



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA  
**CARRERA DE PETROQUÍMICA**

TRABAJO DE UNIDAD DE INTEGRACIÓN CURRICULAR, PREVIO A LA  
OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE PETROQUÍMICO

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

**Quispe Salazar, Lisbeth Morelia y Verdesoto Salazar, Angela Gabriela**

**Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio, PhD.**



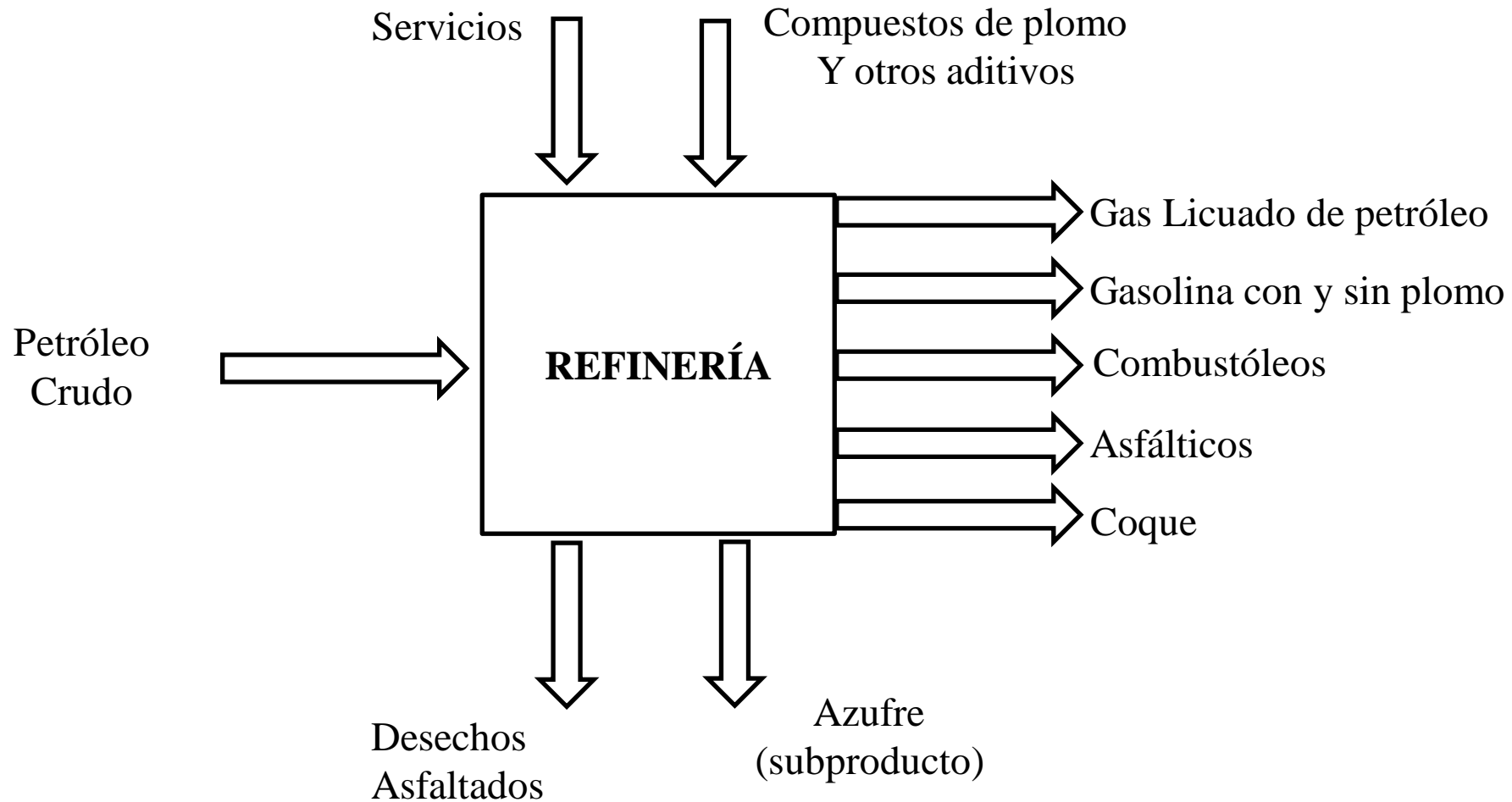
# INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

