



UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS ESPE-L



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA CARRERA DE PETROQUÍMICA

TEMA: ESTUDIO IN SILICO, TEÓRICO COMPUTACIONAL DE LAS CORRIENTES DE ENTRADA Y SALIDA DE UNA REFINERÍA DE PETRÓLEO ENFOCADO EN EL PROCESO DE “DESASFALTADO” 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

AUTORES: JÁCOME SHIGUI, JUAN ANDRÉS Y SÁNCHEZ MORALES RAFAEL EDUARDO

DIRECTOR: ING. SANTANA ROMO, FABIÁN MAURICIO, Ph.D.





CONTENIDO

Introducción

Objetivos

Metodología

Análisis de Resultados

Conclusiones

Recomendaciones



Introducción



**Deposición
del crudo**

Crudo de Oriente
Auca

**Análisis
SARA**



Método simplificado de fraccionamiento de petróleo

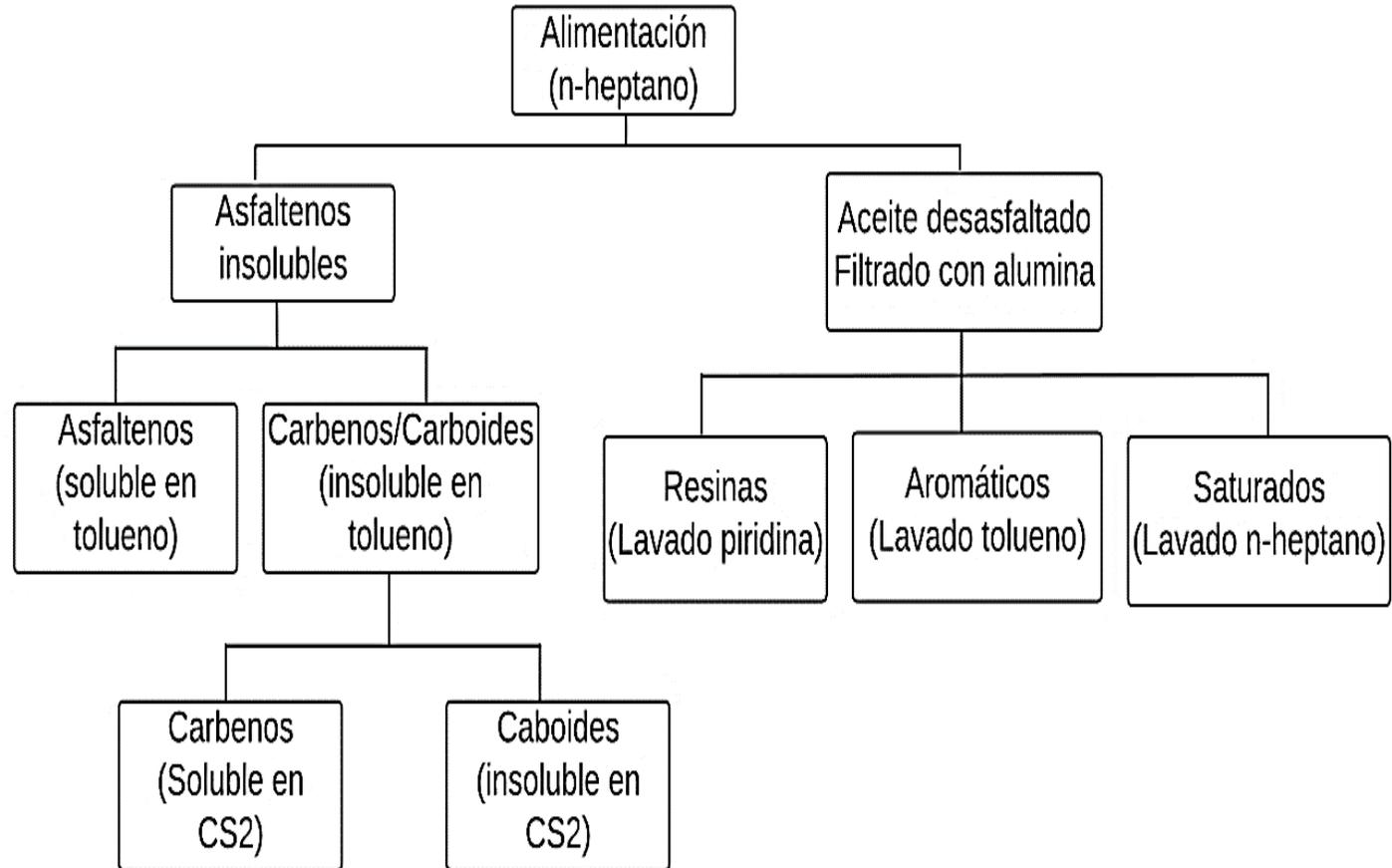
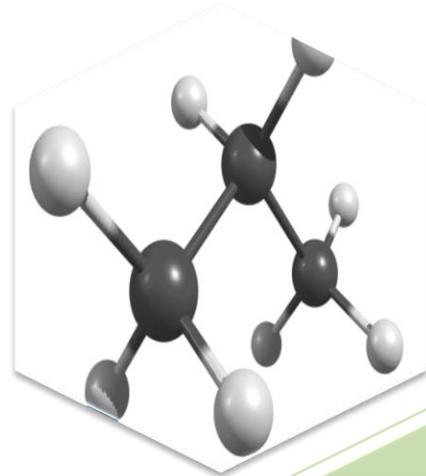


