado de petróleo; etano, etileno, propano, butano, propileno, isobutano e isobutileno. Los gases se licuan por medio de presurización para facilitar su transporte. Es incoloro e inodoro (Mohamed et al., 2010; Venegas et al., 2018).

2.11.2 Gasolina

La gasolina se diferencia por su nivel de octanaje en Ecuador existen tres tipos: gasolina Súper con 93 octanos, gasolina Extra con 87 octano, y la Ecopaís. La gasolina se diferencia por su nivel de octanaje; el octanaje permite que la gasolina resiste altas presiones y elevadas temperaturas en el motor (Llanes et al., 2018).

2.11.3 Queroseno

El queroseno es un líquido inflamable obtenido del destilado del petróleo ligero que es utilizado en calefactores portátiles, en estufas de cocina, combustible para aviones, para fabricar insecticidas; su temperatura máxima de destilación de 204 °C. El queroseno produce contaminantes como el plomo (Pb), Mercurio (Hg), Cadmio (Cd) (Mohamed et al., 2010).

2.11.4 Jet Fuel

Jet Fuel o combustible de aviación, se usa en los aviones, es incoloro. Se emplean combustibles sintéticos de queroseno parafínico, y también gasolina. Los combustibles Jet presentan de 10 a 14 átomos de carbono para proporcionar un mejor rendimiento en las zonas polares, mientras que los combustibles de queroseno presentan 8 a 16 átomos de carbono (Mónico et al., 2020).

2.11.5 Combustible diésel

El diésel premium es un combustible que se usa en los motores de autoignición en la industria automotriz, no debe contener agua y materiales en suspensión; se puede expresar como el índice de cetano (Lopatin, 2020). El índice de cetano se expresa en término de porcentaje en volumen de cetano $C_{16}H_{34}$ (Mohamed et al., 2010).

2.11.6 Gasolina

La gasolina es una mezcla de hidrocarburos que se obtiene de la destilación del crudo, es un líquido volátil e inflamable que posee un olor característico. No debe contener Plomo. A mayor octanaje la gasolina se demora en encender los pistones del automóvil. Se rigen de acuerdo con las normativas europeas, las cuales se enfocan en combustibles amigables con el medio ambiente (Mohamed et al., 2010).

2.11.7 Aceite combustible residual

Está compuesto de residuos de vacío, se utiliza como combustible para hornos en las centrales eléctricas, calderas industriales y en los barcos. Los aceites residuales son contaminantes y perjudiciales con el medio ambiente, por la presencia de metales pesados. Es viscoso, se utiliza como asfalto, adhesivo (Mohamed et al., 2010).

2.11.8 Aceite lubricante

El aceite lubricante es una sustancia que al ser colocada en medio de piezas móviles se forma una capa reduciendo la fricción entre las superficies. Los lubricantes dependen de su composición, existen varios tipos: líquidos, semisólidos, sólidos. Los lubricantes parafínicos y nafténicos con el índice de viscosidad (IV) mayor a 75 (Mohamed et al., 2010).

2.11.9 Asfalto

El asfalto o betún es un mineral negro obtenido por la destilación del crudo, es importante para la industria de construcción. Al ser mezclado con grava y arena es utilizado en la pavimentación de las carreteras. Es viscoso, color gris oscuro. Hay varios tipos de asfaltos: líquidos, emulsificados, oxidados y cemento asfáltico (Mohamed et al., 2010).

2.11.10 Coque de petróleo

Se denominan coque de petróleo o *pet coke* a los compuestos de carbono que son formados por los procesos de conversión térmica de las resinas que contienen petróleo y asfaltenos. Es un sólido derivado de la coquización en el proceso de refinado de petróleo, tiene un alto contenido de carbón y bajo contenido en hidrógeno (Mohamed et al., 2010).

2.12 Principales procesos

2.12.1 Procesos de separación física.

a. Destilación de crudo

La unidad de destilación de petróleo crudo (CDU) tiene la función de separar las fracciones de petróleo crudo según sus puntos de ebullición. Una unidad de destilación de crudo posee un tren de precalentamiento de crudo, una columna de precalentamiento, hornos de aceite y una columna de destilación atmosférica. El petróleo crudo se debe desalar, precalentar y parcialmente se vaporiza antes de ingresar a la columna (Martin et al., 2019).

En la parte superior de la columna salen dos corrientes de hidrocarburos ligeros, en una sale metano y etano; y la segunda corriente es nafta ligera. El residuo atmosférico es introducido en una torre de destilación al vacío que opera aproximadamente a 50 mmHg (Martin et al., 2019; Mohamed et al., 2010).

b. Desasfaltado con disolvente

El desasfaltado con disolvente es un proceso que efectúa un corte profundo en un material de hidrocarburo pesado sin causar una disminución en la calidad del aceite extraído; el aceite desasfaltado (DAO) posee bajo contenido de azufre y metales. El material del hidrocarburo pesado se mezcla con un disolvente y son introducidos en una zona de separación que opera a temperatura y presión elevadas, obteniendo una primera fase ligera de aceites, resinas y disolventes; y una fase pesada de asfaltenos y disolvente (Gearhart, 1980).

c. Extracción con disolvente

El método de extracción con disolvente se aplica en la preparación de aceites lubricantes que poseen un índice alto de viscosidad. El aceite se trata con el disolvente para eliminar aromáticos, separar aceites parafínicos y ceras; este proceso implica la utilización de equilibrios de fase en donde las ceras cristalizadas o solidificadas en el producto, son utilizadas para eliminar los aceites de un solvente líquido (Ackerson & Byars, 2002).

d. Desparafinado con solvente

El refinado se disuelve en un disolvente, se enfría y se añade de manera continua a lo largo de la altura de la torre de enfriamiento. La parafina de alto peso molecular es decir la cera se va a cristalizar y la solución restante es filtrada; utilizan intercambiadores de calor y refrigeración. Elimina los compuestos de azufre y nitrógeno (Hislop & Eagen, 1973).

2.12.2 Procesos de conversión catalítica química.

a. Reforma catalítica

El reformado catalítico es un proceso que se utiliza para aumentar el número de octano de la nafta pesada. La corriente de alimentación de hidrocarburos del reformado catalítico contiene H_2O , CO_2 , CH_4 y CO ; una relación de H_2O/CH_4 inferior

a 0.8 y CO_2/CH_4 mayor a 0.5; se utiliza un catalizador especial de platino soportado sobre sílice para transformar la nafta pesada en aromáticos e isoparafinas (Zhao & Wagner, 2006).

b. Hidrotratamiento

El hidrotratamiento se utiliza para eliminar impurezas como azufre, nitrógeno, oxi-compuestos, aromáticos, ceras y metales que utilizan hidrógeno presente en la nafta, minimiza las pérdidas de octano por la saturación de las oleofinas de alto octanaje a parafinas de bajo octanaje. Se usa al menos un reactor de hidrotratamiento a contracorriente (Vergel, 2013).

c. Hidrocraqueo catalítico

Es un proceso que pone en contacto una corriente de hidrocarburos de bajo peso molecular en presencia de hidrógeno para romper los enlaces carbono-carbono, para obtener productos ligeros; utilizando un catalizador de función dual. Sus productos son queroseno, combustible para aviones, diésel y *fuel oil* (Absil et al., 1991).

d. Craqueo catalítico

El craqueo catalítico es un proceso en donde se rompen las cadenas de los hidrocarburos mediante la utilización de un catalizador. Un reactor de tubo ascendentes está configurado con dos secciones diferentes de radio para producir una mejor selectividad del propeno y butenos como productos (Letzsch, 2005).

e. Alquilación

La alquilación es el proceso en el cual un compuesto que puede alquilarse puede ser un hidrocarburo saturado o aromático reacciona con un agente de alquilación como una olefina, en presencia de un catalizador ácido, para formar hidrocarburos saturados ramificados de alto peso molecular (Van et al., 2015).

f. Isomerización

La isomerización de parafinas de cadena lineal es un proceso para formar productos ramificados con el mismo número de carbonos es decir isoparafinas; con alto índice de octanaje. Las reacciones de isomerización utilizan catalizadores de platino. La unidad de carga de la isomerización es la nafta ligera C₅-C₆ (Degnan & Angevine, 2019).

2.12.3 Procesos de conversión química térmica.

a. Coquización retardada

La coquización retardada es el proceso para fabricar coque sustancialmente libre, la materia prima es el residuo de vacío, el cual se calienta; en donde los compuestos volátiles se recogen en la parte superior y forman coque; la coquización retardada puede producir tres tipos de coque: granalla, esponja y aguja (Siskin et al., 2015).

b. Flexicoking

Es un proceso en el que transforma las fracciones de petróleo que tienen alto punto de ebullición en hidrocarburos ligeros, la mayor parte del coque se gasifica y se convierte en gas combustible con contenido bajo en azufre y coque; utilizando vapor y aire. El objetivo del *flexicoking* es aumentar la producción de productos ligeros, eliminar coque y azufre (Mohamed et al., 2010).

c. Visbreaking

En el proceso de *visbreaking* se opera a temperaturas altas para craquear los hidrocarburos a cadenas más cortas. Es un proceso de viscorreducción que transforma el residuo pesado presente en la torre de destilación atmosférica de crudo en compuestos más ligeros, disminuyendo la viscosidad (Tran & Knaepen, 2020).

2.13 Historia del reformado catalítico

A principios del siglo veinte surge la necesidad de mejorar la nafta para el transporte de combustibles, inicialmente se utilizan procesos térmicos. Los procesos catalíticos se utilizan en 1940 mejorando los rendimientos y el octanaje. Los primeros catalizadores utilizados en el proceso de reformado catalítico tenían como base el óxido de molibdeno soportado, pero fueron reemplazados por catalizadores de platino (Parkash, 2003; Treese et al., 2015).

Las primeras unidades del proceso de reformado catalítico son diseñadas como semiregenerativas o unidades de lecho fijo de tres o cuatro reactores en serie, utilizando catalizadores de platino soportados en alúmina; operaban a altas presiones. El proceso de reformado catalítico mejoro al implementar el uso de catalizadores bimetálicos los cuales permitieron operar a presiones menores alcanzando un octanaje de 95-98 (RON) (Parkash, 2003; Treese et al., 2015).

2.14 Condiciones del proceso

2.14.1 Presión

La presión del reactor debe estar en el rango de 50 a 500 psig afecta al rendimiento del reformado y a la estabilidad del catalizador utilizado. Cuando el alimento pasa por los calentadores, reactores y lechos del catalizador; la caída de presión total es de 50-60 psig, sin embargo, se debe minimizar las caídas de presión en las unidades para que todos los reactores operen a una presión baja (Treese et al., 2015).

Los beneficios de operar a una presión baja es el aumento de compuestos aromáticos, hidrógeno y reformado; sin embargo, acorta el ciclo del catalizador. Debido a que existe un aumento en la velocidad de coquización del catalizador; para el rango de presión de 50 a 150 psig se da la mayor velocidad de desactivación del catalizador, por ende, es necesario la regeneración del catalizador (Treese et al., 2015).

2.14.2 Temperatura

En el proceso de reformado catalítico la temperatura es una variable de procesos muy importante debido a que el aumento de la temperatura de 30 F duplica la velocidad de deposición de coque en los catalizadores provocando la disminución en el rendimiento. Temperatura media ponderada del lecho (WABT) y temperatura media ponderada de entrada (WAIT), son utilizadas para correlacionar las temperaturas efectivas del reactor con el rendimiento. Las caídas de temperaturas de reactor o las temperaturas delta son el resultado de las reacciones endotérmicas netas que se dan en los reactores individuales. El delta de temperatura total se calcula y compara con el tiempo, para monitorear el rendimiento del proceso de reformado catalítico (Oyekan, 2019).

2.14.3 Velocidad espacial

La velocidad espacial es la cantidad de nafta procesada sobre una determinada cantidad de catalizador durante el tiempo; es el recíproco del tiempo de residencia o el tiempo de interacción entre los reactivos y el catalizador. La combinación de la temperatura y la velocidad espacial del reactor son utilizadas para ajustar la conversión de la alimentación, para producir reformado de mayor octanaje; a mayor velocidad espacial mayor temperatura requerida (Treese et al., 2015).

2.14.4 Relación de hidrógeno a hidrocarburo

(H_2/HC) es la relación de las moles de hidrógeno en el gas reciclado y las moles de nafta en la unidad. El gas reciclado es la mezcla de hidrógeno y gases de hidrocarburos ligeros, 75 a 92% en moles de hidrógeno. Es necesario reciclar el hidrógeno para mantener la estabilidad en la vida útil del catalizador; si se aumenta H_2/HC se reduce la velocidad de coquización y aumenta la estabilidad, si H_2/HC disminuye se forma mayor proporción de C_5^+ e hidrógeno (Treese et al., 2015).

En las unidades de hidroprocesamiento se utiliza hidrógeno como reactivo, una parte del hidrógeno residual y los gases de los hidrocarburos ligeros recuperados después de la separación a alta presión son reciclado al reactor para ayudar a disminuir la formación y deposición de coque en el catalizador, a mayor

pureza del gas reciclado e hidrógeno mayor es la presión parcial del hidrógeno en el reactor. Las presiones parciales altas de hidrógeno en el proceso de reformado catalítico tienen el mismo efecto que la presión alta en el reactor; ambas ayudan a suprimir la velocidad de formación y depósito de coque en el catalizador (Oyekan, 2019).

2.15 Alimentación del reformado catalítico.

Las materias primas de nafta que se utilizan para el proceso de reforma catalítica contienen parafinas, naftenos, aromáticos y cantidades muy pequeñas de olefinas. Para la obtención de combustibles para motores, la alimentación normalmente son naftas “de rango completo”, es decir, hidrocarburos que contiene de 6 a 11 átomos de carbono. Las unidades del proceso de reforma catalítica tienen como objetivo de producir benceno, tolueno y xilenos conocidos comúnmente como BTX (Treese et al., 2015).

La nafta típica que contiene: 55.4% en peso de parafinas totales, 30.7% en peso de naftenos totales, 0.1% en peso de olefinas totales y 13.9% en peso de aromáticos totales. Las naftas se clasifican en magro o rica en función de su composición. La alimentación magro contiene una alta concentración de parafinas y concentraciones relativamente bajas de naftenos y aromáticos, mientras que la alimentación rica tiene una baja concentración de parafina y concentraciones relativamente altas de naftenos más aromáticos (Treese et al., 2015).

La nafta más usada para este proceso es aquella que se deriva directamente de la destilación del crudo, esta tiene un rango de ebullición de 150–400 °F (65–200 °C) y se clasificaría como nafta pesada, es denominada nafta de destilación pura. Por otra parte, de la primera destilación, las naftas también pueden provenir de otros procesos que rompen catalítica o térmicamente hidrocarburos más pesados (Treese et al., 2015).

La pesadez (punto final de la destilación) y el tipo (magro o rico) indican si la nafta va a tener dificultades al ser reformada. Por ejemplo, la nafta liviana con un punto final de 320 °F (160 °C) y 65% en peso de parafinas es más difícil de reformar que una nafta rica en peso con un punto final de 370 °F (188 °C) y 60% en peso de naftenos (Antos & Aitani, 2005).

2.16 Pretratamiento de la Alimentación.

La alimentación es previamente sometida a tratarse con hidrógeno para eliminar varios tipos de contaminantes, es decir remover compuestos que son perjudiciales para el catalizador como el nitrógeno, azufre y oxígeno, para esto se necesita que exista una ruptura del enlace carbono-nitrógeno, carbono-azufre o carbono-oxígeno y la formación de amoníaco, sulfuro de hidrógeno o agua, respectivamente (Antos & Aitani, 2005). En este pretratamiento también se saturarán las olefinas y se eliminan los contaminantes metálicos como Si, As y Pb por adsorción sobre el soporte del catalizador de hidrotratamiento de nafta (Treese et al., 2015).

2.17 Separación y estabilización del producto

Existen dos tipos de corrientes a la salida del proceso de reformado catalítico que son las corrientes líquidas y gaseosas. La corriente gaseosa es rica en hidrógeno (60-90% mol) además de hidrocarburos C_1 - C_4 , una parte de este gas es reciclado hacia la entrada de la sección de reacción, donde se mezcla con la alimentación de nafta en proporción 5/10 moles de gas de reciclaje por moles de nafta (Antos & Aitani, 2005).

La corriente líquida por otro lado comúnmente conocida como reformado, contiene una mezcla de hidrocarburos de C_5 - C_{10} , la cual se envía a un estabilizador de producto donde estos hidrocarburos más livianos (C_1 - C_4) que se encuentran en esta corriente son removidos del producto. El estabilizador de producto normalmente es una columna operada a una presión adecuada para que se permita la condensación y el reflujo del vapor de tope. El producto que se encuentra al tope es retirado como una corriente gaseosa (Antos & Aitani, 2005).

2.18 Reacciones del reformado

En la producción de BTX, el objetivo principal es transformar las parafinas y los naftenos en la mayor cantidad de benceno, tolueno y xilenos. El rendimiento del producto deseado es la cantidad de BTX que se convirtieron en aromáticos, es decir

el porcentaje que se transformó. Para ello existen varias reacciones que se explican a continuación (Oyekan, 2019).

2.18.1 Deshidrogenación de nafteno

Son reacciones endotérmicas, rápidas que convierten los naftenos en aromáticos e hidrógeno. Las reacciones suceden con un aumento neto de moles de productos gaseosos y son favorecidas termodinámicamente por altas temperaturas y bajas presiones. Muchos investigadores han señalado que la deshidrogenación de nafteno es una reacción catalizada por metales y, en el reformado catalítico, el metal de elección y el más eficaz es el platino (Oyekan, 2019).

2.18.2 Isomerización de naftenos y parafinas

La isomerización de parafinas a alquilciclopentanos necesita la intervención secuencial tanto de la deshidrogenación como de las funcionalidades ácidas de los catalizadores, además la formación de compuestos intermedios se considera pasos críticos en la formación de aromáticos. La isomerización de los naftenos son reacciones lentas y ligeramente exotérmicas que muchas veces son acompañadas de reacciones de apertura de anillo indeseables. Las reacciones de isomerización de parafina son menos selectivas en relación con las reacciones de isomerización de nafteno, ya que se producen reacciones indeseables importantes tales como hidrocraqueo de parafina e hidrogenólisis (Oyekan, 2019).

2.18.3 Deshidrociclización de parafina

Este tipo de reacción implica la conversión de parafinas en los sitios de hidrogenación / deshidrogenación (platino) y ácidos de los catalizadores de reformado catalítico para producir aromáticos. Estas reacciones son extremadamente lentas y las velocidades de reacción son aproximadamente dos órdenes de magnitud más bajas que las de la deshidrogenación de nafteno (Oyekan, 2019).

2.18.4 Hidrocraqueo de parafina

La reacción de hidrocraqueo de parafina es moderadamente rápida. Las reacciones son catalizadas por las partes metálicas y ácidas del catalizador. Las reacciones son exotérmicas y, ocurren en los dos últimos reactores principales, producen descensos significativos en la caída de temperatura del reactor principal (Oyekan, 2019).

2.18.5 Hidrodesalquilación de alquil aromáticos

Es una reacción deseable para aumentar los rendimientos de compuestos aromáticos C₆ a C₈ y disminuir la velocidad de formación de coque en reformadores catalíticos. Las reacciones de hidrodesalquilación de aromáticos son ligeramente exotérmicas (Oyekan, 2019).

2.19 Propiedades del reformado

El reformado catalítico, además de cumplir su objetivo original de producir gasolina de alto octanaje, también se ha utilizado para diversas aplicaciones, incluida la producción de aromáticos, gas licuado de petróleo (GLP), hidrógeno y mejora de materias primas olefínicas y refinados. La producción de gasolina requiere nafta de rango completo. Estos reformadores operan con alta severidad para maximizar la producción de aromáticos (Turaga & Ramanathan, 2003).

2.19.1 El número de octanos.

Es una medida de la resistencia a quemarse de un combustible. El índice de octano es el parámetro dominante de calidad del producto. Los índices de octano de una mezcla de hidrocarburos o hidrocarburos se establecen comparando sus cualidades antidetonantes con varias mezclas de *n*-heptano con cero octanos y 2,2,4- trimetilpentano o isooctano con cien octanos (Treese et al., 2015).

2.19.2 Otras propiedades

Otra propiedad importante del reformado catalítico es su volatilidad o presión de vapor, a menudo viene dada en términos de la presión de vapor de Reid (RVP). Se necesita suficiente RVP para facilitar la combustión interna de un motor, sin embargo, un RVP demasiado alto da como resultado un hidrocarburo indeseable. Los reformados de alto nivel, por ejemplo, pueden no quemar bien en un motor de combustión interna y conducir a la formación de carbonoso o depósitos de hidrocarburos gomosos (Treese et al., 2015).

2.20 Catalizadores utilizados

El catalizador de uso general para el proceso de reformado catalítico contiene platino soportado sobre una base de alúmina. En la mayoría de los casos, se mezcla renio con platino para formar un catalizador más estable que puede trabajar a presiones más bajas. El platino sirve como un sitio catalítico para reacciones de hidrogenación y deshidrogenación (J. Gary & Handwerk, 2001).

2.20.1 Metal

La concentración de Platino (Pt) en los catalizadores de reformado está generalmente en el rango de 0.2-0.6% en peso. Las dimensiones del tamaño del grupo de platino son del orden de angstroms o 1×10^{-10} m. La interacción del platino con la superficie de alúmina es tal que las incrustaciones de platino son relativamente inmóviles y no se aglomeran durante las reacciones (Treese et al., 2015).

2.20.2 Soporte de alúmina

El soporte de alúmina puede encontrarse en la fase eta (η) o gamma (γ), pero gamma es el más utilizado en catalizadores para el reformado catalítico debido a que muestran una alta área superficial específica, un tamaño de partícula pequeño y una actividad catalítica en su superficie. Además, se agrega cloruro durante el acabado del catalizador para promover la acidez. También se agrega percloroetileno

(PERC) al proceso durante la regeneración para mantenga el nivel (Treese et al., 2015).

2.20.3 Catalizadores para unidades semiregenerativas

Los reformadores SR utilizan catalizadores que contienen platino modificado por renio o, en menor medida, iridio. Estos modificadores actúan hidrogenando el coque a una especie menos grafitica. El renio o el iridio mejora significativamente la vida útil del catalizador. Los catalizadores de Pt-Re tienen mayor estabilidad. Todos los catalizadores SR están sulfurados para minimizar las reacciones de hidrogenólisis catalizada por metales que provocan gases ligeros y reducen el rendimiento de la gasolina (Treese et al., 2015).

2.20.4 Catalizadores para unidades cíclicas

Las unidades de reformado cíclico poseen lechos fijos, pero hay un reactor de oscilación adicional que se reemplaza en cualquier posición del reactor para permitir la regeneración de cada reactor de forma continua. Los tipos de catalizadores que se han usado en el reformado cíclico incluyen Pt, Pt-Re, Pt-Ir y Pt-Sn sobre alúmina clorurada (Treese et al., 2015).

2.21 Desactivación y regeneración de catalizadores

Existen tres tipos de desactivación de catalizadores para el reformado catalítico que incluyen envenenamiento, coquización, y aglomeración del platino. El envenenamiento de los sitios de metales y ácidos se previene o minimiza asegurándose de que el hidrotratador esté siempre funcionando correctamente para eliminar compuestos N y S (Treese et al., 2015).

2.21.1 Rejuvenecimiento del catalizador

El objetivo principal es regresarle al catalizador su estado inicial, es decir que sus propiedades logren estar lo más cercanas posibles a su estado originario. El catalizador se somete a eliminación secuencial de coque, redispersión de metales y soporte, reclusión, seguidamente de la reducción del platino al estado metálico. El

catalizador rejuvenecido se devuelve a la parte superior del primer reactor. Este proceso puede ser realizado de forma continua con el catalizador gastado que se elimina de la parte inferior del reactor (Antos & Aitani, 2005).

Para regenerar un catalizador que se usa en el proceso de reformado, se llevan a cabo los siguientes pasos:

1. Purga del reactor / catalizador utilizando gas reciclado y / o nitrógeno para eliminar los hidrocarburos e hidrógeno para hacer que el lote de catalizador, el reactor o los reactores sean seguros para la manipulación y posterior quemado de coque
2. El coque controlado se quema a temperaturas superiores a 750 °F en una mezcla de nitrógeno y aire
3. Oxidación u oxiclорación para dispersión de metales y adición de cloruro
4. Purga / secado de nitrógeno
5. Reducción de metales
6. Metales sulfurados

2.22 Energía MMFF94.

Se usa para simulaciones de dinámica molecular, además describe las ecuaciones para calcular la energía potencial y los parámetros que esta utiliza. Tiene siete partes, cada una de ellas describe un tipo diferente de energía, todas contribuyen a la energía potencial global, por lo que su suma debe considerarse en el cálculo total. Estos siete tipos de energía son estiramiento de enlace, doblado en ángulo, doblado por estiramiento, torsión, doblado fuera del plano, van der Waals y electrostático (Jász et al., 2017; Tosco et al., 2014).

2.23 Hipótesis

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

Capítulo III

3. Metodología de desarrollo del proyecto

3.1 Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de reforma catalítica

3.1.1 *Búsqueda de datos internacionales*

A través de una investigación bibliográfica se pudo identificar las moléculas orgánicas de la nafta pesada presentes en el flujo de entrada en el proceso de reforma catalítica internacional. Mediante la utilización de *Notas* bibliográficas online como: biblioteca de la Espe virtual, google académico, google patents, revistas científicas, handbooks y libros. Con el fin de crear una lista general de moléculas orgánicas presentes en la nafta pesada.

3.1.2 *Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano*

A través de una investigación bibliográfica se pudo identificar las moléculas orgánicas de la nafta pesada presentes en el flujo de entrada en el proceso de reforma catalítica ecuatoriano. Mediante la utilización de *Notas* bibliográficas online como: biblioteca de la Espe virtual, Google Académico, Google Patents, revistas científicas, handbooks y libros. Con el fin de crear una lista general de moléculas orgánicas presentes en la nafta pesada.

3.1.3 *Obtención, organización y reporte de resultados*

A través de una investigación bibliográfica se pudo identificar las moléculas orgánicas de la nafta pesada presentes en el flujo de entrada en el proceso de reforma catalítica internacional y ecuatoriano. Con el fin de crear una lista general de moléculas orgánicas presentes en la nafta pesada. Para representarla en una tabla de manera entendible. El reporte de resultados se encuentra en el capítulo IV.

3.2 Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de reforma catalítica

3.2.1 Búsqueda de datos internacionales

A través de una investigación bibliográfica se pudo identificar las moléculas orgánicas del reformado, GLP, *Fuel gas* presentes en el flujo de salida en el proceso de reforma catalítica internacional. Mediante la utilización de *Notas* bibliográficas online como: biblioteca de la Espe virtual, Google Académico, Google Patents, revistas científicas, *handbooks* y libros. Con el fin de crear una lista general de moléculas orgánicas presentes en la nafta pesada.

3.2.2 Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano

A través de una investigación bibliográfica se pudo identificar las moléculas orgánicas del reformado, GLP, *Fuel gas* presentes en el flujo de salida en el proceso de reforma catalítica ecuatoriano. Mediante la utilización de *Notas* bibliográficas online como: biblioteca de la Espe virtual, google académico, google patents, revistas científicas, *handbooks* y libros. Con el fin de crear una lista general de moléculas orgánicas presentes en la nafta pesada.

3.2.3 Obtención, organización y reporte de resultados

A través de una investigación bibliográfica se pudo identificar las moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida es decir del reformado, GLP y *Fuel gas*, en el proceso de reforma catalítica internacional y ecuatoriano. Con el fin de crear una lista general de moléculas orgánicas presentes en la nafta pesada. Para representarla en una tabla de manera entendible. El reporte de resultados se encuentra en el capítulo IV.

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

A través de la utilización del programa computacional del software ChemDraw Professional se pudo obtener las estructuras químicas 1D, 2D y las

propiedades químicas básicas para cada molécula presente en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Con el fin de crear tablas con la respectiva información de cada molécula para posteriormente analizarlas.

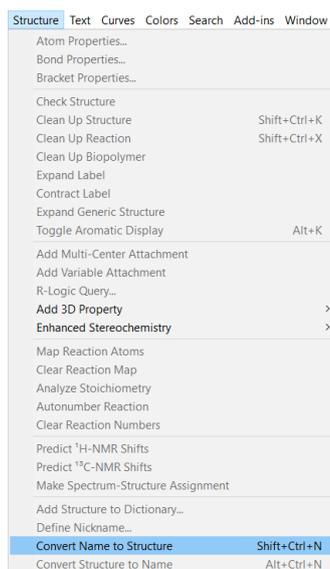
3.3.1 Generación de estructuras químicas en 2D

A través de la utilización del programa computacional del software ChemDraw Professional se pudo obtener de manera automática la estructura química 2D. Se consiguieron dos archivos formato ChemDraw (*.cdx) y MDL Molfile (*.mol), para cada molécula presente en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Con el fin de poder utilizar el formato MDL Molfile (*.mol) en el programa Avogadro. Finalmente crear tablas con la información respectiva de cada molécula para ser posteriormente analizadas. A continuación, se presenta los pasos realizados para la generación de las estructuras químicas en 2D:

1. Elaborar una lista con los nombres de los componentes presentes en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica.
2. Abrir del programa computacional del software ChemDraw Professional.
3. Ingresar uno a uno los nombres de los componentes en la ventana "Structure", y después en "Convert Name to Structure".

Figura 2.

Pestaña de "Structure".



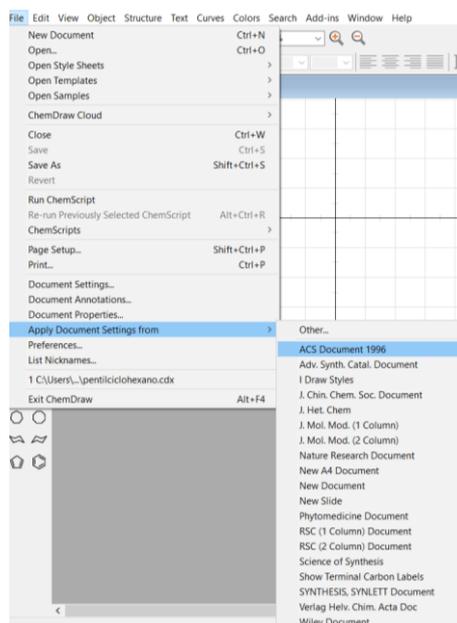
Nota. Software ChemDraw Professional

4. Esperar a que el programa procese la información.

5. Ir a la pestaña "File", abrir "Apply Document Setting From" y escoger la opción "ACS Document 1996".

Figura 3.

Pestaña "Apply Document Setting From"

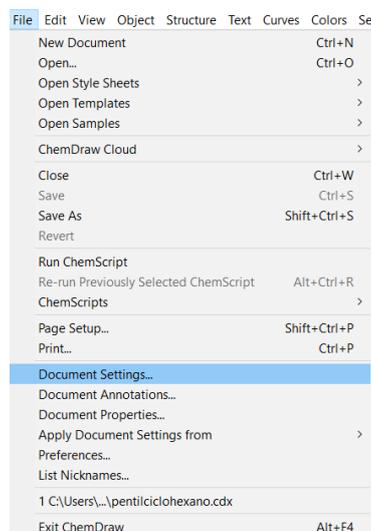


Nota. Software ChemDraw Professional

6. En la pestaña "File", en la opción "Document Setting"

Figura 4.

Pestaña de "File".

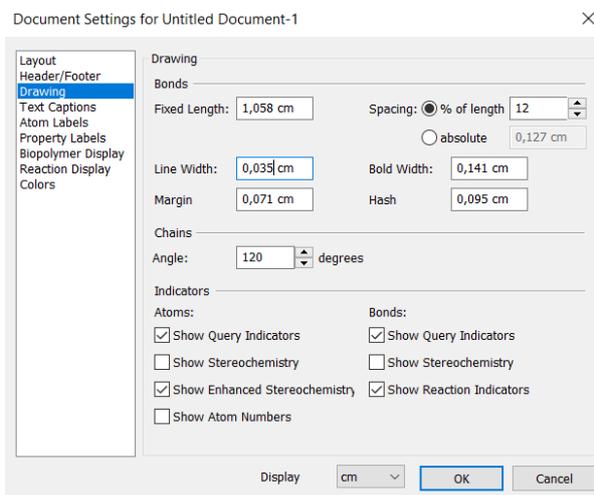


Nota. Software ChemDraw Professional

7. En la ventana que se despliega, ir a "Drawing" y modificar "Line Width" con el valor de 0.041.

Figura 5

.Ventana "Document Setting" opción "Drawing"

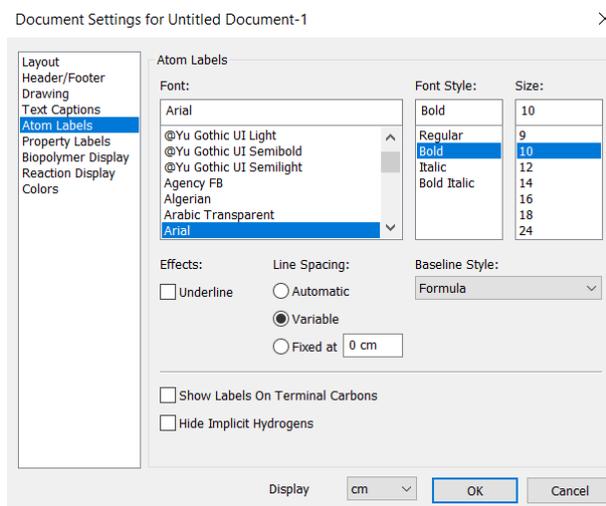


Nota. Software ChemDraw Professional

8. En la misma ventana ir a "Atom Labels" y modificar "Font Styles" con "Bold"

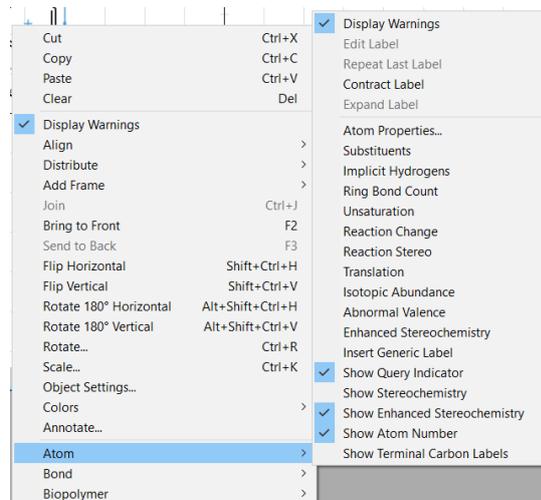
Figura 6.

Ventana "Document Setting" opción "Atom Labels"

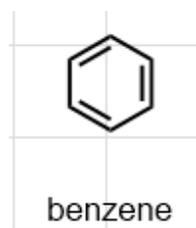


Nota. Software ChemDraw Professional

9. Seleccionar la imagen.
10. Ir a la opción de "Atom" y seleccionar "Show Atom Number".

Figura 7.*Pestaña "Atom"**Nota.* Software ChemDraw Professional

11. Seleccionar la estructura, copiarla y pegarla en un documento word.

Figura 8.*Estructura en 2D**Nota.* Software ChemDraw Professional

3.3.2 Procesamiento de propiedades básicas

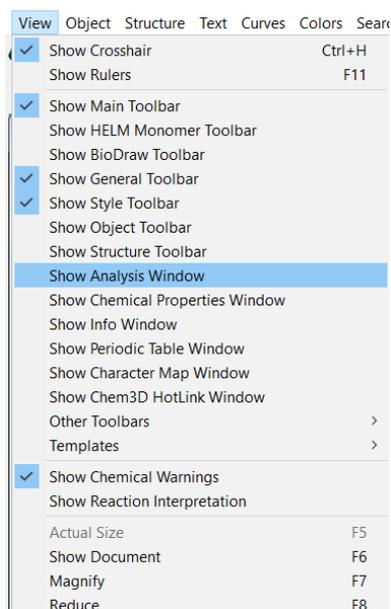
A través de la utilización del programa computacional del software ChemDraw Professional se pudo obtener de manera automática las propiedades básicas como: *Formula*, *"Mol. Wt."* y *"Elem. Anal."*. Se consiguieron dos archivos formato ChemDraw (*.cdx) y MDL Molfile (*.mol), para cada molécula presente en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Con el fin de poder utilizar el formato MDL Molfile (*.mol) en el programa Avogadro. Finalmente crear tablas con la información respectiva de cada molécula para ser posteriormente analizadas. A

continuación, se presenta los pasos realizados para la generación de las propiedades básicas:

1. Después de obtener la estructura, ir a la pestaña "View" y seleccionar "Show Analysis Window".

Figura 9.

Ventana "View"

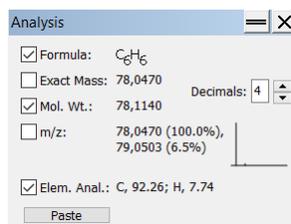


Nota. Software ChemDraw Professional

2. La pestaña que se despliega, escoger solo las propiedades necesarias, que son "Formula", "Mol. Wt." con 4 decimales y "Elem. Anal."

Figura 10.

Pestaña "Analysis"



Nota. Software ChemDraw Professional

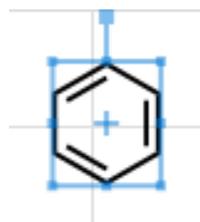
3.3.3 Generación automática de nomenclatura IUPAC

A través de la utilización del programa computacional del software ChemDraw Professional se pudo obtener de manera automática la nomenclatura IUPAC. Se consiguieron dos archivos formato ChemDraw(*.cdx) y MDL Molfile(*.mol), para cada molécula presente en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Con el fin de poder utilizar el formato MDL Molfile(*.mol) en el programa Avogadro. Finalmente crear tablas con la información respectiva de cada molécula para ser posteriormente analizadas. A continuación, se presenta los pasos realizados para la generación de la nomenclatura IUPAC:

1. Después de dibujar la molécula, seleccionarla.

Figura 11.

Estructura en 2D



Nota. Software ChemDraw Professional

2. Dar *click* derecho sobre la molécula y después en “*Analysis*” y seleccionar “*Name*”.

Figura 12.

Ventana “Analysis”

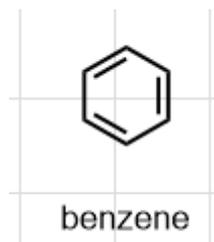
Text	>	Name
Bracket	>	Chemical Formula
Curves	>	Exact Mass
Table	>	Molecular Weight
TLC Plate	>	m/z
Molecule	>	Elemental Analysis
Analysis	>	All

Nota. Software ChemDraw Professional

3. Y se genera el nombre IUPAC.

Figura 13.

Estructura en 2D con nombre IUPAC

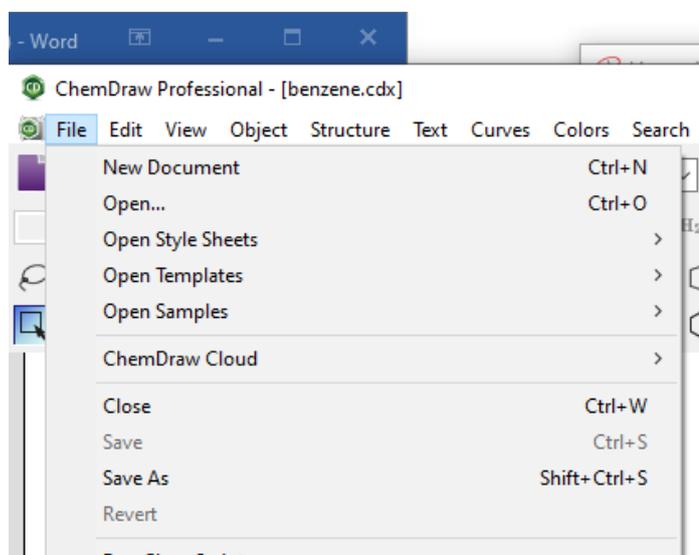


Nota. Software ChemDraw Professional

4. Para guardar la molécula seleccionar "File", luego "Save As".

Figura 14.

Ventana "File"

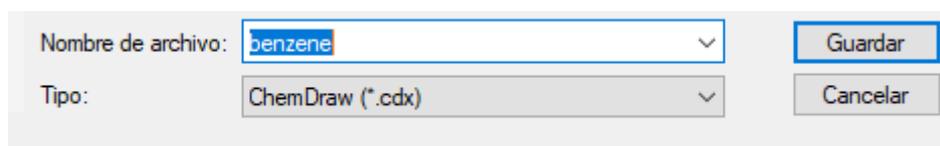


Nota. Software ChemDraw Professional

5. Colocar el nombre de la molécula, y seleccionar el tipo de documento en formato ChemDraw(*.cdx).

Figura 15.

Ventana para guardar



Nota. Software ChemDraw Professional

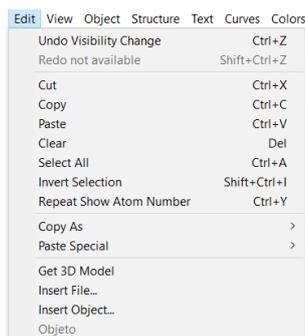
3.3.4 Generación automática del código SMILES

A través de la utilización del programa computacional del software ChemDraw Professional se pudo obtener de manera automática el código SMILES. Se realizó un archivo en formato "Bloc de notas (*.txt)" para todas las moléculas presente en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Con el fin de poder utilizar el código SMILES en la plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME. Finalmente crear una tabla con la información respectiva de las moléculas para ser posteriormente analizadas. A continuación, se presenta los pasos realizados para la generación del código SMILES:

1. Después de obtener la estructura, seleccionarla, e ir a la pestaña "Edit".

Figura 16.

Pestaña "Edit"

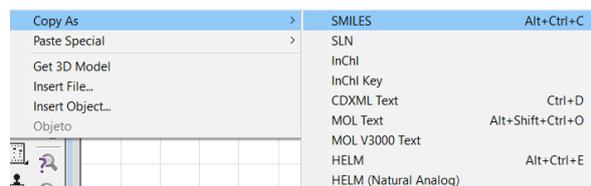


Nota. Software ChemDraw Professional

2. Ir a la opción "Copy As" y escoger "SMILES".

Figura 17.

Ventana "Copy As" opción "SMILES"

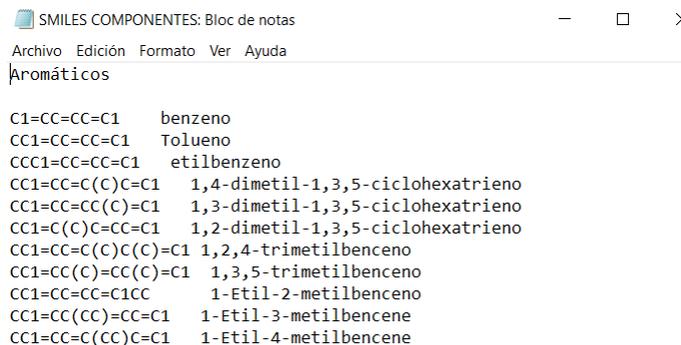


Nota. Software ChemDraw Professional

3. Luego abrir un bloque de notas y pegar.

Figura 18.

Block de notas con los códigos "SMILES".



```

SMILES COMPONENTES: Bloc de notas
Archivo Edición Formato Ver Ayuda
Aromáticos
C1=CC=CC=C1 benzeno
CC1=CC=CC=C1 Tolueno
CCC1=CC=CC=C1 etilbenzeno
CC1=CC=C(C)C=C1 1,4-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno
CC1=CC=CC(C)=C1 1,3-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno
CC1=C(C)C=CC=C1 1,2-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno
CC1=CC=C(C)C(C)=C1 1,2,4-trimetilbenceno
CC1=CC(C)=CC(C)=C1 1,3,5-trimetilbenceno
CC1=CC=CC=C1CC 1-Etil-2-metilbenceno
CC1=CC(CC)=CC=C1 1-Etil-3-metilbenceno
CC1=CC=C(CC)C=C1 1-Etil-4-metilbenceno

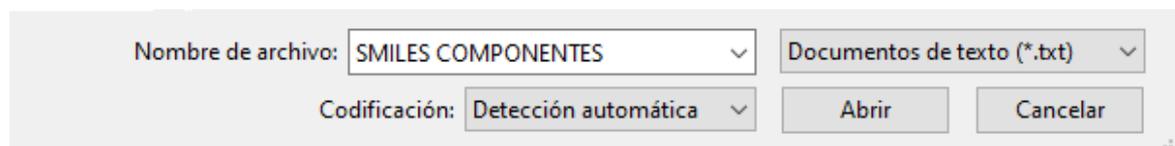
```

Nota. Software ChemDraw Professional

4. Repetir los pasos para cada estructura.
5. Para guardar el archivo se debe colocar nombre y tipo de documento (*.txt).

Figura 19.

Ventana para guardar el archivo de los códigos "SMILES"



Nota. Software ChemDraw Professional

3.3.5 Obtención, organización y reporte de resultados

A través de la utilización del programa computacional del software ChemDraw Professional se pudo obtener las estructuras químicas 1D,2D y las propiedades químicas básicas. Se realizaron tres tipos de documentos formato ChemDraw (*.cdx) y MDL Molfile (*.mol), para cada molécula presente en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica y un archivo en extensión "Bloc de notas (*.txt)". Con el fin de poder utilizar en la plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME y en el programa Avogadro. Finalmente, para la organización se los resultados se crearon tablas con toda la información obtenida de las moléculas para ser posteriormente analizadas. El reporte de resultados se encuentra en el capítulo IV.

3.4 Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas

A través de la utilización la plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME, se pudo obtener de manera automática las propiedades fisicoquímicas, lipofilia y la solubilidad con el agua. Se consiguió un archivo en formato CSV para todas las moléculas presente en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Con el fin de poder analizar las propiedades fisicoquímicas, lipofilia y la solubilidad con el agua. Finalmente organizar la información obtenida en el archivo CSV en tablas.

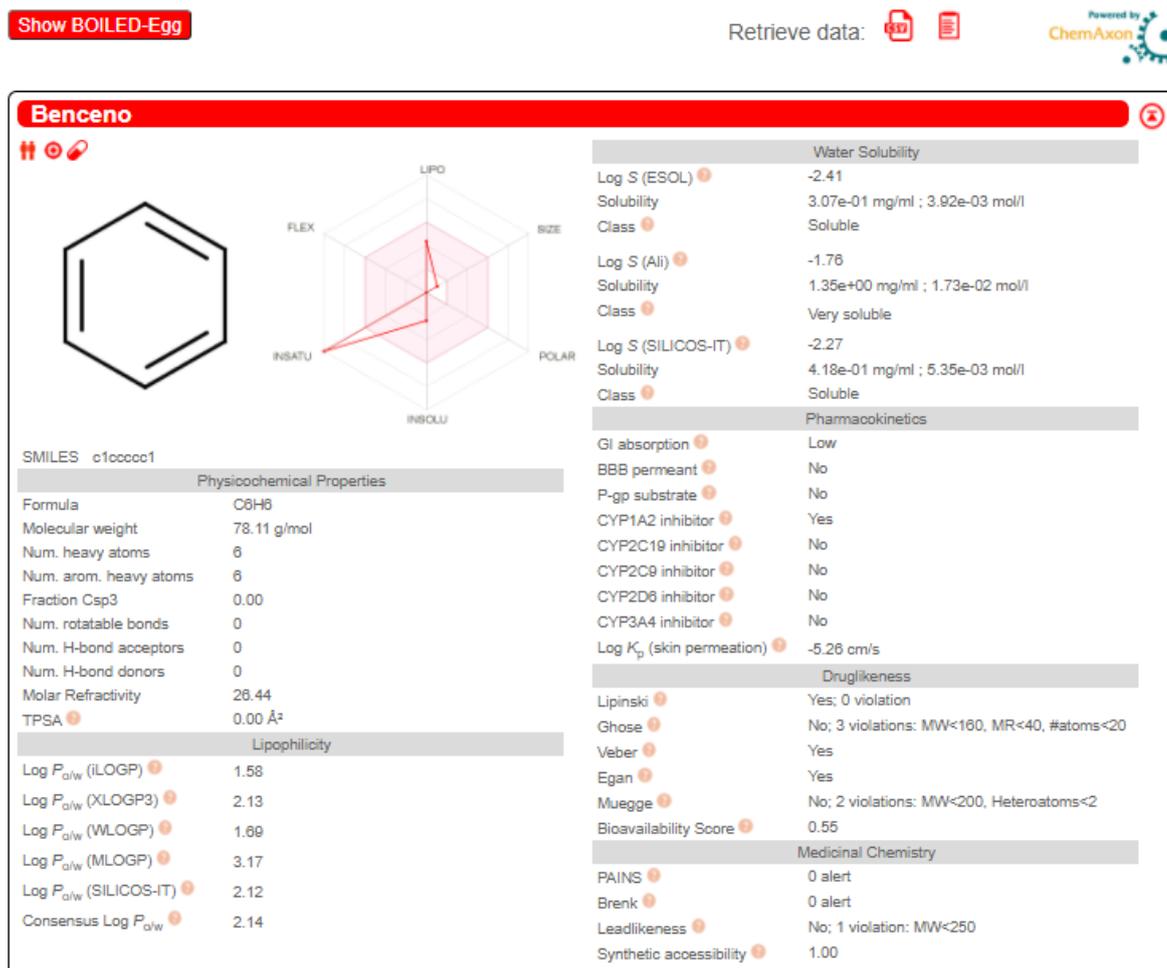
3.4.1 Estudio de la interfaz de la plataforma SwissADME

La plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME es de acceso gratuito; se utiliza para calcular las propiedades fisicoquímicas y estimar la farmacogenética. Los métodos utilizados en la plataforma son internos, o se calcula a través de ejecutables no comerciales. Tiene acceso simple para el uso de investigadores como también para el público en general. Se puede analizar un gran número de moléculas con el código SMILES.

Los valores de los parámetros calculados por la plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME, se muestran en la parte inferior por secciones: propiedades fisicoquímicas, lipofilia, farmacocinética, química medida y similitud en el fármaco. En la parte del superior se encuentra el nombre de la molécula, su estructura química, el código SMILES y el radar de biodisponibilidad. Los paneles de salida de la plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME, se encuentran en la parte superior de la página *Retrieve data*; el ícono CSV representa la recopilación de todos los datos de las moléculas analizadas en formato excel.

Figura 20.

Ventana de cada molécula procesada.



Nota. Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME

3.4.2 Procesamiento a través del código SMILES

A través de la utilización del programa computacional del software ChemDraw Professional se pudo obtener de manera automática el código SMILES. Se realizó un archivo en formato "Bloc de notas (*.txt)" para todas las moléculas presente en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Con el fin de poder utilizar el código SMILES en la plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME, en donde se obtiene un archivo en formato CSV. Finalmente crear una tabla con la información respectiva de las moléculas para ser posteriormente analizadas. A continuación, se presenta los pasos realizados para la generación automática de las propiedades fisicoquímicas, lipofilia y la solubilidad con el agua:

1. Elaborar una lista con los códigos SMILES de todos los componentes presentes en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica.
2. Ingresar los códigos SMILES en la plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME.
3. Esperar hasta que la plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME termine de procesar toda la información.

Figura 21.

Ventana de SwissADME

Enter a list of SMILES here:

```
C1=CC=CC=C1 1
CC1=CC=CC=C1 2
CCC1=CC=CC=C1 3
CC1=CC=C(C)C=C1 4
CC1=CC=CC(C)=C1 5
CC1=C(C)C=CC=C1 6
CC1=CC=C(C)C(C)=C1 7
CC1=CC(C)=CC(C)=C1 8
CC1=CC=CC=C1CC 9
CC1=CC(CC)=CC=C1 10
CC1=CC=C(CC)C=C1 11
CCC 12
CCC 13
CCCC 14
CCC(C)C 15
CCCCC 16
C1CCCC1 17
CCCCCC 18
CC(C)CCC 19
CC(C)C(C)C 20
CC(C)(C)CC 21
CCC(C)CC 22
CCCCCC 23|
```

Fill with an example Clear Run!

Nota. Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME

4. Descargar el archivo en formato CSV, que se encuentra en “*Retrive data*” y guardarlo.

Figura 22.

Ventana "Retrive data"

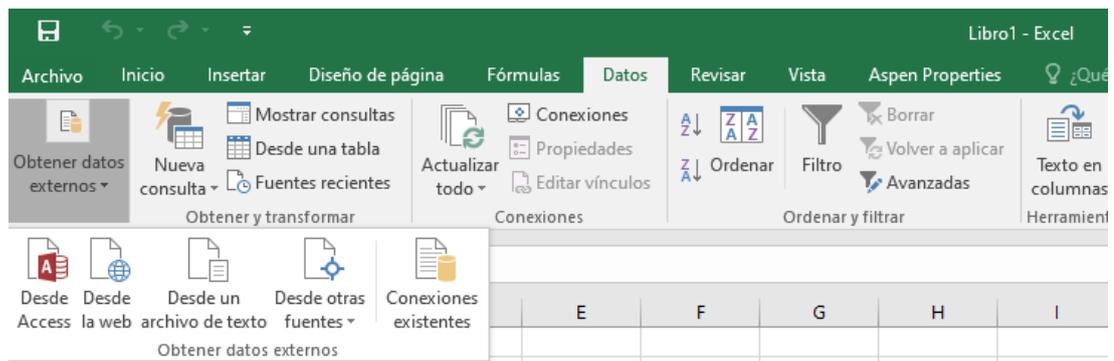
Retrieve data:  

Nota. Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME

5. Abrir un nuevo documento de Excel 2016.
6. En los íconos en la parte superior del documento de excel, seleccionar Datos.
7. Luego "Obtener datos externos" y seleccionar "Desde un archivo de texto".

Figura 23.

Ventana "Obtener datos externos"

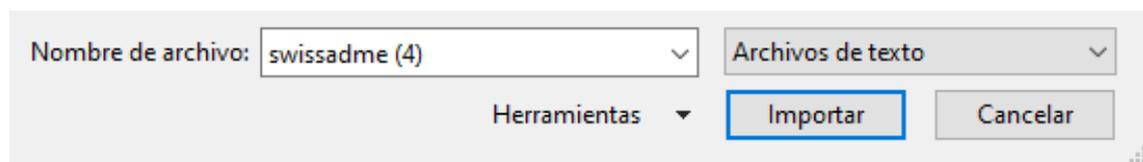


Nota. Software Excel 2019.

8. Escoger el archivo descargado de la plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME y seleccionar importar.

Figura 24.

Ventana para importar el archivo descargado de "SwissADME"



Nota. Software Excel 2019.

9. Aparece una ventana de Asistente para importar texto, seleccionar: delimitados, mis datos tienen encabezado y siguiente.

Figura 25.

Ventana de Asistente para importar texto

Asistente para importar texto - paso 1 de 3

El asistente estima que sus datos son Delimitados.
Si esto es correcto, elija Siguiente, o bien elija el tipo de datos que mejor los describa.

Tipo de los datos originales

Elija el tipo de archivo que describa los datos con mayor precisión:

Delimitados - Caracteres como comas o tabulaciones separan campos.

De ancho fijo - Los campos están alineados en columnas con espacios entre uno y otro.

Comenzar a importar en la fila: 1 Origen del archivo: MS-DOS (PC-8)

Mis datos tienen encabezados.

Vista previa del archivo C:\Users\Liz\Downloads\swissadme (4).csv.

1	Molecule, Canonical SMILES, Formula, MW, #Heavy atoms, #Aromatic heavy atoms, Fraction Csp3, #Rc
2	1, c1ccccc1, C6H6, 78.11, 6, 6, 0.00, 0, 0, 0, 26.44, 0.00, 1.58, 2.13, 1.69, 3.17, 2.12, 2.14, -2.41, 3.07
3	2, Cc1ccccc1, C7H8, 92.14, 7, 6, 0.14, 0, 0, 0, 31.41, 0.00, 1.85, 2.73, 2.00, 3.52, 2.44, 2.51, -2.77, 1.58
4	3, CCc1ccccc1, C8H10, 106.17, 8, 6, 0.25, 1, 0, 0, 36.22, 0.00, 2.06, 3.15, 2.25, 3.85, 2.70, 2.80, -2.97, 1
5	4, Cc1ccc(cc1)C, C8H10, 106.17, 8, 6, 0.25, 0, 0, 0, 36.37, 0.00, 2.12, 3.15, 2.30, 3.85, 2.83, 2.85, -3.04

Cancelar < Atrás **Siguiente >** Finalizar

Nota. Software Excel 2019.

10. Seleccionar en la parte de Separadores la opción coma; siguiente.

Figura 26.

Ventana Asistente para importar texto opción

Asistente para importar texto - paso 2 de 3

Esta pantalla le permite establecer los separadores contenidos en los datos. Se puede ver cómo cambia el texto en la vista previa.

Separadores

Tabulación

Punto y coma

Coma

Espacio

Otro:

Considerar separadores consecutivos como uno solo

Calificador de texto: *

Vista previa de los datos

Molecule	Canonical SMILES	Formula	MW	#Heavy atoms	#Aromatic heavy atoms	Fraction Csp3
1	c1ccccc1	C6H6	78.11	6	6	0.00
2	Cc1ccccc1	C7H8	92.14	7	6	0.14
3	CCc1ccccc1	C8H10	106.17	8	6	0.25
4	Cc1ccc(cc1)C	C8H10	106.17	8	6	0.25

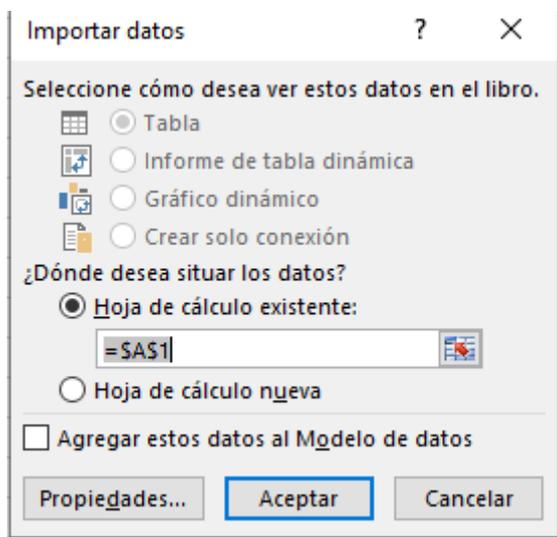
Cancelar < Atrás **Siguiente >** Finalizar

Nota. Software Excel 2019.

11. En la ventana de importar datos se puede seleccionar la casilla desde donde se desea colocar la información y escoger aceptar.

Figura 27.

Ventana Importar datos



Nota. Software Excel 2019.

12. Se obtiene toda la información organizada de manera ordenada.

Figura 28.

Ventana de Excel

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
Molecule	Canonical SMILES	Formula	MW	#Heavy atoms	#Aromatic heavy atoms	Fraction Csp3	#Rotatable bonds	#H-bond acceptors	#H-bond donors	MR	TPSA	iLOGP	XLOGP3	WLOGP	MLOGP	Silicos-IT L
1	c1ccccc1	C6H6	78.11	6	6	0.00	0	0	0	0.2644	0.00	1.58	2.13	1.69	3.17	2.12
2	Cc1ccccc1	C7H8	92.14	7	6	0.14	0	0	0	0.3141	0.00	1.85	2.73	2.00	3.52	2.44
3	CCc1ccccc1	C8H10	106.17	8	6	0.25	1	0	0	0.3622	0.00	2.06	3.15	2.25	3.85	2.70
4	Cc1ccc(cc1)C	C8H10	106.17	8	6	0.25	0	0	0	0.3637	0.00	2.12	3.15	2.30	3.85	2.83
5	Cc1ccc(cc1)C	C8H10	106.17	8	6	0.25	0	0	0	0.3637	0.00	2.12	3.20	2.30	3.85	2.83
6	Cc1ccc(cc1)C	C8H10	106.17	8	6	0.25	0	0	0	0.3637	0.00	2.03	3.12	2.30	3.85	2.83
7	Cc1ccc(c(c1)C)C	C9H12	120.19	9	6	0.33	0	0	0	0.4134	0.00	2.28	3.63	2.61	4.17	3.26
8	Cc1cc(C)cc(c1)C	C9H12	120.19	9	6	0.33	0	0	0	0.4134	0.00	2.34	3.42	2.61	4.17	3.26
9	CCc1ccc(cc1)C	C9H12	120.19	9	6	0.33	1	0	0	0.4118	0.00	2.24	3.53	2.56	4.17	3.13
10	CCCc1ccc(cc1)C	C9H12	120.19	9	6	0.33	1	0	0	0.4118	0.00	2.32	3.98	2.56	4.17	3.13
11	CCc1ccc(cc1)C	C9H12	120.19	9	6	0.33	1	0	0	0.4118	0.00	2.33	3.63	2.56	4.17	3.13
12	CCC	C3H8	44.10	3	0	1.00	0	0	0	0.1654	0.00	1.71	1.84	1.42	2.28	0.45
13	CCC	C3H8	44.10	3	0	1.00	0	0	0	0.1654	0.00	1.71	1.84	1.42	2.28	0.45
14	CCCC	C4H10	58.12	4	0	1.00	1	0	0	0.2134	0.00	1.94	2.89	1.81	2.73	0.89
15	CCC(C)C	C5H12	72.15	5	0	1.00	1	0	0	0.2615	0.00	2.11	2.64	2.05	3.14	1.17
16	CCCCC	C5H12	72.15	5	0	1.00	2	0	0	0.2615	0.00	2.18	3.39	2.20	3.14	1.34
17	C1CCCC1	C5H10	70.13	5	0	1.00	0	0	0	0.2404	0.00	1.94	3.00	1.95	2.75	2.40
18	CCCCC	C6H14	86.18	6	0	1.00	3	0	0	0.3096	0.00	2.35	3.90	2.59	3.52	1.78
19	CCCC(C)C	C6H14	86.18	6	0	1.00	2	0	0	0.3096	0.00	2.31	3.18	2.44	3.52	1.61
20	CC(C)C(C)C	C6H14	86.18	6	0	1.00	1	0	0	0.3096	0.00	2.27	3.42	2.30	3.52	1.44
21	CCC(C)C(C)C	C6H14	86.18	6	0	1.00	1	0	0	0.3070	0.00	2.25	3.82	2.44	3.52	1.46
22	CCC(CC)C	C6H14	86.18	6	0	1.00	2	0	0	0.3096	0.00	2.32	3.60	2.44	3.52	1.61

Nota. Software Excel 2019.

3.4.3 Obtención, organización y reporte de resultados

A través de la utilización del programa computacional del software ChemDraw Professional se pudo obtener de manera automática el código SMILES para ingresarlos en la plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME. Obteniendo de manera automática las propiedades fisicoquímicas, lipofilia y la solubilidad con el agua. Se consiguió un archivo en formato CSV para todas las moléculas presente en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Para la organización de la información en tablas. El reporte de resultados se encuentra en el capítulo IV.

3.5 Cálculo y obtención de estructuras 3D

A través de la utilización del programa Avogadro se pudo obtener de manera automática las estructuras 3D. Se realizaron dos archivos en formato MDL SDfile(*.mol) para todas las moléculas sin optimizar y optimizadas presentes en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Con el fin de poder utilizar el formato MDL SDfile(*.mol) en el programa Chemcraft para graficar la estructura 3D sin optimizar y optimizadas; obtener dos archivos en formato Jpeg files(*.jpg). Finalmente ordenar las imágenes obtenidas para posteriormente analizadas.

3.5.1 Elaboración de archivos con coordenadas 3D sin optimizar

A través de la utilización del programa Avogadro se pudo obtener de manera automática las estructuras 3D sin optimizar. Se obtuvo un archivo en formato MDL SDfile(*.mol) de las coordenadas 3D sin optimizar para todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Con el fin de poder utilizar el formato MDL SDfile(*.mol) en el programa Chemcraft para graficar la estructura 3D sin optimizar; obtener un archivo Jpeg files(*.jpg). Finalmente ordenar las imágenes obtenidas para posteriormente analizadas. A continuación, se presenta los pasos realizados para la elaboración de los archivos con coordenadas 3D sin optimizar:

1. Abrir el programa Avogadro.

Figura 29.

Ícono del software Avogadro

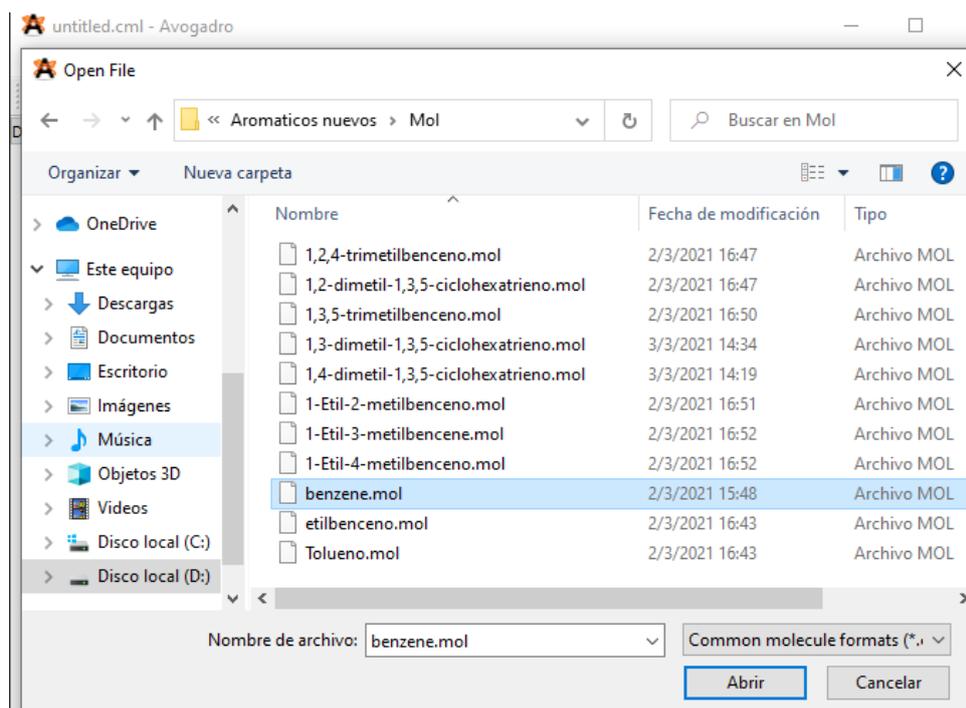


Nota. Software Avogadro.

2. Seleccionar *File* y *Open*, abrir la molécula obtenida en el programa computacional del software ChemDraw MDL Molfile(*.mol).

Figura 30.

Ventana "Open file"

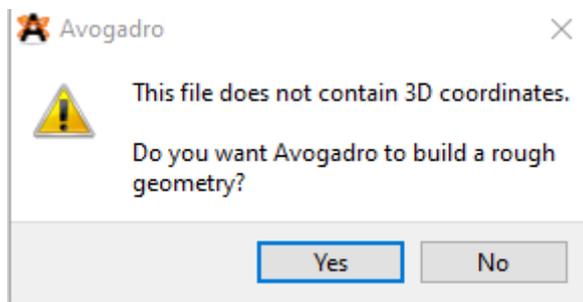


Nota. Software Avogadro.

3. Abrir y seleccionar Yes para agregar coordenadas 3D en la molécula.

Figura 31.

Ventana para agregar coordenadas en 3D

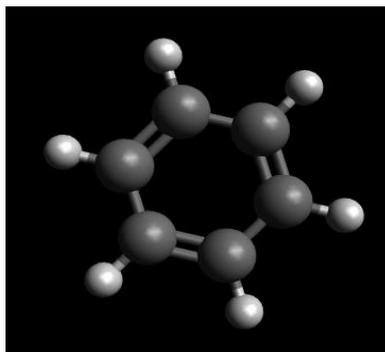


Nota. Software Avogadro.

4. Se obtiene las coordenadas 3D de la molécula sin optimizar.

Figura 32.

Benceno en 3D sin optimizar



Nota. Software Avogadro.

5. Para guardar seleccionar *File, Save As*, en formato MDL SDfile(*.mol).

3.5.2 Elaboración de archivos con coordenadas 3D optimizadas

A través de la utilización del programa Avogadro se pudo obtener de manera automática las estructuras 3D optimizadas. Se obtuvo un archivo en formato MDL SDfile(*.mol) de las coordenadas 3D optimizadas para todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Con el fin de poder utilizar el formato MDL SDfile(*.mol) en el programa Chemcraft para graficar la estructura 3D optimizada; obtener un archivo Jpeg files(*.jpg). Finalmente ordenar las imágenes obtenidas para posteriormente analizadas. A continuación, se

presenta los pasos realizados para la elaboración de los archivos con coordenadas 3D optimizadas:

1. Abrir el programa Avogadro.

Figura 33.

Ícono del software Avogadro.

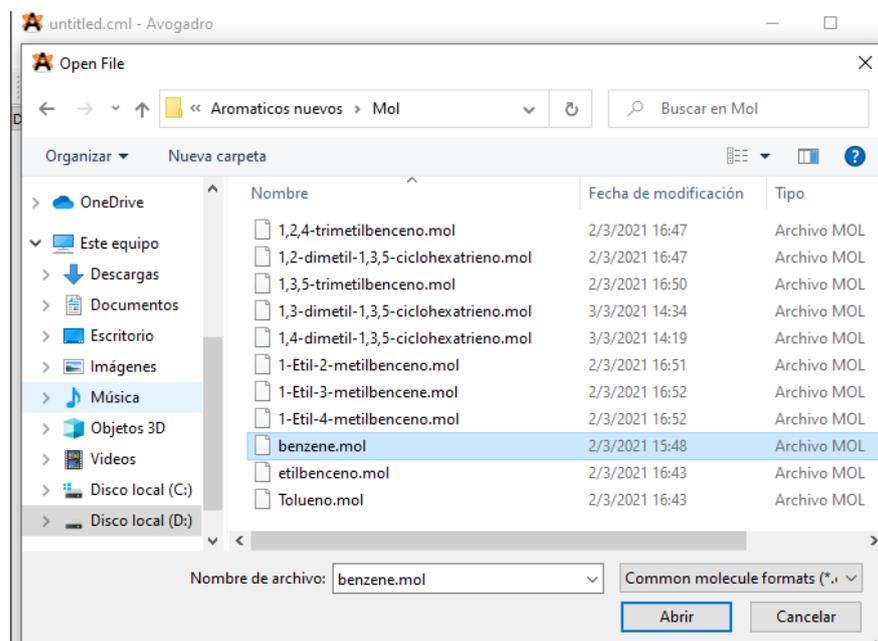


Nota. Software Avogadro.

2. Seleccionar *File* y *Open*, abrir la molécula obtenida en el programa computacional del software ChemDraw MDL Molfile(*.mol).

Figura 34.

Ventana Open file

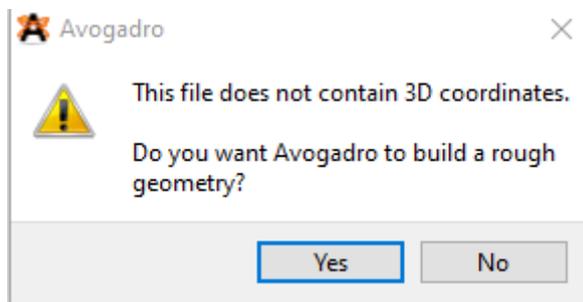


Nota. Software Avogadro.

3. Abrir y seleccionar Yes para agregar coordenadas 3D en la molécula.

Figura 35.

Ventana para agregar las coordenadas en 3D

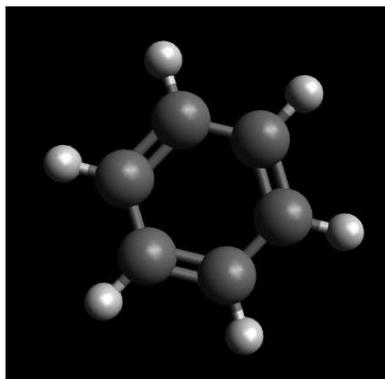


Nota. Software Avogadro.

4. Se obtiene las coordenadas 3D de la molécula optimizada.

Figura 36.

Benceno en 3D optimizado

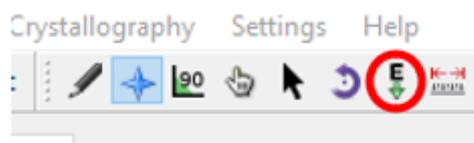


Nota. Software Avogadro.

5. Para optimizar seleccionar

Figura 37.

Ícono para obtener la energía de optimización

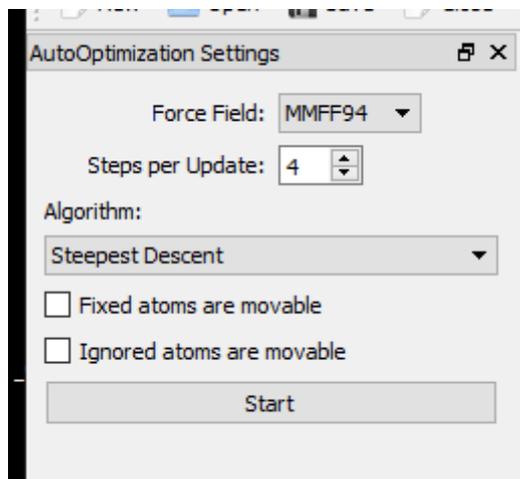


Nota. Software Avogadro.

6. En *Forcé Field*: escoger MMFF94, y *Start*.

Figura 38.

Ventana "Auto Optimization Settings"



Nota. Software Avogadro.

7. Se obtiene la energía de optimización de kJ/mol, anotar los datos en una hoja de Excel.

Figura 39.

Ventana con el valor de la energía de optimización.

```
AutoOpt: E = 67.9391 kJ/mol (dE = 0)
Num Constraints: 0
```

Nota. Software Avogadro.

8. Para guardar seleccionar *File*, *Save As*, en formato MDL SDFfile (*.mol).

3.5.3 Elaboración de las imágenes con coordenadas 3D sin optimizar

A través de la utilización del programa Chemcraft se pudo obtener las imágenes con coordenadas 3D sin optimizar. Se obtuvo un archivo en formato Jpeg files (*.jpg) de las coordenadas 3D sin optimizar para todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Finalmente ordenar las imágenes obtenidas para posteriormente analizadas. A continuación, se presenta

los pasos realizados para la elaboración de las imágenes con coordenadas 3D sin optimizar:

1. Abrir el programa Chemcraft.

Figura 40.

Ícono de chemcraft

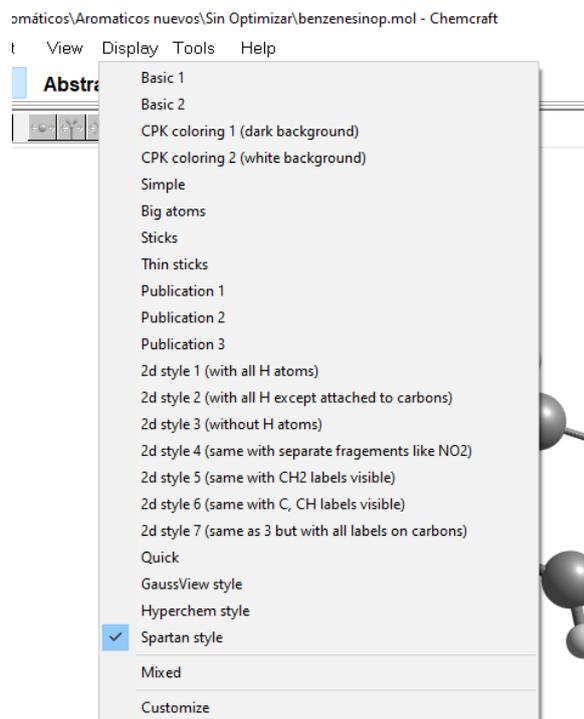


Nota. Software Chemcraft.

2. Seleccionar *File* y *Open*, escoger el archivo obtenido en el formato MDL SDfile(*.mol) sin optimizar en el programa de Avogadro.
3. Escoger *Display* y *Spartan Style*.

Figura 41.

Ventana "File" opción "Open".

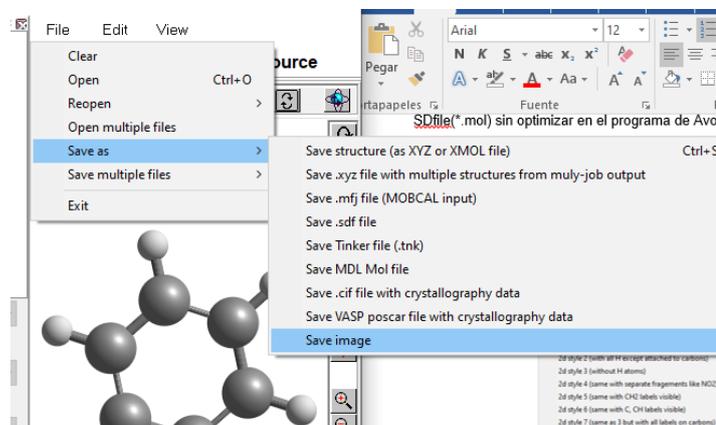


Nota. Software Chemcraft.

4. Para guardar seleccionar *File*, *Save as*, *Save image*.

Figura 42.

Ventana "File" opción Save as imagen"

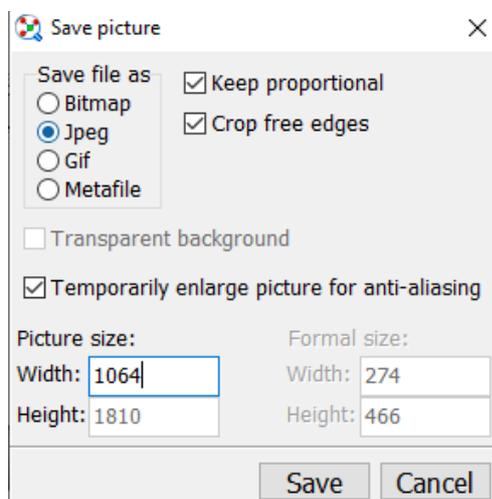


Nota. Software Chemcraft.

5. En *Save file as*, escoger *Jpeg*, y en *picture size: Width* colocar 1064, y finalmente *Save*.

Figura 43.

Ventana "Save file" opción "Jpeg"



Nota. Software Chemcraft.

3.5.4 Elaboración de las imágenes con coordenadas 3D optimizadas.

A través de la utilización del programa Chemcraft se pudo obtener las imágenes con coordenadas 3D optimizadas. Se obtuvo un archivo en formato Jpeg files (*.jpg) de las coordenadas 3D optimizadas para todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Finalmente ordenar

las imágenes obtenidas para posteriormente analizadas. A continuación, se presenta los pasos realizados para la elaboración de las imágenes con coordenadas 3D optimizadas:

1. Abrir el programa Chemcraft.

Figura 44.

Ícono de Chemcraft

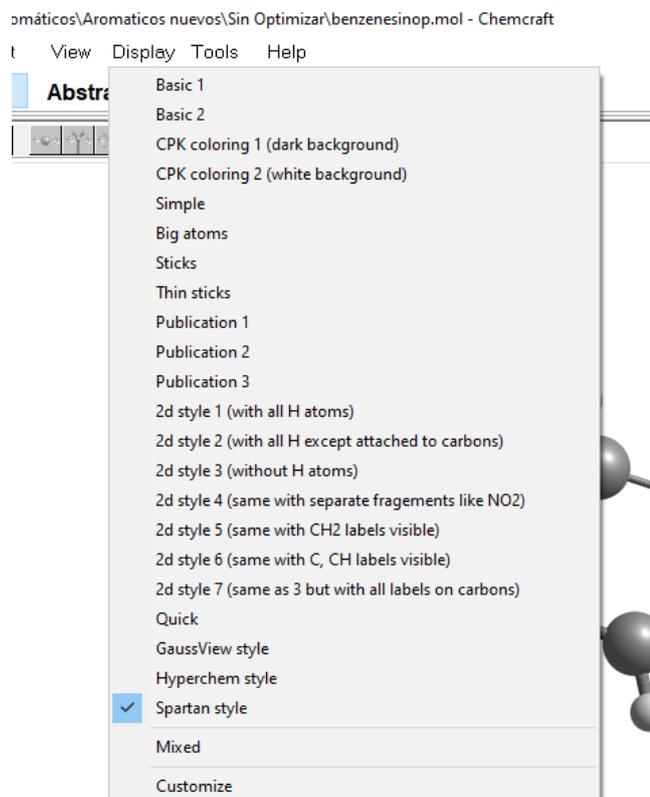


Nota. Software Chemcraft.

2. Seleccionar *File* y *Open*, escoger el archivo obtenido en el formato MDL SDfile(*.mol) optimizadas en el programa de Avogadro.
3. Escoger *Display* y *Spartan Style*.

Figura 45.

Ventana "Display" opción "Spartan Style".

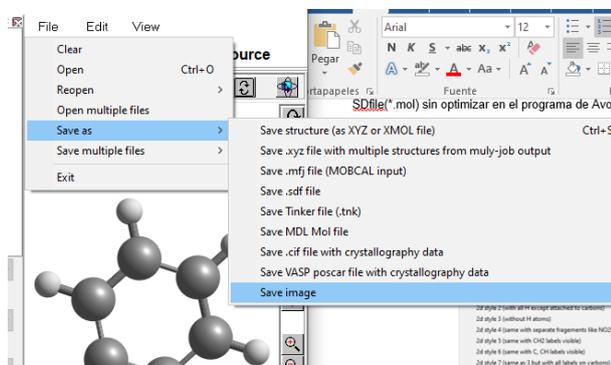


Nota. Software Chemcraft.

4. Para guardar seleccionar *File*, *Save as*, *Save image*.

Figura 46.

Ventana "File" opción "Save imagen"

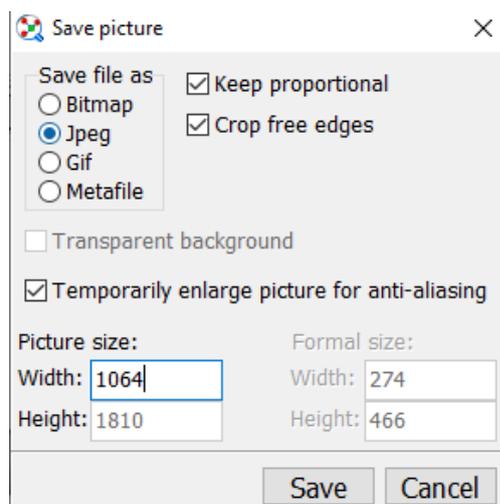


Nota. Software Chemcraft.

5. En *Save file as*, escoger *Jpeg*, y en *picture size: Width* colocar 1064, y finalmente *Save*.

Figura 47.

Ventana "Save picture" opción "Jpeg"



Nota. Software Chemcraft.

3.5.5 Reporte la energía de optimización

A través de la utilización del programa Avogadro se pudo obtener de manera automática las estructuras 3D optimizadas y la energía de optimización en kJ/mol, para todas las moléculas optimizadas presentes en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica. Con el fin de reportarlas en una hoja en Excel para posteriormente analizadas.

Capítulo IV

4. Resultados y discusión

4.1 Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de reforma catalítica.

Con el fin de obtener una lista de las moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de reforma catalítica, se realizó una investigación bibliográfica, mediante la utilización de fuentes bibliográficas online como: biblioteca de la Espe virtual, Google Académico, Google Patents, revistas científicas, *handbooks* y libros, en donde las moléculas obtenidas se muestran en la Tabla 2. En la nafta pesada el total de parafinas es de 0.11% wt, naftenos 30,66% wt y de aromáticos 13.88% wt.

