



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

Estudio *in silico*, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “hidrocraqueo catalítico” con énfasis en las estructuras químicas individuales para cada corriente, y el análisis de sus propiedades fisicoquímicas intrínsecas, configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intermoleculares entre sí

Changoluisa Gualotuña, Elvis Fabricio y Endara Laguaquiza, Jefferson Steeven

Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

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

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio, PhD.

Latacunga

Abril 2021



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

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

Certificación

Certifico que el trabajo de la Unidad de Integración Curricular, “**Estudio *in silico*, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “hidrocraqueo catalítico” con énfasis en las estructuras químicas individuales para cada flujo, y el análisis de sus propiedades fisicoquímicas intrínsecas, configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intermoleculares entre sí**” fue realizado por el señores **Changoluisa Gualotuña, Elvis Fabricio y Endara Laguazuiza, Jefferson Steeven** el mismo que ha sido revisado en su totalidad, analizado por la herramienta de verificación de similitud de contenido; por lo tanto, cumple con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que lo sustente públicamente.

Latacunga, abril de 2021



Firmado electrónicamente por:

**FABIAN
MAURICIO
SANTANA ROMO**

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio, PhD.

C.C.:1802925139

Análisis Urkund



Document Information

Analyzed document	Changoluisa_Endara_TESIS_Hidrocraqueo_Catalitico.pdf (D101193954)	 Firmado electrónicamente por: FABIAN MAURICIO SANTANA ROMO
Submitted	4/10/2021 3:36:00 PM	
Submitted by	Fabián Santana	
Submitter email	fmsantana@espe.edu.ec	
Similarity	4%	
Analysis address	fmsantana.espe@analysis.urkund.com	

Sources included in the report

W	URL: https://vsip.info/quimica-2-guia-pdf-free.html Fetched: 1/27/2021 10:30:23 PM	 1
W	URL: http://anyflip.com/xqubm/ucby/basic/101-150 Fetched: 12/12/2020 5:02:59 AM	 6
W	URL: http://materiales.untrefvirtual.edu.ar/documentos_extras/20384_quimica_ii/U2_carey ... Fetched: 12/5/2020 12:20:54 AM	 3
SA	tt JORGE LUIS TORRES VACA pdf.pdf Document tt JORGE LUIS TORRES VACA pdf.pdf (D59987273)	 23



Firmado electrónicamente por:

**FABIAN
MAURICIO
SANTANA ROMO**

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio, PhD.

C.C.:1802925139



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

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

Autoría de responsabilidad

Nosotros, **Changoluisa Gualotuña, Elvis Fabricio y Endara Laguaquiza, Jefferson Steeven** con cedula de ciudadanía N° 1726308263 y 0504029695, 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 “hidrocraqueo catalítico” con énfasis en las estructuras químicas individuales para cada flujo, y el análisis de sus propiedades fisicoquímicas intrínsecas, configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intermoleculares entre sí** 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.

Latacunga, abril de 2021

Una firma manuscrita en tinta azul, que parece ser 'Changoluisa Gualotuña', sobre una línea horizontal.

Changoluisa Gualotuña, Elvis Fabricio

C.C.:1726308263

Una firma manuscrita en tinta azul, que parece ser 'Endara Laguaquiza', sobre una línea horizontal.

Endara Laguaquiza, Jefferson Steeven

C.C.: 0504029695



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

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

Autorización

Nosotros, **Changoluisa Gualotuña, Elvis Fabricio y Endara Laguaquiza, Jefferson Steeven** con cedula de ciudadanía N° 1726308263 y 0504029695, 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 “hidrocraqueo catalítico” con énfasis en las estructuras químicas individuales para cada flujo, y el análisis de sus propiedades fisicoquímicas intrínsecas, configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intermoleculares entre sí en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de nuestra responsabilidad.**

Latacunga, abril 2021

Firma manuscrita en tinta azul de Changoluisa Gualotuña.

Changoluisa Gualotuña, Elvis Fabricio
C.C.:1726308263

Firma manuscrita en tinta azul de Endara Laguaquiza.

Endara Laguaquiza, Jefferson Steeven
C.C.: 0504029695

Dedicatoria

A mis padres, Ángel y Ana, por estar conmigo, por enseñarme a crecer y a que si caigo debo levantarme, por apoyarme y guiarme por el camino correcto, por el amor ya paciencia que brindan y por ser los pilares que me ayudaron a llegar hasta aquí, sin ellos yo no sería nada.

A mis hermanos, Alexis y Elizabeth, por ser el ejemplo a seguir, por el gran apoyo incondicional y por los sabios consejos que me imparten para seguir luchando por mis objetivos.

Elvis Fabricio Changoluisa Gualotuña

Dedicatoria

A mi madre María Dolores, por el apoyo incondicional que me brinda cada día, guiándome por el camino correcto y por los consejos de nunca rendirme ante los problemas de la vida. A todos mis amigos y familiares que siempre estuvieron conmigo dándome ánimos para cumplir mis metas.

Jefferson Steeven Endara Laguaquiza

Agradecimientos

A nuestro tutor Dr. Fabián Mauricio Santana por su guía, por sus conocimientos impartidos, tiempo, dedicación y paciencia con nosotros lo largo de esta investigación. A pesar de no conocerlo en persona, debido a modalidad de estudio que llevamos, me atrevo a decir que es un excelente docente, y lo respeto mucho por su gran capacidad de enseñanza que tiene y por ser un buen ser humano. Gracias por todo.

A mis abuelos Alfonso y Adelaida, por el gran apoyo incondicional, por su ternura y aprecio que me dieron.

A mi hermano Andy, por ser el último de mis hermanos, con quien la que mayor tiempo compartimos aventuras y experiencias.

A dios, por permitirme estar aquí en este mundo.

A la Universidad de las Fuerzas Armadas sede Latacunga, y todos los docentes que integran la carrera de Petroquímica, por los conocimiento y experiencias impartidas a lo largo de esta trayectoria como estudiante.

Elvis Fabricio Changoluisa Gualotuña

Agradecimientos

A Dios, por el infinito amor que nos brinda, ese amor que me permite cada día seguir adelante, superar mis debilidades y esforzarme cada día. Por darme la vida, la salud y la fuerza para cumplir todos mis objetivos.

A todos los docentes que ayudaron a forjarme en esta etapa de mi vida, por todos los consejos y ayudas que recibí para poder ser una persona honesta y justa. Agradezco al PhD. Fabián Mauricio Santana, por guiarme en esta investigación y por todo el tiempo que empleó en ayudarnos para que este proyecto salga de la mejor manera.

Jefferson Steeven Endara Laguaquiza

Tabla de contenido

Carátula.....	1
Certificación.....	2
Análisis Urkund	3
Autoría de responsabilidad.....	4
Autorización.....	5
Dedicatoria	6
Dedicatoria	7
Agradecimientos.....	8
Agradecimientos.....	9
Tabla de contenido.....	10
Índice de tablas	16
Índice de figuras	18
Índice de esquemas	21
Resumen.....	22
Abstract.....	23
Introducción.....	25
Antecedentes	25
Planteamiento del problema.....	26
Justificación e importancia	27
Objetivos	27
<i>Objetivo general</i>	27
<i>Objetivos específicos</i>	27
Hipótesis	28
Variables de la investigación	29

<i>Variables Independientes</i>	29
<i>Variables Dependientes</i>	29
Fundamentación teórica.....	30
Petróleo.....	30
<i>Composición molecular del petróleo</i>	31
Parafinas.....	31
Olefinas.....	32
Naftenos (cicloalcanos).....	33
Aromáticos.....	34
Compuestos con azufre.....	36
Compuestos con oxígeno.....	37
Compuestos con nitrógeno.....	39
Compuestos metálicos.....	40
Asfaltenos y resinas.....	40
Refinería petrolera.....	40
<i>Hidrocraqueo catalítico</i>	41
Introducción de Hidrocraqueo.....	41
Alimentación y productos en el hidrocraqueo catalítico.....	43
Reacciones químicas en el hidrocraqueo.....	45
Hidrocraqueo de alcanos.....	45
Hidrodealquilación.....	45
Apertura de anillos.....	45
Hidroisomerización.....	45
Hidrocraqueo de aromáticos polinucleares.....	46
Catalizadores empleados en el hidrocraqueo catalítico.....	46
Química computacional.....	47

<i>Modelos computacionales</i>	48
Optimización de estructuras	48
<i>Avogadro</i>	49
Propiedades químicas básicas	51
<i>Peso molecular</i>	51
<i>Fórmula molecular</i>	51
<i>Composición elemental</i>	51
Propiedades fisicoquímicas	52
Lipofilia	52
Solubilidad.....	53
Radar de estructura química y biodisponibilidad.....	53
Propiedades estructurales	54
<i>Isómeros</i>	54
<i>Conformeros</i>	55
Interacciones intermoleculares	56
<i>Polaridad</i>	56
<i>Las fuerzas de atracción dipolo-dipolo</i>	57
<i>Las fuerzas dipolo inducido-dipolo inducido</i>	58
<i>Las fuerzas dipolo-dipolo inducido</i>	58
<i>Puente de hidrógeno</i>	58
<i>Enlace covalente</i>	59
<i>Múltiples enlaces covalentes</i>	59
Metodología	61
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en la corriente de entrada en el proceso de hidrocraqueo catalítico.....	61
<i>Búsqueda de datos internacionales</i>	61

Gasoil de vacío (VGO)	62
Corriente directa de Queroseno	62
Corriente directa de Diésel	62
Corriente ligera del craqueo catalítico fluidizado (FCC LCO).....	62
Corriente pesada del craqueo catalítico fluidizado (FCC HCO)	63
Gasoil ligero de la coquización (CLGO).....	63
Gasoil pesado de la coquización (CHGO)	63
Aceite desasfaltado	63
<i>Obtención, organización y reporte de resultados.....</i>	<i>64</i>
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en la corriente de salida en el proceso de hidrocraqueo catalítico.....	64
<i>Búsqueda de datos internacionales.....</i>	<i>64</i>
Queroseno	64
Jet Fuel	66
Diésel.....	67
<i>Obtención, organización y reporte de resultados.....</i>	<i>68</i>
Procesamiento y obtención de estructuras químicas 1D, 2D y propiedades químicas básicas	68
<i>Generación de estructuras químicas en 2D.....</i>	<i>68</i>
<i>Procesamiento de propiedades básicas.....</i>	<i>71</i>
<i>Generación automática de nomenclatura IUPAC</i>	<i>72</i>
<i>Generación automática del código SMILES</i>	<i>74</i>
<i>Obtención, organización y reporte de resultados.....</i>	<i>75</i>
Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas.....	76
<i>Estudio de la interfaz de la plataforma SwissADME</i>	<i>76</i>
<i>Procesamiento a través del código SMILES.....</i>	<i>77</i>

<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	78
Cálculo y obtención de estructuras 3D	78
<i>Elaboración de archivos con coordenadas 2D</i>	78
<i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D</i>	79
<i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D optimizadas y reporte de la energía de optimización</i>	79
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	82
Resultados y discusiones	83
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en la corriente de entrada del proceso de hidro craqueo catalítico.....	83
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en la corriente de salida del proceso de hidro craqueo catalítico.....	84
Procesamiento y obtención de estructuras químicas 1D, 2D, nomenclatura IUPAC, propiedades químicas básicas y código SMILES.	86
<i>Corriente de entrada</i>	86
<i>Corriente de salida</i>	88
Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas, lipofilia, solubilidad en agua y estudio del radar de biodisponibilidad de las moléculas orgánicas.....	91
<i>Corriente de entrada</i>	91
Propiedades fisicoquímicas.....	91
Lipofilia.....	93
Solubilidad en agua.....	95
Radar de biodisponibilidad	98
<i>Corriente de salida</i>	99
Propiedades fisicoquímicas.....	100
Lipofilia.....	102

Solubilidad en agua.....	103
Radar de biodisponibilidad	107
Obtención de la estructura química 3D y estructura química 3D optimizada con el respectivo valor de la energía mínima de optimización.....	109
<i>Corriente de entrada</i>	109
Estructura química 3D.....	109
Estructura química 3D optimizada.....	111
<i>Corriente de salida</i>	113
Estructuras químicas 3D	113
Estructuras químicas 3D optimizadas	115
Conclusiones y recomendaciones	117
Conclusiones.....	117
Recomendaciones.....	120
Bibliografía	121
Anexos	131

Índice tablas

Tabla 1	<i>Rangos generales de ebullición de las fracciones de petróleo</i>	30
Tabla 2	<i>Nombres y fórmulas para las parafinas</i>	32
Tabla 3	<i>Tipos de compuestos químicos presentes en la alimentación de la unidad de hidrocrqueo catalítico.....</i>	42
Tabla 4	<i>Alimentación y productos usuales en la unidad de hidrocrqueo catalítico.....</i>	43
Tabla 5	<i>Moléculas orgánicas más representativas de la lista general para las corrientes de entrada.....</i>	83
Tabla 6	<i>Moléculas orgánicas más representativas de la lista general para las corrientes de salida.....</i>	84
Tabla 7	<i>Estructura química 2D, propiedades químicas básicas y código SMILES para las moléculas representativas de las corrientes de entrada.</i>	86
Tabla 8	<i>Estructura química 2D, propiedades químicas básicas y código SMILES para las moléculas representativas de las corrientes de salida.....</i>	88
Tabla 9	<i>Propiedades fisicoquímicas para las moléculas más representativas de la corriente de entrada.....</i>	93
Tabla 10	<i>Valores de lipofilia para las moléculas más representativas de la corriente de entrada</i>	94
Tabla 11	<i>Valores de la solubilidad en agua para las moléculas más representativas de la corriente de entrada</i>	97
Tabla 12	<i>Propiedades fisicoquímicas para las moléculas más representativas de las corrientes de salida.....</i>	101
Tabla 13	<i>Valores de lipofilia para las moléculas más representativas de las corrientes de salida.....</i>	102

Tabla 14 <i>Valores de solubilidad en agua para las moléculas más representativas de las corrientes de salida</i>	105
--	-----

Índice de figuras

Figura 1 Estructura química para compuestos con enlace simple.....	32
Figura 2 Estructura química para compuestos con doble y triple enlace.....	33
Figura 3 Estructura química para el ciclohexano	33
Figura 4 Estructura química para compuestos con estructura cíclica.....	34
Figura 5 Estructura química para el benceno.....	34
Figura 6 Estructura química para el tolueno, estireno y o-xileno.....	35
Figura 7 Estructura química para aromáticos complejos.....	36
Figura 8 Estructura química para compuestos con azufre	37
Figura 9 Estructura química para compuestos con grupos funcionales -OH y R-O-R´ ..38	
Figura 10 Estructura química para compuestos con grupos (R ₁ (CO)R ₂), -COOH y - COOR	38
Figura 11 Estructura química para compuestos con nitrógeno	39
Figura 12 Rol de la unidad de hidrocraqueo en una refinería.....	44
Figura 13 Estructura del catalizador de zeolita tipo Y	47
Figura 14 Avogadro versión 1.2.0.....	49
Figura 15 Radar de estructura química y biodisponibilidad para la molécula de decano	54
Figura 16 Isómero del C ₄ H ₁₀	55
Figura 17 Conformaciones del etano: a) Eclipsado; b) Escalonado	55
Figura 18 Polaridad de las moléculas	57
Figura 19 Formación del F ₂ a través de un enlace covalente.....	59
Figura 20 Enlaces covalentes: Simple (etano), Doble(eteno), Triple (etino).....	60
Figura 21 Aumento del número de isómeros con número de carbonos.	66
Figura 22 Barra de herramientas principales de ChemDraw.....	69

Figura 23 <i>Sección gráfica para la estructura molecular en 2D</i>	69
Figura 24 <i>Creación de archivo ACS Document 1996</i>	70
Figura 25 <i>Parámetros de archivo ACS Document 1996</i>	70
Figura 26 <i>Estructura química de la molécula en 2D</i>	71
Figura 27 <i>Visualización de las propiedades químicas básicas</i>	72
Figura 28 <i>Visualización de la nomenclatura IUPAC</i>	73
Figura 29 <i>Formatos para el guardado de archivos en ChemDraw</i>	74
Figura 30 <i>Visualización del código SMILES</i>	75
Figura 31 <i>Almacenamiento de códigos SMILES</i>	76
Figura 32 <i>Interfaz de usuario de la plataforma SwissADME</i>	77
Figura 33 <i>Visualización de las propiedades fisicoquímicas, lipofilia y solubilidad</i>	78
Figura 34 <i>Diagrama de flujo para la elaboración de la estructura química en 3D</i>	79
Figura 35 <i>Elaboración de estructuras en coordenadas 3D optimizadas</i>	80
Figura 36 <i>Selección de la molécula en Chemcraft</i>	81
Figura 37 <i>Tipo de estilo para la molécula en Chemcraft</i>	81
Figura 38 <i>Radar de biodisponibilidad para las moléculas: a) 50-Nafteno; b) 163- Poliaromático, d) 165- compuesto con azufre</i>	98
Figura 39 <i>Radares de biodisponibilidad para las moléculas representativas del queroseno en la corriente de salida: a) 1-Parafina; b) 8-Isoparafina; c) 23- Nafteno; d) 37-Aromático</i>	107
Figura 40 <i>Estructura química 3D de las moléculas representativas de la corriente de entrada: a) 23; b) 50; c) 163; d) 165 ; e) 190; f)199</i>	109
Figura 41 <i>Estructuras químicas 3D optimizadas de las moléculas representativas de la corriente de entrada: a) 23; b) 50; c) 163; d) 165 ;e) 190; f)199</i>	111

Figura 42 Estructura química 3D de las moléculas representativas del queroseno en la corriente de salida: a) 1-Parafina; b) 8-Isoparafina; c) 23-Nafteno; d) 37-Aromático.....114

Figura 43 Estructuras químicas 3D optimizadas de las moléculas representativas del queroseno en la corriente de salida: a) 1-Parafina; b) 8-Isoparafina; c) 23-Nafteno; d) 37-Aromático.....115

Índice de esquemas

Esquema 1 <i>Reacción de hidrocraqueo de alcanos</i>	45
Esquema 2 <i>Reacción de hidrodealquilación</i>	45
Esquema 3 <i>Reacción de apertura de anillos</i>	45
Esquema 4 <i>Reacción de hidroisomerización</i>	46
Esquema 5 <i>Reacción de hidrocraqueo de aromáticos polinucleares</i>	46

Resumen

El petróleo es una mezcla de hidrocarburos, que pueden ser separados en fracciones mediante los distintos puntos de ebullición. En una refinería se aplica este principio para poder extraer los principales derivados como son la gasolina, diésel, queroseno y fueloil, para obtener mayor cantidad de estos derivados se implementa el proceso de hidrocraqueo catalítico que permite transformar las fracciones pesadas del petróleo en productos más ligeros, rompiendo los enlaces C-C con la presencia de hidrógeno. Esta investigación está enfocada en el análisis de las moléculas químicas orgánicas presentes en todas las corrientes de entradas y salidas del proceso de hidrocraqueo catalítico, el objetivo es detallar las propiedades fisicoquímicas mediante el estudio *in silico* que aporta la química computacional. Partiendo de cada molécula química que se encontró de acuerdo a la investigación bibliográfica se determinó cuál es su nomenclatura en formato científico internacional IUPAC, fórmula molecular, propiedades químicas básicas como peso molecular y composición elemental mediante el uso del software *Avogadro*. Al generar las propiedades fisicoquímicas de cada compuesto, estos serán organizados para tabularlos, procesarlos, discutirlos y finalmente realizar conclusiones y recomendaciones de acuerdo al comportamiento y características propias de estas moléculas orgánicas que se encuentran en las corrientes entrada y salida del proceso de hidrocraqueo catalítico.

Palabras clave:

- **HIDROCRAQUEO CATALÍTICO**
- **ENERGÍA DE OPTIMIZACIÓN**
- **PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS**
- **ESTUDIO *IN SILICO***
- **INTERACCIONES INTERMOLECULARES**

Abstract

Petroleum is a mixture of hydrocarbons, which the different boiling points can be separated into fractions. In a refinery this principle is applied to be able to extract the main derivatives such as gasoline, diesel, kerosene and fuel oil, to obtain a greater quantity of these derivatives, the catalytic hydrocracking process is implemented that allows the heavy fractions of oil to be transformed into lighter products, breaking the C-C bonds with the presence of hydrogen. This research is focused on the analysis of the organic chemical molecules present in all the input and output streams of the catalytic hydrocracking process, the objective is to detail the physicochemical properties through the study *in silico* provided by computational chemistry. Starting from each chemical molecule that was found according to the bibliographic research, its nomenclature in IUPAC international scientific format, molecular formula, basic chemical properties such as molecular weight and elemental composition was determined by using the Avogadro software. When generating the physicochemical properties of each compound, they will be organized to tabulate, process, discuss and finally make conclusions and recommendations according to the behavior and characteristics of these organic molecules found in the inlet and outlet streams of the catalytic hydrocracking process.

Key words:

- **CATALYTIC HYDROCRACKING**
- **OPTIMIZATION ENERGY**
- **PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES**
- ***IN SILICO* STUDY**
- **INTERMOLECULAR INTERACTIONS**

Capítulo 1

1. Introducción

1.1. Antecedentes

En base a los descubrimientos y al principio de la mecánica cuántica, los primeros cálculos teóricos en química fueron desarrollados por Walter Heitler y Fritz London en el año de 1927. Durante la década de 1930 se desarrollaron los primeros métodos aproximados a la mecánica cuántica para moléculas, lo que llevo a cabo cierto éxito en el modelado del comportamiento electrónico en moléculas de muchos electrones (Cramer, 2004).

Eric Hückel desarrolló un modelo orbital molecular rudimentario para el comportamiento de los electrones en polienos orgánicos. A finales de la década de 1930 y principios de la de 1940 se desarrollaron las primeras computadoras digitales electrónicas y, después de la Segunda Guerra Mundial, su uso extendió significativamente la aplicación de los principios de la mecánica cuántica y clásica ante los problemas químicos (Leach, 2001).

Seguidamente, después de la formulación de la mecánica cuántica en el año de 1927, Douglas Hartree publicó varios artículos en base a soluciones manuales en calculadoras para átomos de rubidio y cloro (Leszczynski, 2012). A partir de 1928, un "primer principio" o un enfoque *ab initio* de la química requería resolver la ecuación de Schrödinger utilizando máquinas calculadoras de manivela, en donde se examinaron que las soluciones a la ecuación de Schrödinger duplicaban cuantitativamente las características observadas experimentalmente de sistemas simples como el átomo de helio y la molécula de hidrógeno (Council, 1995).

Desafortunadamente, esta ecuación no se pudo resolver exactamente para moléculas o átomos multielectrónicos, por lo que se requirió desarrollar una serie de métodos matemáticos que hicieran posibles soluciones computarizadas aproximadas de la ecuación (Council, 1995). En la década de 1950, con la aparición de las computadoras digitales, se estaban realizando serios intentos para obtener información cuantitativa altamente precisa sobre el comportamiento químico de las moléculas mediante aproximaciones numéricas a la solución de la ecuación de Schrödinger.

Con el avance de la Química Computacional y su posterior desarrollo, se dio un nuevo paso en el progreso de la química que requería visualizar los átomos y enlaces en las moléculas. Los primeros programas computacionales que se diseñaron a inicios de 1970 (ATMOL, GAUSSIAN, IBMOL y POLYAYTOM) reivindicaban una interfaz gráfica para representar las moléculas. De esta forma, nuevos visualizadores comenzaron a figurar en demanda de la necesidad de observar no solo la geometría molecular, sino también sus propiedades electrónicas a través de la ejecución del cálculo computacional (Torres et al., 2017).

1.2. Planteamiento del problema

Algunas de las propiedades de las moléculas se pueden obtener computacionalmente y con mayor facilidad que por medios experimentales. Los programas de química computacional actualizados contienen los avances científicos más destacados, enfocados en caracterizar y predecir la estructura, estimar las posibles y potenciales interacciones intra e intermoleculares en un sistema químico y explicar los mecanismos y proceso químicos generales a nivel atómico y molecular, y así lograr interpretar el comportamientos tales como el punto de ebullición y volatilidad, que permita crear un proceso de refinación más eficiente, menos costoso o más sencillo.

Es conveniente mencionar que la industria petrolera es de vital importancia para las sociedades industriales modernas, por lo que se considera una industria crítica en la mayoría de las naciones, por ende, debe estar regido a disposiciones legales de acuerdo a las leyes y reglamentos de protección del medio ambiente y de seguridad del país.

1.3. Justificación e importancia

La formación del estudiante de la carrera de petroquímica de la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE extensión Latacunga, considera dentro de su malla curricular asignaturas como química orgánica, química general, refinería y biorefinería y legislación petrolera, por lo tanto, el perfil profesional de un petroquímico se encuentra vinculado a conocimientos teóricos y prácticos en áreas de procesos químicos y petroquímicos. Bajo estos conocimientos adquiridos, el profesional debe ser capaz de investigar problemáticas que se generan en su área de trabajo y cumplir con el rol de dar solución, gestión, fiscalización y llevar a cabo procesos individuales dentro de la industria del petróleo, dando un principio a la química pura aplicada y empleando una gran variedad de técnicas teóricas en constante desarrollo.

1.4. Objetivos

1.4.1. Objetivo general

Determinar computacionalmente las características fisicoquímicas de todas las posibles moléculas químicas orgánicas de las corrientes de entrada y salida en una refinería de petróleo “proceso de hidro craqueo catalítico” mediante cálculos teóricos computacionales.

1.4.2. Objetivos específicos

Establecer una lista de potenciales moléculas químicas orgánicas presentes en la corriente de entrada del proceso de hidrocraqueo catalítico.