Diagrama del proceso simplificado (Speight, 2004)





Introducción



Desasfaltado
por propano

Patente
US 20140238903A1
Modelo de Yen –Mullins

Campo de la
invención





Objetivos

Objetivo General

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



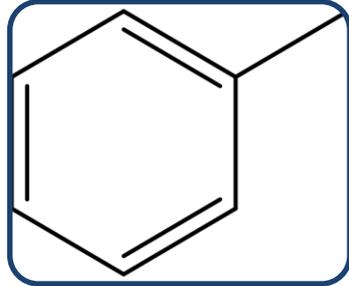


Objetivos Específicos

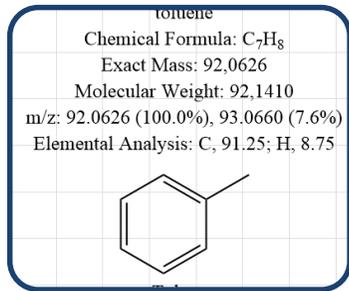
- Establecer una lista de potenciales moléculas químicas de origen orgánico presentes en el proceso de desasfaltado.
- Procesar cada una de las moléculas químicas de origen orgánico, desde su nomenclatura, estructura química 2D, código SMILES y reporte de propiedades básicas como fórmula, peso molecular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



METODOLOGÍA



Generar un lista de estructuras químicas en 2D



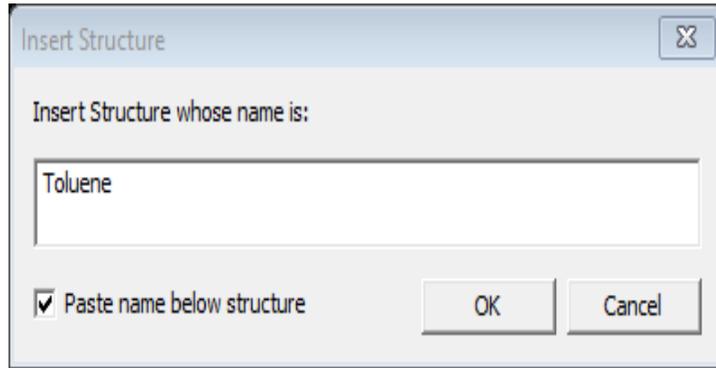
Análisis de las propiedades químicas básicas y código SMILES



Calcular las propiedades fisicoquímicas básicas mediante SwissADME.

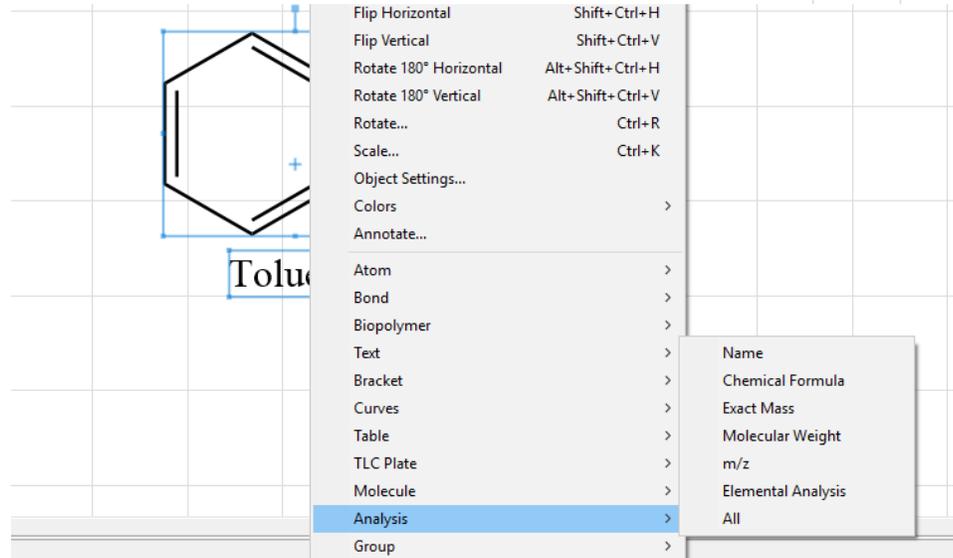


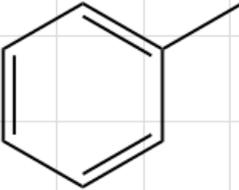
ChemDraw



Insertar estructura
Nota: ChemDraw

Generar Análisis
Nota: ChemDraw

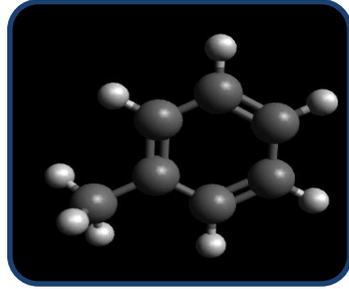


toluene
Chemical Formula: C ₇ H ₈
Exact Mass: 92,0626
Molecular Weight: 92,1410
m/z: 92.0626 (100.0%), 93.0660 (7.6%)
Elemental Analysis: C, 91.25; H, 8.75