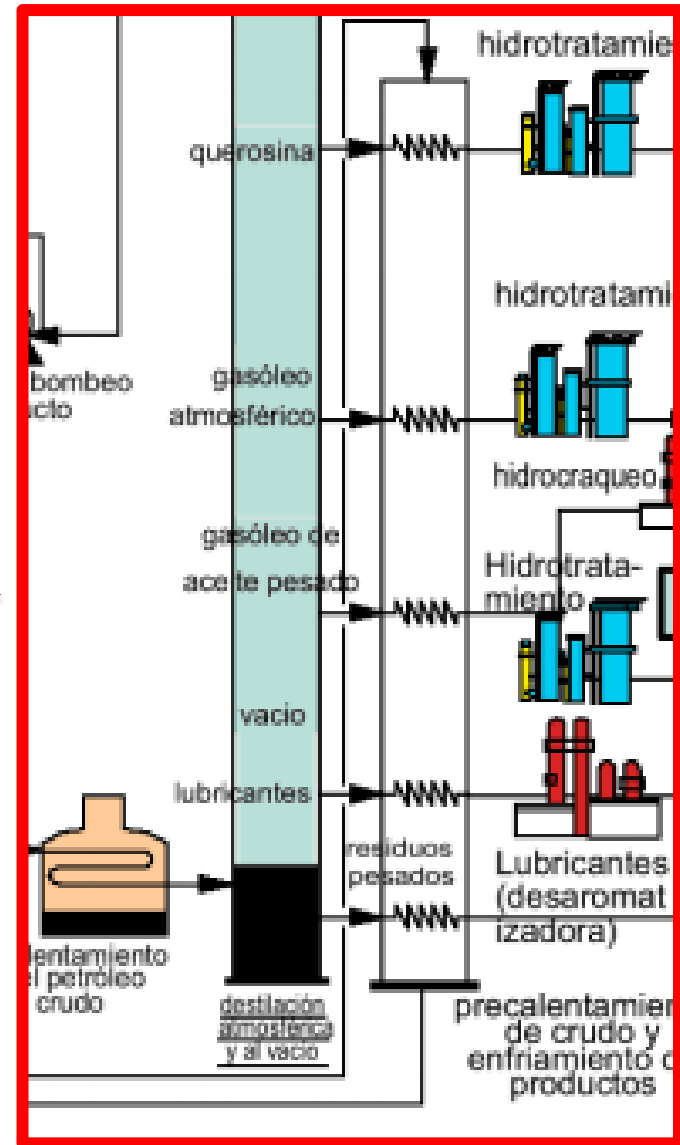
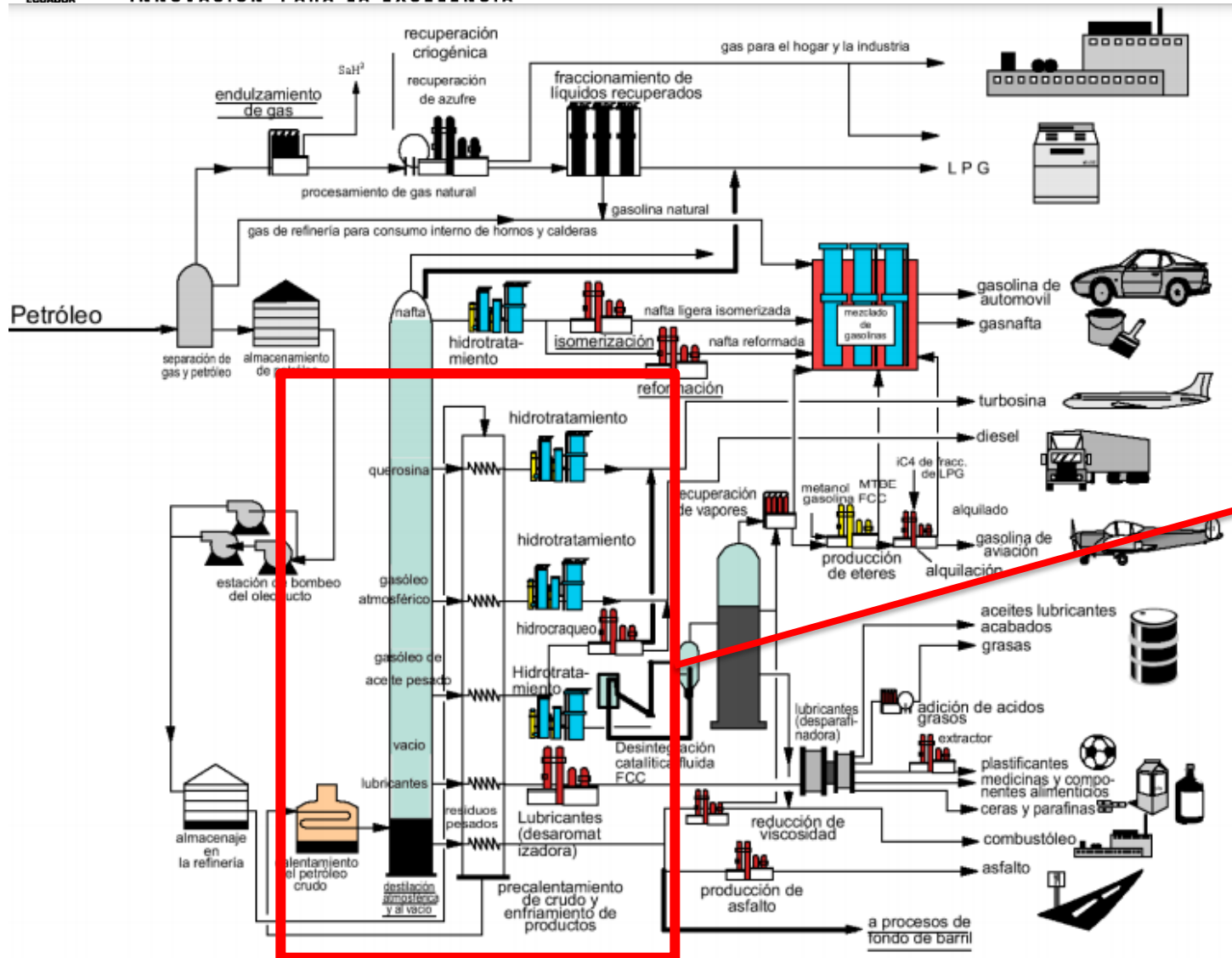
ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES





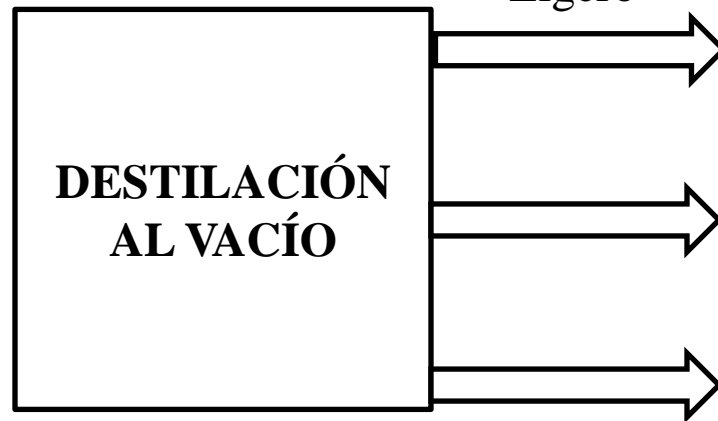
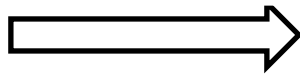
# INTRODUCCIÓN



10 mm Hg 150°C  
parte superior

40 mm Hg 250°C - 350°C  
laterales

Fondos Destilación  
Atmosférica



Gasóleo  
medio





1989

“Restricciones fisicoquímicas del ADN y el ARN, autómata celular y evolución molecular”

*in silico*





ChemDraw®



*ChemCraft*



INTRODUCCIÓN

**OBJETIVOS**

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES



## OBJETIVO GENERAL

- Determinar computacionalmente las características fisicoquímicas de todos los posibles componentes químicos de los flujos de entrada y salida en una refinería de petróleo “proceso de destilación al vacío” mediante cálculos teóricos computacionales.

## OBJETIVOS ESPECÍFICOS

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



INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

**METODOLOGÍA**

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

# Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de destilación al vacío.

*Advanced Materials Research Vols. 455-456 (2012) pp 706-710*  
© (2012) Trans Tech Publications, Switzerland  
doi:10.4028/www.scientific.net/AMR.455-456.706

Online: 2012-01-24

## Composition of Hydrogenated Vacuum Gas Oil Analysis by Gas Chromatography Mass Spectrometry

Razwan Muhammad SARDAR<sup>1</sup>, Yi Yang<sup>1</sup>, Shijuan Du<sup>1</sup>, Yun Wei<sup>1\*\*\*</sup>,  
Limin Xue<sup>2</sup>, Ying Guo<sup>2</sup>, Zhaobin Zhang<sup>2</sup>, Guoqing Wang<sup>2</sup>

<sup>1</sup>State Key Laboratory of Chemical Resource Engineering, Beijing University of Chemical Technology, 15 Beisanhuan East Road, Chaoyang District, Beijing 100029, China

<sup>2</sup>SINOPEC Beijing research Institute of Chemical Industry,

14 Beisanhuan East Road, Chaoyang District, Beijing, 100013, China



## CATALYTIC NAPHTHA REFORMING

SECOND EDITION, REVISED and EXPANDED

edited by  
**George J. Antos**  
UOP, LLC  
Des Plaines, Illinois, U.S.A.

**Abdallah M. Aitani**  
King Fahd University of Petroleum and Minerals  
Dhahran, Saudi Arabia

## DISEÑO DEL PROCESO DE DESTILACIÓN AL VACÍO

L. Ale Ruiz<sup>3\*</sup>, J.M. Vega<sup>1</sup>, J. Martínez<sup>2</sup>, y E. Erdmann<sup>4</sup>

1 INIQI (UNSa-CONICET)

2 INIQI- Facultad de Ingeniería - CIUNSa.(UNSa -CONICET)

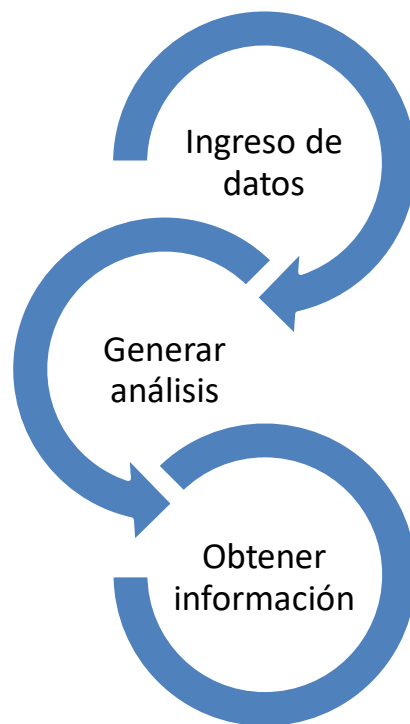
3CIUNSa, Facultad de Ingeniería. UNSa

E-mail: laleruiz@unsa.edu.ar

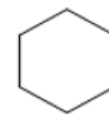
4 ITBA - INIQI (UNSa-CONICET)