Tabla 2

Componentes nafta pesada

Componente	Nombre	%Masa
Aromáticos		
C ₆ H ₆	Benceno	1.45
C ₇ H ₈	Tolueno	4.06
C ₈ H ₁₀	Etilbenceno	0.52
C ₈ H ₁₀	1,4-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno	0.92
C ₈ H ₁₀	1,3-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno	2.75
C ₈ H ₁₀	1,2-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno	0.87
C ₉ ⁺ Aromáticos	1,2,4-trimetilbenceno	3.31
	1,3,5-trimetilbenceno	
	1-Etil-2-metilbenceno	
	1-Etil-3-metilbenceno	
	1-Etil-4-metilbenceno	
Parafinas y Naftenos		
C ₃ H ₈	Propano	0.79
C ₄ H ₁₀	Isobutano	1.28
C ₄ H ₁₀	<i>n</i> -butano	3.43
C ₅ H ₁₂	Isopentano	5.62
C ₅ H ₁₂	<i>n</i> -Pentano	6.19
C ₅ H ₁₀	Ciclopentano	1.40
C ₆ isoparafinas	Hexano	6.00
	2-metilpentano	
	2,3-dimetilbutano	
	2,2-dimetilbutano	
	3-metilpentano	

Componente	Nombre	%Masa
C_6H_{14}	<i>n</i> -Hexano	5.30
C_6H_{12}	Metilciclopentano	2.58
C_6H_{12}	Ciclohexano	3.26
C_7 isoparafinas	Heptano	4.55
	2,4-dimetilpentano	
	2,3-dimetilpentano	
	3-etilpentano	
	2-metilhexano	
	3-metilhexano	
	2,2,3-trimetilbutano	
	2,2-dimetilpentano	
C_7H_{16}	<i>n</i> -heptano	4.65
C_7 ciclopentanos	1,2-dimetilciclopentano	2.77
	1,3-dimetilciclopentano	
	1-etilciclopentano	
Metilciclohexano	C_7H_{14}	7.57
C_8 isoparafinas	Octano	4.24
	Tetrametilbutano	
	2,2,3-trimetilpentano	
	2,2,4-trimetilpentano	
	2,3,3-trimetilpentano	
	2,3,4-trimetilpentano	
	3-etil-2-metilpentano	
	3-etil-3-metilpentano	
	2,2-dimetilhexano	
	2,3-dimetilhexano	
	2,4-dimetilhexano	
	2,5-dimetilhexano	
	3,3-dimetilhexano	
	3,4-dimetilhexano	
	Etilhexano	
2-metilheptano		
3-metilheptano		
4-metilheptano		
C_8H_{18}	<i>n</i> -octano	3.43
C_8 ciclopentanos	1,2,3-trimetilciclopentano	1.52
	1,2,4-trimetilciclopentano	
	1-propilciclopentano	
	1-etil-3metilciclopentano	
	1-etil-2-metilciclopentano	
C_8 ciclohexanos	1,2-dimetilciclohexano	5.23
	1,3-dimetilciclohexano	
	1,4-dimetilciclohexano	
	1-etilciclohexano	

Componente	Nombre	%Masa
C ₉ naftenos	1,1,2-trimetilciclohexano	3.63
	1,1,3-trimetilciclohexano	
	1,1,4-trimetilciclohexano	
	1,2,3-trimetilciclohexano	
	1,2,4-trimetilciclohexano	
	1,3,5-trimetilciclohexano	
	1-etil-2-metilciclohexano	
	1-etil-3-metilciclohexano	
	1-etil-4-metilciclohexano	
	1-propilciclohexano	
	1,2,3,4-tetrametilciclopentano	
	1,1,2,2-tetrametilciclopentano	
	1,1,2,3-tetrametilciclopentano	
	1,1,2,4-tetrametilciclopentano	
	1,1,3,3-tetrametilciclopentano	
	1,2-dietilciclopentano	
	1-etil-2,3-dimetilciclopentano	
	1-etil-2,4-dimetilciclopentano	
	1,3-dietilciclopentano	
	2-metil-1-propilciclopentano	
	3-metil-1-propilciclopentano	
1-butilciclopentano		
1,1,2,5-tetrametilciclopentano		
1-(1-metiletil)-2-metilciclopentano		
1-(1-metiletil)-3-metilciclopentano		
1-(1-metilpropil)ciclopentano		
1-etil-3,4-dimetilciclopentano		
1-(2-metilpropil)ciclopentano		
C ₉ H ₂₀	nonano	5.93
C ₁₀ naftenos	1-etil-2,2-dimetilciclohexano	1.66
	1,1,2,2-tetrametilciclohexano	
	1,1,3,3-tetrametilciclohexano	
	1,1,4,4-tetrametilciclohexano	
	1-etil-3,3-dimetilciclohexano	
	1-etil-4,4-dimetilciclohexano	
	1,2,3,4-tetrametilciclohexano	
	2-metil-1-propilciclohexano	
	3-metil-1-propilciclohexano	
	4-metil-1-propilciclohexano	
	Butilciclohexano	
	1,2-dietilciclohexano	
	1,3-dietilciclohexano	
1,4-dietilciclohexano		
1-(1-metiletil)-2-metilciclohexano		
1-(1,1-dimetiletil)ciclohexano		

Componente	Nombre	%Masa
	1-(1-metiletil)-3-metilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-4-metilciclohexano	
	1,2,3,4,5-pentametilciclopentano	
	1,1,2,2,3-pentametilciclopentano	
	1,1,2,2,4-pentametilciclopentano	
	1,2-dietil-3-metilciclopentano	
	1,2-dietil-4-metilciclopentano	
	1,1,2,3,3-pentametilciclopentano	
	1,1,2,4,4-pentametilciclopentano	
	1,3-dietil-4-metilciclopentano	
	1,3-dietil-2-metilciclopentano	
	Pentilciclopentano	
	1-butil-2-metilciclopentano	
	1-butil-3-metilciclopentano	
	1-etil-2,3,5-trimetilciclopentano	
	1-etil-2,3,4-trimetilciclopentano	
	1-(1-metiletil)-2-etilciclopentano	
	1-(1-metiletil)-3-etilciclopentano	
	1-(1-metilpropil)-2-metilciclopentano	
	1-(1-metilpropil)-3-metilciclopentano	
	1-(2-metilpropil)-2-metilciclopentano	
	1-(2-metilpropil)-3-metilciclopentano	
	1-(1-metilbutil)ciclopentano	
	1-(2-metilbutil)ciclopentano	
	1-(3-metilbutil)ciclopentano	
	2-etil-1-propilciclopentano	
	1-(1,1-dimetiletil)-2-metilciclopentano	
	1-(1,1-dimetiletil)-3-metilciclopentano	
	3-etil-1-propilciclopentano	
C₁₀H₂₂	decano	3.41
	1-etil-2,2,6-trimetilciclohexano	
	1-etil-1,2,2-trimetilciclohexano	
	1-etil-2,3,3-trimetilciclohexano	
	1-etil-2,4,4-trimetilciclohexano	
	1-etil-3,4,4-trimetilciclohexano	
	1-etil-1,3,3-trimetilciclohexano	
	1-etil-1,4,4-trimetilciclohexano	
C₁₁ naftenos	1-(1-metiletil)-2,2-dimetilciclohexano	1.04
	1-(1-metiletil)-3,3-dimetilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-4,4-dimetilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-3,4-dimetilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-2,4-dimetilciclohexano	
	1,2,3,4,5-pentametilciclohexano	
	1,1,2,3,4-pentametilciclohexano	
	1,1,2,4,5-pentametilciclohexano	

Componente	Nombre	%Masa
	1,1,2,2,3-pentametilciclohexano	
	1,1,2,5,5-pentametilciclohexano	
	1,1,2,3,3-pentametilciclohexano	
	1,1,2,4,4-pentametilciclohexano	
	2,6-dimetil-1-propilciclohexano	
	2,5-dimetil-1-propilciclohexano	
	2,3-dimetil-1-propilciclohexano	
	3,4-dimetil-1-propilciclohexano	
	1,2-dietil-3-metilciclohexano	
	1,3-dietil-2-metilciclohexano	
	1,4-dietil-3-metilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-4-etilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-2-etilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-3-etilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-2,3-dimetilciclohexano	
	1-(1,1-dimetiletil)-2-metilciclohexano	
	1-(1,1-dimetiletil)-3-metilciclohexano	
	1-(1,1-dimetiletil)-4-metilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-2,2-dimetilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-3,3-dimetilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-4,4-dimetilciclohexano	
	pentilciclohexano	
	1-(1-metilbutil)ciclohexano	
	1-(2-metilbutil)ciclohexano	
	1-(3-metilbutil)ciclohexano	
	1-(1,2-dimetilpropil)ciclohexano	
	1-(1,1-dimetilpropil)ciclohexano	
	1-(2,2-dimetilpropil)ciclohexano	
	1,1,2,3,4,5-hexametilciclopentano	
	1,1,2,2,3,3-hexametilciclopentano	
	1,1,2,2,4,5-hexametilciclopentano	
	1,1,2,2,3,4-hexametilciclopentano	
	1,1,2,2,3,5-hexametilciclopentano	
	1,2-dietil-3,4-dimetilciclopentano	
	1,2-dietil-1,2-dimetilciclopentano	
	1,3-dietil-1,3-dimetilciclopentano	
	1,2-dipropilciclopentano	
	1,3-dipropilciclopentano	
	3-etil-2-metil-1-propilciclopentano	
	2-etil-3-metil-1-propilciclopentano	
	2-etil-4-metil-1-propilciclopentano	
	2-metil-1-pentilciclopentano	
	hexilciclopentano	
	1-(1-metilpentil)ciclopentano	
	1-(2-metilpentil)ciclopentano	

Componente	Nombre	%Masa
	1-(3-metilpentil)ciclopentano	
	1-(4-metilpentil)ciclopentano	
	1-(1,2-dimetilbutil)ciclopentano	
	1-(1,3-dimetilbutil)ciclopentano	
	1-(1,1-dimetilbutil)ciclopentano	
	1-(2,2-dimetilbutil)ciclopentano	
	1-(3,3-dimetilbutil)ciclopentano	
	1-(2-metilpropil)-2,3-dimetilciclopentano	
	1-(2-metilpropil)-2,4-dimetilciclopentano	
	1-(2-metilpropil)-2,2-dimetilciclopentano	
	1-(2-metilpropil)-3,3-dimetilciclopentano	
	1-(1,1-dimetiletil)-2,2-dimetilciclopentano	
	1-(1,1-dimetiletil)-3,3-dimetilciclopentano	
	1,2,3-trietilciclopentano	
	1,2,4-trietilciclopentano	
	1,2-dietil-4,4-dimetilciclopentano	
	1,2-dietil-3,3-dimetilciclopentano	
	1-(1,2-dimetilpropil)-3-metilciclopentano	
	1-(1-metiletil)-2,3,5-trimetilciclopentano	
	1-(1,2-dimetilpropil)-2-metilciclopentano	
$C_{11}H_{24}$	undecano	0.53
Total Parafinas		0.11
Total Naftenos		30.66
Total Aromáticos		13.88

Nota. Tabla de los componentes de la nafta pesada. Tomado de (Ahmedzeki & Al-tabbakh, 2016; Antos et al., 2019; Fahim et al., 2010; J. H. Gary et al., 2007; Harandi et al., 1993, 1994; Oyekan, 2019; Parkash, 2003; Paterson, 1995; Randall & Metz, 2016; Samimi et al., 2020; Satterfield, 1996; Soltanali et al., 2020; Treese et al., 2015; Wade, 2012, 2013; Wauquier, 1994; Aminu Z. Yusuf et al., 2020; Aminu Zakari Yusuf et al., 2019; Zhang & Chu, 2018)

4.2 Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de reforma catalítica

Con el fin de obtener una lista de las moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de reforma catalítica, se realizó una investigación bibliográfica, mediante la utilización de fuentes bibliográficas online como: biblioteca de la Espe virtual, Google Académico, Google Patents, revistas científicas, *handbooks* y libros, en donde las moléculas obtenidas se muestran en la Tabla 3. En el reformado el total de parafinas es de 30,84% wt, naftenos 1,10% wt y de olefinas 1.02% wt. En el GLP 40% vol de butano y 60% vol propano. Finalmente, en el Fuel Gas el componente con mayor porcentaje es el metano 49.82% vol, y el menor con un 0% vol se encuentra el *n*-pentano y el neopentano.

Tabla 3

Componentes del reformado

Componente	Nombre	%Masa
Aromáticos		
C ₆ H ₆	Benceno	3.72
C ₇ H ₈	Tolueno	13.97
C ₈ H ₁₀	Etilbenceno	3.13
C ₈ H ₁₀	1,4-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno	3.39
C ₈ H ₁₀	1,3-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno	7.47
C ₈ H ₁₀	1,2-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno	4.83
C ₉ ⁺ Aromáticos	1,2,4-trimetilbenceno	36.05
	1,3,5-trimetilbenceno	
	1-Etil-2-metilbenceno	
	1-Etil-3-metilbenceno	
	1-Etil-4-metilbenceno	
Parafinas y Naftenos		
C ₃ H ₈	Propano	0.00
C ₄ H ₁₀	Isobutano	0.14
C ₄ H ₁₀	<i>n</i> -butano	0.94
C ₅ H ₁₂	Isopentano	2.52
C ₅ H ₁₂	<i>n</i> -Pentano	1.74
C ₅ H ₁₀	Ciclopentano	0.10
C ₆ isoparafinas	Hexano	3.91
	2-metilpentano	
	2,3-dimetilbutano	
	2,2-dimetilbutano	
C ₆ H ₁₄	3-metilpentano	1.74
	<i>n</i> -hexano	
	Metilciclopentano	
C ₆ H ₁₂	Ciclohexano	0.28
C ₆ H ₁₂		0.03

Componente	Nombre	%Masa
C ₇ isoparafinas	Heptano	7.70
	2,4-dimetilpentano	
	2,3-dimetilpentano	
	3-etilpentano	
	2-metilhexano	
	3-metilhexano	
	2,2,3-trimetilbutano	
	2,2-dimetilpentano	
3,3-dimetilpentano		
C ₇ H ₁₆	n-heptano	2.22
C ₇ ciclopentanos	1,2-dimetilciclopentano	0.33
	1,3-dimetilciclopentano	
	1-etilciclopentano	
C ₇ H ₁₄	metilciclohexano	0.04
C ₈ isoparafinas	Octano	2.86
	Tetrametilbutano	
	2,2,3-trimetilpentano	
	2,2,4-trimetilpentano	
	2,3,3-trimetilpentano	
	2,3,4-trimetilpentano	
	3-etil-2-metilpentano	
	3-etil-3-metilpentano	
	2,2-dimetilhexano	
	2,3-dimetilhexano	
	2,4-dimetilhexano	
	2,5-dimetilhexano	
	3,3-dimetilhexano	
	3,4-dimetilhexano	
	Etilhexano	
2-metilheptano		
3-metilheptano		
4-metilheptano		
C ₈ H ₁₈	n-octano	0.62
C ₈ ciclopentanos	1,2,3-trimetilciclopentano	0.14
	1,2,4-trimetilciclopentano	
	1-propilciclopentano	
	1-etil-3metilciclopentano	
	1-etil-2-metilciclopentano	
C ₈ ciclohexanos	1,2-dimetilciclohexano	0.06
	1,3-dimetilciclohexano	
	1,4-dimetilciclohexano	
	1-etilciclohexano	
C ₉ naftenos	1,1,2-trimetilciclohexano	0.04
	1,1,3-trimetilciclohexano	
	1,1,4-trimetilciclohexano	

Componente	Nombre	%Masa
	1,2,3-trimetilciclohexano	
	1,2,4-trimetilciclohexano	
	1,3,5-trimetilciclohexano	
	1-etil-2-metilciclohexano	
	1-etil-3-metilciclohexano	
	1-etil-4-metilciclohexano	
	1-propilciclohexano	
	1,2,3,4-tetrametilciclopentano	
	1,1,2,2-tetrametilciclopentano	
	1,1,2,3-tetrametilciclopentano	
	1,1,2,4-tetrametilciclopentano	
	1,1,3,3-tetrametilciclopentano	
	1,2-dietilciclopentano	
	1-etil-2,3-dimetilciclopentano	
	1-etil-2,4-dimetilciclopentano	
	1,3-dietilciclopentano	
	2-metil-1-propilciclopentano	
	3-metil-1-propilciclopentano	
	1-butilciclopentano	
	1,1,2,5-tetrametilciclopentano	
	1-(1-metiletil)-2-metilciclopentano	
	1-(1-metiletil)-3-metilciclopentano	
	1-(1-metilpropil)ciclopentano	
	1-etil-3,4-dimetilciclopentano	
	1-(2-metilpropil)ciclopentano	
C₈H₁₈	nonano	0.90
	1-etil-2,2-dimetilciclohexano	
	1,1,2,2-tetrametilciclohexano	
	1,1,3,3-tetrametilciclohexano	
	1,1,4,4-tetrametilciclohexano	
	1-etil-3,3-dimetilciclohexano	
	1-etil-4,4-dimetilciclohexano	
	1,2,3,4-tetrametilciclohexano	
	2-metil-1-propilciclohexano	
	3-metil-1-propilciclohexano	
C₁₀ naftenos	4-metil-1-propilciclohexano	0.04
	butilciclohexano	
	1,2-dietilciclohexano	
	1,3-dietilciclohexano	
	1,4-dietilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-2-metilciclohexano	
	1-(1,1-dimetiletil)ciclohexano	
	1-(1-metiletil)-3-metilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-4-metilciclohexano	
	1,2,3,4,5-pentametilciclopentano	

Componente	Nombre	%Masa
	1,1,2,4,4-pentametilciclohexano	
	2,6-dimetil-1-propilciclohexano	
	2,5-dimetil-1-propilciclohexano	
	2,3-dimetil-1-propilciclohexano	
	3,4-dimetil-1-propilciclohexano	
	1,2-dietil-3-metilciclohexano	
	1,3-dietil-2-metilciclohexano	
	1,4-dietil-3-metilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-4-etilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-2-etilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-3-etilciclohexano	
	1-(1-metiletil)-2,3-dimetilciclohexano	
	1-(1,1-dimetiletil)-2-metilciclohexano	
	1-(1,1-dimetiletil)-3-metilciclohexano	
	1-(1,1-dimetiletil)-4-metilciclohexano	
	pentilciclohexano	
	1-(1-metilbutil)ciclohexano	
	1-(2-metilbutil)ciclohexano	
	1-(3-metilbutil)ciclohexano	
	1-(1,2-dimetilpropil)ciclohexano	
	1-(1,1-dimetilpropil)ciclohexano	
	1-(2,2-dimetilpropil)ciclohexano	
	1,1,2,3,4,5-hexametilciclopentano	
	1,1,2,2,3,3-hexametilciclopentano	
	1,1,2,2,4,5-hexametilciclopentano	
	1,1,2,2,3,4-hexametilciclopentano	
	1,1,2,2,3,5-hexametilciclopentano	
	1,2-dietil-3,4-dimetilciclopentano	
	1,2-dietil-1,2-dimetilciclopentano	
	1,3-dietil-1,3-dimetilciclopentano	
	1,2-dipropilciclopentano	
	1,3-dipropilciclopentano	
	3-etil-2-metil-1-propilciclopentano	
	2-etil-3-metil-1-propilciclopentano	
	2-etil-4-metil-1-propilciclopentano	
	2-metil-1-pentilciclopentano	
	hexilciclopentano	
	1-(1-metilpentil)ciclopentano	
	1-(2-metilpentil)ciclopentano	
	1-(3-metilpentil)ciclopentano	
	1-(4-metilpentil)ciclopentano	
	1-(1,2-dimetilbutil)ciclopentano	
	1-(1,3-dimetilbutil)ciclopentano	
	1-(1,1-dimetilbutil)ciclopentano	
	1-(2,2-dimetilbutil)ciclopentano	

Componente	Nombre	%Masa
	1-(3,3-dimetilbutil)ciclopentano	
	1-(2-metilpropil)-2,3-dimetilciclopentano	
	1-(2-metilpropil)-2,4-dimetilciclopentano	
	1-(2-metilpropil)-2,2-dimetilciclopentano	
	1-(2-metilpropil)-3,3-dimetilciclopentano	
	1-(1,1-dimetiletil)-2,2-dimetilciclopentano	
	1-(1,1-dimetiletil)-3,3-dimetilciclopentano	
	1,2,3-trietilciclopentano	
	1,2,4-trietilciclopentano	
	1,2-dietil-4,4-dimetilciclopentano	
	1,2-dietil-3,3-dimetilciclopentano	
	1-(1,2-dimetilpropil)-3-metilciclopentano	
	1-(1-metiletil)-2,3,5-trimetilciclopentano	
	1-(1,2-dimetilpropil)-2-metilciclopentano	
$C_{11}H_{24}$	undecano	0.03
Total Parafinas		30.84
Total Olefinas		1.02
Total Naftenos		1.10

Nota. Tabla de los componentes del reformado. Tomado de (Ahmedzeki & Al-tabbakh, 2016; Antos et al., 2019; Fahim et al., 2010; J. H. Gary et al., 2007; Harandi et al., 1993, 1994; Oyekan, 2019; Parkash, 2003; Paterson, 1995; Randall & Metz, 2016; Samimi et al., 2020; Satterfield, 1996; Soltanali et al., 2020; Treese et al., 2015; Wade, 2012, 2013; Wauquier, 1994; Aminu Z. Yusuf et al., 2020; Aminu Zakari Yusuf et al., 2019; Zhang & Chu, 2018)

Tabla 4

Componentes del Fuel Gas

	Fuel Gas	%vol
	Monóxido de carbono	1.84
	Dióxido de carbono	0.38
	Hidrógeno	13.34
	Nitrógeno	9.19
	Oxígeno	
	Metano	49.82
Fuel Gas	Etano	16.17
	Propano	1.94
	<i>n</i> -butano	0.42
	<i>i</i> -butano	0.46
	<i>n</i> -pentano	0.00
	<i>i</i> -pentano	0.07
	Etileno	4.14

Fuel Gas	%vol
Propileno	1.86
Transbuteno	0.07
Cisbuteno	0.05
Neopentano	0.00
Sulfuro de hidrógeno	0.23

Nota. Tabla de los componentes del Fuel Gas. Tomado de (Zhang & Chu, 2018)

Tabla 5

Componentes de GLP

Componente de GLP	%vol	
GLP	Butano	40
	Propano	60

Nota. Tabla de los componentes del GLP. Tomado de (Gegg & Miranda, 2014; Lau et al., 2013)

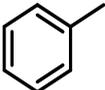
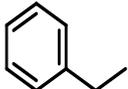
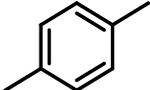
4.3 Procesamiento y obtención de estructuras químicas 1D, 2D y propiedades químicas básicas

4.3.1 Generación de estructuras químicas en 2D

En la presente tabla a través de la utilización del paquete informático de la compañía PerkinElmer el cual proporciona el programa computacional ChemDraw Professional se pudo obtener de manera automática la estructura química 2D, para cada molécula presente en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica.

Tabla 6

Generación de estructuras químicas en 2D

Nombre	Estructura
Benceno	
Tolueno	
Etilbenceno	
1,4-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno	

Nombre	Estructura
1,3-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno	
1,2-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno	
1,2,4-trimetilbenceno	
1,3,5-trimetilbenceno	
1-etil-2-metilbenceno	
1-etil-3-metilbenceno	
1-etil-4-metilbenceno	
Propano	
Isobutano	
<i>n</i> -butano	
isopentano	
<i>n</i> -pentano	
Ciclopentano	
Hexano	
2-metilpentano	
2,3-dimetilbutano	
2,2-dimetilbutano	
3-metilpentano	
<i>n</i> -hexano	
metilciclopentano	
Ciclohexano	
Heptano	

Nombre	Estructura
2,4-dimetilpentano	
2,3-dimetilpentano	
3-etilpentano	
2-metilhexano	
3-metilhexano	
2,2,3-trimetilbutano	
2,2-dimetilpentano	
3,3-dimetipentano	
<i>n</i> -heptano	
1,2-dimetilciclopentano	
1,3-dimetilciclopentano	
1-etilciclopentano	
Metilciclohexano	
Octano	
Tetrametilbutano	
2,2,3-trimetilpentano	
2,2,4-trimetilpentano	
2,3,3-trimetilpentano	
2,3,4-trimetilpentano	

Nombre	Estructura
3-etil-2-metilpentano	
3-etil-3-metilpentano	
2,2-dimetilhexano	
2,3-dimetilhexano	
2,4-dimetilhexano	
2,5-dimetilhexano	
3,3-dimetilhexano	
3,4-dimetilhexano	
Etilhexano	
2-metilheptano	
3-metilheptano	
4-metilheptano	
<i>n</i> -octano	
1,2,3-trimetilciclopentano	
1,2,4-trimetilciclopentano	
1-propilciclopentano	
1-etil-3metilciclopentano	
1-etil-2-metilciclopentano	
1,2-dimetilciclohexano	

Nombre	Estructura
1,3-dimetilciclohexano	
1,4-dimetilciclohexano	
1-etilciclohexano	
1,1,2-trimetilciclohexano	
1,1,3-trimetilciclohexano	
1,1,4-trimetilciclohexano	
1,2,3-trimetilciclohexano	
1,2,4-trimetilciclohexano	
1,3,5-trimetilciclohexano	
1-etil-2-metilciclohexano	
1-etil-3-metilciclohexano	
1-etil-4-metilciclohexano	
1-propilciclohexano	
1,2,3,4-tetrametilciclopentano	
1,1,2,2-tetrametilciclopentano	
1,1,2,3-tetrametilciclopentano	

Nombre	Estructura
1,1,2,4-tetrametilciclopentano	
1,1,3,3-tetrametilciclopentano	
1,2-dietilciclopentano	
1-etil-2,3-dimetilciclopentano	
1-etil-2,4-dimetilciclopentano	
1,3-dietilciclopentano	
2-metil-1-propilciclopentano	
3-metil-1-propilciclopentano	
1-butilciclopentano	
1,1,2,5-tetrametilciclopentano	
1-(1-metiletil)-2-metilciclopentano	
1-(1-metiletil)-3-metilciclopentano	
1-(1-metilpropil)ciclopentano	
1-etil-3,4-dimetilciclopentano	
1-(2-metilpropil)ciclopentano	
Nonano	
1-etil-2,2-dimetilciclohexano	
1,1,2,2-tetrametilciclohexano	

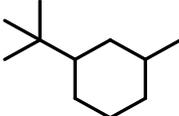
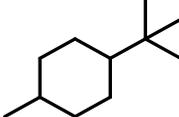
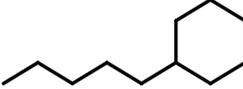
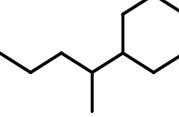
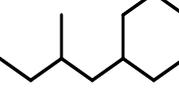
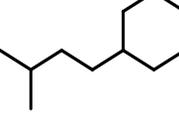
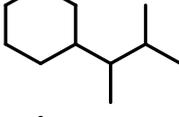
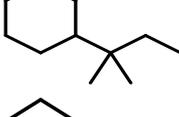
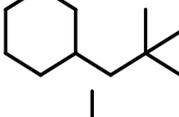
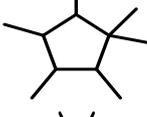
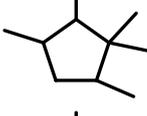
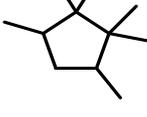
Nombre	Estructura
1,1,3,3-tetrametilciclohexano	
1,1,4,4-tetrametilciclohexano	
1-etil-3,3-dimetilciclohexano	
1-etil-4,4-dimetilciclohexano	
1,2,3,4-tetrametilciclohexano	
2-metil-1-propilciclohexano	
3-metil-1-propilciclohexano	
4-metil-1-propilciclohexano	
butilciclohexano	
1,2-dietilciclohexano	
1,3-dietilciclohexano	
1,4-dietilciclohexano	
1-(1-metiletil)-2-metilciclohexano	
1-(1,1-dimetiletil)ciclohexano	
1-(1-metiletil)-3-metilciclohexano	

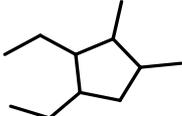
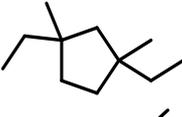
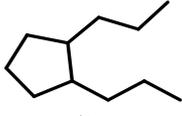
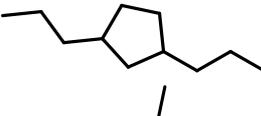
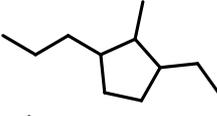
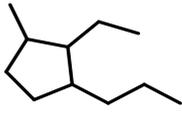
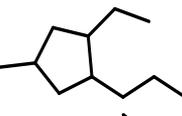
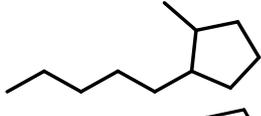
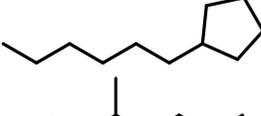
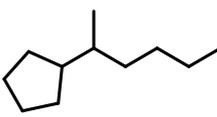
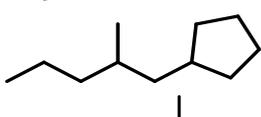
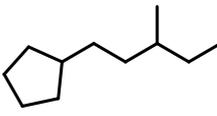
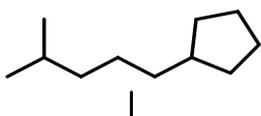
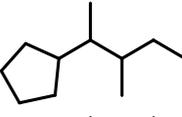
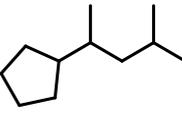
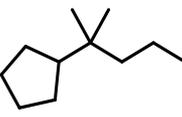
Nombre	Estructura
1-(1-metiletil)-4-metilciclohexano	
1,2,3,4,5-pentametilciclopentano	
1,1,2,2,3-pentametilciclopentano	
1,1,2,2,4-pentametilciclopentano	
1,2-dietil-3-metilciclopentano	
1,2-dietil-4-metilciclopentano	
1,1,2,3,3-pentametilciclopentano	
1,1,2,4,4-pentametilciclopentano	
1,3-dietil-4-metilciclopentano	
1,3-dietil-2-metilciclopentano	
pentilciclopentano	
1-butil-2-metilciclopentano	
1-butil-3-metilciclopentano	
1-etil-2,3,5-trimetilciclopentano	
1-etil-2,3,4-trimetilciclopentano	

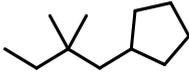
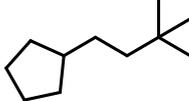
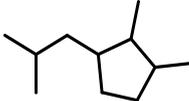
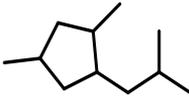
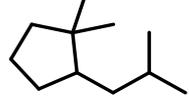
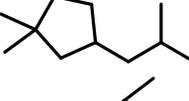
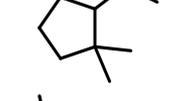
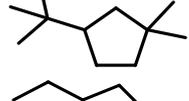
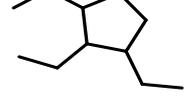
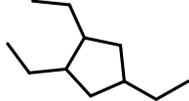
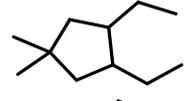
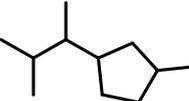
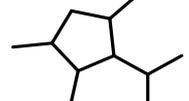
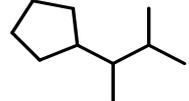
Nombre	Estructura
1-(1-metiletil)-2-etilciclopentano	
1-(1-metiletil)-3-etilciclopentano	
1-(1-metilpropil)-2-metilciclopentano	
1-(1-metilpropil)-3-metilciclopentano	
1-(2-metilpropil)-2-metilciclopentano	
1-(2-metilpropil)-3-metilciclopentano	
1-(1-metilbutil)ciclopentano	
1-(2-metilbutil)ciclopentano	
1-(3-metilbutil)ciclopentano	
2-etil-1-propilciclopentano	
1-(1,1-dimetiletil)-2-metilciclopentano	
1-(1,1-dimetiletil)-3-metilciclopentano	
3-etil-1-propilciclopentano	
Decano	
1-etil-2,2,6-trimetilciclohexano	
1-etil-1,2,2-trimetilciclohexano	
1-etil-2,3,3-trimetilciclohexano	

Nombre	Estructura
1-etil-2,4,4-trimetilciclohexano	
1-etil-3,4,4-trimetilciclohexano	
1-etil-1,3,3-trimetilciclohexano	
1-etil-1,4,4-trimetilciclohexano	
1-(1-metiletil)-2,2-dimetilciclohexano	
1-(1-metiletil)-3,3-dimetilciclohexano	
1-(1-metiletil)-4,4-dimetilciclohexano	
1-(1-metiletil)-3,4-dimetilciclohexano	
1-(1-metiletil)-2,4-dimetilciclohexano	
1,2,3,4,5-pentametilciclohexano	
1,1,2,3,4-pentametilciclohexano	
1,1,2,4,5-pentametilciclohexano	
1,1,2,2,3-pentametilciclohexano	
1,1,2,5,5-pentametilciclohexano	

Nombre	Estructura
1,1,2,3,3-pentametilciclohexano	
1,1,2,4,4-pentametilciclohexano	
2,6-dimetil-1-propilciclohexano	
2,5-dimetil-1-propilciclohexano	
2,3-dimetil-1-propilciclohexano	
3,4-dimetil-1-propilciclohexano	
1,2-dietil-3-metilciclohexano	
1,3-dietil-2-metilciclohexano	
1,4-dietil-3-metilciclohexano	
1-(1-metiletil)-4-etilciclohexano	
1-(1-metiletil)-2-etilciclohexano	
1-(1-metiletil)-3-etilciclohexano	
1-(1-metiletil)-2,3-dimetilciclohexano	
1-(1,1-dimetiletil)-2-metilciclohexano	

Nombre	Estructura
1-(1,1-dimetiletil)-3-metilciclohexano	
1-(1,1-dimetiletil)-4-metilciclohexano	
Pentilciclohexano	
1-(1-metilbutil)ciclohexano	
1-(2-metilbutil)ciclohexano	
1-(3-metilbutil)ciclohexano	
1-(1,2-dimetilpropil)ciclohexano	
1-(1,1-dimetilpropil)ciclohexano	
1-(2,2-dimetilpropil)ciclohexano	
1,1,2,3,4,5-hexametilciclopentano	
1,1,2,2,3,3-hexametilciclopentano	
1,1,2,2,4,5-hexametilciclopentano	
1,1,2,2,3,4-hexametilciclopentano	
1,1,2,2,3,5-hexametilciclopentano	

Nombre	Estructura
1,2-dietil-3,4-dimetilciclopentano	
1,2-dietil-1,2-dimetilciclopentano	
1,3-dietil-1,3-dimetilciclopentano	
1,2-dipropilciclopentano	
1,3-dipropilciclopentano	
3-etil-2-metil-1-propilciclopentano	
2-etil-3-metil-1-propilciclopentano	
2-etil-4-metil-1-propilciclopentano	
2-metil-1-pentilciclopentano	
hexilciclopentano	
1-(1-metilpentil)ciclopentano	
1-(2-metilpentil)ciclopentano	
1-(3-metilpentil)ciclopentano	
1-(4-metilpentil)ciclopentano	
1-(1,2-dimetilbutil)ciclopentano	
1-(1,3-dimetilbutil)ciclopentano	
1-(1,1-dimetilbutil)ciclopentano	

Nombre	Estructura
1-(2,2-dimetilbutil)ciclopentano	
1-(3,3-dimetilbutil)ciclopentano	
1-(2-metilpropil)-2,3-dimetilciclopentano	
1-(2-metilpropil)-2,4-dimetilciclopentano	
1-(2-metilpropil)-2,2-dimetilciclopentano	
1-(2-metilpropil)-3,3-dimetilciclopentano	
1-(1,1-dimetiletil)-2,2-dimetilciclopentano	
1-(1,1-dimetiletil)-3,3-dimetilciclopentano	
1,2,3-trietilciclopentano	
1,2,4-trietilciclopentano	
1,2-dietil-4,4-dimetilciclopentano	
1,2-dietil-3,3-dimetilciclopentano	
1-(1,2-dimetilpropil)-3-metilciclopentano	
1-(1-metiletil)-2,3,5-trimetilciclopentano	
1-(1,2-dimetilpropil)-2-metilciclopentano	
Undecano	
Hidrógeno	H-H
Nitrógeno	N≡N

Nombre	Estructura
Oxígeno	$O=O$
Metano	CH_4
Etano	
Propano	
Etileno	
Propileno	
Trans-buteno	
Cis-buteno	
Neopentano	
Sulfuro de hidrógeno	

Nota. Esta tabla muestra las estructuras químicas en 2D obtenidas en el programa ChemDraw Professional.

4.3.2 Procesamiento de propiedades básicas

Con el fin de obtener de manera automática las propiedades básicas se utiliza el programa computacional ChemDraw Professional, para la generación de: la fórmula química, el peso molecular y el análisis elemental de todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de reforma catalítico, los datos obtenidos se van a presentar en las siguientes tablas:

Tabla 7

Datos de las propiedades básicas del benceno

Propiedades básicas	
Fórmula química	C_6H_6
Peso molecular	78,1140
Análisis elemental	C, 92.26; H, 7.74

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 8

Datos de las propiedades básicas del tolueno

Propiedades básicas	
Fórmula química	C_7H_8
Peso molecular	92,1410
Análisis elemental	C, 91.25; H, 8.75

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 9*Datos de las propiedades básicas del etilbenceno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₀
Peso molecular	106,1680
Análisis elemental	C, 90.51; H, 9.49

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 10*Datos de las propiedades básicas del 1,4-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₀
Peso molecular	106,1680
Análisis elemental	C, 90.51; H, 9.49

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 11*Datos de las propiedades básicas del 1,3-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₀
Peso molecular	106,1680
Análisis elemental	C, 90.51; H, 9.49

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 12*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₀
Peso molecular	106,1680
Análisis elemental	C, 90.51; H, 9.49

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 13*Datos de las propiedades básicas del 1,2,4-trimetilbenceno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₂
Peso molecular	120,1950
Análisis elemental	C, 89.94; H, 10.06

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 14*Datos de las propiedades básicas del 1,3,5-trimetilbenceno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₂
Peso molecular	120,1950
Análisis elemental	C, 89.94; H, 10.06

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 15*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2-metilbenceno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₂
Peso molecular	120,1950
Análisis elemental	C, 89.94; H, 10.06

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 16*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-3-metilbenceno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₂
Peso molecular	120,1950
Análisis elemental	C, 89.94; H, 10.06

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 17*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-4-metilbenceno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₂
Peso molecular	120,1950
Análisis elemental	C, 89.94; H, 10.06

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 18*Datos de las propiedades básicas del propano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₃ H ₈
Peso molecular	44,0970
Análisis elemental	C, 81.71; H, 18.29

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 19*Datos de las propiedades básicas del isobutano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₄ H ₁₀
Peso molecular	58,1240
Análisis elemental	C, 82.66; H, 17.34

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 20*Datos de las propiedades básicas del n-butano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₄ H ₁₀
Peso molecular	58,1240
Análisis elemental	C, 82.66; H, 17.34

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 21*Datos de las propiedades básicas del isopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₅ H ₁₂
Peso molecular	72,1510
Análisis elemental	C, 83.24; H, 16.76

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 22*Datos de las propiedades básicas del n-Pentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₅ H ₁₂
Peso molecular	72,1510
Análisis elemental	C, 83.24; H, 16.76

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 23*Datos de las propiedades básicas del ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₅ H ₁₀
Peso molecular	70,1350
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 24*Datos de las propiedades básicas del hexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₆ H ₁₄
Peso molecular	86,1780
Análisis elemental	C, 83.62; H, 16.38

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 25*Datos de las propiedades básicas del 2-metilpentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₆ H ₁₄
Peso molecular	86,1780
Análisis elemental	C, 83.62; H, 16.38

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 26*Datos de las propiedades básicas del 2,3-dimetilbutano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₆ H ₁₄
Peso molecular	86,1780
Análisis elemental	C, 83.62; H, 16.38

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 27*Datos de las propiedades básicas del 2,2-dimetilbutano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₆ H ₁₄
Peso molecular	86,1780
Análisis elemental	C, 83.62; H, 16.38

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 28*Datos de las propiedades básicas del 3-metilpentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₆ H ₁₄
Peso molecular	86,1780
Análisis elemental	C, 83.62; H, 16.38

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 29*Datos de las propiedades básicas del n-hexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₆ H ₁₄
Peso molecular	86,1780
Análisis elemental	C, 83.62; H, 16.38

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 30*Datos de las propiedades básicas del metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₆ H ₁₂
Peso molecular	84,1620
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 31*Datos de las propiedades básicas del ciclohexano.*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₆ H ₁₂
Peso molecular	84,1620
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 32*Datos de las propiedades básicas del heptano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₆
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 33*Datos de las propiedades básicas del 2,4-dimetilpentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₆
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 34*Datos de las propiedades básicas del 2,3-dimetilpentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₆
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 35*Datos de las propiedades básicas del 3-etilpentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₆
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 36*Datos de las propiedades básicas del 2-metilhexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₆
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 37*Datos de las propiedades básicas del 3-metilhexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₆
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 38*Datos de las propiedades básicas del 2,2,3-trimetilbutano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₆
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 39*Datos de las propiedades básicas del 2,2-dimetilpentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₆
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 40*Datos de las propiedades básicas del 3,3-dimetipentano.*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₆
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 41*Datos de las propiedades básicas del n-heptano.*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₆
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 42*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₄
Peso molecular	98,1890
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 43*Datos de las propiedades básicas del 1,3-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₄
Peso molecular	98,1890
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 44*Datos de las propiedades básicas del 1-etilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₄
Peso molecular	98,1890
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 45*Datos de las propiedades básicas del metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₇ H ₁₄
Peso molecular	98,1890
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 46*Datos de las propiedades básicas del octano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 47*Datos de las propiedades básicas del tetrametilbutano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 48*Datos de las propiedades básicas del 2,2,3-trimetilpentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 49*Datos de las propiedades básicas del 2,2,4-trimetilpentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 50*Datos de las propiedades básicas del 2,3,3-trimetilpentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 51*Datos de las propiedades básicas del 2,3,4-trimetilpentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 52*Datos de las propiedades básicas del 3-etil-2-metilpentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 53*Datos de las propiedades básicas del 3-etil-3-metilpentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 54*Datos de las propiedades básicas del 2,2-dimetilhexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 55*Datos de las propiedades básicas del 2,3-dimetilhexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 56*Datos de las propiedades básicas del 2,4-dimetilhexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 57*Datos de las propiedades básicas del 2,5-dimetilhexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 58*Datos de las propiedades básicas del 3,3-dimetilhexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 59*Datos de las propiedades básicas del 3,4-dimetilhexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 60*Datos de las propiedades básicas del etilhexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 61*Datos de las propiedades básicas del 2-metilheptano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 62*Datos de las propiedades básicas del 3-metilheptano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 63*Datos de las propiedades básicas del 4-metilheptano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 64*Datos de las propiedades básicas del n-octano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 65*Datos de las propiedades básicas del 1,2,3-trimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₆
Peso molecular	112,2160
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 66*Datos de las propiedades básicas del 1,2,4-trimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₆
Peso molecular	112,2160
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 67*Datos de las propiedades básicas del 1-propilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₆
Peso molecular	112,2160
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 68*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-3metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₆
Peso molecular	112,2160
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 69*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₆
Peso molecular	112,2160
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 70*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₆
Peso molecular	112,2160
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 71*Datos de las propiedades básicas del 1,3-dimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₆
Peso molecular	112,2160
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 72*Datos de las propiedades básicas del 1,4-dimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₆
Peso molecular	112,2160
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 73*Datos de las propiedades básicas del 1-etilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₈ H ₁₆
Peso molecular	112,2160
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 74*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 75*Datos de las propiedades básicas del 1,1,3-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 76*Datos de las propiedades básicas del 1,1,4-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 77*Datos de las propiedades básicas del 1,2,3-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 78*Datos de las propiedades básicas del 1,2,4-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 79*Datos de las propiedades básicas del 1,3,5-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 80*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2-metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 81*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-3-metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 82*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-4-metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 83*Datos de las propiedades básicas del 1-propilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 84*Datos de las propiedades básicas del 1,2,3,4-tetrametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 85*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2-tetrametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 86*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,3-tetrametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 87*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,4-tetrametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 88*Datos de las propiedades básicas del 1,1,3,3-tetrametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 89*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 90*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,3-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 91*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,4-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 92*Datos de las propiedades básicas del 1,3-dietilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 93*Datos de las propiedades básicas del 2-metil-1-propilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 94*Datos de las propiedades básicas del 3-metil-1-propilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 95*Datos de las propiedades básicas del 1-butilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 96*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,5-tetrametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 97*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 98*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-3-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 99*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metilpropil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 100*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-3,4-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 101*Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₁₈
Peso molecular	126,2430
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 102*Datos de las propiedades básicas del nonano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₉ H ₂₀
Peso molecular	128,2590
Análisis elemental	C, 84.28; H, 15.72

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 103*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,2-dimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 104*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2-tetrametilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 105*Datos de las propiedades básicas del 1,1,3,3-tetrametilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 106*Datos de las propiedades básicas del 1,1,4,4-tetrametilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 107*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-3,3-dimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 108*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-4,4-dimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 109*Datos de las propiedades básicas del 1,2,3,4-tetrametilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 110*Datos de las propiedades básicas del 2-metil-1-propilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 111*Datos de las propiedades básicas del 3-metil-1-propilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 112*Datos de las propiedades básicas del 4-metil-1-propilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 113*Datos de las propiedades básicas del butilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 114*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 115*Datos de las propiedades básicas del 1,3-dietilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 116*Datos de las propiedades básicas del 1,4-dietilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 117*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2-metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 118*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)ciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 119*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-3-metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 120*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-4-metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 121*Datos de las propiedades básicas del 1,2,3,4,5-pentametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 122*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,3-pentametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 123*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,4-pentametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 124*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-3-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 125*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-4-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 126*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,3,3-pentametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 127*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,4,4-pentametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 128*Datos de las propiedades básicas del 1,3-dietil-4-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 129*Datos de las propiedades básicas del 1,3-dietil-2-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 130*Datos de las propiedades básicas del pentilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 131*Datos de las propiedades básicas del 1-butil-2-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 132*Datos de las propiedades básicas del 1-butil-3-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 133*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,3,5-trimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 134*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,3,4-trimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 135*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2-etilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 136*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-3-etilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 137*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metilpropil)-2-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 138*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metilpropil)-3-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 139*Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)-2-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 140*Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)-3-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 141*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metilbutil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 142*Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilbutil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 143*Datos de las propiedades básicas del 1-(3-metilbutil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 144*Datos de las propiedades básicas del 2-etil-1-propilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 145*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-2-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 146*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-3-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 147*Datos de las propiedades básicas del 3-etil-1-propilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 148*Datos de las propiedades básicas del decano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₀ H ₂₀
Peso molecular	140,2700
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 149*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,2,6-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 150*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-1,2,2-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 151*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,3,3-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 152*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-2,4,4-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 153*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-3,4,4-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 154*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-1,3,3-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 155*Datos de las propiedades básicas del 1-etil-1,4,4-trimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 156*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2,2-dimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 157*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-4,4-dimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 158*Datos de las propiedades básicas 1-(1-metiletil)-3,4-dimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 159*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2,4-dimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 160*Datos de las propiedades básicas del 1,2,3,4,5-pentametilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 161*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,3,4-pentametilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 162*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,4,5-pentametilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 163*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,3-pentametilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 164*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,5,5-pentametilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 165*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,3,3-pentametilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 166*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,4,4-pentametilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 167*Datos de las propiedades básicas del 2,6-dimetil-1-propilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 168*Datos de las propiedades básicas del 2,5-dimetil-1-propilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 169*Datos de las propiedades básicas del 2,3-dimetil-1-propilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 170*Datos de las propiedades básicas del 3,4-dimetil-1-propilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 171*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-3-metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 172*Datos de las propiedades básicas del 1,3-dietil-2-metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 173*Datos de las propiedades básicas del 1,4-dietil-3-metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 174*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-4-etilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 175*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2-etilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 176*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-3-etilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 177*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2,3-dimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 178*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-2-metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 179*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-3-metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 180*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-4-metilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 181*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-3,3-dimetilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 182*Datos de las propiedades básicas del pentilciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 183*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metilbutil)ciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 184*Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilbutil)ciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 185*Datos de las propiedades básicas del 1-(3-metilbutil)ciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 186*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,2-dimetilpropil)ciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 187*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetilpropil)ciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 188*Datos de las propiedades básicas del 1-(2,2-dimetilpropil)ciclohexano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 189*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,3,4,5-hexametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 190*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,3,3-hexametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 191*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,4,5-hexametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 192*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,3,4-hexametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 193*Datos de las propiedades básicas del 1,1,2,2,3,5-hexametilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 194*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-3,4-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 195*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-1,2-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 196*Datos de las propiedades básicas del 1,3-dietil-1,3-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 197*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dipropilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 198*Datos de las propiedades básicas del 1,3-dipropilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 199*Datos de las propiedades básicas del 3-etil-2-metil-1-propilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 200*Datos de las propiedades básicas del 2-etil-3-metil-1-propilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 201*Datos de las propiedades básicas del 2-etil-4-metil-1-propilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 202*Datos de las propiedades básicas del 2-metil-1-pentilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 203*Datos de las propiedades básicas del hexilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 204*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metilpentil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 205*Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpentil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 206*Datos de las propiedades básicas del 1-(3-metilpentil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 207*Datos de las propiedades básicas del 1-(4-metilpentil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 208*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,2-dimetilbutil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 209*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,3-dimetilbutil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 210*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetilbutil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 211*Datos de las propiedades básicas del 1-(2,2-dimetilbutil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 212*Datos de las propiedades básicas del 1-(3,3-dimetilbutil)ciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 213*Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)-2,3-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 214*Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)-2,4-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 215*Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)-2,2-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 216*Datos de las propiedades básicas del 1-(2-metilpropil)-3,3-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 217*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-2,2-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 218*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,1-dimetiletil)-3,3-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 219*Datos de las propiedades básicas del 1,2,3-trietilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 220*Datos de las propiedades básicas del 1,2,4-trietilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 221*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-4,4-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 222*Datos de las propiedades básicas del 1,2-dietil-3,3-dimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 223*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,2-dimetilpropil)-3-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 224*Datos de las propiedades básicas del 1-(1-metiletil)-2,3,5-trimetilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 225*Datos de las propiedades básicas del 1-(1,2-dimetilpropil)-2-metilciclopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₂
Peso molecular	154,2970
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 226*Datos de las propiedades básicas del undecano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₁₁ H ₂₄
Peso molecular	156,3130
Análisis elemental	C, 84.52; H, 15.48

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 227*Datos de las propiedades básicas del monóxido de carbono*

Propiedades básicas	
Fórmula química	CO
Peso molecular	28,0100
Análisis elemental	C, 42,88; O, 57,12

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 228*Datos de las propiedades básicas del dióxido de carbono*

Propiedades básicas	
Fórmula química	CO ₂
Peso molecular	44,0090
Análisis elemental	C, 27.29; O, 72.71

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 229*Datos de las propiedades básicas del hidrógeno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	H ₂
Peso molecular	2,0160
Análisis elemental	H, 100.00

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 230*Datos de las propiedades básicas del nitrógeno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	N ₂
Peso molecular	28,0140
Análisis elemental	N, 100.00

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 231*Datos de las propiedades básicas del oxígeno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	O ₂
Peso molecular	31,9980
Análisis elemental	O, 100.00

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 232*Datos de las propiedades básicas del metano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	CH ₄
Peso molecular	16,0430
Análisis elemental	C, 74.87; H, 25.13

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 233*Datos de las propiedades básicas del etano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₂ H ₆
Peso molecular	30,0700
Análisis elemental	C, 79.89; H, 20.11

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 234*Datos de las propiedades básicas del etileno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₂ H ₄
Peso molecular	28,0540
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 235*Datos de las propiedades básicas del propileno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₃ H ₆
Peso molecular	42,0810
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 236*Datos de las propiedades básicas del trans-buteno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₄ H ₈
Peso molecular	56,1080
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 237*Datos de las propiedades básicas del cis-buteno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₄ H ₈
Peso molecular	56,1080
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 238*Datos de las propiedades básicas del neopentano*

Propiedades básicas	
Fórmula química	C ₅ H ₁₂
Peso molecular	72,1510
Análisis elemental	C, 83.24; H, 16.76

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 239*Datos de las propiedades básicas del Sulfuro de hidrógeno*

Propiedades básicas	
Fórmula química	H ₂ S
Peso molecular	34,0760
Análisis elemental	H, 5.92; S, 94.08

Nota. ChemDraw Professional

4.3.3 Generación automática de nomenclatura IUPAC

Con el fin de obtener de manera automática la nomenclatura IUPAC se utiliza el programa computacional del software ChemDraw Professional, para la generación de la nomenclatura IUPAC de todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de reforma catalítico, los datos obtenidos se van a presentar en las siguientes tablas:

Tabla 240

Nomenclatura IUPAC molécula 1-33.

Número de molécula	Nomenclatura IUPAC
1	Benceno
2	Tolueno
3	Etilbenceno
4	1,4-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno
5	1,3-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno
6	1,2-dimetil-1,3,5-ciclohexatrieno
7	1,2,4-trimetilbenceno
8	1,3,5-trimetilbenceno
9	1-etil-2-metilbenceno
10	1-etil-3-metilbenceno
11	1-etil-4-metilbenceno
12	Propano
13	Isobutano
14	n-butano
15	isopentano
16	n-pentano
17	Ciclopentano
18	Hexano
19	2-metilpentano
20	2,3-dimetilbutano
21	2,2-dimetilbutano
22	3-metilpentano
23	n-hexano
24	metilciclopentano
25	Ciclohexano
26	Heptano
27	2,4-dimetilpentano
28	2,3-dimetilpentano
29	3-etilpentano
30	2-metilhexano
31	3-metilhexano
32	2,2,3-trimetilbutano
33	2,2-dimetilpentano

Tabla 241*Nomenclatura IUPAC molécula 34-70.*

Número de molécula	Nomenclatura IUPAC
34	3,3-dimetipentano
35	n-heptano
36	1,2-dimetilciclopentano
37	1,3-dimetilciclopentano
38	1-etilciclopentano
39	Metilciclohexano
40	Octano
41	Tetrametilbutano
42	2,2,3-trimetilpentano
43	2,2,4-trimetilpentano
44	2,3,3-trimetilpentano
45	2,3,4-trimetilpentano
46	3-etil-2-metilpentano
47	3-etil-3-metilpentano
48	2,2-dimetilhexano
49	2,3-dimetilhexano
50	2,4-dimetilhexano
51	2,5-dimetilhexano
52	3,3-dimetilhexano
53	3,4-dimetilhexano
54	Etilhexano
55	2-metilheptano
56	3-metilheptano
57	4-metilheptano
58	n-octano
59	1,2,3-trimetilciclopentano
60	1,2,4-trimetilciclopentano
61	1-propilciclopentano
62	1-etil-3-metilciclopentano
63	1-etil-2-metilciclopentano
64	1,2-dimetilciclohexano
65	1,3-dimetilciclohexano
66	1,4-dimetilciclohexano
67	1-etilciclohexano
68	1,1,2-trimetilciclohexano
69	1,1,3-trimetilciclohexano
70	1,1,4-trimetilciclohexano

Tabla 242

Nomenclatura IUPAC molécula 71-106.

Número de molécula	Nomenclatura IUPAC
71	1,2,3-trimetilciclohexano
72	1,2,4-trimetilciclohexano
73	1,3,5-trimetilciclohexano
74	1-etil-2-metilciclohexano
75	1-etil-3-metilciclohexano
76	1-etil-4-metilciclohexano
77	1-propilciclohexano
78	1,2,3,4-tetrametilciclopentano
79	1,1,2,2-tetrametilciclopentano
80	1,1,2,3-tetrametilciclopentano
81	1,1,2,4-tetrametilciclopentano
82	1,1,3,3-tetrametilciclopentano
83	1,2-dietilciclopentano
84	1-etil-2,3-dimetilciclopentano
85	1-etil-2,4-dimetilciclopentano
86	1,3-dietilciclopentano
87	2-metil-1-propilciclopentano
88	3-metil-1-propilciclopentano
89	1-butilciclopentano
90	1,1,2,5-tetrametilciclopentano
91	1-(1-metiletil)-2-metilciclopentano
92	1-(1-metiletil)-3-metilciclopentano
93	1-(1-metilpropil)ciclopentano
94	1-etil-3,4-dimetilciclopentano
95	1-(2-metilpropil)ciclopentano
96	Nonano
97	1-etil-2,2-dimetilciclohexano
98	1,1,2,2-tetrametilciclohexano
99	1,1,3,3-tetrametilciclohexano
100	1,1,4,4-tetrametilciclohexano
101	1-etil-3,3-dimetilciclohexano
102	1-etil-4,4-dimetilciclohexano
103	1,2,3,4-tetrametilciclohexano
104	2-metil-1-propilciclohexano
105	3-metil-1-propilciclohexano
106	4-metil-1-propilciclohexano

Tabla 243

Nomenclatura IUPAC molécula 107-142.

Número de molécula	Nomenclatura IUPAC
107	butilciclohexano
108	1,2-dietilciclohexano
109	1,3-dietilciclohexano
110	1,4-dietilciclohexano
111	1-(1-metiletil)-2-metilciclohexano
112	1-(1,1-dimetiletil)ciclohexano
113	1-(1-metiletil)-3-metilciclohexano
114	1-(1-metiletil)-4-metilciclohexano
115	1,2,3,4,5-pentametilciclopentano
116	1,1,2,2,3-pentametilciclopentano
117	1,1,2,2,4-pentametilciclopentano
118	1,2-dietil-3-metilciclopentano
119	1,2-dietil-4-metilciclopentano
120	1,1,2,3,3-pentametilciclopentano
121	1,1,2,4,4-pentametilciclopentano
122	1,3-dietil-4-metilciclopentano
123	1,3-dietil-2-metilciclopentano
124	pentilciclopentano
125	1-butil-2-metilciclopentano
126	1-butil-3-metilciclopentano
127	1-etil-2,3,5-trimetilciclopentano
128	1-etil-2,3,4-trimetilciclopentano
129	1-(1-metiletil)-2-etilciclopentano
130	1-(1-metiletil)-3-etilciclopentano
131	1-(1-metilpropil)-2-metilciclopentano
132	1-(1-metilpropil)-3-metilciclopentano
133	1-(2-metilpropil)-2-metilciclopentano
134	1-(2-metilpropil)-3-metilciclopentano
135	1-(1-metilbutil)ciclopentano
136	1-(2-metilbutil)ciclopentano
137	1-(3-metilbutil)ciclopentano
138	2-etil-1-propilciclopentano
139	1-(1,1-dimetiletil)-2-metilciclopentano
140	1-(1,1-dimetiletil)-3-metilciclopentano
141	3-etil-1-propilciclopentano
142	Decano

Tabla 244

Nomenclatura IUPAC molécula 143-178.

Número de molécula	Nomenclatura IUPAC
143	1-etil-2,2,6-trimetilciclohexano
144	1-etil-1,2,2-trimetilciclohexano
145	1-etil-2,3,3-trimetilciclohexano
146	1-etil-2,4,4-trimetilciclohexano
147	1-etil-3,4,4-trimetilciclohexano
148	1-etil-1,3,3-trimetilciclohexano
149	1-etil-1,4,4-trimetilciclohexano
150	1-(1-metiletil)-2,2-dimetilciclohexano
151	1-(1-metiletil)-4,4-dimetilciclohexano
152	1-(1-metiletil)-3,4-dimetilciclohexano
153	1-(1-metiletil)-2,4-dimetilciclohexano
154	1,2,3,4,5-pentametilciclohexano
155	1,1,2,3,4-pentametilciclohexano
156	1,1,2,4,5-pentametilciclohexano
157	1,1,2,2,3-pentametilciclohexano
158	1,1,2,5,5-pentametilciclohexano
159	1,1,2,3,3-pentametilciclohexano
160	1,1,2,4,4-pentametilciclohexano
161	2,6-dimetil-1-propilciclohexano
162	2,5-dimetil-1-propilciclohexano
163	2,3-dimetil-1-propilciclohexano
164	3,4-dimetil-1-propilciclohexano
165	1,2-dietil-3-metilciclohexano
166	1,3-dietil-2-metilciclohexano
167	1,4-dietil-3-metilciclohexano
168	1-(1-metiletil)-4-etilciclohexano
169	1-(1-metiletil)-2-etilciclohexano
170	1-(1-metiletil)-3-etilciclohexano
171	1-(1-metiletil)-2,3-dimetilciclohexano
172	1-(1,1-dimetiletil)-2-metilciclohexano
173	1-(1,1-dimetiletil)-3-metilciclohexano
174	1-(1,1-dimetiletil)-4-metilciclohexano
175	1-(1-metiletil)-3,3-dimetilciclohexano
176	Pentilciclohexano
177	1-(1-metilbutil)ciclohexano
178	1-(2-metilbutil)ciclohexano

Tabla 245

Nomenclatura IUPAC molécula 179-214.

Número de molécula	Nomenclatura IUPAC
179	1-(3-metilbutil)ciclohexano
180	1-(1,2-dimetilpropil)ciclohexano
181	1-(1,1-dimetilpropil)ciclohexano
182	1-(2,2-dimetilpropil)ciclohexano
183	1,1,2,3,4,5-hexametilciclopentano
184	1,1,2,2,3,3-hexametilciclopentano
185	1,1,2,2,4,5-hexametilciclopentano
186	1,1,2,2,3,4-hexametilciclopentano
187	1,1,2,2,3,5-hexametilciclopentano
188	1,2-dietil-3,4-dimetilciclopentano
189	1,2-dietil-1,2-dimetilciclopentano
190	1,3-dietil-1,3-dimetilciclopentano
191	1,2-dipropilciclopentano
192	1,3-dipropilciclopentano
193	3-etil-2-metil-1-propilciclopentano
194	2-etil-3-metil-1-propilciclopentano
195	2-etil-4-metil-1-propilciclopentano
196	2-metil-1-pentilciclopentano
197	hexilciclopentano
198	1-(1-metilpentil)ciclopentano
199	1-(2-metilpentil)ciclopentano
200	1-(3-metilpentil)ciclopentano
201	1-(4-metilpentil)ciclopentano
202	1-(1,2-dimetilbutil)ciclopentano
203	1-(1,3-dimetilbutil)ciclopentano
204	1-(1,1-dimetilbutil)ciclopentano
205	1-(2,2-dimetilbutil)ciclopentano
206	1-(3,3-dimetilbutil)ciclopentano
207	1-(2-metilpropil)-2,3-dimetilciclopentano
208	1-(2-metilpropil)-2,4-dimetilciclopentano
209	1-(2-metilpropil)-2,2-dimetilciclopentano
210	1-(2-metilpropil)-3,3-dimetilciclopentano
211	1-(1,1-dimetiletil)-2,2-dimetilciclopentano
212	1-(1,1-dimetiletil)-3,3-dimetilciclopentano
213	1,2,3-trietilciclopentano
214	1,2,4-trietilciclopentano

Tabla 246

Nomenclatura IUPAC molécula 215-238.

Número de molécula	Nomenclatura IUPAC
215	1,2-dietil-4,4-dimetilciclopentano
216	1,2-dietil-3,3-dimetilciclopentano
217	1-(1,2-dimetilpropil)-3-metilciclopentano
218	1-(1-metiletil)-2,3,5-trimetilciclopentano
219	1-(1,2-dimetilpropil)-2-metilciclopentano
220	Undecano
221	Monóxido de carbono
222	Dioxido de carbono
223	Hidrógeno
224	Nitrogeno
225	Oxígeno
226	Metano
227	Etano
228	Propano
229	n-butano
230	i-butane
231	n-pentane
232	i-pentane
233	Etileno
234	Propileno
235	Trans-buteno
236	cis-buteno
237	Neopentano
238	Sulfuro de hidrógeno

4.3.4 Generación automática del código SMILES

Con el fin de obtener de manera automática el código SMILES se utiliza el programa computacional ChemDraw Professional, para la generación del código de todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de reforma catalítico, los datos obtenidos se van a presentar en las siguientes tablas:

Tabla 247

Nomenclatura código SMILES molécula 1-33.

Número de molécula	Código SMILES
1	<chem>C1=CC=CC=C1</chem>
2	<chem>CC1=CC=CC=C1</chem>
3	<chem>CCC1=CC=CC=C1</chem>
4	<chem>CC1=CC=C(C)C=C1</chem>
5	<chem>CC1=CC=CC(C)=C1</chem>
6	<chem>CC1=C(C)C=CC=C1</chem>
7	<chem>CC1=CC=C(C)C(C)=C1</chem>
8	<chem>CC1=CC(C)=CC(C)=C1</chem>
9	<chem>CC1=CC=CC=C1CC</chem>
10	<chem>CC1=CC(CC)=CC=C1</chem>
11	<chem>CC1=CC=C(CC)C=C1</chem>
12	<chem>CCC</chem>
13	<chem>CCC</chem>
14	<chem>CCCC</chem>
15	<chem>CCC(C)C</chem>
16	<chem>CCCCC</chem>
17	<chem>C1CCCC1</chem>
18	<chem>CCCCC</chem>
19	<chem>CC(C)CCC</chem>
20	<chem>CC(C)C(C)C</chem>
21	<chem>CC(C)(C)CC</chem>
22	<chem>CCC(C)CC</chem>
23	<chem>CCCCC</chem>
24	<chem>CC1CCCC1</chem>
25	<chem>C1CCCCC1</chem>
26	<chem>CCCCC</chem>
27	<chem>CC(C)CC(C)C</chem>
28	<chem>CC(C)C(C)CC</chem>
29	<chem>CCC(CC)CC</chem>
30	<chem>CC(C)CCCC</chem>
31	<chem>CCC(C)CCC</chem>
32	<chem>CC(C)(C)C(C)C</chem>
33	<chem>CC(C)(C)CCC</chem>

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 248*Nomenclatura código SMILES molécula 34-70.*

Número de molécula	Código SMILES
34	CCC(C)(C)CC
35	CCCCCCC
36	CC1C(C)CCC1
37	CC1CC(C)CC1
38	CCC1CCCC1
39	CC1CCCCC1
40	CCCCCCCC
41	CCC(C)C(C)(C)C
42	CC(C)(C)C(C)CC
43	CC(C)(C)CC(C)C
44	CC(C)C(C)(C)CC
45	CC(C)C(C)C(C)C
46	CC(C)C(CC)CC
47	CCC(C)(CC)CC
48	CC(C)(C)CCCC
49	CC(C)C(C)CCC
50	CC(C)CC(C)CC
51	CC(C)CCC(C)C
52	CCC(C)(C)CCC
53	CCC(C)C(C)CC
54	CC(CC)CCCC
55	CC(C)CCCCCC
56	CCC(C)CCCC
57	CCCC(C)CCC
58	CCCCCCCC
59	CC1C(C)C(C)CC1
60	CC1CC(C)C(C)C1
61	CCCC1CCCC1
62	CC1CC(CC)CC1
63	CC1C(CC)CCC1
64	CC1C(C)CCCC1
65	CC1CC(C)CCC1
66	CC1CCC(C)CC1
67	CCC1CCCCC1
68	CC1C(C)(C)CCCC1
69	CC1CC(C)(C)CCC1
70	CC1CCC(C)(C)CC1

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 249

Nomenclatura código SMILES molécula 71-106.

Número de molécula	Código SMILES
71	<chem>CC1C(C)C(C)CCC1</chem>
72	<chem>CC1CC(C)C(C)CC1</chem>
73	<chem>CC1CC(C)CC(C)C1</chem>
74	<chem>CC1C(CC)CCCC1</chem>
75	<chem>CC1CC(CC)CCC1</chem>
76	<chem>CC1CCC(CC)CC1</chem>
77	<chem>CCCC1CCCC1</chem>
78	<chem>CC1C(C)C(C)C(C)C1</chem>
79	<chem>CC1(C)C(C)(C)CCC1</chem>
80	<chem>CC1C(C)C(C)(C)CC1</chem>
81	<chem>CC1CC(C)C(C)(C)C1</chem>
82	<chem>CC1(C)CC(C)(C)CC1</chem>
83	<chem>CCC1C(CC)CCC1</chem>
84	<chem>CC1C(C)C(CC)CC1</chem>
85	<chem>CC1CC(C)C(CC)C1</chem>
86	<chem>CCC1CC(CC)CC1</chem>
87	<chem>CCCC1C(C)CCC1</chem>
88	<chem>CCCC1CC(C)CC1</chem>
89	<chem>CCCCC1CCCC1</chem>
90	<chem>CC1CCC(C)C1(C)C</chem>
91	<chem>CC1C(C(C)C)CCC1</chem>
92	<chem>CC1CC(C(C)C)CC1</chem>
93	<chem>CCC(C1CCCC1)C</chem>
94	<chem>CC1C(C)CC(CC)C1</chem>
95	<chem>CC(C)CC1CCCC1</chem>
96	<chem>CCCCCCCC</chem>
97	<chem>CC1(C)C(CC)CCCC1</chem>
98	<chem>CC1C(C)(C)CCCC1</chem>
99	<chem>CC1(C)CC(C)(C)CCC1</chem>
100	<chem>CC1(C)CCC(C)(C)CC1</chem>
101	<chem>CC1(C)CC(CC)CCC1</chem>
102	<chem>CC1(C)CCC(CC)CC1</chem>
103	<chem>CC1C(C)C(C)C(C)CC1</chem>
104	<chem>CCCC1C(C)CCCC1</chem>
105	<chem>CCCC1CC(C)CCC1</chem>
106	<chem>CCCC1CCC(C)CC1</chem>

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 250

Nomenclatura código SMILES molécula 107-142.

Número de molécula	Código SMILES
107	CCCCC1CCCCC1
108	CCC1C(CC)CCCC1
109	CCC1CC(CC)CCC1
110	CCC1CCC(CC)CC1
111	CC1C(CC)CCCC1
112	CC(C1CCCCC1)(C)C
113	CC1CC(C(C)C)CCC1
114	CC1CCC(C(C)C)CC1
115	CC1C(C)C(C)C(C)C1C
116	CC1C(C)(C)C(C)(C)CC1
117	CC1CC(C)(C)C(C)(C)C1
118	CC1C(CC)C(CC)CC1
119	CC1CC(CC)C(CC)C1
120	CC1(C)C(C)C(C)(C)CC1
121	CC1(C)CC(C)C(C)(C)C1
122	CC1C(CC)CC(CC)C1
123	CC1C(CC)CCC1CC
124	CCCCC1CCCC1
125	CC1C(CCCC)CCC1
126	CC1CC(CCCC)CC1
127	CC1CC(C)C(C)C1CC
128	CC1C(C)C(C)C(CC)C1
129	CCC1C(C(C)C)CCC1
130	CCC1CC(C(C)C)CC1
131	CC1C(C(C)CC)CCC1
132	CC1CC(CCC)CC1
133	CC1C(CC(C)C)CCC1
134	CC1CC(CC(C)C)CC1
135	CCCC(C1CCCC1)C
136	CCC(C)CC1CCCC1
137	CC(C)CCC1CCCC1
138	CCCC1C(CC)CCC1
139	CC1C(C(C)(C)C)CCC1
140	CC1CC(C(C)(C)C)CC1
141	CCCC1CC(CC)CC1
142	CCCCCCCCC

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 251*Nomenclatura código SMILES molécula 143-178.*

Número de molécula	Código SMILES
143	CC1CCCC(C)(C)C1CC
144	CC1(C)C(C)(CC)CCCC1
145	CC1(C)C(C)C(CC)CCC1
146	CC1(C)CC(C)C(CC)CC1
147	CC1(C)C(C)CC(CC)CC1
148	CC1(C)CC(C)(CC)CCC1
149	CC1(C)CCC(C)(CC)CC1
150	CC1(C)C(C(C)C)CCCC1
151	CC1(C)CCC(C(C)C)CC1
152	CC1C(C)CC(C(C)C)CC1
153	CC1CC(C)C(C(C)C)CC1
154	CC1C(C)CC(C)C(C)C1
155	CC1C(C)C(C)C(C)(C)CC1
156	CC1C(C)CC(C)C(C)(C)C1
157	CC1C(C)(C)C(C)(C)CCC1
158	CC1(C)CCC(C)C(C)(C)C1
159	CC1(C)C(C)C(C)(C)CCC1
160	CC1(C)CC(C)C(C)(C)CC1
161	CCCC1C(C)CCCC1C
162	CCCC1C(C)CCC(C)C1
163	CCCC1C(C)C(C)CCC1
164	CCCC1CC(C)C(C)CC1
165	CC1C(CC)C(CC)CCC1
166	CC1C(CC)CCCC1CC
167	CC1CC(CC)CCC1CC
168	CCC1CCC(C(C)C)CC1
169	CCC1C(C(C)C)CCCC1
170	CCC1CC(C(C)C)CCC1
171	CC1C(C)C(C(C)C)CCC1
172	CC1C(C(C)(C)C)CCCC1
173	CC1CC(C(C)(C)C)CCC1
174	CC1CCC(C(C)(C)C)CC1
175	CC1(C)CC(C(C)C)CCC1
176	CCCCCC1CCCCC1
177	CCCC(C1CCCCC1)C
178	CCC(C)CC1CCCCC1

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 252*Nomenclatura código SMILES molécula 179-214.*

Número de molécula	Código SMILES
179	<chem>CC(C)CCC1CCCCC1</chem>
180	<chem>CC(C)C(C1CCCCC1)C</chem>
181	<chem>CCC(C1CCCCC1)(C)C</chem>
182	<chem>CC(C)(C)CC1CCCCC1</chem>
183	<chem>CC1C(C)C(C)C(C)C1(C)C</chem>
184	<chem>CC1(C)C(C)(C)C(C)(C)CC1</chem>
185	<chem>CC1C(C)CC(C)(C)C1(C)C</chem>
186	<chem>CC1C(C)C(C)(C)C(C)(C)C1</chem>
187	<chem>CC1CC(C)C(C)(C)C1(C)C</chem>
188	<chem>CC1C(C)C(CC)C(CC)C1</chem>
189	<chem>CC1(CC)C(C)(CC)CCC1</chem>
190	<chem>CC1(CC)CC(C)(CC)CC1</chem>
191	<chem>CCCC1C(CCC)CCC1</chem>
192	<chem>CCCC1CC(CCC)CC1</chem>
193	<chem>CCCC1C(C)C(CC)CC1</chem>
194	<chem>CCCC1C(CC)C(C)CC1</chem>
195	<chem>CCCC1C(CC)CC(C)C1</chem>
196	<chem>CCCCCC1C(C)CCC1</chem>
197	<chem>CCCCCCC1CCCC1</chem>
198	<chem>CCCCC(C1CCCC1)C</chem>
199	<chem>CCCC(C)CC1CCCC1</chem>
200	<chem>CCC(C)CCC1CCCC1</chem>
201	<chem>CC(C)CCCC1CCCC1</chem>
202	<chem>CCC(C)C(C1CCCC1)C</chem>
203	<chem>CC(C)CC(C1CCCC1)C</chem>
204	<chem>CCCC(C1CCCC1)(C)C</chem>
205	<chem>CCC(C)(C)CC1CCCC1</chem>
206	<chem>CC(C)(C)CCC1CCCC1</chem>
207	<chem>CC1C(C)C(CC(C)C)CC1</chem>
208	<chem>CC1CC(C)C(CC(C)C)C1</chem>
209	<chem>CC1(C)C(CC(C)C)CCC1</chem>
210	<chem>CC1(C)CC(CC(C)C)CC1</chem>
211	<chem>CC1(C)C(C(C)C)CCC1</chem>
212	<chem>CC1(C)CC(C(C)(C)C)CC1</chem>
213	<chem>CCC1C(CC)C(CC)CC1</chem>
214	<chem>CCC1CC(CC)C(CC)C1</chem>

Nota. ChemDraw Professional

Tabla 253

Nomenclatura código SMILES molécula 215-238.

Número de molécula	Código SMILES
215	<chem>CC1(C)CC(CC)C(CC)C1</chem>
216	<chem>CC1(C)C(CC)C(CC)CC1</chem>
217	<chem>CC1CC(C(C)C(C)C)CC1</chem>
218	<chem>CC1CC(C)C(C)C1C(C)C</chem>
219	<chem>CC1C(C(C)C(C)C)CCC1</chem>
220	<chem>CCCCCCCCCCC</chem>
221	<chem>[C-]#[O+]</chem>
222	<chem>O=C=O</chem>
223	<chem>[H][H]</chem>
224	<chem>N#N</chem>
225	<chem>O=O</chem>
226	<chem>C</chem>
227	<chem>CC</chem>
228	<chem>CCC</chem>
229	<chem>CCCC</chem>
230	<chem>CC(C)C</chem>
231	<chem>CCCCC</chem>
232	<chem>CCC(C)C</chem>
233	<chem>C=C</chem>
234	<chem>C=CC</chem>
235	<chem>C=CCC</chem>
236	<chem>C=CCC</chem>
237	<chem>CC(C)(C)C</chem>
238	<chem>[H]S[H]</chem>

Nota. ChemDraw Professional

4.4 Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas

4.4.1 *Tablas de las propiedades fisicoquímicas de las moléculas.*

Con el fin de obtener de manera automática las propiedades fisicoquímicas se utiliza la Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME), para la generación de las propiedades de todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de reforma catalítico, los datos obtenidos se van a presentar en las siguientes tablas:

En donde en las tablas las moléculas con mayor número de átomos pesados son la 143-153,155-210,212-220 con 11 átomos, y las moléculas con menor número de átomos son la 223 con 0 átomos. De la molécula 1-11 tiene 6 átomos aromáticos pesados y de las moléculas 12-238 no tiene átomos aromáticos pesados. La molécula 220 posee mayor número de enlaces rotativos que son 8, las moléculas 222-225 tienen más enlaces aceptadores, ninguna molécula tiene enlaces donadores, las moléculas 1-220, 226-238 tienen menos enlaces aceptadores, la molécula 220 posee mayor valor de refractividad molar de 54.99, la molécula 224 tiene un área de superficie polar topológica de 47.58.

Tabla 254.*Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 1-20*

Molécula	Fórmula	MW	#átomos pesados	# átomos pesados Aromáticos	Fracción Csp3	#Enlaces rotativos	#Enlaces aceptores	#Enlaces donadores	MR	ASPT
1	C ₆ H ₆	78.11	6	6	0.00	0	0	0	26.44	0.00
2	C ₇ H ₈	92.14	7	6	0.14	0	0	0	31.41	0.00
3	C ₈ H ₁₀	106.17	8	6	0.25	1	0	0	36.22	0.00
4	C ₈ H ₁₀	106.17	8	6	0.25	0	0	0	36.37	0.00
5	C ₈ H ₁₀	106.17	8	6	0.25	0	0	0	36.37	0.00
6	C ₈ H ₁₀	106.17	8	6	0.25	0	0	0	36.37	0.00
7	C ₉ H ₁₂	120.19	9	6	0.33	0	0	0	41.34	0.00
8	C ₉ H ₁₂	120.19	9	6	0.33	0	0	0	41.34	0.00
9	C ₉ H ₁₂	120.19	9	6	0.33	1	0	0	41.18	0.00
10	C ₉ H ₁₂	120.19	9	6	0.33	1	0	0	41.18	0.00
11	C ₉ H ₁₂	120.19	9	6	0.33	1	0	0	41.18	0.00
12	C ₃ H ₈	44.10	3	0	1.00	0	0	0	16.54	0.00
13	C ₃ H ₈	44.10	3	0	1.00	0	0	0	16.54	0.00
14	C ₄ H ₁₀	58.12	4	0	1.00	1	0	0	21.34	0.00
15	C ₅ H ₁₂	72.15	5	0	1.00	1	0	0	26.15	0.00
16	C ₅ H ₁₂	72.15	5	0	1.00	2	0	0	26.15	0.00
17	C ₅ H ₁₀	70.13	5	0	1.00	0	0	0	24.04	0.00
18	C ₆ H ₁₄	86.18	6	0	1.00	3	0	0	30.96	0.00
19	C ₆ H ₁₄	86.18	6	0	1.00	2	0	0	30.96	0.00
20	C ₆ H ₁₄	86.18	6	0	1.00	1	0	0	30.96	0.00

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 255.*Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 21-40*

Molécula	Fórmula	MW	#Átomos pesados	# Átomos pesados Aromáticos	Fracción Csp3	#Enlaces rotativos	#Enlaces aceptores	#Enlaces donadores	MR	ASPT
21	C ₆ H ₁₄	86.18	6	0	1.00	1	0	0	30.70	0.00
22	C ₆ H ₁₄	86.18	6	0	1.00	2	0	0	30.96	0.00
23	C ₆ H ₁₄	86.18	6	0	1.00	3	0	0	30.96	0.00
24	C ₆ H ₁₂	84.16	6	0	1.00	0	0	0	28.84	0.00
25	C ₆ H ₁₂	84.16	6	0	1.00	0	0	0	28.84	0.00
26	C ₇ H ₁₆	100.20	7	0	1.00	4	0	0	35.76	0.00
27	C ₇ H ₁₆	100.20	7	0	1.00	2	0	0	35.76	0.00
28	C ₇ H ₁₆	100.20	7	0	1.00	2	0	0	35.76	0.00
29	C ₇ H ₁₆	100.20	7	0	1.00	3	0	0	35.76	0.00
30	C ₇ H ₁₆	100.20	7	0	1.00	3	0	0	35.76	0.00
31	C ₇ H ₁₆	100.20	7	0	1.00	3	0	0	35.76	0.00
32	C ₇ H ₁₆	100.20	7	0	1.00	1	0	0	35.50	0.00
33	C ₇ H ₁₆	100.20	7	0	1.00	2	0	0	35.50	0.00
34	C ₇ H ₁₆	100.20	7	0	1.00	2	0	0	35.50	0.00
35	C ₇ H ₁₆	100.20	7	0	1.00	4	0	0	35.76	0.00
36	C ₇ H ₁₄	98.19	7	0	1.00	0	0	0	33.65	0.00
37	C ₇ H ₁₄	98.19	7	0	1.00	0	0	0	33.65	0.00
38	C ₇ H ₁₄	98.19	7	0	1.00	1	0	0	33.65	0.00
39	C ₇ H ₁₄	98.19	7	0	1.00	0	0	0	33.65	0.00
40	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	5	0	0	40.57	0.00

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 256.*Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 41-60*

Molécula	Fórmula	MW	#Átomos pesados	# Átomos pesados Aromáticos	Fracción Csp3	#Enlaces rotativos	#Enlaces aceptores	#Enlaces donadores	MR	ASPT
41	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	2	0	0	40.31	0.00
42	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	2	0	0	40.31	0.00
43	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	2	0	0	40.31	0.00
44	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	2	0	0	40.31	0.00
45	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	2	0	0	40.57	0.00
46	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	3	0	0	40.57	0.00
47	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	3	0	0	40.31	0.00
48	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	3	0	0	40.31	0.00
49	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	3	0	0	40.57	0.00
50	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	3	0	0	40.57	0.00
51	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	3	0	0	40.57	0.00
52	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	3	0	0	40.31	0.00
53	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	3	0	0	40.57	0.00
54	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	4	0	0	40.57	0.00
55	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	4	0	0	40.57	0.00
56	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	4	0	0	40.57	0.00
57	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	4	0	0	40.57	0.00
58	C ₈ H ₁₈	114.23	8	0	1.00	5	0	0	40.57	0.00
59	C ₈ H ₁₆	112.21	8	0	1.00	0	0	0	38.46	0.00
60	C ₈ H ₁₆	112.21	8	0	1.00	0	0	0	38.46	0.00

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 257.*Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 61-80*

Molécula	Fórmula	MW	#Átomos pesados	# Átomos pesados Aromáticos	Fracción Csp3	#Enlaces rotativos	#Enlaces aceptores	#Enlaces donadores	MR	ASPT
61	C ₈ H ₁₆	112.21	8	0	1.00	2	0	0	38.46	0.00
62	C ₈ H ₁₆	112.21	8	0	1.00	1	0	0	38.46	0.00
63	C ₈ H ₁₆	112.21	8	0	1.00	1	0	0	38.46	0.00
64	C ₈ H ₁₆	112.21	8	0	1.00	0	0	0	38.46	0.00
65	C ₈ H ₁₆	112.21	8	0	1.00	0	0	0	38.46	0.00
66	C ₈ H ₁₆	112.21	8	0	1.00	0	0	0	38.46	0.00
67	C ₈ H ₁₆	112.21	8	0	1.00	1	0	0	38.46	0.00
68	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	43.00	0.00
69	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	43.00	0.00
70	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	43.00	0.00
71	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	43.26	0.00
72	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	43.26	0.00
73	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	43.26	0.00
74	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	1	0	0	43.26	0.00
75	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	1	0	0	43.26	0.00
76	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	1	0	0	43.26	0.00
77	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	2	0	0	43.26	0.00
78	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	43.26	0.00
79	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	42.74	0.00
80	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	43.00	0.00

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 258.*Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 81-100*

Molécula	Fórmula	MW	#Átomos pesados	# Átomos pesados Aromáticos	Fracción Csp3	#Enlaces rotativos	#Enlaces aceptores	#Enlaces donadores	MR	ASPT
81	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	43.00	0.00
82	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	42.74	0.00
83	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	2	0	0	43.26	0.00
84	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	1	0	0	43.26	0.00
85	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	1	0	0	43.26	0.00
86	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	2	0	0	43.26	0.00
87	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	2	0	0	43.26	0.00
88	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	2	0	0	43.26	0.00
89	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	3	0	0	43.26	0.00
90	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	43.00	0.00
91	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	1	0	0	43.26	0.00
92	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	1	0	0	43.26	0.00
93	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	2	0	0	43.26	0.00
94	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	1	0	0	43.26	0.00
95	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	2	0	0	43.26	0.00
96	C ₉ H ₂₀	128.26	9	0	1.00	6	0	0	45.38	0.00
97	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	1	0	0	47.81	0.00
98	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	0	0	0	43.00	0.00
99	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	0	0	0	47.55	0.00
100	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	0	0	0	47.55	0.00

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 259.*Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 101-119*

Molécula	Fórmula	MW	#Átomos pesados	# Átomos pesados Aromáticos	Fracción Csp3	#Enlaces rotativos	#Enlaces aceptores	#Enlaces donadores	MR	ASPT
101	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	1	0	0	47.81	0.00
102	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	1	0	0	47.81	0.00
103	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	0	0	0	48.07	0.00
104	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
105	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
106	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
107	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	3	0	0	48.07	0.00
108	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
109	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
110	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
111	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	1	0	0	43.26	0.00
112	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	1	0	0	47.81	0.00
113	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	1	0	0	48.07	0.00
114	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	1	0	0	48.07	0.00
115	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	0	0	0	48.07	0.00
116	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	0	0	0	47.55	0.00
117	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	0	0	0	47.55	0.00
118	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
119	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 260.*Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 120-139*

Molécula	Fórmula	MW	#Átomos pesados	# Átomos pesados Aromáticos	Fracción Csp3	#Enlaces rotativos	#Enlaces aceptores	#Enlaces donadores	MR	ASPT
120	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	0	0	0	47.55	0.00
121	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	0	0	0	47.55	0.00
122	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
123	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
124	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	4	0	0	48.07	0.00
125	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	3	0	0	48.07	0.00
126	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	3	0	0	48.07	0.00
127	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	1	0	0	48.07	0.00
128	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	1	0	0	48.07	0.00
129	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
130	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
131	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
132	C ₉ H ₁₈	126.24	9	0	1.00	2	0	0	43.26	0.00
133	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
134	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	2	0	0	48.07	0.00
135	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	3	0	0	48.07	0.00
136	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	3	0	0	48.07	0.00
137	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	3	0	0	48.07	0.00
138	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	3	0	0	48.07	0.00
139	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	1	0	0	47.81	0.00

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 261.*Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 140-158*

Molécula	Fórmula	MW	#Átomos pesados	# Átomos pesados Aromáticos	Fracción Csp3	#Enlaces rotativos	#Enlaces aceptores	#Enlaces donadores	MR	ASPT
140	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	1	0	0	47.81	0.00
141	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	3	0	0	48.07	0.00
142	C ₁₀ H ₂₂	142.28	10	0	1.00	7	0	0	50.18	0.00
143	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.62	0.00
144	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.36	0.00
145	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.62	0.00
146	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.62	0.00
147	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.62	0.00
148	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.36	0.00
149	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.36	0.00
150	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.62	0.00
151	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.62	0.00
152	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.88	0.00
153	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.88	0.00
154	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	0	0	0	48.07	0.00
155	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	0	0	0	52.62	0.00
156	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	0	0	0	52.62	0.00
157	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	0	0	0	52.36	0.00
158	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	0	0	0	52.36	0.00

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 262.*Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 159-178*

Molécula	Fórmula	MW	#Átomos pesados	# Átomos pesados Aromáticos	Fracción Csp3	#Enlaces rotativos	#Enlaces aceptores	#Enlaces donadores	MR	ASPT
159	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	0	0	0	52.36	0.00
160	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	0	0	0	52.36	0.00
161	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
162	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
163	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
164	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
165	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
166	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
167	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
168	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
169	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
170	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
171	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.88	0.00
172	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.62	0.00
173	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.62	0.00
174	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.62	0.00
175	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.62	0.00
176	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	4	0	0	52.88	0.00
177	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.88	0.00
178	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.88	0.00

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 263.*Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 179-198*

Molécula	Fórmula	MW	#Átomos pesados	# Átomos pesados Aromáticos	Fracción Csp3	#Enlaces rotativos	#Enlaces aceptores	#Enlaces donadores	MR	ASPT
179	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.88	0.00
180	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
181	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.62	0.00
182	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.62	0.00
183	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	0	0	0	52.62	0.00
184	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	0	0	0	52.10	0.00
185	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	0	0	0	52.36	0.00
186	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	0	0	0	52.36	0.00
187	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	0	0	0	52.36	0.00
188	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
189	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.36	0.00
190	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.36	0.00
191	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	4	0	0	52.88	0.00
192	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	4	0	0	52.88	0.00
193	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.88	0.00
194	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.88	0.00
195	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.88	0.00
196	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	4	0	0	52.88	0.00
197	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	5	0	0	52.88	0.00
198	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	4	0	0	52.88	0.00

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 264.*Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 199-218*

Molécula	Fórmula	MW	#Átomos pesados	# Átomos pesados Aromáticos	Fracción Csp3	#Enlaces rotativos	#Enlaces aceptores	#Enlaces donadores	MR	ASPT
199	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	4	0	0	52.88	0.00
200	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	4	0	0	52.88	0.00
201	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	4	0	0	52.88	0.00
202	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.88	0.00
203	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.88	0.00
204	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.62	0.00
205	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.62	0.00
206	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.62	0.00
207	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
208	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
209	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.62	0.00
210	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.62	0.00
211	C ₁₀ H ₂₀	140.27	10	0	1.00	1	0	0	47.81	0.00
212	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.36	0.00
213	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.88	0.00
214	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	3	0	0	52.88	0.00
215	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.62	0.00
216	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.62	0.00
217	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
218	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	1	0	0	52.88	0.00

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 265.*Propiedades fisicoquímicas de las moléculas 219-238*

Molécula	Fórmula	MW	#Átomos pesados	# Átomos pesados Aromáticos	Fracción Csp3	#Enlaces rotativos	#Enlaces aceptores	#Enlaces donadores	MR	ASPT
219	C ₁₁ H ₂₂	154.29	11	0	1.00	2	0	0	52.88	0.00
220	C ₁₁ H ₂₄	156.31	11	0	1.00	8	0	0	54.99	0.00
221	CO	28.01	2	0	0.00	0	1	0	4.07	0.00
222	CO ₂	44.01	3	0	0.00	0	2	0	5.01	34.14
223	H ₂	2.02	0	0	0.00	0	2	0	0.00	0.00
224	N ₂	28.01	2	0	0.00	0	2	0	3.45	47.58
225	O ₂	32.00	2	0	0.00	0	2	0	6.73	34.14
226	CH ₄	16.04	1	0	1.00	0	0	0	6.92	0.00
227	C ₂ H ₆	30.07	2	0	1.00	0	0	0	11.73	0.00
228	C ₃ H ₈	44.10	3	0	1.00	0	0	0	16.54	0.00
229	C ₄ H ₁₀	58.12	4	0	1.00	1	0	0	21.34	0.00
230	C ₄ H ₁₀	58.12	4	0	1.00	0	0	0	21.34	0.00
231	C ₅ H ₁₂	72.15	5	0	1.00	2	0	0	26.15	0.00
232	C ₅ H ₁₂	72.15	5	0	1.00	1	0	0	26.15	0.00
233	C ₂ H ₄	28.05	2	0	0.00	0	0	0	11.25	0.00
234	C ₃ H ₆	42.08	3	0	0.33	0	0	0	16.06	0.00
235	C ₄ H ₈	56.11	4	0	0.50	1	0	0	20.87	0.00
236	C ₄ H ₈	56.11	4	0	0.50	1	0	0	20.87	0.00
237	C ₅ H ₁₂	72.15	5	0	1.00	0	0	0	25.89	0.00
238	H ₂ S	34.08	1	0	1.00	0	0	0	10.38	25.30

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

4.4.2 Tablas de la lipofilia de las moléculas.

Con el fin de obtener de manera automatizada la predicción de los valores para lipofilia de todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de reforma catalítico, se utiliza la Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME) que brinda de manera gratuita el acceso a un conjunto de modelos predictivos los cuales reflejan el comportamiento de la variable, los datos obtenidos se van a presentar en las siguientes tablas:

La molécula 197 tiene mayor valor iLOG P que es de 3.29, el mayor valor de XLOG P3 es de la molécula 168 con 6.10, el mayor valor de WLOG P es de la molécula 220 con 4.54, el mayor valor de MLOG P es de la molécula 220 con 5.11, el mayor valor de Silicos-IT es de la molécula 220 con 4.00 y finalmente el mayor valor promedio Log P es la molécula 220 con 4.56.