Toluene

Propiedades Químicas Básicas
Nota: ChemDraw



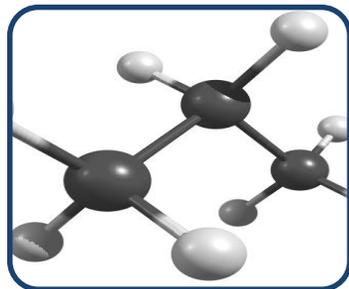
METODOLOGÍA



Optimizar la molécula, Avogadro

```
1.41550000 -0.08100000 -0.06210000 6 C  
1.38170000 0.06900000 0.05070000 6 C  
-0.76880000 1.16030000 -0.10690000 6 C  
-0.64470000 -1.24740000 0.01890000 6 C  
0.62380000 1.23460000 -0.04520000 6 C  
0.74780000 -1.17180000 0.08050000 6 C  
-2.90960000 -0.16360000 -0.16400000 6 C  
2.46570000 0.12730000 0.09760000 1 H  
-1.34680000 2.07780000 -0.18920000 1 H  
-1.12530000 -2.22290000 0.03540000 1 H  
1.11720000 2.20240000 -0.07510000 1 H  
1.33790000 -2.08180000 0.14860000 1 H  
-3.38080000 0.72260000 0.27390000 1 H
```