Establecer una lista de potenciales moléculas químicas orgánicas presentes en la corriente de salida del proceso de hidrocraqueo catalítico.

Procesar cada una de las moléculas químicas orgánicas, desde su nomenclatura, estructura química 2D, código SMILES y reporte de propiedades químicas básicas como fórmula molecular, peso molecular y composición elemental.

Calcular las propiedades fisicoquímicas básicas de cada una de las moléculas químicas orgánicas, mediante la plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática “SwissADME”.

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

Reportar mediante tablas todos los datos obtenidos para cada una de las moléculas químicas orgánicas procesadas en los pasos anteriores.

1.5. Hipótesis

El estudio *in silico* de moléculas químicas orgánicas presentes en las corrientes de entrada y salida del proceso de “hidrocraqueo catalítico” en una refinería de petróleo proveerá información importante acerca de las configuraciones, conformaciones y potenciales interacciones intra e intermoleculares que se hacen presentes en las diferentes fracciones de mezcla de sus derivados, proyectando así, propiedades generales tales como puntos de ebullición y volatilidad, los cuales será analizado por programas químicos informáticos de propiedades fisicoquímicas y energéticas,

generando un vínculo entre la teoría de la química pura aplicada y los ensayos medibles *in situ*.

1.6. Variables de la investigación

1.6.1. Variables Independientes

Posibles y potenciales interacciones intra e intermoleculares.

1.6.2. Variables Dependientes

Propiedades de las mezclas (punto de ebullición, volatilidad).

Capítulo 2

2. Fundamentación teórica

2.1. Petróleo

Petróleo es una mezcla de hidrocarburos en estado gaseoso, líquido y sólidos que se encuentran en depósitos de rocas sedimentarias, también contiene pequeñas cantidades de nitrógeno, oxígeno, azufre, metales y otros elementos. Es una mezcla de componentes con distintos puntos de ebullición y pueden ser separados por fracciones mediante la destilación, la Tabla 1 muestra las fracciones de petróleo con los rangos de puntos de ebullición. Los componentes que contienen metales como el vanadio y níquel, generalmente se encuentran en tipos de petróleo más viscosos en cantidades de hasta varios miles de partes por millón y pueden generar graves consecuencias durante el procesamiento de estas materias primas (Speight & Ozum, 2001).

Tabla 1

Rangos generales de ebullición de las fracciones de petróleo

Fracción	Temperatura de ebullición (°C)
Nafta ligera	-1—150
Gasolina	-1—180
Nafta pesada	150—205
Keroseno	205—260
Gasoil liviano	260—315
Gasoil pesado	315—425
Aceite lubricante	> 400
Gasoil al vacío	425—600
Residuos	>600

Nota. Recuperado de *Petroleum Refining Process* (p. 4), J. Speight, & B. Ozum, 2001, CRC Press.

2.1.1. Composición molecular del petróleo

Los hidrocarburos son los principales componentes del petróleo, están compuestos de carbono e hidrógeno que presentan variaciones en su estructura molecular. Los hidrocarburos más simples son aquellos grupos de moléculas en forma de cadena conocidas como parafinas, los hidrocarburos saturados que contienen un anillo son conocidos como naftenos, constituidos por líquidos volátiles como la nafta hasta sustancias de alto peso molecular como lo son los asfaltenos. Otro grupo de hidrocarburos estructurados con un anillo aromático único, se conoce como aromáticos. El principal compuesto de los aromáticos es el benceno, es la materia prima para la fabricación de productos petroquímicos. Los compuestos considerados como impurezas son aquellos que contienen en su estructura elementos químicos como el azufre, nitrógeno, oxígeno y metales como el níquel y el vanadio (Speight & Ozum, 2001).

a. Parafinas

Las parafinas son conocidas como alcanos, son compuestos saturados que tienen la siguiente fórmula general C_nH_{2n+2} , donde n es el número de átomos de carbono. Las parafinas normales (n -parafinas o n -alcanos) son largas cadenas de moléculas sin ramificaciones (Fahim et al., 2010).

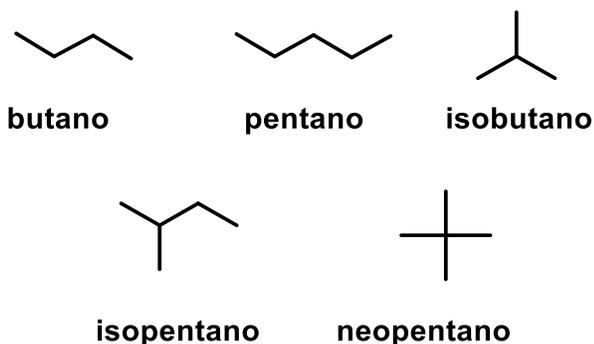
Las isoparafinas o isoalcanos son hidrocarburos de tipo ramificado que presentan isomerización en su estructura. La isomerización estructural ocurre cuando dos moléculas tienen los mismos átomos, pero diferentes enlaces, es decir que tienen la misma fórmula, pero diferentes arreglos entre átomos, se los conoce como isómeros. La Tabla 2 muestra el nombre, fórmula molecular y estructural y número de isómeros para las seis primeras parafinas (Fahim et al., 2010). La Figura 1 muestra la estructura bidimensional para el butano, pentano, isobutano, isopentano y neopentano.

Tabla 2*Nombres y fórmulas para las parafinas*

Nombre	Número de átomos de carbono	Fórmula molecular	Fórmula estructural	Número de isómeros
Metano	1	CH ₄	CH ₄	1
Etano	2	C ₂ H ₆	CH ₃ CH ₃	1
Propano	3	C ₃ H ₈	CH ₃ CH ₂ CH ₃	1
Butano	4	C ₄ H ₁₀	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₃	2
Pentano	5	C ₅ H ₁₂	CH ₃ (CH ₂) ₃ CH ₃	2
Hexano	6	C ₆ H ₁₄	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃	5

Nota. Recuperado de *Fundamentals of petroleum refining* (p. 13), M. Fahim, T. A.

Alsahhaf & A. Elkilani, 2010, Elsevier.

Figura 1*Estructura química para compuestos con enlace simple*

Nota. Elaborado en el software "Chemdraw".

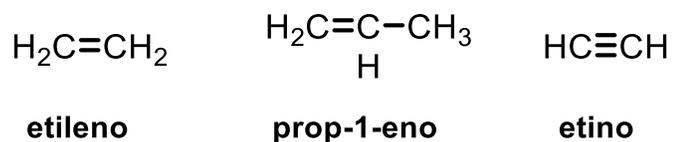
b. Olefinas

Las olefinas, también conocidas como alquenos, son hidrocarburos insaturados con dobles enlaces entre carbono-carbono. Los compuestos con triples enlaces entre carbono-carbono son conocidos como acetilenos, biolefinas o alquinos. Su fórmula general es C_nH_{2n}, su estructura puede tener doble o triple enlace, estos dobles enlaces

se los conoce como dienos (Fahim et al., 2010). La Figura 2 muestra la estructura química bidimensional del etileno, prop-1-eno y etino.

Figura 2

Estructura química para compuestos con doble y triple enlace



Nota. Elaborado en el software “Chemdraw”.

c. Naftenos (cicloalcanos)

Los naftenos, conocidos como cicloalcanos, son hidrocarburos saturados que poseen al menos un anillo de átomos de carbono, su fórmula general es C_nH_{2n} , un ejemplo común es el ciclohexano. El punto de ebullición y las densidades de los naftenos son superiores que los de los alcanos que tienen el mismo número de átomos de carbono (Fahim et al., 2010). La Figura 3 muestra la estructura química bidimensional del ciclohexano.

Figura 3

Estructura química para el ciclohexano



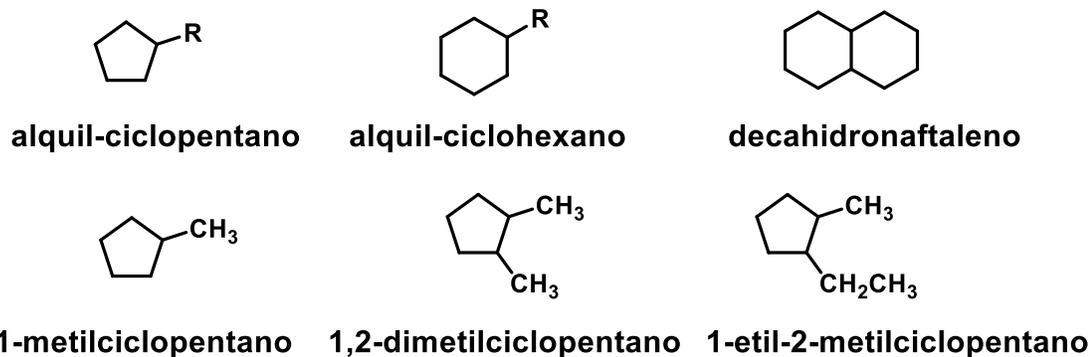
Nota. Elaborado en el software “Chemdraw”.

Los naftenos presentes en el petróleo son anillos con cinco o seis átomos de carbono, con posibles sustituyentes alquilo. Los naftenos con múltiple anillo están

presentes en los cortes pesados del petróleo la Figura 4 indica la estructura química bidimensional de algunos ejemplos de naftenos (Fahim et al., 2010).

Figura 4

Estructura química para compuestos con estructura cíclica



Nota. Elaborado en el software “Chemdraw”.

d. Aromáticos

Los aromáticos son compuestos cíclicos insaturados estructurados por uno o más anillos de benceno. Las fracciones de petróleo ligero contienen mono aromático, que tienen un anillo de benceno con uno o más de los átomos de hidrógeno sustituidos por otro átomo o grupos alquilo, estos compuestos son el tolueno y xileno (Fahim et al., 2010). La Figura 5 indica la estructura química bidimensional para el benceno.

Figura 5

Estructura química para el benceno



Nota. Elaborado en el software “Chemdraw”.

Los cortes ligeros del petróleo contienen compuestos mono aromáticos, la Figura 6 muestra la estructura química bidimensional de compuestos mono aromáticos tales como el tolueno, estireno y o-xileno, se usan como materia prima para productos petroquímicos y la presencia de estos compuestos en la gasolina mejora su octanaje (Fahim et al., 2010).

Figura 6

Estructura química para el tolueno, estireno y o-xileno

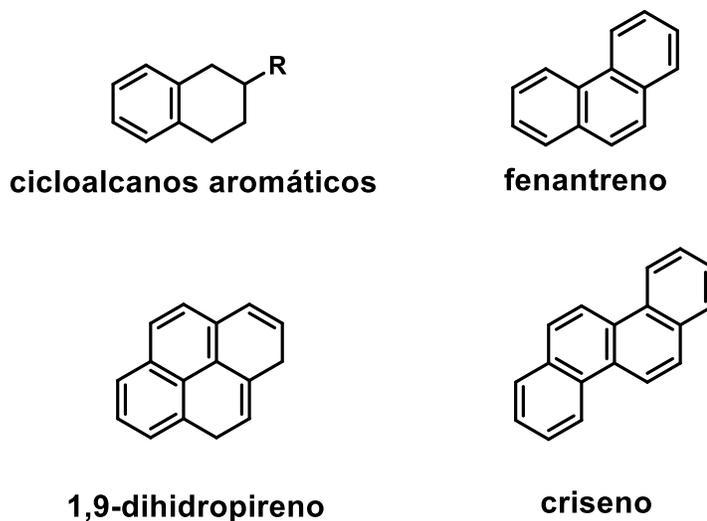


Nota. Elaborado en el software "Chemdraw".

Los compuestos aromáticos complejos consisten en varios anillos de benceno "fusionados", la Figura 7 muestra la estructura química bidimensional para compuestos aromáticos complejos. Se encuentran en los cortes de petróleo pesado y su presencia es indeseable porque provocan la desactivación del catalizador y la deposición de coque en el procesamiento, además de causar problemas ambientales cuando están presentes en el diésel y los fuelóleos. Los cortes más pesados del petróleo contiene asfaltenos, que son compuestos aromáticos polinucleares condensados de estructura compleja (Fahim et al., 2010).

Figura 7

Estructura química para aromáticos complejos



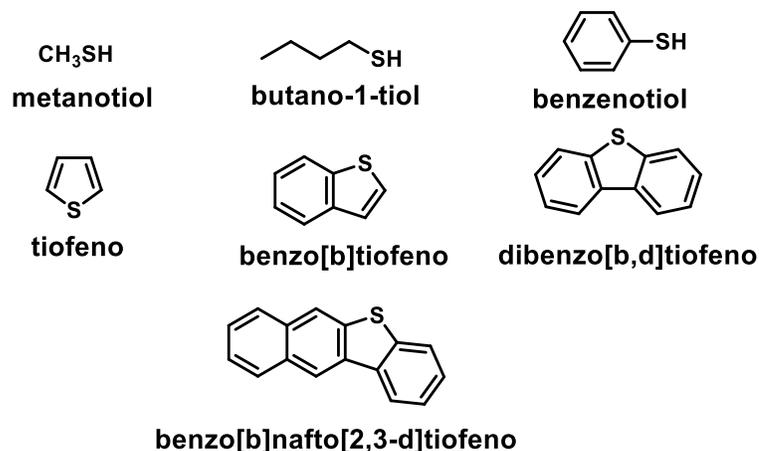
Nota. Elaborado en el software “Chemdraw”

e. Compuestos con azufre

El petróleo contiene heteroátomos de azufre, ácido sulfhídrico H_2S , sulfuro de carbonilo COS , formas inorgánicas y, lo que es más importante, formas orgánicas, en las que los átomos de azufre se colocan dentro de las moléculas de hidrocarburos orgánicos. Los componentes que contienen azufre varían desde los mercaptanos simples, conocidos como tioles, hasta los sulfuros y los sulfuros policíclicos. Los mercaptanos están conformados por una cadena de alquilo con un grupo $-SH$ al final ($R-SH$) (Fahim et al., 2010). La Figura 8 muestra la estructura química bidimensional para compuestos con azufre.

Figura 8

Estructura química para compuestos con azufre



Nota. Elaborado en el software “Chemdraw”.

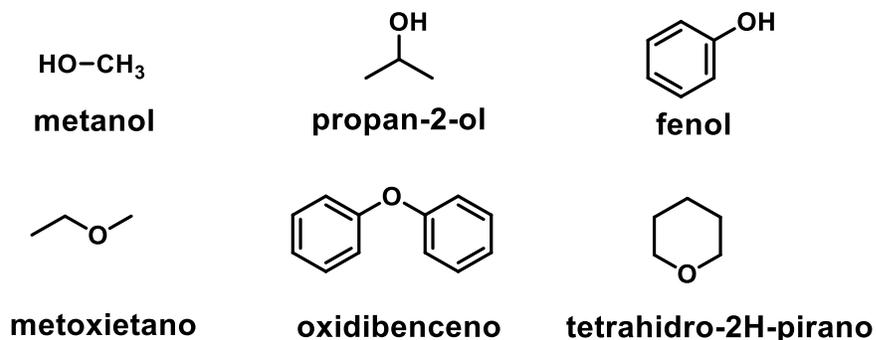
f. Compuestos con oxígeno

El oxígeno en el petróleo puede presentarse de múltiples formas. Estos incluyen alcoholes, éteres, ácidos carboxílicos, compuestos fenólicos, cetonas, ésteres y anhídridos. La presencia de tales compuestos hace que el crudo sea ácido con los consiguientes problemas de procesamiento como la corrosión (Fahim et al., 2010).

Los alcoholes tienen la fórmula general de R-OH y son estructuralmente similares al agua, pero con uno de los átomos de hidrógeno reemplazado por un grupo alquilo. En los fenoles, uno de los átomos de hidrógeno del anillo aromático se reemplaza por un grupo hidroxilo (-OH). Los éteres tienen dos grupos orgánicos conectados a un solo átomo de oxígeno (R-O-R') (Fahim et al., 2010). La Figura 9 muestra la estructura química bidimensional para los compuestos con sustituyentes mencionados.

Figura 9

Estructura química para compuestos con grupos funcionales -OH y R-O-R'.

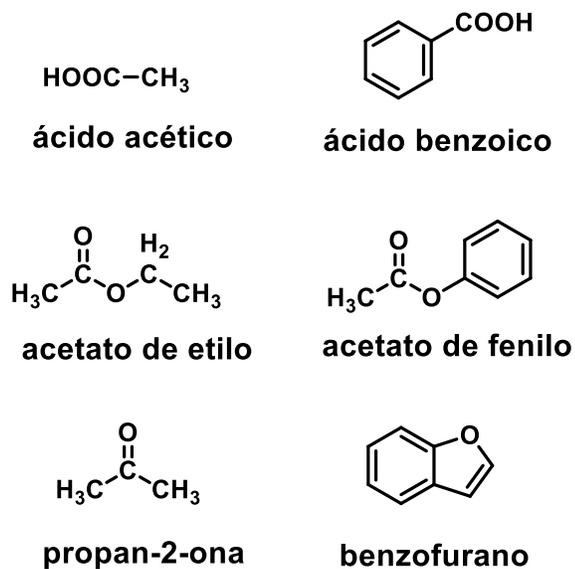


Nota. Elaborado en el software “Chemdraw”.

Los ácidos carboxílicos tienen grupos funcionales (-COOH). Los ésteres de ácido carboxílico están formados por grupos funcionales (-COOR). Las cetonas poseen grupos funcionales ($\text{R}_1(\text{CO})\text{R}_2$). Los furanos son heteroaromáticos de 5 miembros y el benzofurano es un furano condensado con un anillo aromático (Figura 10).

Figura 10

Estructura química para compuestos con grupos ($\text{R}_1(\text{CO})\text{R}_2$), -COOH y -COOR



Nota. Elaborado en el software “Chemdraw”.

g. Compuestos con nitrógeno

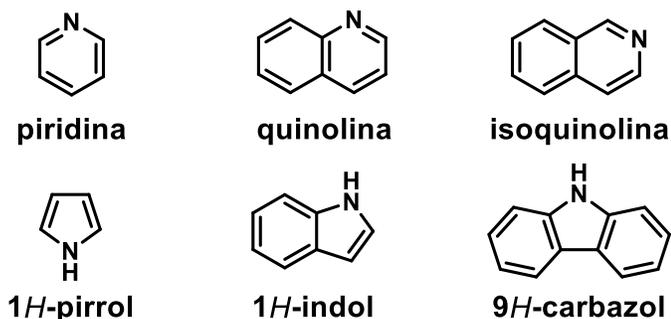
El petróleo contiene cantidades muy bajas de compuestos nitrogenados. Mientras más asfáltico es el aceite, mayor es su contenido de nitrógeno. Son más estables que los compuestos de azufre y, por lo tanto, son más difíciles de eliminar. Aunque están presentes en concentraciones muy bajas, los compuestos de nitrógeno tienen una gran importancia en las operaciones de refinería (Fahim et al., 2010).

Se clasifican en básicos o no básicos. Los compuestos nitrogenados básicos consisten en piridinas. La mayor parte del nitrógeno en el petróleo son los compuestos nitrogenados no básicos, que generalmente son de tipo pirrol. Las piridinas son compuestos heteroaromáticos de seis miembros que contienen un átomo de nitrógeno. Al reaccionar con benceno, las piridinas se convierten en compuestos heteroaromáticos policíclicos, quinolinas e isoquinolinas (Fahim et al., 2010).

Para los compuestos nitrogenados no básicos, los pirroles son compuestos heteroaromáticos de cinco miembros que contienen un átomo de nitrógeno. Al reaccionar con el anillo de benceno, el pirrol se convierte en los compuestos heteroaromáticos policíclicos que son el indol y carbazol (Fahim et al., 2010).

Figura 11

Estructura química para compuestos con nitrógeno



Nota. Elaborado en el software “Chemdraw”.

h. Compuestos metálicos

Los compuestos metálicos presentes en el petróleo se encuentran en cantidades muy pequeñas. Es necesario reducir la concentración para evitar problemas operativos como la contaminación de productos, envenenamiento de catalizadores en el hidroprocesamiento y craqueo. El zinc, titanio, calcio y magnesio aparecen en forma de jabones organometálicos mientras que el vanadio, el níquel, el cobre y el hierro están presentes como compuestos solubles en aceite, capaces de formar complejos con compuestos de pirrol (Fahim et al., 2010).

i. Asfaltenos y resinas

Los asfaltenos son sólidos de color marrón oscuro que no tienen un punto de fusión definido y generalmente dejan residuos carbonosos al calentarlos. Están formados por capas aromáticas polinucleares condensadas unidas por enlaces saturados. Estas capas se pliegan, generando una estructura sólida conocida como micela. Los asfaltenos se separan del petróleo en el laboratorio utilizando disolventes no polares por ejemplo el pentano y *n*-heptano (Fahim et al., 2010).

Las resinas son moléculas polares con pesos moleculares entre 500 a 1000, son insolubles en propano líquido pero solubles en *n*-heptano, son responsables de disolver y estabilizar las moléculas sólidas de asfaltenos en el petróleo. Las moléculas de resina rodean los racimos de asfaltenos (micelas) y los suspenden en aceite líquido. Debido a que cada asfalteno está rodeado por una serie de moléculas de resina, el contenido de resinas en los petróleos crudos es mayor que el de los asfaltenos (Fahim et al., 2010).

2.2. Refinería petrolera

La refinación del petróleo toma un rol importante en el desarrollo de la sociedad. La mayor parte de los vehículos de transporte funcionan con productos refinados del

petróleo como la gasolina, diésel, queroseno y fueloil, debido a su bajo costo. En una refinería los procesos de refinación se clasifican en separación física y conversión química. La separación física incluye los procesos de destilación, desasfaltado con disolvente, extracción con disolventes y desparafinado con disolventes. La conversión química mediante el uso de catalizadores incluye los procesos de reformado, hidrotratamiento, hidrocrqueo, alquilación e isomerización y la conversión química por accionar térmico incluye el *delayed coking*, *flexicoking* y *visbreaking* (Fahim et al., 2010).

2.2.1 Hidrocrqueo catalítico

a. Introducción de Hidrocrqueo

El hidrocrqueo mejora las fracciones más pesadas obtenidas de la destilación del petróleo. Se utiliza para mejorar algunos de los productos obtenidos como el gasoil de coquización, aceite desasfaltado, aceites del ciclo de craqueo catalítico fluido (FCC) y fondos de torres. También se utiliza para mejorar destilados y bases de aceites lubricantes mediante la eliminación de parafinas de cadena larga (desparafinado) (Scherzer & Gruia, 1996).

El hidrocrqueo es similar al craqueo catalítico, con la hidrogenación superpuesta y con las reacciones que tienen lugar de forma simultánea o secuencial. Los procesos modernos de hidrocrqueo fueron creados con el objetivo de convertir materias primas refractarias (gasoil) a gasolina y combustibles para avión, pero al mejorar el proceso y utilizar catalizadores se ha logrado convertir los gases y nafta a aceites de horno y materia prima para el craqueo catalítico (Speight, 2017).

El hidrocrqueo transforma las fracciones pesadas del petróleo en productos más ligeros mediante el rompiendo los enlaces C-C en presencia de hidrógeno. Las

unidades de hidrocrqueo con reactores de lecho fijo procesan las corrientes de VGO con rangos de ebullición similares, aceites del ciclo de FCC (craqueo catalítico fluido), gasóleos de coquización, aceites desasfaltados, etc. Todas las unidades comerciales consumen hidrógeno a alta presión de 100-200 bar y generan un calor considerable (Chang & Robinson, 2017).

Las corrientes del hidrocrqueo catalítico están divididas en cortes de nafta ligera-pesada, aceite ligero-pesado, gasoil al vacío ligero-pesado, residuos al vacío, la Tabla 3 indica los tipos de moléculas químicas presentes en la alimentación de la unidad de hidrocrqueo catalítico (Chang & Robinson, 2017).

Tabla 3

Tipos de compuestos químicos presentes en la alimentación de la unidad de hidrocrqueo catalítico

Moléculas químicas
Parafinas (normales-iso)
Aromáticos (mono, di, tri, etc.)
Naftenos (mono, di, tri, etc.)
Olefinas
Alquil aromáticos
Compuestos con azufre (sulfuros, disulfuros, mercaptanos, tiofenos, benzotiofenos, etc.)
Compuestos con nitrógeno (aminas, piroles, quinolinas, carbazoles, etc.)
Compuestos con oxígeno (ácidos nafténicos, cresoles, etc.)

Nota. Recuperado de *Springer Handbook of Petroleum Technology* (C. S. Hsu & P. R. Robinson (Eds.)) (p. 734), por S. Chang & P. Robinson, 2017, Springer.

El hidrocrqueo juega un papel importante como uno de los principales procesos en una refinería, como se muestra en la siguiente Figura 12. Se utiliza principalmente para producir destilados medios de bajo contenido en azufre como el queroseno y el diésel. Se ha aplicado a las plantas de aceite lubricante y ha reemplazando

gradualmente el antiguo desparafinado con solvente y extracción con solvente aromático (Fahim et al., 2010).

b. Alimentación y productos en el hidrocrqueo catalítico

La alimentación de la unidad de hidrocrqueo catalítico está compuesta por varias entradas como demuestra la Tabla 4 con sus respectivos productos. Las entradas para la unidad de hidrocrqueo catalítico provienen de unidades como la destilación atmosférica, destilación al vacío, desasfaltado, coquizado, FCC, etc.