Tabla 266.*Lipofilia de las moléculas 1-40.*

Molécula	i LOG P	X LOG P3	W LOG P	M LOG P	Silicos-IT Log P	Promedio Log P
1	1.58	2.13	1.69	3.17	2.12	2.14
2	1.85	2.73	2.00	3.52	2.44	2.51
3	2.06	3.15	2.25	3.85	2.70	2.80
4	2.12	3.15	2.30	3.85	2.83	2.85
5	2.12	3.20	2.30	3.85	2.83	2.86
6	2.03	3.12	2.30	3.85	2.83	2.83
7	2.28	3.63	2.61	4.17	3.26	3.19
8	2.34	3.42	2.61	4.17	3.26	3.16
9	2.24	3.53	2.56	4.17	3.13	3.13
10	2.32	3.98	2.56	4.17	3.13	3.23
11	2.33	3.63	2.56	4.17	3.13	3.16
12	1.71	1.84	1.42	2.28	0.45	1.54
13	1.71	1.84	1.42	2.28	0.45	1.54
14	1.94	2.89	1.81	2.73	0.89	2.05
15	2.11	2.64	2.05	3.14	1.17	2.22
16	2.18	3.39	2.20	3.14	1.34	2.45
17	1.94	3.00	1.95	2.75	2.40	2.41
18	2.35	3.90	2.59	3.52	1.78	2.83
19	2.31	3.18	2.44	3.52	1.61	2.61
20	2.27	3.42	2.30	3.52	1.44	2.59
21	2.25	3.82	2.44	3.52	1.46	2.70
22	2.32	3.60	2.44	3.52	1.61	2.70
23	2.35	3.90	2.59	3.52	1.78	2.83
24	2.15	3.37	2.20	3.12	2.27	2.62
25	2.10	3.44	2.34	3.12	2.63	2.73
26	2.65	4.66	2.98	3.87	2.22	3.28
27	2.51	3.43	2.69	3.87	1.88	2.88
28	2.46	3.43	2.69	3.87	1.88	2.87
29	2.49	3.72	2.83	3.87	2.05	2.99
30	2.58	3.72	2.83	3.87	2.05	3.01
31	2.55	3.72	2.83	3.87	2.05	3.00
32	2.39	3.28	2.69	3.87	1.73	2.79
33	2.49	3.57	2.83	3.87	1.90	2.93
34	2.43	3.57	2.83	3.87	1.90	2.92
35	2.65	4.66	2.98	3.87	2.22	3.28
36	2.33	3.21	2.44	3.48	2.23	2.74
37	2.36	3.21	2.44	3.48	2.23	2.74
38	2.35	4.02	2.59	3.48	2.51	2.99
39	2.30	3.61	2.59	3.48	2.54	2.90
40	2.88	5.18	3.37	4.20	2.67	3.66

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 267.*Lipofilia de las moléculas 41-80.*

Molécula	i LOG P	X LOG P3	W LOG P	MLOGP	Silicos-IT Log P	Promedio Log P
41	2.60	3.82	3.08	4.20	2.17	3.17
42	2.60	3.82	3.08	4.20	2.17	3.17
43	2.62	3.82	3.08	4.20	2.17	3.18
44	2.57	3.82	3.08	4.20	2.17	3.17
45	2.61	3.68	2.93	4.20	2.15	3.12
46	2.63	3.97	3.08	4.20	2.32	3.24
47	2.60	4.11	3.22	4.20	2.34	3.30
48	2.72	4.11	3.22	4.20	2.34	3.32
49	2.71	3.97	3.08	4.20	2.32	3.26
50	2.70	3.97	3.08	4.20	2.32	3.26
51	2.75	3.97	3.08	4.20	2.32	3.26
52	2.66	4.11	3.22	4.20	2.34	3.31
53	2.68	3.97	3.08	4.20	2.32	3.25
54	2.78	4.26	3.22	4.20	2.50	3.39
55	2.78	4.26	3.22	4.20	2.50	3.39
56	2.78	4.26	3.22	4.20	2.50	3.39
57	2.79	4.26	3.22	4.20	2.50	3.39
58	2.88	5.18	3.37	4.20	2.67	3.66
59	2.51	3.46	2.69	3.81	2.23	2.94
60	2.53	3.46	2.69	3.81	2.23	2.94
61	2.54	4.56	2.98	3.81	2.80	3.34
62	2.56	3.75	2.83	3.81	2.52	3.09
63	2.53	3.75	2.83	3.81	2.52	3.09
64	2.46	3.75	2.83	3.81	2.52	3.07
65	2.50	3.75	2.83	3.81	2.52	3.08
66	2.50	4.77	2.83	3.81	2.52	3.29
67	2.50	4.56	2.98	3.81	2.80	3.33
68	2.57	4.15	3.22	4.13	2.92	3.40
69	2.63	4.15	3.22	4.13	2.92	3.41
70	2.63	4.15	3.22	4.13	2.92	3.41
71	2.63	4.01	3.08	4.13	2.53	3.28
72	2.66	4.01	3.08	4.13	2.53	3.28
73	2.70	4.01	3.08	4.13	2.53	3.29
74	2.67	4.30	3.22	4.13	2.82	3.43
75	2.70	4.30	3.22	4.13	2.82	3.43
76	2.70	4.30	3.22	4.13	2.82	3.43
77	2.74	5.10	3.37	4.13	3.10	3.69
78	2.69	3.72	2.93	4.13	2.27	3.15
79	2.56	4.00	3.22	4.13	3.06	3.39
80	2.63	3.86	3.08	4.13	2.66	3.27

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 268.*Lipofilia de las moléculas 81-119.*

Molécula	I LOG P	X LOG P3	W LOG P	M LOG P	Silicos-IT Log P	Promedio Log P
81	2.65	3.86	3.08	4.13	2.66	3.28
82	2.63	4.00	3.22	4.13	3.06	3.41
83	2.73	4.30	3.22	4.13	2.84	3.44
84	2.71	4.01	3.08	4.13	2.55	3.30
85	2.74	4.01	3.08	4.13	2.55	3.30
86	2.76	4.30	3.22	4.13	2.84	3.45
87	2.77	4.30	3.22	4.13	2.84	3.45
88	2.79	4.30	3.22	4.13	2.84	3.46
89	2.82	4.59	3.37	4.13	3.12	3.61
90	2.60	3.86	3.08	4.13	2.66	3.27
91	2.68	4.01	3.08	4.13	2.67	3.31
92	2.72	4.01	3.08	4.13	2.67	3.32
93	2.72	4.30	3.22	4.13	2.95	3.46
94	2.74	4.01	3.08	4.13	2.55	3.30
95	2.75	4.81	3.22	4.13	2.95	3.57
96	3.06	5.65	3.76	4.52	3.11	4.02
97	2.78	4.69	3.61	4.43	3.25	3.75
98	2.57	4.15	3.22	4.13	2.92	3.40
99	2.75	4.54	3.61	4.43	3.36	3.74
100	2.76	4.54	3.61	4.43	3.36	3.74
101	2.83	4.69	3.61	4.43	3.25	3.76
102	2.84	4.69	3.61	4.43	3.25	3.76
103	2.79	4.26	3.32	4.43	2.57	3.48
104	2.90	4.84	3.61	4.43	3.14	3.79
105	2.94	4.84	3.61	4.43	3.14	3.79
106	2.91	4.84	3.61	4.43	3.14	3.79
107	2.97	5.13	3.76	4.43	3.43	3.94
108	2.87	4.84	3.61	4.43	3.14	3.78
109	2.91	5.35	3.61	4.43	3.14	3.89
110	2.91	4.84	3.61	4.43	3.14	3.79
111	2.67	4.30	3.22	4.13	2.82	3.43
112	2.78	5.04	3.61	4.43	3.10	3.79
113	2.86	4.55	3.47	4.43	2.97	3.66
114	2.86	5.56	3.47	4.43	2.97	3.86
115	2.83	3.97	3.18	4.43	2.33	3.35
116	2.71	4.26	3.47	4.43	3.12	3.60
117	2.74	4.26	3.47	4.43	3.12	3.60
118	2.88	4.55	3.47	4.43	2.90	3.65
119	2.87	4.55	3.47	4.43	2.90	3.64

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 269.*Lipofilia de las moléculas 120-158.*

Molécula	i LOG P	XLOG P3	W LOG P	M LOG P	Silicos-IT Log P	Promedio Log P
120	2.74	4.26	3.47	4.43	3.12	3.60
121	2.79	4.26	3.47	4.43	3.12	3.61
122	2.91	4.55	3.47	4.43	2.90	3.65
123	2.91	4.55	3.47	4.43	2.90	3.65
124	3.06	5.13	3.76	4.43	3.47	3.97
125	3.00	4.84	3.61	4.43	3.19	3.81
126	2.99	4.84	3.61	4.43	3.19	3.81
127	2.86	4.26	3.32	4.43	2.62	3.50
128	2.89	4.26	3.32	4.43	2.62	3.50
129	2.87	4.55	3.47	4.43	3.01	3.67
130	2.93	4.55	3.47	4.43	3.01	3.68
131	2.87	4.55	3.47	4.43	3.01	3.67
132	2.79	4.30	3.22	4.13	2.84	3.46
133	2.92	4.55	3.47	4.43	3.01	3.68
134	2.95	4.55	3.47	4.43	3.01	3.68
135	2.93	4.84	3.61	4.43	3.30	3.82
136	2.92	4.84	3.61	4.43	3.30	3.82
137	2.99	4.84	3.61	4.43	3.30	3.83
138	2.92	4.84	3.61	4.43	3.19	3.80
139	2.77	4.40	3.47	4.43	2.86	3.59
140	2.82	4.40	3.47	4.43	2.86	3.60
141	2.96	4.84	3.61	4.43	3.19	3.81
142	3.29	5.01	4.15	4.82	3.55	4.16
143	2.90	4.94	3.86	4.72	3.32	3.95
144	2.84	5.09	4.00	4.72	3.71	4.07
145	2.94	4.94	3.86	4.72	3.32	3.95
146	3.00	4.94	3.86	4.72	3.32	3.97
147	2.98	4.94	3.86	4.72	3.32	3.96
148	2.92	5.09	4.00	4.72	3.71	4.09
149	2.92	5.09	4.00	4.72	3.71	4.09
150	2.90	4.94	3.86	4.72	3.43	3.97
151	2.98	4.94	3.86	4.72	3.43	3.99
152	3.03	4.80	3.71	4.72	3.04	3.86
153	3.01	4.80	3.71	4.72	3.04	3.86
154	2.83	4.26	3.32	4.43	2.57	3.48
155	2.90	4.65	3.71	4.72	3.03	3.80
156	2.94	4.65	3.71	4.72	3.03	3.81
157	2.81	4.80	3.86	4.72	3.43	3.92
158	2.89	4.80	3.86	4.72	3.43	3.94

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 270.*Lipofilia de las moléculas 159-198.*

Molécula	i LOG P	XLOG P3	W LOG P	M LOG P	Silicos-IT Log P	Promedio Log P
159	2.84	4.80	3.86	4.72	3.43	3.93
160	2.90	4.80	3.86	4.72	3.43	3.94
161	3.01	5.09	3.86	4.72	3.21	3.98
162	3.10	5.09	3.86	4.72	3.21	4.00
163	3.05	5.09	3.86	4.72	3.21	3.99
164	3.10	5.09	3.86	4.72	3.21	4.00
165	2.98	5.09	3.86	4.72	3.21	3.97
166	3.03	5.09	3.86	4.72	3.21	3.98
167	3.07	5.09	3.86	4.72	3.21	3.99
168	3.07	6.10	3.86	4.72	3.32	4.21
169	3.00	5.09	3.86	4.72	3.32	4.00
170	3.06	5.09	3.86	4.72	3.32	4.01
171	2.97	4.80	3.71	4.72	3.04	3.85
172	2.90	4.94	3.86	4.72	3.17	3.92
173	2.98	4.94	3.86	4.72	3.17	3.93
174	2.98	4.94	3.86	4.72	3.17	3.93
175	2.99	4.94	3.86	4.72	3.43	3.99
176	3.21	5.67	4.15	4.72	3.78	4.30
177	3.08	5.38	4.00	4.72	3.60	4.16
178	3.09	5.38	4.00	4.72	3.60	4.16
179	3.14	5.38	4.00	4.72	3.60	4.17
180	3.01	5.09	3.86	4.72	3.43	4.02
181	2.96	5.58	4.00	4.72	3.45	4.14
182	3.01	5.75	4.00	4.72	3.45	4.19
183	2.93	4.36	3.57	4.72	2.81	3.68
184	2.81	4.65	3.86	4.72	3.59	3.93
185	2.87	4.51	3.71	4.72	3.20	3.80
186	2.87	4.51	3.71	4.72	3.20	3.80
187	2.85	4.51	3.71	4.72	3.20	3.80
188	3.06	4.80	3.71	4.72	2.98	3.86
189	2.91	5.09	4.00	4.72	3.77	4.10
190	2.98	5.09	4.00	4.72	3.77	4.11
191	3.20	5.38	4.00	4.72	3.55	4.17
192	3.23	5.38	4.00	4.72	3.55	4.18
193	3.13	5.09	3.86	4.72	3.26	4.01
194	3.11	5.09	3.86	4.72	3.26	4.01
195	3.15	5.09	3.86	4.72	3.26	4.02
196	3.20	5.38	4.00	4.72	3.55	4.17
197	3.29	5.67	4.15	4.72	3.83	4.33
198	3.14	5.38	4.00	4.72	3.66	4.18

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Tabla 271.*Lipofilia de las moléculas 199-235.*

Molécula	i LOG P	X LOG P3	W LOG P	MLOG P	Silicos-IT Log P	Promedio Log P
199	3.18	5.38	4.00	4.72	3.66	4.19
200	3.19	5.38	4.00	4.72	3.66	4.19
201	3.16	5.38	4.00	4.72	3.66	4.19
202	3.06	5.09	3.86	4.72	3.49	4.04
203	3.11	5.09	3.86	4.72	3.49	4.05
204	3.03	5.23	4.00	4.72	3.51	4.10
205	3.05	5.23	4.00	4.72	3.51	4.10
206	3.13	5.23	4.00	4.72	3.51	4.12
207	3.10	4.80	3.71	4.72	3.09	3.89
208	3.12	4.80	3.71	4.72	3.09	3.89
209	3.04	4.94	3.86	4.72	3.49	4.01
210	3.11	4.94	3.86	4.72	3.49	4.02
211	2.77	4.40	3.47	4.43	3.12	3.64
212	2.98	4.80	3.86	4.72	3.33	3.94
213	3.04	5.09	3.86	4.72	3.26	4.00
214	3.11	5.09	3.86	4.72	3.26	4.01
215	3.04	4.94	3.86	4.72	3.37	3.99
216	3.00	4.94	3.86	4.72	3.37	3.98
217	3.07	4.80	3.71	4.72	3.21	3.90
218	3.00	4.51	3.57	4.72	2.81	3.72
219	3.02	4.80	3.71	4.72	3.21	3.89
220	3.59	5.56	4.54	5.11	4.00	4.56
221	0.00	0.67	-0.04	-1.01	-1.18	-0.31
222	-6.64	0.88	-0.55	-1.24	0.09	-1.49
223	-6.64	0.88	-0.55	-1.24	0.09	-1.49
224	-6.64	0.88	-0.55	-1.24	0.09	-1.49
225	-6.64	0.88	-0.55	-1.24	0.09	-1.49
226	-6.64	0.65	0.64	1.12	-0.48	-1.49
227	1.47	1.30	0.96	1.76	0.01	1.10
228	1.71	1.84	1.42	2.28	0.45	1.54
229	1.94	2.89	1.81	2.73	0.89	2.05
230	1.91	2.09	1.66	2.73	0.72	1.82
231	2.18	3.39	2.20	3.14	1.34	2.45
232	2.11	2.64	2.05	3.14	1.17	2.22
233	1.30	1.20	0.73	1.61	0.17	1.00
234	1.57	1.44	1.19	2.13	0.44	1.35
235	1.78	2.40	1.58	2.58	0.89	1.85
236	1.78	2.40	1.58	2.58	0.89	1.85
237	2.08	2.49	2.05	3.14	1.01	2.15
238	2.08	2.49	2.05	3.14	1.01	2.15

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

4.4.3 Tablas de la solubilidad del agua de las moléculas.

Con el fin de obtener de manera automatizada la predicción de los valores para la solubilidad de todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de reforma catalítico, se utiliza la Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME) que brinda de manera gratuita el acceso a un conjunto de modelos predictivos los cuales reflejan el comportamiento de la variable; la solubilidad influye en la absorción, los datos obtenidos se van a presentar en las siguientes tablas:

El ESOL Log S mayor tiene la molécula 226 con -0.35 y el menor es para la molécula 168 con -4.51; el ESOL Solubilidad (mol/l) mayor tiene la molécula 227 con 1.43×10^{-01} y el menor es para la molécula 197 con 9.15×10^{-05} ; la Ali Log S mayor tiene la molécula 226 con -0.23 y la menor es para la molécula 168 con -5.88.

Tabla 272.*Solubilidad del agua de las moléculas 1-20*

Molécula	ESOL Log S	ESOL Solubilidad (mol/l)	Clase ESOL	Ali Log S	Ali Solubilidad (mol/l)	Clase Ali	Silicos-IT LogSw	Silicos-IT Solubilidad (mol/l)	Clase Silicos-IT
1	-2.41	3.92e-03	***	-1.76	1.73e-02	****	-2.27	5.35e-03	***
2	-2.77	1.72e-03	***	-2.38	4.13e-03	***	-2.69	2.04e-03	***
3	-2.97	1.07e-03	***	-2.82	1.51e-03	***	-3.12	7.59e-04	***
4	-3.04	9.17e-04	***	-2.82	1.51e-03	***	-3.10	7.91e-04	***
5	-3.07	8.53e-04	***	-2.87	1.34e-03	***	-3.10	7.91e-04	***
6	-3.02	9.58e-04	***	-2.79	1.63e-03	***	-3.10	7.91e-04	***
7	-3.37	4.31e-04	***	-3.32	4.81e-04	***	-3.51	3.10e-04	***
8	-3.23	5.85e-04	***	-3.10	7.94e-04	***	-3.51	3.10e-04	***
9	-3.24	5.80e-04	***	-3.21	6.11e-04	***	-3.53	2.97e-04	***
10	-3.52	3.02e-04	***	-3.68	2.08e-04	***	-3.53	2.97e-04	***
11	-3.30	5.02e-04	***	-3.32	4.81e-04	***	-3.53	2.97e-04	***
12	-1.27	5.34e-02	****	-1.46	3.46e-02	****	-0.82	1.50e-01	***
13	-1.27	5.34e-02	****	-1.46	3.46e-02	****	-0.82	1.50e-01	***
14	-1.96	1.11e-02	****	-2.55	2.82e-03	***	-1.28	5.21e-02	***
15	-1.88	1.30e-02	****	-2.29	5.12e-03	***	-1.35	4.42e-02	***
16	-2.29	5.12e-03	***	-3.07	8.53e-04	***	-1.73	1.87e-02	***
17	-2.16	6.84e-03	***	-2.66	2.17e-03	***	-1.12	7.53e-02	***
18	-2.63	2.33e-03	***	-3.60	2.52e-04	***	-2.17	6.81e-03	***
19	-2.25	5.68e-03	***	-2.85	1.41e-03	***	-1.79	1.61e-02	***
20	-2.46	3.44e-03	***	-3.10	7.94e-04	***	-1.42	3.80e-02	***

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

* Poco soluble, ** Moderadamente soluble, *** Soluble, **** Muy soluble

Tabla 273.*Solubilidad del agua de las moléculas 21-40*

Molécula	ESOL Log S	ESOL Solubilidad (mol/l)	Clase ESOL	Ali Log S	Ali Solubilidad (mol/l)	Clase Ali	Silicos-IT LogSw	Silicos-IT Solubilidad (mol/l)	Clase Silicos-IT
21	-2.71	1.93e-03	***	-3.52	3.05e-04	***	-1.78	1.67e-02	***
22	-2.51	3.09e-03	***	-3.29	5.17e-04	***	-1.79	1.61e-02	***
23	-2.63	2.33e-03	***	-3.60	2.52e-04	***	-2.17	6.81e-03	***
24	-2.48	3.27e-03	***	-3.05	8.95e-04	***	-1.31	4.85e-02	***
25	-2.53	2.96e-03	***	-3.12	7.57e-04	***	-1.44	3.66e-02	***
26	-3.13	7.36e-04	***	-4.39	4.10e-05	**	-2.60	2.52e-03	***
27	-2.49	3.23e-03	***	-3.11	7.75e-04	***	-1.85	1.41e-02	***
28	-2.49	3.23e-03	***	-3.11	7.75e-04	***	-1.85	1.41e-02	***
29	-2.61	2.47e-03	***	-3.41	3.88e-04	***	-2.23	5.96e-03	***
30	-2.61	2.47e-03	***	-3.41	3.88e-04	***	-2.23	5.96e-03	***
31	-2.61	2.47e-03	***	-3.41	3.88e-04	***	-2.23	5.96e-03	***
32	-2.46	3.45e-03	***	-2.95	1.11e-03	***	-1.83	1.47e-02	***
33	-2.58	2.64e-03	***	-3.26	5.55e-04	***	-2.21	6.19e-03	***
34	-2.58	2.64e-03	***	-3.26	5.55e-04	***	-2.21	6.19e-03	***
35	-3.13	7.36e-04	***	-4.39	4.10e-05	**	-2.60	2.52e-03	***
36	-2.47	3.38e-03	***	-2.88	1.31e-03	***	-1.50	3.17e-02	***
37	-2.47	3.38e-03	***	-2.88	1.31e-03	***	-1.50	3.17e-02	***
38	-2.92	1.22e-03	***	-3.72	1.89e-04	***	-1.75	1.79e-02	***
39	-2.72	1.89e-03	***	-3.30	5.04e-04	***	-1.62	2.39e-02	***
40	-3.48	3.30e-04	***	-4.93	1.18e-05	**	-3.03	9.42e-04	***

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

* Poco soluble, ** Moderadamente soluble, *** Soluble, **** Muy soluble

Tabla 274.*Solubilidad del agua de las moléculas 41-60*

Molécula	ESOL Log S	ESOL Solubilidad (mol/l)	Clase ESOL	Ali Log S	Ali Solubilidad (mol/l)	Clase Ali	Silicos-IT LogSw	Silicos-IT Solubilidad (mol/l)	Clase Silicos-IT
41	-2.82	1.50e-03	***	-3.52	3.05e-04	***	-2.26	5.48e-03	***
42	-2.82	1.50e-03	***	-3.52	3.05e-04	***	-2.26	5.48e-03	***
43	-2.82	1.50e-03	***	-3.52	3.05e-04	***	-2.26	5.48e-03	***
44	-2.82	1.50e-03	***	-3.52	3.05e-04	***	-2.26	5.48e-03	***
45	-2.73	1.84e-03	***	-3.37	4.27e-04	***	-1.90	1.25e-02	***
46	-2.85	1.41e-03	***	-3.67	2.13e-04	***	-2.28	5.27e-03	***
47	-2.94	1.15e-03	***	-3.82	1.53e-04	***	-2.63	2.32e-03	***
48	-2.94	1.15e-03	***	-3.82	1.53e-04	***	-2.63	2.32e-03	***
49	-2.85	1.41e-03	***	-3.67	2.13e-04	***	-2.28	5.27e-03	***
50	-2.85	1.41e-03	***	-3.67	2.13e-04	***	-2.28	5.27e-03	***
51	-2.85	1.41e-03	***	-3.67	2.13e-04	***	-2.28	5.27e-03	***
52	-2.94	1.15e-03	***	-3.82	1.53e-04	***	-2.63	2.32e-03	***
53	-2.85	1.41e-03	***	-3.67	2.13e-04	***	-2.28	5.27e-03	***
54	-2.97	1.08e-03	***	-3.97	1.07e-04	***	-2.65	2.23e-03	***
55	-2.97	1.08e-03	***	-3.97	1.07e-04	***	-2.65	2.23e-03	***
56	-2.97	1.08e-03	***	-3.97	1.07e-04	***	-2.65	2.23e-03	***
57	-2.97	1.08e-03	***	-3.97	1.07e-04	***	-2.65	2.23e-03	***
58	-3.48	3.30e-04	***	-4.93	1.18e-05	**	-3.03	9.42e-04	***
59	-2.72	1.93e-03	***	-3.14	7.22e-04	***	-1.68	2.10e-02	***
60	-2.72	1.93e-03	***	-3.14	7.22e-04	***	-1.68	2.10e-02	***

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

* Poco soluble, ** Moderadamente soluble, *** Soluble, **** Muy soluble

Tabla 275.

Solubilidad del agua de las moléculas 61-80

Molécula	ESOL Log S	ESOL Solubilidad (mol/l)	Clase ESOL	Ali Log S	Ali Solubilidad (mol/l)	Clase Ali	Silicos-IT LogSw	Silicos-IT Solubilidad (mol/l)	Clase Silicos-IT
61	-3.28	5.29e-04	***	-4.28	5.21e-05	**	-2.17	6.70e-03	***
62	-2.83	1.47e-03	***	-3.44	3.61e-04	***	-1.93	1.19e-02	***
63	-2.83	1.47e-03	***	-3.44	3.61e-04	***	-1.93	1.19e-02	***
64	-2.90	1.26e-03	***	-3.44	3.61e-04	***	-1.80	1.58e-02	***
65	-2.90	1.26e-03	***	-3.44	3.61e-04	***	-1.80	1.58e-02	***
66	-3.54	2.88e-04	***	-4.50	3.15e-05	**	-1.80	1.58e-02	***
67	-3.34	4.54e-04	***	-4.28	5.21e-05	**	-2.05	8.95e-03	***
68	-3.24	5.79e-04	***	-3.86	1.39e-04	***	-2.42	3.76e-03	***
69	-3.24	5.79e-04	***	-3.86	1.39e-04	***	-2.42	3.76e-03	***
70	-3.24	5.79e-04	***	-3.86	1.39e-04	***	-2.42	3.76e-03	***
71	-3.15	7.10e-04	***	-3.71	1.94e-04	***	-1.98	1.06e-02	***
72	-3.15	7.10e-04	***	-3.71	1.94e-04	***	-1.98	1.06e-02	***
73	-3.15	7.10e-04	***	-3.71	1.94e-04	***	-1.98	1.06e-02	***
74	-3.27	5.42e-04	***	-4.01	9.70e-05	**	-2.22	5.98e-03	***
75	-3.27	5.42e-04	***	-4.01	9.70e-05	**	-2.22	5.98e-03	***
76	-3.27	5.42e-04	***	-4.01	9.70e-05	**	-2.22	5.98e-03	***
77	-3.70	1.98e-04	***	-4.84	1.43e-05	**	-2.47	3.38e-03	***
78	-2.97	1.08e-03	***	-3.41	3.88e-04	***	-1.85	1.40e-02	***
79	-3.14	7.20e-04	***	-3.70	1.99e-04	***	-2.75	1.77e-03	***
80	-3.05	8.82e-04	***	-3.56	2.78e-04	***	-2.30	4.98e-03	***

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

* Poco soluble, ** Moderadamente soluble, *** Soluble, **** Muy soluble

Tabla 276.

Solubilidad del agua de las moléculas 81-100

Molécula	ESOL Log S	ESOL Solubilidad (mol/l)	Clase ESOL	Ali Log S	Ali Solubilidad (mol/l)	Clase Ali	Silicos-IT LogSw	Silicos-IT Solubilidad (mol/l)	Clase Silicos-IT
81	-3.05	8.82e-04	***	-3.56	2.78e-04	***	-2.30	4.98e-03	***
82	-3.14	7.20e-04	***	-3.70	1.99e-04	***	-2.75	1.77e-03	***
83	-3.20	6.31e-04	***	-4.01	9.70e-05	**	-2.35	4.48e-03	***
84	-3.08	8.26e-04	***	-3.71	1.94e-04	***	-2.10	7.93e-03	***
85	-3.08	8.26e-04	***	-3.71	1.94e-04	***	-2.10	7.93e-03	***
86	-3.20	6.31e-04	***	-4.01	9.70e-05	**	-2.35	4.48e-03	***
87	-3.20	6.31e-04	***	-4.01	9.70e-05	**	-2.35	4.48e-03	***
88	-3.20	6.31e-04	***	-4.01	9.70e-05	**	-2.35	4.48e-03	***
89	-3.32	4.83e-04	***	-4.31	4.85e-05	**	-2.60	2.53e-03	***
90	-3.05	8.82e-04	***	-3.56	2.78e-04	***	-2.30	4.98e-03	***
91	-3.08	8.26e-04	***	-3.71	1.94e-04	***	-1.98	1.06e-02	***
92	-3.08	8.26e-04	***	-3.71	1.94e-04	***	-1.98	1.06e-02	***
93	-3.20	6.31e-04	***	-4.01	9.70e-05	**	-2.22	5.98e-03	***
94	-3.08	8.26e-04	***	-3.71	1.94e-04	***	-2.10	7.93e-03	***
95	-3.52	3.01e-04	***	-4.54	2.87e-05	**	-2.22	5.98e-03	***
96	-3.80	1.59e-04	***	-5.41	3.85e-06	**	-3.45	3.56e-04	***
97	-3.60	2.52e-04	***	-4.42	3.82e-05	**	-2.84	1.43e-03	***
98	-3.24	5.79e-04	***	-3.86	1.39e-04	***	-2.42	3.76e-03	***
99	-3.57	2.69e-04	***	-4.26	5.47e-05	**	-3.05	8.99e-04	***
100	-3.57	2.69e-04	***	-4.26	5.47e-05	**	-3.05	8.99e-04	***

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

* Poco soluble, ** Moderadamente soluble, *** Soluble, **** Muy soluble

Tabla 277.

Solubilidad del agua de las moléculas 101-119

Molécula	ESOL Log S	ESOL Solubilidad (mol/l)	Clase ESOL	Ali Log S	Ali Solubilidad (mol/l)	Clase Ali	Silicos-IT LogSw	Silicos-IT Solubilidad (mol/l)	Clase Silicos-IT
101	-3.60	2.52e-04	***	-4.42	3.82e-05	**	-2.84	1.43e-03	***
102	-3.60	2.52e-04	***	-4.42	3.82e-05	**	-2.84	1.43e-03	***
103	-3.39	4.04e-04	***	-3.97	1.07e-04	***	-2.15	7.14e-03	***
104	-3.63	2.36e-04	***	-4.57	2.67e-05	**	-2.64	2.28e-03	***
105	-3.63	2.36e-04	***	-4.57	2.67e-05	**	-2.64	2.28e-03	***
106	-3.63	2.36e-04	***	-4.57	2.67e-05	**	-2.64	2.28e-03	***
107	-3.74	1.80e-04	***	-4.87	1.33e-05	**	-2.89	1.29e-03	***
108	-3.63	2.36e-04	***	-4.57	2.67e-05	**	-2.64	2.28e-03	***
109	-3.95	1.13e-04	***	-5.10	7.89e-06	**	-2.64	2.28e-03	***
110	-3.63	2.36e-04	***	-4.57	2.67e-05	**	-2.64	2.28e-03	***
111	-3.27	5.42e-04	***	-4.01	9.70e-05	**	-2.22	5.98e-03	***
112	-3.82	1.52e-04	***	-4.78	1.65e-05	**	-2.50	3.17e-03	***
113	-3.51	3.09e-04	***	-4.27	5.34e-05	**	-2.27	5.38e-03	***
114	-4.15	7.14e-05	**	-5.32	4.78e-06	**	-2.27	5.38e-03	***
115	-3.21	6.16e-04	***	-3.67	2.13e-04	***	-2.02	9.46e-03	***
116	-3.39	4.04e-04	***	-3.97	1.07e-04	***	-2.92	1.19e-03	***
117	-3.39	4.04e-04	***	-3.97	1.07e-04	***	-2.92	1.19e-03	***
118	-3.44	3.60e-04	***	-4.27	5.34e-05	**	-2.52	3.02e-03	***
119	-3.44	3.60e-04	***	-4.27	5.34e-05	**	-2.52	3.02e-03	***

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

* Poco soluble, ** Moderadamente soluble, *** Soluble, **** Muy soluble

Tabla 278.*Solubilidad del agua de las moléculas 120-139*

Molécula	ESOL Log S	ESOL Solubilidad (mol/l)	Clase ESOL	Ali Log S	Ali Solubilidad (mol/l)	Clase Ali	Silicos-IT LogSw	Silicos-IT Solubilidad (mol/l)	Clase Silicos-IT
120	-3.39	4.04e-04	***	-3.97	1.07e-04	***	-2.92	1.19e-03	***
121	-3.39	4.04e-04	***	-3.97	1.07e-04	***	-2.92	1.19e-03	***
122	-3.44	3.60e-04	***	-4.27	5.34e-05	**	-2.52	3.02e-03	***
123	-3.44	3.60e-04	***	-4.27	5.34e-05	**	-2.52	3.02e-03	***
124	-3.68	2.10e-04	***	-4.87	1.33e-05	**	-3.02	9.64e-04	***
125	-3.56	2.75e-04	***	-4.57	2.67e-05	**	-2.77	1.71e-03	***
126	-3.56	2.75e-04	***	-4.57	2.67e-05	**	-2.77	1.71e-03	***
127	-3.33	4.70e-04	***	-3.97	1.07e-04	***	-2.27	5.35e-03	***
128	-3.33	4.70e-04	***	-3.97	1.07e-04	***	-2.27	5.35e-03	***
129	-3.44	3.60e-04	***	-4.27	5.34e-05	**	-2.40	4.03e-03	***
130	-3.44	3.60e-04	***	-4.27	5.34e-05	**	-2.40	4.03e-03	***
131	-3.44	3.60e-04	***	-4.27	5.34e-05	**	-2.40	4.03e-03	***
132	-3.20	6.31e-04	***	-4.01	9.70e-05	**	-2.35	4.48e-03	***
133	-3.44	3.60e-04	***	-4.27	5.34e-05	**	-2.40	4.03e-03	***
134	-3.44	3.60e-04	***	-4.27	5.34e-05	**	-2.40	4.03e-03	***
135	-3.56	2.75e-04	***	-4.57	2.67e-05	**	-2.64	2.28e-03	***
136	-3.56	2.75e-04	***	-4.57	2.67e-05	**	-2.64	2.28e-03	***
137	-3.56	2.75e-04	***	-4.57	2.67e-05	**	-2.64	2.28e-03	***
138	-3.56	2.75e-04	***	-4.57	2.67e-05	**	-2.77	1.71e-03	***
139	-3.42	3.84e-04	***	-4.12	7.64e-05	**	-2.38	4.20e-03	***

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

* Poco soluble, ** Moderadamente soluble, *** Soluble, **** Muy soluble

Tabla 279.*Solubilidad del agua de las moléculas 140-158*

Molécula	ESOL Log S	ESOL Solubilidad (mol/l)	Clase ESOL	Ali Log S	Ali Solubilidad (mol/l)	Clase Ali	Silicos-IT LogSw	Silicos-IT Solubilidad (mol/l)	Clase Silicos-IT
140	-3.42	3.84e-04	***	-4.12	7.64e-05	**	-2.38	4.20e-03	***
141	-3.56	2.75e-04	***	-4.57	2.67e-05	**	-2.77	1.71e-03	***
142	-3.42	3.83e-04	***	-4.75	1.78e-05	**	-3.87	1.36e-04	***
143	-3.84	1.44e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-3.01	9.73e-04	***
144	-3.94	1.16e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-3.46	3.45e-04	***
145	-3.84	1.44e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-3.01	9.73e-04	***
146	-3.84	1.44e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-3.01	9.73e-04	***
147	-3.84	1.44e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-3.01	9.73e-04	***
148	-3.94	1.16e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-3.46	3.45e-04	***
149	-3.94	1.16e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-3.46	3.45e-04	***
150	-3.84	1.44e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-2.89	1.30e-03	***
151	-3.84	1.44e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-2.89	1.30e-03	***
152	-3.75	1.76e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-2.44	3.66e-03	***
153	-3.75	1.76e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-2.44	3.66e-03	***
154	-3.39	4.04e-04	***	-3.97	1.07e-04	***	-2.15	7.14e-03	***
155	-3.73	1.88e-04	***	-4.38	4.20e-05	**	-2.76	1.72e-03	***
156	-3.73	1.88e-04	***	-4.38	4.20e-05	**	-2.76	1.72e-03	***
157	-3.82	1.51e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-3.21	6.11e-04	***
158	-3.82	1.51e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-3.21	6.11e-04	***

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

* Poco soluble, ** Moderadamente soluble, *** Soluble, **** Muy soluble

Tabla 280.*Solubilidad del agua de las moléculas 159-178*

Molécula	ESOL Log S	ESOL Solubilidad (mol/l)	Clase ESOL	Ali Log S	Ali Solubilidad (mol/l)	Clase Ali	Silicos IT LogSw	Silicos-IT Solubilidad (mol/l)	Clase Silicos IT
159	-3.82	1.51e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-3.21	6.11e-04	***
160	-3.82	1.51e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-3.21	6.11e-04	***
161	-3.87	1.34e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.81	1.55e-03	***
162	-3.87	1.34e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.81	1.55e-03	***
163	-3.87	1.34e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.81	1.55e-03	***
164	-3.87	1.34e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.81	1.55e-03	***
165	-3.87	1.34e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.81	1.55e-03	***
166	-3.87	1.34e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.81	1.55e-03	***
167	-3.87	1.34e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.81	1.55e-03	***
168	-4.51	3.11e-05	**	-5.88	1.31e-06	**	-2.69	2.07e-03	***
169	-3.87	1.34e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.69	2.07e-03	***
170	-3.87	1.34e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.69	2.07e-03	***
171	-3.75	1.76e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-2.44	3.66e-03	***
172	-3.84	1.44e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-2.67	2.15e-03	***
173	-3.84	1.44e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-2.67	2.15e-03	***
174	-3.84	1.44e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-2.67	2.15e-03	***
175	-3.84	1.44e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-2.89	1.30e-03	***
176	-4.10	7.86e-05	***	-5.43	3.67e-06	**	-3.31	4.93e-04	***
177	-3.99	1.03e-04	***	-5.13	7.34e-06	**	-2.93	1.17e-03	***
178	-3.99	1.03e-04	***	-5.13	7.34e-06	**	-2.93	1.17e-03	***

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

* Poco soluble, ** Moderadamente soluble, *** Soluble, **** Muy soluble

Tabla 281.*Solubilidad del agua de las moléculas 179-198*

Molécula	ESOL Log S	ESOL Solubilidad (mol/l)	Clase ESOL	Ali Log S	Ali Solubilidad (mol/l)	Clase Ali	Silicos-IT LogSw	Silicos-IT Solubilidad (mol/l)	Clase Silicos-IT
179	-3.99	1.03e-04	***	-5.13	7.34e-06	**	-2.93	1.17e-03	***
180	-3.87	1.34e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.56	2.76e-03	***
181	-4.18	6.61e-05	**	-5.34	4.55e-06	**	-2.92	1.21e-03	***
182	-4.29	5.16e-05	**	-5.52	3.03e-06	**	-2.92	1.21e-03	***
183	-3.54	2.86e-04	***	-4.08	8.40e-05	**	-2.64	2.28e-03	***
184	-3.73	1.88e-04	***	-4.38	4.20e-05	**	-3.54	2.87e-04	***
185	-3.64	2.30e-04	***	-4.23	5.87e-05	**	-3.09	8.09e-04	***
186	-3.64	2.30e-04	***	-4.23	5.87e-05	**	-3.09	8.09e-04	***
187	-3.64	2.30e-04	***	-4.23	5.87e-05	**	-3.09	8.09e-04	***
188	-3.69	2.05e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-2.69	2.05e-03	***
189	-3.87	1.34e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-3.59	2.58e-04	***
190	-3.87	1.34e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-3.59	2.58e-04	***
191	-3.92	1.20e-04	***	-5.13	7.34e-06	**	-3.19	6.53e-04	***
192	-3.92	1.20e-04	***	-5.13	7.34e-06	**	-3.19	6.53e-04	***
193	-3.81	1.57e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.94	1.16e-03	***
194	-3.81	1.57e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.94	1.16e-03	***
195	-3.81	1.57e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.94	1.16e-03	***
196	-3.92	1.20e-04	***	-5.13	7.34e-06	**	-3.19	6.53e-04	***
197	-4.04	9.15e-05	**	-5.43	3.67e-06	**	-3.43	3.69e-04	***
198	-3.92	1.20e-04	***	-5.13	7.34e-06	**	-3.06	8.73e-04	***

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

* Poco soluble, ** Moderadamente soluble, *** Soluble, **** Muy soluble

Tabla 282.*Solubilidad del agua de las moléculas 199-218*

Molécula	ESOL Log S	ESOL Solubilidad (mol/l)	Clase ESOL	Ali Log S	Ali Solubilidad (mol/l)	Clase Ali	Silicos-IT LogSw	Silicos-IT Solubilidad (mol/l)	Clase Silicos-IT
199	-3.92	1.20e-04	***	-5.13	7.34e-06	**	-3.06	8.73e-04	***
200	-3.92	1.20e-04	***	-5.13	7.34e-06	**	-3.06	8.73e-04	***
201	-3.92	1.20e-04	***	-5.13	7.34e-06	**	-3.06	8.73e-04	***
202	-3.81	1.57e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.69	2.07e-03	***
203	-3.81	1.57e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.69	2.07e-03	***
204	-3.89	1.28e-04	***	-4.98	1.05e-05	**	-3.04	9.10e-04	***
205	-3.89	1.28e-04	***	-4.98	1.05e-05	**	-3.04	9.10e-04	***
206	-3.89	1.28e-04	***	-4.98	1.05e-05	**	-3.04	9.10e-04	***
207	-3.69	2.05e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-2.56	2.74e-03	***
208	-3.69	2.05e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-2.56	2.74e-03	***
209	-3.78	1.67e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-3.01	9.73e-04	***
210	-3.78	1.67e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-3.01	9.73e-04	***
211	-3.42	3.84e-04	***	-4.12	7.64e-05	**	-2.60	2.54e-03	***
212	-3.75	1.76e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-3.00	1.01e-03	***
213	-3.81	1.57e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.94	1.16e-03	***
214	-3.81	1.57e-04	***	-4.83	1.47e-05	**	-2.94	1.16e-03	***
215	-3.78	1.67e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-3.14	7.28e-04	***
216	-3.78	1.67e-04	***	-4.68	2.10e-05	**	-3.14	7.28e-04	***
217	-3.69	2.05e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-2.44	3.66e-03	***
218	-3.57	2.68e-04	***	-4.23	5.87e-05	**	-2.31	4.84e-03	***

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

* Poco soluble, ** Moderadamente soluble, *** Soluble, **** Muy soluble

Tabla 283.*Solubilidad del agua de las moléculas 219-238*

Molécula	ESOL Log S	ESOL Solubilidad (mol/l)	Clase ESOL	Ali Log S	Ali Solubilidad (mol/l)	Clase Ali	Silicos-IT LogSw	Silicos-IT Solubilidad (mol/l)	Clase Silicos-IT
219	-3.69	2.05e-04	***	-4.53	2.94e-05	**	-2.44	3.66e-03	***
220	-3.78	1.64e-04	***	-5.32	4.78e-06	**	-4.28	5.21e-05	**
221	-0.44	3.67e-01	****	-0.25	5.67e-01	****	0.33	2.14e+00	***
222	-0.67	2.15e-01	****	-1.18	6.59e-02	****	0.51	3.21e+00	***
223	-0.67	2.15e-01	****	-1.18	6.59e-02	****	0.51	3.21e+00	***
224	-0.67	2.15e-01	****	-1.18	6.59e-02	****	0.51	3.21e+00	***
225	-0.67	2.15e-01	****	-1.18	6.59e-02	****	0.51	3.21e+00	***
226	-0.35	4.48e-01	****	-0.23	5.95e-01	****	0.48	3.04e+00	***
227	-0.85	1.43e-01	****	-0.90	1.26e-01	****	-0.35	4.49e-01	***
228	-1.27	5.34e-02	****	-1.46	3.46e-02	****	-0.82	1.50e-01	***
229	-1.96	1.11e-02	****	-2.55	2.82e-03	***	-1.28	5.21e-02	***
230	-1.52	3.04e-02	****	-1.72	1.91e-02	****	-0.91	1.23e-01	***
231	-2.29	5.12e-03	***	-3.07	8.53e-04	***	-1.73	1.87e-02	***
232	-1.88	1.30e-02	***	-2.29	5.12e-03	***	-1.35	4.42e-02	***
233	-0.77	1.70e-01	***	-0.80	1.60e-01	****	-0.36	4.33e-01	***
234	-1.01	9.82e-02	***	-1.05	9.01e-02	****	-0.47	3.39e-01	***
235	-1.63	2.32e-02	***	-2.04	9.08e-03	***	-0.93	1.17e-01	***
236	-1.63	2.32e-02	***	-2.04	9.08e-03	***	-0.93	1.17e-01	***
237	-1.86	1.39e-02	***	-2.14	7.33e-03	***	-1.34	4.59e-02	***
238	-1.86	1.39e-02	***	-2.14	7.33e-03	***	-1.34	4.59e-02	***

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

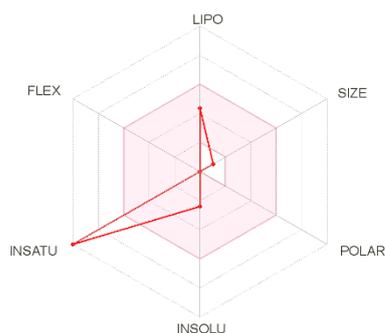
* Poco soluble, ** Moderadamente soluble, *** Soluble, **** Muy soluble

4.4.4 Radar de biodisponibilidad de las moléculas.

Con el fin de obtener de manera automática los radares de biodisponibilidad; de todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de reforma catalítico, se utiliza la Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME); los radares son una unidad gráfica de función de 6 variables en la cuales el área rosa es el rango óptimo para cada propiedad, en donde la lipofilia XLOGP3 debe estar en el rango de -0.7 y +5, y el peso molecular será de 150 y 500 g/mol, el TPSA en el rango 20 a 130 Å, la solubilidad no debe ser mayor que 6, la hibridación debe ser sp y menor a 0.25, la flexibilidad menor a 9; en donde al analizar los datos obtenidos de las propiedades fisicoquímicas se puede identificar la flexibilidad y polaridad de la molécula. Las figuras obtenidas se presentan a continuación:

Figura 48.

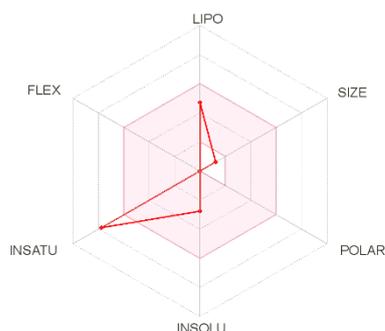
Radar de biodisponibilidad de la molécula 1



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 49.

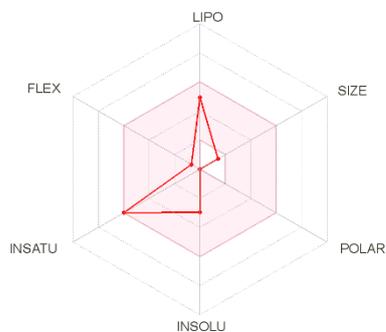
Radar de biodisponibilidad de la molécula 2



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 50.

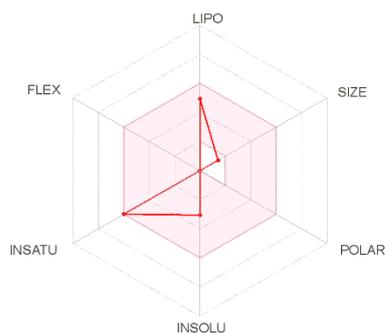
Radar de biodisponibilidad de la molécula 3



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 51.

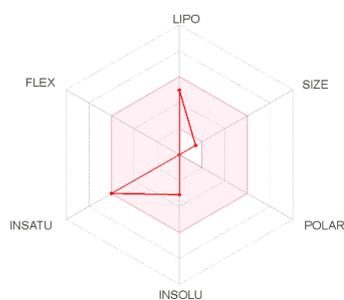
Radar de biodisponibilidad de la molécula 4



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 52.

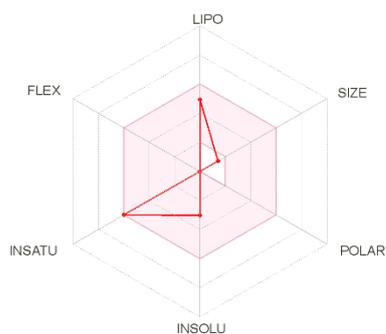
Radar de biodisponibilidad de la molécula 5



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 53.

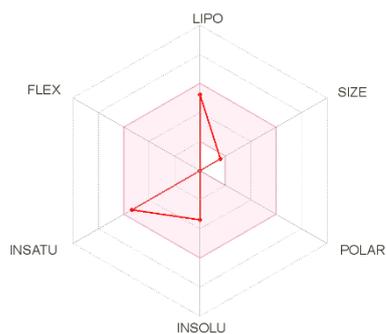
Radars de biodisponibilidad de la molécula 6



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 54.

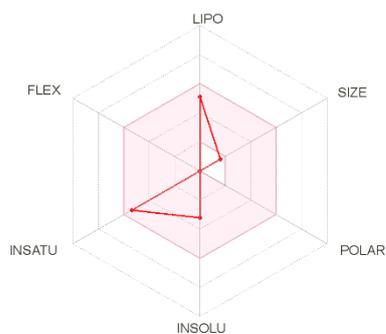
Radars de biodisponibilidad de la molécula 7



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 55.

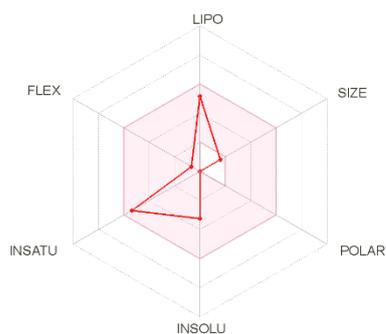
Radars de biodisponibilidad de la molécula 8



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 56.

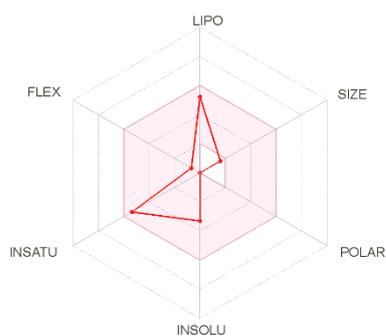
Radar de biodisponibilidad de la molécula 9



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 57.

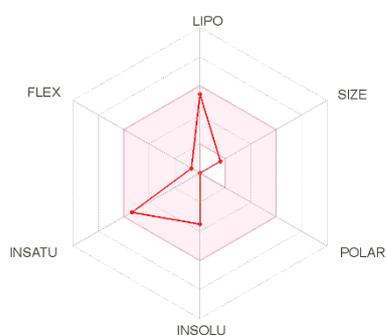
Radar de biodisponibilidad de la molécula 10



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 58.

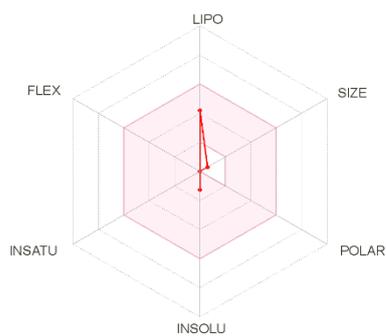
Radar de biodisponibilidad de la molécula 11



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 59.

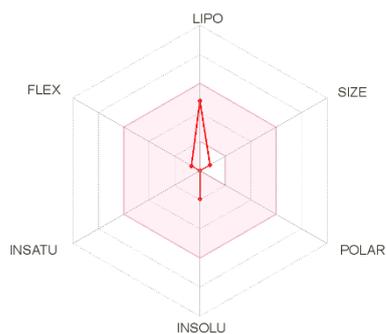
Radar de biodisponibilidad de la molécula 12



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 60.

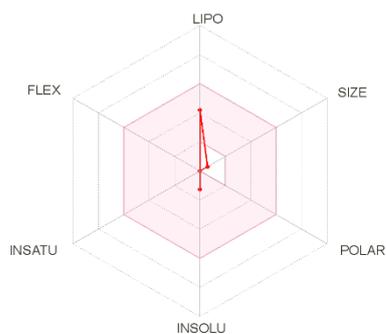
Radar de biodisponibilidad de la molécula 13



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 61.

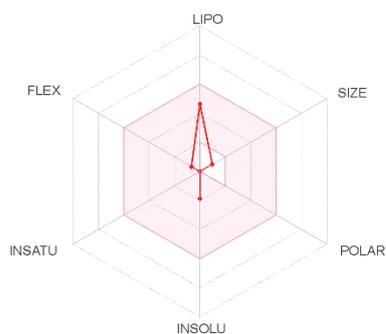
Radar de biodisponibilidad de la molécula 14



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 62.

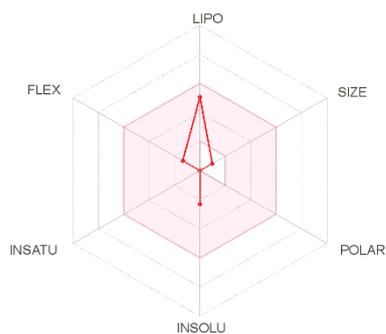
Radar de biodisponibilidad de la molécula 15



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 63.

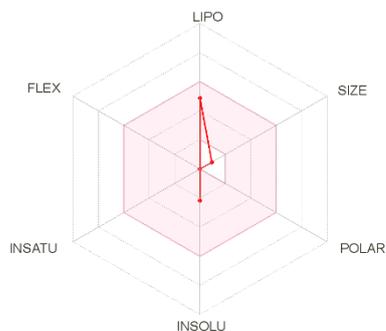
Radar de biodisponibilidad de la molécula 16



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 64.

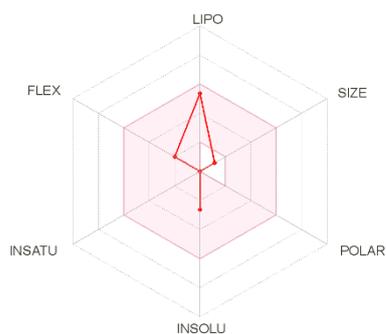
Radar de biodisponibilidad de la molécula 17



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 65.

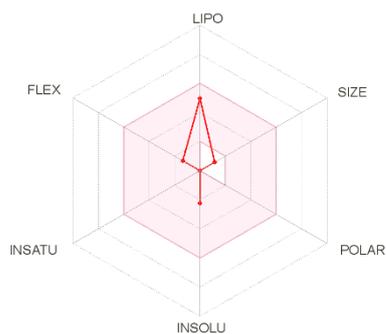
Radars de biodisponibilidad de la molécula 18



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 66.

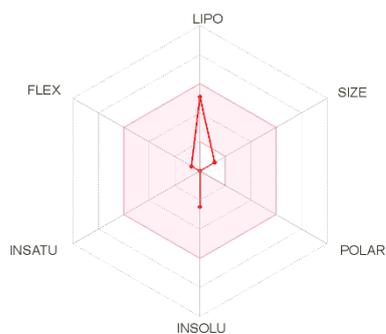
Radars de biodisponibilidad de la molécula 19



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 67.

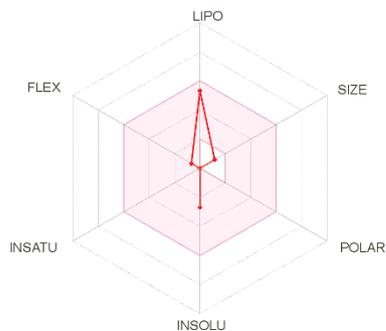
Radars de biodisponibilidad de la molécula 20



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 68.

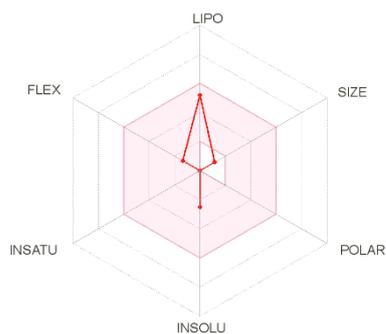
Radars de biodisponibilidad de la molécula 21



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 69.

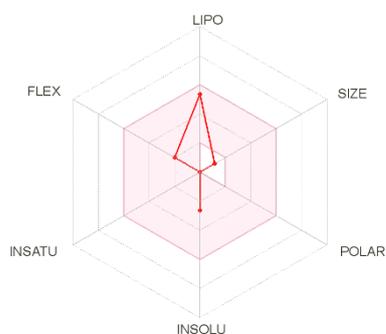
Radars de biodisponibilidad de la molécula 22



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 70.

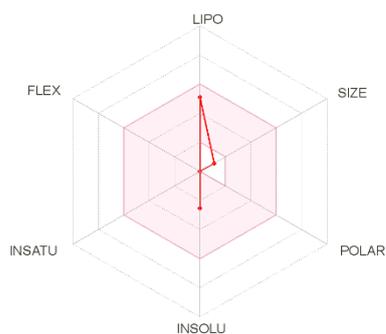
Radars de biodisponibilidad de la molécula 23



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 71.

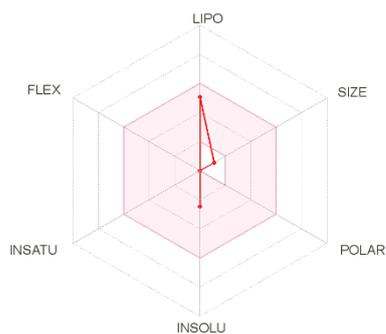
Radar de biodisponibilidad de la molécula 24



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 72.

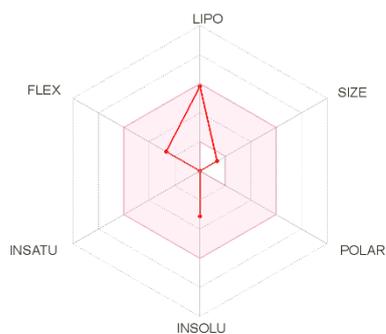
Radar de biodisponibilidad de la molécula 25



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 73.

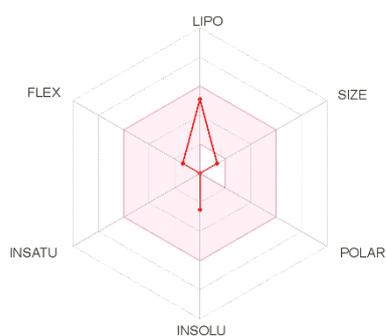
Radar de biodisponibilidad de la molécula 26



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 74.

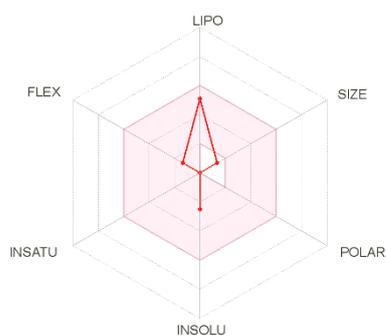
Radar de biodisponibilidad de la molécula 27



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 75.

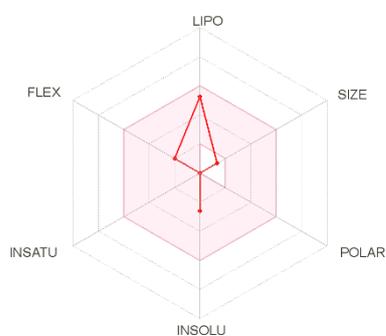
Radar de biodisponibilidad de la molécula 28



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 76.

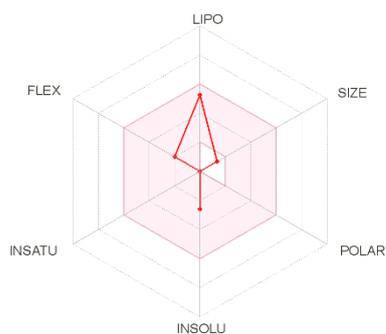
Radar de biodisponibilidad de la molécula 29



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 77.

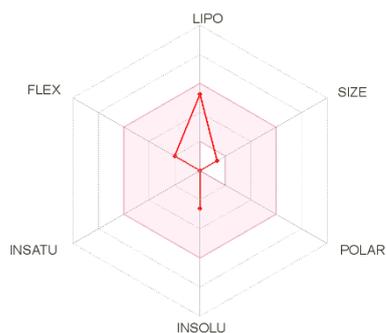
Radar de biodisponibilidad de la molécula 30



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 78.

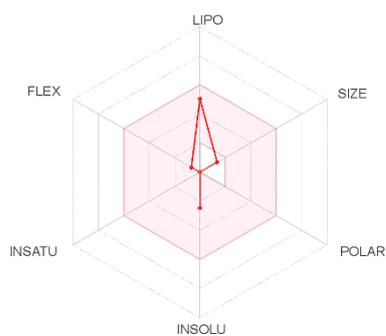
Radar de biodisponibilidad de la molécula 31



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 79.

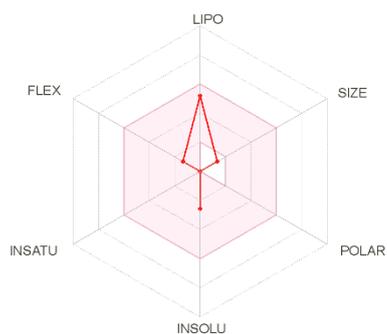
Radar de biodisponibilidad de la molécula 32



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 80.

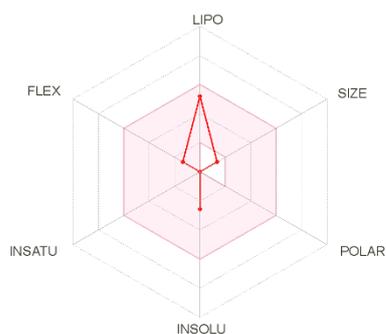
Radar de biodisponibilidad de la molécula 33



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 81.

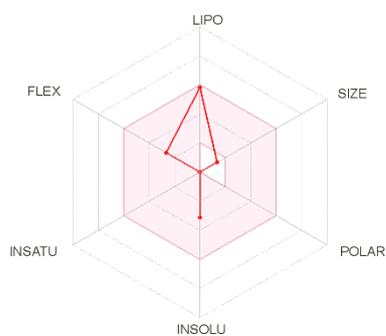
Radar de biodisponibilidad de la molécula 34



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 82.

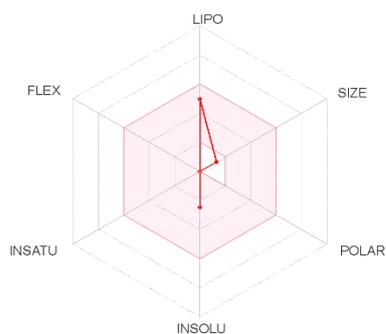
Radar de biodisponibilidad de la molécula 35



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 83.

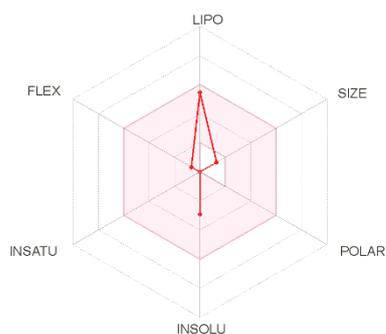
Radar de biodisponibilidad de la molécula 36



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 84.

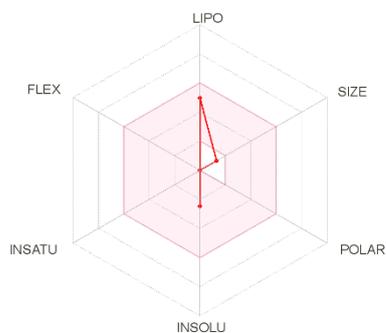
Radar de biodisponibilidad de la molécula 37



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 85.

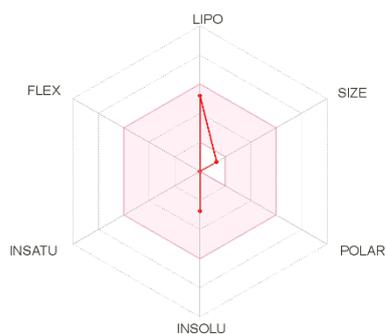
Radar de biodisponibilidad de la molécula 38



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 86.

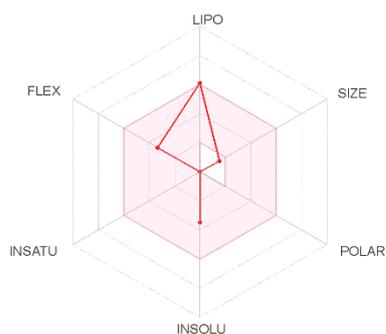
Radar de biodisponibilidad de la molécula 39



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 87.

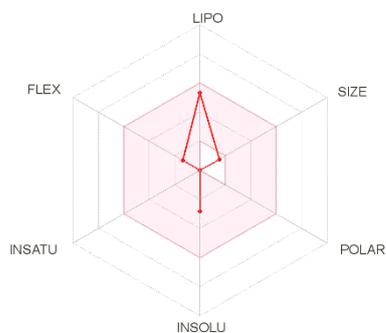
Radar de biodisponibilidad de la molécula 40



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 88.

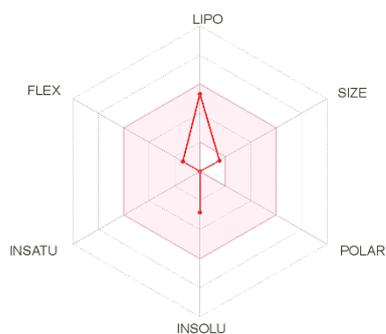
Radar de biodisponibilidad de la molécula 41



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 89.

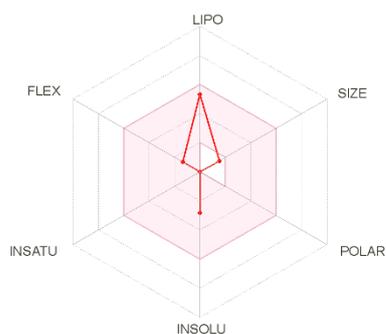
Radar de biodisponibilidad de la molécula 42



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 90.

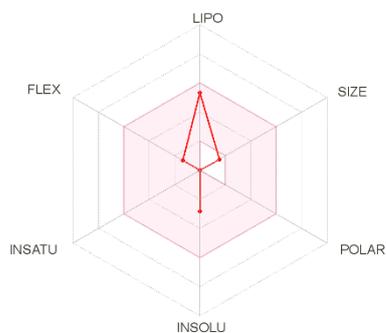
Radar de biodisponibilidad de la molécula 43



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 91.

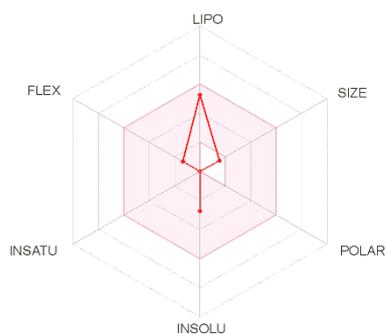
Radar de biodisponibilidad de la molécula 44



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 92.

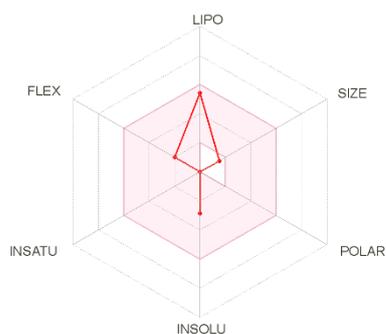
Radar de biodisponibilidad de la molécula 45



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 93.

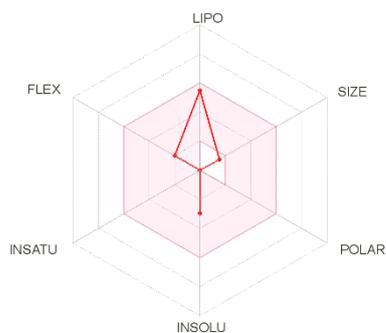
Radar de biodisponibilidad de la molécula 46



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 94.

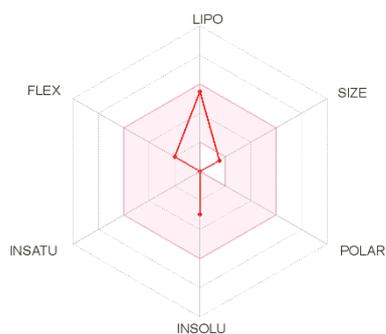
Radar de biodisponibilidad de la molécula 47



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 95.

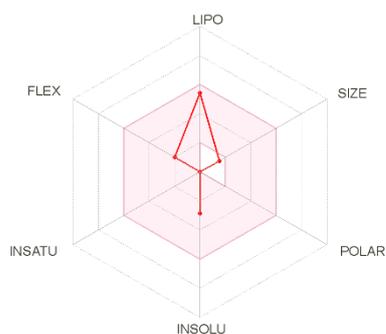
Radar de biodisponibilidad de la molécula 48



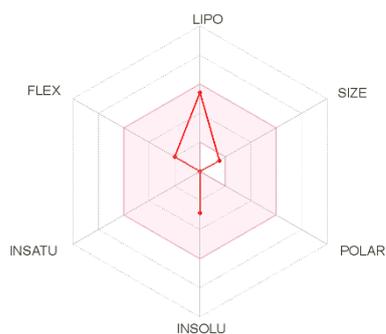
Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 96.

Radar de biodisponibilidad de la molécula 49



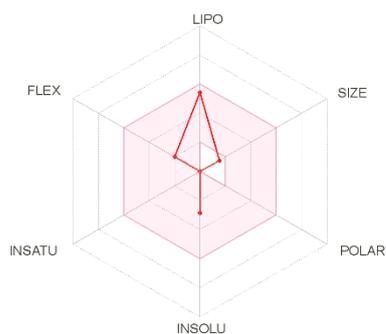
Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 97. *Radar de biodisponibilidad de la molécula 50*

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 98.

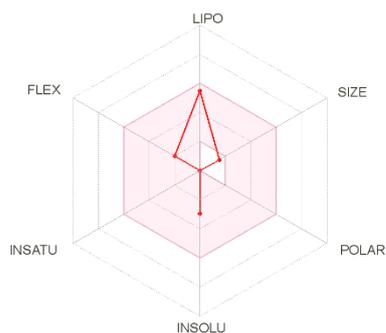
Radar de biodisponibilidad de la molécula 51



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 99.

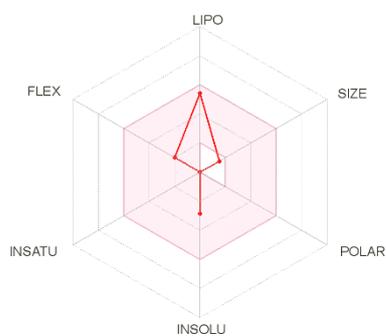
Radar de biodisponibilidad de la molécula 52



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 100.

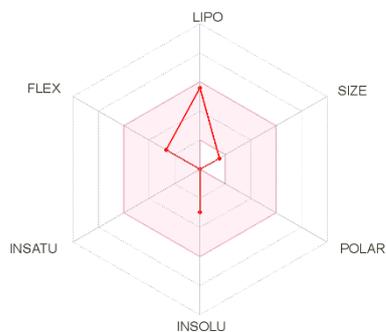
Radar de biodisponibilidad de la molécula 53



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 101.

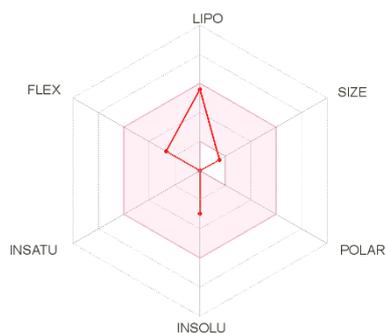
Radar de biodisponibilidad de la molécula 54



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 102.

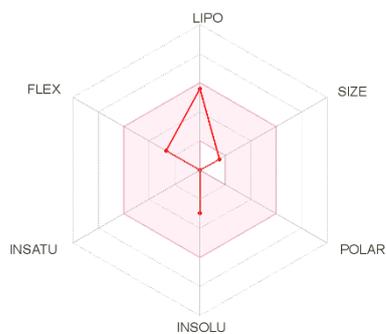
Radar de biodisponibilidad de la molécula 55



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 103.

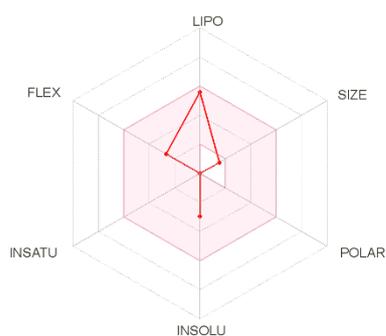
Radar de biodisponibilidad de la molécula 56



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 104.

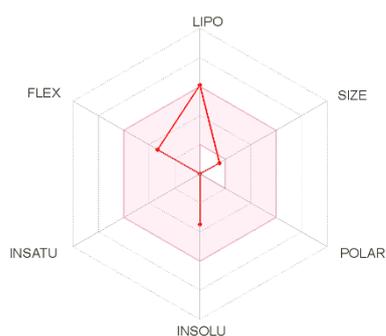
Radar de biodisponibilidad de la molécula 57



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 105.

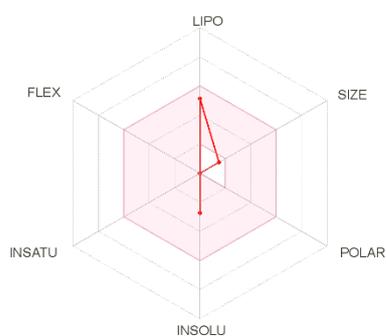
Radar de biodisponibilidad de la molécula 58



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 106.

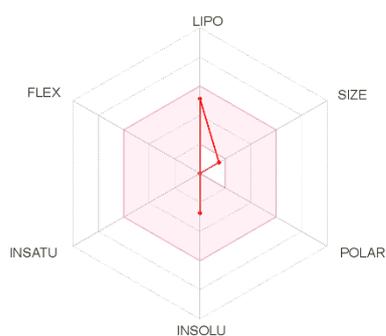
Radar de biodisponibilidad de la molécula 59



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 107.

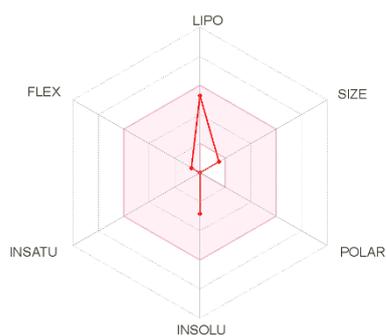
Radar de biodisponibilidad de la molécula 60



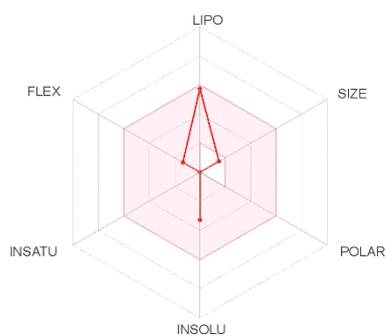
Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 108.

Radar de biodisponibilidad de la molécula 61



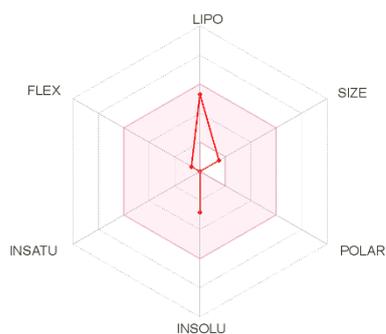
Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 109. Radar de biodisponibilidad de la molécula 62

Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 110.

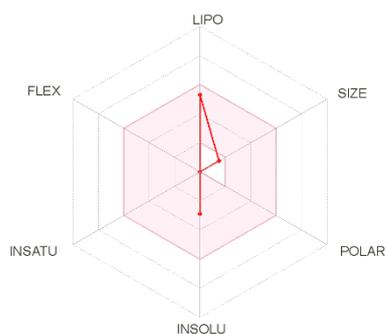
Radar de biodisponibilidad de la molécula 63



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 111.

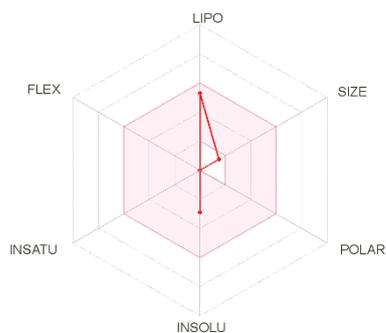
Radar de biodisponibilidad de la molécula 64



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 112.

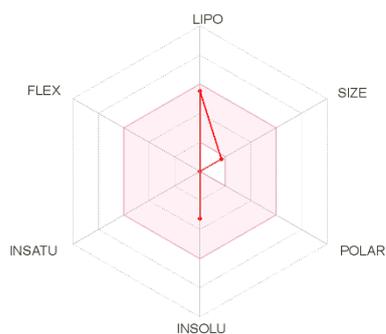
Radar de biodisponibilidad de la molécula 65



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 113.

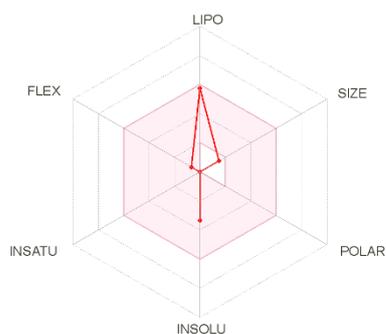
Radar de biodisponibilidad de la molécula 66



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 114.

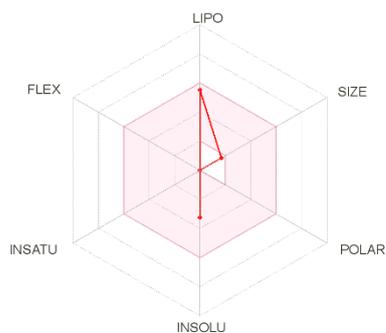
Radar de biodisponibilidad de la molécula 67



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 115.

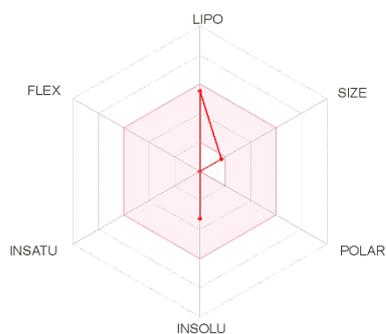
Radar de biodisponibilidad de la molécula 68



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 116.

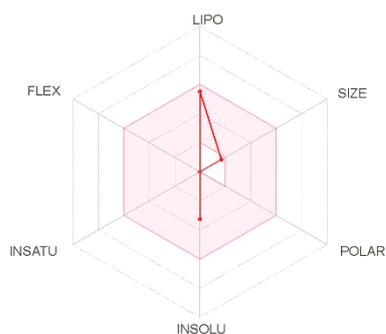
Radar de biodisponibilidad de la molécula 69



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 117

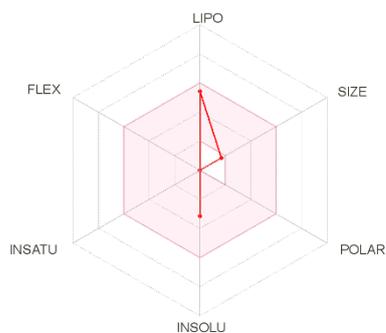
Radar de biodisponibilidad de la molécula 70



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 118.

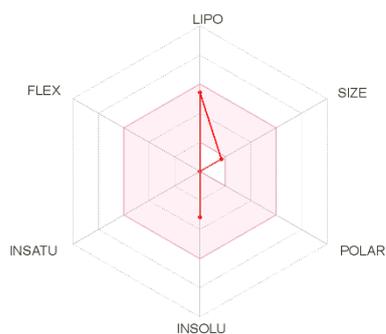
Radar de biodisponibilidad de la molécula 71



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 119.

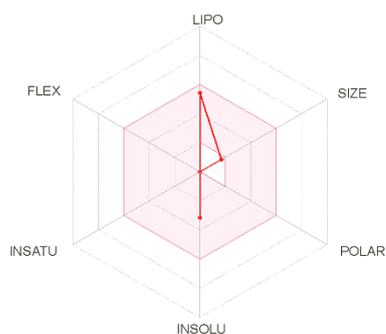
Radar de biodisponibilidad de la molécula 72



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 120.

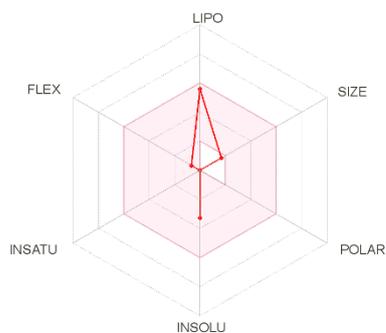
Radar de biodisponibilidad de la molécula 73



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 121.

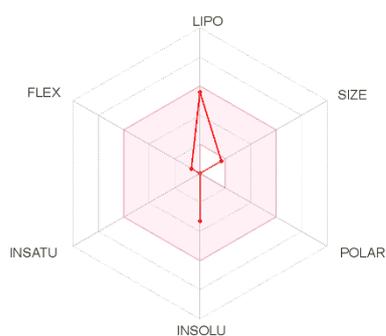
Radar de biodisponibilidad de la molécula 74



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 122.

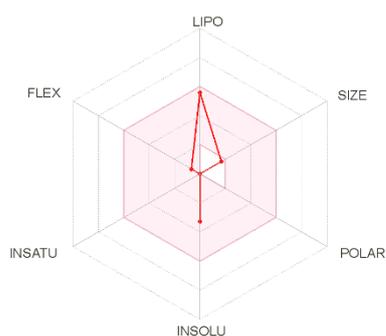
Radar de biodisponibilidad de la molécula 75



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 123.

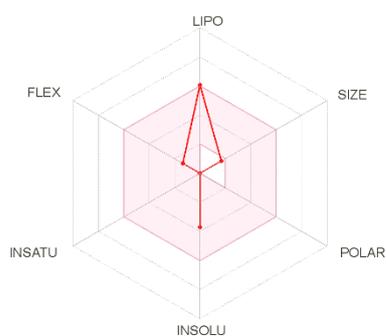
Radar de biodisponibilidad de la molécula 76



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 124.

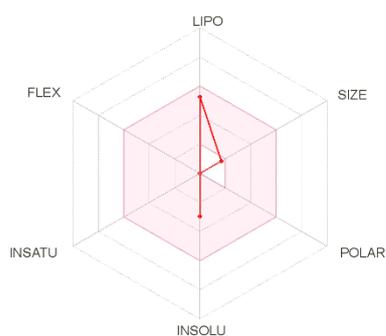
Radar de biodisponibilidad de la molécula 77



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 125.

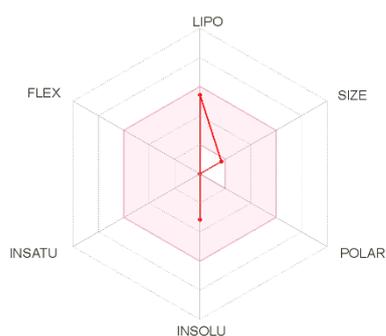
Radar de biodisponibilidad de la molécula 78



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 126.

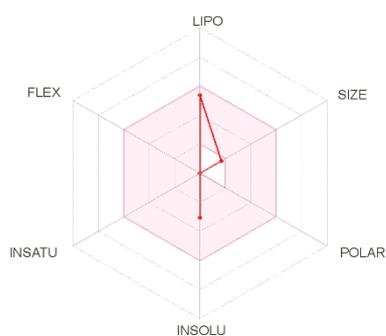
Radar de biodisponibilidad de la molécula 79



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 127.

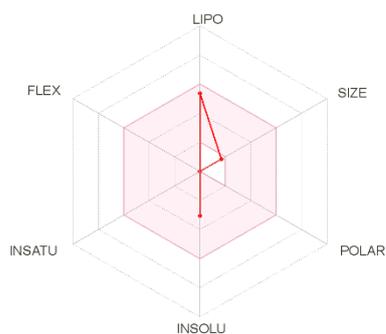
Radar de biodisponibilidad de la molécula 80



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 128.

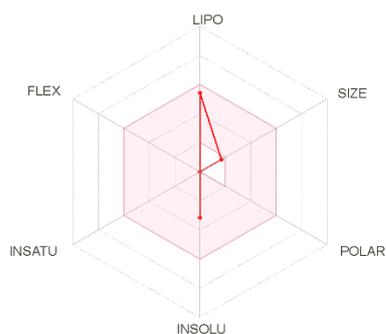
Radar de biodisponibilidad de la molécula 81



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 129.

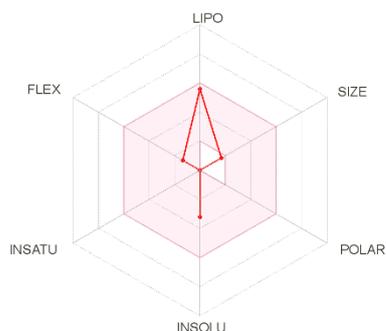
Radar de biodisponibilidad de la molécula 82



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 130.

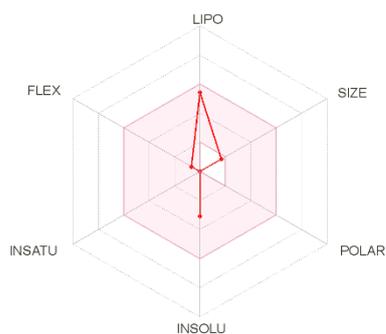
Radar de biodisponibilidad de la molécula 83



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 131.