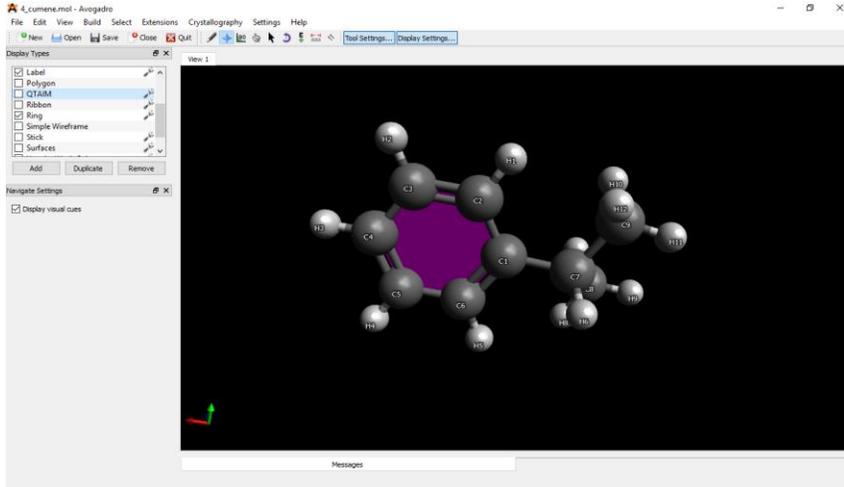
Obtención de las coordenadas espaciales



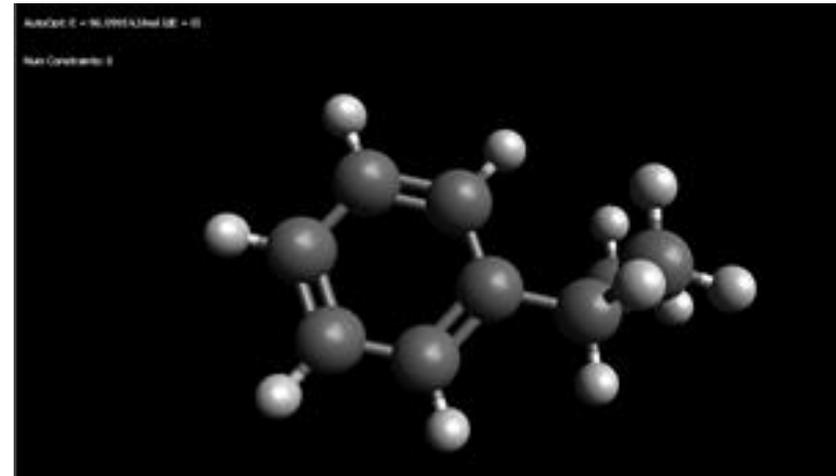
Generación de la molécula 3D



Avogadro



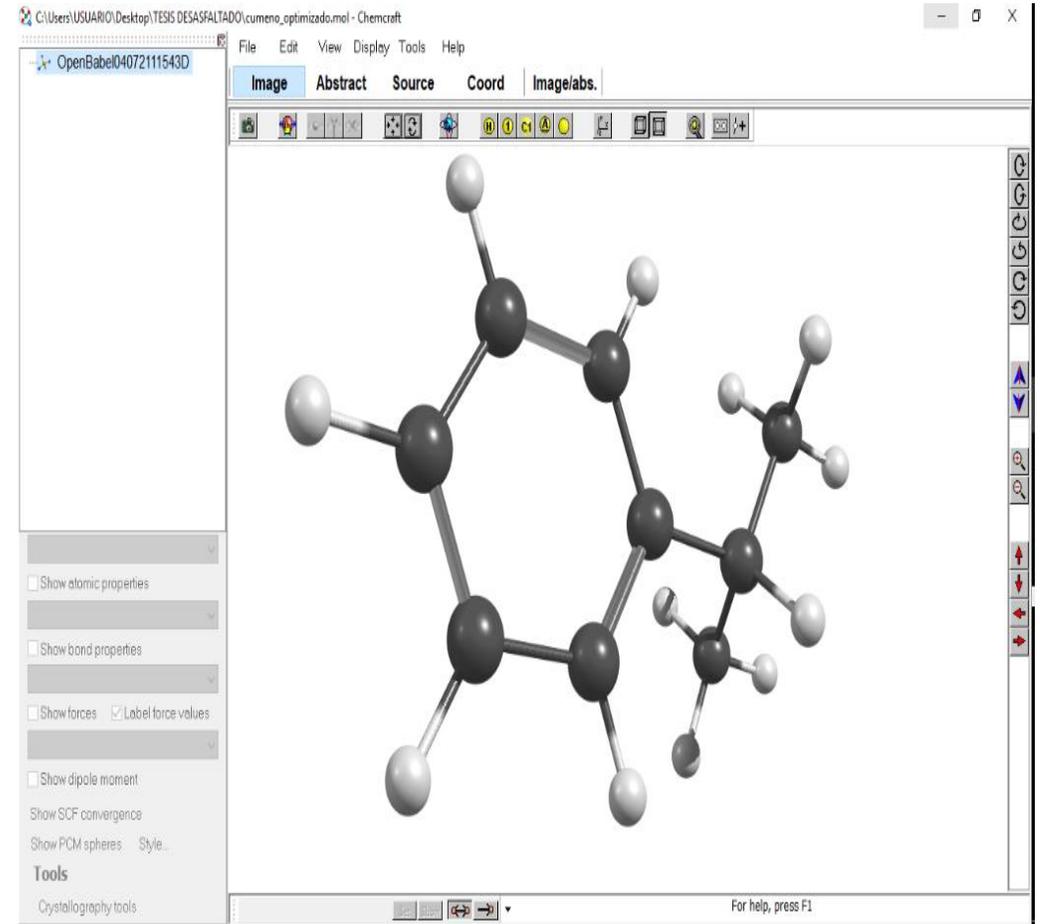
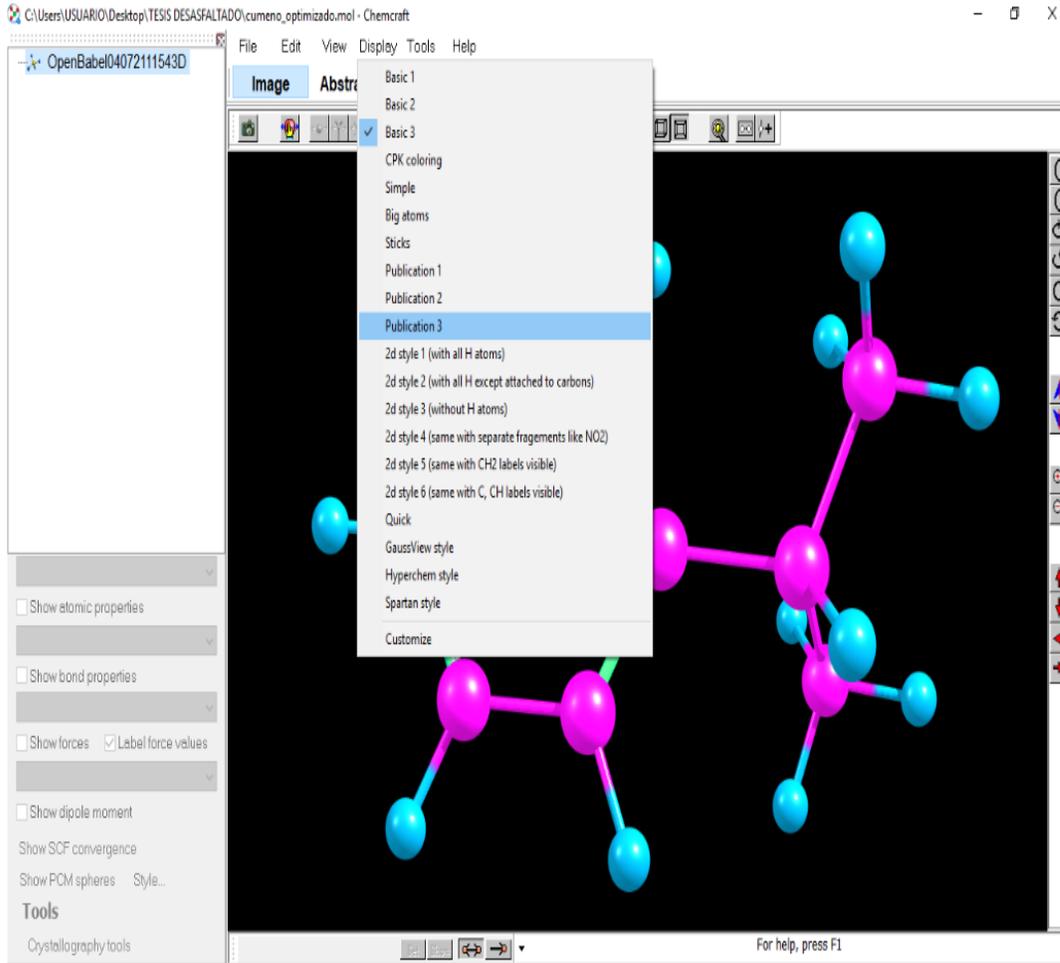
Molécula sin optimizar
Nota: Avogadro v 1.2