Tabla 4

Alimentación y productos usuales en la unidad de hidrocrqueo catalítico

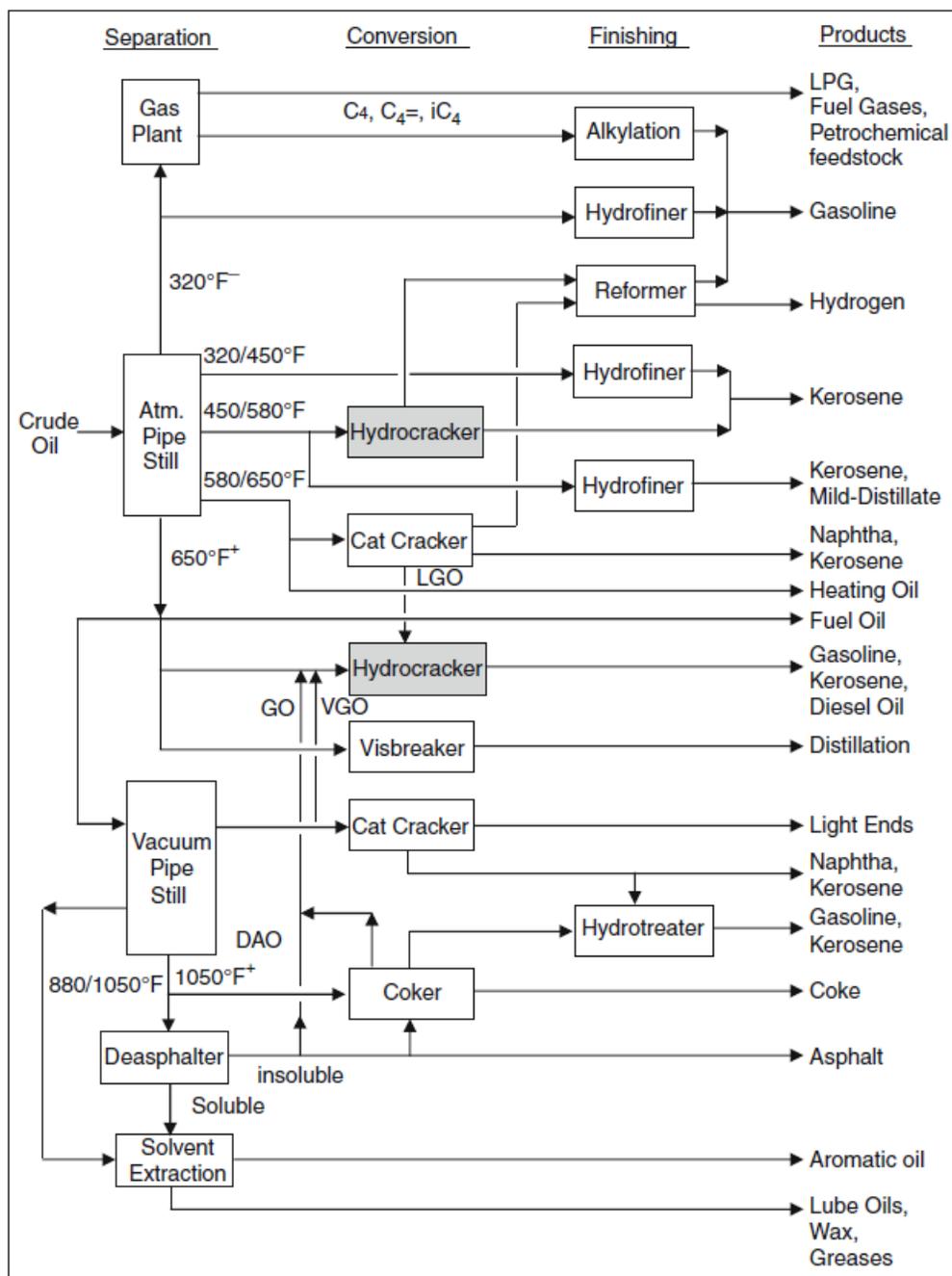
Alimentación	Productos
Queroseno	Nafta
Corriente directa de diésel	Nafta y/o combustibles para aviones
Gasoil atmosférico	Nafta, combustibles para aviones y/o diésel
Gasoil de vacío	Nafta, combustibles para aviones, diésel, aceite lubricante
FCC LCO	Nafta
FCC HCO	Nafta y/o destilados
Coquizado LGO	Nafta y/o destilados
Coquizado HGO	Nafta y/o destilados
Aceite desasfaltado	Materias primas para plantas de olefinas

Nota. Recuperado de *Fundamentals of petroleum refining* (p. 82), M. Fahim, T. A.

Alsahhaf & A. Elkilani, 2010, Elsevier.

Figura 12

Rol de la unidad de hidrocraqueo en una refinería



Nota. Recuperado de *Fundamentals of petroleum refining* (p. 81), M. Fahim, T. A.

Alsahhaf & A. Elkilani, 2010, Elsevier.

c. Reacciones químicas en el hidrocraqueo

c.1. Hidrocraqueo de alcanos

Esquema 1

Reacción de hidrocraqueo de alcanos

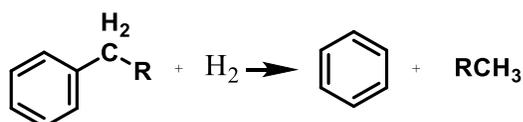


Nota. Elaborado en el software "Chemdraw".

c.2. Hidrodealquilación

Esquema 2

Reacción de hidrodealquilación



Nota. Elaborado en el software "Chemdraw".

c.3. Apertura de anillos

Esquema 3

Reacción de apertura de anillos



Nota. Elaborado en el software "Chemdraw".

c.4. Hidroisomerización

Esquema 4

Reacción de hidroisomerización

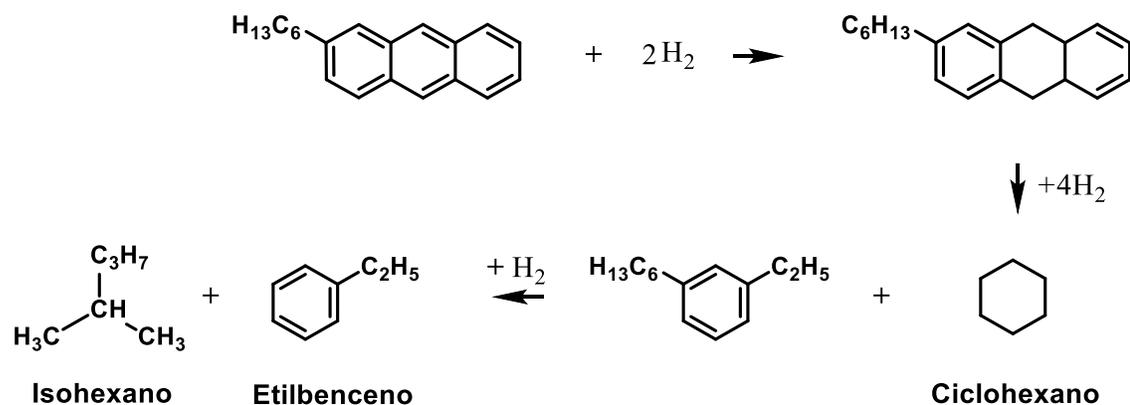


Nota. Elaborado en el software "Chemdraw".

c.5. Hidrocraqueo de aromáticos polinucleares

Esquema 5

Reacción de hidrocraqueo de aromáticos polinucleares



Nota. Elaborado en el software "Chemdraw".

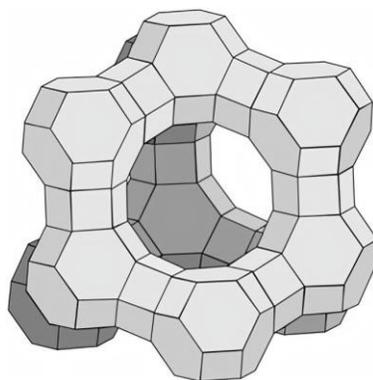
d. Catalizadores empleados en el hidrocraqueo catalítico

Los catalizadores en el hidrocraqueo se clasifican según su función. Los catalizadores con soporte ácido tienen la función de fraccionamiento de la molécula, los catalizadores que están provistos por un metal activo tienen la función de hidrogenación y deshidrogenación de compuestos químicos. Los soportes ácidos pueden ser óxidos amorfos (sílice-alúmina), zeolita cristalina (zeolita tipo Y modificada) más un aglutinante (alúmina), o una mezcla de zeolita cristalina y óxido amorfo (Fahim et al., 2010). La Figura 13 muestra la estructura del catalizador de zeolita tipo Y.

Los metales provistos para la hidrogenación y deshidrogenación pueden ser los metales nobles (paladio, platino) o los sulfuros de metales no nobles del grupo VI-A (molibdeno, tungsteno), grupo VIII-A (cobalto, níquel). Estos metales catalizan la materia prima de la hidrogenación, haciéndola más reactiva para el craqueo, elimina heteroátomos y reduce la velocidad de coquización (Fahim et al., 2010).

Figura 13

Estructura del catalizador de zeolita tipo Y



Nota. Recuperado de *Catalysts and catalysis for acid–base reactions. In Metal Oxides in Heterogeneous Catalysis* (p.182), por H. Hattori., & Y. Ono., 2018, Elsevier.

2.3. Química computacional

La química computacional se define ampliamente como el intento de modelar fenómenos químicos y bioquímicos (estructura, propiedades, reactividad, etc.) mediante la aplicación informática de los principios teóricos de la física mecánica clásica y cuántica (Lipkowitz & Boyd, 1990).

Es ampliamente utilizada en el modelado y simulación por computadora de sistemas como biomoléculas, polímeros y moléculas orgánicas e inorgánicas (Ramachandran et al., 2008). Algunas propiedades de las moléculas se pueden obtener computacionalmente y con mayor facilidad que por medios experimentales, por lo tanto,

muchos químicos experimentales ahora utilizan modelos computacionales para la predicción de propiedades químicas y físicas de compuestos empleando computadoras (Young, 2001).

2.3.1. Modelos computacionales

Un modelo es una forma fácil de describir y predecir resultados científicos, pueden ser descripciones matemáticas simples o elementos visuales completamente no matemáticos, son muy útiles porque nos permiten predecir y comprender fenómenos sin realizar las complejas manipulaciones matemáticas dictadas por una teoría rigurosa (Ramachandran et al., 2008).

Los modelos computacionales son parte importante de la investigación científica al igual que las simulaciones numéricas, se utilizan en las diferentes asignaturas y ayuda a comprender mejor los experimentos de la vida real y probar la predicción de modelos teóricos. Estos modelos a menudo pueden proveer información valiosa sobre especies químicas que son difíciles de analizar experimentalmente, o explicar ciertos fenómenos desconocidos (Almaraz et al., 2001).

2.4. Optimización de estructuras

La química es una ciencia experimental muy importante de estudiar, ya que muchos conocimientos en este campo se refieren al nivel molecular, en términos de interacciones entre átomos y moléculas individuales, además, se deben vincular las estructuras bidimensionales y tridimensionales de las moléculas con sus propiedades fisicoquímicas como: estados físicos, puntos de ebullición, punto de fusión, densidad y sus propiedades químicas como: número de coordinación, estabilidad química, solubilidad y lipofilia (Dori & Kaberman, 2012).

Las herramientas informáticas que son implementadas en gran parte por investigadores para el modelado, visualización molecular y simulaciones tridimensionales, ayudan a comprender, explicar y predecir ciertos fenómenos químicos y físicos (Rayan & Rayan, 2017).

2.4.1. Avogadro

Una de las herramientas informáticas de gran uso para la optimización de estructuras es el programa “Avogadro” (Figura 14), es un editor y visualizador avanzado de moléculas en 3D diseñado para su uso en química computacional, modelado molecular, bioinformática, ciencia de materiales, entre otras áreas (Hanwell et al., 2012).

Figura 14

Avogadro versión 1.2.0



Nota. Recuperado de *Stack.imgur.*,2021, de <https://i.stack.imgur.com/OTRKw.png>

Es un programa de manipulación simple que hace fácil la visualización en 3D de las moléculas, siendo posible aumentar o disminuir su tamaño, moverlas y girarlas. Entre una de las tantas opciones que presenta el programa, está la herramienta de optimización automática que optimiza continuamente la geometría molecular a través de la mecánica molecular, proporcionando una interfaz interactiva que le permite manipular una molécula mientras se optimiza su geometría al mismo tiempo que calcula la energía de optimización de la molécula propiamente dicha (Cornell & Hutchison, 2015).

La herramienta de optimización automática proporciona varias opciones de campo de fuerza. Los campos de fuerza, se componen de funciones energéticas explícitas que describen las energías potenciales de las interacciones en el sistema químico, es decir, estiramiento del enlace, flexión del ángulo del enlace, rotaciones diédricas (torsiones), interacciones de van der Waals y electrostáticas no enlazadas (Liljefors & Pettersson, 1996).

Avogadro viene equipado con múltiples campos de fuerza diferentes, entre ellos están UFF, Ghemical, MMFF94, MMFF94s. Estos campos de fuerza son construcciones teóricas que tienen como objetivo calcular las energías y geometrías de sistemas químicos sin el tratamiento directo de electrones (Lewis-Atwell et al., 2020).

Sin embargo, la utilización de los diferentes campos de fuerza depende del tipo de molécula que se esté optimizando como lo describe (Cornell & Hutchison, 2015):

- UFF (campo de fuerza universal); este campo de fuerza logra optimizar la geometría de todos los elementos y opera bien con materiales inorgánicos y organometálicos.
- Ghemical, funciona aceptablemente al proporcionar geometrías de moléculas de tipo orgánico.
- MMFF94 & MMFF94s (diseñado por Merck), es exclusivamente preciso para moléculas orgánicas. El MMFF94 es referenciado específicamente para alcanos, alquenos, alcoholes, fenoles, éteres, aldehídos, cetonas, cetales, acetales, hemicetales, hemiacetales, aminas, amidas, análogos de péptidos, ureas, imidas, ácidos carboxílicos, ésteres, aniones carboxilato, cationes de amonio, tioles, mercaptanos, disulfuros, haluros (cloruros y fluoruros), iminas, iminio cationes, N-óxidos de amina, hidroxilaminas, ácidos hidroxámicos, amidinas,

guanidinas, cationes amidinio, cationes guanidinio, cationes imidazolio, hidrocarburos aromáticos y compuestos heteroaromáticos.

- GAFF es referenciado específicamente para moléculas orgánicas hechas de C, N, O, H, S, P, F, Cl, Br e I.

2.5. Propiedades químicas básicas

2.5.1. *Peso molecular*

La masa molecular o peso molecular es la suma de las masas atómicas (en una) de una molécula. En general, se multiplica la masa atómica de cada elemento por el número de átomos de ese elemento presente en la molécula. El peso molecular se abrevia comúnmente por MW (Chang & Goldsby, 2017).

2.5.2. *Fórmula molecular*

Las propiedades de una sustancia dependen de los átomos que contiene y de la forma en que éstos están conectados, la fórmula molecular indica el número de átomos de cada elemento que presenta en cada unidad del compuesto (Chang, 2010). Por ejemplo, H_2 es la fórmula molecular del hidrógeno, O_2 representa al oxígeno, O_3 es el ozono y H_2O representa al agua. El subíndice numérico indica el número de átomos de cada elemento que están presentes, además, a partir de la fórmula molecular es posible calcular el porcentaje con que contribuye cada elemento a la masa total del compuesto (Carey, 2006).

2.5.3. *Composición elemental*

El análisis elemental es el método clásico para obtener información sobre la composición elemental de una sustancia desconocida, investiga cuáles son los elementos integrantes de una sustancia pura y la proporción en que se hallan

combinados. Es cualitativo y cuantitativo, cualitativo porque identifica los elementos constitutivos de la sustancia pura y cuantitativo porque determina las proporciones en que se hallan combinados los elementos en dicha sustancia (Sellergren & Hall, 2001).

2.6. Propiedades fisicoquímicas

La Plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME” es una herramienta web gratuita, que permite calcular algunas propiedades fisicoquímicas de moléculas bioactivas, como el peso molecular (MW), la refractividad molecular (MR), el recuento de tipos de átomos específicos y el área de superficie polar (PSA) (Daina et al., 2017).

2.7. Lipofilia

La lipofilia es un parámetro fisicoquímico, generalmente conocida como LogP, representa la relación en equilibrio de la concentración de un compuesto entre dos fases, una fase oleosa y una líquida (Lyubimov et al., 2012). Este parámetro determina la solubilidad, reactividad y degradación de moléculas bioactivas (Rutkowska et al., 2012). En “SwissADME”, el coeficiente de partición entre *n*-octanol y agua ($\log_{P_{o/w}}$) es el descriptor típico para la lipofilia, obtenido en base a muchos métodos computacionales para la estimación de ($\log_{P_{o/w}}$) con rendimiento diverso en varios conjuntos químicos (Daina et al., 2017).

Este parámetro tiene acceso a cinco modelos predictivos disponibles como son: XLOGP3, un método atomístico que incluye factores correctivos y una biblioteca basada en el conocimiento (Cheng et al., 2007); WLOGP, un método puramente atomístico basado en el sistema fragmentario de Wildman y Crippen (Wildman & Crippen, 1999); MLOGP, un modelo del método topológico que se basa en una relación lineal con 13 descriptores moleculares (Moriguchi et al., 1992); SILICOS-IT, un método híbrido que se basa en 27 fragmentos y 7 descriptores topológicos y por ultimo iLOGP, un método

interno basado en la física que consiste en energías libres de solvatación en *n*-octanol y agua, calculadas por el modelo de superficie accesible a solventes y de nacimiento generalizado (GB/SA), además, se tiene el promedio ($\log_{P_{o/w}}$) de los valores predichos por los cinco métodos planteados (Daina et al., 2017).

2.8. Solubilidad

Se define como la cantidad máxima de una sustancia que se disolverá en una cantidad determinada de disolvente a una temperatura determinada. Es una propiedad característica de una combinación de soluto-solvente específica y diferentes sustancias tienen solubilidades muy diferentes. La mayoría de las sustancias se vuelven más solubles a medida que aumenta la temperatura, aunque la relación exacta suele ser compleja (McMurry & Castellion, 2003).

En “SwissADME” se incluyen dos métodos topológicos para predecir la solubilidad en agua. El primero es una implementación del modelo ESOL (Delaney, 2004) y el segundo es una adaptación de (Ali et al., 2012), ambos demuestran una buena correlación lineal entre los valores predichos y experimentales ($R^2 = 0,69$ y $0,81$, respectivamente). El tercer predictor de solubilidad fue desarrollado por SILICOS-IT, donde el coeficiente de correlación lineal de este método fragmentario corregido por el peso molecular es $R^2 = 0,75$. Todos los valores predichos son el logaritmo decimal de la solubilidad molar en agua ($\log S$) con unidades de mol/l y mg/ml junto con clases de solubilidad cualitativa (Daina et al., 2017).

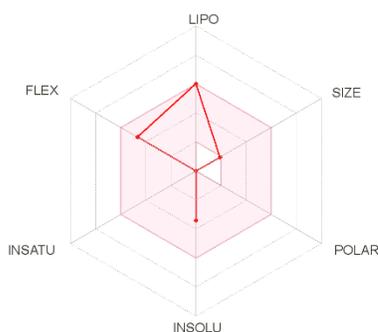
2.9. Radar de estructura química y biodisponibilidad

Indica en qué forma química se calcularon los modelos predictivos y muestra una evaluación rápida de las seis propiedades fisicoquímicas: lipofilia, peso molecular, polaridad, solubilidad, flexibilidad y saturación, cada una está definida por un rango

físicoquímico en cada eje (Figura 15), donde cada propiedad presenta valores óptimos (lipofilia: XLOGP3 entre - 0,7 y + 5,0, tamaño: MW entre 150 y 500 g / mol, polaridad: TPSA entre 20 y 130 Å², solubilidad: log S no superior a 6, saturación: fracción de carbonos en la hibridación sp³ no inferior a 0,25 y flexibilidad: no más de 9 enlaces rotativos) mediante los descriptores adaptados, el cual está representado como un área rosa, área que determina si puede ser o no considerado una molécula bioactiva (Daina et al., 2017).

Figura 15

Radar de estructura química y biodisponibilidad para la molécula de decano

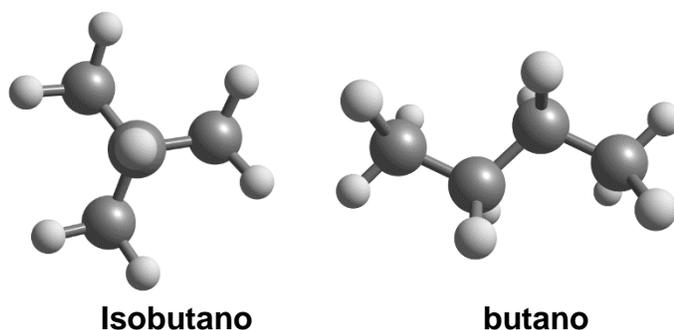


Nota. Obtenido de la Plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME”

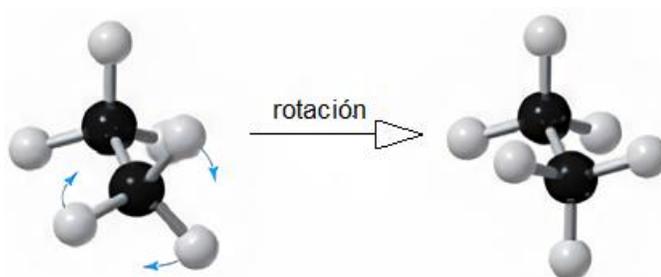
2.10. Propiedades estructurales

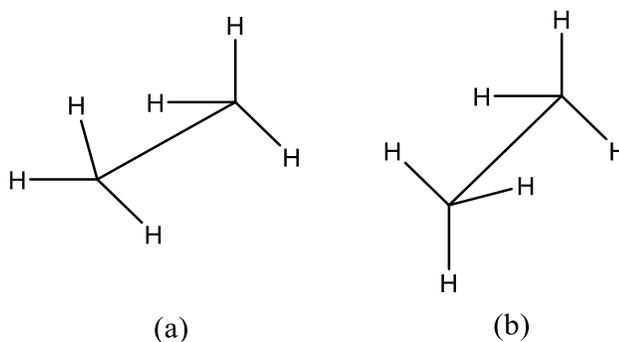
2.10.1. Isómeros

Los isómeros son compuestos diferentes que tienen la misma fórmula molecular, tienen el mismo número y tipos de átomos dispuestos de manera diferente (Figura 16). Debido a que sus estructuras son diferentes, los isómeros tienen diferentes propiedades físicas y químicas (Whitten et al., 2010).

Figura 16*Isómero del C₄H₁₀**Nota.* Obtenido a partir del software “Avogadro”**2.10.2. Conformeros**

Los distintos arreglos que se forman por las rotaciones alrededor de un enlace sencillo se conocen como conformaciones, y a una conformación específica se le llama *conformero* o también *isómero conformacional* (Figura 17). En la mayoría de los casos no es posible aislar conformeros puros, ya que las moléculas giran rápida y constantemente entre todas las conformaciones posibles (Wade, 2011). El análisis conformacional es el estudio de la forma en que los factores conformacionales afectan la estructura de una molécula y sus propiedades físicas, químicas y biológicas (Carey, 2006)

Figura 17*Conformaciones del etano: a) Eclipsado; b) Escalonado*



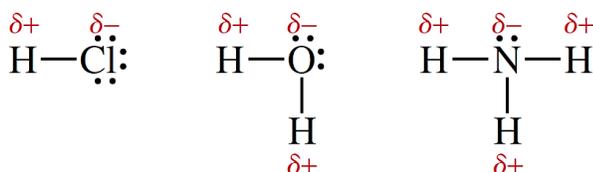
Nota. Obtenido a partir del software “Avogadro” y “Chemdraw”.

2.11. Interacciones intermoleculares

Las interacciones moleculares son fuerzas atractivas o repulsivas entre moléculas y entre átomos no enlazados de un compuesto o de una mezcla, ejercen aún más influencia en las fases condensadas de la materia, es decir, en los líquidos y los sólidos (R. Chang, 2010). Una sustancia existe en forma líquida en lugar de gaseosa debido a que las fuerzas de atracción entre moléculas (fuerzas de atracción intermoleculares), son mayores en la fase líquida que en la fase gaseosa (Carey, 2006).

2.11.1. Polaridad

La polaridad en un enlace covalente se señala con los símbolos $\delta +$ y $\delta -$, que denotan una carga parcialmente positiva y parcialmente negativa, respectivamente (Figura 18). El extremo negativo de enlace corresponde al que tiene al átomo más electronegativo. Cuanto mayor es la diferencia de electronegatividad entre los átomos ligados, más polarizado será el enlace (Yurkanis, 2008).

Figura 18*Polaridad de las moléculas*

Nota. Recuperado de *Química orgánica* (p.12), por P. Yurkanis, 2008, Pearson Educación.

- Enlace covalente polar: es un enlace covalente entre átomos con electronegatividades distintas.



- Enlace covalente no polar: tienen electronegatividades similares y comparten los electrones igualmente, es decir, cada electrón pasó tanto tiempo en vecindad con uno de los átomos como del otro.



2.11.2. Las fuerzas de atracción dipolo-dipolo

Son las fuerzas de atracción entre moléculas polares, es decir, entre moléculas que poseen momentos dipolares, las moléculas de este tipo se organizan de tal forma que el polo positivo de una molécula interactúa con el polo negativo de la molécula vecina (Chang & Goldsby, 2017).

Si sus extremos positivo y negativo se acercan, la interacción es de atracción. Si dos extremos negativos o dos positivos se aproximan, la interacción es de repulsión. En el caso de un líquido o un sólido, las moléculas generalmente orientan sus extremos

positivos y negativos para que estén juntos, y la fuerza neta es de atracción (Wade, 2011).

2.11.3. Las fuerzas dipolo inducido-dipolo inducido

Las fuerzas de atracción dipolo inducido-dipolo inducido con frecuencia se llaman fuerzas de London o fuerzas de dispersión, son las únicas fuerzas de atracción intermoleculares disponibles entre moléculas no polares como los alcanos, y son importantes también en las moléculas polares (Carey, 2006).