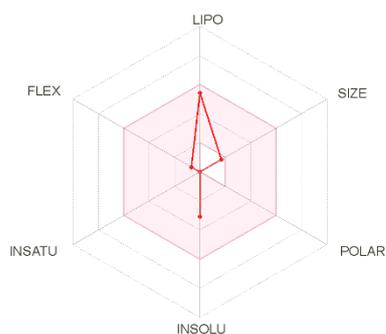
Radar de biodisponibilidad de la molécula 84



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 132.

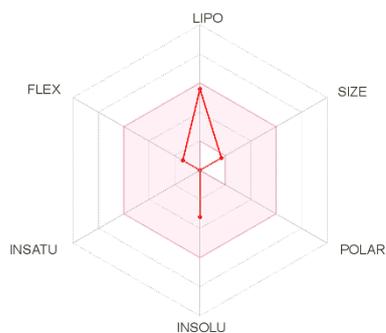
Radar de biodisponibilidad de la molécula 85



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 133.

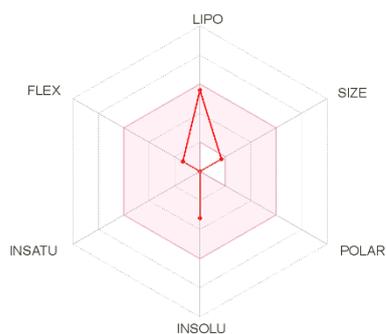
Radar de biodisponibilidad de la molécula 86



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 134.

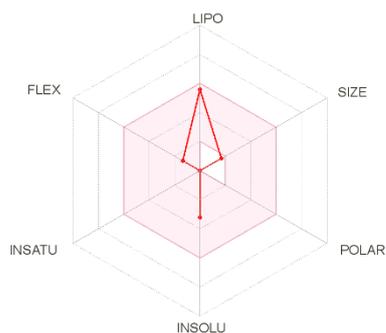
Radars de biodisponibilidad de la molécula 87



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 135.

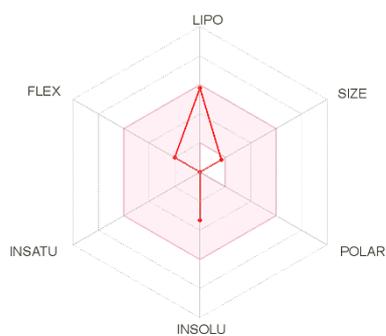
Radars de biodisponibilidad de la molécula 88



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 136.

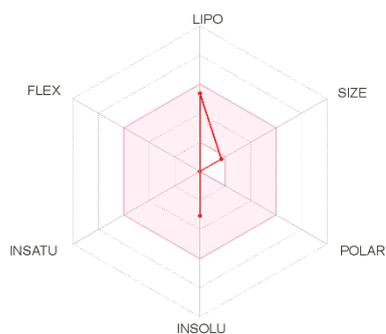
Radars de biodisponibilidad de la molécula 89



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 137.

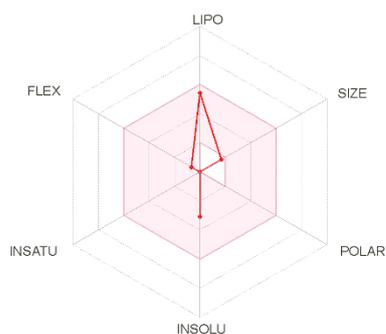
Radar de biodisponibilidad de la molécula 90



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 138.

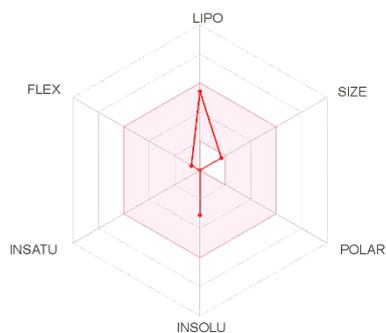
Radar de biodisponibilidad de la molécula 91



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 139.

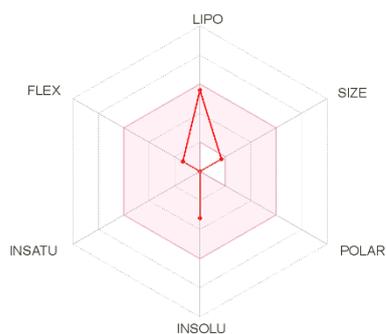
Radar de biodisponibilidad de la molécula 92



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 140.

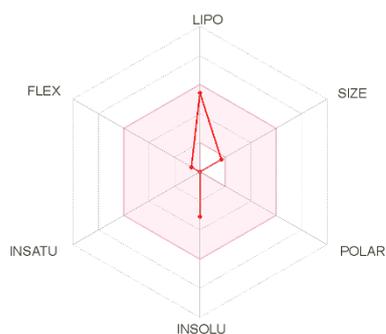
Radar de biodisponibilidad de la molécula 93



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 141.

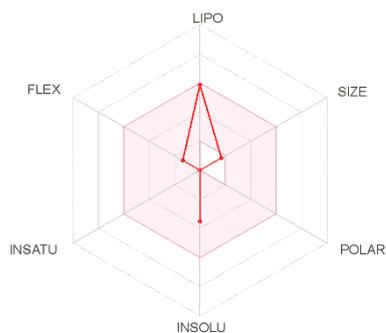
Radar de biodisponibilidad de la molécula 94



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 142.

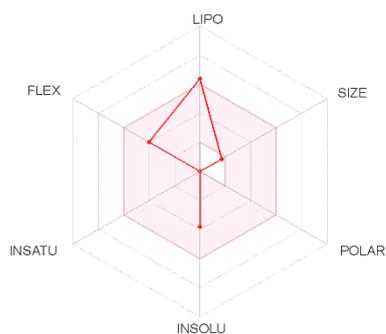
Radar de biodisponibilidad de la molécula 95



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 143.

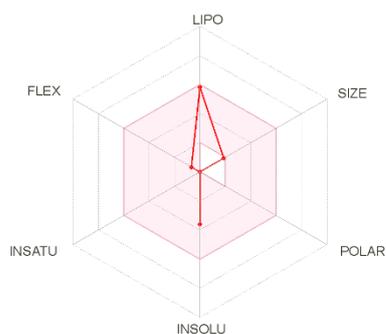
Radar de biodisponibilidad de la molécula 96



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 144.

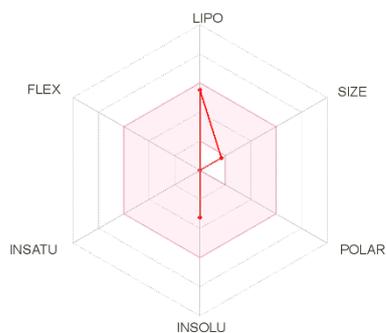
Radar de biodisponibilidad de la molécula 97



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 145.

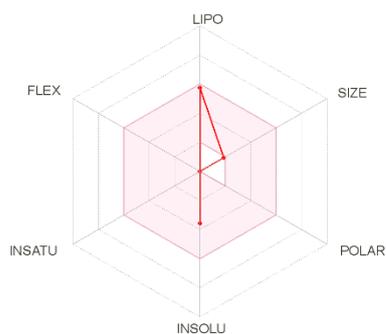
Radar de biodisponibilidad de la molécula 98



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 146.

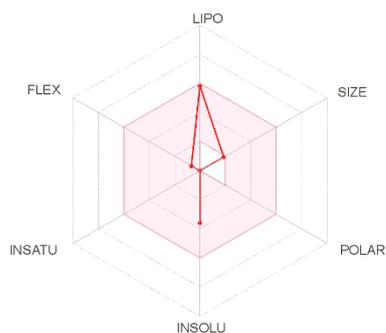
Radar de biodisponibilidad de la molécula 99



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 147.

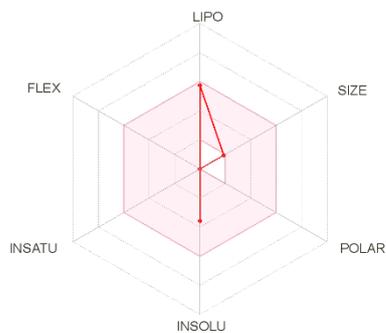
Radar de biodisponibilidad de la molécula 100



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 148.

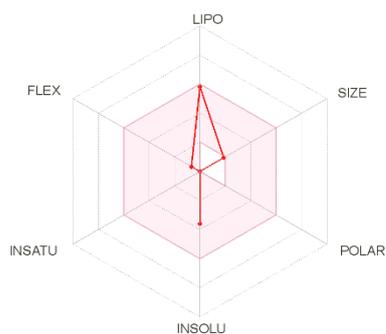
Radar de biodisponibilidad de la molécula 101



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 149.

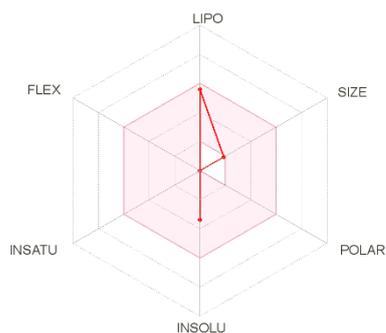
Radar de biodisponibilidad de la molécula 102



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 150.

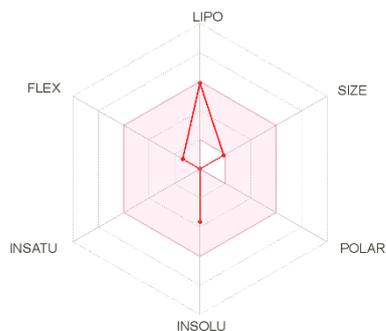
Radar de biodisponibilidad de la molécula 103



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 151.

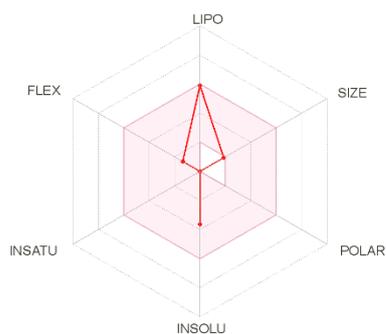
Radar de biodisponibilidad de la molécula 104



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 152.

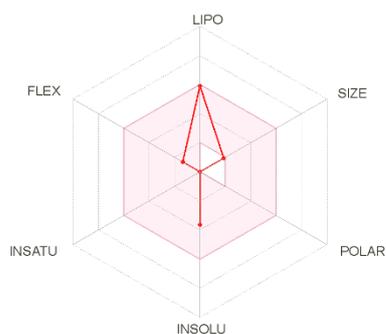
Radar de biodisponibilidad de la molécula 105



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 153.

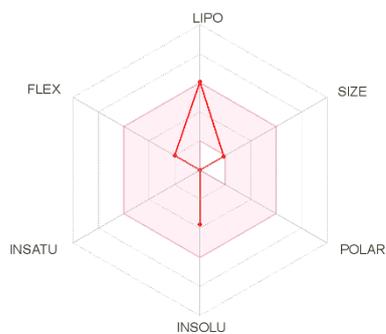
Radar de biodisponibilidad de la molécula 106



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 154.

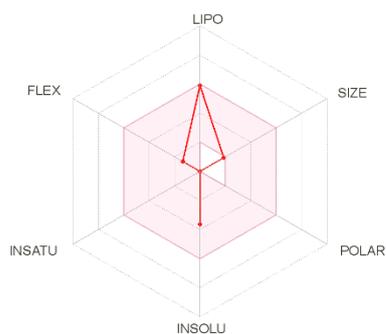
Radar de biodisponibilidad de la molécula 107



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 155.

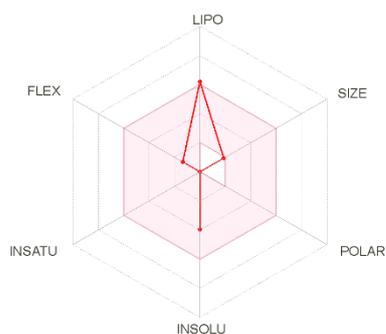
Radar de biodisponibilidad de la molécula 108



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 156.

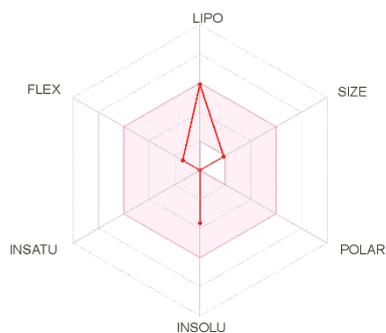
Radar de biodisponibilidad de la molécula 109



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 157.

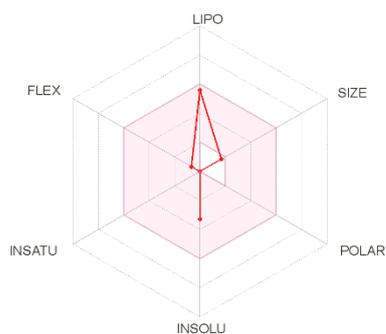
Radar de biodisponibilidad de la molécula 110



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 158.

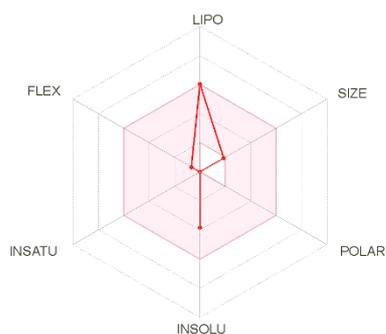
Radar de biodisponibilidad de la molécula 111



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 159.

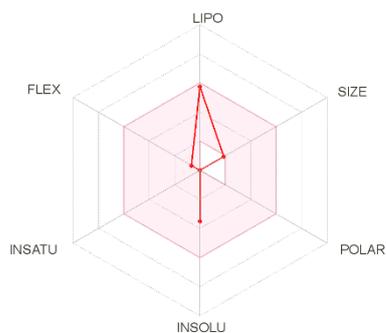
Radar de biodisponibilidad de la molécula 112



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 160.

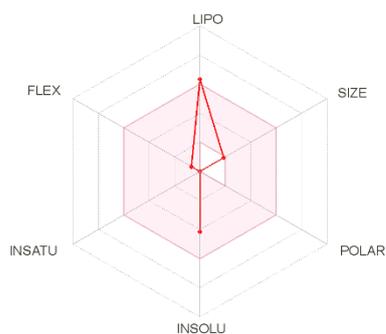
Radar de biodisponibilidad de la molécula 113



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 161.

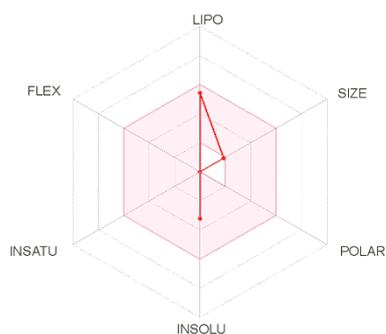
Radar de biodisponibilidad de la molécula 114



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 162.

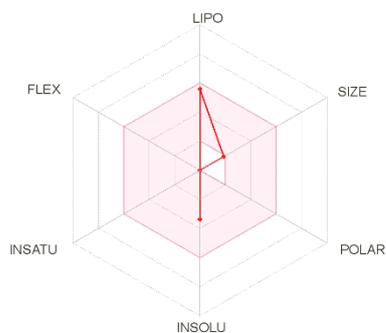
Radar de biodisponibilidad de la molécula 115



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 163.

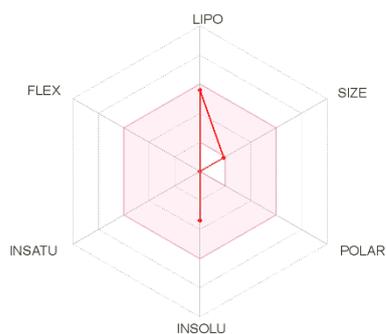
Radar de biodisponibilidad de la molécula 116



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 164.

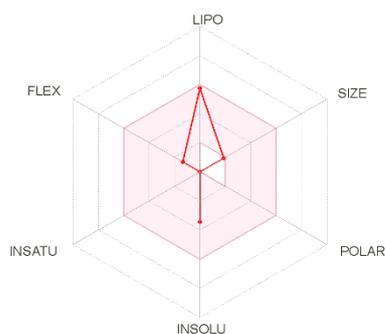
Radar de biodisponibilidad de la molécula 117



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 165.

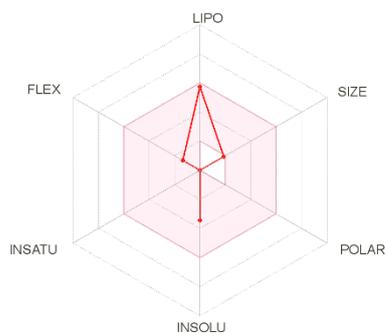
Radar de biodisponibilidad de la molécula 118



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 166.

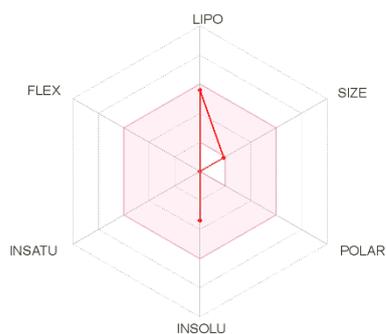
Radar de biodisponibilidad de la molécula 119



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 167.

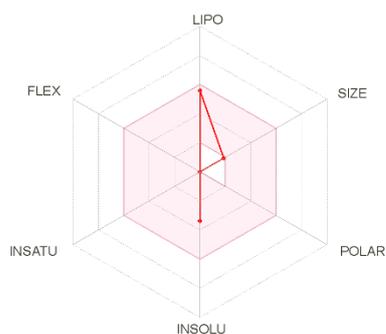
Radar de biodisponibilidad de la molécula 120



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 168.

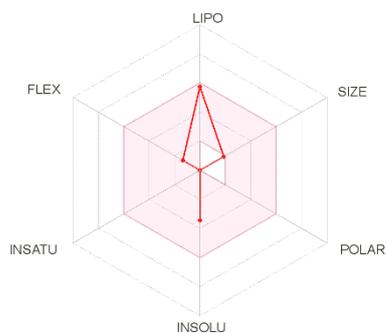
Radar de biodisponibilidad de la molécula 121



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 169.

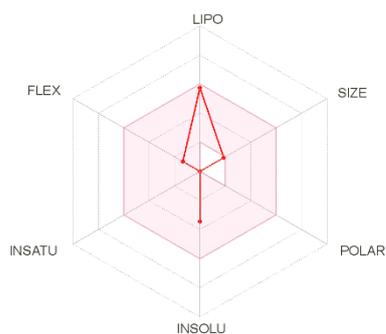
Radar de biodisponibilidad de la molécula 122



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 170.

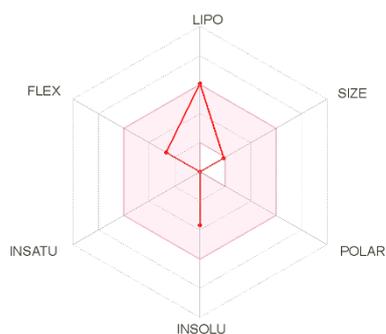
Radar de biodisponibilidad de la molécula 123



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 171.

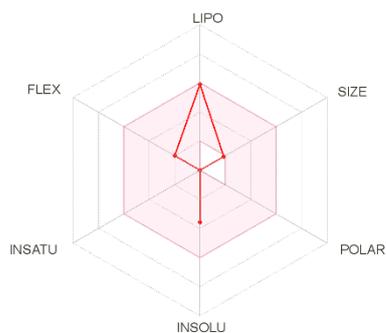
Radar de biodisponibilidad de la molécula 124



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 172.

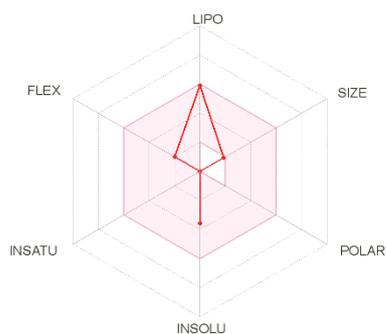
Radar de biodisponibilidad de la molécula 125



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 173.

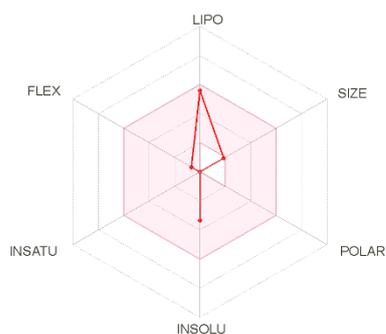
Radar de biodisponibilidad de la molécula 126



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 174.

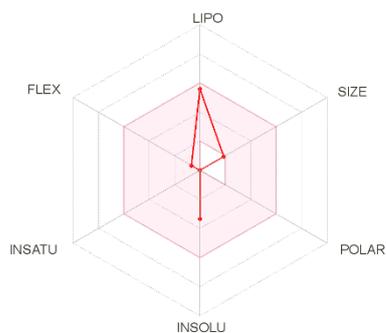
Radar de biodisponibilidad de la molécula 127



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 175.

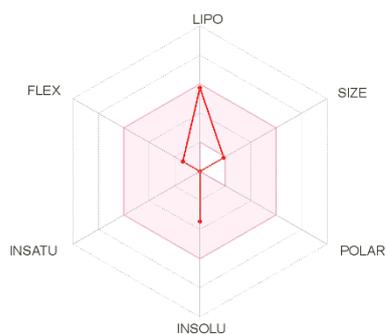
Radar de biodisponibilidad de la molécula 128



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 176.

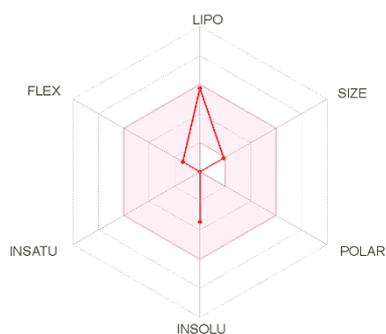
Radar de biodisponibilidad de la molécula 129



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 177.

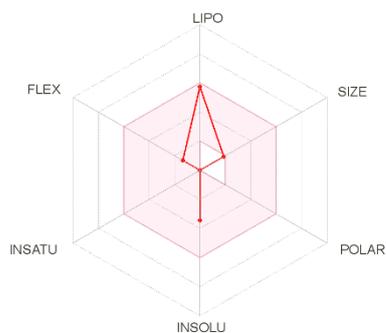
Radar de biodisponibilidad de la molécula 130



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 178.

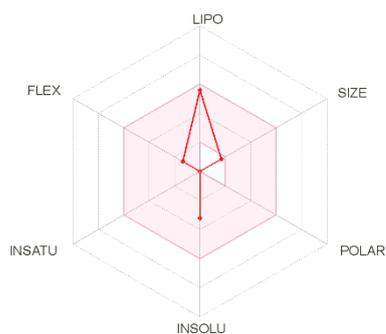
Radar de biodisponibilidad de la molécula 131



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 179.

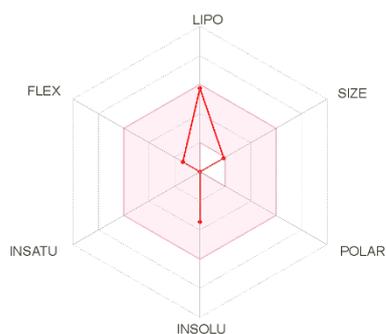
Radar de biodisponibilidad de la molécula 132



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 180.

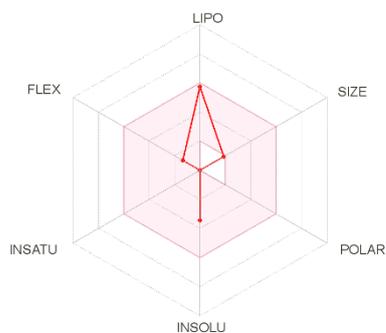
Radar de biodisponibilidad de la molécula 133



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 181.

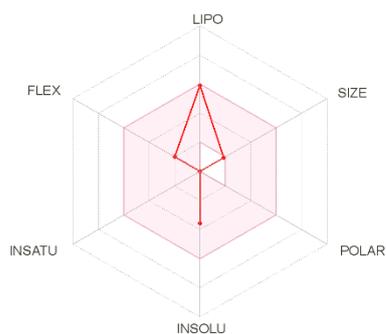
Radar de biodisponibilidad de la molécula 134



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 182.

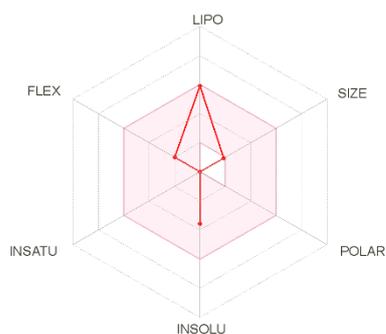
Radar de biodisponibilidad de la molécula 135



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 183.

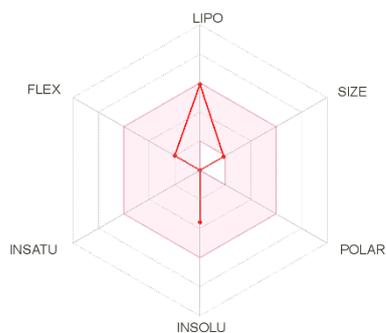
Radar de biodisponibilidad de la molécula 136



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 184.

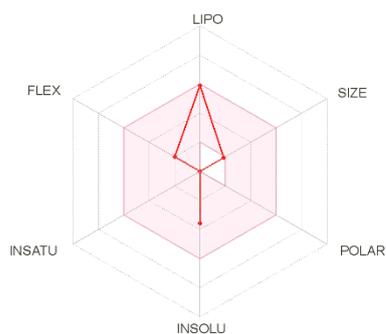
Radar de biodisponibilidad de la molécula 137



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 185.

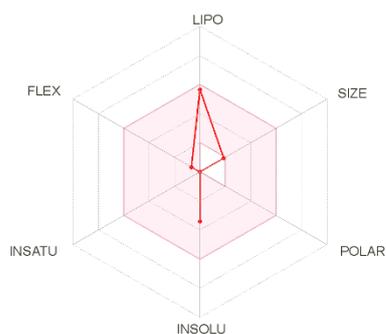
Radar de biodisponibilidad de la molécula 138



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 186.

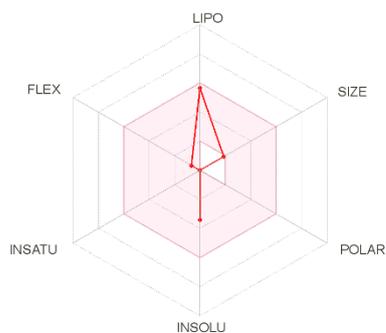
Radar de biodisponibilidad de la molécula 139



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 187.

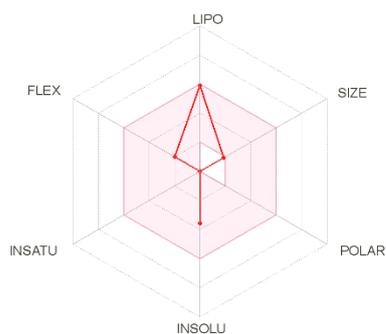
Radar de biodisponibilidad de la molécula 140



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 188.

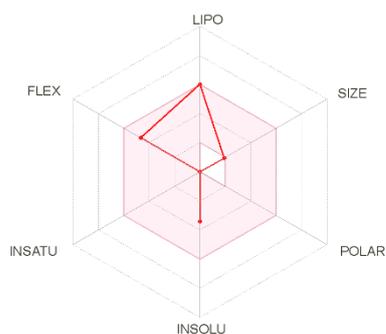
Radar de biodisponibilidad de la molécula 141



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 189.

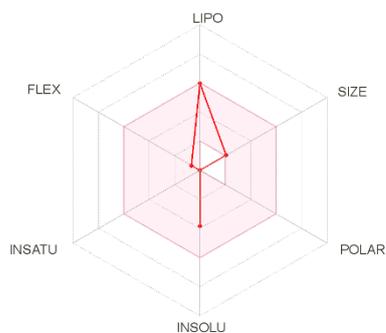
Radar de biodisponibilidad de la molécula 142



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 190.

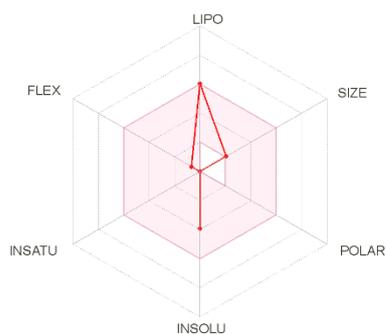
Radar de biodisponibilidad de la molécula 143



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 191.

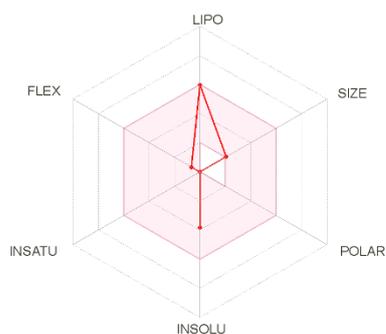
Radar de biodisponibilidad de la molécula 144



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 192.

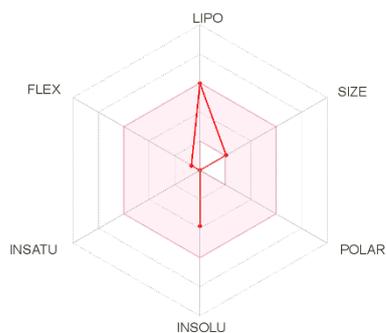
Radar de biodisponibilidad de la molécula 145



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 193.

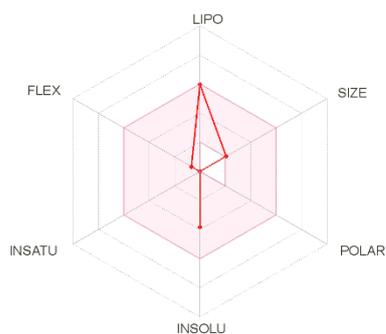
Radar de biodisponibilidad de la molécula 146



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 194.

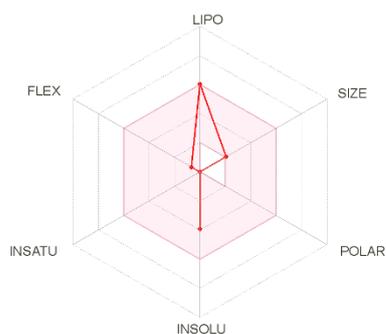
Radar de biodisponibilidad de la molécula 147



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 195.

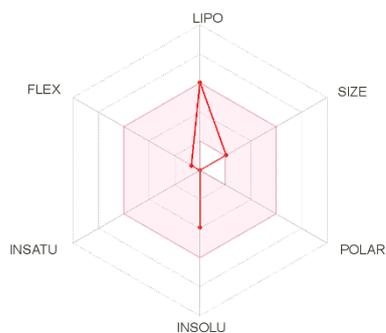
Radar de biodisponibilidad de la molécula 148



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 196.

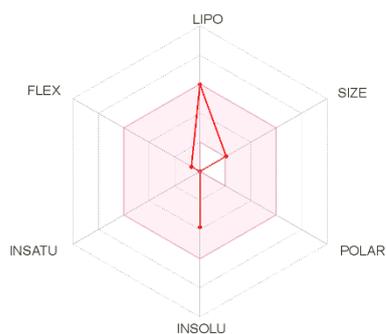
Radar de biodisponibilidad de la molécula 149



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 197.

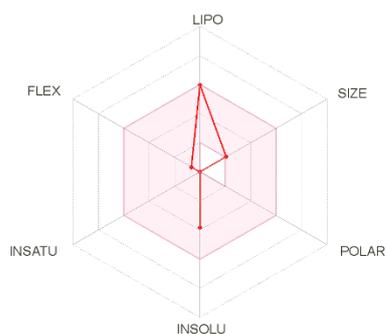
Radar de biodisponibilidad de la molécula 150



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 198.

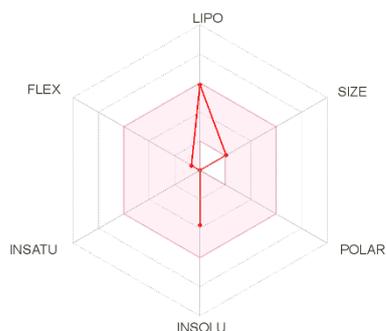
Radar de biodisponibilidad de la molécula 151



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 199.

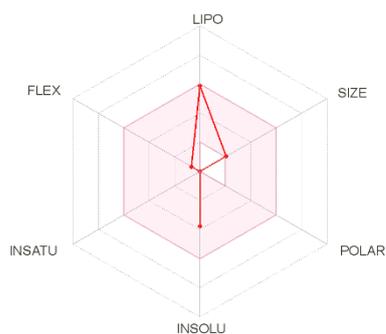
Radar de biodisponibilidad de la molécula 152



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 200.

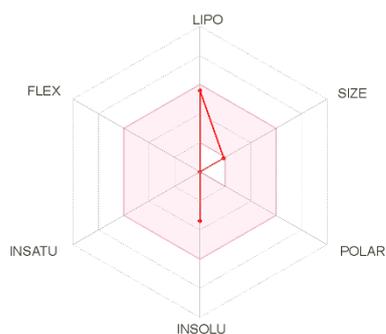
Radar de biodisponibilidad de la molécula 153



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 201.

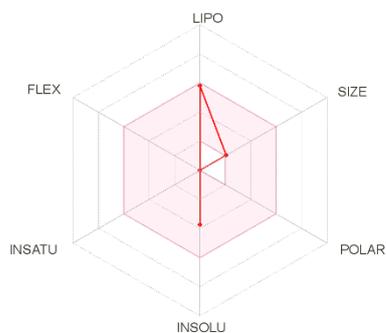
Radar de biodisponibilidad de la molécula 154



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 202.

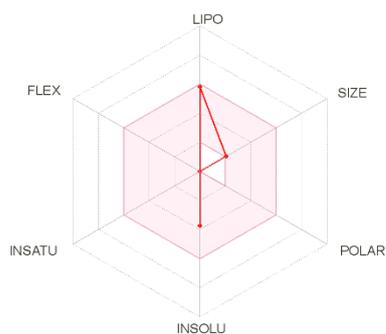
Radar de biodisponibilidad de la molécula 155



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 203.

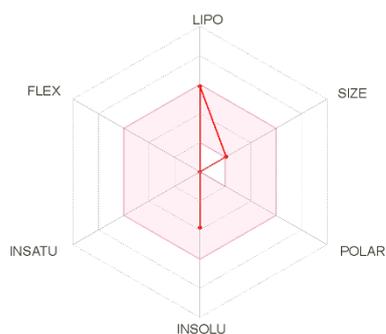
Radar de biodisponibilidad de la molécula 156



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 204.

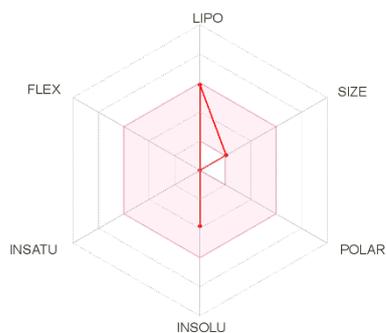
Radar de biodisponibilidad de la molécula 157



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 205.

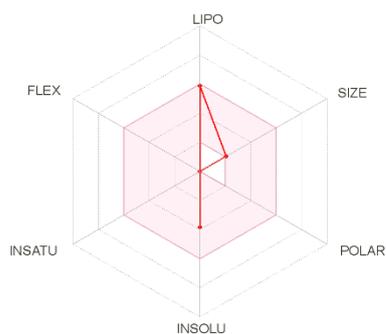
Radar de biodisponibilidad de la molécula 158



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 206.

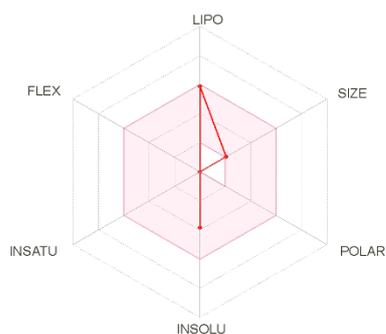
Radar de biodisponibilidad de la molécula 159



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 207.

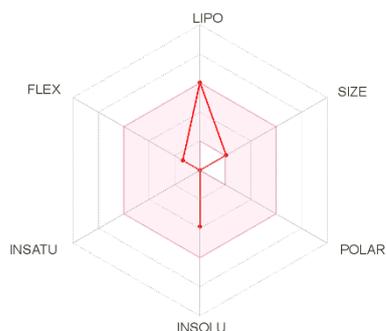
Radar de biodisponibilidad de la molécula 160



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 208.

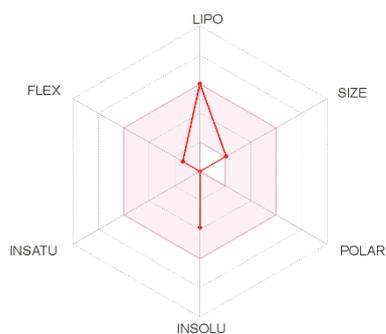
Radar de biodisponibilidad de la molécula 161



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 209.

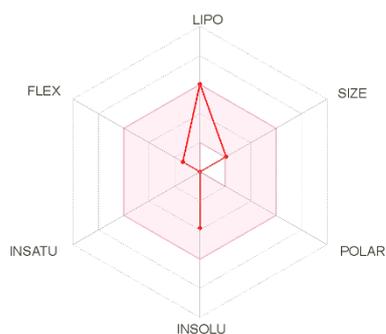
Radar de biodisponibilidad de la molécula 162



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 210.

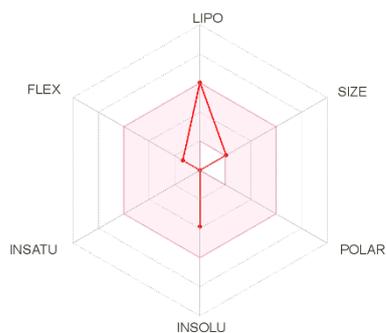
Radar de biodisponibilidad de la molécula 163



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 211.

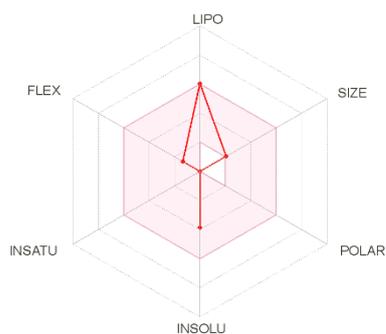
Radar de biodisponibilidad de la molécula 164



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 212.

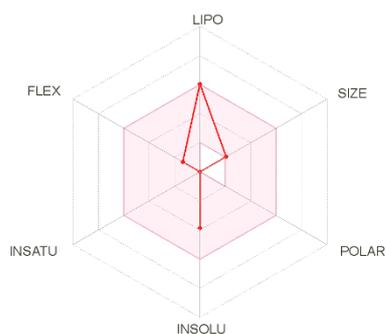
Radar de biodisponibilidad de la molécula 165



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 213.

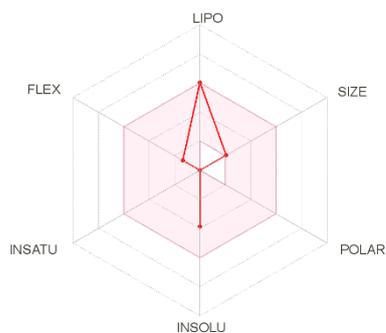
Radar de biodisponibilidad de la molécula 166



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 214.

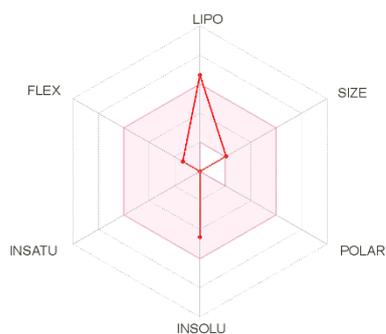
Radar de biodisponibilidad de la molécula 167



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 215.

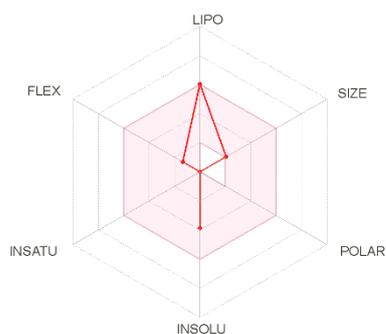
Radar de biodisponibilidad de la molécula 168



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 216.

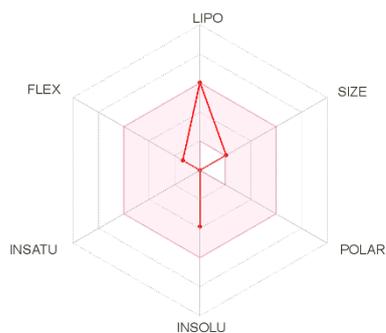
Radar de biodisponibilidad de la molécula 169



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 217.

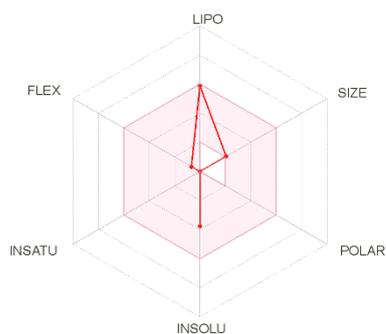
Radar de biodisponibilidad de la molécula 170



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 218.

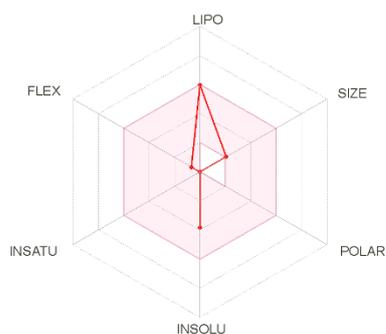
Radar de biodisponibilidad de la molécula 171



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 219.

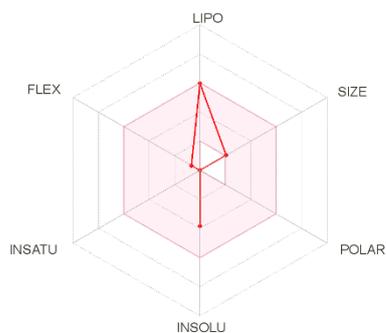
Radar de biodisponibilidad de la molécula 172



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 220.

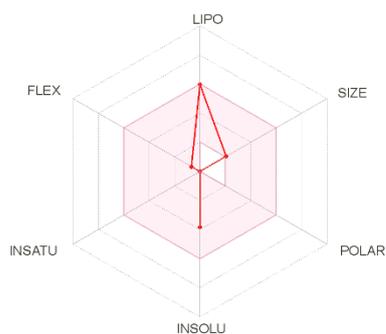
Radar de biodisponibilidad de la molécula 173



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 221.

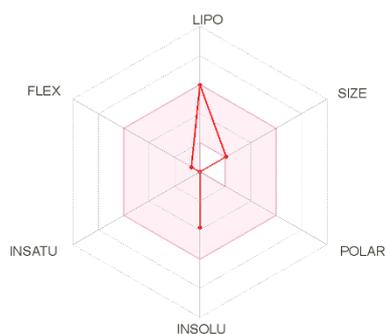
Radar de biodisponibilidad de la molécula 174



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 222.

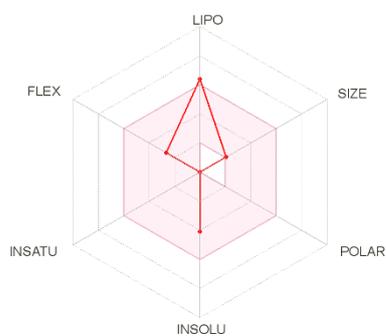
Radar de biodisponibilidad de la molécula 175



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 223.

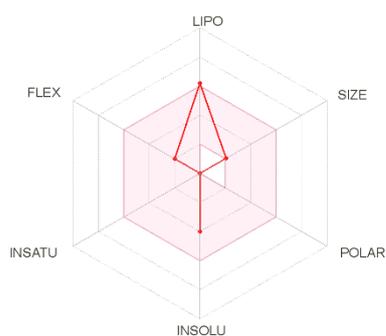
Radar de biodisponibilidad de la molécula 176



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 224.

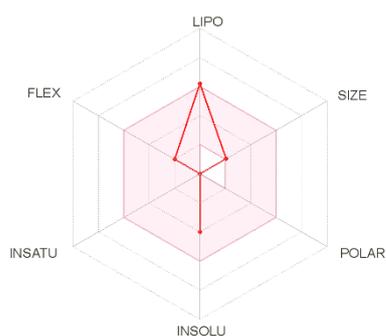
Radar de biodisponibilidad de la molécula 177



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 225.

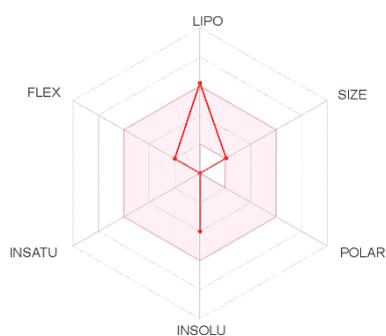
Radar de biodisponibilidad de la molécula 178



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 226.

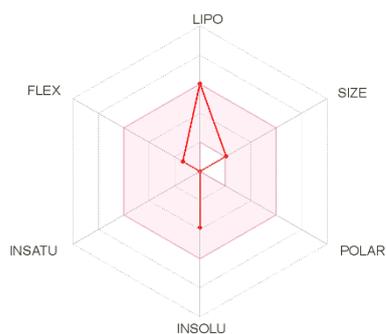
Radar de biodisponibilidad de la molécula 179



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 227.

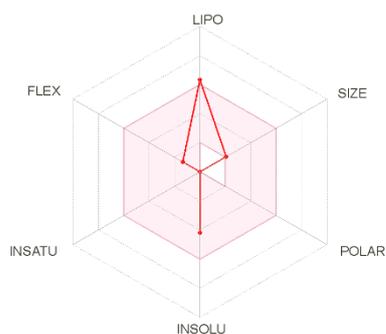
Radar de biodisponibilidad de la molécula 180



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 228.

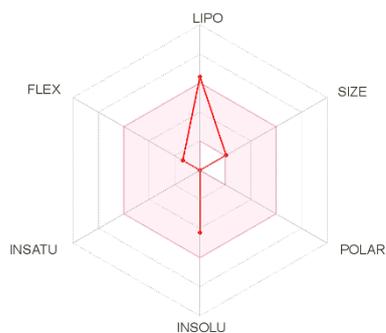
Radar de biodisponibilidad de la molécula 181



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 229.

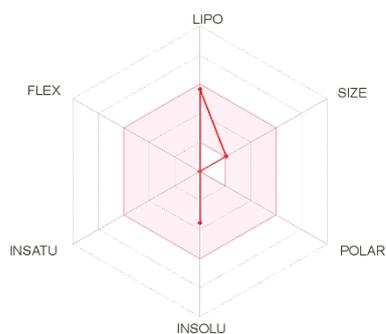
Radar de biodisponibilidad de la molécula 182



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 230

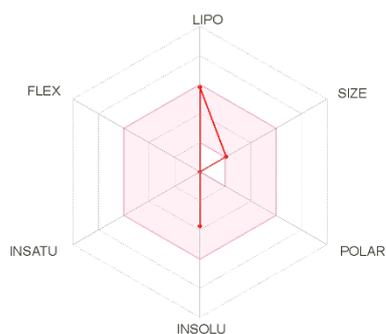
. Radar de biodisponibilidad de la molécula 183



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 231.

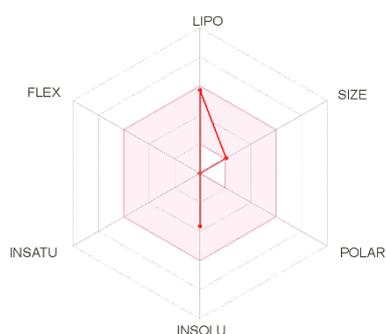
Radar de biodisponibilidad de la molécula 184



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 232.

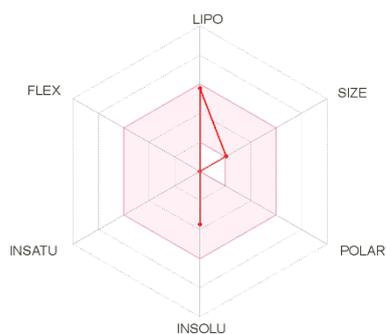
Radar de biodisponibilidad de la molécula 185



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 233.

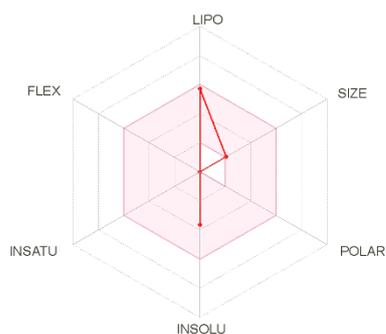
Radar de biodisponibilidad de la molécula 186



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 234.

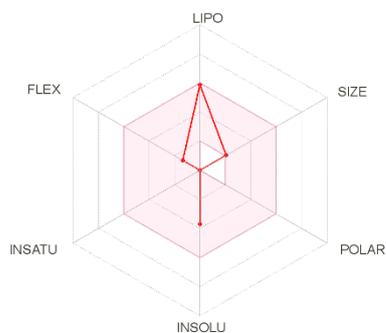
Radar de biodisponibilidad de la molécula 187



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 235.

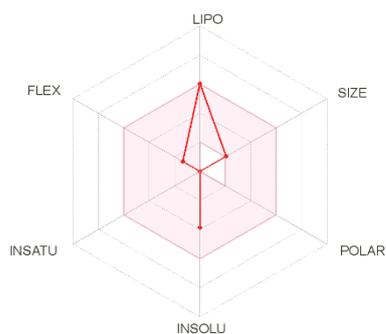
Radar de biodisponibilidad de la molécula 188



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 236.

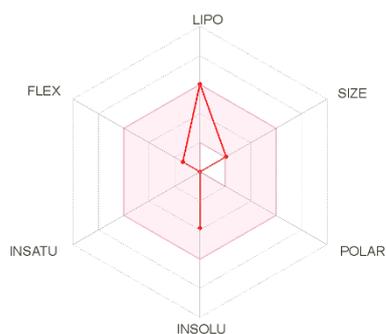
Radar de biodisponibilidad de la molécula 189



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 237.

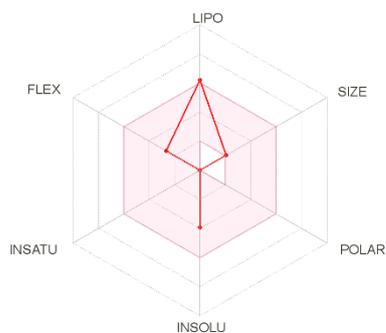
Radar de biodisponibilidad de la molécula 190



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 238.

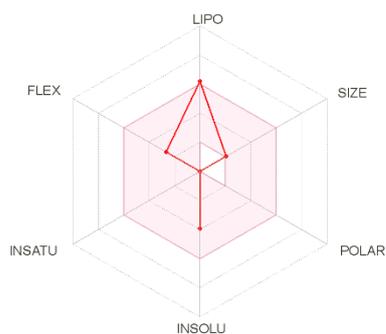
Radar de biodisponibilidad de la molécula 191



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 239.

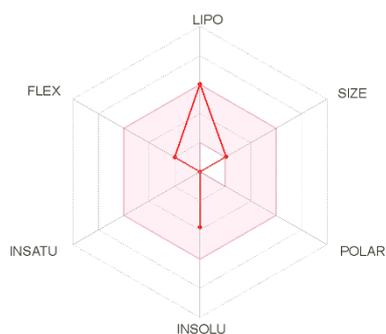
Radar de biodisponibilidad de la molécula 192



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 240.

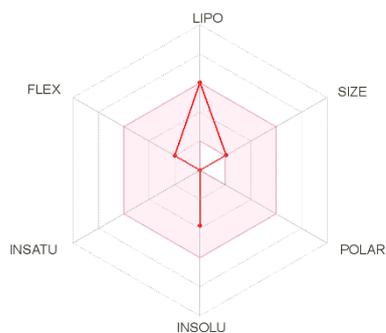
Radar de biodisponibilidad de la molécula 193



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 241.

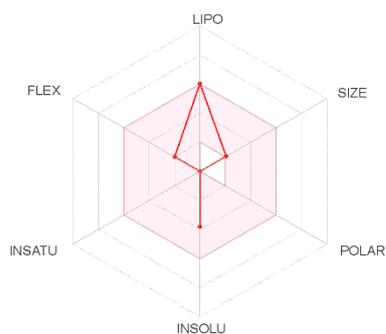
Radar de biodisponibilidad de la molécula 194



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 242.

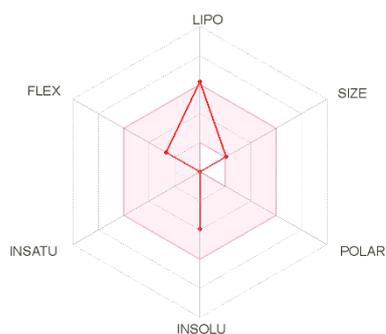
Radar de biodisponibilidad de la molécula 195



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 243.

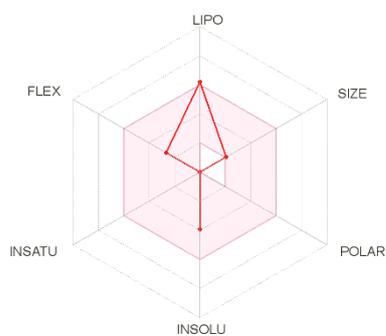
Radar de biodisponibilidad de la molécula 196



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 244.

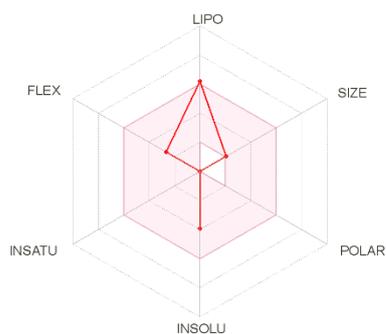
Radar de biodisponibilidad de la molécula 197



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 245.

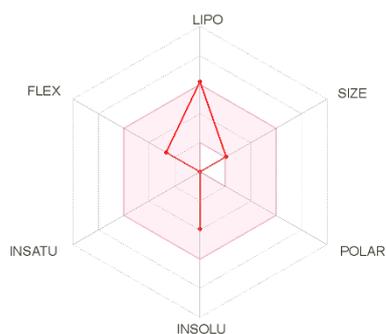
Radar de biodisponibilidad de la molécula 198



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 246.

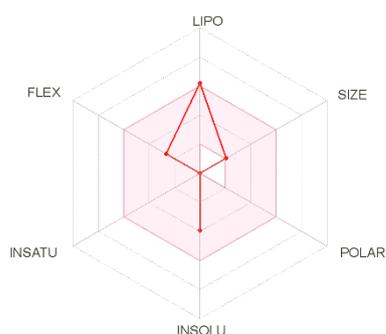
Radar de biodisponibilidad de la molécula 199



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 247.

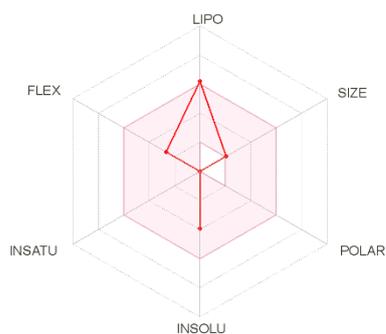
Radar de biodisponibilidad de la molécula 200



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 248.

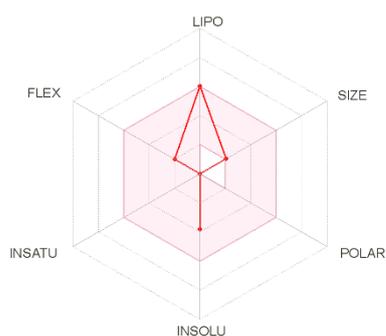
Radar de biodisponibilidad de la molécula 201



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 249.

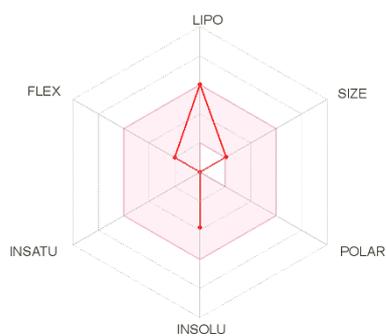
Radar de biodisponibilidad de la molécula 202



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 250.

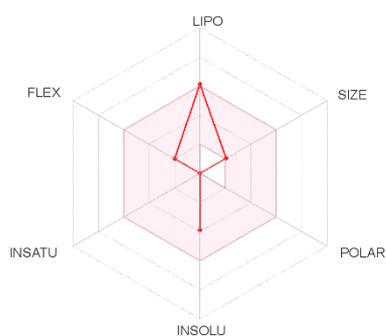
Radar de biodisponibilidad de la molécula 203



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 251.

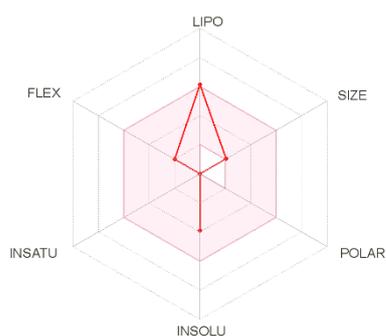
Radar de biodisponibilidad de la molécula 204



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 252.

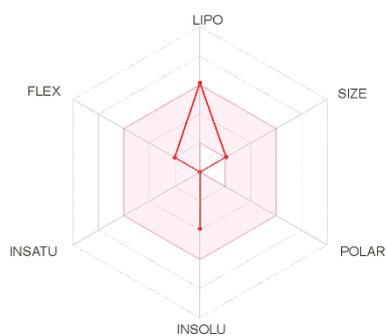
Radar de biodisponibilidad de la molécula 205



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 253.

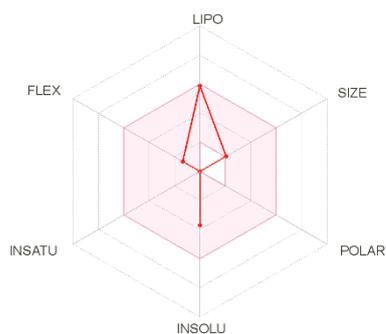
Radar de biodisponibilidad de la molécula 206



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 254.

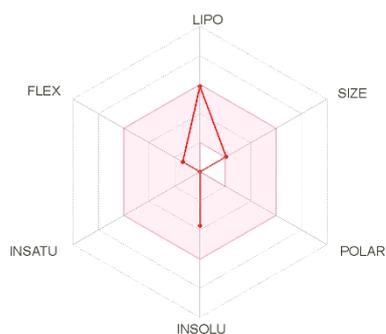
Radar de biodisponibilidad de la molécula 207



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 255.

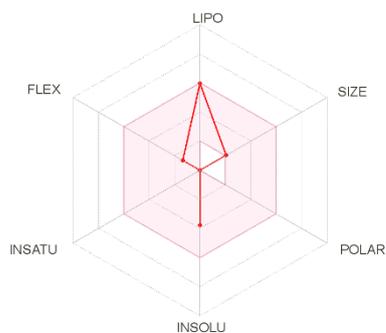
Radar de biodisponibilidad de la molécula 208



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 256.

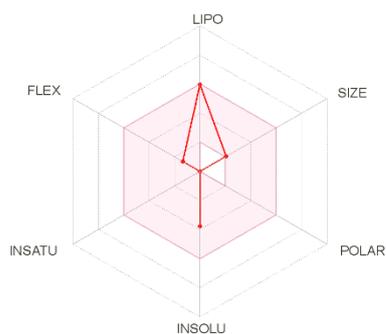
Radar de biodisponibilidad de la molécula 209



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 257.

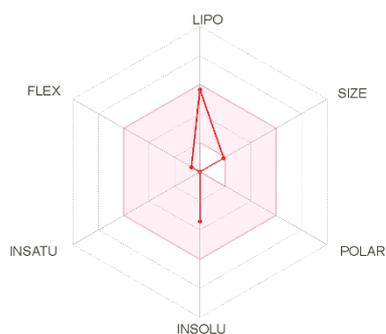
Radar de biodisponibilidad de la molécula 210



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 258.

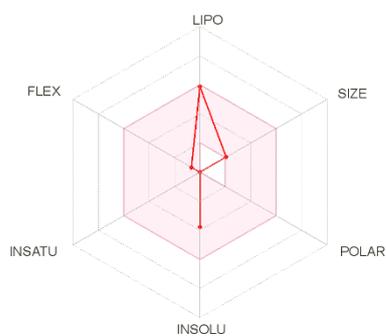
Radar de biodisponibilidad de la molécula 211



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 259.

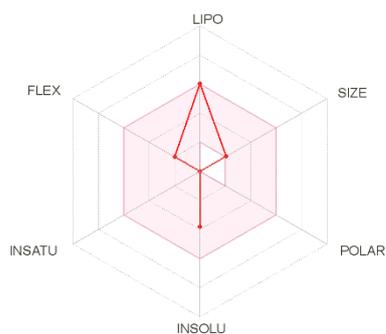
Radar de biodisponibilidad de la molécula 212



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 260.

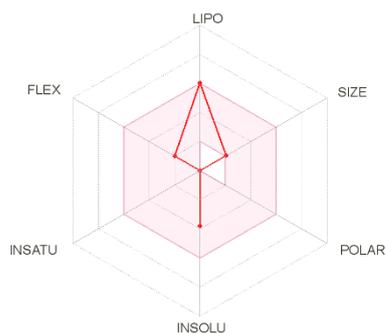
Radar de biodisponibilidad de la molécula 213



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 261.

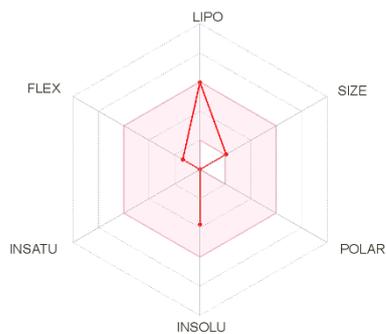
Radar de biodisponibilidad de la molécula 214



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 262.

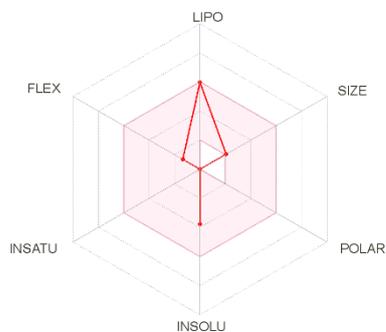
Radar de biodisponibilidad de la molécula 215



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 263.

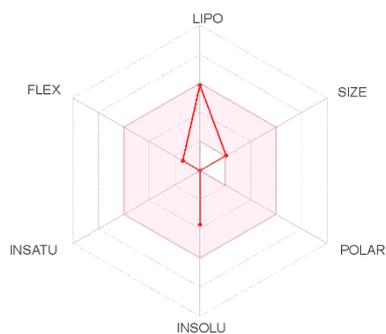
Radar de biodisponibilidad de la molécula 216



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 264.

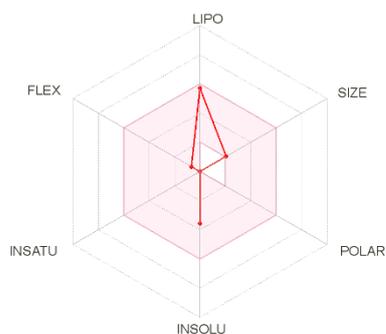
Radar de biodisponibilidad de la molécula 217



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 265.

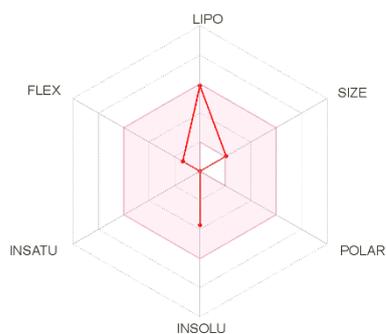
Radar de biodisponibilidad de la molécula 218



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 266.

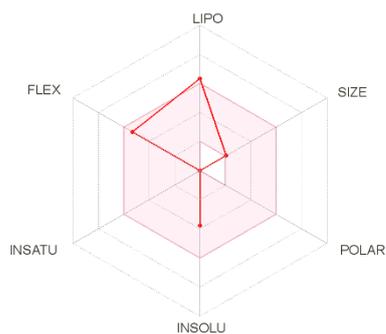
Radars de biodisponibilidad de la molécula 219



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 267.

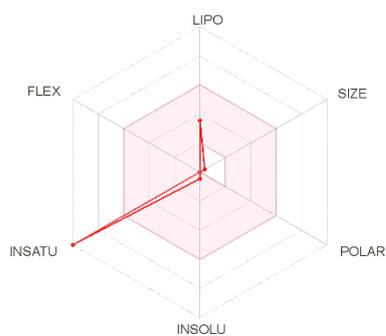
Radars de biodisponibilidad de la molécula 220



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 268.

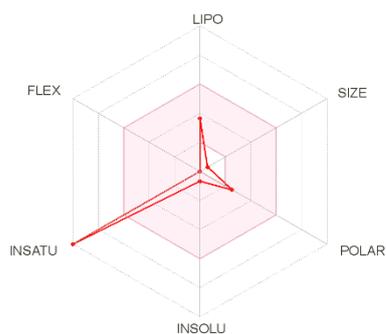
Radars de biodisponibilidad de la molécula 221



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 269.

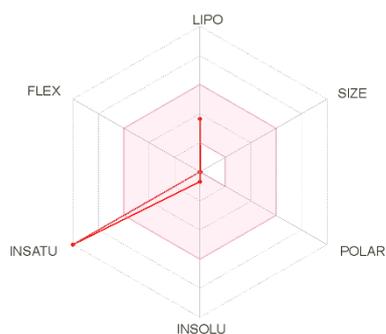
Radars de biodisponibilidad de la molécula 222



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 270.

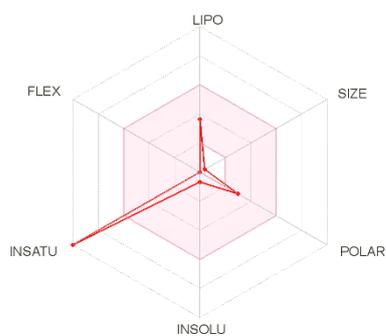
Radars de biodisponibilidad de la molécula 223



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 271.

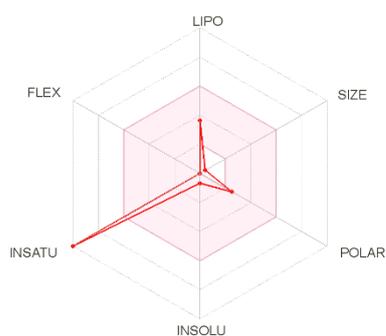
Radars de biodisponibilidad de la molécula 224



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 272.

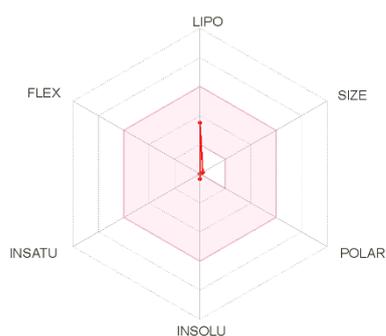
Radar de biodisponibilidad de la molécula 225



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 273.

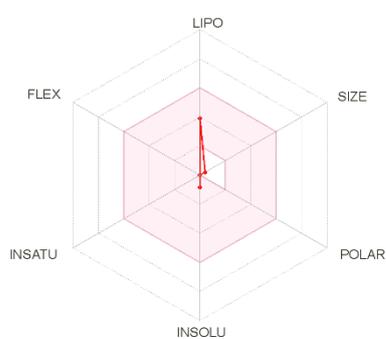
Radar de biodisponibilidad de la molécula 226



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 274.

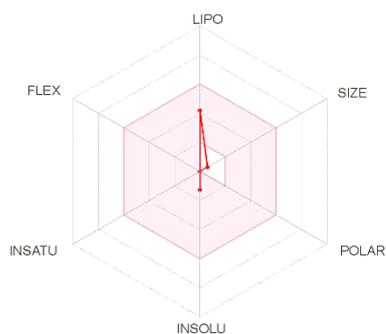
Radar de biodisponibilidad de la molécula 227



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 275.

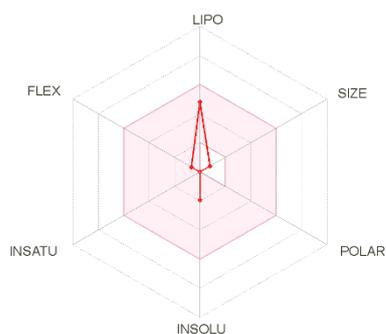
Radar de biodisponibilidad de la molécula 228



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 276.

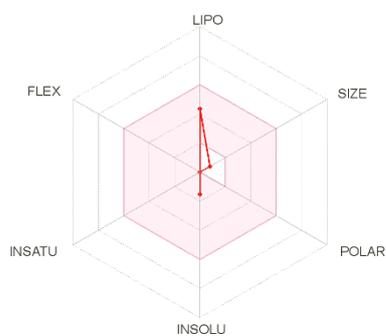
Radar de biodisponibilidad de la molécula 229



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 277.

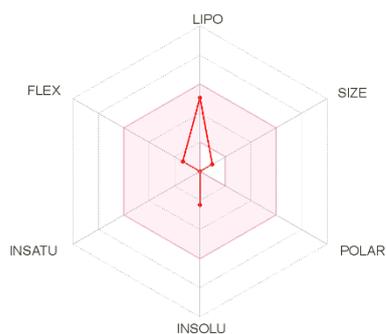
Radar de biodisponibilidad de la molécula 230



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 278.

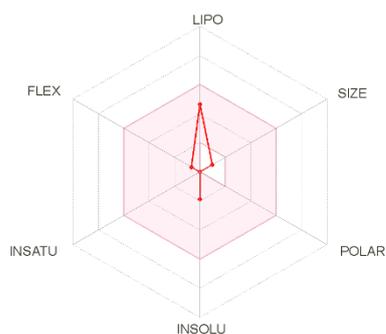
Radar de biodisponibilidad de la molécula 231



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 279.

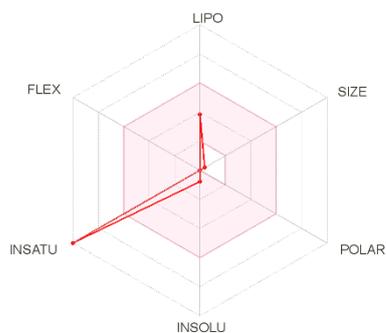
Radar de biodisponibilidad de la molécula 232



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 280.

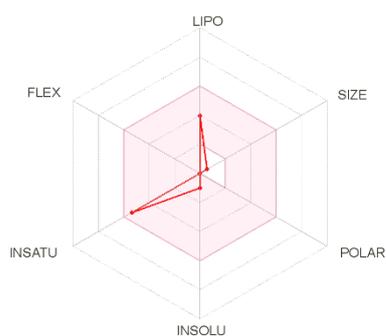
Radar de biodisponibilidad de la molécula 233



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 281.

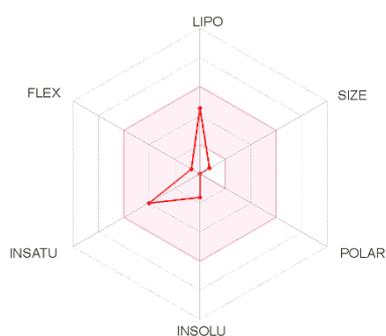
Radar de biodisponibilidad de la molécula 234



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 282.

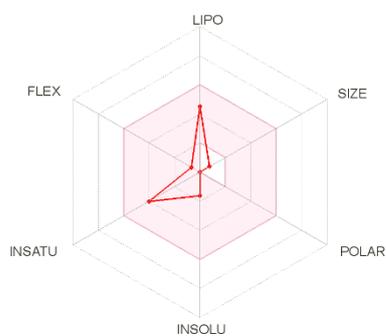
Radar de biodisponibilidad de la molécula 235



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 283.

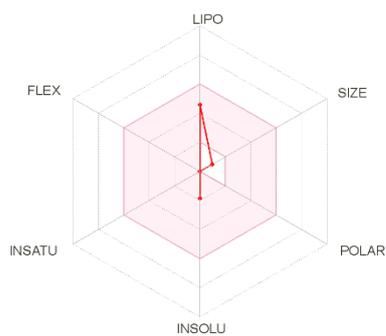
Radar de biodisponibilidad de la molécula 236



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 284.

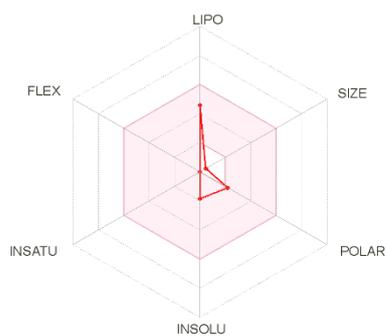
Radar de biodisponibilidad de la molécula 237



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

Figura 285.

Radar de biodisponibilidad de la molécula 238



Nota. Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME)

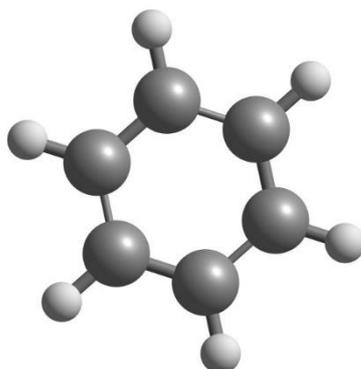
4.5 Cálculo y obtención de estructuras 3D

4.5.1 Figuras con coordenadas 3D sin optimizar

Con el fin de obtener las figuras de manera automática con coordenadas 3D sin optimizar para todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica, se utiliza el programa Avogadro; una molécula no optimizada es aquella que no cumple la geometría molecular básica por ende no posee las coordenadas específicas, las figuras obtenidas se presentan a continuación

Figura 286.

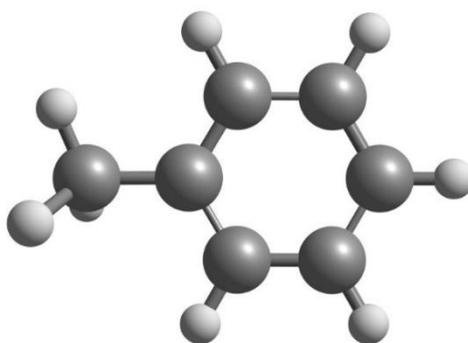
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 1.



Nota: Chemcraft

Figura 287

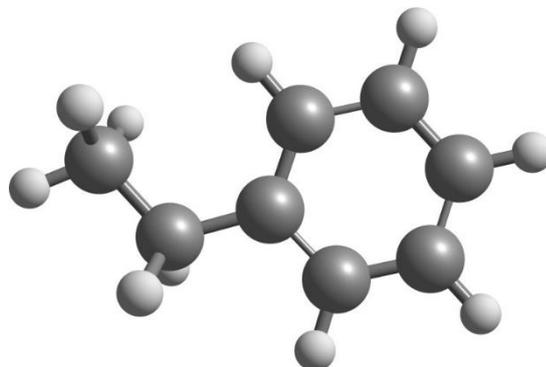
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 2.



Nota: Chemcraft

Figura 288.

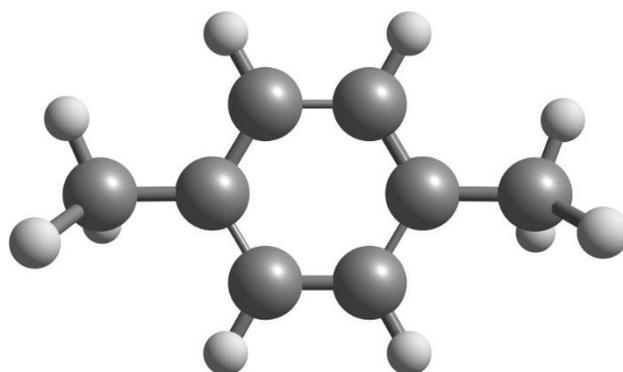
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 3.



Nota: Chemcraft

Figura 289.

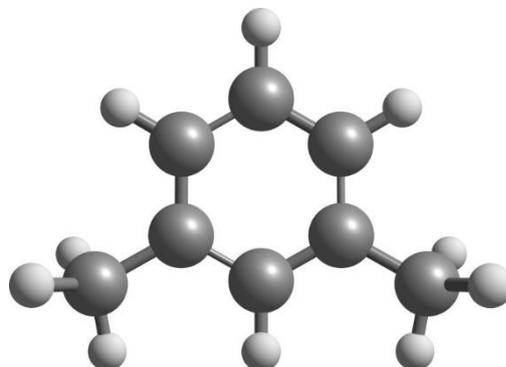
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 4.



Nota: Chemcraft

Figura 290.

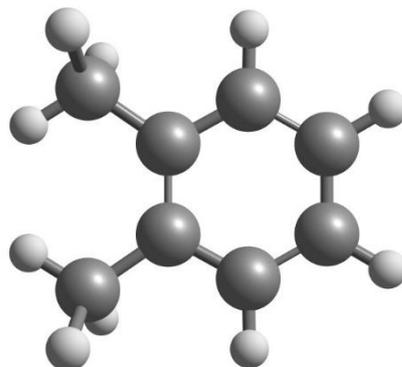
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 5.



Nota: Chemcraft

Figura 291.

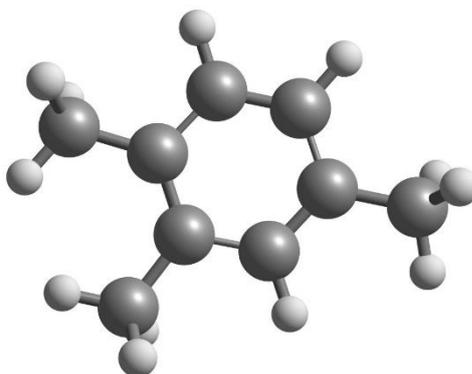
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 6.



Nota: Chemcraft

Figura 292.

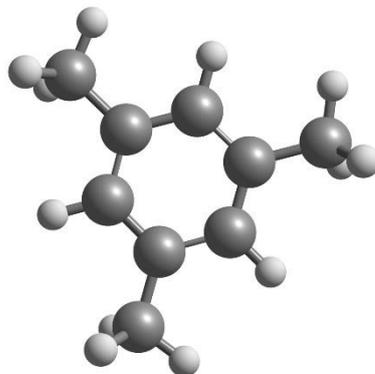
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 7.



Nota: Chemcraft

Figura 293.

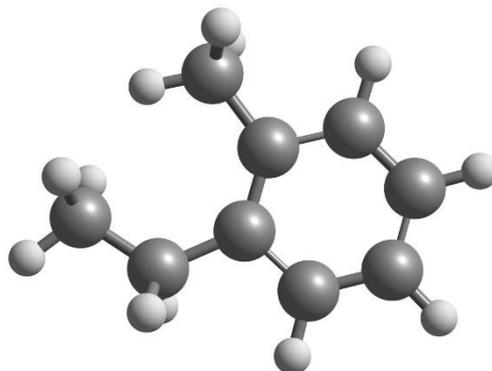
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 8.



Nota: Chemcraft

Figura 294.

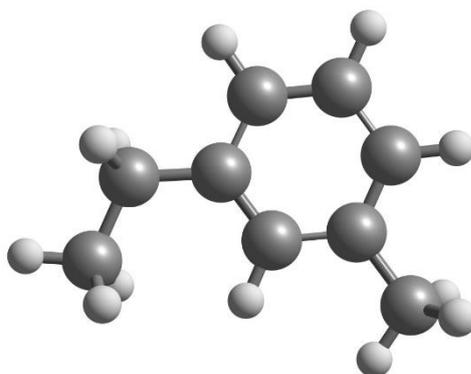
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 9.



Nota: Chemcraft

Figura 295.

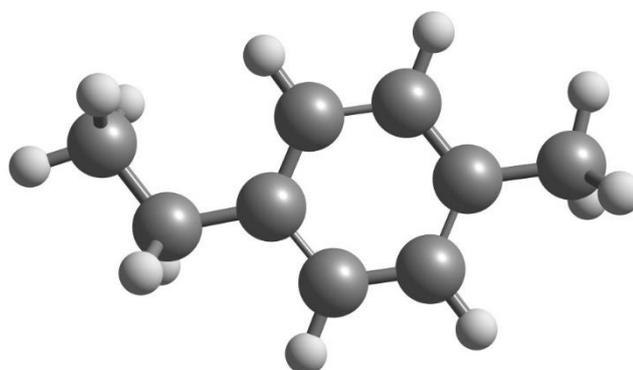
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 10.



Nota: Chemcraft

Figura 296.

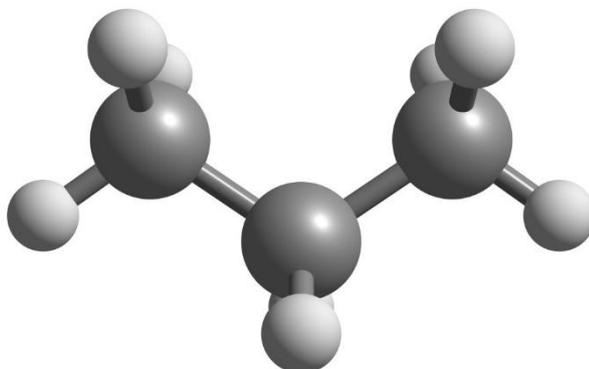
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 11.



Nota: Chemcraft

Figura 297.

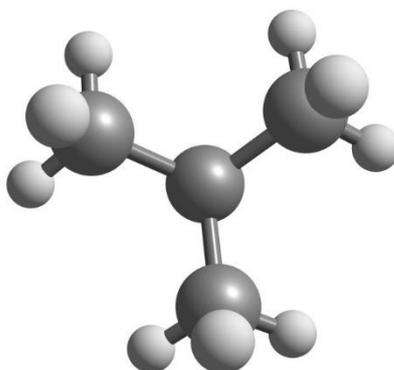
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 12.



Nota: Chemcraft

Figura 298.

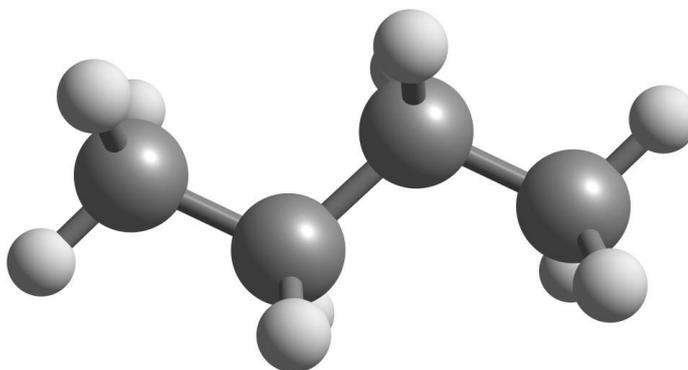
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 13.



Nota: Chemcraft

Figura 299.

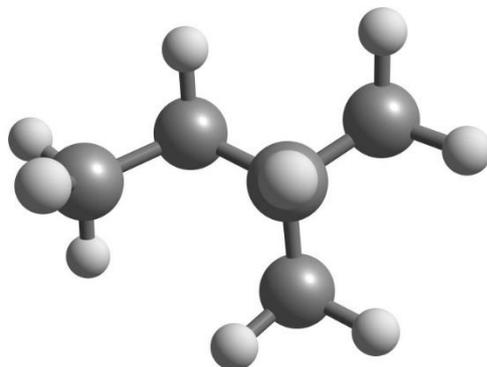
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 14.



Nota: Chemcraft

Figura 300.

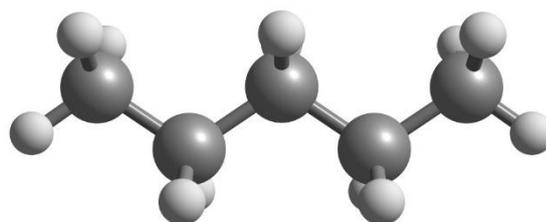
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 15.



Nota: Chemcraft

Figura 301.

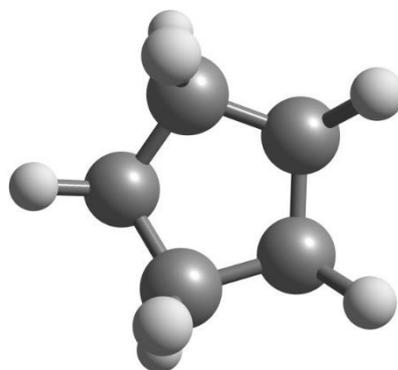
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 16.



Nota: Chemcraft

Figura 302.

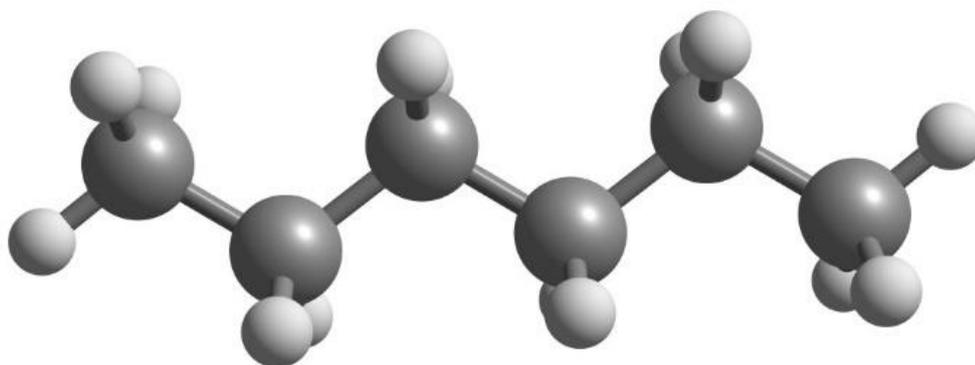
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 17.



Nota: Chemcraft

Figura 303.

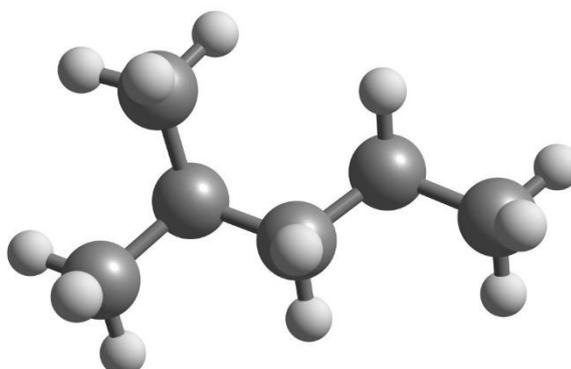
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 18.



Nota: Chemcraft

Figura 304.

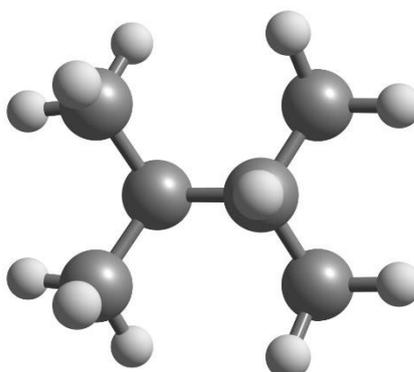
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 19.



Nota: Chemcraft

Figura 305.

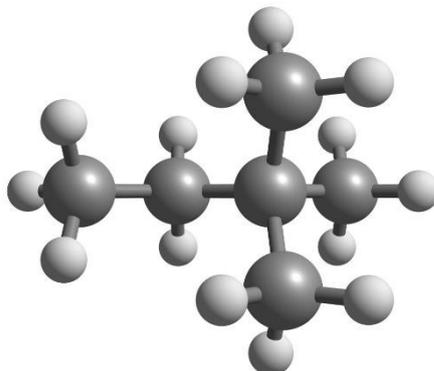
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 20.