Avda Bolivia 5150 - 4400 Salta – Argentina

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



cyclohexane  
Chemical Formula: C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>  
Exact Mass: 84,09  
Molecular Weight: 84,16  
m/z: 84.09 (100.0%), 85.10 (6.5%)  
Elemental Analysis: C, 85.63; H, 14.37



Cyclo hexane  
C1CCCCC1

## Estudio de la interfaz de la plataforma SwissADME



Swiss Institute of  
Bioinformatics

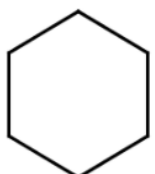
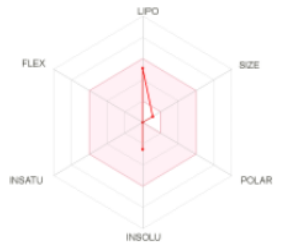
Código  
SMILES

Propiedades  
fisicoquímicas

Lipofilia

Solubilidad

**ciclo hexano**

SMILES: C1CCCCC1

Physicochemical Properties	
Formula	C6H12
Molecular weight	84.16 g/mol
Num. heavy atoms	6
Num. arom. heavy atoms	0
Fraction Csp3	1.00
Num. rotatable bonds	0
Num. H-bond acceptors	0
Num. H-bond donors	0
Molar Refractivity	28.84
TPSA	0.00 Å²

Lipophilicity	
Log $P_{ow}$ (iLOGP)	2.10
Log $P_{ow}$ (XLOGP3)	3.44
Log $P_{ow}$ (WLOGP)	2.34
Log $P_{ow}$ (MLOGP)	3.12
Log $P_{ow}$ (SILICOS-IT)	2.63
Consensus Log $P_{ow}$	2.73

Water Solubility	
Log S (ESOL)	-2.53
Solubility	2.49e-01 mg/ml ; 2.96e-03 mol/l
Class	Soluble
Log S (Ali)	-3.12
Solubility	6.37e-02 mg/ml ; 7.57e-04 mol/l
Class	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-1.44
Solubility	3.08e+00 mg/ml ; 3.66e-02 mol/l
Class	Soluble

Pharmacokinetics	
GI absorption	Low
BBB permeant	Yes
P-gp substrate	No
CYP1A2 inhibitor	No
CYP2C19 inhibitor	No
CYP2C9 inhibitor	No
CYP2D6 inhibitor	No
CYP3A4 inhibitor	No
Log $K_p$ (skin permeation)	-4.37 cm/s

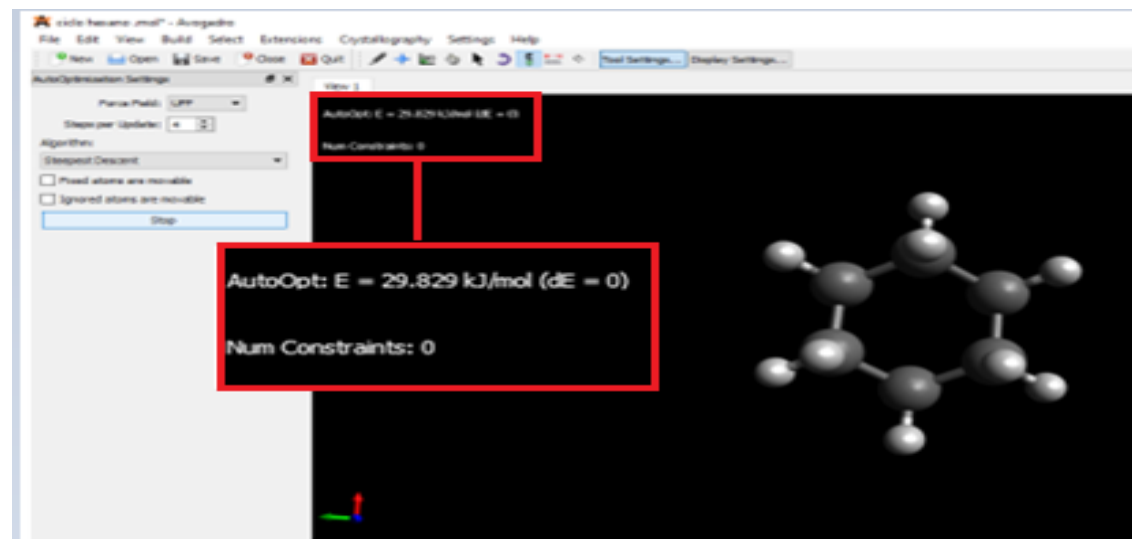
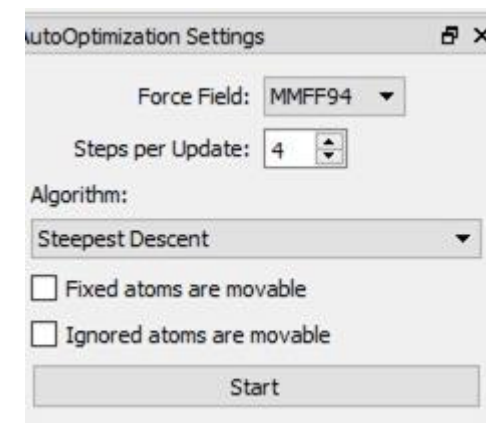
Druglikeness	
Lipinski	Yes; 0 violation
Ghose	No; 3 violations: MW<160, MR<40, #atoms<20
Veber	Yes
Egan	Yes
Muegge	No; 2 violations: MW<200, Heteroatoms<2
Bioavailability Score	0.55