Se puede apreciar los efectos de las fuerzas de London en los puntos de ebullición de los hidrocarburos simples. Al comparar los puntos de ebullición de varios isómeros, aquellos con áreas superficiales más grandes (y mayor potencial para una fuerza de atracción de London) tienen puntos de ebullición más elevados, conforme aumenta la cantidad de ramificaciones en la cadena, la molécula se vuelve más esférica y su área superficial disminuye (Wade, 2011).

2.11.4. Las fuerzas dipolo-dipolo inducido

Combinan características tanto de las fuerzas de atracción dipolo inducido-dipolo inducido como de las atracciones dipolo-dipolo. Una región polar de una molécula altera la distribución electrónica en una región no polar de otra en una dirección que produce una fuerza atractiva entre ellas (Carey, 2006).

2.11.5. Puente de hidrógeno

Los puentes de enlaces de hidrógeno se presentan en líquidos cuyas moléculas tienen un átomo de H₂ enlazado covalentemente compuestos que forman enlaces de hidrógeno. Un enlace por puente de hidrógeno no es un verdadero enlace, sino una atracción dipolo-dipolo particularmente fuerte. Un átomo de hidrógeno puede participar

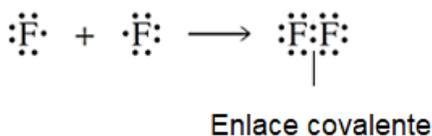
en un enlace por puente de hidrógeno si está enlazado al oxígeno, nitrógeno o flúor (H₂O, HF, NH₃). Los compuestos orgánicos no tienen enlaces H-F por lo que únicamente se considera enlaces por puente de hidrógeno a los enlaces N-H y O-H (Wade, 2011).

2.11.6. Enlace covalente

En enlace covalente se forma como resultado de compartir electrones (Figura 19), dos átomos de flúor pueden formar un enlace covalente al compartir sus electrones y como resultado de un enlace covalente, cada flúor completa una primera capa llena (Yurkanis, 2008).

Figura 19

Formación del F₂ a través de un enlace covalente



Nota. Recuperado de *Química orgánica* (p.10), por P. Yurkanis, 2008, Pearson Educación.

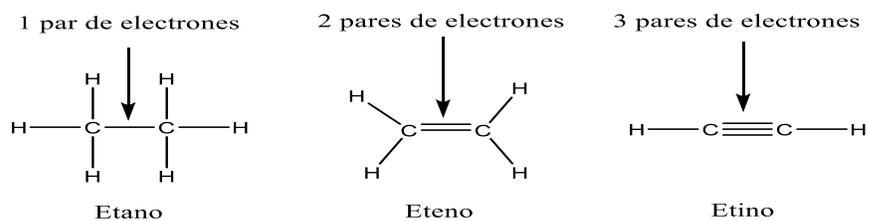
2.11.7. Múltiples enlaces covalentes

En algunas moléculas, más de un par de electrones se comparte entre pares de átomos. Si se comparten cuatro electrones (dos pares) o seis electrones (tres pares), los enlaces se denominan enlaces dobles y triples, respectivamente (Figura 20). Un átomo de carbono puede formar enlaces simples, dobles o triples con otros átomos de carbono, así como con átomos de algunos otros elementos. Los enlaces covalentes simples, dobles y triples unen dos átomos de carbono en etano, etileno y acetileno, respectivamente. Cada átomo de carbono en estos compuestos comparte uno, dos y

tres electrones, respectivamente, con el otro. Los electrones de valencia restantes de los átomos de carbono están contenidos en los enlaces simples con átomos de hidrógeno (Ouellette & Rawn, 2015).

Figura 20

Enlaces covalentes: Simple (etano), Doble(eteno), Triple (etino)



Nota. Obtenido a partir del software “Chemdraw”

Capítulo 3

3. Metodología

La metodología del presente trabajo de investigación inicia con la recopilación de las posibles moléculas químicas orgánicas que se encuentran presentes en las corrientes de entrada y salida del proceso de hidrocrqueo catalítico, mediante revisiones bibliográficas de libros, artículos científicos y patentes relacionados al proceso, posterior a esto, se llevará a cabo el análisis teórico computacional de todas las moléculas obtenidas. Todo este procedimiento se encuentra detallado en las siguientes secciones.

3.1. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en la corriente de entrada en el proceso de hidrocrqueo catalítico.

Las moléculas presentes en la entrada del proceso de hidrocrqueo catalítico fueron reportadas mediante la búsqueda en artículos científicos, libros y patentes. Las corrientes que conforman la alimentación del proceso de hidrocrqueo catalítico fueron reportadas individualmente para una búsqueda más detallada según el proceso de donde provienen.

Las corrientes de alimentación para el proceso de hidrocrqueo catalítico son el queroseno, diésel, gasoil atmosférico, gasoil de vacío, corriente ligera y pesada del craqueo catalítico fluidizado (FCC LCO y FCC HCO), gasoil ligero y pesado de la coquización (LGO y HGO) y aceite desasfaltado (Fahim et al., 2010; Scherzer & Gruia, 1996).

3.1.1. Búsqueda de datos internacionales

Para reportar las moléculas presentes en cada una de las corrientes de entrada del proceso, se llevó a cabo una búsqueda en artículos científicos, libros y patentes donde se menciona el análisis de componentes químicos, dando a conocer el porcentaje en peso, fórmula molecular y nomenclatura química.

a. Gasoil de vacío (VGO)

La corriente de gasoil al vacío presenta un porcentaje en peso de: 9.7% de parafinas, 18% de naftenos, 15.7% de mono aromáticos, 19.3% de di aromáticos, 9.0% de poli aromáticos, 25% azufre y 2.98% de nitrógeno. Estas moléculas se encuentran reportadas en la Tabla A.1 del anexo A (Srinivas et al., 2019).

b. Corriente directa de Queroseno

La corriente directa de queroseno presenta un porcentaje en peso de: 83.7% de parafinas, 15.5% de mono aromáticos, 0.8% de di aromáticos y 0% de tri aromáticos (Vempatapu et al., 2019). La Tabla A.2 del anexo A contiene los compuestos químicos presentes en la corriente de keroseno (Chaudhuri, 2016; Kaltschmitt & Deutschmann, 2012; Saleh, 2016; J. Speight & Wyoming, 2006; Wang et al., 2004; Wauquier, 2004).

c. Corriente directa de Diésel

La corriente directa de diésel presenta un porcentaje en peso de: 55.53% de parafinas, 28.07% de naftenos, 13.64% de aromáticos y 2.75% de resinas (Frantsina et al., 2020) La Tabla A.3 del anexo A contiene los compuestos químicos presentes en la corriente de diésel (Creton et al., 2010; Fahim et al., 2010; Saleh, 2016).

d. Corriente ligera del craqueo catalítico fluidizado (FCC LCO)

La corriente de FCC LCO presenta un porcentaje en peso de: 6.3% de parafinas, 2.4% en naftenos y 91.3% en aromáticos. La Tabla A.4 del anexo A contiene los

compuestos químicos presentes en la corriente (Fahim et al., 2010; Jin et al., 2016; Oh et al., 2019; Pujro, 2014; Rodríguez et al., 2020).

e. Corriente pesada del craqueo catalítico fluidizado (FCC HCO)

La corriente FCC HCO presenta un porcentaje en peso de: 13.6% de parafinas, 16.3% de cicloalcanos, 67.8% de aromáticos y 2.3% de resinas (Fang et al., 2019). La Tabla A.5 del anexo A contiene los compuestos químicos presentes en la corriente FCC HCO (Dupain et al., 2003; Dupain et al., 2006; Pujro, 2014).

f. Gasoil ligero de la coquización (CLGO)

La corriente coquizado LGO presenta un porcentaje en peso de: 62.1% alcanos, 34.8% aromaticos, 3.1% olefinas (Hsu & Robinson, 2017). La Tabla A.6 del anexo A contiene los compuestos químicos presentes en la corriente CLGO (Aleksandrov et al., 2019; Soni et al., 2013).

g. Gasoil pesado de la coquización (CHGO)

El Gasoil pesado de la coquización presenta un porcentaje en peso de: 23% parafinas, 19% de mono aromáticos, 23% de di aromáticos, 12% de tri aromáticos, 11% de poli aromáticos, 6.3% compuestos polares 1 y 5.4% compuestos polares 2. La Tabla A.7 del anexo A contiene los compuestos químicos presentes en la corriente CHGO (Wiehe, 2008).

h. Aceite desasfaltado

La corriente de aceite desasfaltado presenta un porcentaje en peso de: 38.6% parafinas, 54.3% aromáticos, 7.1% resinas (Im et al., 2018). La Tabla A.8 del anexo A contiene los compuestos químicos presentes en la corriente de aceite desasfaltado (Kwek et al., 2017).

3.1.2. Obtención, organización y reporte de resultados

La Tabla B.1 de anexo B reporta una lista general de las moléculas orgánicas presentes en la corriente de entrada del proceso de hidrocraqueo catalítico. Está conformada mediante la recopilación de las moléculas presentes en cada corriente, pero sin tomar en cuenta las repeticiones de las moléculas en cada corriente. Se organizó conforme al aumento de átomos de carbono y de acuerdo a la clasificación de hidrocarburos.

3.2. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en la corriente de salida en el proceso de hidrocraqueo catalítico

El queroseno, jet fuel y diésel son los principales productos que forman parte de la corriente de salida del proceso de hidrocraqueo catalítico. Estos productos se componen de muchos miembros de una serie relativamente pequeña de hidrocarburos homólogos, el cual cada uno contiene un rango variable de número de átomos de carbono. La composición real de estos combustibles derivados del petróleo crudo depende en gran medida de su fuente de petróleo y su procesamiento en la refinería.

3.2.1. Búsqueda de datos internacionales

En base a literaturas internacionales, se reportan las posibles moléculas orgánicas presentes en cada corriente de salida (queroseno, Jet fuel y diésel), dentro del proceso de hidrocraqueo catalítico, ciertas investigaciones proporcionan diferentes datos en cuanto al número de hidrocarburos y su extensión respectivamente, los cuales se mencionan en la siguiente sección.

a. Queroseno

Lam, Smith, Gauthier, & Bates (2012) menciona que el queroseno es una mezcla compleja de compuestos de cadena lineal y ramificada, que generalmente se puede clasificar en tres clases: parafinas (55,2% p/p), alcanos cíclicos o naftenos (40,9%) y aromáticos (3,9%).

De acuerdo con Curl & Donnell (1977), el queroseno generalmente contiene de 10 a 16 átomos de carbono por molécula con un promedio de 12 y con composición química promedio por porcentaje que corresponde a 35% de alcanos e isoalcanos, 60% de alcanos cíclicos o naftenos y 15% de aromáticos como se muestran en la Tabla A.9 del anexo A.

Con un rango de ebullición promedio: 345-510°F (174-266°C), siendo comparado con el rango ASTM D86 aproximado de 400 a 550°F (205 a 288°C) o de operaciones de craqueo térmico y catalítico coquizador, *visbreaker*, FCC, *hydrocracker* (Kayode Coker, 2018).

Según Speight (2015) los alcanos lineales tiene el potencial de contener varios cientos de isómeros (Figura 21). Pero, la mayor parte de estos isómeros, mostrados en la Tabla A.10 del anexo A, no existe en la naturaleza ni se ha sintetizado. De cualquier manera, los números ayudan a explicar por qué el carbono se encuentra en muchos más compuestos que cualquier otro elemento.

Figura 21

Aumento del número de isómeros con número de carbonos.

Átomos de carbono	Número de isómeros
1	1
2	1
3	1
4	2
5	3
6	5
7	9
8	18
9	35
10	75
15	4,347
20	366,319
25	36,797,588
30	4,111,846,763
40	62,491,178,805,831

Nota. Recuperado de *Handbook of petroleum product analysis. In Journal of Chemical Information and Modeling (Segunda, Vol. 53, Issue 9) (p.80)*, por J. G. Speight., 2015, John Wiley & Sons, Inc.

b. Jet Fuel

El jet fuel es un combustible se obtiene a una temperatura aproximada de entre 400 a 525°F de la unidad de *hidrocracker* (Gary et al., 2007). De acuerdo con Díaz & Serrano (2020) el combustible para aviones más común (Jet A-1) es una mezcla compleja de hidrocarburos en el rango C₉-C₁₆. Estos hidrocarburos pertenecen a cuatro familias, a saber, alcanos lineales, alcanos o isoalcanos ligeramente ramificados, cicloalcanos y aromáticos.

Según Kaltschmitt & Deutschmann (2012), reporta que el jet fuel, ejemplar JP-4 presenta una longitud típica de cadena de C₄-C₁₆ átomos de carbono. La composición de JP-4 es aproximadamente 13% (v/v) de hidrocarburos aromáticos, 1% de hidrocarburos olefínicos y 86% de hidrocarburos saturados como se muestra en la

Tabla A.11 del anexo A. Tiene un rango de temperatura de destilación de 60 a 270°C (Faroon et al., 1995).

El combustible para aviones de tipo queroseno tiene una distribución del número de carbonos entre aproximadamente 8 y 16 átomos de carbonos como se muestra en la Tabla A.12 del anexo A. Por lo tanto, los compuestos que hierven cerca de 225°C (430°F), la mitad del rango de ebullición del combustible de aviación tipo queroseno, pueden ser aromáticos C₁₀ naftenos C₁₁ y parafinas C₈ (Aviation, 2006).

c. Diésel

Según Speight (2015), el diésel parte de los destilados medios que cubren el rango de ebullición desde aproximadamente 175 a 375°C (350 a 700°F), y el número de carbonos varía de aproximadamente C₈ a C₂₄. Consiste en un 64% de hidrocarburos alifáticos (número de carbonos predominantemente en el rango de C₉ a C₂₀), un 35% de hidrocarburos aromáticos (incluidos el benceno y los hidrocarburos aromáticos poli cíclicos) y un 1-2% de hidrocarburos olefínicos (Gad, 2014).

De acuerdo con (Liang et al., 2005), la composición del combustible diésel se ha identificado y categorizado en fracciones de entrada de combustible, como 65 a 85% de saturados, 5 a 30% de aromáticos y 0 a 5% de olefinas como se muestra en la Tabla A.13 del anexo A.

Se ha identificado aproximadamente el 70% (en masa) del combustible diésel. Entre las fracciones identificadas, los *n*-alcanos, alcanos ramificados, cicloalcanos saturados, HAP, HAP alquilados y alquilbencenos representan el 27,90%, 53,87%, 7,72%, 0,26%, 3,70% y 6,55%, respectivamente (Liang et al., 2005).

3.2.2. Obtención, organización y reporte de resultados

Se procede a realizar una tabla general enumerando y clasificando cada molécula orgánica de acuerdo al tipo de hidrocarburo y a la corriente que representa (queroseno, jet fuel, diésel).

Para el caso de los isómeros del decano $C_{10}H_{22}$ mostrados en la Tabla A.10 del anexo A, se procedió a una clasificación por grupos de acuerdo al tipo y número de radicales que posee la cadena, es decir, grupos que contenga radicales metilo, etilo, metilo-etilo, y de acuerdo al número de sustituciones como se muestra en la Tabla B.2 del anexo B, posterior a esto solo se tomara un compuesto representativo de cada grupo para llevar a cabo el análisis, debido a que estos presentaran las mismas propiedades básicas como peso molecular, análisis elemental y formula química.

La Tabla B.3 del anexo B muestra la lista general de todas las moléculas orgánicas presentes en las corrientes de salida, mismas que formarán parte de los cálculos teóricos computacionales.

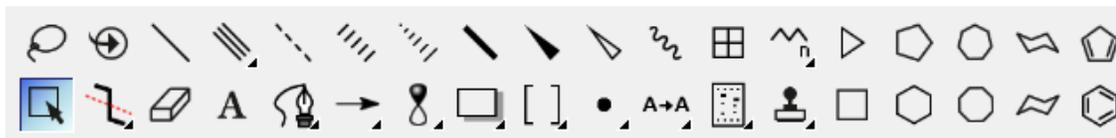
3.3. Procesamiento y obtención de estructuras químicas 1D, 2D y propiedades químicas básicas

3.3.1. Generación de estructuras químicas en 2D

Para este apartado se utiliza ChemDraw, este es un software de diseño de estructuras químicas, permite dibujar estructuras de forma sencilla, a través de los iconos que se muestran en la barra de herramientas principales (Figura 22), o su vez se puede introducir directamente el nombre de la estructura a través del icono → *structure* → *Convert name to structure* como se muestra en la Figura 23.

Figura 22

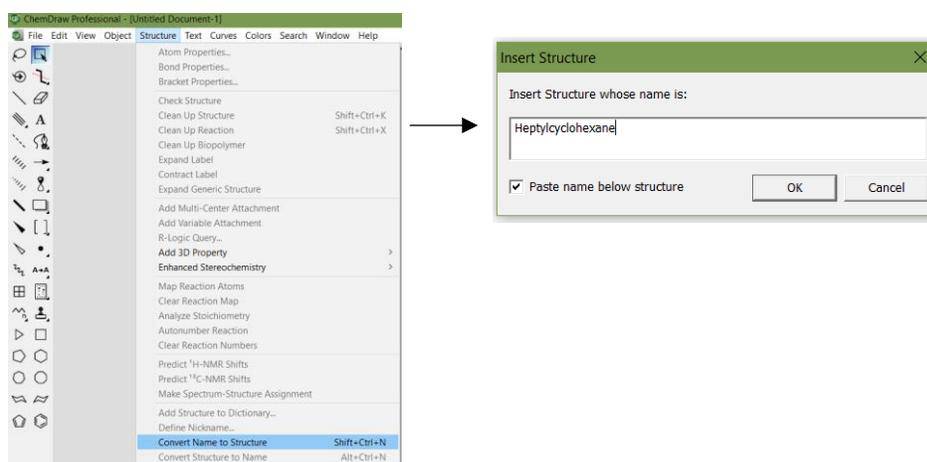
Barra de herramientas principales de ChemDraw



Nota: Obtenido del software “Chemdraw”

Figura 23

Sección gráfica para la estructura molecular en 2D

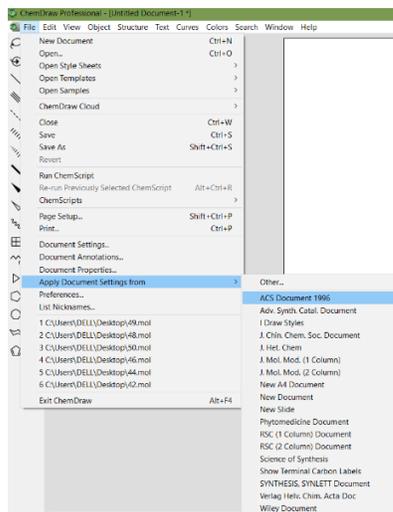


Nota: Obtenido del software “Chemdraw”.

Las estructuras químicas deben estar configuradas de acuerdo al tipo de documento “ACS Document 1996”, utilizada por las revistas de la American Chemical Society, para ello el icono → **file** → **Apply Document Settings from** (Figura 24), permitirá la creación de dicho documento.

Figura 24

Creación de archivo ACS Document 1996

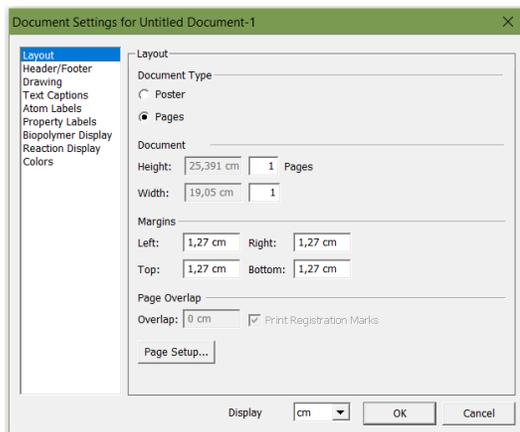


Nota: Obtenido del software “Chemdraw”.

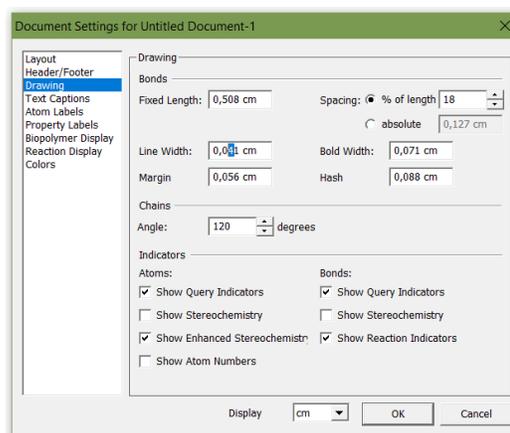
A través del icono → **file** → **Document Settings** se despliega una ventana (Figura 25a), en donde se selecciona la opción → **Drawing** (Figura 25b), para configurar el ancho de línea de dibujo (line width) a un valor de 0.041 cm. Se configura la opción → **Atom labels** (Figura 25c), con un tipo de fuente arial, en negrita y un tamaño 10.

Figura 25

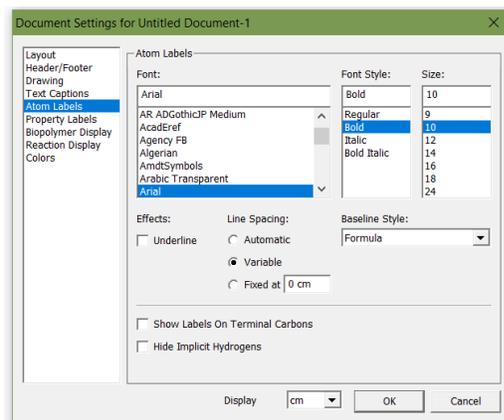
Parámetros de archivo ACS Document 1996



a)



b)



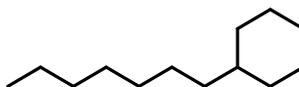
c)

Nota: Obtenido del software “Chemdraw”.

Con estos parámetros se obtiene la estructura química de la molécula en 2D, el cual será el modelo predeterminado para las demás moléculas orgánicas (Figura 26).

Figura 26

Estructura química de la molécula en 2D



Nota. Obtenido del software “Chemdraw”.

3.3.2. Procesamiento de propiedades básicas

ChemDraw calcula y actualiza la fórmula química, el peso molecular y el análisis elemental en tiempo real a medida que se dibuja cualquier tipo de molécula. Además, genera nombres precisos de acuerdo a las reglas sistemáticas propuestas por la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC).

Una vez obtenido la estructura 2D, se procede a calcular dichas propiedades, a partir del icono → **View** → **Show Analysis Window** (Figura 27a) se despliega la ventana “Analysis” (Figura 27b), en donde se seleccionan los casilleros para obtener la

formula química, peso molecular "Mol. Wt." con 4 decimales y el análisis elemental "Elem. Anal.", la opción "Paste" genera las propiedades básicas requeridas.

Figura 27

Visualización de las propiedades químicas básicas.

a)

b)

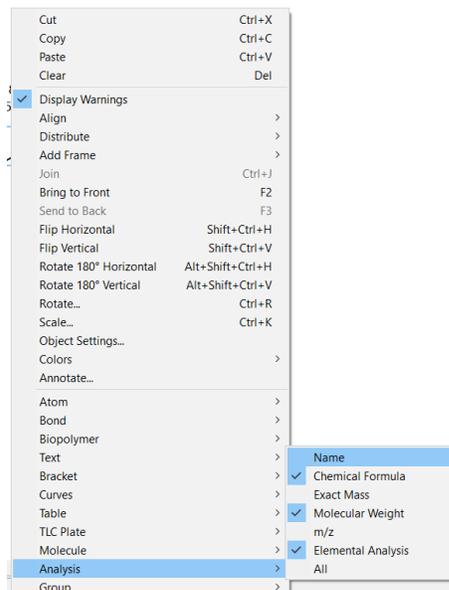
Chemical Formula: $C_{13}H_{26}$
Molecular Weight: 182,3510
Elemental Analysis: C, 85.63; H, 14.37

Heptylcyclohexane

Nota. Obtenido del software "Chemdraw".

3.3.3. Generación automática de nomenclatura IUPAC

Para generar la nomenclatura IUPAC del compuesto, en el caso que se dibuje de forma manual, se procede a marcar la estructura 2D y presionando el botón derecho del cursor se desplegará la ventana que permite elegir la opción "Analysis" (Figura 28), en dónde la opción "Name" mostrará el nombre IUPAC de la molécula.

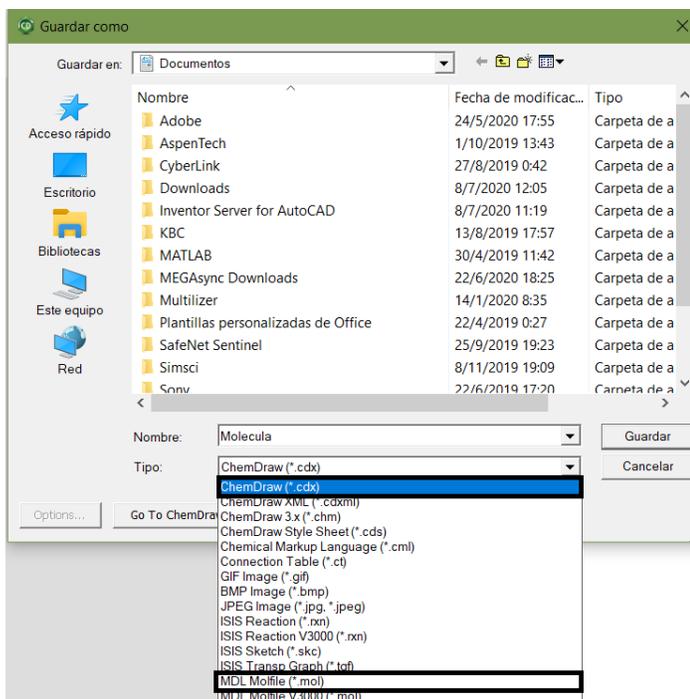
Figura 28*Visualización de la nomenclatura IUPAC*

Nota. Obtenido del software “Chemdraw”.