Nota: Chemcraft

Figura 306.

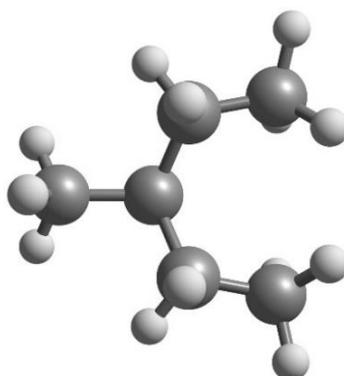
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 21



Nota: Chemcraft

Figura 307.

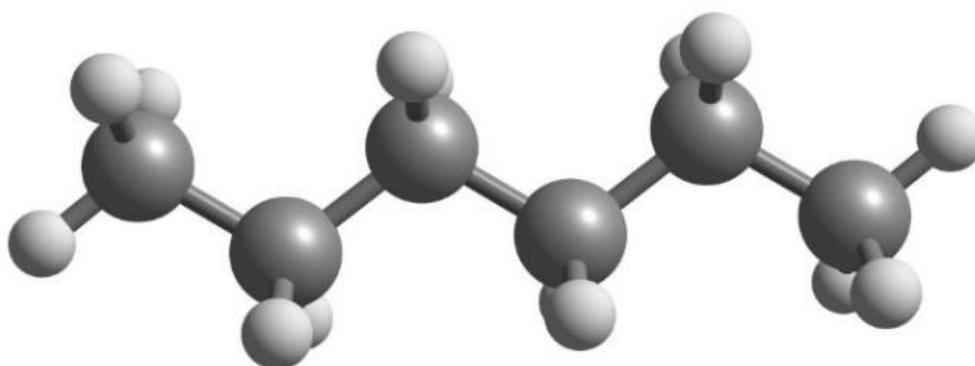
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 22.



Nota: Chemcraft

Figura 308.

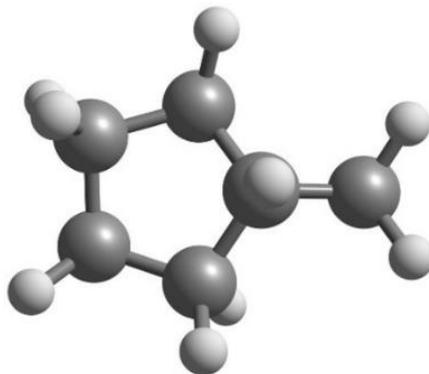
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 23.



Nota: Chemcraft

Figura 309.

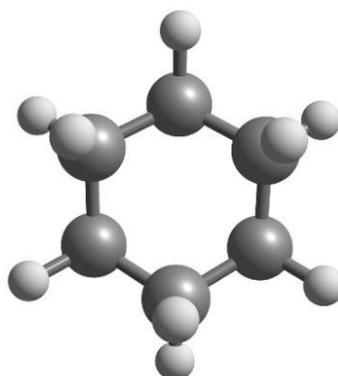
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 24.



Nota: Chemcraft

Figura 310.

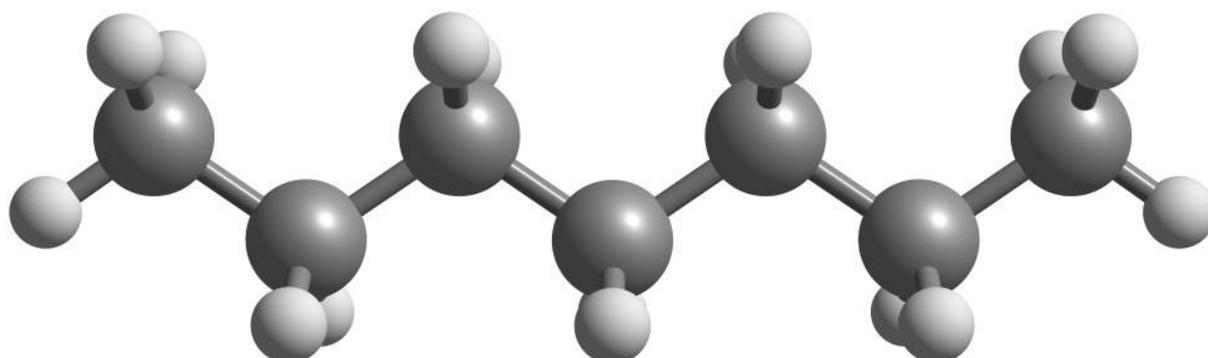
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 25.



Nota: Chemcraft

Figura 311.

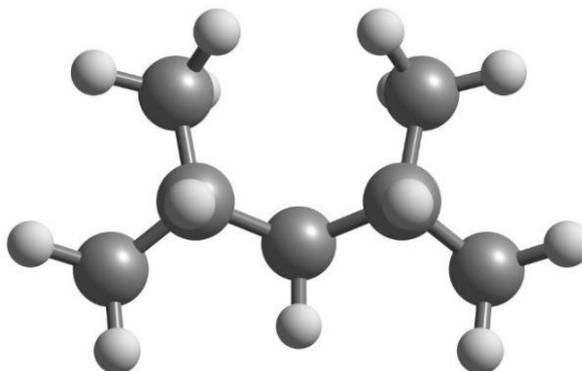
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 26.



Nota: Chemcraft

Figura 312.

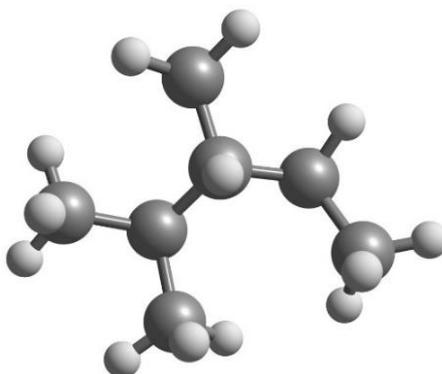
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 27.



Nota: Chemcraft

Figura 313.

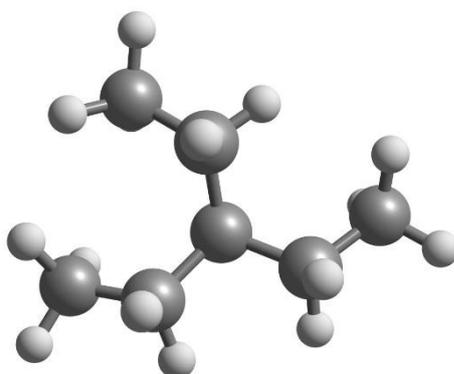
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 28.



Nota: Chemcraft

Figura 314.

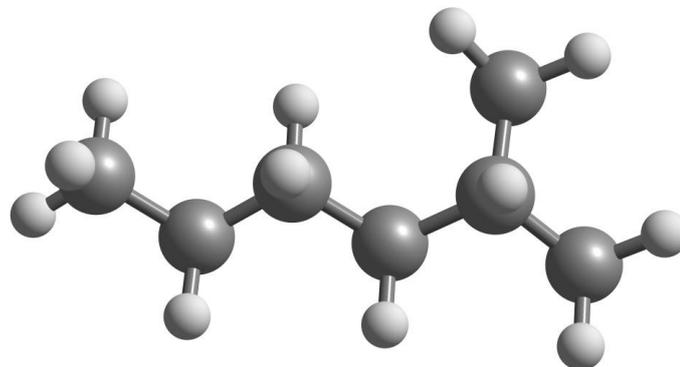
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 29.



Nota: Chemcraft

Figura 315.

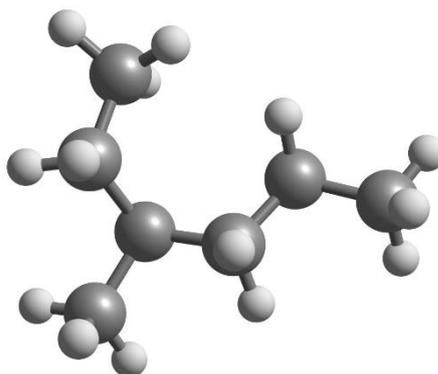
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 30.



Nota: Chemcraft

Figura 316.

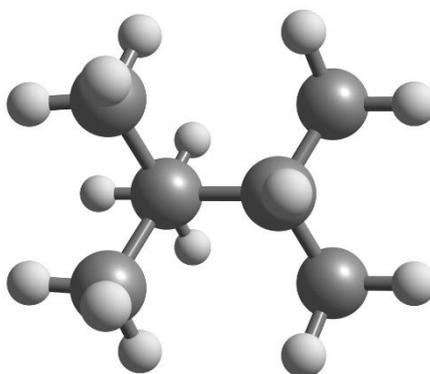
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 31.



Nota: Chemcraft

Figura 317.

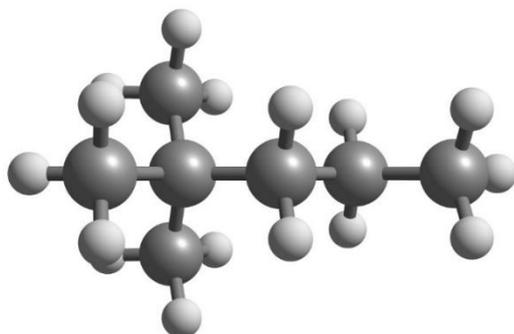
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 32.



Nota: Chemcraft

Figura 318.

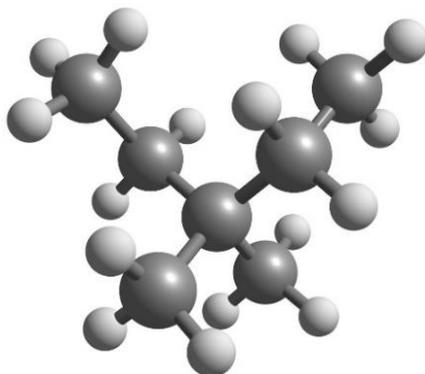
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 33.



Nota: Chemcraft

Figura 319.

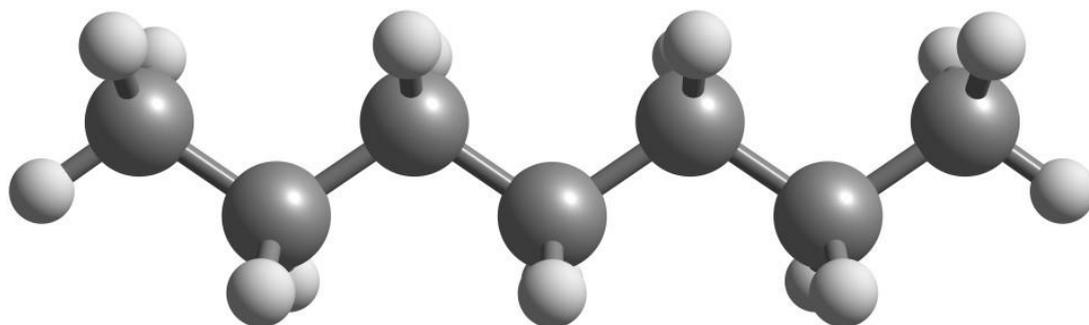
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 34.



Nota: Chemcraft

Figura 320

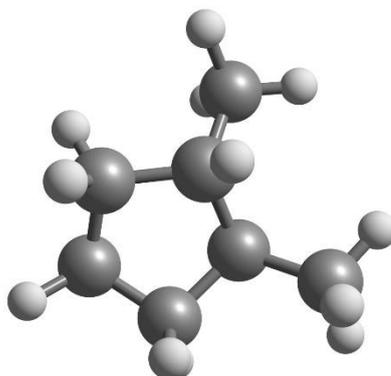
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 35.



Nota: Chemcraft

Figura 321.

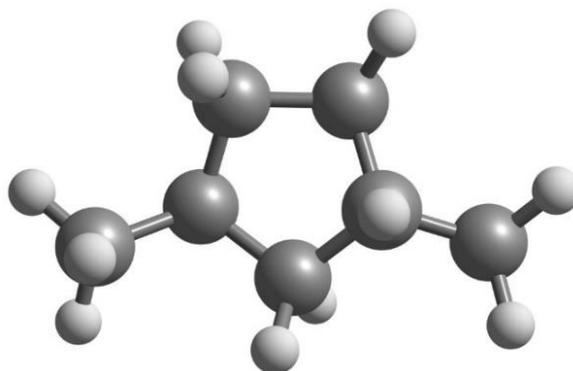
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 36.



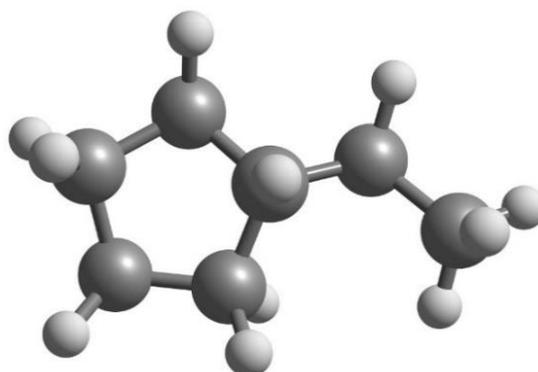
Nota: Chemcraft

Figura 322.

Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 37.



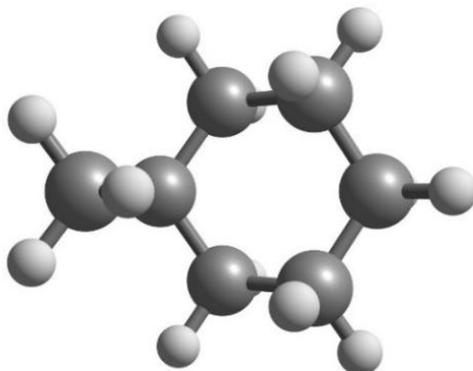
Nota: Chemcraft

Figura 323. *Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 38.*

Nota: Chemcraft

Figura 324.

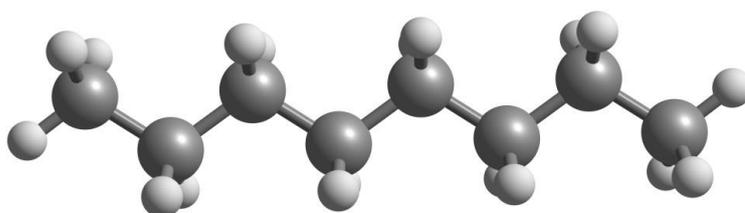
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 39.



Nota: Chemcraft

Figura 325.

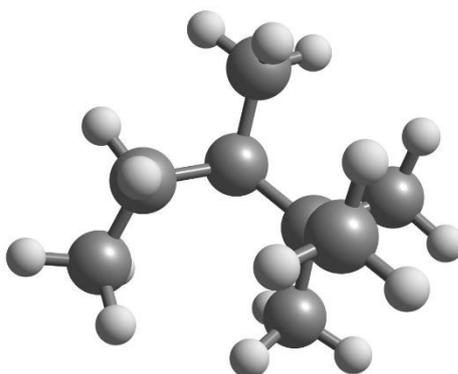
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 40.



Nota: Chemcraft

Figura 326.

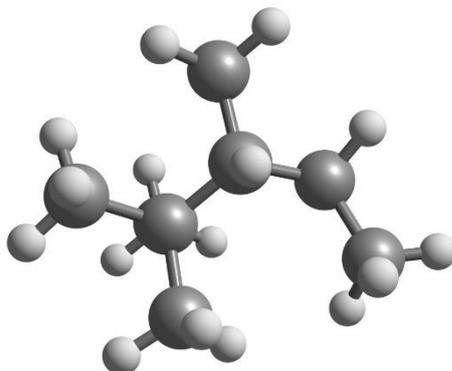
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 41.



Nota: Chemcraft

Figura 327.

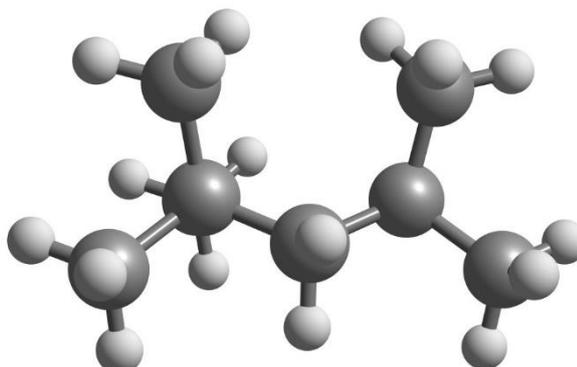
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 42.



Nota: Chemcraft

Figura 328.

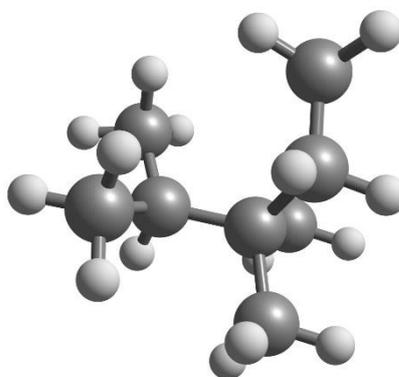
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 43.



Nota: Chemcraft

Figura 329.

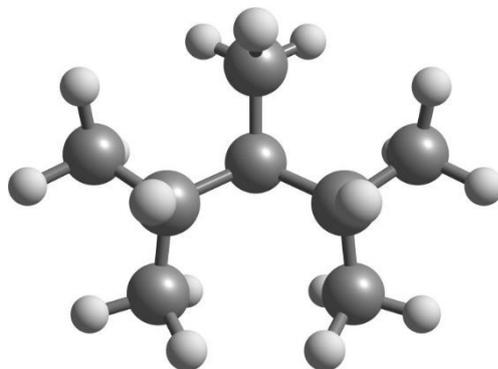
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 44



Nota: Chemcraft

Figura 330.

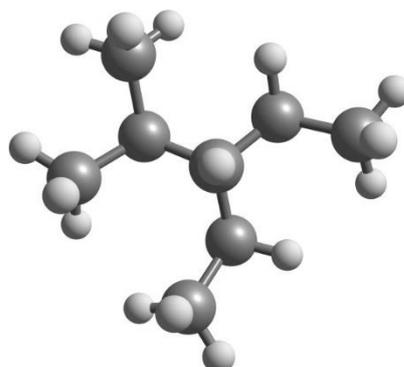
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 45.



Nota: Chemcraft

Figura 331.

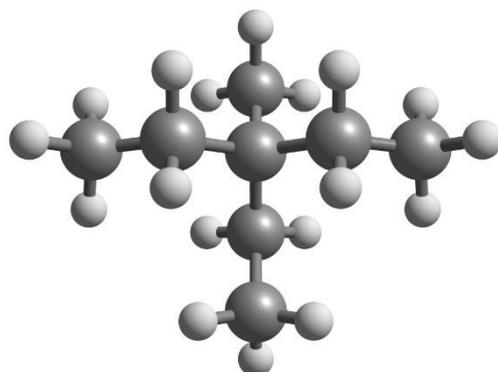
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 46.



Nota: Chemcraft

Figura 332.

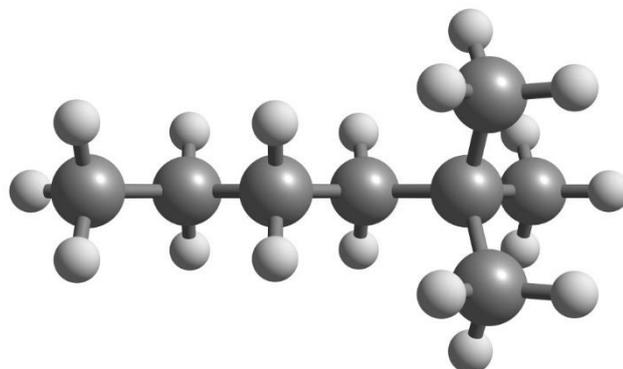
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 47.



Nota: Chemcraft

Figura 333.

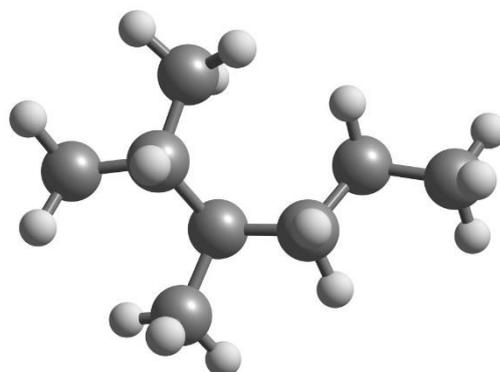
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 48.



Nota: Chemcraft

Figura 334.

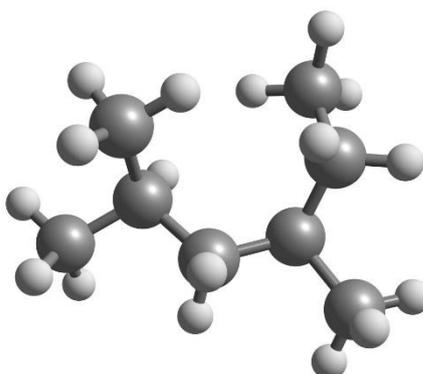
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 49.



Nota: Chemcraft

Figura 335.

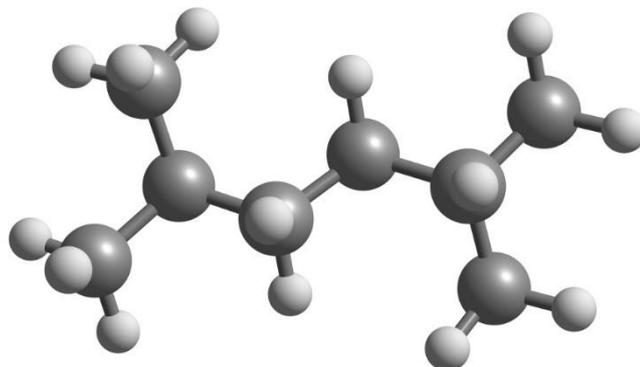
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 50.



Nota: Chemcraft

Figura 336.

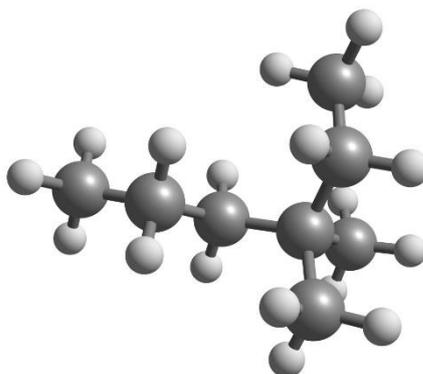
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 51.



Nota: Chemcraft

Figura 337.

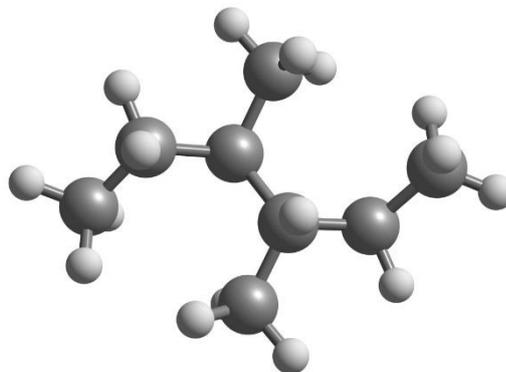
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 52.



Nota: Chemcraft

Figura 338.

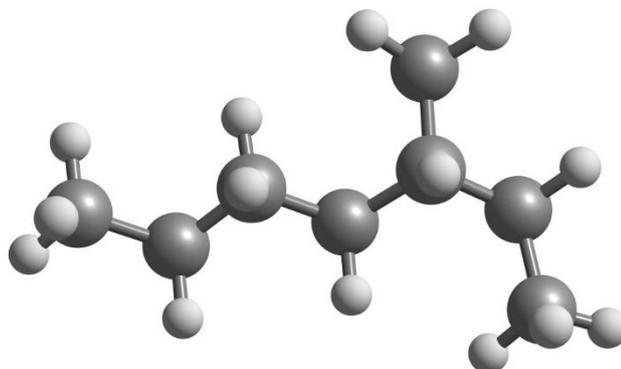
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 53.



Nota: Chemcraft

Figura 339.

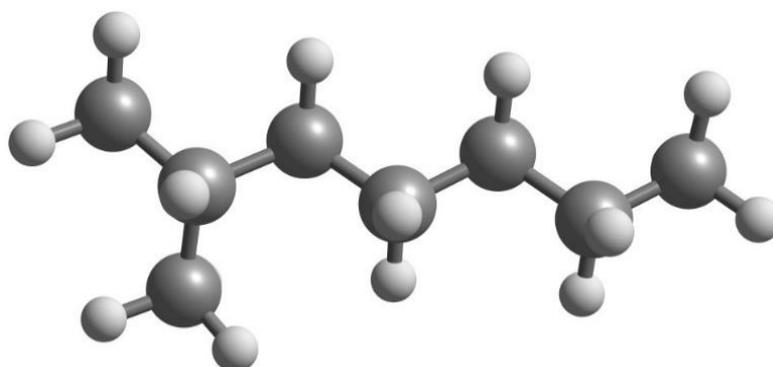
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 54.



Nota: Chemcraft

Figura 340.

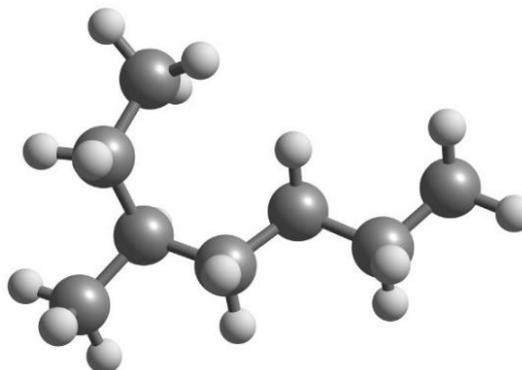
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 55.



Nota: Chemcraft

Figura 341.

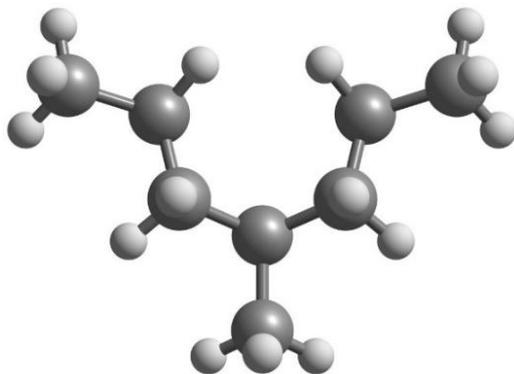
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 56.



Nota: Chemcraft

Figura 342.

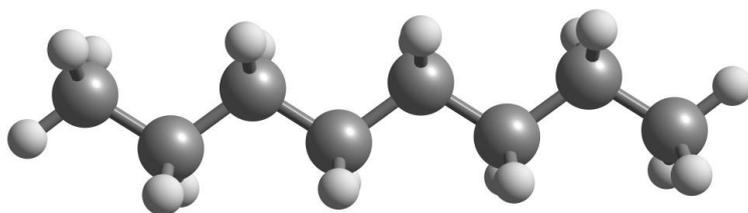
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 57.



Nota: Chemcraft

Figura 343.

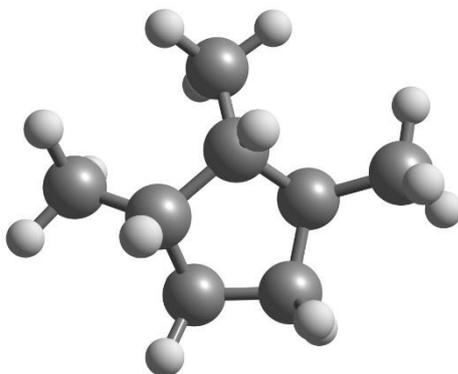
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 58.



Nota: Chemcraft

Figura 344.

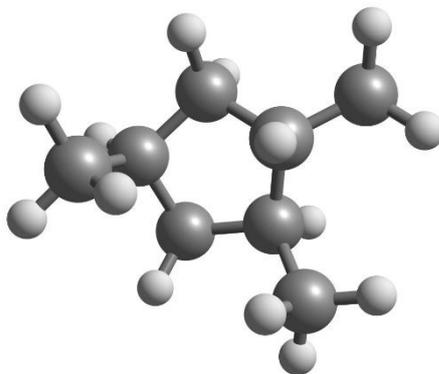
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 59.



Nota: Chemcraft

Figura 345.

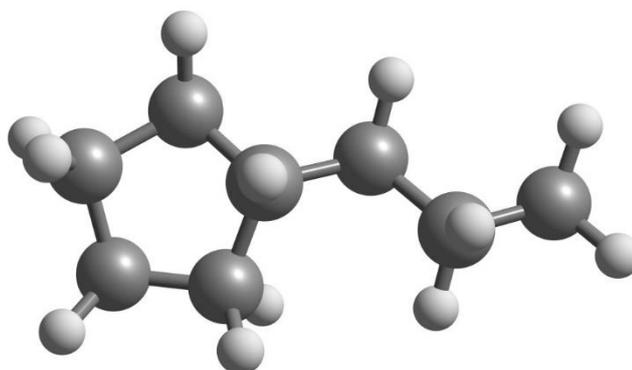
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 60.



Nota: Chemcraft.

Figura 346.

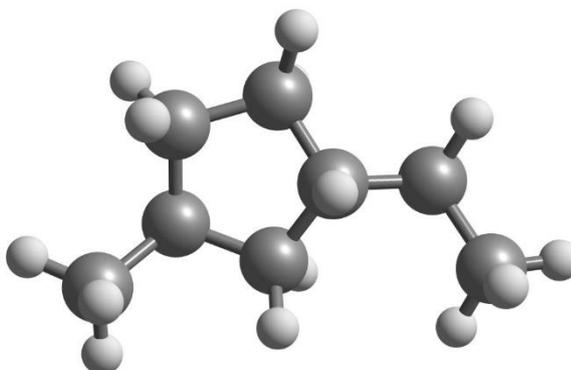
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 61.



Nota: Chemcraft

Figura 347.

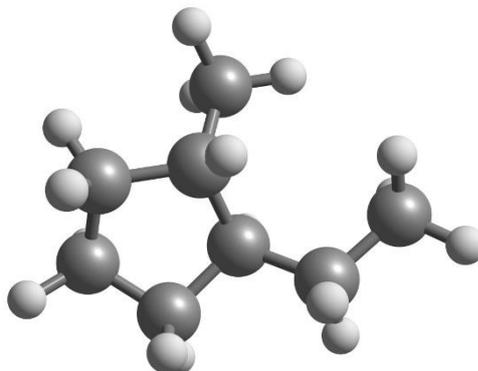
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 62.



Nota: Chemcraft

Figura 348.

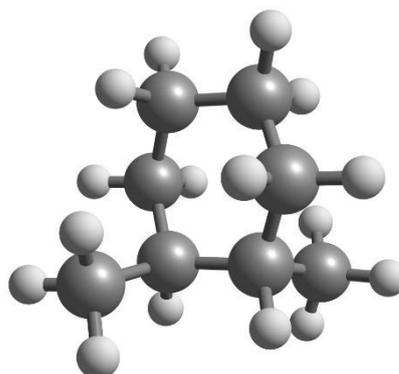
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 63.



Nota: Chemcraft

Figura 349.

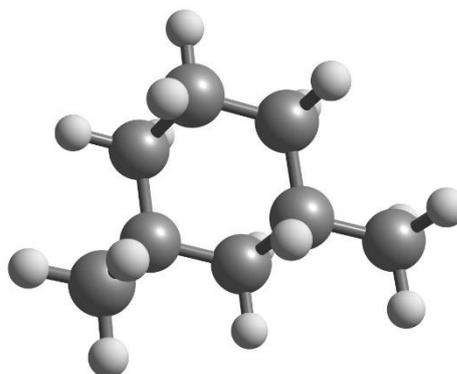
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 64.



Nota: Chemcraft

Figura 350.

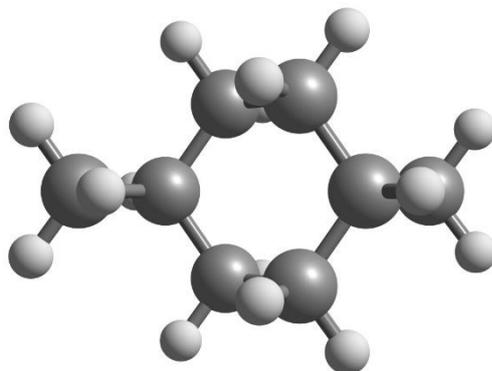
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 65.



Nota: Chemcraft

Figura 351.

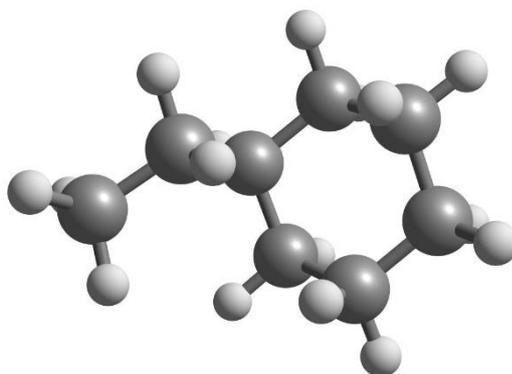
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 66.



Nota: Chemcraft

Figura 352.

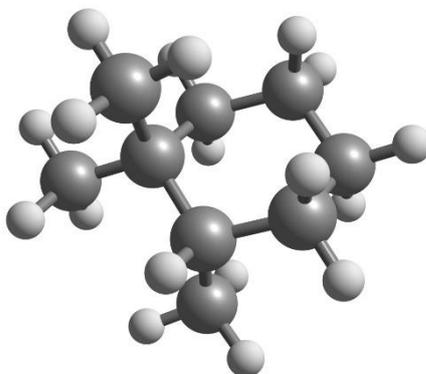
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 67.



Nota: Chemcraft

Figura 353.

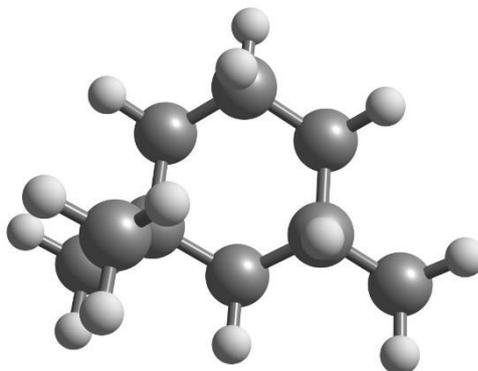
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 68.



Nota: Chemcraft

Figura 354.

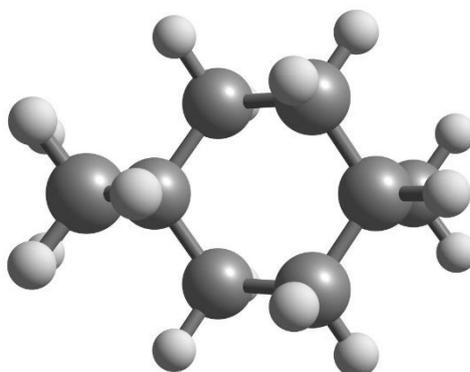
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 69.



Nota: Chemcraft

Figura 355.

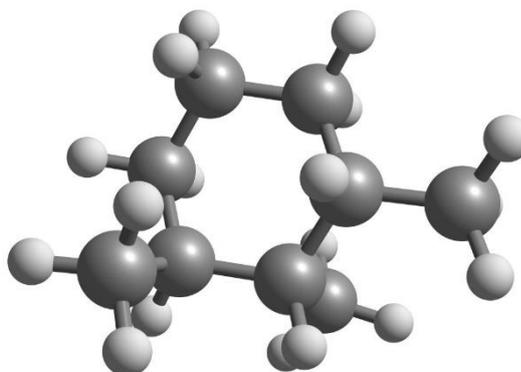
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 70.



Nota: Chemcraft

Figura 356.

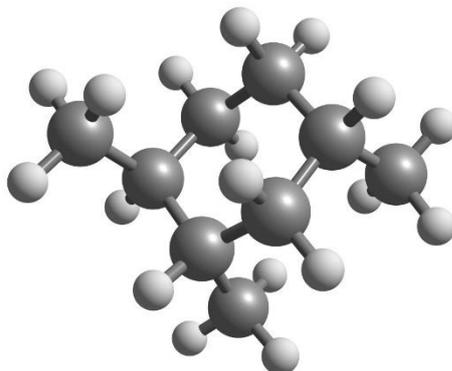
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 71.



Nota: Chemcraft

Figura 357.

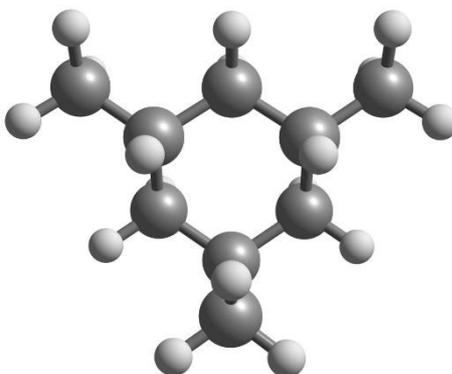
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 72.



Nota: Chemcraft

Figura 358.

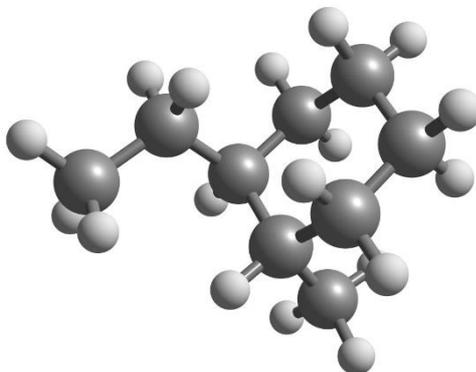
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 73.



Nota: Chemcraft

Figura 359.

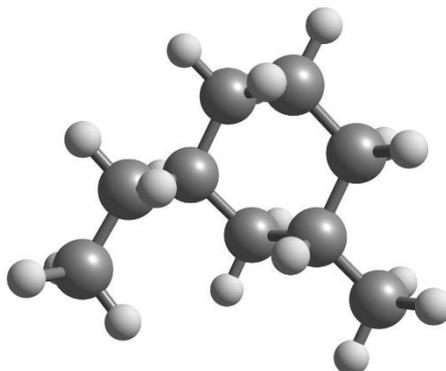
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 74.



Nota: Chemcraft

Figura 360.

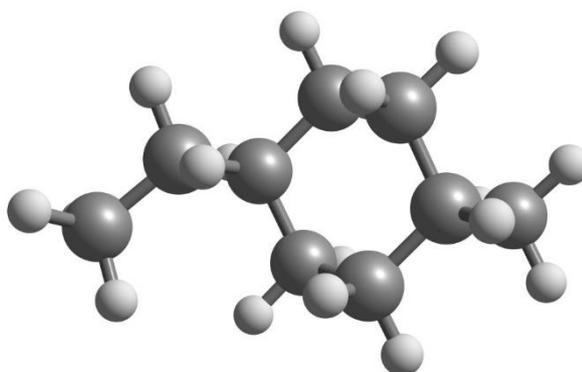
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 75.



Nota: Chemcraft

Figura 361.

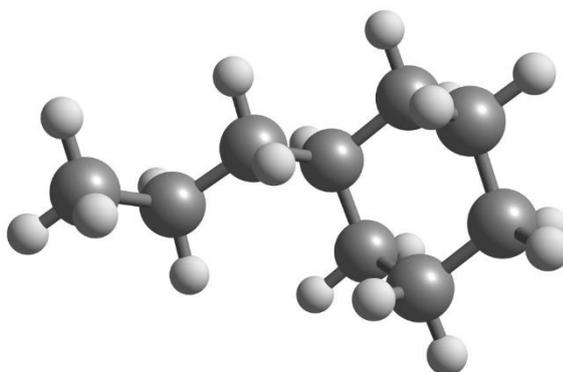
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 76.



Nota: Chemcraft

Figura 362.

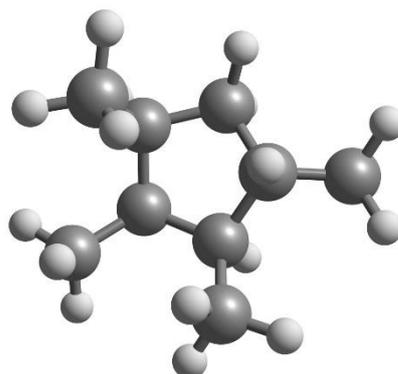
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 77.



Nota: Chemcraft

Figura 363.

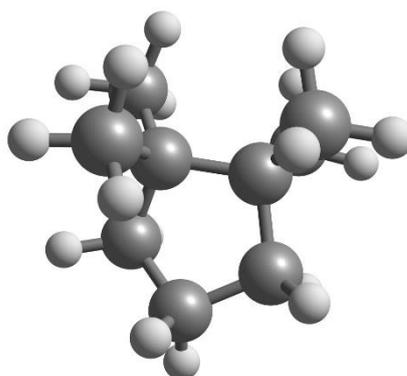
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 78.



Nota: Chemcraft

Figura 364.

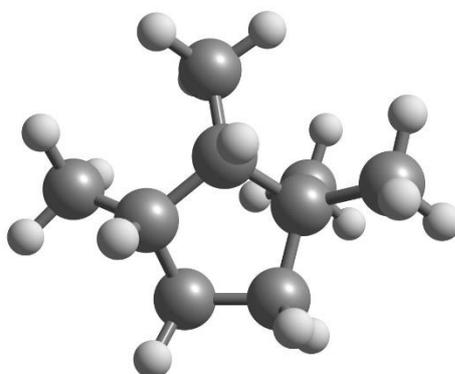
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 79.



Nota: Chemcraft

Figura 365.

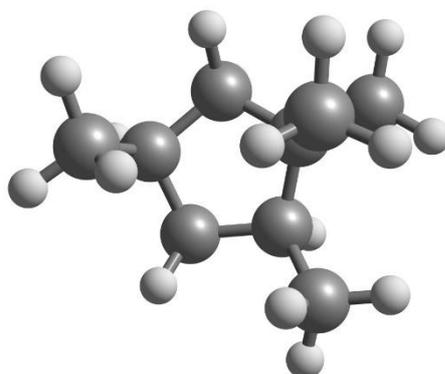
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 80.



Nota: Chemcraft

Figura 366.

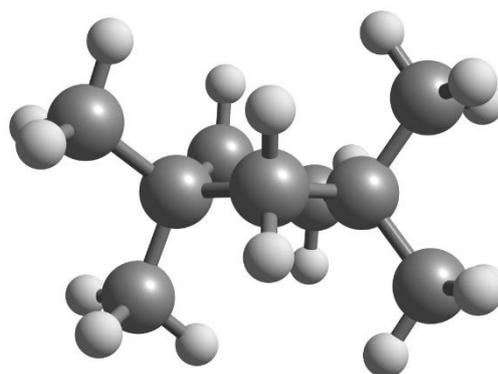
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 81.



Nota: Chemcraft

Figura 367.

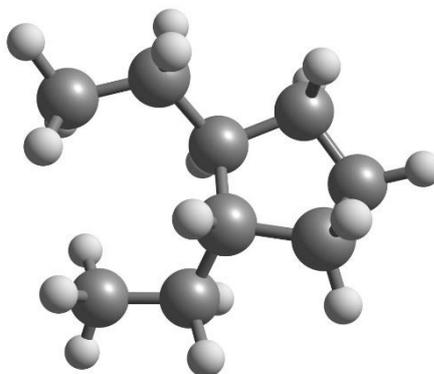
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 82.



Nota: Chemcraft

Figura 368.

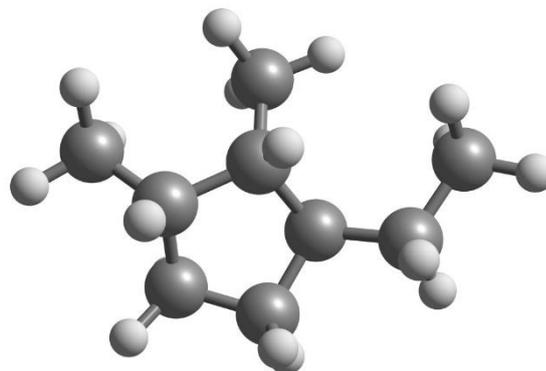
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 83.



Nota: Chemcraft

Figura 369.

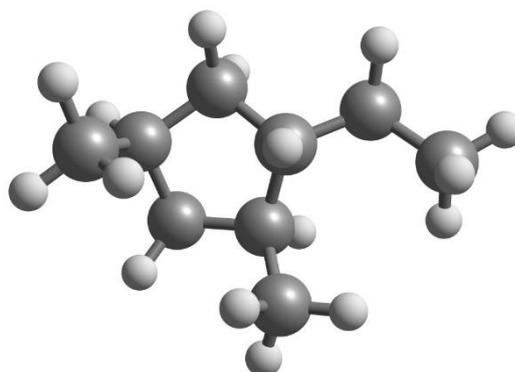
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 84.



Nota: Chemcraft

Figura 370.

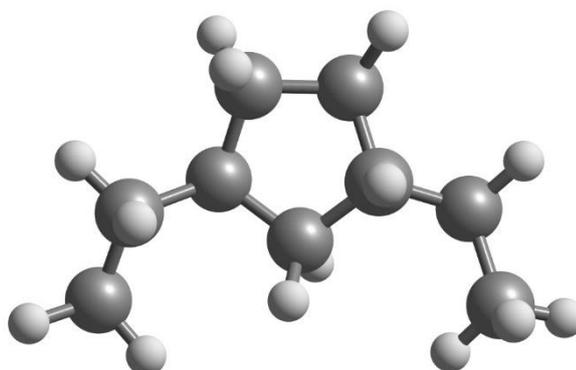
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 85.



Nota: Chemcraft

Figura 371.

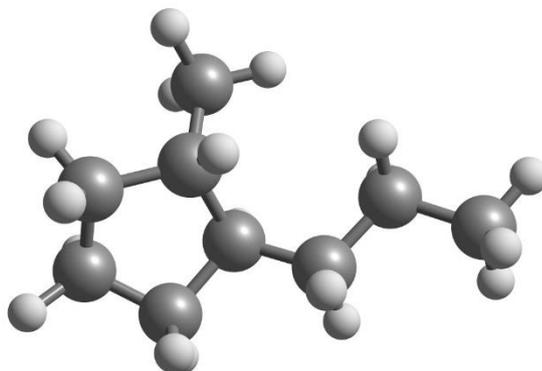
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 86.



Nota: Chemcraft

Figura 372.

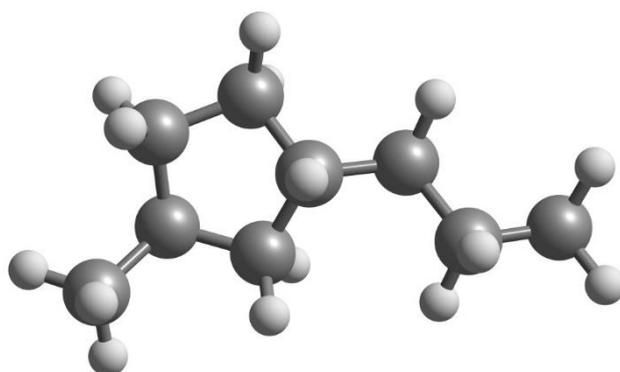
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 87.



Nota: Chemcraft

Figura 373.

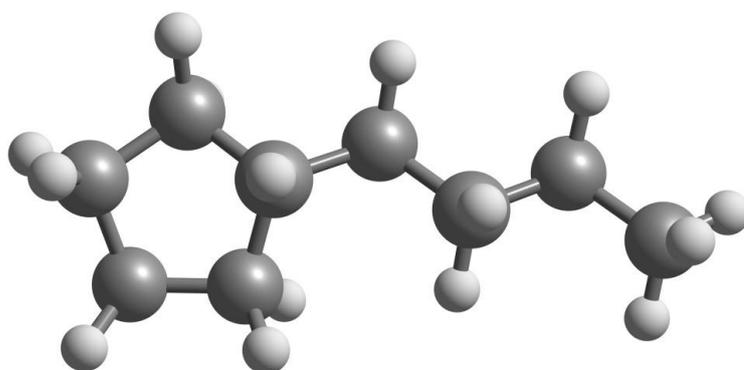
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 88.



Nota: Chemcraft

Figura 374.

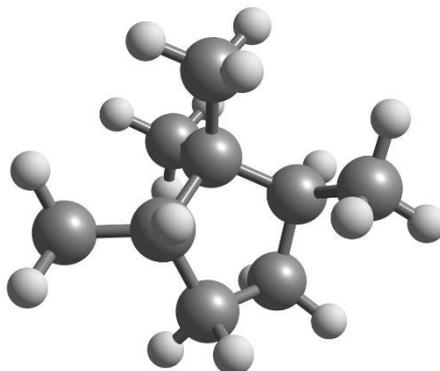
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 89.



Nota: Chemcraft

Figura 375.

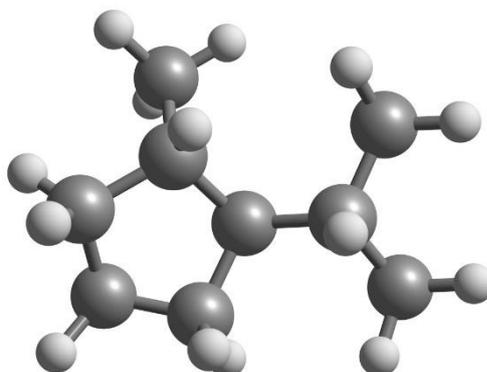
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 90.



Nota: Chemcraft

Figura 376.

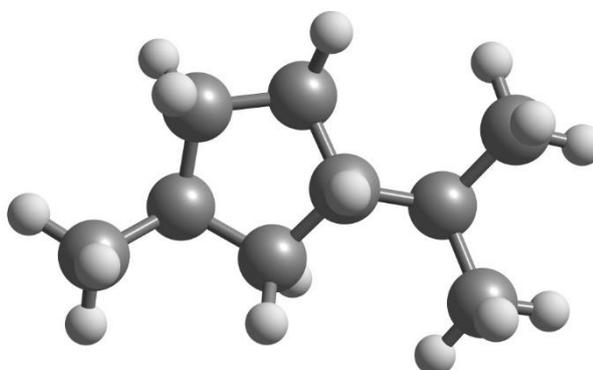
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 91.



Nota: Chemcraft

Figura 377.

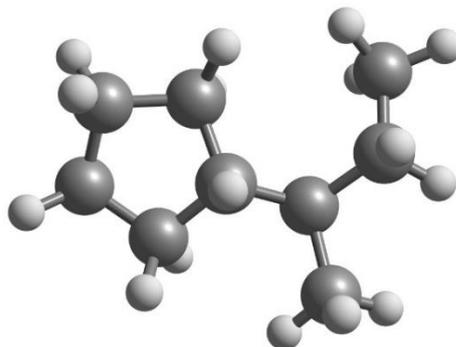
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 92.



Nota: Chemcraft

Figura 378.

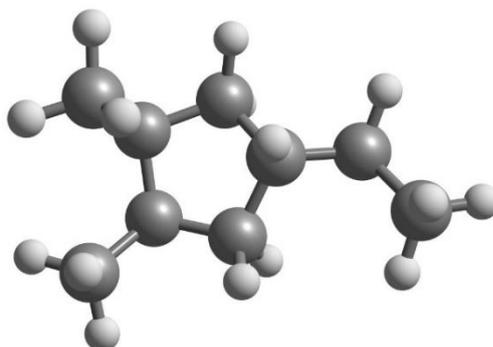
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 93.



Nota: Chemcraft

Figura 379.

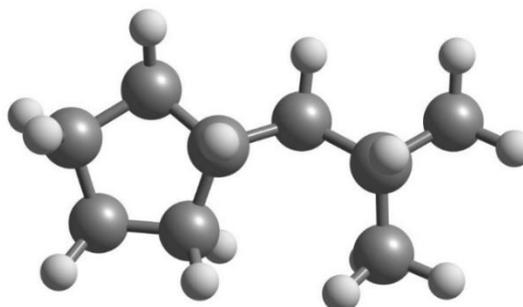
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 94.



Nota: Chemcraft

Figura 380.

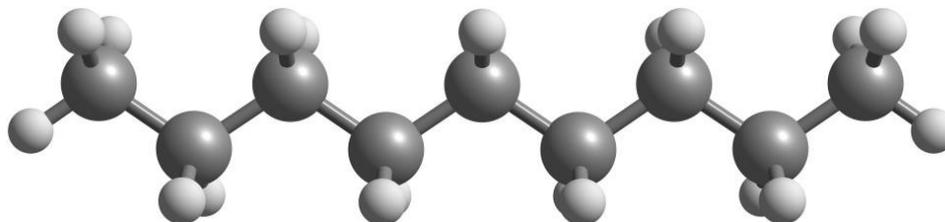
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 95.



Nota: Chemcraft

Figura 381.

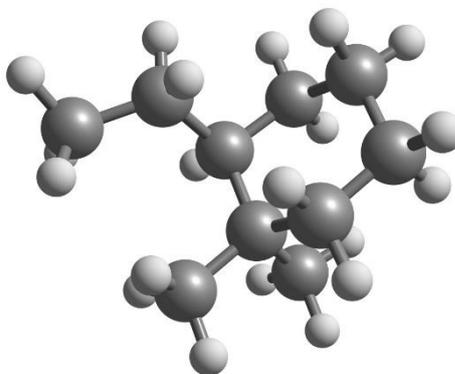
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 96.



Nota: Chemcraft

Figura 382.

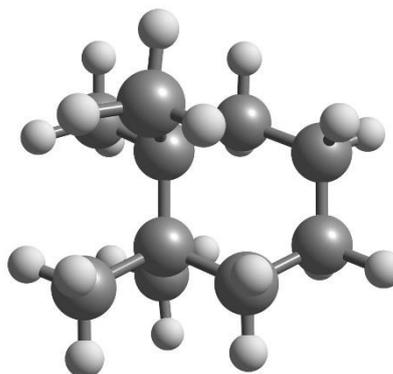
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 97.



Nota: Chemcraft

Figura 383.

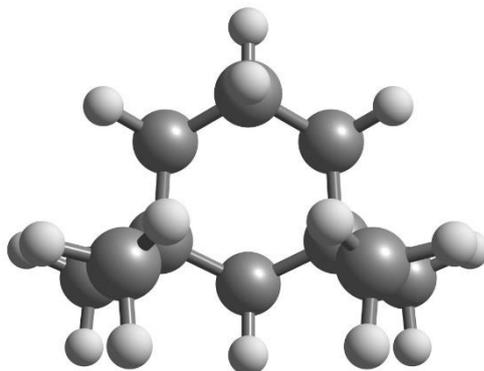
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 98.



Nota: Chemcraft

Figura 384.

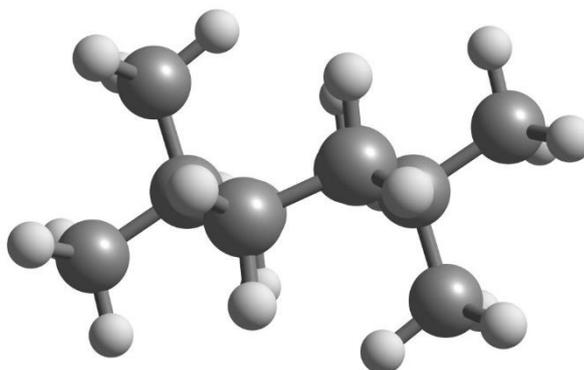
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 99.



Nota: Chemcraft

Figura 385.

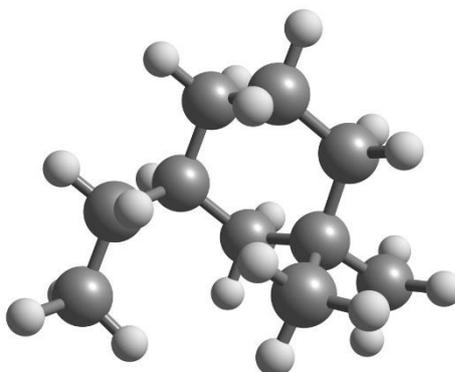
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 100.



Nota: Chemcraft

Figura 386.

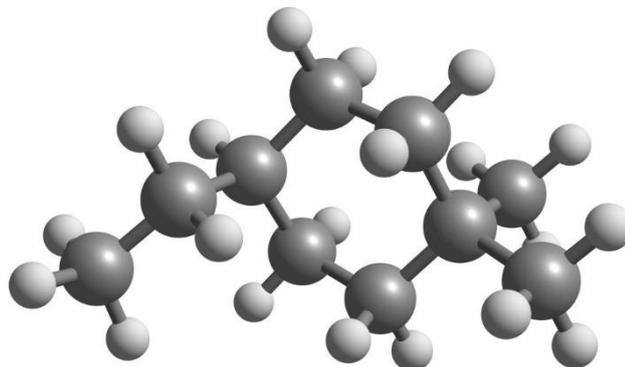
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 101.



Nota: Chemcraft

Figura 387.

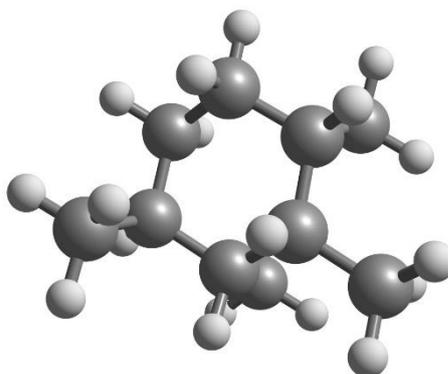
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 102.



Nota: Chemcraft

Figura 388.

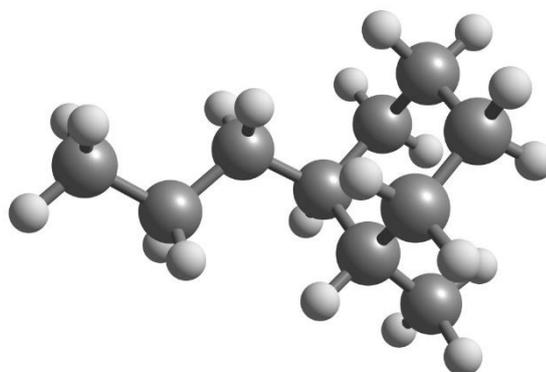
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 103.



Nota: Chemcraft

Figura 389.

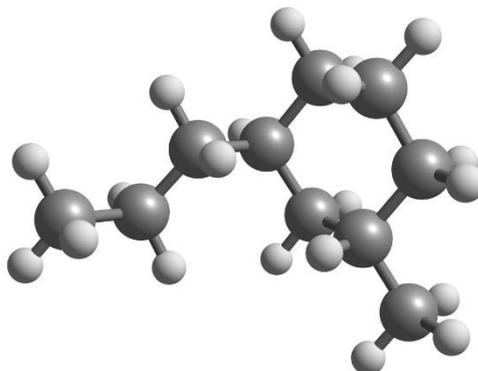
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 104.



Nota: Chemcraft

Figura 390.

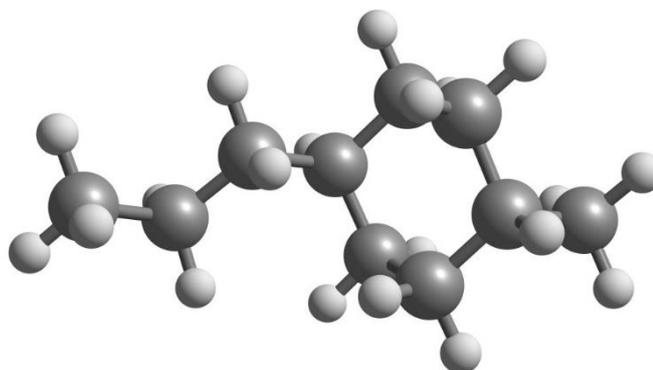
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 105.



Nota: Chemcraft

Figura 391.

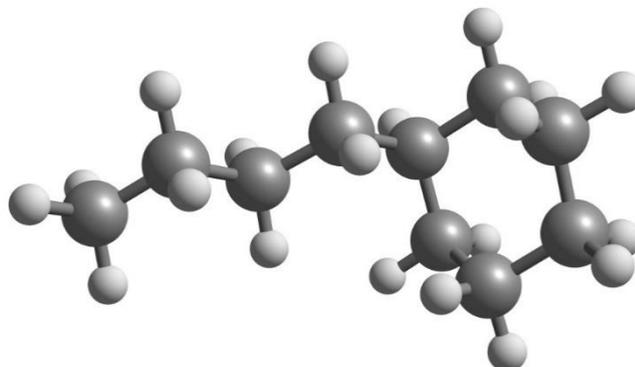
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 106.



Nota: Chemcraft

Figura 392.

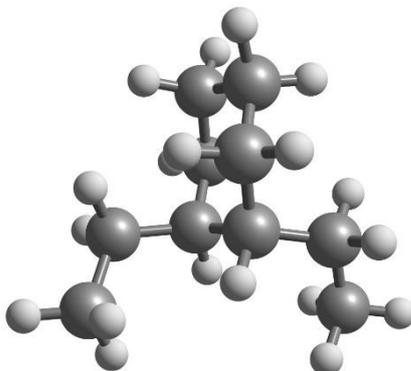
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 107.



Nota: Chemcraft

Figura 393.

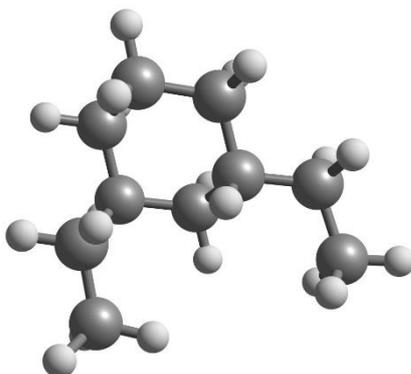
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 108.



Nota: Chemcraft

Figura 394.

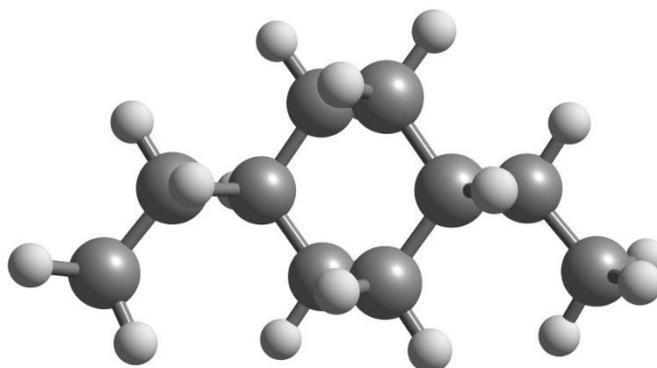
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 109.



Nota: Chemcraft

Figura 395.

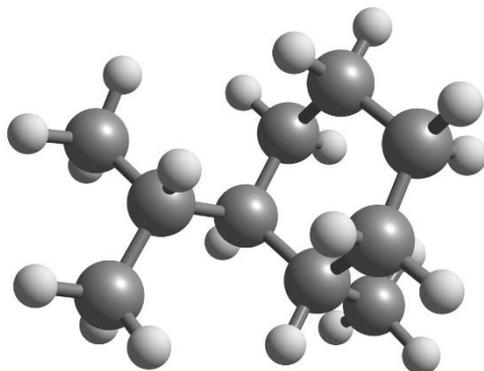
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 110.



Nota: Chemcraft

Figura 396.

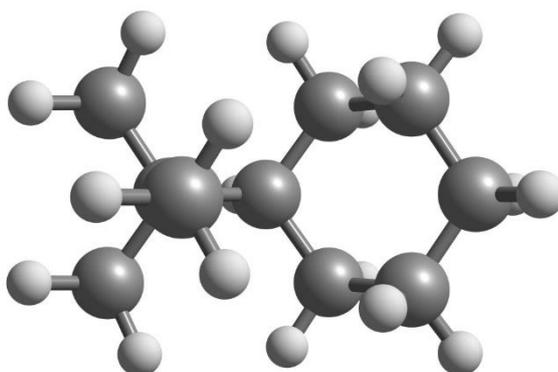
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 111.



Nota: Chemcraft

Figura 397.

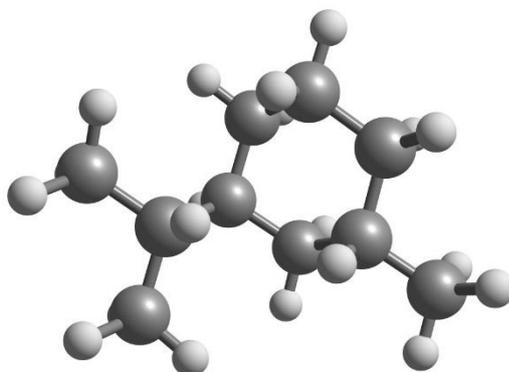
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 112.



Nota: Chemcraft

Figura 398.

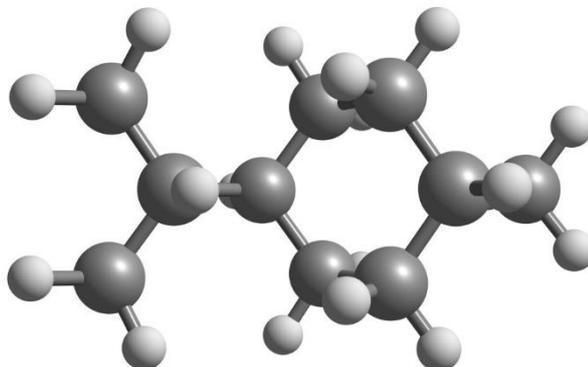
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 113.



Nota: Chemcraft.

Figura 399.

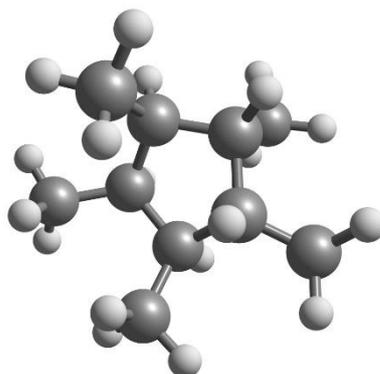
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 114.



Nota: Chemcraft.

Figura 400.

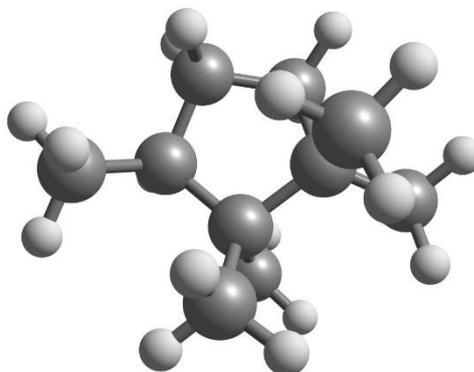
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 115.



Nota: Chemcraft.

Figura 401.

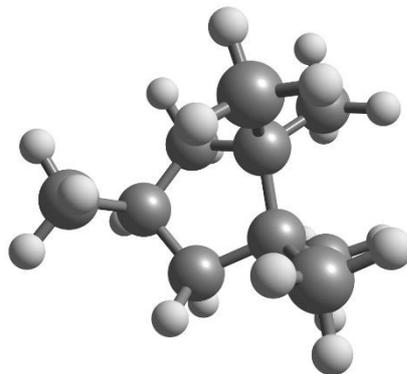
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 116.



Nota: Chemcraft.

Figura 402.

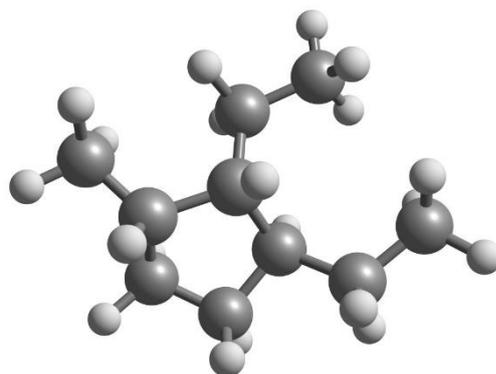
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 117.



Nota: Chemcraft.

Figura 403.

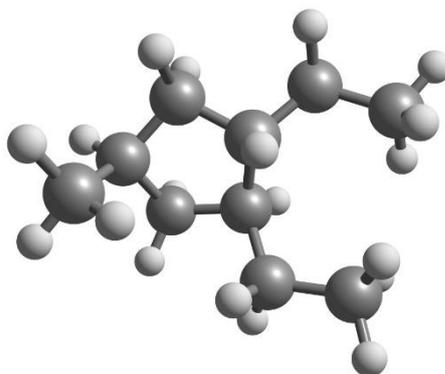
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 118.



Nota: Chemcraft.

Figura 404.

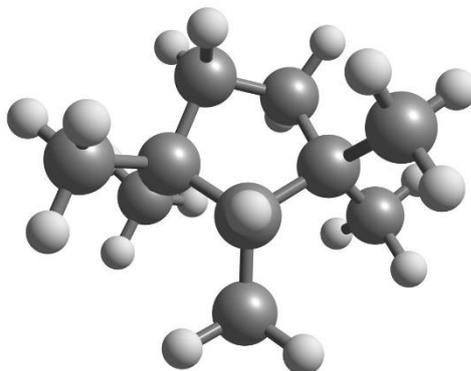
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 119.



Nota: Chemcraft.

Figura 405.

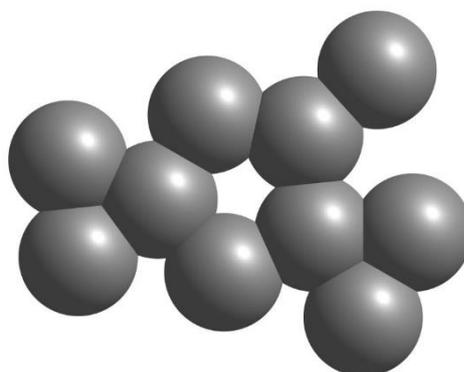
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 120.



Nota: Chemcraft.

Figura 406.

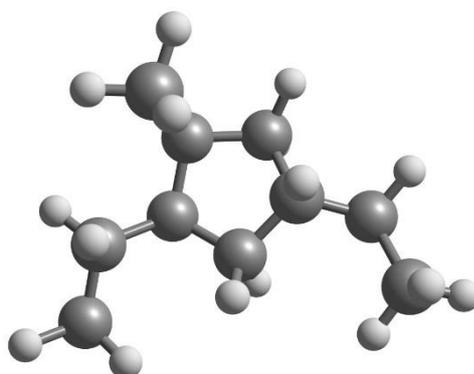
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 121.



Nota: Chemcraft.

Figura 407.

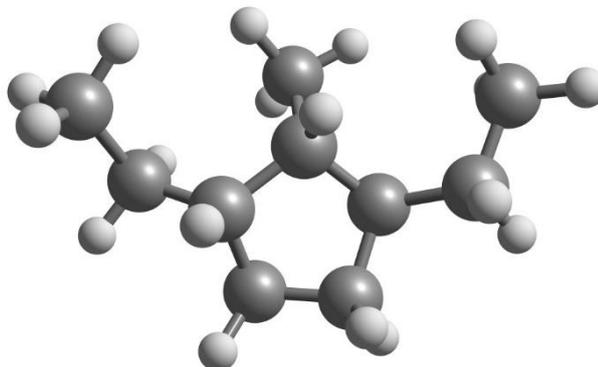
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 122.



Nota: Chemcraft.

Figura 408.

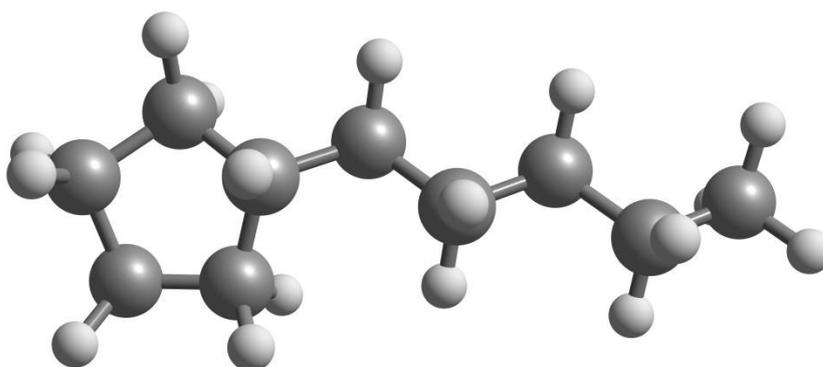
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 123.



Nota: Chemcraft.

Figura 409.

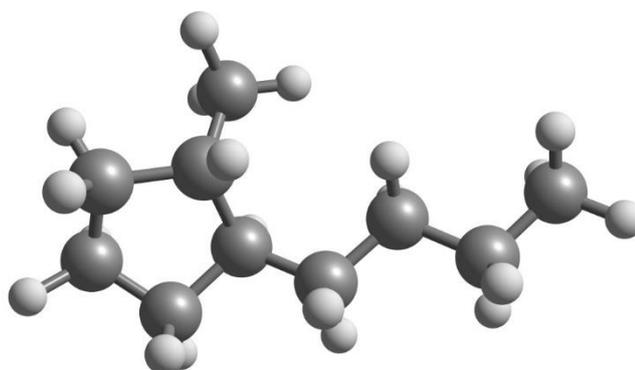
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 124.



Nota: Chemcraft.

Figura 410.

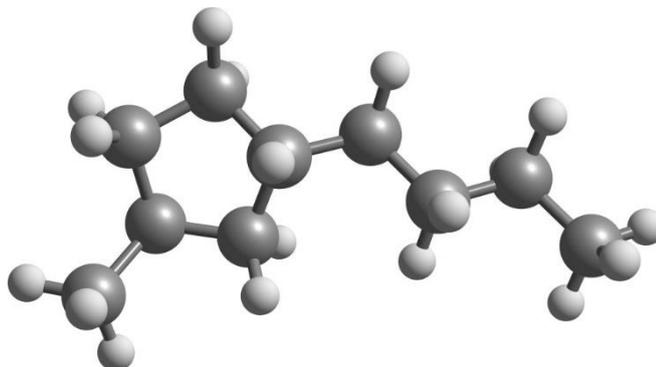
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 125.



Nota: Chemcraft.

Figura 411.

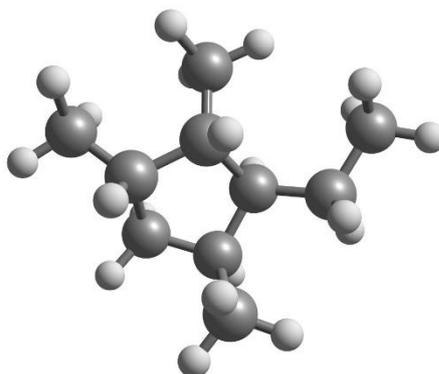
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 126.



Nota: Chemcraft.

Figura 412.

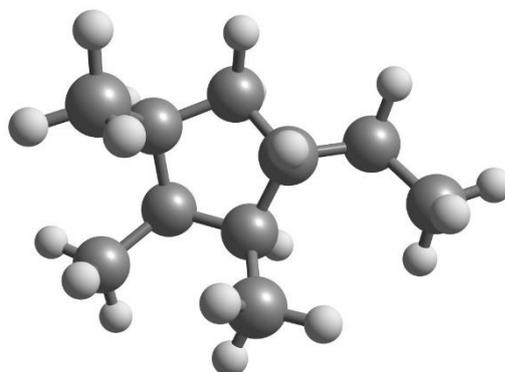
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 127.



Nota: Chemcraft.

Figura 413.

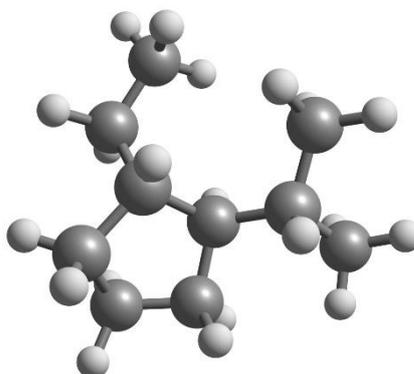
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 128.



Nota: Chemcraft.

Figura 414.

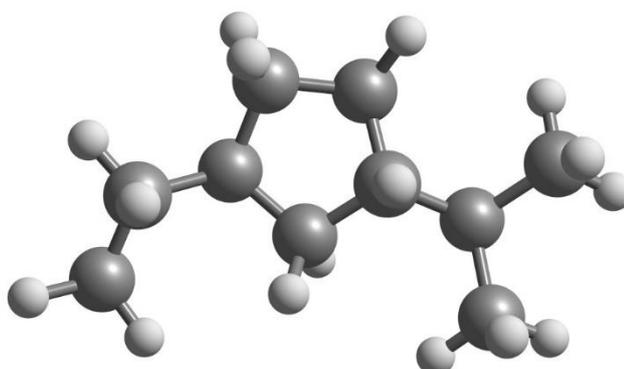
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 129.



Nota: Chemcraft.

Figura 415.

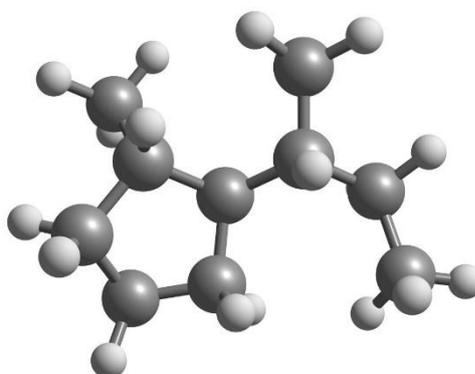
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 130.



Nota: Chemcraft.

Figura 416.

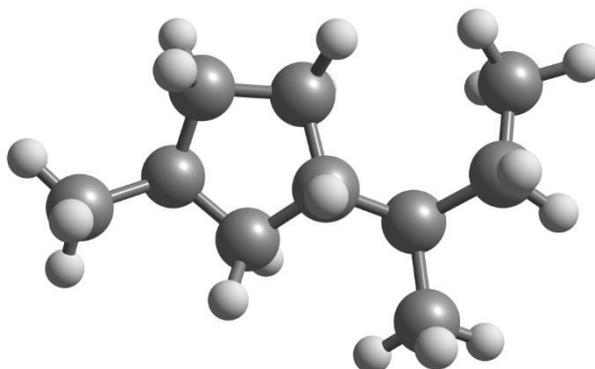
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 131.



Nota: Chemcraft.

Figura 417.

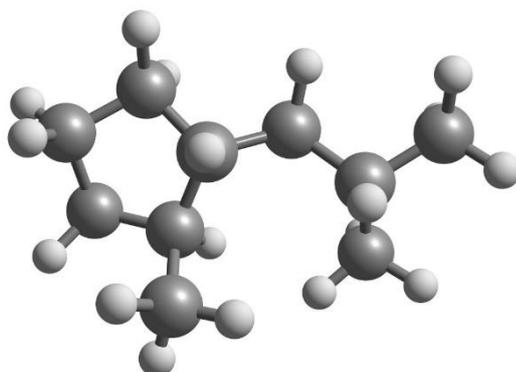
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 132.



Nota: Chemcraft.

Figura 418.

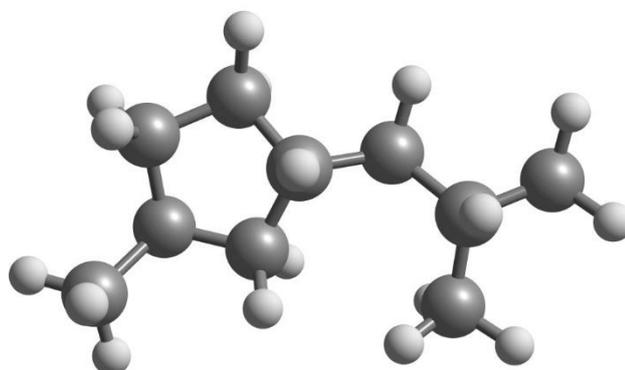
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 133.



Nota: Chemcraft.

Figura 419.

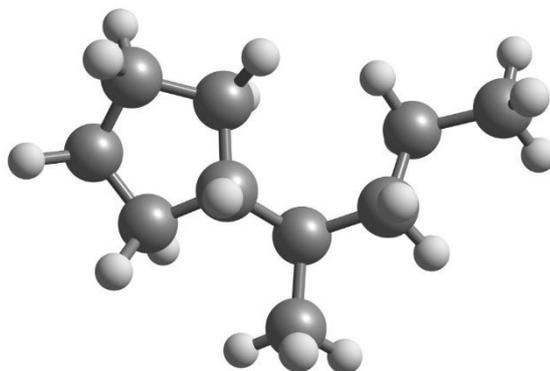
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 134.



Nota: Chemcraft.

Figura 420.

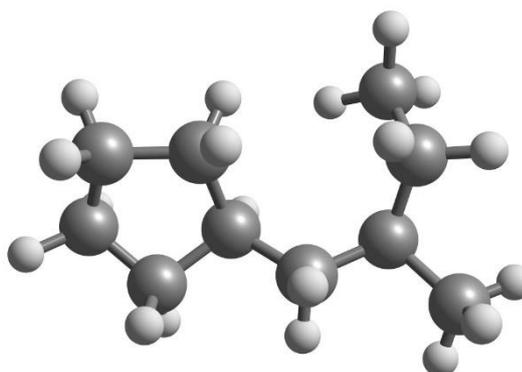
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 135.



Nota: Chemcraft.

Figura 421.

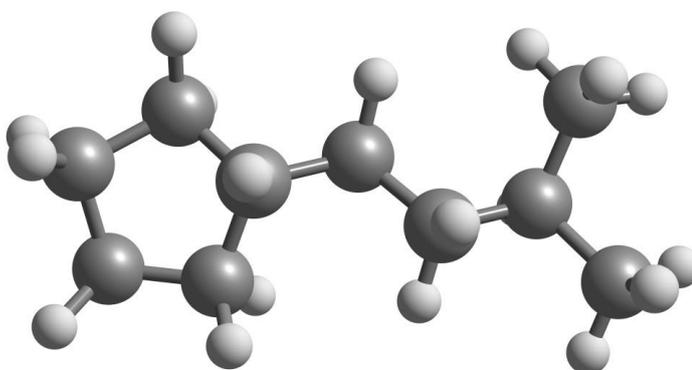
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 136.



Nota: Chemcraft.

Figura 422.

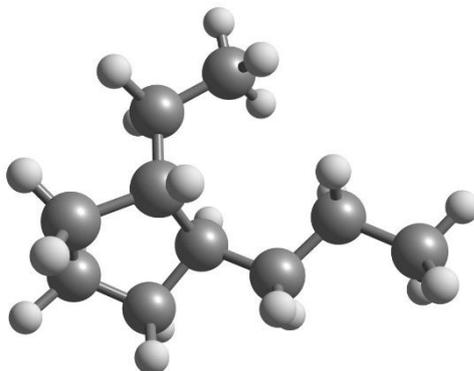
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 137.



Nota: Chemcraft.

Figura 423.

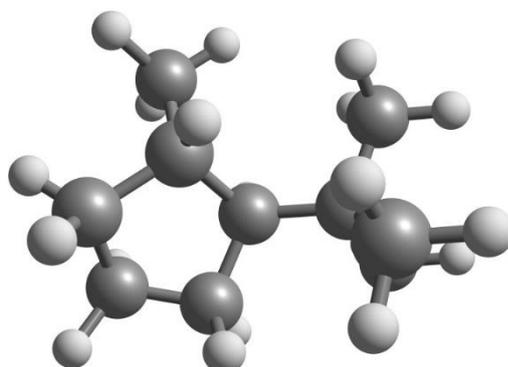
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 138.



Nota: Chemcraft.

Figura 424.

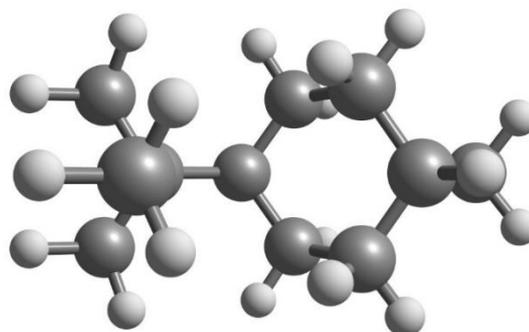
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 139.



Nota: Chemcraft.

Figura 425.

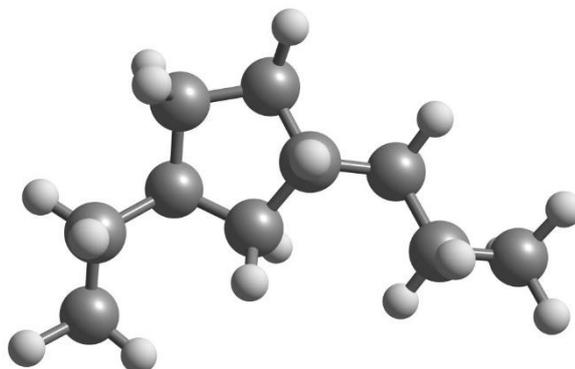
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 140.



Nota: Chemcraft.

Figura 426.

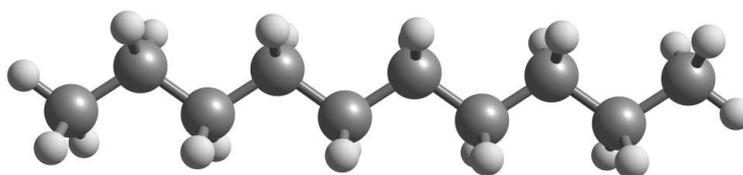
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 141.



Nota: Chemcraft.

Figura 427.

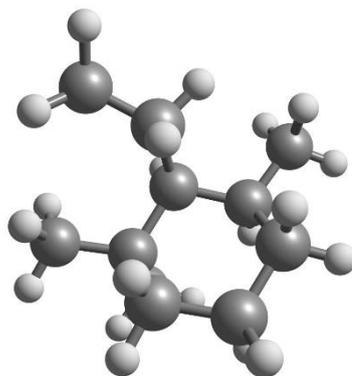
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 142.



Nota: Chemcraft.

Figura 428.

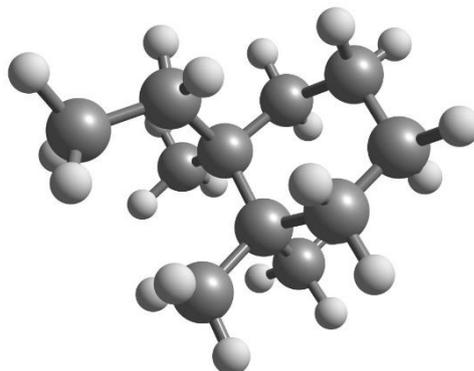
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 143.



Nota: Chemcraft.

Figura 429.

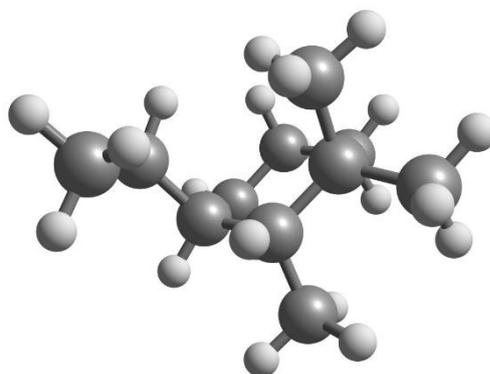
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 144.



Nota: Chemcraft.

Figura 430.

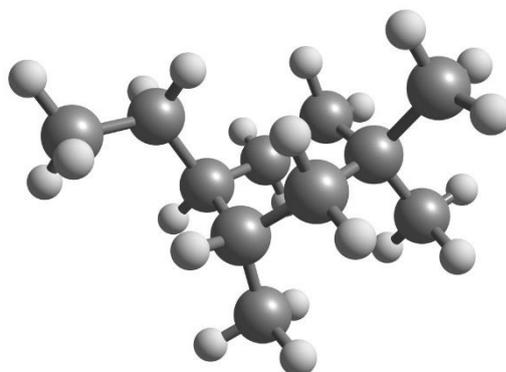
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 145.



