



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

Espín Almachi, Franklin Wladimir y Trávez Osorio, Sandra Elizabeth

Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

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

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.

04 de mayo del 2021

Latacunga



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE PETROQUÍMICA

CERTIFICACIÓN

Certifico que el trabajo de Unidad de Integración Curricular, ***“Estudio in silico, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “Polimerización y Alquilación” 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 el señor Franklin Wladimir Espín Almachi y la señorita Sandra Elizabeth Trávez Osorio el mismo que ha sido revisado en su totalidad, analizado por la herramienta de verificación de similitud de contenido; por lo tanto, cumple con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que lo sustente públicamente.

04 de mayo del 2021.



Firmado electrónicamente por:
FABIAN
MAURICIO
SANTANA ROMO


Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.

C.C.: 1802925139











REPORTE DE VERIFICACIÓN



Document Information

| | | |
|--------------------------|--|---|
| Analyzed document | Proyecto UIC_POLIMERIZACION Y ALQUILACION.pdf (D101193669) | |
| Submitted | 4/10/2021 3:33:00 PM | |
| Submitted by | Fabián Santana |  Firmado electrónicamente por: FABIAN MAURICIO SANTANA ROMO |
| Submitter email | fmsantana@espe.edu.ec | |
| Similarity | 3% | |
| Analysis address | fmsantana.espe@analysis.arkund.com | |

Sources included in the report

| | | |
|-----------|---|---|
| W | URL: https://www.modeloingenieria.edu.ar/images/procesos2/material_de_apoyo/ALQUILA ... Fetched: 4/10/2021 3:34:00 PM |  1 |
| W | URL: http://webdelprofesor.ula.ve/ingenieria/marquezronald/wp-content/uploads/Alquiven2.pdf Fetched: 4/10/2021 3:33:16 PM |  1 |
| W | URL: https://portalacademico.cch.unam.mx/materiales/al/Guias_extras/Experimentales/qui4 ... Fetched: 11/21/2019 9:32:18 PM |  1 |
| W | URL: https://yoquieroaprobar.es/_pdf/04655.pdf Fetched: 8/8/2020 4:04:15 PM |  1 |
| W | URL: https://doi.org/10.1186/1758-2946-5-25 Fetched: 4/10/2021 3:34:00 PM |  1 |
| W | URL: http://bibliotecadigital.usbcali.edu.co/bitstream/10819/6929/1/Estado%20conocimien ... Fetched: 4/10/2021 3:34:00 PM |  1 |
| W | URL: https://revistapublicando.org/revista/index.php/crv/article/view/549 Fetched: 4/10/2021 3:34:00 PM |  1 |
| W | URL: https://doi.org/10.15446/rev.fac.cienc.v8n1.74214 Fetched: 4/10/2021 3:34:00 PM |  1 |
| W | URL: http://repositorio.cepal.org/bitstream/handle/11362/40629/S1600529_es.pdf?sequence ... Fetched: 4/10/2021 3:34:00 PM |  1 |
| SA | 1564147511_71__ALQUILACION_expo_Refinacion.pdf Document 1564147511_71__ALQUILACION_expo_Refinacion.pdf (D54675955) |  1 |



Firmado electrónicamente por:
FABIAN MAURICIO SANTANA ROMO

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.

C.C.: 1802925139



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE PETROQUÍMICA

RESPONSABILIDAD DE AUTORÍA

Nosotros, **Espín Almachi, Franklin Wladimir**, con cédula de ciudadanía N° 0503688566, y **Trávez Osorio, Sandra Elizabeth** con cédula de ciudadanía N° 0504065913 declaramos que el contenido, ideas y criterios del trabajo de Unidad de Integración Curricular: ***“Estudio in silico, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “Polimerización y Alquilación” 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.

04 de mayo del 2021.

Espín Almachi, Franklin Wladimir

C. C.: 0503688566

Trávez Osorio, Sandra Elizabeth

C. C.: 0504065913



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE PETROQUÍMICA

AUTORIZACIÓN DE PUBLICACIÓN

Nosotros, **Espín Almachi, Franklin Wladimir**, con cédula de ciudadanía N° 0503688566, y **Trávez Osorio, Sandra Elizabeth** con cédula de ciudadanía N° 0504065913, autorizamos a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el trabajo de Unidad de Integración Curricular: ***“Estudio in silico, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de Polimerización y Alquilación” 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 responsabilidad.

04 de mayo del 2021.

Espín Almachi, Franklin Wladimir

C. C.: 0503688566

Trávez Osorio, Sandra Elizabeth

C. C.: 0504065913

Dedicatoria

Yo **Espín Almachi Franklin Wladimir**, en primer lugar, quiero dar gracias a Dios por permitirme llegar hasta este momento importante, por cuidarme, guiarme y darme fuerzas para terminar con éxito esta nueva etapa de mi vida, así como también el apoyo y la confianza de mis padres Norma Roció y Pedro por los consejos diarios y principalmente por que día a día estuvieron a mi lado en los momentos buenos y malos de mi formación académica. A mi hermano Irving por compartir momentos significativos dentro y fuera del tema educativo. A mi compañera Sandrita por haber formado un buen equipo y lograr haber terminado con éxito esta tesis.

Yo, **Trávez Osorio, Sandra Elizabeth**, Dedico este trabajo a Dios.

A mi papá y a mi mamá ellos son la razón por la cual he logrado terminar esta etapa de mi vida. A mi hermana por apoyarme en situaciones difíciles para mí y siempre ayudarme a lo largo de los años de estudio. A mi hermano porque siempre fue muy comprensivo y siempre me brindó su apoyo, el juntamente con mi hermana me han ayudado a lo largo de esta carrera.

Agradecimiento

Yo, Espín Almachi Franklin Wladimir

Agradezco a dios por brindarme la fortaleza necesaria para terminar con éxito esta etapa de mi vida. Gracias a mis padres Rocío y Pedro por creer en mí y darme las fuerzas necesarias en los momentos difíciles que atravesé en mi vida, simplemente me queda decirles que los quiero.

A mi hermano Irving por estar conmigo y compartir momentos significativos en mi vida como tambien a mis abuelitas Olga y Esther por estar pendiente de mí y darme su bendición en cada momento que lo necesite y finalmente a mi querida Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE-L, a mi carrera Petroquímica por permitirme estudiar y formarme como profesional y a mi tutor Ing. Fabián Mauricio Santana Romo por guiarme con paciencia y rectitud en todo el proceso.

Yo, Trávez Osorio, Sandra Elizabeth

Agradezco a Dios por su misericordia y fidelidad, definitivamente agradezco a mis padres y a mis hermanos Gladys y Raúl por todo lo que he recibido durante mi vida estudiantil, han sido el impulso y el motor para seguir adelante y lograr terminar mis estudios de educación superior. A Lando por siempre estar ahí para ayudarme a superar las dificultades que surgieron en su momento. Así también agradezco a todos mis amigos, que contribuyeron de muchas formas positivas a mi vida, en los momentos todo momento. A Ing. Fabián Mauricio Santana Romo, PhD y Ing. Catherine Isabel Donoso Quimbita, MSc. mis profesores que no solo impartieron clases, sino que, fueron muy amables, pacientes y supieron mostrar el lado humano sin dejar su excelente profesionalismo.

Tabla de contenidos

| | |
|------------------------------------|----|
| Carátula | 1 |
| Certificación | 2 |
| Reporte de verificación..... | 3 |
| Responsabilidad de autoría..... | 4 |
| Autorización de publicación..... | 5 |
| Dedicatoria..... | 6 |
| Agradecimiento | 7 |
| Tabla de contenidos..... | 8 |
| Índice de tablas..... | 16 |
| Índice de figuras..... | 23 |
| Resumen..... | 26 |
| Abstract..... | 27 |
| Introducción | 28 |
| Antecedentes..... | 28 |
| Planteamiento del problema | 29 |
| Justificación e importancia..... | 31 |
| Objetivos..... | 32 |
| <i>Objetivos General</i> | 32 |
| <i>Objetivos Específicos</i> | 32 |

| | |
|--|----|
| Hipótesis..... | 32 |
| Variables de investigación | 33 |
| <i>Variables independientes</i> | 33 |
| <i>Variables dependientes</i> | 33 |
| Fundamentación teórica..... | 34 |
| Polimerización | 34 |
| Proceso de polimerización..... | 34 |
| <i>Polimerización térmica y catalítica</i> | 34 |
| Endulzamiento de gas | 35 |
| Reacciones..... | 35 |
| <i>Alimentación de la unidad de polimerización</i> | 35 |
| <i>Productos de la unidad de polimerización</i> | 36 |
| Catalizadores..... | 37 |
| Formación de coque | 37 |
| Alquilación | 39 |
| Proceso de alquilación..... | 40 |
| Variables de proceso | 43 |
| Catalizadores..... | 45 |
| <i>Alquilación con catalizador líquido iónico</i> | 45 |
| <i>Alquilación con ácido sulfúrico</i> | 49 |

| | |
|---|----|
| | 10 |
| <i>Alquilación con ácido fluorhídrico</i> | 50 |
| Mecanismo de reacción | 52 |
| Reacciones típicas de alquilación | 57 |
| Química computacional | 58 |
| Historia | 58 |
| <i>Primera era</i> | 58 |
| <i>Segunda era</i> | 58 |
| <i>Tercera era</i> | 59 |
| <i>Cuarta era de la química cuántica</i> | 60 |
| Optimización de moléculas o estructuras | 60 |
| Energía de optimización 3D | 60 |
| <i>Campo de fuerza MMFF94</i> | 61 |
| Cálculos in silico | 61 |
| Simulaciones computacionales | 61 |
| <i>Ventajas</i> | 61 |
| <i>Desventajas</i> | 62 |
| Química pura | 62 |
| Propiedades fisicoquímicas | 62 |
| Pesos moleculares | 63 |
| Fórmulas químicas | 63 |

| | |
|--|----|
| | 11 |
| <i>Fórmulas moleculares</i> | 64 |
| <i>Fórmulas empíricas</i> | 64 |
| <i>Lipofilia</i> | 65 |
| Solubilidad..... | 65 |
| Propiedades estructurales | 66 |
| Confórmeros..... | 66 |
| <i>Conformaciones del etano</i> | 66 |
| <i>Conformaciones del propano</i> | 68 |
| <i>Conformaciones del butano</i> | 68 |
| Isómeros..... | 69 |
| Interacciones intermoleculares | 70 |
| London | 70 |
| Puente de hidrógeno | 71 |
| Enlace covalente | 72 |
| <i>Enlace covalente puro no polar</i> | 72 |
| <i>Enlace covalente polar y covalente coordinado</i> | 73 |
| Enlace covalente simple | 73 |
| Enlace covalente doble..... | 74 |
| Enlace covalente triple..... | 74 |
| Metodología | 75 |

| | |
|---|----|
| Generación de moléculas presentes en los flujos de entrada a los procesos | 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 moléculas presentes en los flujos de salida a los procesos | 76 |
| <i>Búsqueda de datos internacionales</i> | 76 |
| <i>Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano</i> | 77 |
| <i>Obtención, organización y reporte de resultados</i> | 77 |
| Procesamiento y obtención de estructuras químicas 1D 2D y propiedades químicas básicas..... | 77 |
| <i>Generación de estructuras químicas en 2D</i> | 77 |
| <i>Procesamiento de propiedades básicas</i> | 79 |
| <i>Generación automática de nomenclatura IUPAC</i> | 83 |
| <i>Generación automática del código SMILES</i> | 84 |
| Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas | 85 |
| <i>Estudio de la interfaz de la plataforma SwissADME</i> | 85 |
| <i>Procesamiento a través del código SMILES</i> | 86 |
| Cálculo y obtención de estructuras 3D | 89 |

| | |
|---|-----|
| <i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D sin optimizar</i> | 90 |
| <i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D optimizadas</i> | 93 |
| <i>Reporte la energía de optimización</i> | 95 |
| <i>Elaboración de las imágenes con coordenadas 3D sin optimizar y optimizadas</i> | 96 |
| Resultados y discusión..... | 106 |
| Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de polimerización y alquilación | 106 |
| <i>Búsqueda de datos internacionales</i> | 106 |
| <i>Proceso de polimerización</i> | 106 |
| <i>Proceso de alquilación</i> | 108 |
| <i>Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano</i> | 109 |
| Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de polimerización y alquilación | 110 |
| <i>Búsqueda de datos internacionales</i> | 110 |
| <i>Proceso de polimerización</i> | 110 |
| <i>Proceso de alquilación</i> | 112 |
| <i>Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano</i> | 114 |
| Procesamiento y obtención de estructuras químicas 2D y propiedades químicas básicas..... | 114 |

| | |
|---|-----|
| Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas | 114 |
| <i>Proceso de polimerización</i> | 114 |
| <i>Proceso de alquilación</i> | 119 |
| <i>Generación automática de nomenclatura IUPAC</i> | 123 |
| <i>Proceso de polimerización</i> | 123 |
| <i>Proceso de alquilación</i> | 126 |
| <i>Generación automática del código SMILES</i> | 129 |
| <i>Proceso de polimerización</i> | 129 |
| <i>Proceso de alquilación</i> | 133 |
| Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas | 137 |
| <i>Procesamiento a través del código SMILES</i> | 137 |
| <i>Proceso de polimerización</i> | 137 |
| <i>Proceso de alquilación</i> | 145 |
| Cálculo y obtención de estructuras 3D | 156 |
| <i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D no optimizada y optimizada</i> | 156 |
| <i>Proceso de polimerización</i> | 156 |
| <i>Proceso de alquilación</i> | 161 |

| | |
|---|-----|
| <i>Reporte de Energías de optimización y elaboración de estructuras</i> | |
| 3D..... | 171 |
| <i>Proceso de polimerización</i> | 171 |
| <i>Proceso de alquilación</i> | 185 |
| Conclusiones y recomendaciones | 198 |
| Conclusiones | 198 |
| Recomendaciones | 200 |
| Bibliografía | 202 |
| Anexos..... | 208 |

Índice de tablas

| | | |
|-----------------|---|----|
| Tabla 1 | <i>Olefinas usadas para alimentación del proceso de Polimerización</i> | 36 |
| Tabla 2 | <i>Reacciones químicas del proceso de polimerización</i> | 38 |
| Tabla 3 | <i>Alimentación para el proceso de alquilación que se obtiene a partir de las corrientes de salida de la unidad de craqueo catalítico.....</i> | 41 |
| Tabla 4 | <i>Alimentación para la unidad de esterificación asociada al proceso de alquilación.....</i> | 42 |
| Tabla 5 | <i>Alimentación para la síntesis de TAME asociado al proceso de alquilación.....</i> | 42 |
| Tabla 6 | <i>Índice de octano del alquilato según el tipo de olefina.....</i> | 44 |
| Tabla 7 | <i>Componentes y composiciones de entrada para el proceso de alquilación usando un catalizador líquido iónico.</i> | 45 |
| Tabla 8 | <i>Componentes y composiciones de salida del proceso de alquilación usando un catalizador líquido iónico como el cloroaluminato de n-butilpiridinio.</i> | 46 |
| Tabla 9 | <i>Composición del catalizador líquido iónico ácido cloroaluminato de n-butilpiridinio.....</i> | 47 |
| Tabla 10 | <i>Composiciones de isobutano como materia prima a la entrada de la unidad de alquilación de la refinería de Lanzhou, PetroChina.....</i> | 48 |
| Tabla 11 | <i>Composiciones de 2-buteno como materia prima a la entrada de la unidad de alquilación de la refinería de Lanzhou, PetroChina.</i> | 48 |
| Tabla 12 | <i>Componentes y composiciones a la salida de la unidad de alquilación de la refinería de Lanzhou.....</i> | 48 |

| | |
|---|-----|
| Tabla 13 <i>Composición de alquilatos industriales resultantes de la alquilación de isobutano con olefina C₄.</i> | 50 |
| Tabla 14 <i>Composiciones de alquilato en presencia de HF como catalizador.</i> ... | 53 |
| Tabla 15 <i>Puntos de ebullición de algunos alcanos y alcoholes</i> | 71 |
| Tabla 16 <i>Molécula de propileno los estilos en 3 dimensiones disponibles en Chemcraft</i> | 96 |
| Tabla 17 <i>Moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de polimerización</i> | 107 |
| Tabla 18 <i>Moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de alquilación</i> | 108 |
| Tabla 19 <i>Datos de gas dulce ecuatoriano</i> | 109 |
| Tabla 20 <i>Moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de polimerización</i> | 110 |
| Tabla 21 <i>Moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de alquilación</i> | 112 |
| Tabla 22 <i>Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de propileno.</i> | 115 |
| Tabla 23 <i>Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de n-butileno.</i> | 116 |
| Tabla 24 <i>Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de 2-metilbut-2-eno.</i> | 116 |
| Tabla 25 <i>Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de etanotiol.</i> | 117 |

| | |
|---|-----|
| Tabla 26 <i>Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de 2-metilpropano.</i> | 118 |
| Tabla 27 <i>Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de cotrímeros de isobuteno</i> | 118 |
| Tabla 28 <i>Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula isobutano</i> | 119 |
| Tabla 29 <i>Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula isopentano</i> | 120 |
| Tabla 30 <i>Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula 1-buteno</i> | 120 |
| Tabla 31 <i>Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula 2,2-dimetilbutano</i> | 121 |
| Tabla 32 <i>Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula 2,2-dimetilpentano</i> | 121 |
| Tabla 33 <i>Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula 2,2,4-trimetilpentano</i> | 122 |
| Tabla 34 <i>Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula 2,2,5-trimetilhexano</i> | 123 |
| Tabla 35 <i>Nomenclatura IUPAC para los componentes de entrada del proceso de polimerización</i> | 123 |
| Tabla 36 <i>Nomenclatura IUPAC para los componentes de salida del proceso de polimerización</i> | 124 |

| | |
|--|-----|
| Tabla 37 <i>Nomenclatura IUPAC para los componentes de entrada del proceso de alquilación</i> | 126 |
| Tabla 38 <i>Nomenclatura IUPAC para los componentes de salida del proceso de alquilación</i> | 127 |
| Tabla 39 <i>Código SMILES para los componentes de entrada del proceso de polimerización</i> | 130 |
| Tabla 40 <i>Código SMILES para los componentes de salida del proceso de polimerización</i> | 131 |
| Tabla 41 <i>Código SMILES para los componentes de entrada del proceso de alquilación</i> | 133 |
| Tabla 42 <i>Código SMILES para los componentes de salida del proceso de alquilación</i> | 135 |
| Tabla 43 <i>Radar de biodisponibilidad de las moléculas de entrada de proceso de polimerización</i> | 138 |
| Tabla 44 <i>Radar de biodisponibilidad de las moléculas de entrada del proceso de polimerización</i> | 139 |
| Tabla 45 <i>Propiedades fisicoquímicas de los compuestos selectos de la corriente de entrada al proceso de polimerización</i> | 140 |
| Tabla 46 <i>Propiedades fisicoquímicas de los compuestos selectos de la corriente de salida del proceso de polimerización</i> | 142 |
| Tabla 47 <i>Datos de lipofilia para de los compuestos selectos de la corriente de entrada y salida al proceso de polimerización</i> | 143 |

| | |
|---|-----|
| Tabla 48 Datos de solubilidad para de los compuestos selectos de la corriente de entrada y salida al proceso de polimerización | 144 |
| Tabla 49 Datos de solubilidad en agua para de los compuestos selectos de la corriente de entrada al proceso de polimerización | 145 |
| Tabla 50 Estructura 2D y radar de biodisponibilidad de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de entrada del proceso de alquilación | 146 |
| Tabla 51 Propiedades fisicoquímicas de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de entrada del proceso de alquilación | 147 |
| Tabla 52 Datos de lipofilia de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de entrada del proceso de alquilación | 148 |
| Tabla 53 Datos de solubilidad de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de entrada del proceso de alquilación | 149 |
| Tabla 54 Estructura 2D y radar de biodisponibilidad de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de salida del proceso de alquilación | 150 |
| Tabla 55 Propiedades fisicoquímicas de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de salida del proceso de alquilación . | 153 |
| Tabla 56 Datos de lipofilia de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de salida del proceso de alquilación . | 154 |

| | |
|--|-----|
| Tabla 57 <i>Datos de solubilidad de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de salida del proceso de alquilación.</i> | 154 |
| Tabla 58 <i>Coordenadas cartesianas de la molécula de propileno</i> | 156 |
| Tabla 59 <i>Coordenadas cartesianas de la molécula de butileno</i> | 157 |
| Tabla 60 <i>Coordenadas cartesianas de la molécula de metano</i> | 158 |
| Tabla 61 <i>Coordenadas cartesianas de la molécula de etanotiol</i> | 159 |
| Tabla 62 <i>Coordenadas cartesianas de la molécula de 2-metilpropano</i> | 160 |
| Tabla 63 <i>Coordenadas cartesianas de la molécula de etileno</i> | 161 |
| Tabla 64 <i>Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del isobutano</i> | 162 |
| Tabla 65 <i>Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del isopentano</i> | 163 |
| Tabla 66 <i>Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del 1-buteno</i> | 164 |
| Tabla 67 <i>Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del 2,2-dimetilbutano</i> | 165 |
| Tabla 68 <i>Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del 2,2-dimetilpentano</i> | 166 |
| Tabla 69 <i>Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del 2,2,4-trimetilpentano</i> | 167 |
| Tabla 70 <i>Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del 2,2,5-trimetilhexano</i> | 169 |
| Tabla 71 <i>Energías de optimización y estructuras 3D para los componentes de entrada del proceso de polimerización</i> | 172 |
| Tabla 72 <i>Energías de optimización y estructuras 3D para los componentes de salida del proceso de polimerización</i> | 178 |

| | |
|--|-----|
| Tabla 73 <i>Energías de optimización y estructuras 3D para los componentes de entrada del proceso de alquiler</i> | 186 |
| Tabla 74 <i>Energías de optimización y estructuras 3D para los componentes de salida del proceso de alquiler</i> | 190 |

Índice de figuras

| | |
|--|----|
| Figura 1 <i>Diagrama de flujo del proceso de polimerización</i> | 34 |
| Figura 2 <i>Rol del proceso de polimerización y alquilación en la refinería</i> | 39 |
| Figura 3 <i>Diagrama de flujo de la unidad de alquilación</i> | 40 |
| Figura 4 <i>Reacciones primarias de alquilación</i> | 55 |
| Figura 5 <i>Reacciones de iniciación en el proceso de alquilación con HF</i> | 56 |
| Figura 6 <i>Reacciones de propagación en el proceso de alquilación con HF</i> | 56 |
| Figura 7 <i>Mecanismo de reacción de la etapa de isomerización</i> | 57 |
| Figura 9 <i>John Anthony Pople</i> | 59 |
| Figura 10 <i>Rotación de una molécula de Etano</i> | 67 |
| Figura 11 <i>Potencial energía y rotación para etano</i> | 67 |
| Figura 12 <i>Molécula de n-butano e Isobutano</i> | 68 |
| Figura 13 <i>Potencial energía y rotación para n-butano</i> | 69 |
| Figura 14 <i>Cloro enlace covalente</i> | 73 |
| Figura 15 <i>Estructura molecular del butano</i> | 73 |
| Figura 16 <i>Estructura molecular del eteno</i> | 74 |
| Figura 17 <i>Estructura molecular del etino</i> | 74 |
| Figura 18 <i>Ícono del software ChemDraw</i> | 77 |
| Figura 19 <i>Pantalla inicial de herramientas del software ChemDraw</i> | 78 |
| Figura 20 <i>Pestaña Structure del software ChemDraw</i> | 78 |
| Figura 21 <i>Ventana para insertar el nombre de la estructura</i> | 79 |
| Figura 22 <i>Estructura del isobutano</i> | 79 |
| Figura 23 <i>Opción para marcar el compuesto</i> | 80 |

| | |
|--|----|
| Figura 24 <i>Estructura de isobutano marcado</i> | 80 |
| Figura 25 <i>Pantalla inicial de herramientas del software ChemDraw</i> | 80 |
| Figura 26 <i>Opciones de la pestaña View</i> | 81 |
| Figura 27 <i>Ventana para generar las propiedades básicas</i> | 81 |
| Figura 28 <i>Generación de las propiedades básicas</i> | 81 |
| Figura 29 <i>Datos de las propiedades básicas</i> | 82 |
| Figura 30 <i>Opción para editar el texto</i> | 82 |
| Figura 31 <i>Estructura de isobutano marcada</i> | 83 |
| Figura 32 <i>Opción Analysis para generar el nombre IUPAC</i> | 83 |
| Figura 33 <i>Estructura del isobutano</i> | 84 |
| Figura 34 <i>Estructura de isobutano marcada</i> | 84 |
| Figura 35 <i>Pantalla inicial de herramientas del software ChemDraw</i> | 85 |
| Figura 36 <i>Generación del código SMILES en el software ChemDraw</i> | 85 |
| Figura 37 <i>Logo de la página web SwissADME</i> | 86 |
| Figura 38 <i>Interfaz de la página web SwissADME</i> | 87 |
| Figura 39 <i>Procesamiento de moléculas químicas en página web SwissADME</i> | 87 |
| Figura 40 <i>Procesamiento isobutano en página web SwissADME</i> | 88 |
| Figura 41 <i>Generación propiedades químicas de isobutano en página web SwissADME</i> | 88 |
| Figura 42 <i>Presentación de propiedades químicas de isobutano por página web SwissADME</i> | 89 |
| Figura 43 <i>Ícono del programa Avogadro</i> | 90 |
| Figura 44 <i>Pantalla inicial para abrir el archivo</i> | 90 |

| | |
|--|-----|
| Figura 45 <i>Ventana para abrir el archivo MDL Molfile (*.mol)</i> | 91 |
| Figura 46 <i>Generación de la molécula propileno en 3D</i> | 91 |
| Figura 47 <i>Generación de coordenadas 3D no optimizadas del molecular propileno</i> | 92 |
| Figura 48 <i>Obtención de las coordenadas 3D sin optimizar del propileno</i> | 92 |
| Figura 49 <i>Representación del ícono Auto Optimization Tool</i> | 93 |
| Figura 50 <i>Selección del campo de fuerza MMFF94</i> | 94 |
| Figura 51 <i>Obtención de la energía de optimización de la molécula del propileno</i> | 95 |
| Figura 52 <i>Ícono del programa Chemcraft</i> | 98 |
| Figura 53 <i>Ventana principal para abrir los archivos MDL Sdfile (*.mol)</i> | 99 |
| Figura 54 <i>Cinta de opciones de la pestaña Image del programa Chemcraft</i> | 99 |
| Figura 55 <i>Propeno en 3D en del programa Chemcraft</i> | 99 |
| Figura 56 <i>Elección del formato de presentación de la imagen 3D obtenida</i> | 100 |
| Figura 57 <i>Paso para guardar la imagen 3D de la molécula de propileno</i> | 101 |
| Figura 58 <i>Creación de archivos en el programa PyMOL</i> | 101 |
| Figura 59 <i>Adición de hidrogeno a la molécula de propileno</i> | 102 |
| Figura 60 <i>Visualización por defecto de la molécula de propeno en PyMOL</i> | 103 |
| Figura 61 <i>Presentación 3D en PyMOL de la molécula de propeno</i> | 103 |
| Figura 62 <i>Barra de acceso rápido de la interfaz del programa PyMOL e imagen mejorada</i> | 104 |
| Figura 63 <i>Propeno en 3D en del programa PyMOL</i> | 105 |

Resumen

La refinería es un conjunto de varias operaciones unitarias. La polimerización es la conversión de gases de olefina en productos líquidos, como por ejemplo el isobuteno a cotrimeros de isobuteno. La alquilación es un proceso de reacción de las olefinas como: propileno, butileno y amileno con el isobutano, generando así un producto llamado alquilato, que es un componente importante para la mezcla de la gasolina. En este trabajo se ha generado una lista de moléculas orgánicas presentes en los flujos de entrada y salidas de los procesos de polimerización y alquilación, que se ha obtenido mediante una búsqueda bibliográfica online por medio de bibliotecas digitales, repositorios y revistas científicos relevantes en el área de refinación de crudo. El estudio *in silico* se llevó a cabo mediante la química computacional, con el objetivo de encontrar todas las características fisicoquímicas de cada molécula. Los programas que se utilizó para elaborar dichos objetivos fueron; ChemDraw, Avogadro, Chemcraft y la plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME que proporciona propiedades fisicoquímicas. Mediante el uso de los programas anteriormente mencionados, se calculó las propiedades fisicoquímicas, estructuras 2D y se pudo visualizar estructuras 3D para cada molécula de entrada y salida de los procesos de polimerización y alquilación, donde se mostró, guardo y se reportó resultados para cada molécula individual en diferentes secciones con su respectiva clasificación de propiedades.

Palabras clave:

- **POLIMERIZACIÓN**
- **ALQUILACIÓN**
- ***IN SILICO***
- **COMPUTACIONAL**

Abstract

The refinery is a set of several unit operations. Polymerization is the conversion of olefin gases into liquid products, such as isobutene, to isobutene cotrimers. Alkylation is a process of reaction of olefins such as propylene, butylene and amylene with isobutane, thus generating a product called alkylate, which is an important component for the gasoline mixture. In this work, a list of organic molecules present in the inflows and outflows of the polymerization and alkylation processes has been generated, which has been obtained through an online bibliographic search through digital libraries, repositories and relevant scientific journals in the crude refining area. The *in silico* study was carried out using computational chemistry, in order to find all the physicochemical characteristics of each molecule. The programs that were used to elaborate these objectives were; ChemDraw, Avogadro, Chemcraft and the free platform of the Swiss Institute of Bioinformatics SwissADME that provides physicochemical properties. By using the aforementioned programs, the physicochemical properties, 2D structures were calculated and 3D structures could be visualized for each molecule in and out of the polymerization and alkylation processes, where results were shown, saved and reported for each molecule individual in different sections with their respective property classification.

Key words:

- **POLYMERIZATION**
- **ALKYLATION**
- **IN SILICO**
- **COMPUTATIONAL**

Capítulo I

Introducción

1.1. Antecedentes

La refinería de petróleo es un conjunto de operaciones integradas cuyo objetivo es engendrar productos de alto valor agregado como gas licado de petróleo (GLP), gasolina, combustible de aviación, aceites lubricantes, entre otros. Las configuraciones de refinería varían unas de otras dependiendo del tipo de crudo que se procese y por ende el tipo de productos a obtener (Speight, 2013), por lo tanto en el proceso de refinación se tendrán operaciones como las descritas a continuación:

- Destilación de crudo
- Craqueo Catalítico
- Hidrotratamiento
- Reformado
- Unidad de recuperación de azufre
- Isomerización
- Alquilación
- Polimerización
- Operaciones auxiliares

En años pasados el proceso de polimerización fue usado para la producción de gasolinas a partir de olefinas ligeras las cuales a su vez se sintetizaban de la unidad de craqueo térmico y catalítico, ya que tenía la ventaja de requerir un capital de inversión mucho menor que la inversión en el proceso de alquilación, pero posterior a esto los resultados reflejaron que la polimerización catalítica produjo la mitad del volumen de

gasolina que la alquilación por unidad de volumen de olefina que reacciono, adicional a esto, la necesidad de reducir el número de olefinas en la gasolina y elevar la calidad de la misma se optó por el proceso de alquilación en cuanto a producción de gasolinas de alta calidad (L.Kaes, 2000).

La relevancia del proceso de alquilación se debe al alto contenido de alquilato que se obtiene a partir de las reacciones exotérmicas entre el isobutano y las olefinas, su producción se ha aumentado debido a sus propiedades de alquilato como su baja volatilidad, bajo contenido de azufre, no contiene olefinas y tampoco aromáticos. El alquilato es fundamental para la producción de gasolina, este compuesto puede estar presente normalmente en un 15% en la mezcla y puede llegar hasta el 60% en la mezcla de gasolina (Treese et al., 2015).

En cada operación unitaria que se encuentra dentro de una refinería existen corrientes de entrada y salida de cada proceso, un cálculo in silico computacional se basa principalmente en el desarrollo por computadora, la química computacional fue diseñada para describir o diseñar las estructuras de las moléculas por el computador. Implica el uso de modelos matemáticos para predecir las propiedades químicas y físicas. La investigación a realizarse se fundamenta en el estudio del comportamiento de una mezcla, enfocándose en el análisis de las interacciones intermoleculares que se encuentran dentro de las corrientes de entrada y salida del proceso de polimerización y alquilación (Cuevas & Cortés, 2003).

1.2. Planteamiento del problema

La creciente demanda de productos derivados del crudo impulsa a desarrollar tecnologías que sinteticen productos más amigables con el planeta, incluso en los

últimos años el mundo energético ha experimentado el cambio de la matriz generadora de energía, apuntando hacia una estructura energética baja en carbono y alta en gas natural (Kan et al., 2019).

Las economías de los países en las Américas incluido Ecuador, entre otras cosas dependen mayormente del sector hidrocarburífero (Haro de Rosario et al., 2016), ya sea como productor de petróleo & gas o importador de derivados del hidrocarburo, de modo que, la producción y refinación nacional e importada debe cubrir las demandas (Granda Iñiguez, 2017), en los mercados de cada nación. Por ejemplo, para Ecuador el parque automotor ha tenido un crecimiento exponencial en los últimos (Cevallos, 2015) lo cual es un indicativo del incremento consumo de gasolinas en el país, así como la creciente demanda de GLP y otros derivados del petróleo (Sánchez & Reyes, 2016).

Estos productos de refino de los procesos de polimerización y alquilación están formados por un cúmulo de moléculas que dan lugar a dichos fluidos, debido a la naturaleza de cada una de estas especies químicas, estas poseen estructuras químicas individuales, diferente composición en cada flujo y diversas propiedades fisicoquímicas intrínsecas y configuraciones, que variarán unas de otras de acuerdo diferentes variables que intervienen en cada uno de los procesos como temperatura, presión catalizadores entre otros (Speight, 2013).

El comportamiento de las especies químicas en diferentes condiciones puede ser predecible al conocer propiedades intrínsecas de cada una de ellas. Con el cálculo in silico computacional de las moléculas que conforman las corrientes de entrada y salida de estos procesos, será posible conocer las propiedades estructuras químicas 2D de cada molécula (Rabanal Sanchez, 2019), propiedades químicas básicas mediante el uso del software ChemDraw, el procesamiento a través del código sistema

simplificado de entrada de líneas moleculares (SMILES) en la plataforma SwissADME para consecuentemente recuperar las propiedades fisicoquímicas, lipofílicas y solubilidad en agua de las especies químicas. Se consigue la obtención de estructuras 3D y la elaboración las coordenadas cartesianas en el espacio de cada molécula al ser procesadas en el software Chemcraft.

1.3. Justificación e importancia

Debido a la necesidad de elevar el rendimiento de los productos de refinación de mayor demanda en el mercado nacional e internacional , como el GLP, gasolina y número de octanos se procura mejorar el desarrollo de procesos de refinería como alquilación, polimerización e isomerización (Hsu et al., 2019).

De modo que se crea la necesidad de contribuir al desarrollo científico mediante el estudio *in silico*, teórico computacional de las todas las especies químicas reportadas en diversas bibliografías de las moléculas que forma parte de las corrientes de ingreso y salida de los procesos polimerización y alquilación.

De modo que se pueda pronosticar el comportamiento de estas especies químicas al formar parte mezclas hidrocarburíferas o cualquier otro proceso químico que potencie el producto de refinado del cual están formando parte, además, de predecir el posible comportamiento de estas moléculas en caso de ingesta.

En este trabajo se presenta el procesamiento y obtención de estructuras químicas 2D, propiedades químicas básicas, procesamiento SMILES, cálculo y obtención de estructuras 3D, así como la elaboración de archivos con coordenadas 3D para las moléculas más representativas de cada una de las corrientes de entrada y la salida de los procesos de polimerización y alquilación.

1.4. Objetivos

1.4.1 *Objetivos General*

Determinar computacionalmente las características fisicoquímicas de todos los posibles componentes químicos de los flujos de entrada y salida en una refinería de petróleo “Polimerización y Alquilación” 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 polimerización y alquilación
- 2 Establecer una lista de potenciales moléculas químicas de origen orgánico presentes en el flujo de salida en el proceso de polimerización y alquilación.
- 3 Procesar cada una de las moléculas químicas de origen orgánico, desde su nomenclatura, estructura química 2D, código SMILES y reporte de propiedades básicas como fórmula, peso molecular y composición elemental.
- 4 Calcular las propiedades fisicoquímicas básicas de cada molécula de origen orgánico, mediante la plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME.
- 5 Calcular las estructuras 3D de cada una las moléculas orgánicas, mediante el software Avogadro, para la obtención de las configuraciones y conformaciones finales.
- 6 Reportar mediante tablas los datos obtenidos para cada molécula química procesada en los pasos anteriores.

1.5. Hipótesis

El estudio *in silico* de moléculas orgánicas presentes en los flujos de entrada y salida de los proceso de “Polimerización y Alquilación” en una refinería de petróleo proveerá información importante acerca de las configuraciones, conformaciones y

potenciales interacciones intermoleculares que pueden presentar en mezcla, lo que será evaluado por simulaciones computacionales de propiedades fisicoquímicas y energéticas, generando el nexo entre la teoría química aplicada y los experimentos medibles *in situ*.

1.6. Variables de investigación

1.6.1. Variables independientes

Proceso de polimerización

Proceso de alquilación

1.6.2. Variables dependientes

Especies químicas

Propiedades fisicoquímicas

Estructuras moleculares

Energías de optimización

Capítulo II

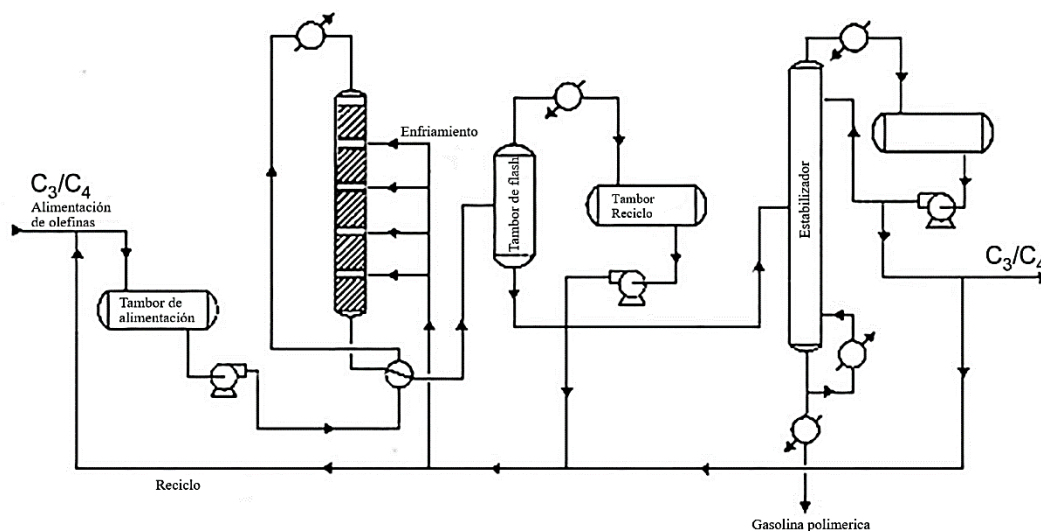
Fundamentación teórica

2.1. Polimerización

El proceso de polimerización se define como el proceso en el que a través de la conversión de gases de olefina se obtienen productos líquidos que pueden ser adecuados para la síntesis de gasolina o conocida como gasolina polimérica y otros combustibles líquidos (Garbrecht et al., 1987), un ejemplo de unidad de polimerización se presenta en la figura 1 (Speight, 2013).

