

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE PETROQUÍMICA

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

Espín Almachi, Franklin Wladimir y Trávez Osorio, Sandra Elizabeth

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.



INTRODUCCIÓN

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

METODOLOGÍA

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

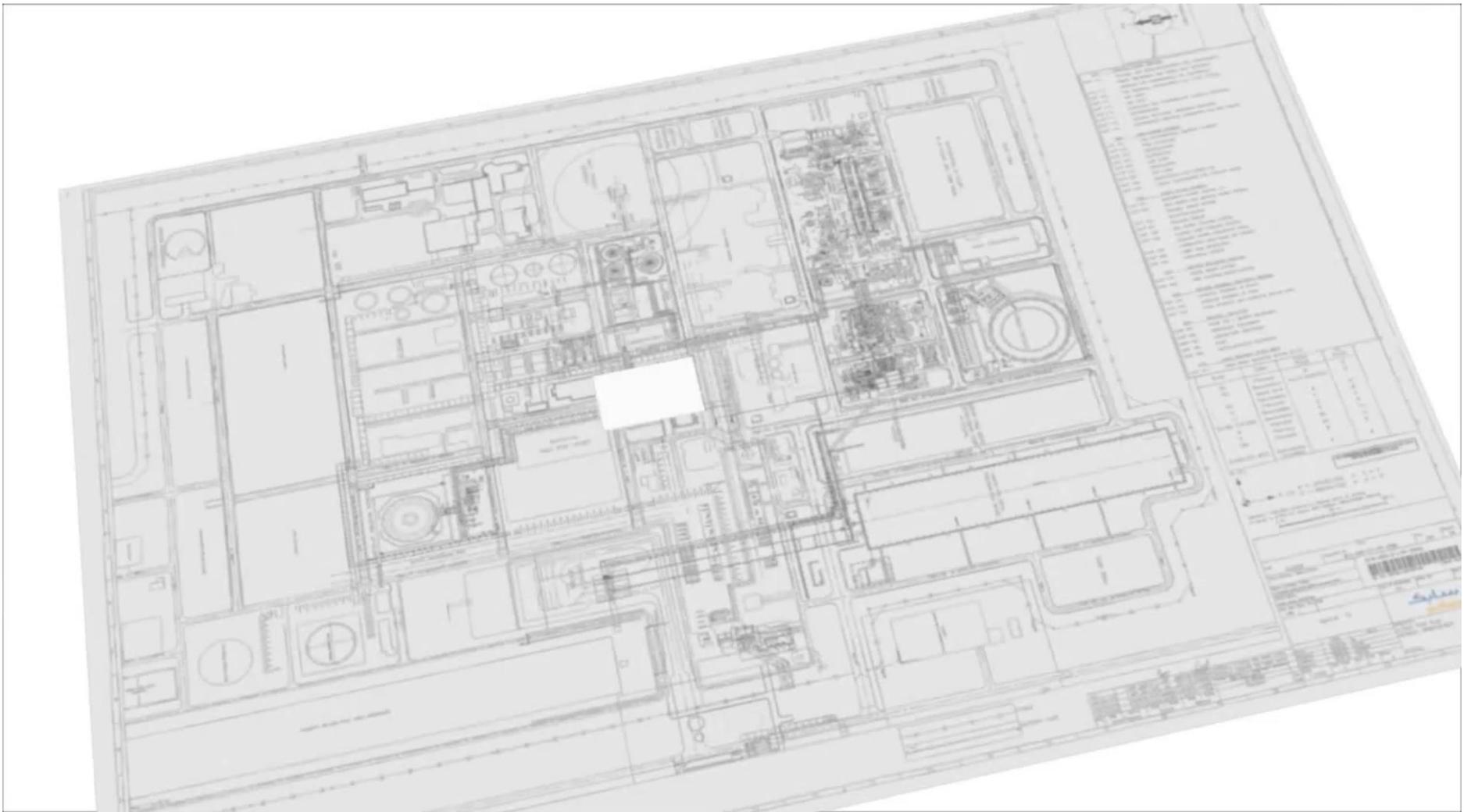
INTRODUCCIÓN

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

METODOLOGÍA

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES



INTRODUCCIÓN

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

METODOLOGÍA

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

INTRODUCCIÓN

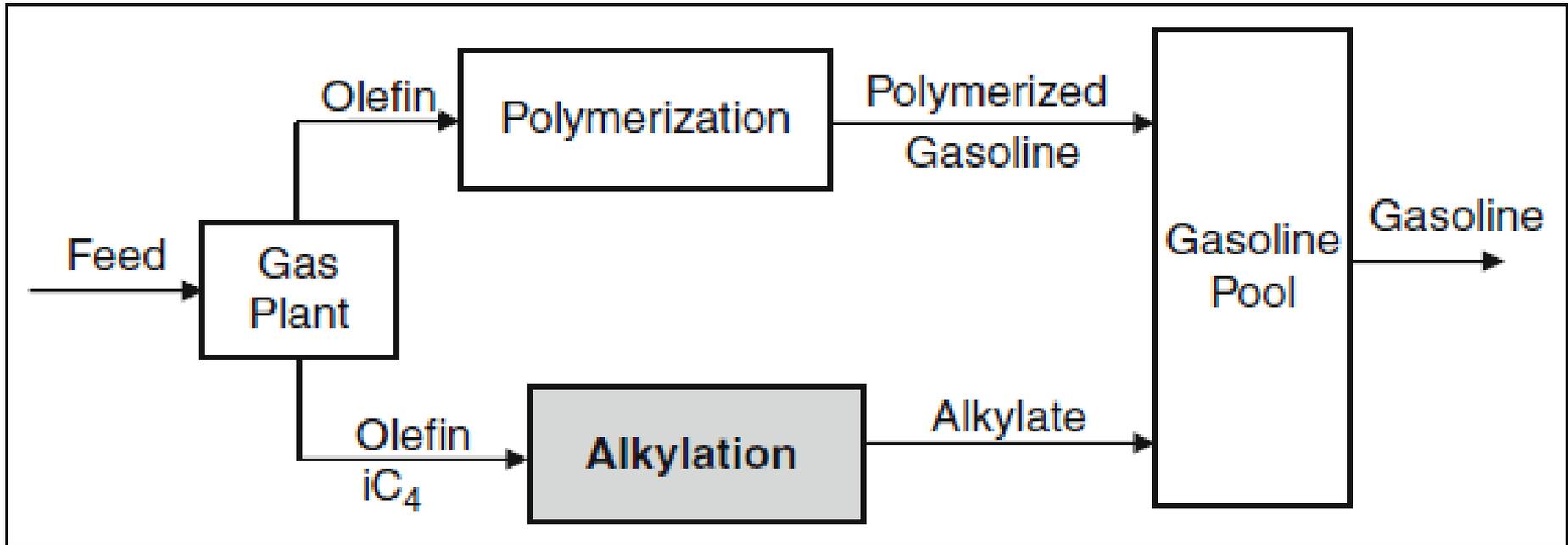
FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