Nota: Chemcraft.

Figura 431.

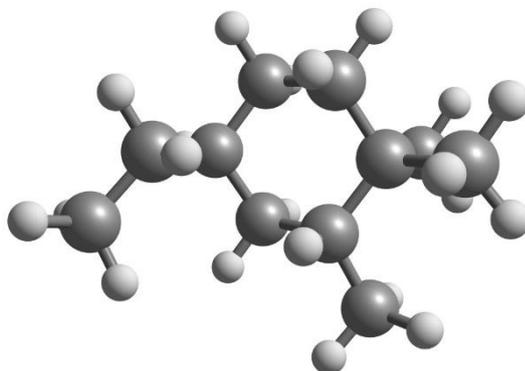
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 146.



Nota: Chemcraft.

Figura 432.

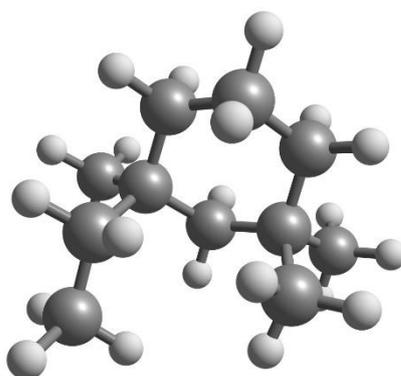
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 147.



Nota: Chemcraft.

Figura 433.

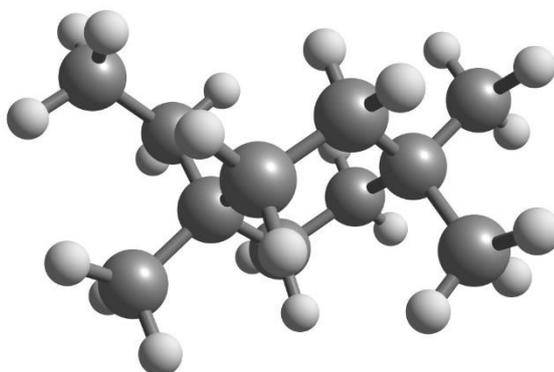
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 148.



Nota: Chemcraft.

Figura 434.

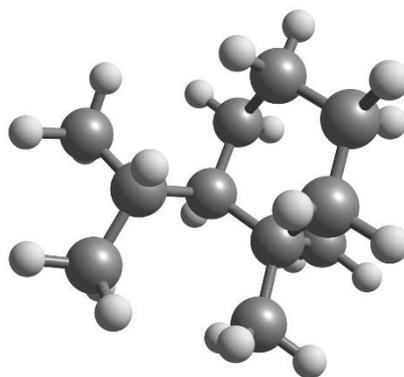
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 149.



Nota: Chemcraft.

Figura 435.

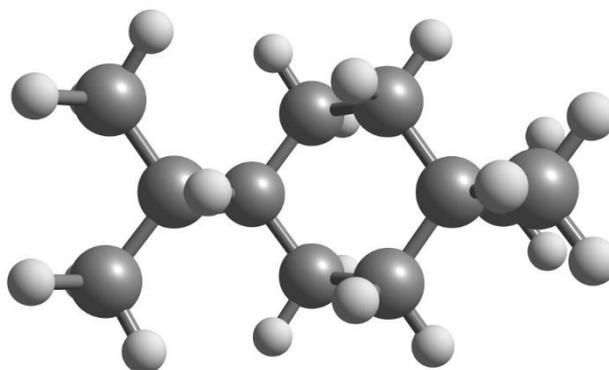
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 150.



Nota: Chemcraft.

Figura 436.

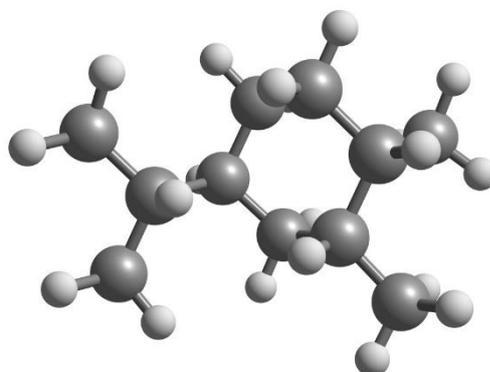
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 151.



Nota: Chemcraft.

Figura 437.

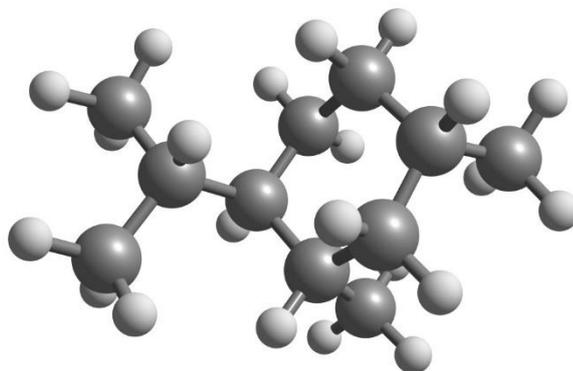
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 152.



Nota: Chemcraft.

Figura 438.

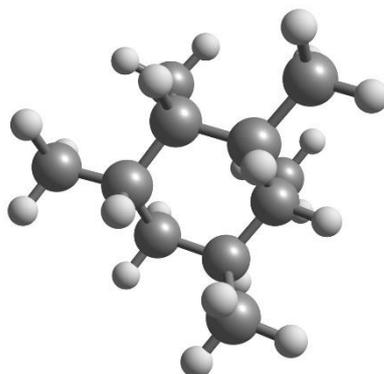
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 153.



Nota: Chemcraft.

Figura 439.

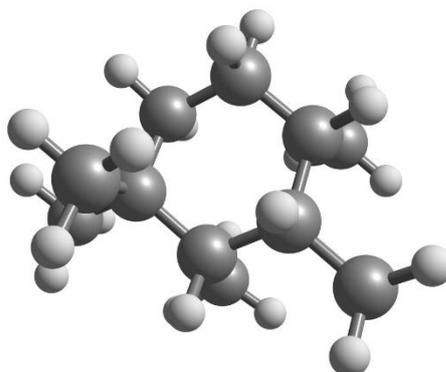
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 154.



Nota: Chemcraft.

Figura 440.

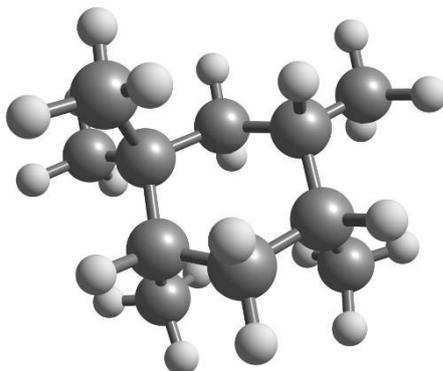
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 155.



Nota: Chemcraft.

Figura 441.

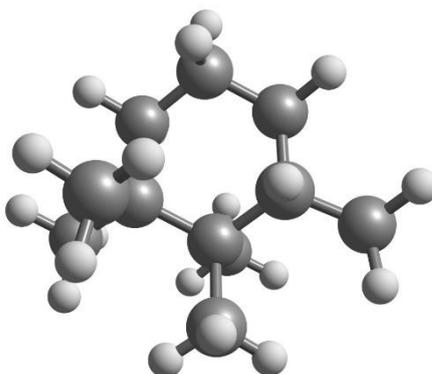
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 156.



Nota: Chemcraft.

Figura 442.

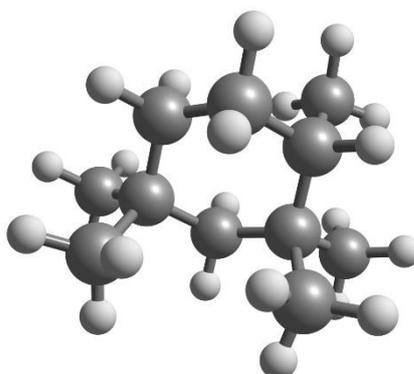
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 157.



Nota: Chemcraft.

Figura 443.

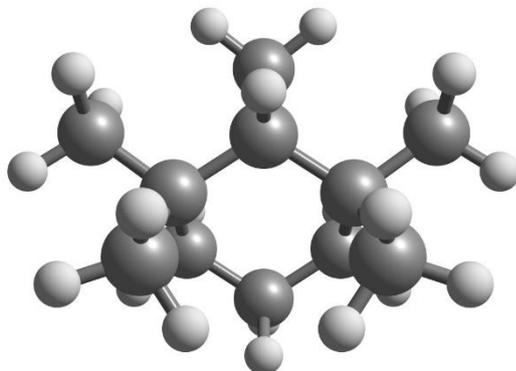
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 158.



Nota: Chemcraft.

Figura 444.

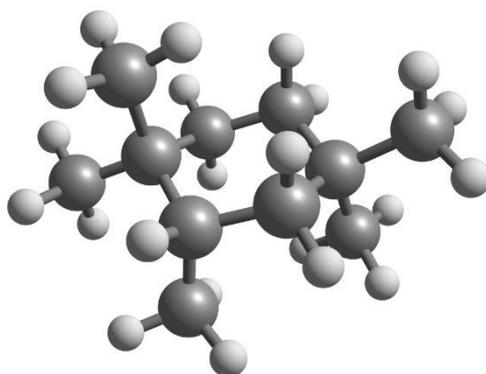
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 159.



Nota: Chemcraft.

Figura 445.

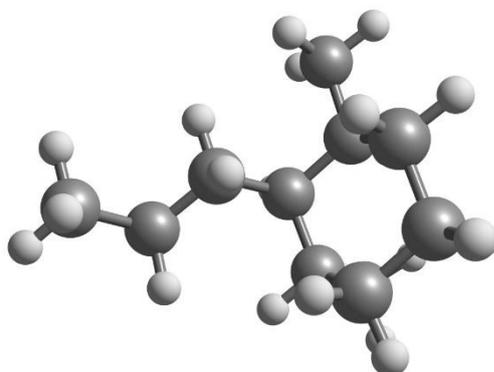
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 160.



Nota: Chemcraft.

Figura 446.

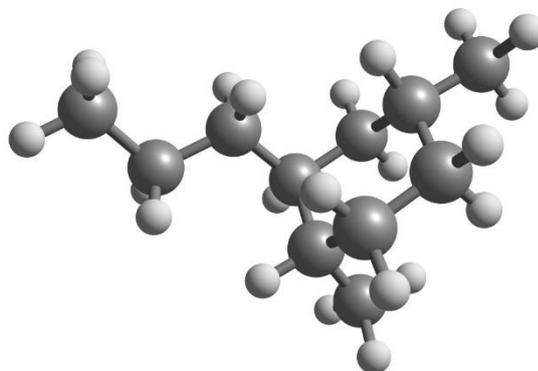
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 161.



Nota: Chemcraft.

Figura 447.

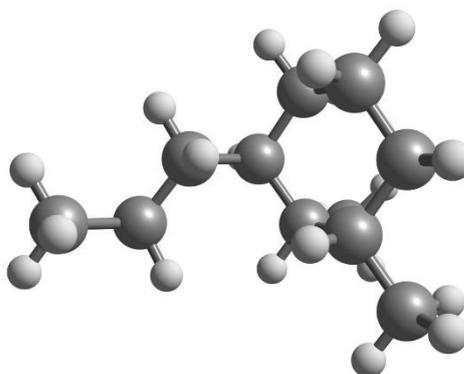
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 162.



Nota: Chemcraft.

Figura 448.

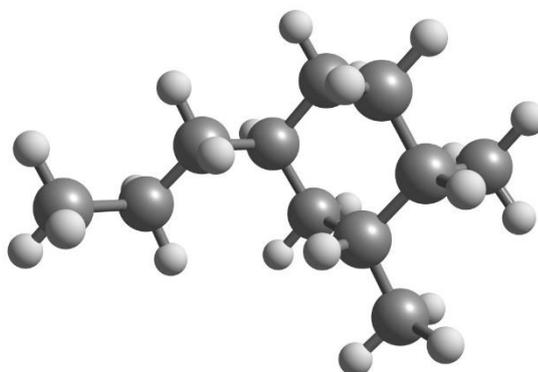
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 163.



Nota: Chemcraft.

Figura 449.

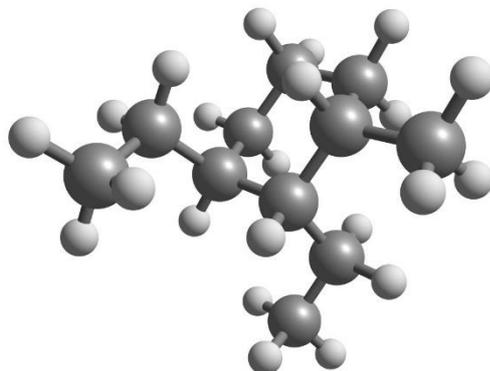
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 164.



Nota: Chemcraft.

Figura 450.

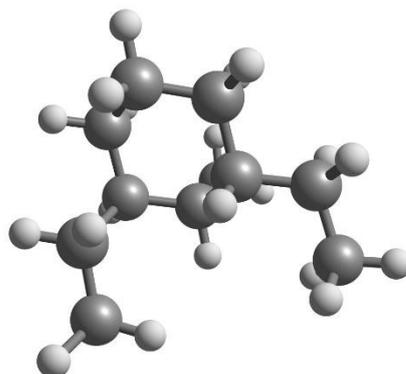
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 165.



Nota: Chemcraft.

Figura 451.

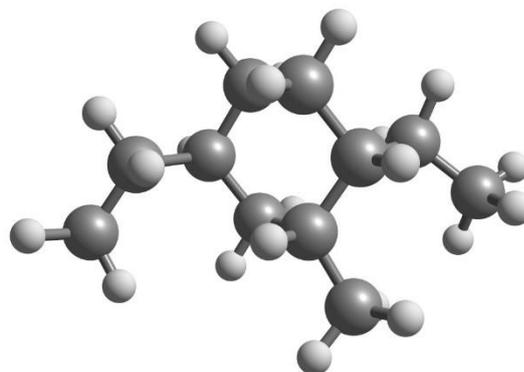
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 166.



Nota: Chemcraft.

Figura 452.

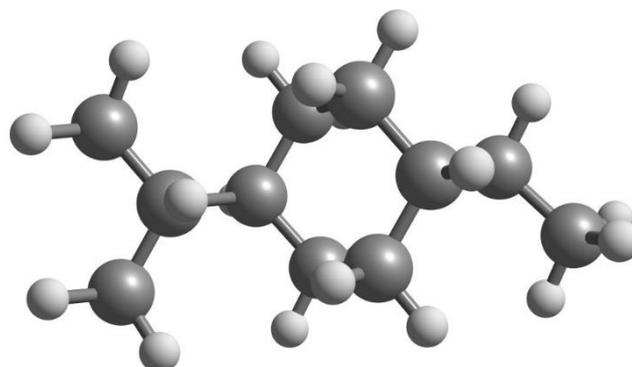
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 167.



Nota: Chemcraft.

Figura 453.

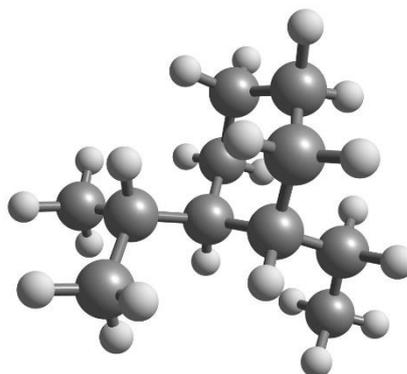
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 168.



Nota: Chemcraft.

Figura 454.

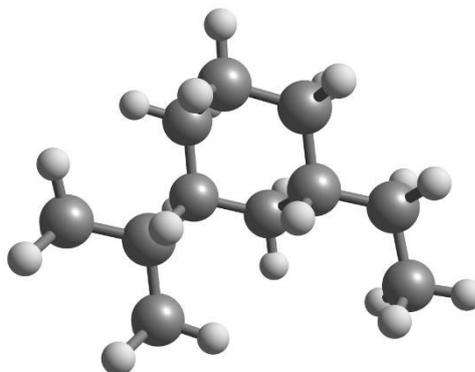
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 169.



Nota: Chemcraft.

Figura 455.

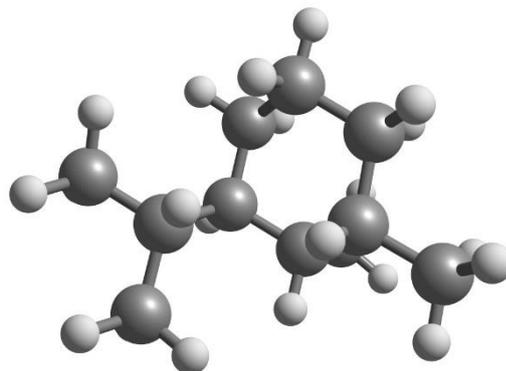
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 170.



Nota: Chemcraft.

Figura 456.

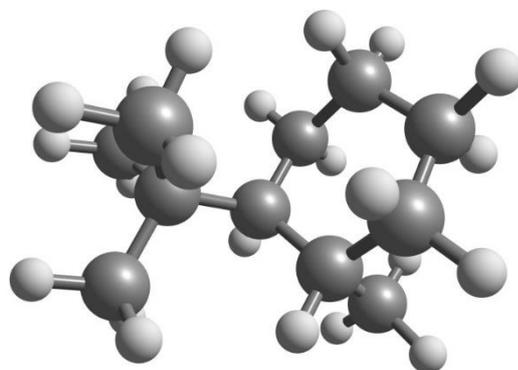
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 171.



Nota: Chemcraft.

Figura 457.

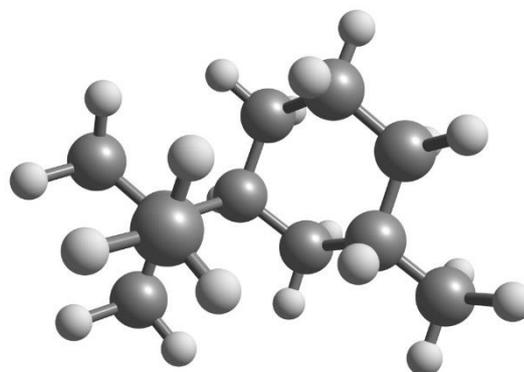
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 172.



Nota: Chemcraft.

Figura 458.

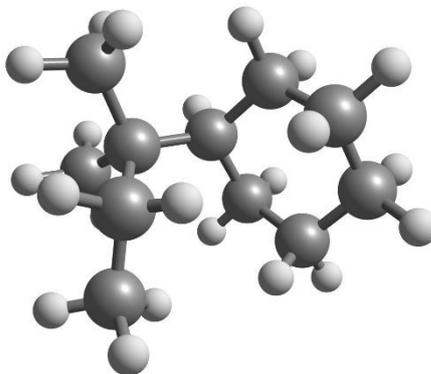
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 173.



Nota: Chemcraft.

Figura 459.

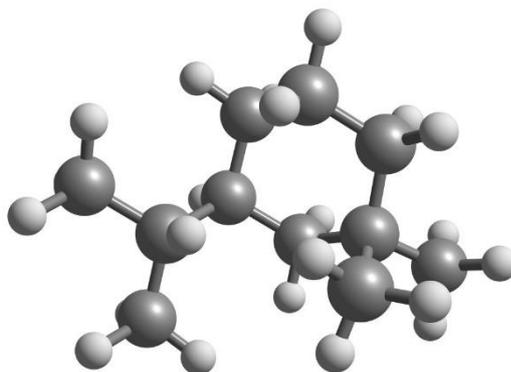
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 174.



Nota: Chemcraft.

Figura 460

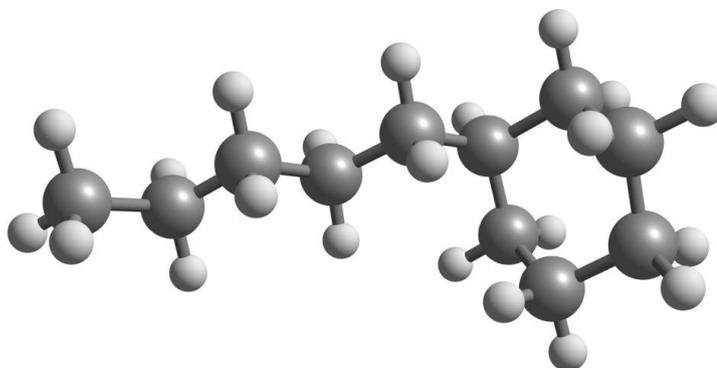
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 175



Nota: Chemcraft.

Figura 461.

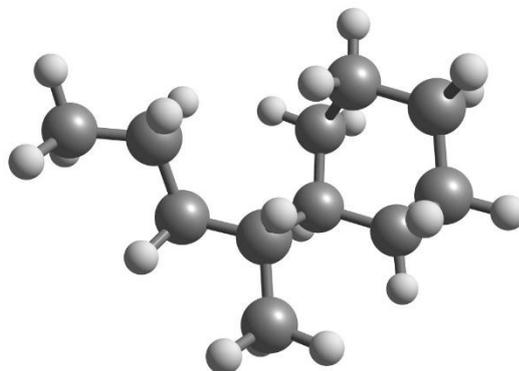
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 176.



Nota: Chemcraft.

Figura 462.

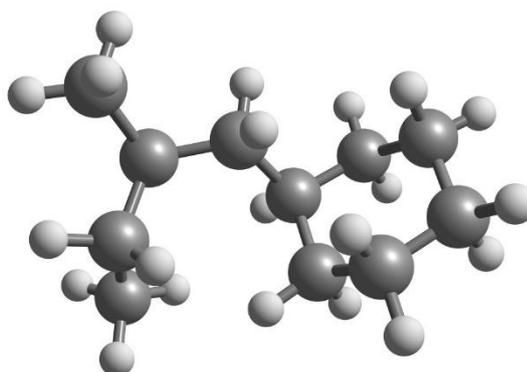
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 177.



Nota: Chemcraft.

Figura 463.

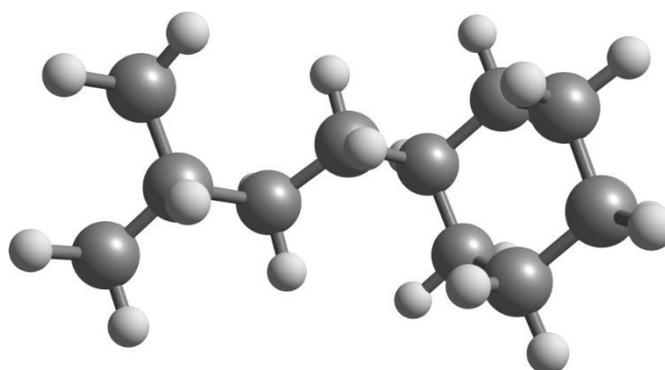
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 178.



Nota: Chemcraft.

Figura 464.

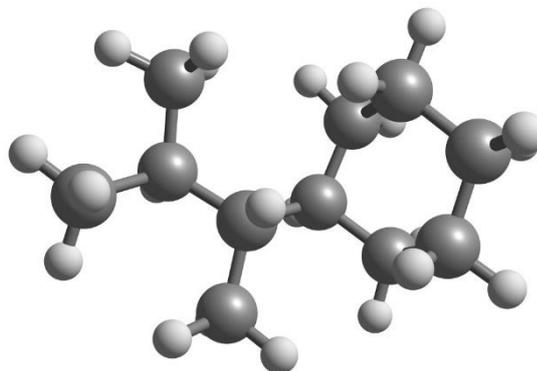
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 179.



Nota: Chemcraft.

Figura 465.

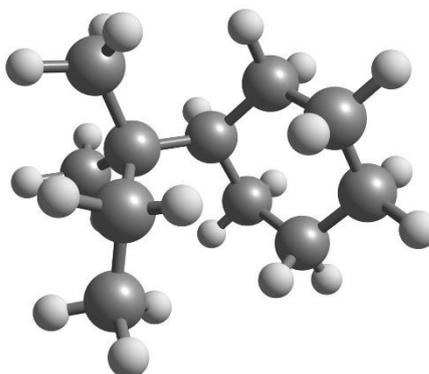
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 180.



Nota: Chemcraft.

Figura 466.

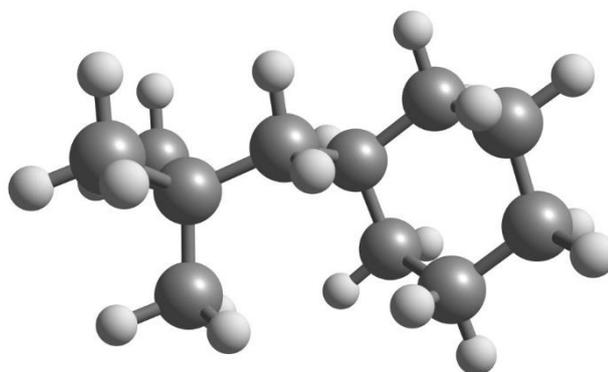
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 181.



Nota: Chemcraft.

Figura 467.

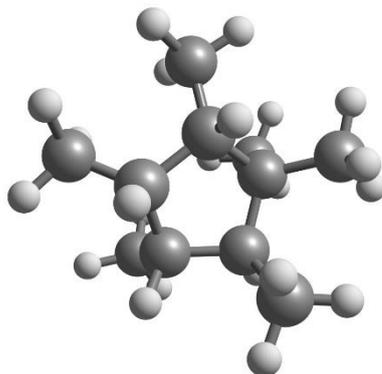
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 182.



Nota: Chemcraft.

Figura 468.

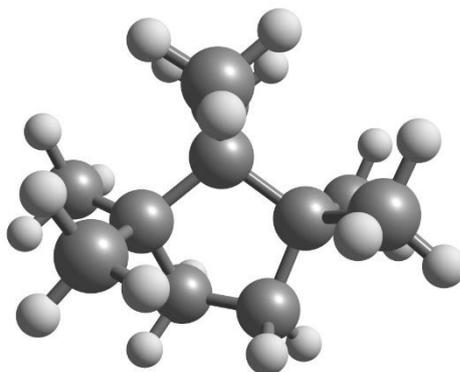
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 183.



Nota: Chemcraft.

Figura 469.

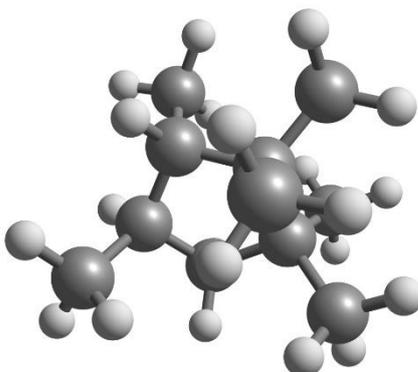
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 184.



Nota: Chemcraft.

Figura 470.

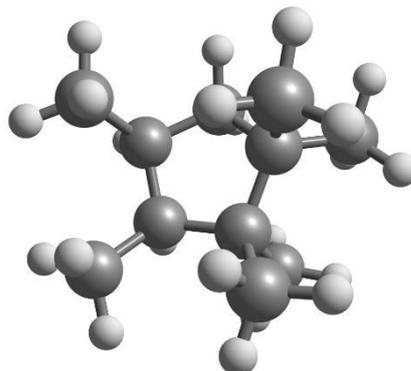
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 185.



Nota: Chemcraft.

Figura 471.

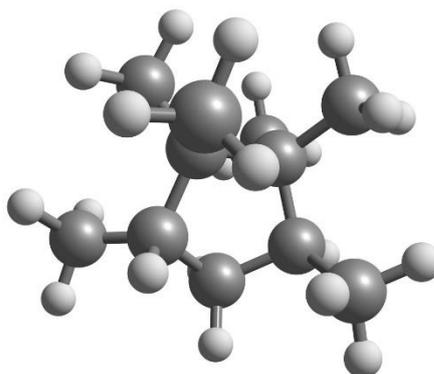
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 186.



Nota: Chemcraft.

Figura 472.

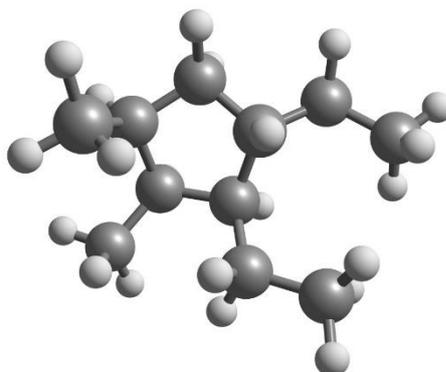
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 187.



Nota: Chemcraft.

Figura 473.

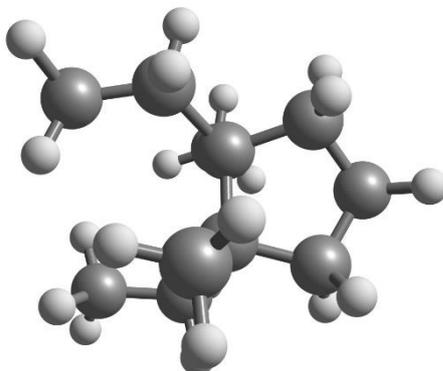
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 188.



Nota: Chemcraft.

Figura 474.

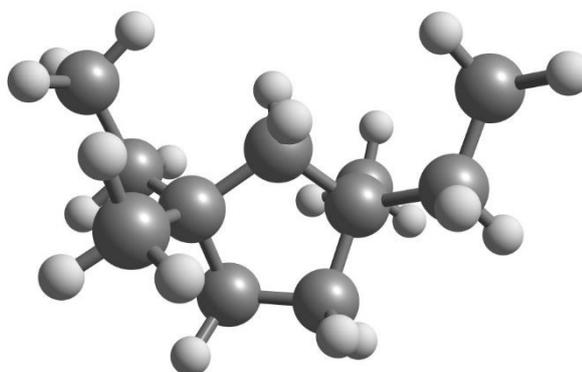
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 189.



Nota: Chemcraft.

Figura 475.

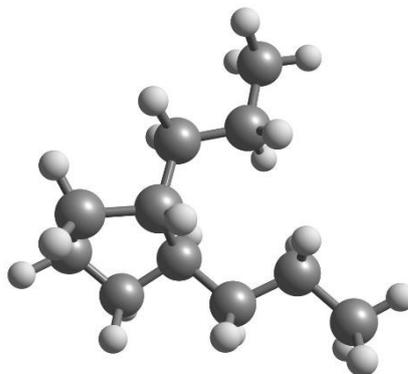
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 190.



Nota: Chemcraft.

Figura 476.

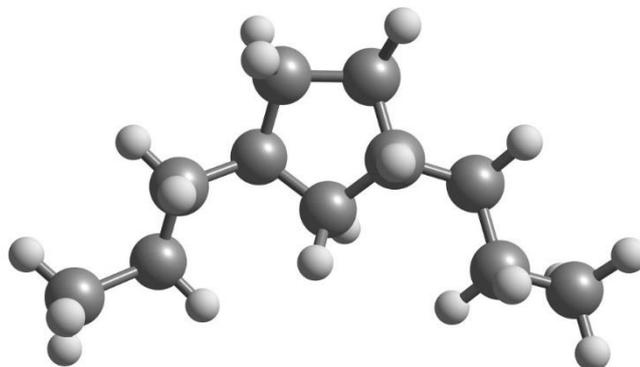
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 191.



Nota: Chemcraft.

Figura 477.

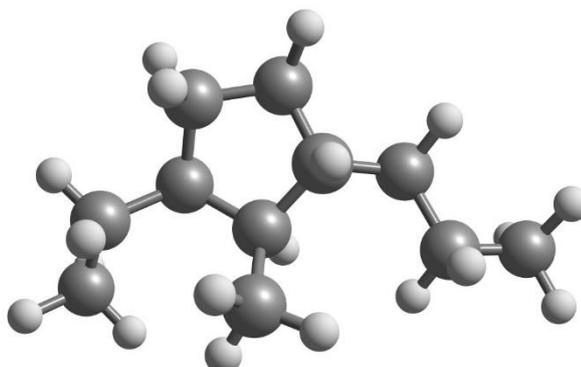
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 192.



Nota: Chemcraft.

Figura 478.

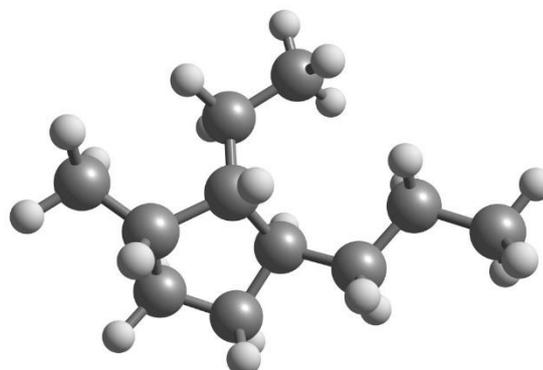
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 193.



Nota: Chemcraft.

Figura 479.

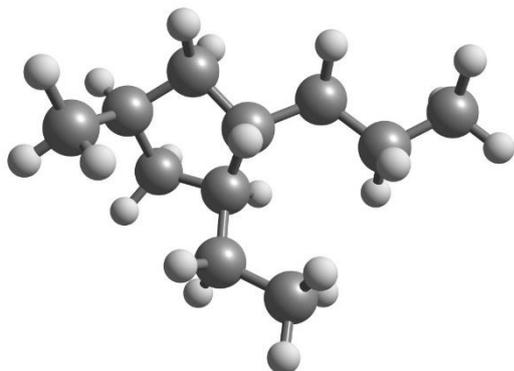
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 194.



Nota: Chemcraft.

Figura 480.

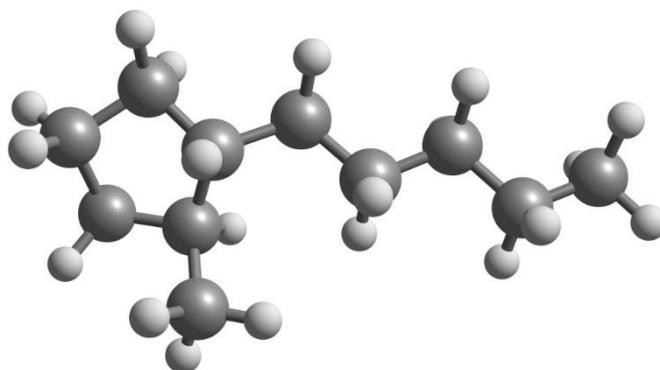
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 195.



Nota: Chemcraft.

Figura 481.

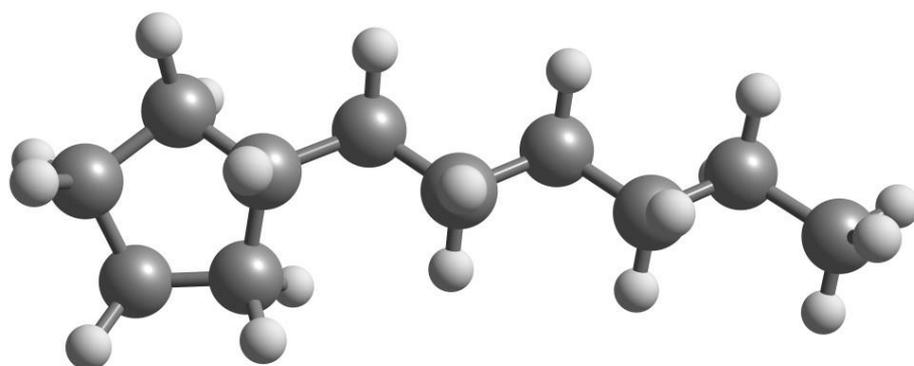
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 196.



Nota: Chemcraft.

Figura 482.

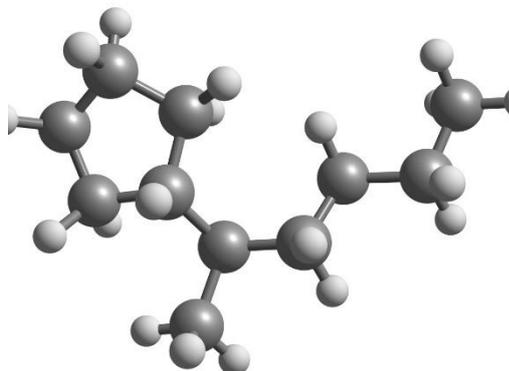
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 197.



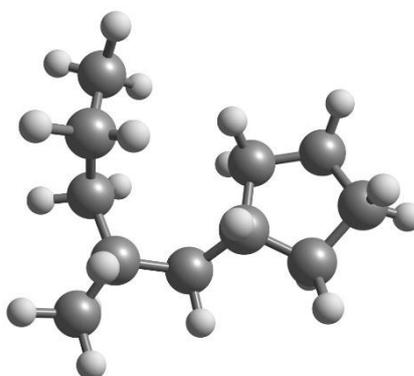
Nota: Chemcraft.

Figura 483.

Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 198.



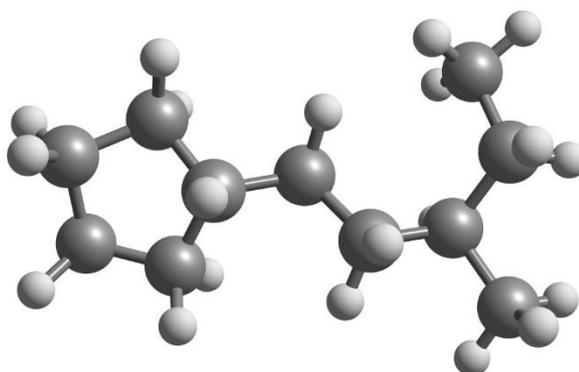
Nota: Chemcraft.

Figura 484. *Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 199.*

Nota: Chemcraft.

Figura 485.

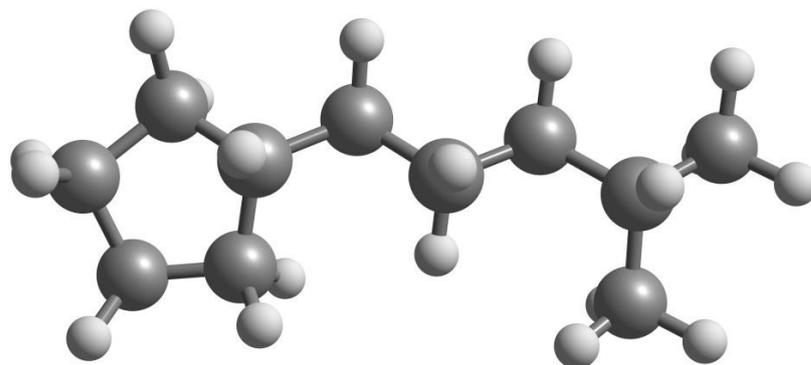
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 200.



Nota: Chemcraft.

Figura 486.

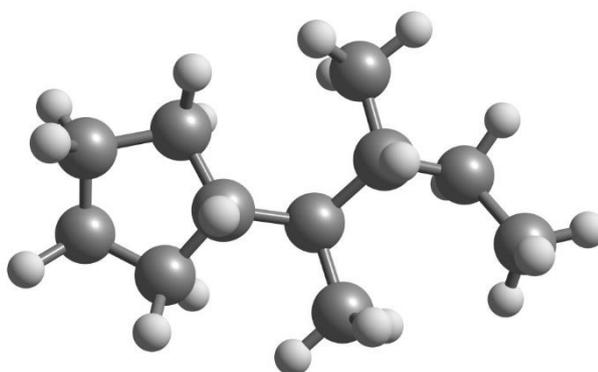
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 201.



Nota: Chemcraft.

Figura 487.

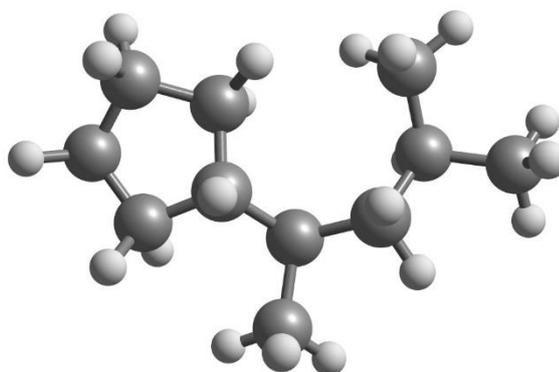
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 202.



Nota: Chemcraft.

Figura 488.

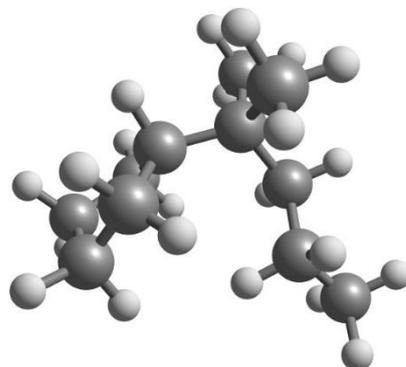
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 203.



Nota: Chemcraft.

Figura 489.

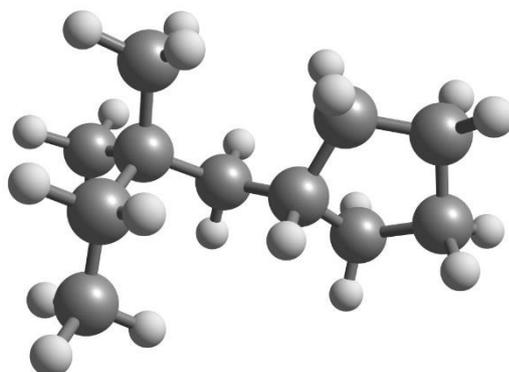
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 204.



Nota: Chemcraft.

Figura 490.

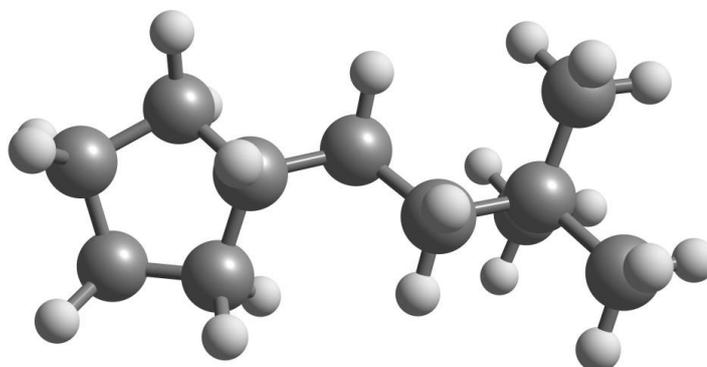
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 205.



Nota: Chemcraft.

Figura 491.

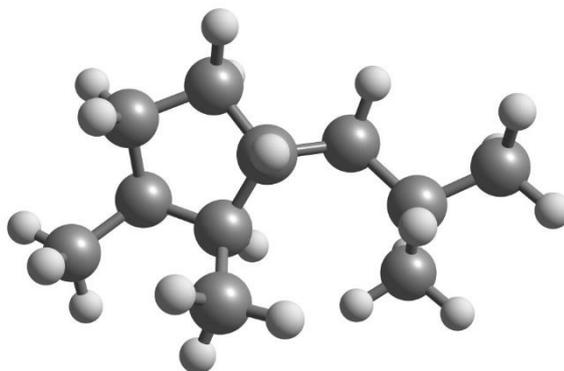
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 206.



Nota: Chemcraft.

Figura 492.

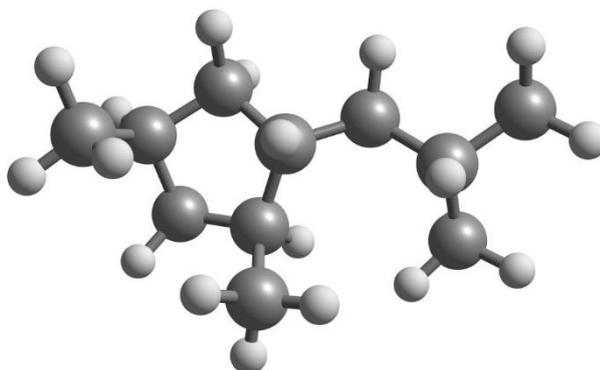
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 207.



Nota: Chemcraft.

Figura 493.

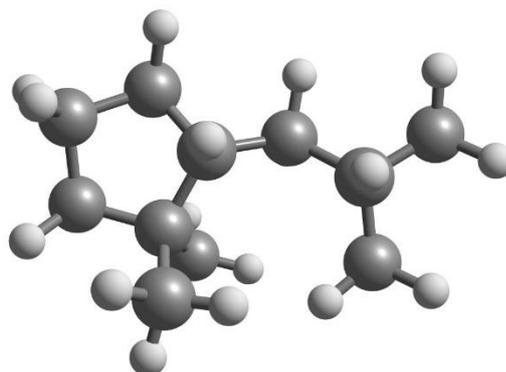
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 208.



Nota: Chemcraft.

Figura 494.

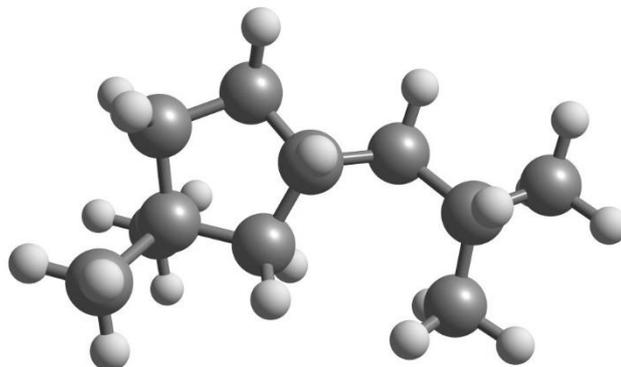
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 209.



Nota: Chemcraft.

Figura 495.

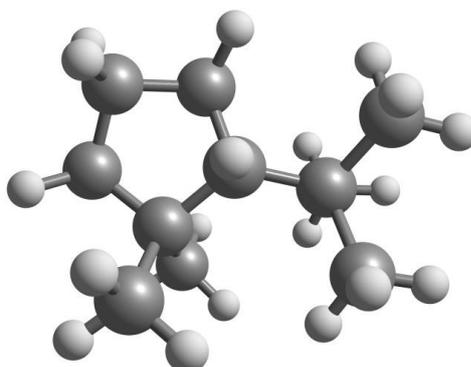
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 210.



Nota: Chemcraft.

Figura 496.

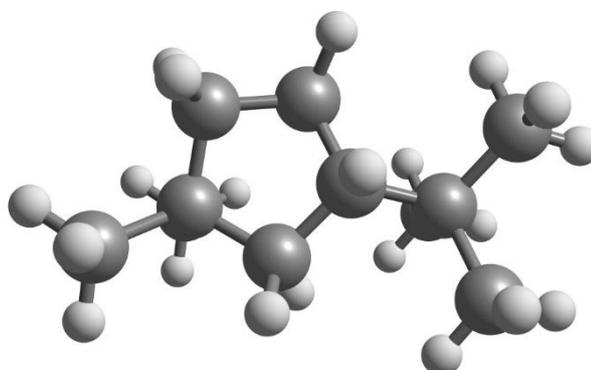
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 211.



Nota: Chemcraft.

Figura 497.

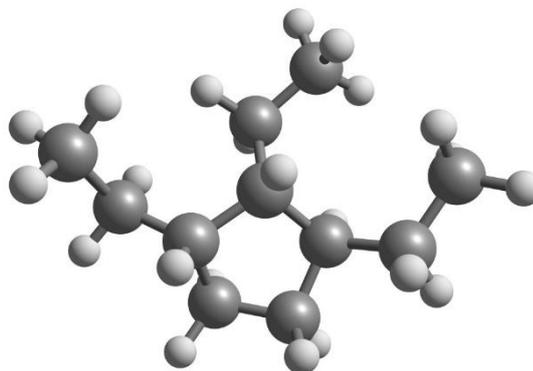
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 212.



Nota: Chemcraft.

Figura 498.

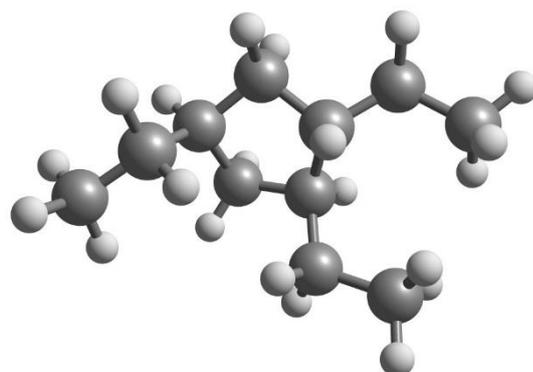
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 213.



Nota: Chemcraft.

Figura 499.

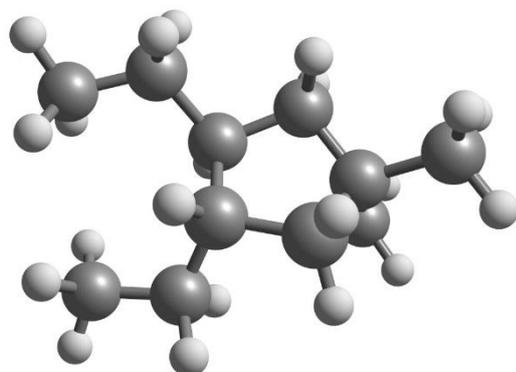
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 214.



Nota: Chemcraft.

Figura 500.

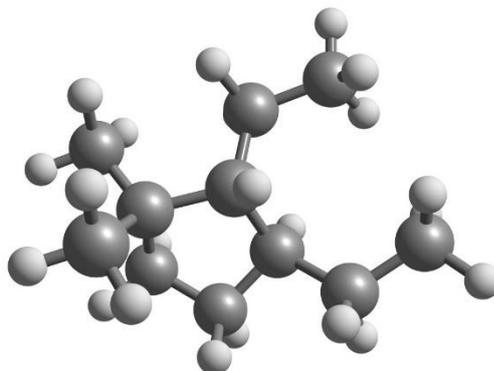
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 215.



Nota: Chemcraft.

Figura 501.

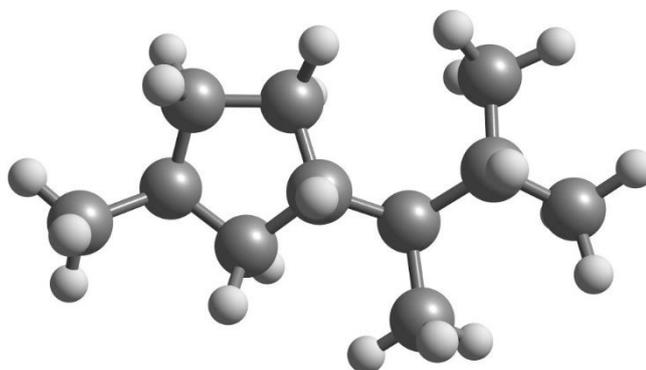
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 216.



Nota: Chemcraft.

Figura 502.

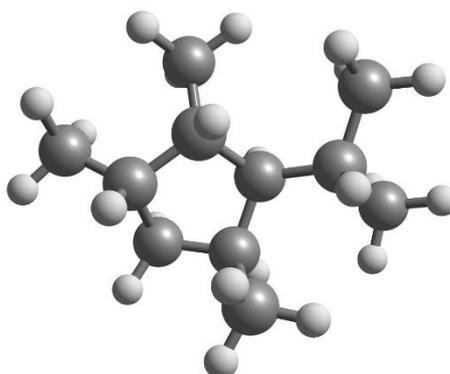
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 217.



Nota: Chemcraft.

Figura 503.

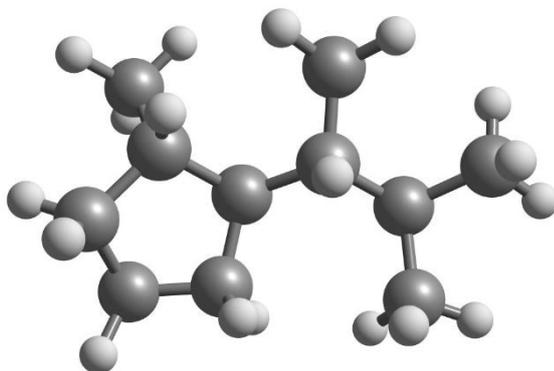
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 218.



Nota: Chemcraft.

Figura 504.

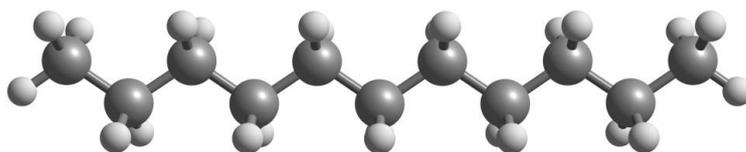
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 219.



Nota: Chemcraft.

Figura 505.

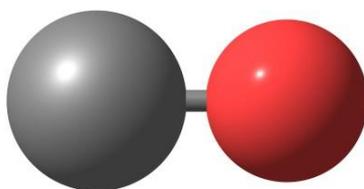
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 220.



Nota: Chemcraft.

Figura 506.

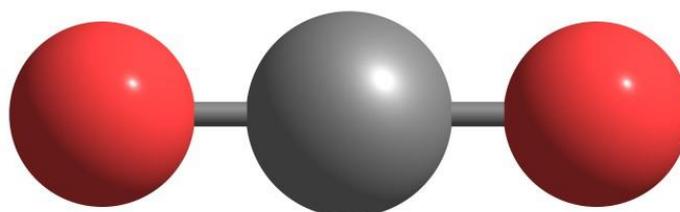
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 221.



Nota: Chemcraft.

Figura 507.

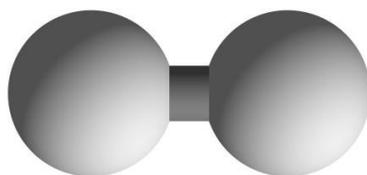
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 222.



Nota: Chemcraft.

Figura 508.

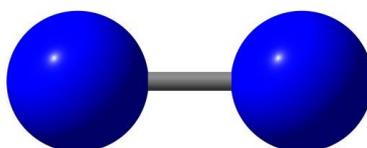
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 223.



Nota: Chemcraft.

Figura 509.

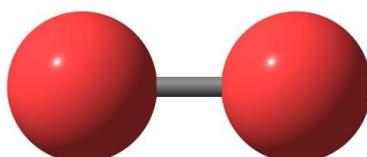
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 224.



Nota: Chemcraft.

Figura 510.

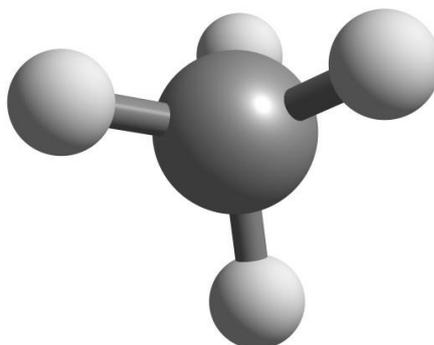
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 225.



Nota: Chemcraft.

Figura 511.

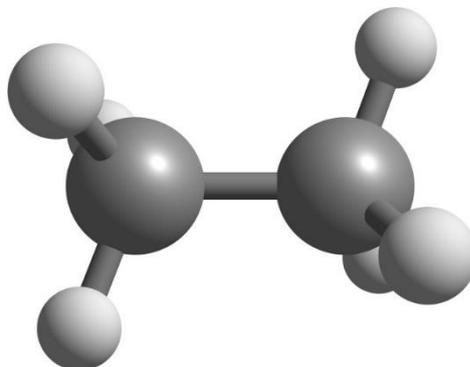
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 226.



Nota: Chemcraft.

Figura 512.

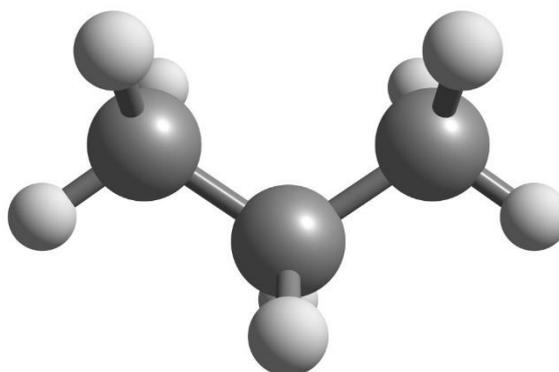
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 227.



Nota: Chemcraft.

Figura 513.

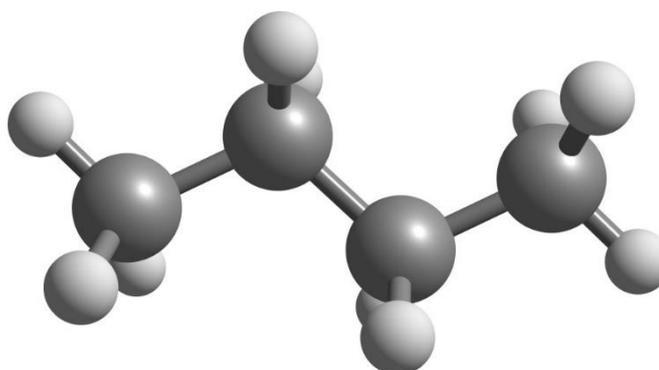
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 228.



Nota: Chemcraft.

Figura 514.

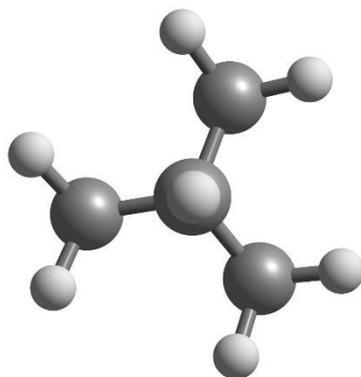
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 229.



Nota: Chemcraft.

Figura 515.

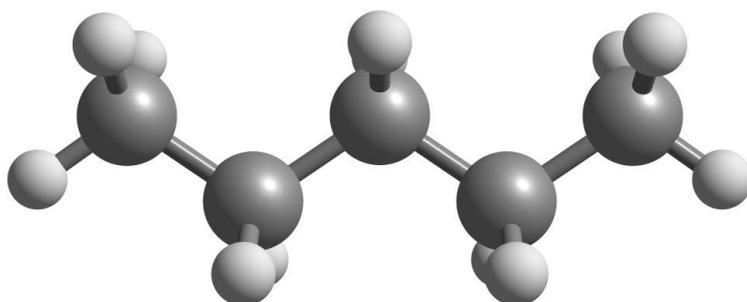
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 230.



Nota: Chemcraft

Figura 516.

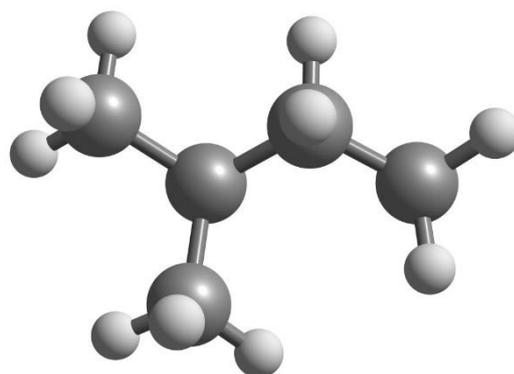
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 231.



Nota: Chemcraft

Figura 517.

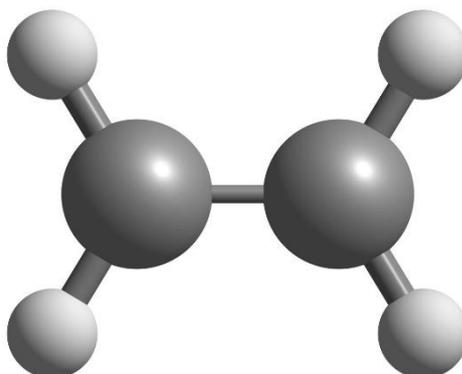
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 232.



Nota: Chemcraft

Figura 518.

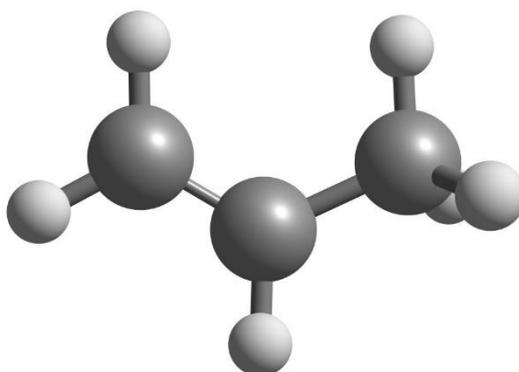
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 233.



Nota: Chemcraft

Figura 519.

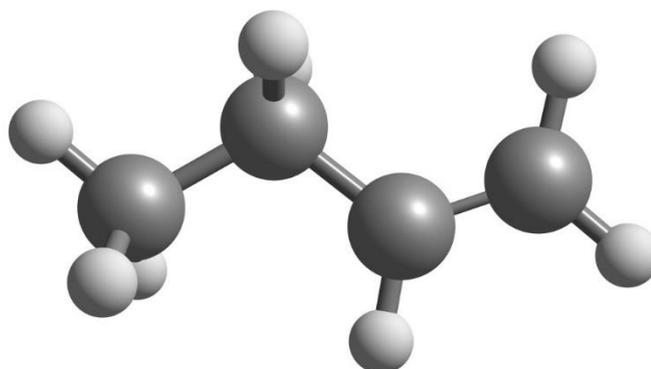
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 234.



Nota: Chemcraft

Figura 520.

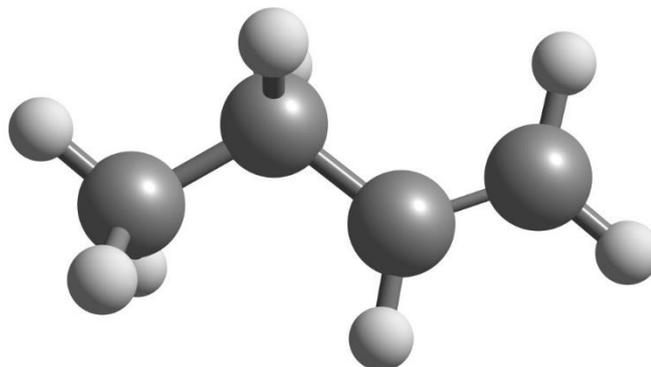
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 235.



Nota: Chemcraft

Figura 521.

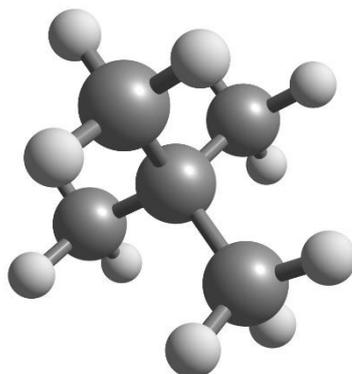
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 236.



Nota: Chemcraft

Figura 522.

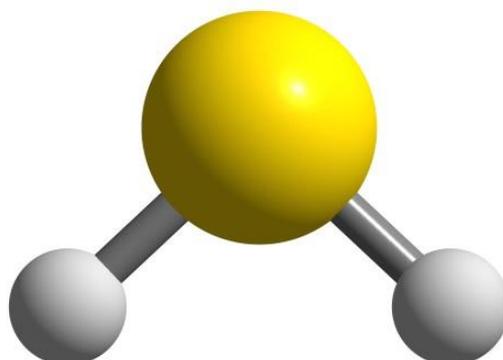
Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 237.



Nota: Chemcraft

Figura 523.

Estructura en 3D sin optimizar de la molécula 238.



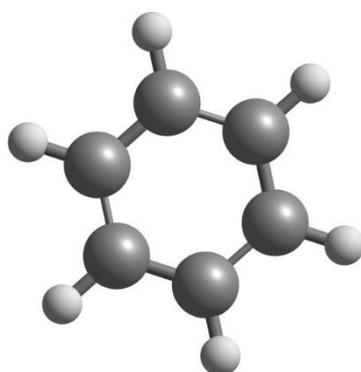
Nota: Chemcraft

4.5.2 Figuras con coordenadas 3D optimizadas

Con el fin de obtener las figuras de manera automática con coordenadas 3D optimizadas para todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica, en donde la optimización geométrica busca encontrar la configuración espacial de mínima energía, es decir que van a formar las interacciones intermoleculares con moléculas similares. Se utiliza el programa Avogadro, las figuras obtenidas se presentan a continuación:

Figura 524

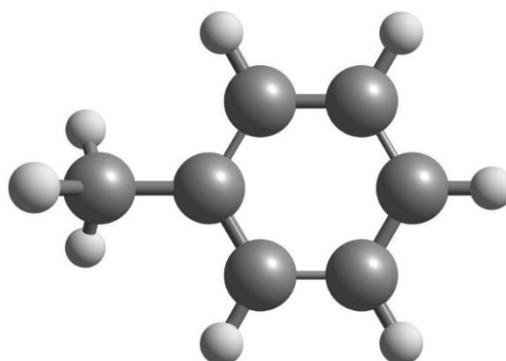
Estructura en 3D optimizada de la molécula 1.



Nota: Chemcraft

Figura 525

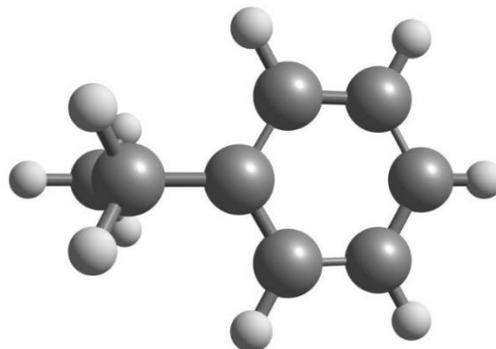
Estructura en 3D optimizada de la molécula 2.



Nota: Chemcraft

Figura 526

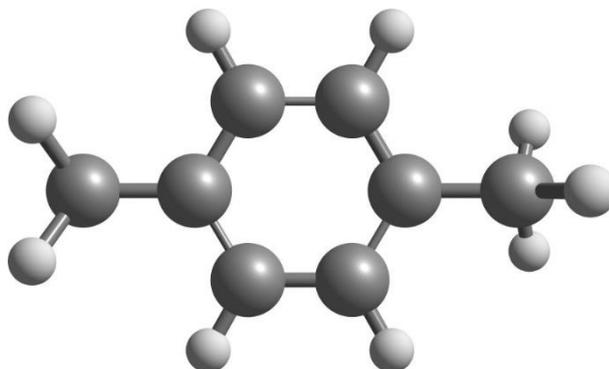
Estructura en 3D optimizada de la molécula 3.



Nota: Chemcraft

Figura 527

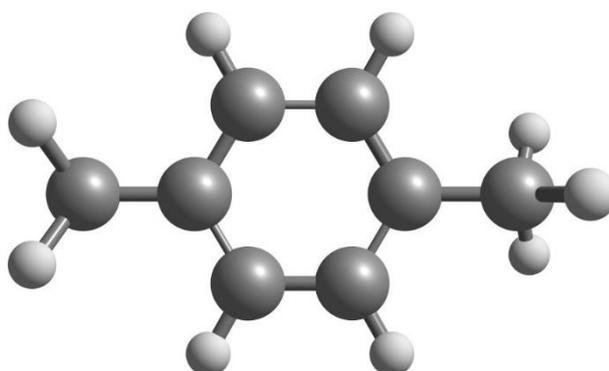
Estructura en 3D optimizada de la molécula 4



Nota: Chemcraft

Figura 528

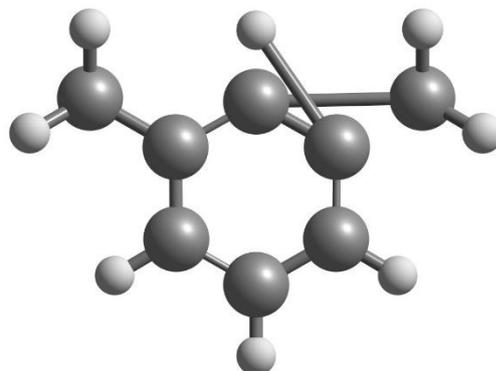
Estructura en 3D optimizada de la molécula 5.



Nota: Chemcraft

Figura 529

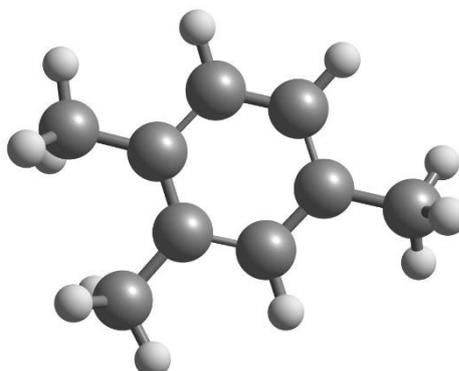
Estructura en 3D optimizada de la molécula 6.



Nota: Chemcraft

Figura 530

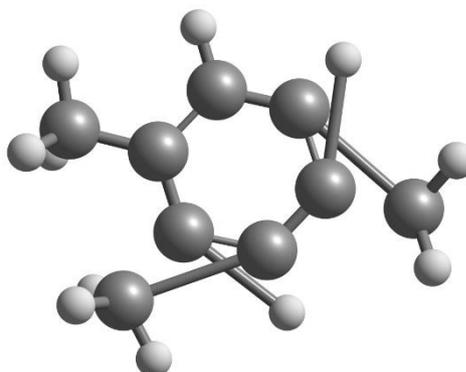
Estructura en 3D optimizada de la molécula 7.



Nota: Chemcraft

Figura 531

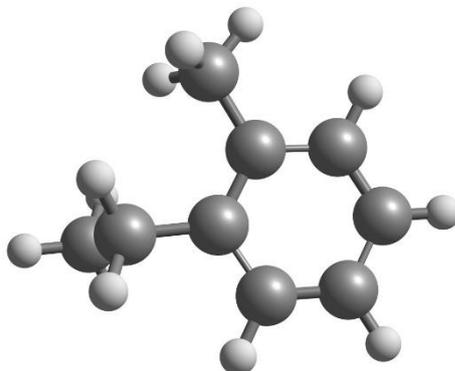
Estructura en 3D optimizada de la molécula 8.



Nota: Chemcraft

Figura 532

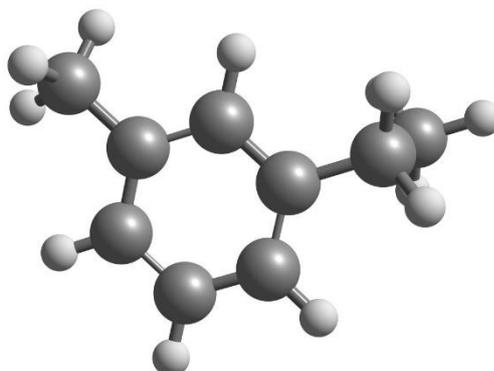
Estructura en 3D optimizada de la molécula 9



Nota: Chemcraft

Figura 533

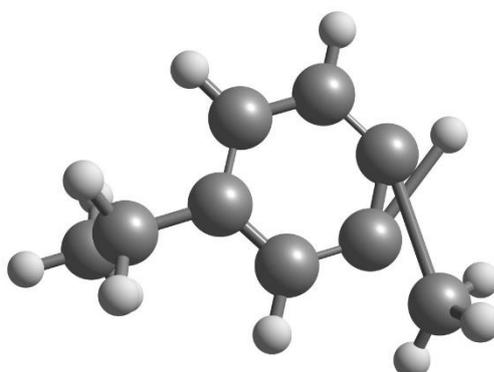
Estructura en 3D optimizada de la molécula 10.



Nota: Chemcraft

Figura 534

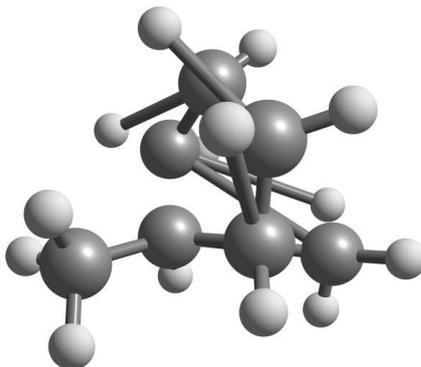
Estructura en 3D optimizada de la molécula 11.



Nota: Chemcraft

Figura 535

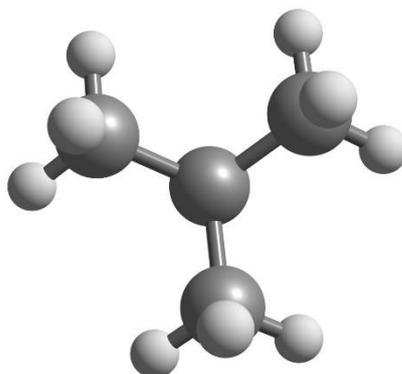
Estructura en 3D optimizada de la molécula 12.



Nota: Chemcraft

Figura 536

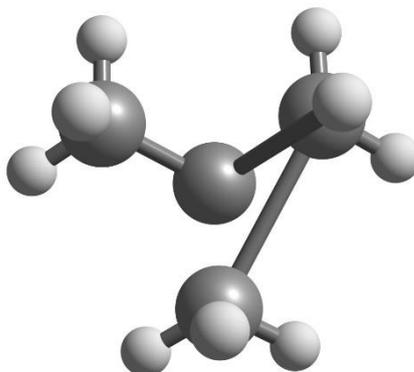
Estructura en 3D optimizada de la molécula 13.



Nota: Chemcraft

Figura 537

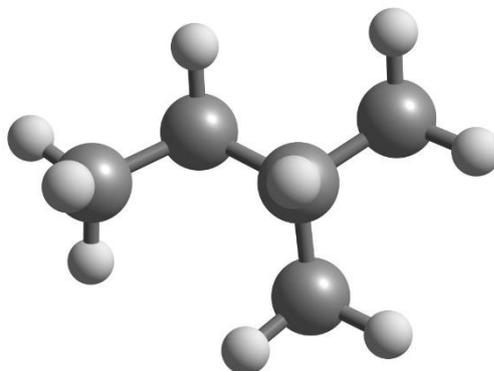
Estructura en 3D optimizada de la molécula 14.



Nota: Chemcraft

Figura 538

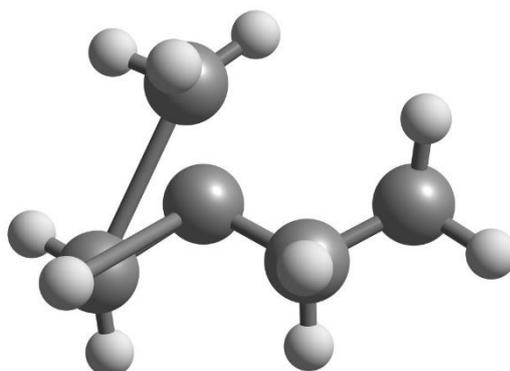
Estructura en 3D optimizada de la molécula 15.



Nota: Chemcraft

Figura 539

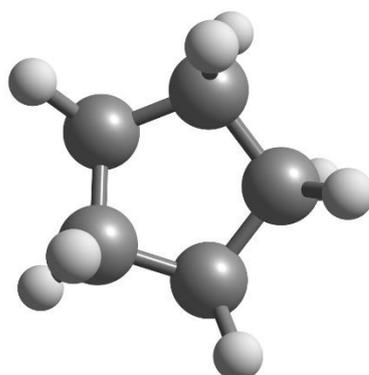
Estructura en 3D optimizada de la molécula 16.



Nota: Chemcraft

Figura 540

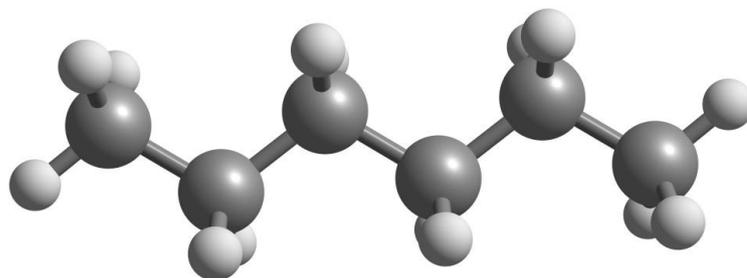
Estructura en 3D optimizada de la molécula 17.



Nota: Chemcraft

Figura 541

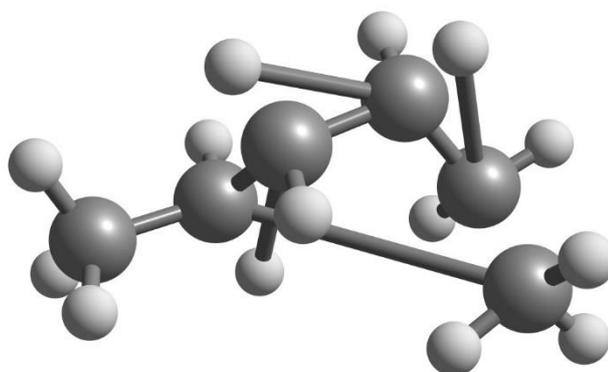
Estructura en 3D optimizada de la molécula 18.



Nota: Chemcraft

Figura 542

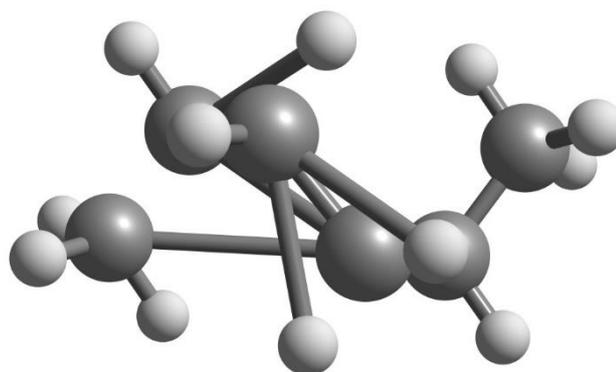
Estructura en 3D optimizada de la molécula 19.



Nota: Chemcraft

Figura 543

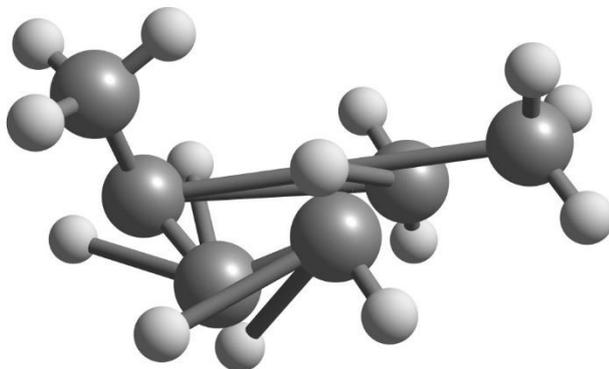
Estructura en 3D optimizada de la molécula 20.



Nota: Chemcraft

Figura 544

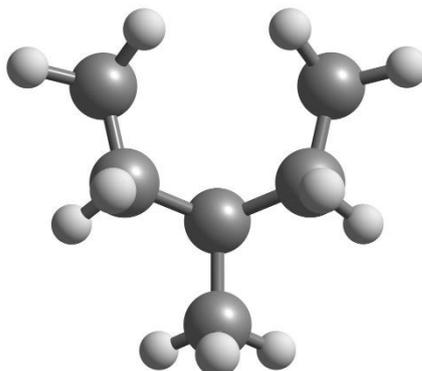
Estructura en 3D optimizada de la molécula 21.



Nota: Chemcraft

Figura 545

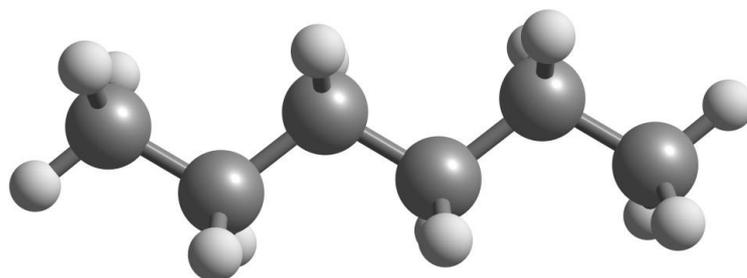
Estructura en 3D optimizada de la molécula 22.



Nota: Chemcraft

Figura 546

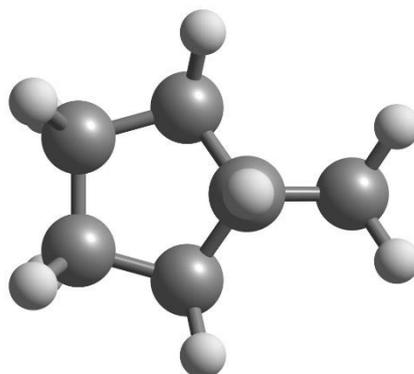
Estructura en 3D optimizada de la molécula 23.



Nota: Chemcraft

Figura 547

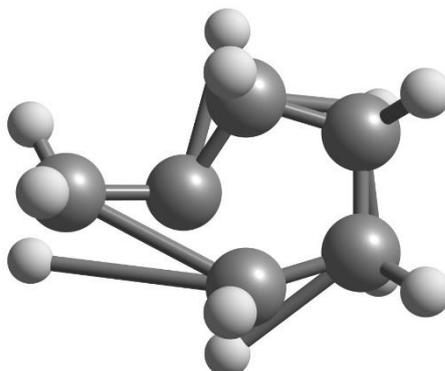
Estructura en 3D optimizada de la molécula 24.



Nota: Chemcraft

Figura 548

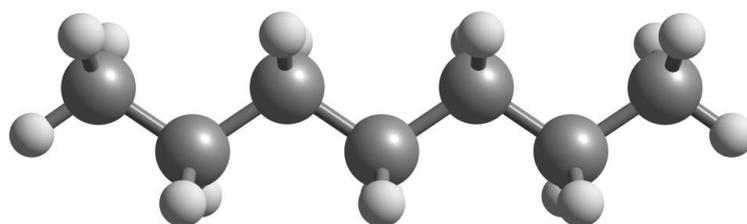
Estructura en 3D optimizada de la molécula 25.



Nota: Chemcraft

Figura 549

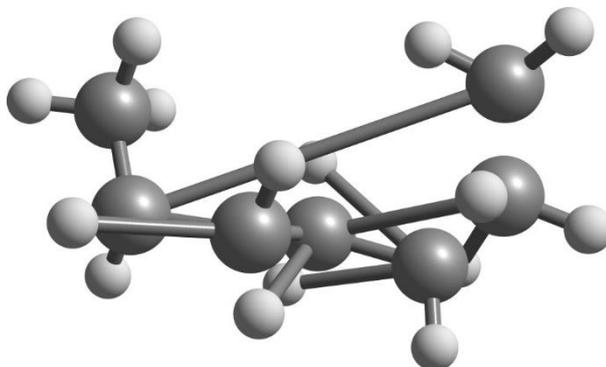
Estructura en 3D optimizada de la molécula 26.



Nota: Chemcraft

Figura 550

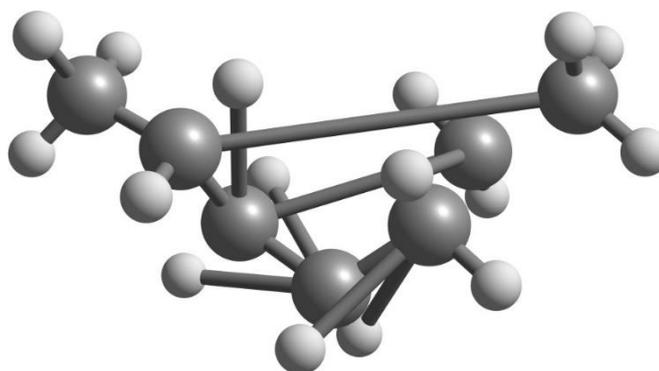
Estructura en 3D optimizada de la molécula 27.



Nota: Chemcraft

Figura 551

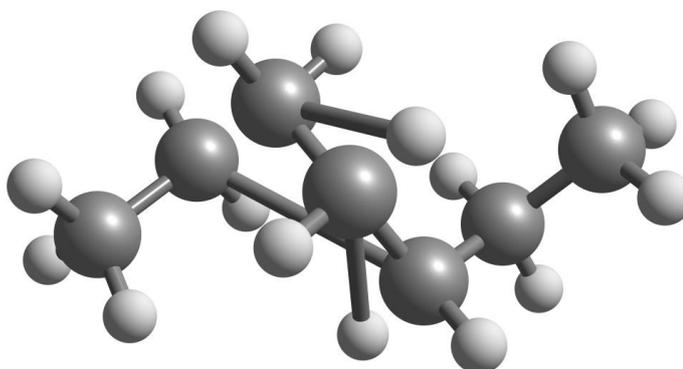
Estructura en 3D optimizada de la molécula 28.



Nota: Chemcraft

Figura 552

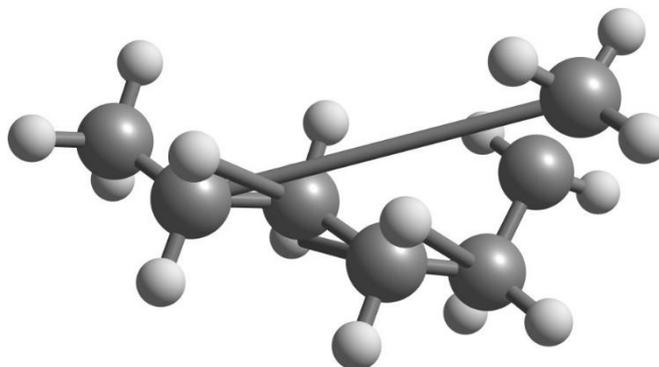
Estructura en 3D optimizada de la molécula 29.



Nota: Chemcraft

Figura 553

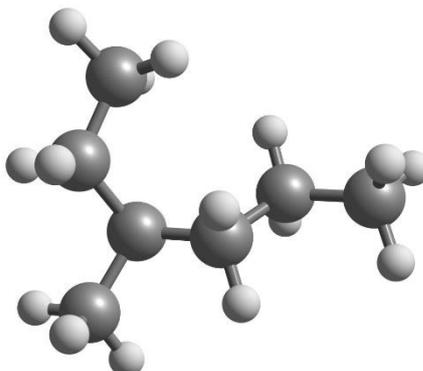
Estructura en 3D optimizada de la molécula 30.



Nota: Chemcraft

Figura 554

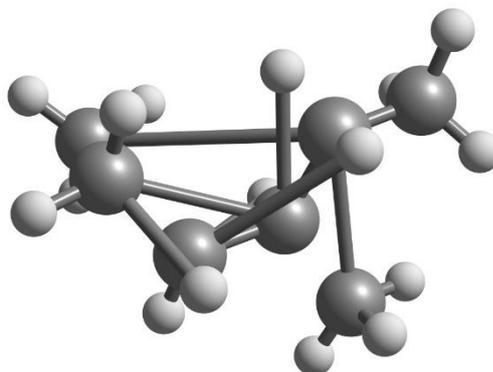
Estructura en 3D optimizada de la molécula 31.



Nota: Chemcraft

Figura 555

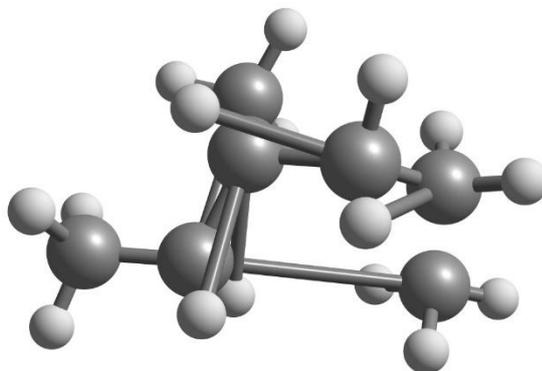
Estructura en 3D optimizada de la molécula 32.



Nota: Chemcraft

Figura 556

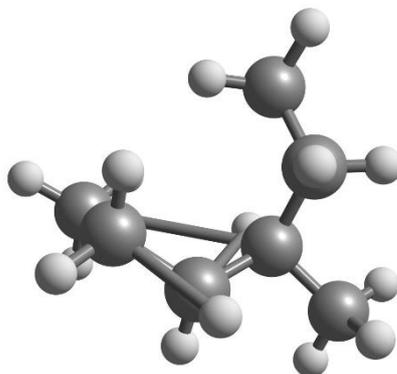
Estructura en 3D optimizada de la molécula 33.