Figura 1

Diagrama de flujo del proceso de polimerización



Nota. Tomado de (Speight, 2013).

2.2. Proceso de polimerización

2.2.1. Polimerización térmica y catalítica

Se usa para compuestos como propano y butano cuando no reacciona catalíticamente. Consiste en craqueo en fase vapor a temperaturas altas alrededor de

510 °C a 595 °C para conseguir que la reacción culmine (Speight, 2013). La polimerización catalítica se trata de reacciones de polimerización por medio de catalizadores ácidos, en donde los reactivos serán mayormente olefinas (Speight, 2013).

2.3. Endulzamiento de gas

Cuando la corriente de alimentación para el proceso de polimerización catalítica se trata de propeno y buteno, debe ser libre de azufre ya que envenena el catalizador y sin oxígeno porque altera el curso de las reacciones, así que dicha corriente debe ser tratada con cáustico y soluciones de amina, posterior a esto hace pasar por un flujo de agua para eliminar cáusticos y aminas respectivamente para finalmente ser sacado con gel de sílice o tamiz molecular (Garbrecht et al., 1987).

2.4. Reacciones

Las reacciones de polimerización en el procesamiento del petróleo suelen ser exotérmicas, por lo que el descontrol de temperatura en estos procesos ocurre cuando hay pérdida de refrigerante o agua de enfriamiento en el intercambiador de calor (Treese et al., 2015), la polimerización en ocasiones se usa como alternativa más barata que la alquilación.

2.4.1. Alimentación de la unidad de polimerización

Las olefinas o alquenos son hidrocarburos que tiene por lo menos un enlace doble carbono-carbono (C-C) y se encuentran en estado gaseoso aquellas moléculas que contienen cadenas de dos a cuatro átomos de carbono. Las olefinas ligeras son usadas para la producción de combustible de aviones mediante el proceso de polimerización, para dicho proceso se usa mezclas de gases olefinas como las presentadas en la tabla 1.

Tabla 1

Olefinas usadas para alimentación del proceso de Polimerización

| Compuesto | Fórmula | Composición % volumen |
|------------------|-------------------------------|------------------------------|
| hidrógeno | H ₂ | 0,01 |
| nitrógeno | N ₂ | 0,606 |
| etileno | C ₂ H ₄ | 0,102 |
| propano | C ₃ H ₆ | 0,172 |
| butano | C ₄ H ₈ | 0,039 |

Nota. Tomado de (Jiang et al., 2016).

Los gases usados para la alimentación del proceso de Polimerización también pueden ser los gases de refinería obtenidos en la destilación bruta, agrietamiento, hidrogenación destructiva u otro proceso térmico, estas corrientes pueden contener hasta un 50% de olefinas, con pequeñas cantidades de amilenos en ellas (Stahly, 2019).

2.4.2. Productos de la unidad de polimerización

Los productos de una unidad de polimerización son la nafta de polimerización o nafta pesada, *n*-Butano y GLP (Al-Qahtani & Elkamel, 2015). Debido a que las reacciones de polimerización son reacciones exotérmica, la relación entre la temperatura y las constantes de equilibrio es inversamente proporcional, de modo que no es beneficioso en polimerización de olefinas (Jiang et al., 2016)

Los cortes de isobuteno o isobuteno en refinerías C4 se usan para producir el dímero (diisobutiloeno) o polímero C5 usado en la preparación de iso octano. Los altos rendimientos de la reacción se deben por la adición de 50-70% de ácido sulfúrico sobre

isobuteno a temperatura alrededor de 180 a 225 °F, no obstante, trímero y polímeros más pesados son de utilidad limitada (Munday, John C, J Mcgee, 1948). La polimerización de propeno da el dímero (olefina C6) y (olefina C9), el butileno produce dímero (olefina C8) y del amileno se sintetiza el dímero (olefina 10) (ver tabla 2) (L.Kaes, 2000).

2.5. Catalizadores

La composición de la corriente de alimentación debe estar libre de azufre para evitar daños en el catalizador, debido a que compuestos con azufre envenena el mismo, las especies químicas no deben ser básicas ya que neutralizan el catalizador; el oxígeno es indeseable la composición de alimentación porque altera el mecanismo de reacción (Speight, 2020). El ácido fosfórico líquido, ácido fosfórico sobre tierra de diatomeas, pellets de pirofosfato de cobre, *films* de ácido fosfórico sobre cuarzo, solo los más usados como catalizadores en reacciones de polimerización. (Speight, 2013). Según (Munday, John C, J Mcgee, 1948) para las reacciones de polimerización en líquida se puede optimizar la cantidad y calidad del polímero sintetizado al usar como diluyente y disolvente catalítico un disolvente de nafta de petróleo.

2.6. Formación de coque

El coque es la formación de carbonatos deficientes en hidrógeno, que suelen impregnarse en el catalizador envenenándolo, su formación está ligada a reacciones de polimerización, condensación térmica y deshidrogenación catalítica (Treese et al., 2015) como se presenta en la reacción siguiente.



Tabla 2*Reacciones químicas del proceso de polimerización*

| Reacción | Compuesto reactivo | Moles de monómero | Compuesto reactivo fórmula | Composición (vol) | Compuesto reactivo | Compuesto producto fórmula | Composición (vol) |
|-----------------|---------------------------|--------------------------|-----------------------------------|--------------------------|---------------------------|-----------------------------------|--------------------------|
| 1 | propileno | 2 | C ₃ H ₆ | 1 | Olefina C6 | C ₆ H ₁₂ | 0,78 |
| 2 | propileno | 3 | C ₃ H ₆ | 1 | Olefina C9 | C ₉ H ₂₀ | 0,1 |
| 3 | butileno | 2 | C ₄ H ₈ | 1 | Olefina C8 | C ₈ H ₁₈ | 0,82 |

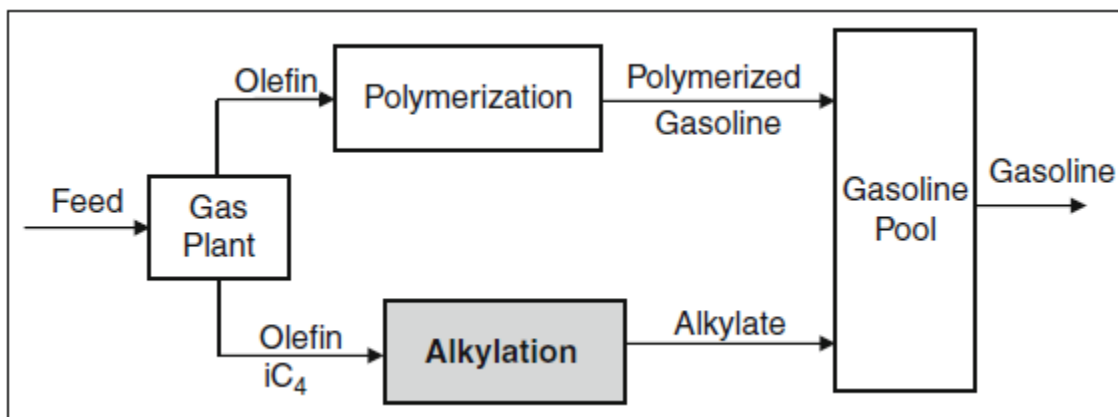
Nota. Tomado de (L.Kaes, 2000).

3. Alquilación

La Alquilación es un proceso exotérmico utilizado en las refinerías con el fin de convertir hidrocarburos de bajo peso molecular que son obtenidos de la unidad de la FCC como propilenos, butilenos y amilenos con isobutano a hidrocarburos de alto peso molecular (parafinas $C_5 - C_{12}$) altamente ramificadas llamado alquilato (Mohamed et al., 2010). Los componentes principales del alquilato son isopentanos e isoocctanos como el 2,2,4-trimetilpentano que contiene un alto índice de octano de 100. La olefina más utilizada es butileno debido a que produce una mayor cantidad de alquilato (Ancheyta, 2011).

Figura 2

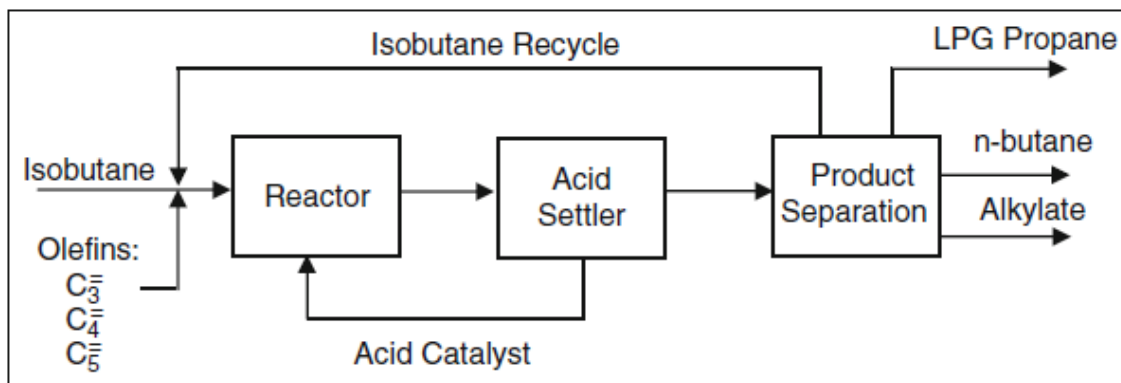
Rol del proceso de polimerización y alquilación en la refinería



Nota. Tomado de (Mohamed et al., 2010).

Figura 3

Diagrama de flujo de la unidad de alquilación



Nota. Tomado de (Mohamed et al., 2010).

3.1. Proceso de alquilación

El proceso de alquilación puede ser llevado a cabo a una temperatura de reacción inferior a 500 °C y presión inferior a 30 bares en presencia de catalizadores ácidos como ácido fluorhídrico, ácido sulfúrico o líquidos iónicos (Treese et al., 2015). Este proceso también puede llevarse a cabo en ausencia de catalizadores en condiciones severas $T = 500\text{ °C}$ y $P = 200\text{-}400$ bares (Mohamed et al., 2010).

En la industria del petróleo el proceso de alquilación es catalizada por ácido fluorhídrico y ácido sulfúrico, la principal diferencia en usar estos catalizadores es debido a que el isobutano es insoluble en ácido sulfúrico y modernamente soluble en ácido fluorhídrico. Al emplear el proceso de alquilación el ácido sulfúrico como catalizador es beneficiado debido a que el ácido fluorhídrico emite vapor y este vapor es muy peligroso para el ser humano ya que puede penetrar y dañar tejidos y huesos (Fahim et al., 2010).

La alimentación para la unidad de alquilación generalmente proviene de la unidad de FCC como se muestra en la tabla 3 que posteriormente reaccionara con la adición de isobutano. La reacción es altamente exotérmica y es catalizada por ácido fluorhídrico o ácido fluorhídrico. La tabla 4 muestra una composición típica de materia prima para la unidad de esterificación que también se puede usar como materia prima para una unidad de alquilación, al igual que la alimentación para la síntesis de TAME como se muestra en la tabla 5 es asociado al proceso de alquilación (J. Wauquier, 2004).

Tabla 3

Alimentación para el proceso de alquilación que se obtiene a partir de las corrientes de salida de la unidad de craqueo catalítico.

| Nombre | Fórmula | Composición wt% |
|------------|-------------|-----------------|
| propeno | C_3H_6 | 0,8 |
| isobutano | C_4H_{10} | 39,98 |
| n-butano | C_4H_{10} | 11,14 |
| isobuteno | C_4H_8 | 0,76 |
| 1-buteno | C_4H_8 | 15,15 |
| 2-buteno | C_4H_8 | 31,67 |
| penteno | C_5H_{10} | 0,5 |
| isopentano | C_5H_{10} | - |

Nota. Tomado de (J. Wauquier, 2004).

Tabla 4

Alimentación para la unidad de esterificación asociada al proceso de alquilación

| Nombre | Fórmula | Composición wt% |
|---------------|--------------------------------|------------------------|
| propano | C ₃ H ₈ | 0,1 |
| isobutano | C ₄ H ₁₀ | 34,6 |
| n-butano | C ₄ H ₈ | 11 |
| isobuteno | C ₄ H ₈ | 15 |
| 1-buteno | C ₄ H ₈ | 12,6 |
| 2-buteno | C ₄ H ₈ | 25,2 |
| 1,3-butadieno | C ₄ H ₆ | 0,5 |

Nota. Tomado de (J.-P. Wauquier, 1994).

Tabla 5

Alimentación para la síntesis de TAME asociado al proceso de alquilación.

| Nombre | Fórmula | Composición wt% |
|------------------|--------------------------------|------------------------|
| 1- penteno | C ₅ H ₁₀ | 5 |
| 2-penteno | C ₅ H ₁₀ | 18 |
| 2-metil-1-buteno | C ₅ H ₁₀ | 9 |
| 2-metil-2-buteno | C ₅ H ₁₀ | 16 |
| 3-metil-1-buteno | C ₅ H ₁₀ | 1 |
| ciclopenteno | C ₅ H ₈ | 2 |
| isopentano | C ₅ H ₁₂ | 40 |
| n-pentano | C ₅ H ₁₂ | 8 |

Nota. Tomado de (J. Wauquier, 2004).

3.2. Variables de proceso

En el proceso de alquilación es de suma importancia controlar las variables de proceso para minimizar las reacciones secundarias ya que puede afectar el producto deseado que es el alquilato como la calidad y el rendimiento (Gary et al., 2007). Al hablar de variables de proceso se hace referencia a la temperatura de reacción, fuerza del ácido, concentración del isobutano y la velocidad espacial de la olefina (Leffler, 2008).

En la reacción de alquilación la temperatura baja presenta una buena calidad de producto, cuando se utiliza como catalizador ácido sulfúrico la temperatura tiene un mayor efecto en comparación al ácido fluorhídrico. En la alquilación con ácido sulfúrico la disminución del octanaje de uno a tres se debe al cambio de temperatura del reactor de 25 a 55 °F (-4 a 13 °C) y la alquilación con ácido fluorhídrico el aumento de temperatura del reactor de 60 a 125 °F (16 a 52 °C) produce una disminución de 3 octanos (Gary et al., 2007).

La fuerza del ácido en el proceso de alquilación no debe ser menos al 85% en peso, cuando se ocupa el catalizador de ácido sulfúrico la mejor calidad y los rendimientos más altos se obtienen con concentraciones de 93 a 95% en peso de ácido, 1 a 2% de agua y el resto de diluyentes de hidrocarburos, cuando la fuerza del ácido aumenta a un 93% en peso eleva la calidad de alquilato en una a dos octanos (Mohamed et al., 2010). En la alquilación con ácido fluorhídrico el índice de octano más alto se alcanza cuando la fuerza de acidez se encuentra en el rango de 86 a 90% en peso, con menos del 1% de agua (Gary et al., 2007).

La concentración de isobutano debe ser lo suficientemente necesaria para reaccionar con las olefinas, es decir tener una relación de isobutano/olefina en la entrada del reactor de 5:1 o 15:1 para obtener un alto índice de octano, alto rendimiento y reducir las reacciones secundarias (Gary et al., 2007).

(Gary et al., 2007), indican que la reducción de la velocidad espacial de la olefina aumenta el octanaje y reduce el consumo de ácido, la velocidad espacial representa el tiempo de reacción o tiempo de contacto, el tiempo de contacto para la alquilación con ácido fluorhídrico es de 5 a 25 min y para la alquilación con ácido sulfúrico de 5 a 40 min (Mohamed et al., 2010).

El tipo de olefina reacciona con el isobutano en presencia de un catalizador, ya sea ácido sulfúrico o ácido fluorhídrico, índice de octano del alquilato varía según el catalizador que se utilice en el proceso de alquilación. (Mohamed et al., 2010), menciona que al reaccionar el buteno usando un catalizador de ácido sulfúrico da los mejores índices de octano, como se muestra en la siguiente tabla.

Tabla 6

Índice de octano del alquilato según el tipo de olefina

| Tipo de olefina | RON (Número de octano de investigación) | | MON (Número de octanaje del motor) | |
|-----------------|---|--------------------------------|------------------------------------|--------------------------------|
| | HF | H ₂ SO ₄ | HF | H ₂ SO ₄ |
| propileno | 91-93 | 91-92 | 89-91 | 90-92 |
| 1-buteno | 90-91 | 97-98 | 88-89 | 93-94 |

| Tipo de olefina | RON | RON | MON | MON |
|-----------------|-------|-------|-------|-------|
| 2-buteno | 96-97 | 97-98 | 92-93 | 93-94 |
| isobuteno | 94-95 | 90-91 | 91-92 | 88-89 |
| amileno | 90-92 | 91-92 | 88-89 | 89-91 |

Nota. Tomado de (Mohamed et al., 2010).

3.3. Catalizadores

3.3.1. Alquilación con catalizador líquido iónico

(Cho Timken et al., 2018), describe que el catalizador líquido iónico ácido cloroaluminato de n-butilpiridinio ($C_5H_5NC_4H_9Al_2Cl_7$) es efectivo en el proceso de alquilación donde la alimentación de olefinas C_5 con isobutano (ver tabla 6) pueden producir gasolina aquilada de buena calidad. Las condiciones de operación al utilizar este catalizador pueden estar a una temperatura entre $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$ a $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ y una presión entre 300 kPa a 2500 kPa, con una relación molar de 2 a 16 de isoparafina a olefina respectivamente, la tabla 7 muestra las composiciones de salida del proceso de alquilación. La composición del catalizador se indica en la tabla 8.

Tabla 7

Componentes y composiciones de entrada para el proceso de alquilación usando un catalizador líquido iónico.

| Nombre | Fórmula | Composición wt% |
|-----------|----------|-----------------|
| propano | C_3H_8 | 0,8 |
| propileno | C_3H_6 | 0,9 |

| Nombre | Fórmula | Composición wt% |
|-----------------------|--------------------------------|-----------------|
| isobutano | C ₄ H ₁₀ | 17,5 |
| n-butano | C ₄ H ₁₀ | 3 |
| buteno | C ₄ H ₈ | 24,9 |
| isopentano | C ₅ H ₁₂ | 29,8 |
| n-pentano | C ₅ H ₁₂ | 2,1 |
| 3-metil-1-buteno | C ₅ H ₁₀ | 1,4 |
| 1-penteno | C ₅ H ₁₀ | 4,5 |
| 2-metil-1-buteno | C ₅ H ₁₀ | 6,8 |
| 2-penteno | C ₅ H ₁₀ | 6,4 |
| 2-metil-2-buteno | C ₅ H ₁₀ | 2,2 |
| ciclopenteno | C ₅ H ₈ | 0,15 |
| 2-metil-1,3-butadieno | C ₅ H ₈ | 0,11 |
| trans-1,3-pentadieno | C ₅ H ₈ | 0,04 |
| ciclopentadieno | C ₅ H ₆ | 0,05 |

Nota. Tomado de (Cho Timken et al., 2018).

Tabla 8

Componentes y composiciones de salida del proceso de alquilación usando un catalizador líquido iónico como el cloroaluminato de n-butilpiridinio.

| Nombre | Fórmula | Composición wt% |
|---------|--------------------------------|-----------------|
| pentano | C ₅ H ₁₂ | 6,9 |
| hexano | C ₆ H ₁₄ | 2,8 |

| Nombre | Fórmula | Composición wt% |
|----------|---------------------------------|-----------------|
| heptano | C ₇ H ₁₆ | 4,5 |
| octano | C ₈ H ₁₈ | 51,4 |
| nonano | C ₉ H ₂₀ | 26,2 |
| decano | C ₁₀ H ₂₂ | 3,9 |
| undecano | C ₁₁ H ₂₄ | 3,9 |
| dodecano | C ₁₂ H ₂₆ | 0,4 |

Nota. Tomado de (Cho Timken et al., 2018).

Tabla 9

Composición del catalizador líquido iónico ácido cloroaluminato de n-butilpiridinio.

| Elemento | Composición wt % |
|-----------|------------------|
| aluminio | 11,18 |
| cloro | 56,50 |
| carbono | 25,95 |
| hidrógeno | 3,29 |
| nitrógeno | 3,32 |

Nota. Tomado de (Cho Timken et al., 2018).

(Liu et al., 2014), presenta un catalizador diferente al ácido fluorhídrico y ácido sulfúrico debido que al utilizar los mencionados catalizadores da como resultados problemas de corrosión, seguridad y ambientales, este catalizador iónico fue desarrollado por la Universidad de petróleo de China que fue sintetizado a partir de clorhidrato de trietilamina Et_3NHCl , $AlCl_3$ anhidro y $CuCl$ y presentó ventajas como la no inflamabilidad, alta estabilidad térmica, baja presión de vapor y un alto rango de temperatura en fase líquida. Las tablas 9 y 10 muestran las composiciones de la

alimentación a la unidad de alquilación y la tabla 11 muestra las composiciones de salida en la refinería de Lanzhou, PetroChina.

Tabla 10

Composiciones de isobutano como materia prima a la entrada de la unidad de alquilación de la refinería de Lanzhou, PetroChina.

| Nombre | Fórmula | Composición wt% |
|-----------|--------------------------------|-----------------|
| isobutano | C ₄ H ₁₀ | 98,2 |
| n-butano | C ₄ H ₈ | 1,42 |

Nota. Tomado de (Liu et al., 2014).

Tabla 11

Composiciones de 2-buteno como materia prima a la entrada de la unidad de alquilación de la refinería de Lanzhou, PetroChina.

| Nombre | Fórmula | Composición wt% |
|----------------|--------------------------------|-----------------|
| isobutano | C ₄ H ₁₀ | 2,78 |
| n-butano | C ₄ H ₈ | 3,24 |
| trans-2-buteno | C ₄ H ₈ | 46,78 |
| cis-2-buteno | C ₄ H ₈ | 43,16 |
| 1-buteno | C ₄ H ₈ | 1,04 |
| isobuteno | C ₄ H ₈ | 1,3 |

Nota. Tomado de (Liu et al., 2014).

Tabla 12

Componentes y composiciones a la salida de la unidad de alquilación de la refinería de Lanzhou.

| Nombre | Fórmula | Composición wt% |
|-----------------------|--------------------------------|-----------------|
| n-pentano | C ₅ H ₁₀ | 1,28 |
| n-hexano | C ₆ H ₁₄ | 1,89 |
| n-heptano | C ₇ H ₁₆ | 1,94 |
| 2,2,4-trimetilpentano | C ₈ H ₁₈ | 44,36 |
| 2,3,3-trimetilpentano | C ₈ H ₁₈ | 18,08 |
| 2,3,4-trimetilpentano | C ₈ H ₁₈ | 17,15 |
| 2,3-dimetilhexano | C ₈ H ₁₈ | 1,62 |
| 2,4-dimetilhexano | C ₈ H ₁₈ | 1,68 |
| 2,5-dimetilhexano | C ₈ H ₁₈ | 3,59 |
| 3,4-dimetilhexano | C ₈ H ₁₈ | 0,26 |
| nonano | C ₉ H ₂₀ | 8,15 |

Nota. Tomado de (Liu et al., 2014).

3.3.2. Alquilación con ácido sulfúrico

La alquilación con ácido sulfúrico se encuentra disponible en dos procesos, el proceso de auto-refrigeración y el proceso de refrigeración. En el proceso de auto-refrigeración la evaporación de isobutano y el butileno induce el enfriamiento de la emulsión en el reactor. En el proceso de refrigeración una unidad de refrigeración proporciona el enfriamiento al reactor. El reactor opera a una temperatura de 10 °C y una presión de 420 kPa por al menos 20 minutos para el proceso de refrigeración, para el proceso de auto-refrigeración el reactor opera a una temperatura de 5 °C y una presión de 90 kPa por al menos 40 minutos (Mohamed et al., 2010).

Según (P. Leprince, 1995) los productos del proceso de alquilación de isobutano con olefinas (C₄) catalizadas con ácido sulfúrico y ácido fluorhídrico son mezclas de

hidrocarburos de 5 a 12 átomos de carbono por molécula, en la tabla 12 se muestran los *componentes y las composiciones más representativas de los alquilatos industriales*.

3.3.3. Alquilación con ácido fluorhídrico

En la alquilación de ácido fluorhídrico se encuentran el proceso de Phillip. Al utilizar ácido fluorhídrico como catalizador no se necesita de una agitación mecánica, en si este proceso permite un diseño más simple debido a que el isobutano contiene una alta solubilidad en presencia del ácido y el ácido fluorhídrico tiene una baja viscosidad. El reactor opera a una temperatura aproximada de 30 °C lo que permite el uso de agua como refrigerante del reactor y el tiempo de residencia del reactor es de 20 a 40 segundos (Mohamed et al., 2010).

Tabla 13

Composición de alquilatos industriales resultantes de la alquilación de isobutano con olefina C₄.

| Nombre | Fórmula | Composición ¹ Composición ² | |
|-------------------|--------------------------------|---|-------|
| | | % vol | % vol |
| propano | C ₃ H ₈ | 0,05 | - |
| isobutano | C ₄ H ₁₀ | 0,04 | 0,13 |
| <i>n</i> -butano | C ₄ H ₁₀ | 0,92 | 4,87 |
| isopentano | C ₅ H ₁₀ | 8,76 | 5,1 |
| <i>n</i> -pentano | C ₅ H ₁₀ | 0,23 | 0,01 |
| 2,2-dimetilbutano | C ₆ H ₁₄ | - | - |
| 2,3-dimetilbutano | C ₆ H ₁₄ | 5,36 | 2,38 |
| 2-metilpentano | C ₆ H ₁₄ | 1,29 | 0,91 |

| Nombre | Fórmula | % vol | % vol |
|-----------------------|--------------------------------|--------------|--------------|
| 3-metilpentano | C ₆ H ₁₄ | 0,64 | 0,4 |
| <i>n</i> -hexano | C ₆ H ₁₄ | - | - |
| 2,2-dimetilpentano | C ₇ H ₁₆ | 0,25 | 0,17 |
| 2,4-dimetilpentano | C ₇ H ₁₆ | 3,62 | 1,95 |
| 2,2,3-trimetilbutano | C ₇ H ₁₆ | 0,01 | - |
| 3,3-dimetilpentano | C ₇ H ₁₆ | 0,01 | - |
| 2-metilhexano | C ₇ H ₁₆ | 0,22 | 0,24 |
| 3-metilhexano | C ₇ H ₁₆ | 0,14 | 0,12 |
| 3-etilpentano | C ₇ H ₁₆ | 0,01 | 0,01 |
| <i>n</i> -heptano | C ₇ H ₁₆ | - | - |
| 2,2,4-trimetilpentano | C ₈ H ₁₈ | 24,2 | 38,02 |
| 2,2-dimetilhexano | C ₈ H ₁₈ | 0,04 | - |
| 2,4-dimetilhexano | C ₈ H ₁₈ | 2,89 | 4,19 |
| 2,5-dimetilhexano | C ₈ H ₁₈ | 4,94 | 3,57 |
| 2,2,3-trimetilpentano | C ₈ H ₁₈ | 1,53 | 1,35 |
| 3,3-dimetilhexano | C ₈ H ₁₈ | - | - |
| 2,3,4-trimetilpentano | C ₈ H ₁₈ | 13,15 | 9,63 |
| 2,3-dimetilhexano | C ₈ H ₁₈ | 3,41 | 4,9 |
| 4-metilheptano | C ₈ H ₁₈ | - | - |
| 2-metilheptano | C ₈ H ₁₈ | 0,08 | 0,09 |
| 2,3,3-trimetilpentano | C ₈ H ₁₈ | 11,47 | 8,14 |
| 3,4-dimetilhexano | C ₈ H ₁₈ | 0,26 | 0,59 |

| Nombre | Fórmula | % vol | % vol |
|----------------------|--------------------------------|-------|-------|
| 3-metilheptano | C ₈ H ₁₈ | 0,23 | 3,2 |
| 2,2,5-trimetilhexano | C ₉ H ₂₀ | 7,2 | 3,2 |

¹Composición de alquilatos industriales resultantes de la alquilación de isobutano con olefina C₄ en presencia de H₂SO₄ como catalizador.

²Composición de alquilatos industriales resultantes de la alquilación de isobutano con olefina C₄ en presencia de HF como catalizador.

3.4. Mecanismo de reacción

(Meyers, 1996). Afirma que el alquilato es uno de los componentes importantes para gasolina debido a su alto índice de octanaje, que típicamente es de 96 octanos de investigación (RON). La olefina (butileno) reacciona con el isobutano en el proceso de alquilación en presencia de un catalizador anteriormente mencionado para formar isómeros trimetilpentano de alto octanaje. La reacción primaria es la siguiente:

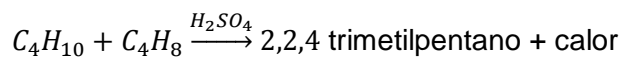


Tabla 14

Composiciones de alquilato en presencia de HF como catalizador.

| | | Composición ¹ | Composición ² | Composición ³ | Composición ⁴ |
|-----------------------|--------------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| Nombre | Fórmula | wt% | wt% | wt% | wt% |
| isopentano | C ₅ H ₁₂ | 0,5 | 0,3 | 1 | 1 |
| dimetilpentano | C ₇ H ₁₆ | 0,8 | 0,7 | 0,8 | 0,3 |
| metilpentano | C ₆ H ₁₄ | 0,2 | 0,2 | 0,3 | - |
| 2,3-dimetilpentano | C ₇ H ₁₆ | 2 | 1,5 | 1,2 | 29,5 |
| 2,4-dimetilpentano | C ₇ H ₁₆ | - | - | - | 14,3 |
| 2,2,4-trimetilpentano | C ₈ H ₁₈ | 66,2 | 48,6 | 38,5 | 36,3 |
| 2,2,3-trimetilpentano | C ₈ H ₁₈ | - | 1,9 | 0,9 | - |
| 2,3,4-trimetilpentano | C ₈ H ₁₈ | 12,8 | 22,2 | 19,1 | 7,5 |
| 2,3,3-trimetilpentano | C ₈ H ₁₈ | 7,1 | 12,9 | 9,7 | 4 |
| dimetilhexano | C ₈ H ₁₈ | 3,4 | 6,9 | 22,1 | 3,2 |
| nonano | C ₉ H ₂₀ | 5,3 | 4,1 | 5,7 | 3,7 |

¹ Composición de alquilato a partir de isobutileno puro como materia prima en presencia de HF como catalizador.

² Composición de alquilato a partir de 2-Buteno puro como materia prima en presencia de HF como catalizador.

³ Composición de alquilato a partir de 1-Buteno puro como materia prima en presencia de HF como catalizador.

⁴ Composición de alquilato a partir de propileno puro como materia prima en presencia de HF como catalizador.

El proceso de alquilación con ácido fluorhídrico como catalizador origina reacciones entre isoparafinas y olefinas, los carbonos terciarios como el isobutano reaccionan con el butileno y las reacciones que se dan en el reactor de alquilación son complejas en la figura 3 se puede observar los productos de reacción primaria de olefinas. La alquilación es una reacción del mecanismo de ion-carbenio. En esta reacción se encuentra el paso de iniciación, el paso de propagación y el paso de isomerización (Meyers, 2003).

En la etapa de iniciación se generan los cationes butilo terciario que se llevara a cabo en las reacciones de alquilación (ver figura 4) (Meyers, 2003). En La etapa de propagación el catión butilo terciario reacciona con la olefina para formar un ion carbenio más grande que posteriormente este ion deberá extraer un hidruro de una molécula de isobutano para generar una isoparafina más un carbo catión terciario nuevo (ver figura 5) (Meyers, 2003). La etapa de isomerización es muy importante para obtener un alto índice de octano en los productos de alquilación, la isomerización de 1-buteno a 2-buteno aumenta la producción de trimetilpentanos (ver figura 6) (Meyers, 2003).

Figura 4

Reacciones primarias de alquilación

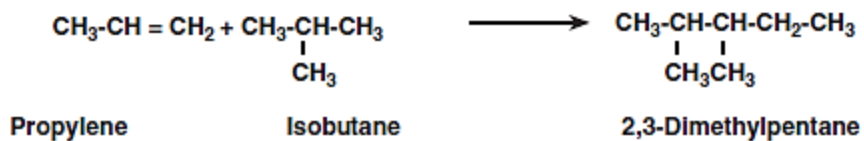
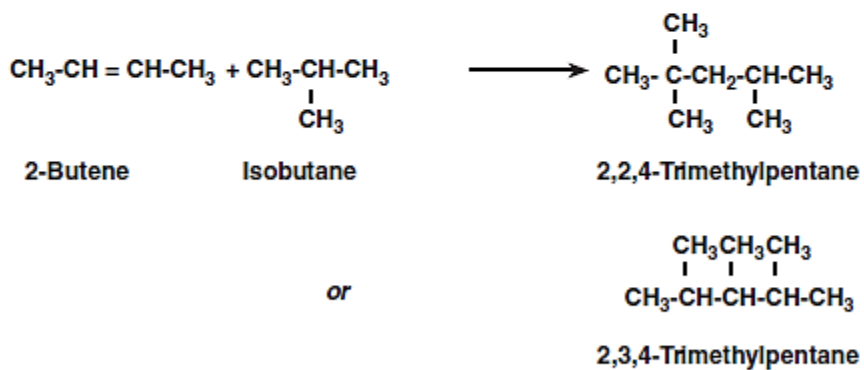
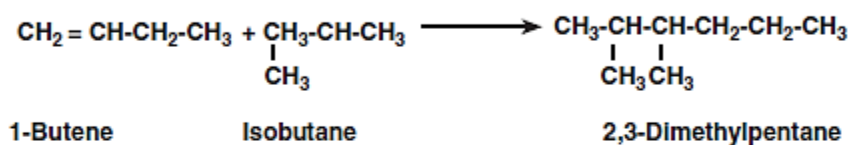
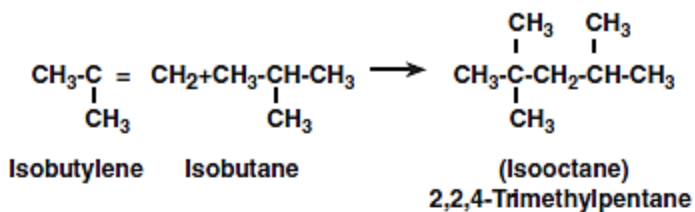


Figura 5

Reacciones de iniciación en el proceso de alquilación con HF

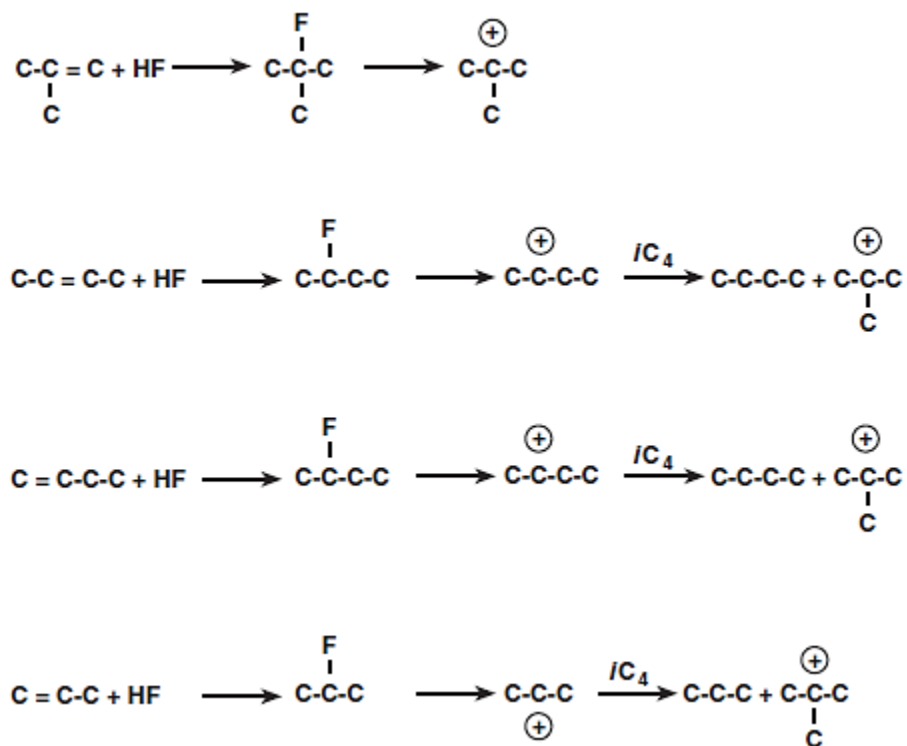


Figura 6

Reacciones de propagación en el proceso de alquilación con HF

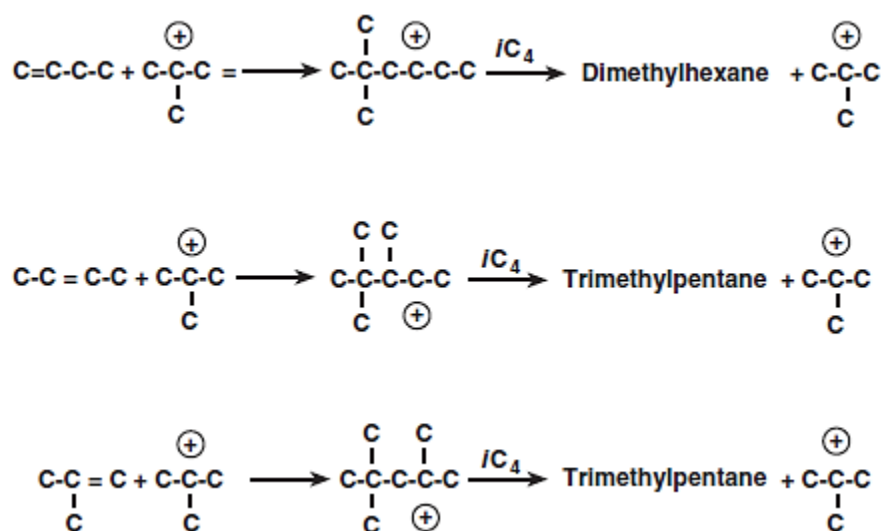
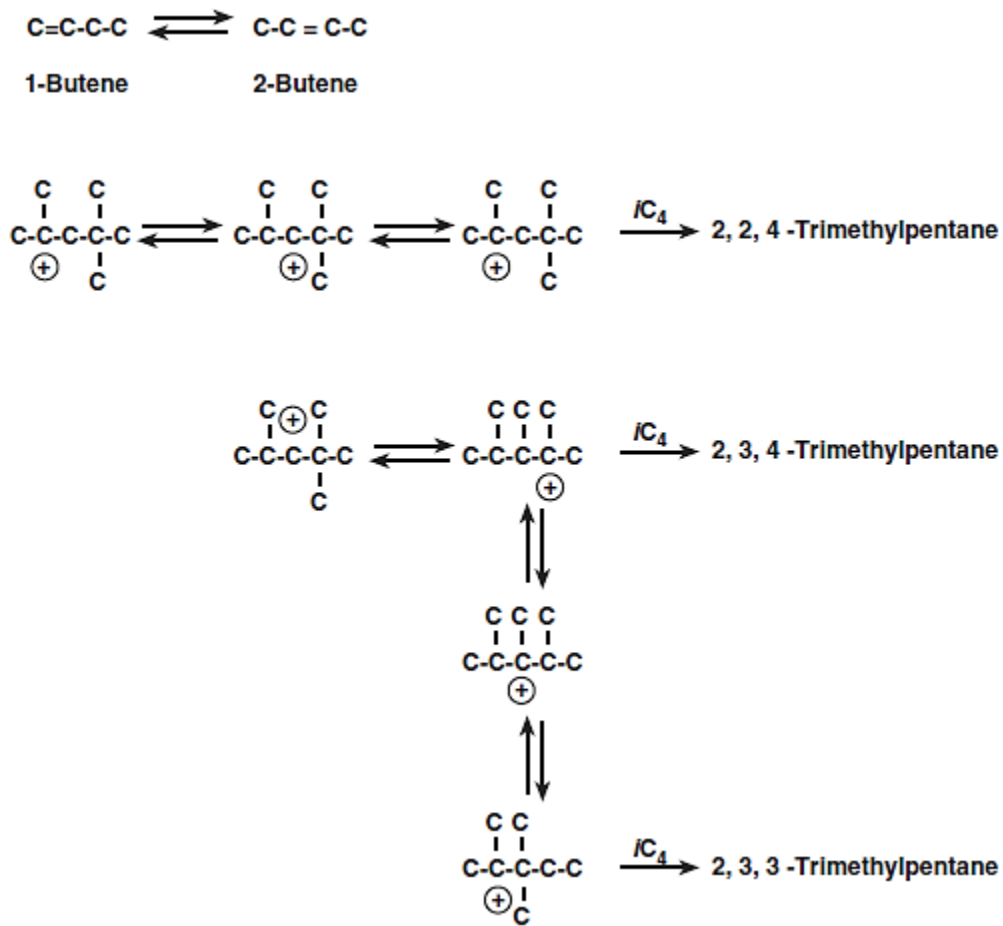
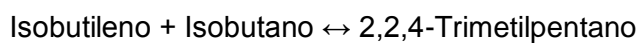
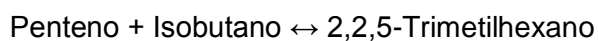
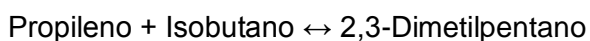
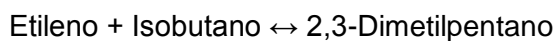


Figura 7

Mecanismo de reacción de la etapa de isomerización.