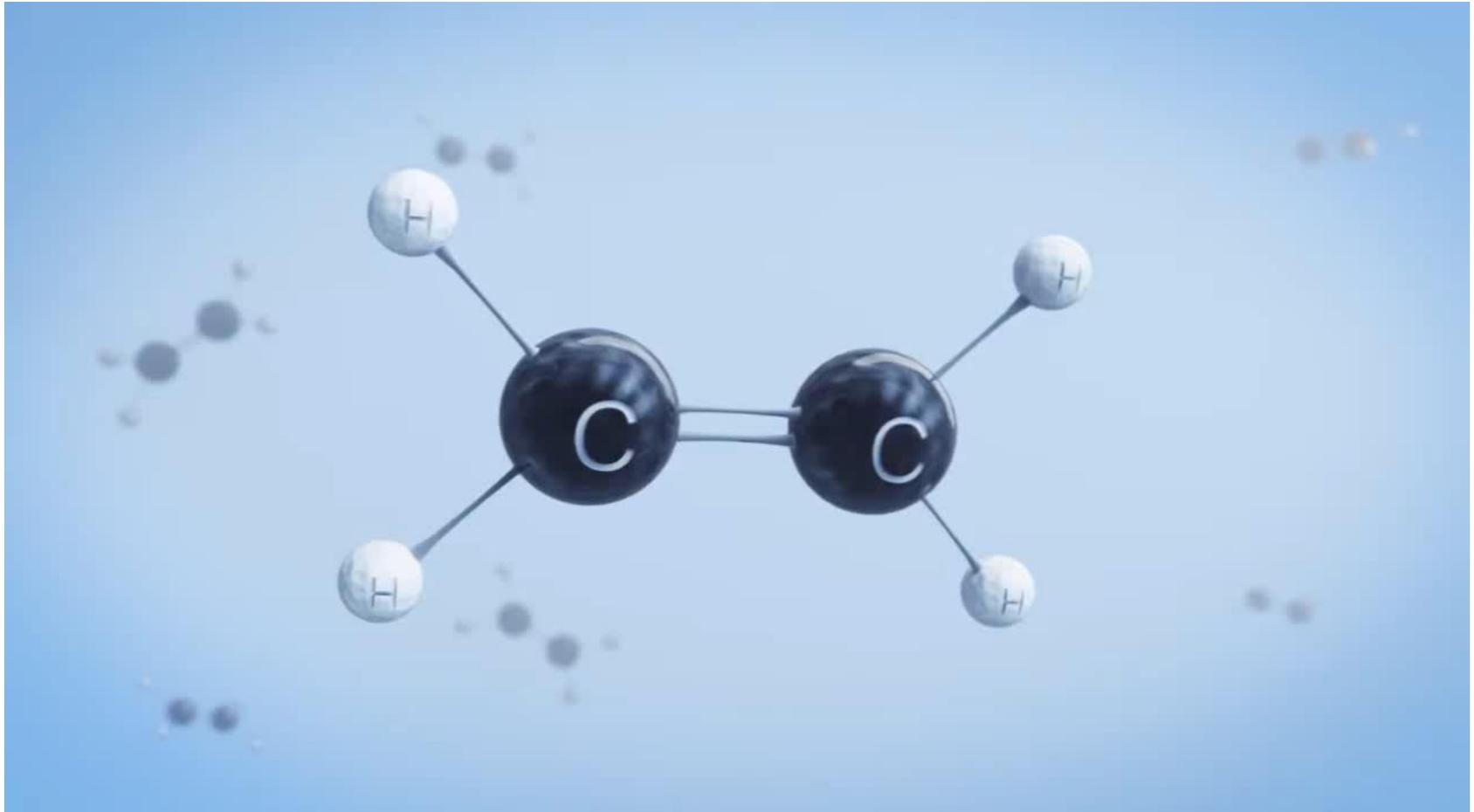
METODOLOGÍA

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA





ALIMENTACIÓN

Compuesto

hidrógeno

nitrógeno

etileno

propano

butano

CATALIZADORES

Catalizadores ácidos

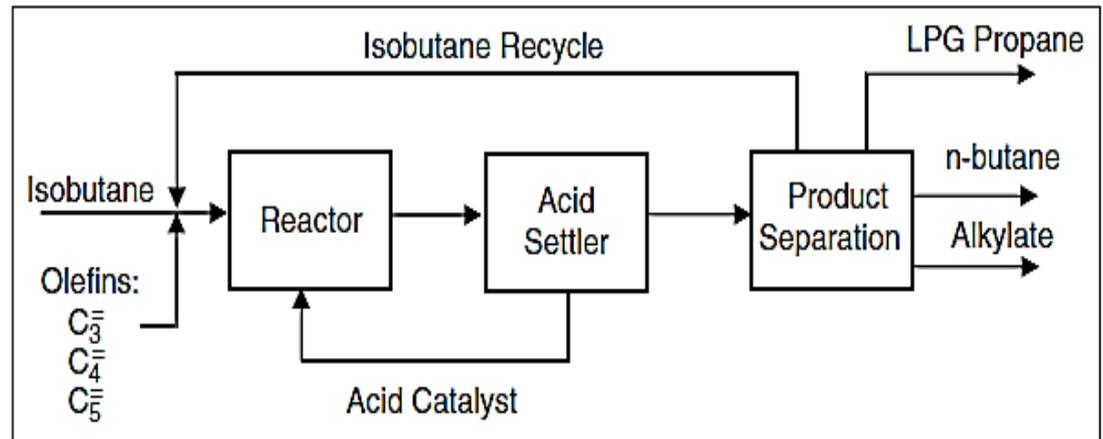
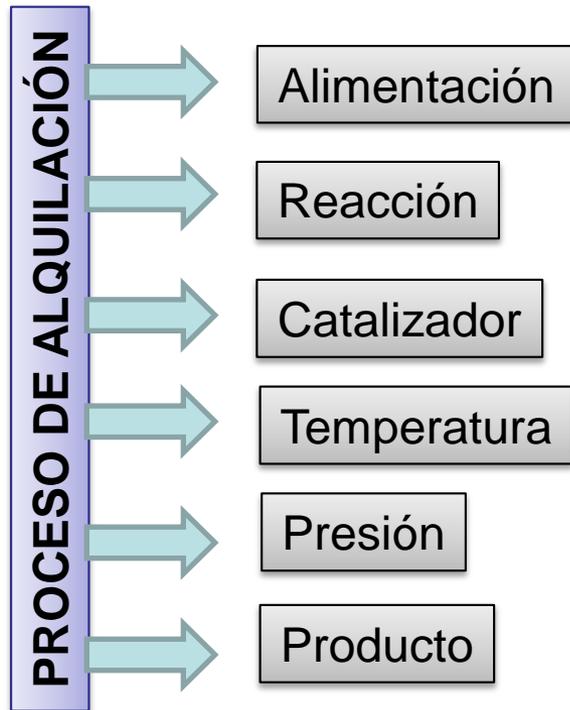
PRODUCTOS

Compuesto

Nafta de polimerización

GLP

n-butano



VARIABLES DEL PROCESO

	H ₂ SO ₄	HF
Temperatura	25 a 55 °F	60 a 125 °F
Fuerza del ácido	93 a 95 wt%	86 a 90 wt%
Concentración del isobutano	Relación molar de isobutano/olefina 5:1	
Tiempo de reacción	5 a 40 min	5 a 25 min

Diseña moléculas asistidas por computador

Impulsada por las empresas farmacéuticas

Describe la estructura de la molécula

Predicen las propiedades químicas y físicas

Propiedades
fisicoquímicas

Masa moleculares

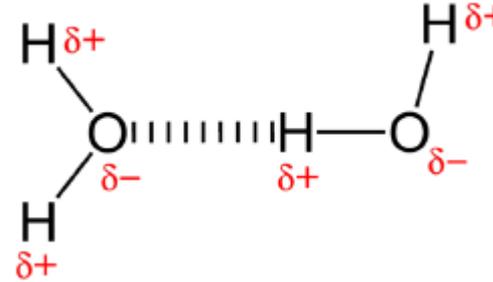
Fórmulas químicas

Lipofilia

Solubilidad