Una vez obtenida la estructura 2D con sus respectivas propiedades químicas básica se procede a guardar el archivo en dos formatos diferentes: tipo “ChemDraw(*.cdx)” que es un formato predeterminado y tipo “MDL Molfile(*.mol)”, que es un formato utilizado en el software Avogadro (Figura 29), en donde se especificara su uso en las secciones siguientes.

Figura 29

Formatos para el guardado de archivos en ChemDraw



Nota. Obtenido del software "Chemdraw".

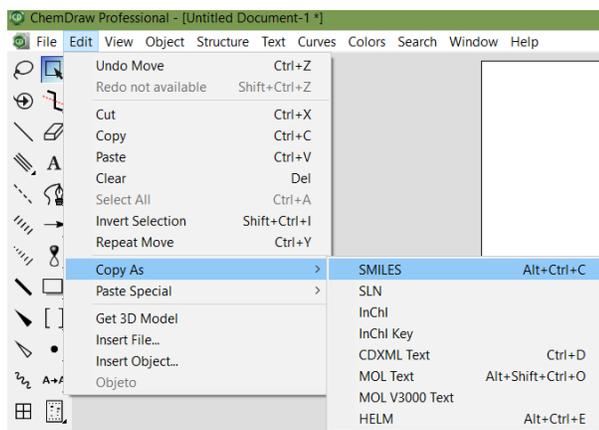
3.3.4. Generación automática del código SMILES

La nomenclatura o código SMILES (del inglés; Simplified Molecular Input Line Entry Specification), es una manera de representar la estructura química usando cadenas de caracteres alfanuméricos de tipo ASCII (Anderson et al., 1987).

El código se obtiene marcando la estructura química y dirigiéndose al icono → **Edit** → **Copy As** → **SMILES**, obteniendo como resultado caracteres alfanuméricos de tipo "CCCCCCCC1CCCCC1" (Figura 30).

Figura 30

Visualización del código SMILES

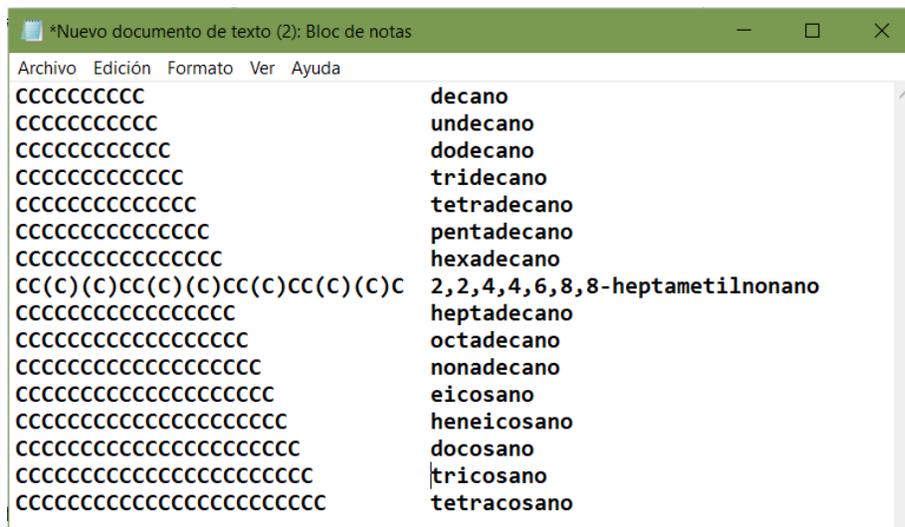


Nota. Obtenido del software “Chemdraw”.

3.3.5. Obtención, organización y reporte de resultados

Los resultados obtenidos a partir del software ChemDraw serán reportados a través de tablas, específicamente en cada tabla se podrá visualizar el número de identificación de la molécula de acuerdo a la lista general, seguida de su estructura en 2D con sus respectivas propiedades químicas básicas (nombre IUPAC, código SMILE, formula química, peso molecular y análisis elemental).

Los códigos SMILES generados para cada molécula, serán enlistados a través de un archivo de texto “.txt” (Figura 31) el cual facilitará su uso a través de la plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME”, mismo que será descrito en las siguientes secciones.

Figura 31*Almacenamiento de códigos SMILES*

Nota. Obtenido del software "Chemdraw".

3.4. Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas

Para este apartado se utiliza la Plataforma Suiza Bioinformática "SwissADME", el cual permite calcular descriptores fisicoquímicos, lipofilia, solubilidad en agua y muestra el radar de biodisponibilidad de cualquier tipo de molécula atreves del código a SMILES.

3.4.1. Estudio de la interfaz de la plataforma SwissADME

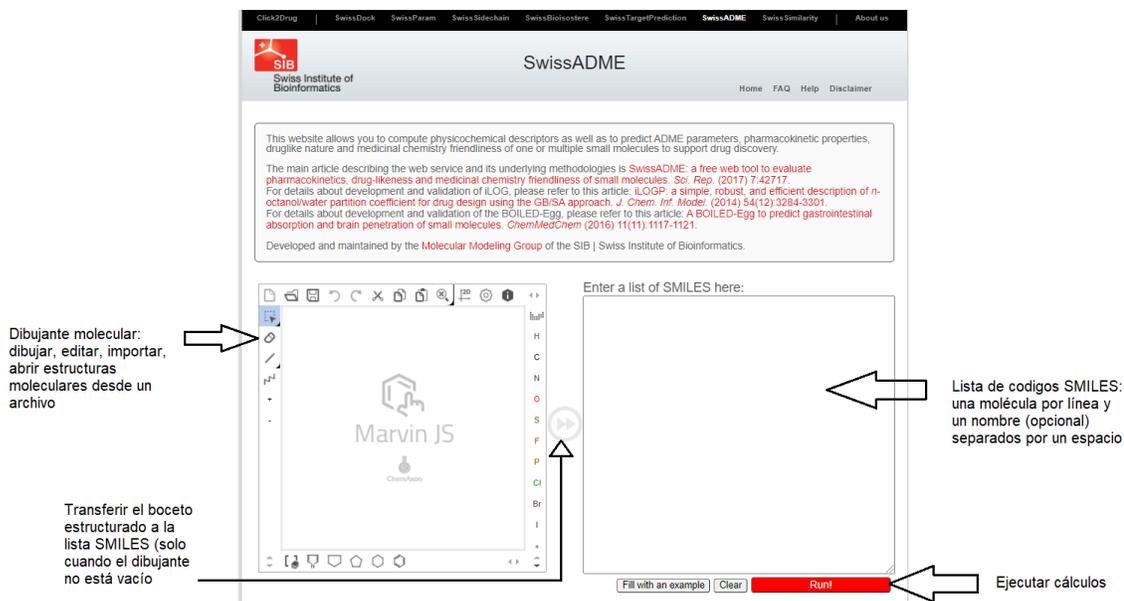
La entrada principal es una lista de códigos SMILES, que contiene una molécula por línea con su respectiva identificación separado por un espacio. Las moléculas se pueden pegar o escribir directamente en formato SMILES, o insertado a través del dibujante molecular.

Este último permite importar desde bases de datos, abrir un archivo local o dibujar una estructura química 2D para transferirla a la lista presionando el botón del

cursor en la opción de doble flecha. Cuando la lista de moléculas está lista para ser enviada, el usuario puede iniciar los cálculos presionando el cursor en la opción "Ejecutar" (Figura 32).

Figura 32

Interfaz de usuario de la plataforma SwissADME



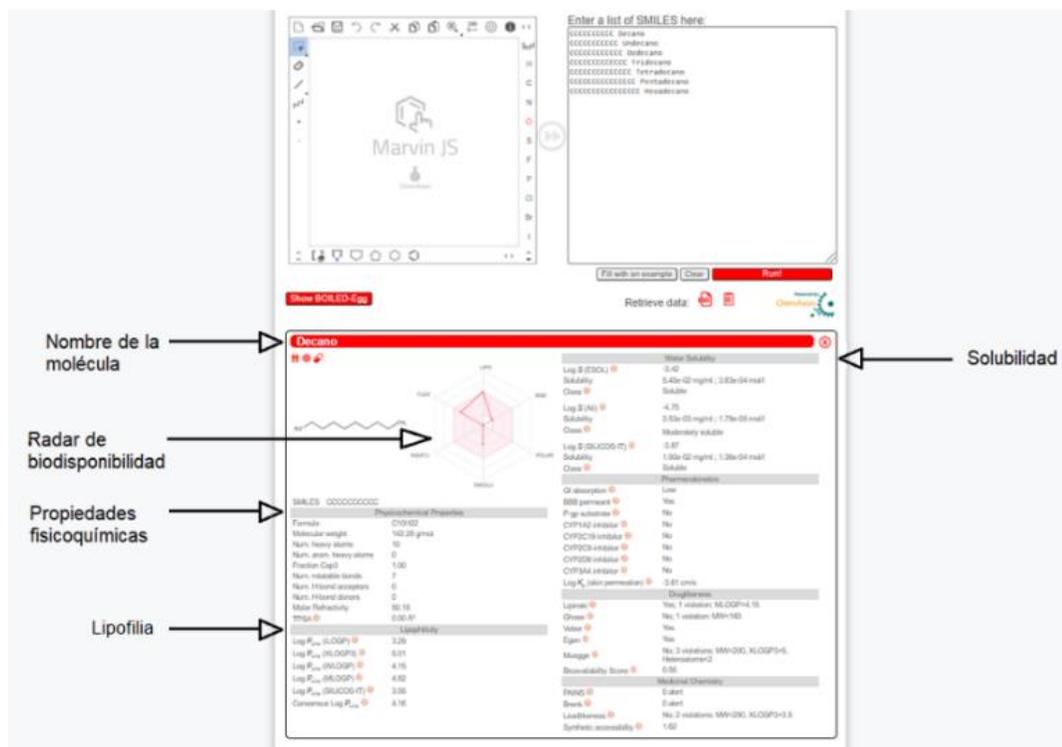
Nota. Obtenido de la plataforma “SwissADME”

3.4.2. Procesamiento a través del código SMILES

A partir de los códigos SMILES de cada molécula, estos se insertan en la ventana de lista de códigos SMILES, y se procede a ejecutar los cálculos. En donde las propiedades fisicoquímicas, lipofilia y solubilidad serán los parámetros tabulados (Figura 33). Además, se dará énfasis al Radar de estructura química y biodisponibilidad indicando su funcionalidad.

Figura 33

Visualización de las propiedades fisicoquímicas, lipofilia y solubilidad



Nota. Obtenido de la plataforma “SwissADME”

3.4.3. Obtención, organización y reporte de resultados

Los resultados obtenidos a partir de la Plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME”, serán reportados a través de tablas, específicamente se obtendrá una tabla general de las propiedades fisicoquímicas, una tabla general de la lipofilia y una tabla general de los datos de solubilidad en agua, cada una con el número de identificación de cada molécula de acuerdo a la lista general establecida anteriormente.

3.5. Cálculo y obtención de estructuras 3D

3.5.1. Elaboración de archivos con coordenadas 2D

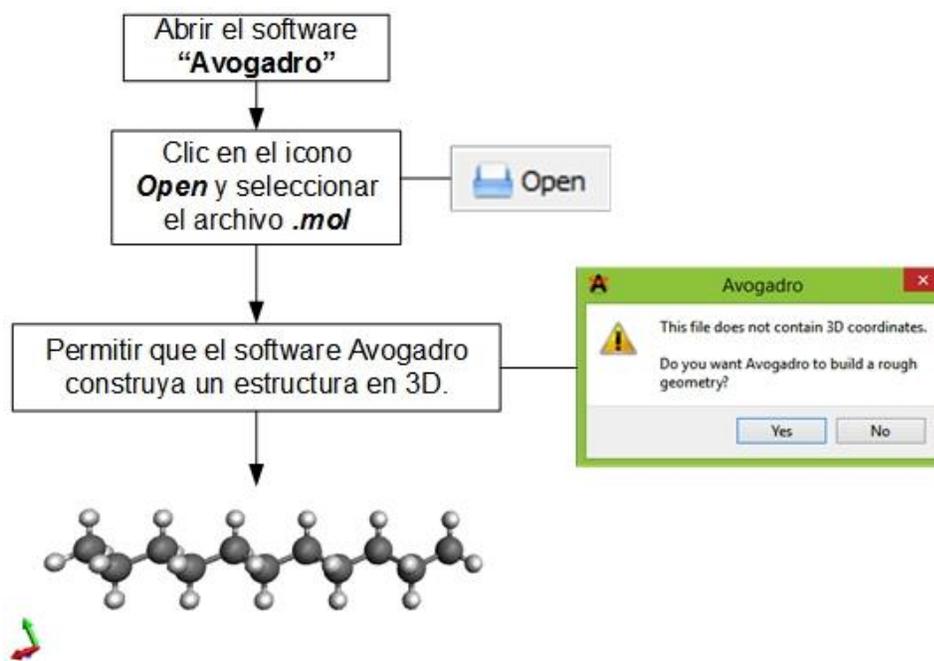
El formato tipo “MDL Molfile (*.mol)”, generado en las secciones anteriores, almacena información sobre los átomos, conectividad, enlaces y coordenadas xyz de la molécula, este tipo de archivo permitirá obtener una estructura química en 3D.

3.5.2. Elaboración de archivos con coordenadas 3D

El software Avogadro permite obtener una estructura química con coordenadas en 3D, para esto se necesita el archivo “MDL Molfile (*.mol)”, el cual permitirá abrir y ejecutar la estructura. El diagrama de flujo de la Figura 34, muestra los pasos para obtener una estructura química en 3D.

Figura 34

Diagrama de flujo para la elaboración de la estructura química en 3D

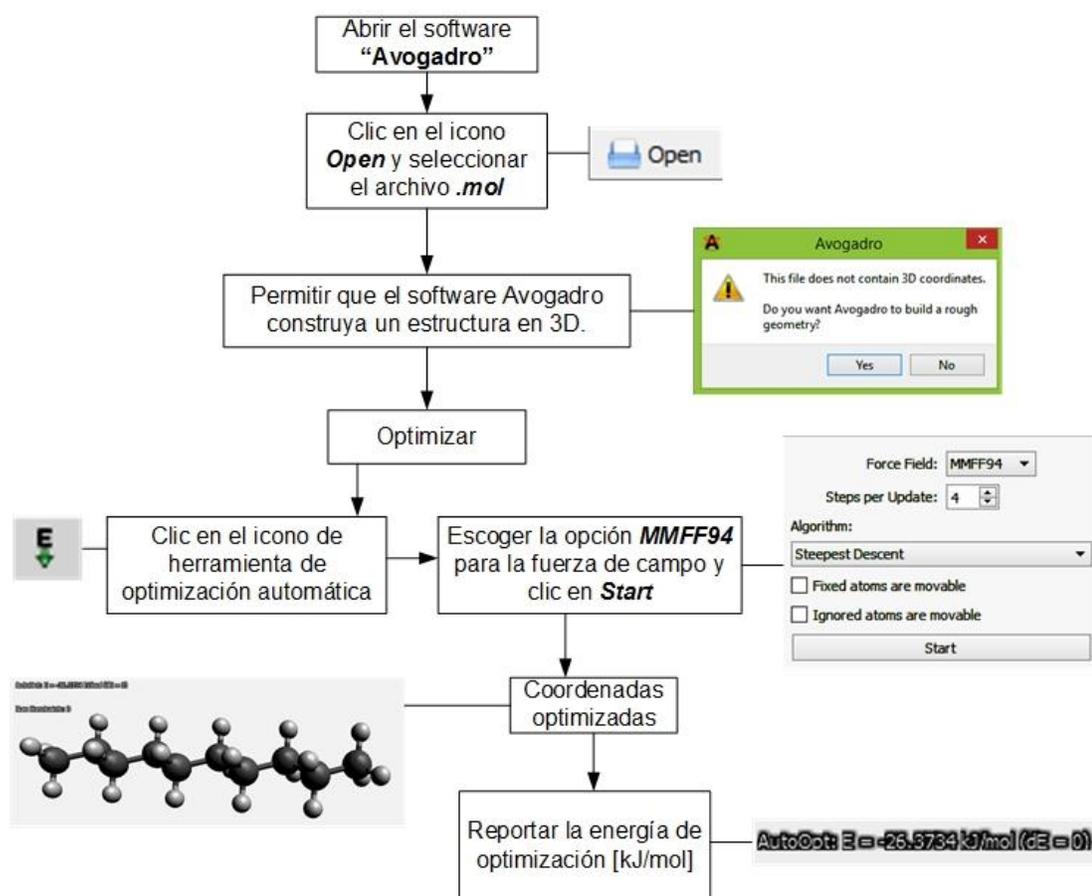


3.5.3. Elaboración de archivos con coordenadas 3D optimizadas y reporte de la energía de optimización.

El diagrama de flujo de la Figura 35 indica el procedimiento para optimizar la estructura 3D obtenida en la sección anterior. Para ello se emplea la herramienta de optimización automática que calcula la energía de la molécula, dicho valor actual de la energía se muestra en la esquina superior izquierda de la ventana de dibujo, como el valor E en kJ/mol.

Figura 35

Elaboración de estructuras en coordenadas 3D optimizadas

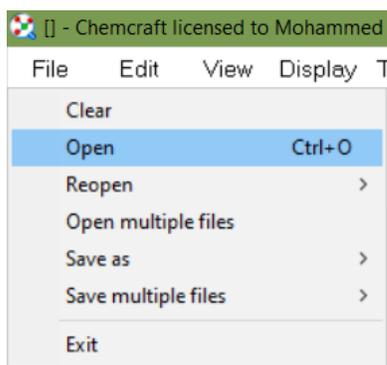


Una vez optimizada la molécula, esta se almacena con un tipo de archivo "MDL SDfile(*.mol)", con un nombre de identificación diferente al que se utilizó inicialmente. Para obtener una imagen tridimensional en formato "Jpeg" de la molécula sin y con optimización se requiere la utilización del software "Chemcraft".

Al iniciar el software abrimos el archivo MDL SDfile(*.mol)", de la molécula que se requiera obtener la imagen tridimensional, para ello el icono → **File** → **Open** (Figura 36) dará acceso para cargar la molécula y poder obtener la imagen. La Figura 36 muestra la imagen obtenida con un formato de estilo tipo "Gauss View style".

Figura 36

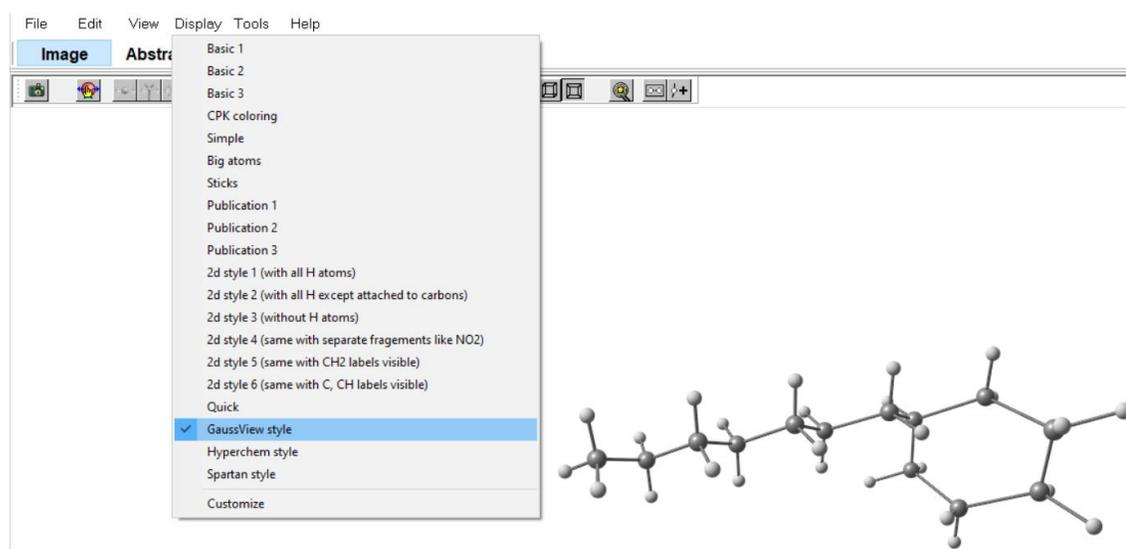
Selección de la molécula en Chemcraft



Nota. Obtenido del software "Chemcraft"

Figura 37

Tipo de estilo para la molécula en Chemcraft



Nota. Obtenido del software "Chemcraft"

3.5.4. Obtención, organización y reporte de resultados

Las estructuras químicas en 3D obtenidas a partir del software Avogadro junto con en el procedimiento de optimación y el respectivo valor de E, se reportan en base a imágenes 3D, extraídas a partir del software Chemcraft.

Capítulo 4

4. Resultados y discusiones

4.1. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en la corriente de entrada del proceso de hidrocrqueo catalítico.

La Tabla 5 reporta las moléculas químicas orgánicas más representativas de la búsqueda bibliográfica para las corrientes de entrada del proceso de hidrocrqueo catalítico, para lo cual, si se desea ver la totalidad de la lista de moléculas clasificadas de acuerdo al tipo de hidrocarburo e identificadas numéricamente, estas se pueden visualizar en la Tabla B.1 del anexo B.

Tabla 5

Moléculas orgánicas más representativas de la lista general para las corrientes de entrada

Tipo de hidrocarburo	N° de identificación de la Molécula	Fórmula	Nombre
Parafinas	23	C ₃₁ H ₆₄	hentriacontano
	24	C ₃₂ H ₆₆	dotriacontano
	25	C ₃₃ H ₆₈	tritriacontano
	26	C ₃₄ H ₇₀	tetratriacontano
	27	C ₃₅ H ₇₂	pentatriacontano
Mono naftenos	48	C ₃₂ H ₆₄	hexacosilciclohexano
	49	C ₃₃ H ₆₆	heptadecil ciclohexano
Poli naftenos	50	C ₁₄ H ₂₆	1-butil-decahidronaftaleno
	51	C ₁₅ H ₂₈	8-etil-7-propil-1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahidronaftaleno
	52	C ₁₆ H ₃₀	2,6-dipropildec hidronaftaleno
Mono aromáticos	126	C ₃₁ H ₅₆	pentacosan-13-ilbenceno
	127	C ₃₂ H ₅₈	hexacosan-5-ilbenceno
	128	C ₃₃ H ₆₀	1,2,3-trinonilbenceno
Poli aromáticos	163	C ₃₃ H ₄₈	2-nonadecilantraceno
	164	C ₃₃ H ₅₄	2-tricosilnaftaleno

Tipo de hidrocarburo	N° de identificación de la Molécula	Fórmula	Nombre
Compuestos con azufre	165	C ₄ H ₄ S	tiofeno
	166	C ₅ H ₆ S	3-metiltiofeno
Compuestos con nitrógeno	190	C ₁₂ H ₉ N	9H-carbazol
	191	C ₁₄ H ₁₃ N	1,8-dimetil-9H-carbazol
	192	C ₁₄ H ₁₇ N	7-fenilquinolina
Compuestos con oxígeno	199	C ₂₂ H ₂₆ O	9-hexil-1,2,3,4-tetrahidronafto[2,1-b] benzofurano

Nota. Moléculas orgánicas más representativas para la corriente de entrada del proceso de hidrocrqueo catalítico.

4.2. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en la corriente de salida del proceso de hidrocrqueo catalítico

La Tabla 6 reporta las moléculas químicas orgánicas más representativas de la búsqueda bibliográfica para las corrientes de salida del proceso de hidrocrqueo catalítico, para lo cual, si se desea ver la totalidad de la lista de moléculas clasificadas de acuerdo al tipo de hidrocarburo e identificadas numéricamente, estas se pueden visualizar en la Tabla B.3 del anexo B.