Medicinal Chemistry	
PAINS	0 alert
Brenk	0 alert
Leadlikeness	No; 1 violation: MW<250
Synthetic accessibility	1.17

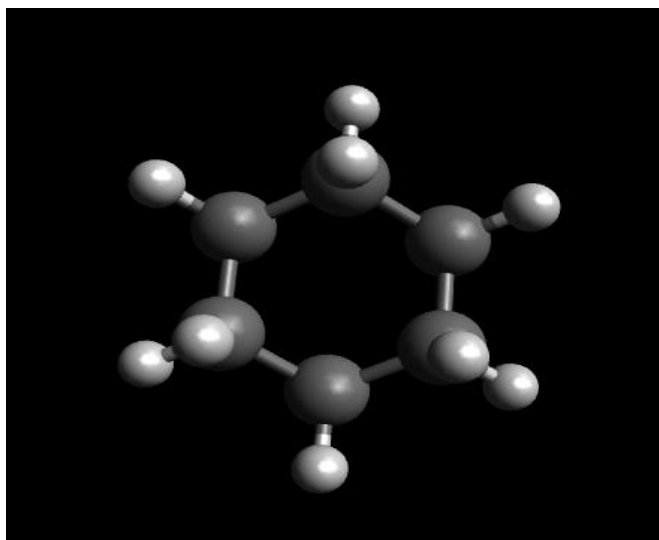
## Cálculo y obtención de estructuras 3D



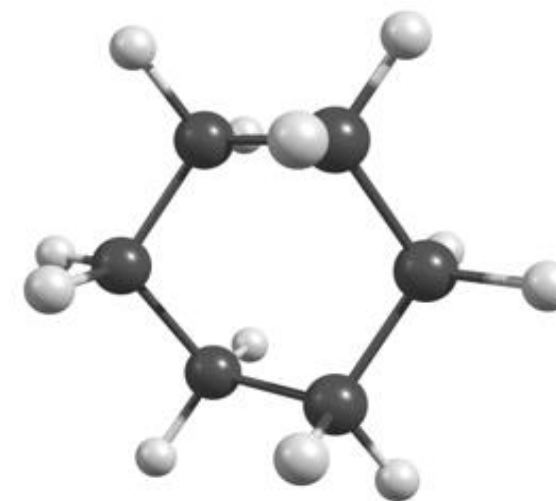
ciclo hexano  
.mol



## Cálculo y obtención de estructuras 3D



*ChemCraft*



## Elaboración de archivos con coordenadas 3D optimizadas



AutoOpt: E = 29.829 kJ/mol (dE = 0)  
Num Constraints: 0

**GAMMESS-UK Input**

Title:

Calculation:  Basis:

Theory:  DFT Functional:

Charge:  Multiplicity:

Format:  Run in direct mode:

```

geometry angstrom
0.80417336 1.25464598 -0.23222045 6 C
1.51289580 -0.01636929 0.25825143 6 C
0.77288011 -1.26618535 -0.24041281 6 C
-0.68581505 -1.24963718 0.23944562 6 C
-1.39453912 0.02137638 -0.25102807 6 C
-0.65452408 1.27119475 0.24763202 6 C
0.82830443 1.28609643 -1.34399882 1 H
1.33518760 2.15169970 0.15225841 1 H
1.53784139 -0.02029420 1.37044976 1 H
2.56015076 -0.02816397 -0.11272479 1 H
1.28143342 -2.17862410 0.13818241 1 H
0.79630835 -1.29099848 -1.35237433 1 H
-0.70994133 -1.28108524 1.35122432 1 H
-1.21683025 -2.14669210 -0.14502880 1 H
-2.44179363 0.03317131 0.11994949 1 H
    
```





INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

**ANÁLISIS DE RESULTADOS**

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

**Tabla 1**  
*Moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada*

Hidrocarburo policíclico aromático		
Número	Componente	Nombre
1	C14H10	Antraceno
2	C16H10	Pireno
3	C18H12	1,2-benzantraceno
4	C20H12	Benzo[a]pireno
5	C23H12O	12,13-Carbonilpiceno
6	C24H25NO	N-Tritylpentanamide
7	C24H25NO	N,N-Didesmethyltamoxifen
8	C24H25N	1-Tritylpiperidine
9	C24H25N	2,3,6-Triphenylcyclohexan-1-amine
10	C23H30NO2+	(2S,6R)-2-[(2S)-2-Hydroxy-2-phenylethyl]-1,1-dimethyl-6-(2-oxo-2-phenylethyl)piperidinium
11	C25H40N+	1-Hexadecylquinolinium
	C23H45O2-	2-Methyldocosanoate
12	C14H10	Fenantreno
13	C16H10	Fluoranteno