INTERACCIONES INTERMOLECULARES

Puente de hidrógeno



Fuerzas de van der waals

Ion-dipolo

London

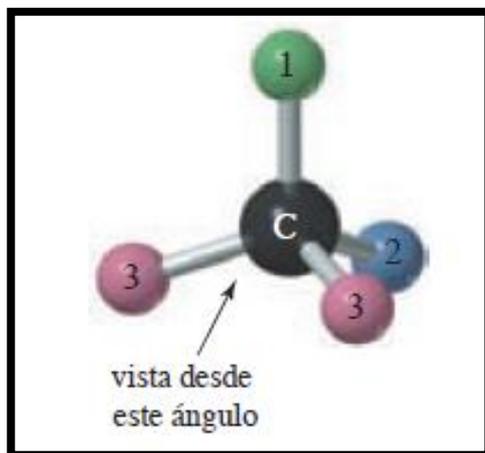
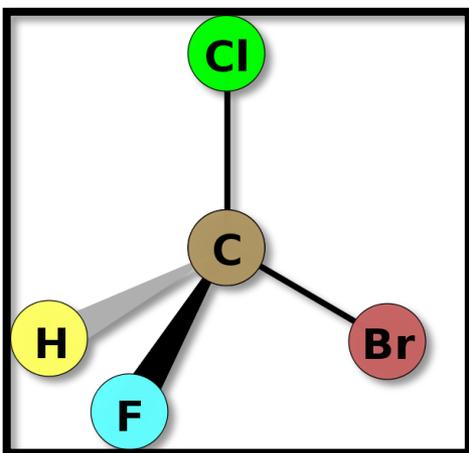
Dipolo-dipolo

CONFIGURACIONES Y CONFORMACIONES

Configuraciones

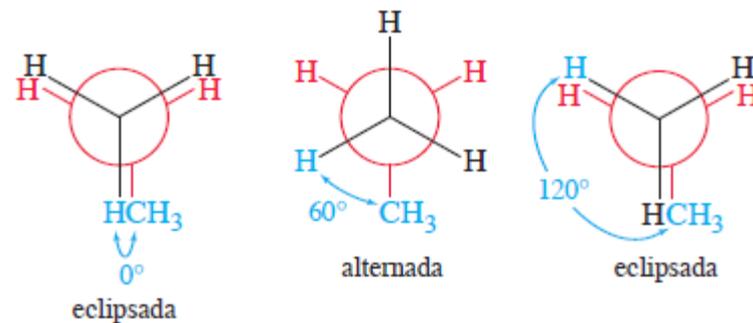
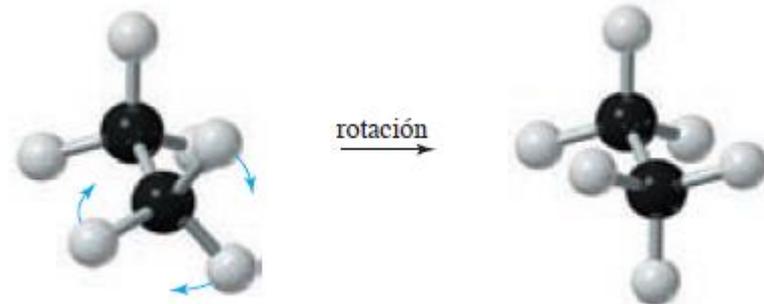
Quiral

Aquiral



Conformaciones

Proyecciones de Newman



1

- Determinar computacionalmente las características fisicoquímicas de todos los posibles componentes químicos de los flujos de entrada y salida en una refinería de petróleo de los procesos de “Polimerización y Alquilación” mediante cálculos teóricos computacionales

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1

- Establecer una lista de potenciales moléculas químicas de origen orgánico presentes en el flujo de entrada y salida en los procesos de polimerización y alquilación.