Tabla 6

Moléculas orgánicas más representativas de la lista general para las corrientes de salida

Tipo de hidrocarburo	N° de identificación de la molécula	Fórmula	Nombre
Queroseno			
Alcanos (parafinas)	1	C ₁₀ H ₂₂	decano
	2	C ₁₁ H ₂₄	undecano
	3	C ₁₂ H ₂₆	dodecano
Isoparafinas	8	C ₁₀ H ₂₂	2-metilnonano
	9	C ₁₀ H ₂₂	3-etiloctano

Tipo de hidrocarburo	N° de identificación de la molécula	Fórmula	Nombre
	10	C ₁₀ H ₂₂	2,2-dimetiloctano
Queroseno			
Naftenos (Cicloparafinas)	23	C ₁₀ H ₁₈	decalin (decahidronaftaleno)
	24	C ₁₀ H ₂₀	pentilciclohexano
	25	C ₁₀ H ₂₀	butilciclohexano
Aromáticos	37	C ₁₀ H ₈	naftaleno
	38	C ₁₀ H ₁₄	dureno
	39	C ₁₁ H ₁₆	pentametilbenceno
Jet Fuel JP-4 y JET A-1			
Parafinas	52	C ₅ H ₁₂	pentano
	53	C ₆ H ₁₄	hexano
	54	C ₇ H ₁₆	heptano
Isoparafina	84	C ₁₂ H ₂₆	2-metilundecano (Jet A-1)
	85	C ₁₃ H ₂₈	2,6-dimetilundecano
	86	C ₁₆ H ₃₄	2-metilpentadecano (Jet A-1)
Naftenos (Cicloparafinas)	87	C ₆ H ₁₂	metilciclohexano
	88	C ₆ H ₁₂	ciclohexano
	89	C ₇ H ₁₄	trans-1,3-dimetilciclohexano
Aromáticos	107	C ₆ H ₆	benzeno
	108	C ₇ H ₈	tolueno
	109	C ₈ H ₁₀	etilbenceno
Diésel			
Parafinas	146	C ₂₁ H ₄₄	heneicosano
	147	C ₂₂ H ₄₆	docosano
	148	C ₂₃ H ₄₈	tricosano
Isoparafinas	150	C ₁₄ H ₃₀	norfarnesano
	151	C ₁₅ H ₃₂	farnesano
Naftenos (Cicloparafinas)	155	C ₁₃ H ₂₆	heptilciclohexano
	156	C ₁₄ H ₂₈	octilciclohexano
Hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP)	163	C ₁₀ H ₈	naftaleno (Nap)
	164	C ₁₂ H ₈	acenaftileno (Acy)
Hidrocarburos aromáticos policíclicos alquilados	171	C ₁₁ H ₁₀	2-metilnaftaleno
	172	C ₁₁ H ₁₀	1-metilnaftaleno
Alquilbencenos	184	C ₉ H ₁₂	C ₃ -Bencenos
	185	C ₁₀ H ₁₄	C ₄ -Bencenos

Nota. Moléculas químicas orgánicas más representativas para las corrientes de salida en el proceso de hidrocraqueo catalítico

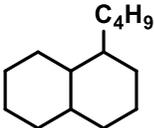
4.3. Procesamiento y obtención de estructuras químicas 1D, 2D, nomenclatura IUPAC, propiedades químicas básicas y código SMILES.

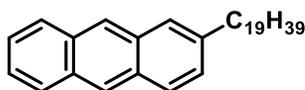
4.3.1. Corriente de entrada

Mediante el procesamiento de las moléculas orgánicas presentes en la corriente de entrada del proceso de hidrocraqueo catalítico por medio del software “Chemdraw”, se obtuvieron las siguientes estructuras, y a través de un cálculo análogo se reporta la nomenclatura IUPAC, código SMILES, fórmula química (estructura química 1D), peso molecular y el análisis elemental como se muestra en la Tabla 7, esto se hizo tomando como referencia a una de las moléculas representativas de cada tipo de hidrocarburo provenientes de la Tabla 5.

Tabla 7

Estructura química 2D, propiedades químicas básicas y código SMILES para las moléculas representativas de las corrientes de entrada.

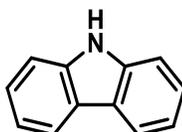
Molécula 23	
	
Nomenclatura IUPAC:	hentriacontano
Código SMILES:	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
Fórmula química:	C ₃₁ H ₆₄
Peso molecular:	436,8530
Análisis elemental:	C, 85.23; H, 14.77
Molécula 50	
	
Nomenclatura IUPAC:	1-butil-decahidronaftaleno
Código SMILES:	CCCCC1CCCC2CCCCC21
Fórmula química:	C ₁₄ H ₂₆
Peso molecular:	194,3620
Análisis elemental:	C, 86.52; H, 13.48

Molécula 163

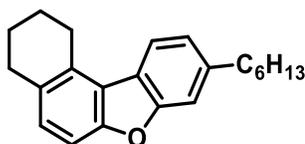
Nomenclatura IUPAC:	2-nonadecilantraceno
Código SMILES:	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC1=CC2=CC3 =C(C=C2C=C1)C=CC=C3
Fórmula química:	C ₃₃ H ₄₈
Peso molecular:	444,7470
Análisis elemental:	C, 89.12; H, 10.88

Molécula 165

Nomenclatura IUPAC:	tiofeno
Código SMILES:	C1=CC=CS1
Fórmula química:	C ₄ H ₄ S
Peso molecular:	84,1360
Análisis elemental:	C, 57.10; H, 4.79; S, 38.10

Molécula 190

Nomenclatura IUPAC:	9H-carbazol
Código SMILES:	C1(NC2=C3C=CC=C2)=C3C=CC=C1
Fórmula química:	C ₁₂ H ₉ N
Peso molecular:	167,2110
Análisis elemental:	C, 86.20; H, 5.43; N, 8.38

Molécula 199

Nomenclatura IUPAC:	9-hexil-1,2,3,4-tetrahidronafto[2,1- b]benzofurano
Código SMILES:	CCCCCCC(C=C1)=CC2=C1C3=C(O2)C=CC 4=C3CCCC4
Fórmula química:	C ₂₂ H ₂₆ O
Peso molecular:	306,4490
Análisis elemental:	C, 86.23; H, 8.55; O, 5.22

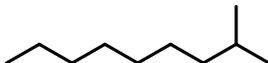
Nota. La Tabla C.1 del apéndice C reporta el mismo procedimiento para todas las moléculas orgánicas de la lista general descritos en la Tabla B.1 del anexo B.

4.3.2. Corriente de salida

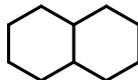
Mediante el procesamiento de las moléculas orgánicas presentes en la corriente de salida del proceso de hidrocraqueo catalítico por medio del software “Chemdraw”, se obtuvieron las siguientes estructuras, y a través de un cálculo análogo se reporta la nomenclatura IUPAC, código SMILES, fórmula química (estructura química 1D), peso molecular y el análisis elemental como se muestra en la Tablas 8, esto se hizo tomando como referencia a una de las moléculas representativas de cada tipo de hidrocarburo provenientes de la Tabla 6.

Tabla 8

Estructura química 2D, propiedades químicas básicas y código SMILES para las moléculas representativas de las corrientes de salida

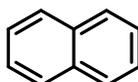
Queroseno		
Molécula 1		
		
Nomenclatura IUPAC:		Decano
Código SMILES:		CCCCCCCCC
Fórmula química:		C ₁₀ H ₂₂
Peso molecular:		142,2860
Análisis Elemental:		C, 84.41; H, 15.59
Molécula 8		
		
Nomenclatura IUPAC:		2-metilnonano
Código SMILES:		CC(C)CCCCC
Fórmula química:		C ₁₀ H ₂₂
Peso molecular:		142,2860
Análisis Elemental:		C, 84.41; H, 15.59
Molécula 23		

Queroseno



Nomenclatura IUPAC:	Decahidronaftaleno
Código SMILES:	C12CCCCC1CCCC2
Fórmula química:	C ₁₀ H ₁₈
Peso molecular:	138,2540
Análisis Elemental:	C, 86.88; H, 13.12

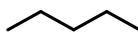
Molécula 37



Nomenclatura IUPAC:	Naftaleno
Código SMILES:	C12=CC=CC=C1C=CC=C2
Fórmula química:	C ₁₀ H ₈
Peso molecular:	128,1740
Análisis Elemental:	C, 93.71; H, 6.29

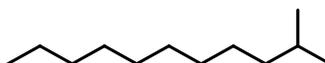
Jet Fuel

Molécula 52



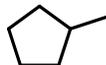
Nomenclatura IUPAC:	Pentano
Código SMILES:	CCCCC
Fórmula química:	C ₅ H ₁₂
Peso molecular:	72,1510
Análisis Elemental:	C, 83.24; H, 16.76

Molécula 84



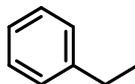
Nomenclatura IUPAC:	2-metilundecano
Código SMILES:	CC(C)CCCCCCCCC
Fórmula química:	C ₁₂ H ₂₆
Peso molecular:	170,3400
Análisis Elemental:	C, 84.61; H, 15.39

Molécula 87



Nomenclatura IUPAC:	Metilciclopentano
Código SMILES:	CC1CCCC1
Fórmula química:	C ₆ H ₁₂
Peso molecular:	84,1620
Análisis Elemental:	C, 85.63; H, 14.37

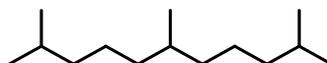
Jet Fuel

Molécula 109

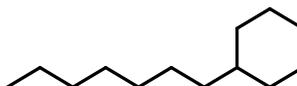
Nomenclatura IUPAC:	Etilbenceno
Código SMILES:	<chem>CCC1=CC=CC=C1</chem>
Fórmula química:	C_8H_{10}
Peso molecular:	106,1680
Análisis Elemental:	C, 90.51; H, 9.49

Diésel**Molécula 146**

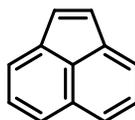
Nomenclatura IUPAC:	Heneicosano
Código SMILES:	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC</chem>
Fórmula química:	$C_{21}H_{44}$
Peso molecular:	296,5830
Análisis Elemental:	C, 85.05; H, 14.95

Molécula 150

Nomenclatura IUPAC:	2,6,10-trimetilundecano
Código SMILES:	<chem>CC(C)CCCC(C)CCCC(C)C</chem>
Fórmula química:	$C_{14}H_{30}$
Peso molecular:	198,3940
Análisis Elemental:	C, 84.76; H, 15.24

Molécula 155

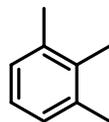
Nomenclatura IUPAC:	Heptilciclohexano
Código SMILES:	<chem>CCCCCCC1CCCCC1</chem>
Fórmula química:	$C_{13}H_{26}$
Peso molecular:	182,3510
Análisis Elemental:	C, 85.63; H, 14.37

Molécula 164

Nomenclatura IUPAC:	Acenaftileno
Código SMILES:	<chem>C12=CC=CC3=C1C(C=C2)=CC=C3</chem>
Fórmula química:	$C_{12}H_8$

Peso molecular:	152,1960
Análisis Elemental:	C, 94.70; H, 5.30

Molécula 184



Nomenclatura IUPAC:	1,2,3-trimetilbenceno
Código SMILES:	CC1=C(C)C(C)=CC=C1
Fórmula química:	C ₉ H ₁₂
Peso molecular:	120,1950
Análisis Elemental:	C, 89.94; H, 10.06

Nota. La Tabla C.2 del apéndice C reporta el mismo procedimiento para todas las moléculas orgánicas de la lista general descritos en la Tabla B.3 del anexo B.

4.4. Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas, lipofilia, solubilidad en agua y estudio del radar de biodisponibilidad de las moléculas orgánicas

4.4.1. Corriente de entrada

a. Propiedades fisicoquímicas

La Tabla 9 reporta las propiedades fisicoquímicas obtenidas a través de la plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME”, al igual que en la sección anterior, esto se hizo tomando como referencia las moléculas más representativas de cada tipo de hidrocarburo provenientes de la Tabla 5. En cuanto a estas propiedades se generó un reporte de observaciones, dichos resultados nos servirán para un mejor entendimiento sobre estas moléculas.

En base a la Tabla D.1 del anexo D, donde se puede visualizar el reporte oficial de las propiedades fisicoquímicas para toda la lista general de moléculas orgánicas descritas en la tabla B.3 del anexo B se puede determinar lo siguiente:

- Para las moléculas analizadas se observan que las parafinas, mono naftenos y poli naftenos presentan mayor número de enlaces rotables, por lo tanto, formaran mayor número de conformaciones, mientras que los mono aromáticos, poli aromáticos, compuestos con azufre, oxígeno y nitrógeno son los que poseen valores de menores o incluso nulos de enlaces rotables.
- Las parafinas, mono naftenos, poli naftenos, mono aromáticos, poli aromáticos y compuestos con azufre no poseen aceptores de átomos de hidrógeno ni donadores de átomos de hidrógeno. Los compuestos con nitrógeno y oxígeno son los que poseen un valor de aceptores de átomos de hidrógeno y donadores de átomos de hidrógeno pueden formar interacciones del tipo puente de hidrógeno.
- El número de átomos pesados es directamente proporcional al valor de la refractividad molar, es decir a mayor número de átomos pesados, mayor va a ser el valor de la refractividad molar.
- El termino PSA se refiere al área de la superficie polar, exclusivo para moléculas polares, por tanto, las moléculas orgánicas que van a poseer un valor de PSA son las moléculas compuestas por átomos de oxígeno, azufre y nitrógeno.
- La insaturación se basa en los valores de la fracción de carbonos con configuración sp_3 . La fracción C_{sp3} se refiere a los carbonos con hibridación sp_3 , el cual forman tetraedros con rotación libre.

Tabla 9

Propiedades fisicoquímicas para las moléculas más representativas de la corriente de entrada

N° Identificación de moléculas	N° de átomos pesados	N° de átomos aromáticos pesados	Fracción Csp3	N° de enlaces rotables	N° de aceptores de puentes de hidrógeno	N° de donantes de puentes de hidrógeno	Refractividad molar	PSA (Å ²)
Parafinas								
23	31	0	1.00	28	0	0	151.13	0.00
Naftenos								
50	14	0	1.00	3	0	0	65.18	0.00
Aromáticos								
163	33	14	0.58	18	0	0	152.95	0.00
Compuestos con azufre								
165	5	5	0.00	0	0	0	24.32	28.24
Compuestos con nitrógeno								
190	13	13	0.00	0	0	1	55.80	15.79
Compuestos con oxígeno								
199	23	13	0.45	5	1	0	100.15	13.14

Nota. El termino PSA se refiere al área de la superficie polar, la fracción Csp3 se refiere a los carbonos con hibridación sp³, el cual forman tetraedros con rotación libre.

b. Lipofilia

La Tabla 10 reporta los valores de lipofilia obtenidas a través de la plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME”, al igual que en la sección anterior, esto se hizo tomando como referencia las moléculas representativas de cada tipo de hidrocarburo provenientes de la Tabla 5.

Tabla 10

Valores de lipofilia para las moléculas más representativas de la corriente de entrada

N° Identificación de la molécula	Log Po/w (iLOGP)	Log Po/w (XLOGP3)	Log Po/w (WLOGP)	Log Po/w (MLOGP)	Log Po/w (SILICOS-IT)	Promedio Log Po/w
Parafinas						
23	3.51	5.23	4.15	4.82	3.77	4.38
Naftenos						
50	3.49	6.50	4.78	5.54	4.13	4.89
Aromáticos						
163	6.87	15.06	11.19	9.24	11.65	10.80
Compuestos con azufre						
165	0.00	1.81	1.75	1.12	2.85	1.51
Compuestos con nitrógeno						
190	1.82	3.39	3.32	2.83	3.63	3.00
Compuestos con oxígeno						
199	4.34	8.00	6.59	5.25	7.16	6.27

Nota. La tabla E.1 del apéndice E reporta el mismo tratamiento para todas las moléculas orgánicas de la lista general descritos en la tabla B.1 del anexo B.

- La Tabla 10 muestra los valores de la lipofilia de acuerdo con los métodos predictores iLOGP, XLOGP3, WLOGP, MLOGP y SILICOS-IT enfocados en el coeficiente de partición octanol/agua, se puede apreciar que la mayoría de los compuestos de la Tabla B.1 del anexo B poseen valores elevados de lipofilia lo que las convierte en moléculas con una toxicidad debido a que son muy volátiles y de naturaleza apolar y pueden ser asimiladas fácilmente por las mucosas o las membranas más externas de los seres humanos.

- La lipofilia ayuda a identificar la capacidad para poder disolverse en grasas aceites; además de poder predecir las propiedades intermoleculares entre moléculas similares, siendo estas, interacciones de Van der Waals y específicamente fuerzas de London.

c. Solubilidad en agua

La Tabla 11 reportan las propiedades de solubilidad en agua obtenidas a través de la plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME”, al igual que en la sección anterior, esto se hizo tomando como referencia las moléculas más representativas de cada tipo de hidrocarburo provenientes de la Tabla 5.

Indica la estimación de Log S, mediante los tres métodos predictivos utilizados por la plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME”, donde la escala de solubilidad describe: Insoluble < -10 < Poco soluble < -6 < Moderadamente soluble < -4 < Soluble < -2 < Muy soluble < 0 < Muy soluble.

- La mayor parte de molécula orgánica de la corriente de entrada del proceso analizadas en la Tabla E.1 del apéndice E son insolubles. Todas las interacciones intermoleculares que se pueden presentar entre las moléculas de hidrocarburos y entre las moléculas de agua e hidrocarburos hacen que sean más afines, por lo tanto, existen valores de solubilidad los cuales proyectan este tipo de comportamiento.
- Por definición, las moléculas de hidrocarburos puros son bastante insolubles en agua, pero “SwissADME” calcula valores para predecir la solubilidad en agua, en base a los métodos topológicos de ESOL (Delaney, 2004) y de (Ali et al., 2012), el cual, genera rangos de solubilidad que van desde insoluble (IS) hasta altamente soluble (AS) de acuerdo al medio en el cual se encuentren, de los

cuales se sabe que no van a estar cercanos al agua o disueltos en agua, pero potencialmente estos datos pueden servir en el caso que exista accidentes como derrame de petróleo, o fugas en tuberías, el cual pueda ser remediada rápidamente mediante la inclusión de un agente quelante que permita la rápida separación y así detener la propagación evitando daños ambientales.

Tabla 11

Valores de la solubilidad en agua para las moléculas más representativas de la corriente de entrada

Tipo de hidrocarburo	N° de identificación de la molécula	Log S (ESOL)					Log S (Ali)					Log S (SILICOS-IT)				
		Log S (ESOL)	Solubilidad		Clase	Log S (Ali)	Solubilidad		Clase	Log S (SILICOS-IT)	Solubilidad		Clase			
			mg/ml	mol/l			mg/ml	mol/l			mg/ml	mol/l				
Parafinas	23	-11.04	4.00e-09	9.15e-12	I	-16.58	1.15e-14	2.63e-17	I	-12.28	2.29e-10	5.24e-13	I			
Naftenos	50	-4.94	2.22e-03	1.14e-05	MS	-6.30	9.83e-05	5.06e-07	PS	-3.57	5.24e-02	2.70e-04	S			
Aromáticos	163	-11.21	2.74e-09	6.15e-12	I	-15.18	2.95e-13	6.62e-16	I	-13.30	2.22e-11	5.00e-14	I			
Compuestos con azufre	165	-2.24	4.82e-01	5.73e-03	S	-2.02	7.99e-01	9.50e-03	S	-1.56	2.34e+00	2.78e-02	S			
Compuestos con nitrógeno	190	-3.75	2.96e-02	1.77e-04	S	-3.40	6.65e-02	3.98e-04	S	-4.95	1.87e-03	1.12e-05	MS			
Compuestos con oxígeno	199	-6.87	4.15e-05	1.35e-07	PS	-8.13	2.28e-06	7.43e-09	PS	-8.47	1.04e-06	3.40e-09	PS			

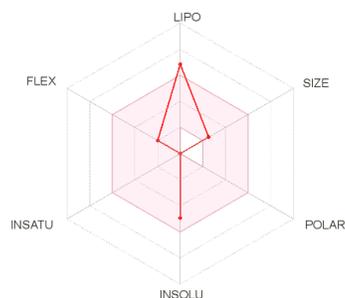
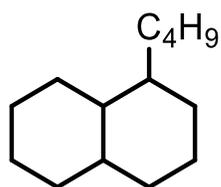
Nota. MS moderadamente soluble; S soluble; PS poco soluble; I insoluble. La Tabla E.1 del apéndice E muestra el reporte oficial de los valores de solubilidad para toda la lista general de moléculas orgánicas descritas en la Tabla B.1 del anexo B.

d. Radar de biodisponibilidad

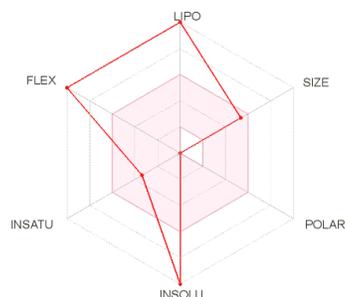
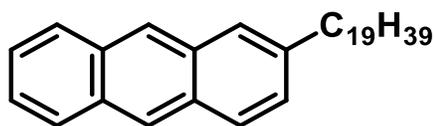
La Figura 38 reportan los radares de biodisponibilidad obtenidos a través de la plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME”, al igual que en la sección anterior, esto se hizo tomando como referencia las moléculas más representativas de cada tipo de hidrocarburo provenientes de la Tabla 5. Estos radares reflejan una característica en común, el cual predice que la molécula puede presentar efectos toxicológicos sobre el organismo o puede ocasionar daños severos al momento que entra en contacto con la piel, al ser manipuladas sin ningún tipo de protección, debido a que la línea roja de las moléculas analizadas no están incluidas en su totalidad dentro del área de color rosa, es decir, no se encuentra en el rango de valores óptimos para cualquiera de las propiedades fisicoquímicas, lipofilia y solubilidad en agua.

Figura 38

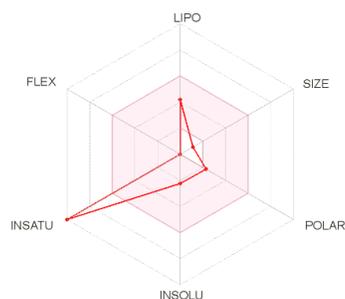
Radar de biodisponibilidad para las moléculas: a) 50-Nafteno; b) 163-Poliaromático, d) 165- compuesto con azufre



(b)



(c)



Nota. La tabla G.1 del anexo G reporta el mismo procedimiento para todas las moléculas orgánicas de la lista general descritos en la Tabla B.1 del anexo B.

El radar de biodisponibilidad para cada molécula analizada está constituido por los siguientes ejes: lipofilia (LIPO), tamaño (SIZE), polaridad (POLAR), insolubilidad (INSOLU), insaturación (INSATU) y flexibilidad (FLEX). El área color rosa representa el rango óptimo para cada propiedad, por ejemplo, la Figura 38.a y b presenta valores altos del coeficiente de partición del octanol y agua que es el prescriptor de la lipofilia, la Figura 38.b presenta valores mayores de insaturación que están prescritos por la fracción C_{sp3} , la Figura 38.b posee un valor alto de insolubilidad prescritos por los valores de Log S, la Figura 38.b presenta valores altos de flexibilidad cuyo principal prescriptor son los números de enlaces rotables. Cabe destacar que la polaridad y el tamaño están prescritos por el valor de PSA y MW respectivamente.

4.4.2. Corriente de salida

a. Propiedades fisicoquímicas

La Tabla 12 reporta las propiedades fisicoquímicas de las moléculas referenciadas en la Tabla 8, obtenidas a través de la Plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME”. En cuanto a estas propiedades se generó un reporte de observaciones, dichos resultados nos servirán para un mejor entendimiento sobre estas moléculas.

- Tanto para las tres corrientes de salida se observa que: las parafinas lineales, isoparafinas y los naftenos con mayor número de ramificaciones son las que presentan mayor número de enlaces rotables, por ende, formarán mayor número de conformaciones, mientras que los aromáticos son los que poseen valores menores de enlaces rotables debido a las conformaciones fijas que presentan las moléculas.
- Ninguna molécula orgánica de la lista posee aceptores de átomos de hidrógeno y donadores de átomos de hidrógeno, variables que corroboran que estas moléculas orgánicas no pueden formar interacciones del tipo puente de hidrógeno.
- Se observa también que, a mayor número de átomos pesados, mayor va a ser el valor de la refractividad molar.
- El termino PSA se refiere al área de la superficie polar, exclusivo para moléculas polares, por tanto, ninguna molécula orgánica de la lista posee un valor numérico por ser moléculas apolares.
- La fracción Csp3 se refiere a los carbonos con hibridación sp3, el cual forman tetraedros con rotación libre.

Tabla 12

Propiedades fisicoquímicas para las moléculas más representativas de las corrientes de salida

Tipo de hidrocarburo	N° de identificación de la molécula	N° de átomos pesados	N° de átomos aromáticos pesados	Fracción Csp3	N° de enlaces rotables	N° de aceptores de puentes de hidrógeno	N° de donantes de puentes de hidrógeno	Refractividad molar	TPSA (Å ²)
Queroseno									
Parafina	1	10	0	1.00	7	0	0	50.18	0
Isoparafina	8	10	0	1.00	6	0	0	50.18	0
Nafteno	23	10	0	1.00	0	0	0	45.96	0
Aromático	37	10	10	0.00	0	0	0	43.95	0
Jet Fuel									
Parafina	52	5	0	1.00	2	0	0	26.15	0
Isoparafina	84	12	0	1.00	8	0	0	59.80	0
Nafteno	87	6	0	1.00	0	0	0	28.84	0
Aromático	109	8	6	0.25	1	0	0	36.22	0
Diésel									
Parafina lineal	146	21	0	1.00	18	0	0	103.06	0
Parafina ramificada	150	14	0	1.00	8	0	0	69.41	0
Cicloparafina	155	13	0	1.00	6	0	0	62.49	0
Hidrocarburo aromático policíclico (HAP)	164	12	10	0.00	0	0	0	52.88	0
Alquilbenceno	184	9	6	0.33	0	0	0	41.34	0

Nota: La Tabla D.2 del anexo D, muestra el reporte oficial de las propiedades fisicoquímicas para toda la lista general de moléculas orgánicas descritas en la tabla B.3 del anexo B.

b. Lipofilia

La Tabla 13 reporta los valores de lipofilia para las mismas moléculas orgánicas referenciadas en la sección anterior, obtenidas a través de la Plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME”. En cuanto a estos valores se generó el siguiente reporte de observaciones:

- Los valores de lipofilia se muestran con varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua y sus múltiples derivaciones del mismo método en base a investigaciones que fundamentan sus cálculos para ampliar y disminuir su rango de valores, y en base a esto, se puede apreciar valores elevados de lipofilia para las parafinas, isoparafinas y cicloparafinas del diésel.
- También se debe considerar que este tipo de moléculas tienen una alta toxicidad debido a que son moléculas muy volátiles y pueden ser asimiladas fácilmente por las mucosas o las membranas más externas de los seres humanos.