3.5. Reacciones típicas de alquilación



(Mohamed et al., 2010)

cis-2-Butileno+Isobutano ↔ 2,2,4- Trimetilpentano

trans-2-Butileno+ Isobutano ↔ 2,2,4-Trimetilpentano

2-metil-2-butileno + Isobutano ↔ 2,2,5-Trimetilhexano

Isobutileno + Isobutano ↔ 2,2,4-Trimetilpentano

Propileno + Isobutano ↔ 2,2-Dimetilpentano

(Gary et al., 2007).

4. Química computacional

4.1. Historia

4.1.1. Primera era

La química computacional tiene sus inicios con físico austríaco Erwin Schrödinger (1887-1961) en 1925 cuando desarrolla la ecuación que lleva su apellido, en la que se explica el espectro de los sistemas hidrogenoides (Mó & Yáñez, 2011), posterior a esto muchos científicos relevantes en la química cuántica como Douglas Hartree y Vladímir A. Fok , George G. Hall, John C. Slater, entre otros, intentaron dar resolución a dicha ecuación dando como inicio las eras de la química computacional.

4.1.2. Segunda era

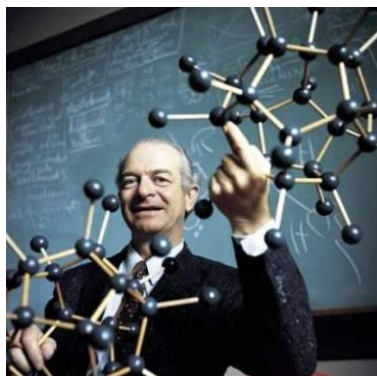
El Método de Hartree-Fock proveyó una descripción cuantitativa de la estructura electrónica de átomos polielectrónicos, con la aparición de los métodos ab initio de concluyo que, este modelo físico es incorrecto por que odiaba el hecho de que el movimiento de los electrones correlacionado entre sí, ya que al ser partículas con carga iguales se repelen (Mó & Yáñez, 2011).

Los Métodos *ab initio* son el origen de modelos interpretativos, capaces de advertir fenómenos, por ejemplo, los efectos inductivos, hiperconjugativos o la resonancia relacionada con la aromaticidad, además este método facilitó las geometrías de sistemas para los cuales no había información experimental en lo absoluto (Mó & Yáñez, 2011).

La metodología (MP_n) (n = 2, 3...6), John A. Pople (1925-2004) (Gordon, 2005) ganador de premio Nobel de Química en 1998, establece los cimientos de la química cuántica moderna al incursionar en el desarrollo de la metodología MP_n (n = 2, 3...6), con una eficiencia superior al 90% en recuperación de la correlación electrónica basando en ellos estudios de funciones de onda Hartree-Fock, además hace uso de la teoría de perturbaciones publicada en 1934 por Christian Møller y Milton S. Plesset para afinar sus estudios de la correlación electrónica (Mó & Yáñez, 2011).

Figura 8

John Anthony Pople



Nota. Tomado de (Gordon, 2005).

4.1.3. Tercera era

Los avances tecnológicos en la computación para este punto de la historia son de vital importancia y que surgen el Método CCSD(T), las teorías G_n (n =1-4) de Pople

y colaboradores (9,10), además ya se cuentan con equipos computacionales capaces de alcanzar la precisión química requerida, de modo que estos métodos es posible obtener resultados cuyas de magnitudes termodinámicas tiene una precisión de ± 1 kcal/mol (Mó & Yáñez, 2011).

4.1.4. Cuarta era de la química cuántica

A criterio personal de muchos científicos de este campo científico asevera que actualmente se está viviendo ya en la cuarta era de la química cuántica, debido a la calidad tecnológica de los equipos que mayormente se utilizan para los cálculos de química cuántica, hoy se logran obtener resultados con gran precisión y exactitud, por ejemplo según (Mó & Yáñez, 2011) el cálculo los estados propios de rotación-vibración de moléculas poliatómicas y lograr conseguir frecuencias de vibración con una precisión única de hasta $0,001\text{cm}^{-1}$.

4.2. Optimización de moléculas o estructuras

La especificación de la geometría molecular se puede definir mediante una estructura simplificada con una línea detallada de entrada molecular (SMILES), que es una forma de escribir una cadena de texto que define los átomos y la conectividad, esta es importante debido a que se tiene que describir una base de datos importantes del compuesto (Young, 2001a).

4.3. Energía de optimización 3D

La optimización de la geometría molecular busca encontrar el menor valor de energía en la superficie potencial, a fin de tener un equilibrio en la estructura del sistema molecular, Es por ello que se busca tener un gradiente de cero en la energía, la superficie de energía potencial está dada por la variación de la energía con mínimos cambios en la estructura molecular, de modo que la superficie de energía potencial

puede ser definida como la relación entre la estructura molecular y la energía resultante (Gutiérrez Pérez, 2013).

4.3.1. Campo de fuerza MMFF94

El campo de fuerza molecular MMFF94 es uno de los campos de fuerza más populares en el diseño de simulaciones de dinámica molecular que también se utiliza para la optimización de la geometría, funciona bien para una amplia gama de pequeñas moléculas orgánicas. El usuario puede controlar los factores de escala, distancia de corte y los términos incluidos en el campo de fuerza (Young, 2001b). El campo de fuerza MMFF94 no se puede utilizar para completar isómeros ya que no permite una comparación significativa entre moléculas con diferentes conectividades (Champagne, Deleuze, & Proft, 2014).

5. Cálculos *in silico*

5.1. Simulaciones computacionales

La simulación computacional es más económicas y seguras que las típicas experiencias en laboratorios. En adición a ello, según (Alvear, 2007) las simulaciones computacionales poseen ventajas y desventajas. La simulación computacional es más económicas y seguras que las típicas experiencias en laboratorios. En adición a ello, según (Alvear, 2007) las simulaciones computacionales poseen ventajas y desventajas como se presenta a continuación.

5.1.1. Ventajas

- Con el mismo Modelo matemático se puede realizar varias interacciones modificando factores o variables de la simulación.
- En algunas áreas científicas y no científicas las simulaciones son las únicas formas factibles de análisis o diseño de procesos y o sistemas.

- En el uso los modelos de simulación se puede modificar la complejidad y las restricciones del proceso en cuestión sin que represente más inversión económica.

5.1.2. Desventajas

- Para la construcción de los programas de simulación es requerido que las personas que lo diseñan tengan experiencia en esa área de estudio, caso contrario los resultados de dicho programa no serán confiables.
- Dependiendo de la complejidad de la simulación del proceso los resultados obtenidos serán difíciles de interpretar.
- Es importante considerar que, el programa de simulación procederá con los cálculos y generara un resultado, el programa como tal no considera errores de tipeo por parte del programador, por ende, los resultados obtenidos serán matemáticamente correctos, pero, no serán del todo confiables.

6. Química pura

La química pura se encarga de estudiar los compuestos orgánicos e inorgánicos de manera distinta, a partir de esto se desenlazan dos ramas de estudio importantes que es la química orgánica y la química inorgánica. La química orgánica estudia los compuestos de carbono, y la química inorgánica estudia los compuestos que no poseen enlaces entre carbono e hidrogeno (Brown, LeMay, Bursten, & Burdge, 2004).

7. Propiedades fisicoquímicas

Las propiedades fisicoquímicas son: “Parte de la Química que estudia los fenómenos químicos o de interés para la Química desde un punto de vista o metodología físico, aunque sin excluir métodos químicos como, por ejemplo, los analíticos. La estructura fisicoquímica de los materiales tiene gran importancia

principalmente en cuanto a la disposición de los átomos, iones o moléculas que constituyen el sólido y de las fuerzas de enlace entre ellos” (CEDE, s. f).

7.1. Pesos moleculares

Según Chang (2002) “La masa molecular algunas veces denominada peso molecular es la suma de las masas atómicas en una molécula. En general, es necesario multiplicar la masa atómica de cada elemento por el número de átomos de ese elemento presente en la molécula y sumar todos los elementos”.

“El peso molecular de una sustancia puede determinarse por varios métodos; la mayoría de ellos utilizan la ley de Raoult, es decir, los cambios observados en la presión de vapor después de la adición de un soluto no volátil a un disolvente puro, implicando medidas de disminuciones del punto de fusión (método de Rast), aumentos en el punto de ebullición, y a la igualación de la presión de vapor (métodos osmométricos e isopiésticos). Los pesos moleculares de sustancias volátiles pueden determinarse por aplicación de la ley de los gases ideales, evaporando un peso conocido de sustancia a temperatura dada y midiendo el volumen y la presión resultante, o por espectroscopía de masas. Los métodos basados en la espectroscopía de masas son los más sencillos, pero requieren de instrumentación costosa” (CEDE, s. f.).

7.2. Fórmulas químicas

Se las usa para expresar la composición de las moléculas y los compuestos iónicos, por medio de los símbolos químicos. Composición significa no solamente los elementos presentes. Sino también la proporción en la cual combinan los átomos. Es necesario familiarizarse con dos tipos de fórmulas: Fórmulas moleculares y fórmulas empíricas.

7.2.1. Fórmulas moleculares

Una fórmula molecular indica el número exacto de átomos de cada elemento que están presentes en la unidad más pequeña de una sustancia. En el análisis sobre moléculas, cada ejemplo se presenta con su fórmula molecular entre paréntesis. Así, es la fórmula molecular del hidrógeno. O: representa al oxígeno. O₃ es el ozono y H₂O representa al agua. El subíndice numérico indica el número de átomos de cada elemento que están presentes. En el caso H₂O no aparece un subíndice para el O debido a que solamente hay un átomo de oxígeno en una molécula de agua: de esta manera se omite el subíndice "uno" de las fórmulas. Observe que oxígeno y ozono (O₃) son alótropos del oxígeno. Un alótropo es uno de dos o más formas diferentes de un elemento. Dos formas alotrópicas del elemento carbono —diamante y grafito—, son completamente diferentes no solo en sus propiedades químicas, sino también en su costo relativo.

7.2.2. Fórmulas empíricas

La fórmula molecular del peróxido de hidrógeno. Sustancia que se utiliza como antiséptico y como agente blanqueador para fibras textiles y decolorante del cabello. Esta fórmula indica que cada molécula de peróxido de hidrógeno contiene dos átomos de hidrógeno y dos átomos de oxígeno- La relación de átomos de hidrógeno a átomos de oxígeno en esta molécula es 2:2 o 1:1. La fórmula empírica del peróxido de hidrógeno es HO. En consecuencia, la fórmula empírica indica cuáles están presentes y la relación mínima, en número entero entre sus átomos, pero no necesariamente indica el número real de átomos en una molécula determinada. Como otro ejemplo, considere el compuesto hidrazina (N₂H₄), que se utiliza como combustible para cohetes. La fórmula empírica de la hidrazina es NH₂. La relación entre el nitrógeno y el hidrógeno es 1:2, tanto en la fórmula molecular como en la fórmula empírica (N₂H₄); sólo la fórmula

molecular indica el número real de átomos de N (dos) y de H (cuatro) presentes en una molécula de hidrazina.

Las fórmulas empíricas son las fórmulas químicas más sencillas: se escriben de manera que los subíndices de las fórmulas moleculares se reduzcan a los números enteros pequeños que sea posible. Las fórmulas moleculares son las fórmulas verdaderas de las moléculas. Cuando los químicos analizan un compuesto desconocido, generalmente el primer paso consiste con la determinación de su fórmula empírica.

Para muchas moléculas, la fórmula molecular y la fórmula empírica son la misma. Algunos ejemplos lo constituyen el agua (H_2O), el amoníaco (NH_3), el dióxido de carbono (CO_2) y el metano (CH_4). (Chang, 2002).

7.2.3. Lipofilia

Dentro de un compuesto la lipofilia es considerada como un importante factor de diseño debido a que en términos de solubilidad la unión de grupos metilo aumenta considerablemente y se encuentra relacionado en los procesos de absorción para determinar las propiedades de los fármacos y para predecir la permeabilidad (Galbis, 2004). La lipofilia además de ser usado para predecir la permeabilidad de los animales también se puede relacionar con el peso molecular y la capacidad de formar puentes de hidrogeno (Álvarez, Pérez, & Sanz, 2015).

7.3. Solubilidad

Se denomina solubilidad cuando los iones o moléculas de un líquido o sólido se separan para formar enlaces con las moléculas del disolvente, durante la disolución se debe suministrar energía para vencer las fuerzas intermoleculares. Los enlaces ion-dipolo se forman por la atracción electrostática entre el extremo positivo de la molécula

polar con un ion negativo y el extremo negativo de la molécula polar con un ion positivo (Morrison & Boyd, 1998). Por ejemplo, la solubilidad de los alcanos es significativo debido a que representa una propiedad física de interés para un químico. Log S (ESOL) y Log S (Ali) describen un método topológico simple implementado para calcular la solubilidad, además existe otro método fragmentario por el programa FILTER-IT (Delaney, 2004).

8. Propiedades estructurales

8.1. Confórmeros

La estereoquímica es una rama de la química que tiene por objetivo el estudio de las moléculas en su distribución espacial. Las conformaciones moleculares son resultado de diferentes arreglos atómicos producto de la rotación de los enlaces que tienen diferentes disposiciones (Morrison & Boyd, 1998). Los enlaces sigma (σ) tiene forma de cilindro simétrico, por lo que en el caso de tener un plano que atraviesa un orbital de enlace simple C-C la intersección parece tener forma de círculo, debido a esto la rotación es posible alrededor de los enlaces C-C en molécula. Los confórmeros estables con aquellos en los que, seis enlaces carbono-hidrógeno (C-H) están lo más lejos posible unos de otros, para alcanos C_5^+ la isomería conformacional se vuelve más compleja, la diferencia energética que tiene cada una de las conformaciones (McMurry, 2012).

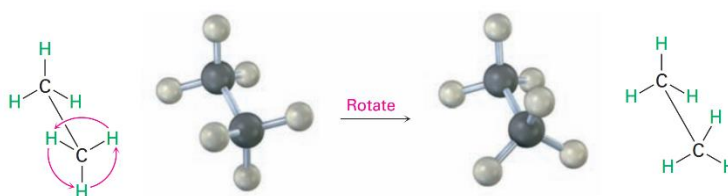
8.1.1. Conformaciones del etano

La rotación alrededor del enlace C-C se da libremente, de modo que cambia constantemente las relaciones espaciales entre los átomos de hidrógenos y carbono (McMurry, 2012), esto se produce debido a la simetría cilíndrica del enlace σ . Experimentalmente se ha demostrado que para cada rotación se requiere una

determinada cantidad de energía, para el caso del etano oscila entre 12 kJ/mol a 2,9 kcal/mol , dependiendo de la estabilidad de la conformación.

Figura 9

Rotación de una molécula de Etano

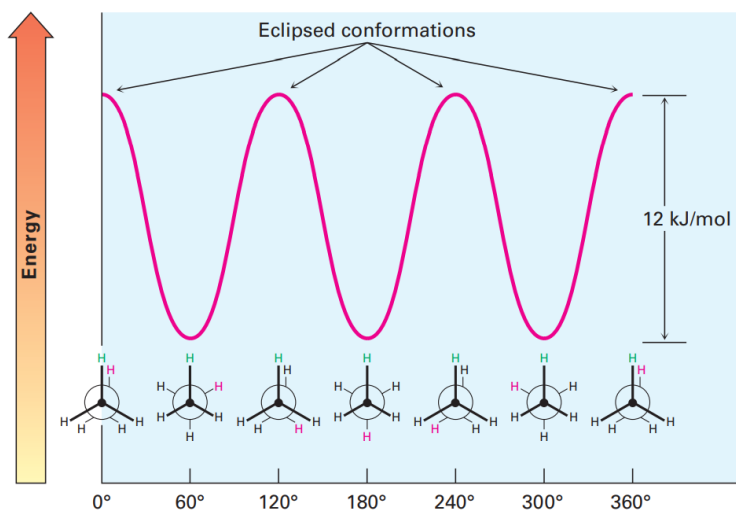


Nota. Tomado de (McMurry, 2012)

Experimentalmente se ha demostrado que para cada rotación se requiere una determinada cantidad de energía, para el caso del etano oscila entre 1,9 kcal/mol , dependiendo de la estabilidad de la conformación, como se muestra en la siguiente figura.

Figura 10

Potencial energía y rotación para etano



Nota. Tomado de (McMurry, 2012).

8.1.2. Conformaciones del propano

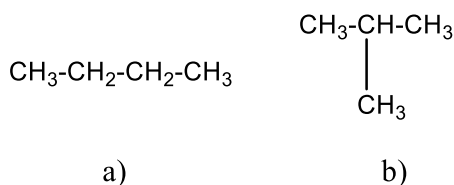
La rotación de para una molécula de propano se produce en torno a dos enlaces C-C teniendo en cuenta que el grupo metilo es más grande que el hidrógeno, posteriormente es dicha rotación será libre, para lo cual la energía requerida no será mayor a 3,3 kcal/mol. (Morrison & Boyd, 1998)

8.1.3. Conformaciones del butano

El butano Presenta dos estructuras diferentes a considerar el *n*-butano e isobutano ya que el *n* butano tiene una cadena lineal de 4 átomos de carbono mientras que la del isobutano tiene una cadena de 3 átomos de carbono con una ramificación de un átomo de carbono.

Figura 11

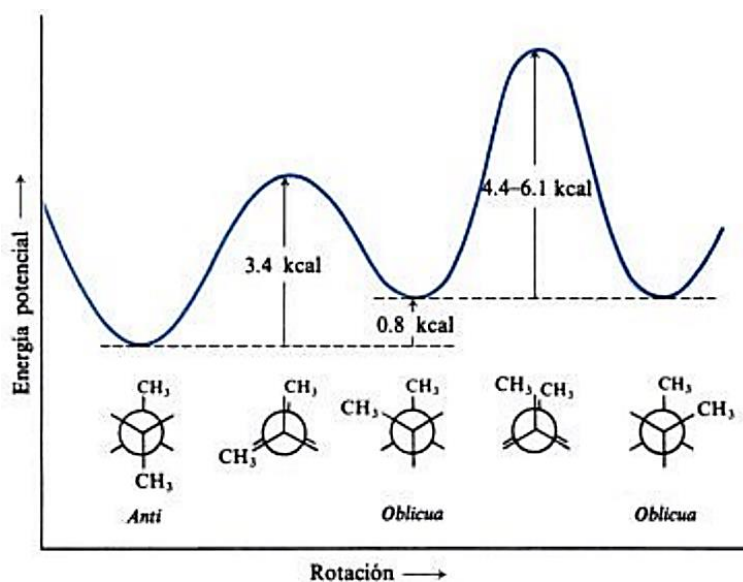
Molécula de n-butano e Isobutano



El *n*-butano tiene un enlace central C-C y dos sustituyentes metilos, lo cual da lugar a dos conformaciones anti y oblicuas cómo se muestra en la figura siguiente, siguiendo la conformación anti la más estable con una energía para rotación de 0.8 kcal/mol (Morrison & Boyd, 1998).

Figura 12

Potencial energía y rotación para *n*-butano



Nota. Tomado de (Morrison & Boyd, 1998).

8.2. Isómeros

Los isómeros son compuestos importantes en el proceso de polimerización y alquilación debido que poseen la misma fórmula molecular, pero con diferente estructura, estos compuestos llamados isómeros se dividen en dos grandes grupos dentro en la isomería de compuestos orgánicos que son los isómeros constitucionales o estructurales y estereoisómeros.

Los isómeros constitucionales o estructurales se encuentran conectados de una manera distinta, por ejemplo, el isobutano que es el hidrocarburo utilizado como reactivo en el proceso de alquilación contiene cuatro carbonos y diez hidrógenos al igual que es *n*-butano, estos dos compuestos poseen una misma fórmula molecular, con la diferencia que el *n*-butano posee una estructura lineal y el isobutano una estructura ramificada.

Los estereoisómeros únicamente difieren la orientación de sus átomos en el espacio. El prefijo cis o trans del but-2-eno determina que orientación espacial se encuentra el grupo metilo. El isómero cis tiene el grupo metilo al mismo lado del enlace doble, el isómero trans tiene los grupos iguales en lados opuestos. También son llamados isómeros geométricos ya que tienen diferente geometría ya sea cis o trans de un grupo de doble enlace (Wade, 2012).

9. Interacciones intermoleculares

Las fuerzas intermoleculares son fuerzas de atracción entre las moléculas. Estas fuerzas son las responsables del comportamiento no ideal de los gases. Ejercen aún más influencia en las fases condensadas de la materia, es decir, en los líquidos y los sólidos. A medida que baja la temperatura de un gas disminuye la energía cinética promedio de sus moléculas. Así, a una temperatura suficientemente baja, las moléculas ya no tienen la energía necesaria para liberarse de la atracción de las moléculas vecinas. En este momento, las moléculas se agregan y forman pequeñas gotas de líquido. Esta transición de la fase gaseosa a la fase líquida se conoce como condensación.

9.1. London

Si un ion o una molécula polar se acerca a un átomo (o una molécula no polar), la distribución electrónica del átomo (o molécula) se distorsiona por la fuerza que ejerce el ion o [a molécula polar, dando lugar a una clase de dipolo. Se dice que el dipolo del átomo (o molécula no polar) es un dipolo inducido porque la separación de sus cargas positiva y negativa se debe a la proximidad de un ion o una molécula polar. La atracción entre un ion y el dipolo inducido se conoce como interacción ion-dipolo inducido, en tanto que la atracción entre una molécula polar y el dipolo Inducido se conoce como interacción incluido.

En 1930, Fritz London ofreció una interpretación de los dipolos temporales desde el punto de vista de la mecánica cuántica. London demostró que la magnitud de esta fuerza de atracción es directamente proporcional al grado de polarización de' átomo o molécula. Como se esperarla, [as fuerzas de dispersión pueden ser muy débiles. Esto es válido para el helio, que tiene un punto de ebullición de sólo 4.2 K o — 269 °C. (Chang, 2002)

9.2. Puente de hidrógeno

Se forman puentes de hidrogeno entre dos átomos electronegativos, es decir ocurre cuando un átomo electronegativo el cual cede el puente de hidrógeno se une de forma covalente con otro átomo electronegativo que recibe el puente de hidrógeno, por ejemplo, de este modo se forman el agua y otras especies químicas como alcoholes, ácidos, éteres entre otros (Díaz & Pena 2002).

En el caso de alcoholes y éteres son los puentes de hidrógeno los que les confieren la característica de solubilidad en agua mientras en los hidrocarburos esto no ocurre, así mismo en los puntos de ebullición de los hidrocarburos y de alcoholes Presentan características similares por efectos de dichos enlaces, aunque los puntos ebullición de los alcoholes son mayores qué el de los hidrocarburos las dos especies químicas comparten qué, la temperatura del punto de ebullición aumenta conforme aumenta el número de carbonos en su estructura. (Morrison & Boyd, 1998) como se muestra en la tabla 2.

Tabla 15

Puntos de ebullición de algunos alcanos y alcoholes

| Formula | Nombre IUPAC | Punto de ebullición °C |
|----------------------------------|--------------|------------------------|
| CH ₄ | metano | -161,5 |
| C ₂ H ₆ | etano | -172 |
| C ₃ H ₈ | propano | -42,1 |
| C ₅ H ₁₂ | pentano | 36 |
| CH ₃ OH | metanol | 64,5 |
| C ₄ H ₁₀ O | 1-butanol | 117 |
| | 1-pentanol | 138 |
| C ₅ H ₁₂ O | | |

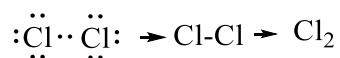
Nota. Tomado de (Morrison & Boyd, 1998).

9.3. Enlace covalente

Los enlaces covalentes ocurren cuando dos átomos o grupos de átomos electronegativamente iguales se unen compartiendo electrones con el fin de alcanzar la regla del octeto en su último nivel de energía (Cárdenas 2003), cabe recalcar que en los enlaces covalentes se pueden compartir dos y hasta tres pares de electrones.

9.3.1. Enlace covalente puro no polar

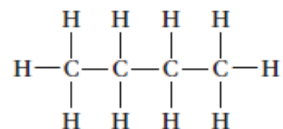
Son aquellos que permiten la existencia de moléculas diatómicas ya que comparte electrones dos átomos de la misma especie, por ejemplo, el cloro tiene siete electrones de valencia en su último nivel de energía procura buscar completar la ley del octeto, por lo cual obtiene el átomo faltante con otro átomo semejante, como se muestra en la figura para el caso del cloro diatómico (Cárdenas 2003).

Figura 13*Cloro enlace covalente***9.3.2. Enlace covalente polar y covalente coordinado**

Enlace covalente polar ocurre cuando, en un par de átomos los electrones se comparten de forma no equitativa y al ser polar presenta diferencias en las cargas (Audesirk, Audesirk, Byers, 2003). El enlace covalente coordinado Se produce cuando dos electrones son contribuidos por un único átomo, por ejemplo, el ion amonio (Cárdenas 2003).

9.4. Enlace covalente simple

Los enlaces covalentes simples se representan cuando el átomo de carbono comparte sus cuatro electrones valencias con átomos de hidrogeno u otros átomos formando cuatro enlaces covalentes simples. Los hidrocarburos llamados alcanos forman enlaces covalentes simples, es por ello que se denominan hidrocarburos saturados porque cada carbono se encuentra enlazado con un átomo de hidrogeno. Su fórmula general se representa C_nH_{2n+2} (Moore et al., 2011).

Figura 14*Estructura molecular del butano*

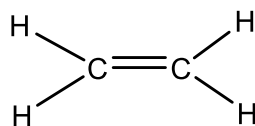
Nota. Tomado de (Moore et al., 2011).

9.5. Enlace covalente doble

Los enlaces covalentes de dobles hacen referencia a los hidrocarburos llamados alquenos u también conocidos como olefinas que poseen un doble enlace (C=C) entre dos carbonos, que son caracterizados por las reacciones de su doble enlace. Debido al doble enlace, a los alquenos se les puede considerar como un grupo funcional. Su fórmula general se representa $C_n H_{2n}$ (Wade, 2012).

Figura 15

Estructura molecular del eteno



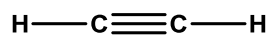
Nota. Tomado de (Wade, 2012).

9.6. Enlace covalente triple

Los enlaces covalentes de triples hacen referencia a los hidrocarburos llamados alquinos o acetilenos que poseen un triple enlace ($C \equiv C$) entre dos átomos de carbono y su grado de saturación es de dos, estos alquinos no son muy comunes en la naturaleza y poseen reacciones similares a la de los alquenos. Su fórmula general se presenta $C_n H_{2n-2}$ (Wade, 2012).

Figura 16

Estructura molecular del etino



Nota. Tomado de (Wade, 2012).

Capítulo III

Metodología

3.1. Generación de moléculas presentes en los flujos de entrada a los procesos

3.1.1. *Búsqueda de datos internacionales*

Para la generación de la lista de especies química presentes en los flujos de entrada y salida de los procesos de polimerización y alquilación, se ha realizado un estudio en diferentes bibliografías online relacionados al área de refinación de crudo internacional, recopilando así varios compuestos químicos reportados por diversos autores internacionales obtenidos en diferentes temperaturas, diferentes tipos de catalizador, y métodos de obtención.

3.1.2. *Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano*

La información correspondiente a petróleo ecuatoriano ha sido tomada de una de las tesis que se encuentra en el repositorio de la Universidad Central del Ecuador en el apartado correspondiente a la facultad de ingeniería en geología, minas, petróleos y ambiental. La composición de gas dulce reportada es apta para el proceso de polimerización y corresponde a la planta de planta de gas Shushufindi en Ecuador (Brito & Cevallos, 2013), los análisis cromatográficos muestran que en el gas ecuatoriano mencionado tiene hasta la olefina C_3 y carece de hidrógeno, oxígeno, agua, ácido sulfhídrico.

3.1.3. *Obtención, organización y reporte de resultados*

A través de la investigación bibliográfica la información recopilada para las corrientes de ingreso en el proceso de polimerización y alquilación se presenta en el capítulo 4 del presente trabajo. En la cual se muestra una lista general de los componentes orgánicos en las corrientes de alimentación para dichos procesos.

3.2 Generación de moléculas presentes en los flujos de salida a los procesos

3.2.1. Búsqueda de datos internacionales

Para el proceso de polimerización los productos típicos de una unidad de polimerización es nafta de polimerización o nafta pesada, *n*-Butano y gas licuado de petróleo (Al-Qahtani & Elkamel, 2015). Los compuestos mayoritarios del GLP son propano y butano (Raslavičius et al., 2014) las composiciones de los otros compuestos son tan pequeñas que son despreciables para algunos autores, pero son identificables mediante cromatografía de gases (Pasban et al., 2017). Para el caso olefinas C8 y olefinas C9 (Jiang et al., 2016) consisten principalmente sus diversos isómeros como se muestra en la tabla 21.

Para el proceso de alquilación los componentes y composiciones a la salida del proceso de alquilación que comprende una alimentación de olefinas con isobutano usando un catalizador líquido iónico como el cloroaluminato de N-butilpiridinio (Cho Timken et al., 2018), así también composición de alquilatos industriales resultantes de la alquilación de isobutano con olefina C₄ en presencia de H₂SO₄ y HF como catalizador (P. Leprince, 1995).

Componentes y composiciones a la salida del proceso de alquilación a partir de propileno, isobutileno, 2- Buteno y 1-Buteno puro como materia prima en presencia de HF como catalizador (Meyers, 2003). En la refinería de Lanzhou, PetroChina se tiene componentes y composiciones utilizando un catalizador líquido iónico compuesto de clorhidrato de trietilamina (Liu et al., 2014).

3.2.2. Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano

3.2.3. Obtención, organización y reporte de resultados

Ecuador tiene tres refinерías la de Esmeraldas, La Libertad y Amazonas (Shushufindi), no se ha encontrado bibliografía que registra el proceso de polimerización y alquilación en las refinерías ecuatorianas por lo que no ha sido posible generar una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida del proceso de polimerización y alquilación.

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

3.3.1. Generación de estructuras químicas en 2D

La generación de estructuras químicas en 2D se hizo posible gracias a la ayuda del programa ChemDraw que es un software que dibuja moléculas y proporciona información textual, muy fácil de usar ya que se puede copiar y pegar fácilmente en documentos de Word, además a eso tiene la opción de guardar las moléculas dibujadas en diferentes formatos. Para generar una estructura química en 2D se realiza los siguientes pasos:

Paso 1: ingresar al programa ChemDraw.

Figura 17

Ícono del software ChemDraw

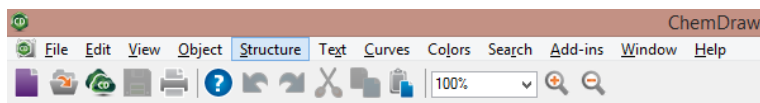


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 2: en la pantalla inicial de ChemDraw seleccionar en *Structure*.

Figura 18

Pantalla inicial de herramientas del software ChemDraw

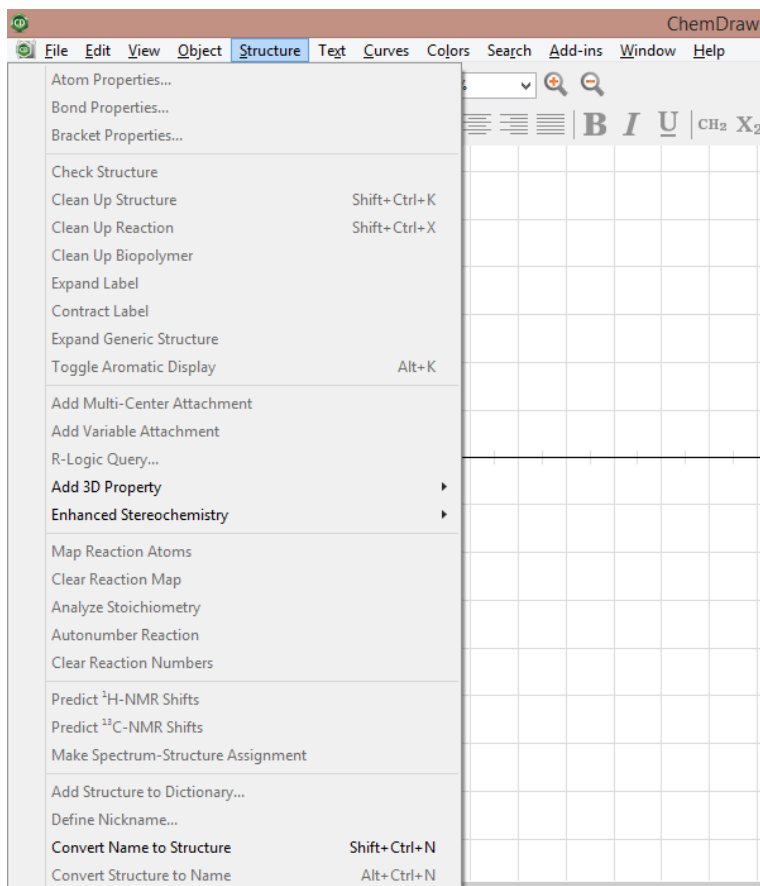


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 3: seleccionar *Convert Name to Structure*.

Figura 19

Pestaña Structure del software ChemDraw

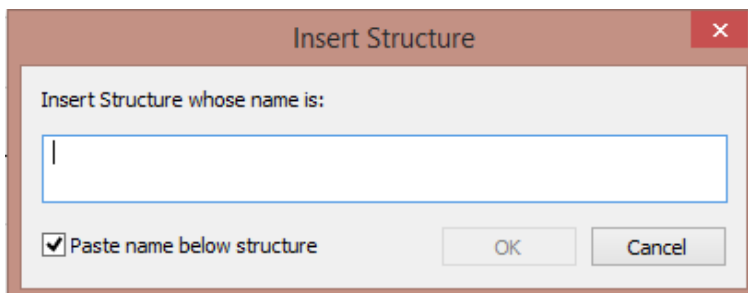


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 4: escribir el nombre del compuesto químico para generar la estructura en 2D.

Figura 20

Ventana para insertar el nombre de la estructura

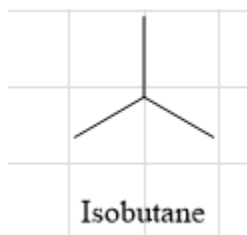


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 5: para terminar de generar la estructura química se utilizó como ejemplo el isobutano que es un compuesto importante en el proceso de alquilación.

Figura 21

Estructura del isobutano



Nota. Tomado del software ChemDraw.

3.3.2. Procesamiento de propiedades básicas

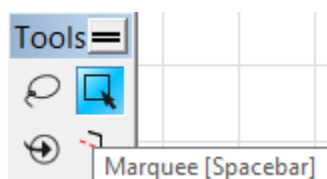
Para obtener resultados de las propiedades básicas de un componente en el software ChemDraw se tiene que dibujar y seleccionar la molécula. Al momento de generar o dibujar la molécula en la pestaña View da la opción de Show Analysis Windows que permite la obtención de datos básicos como la fórmula química, peso

molecular y análisis elemental. A continuación, se muestra a detalle los pasos para obtener dicha información.

Paso 1: seleccionar en el siguiente icono para marcar el compuesto.

Figura 22

Opción para marcar el compuesto

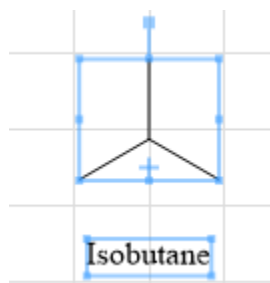


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 2: marcar el compuesto.

Figura 23

Estructura de isobutano marcado

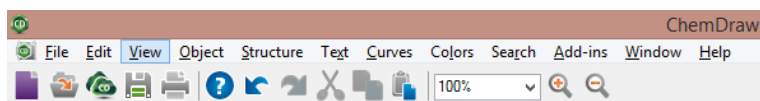


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 3: seleccionar la pestaña View.

Figura 24

Pantalla inicial de herramientas del software ChemDraw

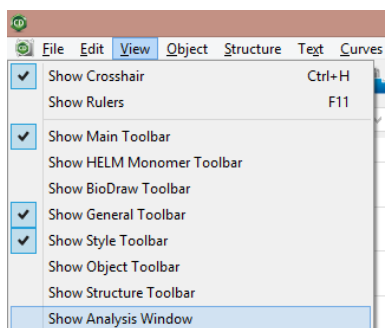


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 4: desplegar la pestaña View y seleccionar la opción Show Analysis Windows.

Figura 25

Opciones de la pestaña View

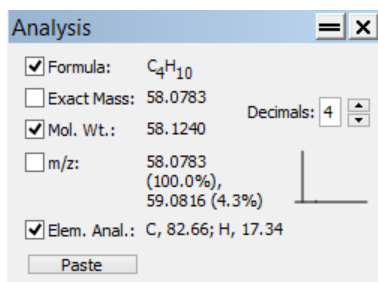


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 5: seleccionar la opción fórmula, peso atómico y análisis elemental, colocar 4 decimales.

Figura 26

Ventana para generar las propiedades básicas

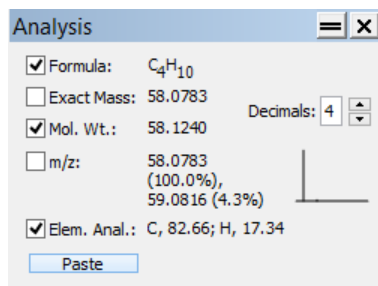


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 6: seleccionar Paste para generar los resultados.