2

- 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.

3

- Calcular las propiedades fisicoquímicas básicas de cada molécula de origen orgánico, mediante la plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME.

4

- Calcular las estructuras 3D de cada una las moléculas orgánicas, mediante el software Avogadro, para la obtención de las configuraciones y conformaciones finales.

5

- Reportar mediante tablas los datos obtenidos para cada molécula química procesada en los pasos anteriores.

INTRODUCCIÓN

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

METODOLOGÍA

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

INTRODUCCIÓN

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

METODOLOGÍA

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES



Flujo de entrada en los procesos de polimerización y alquilación

- Bibliotecas online
- Repositorios de tesis



Flujo de salida en los procesos de polimerización y alquilación

- Revistas de artículos científicos
- Reportes cromatográficos

energy&fuels

Cite This: Energy Fuels 2019, 33, 3828–3843

pubs.acs.org/EF

Catalytic Upgrading of Light Naphtha to Gasoline Blending Components: A Mini Review

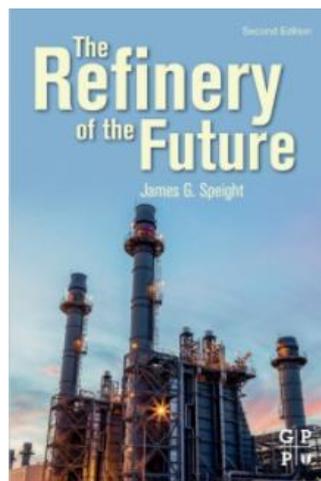
Abdullah Aitani,^{1,*} Muhammad Naseem Akhtar,¹ Sulaiman Al-Khattaf,¹ Yaming Jin,^{2,†} Omer Koseglo,¹ and Michael T. Klein^{3,§}

¹Center for Refining & Petrochemicals, King Fahd University of Petroleum & Minerals, Dhahran 31261, Saudi Arabia

²R&D Center, Saudi Aramco, Dhahran 31311, Saudi Arabia

³Department of Chemical and Biomolecular Engineering, University of Delaware, Newark, Delaware 19716, United States

ABSTRACT: The upgrading of light naphtha (C_5 – C_6 stream) to gasoline blending components has been the subject of intensive research at both academic and industrial laboratories. The combination of high volatility and low-octane number has made this stream surplus at many refineries worldwide. This review presents the latest developments in selected catalytic upgrading processes and a brief discussion on the reaction mechanism and reactor models. A majority of the review falls within the development of catalysts for *n*-hexane isomerization to hydrocarbon isomers with a high octane number. There are three types of isomerization catalysts that include Pt/ Al_2O_3 -Cl, Pt/ SO_2 -ZrO₂, and Pt/zeolite. Efforts are ongoing to improve the catalyst performance for higher selectivity and catalyst lifetime. Very little work has been published on the conversion of *n*-pentane mainly as a result of its low activity and the limited options available for its transformation to gasoline blending components. Other approaches discussed in the review include dimerization and oligomerization of C_5 – C_6 alkenes and methylative homologation. The review covers literature published during the period of 2000–2018.



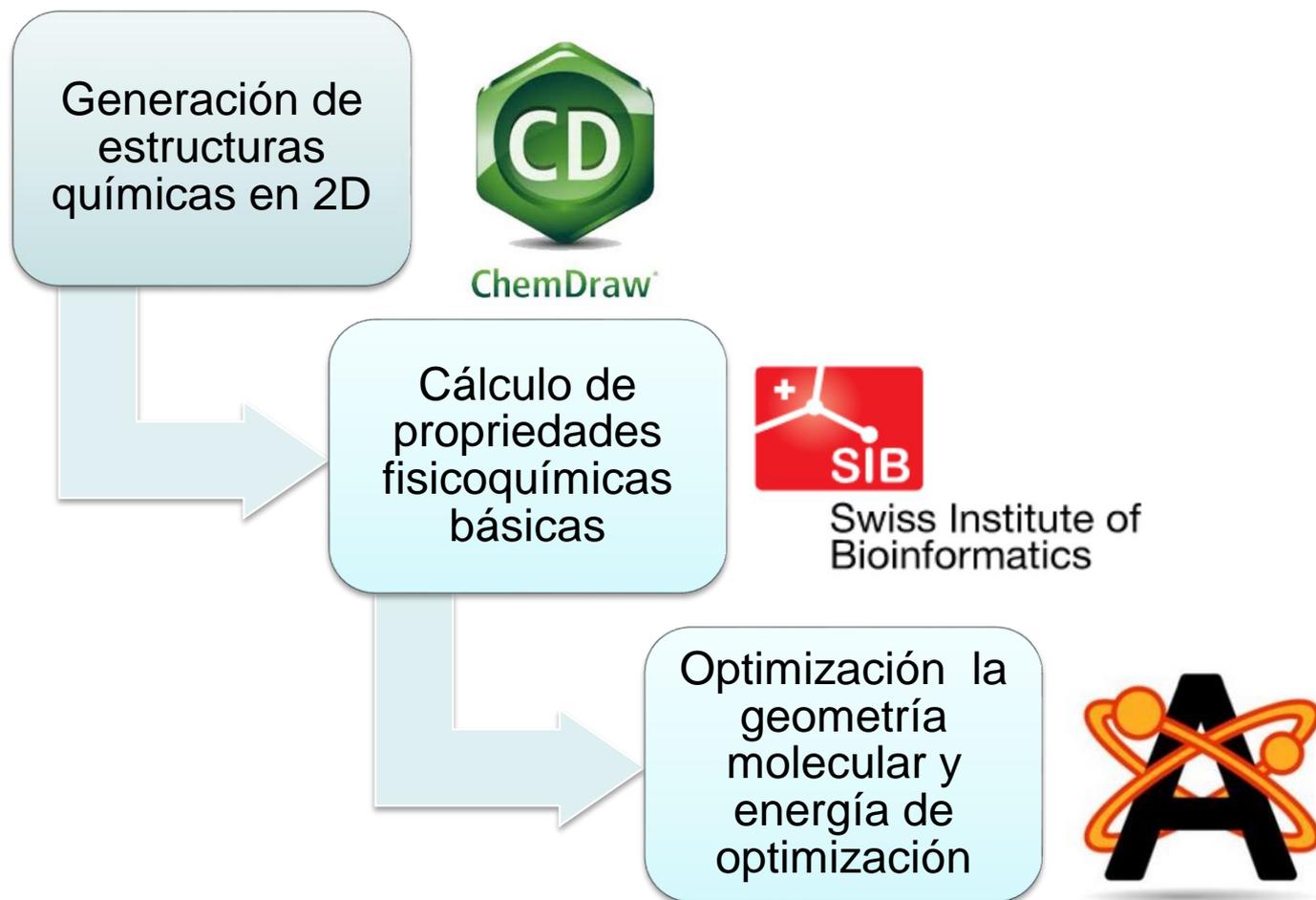
Steven A. Treese
Peter R. Pujadó
David S. J. Jones
Editors