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

**Tabla 2**  
*Moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida*

Compuestos de alquil ciclohexanos lineales (LACH)		
Número	Componente	Nombre
1		
2		
3	C6H12	Ciclohexano
4	C7H14	Metil ciclohexano
5	C8H16	Ciclohexano de etilo
6	C9H18	Propano, 1- ciclohexano
7	C10H20	Butano, 1-ciclohexilo
8	C11H22	Pentano, 1-ciclohexilo
9	C12H24	Hexano, 1-ciclohexilo
10	C13H26	Heptano, 1-ciclohexilo
11	C14H28	Octano, 1-ciclohexilo
12	C15H30	Nonano, ciclohexilo
13	C16H32	Decano, 1-ciclohexilo
14	C17H34	Undecano, 1-ciclohexilo
15	C18H36	Dodecano1-ciclohexilo
16	C19H38	Tridecano, 1-ciclohexilo
17	C20H40	Tetradecano, 1-ciclohexilo
18	C21H42	Pentadecano, 1-ciclohexilo
19	C22H44	Hexadecano, 1-ciclohexilo
20	C23H46	Heptadecano, 1-ciclohexilo
21	C24H48	Octadecano, 1-ciclohexilo
22	C25H50	Nonadecano, 1-ciclohexilo
23	C26H52	Eicosano, 1-ciclohexilo
24	C27H54	Heneicosano, 1-ciclohexilo
25	C28H56	Docosano, 1-ciclohexilo
26	C29H58	Tricono, 1-ciclohexilo
27	C30H60	Tetracosano, 1-ciclohexilo
	C31H62	Pentacosano, 1-ciclohexilo
	C32H64	Hexacosano, 1-ciclohexilo

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

**Tabla 3**

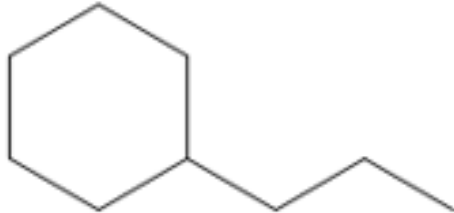
*Datos de propiedades químicas básicas del antraceno*

<b>Antraceno</b>	
<b>Estructura 2D</b>	
<b>Propiedades químicas básicas</b>	
Nomenclatura IUPAC	Antraceno
Fórmula química	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>
Masa exacta	178,08
Peso molecular	178,23
Porcentaje en masa	179.08 (15.1%), 180.08 (1.1%)
Análisis elemental	C, 94.34; H, 5.66

Nota. La tabla muestra propiedades químicas básicas del ciclo hexano obtenido del programa ChemDraw Professional.

**Tabla 4**

*Datos de propiedades químicas básicas del ciclo hexano propil, 1-ciclohexil*

<b>Propil, 1-Ciclohexil</b>	
<b>Estructura 2D</b>	
	
<b>Propiedades químicas básicas</b>	
Nomenclatura IUPAC	Propilciclohexano
Fórmula química	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub>
Masa exacta	126.14
Peso molecular	126.24
Porcentaje en masa	126.14 (100.0%), 127.14 (9.7%)
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

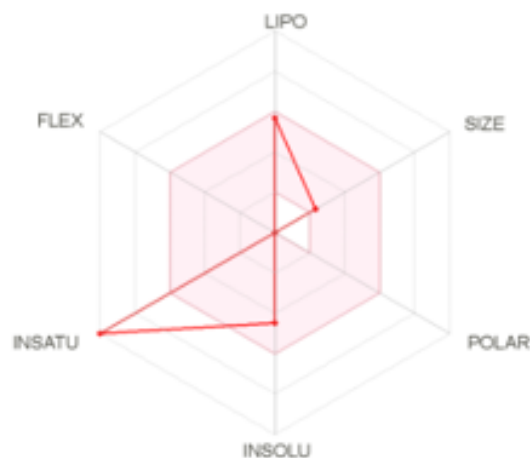
Nota. La tabla muestra propiedades químicas básicas del propil, 1-ciclohexil obtenido del programa ChemDraw Professional

**Tabla 5**

*Datos de propiedades fisicoquímicas básicas del antraceno*

**Antraceno**

**Radar de biodisponibilidad de la molécula**



**Código SMILES**

C12=CC=CC=C1C=C3C=CC=CC3=C2

**Propiedades fisicoquímicas**

Fórmula	C14H10
Peso molecular	178.23 g/mol
Núm. átomos pesados	14
Núm. arom. átomos pesados	14
Fracción Csp3	0.00
Núm. enlaces rotativos	0
Núm. Aceptadores de enlaces H	0
Núm. Donantes de bonos H	0
Refractividad molar	61.45
TPSA	0.00 Å <sup>2</sup>

**Lipofilia**

Log Po / w (iLOGP)	2.10
Log Po / w (XLOGP3)	3,44
Log Po / w (WLOGP)	2,34
Log Po / w (MLOGP)	3.12
Log Po / w (SILICOS-IT)	2,63
Registro de consenso Po / w	2,73