Molécula optimizada
Nota: Avogadro v 1.2



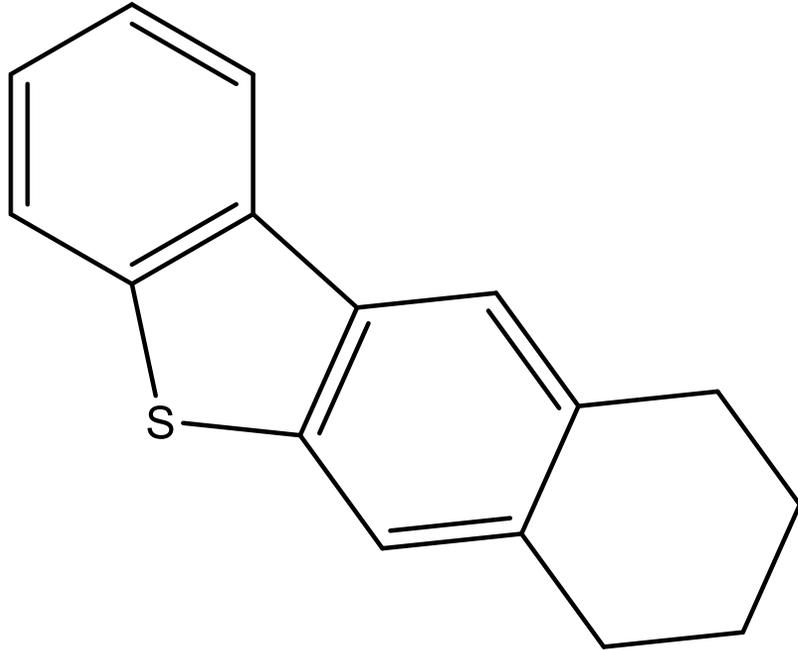
ChemCraft



Publicación 1 - 2
Nota: Avogadro v 1.2



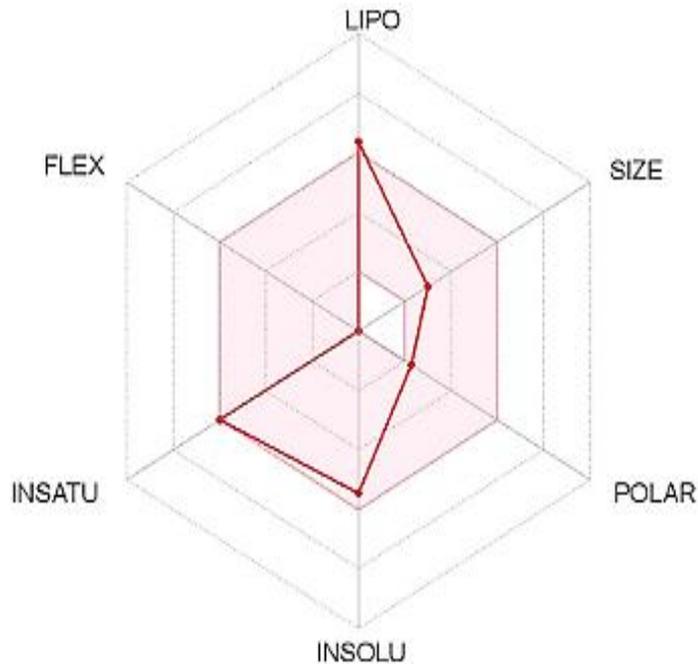
ANÁLISIS DE RESULTADOS



Naftenodibenzotiofeno - Benzotiofenos	
Nomenclatura IUPAC	naftenodibenzotiofeno
Código SMILES	C1(SC2=C3C=C4C(CCCC4)=C2)=C 3C=CC=C1
Fórmula Química	C ₁₆ H ₁₄ S
Peso Molecular	238,0816
Análisis Elemental	C: 80,63%, H: 5,92%, S:13,45%