Figura 27

Generación de las propiedades básicas

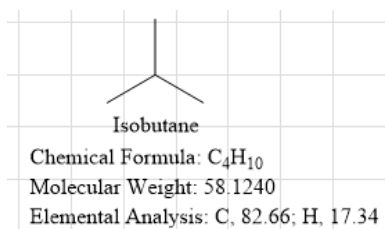


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 7: resultados generados de las propiedades básicas.

Figura 28

Datos de las propiedades básicas



Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 8: seleccionar el siguiente icono para editar el texto

Figura 29

Opción para editar el texto



Nota. Tomado del software ChemDraw.

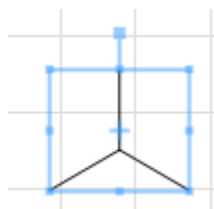
3.3.3. Generación automática de nomenclatura IUPAC

La obtención de la nomenclatura IUPAC en el programa ChemDraw de los compuestos orgánicos a la entrada del proceso de polimerización y alquilación es posible dándole clic derecho en la molécula marcada y seleccionando la opción *Analysis* seguidamente de la palabra *Name* y automáticamente se genera la nomenclatura IUPAC. A continuación, se detalla los pasos a seguir.

Paso 1: marcar la molécula dibujada.

Figura 30

Estructura de isobutano marcada

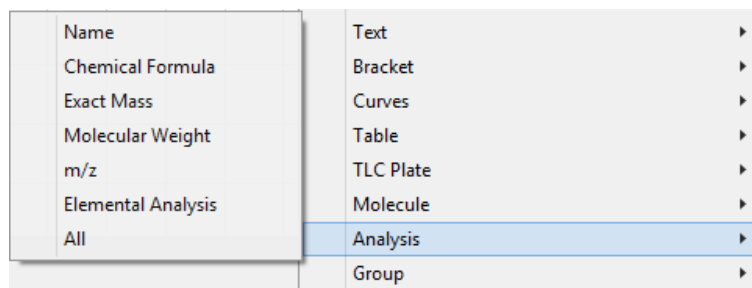


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 2: generar clic derecho en la molécula marcada y en *Analysis* seleccionar *Name*.

Figura 31

Opción Analysis para generar el nombre IUPAC

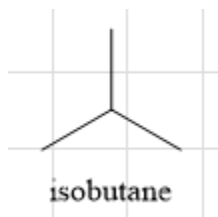


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 3: generación de nombre IUPAC.

Figura 32

Estructura del isobutano



Nota. Tomado del software ChemDraw.

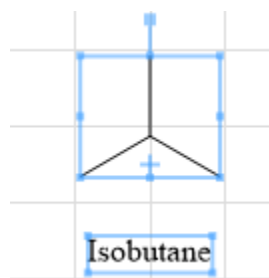
3.3.4. Generación automática del código SMILES

El software ChemDraw es un programa que dibuja moléculas y a partir de la generación de las moléculas ayuda a obtener el código SMILES que se utiliza para pegar en la página web SwissADME y posteriormente generar cálculos como las propiedades fisicoquímicas, lipofilia y solubilidad del agua. A continuación, se muestran los pasos a desarrollar para obtener el código SMILES.

Paso 1: marcar la molécula dibujada.

Figura 33

Estructura de isobutano marcada

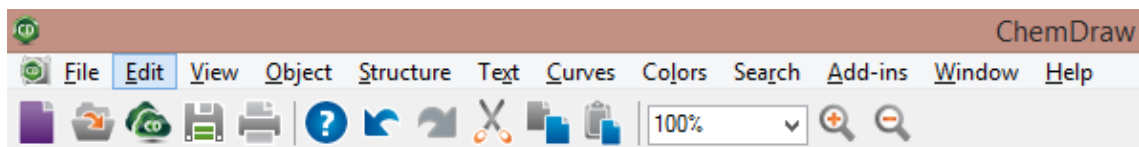


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 2: seleccionar la pestaña *Edit*.

Figura 34

Pantalla inicial de herramientas del software ChemDraw

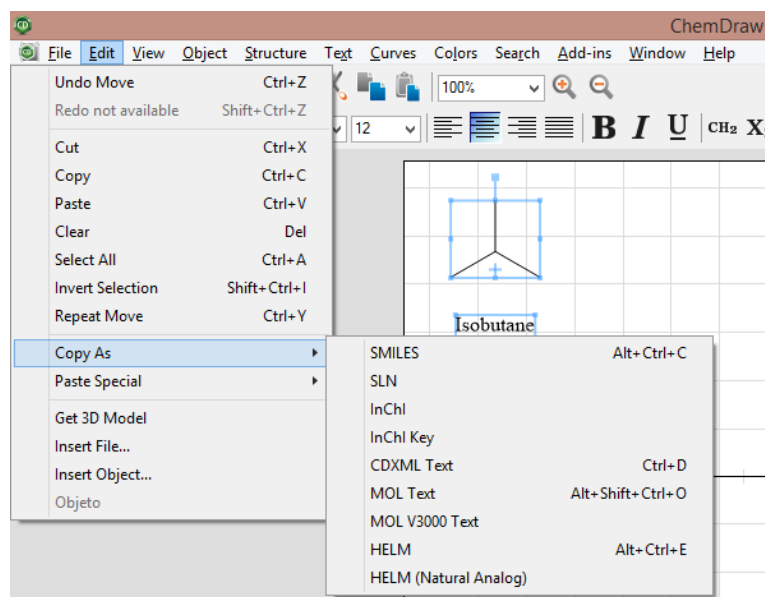


Nota. Tomado del software ChemDraw.

Paso 3: seleccionar *Copy As* con la opción SMILES

Figura 35

Generación del código SMILES en el software ChemDraw



Nota. Tomado del software ChemDraw.

3.4. Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas

3.4.1. Estudio de la interfaz de la plataforma SwissADME

SwissADME es una plataforma virtual del instituto suizo de bioinformática, este software es una herramienta web gratis gratuita que permite obtener propiedades de las moléculas como radar de biodisponibilidad, propiedades fisicoquímicas, lipofilia,

solubilidad en agua entre otras. En la presente sección se describe en detalle el uso de dicha plataforma además de la exportación de datos que genera al procesar las moléculas introducidas.

Figura 36

Logo de la página web SwissADME



Nota. Tomado de la plataforma suiza bioinformática [SwissADME](#)

3.4.2. Procesamiento a través del código SMILES

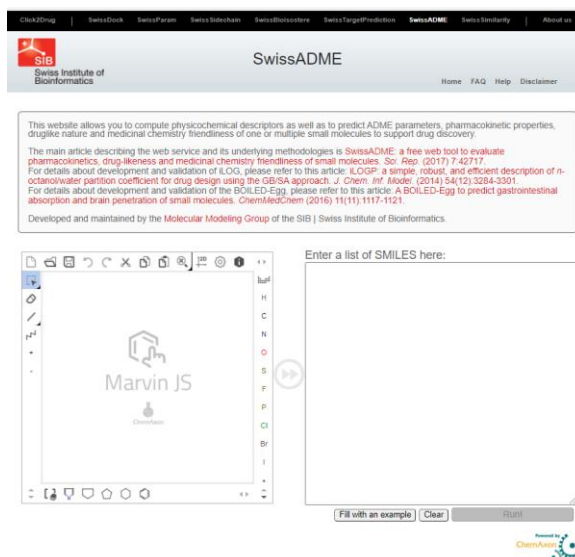
El procesamiento de moléculas químicas a través del código es SMILES se lo realiza de forma virtual con acceso a internet, al ingresar en la página se debe colocar el código de una o varias moléculas ya que la página generará propiedades como propiedades fisicoquímicas, lipofilia, solubilidad en agua entre otras, de manera ordenada otorgando a cada código SMILES el nombre de Molécula 1, Molécula 2, etc. Si el usuario incluye el nombre de la molécula junto con el código precedido de un espacio, las propiedades calculadas tendrán como título el dicho nombre, finalmente se tendrá una matriz de datos con todos compatibles con Excel de Microsoft. A continuación, se especifica paso a paso el uso de SwissADME.

Paso 1: colocar en el buscador la palabra SwissADME

Paso 2: la página acceder tiene la siguiente interfaz.

Figura 37

Interfaz de la página web SwissADME

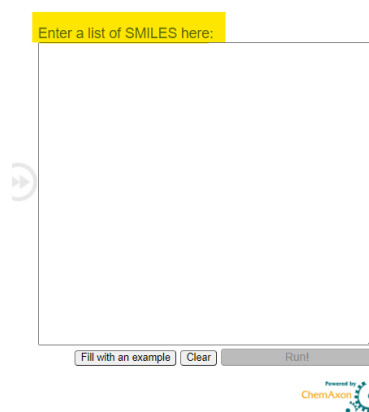


Nota. Tomado de [SwissADME](#)

Paso 3: colocar el código es SMILES de la molécula en la región resaltada.

Figura 38

Procesamiento de moléculas químicas en página web SwissADME

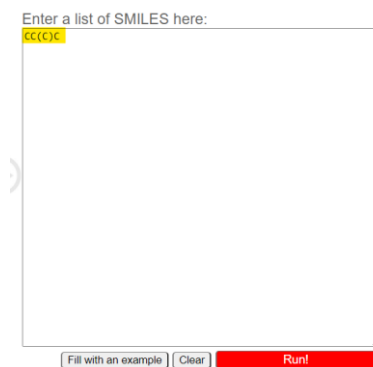


Notar. Tomado de la plataforma suiza bioinformática [SwissADME](#)

Paso 4: ejemplificación para el isobutano

Figura 39

Procesamiento isobutano en página web SwissADME



Enter a list of SMILES here:
CCCCC

Fill with an example Clear Run!

Nota. Tomado de la plataforma suiza bioinformática [SwissADME](#)

Paso 5: presionar el botón rojo *run*

Figura 40

Generación propiedades químicas de isobutano en página web SwissADME

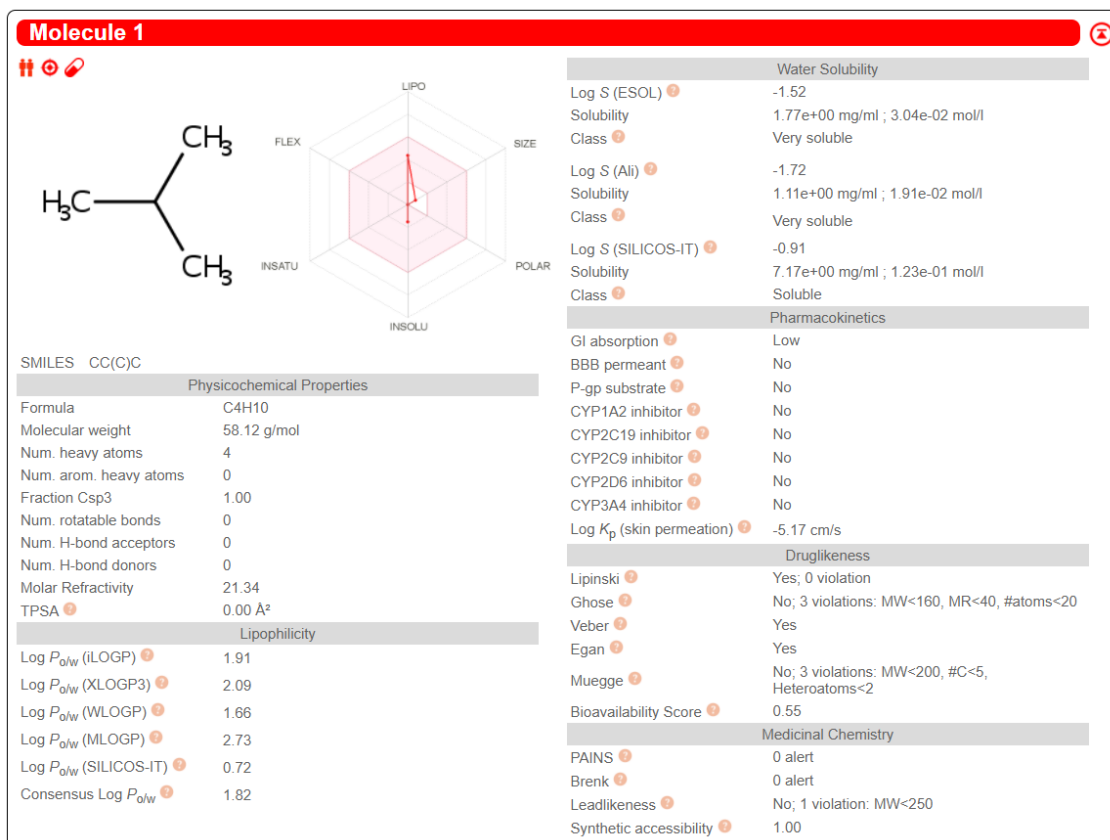


Nota. Tomado de la plataforma suiza bioinformática [SwissADME](#)

Paso 6: obtención de resultados

Figura 41

Presentación de propiedades químicas de isobutano por página web SwissADME



Nota. Tomado de la plataforma suiza bioinformática [SwissADME](#)

3.5. Cálculo y obtención de estructuras 3D

El software Avogadro es una plataforma grafica con un método computacional que sirve para optimizar, construir, analizar y visualizar moléculas en diferentes estudios en interacciones entre el carbono y el hidrógeno con la ayuda de la herramienta automática que posee dicho programa. Avogadro puede importar su información en cualquier formato de archivo, este software puede leer datos CML (*Chemical Markup Language*) y mostrar la geometría molecular en una, dos o tres dimensiones (Avery et al., 2018) (De Jong et al., 2013) (Salha et al., 2020).

3.5.1. Elaboración de archivos con coordenadas 3D sin optimizar

Para la elaboración de archivos con coordenadas 3D no optimizadas de los componentes de entrada y salida del proceso de polimerización y alquilación se requiere del programa Avogadro, en el cual es posible abrir archivos en formato MDL Molfile (*.mol), el cual es generado por el procesamiento de moléculas en el software ChemDraw. A continuación, se detallan los pasos para obtener dicha información.

Paso 1: ingresar programa Avogadro.

Figura 42

Ícono del programa Avogadro

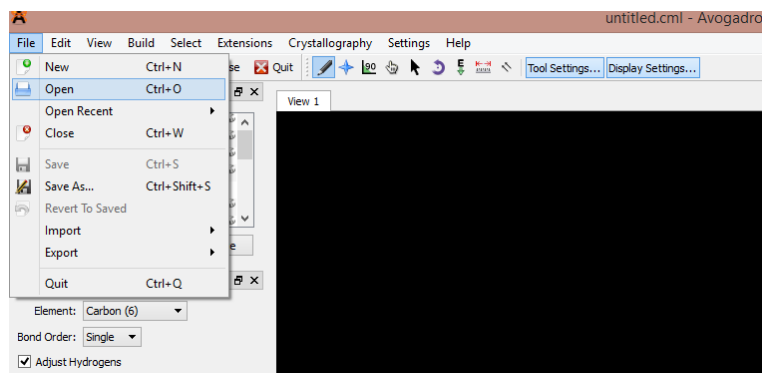


Nota. Tomado del programa Avogadro.

Paso 2: abrir el archivo generado en el software ChemDraw en formato MDL Molfile (*.mol).

Figura 43

Pantalla inicial para abrir el archivo

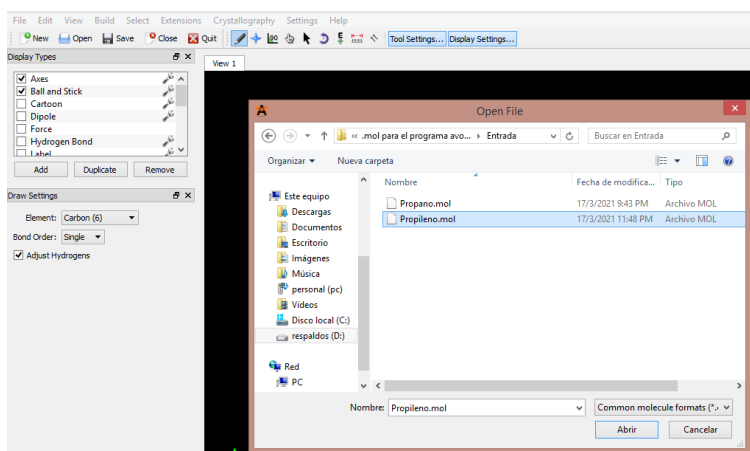


Nota. Tomado del programa Avogadro.

Paso 3: seleccionar el archivo y abrir.

Figura 44

Ventana para abrir el archivo MDL Molfile (.mol)*

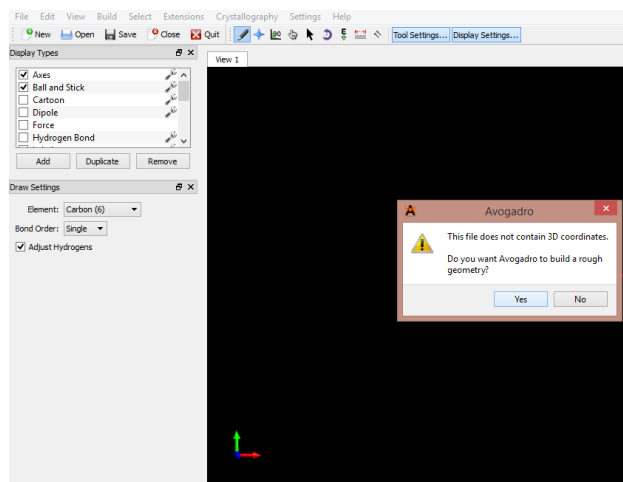


Nota. Tomado del programa Avogadro.

Paso 4: abrir y seleccionar Yes

Figura 45

Generación de la molécula propileno en 3D

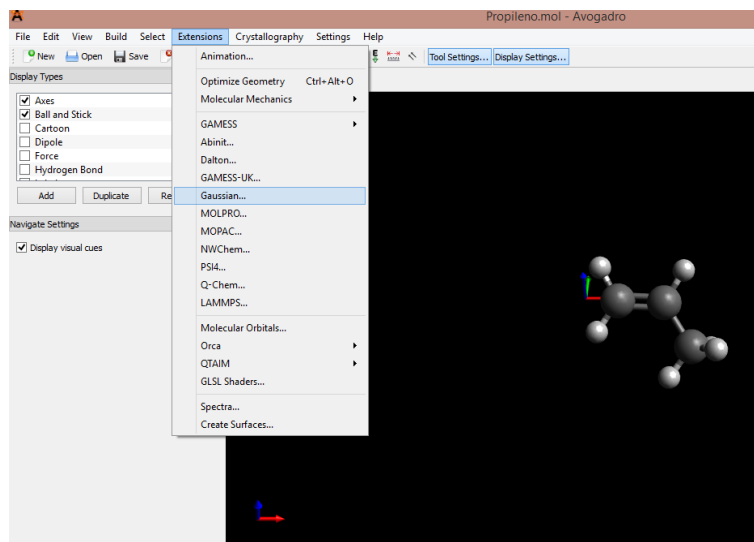


Nota. Tomado del programa Avogadro.

Paso 5: seleccionar en la pestaña cinta de opciones *Extensions* y en la ventana emergente elegir la opción *Gaussian*.

Figura 46

Generación de coordenadas 3D no optimizadas del molecular propileno.

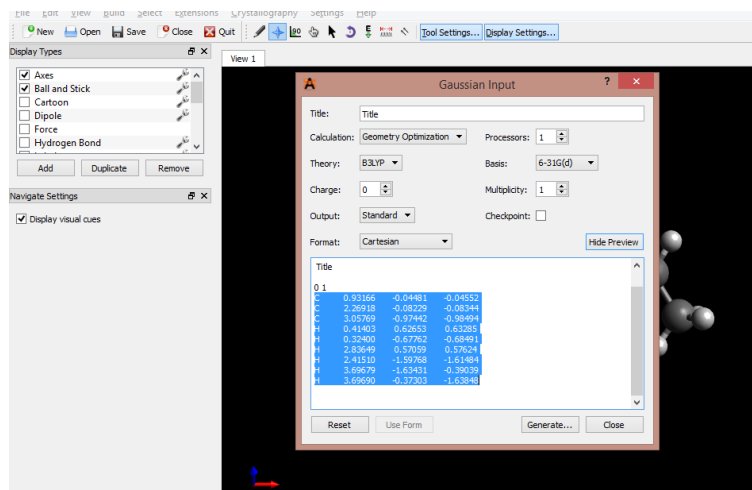


Nota. Tomado del programa Avogadro.

Paso 6: Recuperar las coordenadas cartesianas en 3D no optimizadas generadas por Avogadro de la molécula del propileno.

Figura 47

Obtención de las coordenadas 3D sin optimizar del propileno



Nota. Tomado del programa Avogadro.

3.5.2. Elaboración de archivos con coordenadas 3D optimizadas

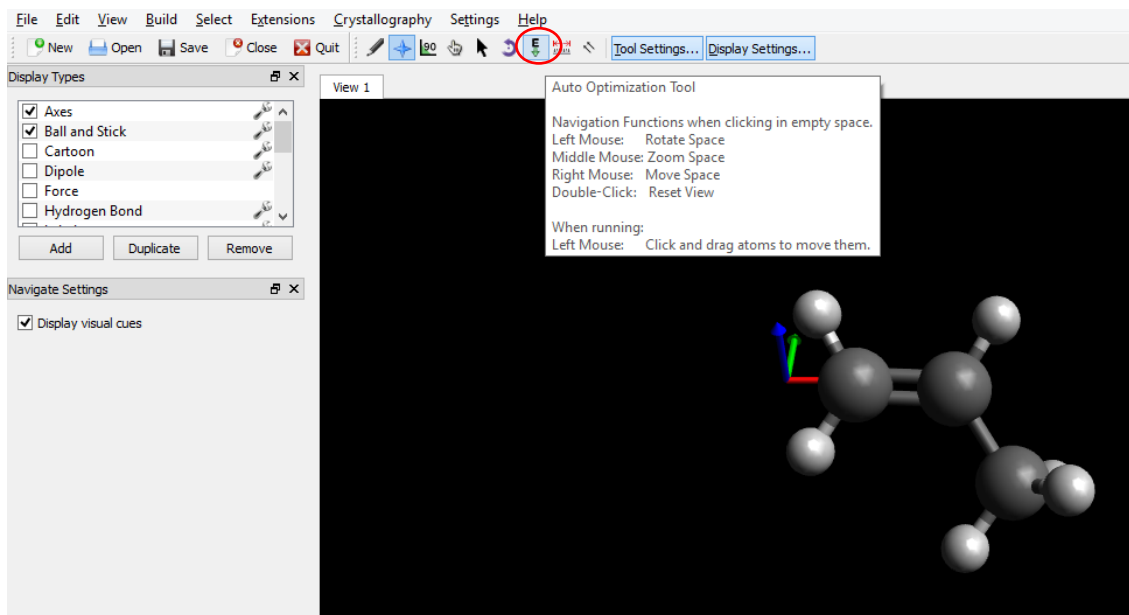
Para la elaboración de archivos con coordenadas 3D no optimizadas de los componentes de entrada y salida del proceso de polimerización y alquilación se requiere del programa Avogadro, en el cual es posible abrir archivos en formato MDL Molfile (*.mol), el cual es generado por el procesamiento de moléculas en el software ChemDraw., mediante el uso de la herramienta de optimización automática *Auto Optimize* la cual optimiza la geometría molecular a campos de fuerza exclusivos para hidrocarburos. A continuación, se detallan los pasos para obtener dicha información.

Paso 1: ejecutar todos los pasos del apartado 3.5.1.

Paso 2: seleccionar en la pestaña cinta de opciones *Auto Optimization Tool*

Figura 48

Representación del ícono Auto Optimization Tool

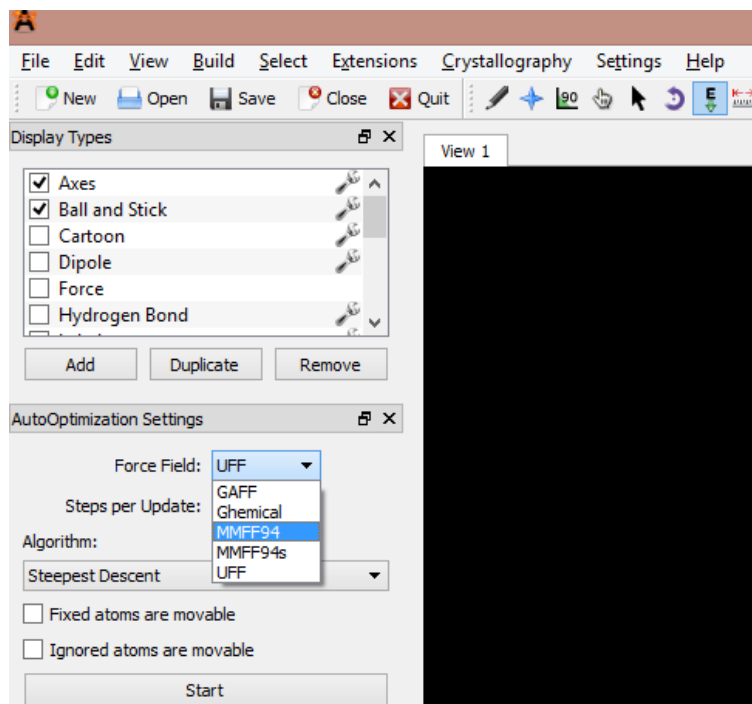


Nota. Tomado del programa Avogadro.

Paso 3: en las opciones desplegadas de *AutoOptimization Setting*, se selecciona el campo de fuerza MMFF94 para hidrocarburos, e iniciar el cálculo al seleccionar *Star*.

Figura 49

Selección del campo de fuerza MMFF94



Nota. Tomado del programa Avogadro.

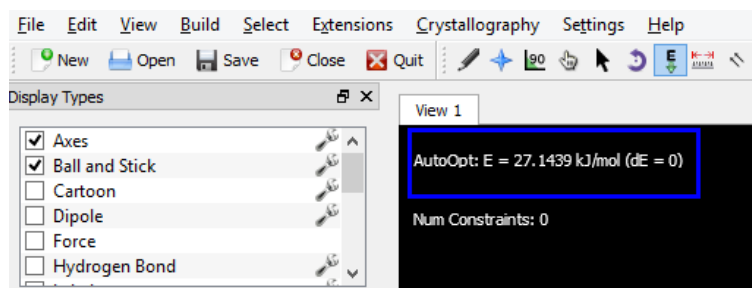
Paso 4: repetir reiteradamente los pasos 5 y 6 del apartado 5.3.1. para la generación y obtención de las coordenadas 3D optimizadas.

3.5.3. Reporte la energía de optimización

Para obtener la energía de optimización de cada molecular presente en la entrada y salida del proceso de polimerización y alquilación es necesario realizar la optimización de la molécula y automáticamente se generará el valor en la parte superior del lado izquierdo de la pantalla principal del programa Avogadro cuando el diferencial de energía llega a cero. Se muestra la energía de optimización reportada para la molécula del propileno en unidades de KJ/mol que se ilustra en el apartado 3.5.2.

Figura 50

Obtención de la energía de optimización de la molécula del propileno



Nota. Tomado del programa Avogadro.

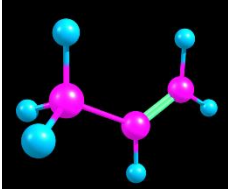
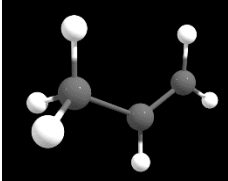
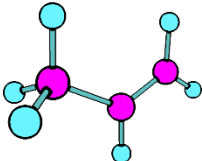
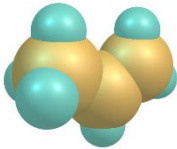
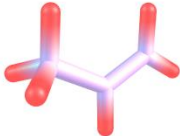
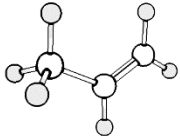
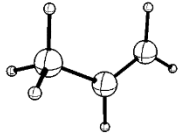
3.5.4. Elaboración de las imágenes con coordenadas 3D sin optimizar y optimizadas

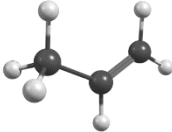
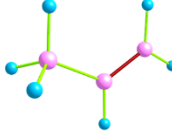
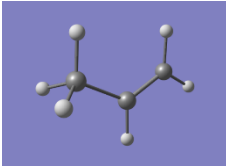
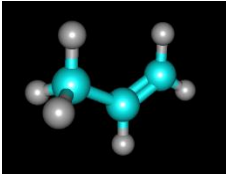
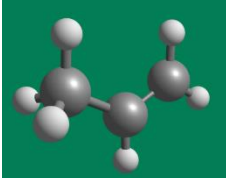
Para la elaboración de las imágenes 3D de los componentes orgánicos que se encuentran presentes en los flujos de entrada y salida del proceso de polimerización y alquilación, se la pudo obtener usando los programas PyMOL o Chemcraft, donde inicialmente las estructuras fueron graficadas como imágenes en 3D sin optimizar y optimizadas. El procedimiento para Chemcraft se fundamenta en la visualización por estilos, dichos estilos de presentación de las moléculas procesadas en 3D se detallan como plantillas disponibles y modificables a la vez.

Tabla 16

Molécula de propileno los estilos en 3 dimensiones disponibles en Chemcraft

| Nombres de estilos | Presentación en 3D |
|--------------------|--------------------|
| Basic 1 | |
| Basic 2 | |

| Nombres de estilos | Presentación en 3D |
|--------------------|---|
| Basic 3 |  |
| Cpk Coloring |  |
| Simple |  |
| Big Atoms |  |
| Sticks |  |
| Publication 1 |  |
| Publication 2 |  |

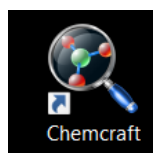
| Nombres de estilos | Presentación en 3D |
|--------------------|---|
| Publication 3 |  |
| Quick |  |
| Gaussview Style |  |
| Hyperchem Style |  |
| Spartan Style |  |

Nota. Tomado del software Chemcraft.

Paso 1: ingresar en el programa Chemcraft

Figura 51

Ícono del programa Chemcraft

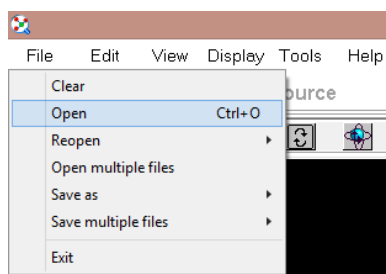


Nota. Tomado del programa Chemcraft.

Paso 2: seleccionar en la pestaña cinta de opciones *File* y en la ventana emergente elegir la opción *Open*, para abrir el archivo en formato MDL SDfile(*.mol) que se obtuvo del programa Avogadro.

Figura 52

Ventana principal para abrir los archivos MDL SDfile(.mol)*

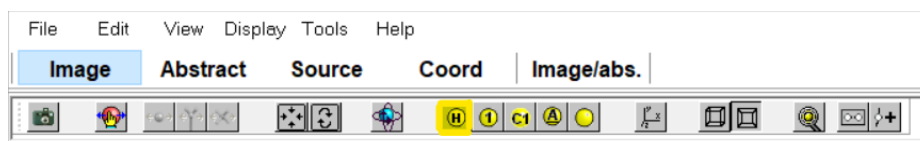


Nota. Tomado del programa Chemcraft.

Paso 3: para mostrar el tipo de átomos se presiona el botón H, de la cinta de opciones de la pestaña *Image*.

Figura 53

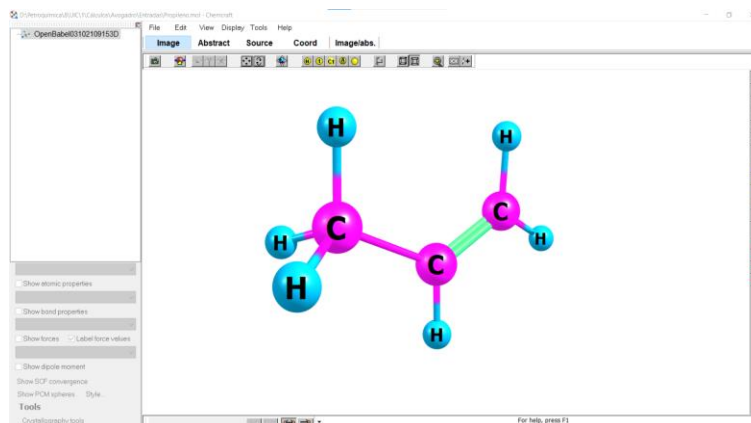
Cinta de opciones de la pestaña Image del programa Chemcraft.



Nota. Tomado del programa Chemcraft.

Figura 54

Propeno en 3D en del programa Chemcraft

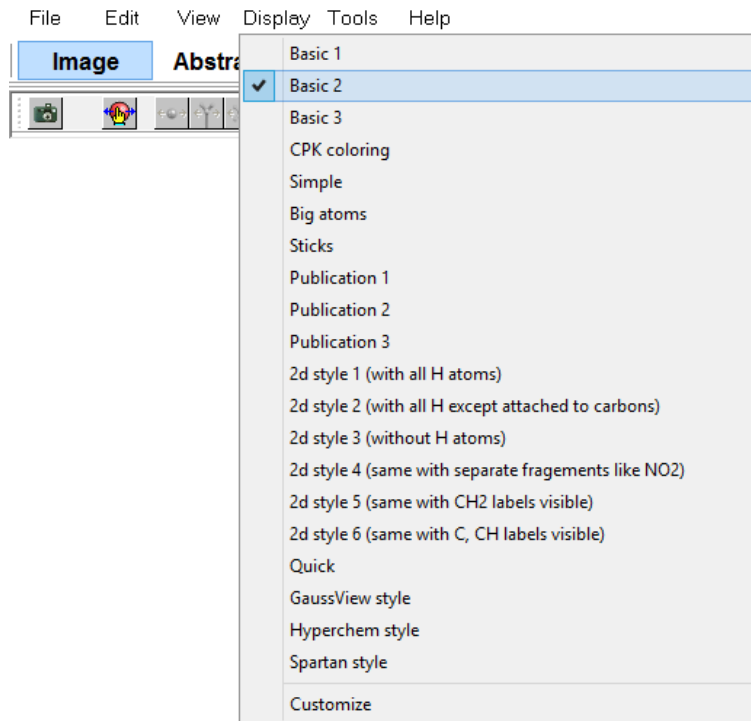


Nota. Tomado del programa Chemcraft.

Paso 3: elegir un estilo en 3D conveniente en la pestaña cinta de opciones *Display*, en este caso se trabajó con *Basic 2*.

Figura 55

Elección del formato de presentación de la imagen 3D obtenida

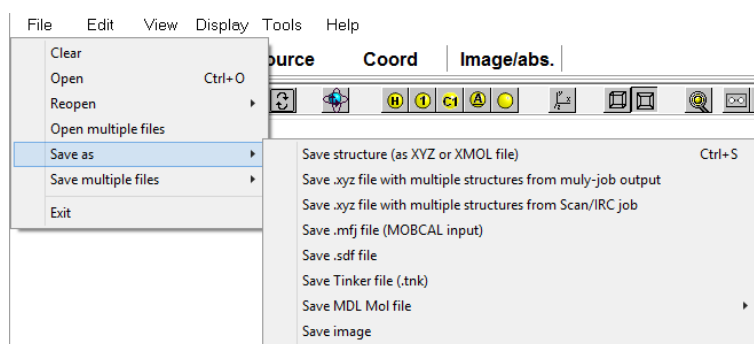


Nota. Tomado del programa Chemcraft.

Paso 4: guardar en formato correspondiente para tener la imagen de buena calidad y visualización.

Figura 56

Paso para guardar la imagen 3D de la molécula de propileno



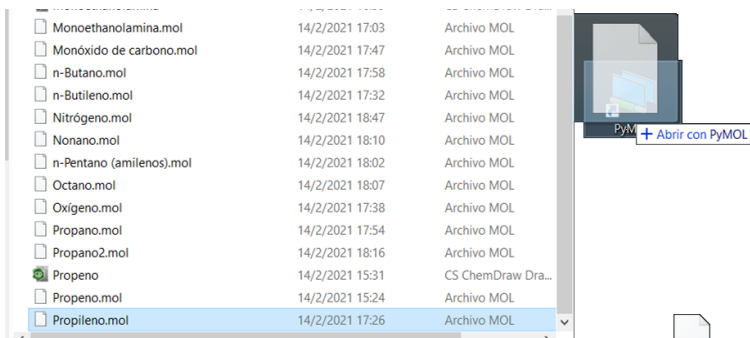
Nota. Tomado del programa Chemcraft.

PyMOL es un software de visualización de estructuras moleculares 3D. Para el presente trabajo los resultados que se presentarán en el capítulo 5 han sido procesados con el software Chemcraft, no obstante, en esta sección se muestra cómo llevar a cabo la elaboración de las imágenes con coordenadas 3D sin optimizar y optimizadas en PyMOL, la generación de las imágenes en 3D sin optimizar y optimizadas llevan el mismo procedimiento.

Paso 1: arrastrar el archivo en formato MDL Molfile (*.mol) de la molécula al icono del programa PyMOL

Figura 57

Creación de archivos en el programa PyMOL

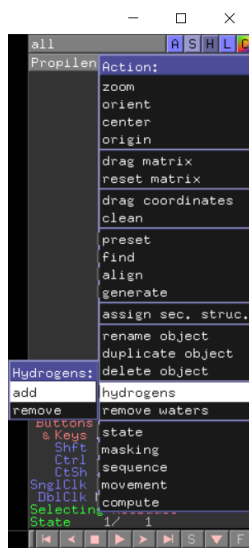


Nota. Tomado del programa PyMOL.

Paso 2: seleccionar en la pestaña cinta de opciones *A* y en la ventana emergente elegir la opción *hydrogens*, y a su vez *add*.

Figura 58

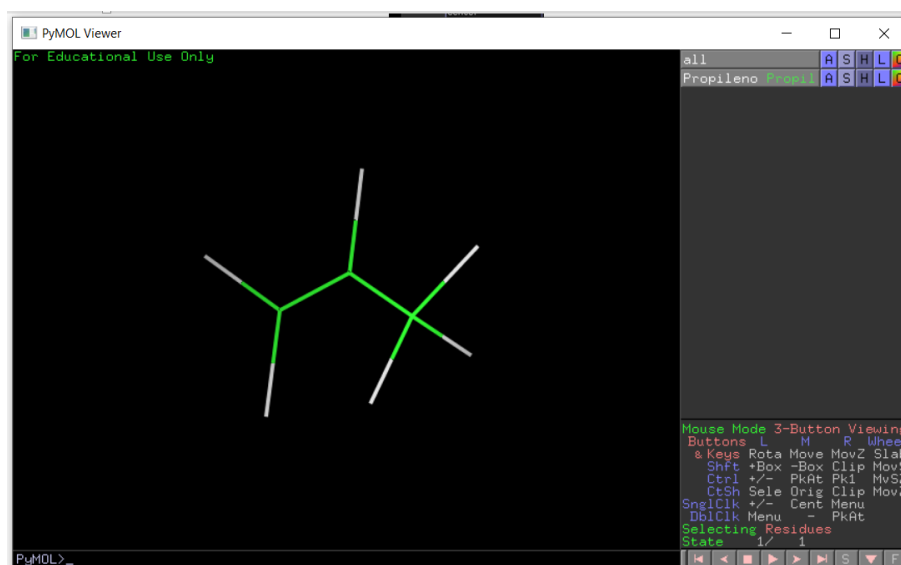
Adición de hidrogeno a la molécula de propileno



Nota. Tomado del programa PyMOL.