**Tabla 6**

*Datos de propiedades fisicoquímicas básicas del propano, 1-ciclohexil*

**Propiedades fisicoquímicas**

Fórmula	C9H18
Peso molecular	126.24 g/mol
Núm. átomos pesados	9
Núm. arom. átomos pesados	0
Fracción Csp3	1.00
Núm. enlaces rotativos	2
Núm. Aceptadores de enlaces H	0
Núm. Donantes de bonos H	0
Refractividad molar	43.26
TPSA	0.00 Å <sup>2</sup>

**Lipofilia**

Log Po / w (iLOGP) 2.10	2.74
Log Po / w (XLOGP3) 3,44	5.10
Log Po / w (WLOGP) 2,34	3.37
Log Po / w (MLOGP) 3.12	4.13
Log Po / w (SILICOS-IT) 2,63	3.10
Registro de consenso Po / w 2,73	3.69

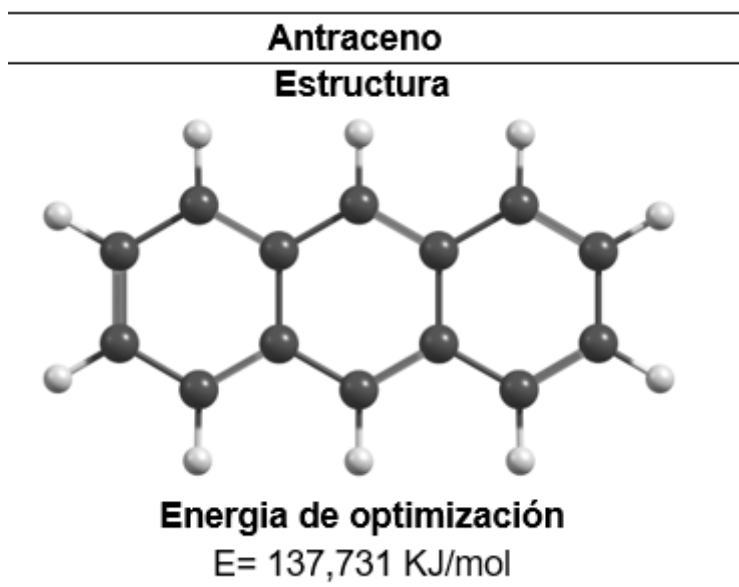
**Propano, 1-Ciclohexil**  
**Radar de biodisponibilidad de la molécula**



**Código SMILES**  
**CCCC1CCCCC1**

**Tabla 7**

*Estructura 3D y energía de optimización del antraceno*



**Tabla 8**

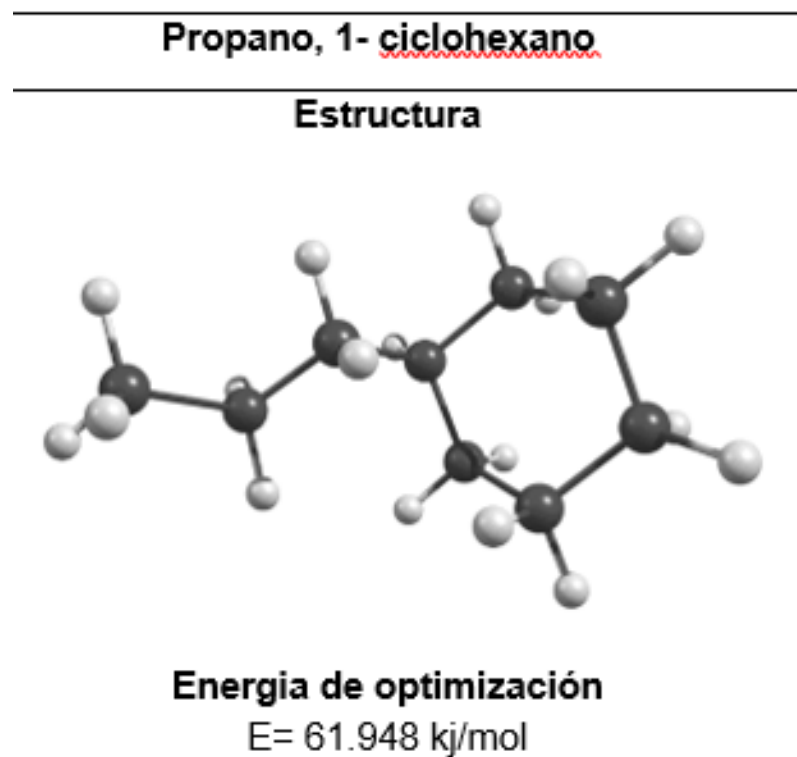
*Coordenadas del antraceno*

	X	Y	Z
C	-2.44708874	1.39459237	-0.00393323
C	-3.65556964	0.69862604	0.07241699
C	-3.65620249	-0.69262411	0.07294693
C	-2.44989909	-1.39040993	-0.00367720
C	-1.22544336	-0.70338896	-0.05655734
C	-0.00155032	-1.39117705	-0.07951449
C	1.22360835	-0.70368821	-0.05187217
C	2.44727056	-1.39133897	0.00417920
C	3.65402917	-0.69440714	0.08162508
C	3.65437572	0.69686944	0.07784672
C	2.44814806	1.39467639	-0.00229515
C	1.22404182	0.70761425	-0.05531294
C	-0.00001843	1.39583776	-0.08360715
C	-1.22406000	0.70746253	-0.05741443
H	-2.46917552	2.48340192	0.00024556
H	-4.59329983	1.24405456	0.14123500
H	-4.59441230	-1.23667196	0.14259776
H	-2.47067235	-2.47788837	0.00130946
H	-0.00151754	-2.47952853	-0.08466772
H	2.46701825	-2.47843193	0.01263900
H	4.59137417	-1.23966088	0.15397520
H	4.59235579	1.24112748	0.14706293
H	2.46876532	2.48144047	-0.00083963
H	-0.00049822	2.48360695	-0.09165843