Nota: ChemDraw

Naftenodibenzotiofeno - Benzotiofenos

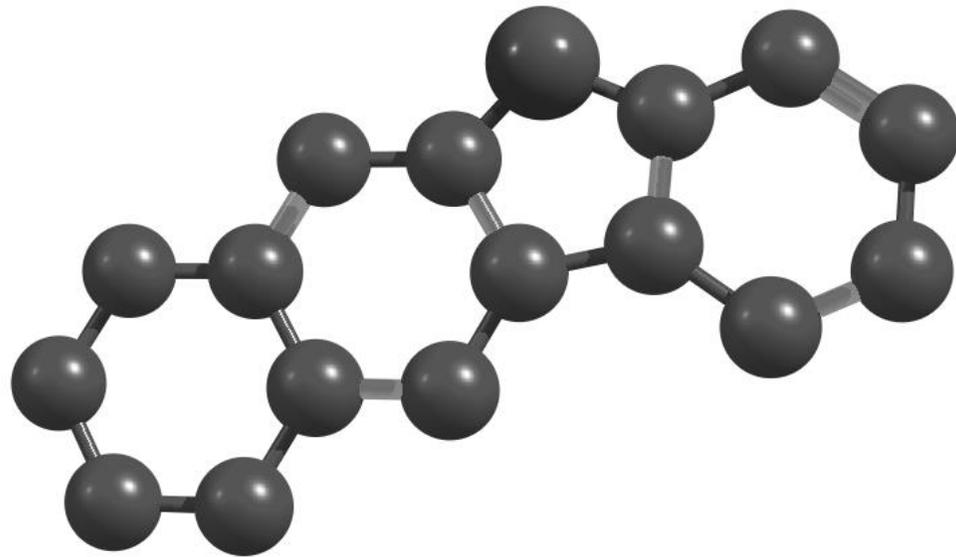


Radar de Biodisponibilidad
Nota: SwissADME

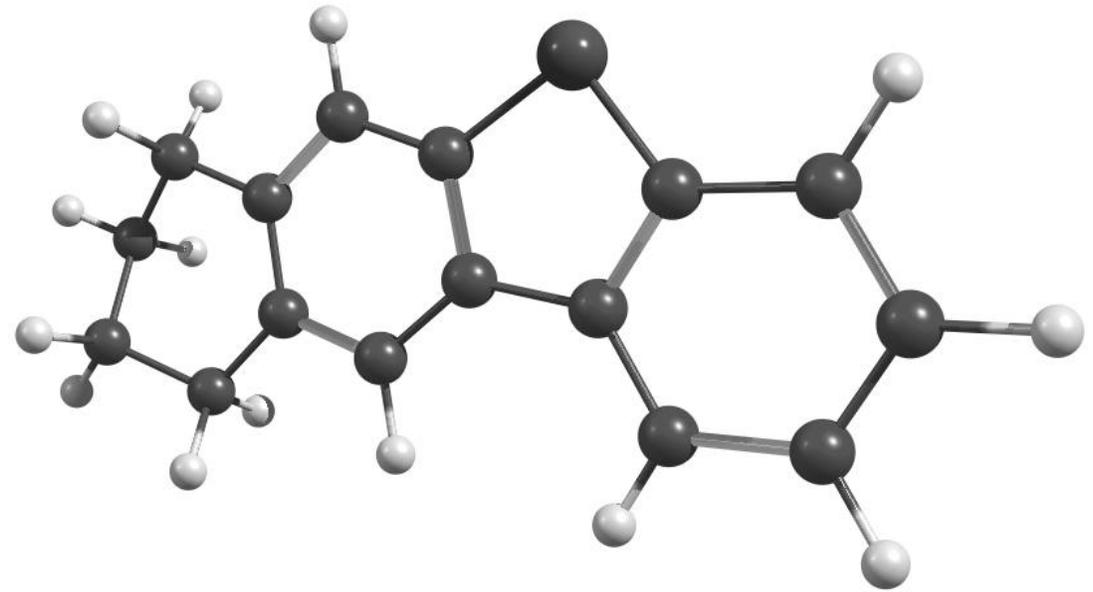
Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	3,09
Log P _{o/w} (XLOGP3)	5,66
Log P _{o/w} (WLOGP)	4,93
Log P _{o/w} (MLOGP)	4,94
Log P _{o/w} (SILICOS - IT)	6,08
Consenso Log P _{o/w} (iLOGP)	4,94
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-5,45
Solubilidad	8,47e-04 mg/ml; 3,55e-06 mol/l
Clase soluble	Moderadamente Soluble
Log S (Ali)	-6,02
Solubilidad	2,29e-04 mg/ml; 9,60e-07 mol/l
Clase Soluble	Pobrememente Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-6,13
Solubilidad	1,75e-04 mg/ml; 7,36e-07 mol/l
Clase Soluble	Pobrememente Soluble