Handbook of Petroleum Processing

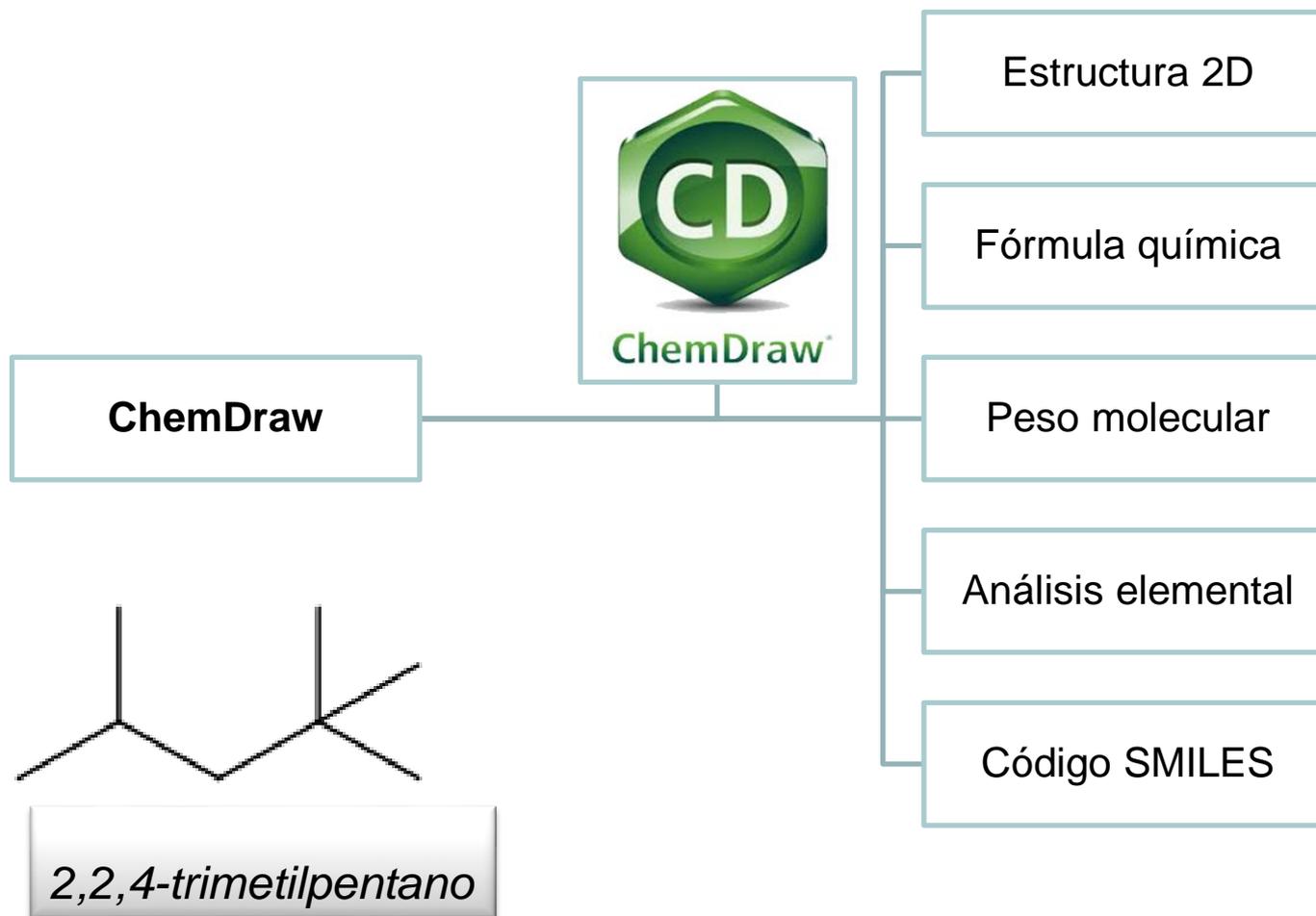
Second Edition



PROCESAMIENTO DE ESTRUCTURAS QUÍMICAS 2D Y PROPIEDADES QUÍMICAS BÁSICAS



CÁLCULO DE LAS ESTRUCTURAS 3D DE CADA UNA LAS MOLÉCULAS ORGÁNICAS



CÁLCULO DE LAS ESTRUCTURAS 3D DE CADA UNA LAS MOLÉCULAS ORGÁNICAS

El archivo MOL, un formato de archivo de estructura química ampliamente utilizado, contiene:

Bloque de átomos:

chemdraw-Dec-2016.cdx
ChemDraw12011615112D

9 9 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000

-1.4289	-0.0000	0.0000	C
-1.4289	-0.8250	0.0000	C
-0.7145	-1.2375	0.0000	C
0.0000	-0.8250	0.0000	C
0.0000	-0.0000	0.0000	C
-0.7145	0.4125	0.0000	C
0.7145	0.4125	0.0000	C
1.4289	0.0000	0.0000	O
0.7145	1.2375	0.0000	O