Figura 59

Visualización por defecto de la molécula de propeno en PyMOL

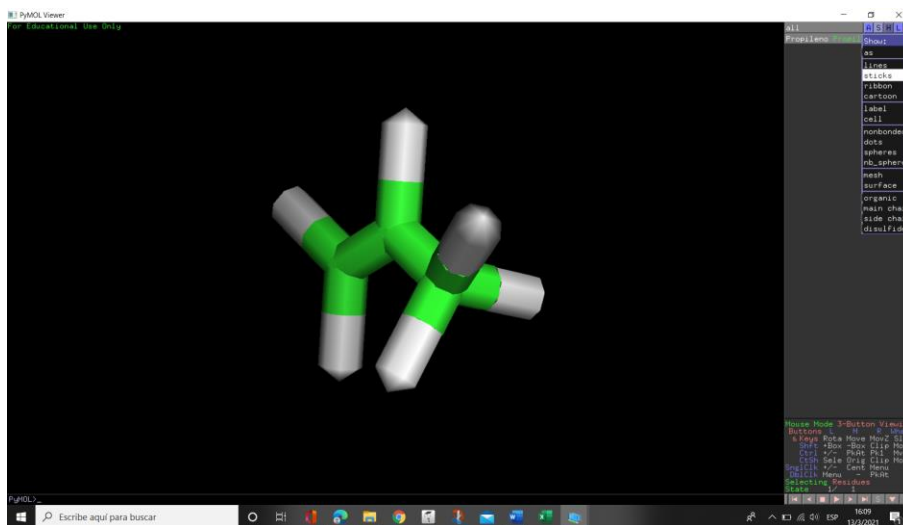


Nota. Tomado del programa PyMOL.

Paso 3: para mejor presentación, elegir la pestaña cinta de opciones S y en la ventana emergente elegir la opción *sticks*.

Figura 60

Presentación 3D en PyMOL de la molécula de propeno

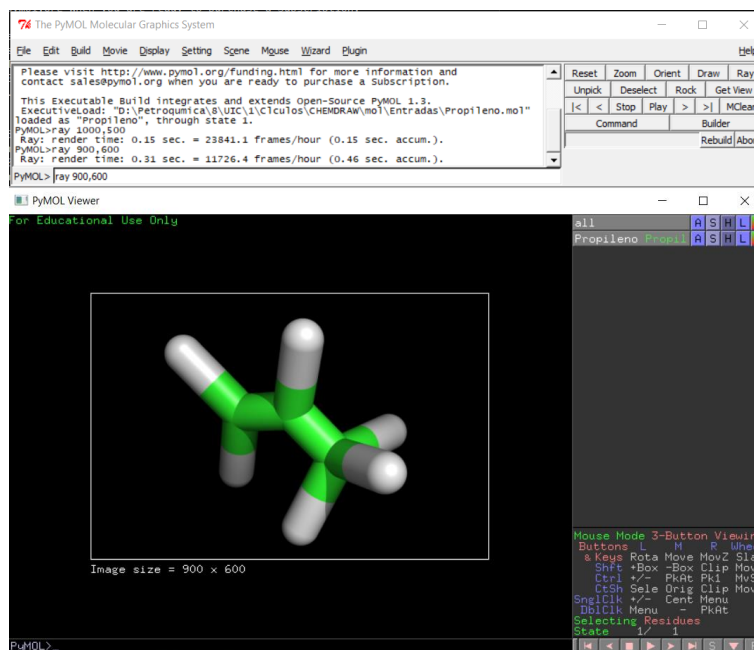


Nota. Tomado del programa PyMOL.

Paso 3: para tener la imagen de buena calidad y visualización, escribir la palabra *ray* seguido de la resolución deseada, por ejemplo “ray 900,600”.

Figura 61

Barra de acceso rápido de la interfaz del programa PyMOL e imagen mejorada

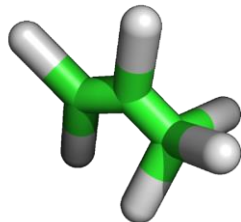


Nota. Tomado del programa PyMOL.

Paso 4: recuperar la molécula guardando desde la barra de acceso rápido de la interfaz de *PyMOL* o capturando la imagen con las herramientas del ordenador desde la interfaz del programa.

Figura 62

Propeno en 3D en del programa PyMOL.



Nota. Tomado del programa PyMOL.

Capítulo IV

Resultados y discusión

4.1. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de polimerización y alquilación

4.1.1. *Búsqueda de datos internacionales*

En la bibliografía reportada se ha encontrado especies químicas que se repiten, esto ocurre debido los diversos enfoques de investigación de cada autor ya que en las refinerías los procesos a emplearse difieren mucho entre ellas al depender de las necesidades de producción, el crudo disponible entre otros factores, de modo que se ha recopilado las especies químicas involucradas en las corrientes de ingreso a los proceso de polimerización y alquilación de forma general en las tablas 16 y 17, en las que se muestra la numeración por molécula en la columna 1 y en la columna dos el nombre IUPAC obtenido en ChemDraw.

Proceso de polimerización

Se ha recopilado una lista general de compuestos químicos para la corriente de entrada del proceso de polimerización de diversos autores procedentes de diferentes fuentes, la cual se detalla en la tabla 17 donde se estructura el número de molécula y el compuesto químico que servirá posteriormente para realizar los cálculos correspondientes.

Tabla 17

Moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de polimerización

| Número de molécula | Compuesto químico |
|---------------------------|--------------------------|
| 1 | sulfuro de hidrógeno |
| 2 | agua |
| 3 | 2-metilbut-2-eno |
| 4 | etano |
| 5 | etileno |
| 6 | heptano |
| 7 | hexano |
| 8 | hidrógeno |
| 9 | isobutano |
| 10 | isobutileno |
| 11 | isopentano |
| 12 | metano |
| 13 | monóxido de carbono |
| 14 | butano |
| 15 | but-1-eno |
| 16 | nitrógeno |
| 17 | nonano |
| 18 | pentano |
| 19 | octano |
| 20 | oxígeno |

| Número de molécula | Compuesto químico |
|--------------------|-------------------|
| 21 | propano |
| 22 | (e)-but-2-eno |
| 23 | prop-1-eno |

Proceso de alquilación

A partir de la búsqueda bibliográfica en diferentes artículos científicos, libros y patentes se logra obtener una lista general de compuestos químicos para la corriente de entrada del proceso de alquilación, la cual se detalla en la tabla 18 donde se estructura el número de molécula y el compuesto químico que servirá posteriormente para realizar los cálculos correspondientes.

Tabla 18

Moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de alquilación

| Número de molécula | Componente de entrada |
|--------------------|-----------------------|
| 1 | Propano |
| 2 | Propileno |
| 3 | Isobutano |
| 4 | <i>n</i> -butano |
| 5 | Buteno |
| 6 | Isopentano |
| 7 | <i>n</i> -pentano |
| 8 | 3-metil-1-buteno |
| 9 | 1-penteno |

| Número de molécula | Componente de entrada |
|--------------------|-----------------------|
| 10 | 2-metil-1-buteno |
| 11 | 2-penteno |
| 12 | 2-metil-2-buteno |
| 13 | Ciclopenteno |
| 14 | 2-metil-1,3-butadieno |
| 15 | trans-1,3-pentadieno |
| 16 | Ciclopentadieno |
| 17 | Isobuteno |
| 18 | 1,3-butadieno |
| 19 | trans-2-buteno |
| 20 | cis-2-buteno |

4.1.2. Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano

Los datos presentados en la tabla 19 son producto de la planta de planta de gas Shushufindi en Ecuador, en ración a la lista de compuestos internacionales se observó que, debido a la diferencia del tipo yacimiento y grado api de crudo, el gas ecuatoriano mencionado tiene hasta la olefina C_3 y carece de otras especies químicas como C_4^+ hidrógeno, oxígeno, agua, ácido sulfhídrico.

Tabla 19

Datos de gas dulce ecuatoriano

| Número de molécula | Compuesto químico |
|--------------------|-------------------|
| 6 | etano |

| Número de molécula | Compuesto químico |
|--------------------|---------------------|
| 14 | metano |
| 15 | monóxido de carbono |
| 16 | nitrógeno |
| 22 | propano |

4.2. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de polimerización y alquilación

4.2.1. Búsqueda de datos internacionales

Proceso de polimerización

A partir de la búsqueda bibliográfica en diferentes artículos científicos, libros y patentes se logra obtener una lista general de compuestos químicos para la corriente de salida del proceso de polimerización, la cual se detalla en la tabla 20 donde se estructura el número de molécula y el compuesto químico que servirá posteriormente para realizar los cálculos correspondientes.

Tabla 20

Moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de polimerización

| Número de molécula | Compuesto químico |
|--------------------|----------------------|
| 1 | 2,2,5-trimetilhexano |
| 2 | 2,2-dimetilpropano |
| 3 | 2,3,5-trimetilhexano |
| 4 | 2,3-dimetilhexano |
| 5 | 2,4-dimetilheptano |
| 6 | 2,4-dimetilhexano |
| 7 | 2,5-dimetilheptano |

| Número de molécula | Compuesto químico |
|---------------------------|---|
| 8 | 2,5-dimetilhexano |
| 9 | 2,6-dimetilheptano |
| 10 | 2-metilbutano |
| 11 | 2-metilheptano |
| 12 | 2-metiloctano |
| 13 | 2-metilpropano |
| 14 | 3,4-dimetilheptano |
| 15 | 3-etil-2,4dimetilpentano |
| 16 | 3-metilheptano |
| 17 | 3-metiloctano |
| 18 | 4-metiloctano |
| 19 | but-1-eno |
| 20 | 2,4,4,6,6,8,8,10,10,12,12-undecametiltridec-2-eno |
| 21 | 2,4,4-trimetilpent-1-eno |
| 22 | Etanotiol |
| 23 | hept-1-eno |
| 24 | hex-1-eno |
| 25 | dec-1-eno |
| 26 | undec-1-eno |
| 27 | dodec-1-eno |
| 28 | tridec-1-eno |
| 29 | tetradec-1-eno |
| 30 | pentadec-1-eno |
| 31 | pent-1-eno |
| 32 | Eteno |
| 33 | Propano |
| 34 | 2,4,4,6,6-pentametilhept-2-eno |

Proceso de alquilación

A partir de la búsqueda bibliográfica en diferentes artículos científicos, libros y patentes se logra obtener una lista general de compuestos químicos para la corriente de salida del proceso de alquilación, la cual se detalla en la tabla 21 donde se estructura el número de molécula y el compuesto químico que servirá posteriormente para realizar los cálculos correspondientes.

Tabla 21

Moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de alquilación

| Número de molécula | Componentes de salida |
|---------------------------|------------------------------|
| 1 | Propano |
| 2 | Isobutano |
| 3 | n-butano |
| 4 | Isopentano |
| 5 | n-pentano |
| 6 | 2,2-dimetilbutano |
| 7 | 2,3-dimetilbutano |
| 8 | 2-metilpentano |
| 9 | 3-metilpentano |
| 10 | n-hexano |
| 11 | 2,2-dimetilpentano |
| 12 | 2,4-dimetilpentano |
| 13 | 2,2,3-trimetilbutano |
| 14 | 3,3-dimetilpentano |

| Número de molécula | Componentes de salida |
|---------------------------|------------------------------|
| 15 | 2,3-dimetilpentano |
| 16 | 2-metilhexano |
| 17 | 3-metilhexano |
| 18 | 3-etilpentano |
| 19 | n-heptano |
| 20 | 2,2,4-trimetilpentano |
| 21 | 2,2-dimetilhexano |
| 22 | 2,4-dimetilhexano |
| 23 | 2,5-dimetilhexano |
| 24 | 2,2,3-trimetilpentano |
| 25 | 3,3-dimetilhexano |
| 26 | 2,3,4-trimetilpentano |
| 27 | 2,3-dimetilhexano |
| 28 | 4-metilheptano |
| 29 | 2-metilheptano |
| 30 | 2,3,3-trimetilpentano |
| 31 | 3,4-dimetilhexano |
| 32 | 3-metilheptano |
| 33 | 2,2,5-trimetilhexano |
| 34 | n-octano |
| 35 | nonano |
| 36 | decano |
| 37 | undecano |

| Número de molécula | Componentes de salida |
|--------------------|-----------------------|
| 38 | dodecano |

4.2.2. Búsqueda de datos del petróleo ecuatoriano

En la bibliografía revisada para la elaboración de este trabajo no se ha encontrado datos de los procesos de polimerización y alquilación, esto se atribuye a que en Ecuador las refinerías en su mayoría no poseen procesos catalíticos, y a su vez los reportes generados de las unidades de procesos de dichas refinerías no son de acceso público.

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

4.3.1. Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas

La generación de estructuras 2D y la obtención de las propiedades básicas se realiza mediante del software ChemDraw de fácil de uso y donde es posible insertar o dibujar moléculas orgánicas que se encuentran presentes en los flujos de entrada y salida del proceso de polimerización y alquilación que son reportadas en las tablas a continuación.

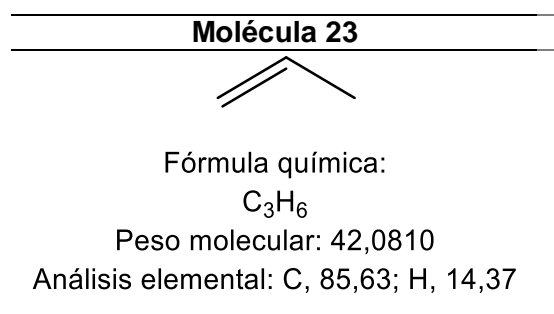
Proceso de polimerización

De la lista general de la corriente de alimentación al proceso de polimerización se ha investigado que, los compuestos representativos de dicha corriente son el propileno, *iso*-butileno, *n*-butileno y 2-metilbut-2-eno o amilenos. Por lo tanto, se presentará parra tres de estas moléculas las estructuras en 2D y el procesamiento de propiedades básicas de estas tres de estas moléculas, mientras que el procesamiento del resto de moléculas se mostrará en el Anexo 1.

La generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de propileno, muestra su estructura esquelética o lineoangular en la que simboliza los enlaces de los átomos de carbono mediante líneas rectas, en forma de zigzag, omitiendo en la presentación los átomos de hidrógeno, se muestra también la fórmula molecular C_3H_6 , el peso molecular de 42,0810 y el correspondiente análisis elemental donde se tiene que, la composición de carbono en la molécula es de 85,63% y 14,37% para el hidrógeno.

Tabla 22

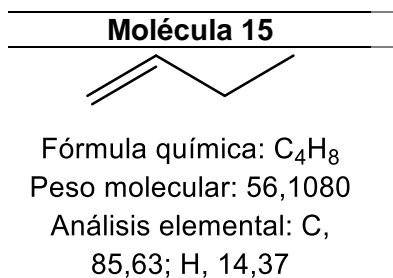
Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de propileno.



Se presenta para el n-butileno su estructura lineoangular en la que simboliza los enlaces de los átomos de carbono mediante líneas rectas en forma de zigzag, se muestra también la fórmula molecular C_4H_8 , el peso molecular de 56,1080 y el correspondiente análisis elemental donde se tiene que, la composición de carbono en la molécula es de 85,63% y 14,37% para el hidrógeno.

Tabla 23

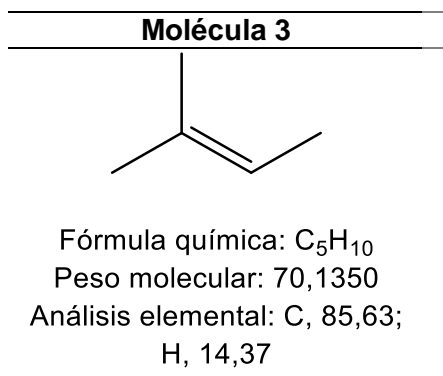
Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de n-butileno.



En relación al *2-metilbut-2-eno* su estructura se la presenta de forma esquelética o lineoangular, omitiendo en la presentación todos los átomos de hidrógeno, se muestra también la fórmula molecular C₅H₁₀, el peso molecular de 70,1350 y el correspondiente análisis elemental donde se tiene que, la composición de carbono en la molécula es de 85,63% y 14,37% para el hidrógeno.

Tabla 24

Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de 2-metilbut-2-eno.



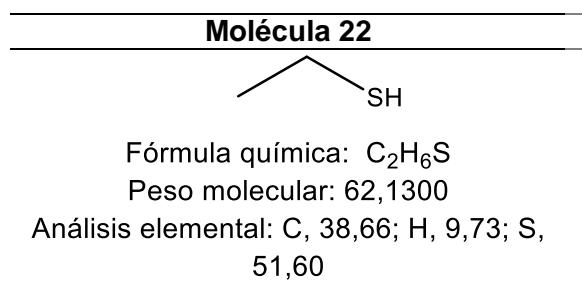
Según (Al-Qahtani & Elkamel, 2015) los productos de salida de polimerización son: es nafta pesada, *n*-Butano y GLP , debido a esto se presentará las estructuras

químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de etanotiol y 2-metilpropano puesto que son los componentes mayoritarios de GLP (Raslavičius et al., 2014) y al cotrimeros de isobuteno (Munday, John C, J Mcgee, 1948) es un producto de refinación en los cortes de isobuteno, los demás compuestos químicos presentes en la corriente de salida del proceso de polimerización se muestra en el Anexo 1.

La generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de etanotiol muestra su estructura lineoangular omitiendo en la presentación todos los átomos de hidrógeno, se muestra también la fórmula molecular C_2H_6S , el peso molecular de 62,1300 y el correspondiente análisis elemental donde se tiene que, la composición de carbono en la molécula es de 38,66%, el porcentaje de hidrógeno es de 9,73 y 51,60% para el azufre.

Tabla 25

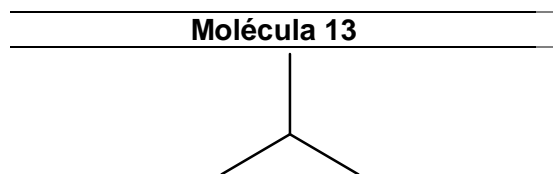
Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de etanotiol.



Para el producto de polimerización 2-metilpropano muestra su estructura lineoangular, también la fórmula molecular C_4H_{10} , el peso molecular de 58,1240 y el correspondiente análisis elemental donde se tiene que, la composición de carbono en la molécula es de 82,66% y 17,34% para el hidrógeno.

Tabla 26

Generación de estructuras químicas en 2D y procesamiento de propiedades básicas de 2-metilpropano.



Fórmula química: C_4H_{10}

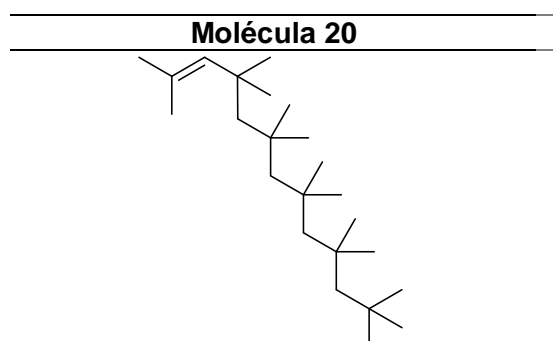
Peso molecular: 58,1240

Análisis elemental: C, 82,66; H, 17,34

Para el *cotrímeros de isobuteno* o 2,4,4,6,6,8,8,10,10,12,12-undecametiltridec-2-eno se muestra los enlaces de los átomos de carbono mediante líneas rectas en forma de zigzag, omitiendo en la presentación todos los átomos de hidrógeno; es decir su estructura lineoangular, se presenta también la fórmula molecular $C_{24}H_{48}$, el peso molecular de 336,6480 y el correspondiente análisis elemental donde se tiene que, la composición de carbono en la molécula es de 85,63% y 14,37% para el hidrógeno.

Tabla 27

Generación de estructuras 2D y propiedades básicas de *cotrímeros de isobuteno*



Fórmula química: $C_{24}H_{48}$

Peso molecular: 336,6480

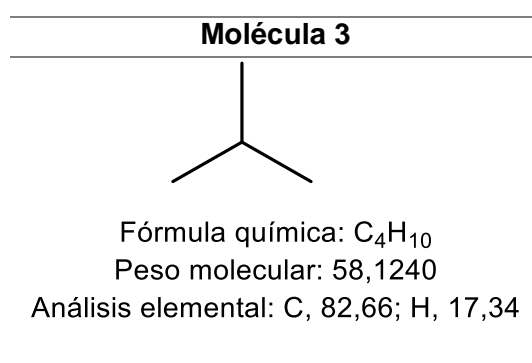
Análisis elemental: C, 85,63; H, 14,37

Proceso de alquilación

El isobutano es un componente de entrada que se encuentra presente en la alimentación del proceso de alquilación. La estructura química 2D y las propiedades físicas del isobutano se presenta en la tabla 29 de manera esquelética o lineoangular, en donde se muestra la fórmula molecular C_4H_{10} , el peso molecular de 58,1240 y el correspondiente análisis elemental donde se tiene que, la composición de carbono en la molécula es de 82,66% y 17,34% para el hidrógeno.

Tabla 28

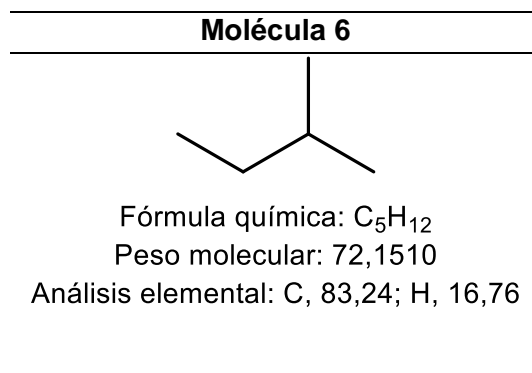
Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula isobutano



El isopentano es una molécula orgánica presente en la corriente de entrada al proceso de alquilación. La tabla 21 muestra su estructura química 2D y las propiedades físicas del compuesto de manera esquelética o lineoangular, en donde se indica su fórmula molecular C_5H_{12} , el peso molecular de 72,1510 y el correspondiente análisis elemental donde posee 83,24% de composición de carbono y 16,76% de composición de hidrógeno.

Tabla 29

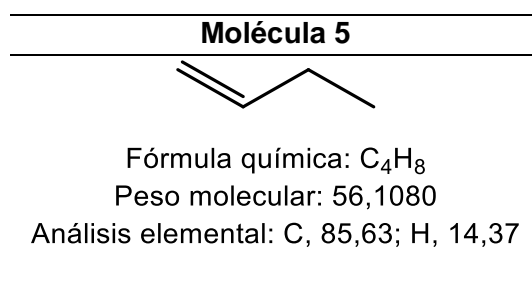
Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula isopentano



El proceso de alquilación se da en base a una reacción entre el isobutano y las olefinas, en la tabla 31 se detalla la estructura química 2D y las propiedades físicas de 1-buteno de manera esquelética o lineoangular, en donde se reporta la fórmula molecular C₄H₈, el peso molecular de 56,1080 y el correspondiente análisis elemental donde se tiene que, la composición de carbono en la molécula es de 85,63% y 14,37% para el hidrógeno.

Tabla 30

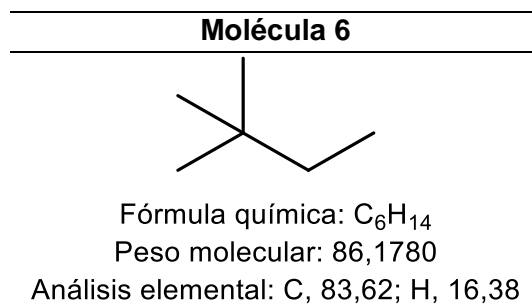
Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula 1-buteno



El 2,2-dimetilbutano es un componente de salida que se encuentra presente como producto del proceso de alquilación. La estructura química 2D y las propiedades físicas del 2,2-dimetilbutano se presenta en la tabla 32 de manera esquelética o lineoangular, en donde se muestra también la fórmula molecular C_6H_{14} , el peso molecular de 86,1780 y el correspondiente análisis elemental donde se tiene que, la composición de carbono en la molécula es de 83,62% y 16,38% para el hidrógeno.

Tabla 31

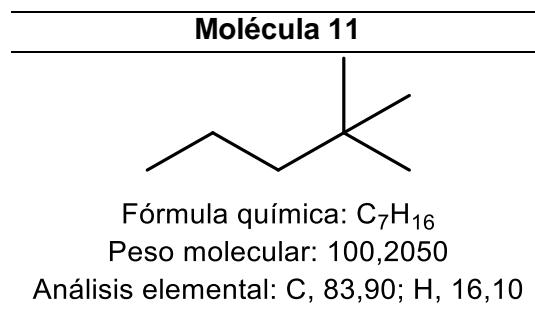
Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula 2,2-dimetilbutano



El 2,2-dimetilpentano es una molécula orgánica presente en la corriente de salida del proceso de alquilación. La tabla 33 muestra su estructura química 2D y las propiedades físicas del compuesto de manera esquelética o lineoangular en donde se muestra la fórmula molecular C_7H_{16} , el peso molecular de 100,2050 y el correspondiente análisis elemental donde posee 83,90% de composición de carbono y 16,10% de composición de hidrógeno.

Tabla 32

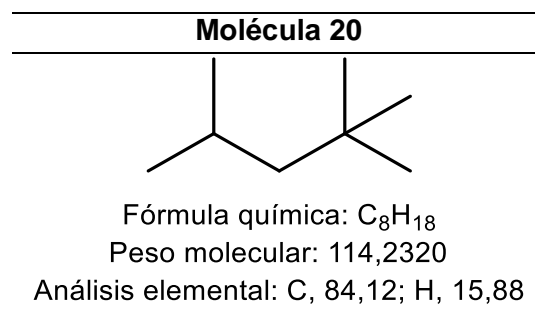
Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula 2,2-dimetilpentano



Los productos del proceso de alquilación se obtienen de la reacción entre el isobutano y las olefinas, en la tabla 34 se detalla la estructura química 2D y las propiedades físicas de 2,2,4-trimetilpentano de manera esquelética o lineoangular, en donde se muestra la fórmula molecular C_8H_{18} , el peso molecular de 114,2320 y el correspondiente análisis elemental donde se tiene que, la composición de carbono en la molécula es de 84,12% y 15,88% para el hidrógeno.

Tabla 33

Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula 2,2,4-trimetilpentano

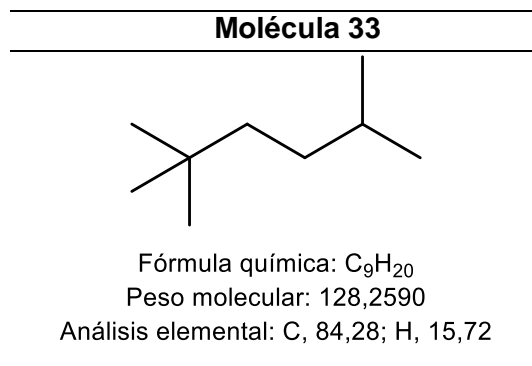


La molécula orgánica 2,2,5-trimetilhexano presente en la corriente de salida del proceso de alquilación, muestra su estructura química 2D y las propiedades físicas del compuesto de manera esquelética o lineoangular en la tabla 35, donde indica su fórmula molecular C_9H_{20} , el peso molecular de 128,2590 y el correspondiente análisis

elemental donde posee 84,28% de composición de carbono y 15,72% de composición de hidrógeno.

Tabla 34

Estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de la molécula 2,2,5-trimetilhexano



En el Anexo 2 se encuentra la estructura química 2D y procesamiento de propiedades básicas de los demás compuestos de entrada y salida del proceso.

4.3.2. Generación automática de nomenclatura IUPAC

Proceso de polimerización

Con el uso del software ChemDraw se hizo posible la generación automática de la nomenclatura IUPAC para todos los compuestos químicos. A continuación, se muestran las tablas 36 y 37 una lista general de todas las moléculas presentes en los flujos de entrada y salida del proceso de polimerización donde se indica el número de molécula, los componentes de entrada y su nomenclatura IUPAC.

Tabla 35

Nomenclatura IUPAC para los componentes de entrada del proceso de polimerización

| Número | Componentes de entrada | Nomenclatura IUPAC |
|--------|------------------------------|----------------------|
| 1 | ácido sulfhídrico | sulfuro de hidrógeno |
| 2 | agua | agua |
| 3 | amilenos (2-methyl-2-butene) | 2-metilbut-2-eno |
| 4 | etano | etano |
| 5 | etileno | etileno |
| 6 | heptano | heptano |
| 7 | hexano | hexano |
| 8 | hidrógeno | hidrógeno |
| 9 | iso-butano | isobutano |
| 10 | iso-butileno | isobutileno |
| 11 | iso-pentano | isopentano |
| 12 | metano | metano |
| 13 | monóxido de carbono | monóxido de carbono |
| 14 | n-butano | butano |
| 15 | n-butileno | but-1-eno |
| 16 | nitrógeno | nitrógeno |
| 17 | nonano | nonano |
| 18 | n-pentano (amilenos) | pentano |
| 19 | octano | octano |
| 20 | oxígeno | oxígeno |
| 21 | propano | propano |
| 22 | propeno | (e)-but-2-eno |
| 23 | propileno | prop-1-eno |

Tabla 36

Nomenclatura IUPAC para los componentes de salida del proceso de polimerización

| Número | Componentes de entrada | Nomenclatura IUPAC |
|---------------|-------------------------------|---|
| 1 | 2,2,5-trimetilhexano | 2,2,5-trimetilhexano |
| 2 | 2,2-dimetilpropano | 2,2-dimetilpropano |
| 3 | 2,3,5-trimetilhexano | 2,3,5-trimetilhexano |
| 4 | 2,3-dimetil-hexano | 2,3-dimetilhexano |
| 5 | 2,4-dimetilheptano | 2,4-dimetilheptano |
| 6 | 2,4-dimetil-hexano | 2,4-dimetilhexano |
| 7 | 2,5-dimetilheptano | 2,5-dimetilheptano |
| 8 | 2,5-dimetil-hexano | 2,5-dimetilhexano |
| 9 | 2,6-dimetilheptano | 2,6-dimetilheptano |
| 10 | 2-metilbutano | 2-metilbutano |
| 11 | 2-metil-heptano | 2-metilheptano |
| 12 | 2-metil-octano | 2-metiloctano |
| 13 | 2-metilpropano | 2-metilpropano |
| 14 | 3,4-dimetilheptano | 3,4-dimetilheptano |
| 15 | 3-etil-2,4-dimetilpentano | 3-etil-2,4dimetilpentano |
| 16 | 3-metilheptano | 3-metilheptano |
| 17 | 3-metil-octano | 3-metiloctano |
| 18 | 4-metil-octano | 4-metiloctano |
| 19 | butileno | but-1-eno |
| 20 | co trímeros de isobuteno | 2,4,4,6,6,8,8,10,10,12,12-undecametiltridec-2-eno |
| 21 | diisobutileno | 2,4,4-trimetilpent-1-eno |
| 22 | etanotiol | etanotiol |
| 23 | hepteno | hept-1-eno |

| Número | Componentes de entrada | Nomenclatura IUPAC |
|--------|------------------------|--------------------------------|
| 24 | hexeno | hex-1-eno |
| 25 | olefina c10 | dec-1-eno |
| 26 | olefina c11 | undec-1-eno |
| 27 | olefina c12 | dodec-1-eno |
| 28 | olefina c13 | tridec-1-eno |
| 29 | olefina c14 | tetradec-1-eno |
| 30 | olefina c15 | pentadec-1-eno |
| 31 | penteno | pent-1-eno |
| 32 | polietileno | eteno |
| 33 | propano | propano |
| 34 | triisobuteno | 2,4,4,6,6-pentametilhept-2-eno |

Proceso de alquilación

Mediante el manejo del software ChemDraw se hizo posible la generación automática de la nomenclatura IUPAC para todos los compuestos químicos. A continuación, se muestran las tablas 38 y 39 una lista general de todas las moléculas presentes en los flujos de entrada y salida del proceso de alquilación donde se indica el número de molécula, los componentes de entrada y su nomenclatura IUPAC.

Tabla 37

Nomenclatura IUPAC para los componentes de entrada del proceso de alquilación

| Número | Componentes de entrada | Nomenclatura IUPAC |
|--------|------------------------|----------------------|
| 1 | propano | propano |
| 2 | propileno | prop-1-eno |
| 3 | isobutano | isobutano |
| 4 | <i>n</i> -butano | butano |
| 5 | buteno | but-1-eno |
| 6 | isopentano | isopentano |
| 7 | <i>n</i> -pentano | pentano |
| 8 | 3-metil-1-buteno | 3-metilbut-1-eno |
| 9 | 1-penteno | pent-1-eno |
| 10 | 2-metil-1-buteno | 2-metilbut-1-eno |
| 11 | 2-penteno | trans-2-penteno |
| 12 | 2-metil-2-buteno | 2-metilbut-2-eno |
| 13 | ciclopenteno | ciclopenteno |
| 14 | 2-metil-1,3-butadieno | isopreno |
| 15 | trans-1,3-pentadieno | trans-1,3-pentadieno |
| 16 | ciclopentadieno | ciclopenta-1,3-dieno |
| 17 | isobuteno | 2-metilprop-1-eno |
| 18 | 1,3-butadieno | buta-1,3-dieno |
| 19 | trans-2-buteno | trans-but-2-eno |
| 20 | cis-2-buteno | cis-but-2-eno |

Tabla 38

Nomenclatura IUPAC para los componentes de salida del proceso de alquilación

| Número de molécula | Componentes de entrada | Nomenclatura IUPAC |
|---------------------------|-------------------------------|---------------------------|
| 1 | propano | propano |
| 2 | isobutano | isobutano |
| 3 | <i>n</i> -butano | butano |
| 4 | isopentano | isopentano |
| 5 | <i>n</i> -pentano | pentano |
| 6 | 2,2-dimetilbutano | 2,2-dimetilbutano |
| 7 | 2,3-dimetilbutano | 2,3-dimetilbutano |
| 8 | 2-metilpentano | 2-metilpentano |
| 9 | 3-metilpentano | 3-metilpentano |
| 10 | <i>n</i> -hexano | hexano |
| 11 | 2,2-dimetilpentano | 2,2-dimetilpentano |
| 12 | 2,4-dimetilpentano | 2,4-dimetilpentano |
| 13 | 2,2,3-trimetilbutano | 2,2,3-trimetilbutano |
| 14 | 3,3-dimetilpentano | 3,3-dimetilpentano |
| 15 | 2,3-dimetilpentano | 2,3-dimetilpentano |
| 16 | 2-metilhexano | 2-metilhexano |
| 17 | 3-metilhexano | 3-metilhexano |
| 18 | 3-etilpentano | 3-etilpentano |
| 19 | <i>n</i> -heptano | heptano |
| 20 | 2,2,4-trimetilpentano | 2,2,4-trimetilpentano |
| 21 | 2,2-dimetilhexano | 2,2-dimetilhexano |
| 22 | 2,4-dimetilhexano | 2,4-dimetilhexano |

| Número de molécula | Componentes de entrada | Nomenclatura IUPAC |
|--------------------|------------------------|-----------------------|
| 23 | 2,5-dimetilhexano | 2,5-dimetilhexano |
| 24 | 2,2,3-trimetilpentano | 2,2,3-trimetilpentano |
| 25 | 3,3-dimetilhexano | 3,3-dimetilhexano |
| 26 | 2,3,4-trimetilpentano | 2,3,4-trimetilpentano |
| 27 | 2,3-dimetilhexano | 2,3-dimetilhexano |
| 28 | 4-metilheptano | 4-metilheptano |
| 29 | 2-metilheptano | 2-metilheptano |
| 30 | 2,3,3-trimetilpentano | 2,3,3-trimetilpentano |
| 31 | 3,4-dimetilhexano | 3,4-dimetilhexano |
| 32 | 3-metilheptano | 3-metilheptano |
| 33 | 2,2,5-trimetilhexano | 2,2,5-trimetilhexano |
| 34 | <i>n</i> -octano | octano |
| 35 | nonano | nonano |
| 36 | decano | decano |
| 37 | undecano | undecano |
| 38 | dodecano | dodecano |

4.3.3. Generación automática del código SMILES

Proceso de polimerización

Mediante la utilización de software ChemDraw se hizo posible la generación automática del código unidimensional para la representación de estructuras químicas que se encuentran en los flujos de entrada y salida del proceso de polimerización con

caracteres alfanuméricos de tipo ASCII. A continuación, se muestran las tablas 40 y 41 una lista general de todas las moléculas con su correspondiente código SMILE.

Tabla 39

Código SMILES para los componentes de entrada del proceso de polimerización

| Número | Componentes de entrada | Código SMILES |
|--------|------------------------|---------------|
| 1 | sulfuro de hidrógeno | [H]S[H] |
| 2 | agua | [H]O[H] |
| 3 | 2-metilbut-2-eno | C/C(C)=C/C |
| 4 | etano | CC |
| 5 | etileno | C=C |
| 6 | heptano | CCCCCCC |
| 7 | hexano | CCCCCC |
| 8 | hidrógeno | [H][H] |
| 9 | isobutane | CC(C)C |
| 10 | isobutileno | C=C(C)C |
| 11 | isopentano | CCC(C)C |
| 12 | metano | C |
| 13 | monóxido de carbono | [C-]#[O+] |
| 14 | butano | CCCC |
| 15 | but-1-eno | C=CCC |
| 16 | nitrógeno | N#N |
| 17 | nonano | CCCCCCCCC |
| 18 | pentano | CCCCC |

| Número | Componentes de entrada | Código SMILES |
|--------|------------------------|---------------|
| 19 | octano | CCCCCCCC |
| 20 | oxígeno | O=O |
| 21 | propano | CCC |
| 22 | (e)-but-2-eno | C=CC |
| 23 | prop-1-eno | C=CC |

Tabla 40

Código SMILES para los componentes de salida del proceso de polimerización

| Número de molécula | Componentes de entrada | SMILES |
|--------------------|------------------------|-----------------|
| 1 | 2,2,5-trimetilhexano | CC(C)(C)CCC(C)C |
| 2 | 2,2-dimetilpropano | CC(C)(C)C |
| 3 | 2,3,5-trimetilhexano | CC(C)C(C)CC(C)C |
| 4 | 2,3-dimetilhexano | CC(C)C(C)CCC |
| 5 | 2,4-dimetilheptano | CC(C)(C)CC(C)=C |
| 6 | 2,4-dimetilhexano | CC(C)CC(C)CC |
| 7 | 2,5-dimetilheptano | CC(C)CCC(C)CC |
| 8 | 2,5-dimetilhexano | CC(C)CCC(C)C |
| 9 | 2,6-dimetilheptano | CC(C)CCCC(C)C |
| 10 | 2-metilbutano | CC(C)CC |

| Número de molécula | Componentes de entrada | SMILES |
|-----------------------|---|---|
| 11 | 2-metilheptano | <chem>CC(C)CCCCCC</chem> |
| 12 | 2-metiloctano | <chem>CC(C)CCCCCCC</chem> |
| 13 | 2-metilpropano | <chem>CC(C)C</chem> |
| 14 | 3,4-dimetilheptano | <chem>CCC(C)C(C)CCC</chem> |
| 15 | 3-etil-2,4dimetilpentano | <chem>CC(C)C(CC)C(C)C</chem> |
| 16 | 3-metilheptano | <chem>CCC(C)CCCC</chem> |
| 17 | 3-metiloctano | <chem>CCC(C)CCCCC</chem> |
| 18 | 4-metiloctano | <chem>CCCC(C)CCCC</chem> |
| 19 | but-1-eno | <chem>C=CCC</chem> |
| 20 | 2,4,4,6,6,8,8,10,10,12,12- undecametiltridec-2-eno | <chem>C/C(C)=C/C(C)(CC(C)(C)CC(C)(C) CC(C)(C)CC(C)(C)C</chem> |
| 21 | 2,4,4-trimetilpent-1-eno | <chem>CC(C)(C)CC(C)=C</chem> |
| 22 | etanotiol | <chem>CCS</chem> |
| 23 | hept-1-eno | <chem>C=CCCCCC</chem> |
| 24 | hex-1-eno | <chem>C=CCCCC</chem> |
| 25 | dec-1-eno | <chem>C=CCCCCCCCC</chem> |
| 26 | undec-1-eno | <chem>C=CCCCCCCCCC</chem> |

| Número de molécula | Componentes de entrada | SMILES |
|--------------------|--------------------------------|---------------------------|
| 27 | dodec-1-eno | C=CCCCCCCCCCC |
| 28 | tridec-1-eno | C=CCCCCCCCCCCC |
| 29 | tetradec-1-eno | C=CCCCCCCCCCCCC |
| 30 | pentadec-1-eno | C=CCCCCCCCCCCCC |
| 31 | pent-1-eno | C=CCCC |
| 32 | eteno | C=C |
| 33 | propano | CCC |
| 34 | 2,4,4,6,6-pentametilhept-2-eno | C/C(C)=C/C(CC(C)(C)C)(C)C |

Proceso de alquilación

Utilizando el software ChemDraw se hizo posible la generación automática del código unidimensional para la representación de estructuras químicas que se encuentran en los flujos de entrada y salida del proceso de alquilación, con caracteres alfanuméricos de tipo ASCII. A continuación, se muestran las tablas 42 y 43 una lista general de todas estas moléculas su correspondiente código SMILE.