Naftenodibenzotiofeno - Benzotiofenos

Energía de optimización (kJ/mol) 182.077



Molécula sin optimizar
Avogadro

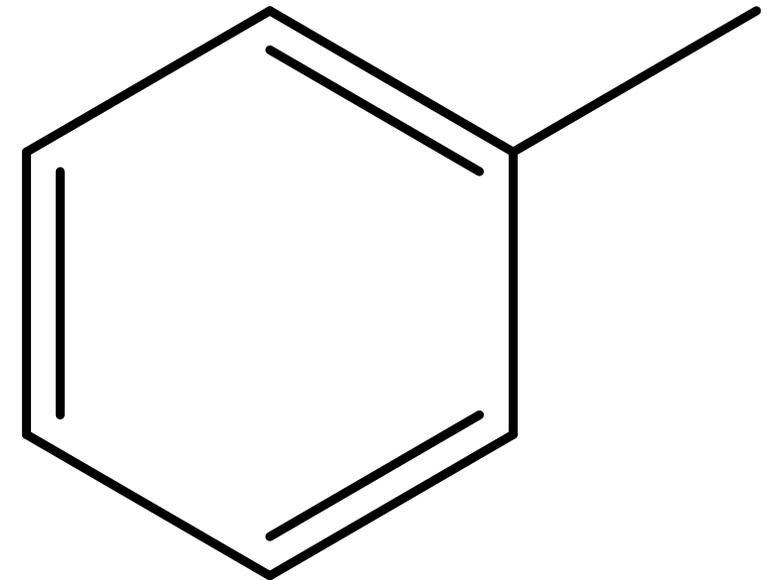


Molécula Optimizada



ANÁLISIS DE RESULTADOS

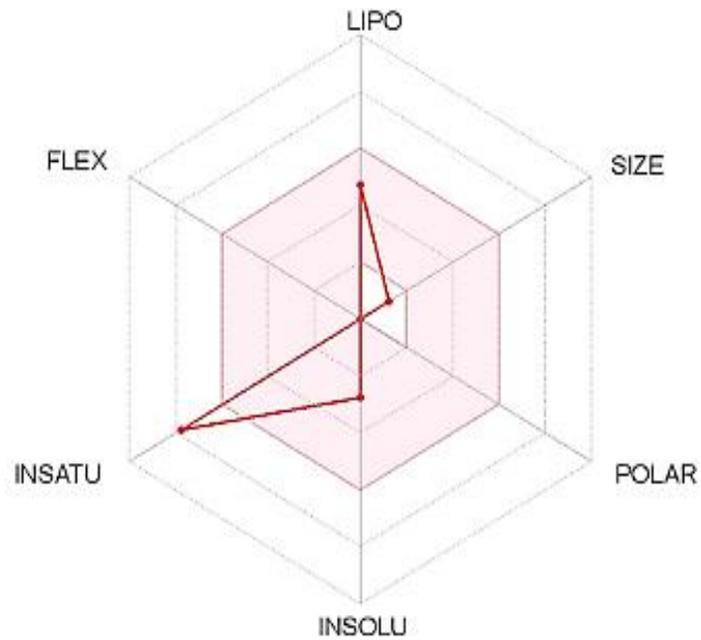
Tolueno - Alquilbenceno	
Nomenclatura IUPAC	Metilbenceno
Código SMILES	<chem>CC1=CC=CC=C1</chem>
Fórmula Química	C_7H_8
Peso Molecular	92,1410
Análisis Elemental	C: 91,25%, H: 8,75%



Tolueno
Nota: ChemDraw



Tolueno - Alquilbenceno



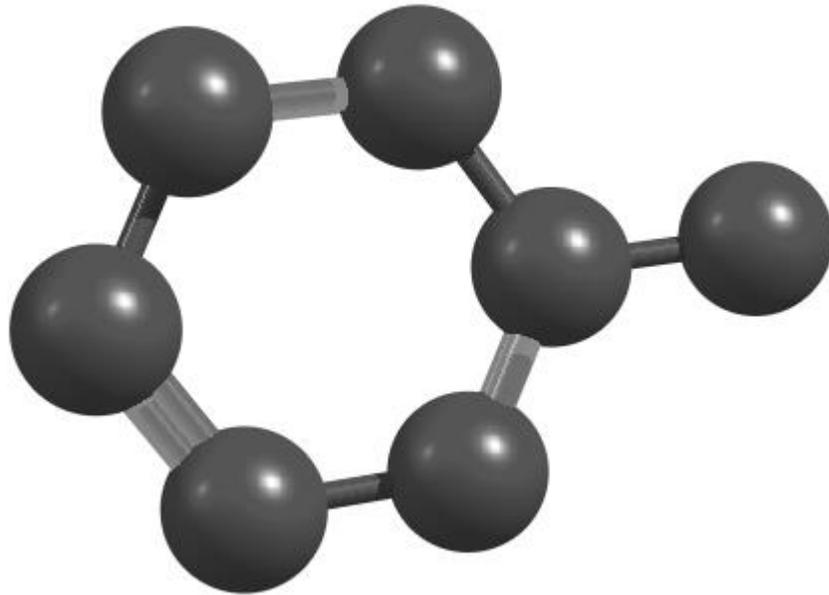
Radar de Biodisponibilidad
Nota: SwissADME

Lipofilia	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	1,85
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	2,73
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	2,00
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	3,52
Log $P_{o/w}$ (SILICOS - IT)	2,44
Consenso Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	2,51
Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2,77
Solubilidad	1,58e-01 mg/ml; 1,72e-03 mol/l
Clase soluble	Soluble
Log S (Ali)	-2,38
Solubilidad	3,80e-01 mg/ml; 4,13e-03 mol/l
Clase Soluble	Soluble
Log S (SILICOS- IT)	-2,69
Solubilidad	1,88e-01 mg/ml; 2,04e-03 mol/l
Clase Soluble	Soluble