**Tabla 9**

*Estructura 3D y energía de optimización del propano, 1- ciclohexano*



**Tabla 10**

*Coordenadas del propano, 1- ciclohexano*

	X	Y	Z
C	0.72832287	1.18213160	-0.30889005
C	1.41481115	-0.07751208	0.27835101
C	0.65673537	-1.36327301	-0.09308926
C	-0.79340386	-1.28509874	0.40742807
C	-1.50662915	-0.05475988	-0.17147235
C	-0.73558641	1.22690744	0.19250573
C	2.24055016	1.56453936	-3.91023936
C	2.23273164	1.38313200	-2.39459370
C	0.79628838	1.27896503	-1.85806657
H	1.24863774	2.08223097	0.08784612
H	1.42556349	0.00951070	1.38767967
H	2.47319673	-0.14745722	-0.04286283
H	1.15898062	-2.23789181	0.37315815
H	0.67066936	-1.51409120	-1.19283034
H	-0.79124694	-1.21508221	1.51780567
H	-1.34182936	-2.20805500	0.12143121
H	-2.53729018	0.00220364	0.23969705
H	-1.59279220	-0.15529401	-1.27317140
H	-0.73025208	1.32500403	1.30098909
H	-1.25805020	2.11818570	-0.21735561
H	3.28802782	1.63992937	-4.27103063
H	1.70071644	2.49374564	-4.19168873
H	1.75555519	0.69638030	-4.40548365
H	2.74261638	2.25421803	-1.92875218
H	2.80370450	0.46211455	-2.15799286
H	0.29570703	0.41731345	-2.34303638
H	0.25335267	2.20077092	-2.16372941



**INTRODUCCIÓN**

**OBJETIVOS**

**METODOLOGÍA**

**ANÁLISIS DE RESULTADOS**

**CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES**

- De acuerdo a la búsqueda bibliográfica, se concluye que a pesar de los análisis elementales no se han realizado estudios que indiquen la composición molecular exacta del residuo atmosférico, el mismo que representa el flujo de entrada a la unidad destilación al vacío, de forma que se logró generar un listado de trece componentes principales, presentes en el flujo de entrada de la unidad de destilación al vacío.
- En cuanto a lo recopilado en la búsqueda bibliográfica, debido a que los métodos de análisis tradicionales no han podido proporcionar la composición detallada de los flujos de salida de la unidad de destilación al vacío, se ha creado una lista con los compuestos presentes de alquil ciclohexanos lineales (LACH) que han sido determinados mediante espectrometría de masas por cromatografía de gases (GC-MS).
- El análisis de las moléculas en el programa ChemDraw proporciono propiedades químicas básicas tales como nombre, formula, peso molecular, porcentaje en masa, análisis elemental y estructura en 2D de las principales moléculas presentes en las corrientes de entrada y salida de la unidad de destilación al vacío.

- Por medio del uso de la plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME se obtuvo propiedades fisicoquímicas básicas, parámetros de lipofilia y la solubilidad en agua de cada molécula analizada, en donde se observó que la solubilidad de compuestos orgánicos con menor peso molecular son solubles, lo contrario pasa, con las moléculas de alto peso molecular donde se vuelven insolubles.
- Mediante el programa Avogadro y utilizando el campo de fuerza MMFF94; que está diseñado particularmente para los compuestos orgánicos, se obtuvo estructuras moleculares en 3D optimizadas y coordenadas de cada una de las principales moléculas presentes en los flujos de entrada y salida de la unidad de destilación al vacío. Estableciendo que la energía de optimización tiene una relación directamente proporcional con el tamaño de la molécula y finalmente se utilizó el programa Chemcraft para mejorar la calidad de la gráfica.
- Finalmente todos los resultados obtenidos han sido analizados y tabulados de manera individual, con el propósito de comparar entre si las propiedades, de forma que se obtuvo moléculas simples como los alquil cilohexanos lineales y otras moléculas más complejas como los aromáticos policíclicos.

- Se recomienda utilizar el nombre del compuesto que será analizado en el idioma inglés, debido a que los programas y la plataforma web tiene la biblioteca de información en ese único idioma.
- Para los archivos creados en el programa ChemDraw se recomienda guardar con formato “MDL Molfile(\*.mol)”, para posterior realizar la optimización de la estructura 3D en el programa Avogadro.
- Cuando se proceda a obtener el dato de energía de optimización del programa Avogadro se recomienda hacerlo cuando el valor delta E sea igual a cero.

***GRACIAS POR SU ATENCIÓN***