C 1 2 3
5 7 1 0

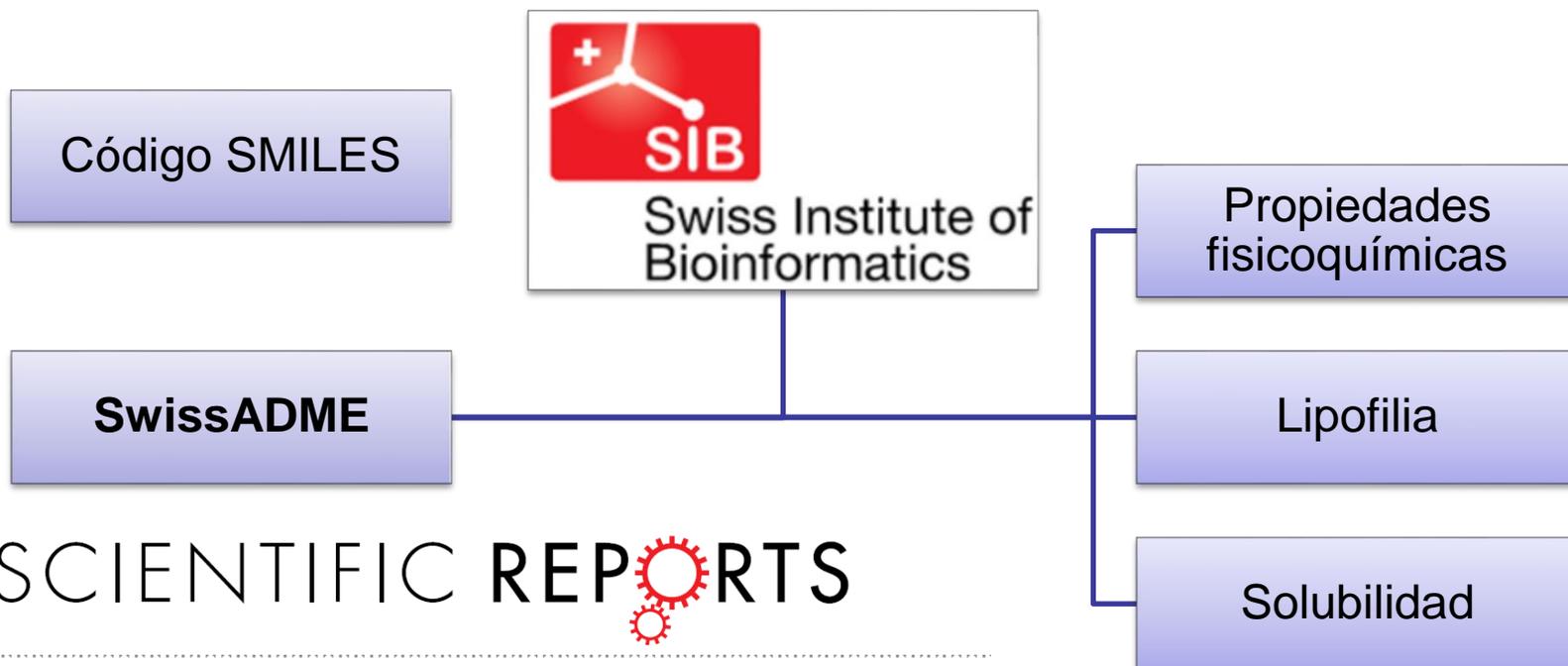
7 8
7 9 X, Y, Z coordinates

Atom symbol

M END

2,2,4-trimetilpentano

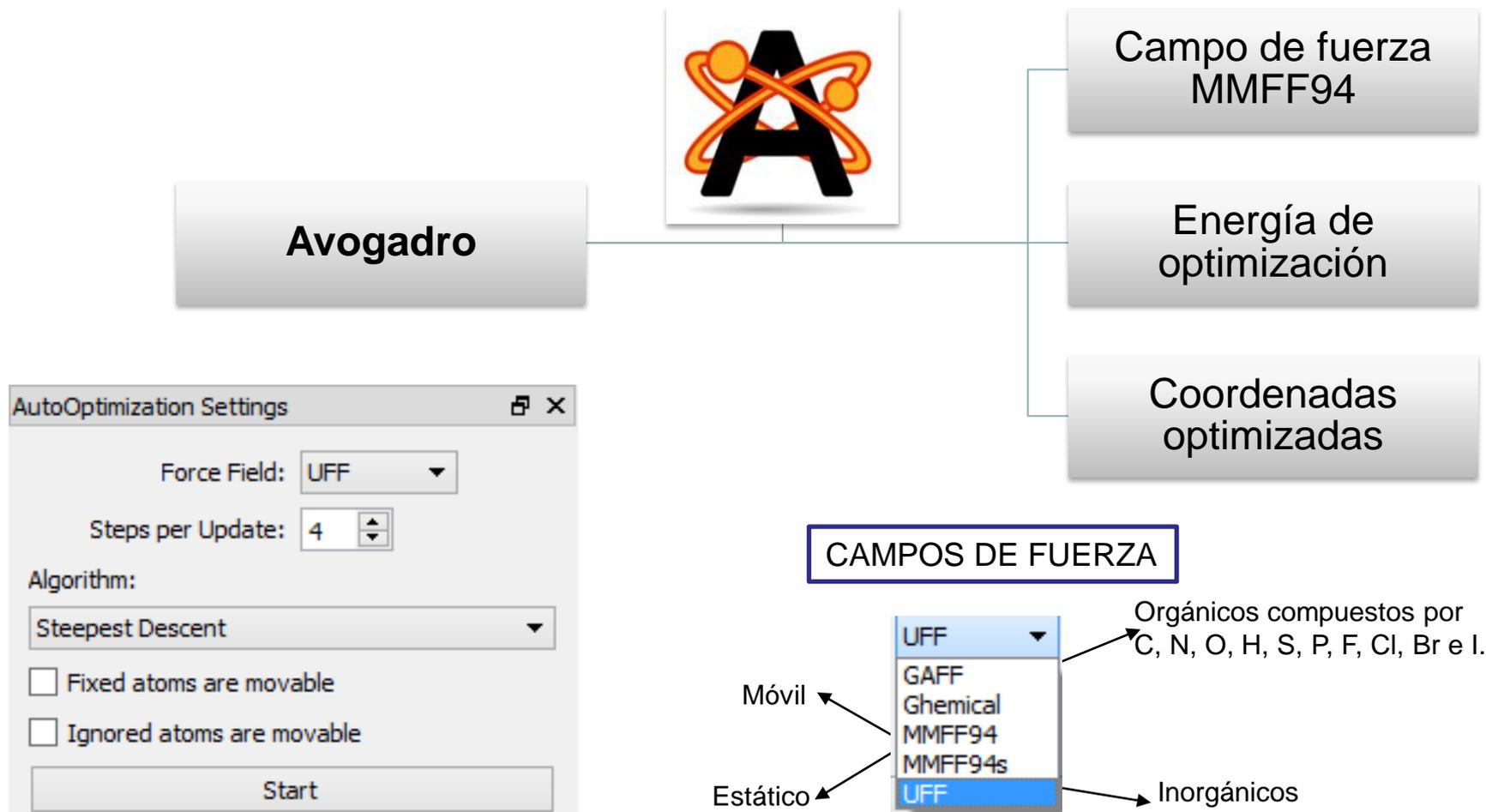


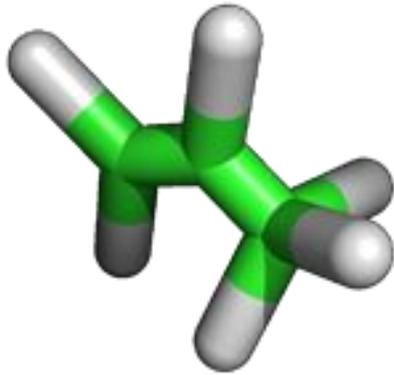


SCIENTIFIC REPORTS

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

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

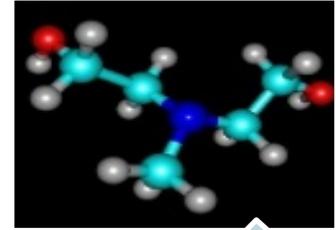




PyMOL



Chemcraft



Elaboración
estructuras 3D de los
componentes
orgánicos que se
encuentran presentes
en los flujos de
entrada y salida de los
proceso de
polimerización y
Alquilación.

INTRODUCCIÓN

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

METODOLOGÍA

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

INTRODUCCIÓN

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

METODOLOGÍA

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

RESULTADOS Y DISCUSIÓN



Gas dulce argentino

propano	1-penteno
propileno	2-metil-1-buteno
isobutano	2-penteno
<i>n</i> -butano	2-metil-2-buteno
buteno	2-metil-1-buteno
isopentano	2-penteno
<i>n</i> -pentano	ciclopenteno
3-metil-1-buteno	2-metil-1,3-butadieno
ciclopentadieno	trans-1,3-pentadieno
isobuteno	ciclopenteno
1,3-butadieno	cis-2-buteno
trans-2-buteno	

Gas dulce ecuatoriano

etano
 metano
 monóxido de carbono
 nitrógeno
propano

Polimerización



Alquilación



ESPE
 UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
 INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Componente en la corrientes de salida del 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
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

Número de molécula	Compuesto químico
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

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Componentes de la corrientes de salida del proceso de alquilación

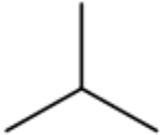
Número de molécula	Componentes de salida
1	propano
2	isobutano
3	<i>n</i> -butano