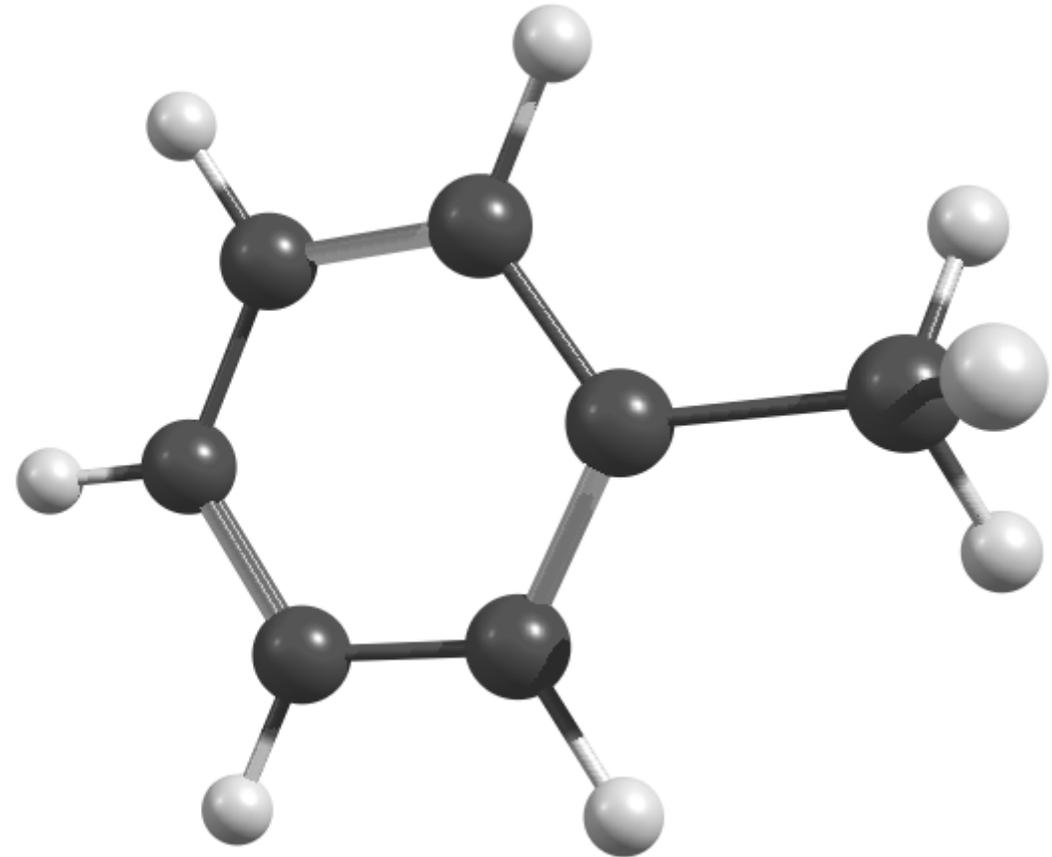
Tolueno - Alquilbenceno

Energía de optimización
(kJ/mol)

77.1107



Molécula sin optimizar
Nota: Avogadro v 1.2



Molécula Optimizada





CONCLUSIONES

- El modelo de Yen – Mullins desarrolla una ciencia predictiva de los hidrocarburos aromáticos policíclicos asfálticos (PAHs) apoyada de la espectroscopia de masas de resonancia de ciclón iónico por transformada de Fourier, situación que valida la su simulación de su composición por medio del campo de fuerza MMFF94 al ser este adecuado para sistemas no condensables como es el caso de los componentes asfálticos de inapropiada separación de fases debido a su naturaleza aromática.





CONCLUSIONES

- La deposición de los asfaltenos no se produce después de que la presión ha caído por debajo de su punto de burbuja, repartiéndose así los depósitos existentes por el crudo bifásico y permitiendo observar un comportamiento lineal en el trazado logarítmico de la presión y el tiempo.
- El crudo ecuatoriano de oriente gracias a su bajo índice de carbono de Conradson es susceptible a ser analizado por medio del desasfaltado por GLP, método propuesto por Devotta Irudayaraj en la patente USA 38903A1, 2014 permitiendo controlar el rendimiento del aceite desasfaltado entre el 15 y 60% para un disolvente fijo al variar la temperatura del funcionamiento del proceso.





CONCLUSIONES

- El desarrollo de la estructura 3D de componentes orgánicos permite el estiramiento de los enlaces intermoleculares, la flexión de los ángulos y los cambios de los ángulos diedros observados en los componentes presentes en las corrientes de desasfaltado por medio del campo de fuerza MMFF94.





CONCLUSIONES

- La parametrización de MMFF94 utilizó una gran cantidad de datos computacionales de alta calidad, alrededor de 2500 estructuras optimizadas por medio de la química cuántica, abarcando casi todas las moléculas orgánicas estables lo que da certeza de las propiedades fisicoquímicas expuestas de las moléculas provenientes de los corrientes del proceso de desasfaltado., sin embargo, presenta un error del 32% al compararlo con los campos de fuerza AMBER94 y OPLS-AA en el modelado de líquidos orgánicos y biomoleculares condensables en solución.





RECOMENDACIONES

Validar la experimentación expuesta por Devotta Irudayaraj en su patente 38903A1, 2014 utilizando el petróleo crudo de oriente con el propósito de conocer el rendimiento del aceite desasfaltado y cuantificar el residuo del carbono de Conradson como fuente de futuras investigaciones relacionadas con la caracterización de aceites base para lubricantes.





Gracias