Tabla 41

Código SMILES para los componentes de entrada del proceso de alquilación

| Número | Componentes de entrada | Código SMILES |
|--------|------------------------|---------------|
| 1 | propano | CCC |
| 2 | propileno | C=CC |
| 3 | isobutano | CC(C)C |
| 4 | <i>n</i> -butano | CCCC |
| 5 | buteno | C=CCC |
| 6 | isopentano | CCC(C)C |
| 7 | <i>n</i> -pentano | CCCCC |
| 8 | 3-metil-1-buteno | C=CC(C)C |
| 9 | 1-penteno | C=CCCC |
| 10 | 2-metil-1-buteno | C=C(C)CC |
| 11 | 2-penteno | CC=CCC |
| 12 | 2-metil-2-buteno | C/C(C)=C/C |
| 13 | ciclopenteno | C1=CCCC1 |
| 14 | 2-metil-1,3-butadieno | C=C(C)C=C |
| 15 | trans-1,3-pentadieno | C=C/C=C/C |
| 16 | ciclopentadieno | C1=CC=CC1 |
| 17 | isobuteno | C=C(C)C |
| 18 | 1,3-butadieno | C=CC=C |
| 19 | trans-2-buteno | C/C=C/C |
| 20 | cis-2-buteno | C/C=C\C |

Tabla 42

Código SMILES para los componentes de salida del proceso de alquilación

| Número de molécula | Componentes de entrada | SMILES |
|---------------------------|-------------------------------|---------------|
| 1 | propano | CCC |
| 2 | isobutano | CC(C)C |
| 3 | <i>n</i> -butano | CCCC |
| 4 | isopentano | CCC(C)C |
| 5 | <i>n</i> -pentano | CCCCC |
| 6 | 2,2-dimetilbutano | CC(C)(C)CC |
| 7 | 2,3-dimetilbutano | CC(C)C(C)C |
| 8 | 2-metilpentano | CC(C)CCC |
| 9 | 3-metilpentano | CCC(C)CC |
| 10 | <i>n</i> -hexano | CCCCCC |
| 11 | 2,2-dimetilpentano | CC(C)(C)CCC |
| 12 | 2,4-dimetilpentano | CC(C)CC(C)C |
| 13 | 2,2,3-trimetilbutano | CC(C)(C)C(C)C |
| 14 | 3,3-dimetilpentano | CCC(C)(C)CC |
| 15 | 2,3-dimetilpentano | CC(C)C(C)CC |
| 16 | 2-metilhexano | CC(C)CCCC |

| Número de molécula | Componentes de entrada | SMILES |
|--------------------|------------------------|------------------------------|
| 17 | 3-metilhexano | <chem>CCC(C)CCC</chem> |
| 18 | 3-etilpentano | <chem>CCC(CC)CC</chem> |
| 19 | <i>n</i> -heptano | <chem>CCCCCCC</chem> |
| 20 | 2,2,4-trimetilpentano | <chem>CC(C)(C)CC(C)C</chem> |
| 21 | 2,2-dimetilhexano | <chem>CC(C)(C)CCCC</chem> |
| 22 | 2,4-dimetilhexano | <chem>CC(C)CC(C)CC</chem> |
| 23 | 2,5-dimetilhexano | <chem>CC(C)CCC(C)C</chem> |
| 24 | 2,2,3-trimetilpentano | <chem>CC(C)(C)C(C)CC</chem> |
| 25 | 3,3-dimetilhexano | <chem>CCC(C)(C)CCC</chem> |
| 26 | 2,3,4-trimetilpentano | <chem>CC(C)C(C)C(C)C</chem> |
| 27 | 2,3-dimetilhexano | <chem>CC(C)C(C)CCC</chem> |
| 28 | 4-metilheptano | <chem>CCCC(C)CCC</chem> |
| 29 | 2-metilheptano | <chem>CC(C)CCCCCC</chem> |
| 30 | 2,3,3-trimetilpentano | <chem>CC(C)C(C)(C)CC</chem> |
| 31 | 3,4-dimetilhexano | <chem>CCC(C)C(C)CC</chem> |
| 32 | 3-metilheptano | <chem>CCC(C)CCCC</chem> |
| 33 | 2,2,5-trimetilhexano | <chem>CC(C)(C)CCC(C)C</chem> |
| 34 | <i>n</i> -octano | <chem>CCCCCCCC</chem> |

| Número de molécula | Componentes de entrada | SMILES |
|--------------------|------------------------|-----------|
| 35 | nonano | CCCCCCCCC |
| 36 | decano | CCCCCCCCC |
| 37 | undecano | CCCCCCCCC |
| 38 | dodecano | CCCCCCCCC |

4.4. Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas

4.4.1. Procesamiento a través del código SMILES

Las propiedades fisicoquímicas obtenidas a través de la plataforma suiza bioinformática SwissADME son confiables debido a que se consiguen resultados equivalentes a los que se reportan en la bibliografía, por ejemplo, para el caso del etileno el peso molecular según (Gallant & Yaws, 1992) es 28,054 g/mol, mientras que el valor Tomado de la plataforma es 28,05 g/mol, esto se cumple de manera similar para todos los compuestos químicos presentados a continuación para los procesos de polimerización y alquilación.

Proceso de polimerización

Los radares de biodisponibilidad para las moléculas representativas de las entrada y salida del proceso de polimerización tablas 44 y 45, muestran el comportamiento teórico que tendría en el organismo humano estos compuestos orgánicos en caso de ingesta (Daina et al., 2017), es decir, las coordenadas en zona roja de los radares muestran que, aunque dichas moléculas conservarían sus propiedades fisicoquímicas, lipofílicas y de solubilidad en agua aun dentro del cuerpo humano o en contacto con él (Maray Mateos, 2020), ninguna estas es compatible con

ninguno de los órganos que forman al ser humano ya que no poseen características farmacocinéticas en lo absoluto y por lo tanto sería muy perjudiciales para la salud en caso de consumo o contacto directo con grandes cantidades de dichas moléculas.

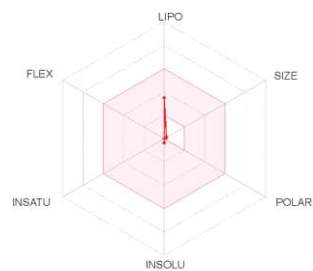
Tabla 43

Radar de biodisponibilidad de las moléculas de entrada del proceso de polimerización

| Nombre de la molécula | Estructura 2D | Radar de biodisponibilidad |
|-----------------------|--|--|
| propileno | $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}_3$ | <p>A radar chart with six axes: LIPO (top), SIZE (top-right), POLAR (right), INSOLU (bottom), INSATU (bottom-left), and FLEX (left). The chart has three concentric rings. A red line connects the data points for each axis, showing values that are generally low to moderate across all categories.</p> |
| 2-metilbut-2-eno | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}=\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{C} \end{array}$ | <p>A radar chart with six axes: LIPO (top), SIZE (top-right), POLAR (right), INSOLU (bottom), INSATU (bottom-left), and FLEX (left). The chart has three concentric rings. A red line connects the data points for each axis, showing values that are generally low to moderate across all categories.</p> |

| Nombre de la molécula | Estructura 2D | Radar de biodisponibilidad |
|-----------------------|---------------|----------------------------|
|-----------------------|---------------|----------------------------|

metano

CH₄

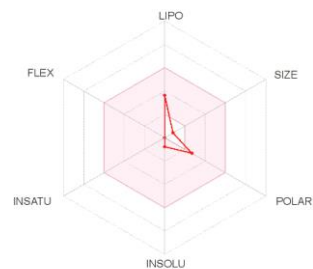
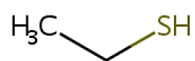
Nota. Tomado de la plataforma suiza bioinformática [SwissADME](#)

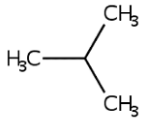
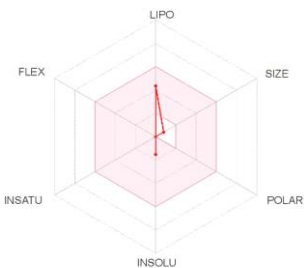
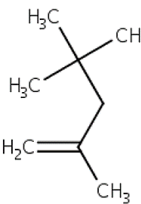
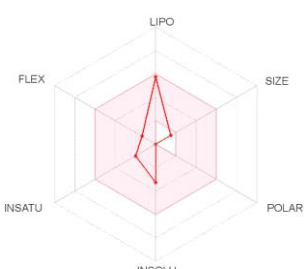
Tabla 44

Radar de biodisponibilidad de las moléculas de entrada del proceso de polimerización

| Nombre de la molécula | Estructura 2D | Radar de biodisponibilidad |
|-----------------------|---------------|----------------------------|
|-----------------------|---------------|----------------------------|

etanotiol



| Nombre de la molécula | Estructura 2D | Radar de biodisponibilidad |
|-----------------------|---|---|
| 2-metilpropano |  |  |
| diisobutileno |  |  |

Los datos que se genera mediante el procesamiento a través del código SMILES, en las propiedades físicas para cada molécula, también se proporciona más información relevante como número de átomos pesados, número de átomos pesados aromáticos, entre otros, para posteriores análisis, como el uso de estos compuestos en mezclas de hidrocarburos requeridas en la industria del petróleo (Wauquier, 2004). La molécula 12 correspondiente al metano se la consideró para este apartado debido a que, es el componente mayoritario del gas dulce para el caso de la búsqueda de petróleo internacional, así como también para el petróleo ecuatoriano, tabla 46.

Tabla 45

Propiedades fisicoquímicas de los compuestos selectos de la corriente de entrada al proceso de polimerización

| Propiedades fisicoquímicas | | | | |
|-------------------------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| Nombre de la molécula | propileno | butileno | penteno | Metano |
| Fórmula | C_3H_6 | C_4H_8 | C_5H_{12} | CH_4 |
| Peso molecular (g/mol) | 42,08 | 56,11 | 72,15 | 16,04 |
| Número de átomos pesados | 3 | 4 | 5 | 1 |
| Número de átomos aromáticos pesados | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Fracción de carbono sp ³ | 0,33 | 0,50 | 1,00 | 1,00 |
| Número enlaces rotativos | 0 | 1 | 2 | 0 |
| Número aceptores de enlaces H | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Número donantes de bonos H | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Refractividad molar | 16,06 | 20,87 | 26,15 | 6,92 |
| TPSA | 0,00 Å ² | 0,00 Å ² | 0,00 Å ² | 0,00 Å ² |

El análisis global muestra que ninguno de las moléculas tiene átomos aromáticos pesados esto se debe al previo proceso de tratamiento del gas, ya que para la corriente de ingreso del proceso de polimerización la presencia de azufre es indeseable. En cuanto a las propiedades fisicoquímicas de las especies químicas de entrada del proceso de polimerización el nonano presenta el máximo peso molecular de 128,26 g/mol, el menor valor es del hidrogeno de 2,02 g/mol.

Según (Al-Qahtani & Elkamel, 2015) los productos de salida de polimerización son es nafta pesada, *n*-Butano y GLP , debido a esto se presentarán las propiedades fisicoquímicas básicas resaltantes del procesamiento a través del código SMILES del 3-etil-2,4-dimetilpentano que está formando parte de la nafta de polimerización (Al-Qahtani & Elkamel, 2015) , del 2-metilpropano que es uno de los componentes mayoritarios de GLP (Raslavičius et al., 2014) y al cotrímeros de isobuteno (Munday, John C, J McGee, 1948), y los demás compuestos químicos presentes en la corriente de salida del proceso de polimerización se muestra en el Anexo 2.

De las todas moléculas de los compuestos selectos de la corriente de salida del proceso de polimerización analizadas con la plataforma suiza bioinformática SwissADME, la especie química más liviana es el eteno con 28,05 g/mol y la más pesada corresponde al cotrimeros de isobuteno que tiene 336,64 g/mol, mientras que el peso promedio es de 122,12 g/mol.

Tabla 46

Propiedades fisicoquímicas de los compuestos selectos de la corriente de salida del proceso de polimerización

| Nombre de la molécula | 3-etil-2,4-dimetilpentano | 2-metilpropano | Cotrimeros de isobuteno |
|-------------------------------------|----------------------------------|-----------------------|--------------------------------|
| Fórmula | C_9H_{20} | C_4H_{10} | $C_{24}H_{48}$ |
| Peso molecular (g/mol) | 128,26 g/mol | 58,12 g/mol | 336,64 g/mol |
| Número de átomos pesados | 9 | 4 | 24 |
| Número de átomos aromáticos pesados | 0 | 0 | 0 |
| Fracción de carbono sp ³ | 1,00 | 1,00 | 0,92 |
| Número enlaces rotativos | 3 | 0 | 9 |
| Número aceptores de enlaces H | 0 | 0 | 0 |
| Número donador de enlaces de H | 0 | 0 | 0 |
| Refractividad molar | 45,38 | 21,34 | 115,71 |
| TPSA | 0,00 Å ² | 0,00 Å ² | 0,00 Å ² |

Para la lipofilia se presenta una sola tabla debido a la similitud en el comportamiento físico químico de las moléculas presentes en los flujos de entrada y salida del proceso de polimerización, debido su naturaleza hidrocarburífera, éstas moléculas están impedidas de moverse a través de compartimentos biológicos (Clemente, 2011) como se menciona al inicio de este apartado, no obstante se

presentan los valores en lipofilia obtenidos por la plataforma bioinformática SwissADME calculados en diferentes métodos

Tabla 47

Datos de lipofilia para de los compuestos selectos de la corriente de entrada y salida al proceso de polimerización

| Nombre de la molécula | Lipofilia | | | |
|--------------------------------|-----------|----------|---------|--------|
| | propileno | butileno | penteno | metano |
| $\log p_{o/w}$ (ilogp) | 1,57 | 1,78 | 2,02 | 0,00 |
| $\log p_{o/w}$ (xlogp3) | 1,44 | 2,40 | 2,41 | 0,65 |
| $\log p_{o/w}$ (wlogp) | 1,19 | 1,58 | 1,97 | 0,64 |
| $\log p_{o/w}$ (mlogp) | 2,13 | 2,58 | 2,99 | 1,12 |
| $\log p_{o/w}$ (silicos-it) | 0,44 | 0,89 | 1,33 | -0,48 |
| Registro de consenso $P_{o/w}$ | 1,35 | 1,85 | 2,14 | -0,3 |

Para las especies químicas en la entrada al proceso de polimerización la solubilidad en agua está en el rango de muy soluble y soluble para las 23 moléculas presentadas en la tabla 17 , para el método de cálculo ESOL Log S el valor mínimo es de -3,8 que corresponde a las moléculas de octano y oxígeno catalogado como Soluble , mientras que el valor máximo es del metano -0,35 muy soluble, para el método de cálculo ESOL el mínimo valor es del nonano con -5,41 es moderadamente soluble , para este mismo método el valor máximo es del metano -0,23 muy soluble, finalmente para el tipo Log S (SILICOS-IT) el menor valor reportado por SwissADME es del nonano con -3,45 soluble, el valor máximo para este método continúa siendo el metano con un valor de -0,48 es decir del tipo soluble.

Tabla 48

Datos de solubilidad para de los compuestos selectos de la corriente de entrada y salida al proceso de polimerización

| Solubilidad en agua | | | | |
|----------------------------|-----------------------|-----------------------|-------------|-----------------------|
| Número de Molécula | octano | oxígeno | nonano | metano |
| log S (ESOL) | -3,48 | -3,48 | -1,66 | -3,80 |
| tipo | soluble | soluble | muy soluble | soluble |
| log S (ALI) | -4,93 | -4,93 | -2,05 | -5,41 |
| Número de Molécula | octano | oxígeno | nonano | metano |
| tipo | Moderadamente soluble | Moderadamente soluble | Soluble | Moderadamente soluble |
| log S (SILICOS-IT) | -3,03 | -3,03 | -1,38 | -3,45 |
| tipo | soluble | soluble | soluble | soluble |

Las especies químicas en la salida del proceso de polimerización según los datos recuperados de SwissADME, para el método de cálculo ESOL Log S el valor mínimo es de -7,96 catalogado como poco soluble , mientras que el valor máximo es del eteno -0,77 muy soluble, para el método de cálculo ESOL el mínimo valor es de -10,47 es insoluble , para este mismo método el valor máximo es de -0,8 muy soluble, posteriormente para el tipo Log S (SILICOS-IT) el menor valor reportado es -6,83 poco soluble, el valor máximo para este método es de -0,36 es decir del tipo soluble. Para

todos los métodos de análisis los valores mínimos corresponden al cotrímeros de isobuteno y los valores máximos pertenecen al eterno

Tabla 49

Datos de solubilidad en agua para de los compuestos selectos de la corriente de entrada al proceso de polimerización

| Solubilidad en agua | | | |
|----------------------------|---------------------------|-------------|-------------------------|
| Número de Molécula | 3-etil-2,4-dimetilpentano | eteno | cotrímeros de isobuteno |
| log S (ESOL) | -3,10 | -0,77 | -7,96 |
| Número de Molécula | 3-etil-2,4-dimetilpentano | eteno | cotrímeros de isobuteno |
| tipo | Soluble | Muy soluble | Poco soluble |
| log S (ALI) | -3,93 | -0,80 | -10,47 |
| tipo | Soluble | Muy soluble | Insoluble |
| log S (SILICOS-IT) | -2,33 | -0,36 | -6,83 |
| tipo | Soluble | Soluble | Poco soluble |

Proceso de alquilación

Para realizar los cálculos de las propiedades fisicoquímicas básicas, lipofilia y solubilidad en agua se utilizó la plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME, donde es posible la obtención de datos ingresando un código SMILES en dicha plataforma. Se muestra la estructura 2D, radar de biodisponibilidad y tablas de las

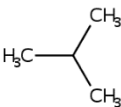
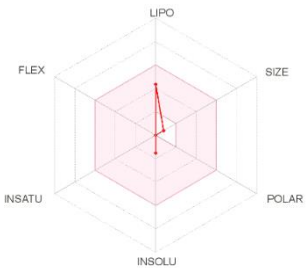
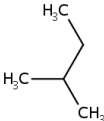
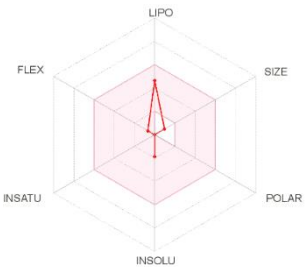
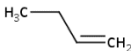
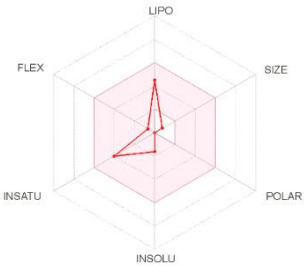
propiedades fisicoquímicas básicas, lipofilia y solubilidad en agua de los compuestos orgánicos más representativos en la corriente de entrada y salida del proceso, de igual manera en el Anexo 2 se encuentra las propiedades fisicoquímicas para los demás compuestos de entrada y salida del proceso.

A continuación, se muestra una tabla de los componentes orgánicos a la entrada al proceso de alquilación, como la estructura bidimensional y el radar de biodisponibilidad, donde este a simple vista presenta seis propiedades fisicoquímicas como la lipofilia, tamaño, polaridad, solubilidad, flexibilidad y saturación. El área rosa presenta un rango óptimo a ser considerado para cada propiedad física anteriormente mencionada.

Los componentes orgánicos representativos dentro de la corriente de entrada al proceso de alquilación, en la zona rosa del radar de biodisponibilidad, todos los componentes se dirigen a la propiedad fisicoquímica lipofilia, esta propiedad hace referencia al modelo predictivo XLOGP3, que es un método atomístico, que se encuentra en el rango entre -0.7 y +0.5, es decir estos componentes son lípidos, por lo que también se evidencia que el compuesto orgánico 1-buteno presenta una dirección a la propiedad fisicoquímica insaturada por ser un alqueno.

Tabla 50

Estructura 2D y radar de biodisponibilidad de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de entrada del proceso de alquilación

| Nombre de la molécula | Estructura 2D | Radar de biodisponibilidad |
|-----------------------|--|--|
| isobutano |  |  |
| isopentano |  |  |
| 1-buteno |  |  |

Con respecto a las propiedades físicas de los componentes más representativos, en porcentaje en masa de la corriente de entrada al proceso de alquilación se observa que el 1-buteno presenta una fracción de carbono sp^3 de 0.50 a diferencia del isobutano e isopentano que tienen un valor de 1 de fracción de carbono sp^3 . Además, a esto se añade que ninguno de los tres componentes orgánicos posee un área de superficie polar topológica.

Tabla 51

Propiedades fisicoquímicas de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de entrada del proceso de alquilación

| Propiedades fisicoquímicas | | | |
|-------------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|-------------------------------|
| Nombre de la molécula | isobutano | isopentano | 1-buteno |
| Fórmula | C ₄ H ₁₀ | C ₅ H ₁₂ | C ₄ H ₈ |
| Peso molecular (g/mol) | 58,12 | 72,15 | 56,11 |
| Número de átomos pesados | 4 | 5 | 4 |
| Número de átomos aromáticos pesados | 0 | 0 | 0 |
| Fracción de carbono sp ³ | 1,00 | 1,00 | 0,50 |
| Número enlaces rotativos | 0 | 1 | 1 |
| Número aceptores de enlaces H | 0 | 0 | 0 |
| Número donador de enlaces de H | 0 | 0 | 0 |
| Nombre de la molécula | isobutano | isopentano | 1-buteno |
| Refractividad molar | 21,34 | 26,15 | 20,87 |
| TPSA (Å ²) | 0,00 | 0,00 | 0,00 |

En referencia a la propiedad fisicoquímica de lipofilia, se observa que se muestran cinco métodos computacionales para generar un consenso de las cinco predicciones, en relación al isobutano, isopentano y 1-buteno el método topológico MLOGP arroja un mayor valor de exactitud para una mejor predicción del consenso o serie química en relación a los otros cuatro modelos predictivos.

Tabla 52

Datos de lipofilia de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de entrada del proceso de alquilación

| Lipofilia | | | |
|------------------------------|------------------|-------------------|-----------------|
| Nombre de la molécula | isobutano | isopentano | 1-buteno |
| Log P_{ow} (iLOGP) | 1,91 | 2,11 | 1,78 |

| Nombre de la molécula | isobutano | isopentano | 1-buteno |
|--------------------------------|-----------|------------|----------|
| Log $P_{o/w}$ (XLOGP3) | 2,09 | 2,64 | 2,40 |
| Log $P_{o/w}$ (WLOGP) | 1,66 | 2,05 | 1,58 |
| Log $P_{o/w}$ (MLOGP) | 2,73 | 3,14 | 2,58 |
| Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT) | 0,72 | 1,17 | 0,89 |
| Registro de consenso $P_{o/w}$ | 1,82 | 2,22 | 1,85 |

La solubilidad de los componentes orgánicos de entrada al proceso de alquilación es importante debido a que representa una propiedad física de interés para ser estudiada. Log S (ESOL) y Log S (Ali) describen un método topológico simple implementado para calcular la solubilidad, con correlaciones lineales de $R^2=0.69$ y $R^2=0.81$ respectivamente, además existe otro método fragmentario por el programa FILTER-IT con una correlación lineal de $R^2=0.75$. El isobutano presenta clase muy soluble y el isopentano como el 1-buteno posee una clase soluble según el método topológico Log S (Ali).

Tabla 53

Datos de solubilidad de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de entrada del proceso de alquilación

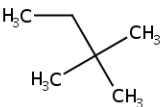
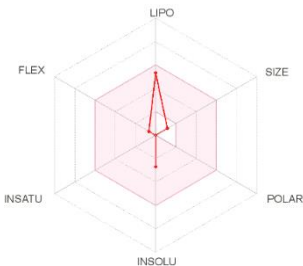
| Solubilidad en agua | | | |
|-----------------------|-------------|-------------|-------------|
| Nombre de la molécula | isobutano | isopentano | 1-buteno |
| Log S (ESOL) | -1,52 | -1,88 | -1,63 |
| Clase | Muy soluble | Muy soluble | Muy soluble |
| Log S (Ali) | -1,72 | -2,29 | -2,04 |
| Clase | Muy soluble | Soluble | Soluble |
| Log S (SILICOS-IT) | -0,91 | -1,35 | -0,93 |
| Clase | Soluble | Soluble | Soluble |

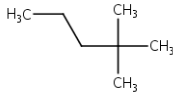
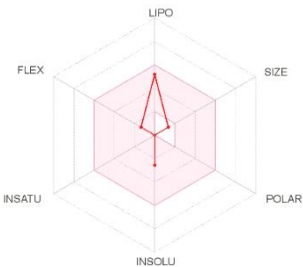
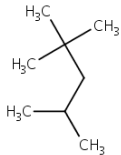
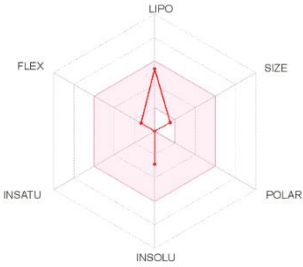
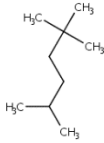
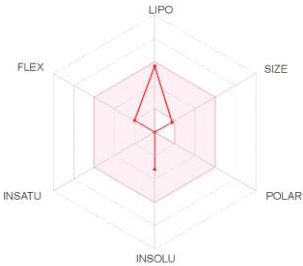
En la siguiente tabla se muestra el nombre de la molécula en la primera columna, estructura bidimensional en la segunda columna y por último el radar de biodisponibilidad, donde este a simple vista presenta seis propiedades fisicoquímicas como la lipofilia, tamaño, polaridad, solubilidad, flexibilidad y saturación. El área rosa presenta un rango óptimo a ser considerado para cada propiedad física anteriormente mencionada.

Los componentes orgánicos representativos dentro de la corriente de salida del proceso de alquilación, en la zona rosa del radar de biodisponibilidad, todos los componentes se dirigen a la propiedad fisicoquímica lipofilia, esta propiedad hace referencia al modelo predictivo XLOGP3, que es un método atomístico, que se encuentra en el rango entre -0.7 y +0.5, es decir estos componentes son lípidos.

Tabla 54

Estructura 2D y radar de biodisponibilidad de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de salida del proceso de alquilación

| Nombre de la molécula | Estructura 2D | Radar de biodisponibilidad |
|-----------------------|---|---|
| 2,2-dimetilbutano |  |  |

| Nombre de la molécula | Estructura 2D | Radar de biodisponibilidad |
|-----------------------|--|--|
| 2,2-dimetilpentano |  |  |
| 2,2,4-trimetilpentano |  |  |
| 2,2,5-trimetilhexano |  |  |

Con respecto a las propiedades fisicoquímicas de los isómeros de C₆ a C₉, que se encuentra en la corriente de salida del proceso de alquilación, todos los componentes orgánicos presentan un valor de 1 en la fracción de carbono sp³. Además, a esto se añade que ninguno de los cuatro componentes orgánicos posee un área de superficie polar topológica.

En referencia a la propiedad física de la lipofilia, se observa que se muestran cinco métodos computacionales para generar un consenso de las cinco predicciones, en relación al 2,2-dimetilbutano presenta un valor mayor 3.82 con el método atomístico

a comparación de los componentes orgánicos como 2,2-dimetilpentano además de 2,2,4-trimetilpentano y finalmente 2,2,5-trimetilhexano el método topológico MLOGP arroja un mayor valor de exactitud para una mejor predicción del consenso o serie química en relación a los otros cuatro modelos predictivos.

La solubilidad de los componentes orgánicos a la salida del proceso de alquilación es importante debido a que representa una propiedad física de interés a ser estudiada. Log S (ESOL) y Log S (Ali) describen un método topológico simple implementado para calcular la solubilidad, con correlaciones lineales de $R^2=0.69$ y $R^2=0.81$ respectivamente, además existe otro método fragmentario por el programa FILTER-IT con una correlación lineal de $R^2=0.75$. El 2,2-dimetilbutano además del 2,2-dimetilpentano y finalmente el 2,2,4-trimetilpentano presenta clase muy soluble, y el 2,2,5-trimetilhexano moderadamente soluble según el método topológico Log S (Ali).

Tabla 55

Propiedades fisicoquímicas de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de salida del proceso de alquilación

| Propiedades fisicoquímicas | | | | |
|-------------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| Nombre de la molécula | 2,2-dimetilbutano | 2,2-dimetilpentano | 2,2,4-trimetilpentano | 2,2,5-trimetilhexano |
| Fórmula | C ₆ H ₁₄ | C ₇ H ₁₆ | C ₈ H ₁₈ | C ₉ H ₂₀ |
| Peso molecular (g/mol) | 86,18 | 100,20 | 114,23 | 128,26 |
| Número de átomos pesados | 6 | 7 | 8 | 9 |
| Número de átomos aromáticos pesados | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Fracción de carbono sp ³ | 1,00 | 1,00 | 1,00 | 1,00 |
| Número enlaces rotativos | 1 | 2 | 2 | 3 |
| Número aceptores de enlaces H | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Número donantes de bonos H | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Refractividad molar | 30,70 | 35,50 | 40,31 | 45,12 |
| ASPT (Å ²) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |

Tabla 56

Datos de lipofilia de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de salida del proceso de alquilación

| Lipofilia | | | | |
|--------------------------------|-------------------|--------------------|-----------------------|----------------------|
| Nombre de la molécula | 2,2-dimetilbutano | 2,2-dimetilpentano | 2,2,4-trimetilpentano | 2,2,5-trimetilhexano |
| Log $P_{o/w}$ (iLOGP) | 2,25 | 2,49 | 2,62 | 2,89 |
| Log $P_{o/w}$ (XLOGP3) | 3,82 | 3,57 | 3,82 | 4,37 |
| Log $P_{o/w}$ (WLOGP) | 2,44 | 2,83 | 3,08 | 3,47 |
| Log $P_{o/w}$ (MLOGP) | 3,52 | 3,87 | 4,20 | 4,52 |
| Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT) | 1,46 | 1,90 | 2,17 | 2,61 |
| Registro de consenso $P_{o/w}$ | 2,70 | 2,93 | 3,18 | 3,57 |

Tabla 57

Datos de solubilidad de los componentes orgánicos más representativos en la corriente de salida del proceso de alquilación

| Solubilidad del agua | | | | |
|-----------------------------|-------------------|--------------------|-----------------------|----------------------|
| Nombre de la molécula | 2,2-dimetilbutano | 2,2-dimetilpentano | 2,2,4-trimetilpentano | 2,2,5-trimetilhexano |
| Log S (ESOL) | -2,71 | -2,58 | -2,82 | -3,19 |
| Clase | Soluble | Soluble | Soluble | Soluble |
| Log S (Ali) | -3,52 | -3,26 | -3,52 | -4,09 |

| Nombre de la molécula | 2,2-dimetilbutano | 2,2-dimetilpentano | 2,2,4-trimetilpentano | 2,2,5-trimetilhexano |
|-----------------------|-------------------|--------------------|-----------------------|-----------------------|
| Clase | Soluble | Soluble | Soluble | Moderadamente soluble |
| Log S (SILICOS-IT) | -1,787 | -2,21 | -2,26 | -2,68 |
| Clase | Soluble | Soluble | Soluble | Soluble |

4.5. Cálculo y obtención de estructuras 3D

4.5.1. Elaboración de archivos con coordenadas 3D no optimizada y optimizada

La elaboración de los archivos con coordenadas 3D no optimizada y optimizada para las moléculas de entrada y salida del proceso de polimerización y alquilación se lleva a cabo mediante el uso del programa Avogadro, previamente se dibuja la molécula en el software ChemDraw y se guarda en formato MDL Molfile (*.mol) para así poder abrir en el programa Avogadro. Se utiliza el campo de fuerza MMFF94 para la obtención de la molécula optimizada, el apartado 3.5.1. y 3.5.2. muestran paso a paso la elaboración de la molécula no optimizada y optimizada.

Proceso de polimerización

Coordenadas 3D no optimizada y optimizada para los componentes selectos de entrada del proceso de polimerización. Las coordenadas de los compuestos en su totalidad se presentan en el Anexo 3

Tabla 58

Coordenadas cartesianas de la molécula de propileno

| Molécula no optimizada | | | |
|-------------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje x | Eje y | Eje z |
| C | 0,97223 | 0,04476 | - |
| C | 2,30975 | 0,07200 | - |
| C | 3,09843 | 0,72214 | - |
| H | 0,45447 | -0,44448 | - |
| H | 0,36469 | 0,50597 | - |
| H | 2,87694 | -0,40385 | - |
| H | 2,45595 | 1,17646 | - |
| H | 3,73759 | 1,50514 | - |
| H | 3,73759 | -0,01837 | - |

| Molécula optimizada | | | |
|----------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje x | Eje y | Eje z |
| C | 0,97900 | -0,06180 | -0,06250 |
| C | 2,31650 | -0,09940 | -0,10060 |
| C | 3,10470 | -0,99100 | -1,00300 |
| H | 0,46150 | 0,60910 | 0,61650 |
| H | 0,37110 | -0,69400 | -0,70240 |
| H | 2,88400 | 0,55280 | 0,55950 |
| H | 2,46200 | -1,61370 | -1,63320 |
| H | 3,74390 | -1,65140 | -0,40900 |
| H | 3,74390 | -0,38920 | -1,65620 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

Tabla 59

Coordenadas cartesianas de la molécula de butileno

| Molécula no optimizada | | | |
|-------------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje x | Eje y | Eje z |
| C | 0,97900 | 0,05517 | - |
| C | 2,31798 | 0,06913 | - |
| C | 3,11136 | 0,78277 | - |
| C | 4,61145 | 0,63809 | - |
| H | 0,44010 | -0,47244 | - |
| H | 0,39340 | 0,56698 | - |
| H | 2,85871 | -0,45946 | - |
| H | 2,85521 | 1,84859 | - |
| H | 2,85521 | 0,37903 | - |
| H | 4,91552 | 1,05634 | - |
| H | 5,15831 | 1,16901 | - |
| H | 4,91553 | -0,41378 | - |
| | | | - |

| Molécula optimizada | | | |
|----------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje x | Eje y | Eje z |
| C | 1,00660 | 0,09850 | -0,01470 |
| C | 2,34550 | 0,12290 | -0,01840 |
| C | 3,13920 | 1,38350 | -0,20670 |
| C | 4,63920 | 1,12760 | -0,16850 |
| H | 0,46750 | -0,83350 | 0,12460 |
| H | 0,42110 | 1,00280 | -0,14980 |
| H | 2,88610 | -0,81100 | 0,12120 |
| H | 2,88310 | 2,09940 | 0,58290 |
| H | 2,88310 | 1,83730 | -1,17120 |
| H | 4,94320 | 0,69900 | 0,79250 |
| H | 5,18620 | 2,06540 | -0,30860 |
| H | 4,94320 | 0,43670 | -0,96220 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

Tabla 60

Coordenadas cartesianas de la molécula de metano

| Molécula no optimizada | | | |
|-------------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje x | Eje y | Eje z |
| C | 0,97307 | 0,05393 | - |
| H | 2,06527 | 0,05393 | - |
| H | 0,60901 | 0,63057 | - |
| H | 0,60900 | 0,50445 | - |
| H | 0,60900 | -0,97323 | - |

| Molécula optimizada | | | |
|----------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje x | Eje y | Eje z |
| C | 0,96940 | -0,05620 | 0,07680 |
| H | 2,06160 | -0,05620 | 0,07680 |
| H | 0,60530 | -0,66400 | 0,90810 |
| H | 0,60530 | -0,47220 | -0,86510 |
| H | 0,60530 | 0,96760 | 0,18760 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

Coordenadas 3D no optimizada y optimizada para los componentes selectos de salidas del proceso de polimerización, las coordenadas para las especies químicas en su totalidad se presentan en el Anexo 3.