Tabla 13

Valores de lipofilia para las moléculas más representativas de las corrientes de salida

Tipo de hidrocarburo	N° de identificación de la molécula	Log Po/w (iLOGP)	Log Po/w (XLOGP3)	Log Po/w (WLOGP)	Log Po/w (MLOGP)	Log Po/w (SILICOS-IT)	Promedio Log Po/w
Queroseno							
Parafina	1	3.29	5.01	4.15	4.82	3.55	4.16
Isoparafinas	8	3.26	5.34	4.00	4.82	3.38	4.16
Naftenos	23	2.65	4.62	3.37	4.43	3.14	3.64
Aromáticos	37	1.99	3.30	2.84	4.26	3.11	3.10
Jet Fuel							

Tipo de hidrocarburo	N° de identificación de la molécula	Log Po/w (iLOGP)	Log Po/w (XLOGP3)	Log Po/w (WLOGP)	Log Po/w (MLOGP)	Log Po/w (SILICOS-IT)	Promedio Log Po/w
Parafinas	52	2.18	3.39	2.20	3.14	1.34	2.45
Isoparafinas	84	3.73	6.43	4.78	5.40	4.27	4.92
Naftenos	87	2.15	3.37	2.20	3.12	2.27	2.62
Aromáticos	109	2.06	3.15	2.25	3.85	2.70	2.80
Diésel							
Parafinas lineales	146	5.85	10.99	8.44	7.60	8.43	8.26
Parafinas ramificadas	150	4.07	6.93	5.28	5.93	4.81	5.40
Cicloparafinas	155	3.62	6.75	4.93	5.28	4.52	5.02
Hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP)	164	2.23	3.94	3.11	4.36	3.58	3.44
Alquilbencenos	184	2.22	3.66	2.61	4.17	3.26	3.19

Nota: La Tabla E.2 del anexo E muestra el reporte oficial de los valores de lipofilia para toda la lista general de moléculas orgánicas descritas en la Tabla B.3 del anexo B.

c. Solubilidad en agua

La Tabla 14 reporta los valores de solubilidad en agua para las mismas moléculas orgánicas referenciadas en la sección anterior, obtenidas a través de la Plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME”. En cuanto a estos valores se generó el siguiente reporte de observaciones:

- Toda aquella molécula orgánica que contenga heteroátomos le da propiedades de solubilidad, en este caso, ninguna molécula de estudio presenta esta peculiaridad.

- Todas las interacciones intermoleculares que se pueden presentar entre las moléculas de hidrocarburos y entre las moléculas de agua e hidrocarburos hacen que sean más afines, por lo tanto, existen valores de solubilidad los cuales proyectan este tipo de comportamiento.
- Por definición, las moléculas de hidrocarburos puros son bastante insolubles en agua, pero “SwissADME” calcula valores para predecir la solubilidad en agua, en base a los métodos topológicos de ESOL (Delaney, 2004) y de (Ali et al., 2012), el cual, genera rangos de solubilidad que van desde insoluble (IS) hasta altamente soluble (AS) de acuerdo al medio en el cual se encuentren, de los cuales se sabe que no van a estar cercanos al agua o disueltos en agua, pero potencialmente estos datos pueden servir en el caso que exista accidentes como derrame de petróleo, o fugas en tuberías, el cual pueda ser remediada rápidamente mediante la inclusión de un agente quelante que permita la rápida separación y así detener la propagación evitando daños ambientales.

Tabla 14

Valores de solubilidad en agua para las moléculas más representativas de las corrientes de salida

Tipo de hidrocarburo	N° de identificación de la molécula	Log S (ESOL)	Solubilidad			Clase	Log S (Ali)	Solubilidad			Clase	Log S (SILICOS-IT)	Solubilidad		Clase
			mg/ml	mol/l	mg/ml			mol/l	mg/ml	mol/l					
													mg/ml	mol/l	
Queroseno															
Parafina	1	-3.42	5.45e-02	3.83e-04	S	-4.75	2.53e-03	1.78e-05	MS	-3.87	1.93e-02	1.36e-04	S		
Isoparafina	8	-3.69	2.90e-02	2.04e-04	S	-5.09	1.15e-03	8.08e-06	MS	-3.49	4.57e-02	3.21e-04	S		
Nafteno	23	-3.61	3.41e-02	2.47e-04	S	-4.35	6.24e-03	4.51e-05	MS	-2.17	9.43e-01	6.82e-03	S		
Aromático	37	-3.45	4.51e-02	3.52e-04	S	-2.98	1.36e-01	1.06e-03	S	-4.03	1.19e-02	9.27e-05	MS		
Jet Fuel															
Parafina	52	-2.29	3.69e-01	5.12e-03	S	-3.07	6.15e-02	8.53e-04	S	-1.73	1.35e+0	1.87e-02	S		
Isoparafina	84	-4.42	6.49e-03	3.81e-05	MS	-6.22	1.02e-04	5.98e-07	PS	-4.32	8.12e-03	4.76e-05	MS		
Nafteno	87	-2.48	2.76e-01	3.27e-03	S	-3.05	7.53e-02	8.95e-04	S	-1.31	4.08e+0	4.85e-02	S		
Aromático	109	-2.97	1.13e-01	1.07e-03	S	-2.82	1.61e-01	1.51e-03	S	-3.12	8.05e-02	7.59e-04	S		

Tipo de hidrocarburo	N° de identificación de la molécula	Log S (ESOL)	Solubilidad			Clase	Log S (Ali)	Solubilidad			Clase	Log S (SILICOS-IT)	Solubilidad		Clase
			mg/ml	mol/l				mg/ml	mol/l				mg/ml	mol/l	
Diésel															
Parafinas lineales	146	-7.41	1.14e-05	3.85e-08	PS	-10.96	3.29e-09	1.11e-11	I	-8.34	1.37e-06	4.61e-09	PS		
Parafinas ramificadas	150	-4.91	2.45e-03	1.24e-05	MS	-6.74	3.59e-05	1.81e-07	PS	-4.39	7.99e-03	4.03e-05	MS		
Cicloparafinas	155	-4.83	2.72e-03	1.49e-05	MS	-6.56	5.07e-05	2.78e-07	PS	-4.13	1.35e-02	7.38e-05	MS		
Hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP)	164	-3.88	1.99e-02	1.31e-04	S	-3.64	3.49e-02	2.29e-04	S	-4.14	1.11e-02	7.28e-05	MS		
Alquilbencenos	184	-3.38	4.96e-02	4.13e-04	S	-3.35	5.38e-02	4.48e-04	S	-3.51	3.72e-02	3.10e-04	S		

Nota: I=Insoluble; PS=Poco soluble; MS=Moderadamente soluble; S=Soluble. La Tabla F.2 del anexo F muestra el reporte oficial de los valores de solubilidad para toda la lista general de moléculas orgánicas descritas en la Tabla B.3 del anexo B.

d. Radar de biodisponibilidad

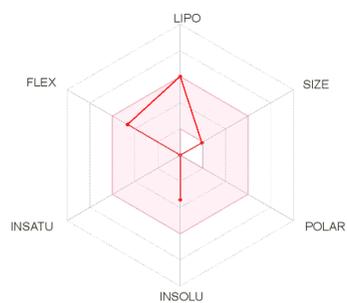
La Figura 39 obtenida a través de la Plataforma Suiza Bioinformática “SwissADME”, muestra los radares de biodisponibilidad para las moléculas representativas de la corriente de queroseno provenientes de la Tabla 6, estos radares reflejan una característica en común, el cual predice que la molécula puede presentar efectos toxicológicos sobre el organismo o puede ocasionar daños severos al momento que entra en contacto con la piel, al ser manipuladas sin ningún tipo de protección, debido a que la línea roja de las moléculas analizadas no están incluidas en su totalidad dentro del área de color rosa, es decir, no se encuentra en el rango de valores óptimos para cualquiera de las propiedades fisicoquímicas, lipofilia y solubilidad en agua.

Específicamente, el radar de la Figura 39.a y 39.b, refleja que el peso molecular (MW) está fuera del rango óptimo, es una molécula flexible y de solubilidad óptima, la Figura 39.c refleja que el peso molecular (MW) está fuera del rango óptimo y presenta una solubilidad óptima, mientras que la Figura 39.d, de igual forma refleja que el peso molecular (MW) está fuera del rango óptimo, a diferencia que el número de instauraciones crece debido a los anillos aromáticos que presenta la molécula, el cual, le da una característica de movilidad limitada.

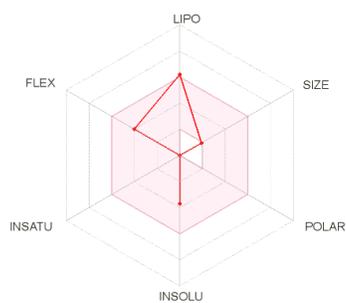
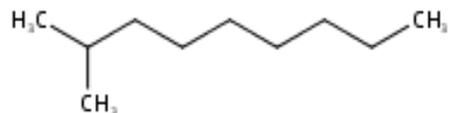
Figura 39

Radares de biodisponibilidad para las moléculas representativas del queroseno en la corriente de salida: a) 1-Parafina; b) 8-Isoparafina; c) 23-Nafteno; d) 37-Aromático

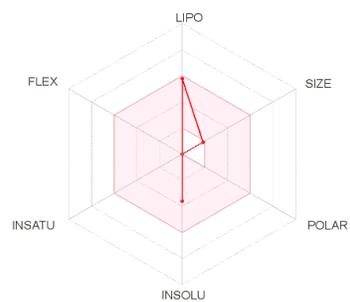
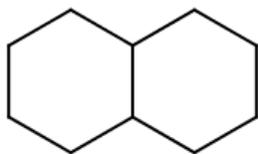
(a)



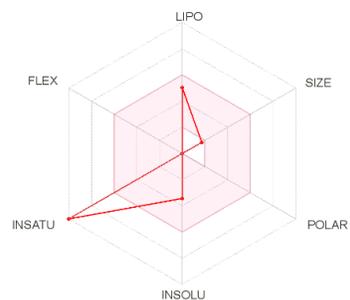
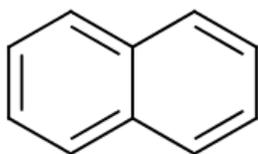
(b)



(c)



(d)



Nota: La Tabla G.2 del anexo G, muestra los radares de biodisponibilidad de todas las moléculas orgánicas de la lista general descritas en la Tabla B.3 del anexo B.

4.5. Obtención de la estructura química 3D y estructura química 3D optimizada con el respectivo valor de la energía mínima de optimización.

4.5.1. Corriente de entrada

a. Estructura química 3D

La Figura 40 obtenida a través del software “Chemcraft”, muestra la estructura química 3D de las moléculas representativas de la corriente de entrada según la Tabla 5. La visualización molecular mediante el software “Avogadro” y la simulación tridimensional de las estructuras, ejerce un papel central en la internalización de los conceptos químicos de Van Der Waals y las interacciones estéricas, es decir, en la conformación o en las interacciones espaciales intermoleculares entre grupo de átomos de una molécula.

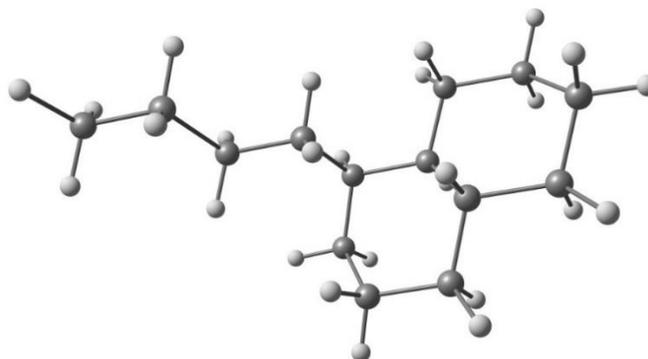
Figura 40

Estructura química 3D de las moléculas representativas de la corriente de entrada: a) 23; b) 50; c) 163; d) 165 ; e) 190; f)199

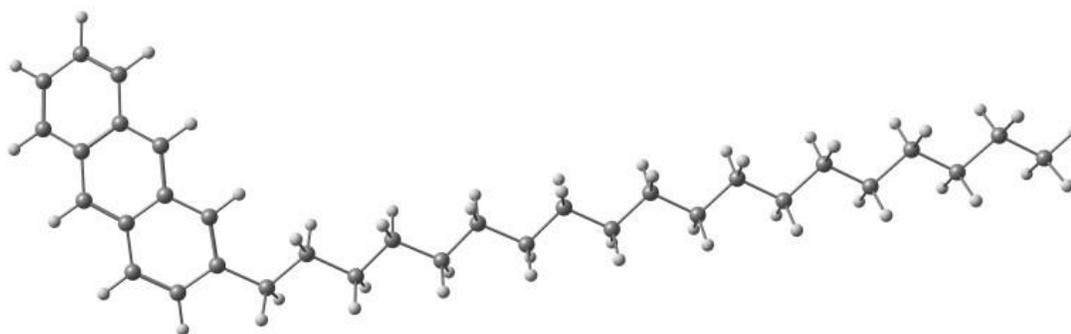
(a)



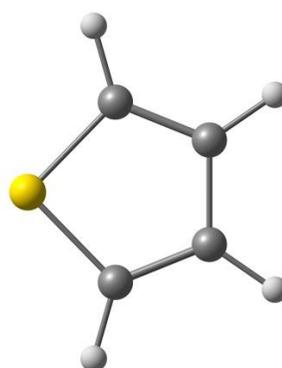
(b)



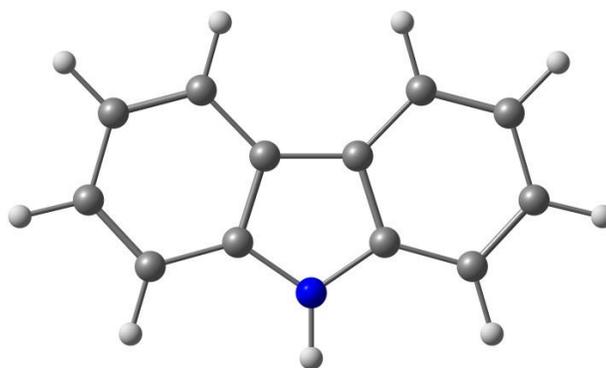
(c)



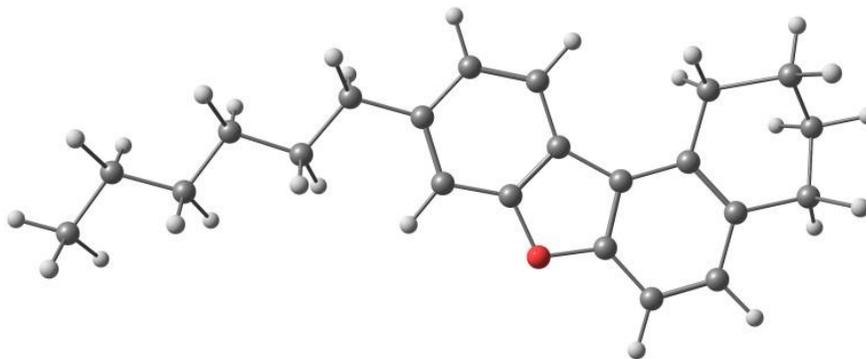
(d)



(e)



(f)



Nota: La Tabla H.1 del anexo H, muestra las estructuras químicas 3D de todas las moléculas orgánicas de la lista general descritas en la Tabla B.1 del anexo B

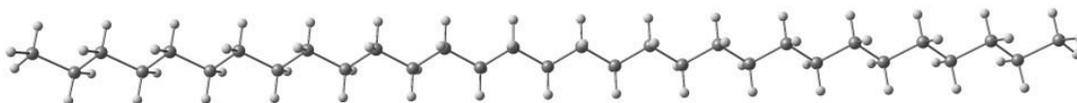
b. Estructura química 3D optimizada

La Figura 41 muestra las estructuras químicas 3D optimizadas mediante software “Avogadro”. Estas moléculas orgánicas al ser optimizadas, busca hallar la configuración espacial de los núcleos de mínima energía de la molécula. La optimización calcula la fuerza sobre cada átomo evaluando el gradiente (primera derivada “dE”) de la energía con respecto a las posiciones atómicas, cuando cada átomo de la geometría de mínima energía es cero, es decir que “dE=0” muestra el valor actual de la energía mínima E en unidades de kJ/mol.

Figura 41

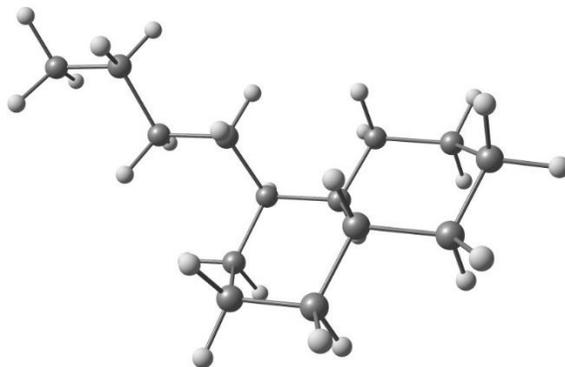
Estructuras químicas 3D optimizadas de las moléculas representativas de la corriente de entrada: a) 23; b) 50; c) 163; d) 165 ;e) 190; f)199

(a)



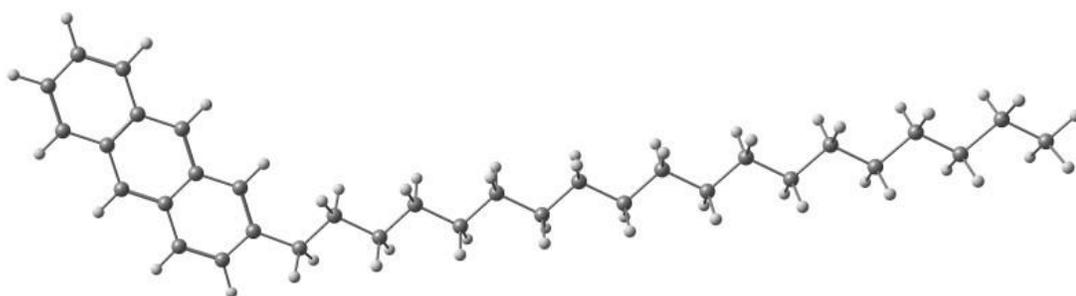
E=-44.5677 kJ/mol

(b)



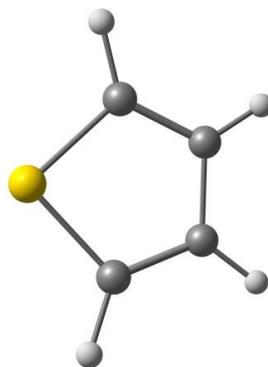
E=58,4359 kJ/mol

(c)



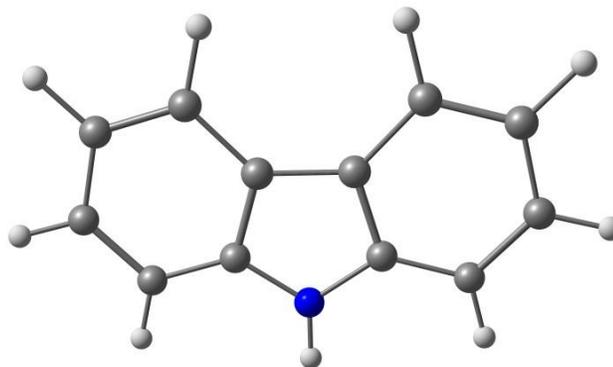
E=178,726kJ/mol

(d)



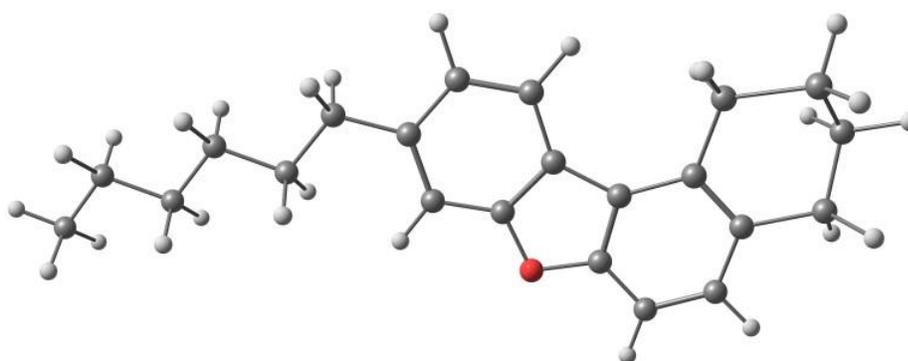
E=18,3347kJ/mol

(e)



$E=121,5\text{kJ/mol}$

(f)



$E=168,448 \text{ kJ/mol}$

Nota: La tabla H.1 del apéndice H, muestra las estructuras 3D optimizadas con sus respectivos valores de E para todas las moléculas orgánicas de la lista general descritos en la Tabla B.1 del anexo B.

4.5.2. Corriente de salida

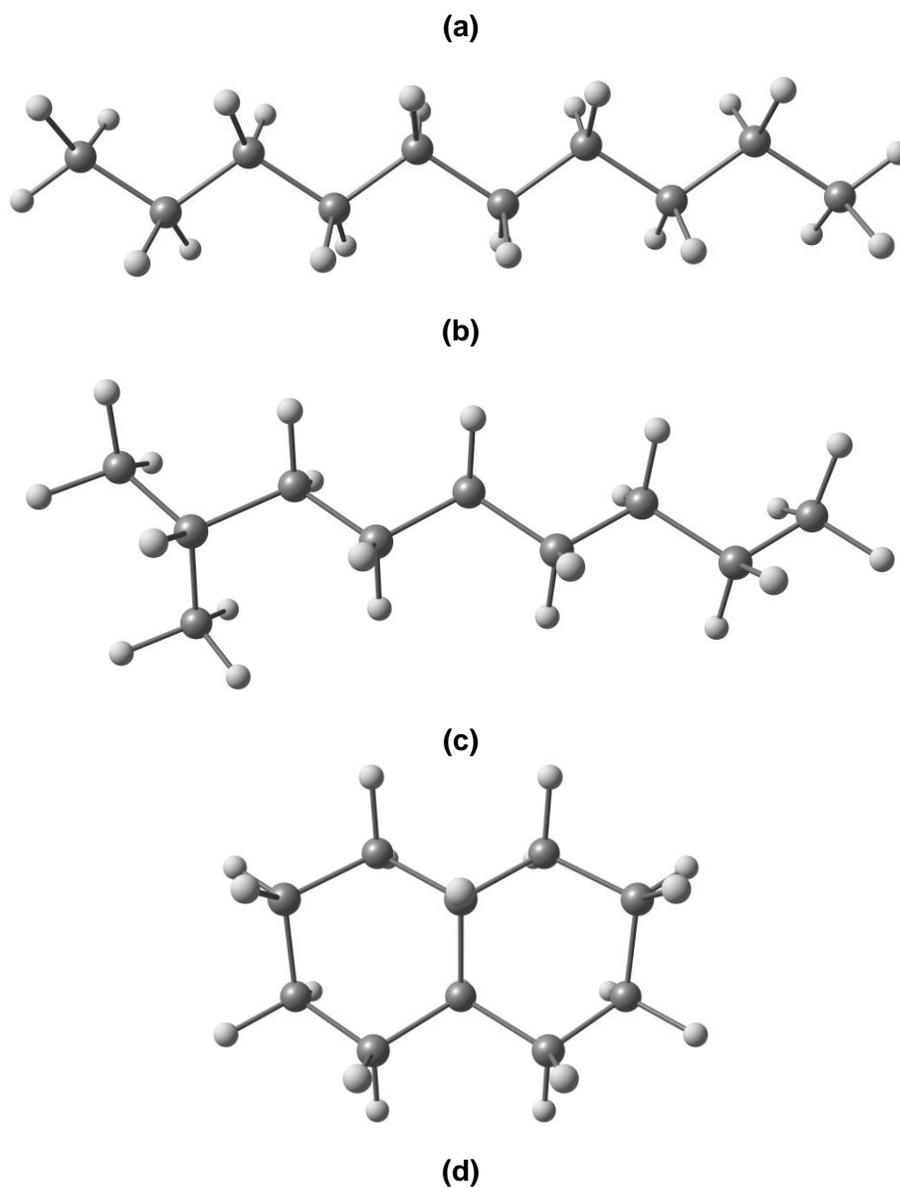
a. Estructuras químicas 3D

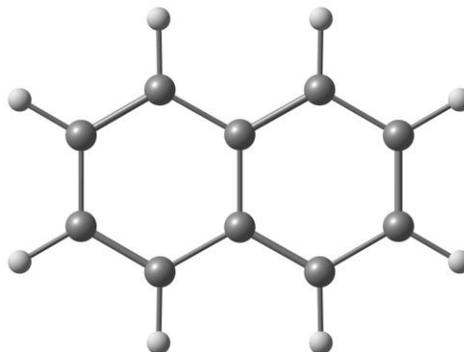
La Figura 42 obtenida a través del software “Chemcraft”, muestra la estructura química 3D de las moléculas representativas de la corriente de queroseno descritas en la Tabla 6. La visualización molecular mediante el software “Avogadro” y la simulación tridimensional de las estructuras, ejerce un papel central en la internalización de los

conceptos químicos de Van Der Waals y las interacciones estéricas, es decir, en la conformación o en las interacciones espaciales intermoleculares entre grupo de átomos de una molécula.