Nota: Chemcraft

Figura 557

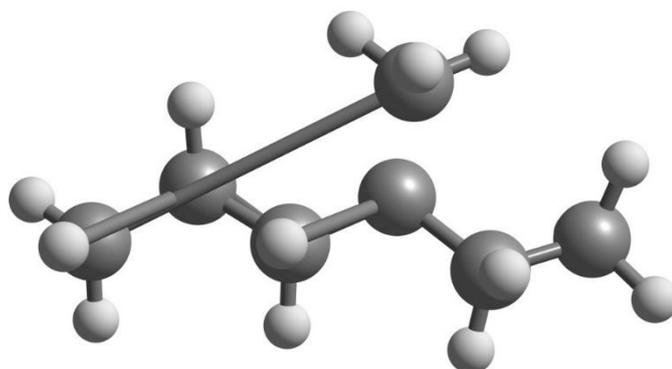
Estructura en 3D optimizada de la molécula 34.



Nota: Chemcraft

Figura 558

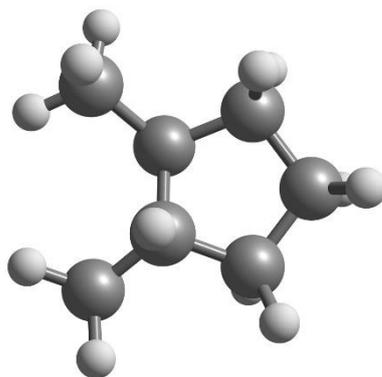
Estructura en 3D optimizada de la molécula 35.



Nota: Chemcraft

Figura 559

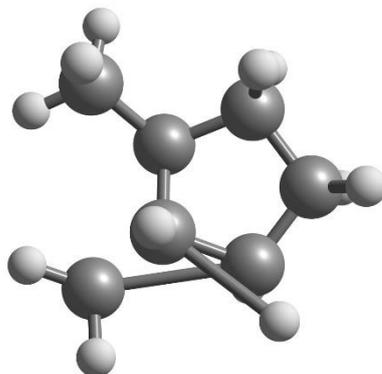
Estructura en 3D optimizada de la molécula 36.



Nota: Chemcraft

Figura 560

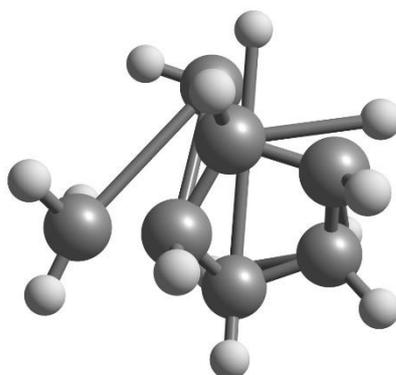
Estructura en 3D optimizada de la molécula 37.



Nota: Chemcraft

Figura 561

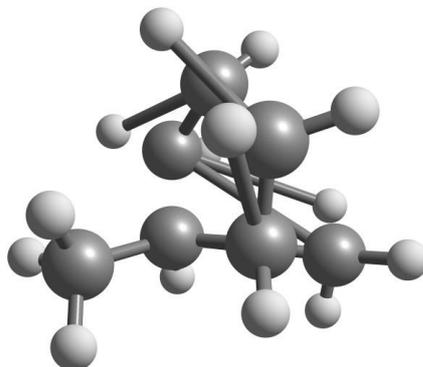
Estructura en 3D optimizada de la molécula 38.



Nota: Chemcraft

Figura 562

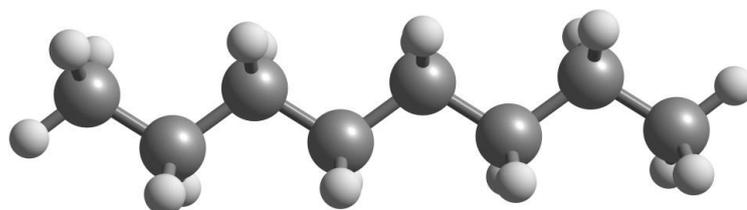
Estructura en 3D optimizada de la molécula 39.



Nota: Chemcraft

Figura 563

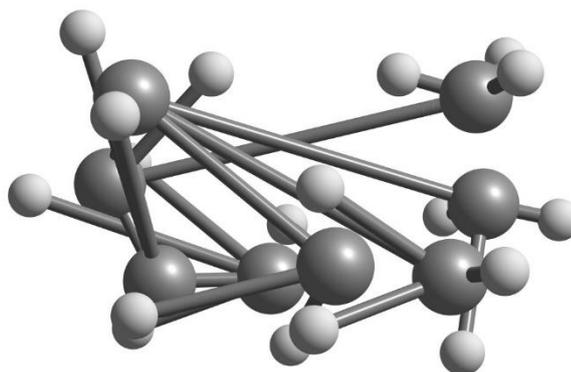
Estructura en 3D optimizada de la molécula 40.



Nota: Chemcraft

Figura 564

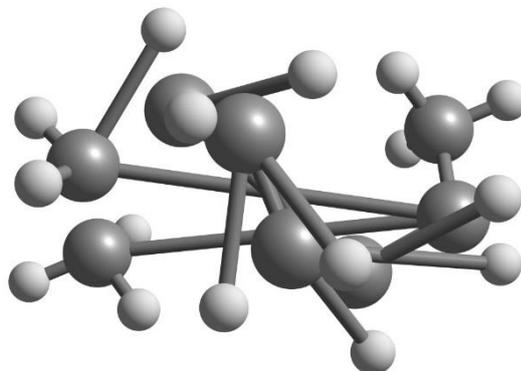
Estructura en 3D optimizada de la molécula 41.



Nota: Chemcraft

Figura 565

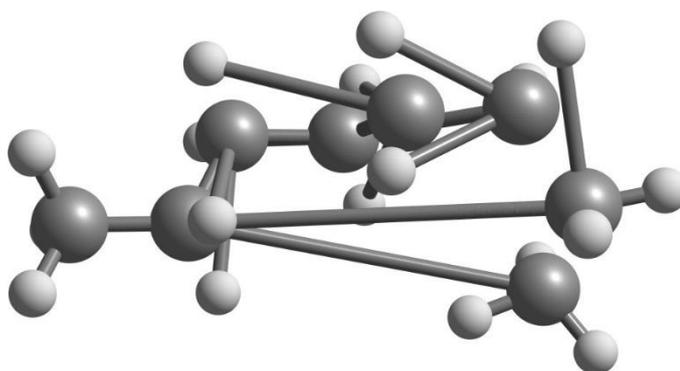
Estructura en 3D optimizada de la molécula 42.



Nota: Chemcraft

Figura 566

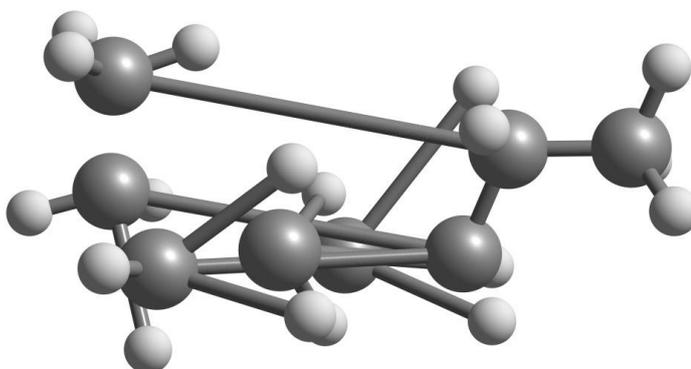
Estructura en 3D optimizada de la molécula 43.



Nota: Chemcraft

Figura 567

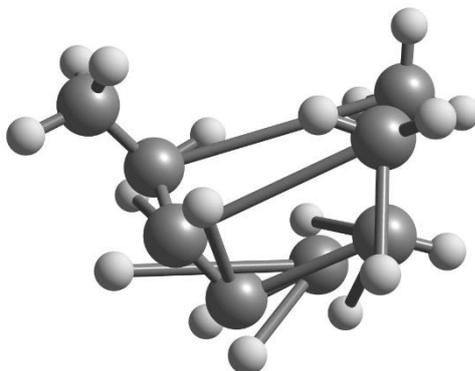
Estructura en 3D optimizada de la molécula 44.



Nota: Chemcraft

Figura 568

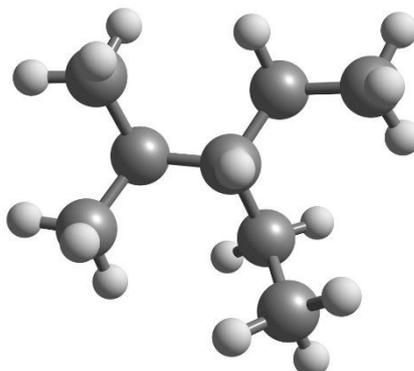
Estructura en 3D optimizada de la molécula 45.



Nota: Chemcraft

Figura 569

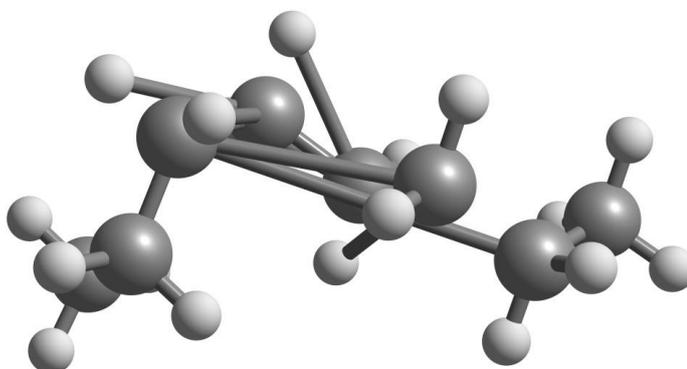
Estructura en 3D optimizada de la molécula 46.



Nota: Chemcraft

Figura 570

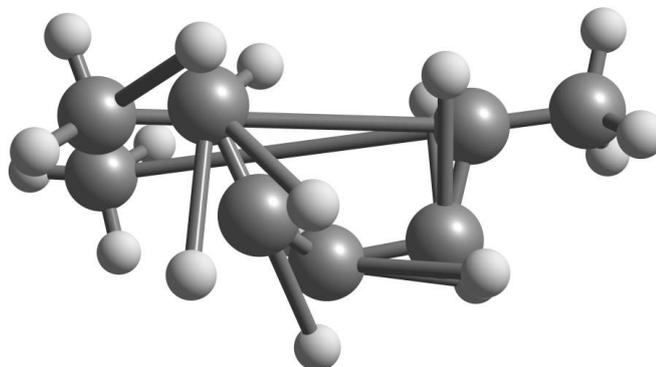
Estructura en 3D optimizada de la molécula 47.



Nota: Chemcraft

Figura 571

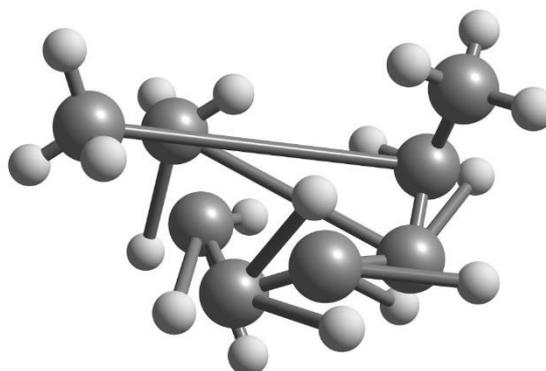
Estructura en 3D optimizada de la molécula 48.



Nota: Chemcraft

Figura 572

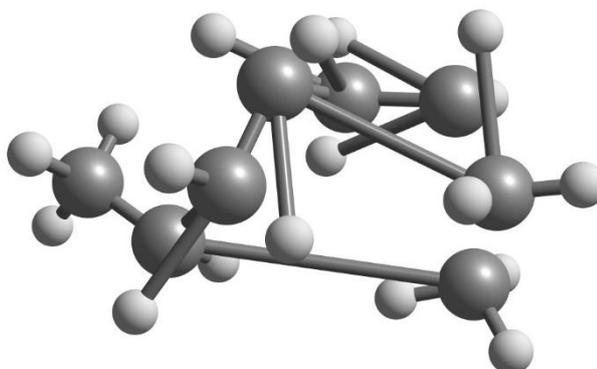
Estructura en 3D optimizada de la molécula 49.



Nota: Chemcraft

Figura 573

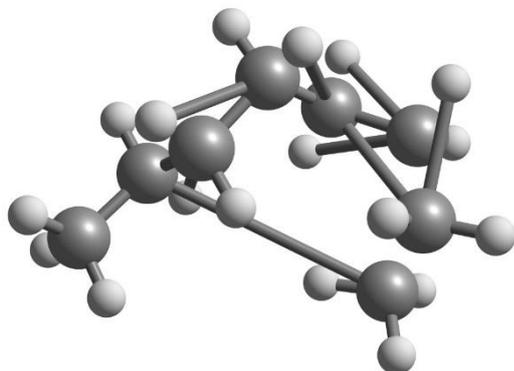
Estructura en 3D optimizada de la molécula 50.



Nota: Chemcraft

Figura 574

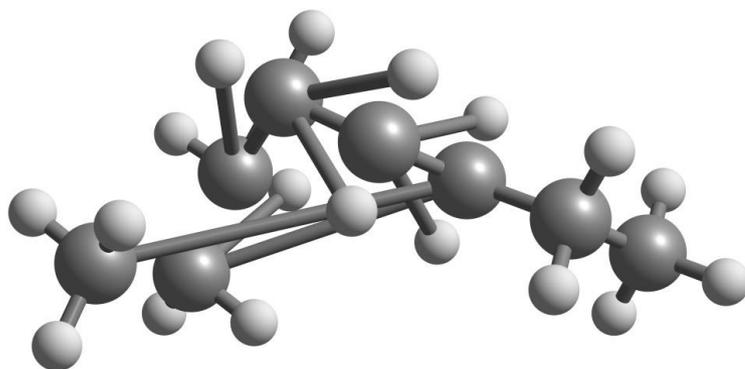
Estructura en 3D optimizada de la molécula 50.



Nota: Chemcraft

Figura 575

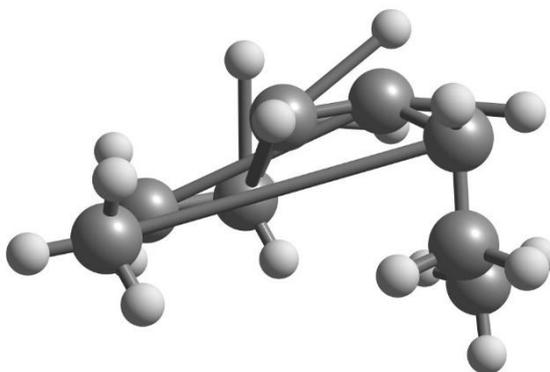
Estructura en 3D optimizada de la molécula 52.



Nota: Chemcraft

Figura 576

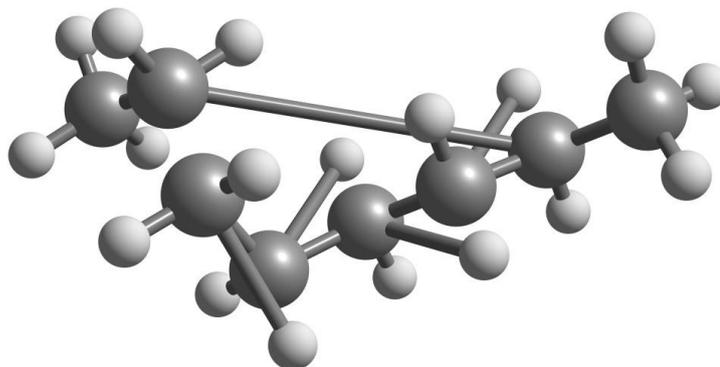
Estructura en 3D optimizada de la molécula 53.



Nota: Chemcraft

Figura 577

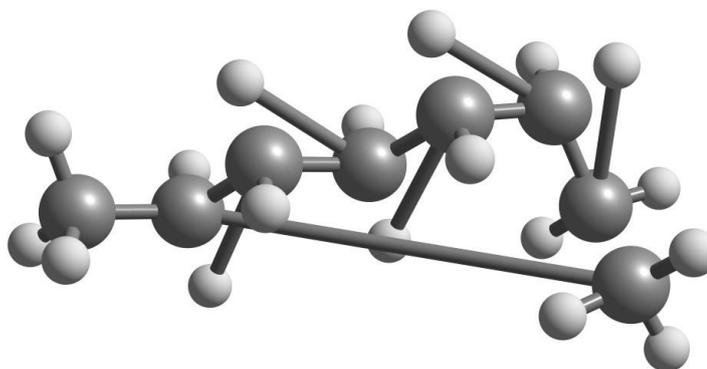
Estructura en 3D optimizada de la molécula 54.



Nota: Chemcraft

Figura 578

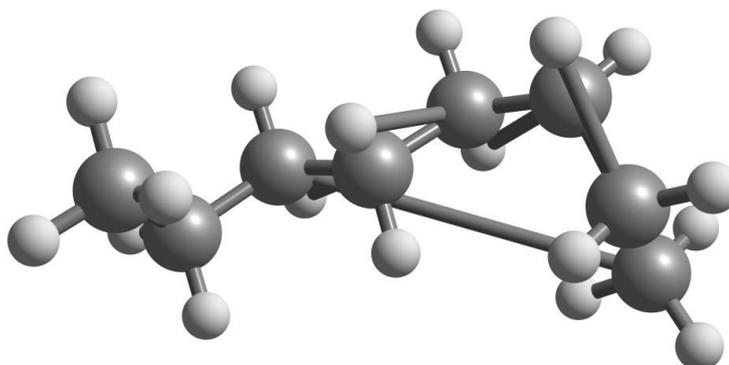
Estructura en 3D optimizada de la molécula 55.



Nota: Chemcraft

Figura 579

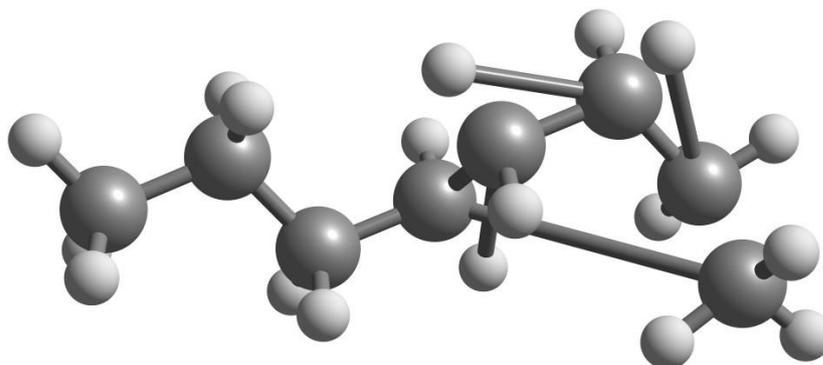
Estructura en 3D optimizada de la molécula 56.



Nota: Chemcraft

Figura 580

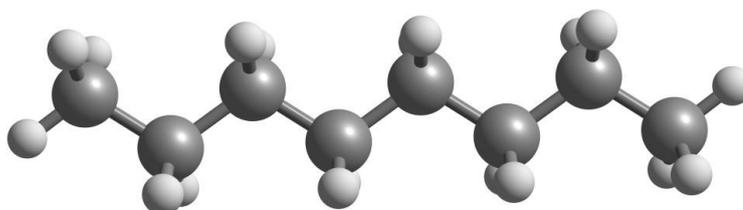
Estructura en 3D optimizada de la molécula 57.



Nota: Chemcraft

Figura 581

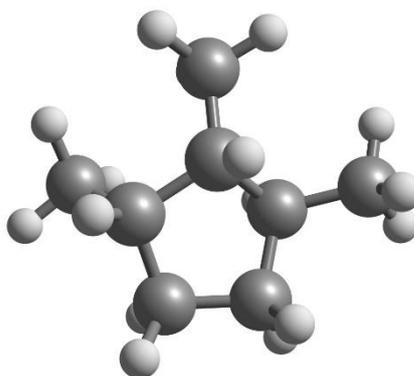
Estructura en 3D optimizada de la molécula 58.



Nota: Chemcraft

Figura 582

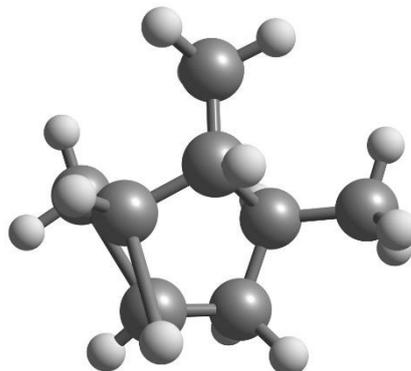
Estructura en 3D optimizada de la molécula 59.



Nota: Chemcraft

Figura 583

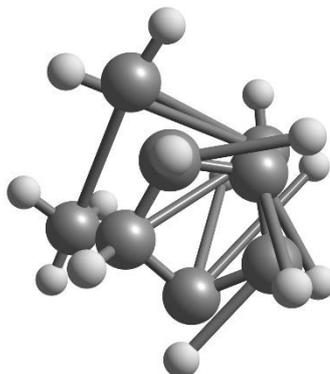
Estructura en 3D optimizada de la molécula 60.



Nota: Chemcraft

Figura 584

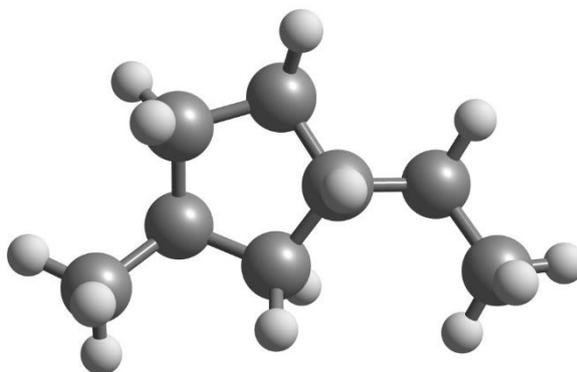
Estructura en 3D optimizada de la molécula 61.



Nota: Chemcraft

Figura 585

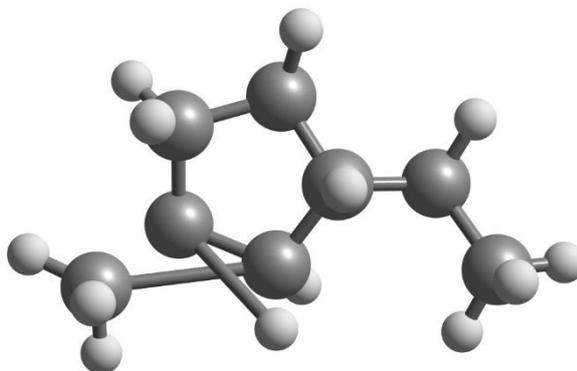
Estructura en 3D optimizada de la molécula 62.



Nota: Chemcraft

Figura 586

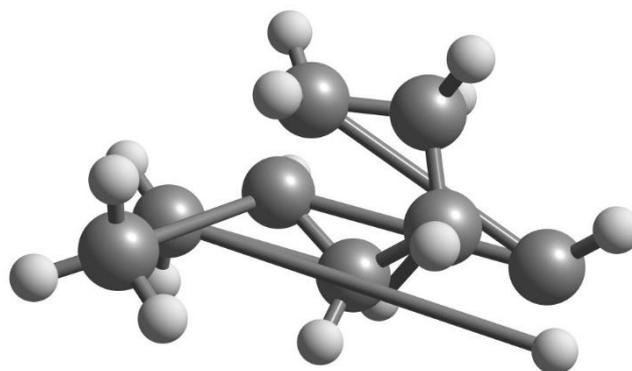
Estructura en 3D optimizada de la molécula 63.



Nota: Chemcraft

Figura 587

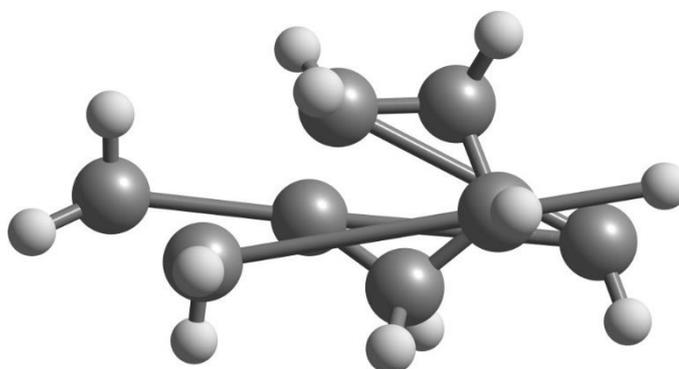
Estructura en 3D optimizada de la molécula 64.



Nota: Chemcraft

Figura 588

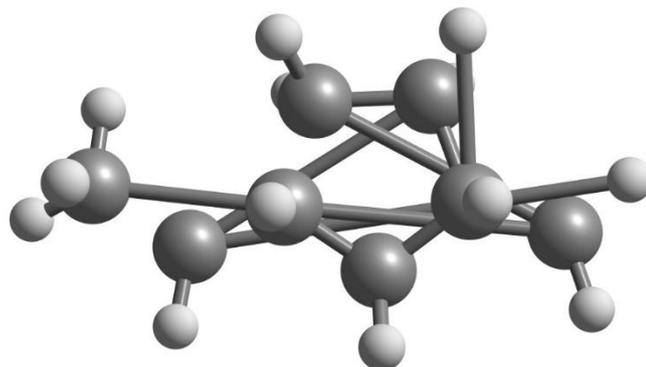
Estructura en 3D optimizada de la molécula 65.



Nota: Chemcraft

Figura 589

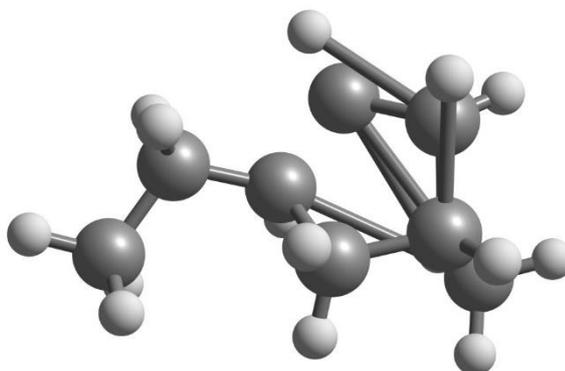
Estructura en 3D optimizada de la molécula 66.



Nota: Chemcraft

Figura 590

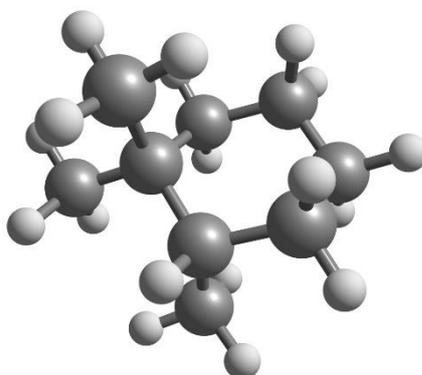
Estructura en 3D optimizada de la molécula 67.



Nota: Chemcraft

Figura 591

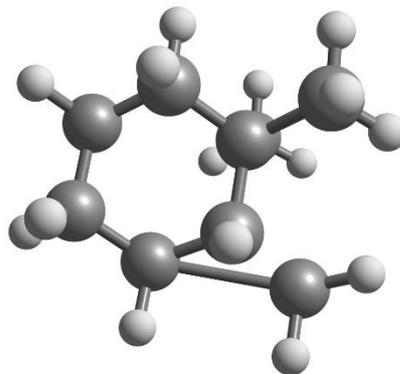
Estructura en 3D optimizada de la molécula 68.



Nota: Chemcraft

Figura 592

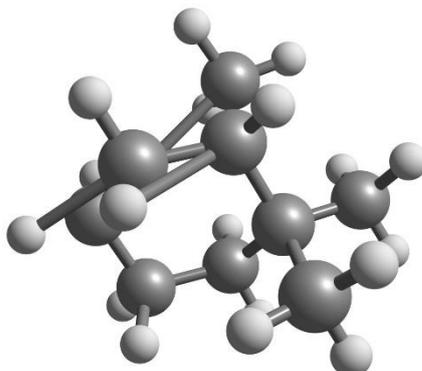
Estructura en 3D optimizada de la molécula 69.



Nota: Chemcraft

Figura 593

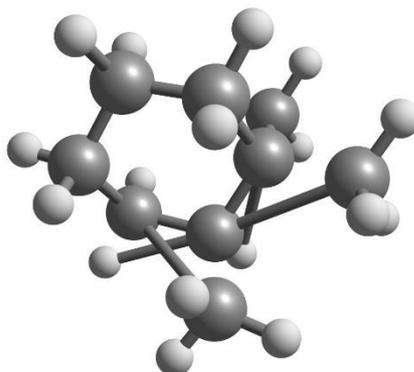
Estructura en 3D optimizada de la molécula 70.



Nota: Chemcraft

Figura 594

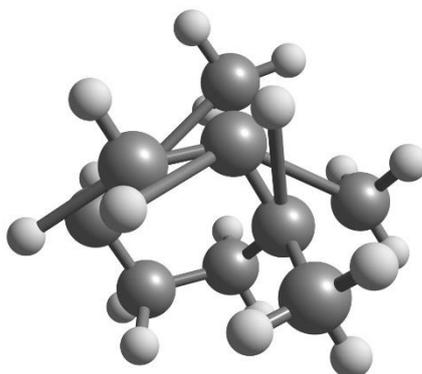
Estructura en 3D optimizada de la molécula 71.



Nota: Chemcraft

Figura 595

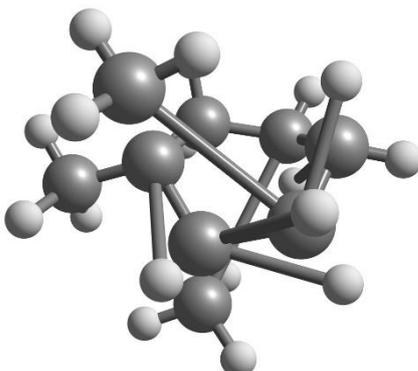
Estructura en 3D optimizada de la molécula 72.



Nota: Chemcraft

Figura 596

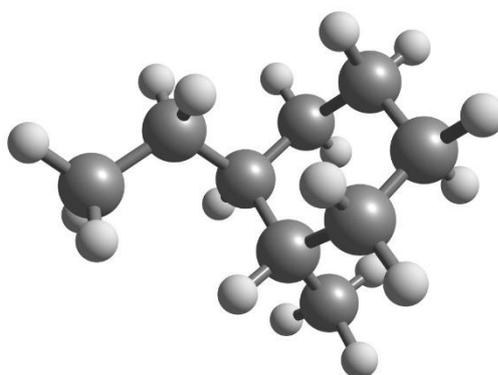
Estructura en 3D optimizada de la molécula 73.



Nota: Chemcraft

Figura 597

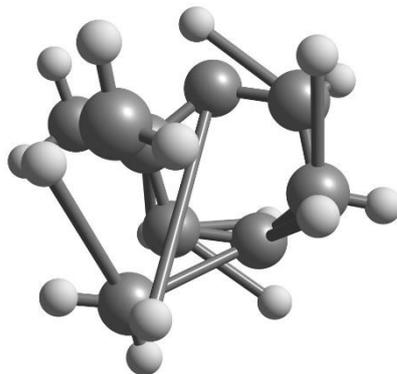
Estructura en 3D optimizada de la molécula 74.



Nota: Chemcraft

Figura 598

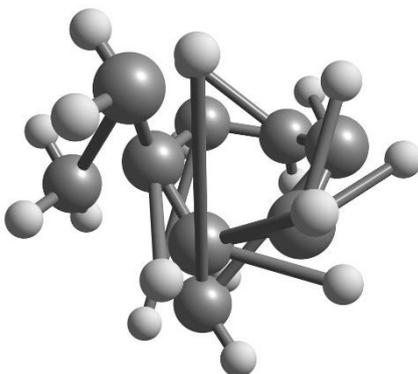
Estructura en 3D optimizada de la molécula 75.



Nota: Chemcraft

Figura 599

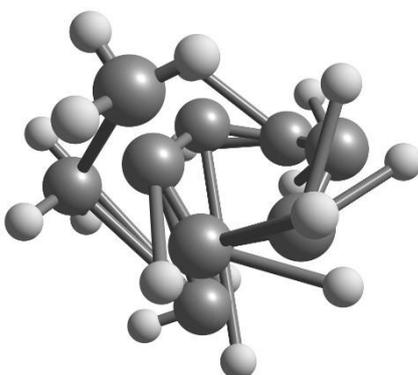
Estructura en 3D optimizada de la molécula 76.



Nota: Chemcraft

Figura 600

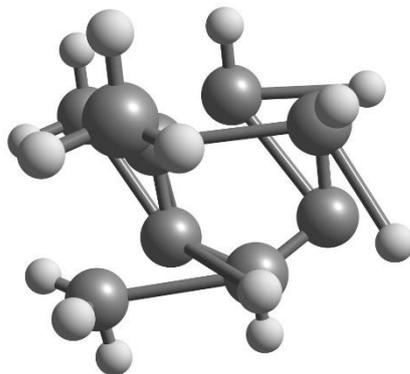
Estructura en 3D optimizada de la molécula 77.



Nota: Chemcraft

Figura 601

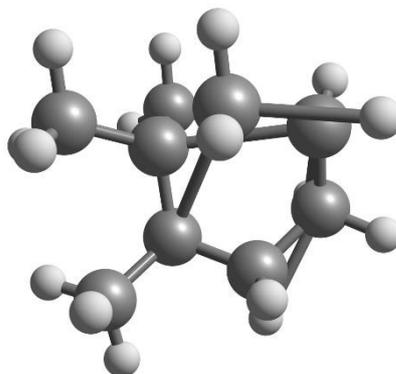
Estructura en 3D optimizada de la molécula 78.



Nota: Chemcraft

Figura 602

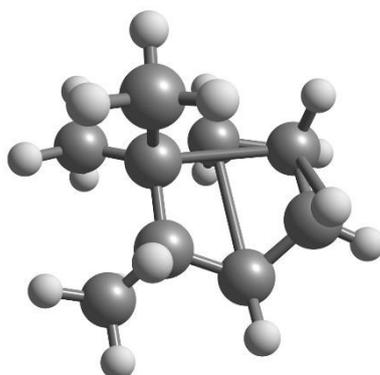
Estructura en 3D optimizada de la molécula 79.



Nota: Chemcraft

Figura 603

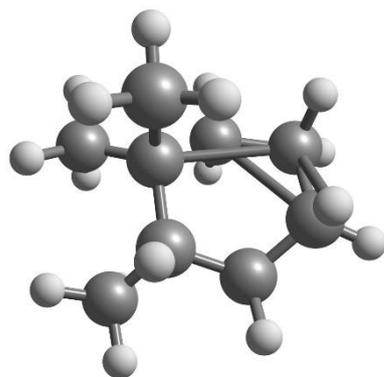
Estructura en 3D optimizada de la molécula 80.



Nota: Chemcraft

Figura 604

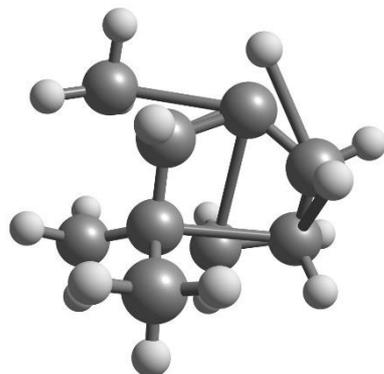
Estructura en 3D optimizada de la molécula 81.



Nota: Chemcraft

Figura 605

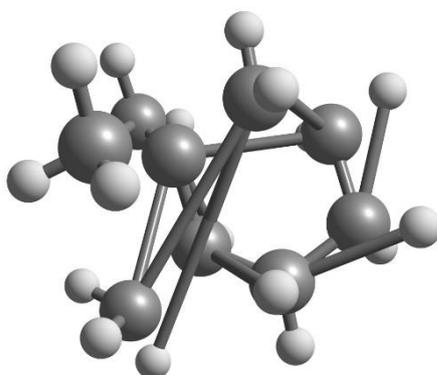
Estructura en 3D optimizada de la molécula 82.



Nota: Chemcraft

Figura 606

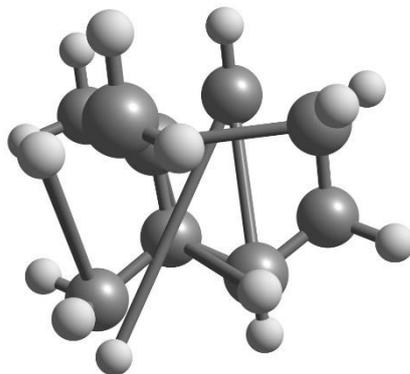
Estructura en 3D optimizada de la molécula 83.



Nota: Chemcraft

Figura 607

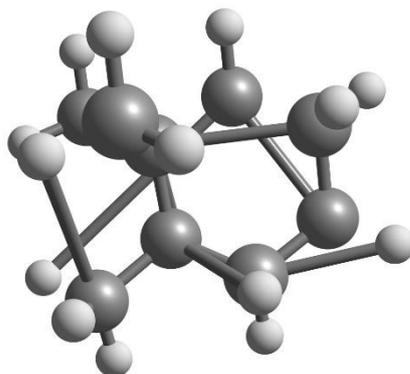
Estructura en 3D optimizada de la molécula 84.



Nota: Chemcraft

Figura 608

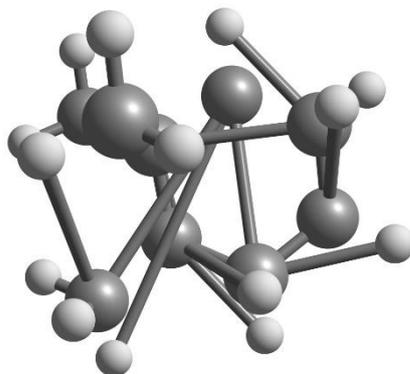
Estructura en 3D optimizada de la molécula 85.



Nota: Chemcraft

Figura 609

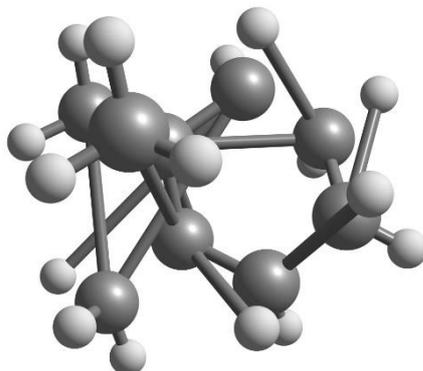
Estructura en 3D optimizada de la molécula 86.



Nota: Chemcraft

Figura 610

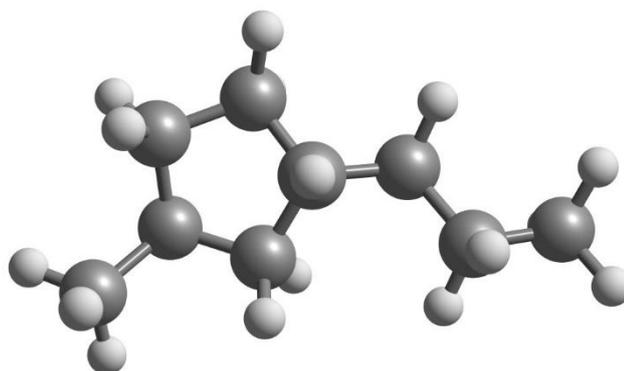
Estructura en 3D optimizada de la molécula 87.



Nota: Chemcraft

Figura 611

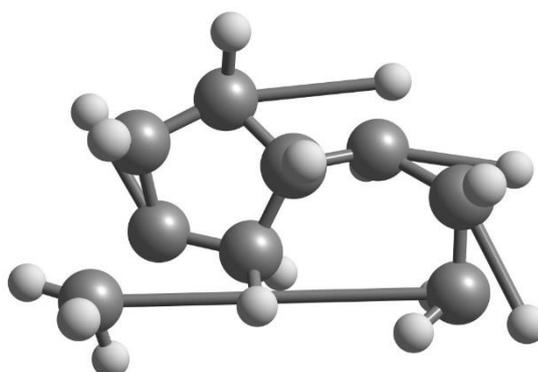
Estructura en 3D optimizada de la molécula 88.



Nota: Chemcraft

Figura 612

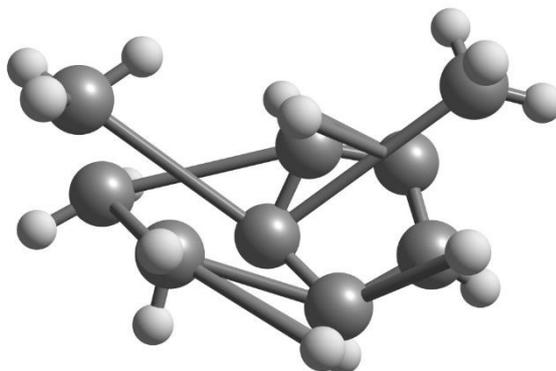
Estructura en 3D optimizada de la molécula 89.



Nota: Chemcraft

Figura 613

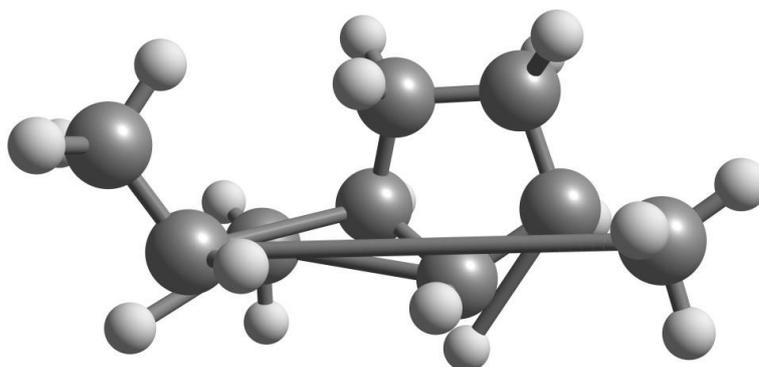
Estructura en 3D optimizada de la molécula 90.



Nota: Chemcraft

Figura 614

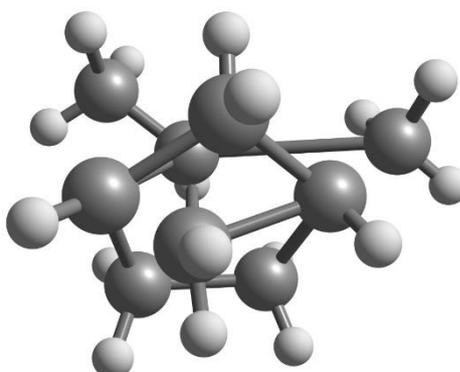
Estructura en 3D optimizada de la molécula 91.



Nota: Chemcraft

Figura 615

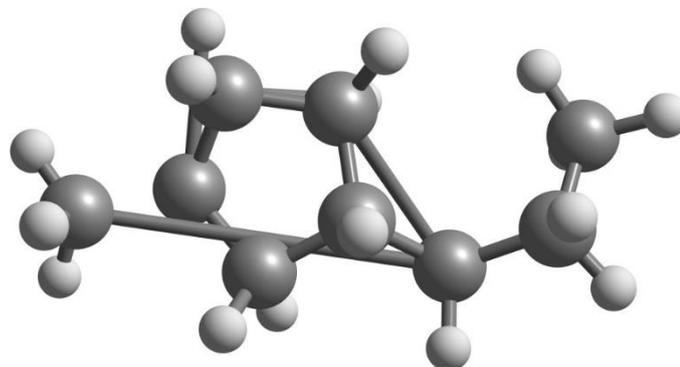
Estructura en 3D optimizada de la molécula 92.



Nota: Chemcraft

Figura 616

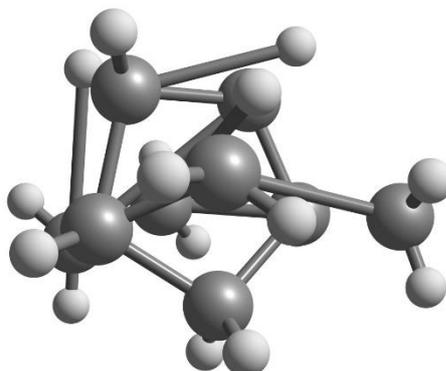
Estructura en 3D optimizada de la molécula 93.



Nota: Chemcraft

Figura 617

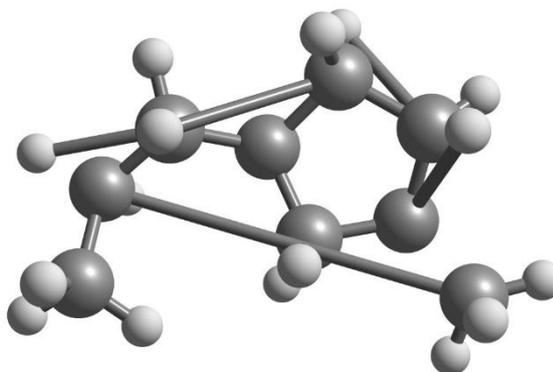
Estructura en 3D optimizada de la molécula 94.



Nota: Chemcraft

Figura 618

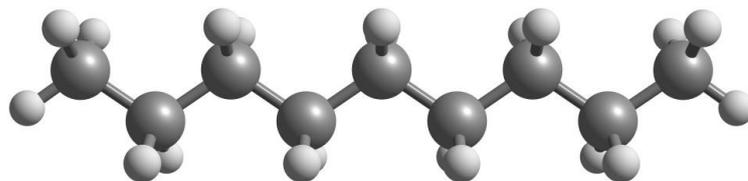
Estructura en 3D optimizada de la molécula 95.



Nota: Chemcraft

Figura 619

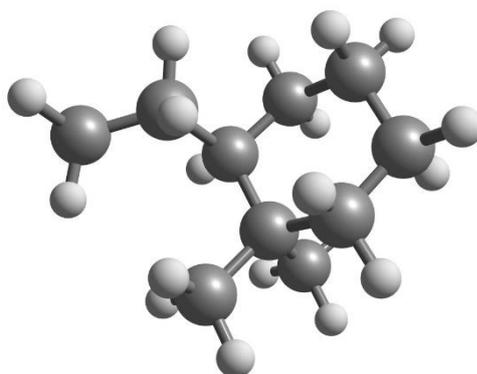
Estructura en 3D optimizada de la molécula 96.



Nota: Chemcraft

Figura 620

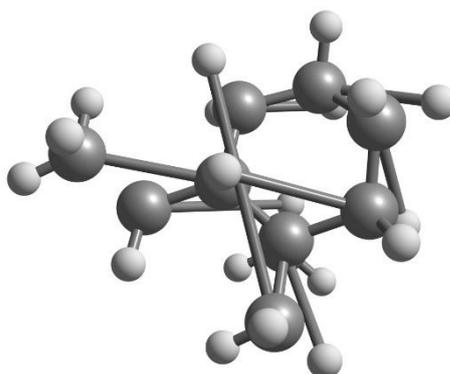
Estructura en 3D optimizada de la molécula 97.



Nota: Chemcraft

Figura 621

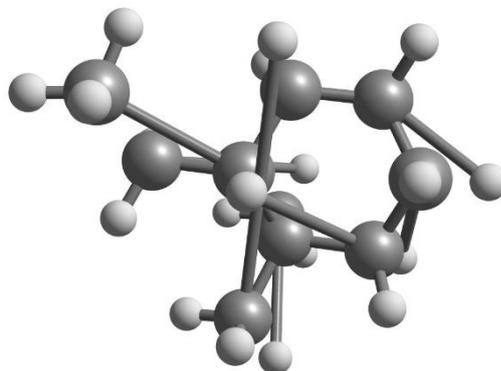
Estructura en 3D optimizada de la molécula 98.



Nota: Chemcraft

Figura 622

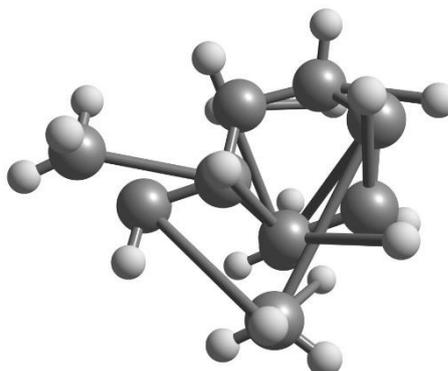
Estructura en 3D optimizada de la molécula 99.



Nota: Chemcraft

Figura 623

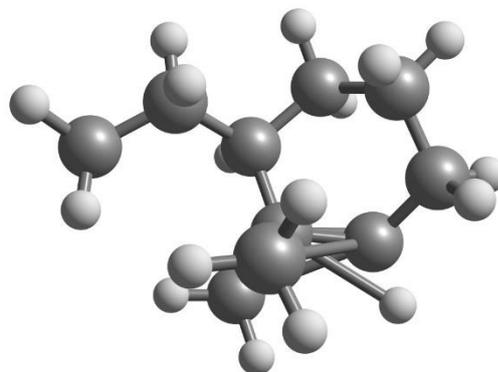
Estructura en 3D optimizada de la molécula 100.



Nota: Chemcraft

Figura 624

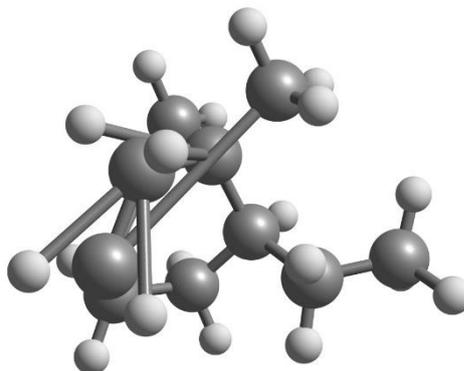
Estructura en 3D optimizada de la molécula 101.



Nota: Chemcraft

Figura 625

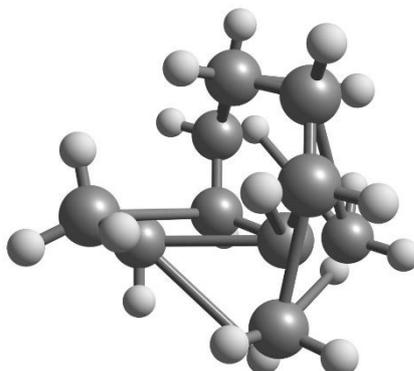
Estructura en 3D optimizada de la molécula 102.



Nota: Chemcraft

Figura 626

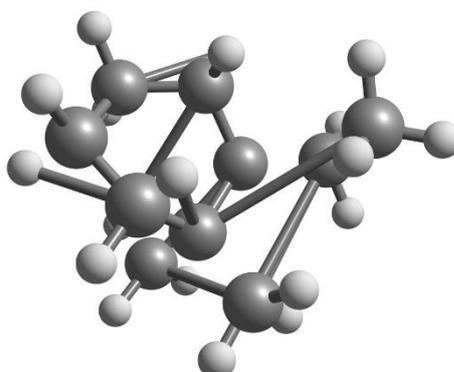
Estructura en 3D optimizada de la molécula 103.



Nota: Chemcraft

Figura 627

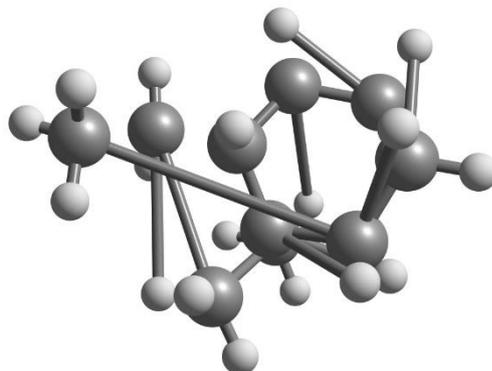
Estructura en 3D optimizada de la molécula 104.



Nota: Chemcraft

Figura 628

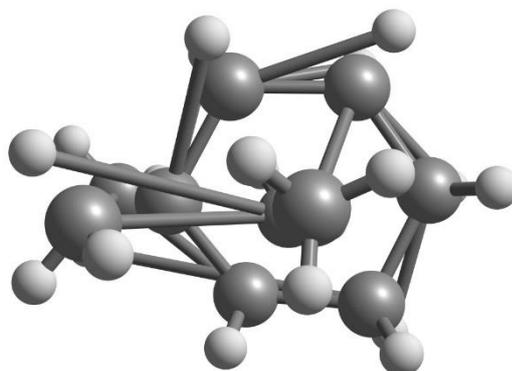
Estructura en 3D optimizada de la molécula 105.



Nota: Chemcraft

Figura 629

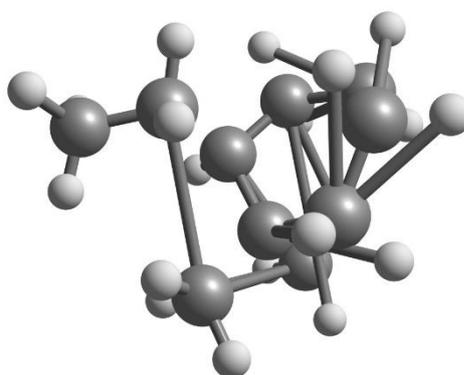
Estructura en 3D optimizada de la molécula 106.



Nota: Chemcraft

Figura 630

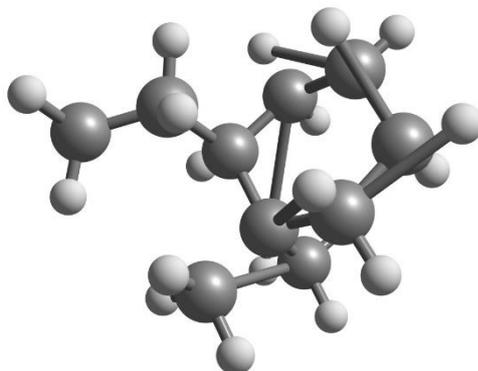
Estructura en 3D optimizada de la molécula 107.



Nota: Chemcraft

Figura 631

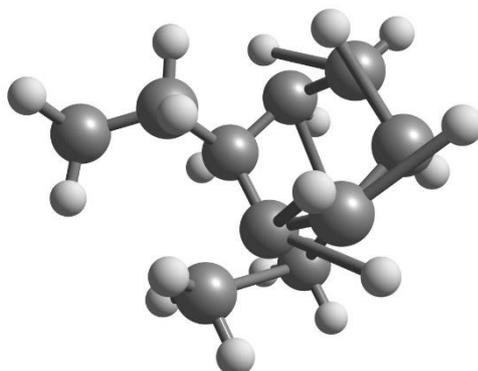
Estructura en 3D optimizada de la molécula 108.



Nota: Chemcraft

Figura 632

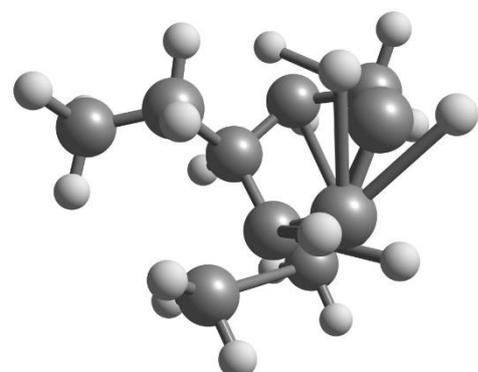
Estructura en 3D optimizada de la molécula 109.



Nota: Chemcraft

Figura 633

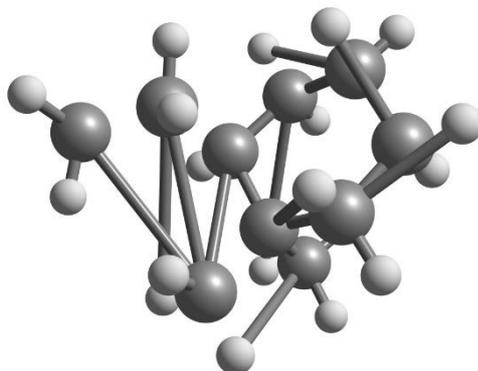
Estructura en 3D optimizada de la molécula 110.



Nota: Chemcraft

Figura 634

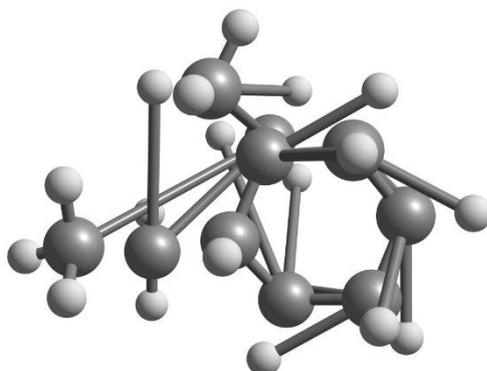
Estructura en 3D optimizada de la molécula 111.



Nota: Chemcraft

Figura 635

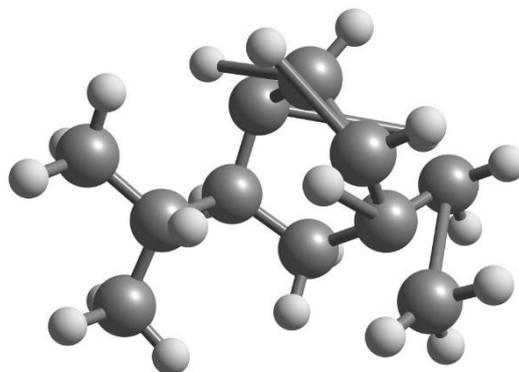
Estructura en 3D optimizada de la molécula 112.



Nota: Chemcraft

Figura 636

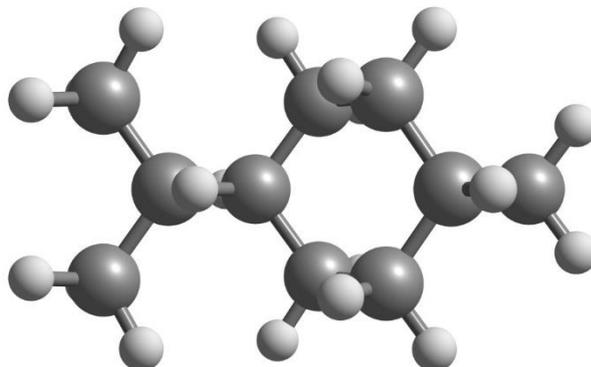
Estructura en 3D optimizada de la molécula 113.



Nota: Chemcraft.

Figura 637

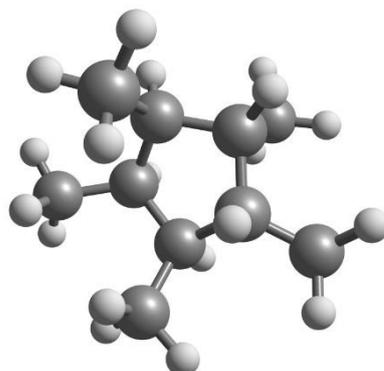
Estructura en 3D optimizada de la molécula 114.



Nota: Chemcraft.

Figura 638

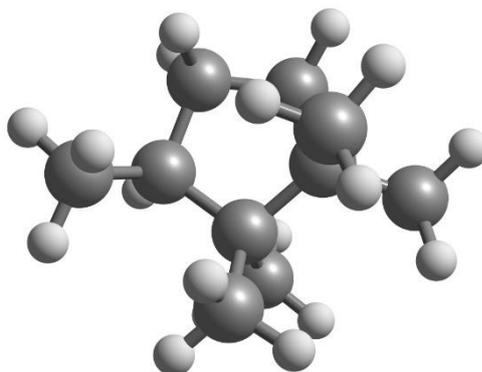
Estructura en 3D optimizada de la molécula 115.



Nota: Chemcraft.

Figura 639

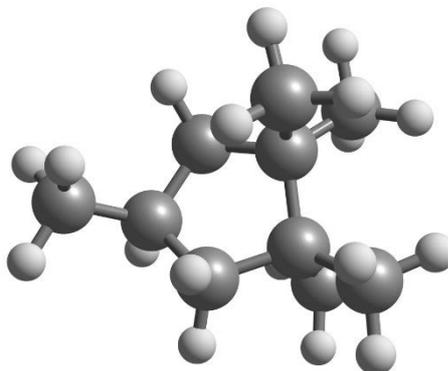
Estructura en 3D optimizada de la molécula 116.



Nota: Chemcraft.

Figura 640

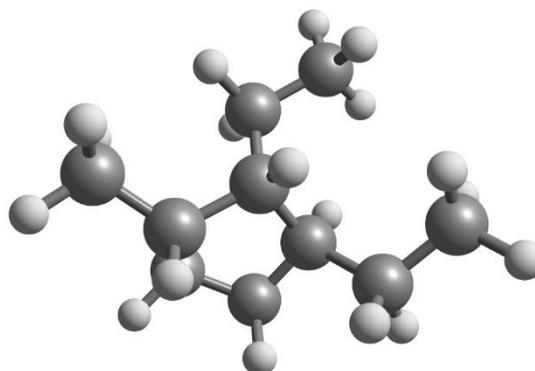
Estructura en 3D optimizada de la molécula 117.



Nota: Chemcraft.

Figura 641

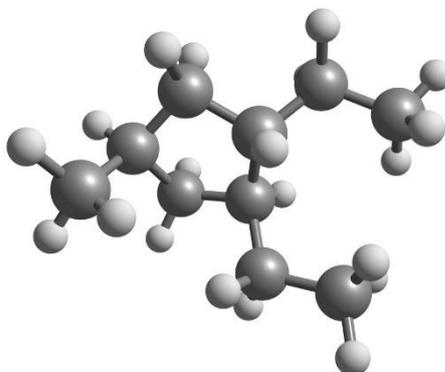
Estructura en 3D optimizada de la molécula 118.



Nota: Chemcraft.

Figura 642

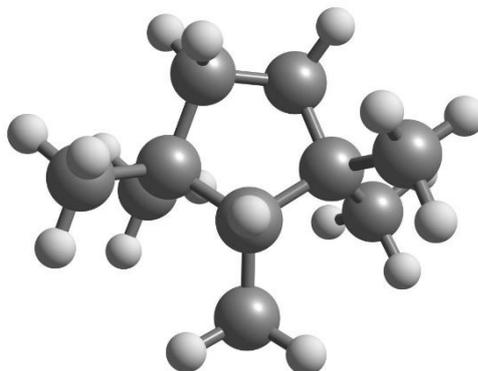
Estructura en 3D optimizada de la molécula 119.



Nota: Chemcraft.

Figura 643

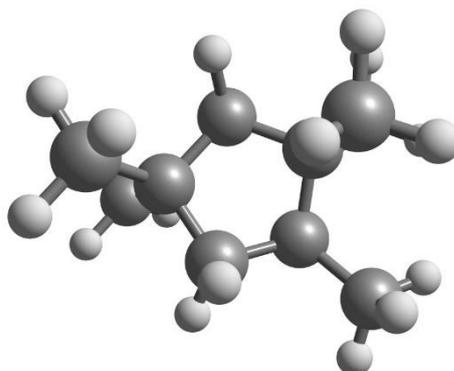
Estructura en 3D optimizada de la molécula 120.



Nota: Chemcraft.

Figura 644

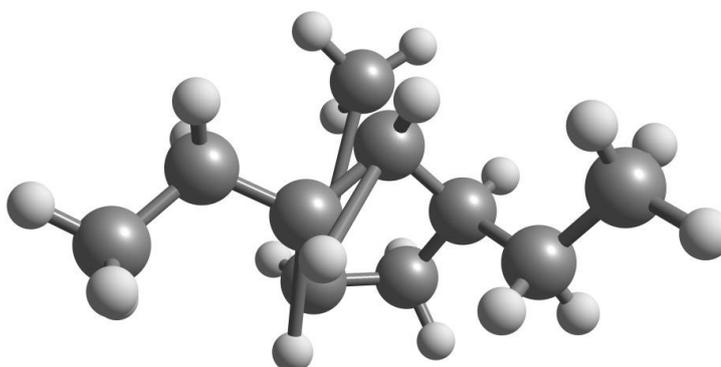
Estructura en 3D optimizada de la molécula 121.



Nota: Chemcraft.

Figura 645

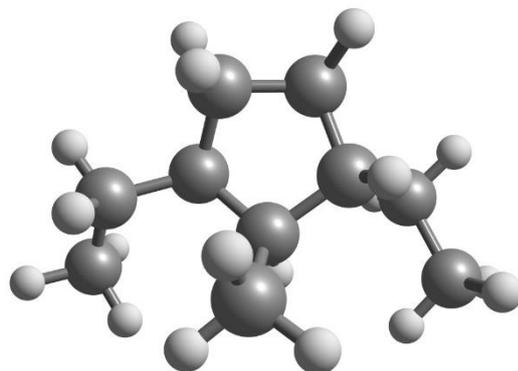
Estructura en 3D optimizada de la molécula 122.



Nota: Chemcraft.

Figura 646

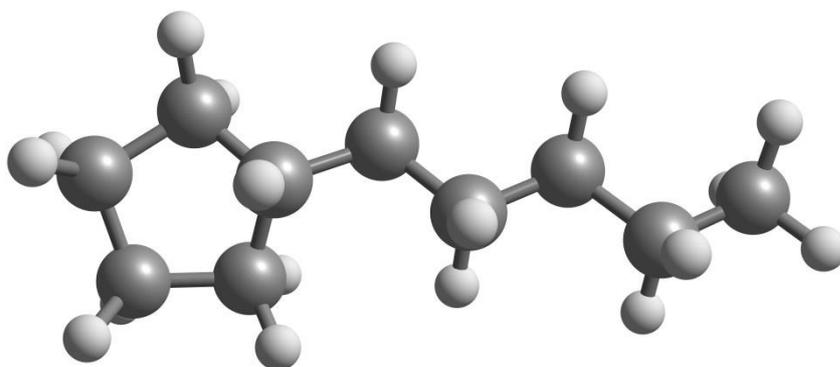
Estructura en 3D optimizada de la molécula 123.



Nota: Chemcraft.

Figura 647

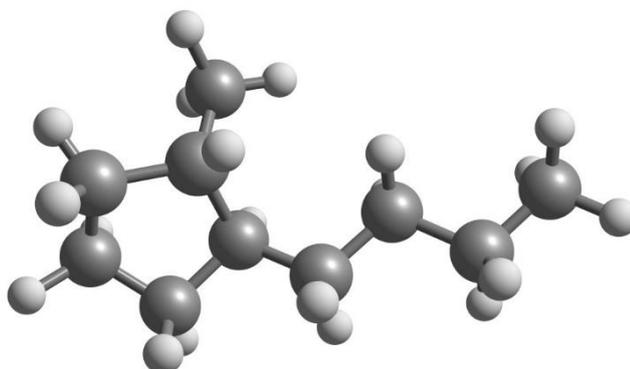
Estructura en 3D optimizada de la molécula 124.



Nota: Chemcraft.

Figura 648

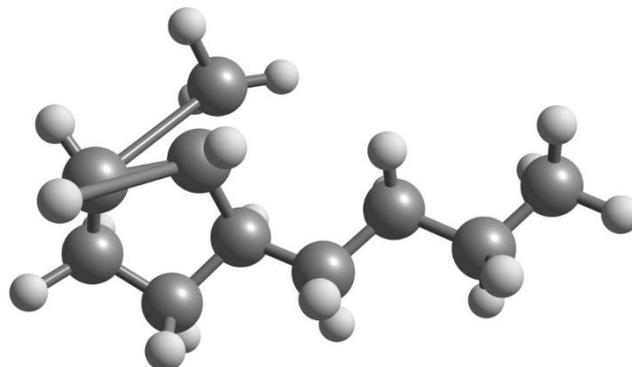
Estructura en 3D optimizada de la molécula 125.



Nota: Chemcraft.

Figura 649

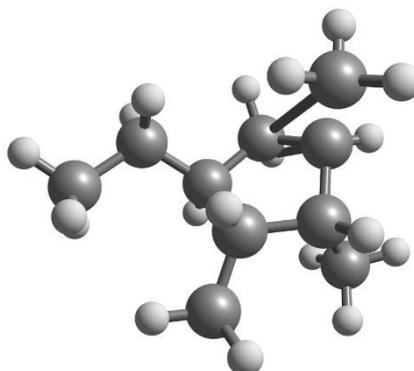
Estructura en 3D optimizada de la molécula 126.



Nota: Chemcraft.

Figura 650

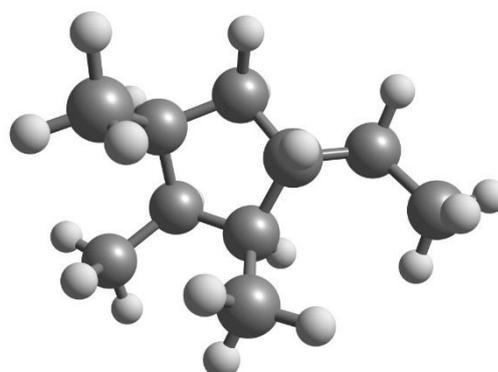
Estructura en 3D optimizada de la molécula 127



Nota: Chemcraft.

Figura 651

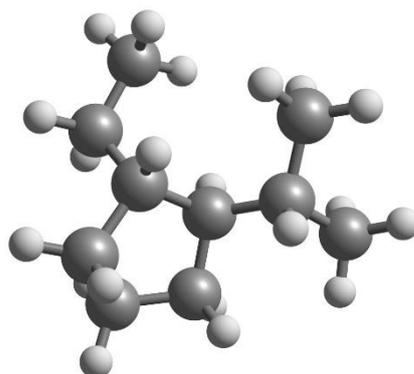
Estructura en 3D optimizada de la molécula 128.



Nota: Chemcraft.

Figura 652

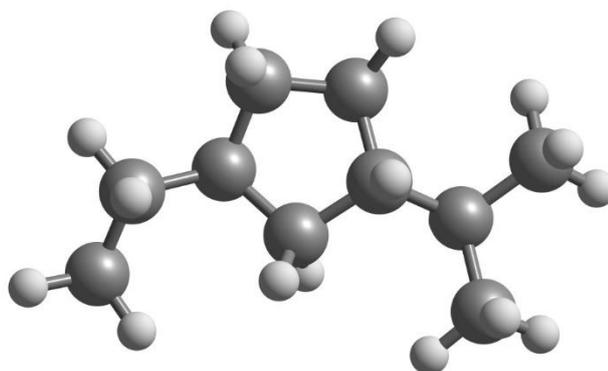
Estructura en 3D optimizada de la molécula 129.



Nota: Chemcraft.

Figura 653

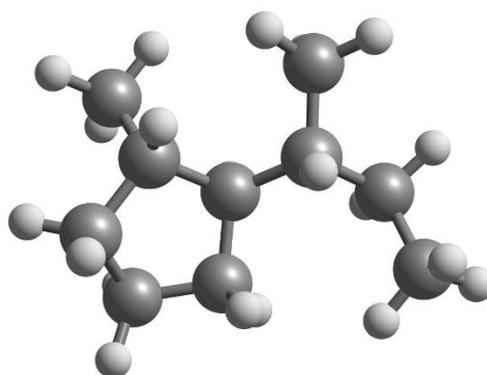
Estructura en 3D optimizada de la molécula 130.



Nota: Chemcraft.

Figura 654

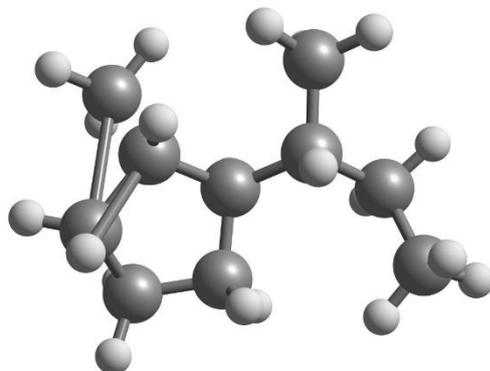
Estructura en 3D optimizada de la molécula 131.



Nota: Chemcraft.

Figura 655

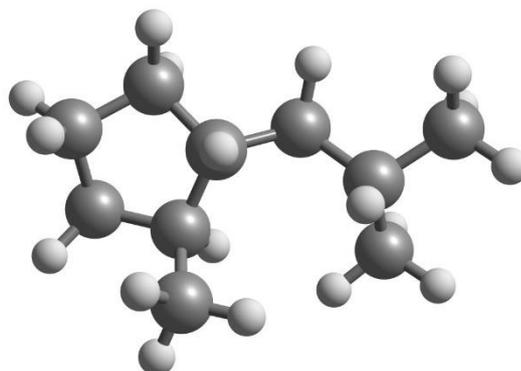
Estructura en 3D optimizada de la molécula 132.



Nota: Chemcraft.

Figura 656

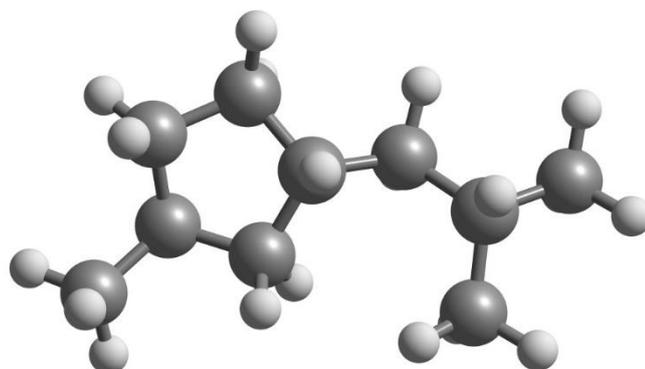
Estructura en 3D optimizada de la molécula 133.



Nota: Chemcraft.

Figura 657

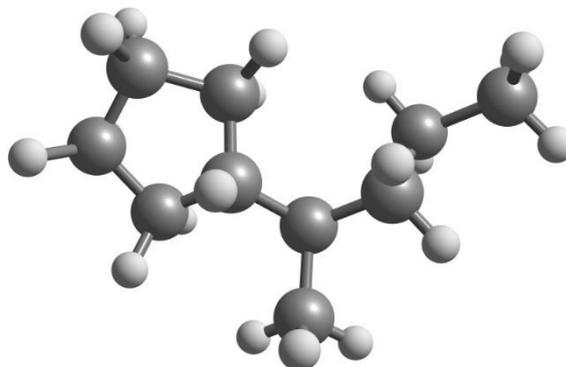
Estructura en 3D optimizada de la molécula 134.



Nota: Chemcraft.

Figura 658

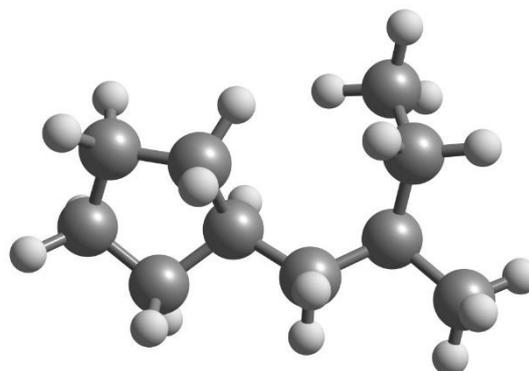
Estructura en 3D optimizada de la molécula 135.



Nota: Chemcraft.

Figura 659

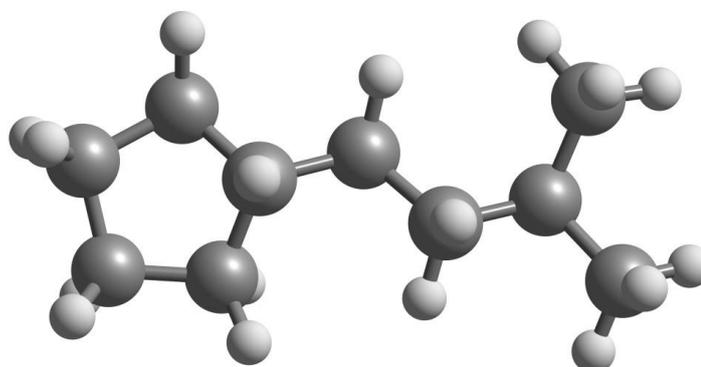
Estructura en 3D optimizada de la molécula 136.



Nota: Chemcraft.

Figura 660

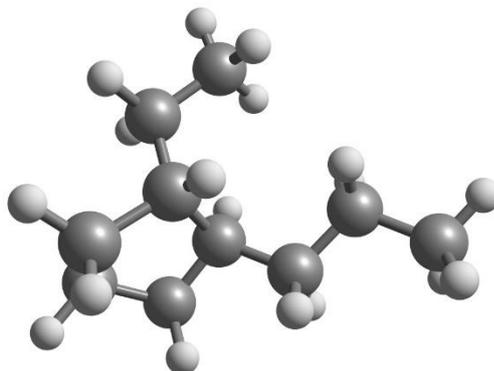
Estructura en 3D optimizada de la molécula 137.



Nota: Chemcraft.

Figura 661

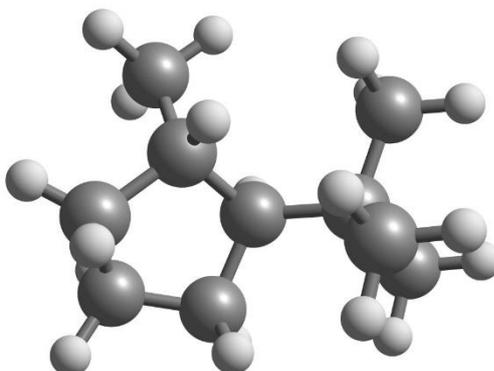
Estructura en 3D optimizada de la molécula 138.



Nota: Chemcraft.

Figura 662

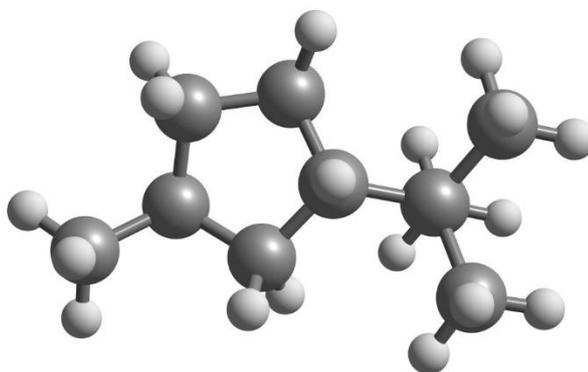
Estructura en 3D optimizada de la molécula 139.



Nota: Chemcraft.

Figura 663

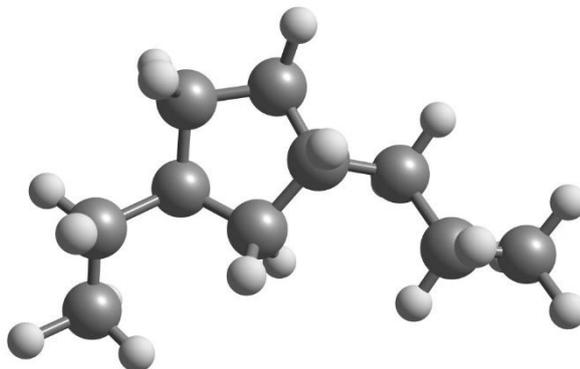
Estructura en 3D optimizada de la molécula 140.



Nota: Chemcraft.

Figura 664

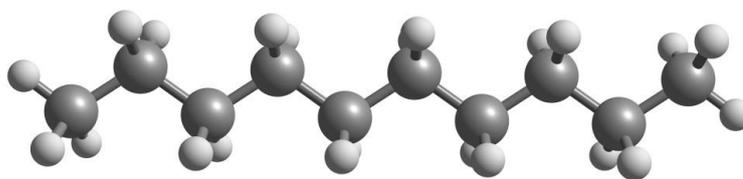
Estructura en 3D optimizada de la molécula 141.



Nota: Chemcraft.

Figura 665

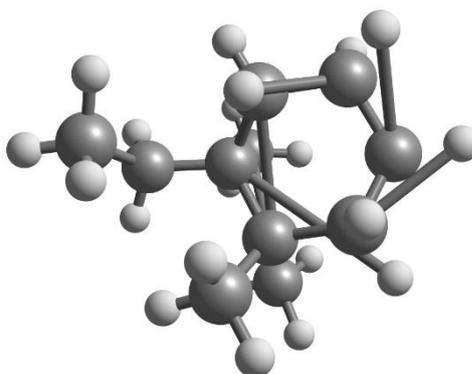
Estructura en 3D optimizada de la molécula 142.



Nota: Chemcraft.

Figura 666

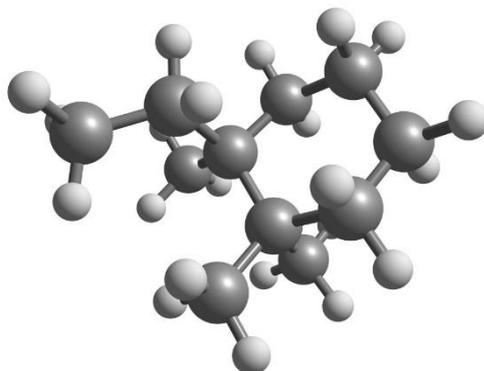
Estructura en 3D optimizada de la molécula 143.



Nota: Chemcraft.

Figura 667

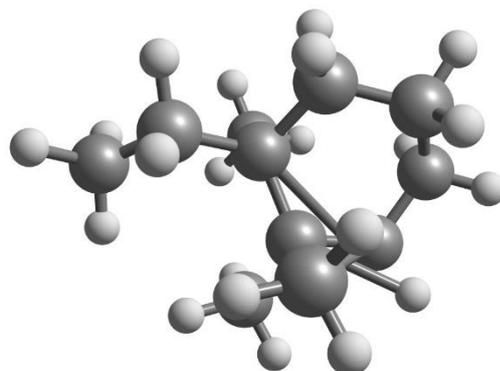
Estructura en 3D optimizada de la molécula 144.



Nota: Chemcraft.

Figura 668

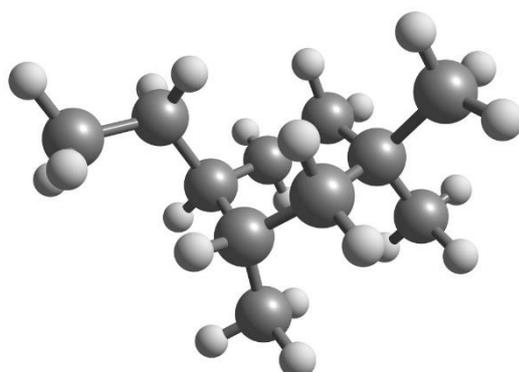
Estructura en 3D optimizada de la molécula 145.



Nota: Chemcraft.

Figura 669

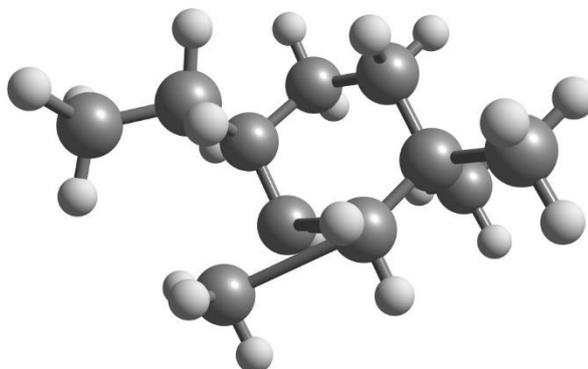
Estructura en 3D optimizada de la molécula 146.



Nota: Chemcraft.

Figura 670

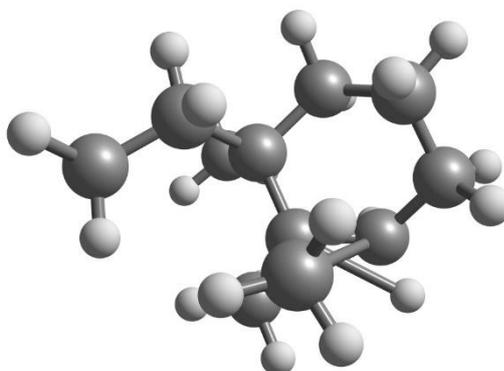
Estructura en 3D optimizada de la molécula 147.



Nota: Chemcraft.

Figura 671

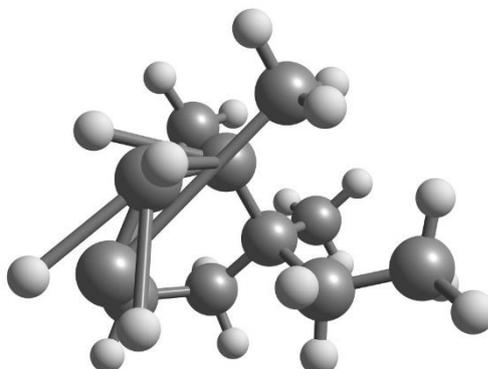
Estructura en 3D optimizada de la molécula 148.



Nota: Chemcraft.

Figura 672

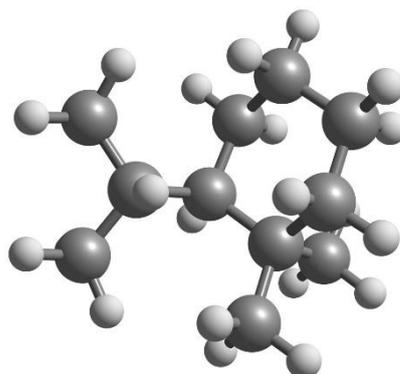
Estructura en 3D optimizada de la molécula 149.



Nota: Chemcraft.

Figura 673

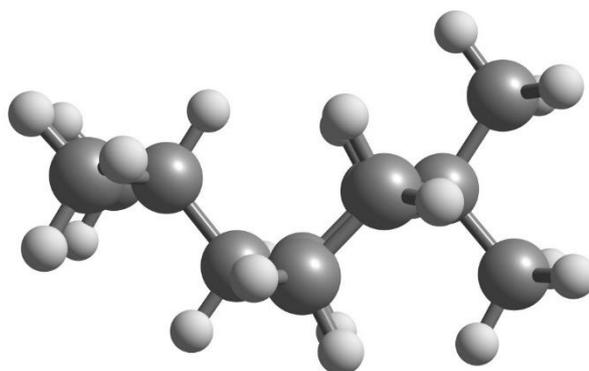
Estructura en 3D optimizada de la molécula 150.



Nota: Chemcraft.

Figura 674

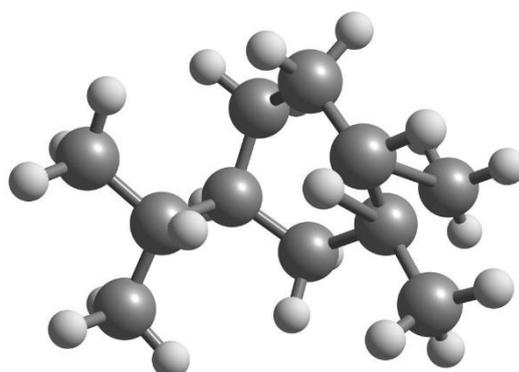
Estructura en 3D optimizada de la molécula 151.



Nota: Chemcraft.

Figura 675

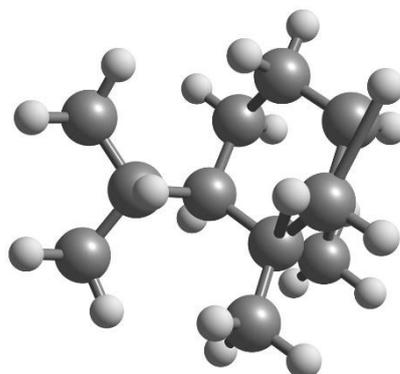
Estructura en 3D optimizada de la molécula 152.



Nota: Chemcraft.