Tabla 61

Coordenadas cartesianas de la molécula de etanotiol

| Molécula no optimizada | | | |
|-------------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje x | Eje y | Eje z |
| C | 1,00778 | 0,01194 | - |
| C | 0,48114 | 0,27919 | - |
| S | 2,82103 | 0,06116 | - |
| H | 0,67725 | -0,97136 | - |
| H | 0,62781 | 0,76502 | - |
| H | 0,82963 | -0,47598 | - |
| H | 0,78548 | 1,26699 | - |
| H | -0,61356 | 0,25065 | - |
| H | 3,01525 | -0,96394 | - |
| Molécula optimizada | | | |
| Átomo | Eje x | Eje y | Eje z |
| C | 1,04740 | 0,08060 | -0,04910 |
| C | 0,52060 | 1,33710 | -0,71650 |
| S | 2,86070 | 0,09390 | 0,00370 |
| H | 0,71710 | -0,80670 | -0,59750 |
| H | 0,66740 | 0,00940 | 0,97440 |
| H | 0,86970 | 1,41990 | -1,75130 |
| H | 0,82410 | 2,23840 | -0,17320 |
| H | -0,57410 | 1,31640 | -0,73760 |
| H | 3,05500 | 0,10630 | -1,32330 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

Tabla 62

Coordenadas cartesianas de la molécula de 2-metilpropano

| Molécula no optimizada | | | |
|-------------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje x | Eje y | Eje z |
| C | 0,93701 | 0,01815 | - |
| C | 2,46379 | -0,00599 | - |
| C | 2,98714 | -1,31860 | - |
| C | 2,98680 | 0,20109 | - |
| H | 0,55893 | -0,10107 | - |
| H | 0,51810 | -0,78755 | - |
| H | 0,55869 | 0,96994 | - |
| H | 2,82949 | 0,81722 | - |
| H | 2,64957 | -2,17731 | - |
| H | 2,63752 | -1,45639 | - |
| H | 4,08214 | -1,32744 | - |
| H | 2,64919 | -0,59735 | - |
| H | 4,08179 | 0,21333 | - |
| H | 2,63696 | 1,15542 | - |
| Molécula optimizada | | | |
| Átomo | Eje x | Eje y | Eje z |
| C | 0,96790 | -0,05790 | -0,07440 |
| C | 2,49470 | -0,08780 | -0,06800 |
| C | 3,01810 | -0,49130 | 1,30870 |
| C | 3,01760 | -1,03970 | -1,14150 |
| H | 0,58990 | 0,64570 | 0,67480 |
| H | 0,54900 | -1,04560 | 0,14680 |
| H | 0,58960 | 0,25920 | -1,05190 |
| H | 2,86040 | 0,92140 | -0,29400 |
| H | 2,68050 | -1,49610 | 1,58470 |
| H | 2,66850 | 0,20640 | 2,07710 |
| H | 4,11310 | -0,48560 | 1,32500 |
| H | 2,68000 | -2,06630 | -0,96260 |
| H | 4,11260 | -1,04160 | -1,15910 |
| H | 2,66770 | -0,73620 | -2,13380 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

Tabla 63*Coordenadas cartesianas de la molécula de etileno*

| Molécula no optimizada | | | |
|-------------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje x | Eje y | Eje z |
| C | 0,98232 | 0,07430 | - |
| C | 2,31811 | 0,07430 | - |
| H | 0,42243 | 0,79854 | - |
| H | 0,42243 | -0,64995 | - |
| H | 2,87799 | 0,79854 | - |
| H | 2,87799 | -0,64995 | - |

| Molécula optimizada | | | |
|----------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje x | Eje y | Eje z |
| C | 0,96840 | 0,08600 | 0,02590 |
| C | 2,30420 | 0,08600 | 0,02590 |
| H | 0,40850 | 0,97640 | 0,29440 |
| H | 0,40850 | -0,80430 | -0,24250 |
| H | 2,86410 | 0,97640 | 0,29440 |
| H | 2,86410 | -0,80430 | -0,24250 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

Proceso de alquilación

Coordenadas 3D no optimizada y optimizada para los componentes representativos de la corriente de entrada del proceso de alquilación. En el Anexo 3 se puede apreciar las coordenadas optimizadas y no optimizadas de los compuestos restantes presentes en la corriente de entrada.

Tabla 64

Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del isobutano

| Molécula no optimizada | | | |
|-------------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
| C | 0.88820 | 0.00508 | - |
| C | 2.41498 | -0.00393 | - |
| C | 2.93829 | -1.40974 | - |
| C | 2.93813 | 0.98548 | - |
| H | 0.51002 | -0.68213 | - |
| H | 0.46936 | -0.29845 | - |
| H | 0.50991 | 1.00590 | - |
| H | 2.78061 | 0.30617 | - |
| H | 2.60074 | -1.76938 | - |
| H | 2.58860 | -2.11661 | - |
| H | 4.03328 | -1.42567 | - |
| H | 2.60059 | 0.72086 | - |
| H | 4.03312 | 1.00281 | - |
| H | 2.58832 | 1.99991 | - |
| Molécula optimizada | | | |
| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
| C | 0.88820 | 0.00508 | 0.02995 |
| C | 2.41498 | -0.00393 | 0.00094 |
| C | 2.93829 | -1.40974 | -0.28513 |
| C | 2.93813 | 0.98548 | -1.03797 |
| H | 0.51003 | -0.68214 | 0.79416 |
| H | 0.46936 | -0.29844 | -0.93561 |
| H | 0.50991 | 1.00590 | 0.26358 |
| H | 2.78062 | 0.30618 | 0.98749 |
| H | 2.60076 | -1.76937 | -1.26318 |
| H | 2.58859 | -2.11661 | 0.47471 |
| H | 4.03328 | -1.42567 | -0.27793 |
| H | 2.60059 | 0.72086 | -2.04589 |
| H | 4.03312 | 1.00281 | -1.04123 |
| H | 2.58831 | 1.99991 | -0.81917 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

Tabla 65

Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del isopentano

| Molécula no optimizada | | | |
|-------------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
| C | 0.89910 | -0.04392 | - |
| C | 2.41734 | 0.05820 | - |
| C | 2.95329 | 0.87589 | - |
| C | 2.49629 | 2.33474 | - |
| C | 4.48236 | 0.81352 | - |
| H | 0.58753 | -0.71997 | - |
| H | 0.50944 | -0.43735 | - |
| H | 0.43505 | 0.92812 | - |
| H | 2.82634 | -0.95863 | - |
| H | 2.76886 | 0.49096 | - |
| H | 2.58316 | 0.42789 | - |
| H | 2.78546 | 2.81416 | - |
| H | 1.41011 | 2.41500 | - |
| H | 2.94360 | 2.90568 | - |
| H | 4.91331 | 1.25169 | - |
| H | 4.88033 | 1.35920 | - |
| H | 4.82877 | -0.22277 | - |
| Molécula optimizada | | | |
| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
| C | 0.89893 | -0.04757 | -0.02140 |
| C | 2.41684 | 0.06132 | -0.05095 |
| C | 2.95237 | 0.87733 | -1.24024 |
| C | 2.49865 | 2.33719 | -1.19648 |
| C | 4.48124 | 0.81166 | -1.26894 |
| H | 0.58739 | -0.72248 | 0.78244 |
| H | 0.51475 | -0.44602 | -0.96563 |
| H | 0.42960 | 0.92297 | 0.16343 |
| H | 2.83036 | -0.95389 | -0.09768 |
| H | 2.76324 | 0.49908 | 0.89331 |
| H | 2.57942 | 0.43006 | -2.17039 |
| H | 2.79294 | 2.81648 | -0.25668 |

| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje |
|-------|---------|----------|----------|
| H | 1.41220 | 2.41983 | -1.29643 |
| H | 2.94372 | 2.90669 | -2.01964 |
| H | 4.91521 | 1.24939 | -0.36344 |
| H | 4.82516 | -0.22546 | -1.34299 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

Tabla 66

Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del 1-buteno

| Molécula no optimizada | | | |
|-------------------------------|---------|----------|----------|
| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
| C | 0.93125 | -0.06627 | - |
| C | 2.27023 | -0.08746 | - |
| C | 3.06378 | -1.17955 | - |
| C | 4.56384 | -0.95794 | - |
| H | 0.39221 | 0.74115 | - |
| H | 0.34577 | -0.84963 | - |
| H | 2.81082 | 0.72157 | - |
| H | 2.80772 | -1.22893 | - |
| H | 2.80772 | -2.14350 | - |
| H | 4.86784 | -0.01559 | - |
| H | 5.11083 | -1.77041 | - |
| H | 4.86783 | -0.93050 | - |
| Molécula optimizada | | | |
| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
| C | 0.93125 | -0.06627 | -0.03988 |
| C | 2.27023 | -0.08746 | -0.05265 |
| C | 3.06379 | -1.17955 | -0.70995 |
| C | 4.56384 | -0.95794 | -0.57656 |
| H | 0.39221 | 0.74115 | 0.44608 |
| H | 0.34577 | -0.84963 | -0.51137 |
| H | 2.81082 | 0.72157 | 0.43429 |
| H | 2.80772 | -1.22893 | -1.77466 |
| H | 2.80772 | -2.14350 | -0.25514 |
| H | 5.11083 | -1.77041 | -1.06557 |

| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
|-------|---------|----------|---------|
| H | 4.86783 | -0.93050 | 0.47534 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

Coordenadas 3D no optimizada y optimizada para los componentes representativos de la corriente de salida del proceso de alquiler. En el Anexo 3 se puede apreciar las coordenadas optimizadas y no optimizadas de los compuestos restantes presentes en la corriente de salida.

Tabla 67

Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del 2,2-dimetilbutano

| Molécula no optimizada | | | |
|-------------------------------|---------|----------|-------|
| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
| C | 2.48200 | -0.08933 | - |
| C | 2.99123 | -0.47462 | - |
| C | 2.55792 | -1.84331 | - |
| C | 3.01942 | 1.31479 | - |
| C | 2.99230 | -1.07668 | - |
| H | 0.54600 | 0.61674 | - |
| H | 0.58953 | 0.31998 | - |
| H | 0.50806 | -1.04032 | - |
| H | 4.08853 | -0.44043 | - |
| H | 2.65539 | 0.27970 | - |
| H | 2.92125 | -2.64917 | - |
| H | 2.97081 | -2.01140 | - |
| H | 1.46996 | -1.92015 | - |
| H | 2.66967 | 2.05804 | - |
| H | 4.11518 | 1.33131 | - |
| H | 2.68822 | 1.63888 | - |
| H | 2.57145 | -2.07766 | - |
| H | 2.71442 | -0.74831 | - |
| H | 4.08413 | -1.16201 | - |
| Molécula optimizada | | | |

| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
|-------|---------|----------|----------|
| C | 0.94555 | -0.04800 | 0.13812 |
| C | 2.48199 | -0.08934 | 0.09404 |
| C | 2.99136 | -0.47442 | -1.31887 |
| C | 2.55799 | -1.84297 | -1.83036 |
| C | 3.01925 | 1.31482 | 0.43292 |
| C | 2.99231 | -1.07688 | 1.15642 |
| H | 0.54585 | 0.61453 | -0.63763 |
| H | 0.58929 | 0.32190 | 1.10653 |
| H | 0.50835 | -1.04105 | -0.00839 |
| H | 4.08869 | -0.44021 | -1.32948 |
| H | 2.65565 | 0.28004 | -2.04240 |
| H | 2.92112 | -2.64892 | -1.18676 |
| H | 2.97108 | -2.01109 | -2.83068 |
| H | 1.47004 | -1.91964 | -1.90857 |
| H | 2.66942 | 2.05812 | -0.29240 |
| H | 4.11499 | 1.33144 | 0.42681 |
| H | 2.68792 | 1.63870 | 1.42611 |
| H | 2.56961 | -2.07722 | 1.01715 |
| H | 2.71659 | -0.74744 | 2.16489 |
| H | 4.08397 | -1.16407 | 1.12264 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

Tabla 68

Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del 2,2-dimetilpentano

| Molécula no optimizada | | | |
|------------------------|---------|----------|-------|
| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
| C | 3.00169 | 1.21087 | - |
| C | 2.55182 | 1.47070 | - |
| C | 3.09704 | 2.79496 | - |
| C | 3.05368 | -0.19854 | - |
| C | 3.01361 | -1.33428 | - |
| H | 0.56835 | 0.71757 | - |
| H | 0.62189 | -1.05056 | - |
| H | 4.09967 | 1.22871 | - |

| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
|---------------------|---------|----------|----------|
| H | 2.66719 | 2.05024 | - |
| H | 1.45925 | 1.49747 | - |
| H | 2.90062 | 0.67052 | - |
| H | 2.74279 | 3.63088 | - |
| H | 2.76691 | 2.96396 | - |
| H | 4.19164 | 2.79970 | - |
| H | 2.70453 | 0.64477 | - |
| H | 4.14945 | -0.18384 | - |
| H | 2.73148 | -1.12062 | - |
| H | 2.58238 | -1.37837 | - |
| H | 2.74717 | -2.26944 | - |
| Molécula optimizada | | | |
| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
| C | 3.00159 | 1.21051 | -0.70992 |
| C | 2.55187 | 1.47073 | -2.15184 |
| C | 3.09741 | 2.79521 | -2.66763 |
| C | 3.05361 | -0.19841 | 1.36053 |
| C | 3.01341 | -1.33453 | -0.86426 |
| H | 0.56778 | 0.72036 | 0.49999 |
| H | 0.62155 | -1.04765 | 0.52916 |
| H | 0.52099 | -0.20040 | -1.01283 |
| H | 4.09959 | 1.22818 | -0.68002 |
| H | 2.66733 | 2.04990 | -0.08501 |
| H | 1.45925 | 1.49753 | -2.21382 |
| H | 2.90067 | 0.67066 | -2.81259 |
| H | 2.74346 | 3.63066 | -2.05519 |
| H | 2.76735 | 2.96536 | -3.69725 |
| H | 4.19203 | 2.79970 | -2.65687 |
| H | 2.70462 | 0.64518 | 1.96676 |
| H | 4.14938 | -0.18385 | 1.36633 |
| H | 2.73137 | -1.12026 | 1.85798 |
| H | 2.57841 | -1.38105 | -1.86787 |
| H | 4.10367 | -1.30850 | -0.96957 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

Tabla 69

Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del 2,2,4-trimetilpentano

| Molécula no optimizada | | | |
|-------------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
| C | 2.90205 | -1.30048 | - |
| C | 2.53282 | -2.56512 | - |
| C | 1.03181 | -2.83852 | - |
| C | 3.22337 | -3.78076 | - |
| C | 3.21627 | 1.15475 | - |
| C | 3.04092 | 0.29491 | - |
| H | 0.58450 | 0.06910 | - |
| H | 0.80795 | 1.44842 | - |
| H | 0.48096 | -0.12933 | - |
| H | 3.99392 | -1.31488 | - |
| H | 2.48857 | -1.39917 | - |
| H | 2.92172 | -2.47651 | - |
| H | 0.55175 | -2.70662 | - |
| H | 0.54452 | -2.18240 | - |
| H | 0.83252 | -3.86250 | - |
| H | 2.88107 | -3.93762 | - |
| H | 3.01409 | -4.69252 | - |
| H | 4.31036 | -3.64755 | - |
| H | 2.87401 | 1.06774 | - |
| H | 4.30569 | 1.03252 | - |
| H | 2.99977 | 2.17500 | - |
| H | 2.54154 | -0.38183 | - |
| H | 2.85740 | 1.31693 | - |
| H | 4.11936 | 0.11129 | - |
| Molécula optimizada | | | |
| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
| C | 2.87906 | -1.29973 | -0.49650 |
| C | 2.60439 | -2.56430 | 0.34949 |
| C | 1.12638 | -2.81963 | 0.63220 |
| C | 3.19266 | -3.78538 | -0.37183 |
| C | 3.28410 | 1.15917 | -0.73983 |
| C | 2.90413 | 0.24371 | 1.55127 |

| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
|-------|---------|----------|----------|
| H | 0.68388 | 0.25083 | -1.12597 |
| H | 0.79564 | 1.45584 | 0.16138 |
| H | 0.37829 | -0.19999 | 0.55654 |
| H | 3.96023 | -1.29363 | -0.69858 |
| H | 2.40312 | -1.41846 | -1.48000 |
| H | 3.12987 | -2.47771 | 1.30795 |
| H | 0.52420 | -2.73665 | -0.27838 |
| H | 0.73943 | -2.11909 | 1.37577 |
| H | 0.97378 | -3.82303 | 1.04531 |
| H | 2.70552 | -3.94769 | -1.33947 |
| H | 3.06505 | -4.69248 | 0.22871 |
| H | 4.26575 | -3.65569 | -0.54846 |
| H | 3.03698 | 1.09677 | -1.80578 |
| H | 4.36683 | 1.02289 | -0.63818 |
| H | 3.04819 | 2.17481 | -0.40185 |
| H | 2.31638 | -0.41650 | 2.19681 |
| H | 2.74120 | 1.26825 | 1.90533 |
| H | 3.96358 | 0.00665 | 1.69918 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

Tabla 70

Coordenadas 3D no optimizada y optimizada del 2,2,5-trimetilhexano

| Molécula no optimizada | | | |
|------------------------|---------|----------|-------|
| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
| C | 2.96621 | 0.41426 | - |
| C | 2.55079 | 1.79077 | - |
| C | 4.59876 | 2.10932 | - |
| C | 2.50715 | 3.41423 | - |
| C | 2.97497 | -1.32845 | - |
| C | 2.94945 | 1.08083 | - |
| H | 0.50959 | -0.65794 | - |
| H | 0.54590 | -0.31171 | - |
| H | 0.46879 | 1.01600 | - |
| H | 4.06096 | 0.35227 | - |

| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
|-------|---------|----------|-------|
| H | 2.62515 | -0.35476 | - |
| H | 1.45695 | 1.85516 | - |
| H | 2.90634 | 2.57988 | - |
| H | 2.70989 | 1.29091 | - |
| H | 5.01582 | 2.81390 | - |
| H | 5.02744 | 1.12212 | - |
| H | 4.93490 | 2.41412 | - |
| H | 2.83344 | 4.24200 | - |
| H | 2.83870 | 3.62535 | - |
| H | 1.41231 | 3.39864 | - |
| H | 2.62725 | -2.09127 | - |
| H | 4.07085 | -1.34794 | - |
| H | 2.63828 | -1.62345 | - |
| H | 2.52171 | 2.07582 | - |
| H | 2.67632 | 0.77300 | - |
| H | 4.04064 | 1.17230 | - |

Molécula optimizada

| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
|-------|---------|----------|----------|
| C | 0.90602 | 0.00778 | -0.13655 |
| C | 2.44263 | 0.06995 | -0.14307 |
| C | 2.99846 | 0.44107 | 1.25934 |
| C | 2.60174 | 1.82784 | 1.78733 |
| C | 3.06240 | 2.08158 | 3.23737 |
| C | 4.58539 | 2.08180 | 3.37762 |
| C | 2.49953 | 3.41609 | 3.73372 |
| C | 2.98324 | -1.32413 | -0.51894 |
| C | 2.90466 | 1.07652 | -1.20936 |
| H | 0.54110 | -0.66083 | 0.65098 |
| H | 0.52357 | -0.36667 | -1.09321 |
| H | 0.45842 | 0.99379 | 0.02349 |
| H | 4.09310 | 0.37727 | 1.22221 |
| H | 2.66991 | -0.31653 | 1.98332 |
| H | 1.51171 | 1.93186 | 1.75321 |
| H | 3.01724 | 2.60637 | 1.13681 |
| H | 2.65828 | 1.28832 | 3.87899 |

| Átomo | Eje X | Eje Y | Eje Z |
|-------|---------|----------|----------|
| H | 5.04642 | 2.80865 | 2.70039 |
| H | 4.88097 | 2.33894 | 4.40064 |
| H | 2.87096 | 4.25266 | 3.13201 |
| H | 2.78402 | 3.59536 | 4.77603 |
| H | 1.40557 | 3.42064 | 3.68278 |
| H | 2.66874 | -2.07995 | 0.20962 |
| H | 4.07857 | -1.32809 | -0.55347 |
| H | 2.61950 | -1.64004 | -1.50332 |
| H | 2.47310 | 2.06914 | -1.04403 |
| H | 2.60048 | 0.75528 | -2.21225 |
| H | 3.99557 | 1.17835 | -1.20986 |

Nota. Tomado del programa Avogadro

4.5.2. Reporte de Energías de optimización y elaboración de estructuras 3D

La obtención de la energía de optimización para las moléculas orgánicas de entrada y salida del proceso de polimerización y alquilación se lleva a cabo mediante el uso del programa Avogadro, previamente se dibuja la molécula en el software ChemDraw y se guarda en formato MDL Molfile (*.mol) para así poder abrir en el programa Avogadro. Cabe resaltar que el reporte de la energía de optimización se encuentra en unidades de kJ/mol.

La elaboración de las estructuras 3D para las moléculas orgánicas de entrada y salida del proceso de polimerización y alquilación se lleva a cabo mediante el uso del programa Chemcraft, previamente se dibuja la molécula en el software ChemDraw y se guarda en formato MDL Molfile (*.mol) para así poder abrir en el programa Chemcraft.


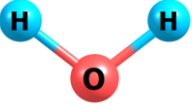
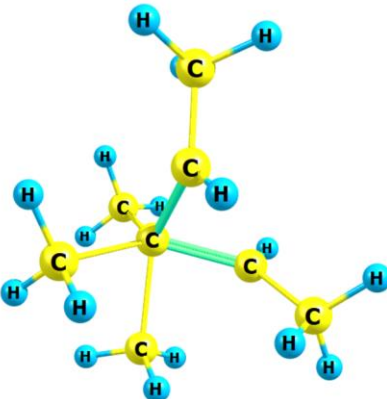
Proceso de polimerización

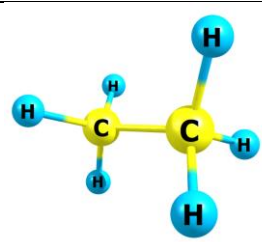
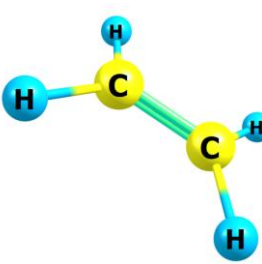
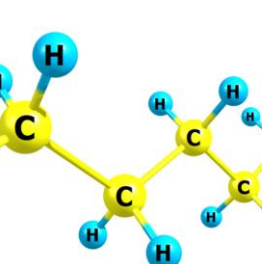
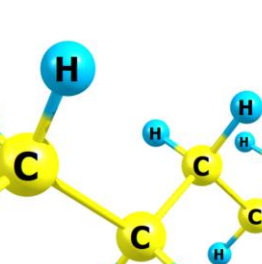
Las moléculas etileno, *n*-butano, nonano, *n*-pentano, octano y propileno se repiten en las corrientes de salida y entrada del proceso de polimerización se modo que, se


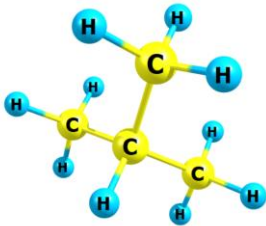
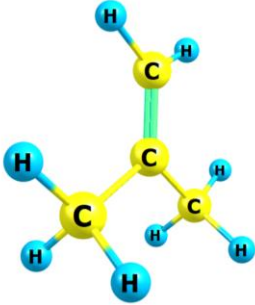
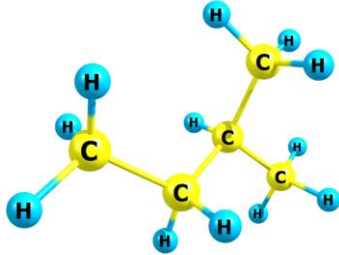
presentan los valores de las energías de optimización y elaboración de estructuras 3D únicamente en la tabla siguiente.

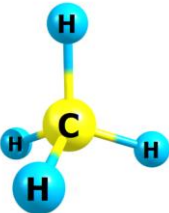

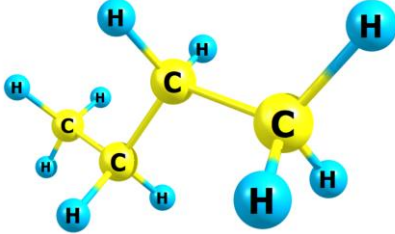
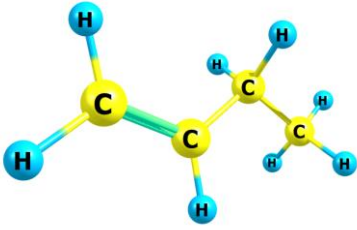

Tabla 71

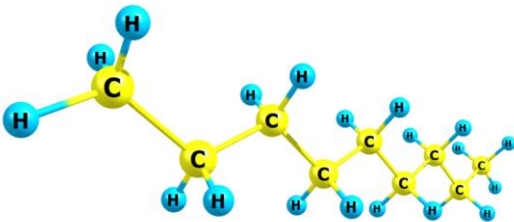
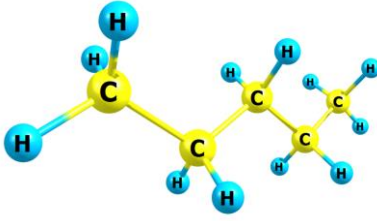
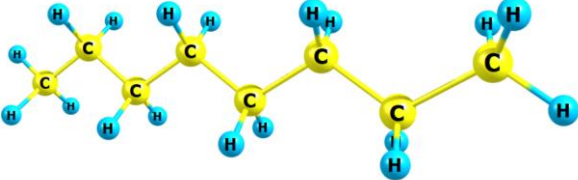
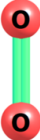
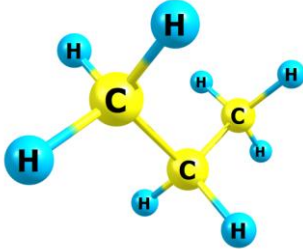
Energías de optimización y estructuras 3D para los componentes de entrada del proceso de polimerización

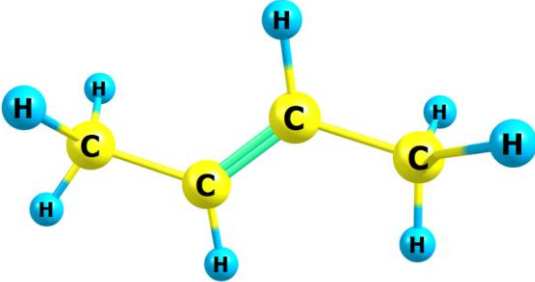
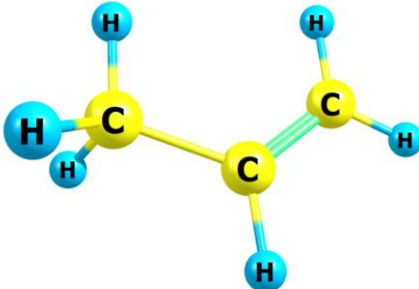
| N.º | Energías de Optimización [kJ/mol] | Estructuras 3D |
|-----|-----------------------------------|--|
| 1 | 1,55E-16 |  |
| 2 | 3,29E-15 |  |
| 3 | 1,20E+09 |  |

| N.º | E. Optimización | Estructuras 3D |
|-----|-----------------|--|
| | [kJ/mol] | |
| 4 | -19,8218 |  |
| 5 | 34,3322 |  |
| 6 | -23,7798 |  |
| 7 | -22,9204 |  |

| N.º | E. Optimización | Estructuras 3D |
|-----|-----------------|--|
| | [kJ/mol] | |
| 8 | - |  |
| 9 | -1,99924 |  |
| 10 | 31,4064 |  |
| 11 | 1,38367 |  |

| N.º | E. Optimización | Estructuras 3D |
|-----|-----------------|--|
| | [kJ/mol] | |
| 12 | 0,110457 |  |
| 13 | 1,61E-18 |  |
| 14 | -21,2521 |  |
| 15 | 32,6231 |  |
| 16 | 1,58E-19 |  |

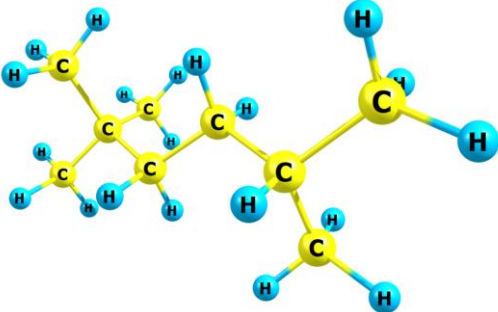
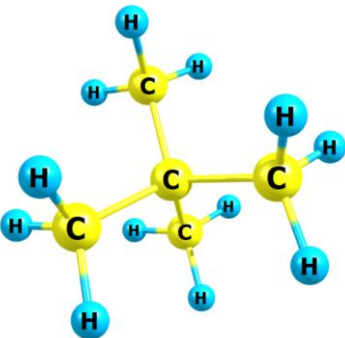
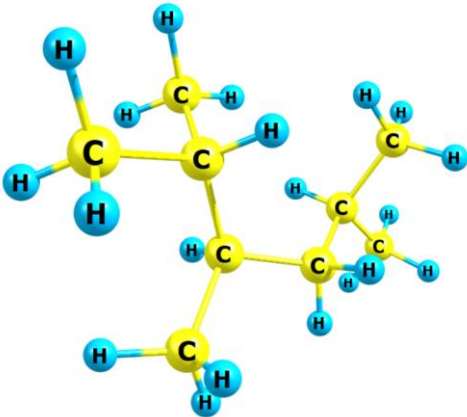
| N.º | E. Optimización | Estructuras 3D |
|----------|-----------------|---|
| [kJ/mol] | | |
| 17 | -25,5078 |  |
| 18 | -22,0718 |  |
| 19 | -24,6429 |  |
| 20 | 7,91E-20 |  |
| 21 | -20,504 |  |

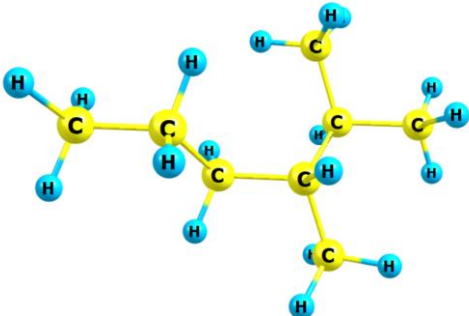
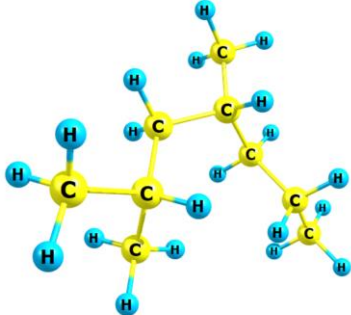
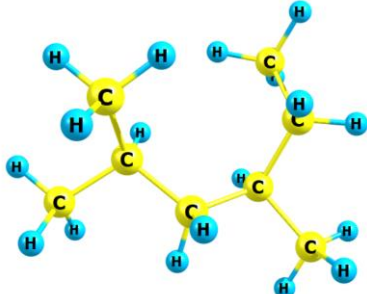
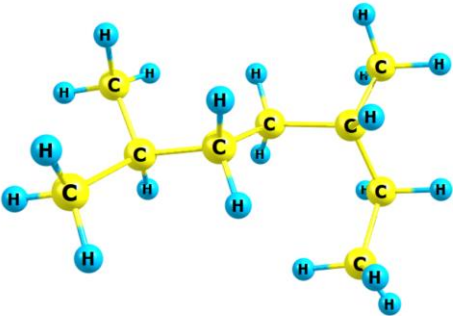
| N.º | E. Optimización | Estructuras 3D |
|----------|-----------------|---|
| [kJ/mol] | | |
| 22 | 28,3886 |  |
| 23 | 27,1439 |  |

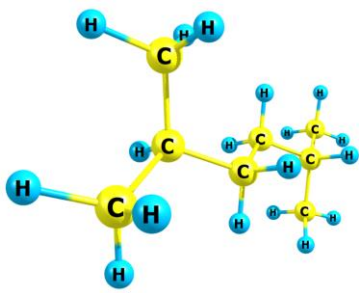
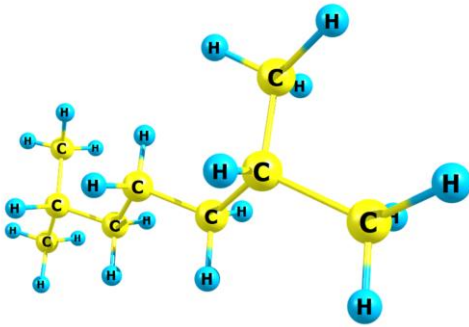
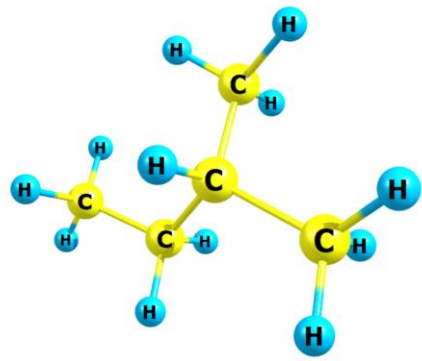
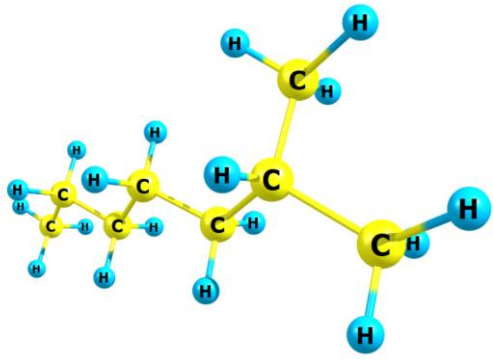
Nota. Tomado del programa Chemcraft

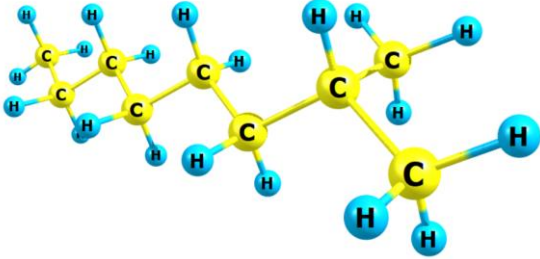
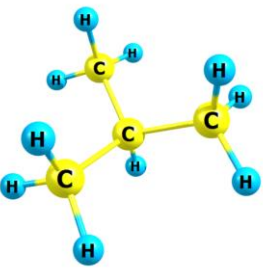
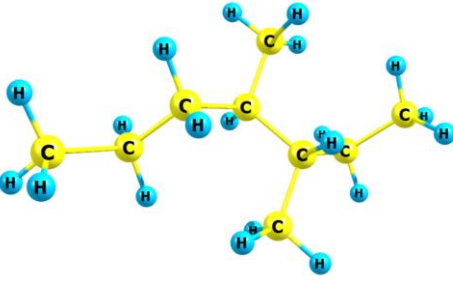
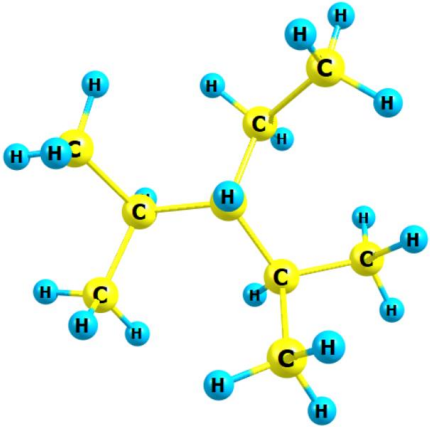
Tabla 72

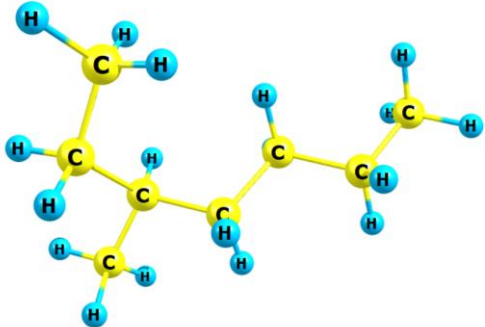
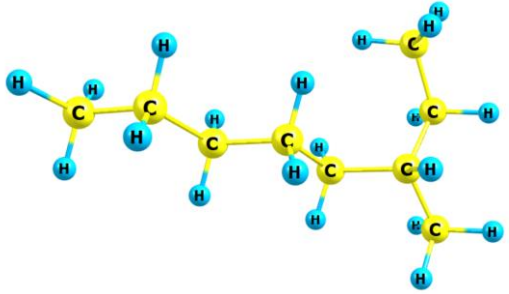
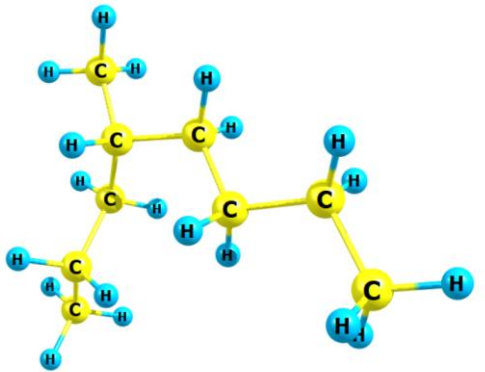
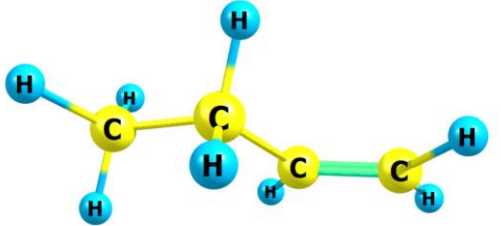
Energías de optimización y estructuras 3D para los componentes de salida del proceso de polimerización

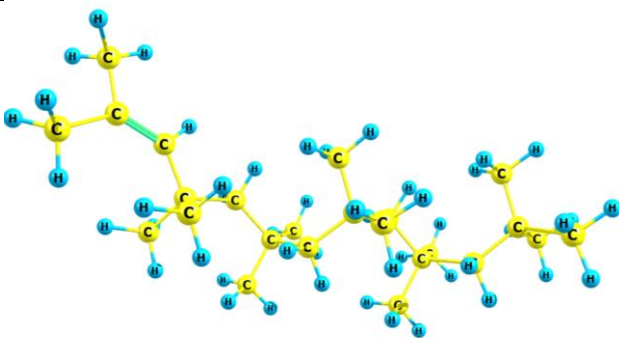
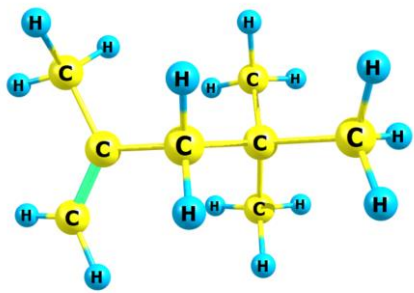
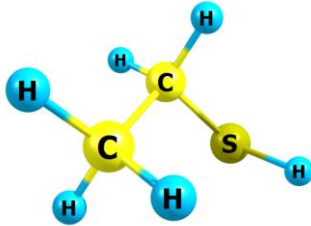

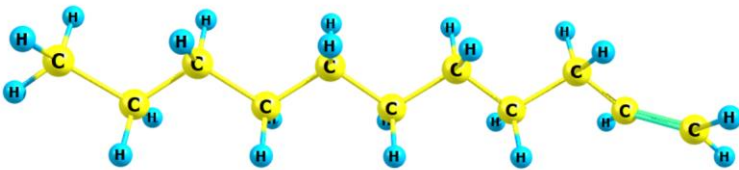
| N.º | Energías de Optimización [kJ/mol] | Estructuras 3D |
|-----|-----------------------------------|--|
| 1 | 64,4599 |  |
| 2 | 35,5953 |  |
| 3 | 85,0849 |  |

| N.º | E. | Estructuras 3D |
|---------------------|---------|--|
| Optimización | | |
| [kJ/mol] | | |
| 4 | 42,841 |  |
| 5 | 49,9414 |  |
| 6 | 51,2007 |  |
| 7 | 36,8479 |  |

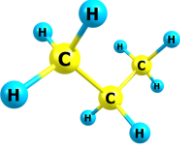
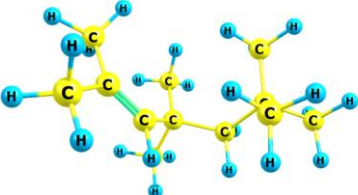
| N.º | E. | Estructuras 3D |
|--------------|-----------|--|
| Optimización | | |
| [kJ/mol] | | |
| 8 | 23,4995 |  |
| 9 | 21,8194 |  |
| 10 | 1,38367 |  |
| 11 | -0,987215 |  |

| N.º | E. | Estructuras 3D |
|---------------------|----------|--|
| Optimización | | |
| [kJ/mol] | | |
| 12 | 10,1088 |  |
| 13 | -1,99924 |  |
| 14 | 59,3026 |  |
| 15 | 102,407 |  |

| N.º | E. | Estructuras 3D |
|--------------|---------|--|
| Optimización | | |
| [kJ/mol] | | |
| 16 | 13,9709 |  |
| 17 | 13,0648 |  |
| 18 | 13,3462 |  |
| 19 | 32,6231 |  |

| N.º | E. | Estructuras 3D |
|--------------|----------|--|
| Optimización | | |
| [kJ/mol] | | |
| 20 | 519,946 |  |
| 21 | 95,4461 |  |
| 22 | -3,91094 |  |
| 25 | 17,6392 |  |
| 26 | 16,773 |  |

| N.º | E. | Estructuras 3D |
|--------------|---------|----------------|
| Optimización | | |
| [kJ/mol] | | |
| 27 | 15,9068 | |
| 28 | 15,0405 | |
| 29 | 14,1743 | |
| 30 | 13,3077 | |
| 31 | 31,9192 | |
| 32 | 34,3322 | |

| N.º | E. | Estructuras 3D |
|-----|---------------------|--|
| | Optimización | |
| | [kJ/mol] | |
| 33 | -20,504 |  |
| 34 | 189,91 |  |

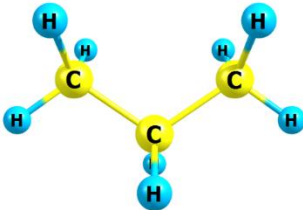
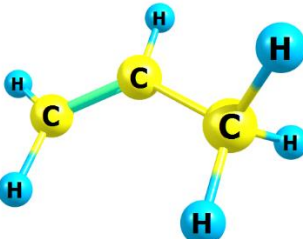
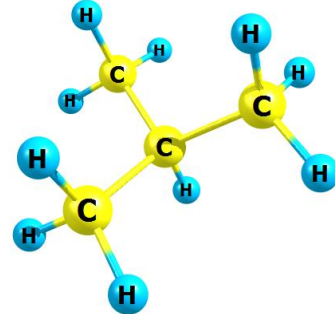
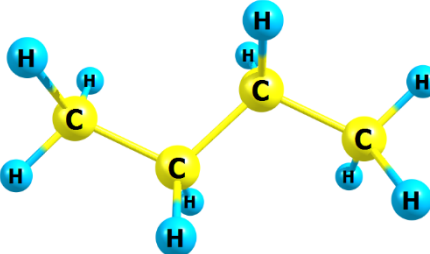
Nota. Tomado del programa Chemcraft

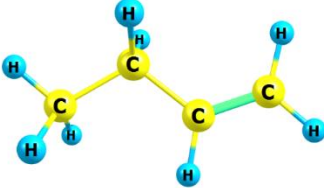
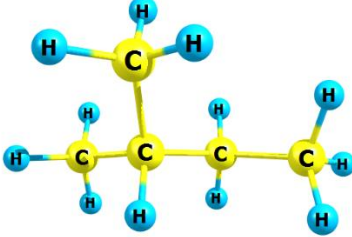
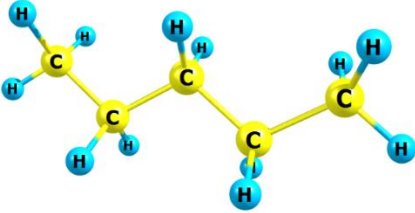
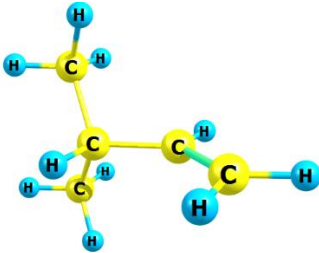
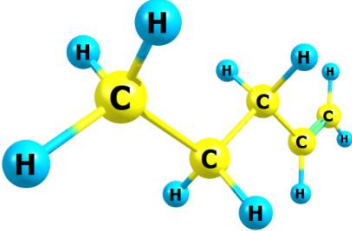
Proceso de alquilación

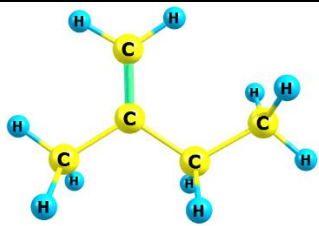
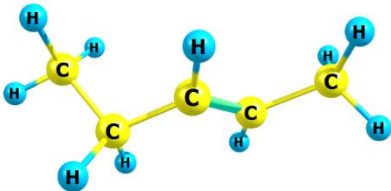
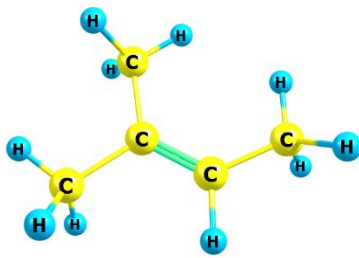
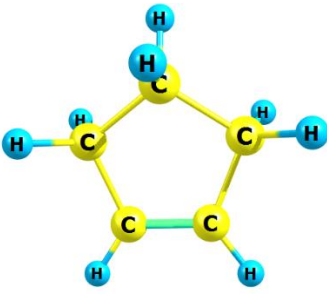
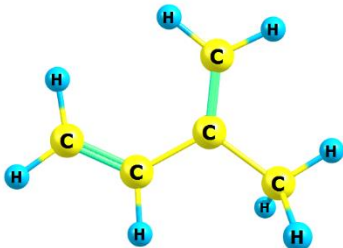
La energía de optimización y la estructura 3D de los compuestos orgánicos de entrada del proceso de alquilación es calculado con el programa de visualización Chemcraft, donde la tabla a continuación muestra el número de molécula que se obtiene por una búsqueda bibliográfica y se reporta en el apartado 4.1.1.2. los nombres de dichas moléculas.