4	isopentano
5	<i>n</i> -pentano
6	2,2-dimetilbutano
7	2,3-dimetilbutano
8	2-metilpentano
9	3-metilpentano
10	<i>n</i> -hexano
11	2,2-dimetilpentano
12	2,4-dimetilpentano
13	2,2,3-trimetilbutano
14	3,3-dimetilpentano
15	2,3-dimetilpentano
16	2-metilhexano
17	3-metilhexano
18	3-etilpentano

Número de molécula	Componentes de salida
19	<i>n</i> -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



Estructuras químicas 2D y propiedades básicas

isobutano



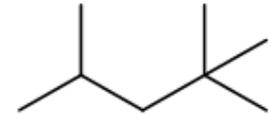
Fórmula química: C_4H_{10}
Peso molecular: 58,1240
Análisis elemental: C, 82,66; H, 17,34

1-buteno



Fórmula química: C_4H_8
Peso molecular: 56,1080
Análisis elemental: C, 85,63; H, 14,37

2,2,4-trimetilpentano



Fórmula química: C_8H_{18}
Peso molecular: 114,2320
Análisis elemental: C, 84,12; H, 15,88

GENERACIÓN AUTOMÁTICA DE NOMENCLATURA IUPAC

Nomenclatura IUPAC para los componentes de entrada del proceso de polimerización

Componentes de entrada	Nomenclatura IUPAC
agua	agua
amilenos	2-metilbut-2-eno
etano	etano

Nomenclatura IUPAC para los componentes de entrada del proceso de alquilación

Componentes de entrada	Nomenclatura IUPAC
propano	propano
propileno	prop-1-eno
isobutano	isobutano
n-butano	butano

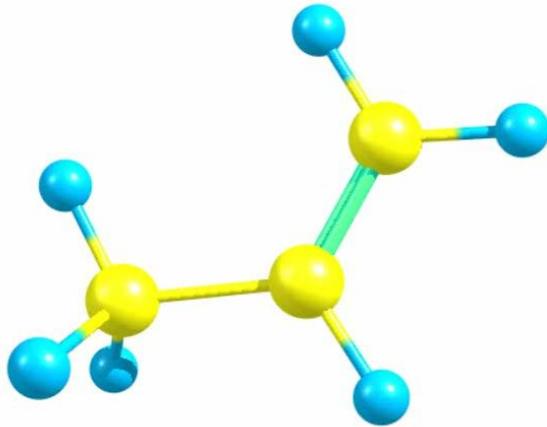
Código SMILES para los componentes de salida del proceso de polimerización

Componentes de entrada	SMILES
2,2,5-trimetilhexano	<chem>CC(C)(C)CCC(C)C</chem>
2,2-dimetilpropano	<chem>CC(C)(C)C</chem>
2,3,5-trimetilhexano	<chem>CC(C)C(C)CC(C)C</chem>
2,3-dimetilhexano	<chem>CC(C)C(C)CCC</chem>
2,4-dimetilheptano	<chem>CC(C)(C)CC(C)=C</chem>
2,4-dimetilhexano	<chem>CC(C)CC(C)CC</chem>
2,5-dimetilheptano	<chem>CC(C)CCC(C)CC</chem>
2,5-dimetilhexano	<chem>CC(C)CCC(C)C</chem>

- Procesamiento a través del código SMILES de las propiedades fisicoquímicas de los compuestos selectos de la corriente de entrada al proceso de polimerización y alquilación.