Figura 676

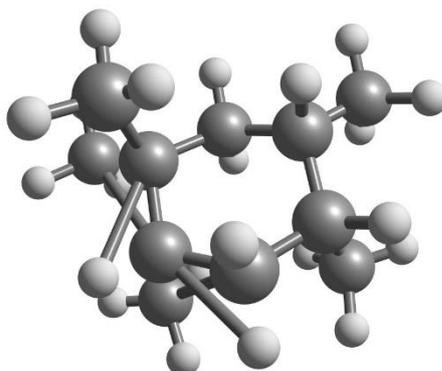
Estructura en 3D optimizada de la molécula 153.



Nota: Chemcraft.

Figura 677

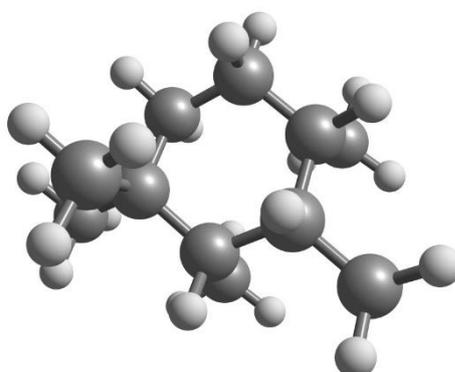
Estructura en 3D optimizada de la molécula 154.



Nota: Chemcraft.

Figura 678

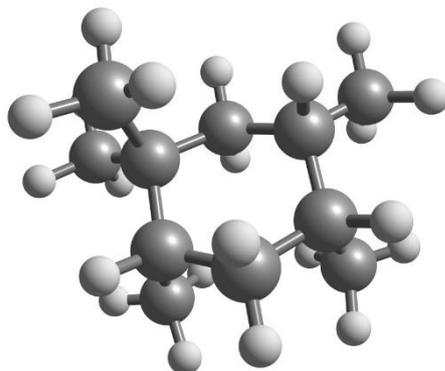
Estructura en 3D optimizada de la molécula 155.



Nota: Chemcraft.

Figura 679

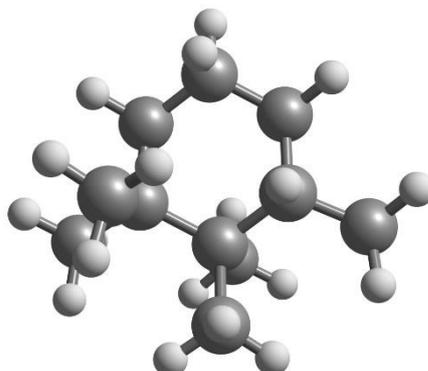
Estructura en 3D optimizada de la molécula 156.



Nota: Chemcraft.

Figura 680

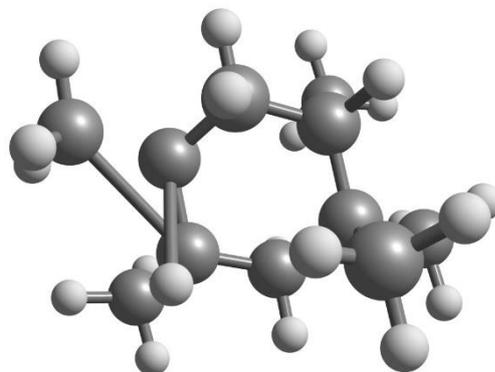
Estructura en 3D optimizada de la molécula 157.



Nota: Chemcraft.

Figura 681

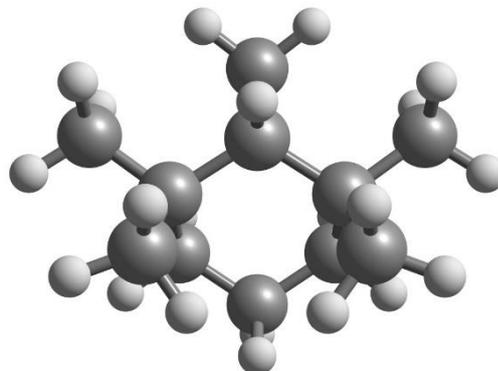
Estructura en 3D optimizada de la molécula 158.



Nota: Chemcraft.

Figura 682

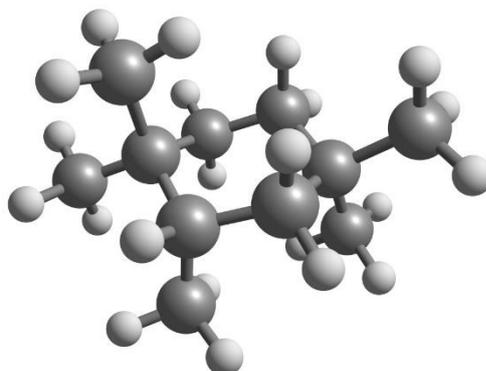
Estructura en 3D optimizada de la molécula 159.



Nota: Chemcraft.

Figura 683

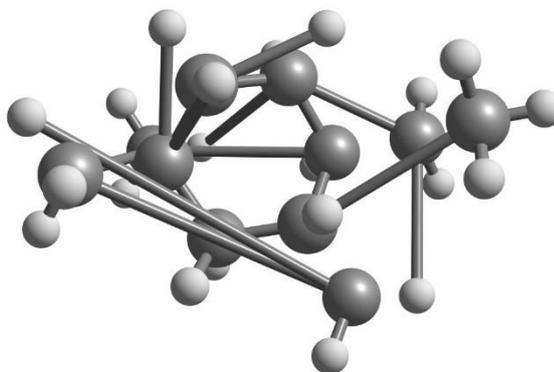
Estructura en 3D optimizada de la molécula 160.



Nota: Chemcraft.

Figura 684

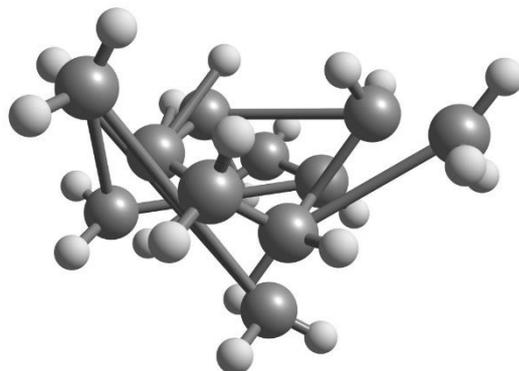
Estructura en 3D optimizada de la molécula 161.



Nota: Chemcraft.

Figura 685

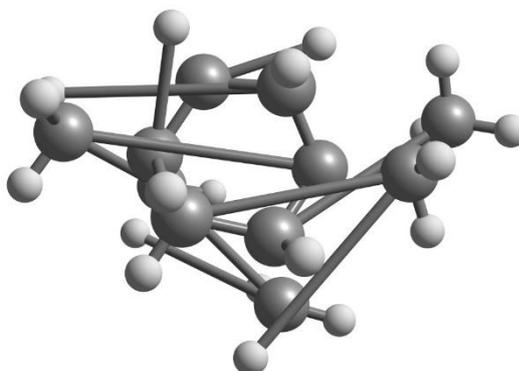
Estructura en 3D optimizada de la molécula 162.



Nota: Chemcraft.

Figura 686

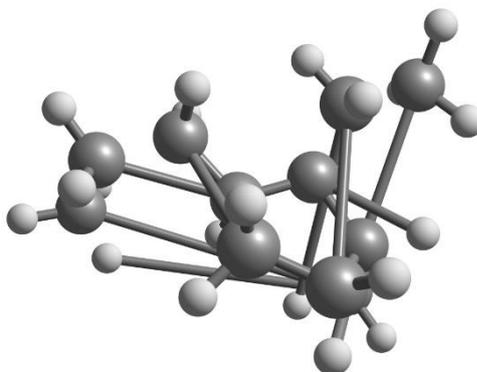
Estructura en 3D optimizada de la molécula 163.



Nota: Chemcraft.

Figura 687

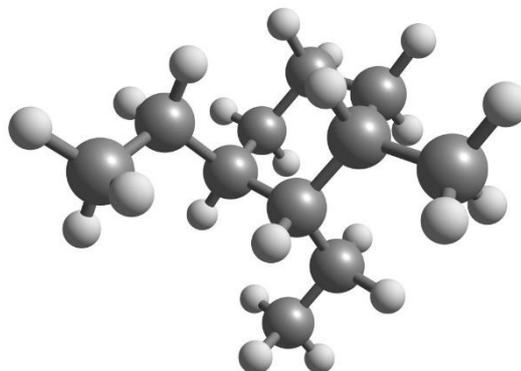
Estructura en 3D optimizada de la molécula 164.



Nota: Chemcraft.

Figura 688

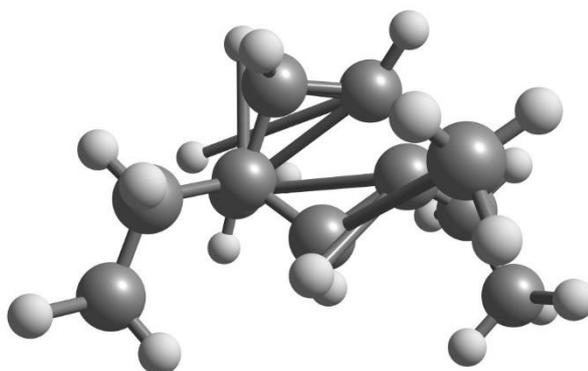
Estructura en 3D optimizada de la molécula 165.



Nota: Chemcraft.

Figura 689

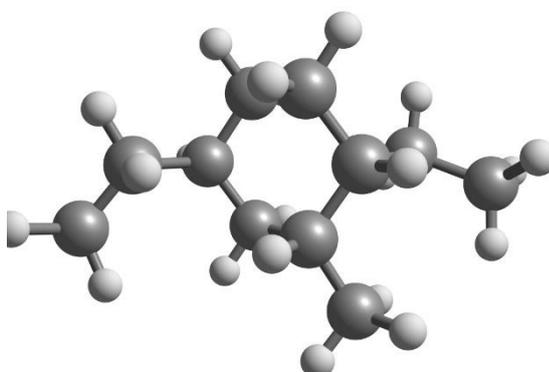
Estructura en 3D optimizada de la molécula 166.



Nota: Chemcraft.

Figura 690

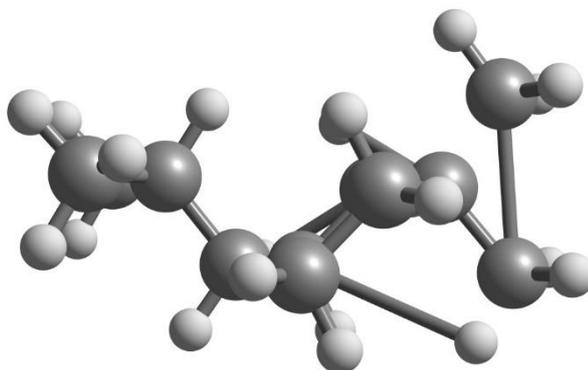
Estructura en 3D optimizada de la molécula 167.



Nota: Chemcraft.

Figura 691

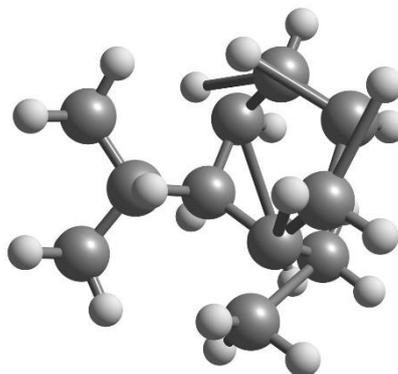
Estructura en 3D optimizada de la molécula 168.



Nota: Chemcraft.

Figura 692

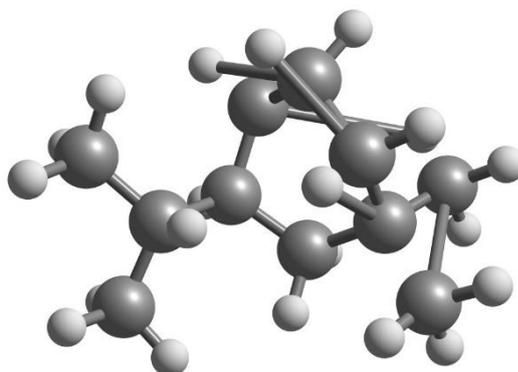
Estructura en 3D optimizada de la molécula 169.



Nota: Chemcraft.

Figura 693

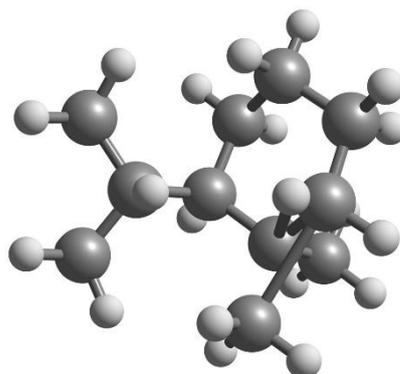
Estructura en 3D optimizada de la molécula 170.



Nota: Chemcraft.

Figura 694

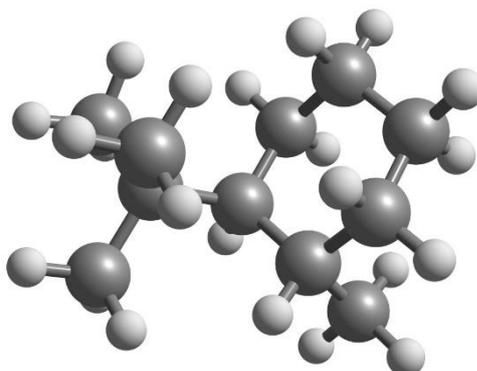
Estructura en 3D optimizada de la molécula 171.



Nota: Chemcraft.

Figura 695

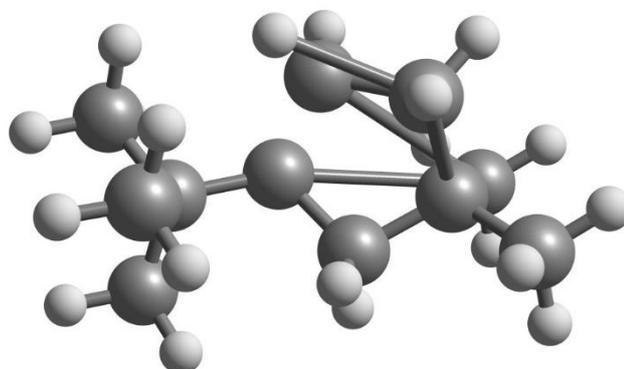
Estructura en 3D optimizada de la molécula 172.



Nota: Chemcraft.

Figura 696

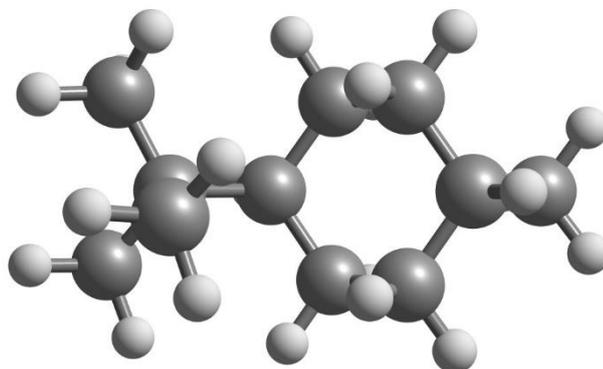
Estructura en 3D optimizada de la molécula 173.



Nota: Chemcraft.

Figura 697

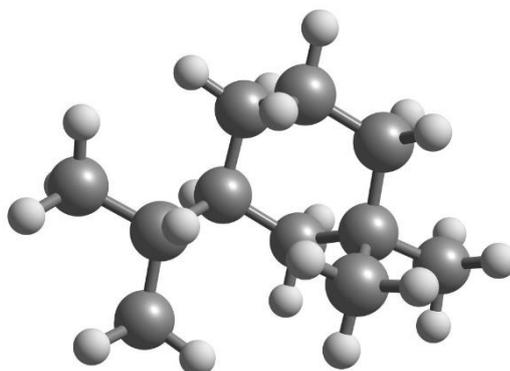
Estructura en 3D optimizada de la molécula 174.



Nota: Chemcraft.

Figura 698

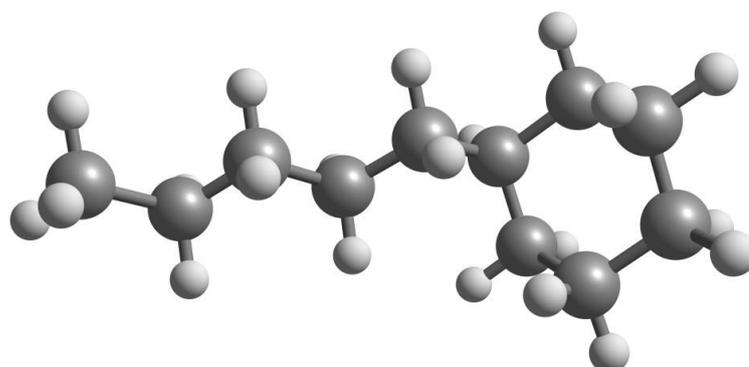
Estructura en 3D optimizada de la molécula 175.



Nota: Chemcraft.

Figura 699

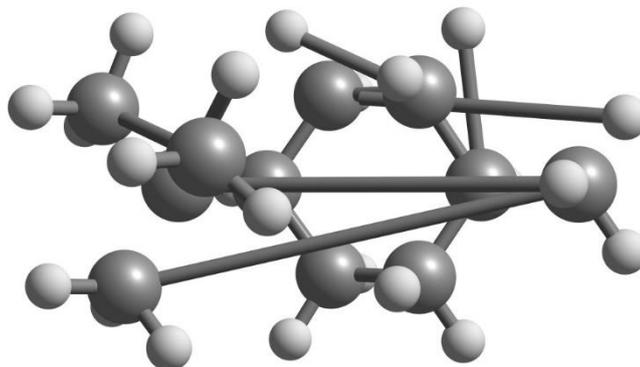
Estructura en 3D optimizada de la molécula 176.



Nota: Chemcraft.

Figura 700

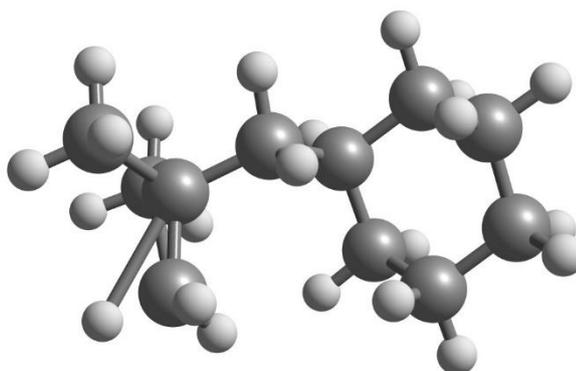
Estructura en 3D optimizada de la molécula 177.



Nota: Chemcraft.

Figura 701

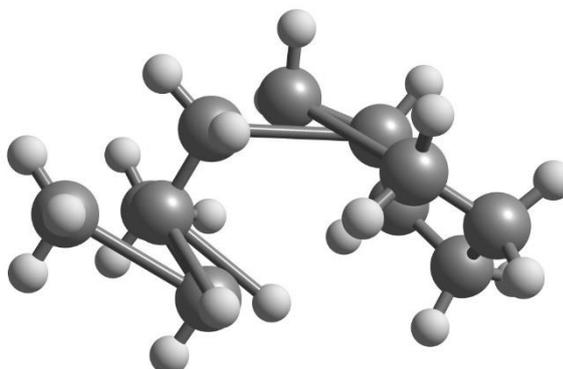
Estructura en 3D optimizada de la molécula 178.



Nota: Chemcraft.

Figura 702

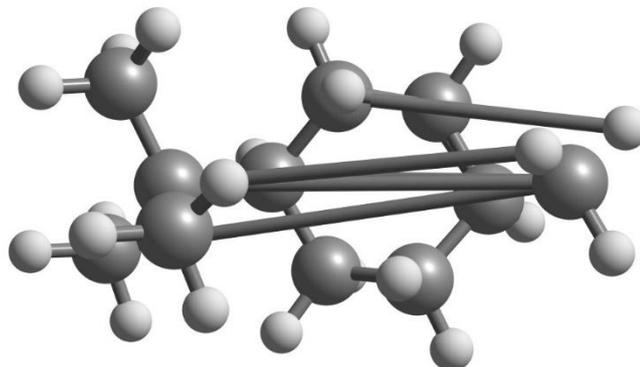
Estructura en 3D optimizada de la molécula 179.



Nota: Chemcraft.

Figura 703

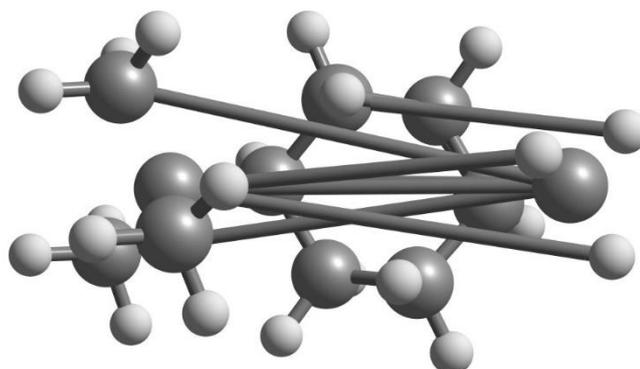
Estructura en 3D optimizada de la molécula 180.



Nota: Chemcraft.

Figura 704

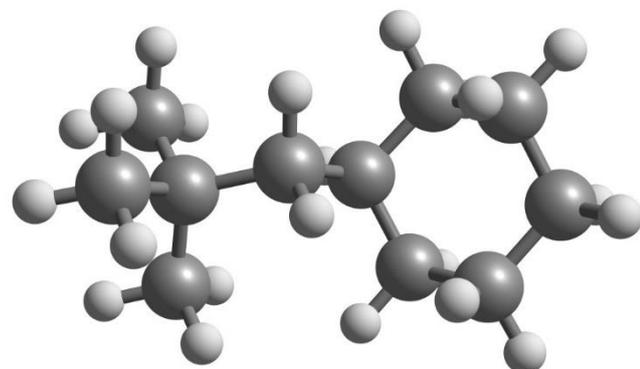
Estructura en 3D optimizada de la molécula 181.



Nota: Chemcraft.

Figura 705

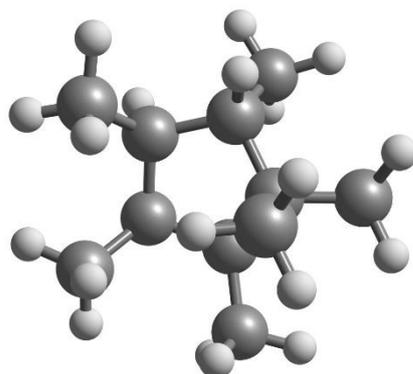
Estructura en 3D optimizada de la molécula 182.



Nota: Chemcraft.

Figura 706

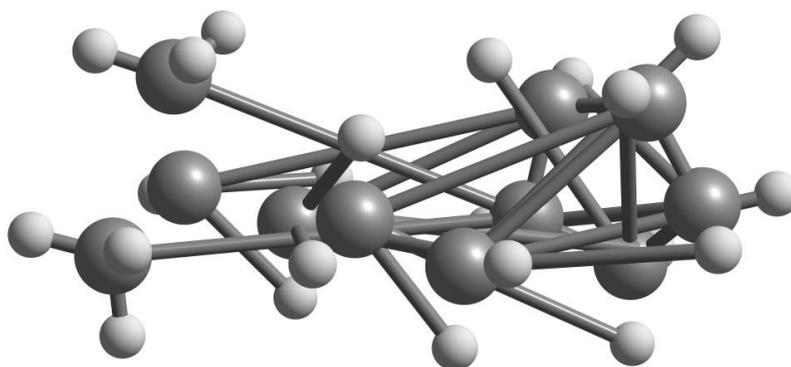
Estructura en 3D optimizada de la molécula 183.



Nota: Chemcraft.

Figura 707

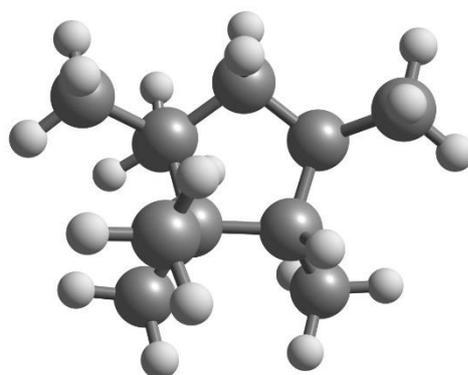
Estructura en 3D optimizada de la molécula 184



Nota: Chemcraft.

Figura 708

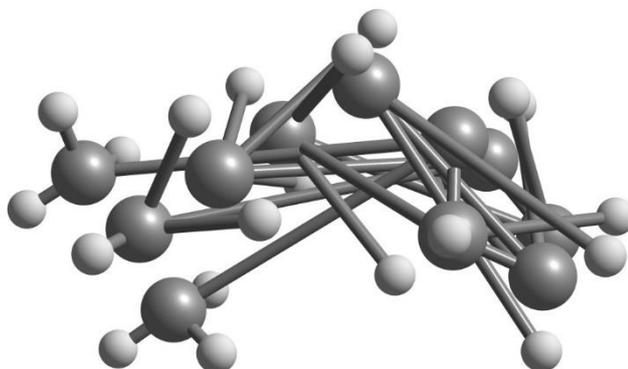
Estructura en 3D optimizada de la molécula 185.



Nota: Chemcraft.

Figura 709

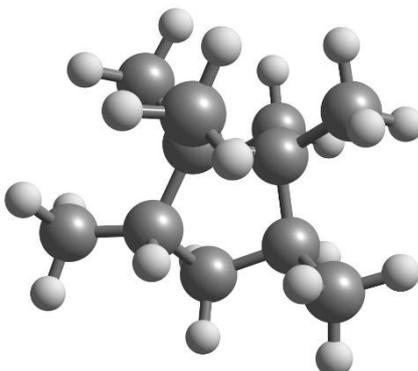
Estructura en 3D optimizada de la molécula 186.



Nota: Chemcraft.

Figura 710

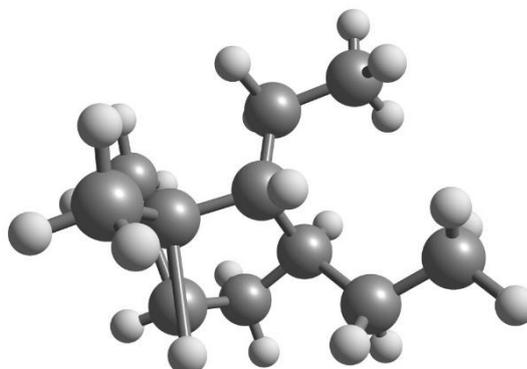
Estructura en 3D optimizada de la molécula 187.



Nota: Chemcraft.

Figura 711

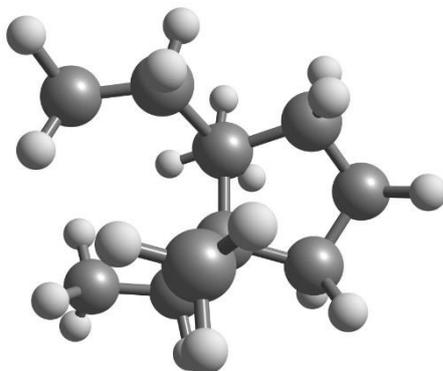
Estructura en 3D optimizada de la molécula 188.



Nota: Chemcraft.

Figura 712

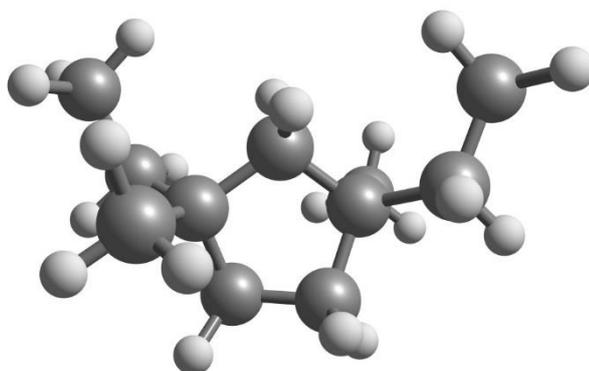
Estructura en 3D optimizada de la molécula 189.



Nota: Chemcraft.

Figura 713

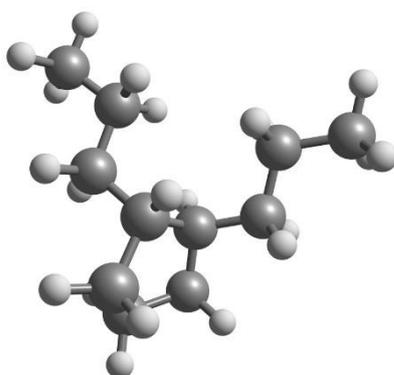
Estructura en 3D optimizada de la molécula 190.



Nota: Chemcraft.

Figura 714

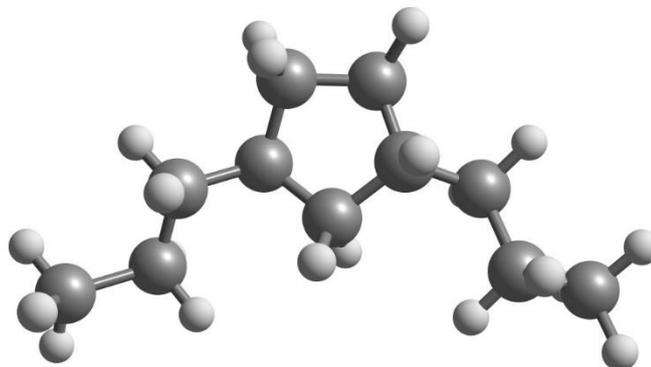
Estructura en 3D optimizada de la molécula 191.



Nota: Chemcraft.

Figura 715

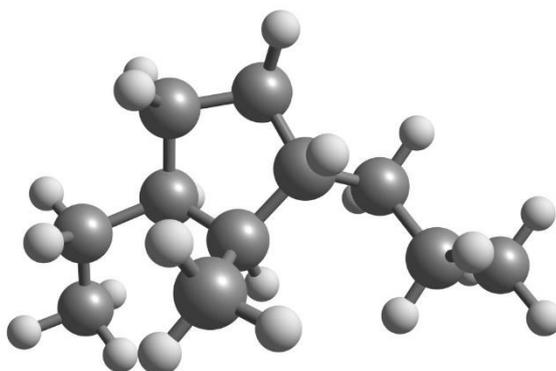
Estructura en 3D optimizada de la molécula 192.



Nota: Chemcraft.

Figura 716

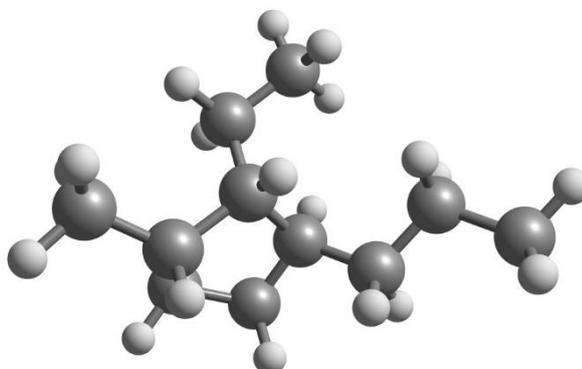
Estructura en 3D optimizada de la molécula 193.



Nota: Chemcraft.

Figura 717

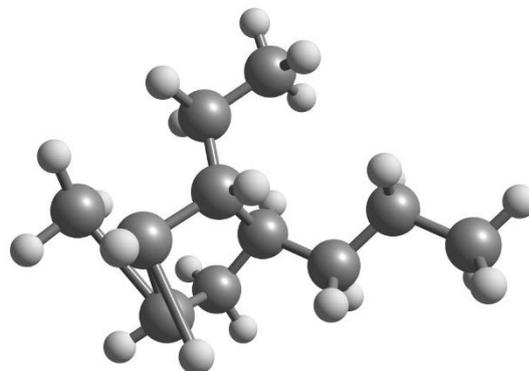
Estructura en 3D optimizada de la molécula 194.



Nota: Chemcraft.

Figura 718

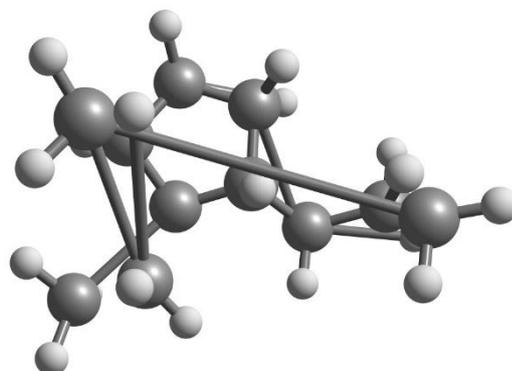
Estructura en 3D optimizada de la molécula 195.



Nota: Chemcraft.

Figura 719

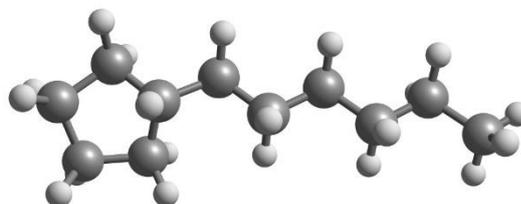
Estructura en 3D optimizada de la molécula 196.



Nota: Chemcraft.

Figura 720

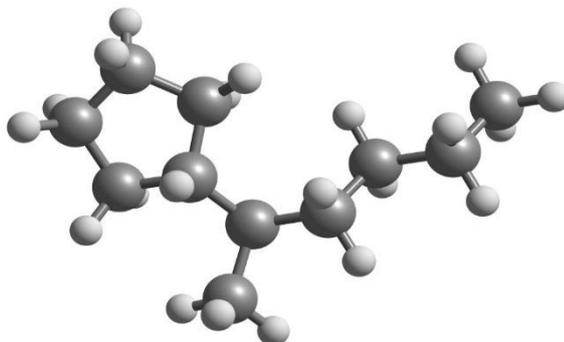
Estructura en 3D optimizada de la molécula 197.



Nota: Chemcraft.

Figura 721

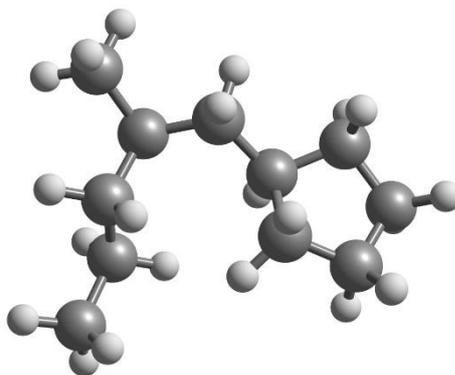
Estructura en 3D optimizada de la molécula 198.



Nota: Chemcraft.

Figura 722

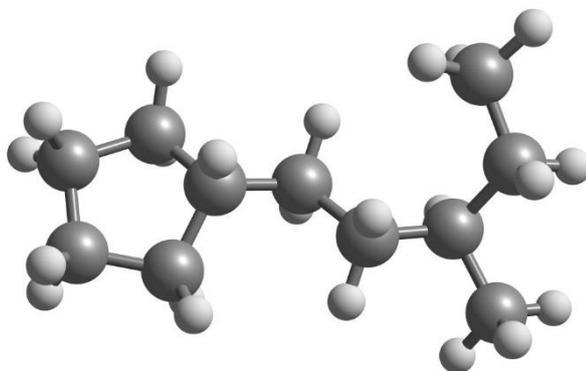
Estructura en 3D optimizada de la molécula 199.



Nota: Chemcraft.

Figura 723

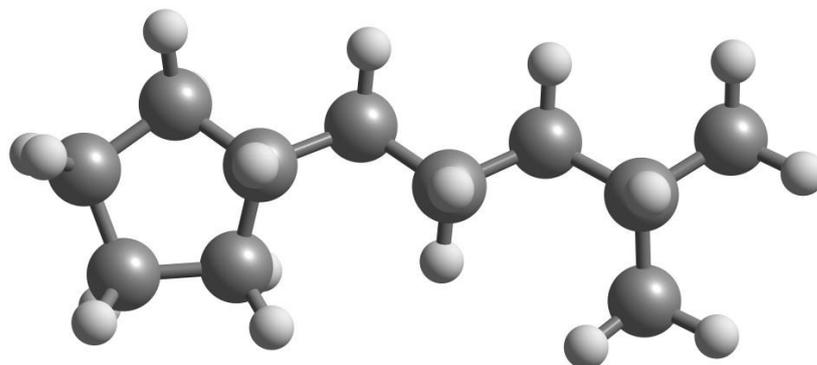
Estructura en 3D optimizada de la molécula 200.



Nota: Chemcraft.

Figura 724

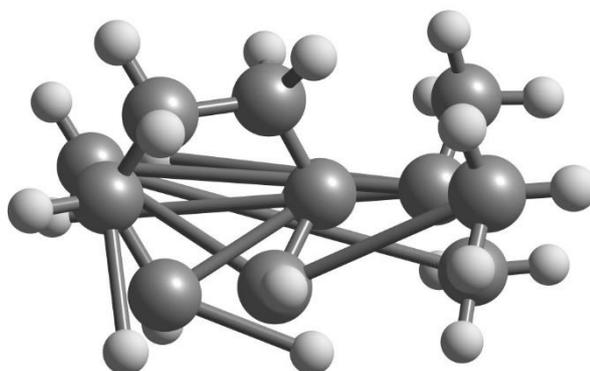
Estructura en 3D optimizada de la molécula 201.



Nota: Chemcraft.

Figura 725

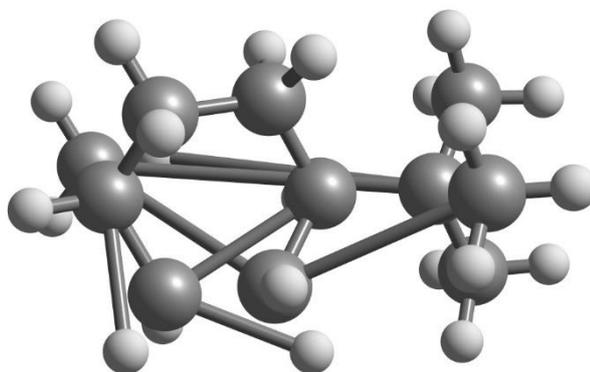
Estructura en 3D optimizada de la molécula 202.



Nota: Chemcraft.

Figura 726

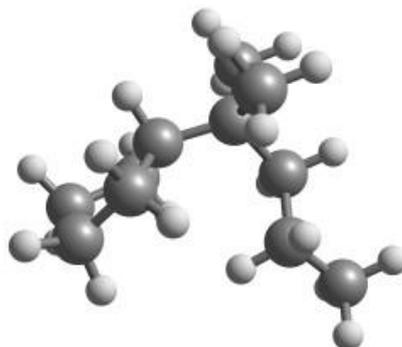
Estructura en 3D optimizada de la molécula 203.



Nota: Chemcraft.

Figura 727

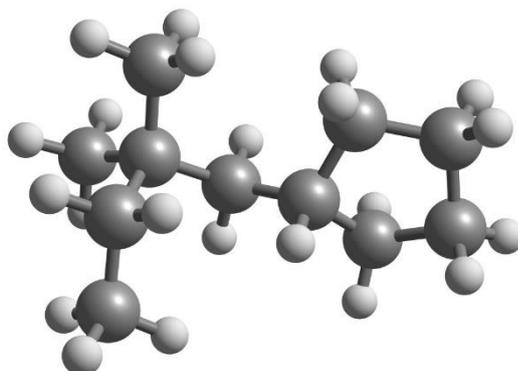
Estructura en 3D optimizada de la molécula 204.



Nota: Chemcraft.

Figura 728

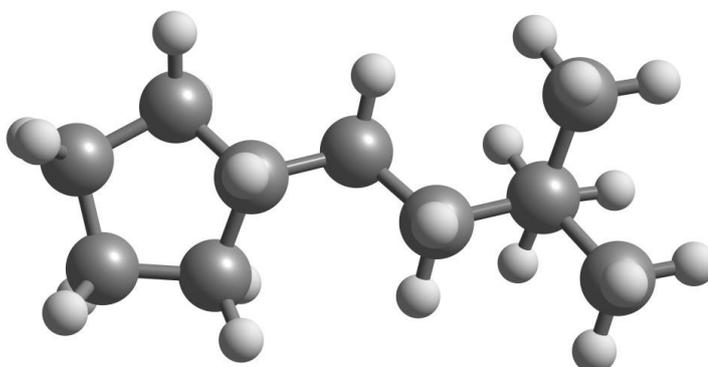
Estructura en 3D optimizada de la molécula 205.



Nota: Chemcraft.

Figura 729

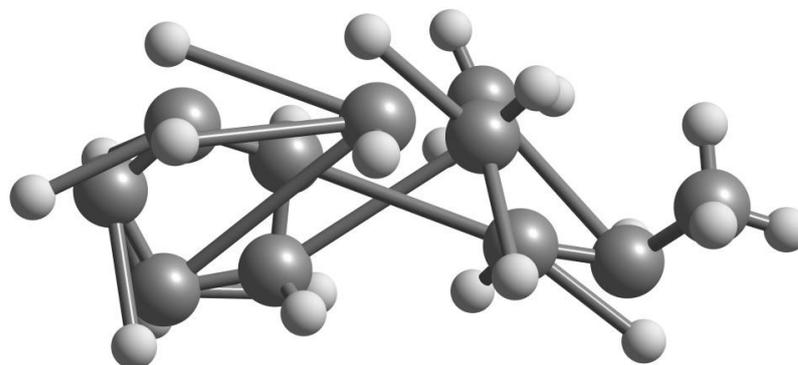
Estructura en 3D optimizada de la molécula 206



Nota: Chemcraft.

Figura 730

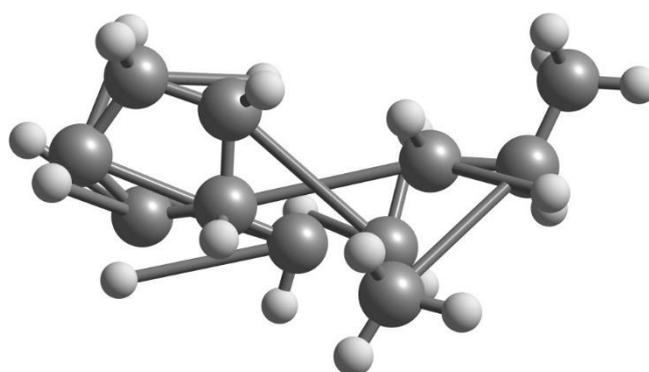
Estructura en 3D optimizada de la molécula 207.



Nota: Chemcraft.

Figura 731

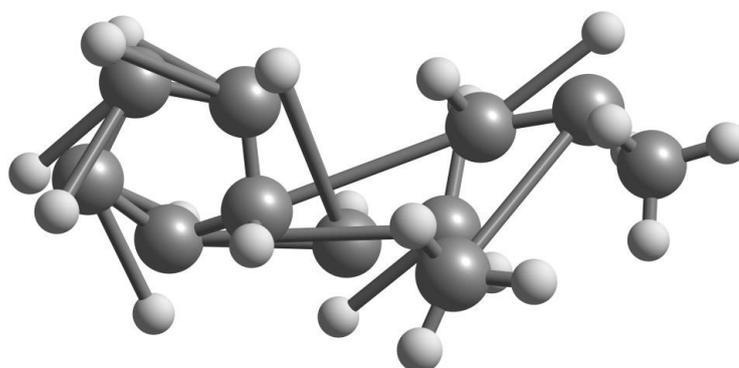
Estructura en 3D optimizada de la molécula 208.



Nota: Chemcraft.

Figura 732

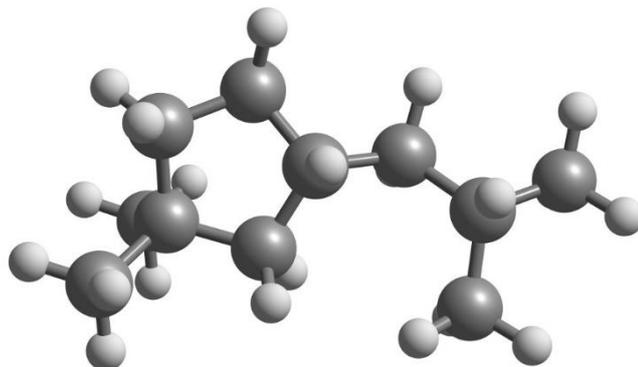
Estructura en 3D optimizada de la molécula 209.



Nota: Chemcraft.

Figura 733

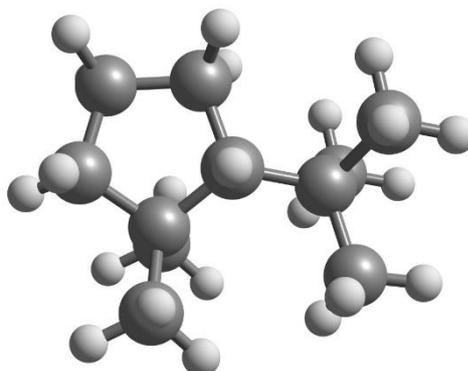
Estructura en 3D optimizada de la molécula 210.



Nota: Chemcraft.

Figura 734

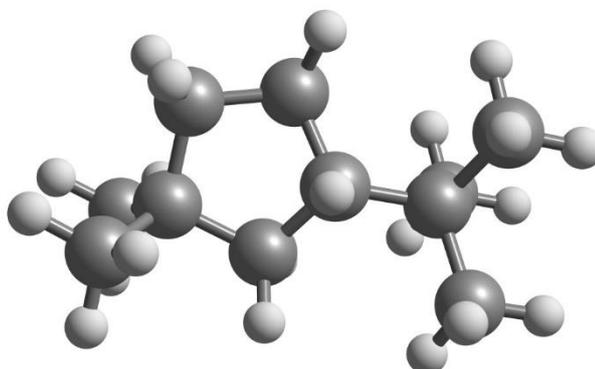
Estructura en 3D optimizada de la molécula 211.



Nota: Chemcraft.

Figura 735

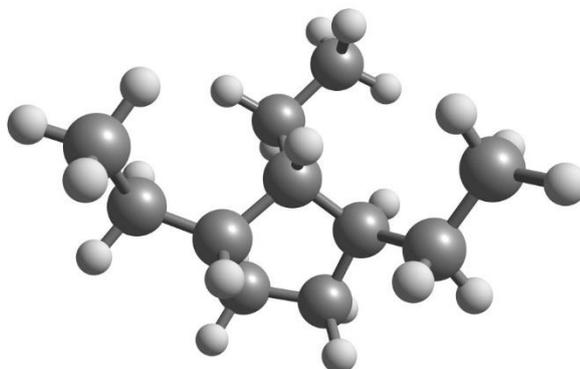
Estructura en 3D optimizada de la molécula 212.



Nota: Chemcraft.

Figura 736

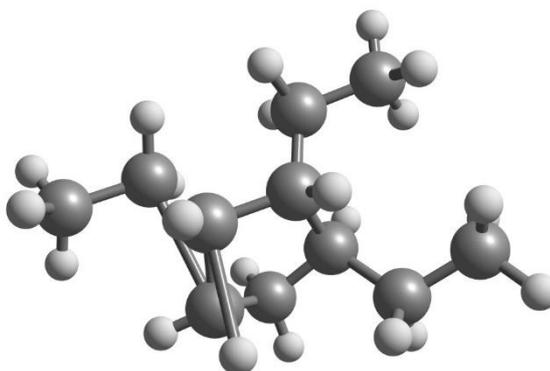
Estructura en 3D optimizada de la molécula 213.



Nota: Chemcraft.

Figura 737

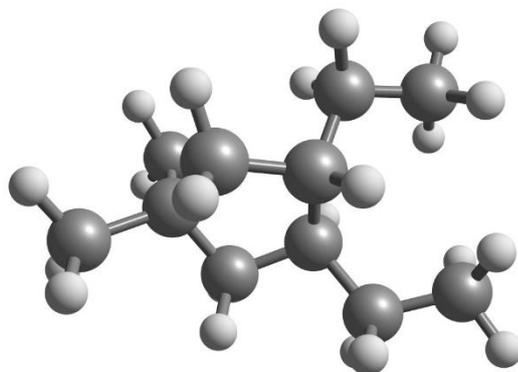
Estructura en 3D optimizada de la molécula 214.



Nota: Chemcraft.

Figura 738

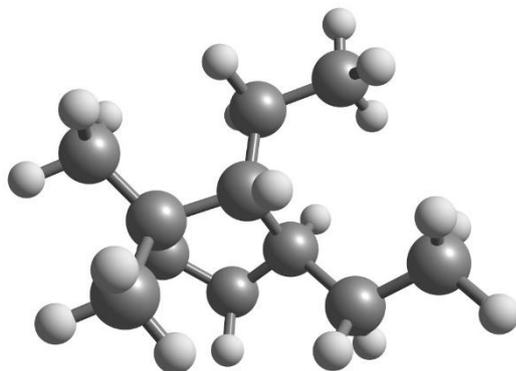
Estructura en 3D optimizada de la molécula 215.



Nota: Chemcraft.

Figura 739

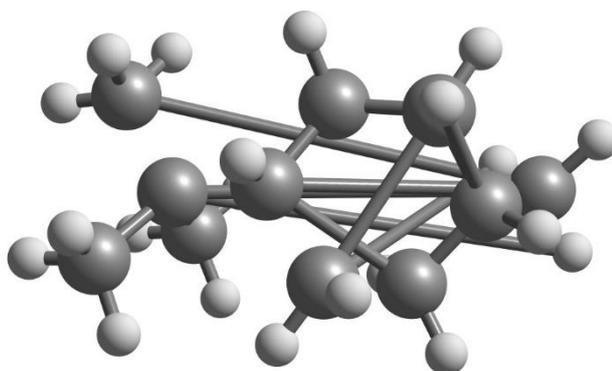
Estructura en 3D optimizada de la molécula 216.



Nota: Chemcraft.

Figura 740

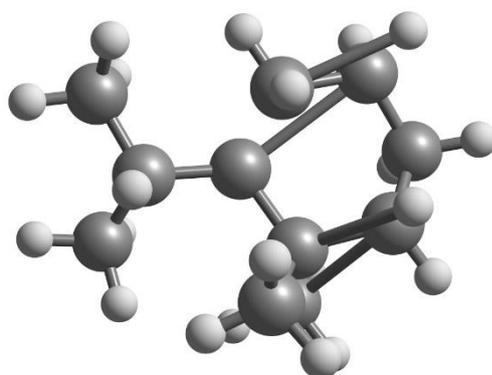
Estructura en 3D optimizada de la molécula 217.



Nota: Chemcraft.

Figura 741

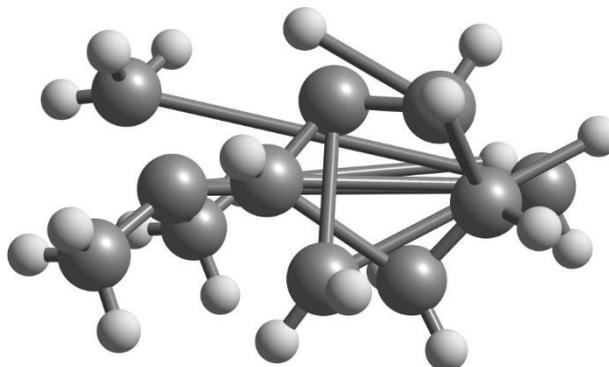
Estructura en 3D optimizada de la molécula 218.



Nota: Chemcraft.

Figura 742

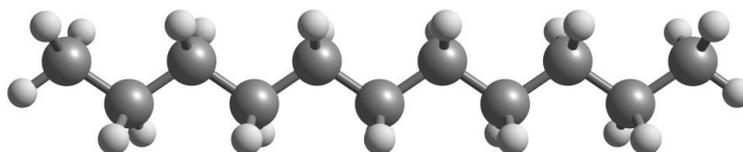
Estructura en 3D optimizada de la molécula 219.



Nota: Chemcraft.

Figura 743

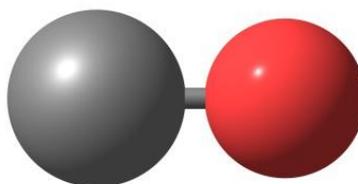
Estructura en 3D optimizada de la molécula 220.



Nota: Chemcraft.

Figura 744

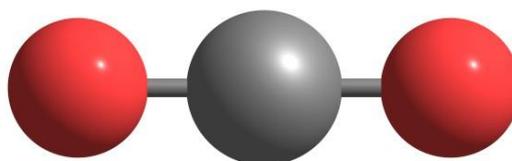
Estructura en 3D optimizada de la molécula 221.



Nota: Chemcraft.

Figura 745

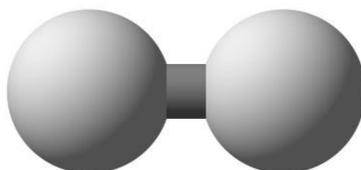
Estructura en 3D optimizada de la molécula 222



Nota: Chemcraft.

Figura 746

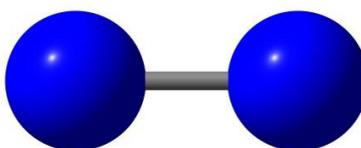
Estructura en 3D optimizada de la molécula 223.



Nota: Chemcraft.

Figura 747

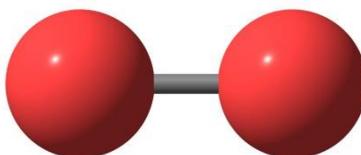
Estructura en 3D optimizada de la molécula 224.



Nota: Chemcraft.

Figura 748

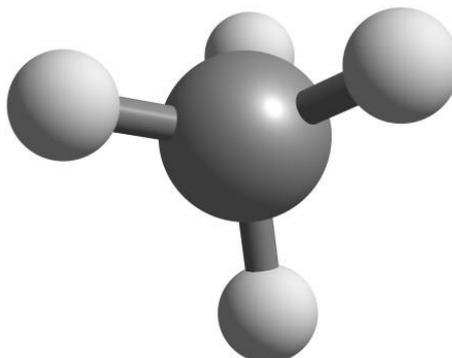
Estructura en 3D optimizada de la molécula 225.



Nota: Chemcraft.

Figura 749

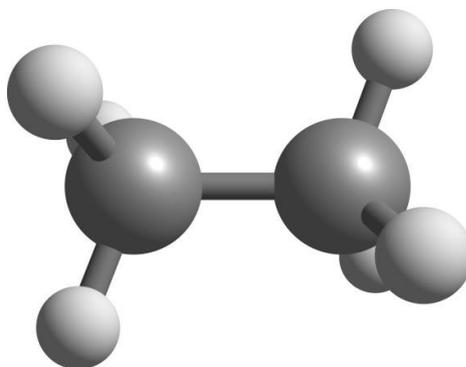
Estructura en 3D optimizada de la molécula 226.



Nota: Chemcraft.

Figura 750

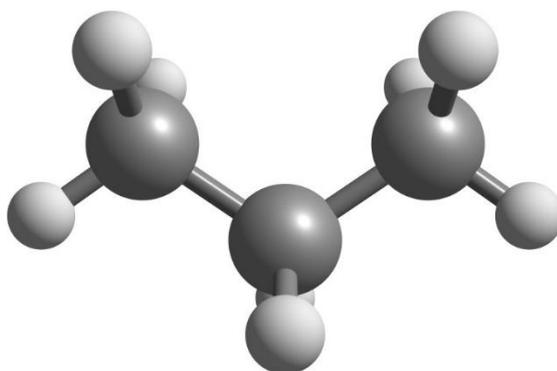
Estructura en 3D optimizada de la molécula 227.



Nota: Chemcraft.

Figura 751

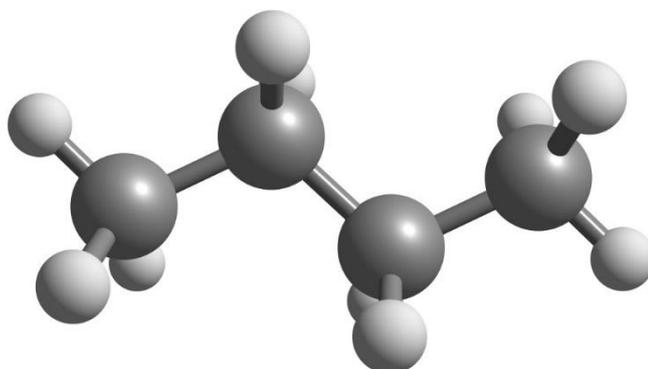
Estructura en 3D optimizada de la molécula 228.



Nota: Chemcraft.

Figura 752

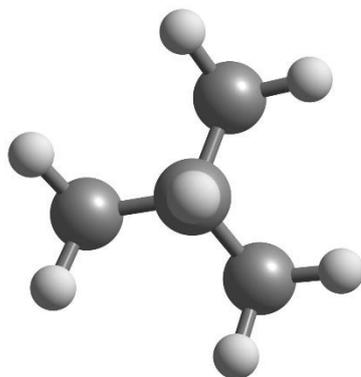
Estructura en 3D optimizada de la molécula 229.



Nota: Chemcraft.

Figura 753

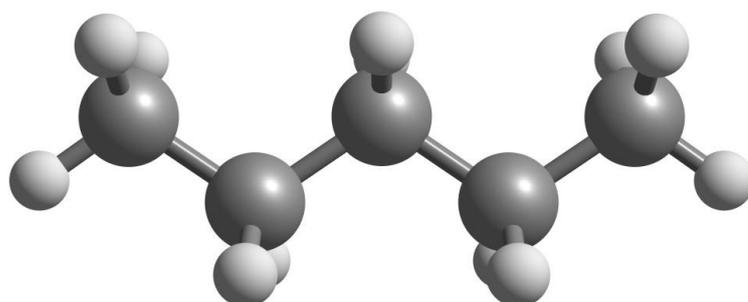
Estructura en 3D optimizada de la molécula 229.



Nota: Chemcraft

Figura 754

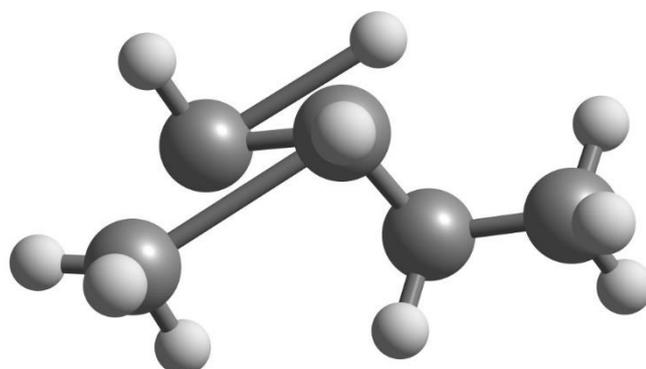
Estructura en 3D optimizada de la molécula 231.



Nota: Chemcraft

Figura 755

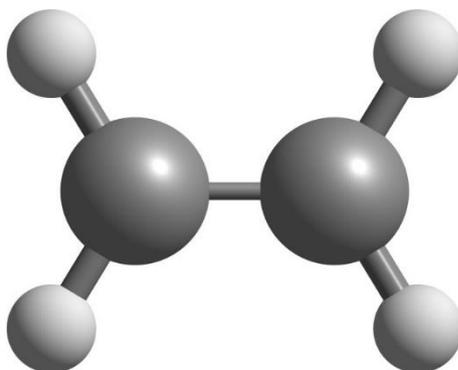
Estructura en 3D optimizada de la molécula 232.



Nota: Chemcraft

Figura 756

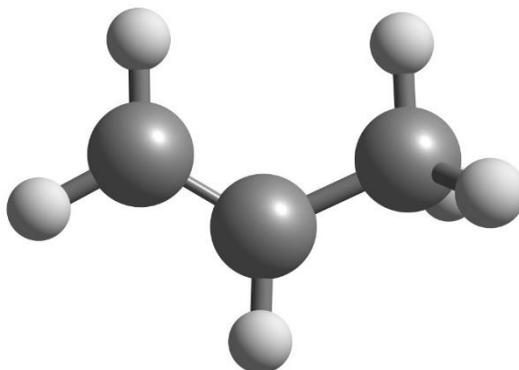
Estructura en 3D optimizada de la molécula 233.



Nota: Chemcraft

Figura 757

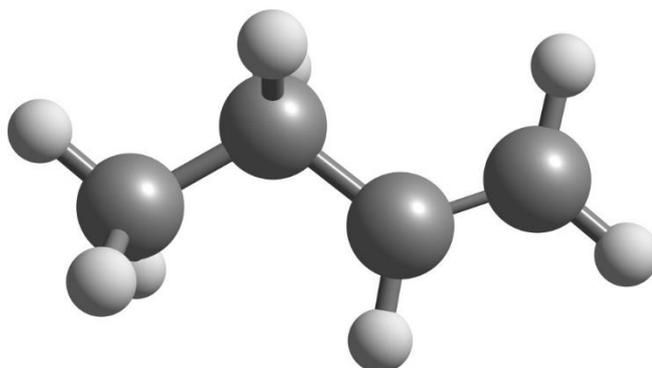
Estructura en 3D optimizada de la molécula 234.



Nota: Chemcraft

Figura 758

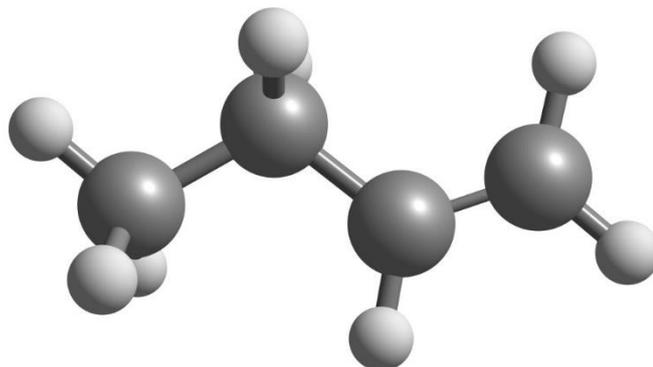
Estructura en 3D optimizada de la molécula 235.



Nota: Chemcraft

Figura 759

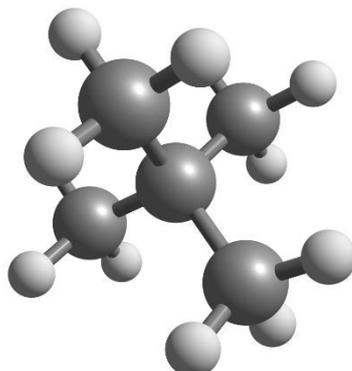
Estructura en 3D optimizada de la molécula 236.



Nota: Chemcraft

Figura 760

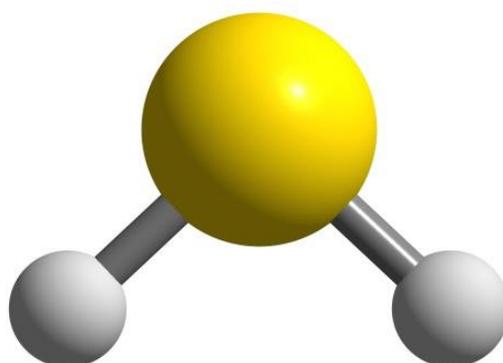
Estructura en 3D optimizada de la molécula 237.



Nota: Chemcraft

Figura 761

Estructura en 3D optimizada de la molécula 238.



Nota: Chemcraft

4.5.3 Reporte la energía de optimización

Con el fin de obtener la energía de optimización de manera automática para todas las moléculas presentes en el flujo de entrada y salida del proceso de reforma catalítica, se utiliza el programa Avogadro y el campo MMFF94; en donde el programa generara la estructura por posea la energía mínima en el campo de fuerza antes mencionado; los valores obtenidos se presentan a continuación en las siguientes tablas, en donde las energías positivas son exoenergéticas y las energías negativas son endoenergéticas.

Tabla 284

Reporte de la energía de optimización molécula 1-33.

Molécula	Energía de optimización (kJ/mol)
1	67,9391
2	77,1107
3	75,6023
4	86,3219
5	86,3156
6	86,3154
7	101,374
8	101,374
9	92,0469
10	84,7816
11	84,7817
12	-20,504
13	-1,99924
14	-1,99924
15	1,38367
16	1,38367
17	6,48009
18	-22,9204
19	-16,8883
20	-14,5541
21	-16,8883
22	67,0158
23	-22,9204
24	23,5362
25	23,5362
26	-23,7798
27	-14,7954
28	-17,7033
29	-12,9691
30	-17,8108
31	14,9513
32	7,8196
33	19,0294

Nota. Avogadro

Tabla 285*Reporte de la energía de optimización molécula 34-70.*

Molécula	Energía de optimización (kJ/mol)
34	18,5869
35	5,41906
36	42,154
37	42,154
38	48,7892
39	50,9098
40	-24,6429
41	-3,7369
42	8,71924
43	-5,75652
44	-15,5069
45	-2,38411
46	-13,8406
47	-12,3567
48	4,4121
49	0,431071
50	1,15545
51	-2,06444
52	-16,3602
53	-2,89748
54	-16,3602
55	-18,698
56	-15,3144
57	-14,4059
58	-24,6429
59	68,8989
60	68,7681
61	76,2231
62	43,0014
63	43,0014
64	49,8975
65	43,1291
66	41,5196
67	47,0139
68	79,2748
69	74,2825
70	79,2748

Nota. Avogadro

Tabla 286*Reporte de la energía de optimización molécula 71-106.*

Molécula	Energía de optimización (kJ/mol)
71	79,2748
72	79,2748
73	112,154
74	112,154
75	106,975
76	112,154
77	112,154
78	74,2825
79	109,504
80	109,504
81	109,504
82	109,504
83	100,237
84	74,2825
85	74,2825
86	74,2825
87	103,655
88	42,0652
89	51,7471
90	51,9449
91	61,4369
92	2776,94
93	53,2181
94	3216,09
95	51,9449
96	-25,5078
97	95,0842
98	107,518
99	92,3463
100	107,518
101	119,114
102	126,491
103	103,125
104	125,244
105	120,939
106	230,47

Nota. Avogadro

Tabla 287*Reporte de la energía de optimización molécula 107-142.*

Molécula	Energía de optimización (kJ/mol)
107	126,491
108	95,0842
109	95,0842
110	126,491
111	95,0842
112	94,0403
113	64,52
114	63,4307
115	123,921
116	173,744
117	158,682
118	77,9157
119	81,737
120	160,17
121	150,052
122	76,3611
123	74,6394
124	9,62921
125	46,0138
126	46,0138
127	99,2483
128	98,7009
129	77,4821
130	64,52
131	85,874
132	85,874
133	81,7646
134	71,9249
135	58,6696
136	70,3549
137	49,9913
138	52,8338
139	116,998
140	110,304
141	42,3228
142	26,3734

Nota. Avogadro

Tabla 288*Reporte de la energía de optimización molécula 143-178.*

Molécula	Energía de optimización (kJ/mol)
143	190,774
144	151,533
145	191,604
146	113,122
147	108,455
148	181,89
149	188,633
150	135,594
151	102,012
152	135,568
153	135,594
154	135,353
155	144,829
156	135,353
157	160,447
158	120,563
159	179,835
160	153,461
161	124,956
162	113,122
163	127,437
164	80,4852
165	67,339
166	139,452
167	73,4242
168	102,012
169	135,594
170	135,568
171	135,594
172	131,083
173	152,275
174	128,413
175	114,673
176	8,36315
177	121,858
178	90,5393

Nota. Avogadro

Tabla 289*Reporte de la energía de optimización molécula 179-214*

Molécula	Energía de optimización (kJ/mol)
179	126,033
180	126,343
181	126,343
182	87,564
183	185,513
184	234,352
185	193,687
186	64,7151
187	211,581
188	110,543
189	177,18
190	139,452
191	51,8599
192	41,3685
193	73,6306
194	76,9303
195	84,8174
196	72,1108
197	20,1016
198	57,6528
199	68,7469
200	58,6925
201	43,7052
202	127,245
203	127,245
204	107,765
205	101,159
206	86,1367
207	60,7531
208	57,0237
209	60,7531
210	114,662
211	180,355
212	151,991
213	79,0224
214	83,7572

Nota. Avogadro

Tabla 290*Reporte de la energía de optimización molécula 215-238.*

Molécula	Energía de optimización (kJ/mol)
215	120,638
216	125,918
217	126,343
218	147,739
219	126,343
220	-20,504
221	1,60225
222	840,918
223	-
224	-3,73E-19
225	-25,5078
226	0,110457
227	19,8218
228	20,9772
229	-21,2521
230	-1,99924
231	-22,0718
232	-18,5972
233	34,3322
234	27,1439
235	32,6231
236	32,6231
237	35,5953
238	1,48E-16

Nota. Avogadro

Capítulo V

5. Conclusiones y recomendaciones

5.1 Conclusiones

Se obtuvo una lista de alrededor de 222 compuestos como se indica en la tabla 2, los cuales se encuentran presentes en el flujo de entrada en el proceso de reforma catalítica, siendo el principal compuesto el metilciclohexano con un porcentaje en masa del 7.57%, dicho compuesto es uno de los productos primordiales provenientes de la destilación al vacío la cual es la carga de alimentación para este proceso.

Mediante la búsqueda bibliográfica se logró recolectar una lista de 242 compuestos que se encuentran en el flujo de salida del proceso reforma catalítica, los cuales se distribuyeron en tres tablas; en la tabla 3 se muestra la primera salida de productos con 222 compuestos, el producto principal de esta tabla es el tolueno con 13,97% en masa, debido a que es el compuesto aromático con más alto octanaje, la tabla 4 es la segunda salida de productos hay 18 compuestos, siendo el primero el metano con un 49.82% en volumen, y en la tabla 5 hay 2 compuestos como productos de salida presentes en el proceso de reforma catalítica, siendo el principal producto propano con 60% en volumen, el cual se mezcla con 40% en volumen de butano para así formar el GLP:

Con la ayuda del programa ChemDraw se realizó una tabla completa de todos los compuestos tanto de entrada como de salida para la generación de estructuras en 2D como se indica en la tabla 6, de igual manera dicho programa nos facilitó tanto los códigos SMILES como las propiedades básicas que son: nombre IUPAC, fórmula química, peso molecular y análisis elemental de cada compuesto como se señala desde la tabla 7 a la 253, permitiendo conocer que muchos de estos compuestos tienen propiedades básicas similares debido a que su fórmula química es la misma, como se indica en las tablas 13-17, 19-20, 21-22, 24-31, 32-41, 42-45, 46-64, 65-73, 74-101, 103-148, 149-225, 236-237.

El programa SwissADME (Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática) nos facilitó las propiedades fisicoquímicas básicas de cada molécula como se

denota en las tablas 254-265, de igual manera su Lipofilia en las tablas 266-271 y su solubilidad del agua en las tablas 272-283, indicando que las moléculas que tienen la misma fórmula química, tienen propiedades idénticas tanto en las tablas de Lipofilia como de solubilidad del agua, mientras que en las tablas de propiedades fisicoquímicas básicas la única similitud de dichas moléculas es la fracción Csp3.

Mediante el software Avogadro se obtuvieron las estructuras en 3D de todas las moléculas, tanto optimizadas como sin optimizar como se muestran en las figuras 240-715, además dicho software también proporcionó las energías de optimización, obteniendo que la molécula número 180 es la que requiere mayor energía de optimización con un valor de 173.744 kJ/mol, por otro lado, la molécula número 96 es la que requiere una menor energía de optimización con un valor de -25.5078 kJ/mol, dicho valor negativo significa que las moléculas son más estables y son las que van a regir las propiedades intermoleculares de acuerdo a las predicciones hechas por este software.

Usando el programa SwissADME (Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática) se obtuvo los radares de biodisponibilidad de cada molécula como se indica en las figuras 2-239 los cuales indican que la zona coloreada es el espacio fisicoquímico adecuado para la biodisponibilidad oral.

5.2 Recomendaciones

Se recomienda que la biblioteca online de la Universidad de las Fuerzas Armadas adquiera más libros referentes a la industria petroquímica y refinación de petróleo.

Se sugiere que para la generación de las propiedades básicas de las moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de reforma catalítica en el programa ChemDraw es necesario utilizar 4 decimales en el peso molecular para dar mayor confiabilidad y sensibilidad al método, para si en un futuro se utiliza el para comparar esos datos con masas de altas resolución.

Se puede procesar las propiedades fisicoquímicas básicas por medio de la Plataforma del Instituto Suizo de Bioinformática (SwissADME) de las moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de reforma catalítica, se debe ingresar la estructura 1D (código SMILES) obtenida en el programa computacional ChemDraw; y a continuación colocar un número o el nombre de la molécula sin tildes ni comas; para que la plataforma pueda generar las propiedades, caso contrario no se reconocerá el formato que se ingresó al inicio y no se procesarán los datos.

Se tiene que utilizar *Spartan Style* del programa computacional Chemcraft para generar las imágenes con coordenadas 3D optimizadas y no optimizadas, para las moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de reforma catalítica, con una resolución de imagen de 1064 pixeles para evitar que se distorsionen al agrandar la imagen.

Lista de abreviaciones

GLP	Gas licuado de petróleo
CDU	Destilación de petróleo crudo
DAO	Aceite desasfaltado
RON	Índice de octano
WABT	Temperatura media ponderada del lecho
WAIT	Temperatura media ponderada de entrada
C_5^+	<i>Pentanes Plus</i>
BTX	Mezcla de benceno, tolueno, xileno
RVP	Presión de vapor de Reid
SR	Semiregenerativos
SMILES	<i>Simplified Molecular Input Line Entry Specification</i>
IUPAC	<i>International Union of Pure and Applied Chemistry</i>
MM	Mecánica molecular
Ansatz	Solución estimada a una ecuación inicial
CLOA	Combinación lineal de orbitales atómicos
<i>Cis</i>	Sustituyentes en el mismo lado del doble enlace
<i>Trans</i>	Sustituyentes en el lado opuesto del doble enlace
Z	Sustituyentes juntos
E	Sustituyentes opuestos
R	Rectus (dirección a las manecillas del reloj)
S	Siniestro (dirección en contra a las manecillas del reloj)
D	Dextro: presenta el grupo funcional a la derecha
L	Levo: presenta el grupo funcional a la izquierda
N	Nitrógeno
H	Hidrógeno
O	Oxígeno
Ni	Níquel
V	Vanadio
HC	Hidrocarburos
Si	Silicio

As	Arsénico
Pb	Plomo
Pt	Platino
η	eta
γ	gamma
Re	Renio
Ir	Iridio
Sn	Estaño
S	Azufre
MW	Peso molecular
MR	Refractividad molar
ASPT	Área de superficie polar topológica
Csp3	La proporción de carbonos híbridos sp ³ .
iLOGP	Programa de predicción de log P y S implícito
XLOGP3	Programa de predicción de log P y S XLOGP3
WLOGP	Programa de predicción de log P y S atomístico Wildman
MLOGP	Programa de predicción de log P y S topológico Moriguchi
Silicos-IT	Programa de predicción de log P y S
Consensus Log P	Valor predictivo promedio para la lipofilia
ESOL Log S	Programa de predicción de log P y S
Psig	Libra por pulgada cuadrada
PERC	Percloroetileno
IV	Índice de viscosidad

Bibliografía

- Absil, R., Degnan, T., Han, S., Marler, D., Socha, R., & Stapleton, M. (1991). *Catalytic hydrocracking process* (Patent No. 5013422). U.S. Patent Office.
- Ackerson, M., & Byars, M. (2002). *Solvent extraction refining of petroleum products* (Patent No. 2434134). Canadian Intellectual Property Office.
- Ahmedzeki, N. S., & Al-tabbakh, B. A. (2016). Catalytic Reforming of Iraqi Naphtha over Pt-Ti / HY Zeolite Catalyst. *Iraqi Journal of Chemical and Petroleum Engineering*, 17(3), 45–56. Recuperado el 8 de Diciembre de 2020, de <https://www.iasj.net/iasj/download/e1b9f84fa96c1f59>
- Andrés, J., & Beltrán, J. (2000). *Química teórica y computacional* (2nd ed.). Universitat Jaume I. Recuperado el 16 de Diciembre de 2020, de <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.6035/CienciasExperimentals.2000.2>
- Antos, G., & Aitani, A. (2005). *Catalytic Naphtha reforming* (2nd ed.). Marcel Dekker, Inc.
- Antos, G., Aitani, A., & Parera, J. (2019). Catalytic Naphtha Reforming Science and Technology. In *Journal of Chemical Information and Modeling* (Vol. 53, Issue 9). Marcel Dekker, Inc.
- Bernal, C., Castro, A., Ramos, M., & Cárdenas, A. (2017). Estandarización del método espectroscópico UV-Visible para la determinación del contenido de asfaltenos en crudos pesados. *Revista Ingeniería*, 27(2), 1. Recuperado el 16 de Diciembre de 2020, de <https://doi.org/10.15517/ri.v27i2.27854>
- Botello, A., Osten, J., Gold, G., & Agraz, C. (2005). *Golfo de México, contaminación e impacto ambiental: diagnóstico y tendencias* (2nd ed.). Epomex.
- Choque, R., & Nogales, J. (2019). Estudio de propiedades moleculares del glifosato usando métodos químico-cuánticos computacionales. *Revista Con-Ciencia*, 7(1), 41–56. Recuperado el 8 de Diciembre de 2020, de http://www.scielo.org.bo/scielo.php?script=sci_abstract&pid=S2310-02652019000100005&lng=es&nrm=iso
- Dávila, M. (2019). El juego como estrategia para la enseñanza y el aprendizaje de la nomenclatura de la Química Inorgánica. *Dialéctica. Revista de Investigación Educativa*, 2019, 1–19. Recuperado el 10 de Diciembre de 2020, de

<http://portal.amelica.org/ameli/jatsRepo/88/88868007/88868007.pdf>

- Degnan, T., & Angevine, P. (2019). *Proceso para el desparafinado por isomerización de corrientes de hidrocarburos* (Patent No. 2720600). European Patent Office.
- Engel, T., & Reid, P. (2006). *Química Física* (1st ed.). Pearson Educación S.A.
- Fahim, M., Alsahhaf, T., & Elkilani, A. (2010). *Fundamentals of Petroleum Refining* (1st ed.). ELSEVIER.
- Gary, J. H., Handwerk, G. E., & Kaiser, M. J. (2007). Petroleum refining: Technology and Economics. In *The Chemical Engineering Journal and the Biochemical Engineering Journal* (Quinta). Taylor & Francis Group. Recuperado el 14 de Diciembre de 2020, de [https://doi.org/10.1016/0923-0467\(95\)80014-x](https://doi.org/10.1016/0923-0467(95)80014-x)
- Gary, J., & Handwerk, G. (2001). Petroleum Refining: Technology and Economics. In *Chemical Engineering Science* (4th ed.). Marcel Dekker, Inc. Recuperado el 8 de Diciembre de 2020, de [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(94\)87025-x](https://doi.org/10.1016/0009-2509(94)87025-x)
- Gearhart, J. (1980). *Solvent deasphalting* (Patent No. 4239616). U.S. Patent Office.
- Gegg, C., & Miranda, L. (2014). *GLP-1 COMPOUNDS* (Patent No. EP2007804 B1). European Patent Office.
- Gonzalez, L., Urista, L., & Martínez, P. (2017). Historia de las resinas. *Revista Mexicana de Estomatología*, 4(1), 41–42. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de <https://www.remexesto.com/index.php/remexesto/article/view/127/211>
- Harandi, M., Langhorne, P., Morrison, R., & Lambertville, N. (1993). *Heavy Naphtha Upgrading* (Patent No. 5396010). U.S. Patent Office.
- Harandi, M., Morrison, R., Langhorne, P., Lambertville, N., Teitman, G., & Vienna, V. (1994). *Heavy Naphtha Conversion* (Patent No. 5409595). U.S. Patent Office.
- Hislop, D., & Eagen, J. (1973). *Dewaxing process* (Patent No. 3773650). U.S. Patent Office.
- Jász, Á., Rák, Á., & Cserey, G. (2017). Energy Calculation of MMFF94 Force Field on GPU. *IEEE Xplore*, 1, 1–4. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.1109/ECCTD.2017.8093267>
- Kempińska, D., Chmiel, T., Kot-Wasik, A., Mróz, A., Mazerska, Z., & Namieśnik, J. (2019). State of the art and prospects of methods for determination of lipophilicity of chemical compounds. *Trends in Analytical Chemistry*, 113, 54–73.

- Recuperado el 12 de Enero 2021, de <https://doi.org/10.1016/j.trac.2019.01.011>
- Larraz, R. (2019). Historia de los procesos del refino de petróleo. *De Re Metallica*, 33, 87–112. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de https://www.researchgate.net/profile/Rafael-Larraz-2/publication/339721380_HISTORIA_DE_LOS_PROCESOS_DEL_REFINO_DE_PETROLEO_A_Brief_history_of_Oil_Refining/links/5e60f73145851516354ef3cb/HISTORIA-DE-LOS-PROCESOS-DEL-REFINO-DE-PETROLEO-A-Brief-history-of-Oil-Refining.pdf
- Lau, J., Zaragoza, F., Lauge, S., & Kruse, H. (2013). *Extendes GLP-1 Compounds* (Patent No. US 8603972 B2). U.S. Patent Office.
- Letzsch, W. (2005). *Deep catalytic cracking process* (Patent No. 6905591). U.S. Patent Office.
- Llanes, E., Rocha, J., Peralta, D., & Leguísamo, J. (2018). Evaluación de emisiones de gases en un vehículo liviano a gasolina en condiciones de altura. Caso de estudio Quito, Ecuador. *Enfoque UTE*, 9(2), 149–158. Recuperado el 20 de Enero de 2021, de <http://scielo.senescyt.gob.ec/pdf/ing/n19/1390-650X-ing-19-00051.pdf>
- Lopatin, O. (2020). Natural gas combustion in diesel engine. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 421(7), 1–6. Recuperado el 13 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.1088/1755-1315/421/7/072019>
- Martin, P., Zanin, A., & Odloak, D. (2019). Integrating real time optimization and model predictive control of a crude distillation unit. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 36(3), 1205–1222. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.1590/0104-6632.20190363s20170578>
- Maslehat, S., Nickchi, P., Sardari, S., & Soheilzad, M. (2018). Application of SMILES strings to identification of functional groups responsible for biological activity in medicinal compounds. *Amazonia Investiga*, 7(12), 245–254. Recuperado el 12 de Enero de 2021, de <https://amazoniainvestiga.info/index.php/amazonia/article/view/596/563>
- Materán, M. (2018). Eficiencia energética en refinerías de petróleo. *EnerLac Revista de Energía de Latinoamérica y El Caribe*, 2(2), 72–105. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de <http://enerlac.olade.org/index.php/ENERLAC/article/view/49/38>

- McMurry, J. (2008). *Química orgánica* (7th ed.). Cengage Learning Editores, S.A.
- Mohamed, A., Fahim, T. A., & Al-Sahhaf, A. E. (2010). *Fundamentals of Petroleum Refining* (p. 484). Elsevier.
- Mónico, L., Rincón, E., & Manrique, C. (2020). Combustibles alternativos en el transporte aéreo nacional. *Ciencia y Poder Aéreo*, 15(2), 68–76. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.18667/cienciaypoderaereo.643>
- Oyekan, S. (2019). *Catalytic Naphtha Reforming Process*. CRC Press Taylor & Francis Group.
- Parkash, S. (2003). *Refining processes Handbook* (1st ed.). Elsevier.
- Paterson, W. R. (1995). Petroleum refining: technology and economics 3rd edn. In *The Chemical Engineering Journal and the Biochemical Engineering Journal* (Vol. 56, Issue 2). Recuperado el 6 de Enero de 2021, de [https://doi.org/10.1016/0923-0467\(95\)80014-x](https://doi.org/10.1016/0923-0467(95)80014-x)
- Randall, R., & Metz, J. (2016). *Petrochemistry & Oil Refinery Engineering*. Academic Studio.
- Samimi, A., Zarinabadi, S., Hossein, A., Kootenaei, S., & Azimi, A. (2020). Kinetic Overview of Catalytic Reforming Units (Fixed and Continuous Reforming). *Chemical Methodologies*, 4, 245–257. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.33945/SAMI/CHEMM.2020.3.3>
- Satterfield. (1996). *Heterogeneous Catalysis in Industrial Practice* (Segunda). Krieger Publishing Company.
- Siskin, M., Eppig, C., Gorbaty, M., Brown, L., Kelemen, S., Ferrughelli, D., & Bernatz, F. (2015). *Delayed coking process for producing free flowing shot coke* (Patent No. EP 1633831 B1). European Patent Office.
- Soltanali, S., Mohaddecy, S. R. S., Mashayekhi, M., & Rashidzadeh, M. (2020). Catalytic upgrading of heavy naphtha to gasoline: Simultaneous operation of reforming and desulfurization in the absence of hydrogen. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 8(6), 1–37. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.1016/j.jece.2020.104548>
- Tosco, P., Stiefl, N., & Landrum, G. (2014). Bringing the MMFF force field to the RDKit: Implementation and validation. *Journal of Cheminformatics*, 6(1), 4–7. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de

0037-3

- Tran, T., & Knaepen, M. (2020). Visbreaking Process (Patent No. US 10793753 B2). In *Yeast* (US 10793753 B2). U.S. Patent Office.
- Treese, S. A., Pujadó, P. R., & Jones, D. S. J. (2015). Handbook of petroleum processing. In *Handbook of Petroleum Processing* (2nd ed., Vol. 1, pp. 1–1913). Springer Reference. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.1007/978-3-319-14529-7>
- Turaga, U., & Ramanathan, R. (2003). Catalytic naphtha reforming: Revisiting its importance in the modern refinery. *Journal of Scientific and Industrial Research*, 62(10), 963–978. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de http://nopr.niscair.res.in/bitstream/123456789/17620/1/JSIR_62%2810%29_963-978.pdf
- Van, E., Sonnemans, W., & Zuijdensorp, S. (2015). *Procedimiento continuo para la alquilación de hidrocarburos* (Patent No. 2536971). European Patent Office.
- Venegas, D., Ayabaca, C., Celi, S., Rocha, J., & Mena, E. (2018). Factores para seleccionar tuberías de conducción de gas licuado de petróleo en el Ecuador. *Ingenius*, 19, 51–59. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.17163/ings.n19.2018.05>
- Vergel, C. (2013). *Process for Hydrotreating a diesel fuel feedstock, Hydrotreating unit for implementing said process, and corresponding Hydrorefining unit* (Patent No. US 8541636 B2). U.S. Patent Office.
- Wade, L. (2012). *Química Orgánica* (7th ed., Vol. 2). Pearson.
- Wade, L. (2013). *Química Orgánica*. In *Journal of Chemical Information and Modeling* (7th ed., Vol. 1). Pearson.
- Wauquier, J. P. (1994). *Crude Oil, Petroleum products, Process Flowsheets*. Editions TECHNIP.
- Yusuf, Aminu Z., John, Y. M., Aderemi, B. O., Patel, R., & Mujtaba, I. M. (2020). Effect of hydrogen partial pressure on catalytic reforming process of naphtha. *Computers and Chemical Engineering*, 143, 107-900. Recuperado el 6 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.107090>
- Yusuf, Aminu Zakari, John, Y. M., Aderemi, B. O., Patel, R., & Mujtaba, I. M. (2019). Modelling, simulation and sensitivity analysis of naphtha catalytic reforming reactions. *Computers and Chemical Engineering*, 130, 106-531. Recuperado el

6 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.106531>

Zhang, T., & Chu, J. (2018). A Simplified Simulation Model of Steady Temperature for Tubular Furnace. *Journal of Physics: Conference Series*, 1060(1), 1–6.

Recuperado el 6 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1060/1/012092>

Zhao, S., & Wagner, J. (2006). *Process for Catalytic Reforming* (Patent No. US 6984371 B2). U.S. Patent Office.

Anexos