Tabla 73

Energías de optimización y estructuras 3D para los componentes de entrada del proceso de alquilación

| N.- | Energía de optimización [kJ/mol] | Estructura 3D |
|-----|-------------------------------------|--|
| 1 | -20.504 |  |
| 2 | 27.1439 |  |
| 3 | -1.99924 |  |
| 4 | -21.2521 |  |

| N.º | Energía de optimización [kJ/mol] | Estructuras 3D |
|-----|----------------------------------|--|
| 5 | 32.6231 |  |
| 6 | 1.38367 |  |
| 7 | -22.0718 |  |
| 8 | 37.597 |  |
| 9 | 31.9192 |  |

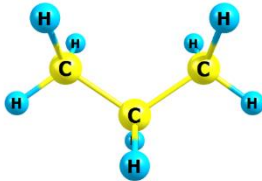
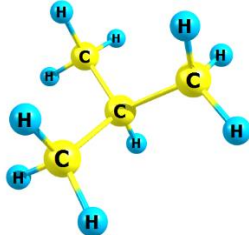
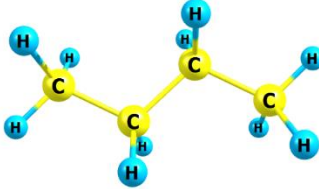
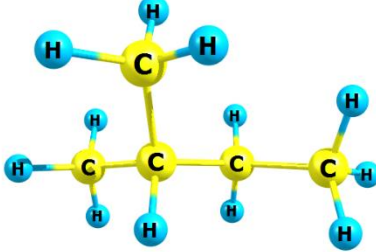
| N.º | Energía de optimización [kJ/mol] | Estructuras 3D |
|-----|----------------------------------|--|
| 10 | 29.936 |  |
| 11 | 15.7544 |  |
| 12 | 41.7601 |  |
| 13 | 29.5395 |  |
| 14 | 45.0953 |  |

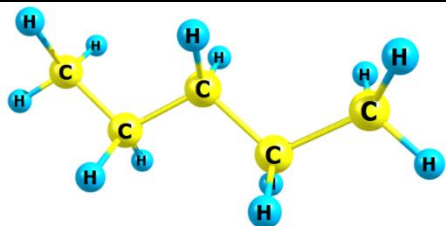
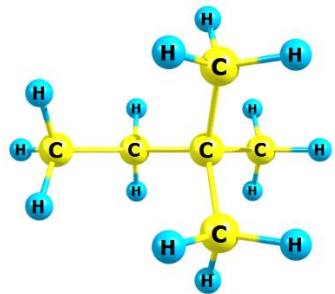
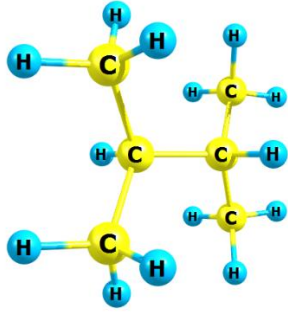
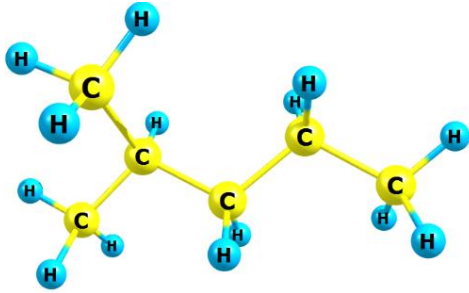
| N.º | Energía de optimización [kJ/mol] | Estructuras 3D |
|-----|----------------------------------|----------------|
| 15 | 15.2177 | |
| 16 | 44.1907 | |
| 17 | 31.4064 | |
| 18 | 20.0432 | |
| 19 | 28.3886 | |
| 20 | 30.1994 | |

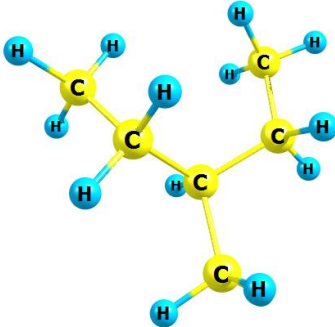
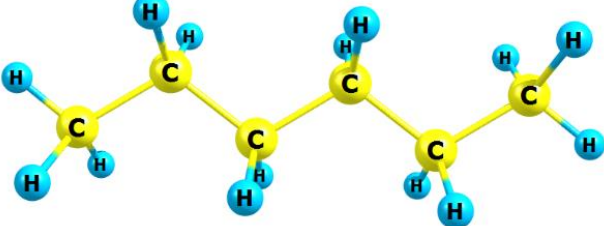
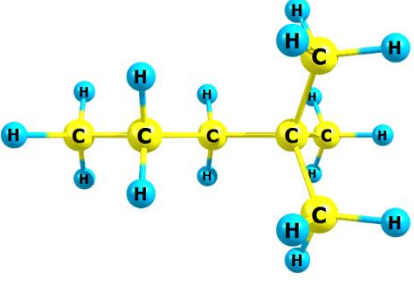
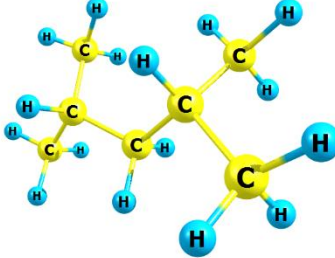
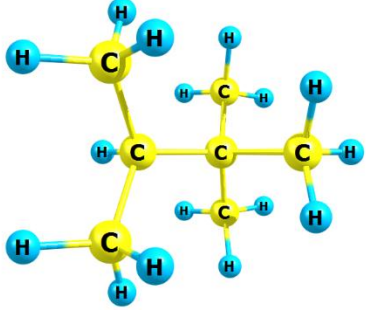
Nota. Tomado del programa Chemcraft

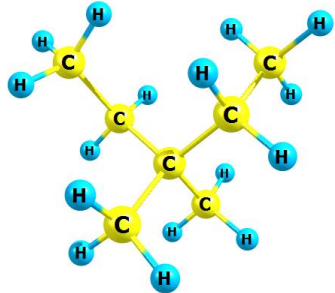
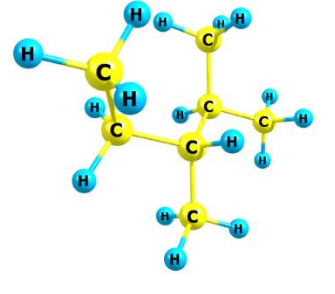
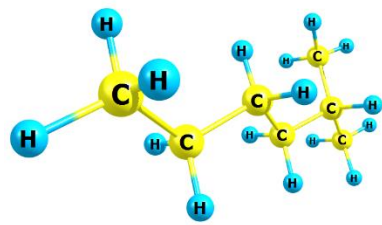
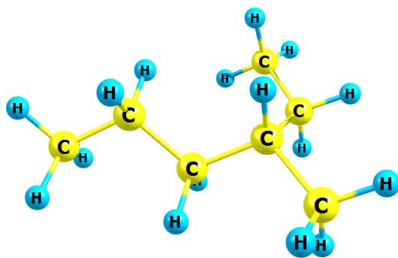
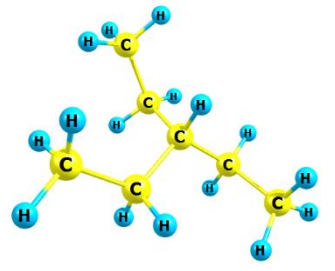
La energía de optimización y la estructura 3D de los compuestos orgánicos de salida del proceso de alquilación es calculado con el programa de visualización Chemcraft, donde la tabla a continuación muestra el número de molécula que se obtiene por una búsqueda bibliográfica y se reporta en el apartado 4.2.1.2. los nombres de dichas moléculas.

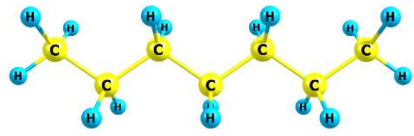
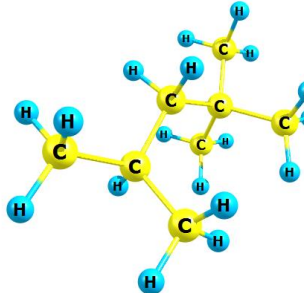
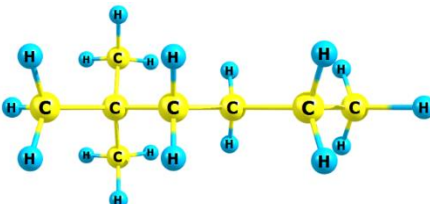
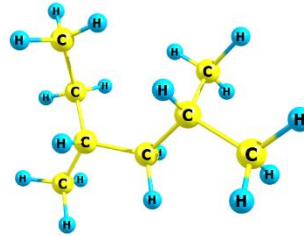
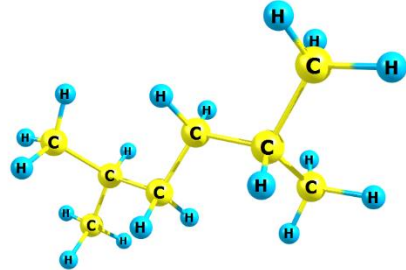
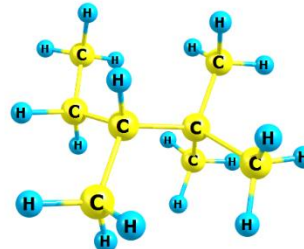
Tabla 74 Energías de optimización y estructuras 3D para los componentes de salida del proceso de alquilación

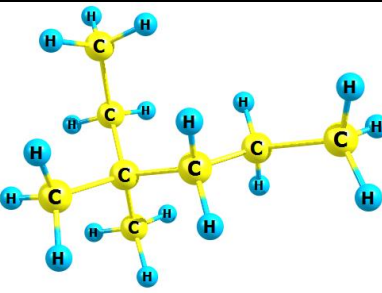
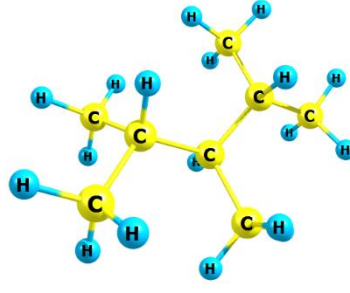
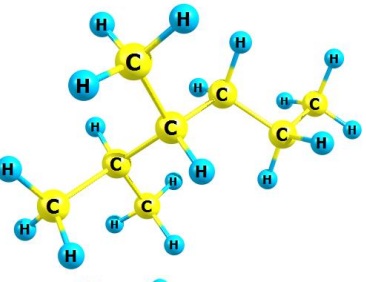
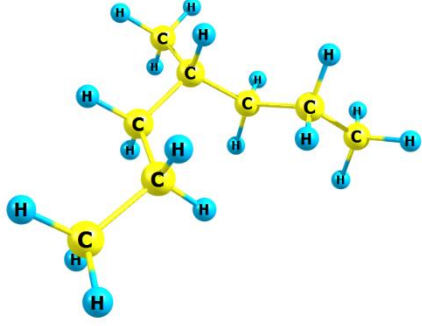
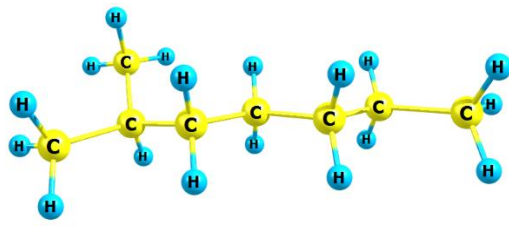
| N.- | Energía de optimización [kJ/mol] | Estructura 3D |
|-----|----------------------------------|--|
| 1 | -20.504 |  |
| 2 | -1.99924 |  |
| 3 | -21.2521 |  |
| 4 | 1.38367 |  |

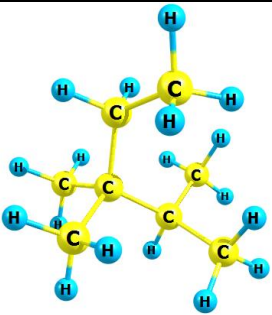
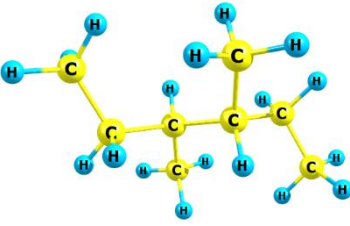
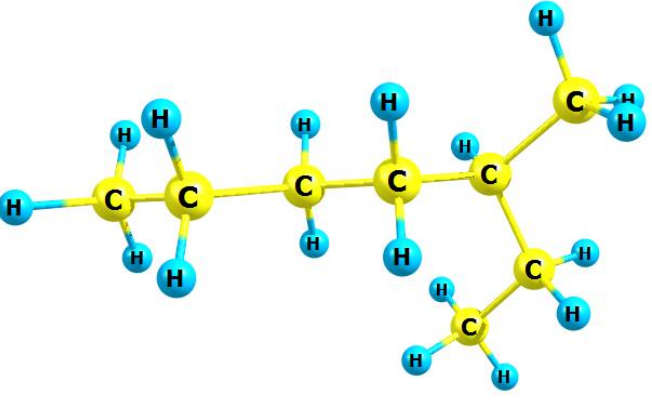
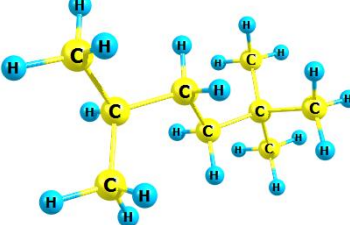
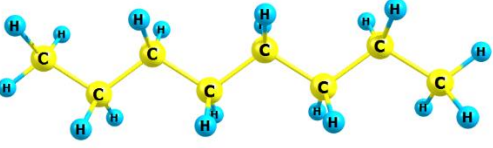
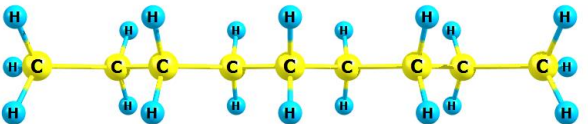
| | Energía de | Estructura 3D |
|-----|--------------|--|
| N.- | optimización | |
| | [kJ/mol] | |
| 5 | -22.0718 |  |
| 6 | 42.8532 |  |
| 7 | 27.7672 |  |
| 8 | 0.773895 |  |

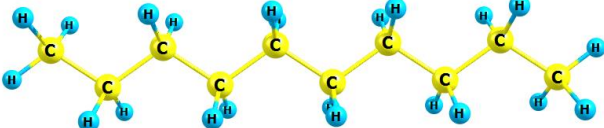
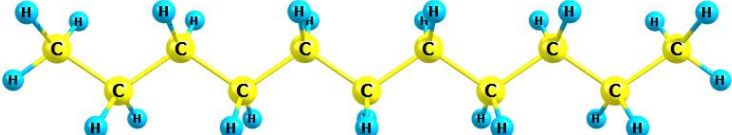

| N.- | Energía de optimización [kJ/mol] | Estructura 3D |
|-----|----------------------------------|--|
| 9 | 15.8191 |  |
| 10 | -22.9204 |  |
| 11 | 42.3244 |  |
| 12 | 34.9972 |  |
| 13 | 72.8256 |  |

| N.- | Energía de optimización [kJ/mol] | Estructura 3D |
|-----|--|--|
| 14 | 49.3172 |  |
| 15 | 43.8369 |  |
| 16 | -0.107135 |  |
| 17 | 14.9513 |  |
| 18 | 21.5196 |  |

| N.- | Energía de optimización [kJ/mol] | Estructura 3D |
|-----|----------------------------------|--|
| 19 | -23.7798 |  |
| 20 | 78.2345 |  |
| 21 | 41.409 |  |
| 22 | 51.2007 |  |
| 23 | 23.4995 |  |
| 24 | 93.4867 |  |

| | Energía de | Estructura 3D |
|-----|--------------|--|
| N.- | optimización | |
| | [kJ/mol] | |
| 25 | 48.55 |  |
| 26 | 79.1602 |  |
| 27 | 42.841 |  |
| 28 | 14.3714 |  |
| 29 | -0.987214 |  |

| N.- | Energía de optimización [kJ/mol] | Estructura 3D |
|-----|----------------------------------|--|
| 30 | 91.0836 |  |
| 31 | 60.3501 |  |
| 32 | 13.9709 |  |
| 33 | 64.4599 |  |
| 34 | -24.6429 |  |
| 35 | -25.5078 |  |

| N.- | Energía de optimización [kJ/mol] | Estructura 3D |
|-----|----------------------------------|--|
| 36 | -26.3734 |  |
| 37 | -27.2393 |  |
| 38 | -28.1055 |  |

Nota. Tomado del programa Chemcraft

Capítulo V

Conclusiones y recomendaciones

5.1. Conclusiones

Se estableció una lista de moléculas orgánicas mediante la realización de una búsqueda bibliográfica de diferentes fuentes científicas, es así que, se pudo obtener y reportar tablas de las moléculas estudiadas, las cuales fueron categorizadas por entradas al proceso, salidas del proceso, composición en peso y composición el volumen.

En relación a lo expuesto sobre el proceso de alquilación, la olefina más usada son los butilenos como el isobutileno y el 2-buteno como reactivos para la reacción, estos componentes orgánicos posteriormente reaccionaran con el isobutano para obtener el componente principal para la gasolina llamado alquilato (Mohamed et al., 2010).

Se aprendió a utilizar un nuevo programa computacional como el software ChemDraw para dibujar molecular químicas y de esta forma se logró obtener las propiedades básicas para cada una de las moléculas químicas de origen orgánico, y se evidencio que, en la corriente de entrada del proceso de polimerización, los hidrocarburos insaturados en específico, las moléculas de propileno; n-butileno y 2-metilbut-2-eno presentan igual resultados de análisis elemental en cuanto a su porcentaje de carbono e hidrógeno.

Frente a la evidencia recaudada, se encontró que una de las corrientes de salida del proceso de alquilación es el alquilato, los componentes orgánicos que se encuentran mayoritariamente en dicha corriente son los isooctanos, por lo que se realizó un análisis de propiedades fisicoquímicas de los isómeros del isooctano y se encontró que el 2,2,4-trimetilpentano además de 2,2,3-trimetilpentano y finalmente 2,3,3-trimetilpentano presentan las mismas propiedades fisicoquímicas en referencia a los demás.

En la energía de optimización encontrada para los componentes de salida del proceso de polimerización, se encontró que, mientras más grande es la cadena de carbonos del hidrocarburo, más tiempo le toma en llegar al diferencial de energía al valor de cero, como se presentó en la molécula 20 perteneciente al cotrímeros de isobuteno; determinando que hay una relación directamente proporcional entre la cantidad de átomos y enlaces, con el volumen estérico que ocupa ésta en el espacio, y a su vez el tiempo para la generación de coordenadas optimizadas.

Una vez culminado el análisis de las energías de optimización para el proceso de polimerización, se concluye, que mediante la experimentación la molécula 19 de la corriente de entrada, correspondiente al octano posee un mínimo valor, y para la molécula 20, correspondiente al oxígeno posee el mayor valor. Lo que nos da a entender que, bajo el principio básico termodinámico de la energía libre de Gibbs, todo aquel valor que sea negativo es exotérmico/exoenergético, mientras que los que son positivos serán endotérmicos/endoenergéticos.

Se calculó las estructuras 3D de cada una las moléculas orgánicas, esto se logró mediante la utilización previa de las moléculas orgánicas en 2D las mismas que a través de los programas utilizados en esta investigación, se pudo determinar que mediante uno de ellos; el programa Avogadro, permite generar las coordenadas faltantes del eje Z, además de optimizar mediante la geometría molecular las coordenadas en los ejes X, Y, Z.

Mediante el uso de la plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME, se calculó las propiedades fisicoquímicas, lipofilia y solubilidad en agua para cada molécula de entrada y salida del proceso de polimerización y alquilación, donde se mostró, guardo y se pudo compartir resultados por cada molécula individual para diferentes secciones con su respectiva imagen de radar de biodisponibilidad.

Al terminar el análisis de las energías de optimización para el proceso de alquilación, se concluye, que mediante la experimentación la molécula 7 de la

corriente de entrada, correspondiente al n pentano posee un mínimo valor, y para la molécula 14, correspondiente al 2-metil-1,3-pentadieno posee el mayor valor. Lo que nos da a entender que, bajo el principio básico termodinámico de la energía libre de Gibbs, todo aquel valor que sea negativo es exotérmico/exoenergético, mientras que los que son positivos serán endotérmicos/endoenergéticos.

La energía de optimización encontrada para los componentes de salida del proceso de alquilación, se encontró que, mientras más ramificaciones tenga la molécula del hidrocarburo, más tiempo le toma en llegar al valor de cero el diferencial de energía, como se evidencia en las moléculas 13, 20, 24, 26, 30, 33 presentes en la tabla 73, determinando que hay una relación directamente proporcional entre la cantidad de átomos y enlaces, con el volumen estérico que ocupa ésta en el espacio, y a su vez el tiempo para la generación de coordenadas optimizadas.

5.2. Recomendaciones

Se recomienda realizar la búsqueda bibliográfica en el idioma inglés, ya que la mayoría de los escritos relevantes en el área científica se encuentran en dicho idioma.

La elaboración de las moléculas 2D presentes en las corrientes de entrada y salida de los procesos de polimerización y alquilación se realiza por medio del programa ChemDraw, lo que por defecto dibuja moléculas ya sea pequeñas o muy grandes, y proporciona información en el idioma inglés, se sugiere que, con la opción: configuración de documento y *Text Tool* editar dicha información de manera que, pueda obtener resultados en un formato con mejor visualización.

Para el procesamiento de las moléculas en cada uno de los programas, es necesario que se creen archivos individuales para cada especie química, en especial para el programa ChemDraw, ya que, para hacer correcciones en las estructuras generadas, se crea por defecto un hipervínculo de acceso directo a la interfase de

dicho programa, lo que puede repercutir en alterar el análisis de alguna otra estructura de forma errónea.

Para el uso de la plataforma SwissADME, se recomienda tomar en cuenta la diferencia horaria entre Suiza y la local, debido a que, si muchos usuarios están a la vez en la plataforma los resultados que se generan tomarán más tiempo de lo normal.

Cuando se esté usando el software Avogadro se sugiere que, en el ordenador únicamente se esté trabajando con este programa, porque, la saturación de la memoria RAM influye en los resultados que se obtengan en cuanto a la generación de la energía de optimización de las moléculas.

En base a la obtención de la energía de optimización de las moléculas orgánicas presentes en las corrientes de entrada y salida de los procesos de polimerización y alquilación, se necesita utilizar un campo de fuerza, por lo que se recomienda utilizar el campo de fuerza MMFF94, debido a que, éste asigna ha sido diseñado para análisis de hidrocarburos, el mismo asigna un código a cada átomo en la molécula según al tipo que pertenece.

La creación de las moléculas en 3D de los componentes orgánicos presentes en las corrientes de entrada y salida de los procesos de polimerización y alquilación se generan con ayuda del programa Chemcraft, por lo que se aconseja, abrir en formato MDL SDfile (*.mol) y escoger la opción *Display, Basic 2* y mostrar el tipo de átomo que se encuentra presente en los compuestos orgánicos para una mejor visualización.

Las coordenadas 3D optimizadas y no optimizadas de los compuestos orgánicos presentes en las corrientes de entrada y salida de los procesos de polimerización y alquilación se obtiene del programa Avogadro, por lo tanto, se recomienda optimizar la molécula antes de generar los valores de energía de optimización.

Bibliografía

- Al-Qahtani, K. Y., & Elkamel, A. (2015). Planning and Integration of Refinery and Petrochemical Operations. In *Acta Universitatis Agriculturae et Silviculturae Mendelianae Brunensis* (Vol. 53, Issue 9).
- Ancheyta, J. (2011). *Modeling and Simulation of Catalytic Reactors for Petroleum Refining*. John Wiley & Sons.
- Avery, P., Ludowieg, H., Autschbach, J., & Zurek, E. (2018). Extended Hückel Calculations on Solids Using the Avogadro Molecular Editor and Visualizer. *Journal of Chemical Education*, 95(2), 331–337. Recuperado el 10 de marzo de 2021 de: <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.7b00698>
- Biografieonline. (2020). *Erwin Schrödinger*. Physicists of Ireland. Recuperado el 5 de febrero de 2021 de: <https://biografieonline.it/biografia-erwin-schrodinger>
- Brito, L., & Cevallos, E. (2013). ESTUDIO DE FACTIBILIDAD PARA EL APROVECHAMIENTO DEL GAS PRODUCIDO EN EL CAMPO SACHA PARA LA SUSTITUCIÓN DEL DIESEL EN LA GENERACIÓN DE ENERGÍA ELÉCTRICA. *Persepsi Masyarakat Terhadap Perawatan Ortodontik Yang Dilakukan Oleh Pihak Non Profesional*, 53(9), 1689–1699.
- Cevallos, J. (2015). Estimación del consumo de combustibles en el transporte terrestre en Ecuador. *Ideas*, 151, 10–17. Recuperado el 15 de marzo de 2021 de: https://ideas.repec.org/p/cpe/cpewps/2015_05.html
- Cho Timken, H.-K., Chang, B.-K. ., & Hommeltoft, S. I. (2018). *ALKYLATION OF REFINERY PENTENES WITH ISOBUTANE* (Patent No. U.S. Patent No 10,059,639 B2).
- Clemente, G. (2011). Estudo comparativo de procedimentos experimentais e computacionais para cálculo da lipofilia molecular. *Saúde & Tecnologia*, 29–34.

- Cuevas, G., & Cortés, F. (2003). *Introducción a la química computacional* (p. 172). Fce.
- Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2017). SwissADME: A free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific Reports*, 7(October 2016), 42717. Recuperado el 15 de febrero de 2021 de: <https://doi.org/10.1038/srep42717>
- De Jong, W. A., Walker, A. M., & Hanwell, M. D. (2013). From data to analysis: Linking NWChem and Avogadro with the syntax and semantics of Chemical Markup Language. *Journal of Cheminformatics*, 5(5), 1–12. Recuperado el 03 de marzo de 2021 de: <https://doi.org/10.1186/1758-2946-5-25>
- Delaney, J. S. (2004). *ESOL : Estimating Aqueous Solubility Directly from Molecular Structure*. 1000–1005. Recuperado el 19 de marzo de 2021 de: <https://doi.org/10.1021/ci034243x>
- Gallant, R. W., & Yaws, C. L. (1992). *Physical Properties of Hydrocarbons* (2nd ed, Vol. 49, Issue 1).
- Garbrecht, L., Lionetti, T. A., & Barton, W. G. (1987). The refinery of the future. *World Petroleum Congress Proceedings, 1987-April*, 209–215. Recuperado el 25 de marzo de 2021 de: <https://doi.org/10.1016/j.focat.2020.02.050>
- 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 23 de febrero de 2021 de: [https://doi.org/10.1016/0923-0467\(95\)80014-x](https://doi.org/10.1016/0923-0467(95)80014-x)
- Gordon, M. S. (2005). *EcuRed*. Physics Today. Recuperado el 01 de febrero de 2021 de: <https://doi.org/10.1063/1.1955494>
- Granda Iñiguez, S. P. (2017). Vista de Subsidios a los hidrocarburos en Ecuador.

Publicando, 4, 8. Recuperado el 15 de enero de 2021 de:

<https://revistapublicando.org/revista/index.php/crv/article/view/549>

Gutiérrez Pérez, R. M. (2013). *Análisis de las propiedades de transporte de carga en dendrímeros utilizando DFT*. 862566.

Haro de Rosario, A., Saraite, L., Caba Pérez, C., & Rodríguez, M. del M. G. (2016).

Las Empresas Latinoamericanas del Sector del Petróleo y Gas Ante la

Información Sobre Sostenibilidad. *TEC Empresarial*, 10(1), 39–49. Recuperado el

21 de marzo de 2021 de:

http://revistas.tec.ac.cr/index.php/tec_empresarial/article/view/2533/2322

Hsu, C. S., Robinson, P. R., Hsu, C. S., & Robinson, P. R. (2019). Petroleum

Processing and Refineries. *Petroleum Science and Technology*, 129–157.

Recuperado el 13 de marzo de 2021 de: [https://doi.org/10.1007/978-3-030-16275-](https://doi.org/10.1007/978-3-030-16275-7_8)

[7_8](https://doi.org/10.1007/978-3-030-16275-7_8)

Jiang, P., Wu, X., Zhu, L., Jin, F., Liu, J., Xia, T., Wang, T., & Li, Q. (2016). Production

of jet fuel range paraffins by low temperature polymerization of gaseous light

olefins using ionic liquid. *Energy Conversion and Management*, 120, 338–345.

Recuperado el 27 de marzo de 2021 de:

<https://doi.org/10.1016/j.enconman.2016.05.010>

Kan, S. Y., Chen, B., Wu, X. F., Chen, Z. M., & Chen, G. Q. (2019). Natural gas

overview for world economy: From primary supply to final demand via global

supply chains. *Energy Policy*, 124, 215–225. Recuperado el 7 de febrero de 2021

de: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.enpol.2018.10.002>

L.Kaes, G. (2000). *Refinery process modeling*.

Leffler, W. L. (2008). *Petroleum refining in nontechnical language* (Cuarta). PennWell Corporation.

- Liu, Z., Meng, X., Zhang, R., Xu, C., Dong, H., & Hu, Y. (2014). Reaction Performance of Isobutane Alkylation Catalyzed by a Composite Ionic Liquid at a Short Contact Time. *AIChE Journal*, 60(6), 2244–2253. Recuperado el 25 de enero de 2021 de: <https://doi.org/10.1002/aic.14394>
- Maray Mateos, I. (2020). *Diseño de ligandos inhibidores del proteasoma mediante técnicas computacionales*. Recuperado el 27 de enero de 2021 de: <http://hdl.handle.net/10609/120506>
- McMurry, J. (2012). *Organic Chemistry*. Cengage Learning.
- Meyers, R. (2003). *HANDBOOK OF PETROLEUM REFINING PROCESSES* (Tercera). McGraw-Hill.
- Mó, O., & Yáñez, M. (2011). La química computacional en la nueva frontera. *Arbor*, 187(EXTRA), 143–155. Recuperado el 02 de marzo de 2021 de: <https://doi.org/10.3989/arbor.2011.extran1119>
- Mohamed, A., Fahim, T. A., & Al-Sahhaf, A. E. (2010). *Fundamentals of Petroleum Refining* (p. 484). Elsevier.
- Moore, J., Stanitski, C., & Jurs, P. (2011). *Chemistry The Molecular Science* (Cuarta). Brooks/Cole Cengage Learning.
- Morrison, R. T., & Boyd, R. N. (1998). *Química orgánica* (Quinta).
- Munday, John C, J Mcgee, R. (1948). The United States Patent Office. In *Law and Contemporary Problems*. Recuperado el 16 de febrero de 2021 de: <https://doi.org/10.2307/1190003>
- P. Leprince. (1995). *Petroleum refining Conversion processing*. Technip.
- Pasban, A., Mostafavi, S. M., Malekzadeh, H., & Nazari, B. M. (2017). Quantitative Determination of LPG Hydrocarbons by Modified Packed Column Adsorbent of Gas Chromatography Via Full Factorial Design. *Journal of Nanoanalysis*, 4(1), 31–

40. Recuperado el 10 de diciembre de 2020 de:

<https://doi.org/10.22034/JNA.2017.01.004>

Rabanal Sanchez, J. (2019). *Estudio in silico de la reactividad y propiedades fisicoquímicas de aductos de epóxido de eugenol y quinona metilada con glutatión, aminoácidos y poliaminas de Candida albicans* [Universidad Nacional Mayor de San Marcos]. Recuperado el 11 de marzo de 2021 de:

<https://doi.org/10.15446/rev.fac.cienc.v8n1.74214>

Raslavičius, L., Keršys, A., Mockus, S., Keršiene, N., & Starevičius, M. (2014).

Liquefied petroleum gas (LPG) as a medium-term option in the transition to sustainable fuels and transport. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 32, 513–525. Recuperado el 15 de marzo de 2021 de:

<https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.01.052>

Salha, D., Andaç, M., & Denizli, A. (2020). Molecular docking of metal ion immobilized ligands to proteins in affinity chromatography. *Journal of Molecular Recognition*, January, 1–11. Recuperado el 09 de enero de 2021 de:

<https://doi.org/10.1002/jmr.2875>

Sánchez, L., & Reyes, O. (2016). *La demanda de gasolinas, gas licuado de petróleo y electricidad en el Ecuador Elementos para una reforma fiscal ambiental*.

Recuperado el 30 de enero de 2021 de:

http://repositorio.cepal.org/bitstream/handle/11362/40629/S1600529_es.pdf?sequence=1&isAllowed=y

Speight, J. G. (2013). The Refinery of the Future. In *Journal of Chemical Information and Modeling* (Second, Vol. 53, Issue 9). Joe Hayton.

Speight, J. G. (2020). Catalytic cracking. In *The Refinery of the Future* (pp. 197–226).

Elsevier. Recuperado el 17 de marzo de 2021 de: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-816994-0.00006-3>

- Stahly, E. E. (2019). Polimerización de la refinería insaturada y preparación de combustibles motorizados mejorados. *Kemampuan Koneksi Matematis (Tinjauan Terhadap Pendekatan Pembelajaran Savi)*, 53(9), 1689–1699.
- Treese, S. A., Pujadó, P. R., & Jones, D. S. J. (2015). Handbook of petroleum processing. In *Handbook of Petroleum Processing* (2nd ed., Vol. 1). Springer Reference. Recuperado el 04 de marzo de 2021 de: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-14529-7>
- Wade, L. (2012). *Química Orgánica* (7th ed., Vol. 2). Pearson.
- Wauquier, J.-P. (1994). *El refino del petróleo*. 0(0), 39–363. Recuperado el 15 de marzo de 2021 de:
[https://books.google.es/books?hl=es&lr&id=dwkgt8u2MmIC&oi=fnd&pg=PR13&dq=productos+de+la+destilación+al+vacío+de+crudo&ots=eDg-ZDMiy2&sig=YQ9giiWlz98daEgAPQ-KDiZ2rRo&pli=1#v=onepage&q=productos de la destilación al vacío de crudo&f=false](https://books.google.es/books?hl=es&lr&id=dwkgt8u2MmIC&oi=fnd&pg=PR13&dq=productos+de+la+destilación+al+vacío+de+crudo&ots=eDg-ZDMiy2&sig=YQ9giiWlz98daEgAPQ-KDiZ2rRo&pli=1#v=onepage&q=productos+de+la+destilación+al+vacío+de+crudo&f=false)
- Wauquier, J. (2004). *El Refino del Petróleo Petróleo crudo, productos petrolíferos, esquemas de fabricación*. Díaz de Santos.

Anexos