Figura 42

Estructura química 3D de las moléculas representativas del queroseno en la corriente de salida: a) 1-Parafina; b) 8-Isoparafina; c) 23-Nafteno; d) 37-Aromático





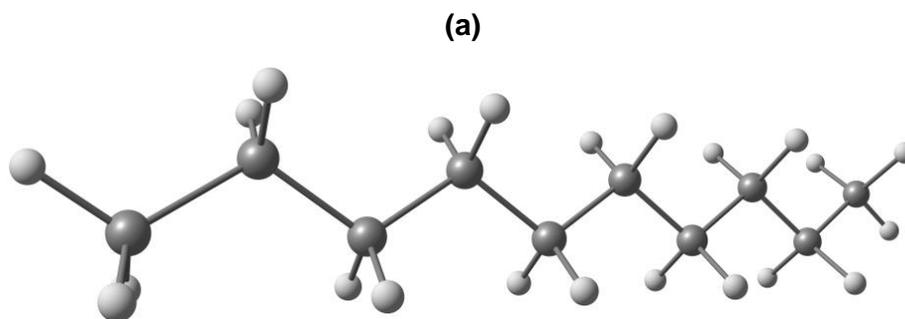
Nota: La Tabla H.2 del anexo H, muestra las estructuras químicas 3D de todas las moléculas orgánicas de la lista general descritas en la Tabla B.3 del anexo B

b. Estructuras químicas 3D optimizadas

La Figura 43 muestra las estructuras químicas 3D optimizadas mediante software “Avogadro”. Estas moléculas orgánicas al ser optimizadas, busca hallar la configuración espacial de los núcleos de mínima energía de la molécula. La optimización calcula la fuerza sobre cada átomo evaluando el gradiente (primera derivada “dE”) de la energía con respecto a las posiciones atómicas, cuando cada átomo de la geometría de mínima energía es cero, es decir que “dE=0” muestra el valor actual de la energía mínima E en unidades de kJ/mol.

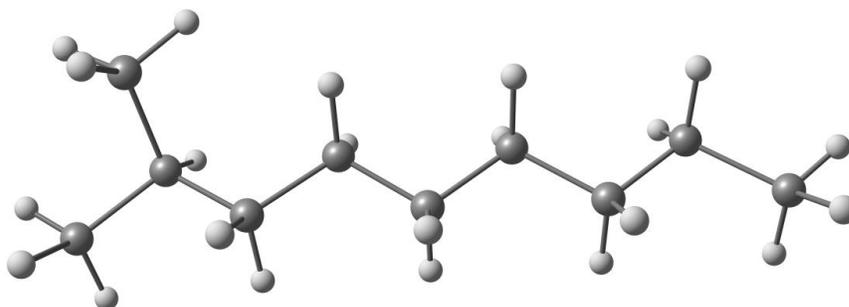
Figura 43

Estructuras químicas 3D optimizadas de las moléculas representativas del queroseno en la corriente de salida: a) 1-Parafina; b) 8-Isoparafina; c) 23-Nafteno; d) 37-Aromático



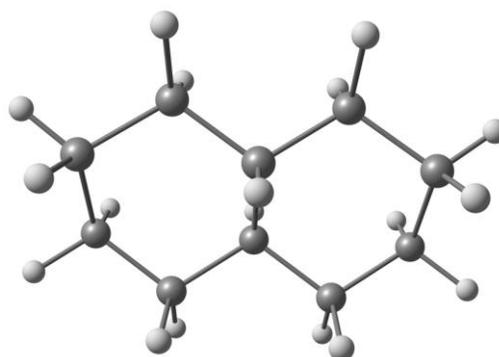
$$E = -26,3734 \left(\frac{kJ}{mol} \right)$$

(b)



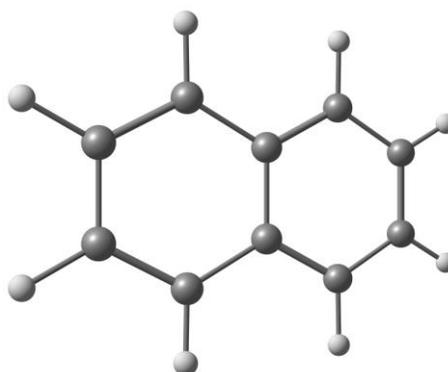
$$E = -2,72734 \left(\frac{kJ}{mol} \right)$$

(c)



$$E = 26,2119 \left(\frac{kJ}{mol} \right)$$

(d)



$$E = 130,347 \left(\frac{kJ}{mol} \right)$$

Nota: La tabla H.2 del apéndice H, muestra las estructuras 3D optimizadas con sus respectivos valores de E para todas las moléculas orgánicas de la lista general descritos en la Tabla B.3 del anexo B.

Capítulo 5

5. Conclusiones y recomendaciones

5.1. Conclusiones

Se determinó computacionalmente las características fisicoquímicas de todas las posibles moléculas químicas orgánicas presentes en las corrientes de entrada y salida del “proceso de hidrocraqueo catalítico” mediante la implementación de datos computacionales confiables con un soporte científico y modelos matemático de respaldo ejecutados y publicados en artículos científicos.

Mediante la búsqueda bibliográfica de moléculas orgánicas se pudo determinar que el alimento al proceso de hidrocraqueo catalítico es predominantemente la corriente de VGO, típicamente con un contenido de 60% en peso de la alimentación total entre moléculas parafinas, aromáticas y naftenos.

Mediante la búsqueda bibliográfica de las moléculas orgánicas, se pudo determinar que para la corriente de queroseno obtenida en el proceso de hidrocraqueo catalítico predominan las isoparafinas y naftenos con pesos moleculares promedio de 167.03 g/mol y 142.28 g/mol respectivamente, para el caso de la corriente de jet fuel predomina las isoparafinas y aromáticos con pesos moleculares promedio de 58.235 g/mol y 125.658 g/mol respectivamente, y por último para la corriente de diésel predominan las parafinas lineales y lo aromáticos policíclicos alquilados con pesos moleculares promedio de 166.984 g/mol y 289.56 g/mol respectivamente.

Las estructuras químicas 2D y cálculos previos generados a través del programa “Chemdraw”, permitió observar con facilidad como se enlazan los diferentes átomos que forman cada molécula orgánica, la geometría molecular y la configuración electrónica de

las mismas, consecutivamente permitió calcular y actualizar la fórmula química, el peso molecular y el análisis elemental en tiempo real a medida en que se dibujan los diferentes tipos de moléculas, además permitió obtener nombres precisos de acuerdo a las reglas sistemáticas propuestas por la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC).

La notación de la estructura química a través del código SMILE, permitió proveer el almacenamiento, recuperación y modelado de estructuras químicas e información química, al ser un método adaptable e inequívoco para especificar la estructura topológica de las moléculas orgánicas y tener la facultad de interactuar con software adicional para poder evaluar las propiedades fisicoquímicas de las moléculas de estudio.

A través del cálculo de las propiedades fisicoquímicas para cada molécula orgánica, se dio a notar el hecho que toda la molécula con un peso molecular alto tiene más átomos y electrones y, por consiguiente, más oportunidades para atracciones intermoleculares y un punto de ebullición más alto, que uno con un peso molecular inferior. Esto se puede evidenciar en las moléculas que tienen las estructuras más extendidas y superficies largas disponibles para unirse a otras moléculas por medio de fuerzas de London, mientras que las moléculas que presentan mayores ramificaciones sucede lo contrario, debido a que son menos compactas, con menos área superficial para las interacciones de fuerzas de London.

Los radares de estructura química y biodisponibilidad, permitieron evaluar de forma rápida y precisa a las moléculas orgánicas que cumplen con el rango de valores óptimos para las propiedades fisicoquímicas, lipofilia y solubilidad en agua, resultados que permiten predecir que moléculas pueden ser consideradas tóxicas o pueden causar efectos nocivos por su alta volatilidad y naturaleza apolar que presentan.

A partir del software “Avogadro”, se pudo extraer las estructuras químicas 3D para todas las moléculas orgánicas, obteniendo así, las distintas conformaciones, los cuales permitieron tener una idea más clara de cómo los factores conformacionales afectan la estructura y reactividad de una molécula, así como también sus propiedades físicas, químicas y biológicas.

Se optimizó cada molécula orgánica, utilizando el campo de fuerza MMFF94 exclusivo para moléculas orgánicas, el cual, permitió experimentar la rotación en torno a un enlace carbono-carbono y carbono-hidrógeno, dando como resultado la energía mínima de optimización de la molécula.

Mediante el estudio *in silico*, se puede determinar las propiedades y características químicas de cada molécula, permitiendo predecir el comportamiento de las moléculas en el proceso de hidrocraqueo catalítico con el propósito de dar paso a investigaciones con estudios *in situ*.

5.2. Recomendaciones

Al existir una gran variedad de isómeros para cada fórmula química, es necesario buscar la estructura base de los principales componentes del petróleo que están en función de sustituyentes de grupos R, que hacen referencia a cadenas de tipo alquilo.

Al dibujar las estructuras químicas en 2D que sean complejas se aplica la “opción limpiar estructura” (“*Clean up structure*” por su traducción en inglés) para obtener una estructura con ángulos de enlace mejor distribuidos.

En la obtención de las propiedades físico químicas de cada molécula, mediante la plataforma Bioinformática Suiza SwissADME, es recomendable utilizar la opción de “recuperar datos” la cual permite obtener un archivo CSV (del inglés comma-separated values) la cual contiene las propiedades de cada molécula organizadas.

Para evitar errores al graficar las estructuras en 3D en el software “*Chemcraft*”, se recomienda guardar todos los archivos en formato tipo “.*mol*” por medio del software “*Avogadro*” .

Bibliografía

- Aleksandrov, P. V., Bukhtiyarova, G. A., & Reshetnikov, S. I. (2019). Study of the Influence Exerted by Addition of Coker Gas Oil to Straight-Run Gas Oil on the Process of Hydrotreating in the Presence of CoMo/Al₂O₃ Catalyst. *Russian Journal of Applied Chemistry*, 92(8), 1077–1083. Recuperado el 21 de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.1134/S1070427219080044>.
- Ali, J., Camilleri, P., Brown, M. B., Hutt, A. J., & Kirton, S. B. (2012). Revisiting the general solubility equation: in silico prediction of aqueous solubility incorporating the effect of topographical polar surface area. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 52(2), 420–428. Recuperado el 10 de febrero del 2021 de <https://doi.org/10.1021/ci200387c>.
- Almaraz, E., Magaña, R., & Yang, P.-H. (2001). *Computational Chemistry Laboratory*.
- Anderson, E., Veith, G. D., & Weininger, D. (1987). SMILES: a line notation and computerized interpreter for chemical structures. In *US EPA Environmental Research Brief* (p. 4).
- Aviation, C. G. (2006). *Aviation Fuels Technical Review*. Chevron Corporation.
- Carey, F. A. (2006). *Química orgánica* (6th ed.). McGraw-Hill.
- Chang, R. (2010). *Química* (10th ed.). McGraw-Hill.
- Chang, R., & Goldsby, K. A. (2017). *Química* (12th ed.). McGraw-Hill Education.
- Chang, S., & Robinson, P. (2017). *Springer Handbook of Petroleum Technology* (C. S. Hsu & P. R. Robinson (Eds.)). Springer International Publishing. Recuperado el 12 febrero del 2021 de <https://doi.org/10.1007/978-3-319-49347-3>.

- Chaudhuri, U. R. (2016). *Fundamentals of Petroleum and Petrochemical Engineering*. In *Fundamentals of Petroleum and Petrochemical Engineering*. CRC Press.
Recuperado el 27 de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.1201/b10486>.
- Cheng, T., Zhao, Y., Li, X., Lin, FuXu, Y., Zhang, X., Li, Y., Wang, R., & Lai, L. (2007). Computation of octanol-water partition coefficients by guiding an additive model with knowledge. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 47(6), 2140–2148.
Recuperado el 27 de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.1021/ci700257y>.
- Cornell, T., & Hutchison, G. R. (2015). *Avogadro: Molecular Editor and Visualization* (Vol. 2017, Issue July). GitBook. Recuperado el 15 de enero del 2021 de <http://pubs.sciepub.com/wjce/5/4/4/index.html>
- Council, N. R. (1995). *Mathematical Challenges from Theoretical/Computational Chemistry*. The National Academies Press. Recuperado el 15 de enero del 2021 de <https://doi.org/10.17226/4886>
- Cramer, C. J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd ed.). Wiley.
- Creton, B., Dartiguelongue, C., de Bruin, T., & Toulhoat, H. (2010). Prediction of the Cetane Number of Diesel Compounds Using the Quantitative Structure Property Relationship. *Energy & Fuels*, 24(10), 5396–5403. Recuperado el 28 de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.1021/ef1008456>.
- Curl, H., & Donnell, K. O. (1977). *Chemical and Physical Properties of Refined*. October.
- 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 16 de enero

del 2021 de <https://doi.org/10.1038/srep42717>

Delaney, J. S. (2004). *ESOL : Estimating Aqueous Solubility Directly from Molecular Structure*. 1000–1005.

Díaz, M. A., & Serrano, J. C. (2020). Catalytic production of jet fuels from biomass. *Molecules*, 25(4). Recuperado el 28 de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.3390/molecules25040802>

Dori, Y. J., & Kaberman, Z. (2012). Assessing high school chemistry students' modeling sub-skills in a computerized molecular modeling learning environment. *Instructional Science*, 40(1), 69–91. Recuperado el 16 de enero del 2021 de <https://doi.org/10.1007/s11251-011-9172-7>

Dupain, X, Rogier, L. ., Gamas, E. ., Makkee, M., & Moulijn, J. . (2003). Cracking behavior of organic sulfur compounds under realistic FCC conditions in a microriser reactor. *Applied Catalysis A: General*, 238(2), 223–238. Recuperado el 2 de enero del 2021 de [https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(02\)00367-8](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(02)00367-8)

Dupain, Xander, Krul, R. A., Schaverien, C. J., Makkee, M., & Moulijn, J. A. (2006). Production of clean transportation fuels and lower olefins from Fischer-Tropsch Synthesis waxes under fluid catalytic cracking conditions. *Applied Catalysis B: Environmental*, 63(3–4), 277–295. Recuperado el 2 de febrero del 2021 de <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2005.10.012>

Fahim, Mohamed, Alsahhaf, T., & Elkilani, A. (2010). *Fundamentals of petroleum refining* (1rst ed.). Elsevier.

Fang, D., Wang, G., Sheng, Q., Ge, S., Gao, C., & Gao, J. (2019). Preparation of hydrogen donor solvent for asphaltenes efficient liquid-phase conversion via heavy

- cycle oil selective hydrogenation. *Fuel*, 257, 115886. Recuperado el 5 de enero del 2021 de <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.115886>
- Faroon, O., Mandell, D., & Navarro, H. (1995). *TOXICOLOGICAL PROFILE FOR JET FUELS JP-4 AND JP-7*. Recuperado el 12 de diciembre del 2020 de https://stacks.cdc.gov/view/cdc/6252/cdc_6252_DS1.pdf
- Frantsina, E. V., Grinko, A. A., Krivtsova, N. I., Maylin, M. V., & Sycheva, A. A. (2020). Identification of hydrocarbon compositions of diesel fractions and assessment of their effect on fuel operational characteristics. *Petroleum Science and Technology*, 38(4), 338–344. Recuperado el 12 de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.1080/10916466.2019.1705856>
- Gad, S. C. (2014). Diesel Fuel. In *Encyclopedia of Toxicology: Third Edition* (pp. 115–118). Elsevier. Recuperado el 12 de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-386454-3.00837-X>
- 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 28 de diciembre del 2020 de [https://doi.org/10.1016/0923-0467\(95\)80014-x](https://doi.org/10.1016/0923-0467(95)80014-x)
- Hanwell, M. D., Curtis, D. E., Lonie, D. C., Vandermeerschd, T., Zurek, E., & Hutchison, G. R. (2012). Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, 4(8), 17. Recuperado el 12 de enero del 2021 de <https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17>
- Hattori, H., & Ono, Y. (2018). Catalysts and catalysis for acid–base reactions. In *Metal Oxides in Heterogeneous Catalysis* (pp. 133–209). Elsevier. Recuperado el 20 de febrero del 2021 de <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-811631-9.00004-1>

- Hsu, C. S., & Robinson, P. R. (2017). *Springer Handbook of Petroleum Technology* (C. S. Hsu & P. R. Robinson (Eds.)). Springer International Publishing. Recuperado el 20 de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.1007/978-3-319-49347-3>
- Im, S. I., Shin, S., Park, J. W., Yoon, H. J., Go, K. S., Nho, N. S., & Lee, K. B. (2018). Selective separation of solvent from deasphalted oil using CO₂ for heavy oil upgrading process based on solvent deasphalting. *Chemical Engineering Journal*, 331, 389–394. Recuperado el 12 de enero del 2021 de <https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.08.094>
- Jin, N., Wang, G., Yao, L., Hu, M., & Gao, J. (2016). Synergistic Process for FCC Light Cycle Oil Efficient Conversion To Produce High-Octane Number Gasoline. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 55(17), 5108–5115. Recuperado el 2 de enero del 2021 de <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.6b00360>
- Kaltschmitt, T., & Deutschmann, O. (2012). Fuel Processing for Fuel Cells. In *Advances in Chemical Engineering* (First, p. 64). Elsevier.
- Kayode Coker, A. (2018). *Petroleum Refining Design and Applications Handbook*. John Wiley & Sons.
- Kwek, W., Khan, M. K., Sarkar, B., Insyani, R., Yi, M., & Kim, J. (2017). A non-catalytic, supercritical methanol route for producing high-yield saturated and aromatic compounds from de-oiled asphaltenes. *The Journal of Supercritical Fluids*, 120, 140–150. Recuperado el 20 de enero del 2021 de <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2016.11.001>
- Lam, N. L., Smith, K. R., Gauthier, A., & Bates, M. N. (2012). Kerosene: A review of household uses and their hazards in low-and middle-income countries. *Journal of Toxicology and Environmental Health - Part B: Critical Reviews*, 15(6), 396–432.

Recuperado el 27 de diciembre del 2020 de

<https://doi.org/10.1080/10937404.2012.710134>

Leach, A. R. (2001). *Molecular Modelling: Principles and Applications*. Prentice Hall.

Recuperado el 15 de enero del 2021 de

<https://books.google.com.ec/books?id=kB7jsbV-uhkC>

Leszczynski, J. (2012). *Handbook of Computational Chemistry*. Springer. Recuperado el

15 de enero del 2021 de <https://books.google.es/books?id=aJn6UBI2YCwC>

Lewis-Atwell, T., Townsend, P. A., & Grayson, M. N. (2020). Comparisons of different force fields in conformational analysis and searching of organic molecules: A

review. *Tetrahedron*, 79, 131865. Recuperado el 16 de enero del 2021 de

<https://doi.org/10.1016/j.tet.2020.131865>

Liang, F., Lu, M., Keener, T. C., Liu, Z., & Khang, S. J. (2005). The organic composition of diesel particulate matter, diesel fuel and engine oil of a non-road diesel

generator. *Journal of Environmental Monitoring*, 7(10), 983–988. Recuperado el 27

de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.1039/b504728e>

Liljefors, I., & Pettersson, T. (1996). Reviews in Computational Chemistry. In K. B.

Lipkowitz & D. B. Boyd (Eds.), *Reviews in Computational Chemistry* (Vol. 9). John

Wiley & Sons. Recuperado el 15 de enero del 2021 de

<https://doi.org/10.1002/9780470125861>

Lipkowitz, K. B., & Boyd, D. B. (Eds.). (1990). *Review in Computational Chemistry 10*.

Wiley-VCH.

Lyubimov, A. V., Bohnert, T., & Prakash, C. (2012). ADME Profiling in Drug Discovery

and Development: An Overview. *Encyclopedia of Drug Metabolism and*

Interactions. Recuperado el 16 de enero del 2021 de

<https://doi.org/10.1002/9780470921920.edm021>

McMurry, J., & Castellion, M. E. (2003). *Fundamentals of general, organic, and biological chemistry* (4th ed.). Pearson Education, Inc.

Moriguchi, I., Hirono, S., Liu, Q., Nakagome, I., & Matsushita, Y. (1992). Simple Method of Calculating Octanol/Water Partition Coefficient. *Chemical and Pharmaceutical Bulletin*, 40(1), 127–130. Recuperado el 15 de febrero del 2021 de <https://doi.org/10.1248/cpb.40.127>

Oh, Y., Shin, J., Noh, H., Kim, C., Kim, Y.-S., Lee, Y.-K., & Lee, J. K. (2019). Selective hydrotreating and hydrocracking of FCC light cycle oil into high-value light aromatic hydrocarbons. *Applied Catalysis A: General*, 577, 86–98. Recuperado el 27 de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2019.03.004>

Ouellette, R. J., & Rawn, J. D. (2015). 1 - Structure of Organic Compounds. In R. J. Ouellette & J. D. Rawn (Eds.), *Principles of Organic Chemistry* (pp. 1–32). Elsevier. Recuperado el 20 de enero del 2020 de <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-12-802444-7.00001-X>

Pujro, R. (2014). *Mecanismos de formación de aromáticos en cortes de destilados medios del FCC. Impacto sobre su calidad y consecuencias del uso de residuos*. Universidad Nacional del Litoral.

Ramachandran, K. I., Deepa, G., & Namboori, K. (2008). Computational Chemistry and Molecular Modeling. In *Computational Chemistry and Molecular Modeling*. Springer. Recuperado el 20 de enero del 2021 de <https://doi.org/10.1007/978-3-540-77304-7>

Rayan, B., & Rayan, A. (2017). Avogadro Program for Chemistry Education: To What

Extent can Molecular Visualization and Three-dimensional Simulations Enhance Meaningful Chemistry Learning? *World Journal of Chemical Education*, 5(4), 136–141. Recuperado el 15 de enero del 2021 de <https://doi.org/10.12691/wjce-5-4-4>

Rodríguez, E., Gutiérrez, A., Palos, R., Vela, F. J., Azkoiti, M. J., Arandes, J. M., & Bilbao, J. (2020). Co-cracking of high-density polyethylene (HDPE) and vacuum gasoil (VGO) under refinery conditions. *Chemical Engineering Journal*, 382, 122602. Recuperado el 24 de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.122602>

Rutkowska, E., Pajak, K., & Jozwiak, K. (2012). Lipophilicity - Methods of determination and its role in medicinal chemistry. *Acta Poloniae Pharmaceutica*, 70, 3–18.

Saleh, T. (2016). *Applying Nanotechnology to the Desulfurization Process in Petroleum Engineering*. Engineering Science Reference.

Scherzer, J., & Gruia, A. (1996). *Hydrocracking Science and Technology Chemical Industries* (First). CRC Press.

Sellergren, B., & Hall, A. J. (2001). Chapter 2 Fundamental aspects on the synthesis and characterisation of imprinted network polymers. *Techniques and Instrumentation in Analytical Chemistry*, 23(C), 21–57. Recuperado el 16 de enero del 2021 de [https://doi.org/10.1016/S0167-9244\(01\)80005-6](https://doi.org/10.1016/S0167-9244(01)80005-6)

Soni, K. K., Boahene, P. E., Rambabu, N., Dalai, A. K., & Adjaye, J. (2013). Hydrotreating of coker light gas oil on SBA-15 supported nickel phosphide catalysts. *Catalysis Today*, 207, 119–126. Recuperado el 15 de enero del 2021 de <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2012.07.012>

Speight, J. (2017). *Handbook of petroleum* (First). CRC Press.

- Speight, J. G. (2015). Handbook of petroleum product analysis. In *Journal of Chemical Information and Modeling* (Segunda, Vol. 53, Issue 9). John Wiley & Sons, Inc.
- Speight, J., & Ozum, B. (2001). *Petroleum Refining Process*. CRC Press.
- Speight, J., & Wyoming, L. (2006). *The Chemistry and Technology of Petroleum* (Fourth Edi). CRC Press.
- Srinivas, B. K., Pant, K. K., Gupta, S. K., Saraf, D. N., Choudhury, I. R., & Sau, M. (2019). A carbon-number lump based model for simulation of industrial hydrotreaters: Vacuum gas oil (VGO). *Chemical Engineering Journal*, 358, 504–519. Recuperado el 20 de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.10.019>
- Torres, C., Varela, P., Frías, M. V., & Flores, P. (2017). Implementación de Avogadro como visualizador y constructor de moléculas para alumnos de primer año de Odontología en la asignatura Química General y Orgánica. *Educacion Quimica*, 28(1), 22–29. Recuperado el 14 de febrero del 2021 de <https://doi.org/10.1016/j.eq.2016.09.003>
- Vempatapu, B. P., Tripathi, D., Kumar, J., & Kanaujia, P. K. (2019). Determination of kerosene as an adulterant in diesel through chromatography and high-resolution mass spectrometry. *SN Applied Sciences*, 1(6), 614. Recuperado el 27 de diciembre del 2020 de <https://doi.org/10.1007/s42452-019-0637-7>
- Wade, L. (2011). *Química Orgánica* (7th ed.). Pearson Educación.
- Wang, M., Lee, H., & Molburg, J. (2004). Allocation of energy use in petroleum refineries to petroleum products. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 9(1), 34–44. Recuperado el 27 de diciembre del 2020 de

<https://doi.org/10.1007/bf02978534>

- Wauquier, J. (2004). *El Refino del Petróleo Petroleo crudo, productos petrolíferos, esquemas de fabricación*. Díaz de Santos.
- Whitten, K., Stanley, G. G., Peck, L., & Davis, R. E. (2010). *Chemistry* (C. Learning.Inc. (Ed.); 9th ed.).
- Wiehe, I. (2008). *Process Chemistry of Petroleum Macromolecules*. CRC Press.
- Wildman, S. A., & Crippen, G. M. (1999). *Prediction of Physicochemical Parameters by Atomic Contributions*. 868–873.
- Young, D. C. (2001). *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems* (Vol. 9). John Wiley & Sons, Ltd.
- Yurkanis, P. (2007). *Fundamentos de Química orgánica*. Pearson Educación.

Anexos