Propiedades fisicoquímicas				
Nombre de la molécula	propileno	butileno	penteno	metano
Fórmula	C_3H_6	C_4H_8	C_5H_{12}	CH_4
Masa 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

Coordenadas cartesianas de la molécula de propileno

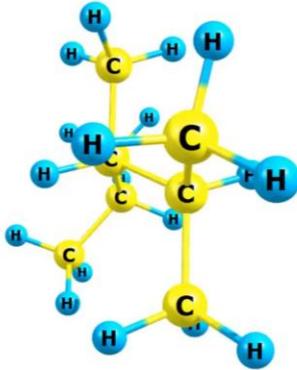
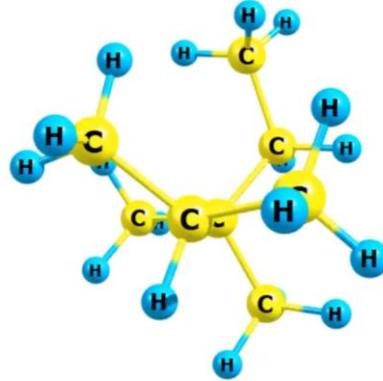


Molécula no optimizada			
Átomo	Eje x	Eje y	Eje z
C	0,97223	0,04476	-
C	2,30975	0,07200	-
C	3,09843	0,72214	-
H	0,45447	-0,44448	-
H	0,36469	0,50597	-
H	2,87694	-0,40385	-
H	2,45595	1,17646	-
H	3,73759	1,50514	-
H	3,73759	-0,01837	-
Molécula optimizada			
Átomo	Eje x	Eje y	Eje z
C	0,97900	-0,06180	-0,06250
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

Energía de optimización

2,3,3-trimetilpentano

91.0836 kJ/mol

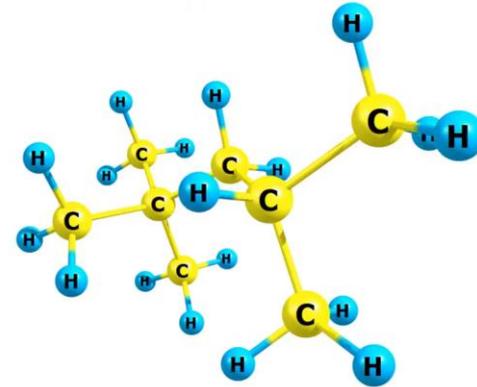


2,3,4-trimetilpentano

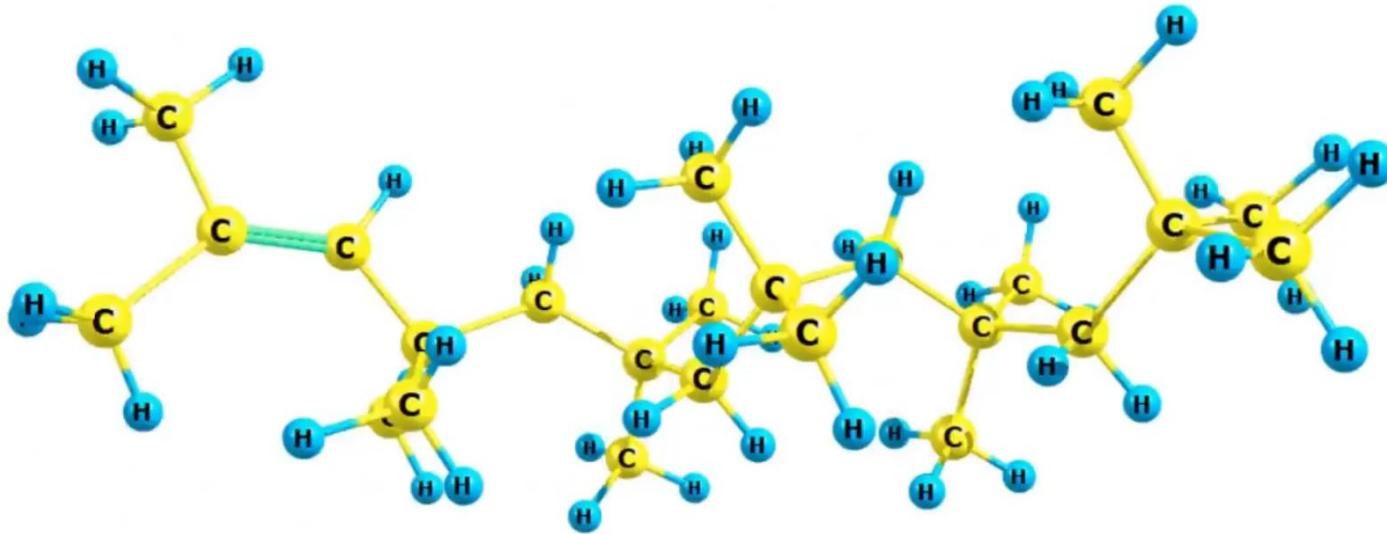
79.1602 kJ/mol

2,2,4-trimetilpentano

78.2345 kJ/mol



Estructuras 3D Polimerización



INTRODUCCIÓN

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

METODOLOGÍA

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

INTRODUCCIÓN

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

METODOLOGÍA

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

CONCLUSIONES

- 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 aun teniendo el mismo número de átomos.
- Los compuestos orgánicos presentes a la salida de los procesos de polimerización y alquilación presentan fuerzas de London.
- En la energía de optimización, mientras más grande es la cadena de carbonos del hidrocarburo, mayor será el valor de la energía de optimización.

RECOMENDACIONES

- Uso de la plataforma SwissADME.
- Resultados con el software Avogadro



BIBACIMS



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA