



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

Rodríguez Oñate, Danny Alexander y Tapia Tapia, Erika Gabriela

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 ENERGÍA Y MECÁNICA  
CARRERA DE PETROQUÍMICA**

**CERTIFICACIÓN**

Certifico que el trabajo de unidad de integración curricular, “Estudio *in silico*, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “destilación atmosférica” 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 los señores Rodríguez Oñate, Danny Alexander y Tapia Tapia, Erika Gabriela, 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, 13 de abril del 2021.



Firmado electrónicamente por:


**FABIAN  
MAURICIO  
SANTANA ROMO**

---












Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio, PhD.

C.C.:1802925139

## Document Information

Analyzed document	Destilacion atmosferica_Rodriguez_Tapia.pdf (D101194028)	
Submitted	4/10/2021 3:37:00 PM	
Submitted by	Fabián Santana	 Firmado electrónicamente por: <b>FABIAN MAURICIO SANTANA ROMO</b>
Submitter email	fmsantana@espe.edu.ec	
Similarity	4%	
Analysis address	fmsantana.espe@analysis.arkund.com	

## Sources included in the report

<b>SA</b>	<b>Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE / Tesis Anabel Herrera.docx</b> Document Tesis Anabel Herrera.docx (D40661682) Submitted by: vealbuena@espe.edu.ec Receiver: vealbuena.espe@analysis.arkund.com	 11
<b>SA</b>	<b>Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE / tesis_Santiago_Clavijo-ok_final.pdf</b> Document tesis_Santiago_Clavijo-ok_final.pdf (D54170097) Submitted by: edluna@espe.edu.ec Receiver: edluna.espe@analysis.arkund.com	 3
<b>W</b>	URL: <a href="http://www.une.edu.pe/docentesune/jjhoncon/Descargas/Fasciculos%20CTA/Los%20Hidroc...">http://www.une.edu.pe/docentesune/jjhoncon/Descargas/Fasciculos%20CTA/Los%20Hidroc...</a> Fetched: 11/30/2020 5:14:53 AM	 3
<b>W</b>	URL: <a href="https://www.slideshare.net/luismigellazarodelao/libro-de-quimica-organica">https://www.slideshare.net/luismigellazarodelao/libro-de-quimica-organica</a> Fetched: 8/11/2020 3:12:09 PM	 1
<b>W</b>	URL: <a href="http://anyflip.com/xqubm/ucby/basic/101-150">http://anyflip.com/xqubm/ucby/basic/101-150</a> Fetched: 12/12/2020 5:02:59 AM	 8
<b>W</b>	URL: <a href="https://www.slideshare.net/ErickGomezmarmol/curso-de-gasotecnia-udo-62126188">https://www.slideshare.net/ErickGomezmarmol/curso-de-gasotecnia-udo-62126188</a> Fetched: 7/25/2020 7:29:29 PM	 1
<b>W</b>	URL: <a href="https://resources.aprendoencasa.pe/red/orientation/teachers/group/competencias/res...">https://resources.aprendoencasa.pe/red/orientation/teachers/group/competencias/res...</a> Fetched: 4/10/2021 3:38:00 PM	 1
<b>W</b>	URL: <a href="https://tesis.ipn.mx/jspui/bitstream/123456789/8241/1/RIVAS%20MEZA.pdf">https://tesis.ipn.mx/jspui/bitstream/123456789/8241/1/RIVAS%20MEZA.pdf</a> Fetched: 7/30/2020 2:27:48 AM	 1
<b>SA</b>	<b>Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE / 1 Tesis David 05-03-2018.docx</b> Document 1 Tesis David 05-03-2018.docx (D36138902) Submitted by: hmmolero@espe.edu.ec Receiver: hmmolero.espe@analysis.arkund.com	 1
<b>W</b>	URL: <a href="https://en.wikipedia.org/wiki/Simplified_molecular-input_line-entry_system">https://en.wikipedia.org/wiki/Simplified_molecular-input_line-entry_system</a> Fetched: 4/10/2021 3:38:00 PM	 2
<b>W</b>	URL: <a href="https://doi.org/10.1201/b10486">https://doi.org/10.1201/b10486</a> Fetched: 4/10/2021 3:38:00 PM	 1



**ESPE**  
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS  
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

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

**AUTORÍA DE RESPONSABILIDAD**

Nosotros, Rodríguez Oñate, Danny Alexander, con cédula de ciudadanía n° 1719134478 y Tapia Tapia, Erika Gabriela, con cédula de ciudadanía n° 0504390378, 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 “destilación atmosférica” 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, 13 de abril del 2021.

Una firma manuscrita en azul que parece decir 'Danny Alexander'.

---

Rodríguez Oñate, Danny Alexander

C.C.: 1719134478

Una firma manuscrita en azul que parece decir 'Erika Tapia'.

---

Tapia Tapia, Erika Gabriela

C.C.: 0504390378



# ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS  
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE ENERGÍA Y MECÁNICA  
CARRERA DE PETROQUÍMICA

### AUTORIZACIÓN DE PUBLICACIÓN

Nosotros, Rodríguez Oñate, Danny Alexander, con cédula de ciudadanía n° 1719134478 y Tapia Tapia, Erika Gabriela, con cédula de ciudadanía n° 0504390378, 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 “destilación atmosférica” 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 autoría y responsabilidad.

Latacunga, 13 de abril del 2021.

---

Rodríguez Oñate, Danny Alexander

C.C.: 1719134478

---

Tapia Tapia, Erika Gabriela

C.C.: 0504390378

## DEDICATORIA

A mis padres y hermanas que han sido mi fuerza para esta lucha, que aunque no les he tenido a mi lado, siempre les he sentido cerca de mí. Mi madre, una luchadora de toda cepa, quien me enseñó a ser fuerte e ir a contracorriente si es necesario; a mi padre que siempre me ha inculcado el respeto hacia las personas y el valor de cada esfuerzo; a mi hermana Nerea que siempre será mi vida entera; mi hermana Keyra que es uno de mis tesoros más valiosos y por último a Dios, quien me dio la vida y ha cuidado de mí y de mi familia para poder cumplir este sueño de ser un profesional.

***Danny***

El presente trabajo se lo dedico a mis padres, Gustavo y Mercedes por ser el pilar fundamental de mi vida, por brindarme su apoyo incondicional y haberme dado la confianza para seguir con mis sueños y lograr cumplir esta meta profesional. A mis hermanos Carlos y Alex, por ser esas personitas acolitadoras que me cuidan y me alienta a ser cada día mejor.

A mis abuelitos paternos, Luis y Olimpia, quienes son esos angelitos que desde el cielo me cuidan y a los cuales tengo presente siempre en mi corazón. A mis abuelitos maternos, Luis y Victoria, por ser esos abuelitos cariñosos que me han enseñado que siendo humilde se llega muy lejos.

A mis primas, María, Sofía y Lucia, quienes han estado conmigo en cada momento de mi vida dándome su apoyo incondicional y siendo esas hermanas del alma que siempre están ahí aconsejándote e impulsándote a cumplir todos tus sueños.

***Erika***

## AGRADECIMIENTO

Sobre todo mi mayor agradecimiento es a mis padres, quienes me han ayudado a conseguir este propósito, que aunque a la distancia sé que siempre podré contar con ellos. A toda mi familia que me ha apoyado desde que llegué a Ecuador, dándome una mano para poder alcanzar este objetivo.

Mi tío Jonathan con quien compartí muchos momentos bonitos, que más que un tío es como hermano para mí. Mi tía Marina quien estuvo ahí en las buenas y en las malas acompañándome y aconsejándome como lo haría una mamá.

A todos los profesores y maestros que han tenido la paciencia y la vocación para enseñarme paso a paso cada materia, pero sobre todo a la ingeniera Donoso e ingeniera Pazmiño a quienes les guardo un gran cariño. Al director de carrera, el Dr. Román Rodríguez que siempre hizo todo lo posible para que nuestra enseñanza siempre fuera la mejor. Al Dr. Fabián Santana quien me dio la oportunidad de trabajar con él en este proyecto.

A mi compañera de grupo de Tesis, Gaby, que más que una compañera siempre la he considerado como una hermana, que siempre ha estado en las malas y peores, y espero que esta amistad siga por muchos años más. A todos mis compañeros de curso que junto a ellos se hizo más fácil llegar a la meta y por último a mis grandes amigos con los que llegué a tener muchas experiencias que me ayudaron a madurar y a concentrarme en mi objetivo.

***Danny***



Mi agradecimiento especial primero a Dios, por llenarme de bendiciones, darme las fuerzas necesarias para salir adelante y por haberme permitido culminar con éxito mis estudios universitarios.

A mis padres, todo mi agradecimiento es a ustedes papitos por ese apoyo económico y emocional que siempre me han brindado, por alentarme a seguir adelante cuando sentía que ya no podía más, sin duda este triunfo es nuestro.

A mi querida Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE-L y a todos mis profesores que aportaron con ese granito de arena a mi formación académica, gracias por el conocimiento brindado y la paciencia que tuvieron para forjar nuevos profesionales. Le agradezco a mi tutor de tesis el Doctor Santana, por haberme tenido la confianza y haberme dejado ser parte de este proyecto.

Y un gracias infinito a mi compañero de tesis Danny, que más que mi amigo lo considero mi hermano, gracias por haber sido parte de este maravilloso viaje llamado universidad. A mis amigos y compañeros que fueron parte de esta linda etapa de mi vida, gracias por las experiencias vividas y por haber hecho que este sueño sea un poquito más fácil de cumplir.

***Erika***

**Tabla de contenidos**

<b>Carátula</b> .....	1
<b>Certificación</b> .....	2
<b>Urkund</b> .....	3
<b>Autoría de responsabilidad</b> .....	4
<b>Autorización</b> .....	5
<b>Dedicatoria</b> .....	6
<b>Agradecimiento</b> .....	8
<b>Tabla de contenidos</b> .....	10
<b>Índice de tablas</b> .....	17
<b>Índice de figuras</b> .....	22
<b>Índice de esquemas</b> .....	25
<b>Resumen</b> .....	26
<b>Abstrac</b> .....	29
<b>Generalidades</b> .....	28
Introducción .....	28
Planteamiento del problema .....	29
Justificación e importancia .....	30
Hipótesis .....	30
Objetivos.....	31
<i>Objetivo general</i> .....	31
<i>Objetivos específicos</i> .....	31

	11
VARIABLES DE INVESTIGACIÓN	31
<i>Variable independiente</i>	31
<i>Variable dependiente</i>	31
<b>Fundamento Teórico</b>	32
Petróleo	32
<i>Propiedades del petróleo crudo</i>	32
Gravedad API	32
Punto de fluidez	33
Punto de ebullición	34
Número de octano	34
Número de cetano	34
<i>Composición del petróleo</i>	35
Parafinas	36
Olefinas	37
Naftenos	38
Aromáticos	39
Compuestos de azufre	40
Compuestos de oxígeno	41
Compuestos de nitrógeno	42
Compuestos metálicos	42
Asfaltenos	43
Resinas	43

<i>Refinería de petróleo</i> .....	44
Destilación atmosférica .....	46
<i>Definición</i> .....	46
<i>Descripción del proceso</i> .....	47
<i>Productos obtenidos de la unidad de destilación de crudo atmosférico</i> .....	49
Nafta.....	50
Queroseno.....	52
Gasóleo (diésel). .....	52
Aceite combustible residual. ....	53
<i>Equipos que forman la unidad de destilación atmosférica</i> .....	54
Columna.....	54
Embalajes.....	56
Bandejas. ....	56
<i>Desarrollo del balance de masa para la unidad de destilación de crudo</i> .....	57
Química computacional.....	60
<i>Definición.</i> ....	60
<i>Modelos Computacionales.</i> .....	61
<i>Estructura de optimización.</i> .....	62
<i>Programas computacionales.</i> .....	62
ChemDraw. ....	62
Página de Swissadme. ....	62
Avogadro.....	63

Pymol.....	64
Propiedades químicas básicas.....	65
<i>Nombres sistemáticos o de la IUPAC</i> .....	65
<i>Fórmula molecular</i> .....	65
<i>Peso molecular</i> .....	66
<i>Composición en porcentaje</i> .....	66
<i>Análisis elemental</i> .....	66
Propiedades fisicoquímicas.....	67
<i>Hibridación <math>sp^3</math></i> .....	67
<i>Refractividad molar</i> .....	67
<i>Lipofilicidad</i> .....	68
<i>Solubilidad de compuestos orgánicos</i> .....	68
Interacciones intermoleculares.....	69
<i>Fuerzas dipolo-dipolo</i> .....	69
<i>Fuerzas de dispersión de London</i> .....	70
<i>Enlace por puente hidrógeno</i> .....	70
<b>Metodología</b> .....	71
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de destilación atmosférica.....	71
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i> .....	71
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de destilación atmosférica.....	72
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i> .....	72

Procesamiento y obtención de estructuras químicas 2D y propiedades químicas básicas .....	73
<i>Generación de estructuras químicas en 2D</i> .....	73
<i>Procesamiento de propiedades básicas</i> .....	74
<i>Generación automática del código SMILES</i> .....	75
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i> .....	75
Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas .....	76
<i>Procesamiento a través del código SMILES</i> .....	76
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i> .....	77
Cálculo y obtención de estructuras 3D.....	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> .....	83
<b>Resultados y discusión</b> .....	84
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de destilación atmosférica .....	84
<i>Compuestos Parafínicos</i> .....	84
<i>Compuestos Nafténicos</i> .....	86
<i>Compuestos Aromáticos</i> .....	88
<i>Compuestos orgánicos con contenido de azufre</i> .....	90
<i>Compuestos orgánicos con contenido de oxígeno</i> .....	91
<i>Compuestos orgánicos con contenido en nitrógeno</i> .....	92
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de destilación atmosférica .....	93

<i>Gas combustible</i> .....	93
<i>Gasolina</i> .....	94
<i>Nafta</i> .....	96
<i>Queroseno</i> .....	101
<i>Diésel</i> .....	103
<i>Residuo atmosférico</i> .....	109
Procesamiento de las moléculas químicas de origen orgánico, desde su estructura química 2D, nomenclatura, código SMILES y reporte de propiedades básicas como fórmula, peso molecular y análisis elemental. ....	
<i>Crudo de petróleo</i> .....	110
<i>Gas combustible</i> .....	114
<i>Gasolina</i> .....	116
<i>Nafta</i> .....	118
<i>Queroseno</i> .....	120
<i>Diésel</i> .....	122
<i>Residuo atmosférico</i> .....	124
Cálculo de las propiedades fisicoquímicas básicas de las moléculas de origen orgánico, mediante la plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME .....	
<i>Crudo de petróleo</i> .....	127
<i>Gas combustible</i> .....	137
<i>Gasolina</i> .....	144
<i>Nafta</i> .....	149

<i>Queroseno</i> .....	155
<i>Diésel</i> .....	160
<i>Residuo atmosférico</i> .....	166
Cálculo de las estructuras 3D de las moléculas orgánicas, mediante el software Avogadro, con la obtención de las configuraciones y conformaciones finales .....	173
<i>Crudo de petróleo</i> .....	173
<i>Gas combustible</i> .....	176
<i>Gasolina</i> .....	178
<i>Nafta</i> .....	180
<i>Queroseno</i> .....	182
<i>Diésel</i> .....	184
<i>Residuo atmosférico</i> .....	186
<b>Conclusiones y recomendaciones</b> .....	189
Conclusiones .....	189
Recomendaciones .....	191
<b>Lista de abreviaciones</b> .....	192
<b>Bibliografía</b> .....	193
<b>Anexos</b> .....	199



## Índice de tablas

<b>Tabla 1</b> <i>Clasificación de crudos</i> .....	33
<b>Tabla 2</b> <i>Composición elemental de petróleo crudo</i> .....	35
<b>Tabla 3</b> <i>Rango de hidrocarburos y de ebullición de fracciones de petróleo</i> .....	46
<b>Tabla 4.</b> <i>Análisis típicos de dos fracciones de nafta pura de dos tipos crudos</i> .....	51
<b>Tabla 5</b> <i>Características del gasóleo atmosférico típico (AGO) y gasóleo de vacío (VGO)</i> .....	53
<b>Tabla 6</b> <i>Lista de moléculas orgánicas de hidrocarburos parafínicos</i> .....	84
<b>Tabla 7</b> <i>Lista de moléculas orgánicas de hidrocarburos nafténicos</i> .....	86
<b>Tabla 8</b> <i>Lista de moléculas orgánicas de hidrocarburos aromáticos</i> .....	88
<b>Tabla 9</b> <i>Lista de moléculas orgánicas del crudo de petróleo con contenido de azufre</i> ..	90
<b>Tabla 10</b> <i>Lista de moléculas orgánicas del crudo de petróleo con contenido de oxígeno</i> .....	91
<b>Tabla 11</b> <i>Lista de moléculas orgánicas del crudo de petróleo con contenido de nitrógeno</i> .....	92
<b>Tabla 12</b> <i>Lista de moléculas orgánicas del gas combustible</i> .....	93
<b>Tabla 13</b> <i>Lista de moléculas orgánicas de la gasolina</i> .....	94
<b>Tabla 14</b> <i>Lista de moléculas orgánicas de la nafta</i> .....	96
<b>Tabla 15</b> <i>Lista de moléculas orgánicas del queroseno</i> .....	101
<b>Tabla 16</b> <i>Lista de moléculas orgánicas del diésel</i> .....	103
<b>Tabla 17</b> <i>Lista de moléculas orgánicas más representativas del residuo atmosférico</i> .	109
<b>Tabla 18</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de iso-butano</i> .....	110
<b>Tabla 19</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de ciclopentano</i> .....	110
<b>Tabla 20</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de isopreno</i> .....	111
<b>Tabla 21</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de metanotiol</i> .....	112
<b>Tabla 22</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de metanol</i> .....	113

<b>Tabla 23</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de piridina</i> .....	113
<b>Tabla 24</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de metano</i> .....	114
<b>Tabla 25</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de etano</i> .....	115
<b>Tabla 26</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de propano</i> .....	115
<b>Tabla 27</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de butano</i> .....	116
<b>Tabla 28</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de n-pentano</i> .....	116
<b>Tabla 29</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de ciclohexano</i> .....	117
<b>Tabla 30</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de benceno</i> .....	118
<b>Tabla 31</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de 2,4-dimetilpentano</i> .....	119
<b>Tabla 32</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de isopropilciclopentano</i> .....	119
<b>Tabla 33</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de 1, 3,5-trimetilbenceno</i> .....	120
<b>Tabla 34</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de n-octadecano</i> .....	121
<b>Tabla 35</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de tolueno</i> .....	121
<b>Tabla 36</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de fluoreno</i> .....	122
<b>Tabla 37</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de 2,7-dimetil-4,5-dietiloctano</i> .....	123
<b>Tabla 38</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de 2-feniltetradecano</i> .....	123
<b>Tabla 39</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de dimetil-3-naftiloctano</i> .....	124
<b>Tabla 40.</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de o-dicetilbenceno</i> ... ..	125
<b>Tabla 41</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de n-hexadecilbenceno</i> .....	125
<b>Tabla 42</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de 3,4-bencilpireno</i> ....	126
<b>Tabla 43</b> <i>Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de criseno</i> .....	126

<b>Tabla 44</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de iso-butano</i> .....	128
<b>Tabla 45</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de iso-butano</i> .....	129
<b>Tabla 46</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de ciclopentano</i> .....	130
<b>Tabla 47</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de ciclopentano</i> .....	130
<b>Tabla 48</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de isopreno</i> .....	131
<b>Tabla 49</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de isopreno</i> .....	132
<b>Tabla 50</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de metanotiol</i> .....	133
<b>Tabla 51</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de metanotiol</i> .....	133
<b>Tabla 52</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de metanol</i> .....	134
<b>Tabla 53</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de metanol</i> .....	135
<b>Tabla 54</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de piridina</i> .....	136
<b>Tabla 55</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de piridina</i> .....	136
<b>Tabla 56</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de metano</i> .....	138
<b>Tabla 57</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de metano</i> .....	139
<b>Tabla 58</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de etano</i> .....	140
<b>Tabla 59</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de etano</i> .....	140
<b>Tabla 60</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de propano</i> .....	141
<b>Tabla 61</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de propano</i> .....	142
<b>Tabla 62</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de butano</i> .....	143
<b>Tabla 63</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de butano</i> .....	143
<b>Tabla 64</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de n-pentano</i> .....	145
<b>Tabla 65</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de n-pentano</i> .....	146
<b>Tabla 66</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de ciclohexano</i> .....	147
<b>Tabla 67</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de ciclohexano</i> .....	147
<b>Tabla 68</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de benceno</i> .....	148
<b>Tabla 69</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de benceno</i> .....	149

<b>Tabla 70</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de 2,4-dimetilpentano</i> .....	151
<b>Tabla 71</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de 2,4-dimetilpentano</i> .....	151
<b>Tabla 72</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de isopropilciclopentano</i> .....	152
<b>Tabla 73</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de isopropilciclopentano</i> .	153
<b>Tabla 74</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de 1,3,5-trimetilbenceno</i> .....	154
<b>Tabla 75</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de 1,3,5-trimetilbenceno</i> .	154
<b>Tabla 76</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de n-octadecano</i> .....	156
<b>Tabla 77</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de n-octadecano</i> .....	157
<b>Tabla 78</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de tolueno</i> .....	158
<b>Tabla 79</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de tolueno</i> .....	158
<b>Tabla 80</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de fluoreno</i> .....	159
<b>Tabla 81</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de fluoreno</i> .....	160
<b>Tabla 82</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de 2,7-dimetil-4,5-dietiloctano</i> ...	162
<b>Tabla 83</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de 2,7-dimetil-4,5-dietiloctano</i> .....	162
<b>Tabla 84</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de 2-feniltetradecano</i> .....	163
<b>Tabla 85</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de 2-feniltetradecano</i> .....	164
<b>Tabla 86</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de dimetil-3-naftiloctano</i> .....	165
<b>Tabla 87</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de dimetil-3-naftiloctano</i> .	165
<b>Tabla 88</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de o-dicetilbenceno</i> .....	167
<b>Tabla 89</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de o-dicetilbenceno</i> .....	168
<b>Tabla 90</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de n-hexadecilbenceno</i> .....	169
<b>Tabla 91</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de n-hexadecilbenceno</i> ..	169
<b>Tabla 92</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de 3,4-bencilpireno</i> .....	170
<b>Tabla 93</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de 3,4-bencilpireno</i> .....	171
<b>Tabla 94</b> <i>Propiedades fisicoquímicas de la molécula de criseno</i> .....	172

<b>Tabla 95</b> <i>Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de criseno.....</i>	172
--	-----

## Índice de figuras

<b>Figura 1</b> Ejemplos de <i>n</i> -parafinas e isoparafinas .....	37
<b>Figura 2</b> Ejemplos de olefinas.....	38
<b>Figura 3</b> Ejemplos de olefinas más representativas.....	39
<b>Figura 4</b> Ejemplos de aromáticos más representativos.....	40
<b>Figura 5</b> Ejemplos de compuestos de azufre más representativos .....	40
<b>Figura 6</b> Ejemplos de compuestos de oxígeno más representativos.....	41
<b>Figura 7</b> Ejemplos de compuestos de nitrógeno más representativos.....	42
<b>Figura 8</b> Refinería moderna.....	45
<b>Figura 9</b> Una unidad típica de destilación de crudo atmosférico .....	48
<b>Figura 10</b> Representación de perfiles de temperatura dentro de una torre de destilación atmosférica .....	50
<b>Figura 11</b> Partes individuales de una columna de destilación atmosférica.....	55
<b>Figura 12</b> Puntos de ebullición VS peso molecular y gravedad ( $\rho$ API) .....	58
<b>Figura 13</b> TBP y puntos de corte de producto para un crudo típico de Oriente Medio...59	
<b>Figura 14</b> Representación de una molécula química, con sus propiedades fisicoquímicas en Swissadme.....	63
<b>Figura 15</b> La interfaz gráfica de Avogadro .....	64
<b>Figura 16</b> Diversas vistas del metano. ....	67
<b>Figura 17</b> Ventana para la edición de texto, longitud, colores..etc. ....	74
<b>Figura 18</b> Ventana de las propiedades químicas básicas .....	75
<b>Figura 19</b> Código SMILES en la plataforma SwissADME.....	77
<b>Figura 20</b> Ejemplo del análisis de una molécula en SwissADME.....	78
<b>Figura 21</b> Estructura 3D sin optimizar de una molécula en el software Avogadro.....	80
<b>Figura 22</b> Estructura 3D optimizada de una molécula en el software Avogadro.....	81
<b>Figura 23</b> Estructura 3D de una molécula en el sistema gráfico molecular PyMOL .....	82

<b>Figura 24</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de iso-butano</i> .....	128
<b>Figura 25</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de ciclopentano</i> .....	129
<b>Figura 26</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de isopreno</i> .....	131
<b>Figura 27</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de metanotiol</i> .....	132
<b>Figura 28</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de metanol</i> .....	134
<b>Figura 29</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de piridina</i> .....	135
<b>Figura 30</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de metano</i> .....	138
<b>Figura 31</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de etano</i> .....	139
<b>Figura 32</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de propano</i> .....	141
<b>Figura 33</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de butano</i> .....	142
<b>Figura 34</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de n-pentano</i> .....	145
<b>Figura 35</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de ciclohexano</i> .....	146
<b>Figura 36</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de benceno</i> .....	148
<b>Figura 37</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de 2,4-dimetilpentano</i> .....	150
<b>Figura 38</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de isopropilciclopentano</i> .....	152
<b>Figura 39</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de 1,3,5-trimetilbenceno</i> .....	153
<b>Figura 40</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de n-octadecano</i> .....	156
<b>Figura 41</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de tolueno</i> .....	157
<b>Figura 42</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de fluoreno</i> .....	159
<b>Figura 43</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de 2,7-dimetil-4,5-dietiloctano</i> .....	161
<b>Figura 44</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de 2-feniltetradecano</i> .....	163
<b>Figura 45</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de dimetil-3-naftiloctano</i> .....	164
<b>Figura 46</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de o-dicetilbenceno</i> .....	167
<b>Figura 47</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de n-hexadecilbenceno</i> .....	168
<b>Figura 48</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de 3,4-bencilpireno</i> .....	170
<b>Figura 49</b> <i>Espacio fisicoquímico de la molécula de criseno</i> .....	171

<b>Figura 50</b> Estructura 3D de la molécula de iso-butano.....	173
<b>Figura 51</b> Estructura 3D de la molécula de ciclopentano. ....	174
<b>Figura 52</b> Estructura 3D de la molécula de isopreno.....	174
<b>Figura 53</b> Estructura 3D de la molécula de metanotiol.....	175
<b>Figura 54</b> Estructura 3D de la molécula de metanol.....	175
<b>Figura 55</b> Estructura 3D de la molécula de piridina.....	176
<b>Figura 56</b> Estructura 3D de la molécula de metano .....	177
<b>Figura 57</b> Estructura 3D de la molécula de etano .....	177
<b>Figura 58</b> Estructura 3D de la molécula de propano .....	178
<b>Figura 59</b> Estructura 3D de la molécula de butano .....	178
<b>Figura 60</b> Estructura 3D de la molécula de n-pentano .....	179
<b>Figura 61</b> Estructura 3D de la molécula de ciclohexano .....	179
<b>Figura 62</b> Estructura 3D de la molécula de benceno.....	180
<b>Figura 63</b> Estructura 3D de la molécula de 2,4-dimetilpentano.....	181
<b>Figura 64</b> Estructura 3D de la molécula de isopropilciclopentano .....	181
<b>Figura 65</b> Estructura 3D de la molécula de 1,3,5-trimetilbenceno .....	182
<b>Figura 66</b> Estructura 3D de la molécula de n-octadecano.....	183
<b>Figura 67</b> Estructura 3D de la molécula de tolueno.....	183
<b>Figura 68</b> Estructura 3D de la molécula de fluoreno. ....	184
<b>Figura 69</b> Estructura 3D de la molécula de 2,7-dimetil-4,5-dietiloctano.....	185
<b>Figura 70</b> Estructura 3D de la molécula de 2-feniltetradecano.....	185
<b>Figura 71</b> Estructura 3D de la molécula de dimetil-3-naftiloctano.....	186
<b>Figura 72</b> Estructura 3D de la molécula de o-dicetilbenceno .....	187
<b>Figura 73</b> Estructura 3D de la molécula de n-hexadecilbenceno.....	187
<b>Figura 74</b> Estructura 3D de la molécula de 3,4-bencilpireno. ....	188
<b>Figura 75</b> Estructura 3D de la molécula de criseno.....	188



**Índice de esquemas**

<b>Esquema 1</b> <i>Diagrama de flujo para la obtención de componentes presentes en el crudo.....</i>	<i>72</i>
<b>Esquema 2</b> <i>Diagrama de flujo para la obtención de compuestos orgánicos presentes en las corrientes de salida de la columna de destilación .....</i>	<i>73</i>
<b>Esquema 3</b> <i>Diagrama de flujo para la generación de estructuras 2D, propiedades químicas básicas y códigos SMILES.....</i>	<i>76</i>
<b>Esquema 4</b> <i>Diagrama de flujo para la obtención de propiedades fisicoquímicas, lipofilia, solubilidad en el agua y radar de biodisponibilidad.....</i>	<i>79</i>
<b>Esquema 5</b> <i>Diagrama de flujo para la optimización de la molécula y visualización de la molécula en 3D.....</i>	<i>83</i>

## Resumen

El presente trabajo es una investigación bibliográfica-computacional acerca de los componentes que forman el petróleo crudo en una refinería y los productos refinados que se obtienen a la salida de un proceso de destilación atmosférica, con el objetivo de encontrar las propiedades físicas y químicas de todos los compuestos conseguidos y obtener una vista de su estructura molecular en 2D y en 3D. Para ello se empleó programas computacionales con diferentes herramientas que permitían obtener múltiples propiedades y comportamientos moleculares, uno de ellos fue Chemdraw usado para la obtención de las propiedades químicas básica, el código SMILES y una modelización en 2D de las moléculas. A partir de estos códigos se pudo encontrar las propiedades fisicoquímicas como la lipofilicidad, solubilidad en agua y el radar de biodisponibilidad de las moléculas mediante la plataforma web SwissADME. El programa Pymol a través de las moléculas 2D permitió alcanzar una visualización tridimensional de las moléculas a partir de una optimización previa de la molécula en Avogadro. Todo este proceso se realizó para un total de 421 compuestos, cuya información se organizó y reportó en tablas para su respectiva interpretación. De esta forma, a partir de la estructura molecular de cada componente se puede relacionar muchas de las propiedades de cada compuesto y predecir cómo será su comportamiento con la interacción con otras moléculas en cualquier proceso químico.

Palabras clave:

- **COMPONENTES**
- **DESTILACIÓN ATMOSFÉRICA**
- **PROGRAMAS COMPUTACIONALES**

**Abstrac**

The present work is a bibliographic-computational research about the components that form crude oil in a refinery and the refined products obtained at the exit of an atmospheric distillation process, with the objective of finding the physical and chemical properties of all the compounds obtained and to obtain a view of their molecular structure in 2D and 3D. For this purpose, computer programs with different tools were used to obtain multiple properties and molecular behaviors, one of them was Chemdraw used to obtain the basic chemical properties, the SMILES code and a 2D modeling of the molecules. From these codes it was possible to find the physicochemical properties such as lipophilicity, water solubility and the bioavailability radar of the molecules using the SwissADME web platform. The Pymol program through 2D molecules allowed to reach a three-dimensional visualization of the molecules from a previous optimization of the molecule in Avogadro. This whole process was carried out for a total of 421 compounds, whose information was organized and reported in tables for their respective interpretation. In this way, from the molecular structure of each component it is possible to relate many of the properties of each compound and predict how its behavior will be with the interaction with other molecules in any chemical process.

Key words:

- **COMPONENTS**
- **ATMOSPHERIC DISTILLATION**
- **COMPUTER PROGRAMS**

## CAPÍTULO I

### Generalidades

#### 1.1. Introducción

En la actualidad el crudo aun teniendo una gran importancia en nuestro día a día, sigue siendo una materia prima compleja y mal entendida. Esta mezcla líquida compleja está formada por diferentes átomos como el carbono, hidrogeno, oxígeno, nitrógeno, azufre y metales pesados, pero siendo el átomo de carbono el más importante en la mezcla (Valencia & García, 2010) . Una de las propiedades importantes que presenta el crudo es la gravedad API, que permite determinar la calidad del crudo, diferenciándolo en cuatro grupos: ligero, mediano, pesado y muy pesado. Una vez que se obtiene el petróleo, este se transporta a través de oleoductos a las refinerías, donde se obtienen productos refinados después de que hayan pasado por diferentes procesos como es la unidad de destilación atmosférica (Fahim et al., 2010).

En una unidad de destilación atmosférica el petróleo sufre una separación de sus compuestos debido a la diferencia de los puntos de ebullición de los componentes. Las diferentes fracciones de petróleo están constituidos de diferentes moléculas que componen las corrientes de salida de esta unidad, obteniendo por el *topping* de la torre los elementos menos pesados como son los que forman el gas combustible (metano, etano, propano y butano), mientras que los otros componentes más pesados se van obteniendo por la parte lateral de la torre siendo estas nafta, gasolina, queroseno, diésel y los residuos (asfáltenos y resinas) (Valencia & García, 2010).

Aunque el petróleo es una fuente importante de energía, también tiene que cumplir ciertas normas ambientales o regulaciones de calidad de los productos, sin

tener pérdidas, por lo que se debe maximizar la producción y minimizar los costos de operación. De ahí surge el interés creciente en la industria petrolera de adquirir conocimientos en el campo de la química computacional tanto en simulaciones como a nivel molecular, en términos de interacciones entre átomos y moléculas individuales (Verruschi et al., 2009).

Los años setenta puede ser el origen del cálculo de propiedades moleculares a partir de modelos cuantitativos de la mecánica cuántica. A partir de reglas y métodos semiempíricos de Woodward, Hückel y Hoffmann, se pudo predecir el comportamiento molecular. De ahí surgen programas que permiten dar un sentido amplio a la geometría molecular pudiendo representar a la molécula con ángulos de enlace y distancia entre los átomos, además de dar información acerca de las moléculas como son las propiedades químicas básicas, las propiedades fisicoquímicas, propiedades espectroscópicas, entre otras propiedades (Suárez, 2012).

Gracias a estas aplicaciones, que sirven como herramientas de estudio por investigadores se puede representar moléculas en 2D como es el caso del software ChemDraw, obtener propiedades ADME de la página de Swissadme o visualizar y construir moléculas en 3D en tiempo real como es el caso del Pymol y Avogadro.

## **1.2. Planteamiento del problema**

Desde el punto de vista de la investigación, se desea contribuir al conocimiento científico mediante la aplicación de los conocimientos enfocados en la química pura, y afianzados en los cálculos teóricos computacionales lo que le dan el soporte para la discusión de los resultados. Así se logrará predecir el comportamiento global en una mezcla, además, de posibles y potenciales interacciones intermoleculares entre ellas para explicar comportamientos de las propiedades fisicoquímicas que presentan las

moléculas orgánicas que conforman las corrientes de entrada y salida en el proceso de destilación atmosférica.

Debido a que la industria petrolera es el principal pilar para la economía ecuatoriana, las leyes que regulan la contaminación de cada una de estas empresas son severas, lo que hace que parte del capital que producen esté destinado a la implementación de sistemas que eliminen o disminuyan el nivel de contaminación que emiten.

### **1.3. Justificación e importancia**

Conocer las estructuras químicas y las propiedades fisicoquímicas que tienen todas las moléculas orgánicas presentes en una mezcla de crudo y en las corrientes de salida de un proceso de destilación atmosférica es de suma importancia, ya que a partir de propiedades como el peso molecular, volatilidad, punto de ebullición, solubilidad en el agua, conformaciones moleculares y el número de cadenas carbonadas, se puede predecir cuáles serán las propiedades de los productos refinados en una refinería de petróleo, y que procesos necesitan pasar para obtener productos de calidad con las propiedades fisicoquímicas adecuadas para su utilización en la sociedad.

### **1.4. Hipótesis**

El estudio de propiedades fisicoquímicas básicas y de estructuras químicas mediante la utilización de programas y plataformas basadas en estudios teóricos computacionales, permitirá predecir propiedades (punto de ebullición, volatilidad, solubilidad en el agua) de las mezclas en las corrientes de entrada y salida del proceso de destilación atmosférica, analizando sus posibles y potenciales interacciones intermoleculares.

## **1.5. Objetivos**

### **1.4.1. Objetivo general**

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

### **1.4.2. Objetivos específicos**

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

## **1.6. Variables de investigación**

### **1.6.1. Variable independiente**

Moléculas orgánicas presentes en la corriente de entrada y salida del proceso de destilación atmosférica en una refinería de petróleo.

### **1.6.1. Variable dependiente**

Estudio teórico computacional de las propiedades fisicoquímicas de las mezclas

## CAPÍTULO II

### Fundamento Teórico

#### 2.1. Petróleo

El petróleo crudo es una mezcla líquida muy compleja formada de varios compuestos de hidrocarburos que consisten en mayor cantidad de carbono e hidrógeno y pequeñas cantidades de compuestos orgánicos que contienen azufre, oxígeno, nitrógeno y metales como vanadio, níquel, hierro y cobre. Las propiedades físicas del petróleo crudo se ven afectadas por las diferentes proporciones de hidrógeno a carbono. A medida que disminuye la relación de hidrógeno a carbono, aumenta la gravedad y el punto de ebullición de los compuestos de hidrocarburos. Además, cuanto mayor es la relación de hidrógeno a carbono de la materia prima, mayor es su valor para una refinería porque se requiere menos hidrógeno (Fahim et al., 2010).

##### 2.1.1. *Propiedades del petróleo crudo*

Según (Gary & Handwerk, 2003) el petróleo es una mezcla muy compleja de varios compuestos orgánicos sobre el cual se realizan pruebas analíticas relativamente sencillas y los resultados de las mismas se utilizan junto con correlaciones empíricas para la evaluación del crudo de petróleo como materia prima de la refinería en particular. Cada crudo se diferencia de otras materias primas disponibles por las diferentes propiedades que presentan y, basándose en el análisis del producto se les asigna un valor. Las propiedades más útiles son:

##### a. Gravedad API

La gravedad API se expresa como la relación desarrollada por el *American Petroleum Institute*, como:



$$^{\circ}API = \frac{(141,5)}{\text{peso específico}} - 131,5$$

Es un parámetro útil para caracterizar fluidos de petróleo, para determinar la composición, la calidad de un combustible (esto hace referencia al contenido de azufre) y para estimar otras propiedades como constantes críticas, densidad a diversas temperaturas, viscosidad o conductividad térmica (Riazi, 2005).

**Tabla 1**

*Clasificación de crudos*

<b>Categoría del crudo</b>	<b>Gravedad</b>
Crudo ligero	API > 38
Crudo mediano	38 > API > 29
Crudo pesado	29 > API > 8,5
Crudo muy pesado	API < 8,5

*Nota.* Tomado de (Fahim et al., 2010)

**b. Punto de fluidez**

El punto de fluidez (Tp), también conocido como punto de vaciado y el punto de fusión (TM) tienen usos limitados en ceras y aceites pesados parafínicos para determinar el grado de solidificación y el contenido de cera, se relaciona con la temperatura más baja a la cual el crudo deja de fluir y estas condiciones son determinadas según el ASTM estándar. Existe un máximo contenido de aromáticos y un mínimo contenido de parafinas cuando el punto de fluidez es más bajo (Riazi, 2005).

### **c. Punto de ebullición**

Las curvas de punto de ebullición ( $T_b$ ) se utiliza para determinar la volatilidad y estimar parámetros de caracterización como el punto de ebullición promedio, el peso molecular, la composición y muchas propiedades físicas (es decir, constantes críticas, presión de vapor, propiedades térmicas, propiedades de transporte) (Riazi, 2005).

### **d. Número de octano**

Un número de octano es una medida de la tendencia a la detonación de los combustibles de gasolina en los motores de encendido por chispa. Se da un alto índice de octanaje a la capacidad de un combustible para resistir la autoignición durante la compresión y antes del encendido por chispa. El índice de octano de un combustible se determina midiendo su valor de detonación en comparación con la de una mezcla de n-heptano e isooctano (2,2,4-trimetil pentano). Al n-heptano puro se le asigna un valor de octano cero, mientras que al isooctano se le asigna 100 octanos. Por lo tanto, una mezcla de isooctano al 80% en volumen tiene un índice de octano de 80 (Fahim et al., 2010).

Se pueden realizar pruebas de dos octanos para la gasolina. El índice de octanaje del motor (MON) indica el rendimiento del motor en condiciones de carretera con altas velocidades (900 rpm). Por otro lado, el índice de octanaje de la investigación (RON) es indicativo de conducción urbana a baja velocidad (600 rpm) (Fahim et al., 2010).

### **e. Número de cetano**

El índice de cetano es lo opuesto al índice de octano ya que este mide la capacidad de autoignición a diferencia del índice de octano que resiste la autoignición. El índice de cetano es el porcentaje de cetano puro (n-hexadecano) en una mezcla de

cetano y alfa metil naftaleno que coincide con la calidad de ignición de una muestra de combustible diesel. Esta calidad se especifica para combustibles destilados medios (Fahim et al., 2010).

### **2.1.2. Composición del petróleo**

Los compuestos en el petróleo crudo son principalmente carbono en 83% - 87% e hidrógeno en 10% - 14%, y el resto son elementos inorgánicos: azufre (0,05% - 6%), nitrógeno (0,1 - 0,2%), oxígeno (0,05% - 2%) y compuestos organometálicos de níquel, vanadio, arsénico, plomo y otros metales en trazas (en partes por millón o partes por mil millones de concentración). Las sales inorgánicas de cloruro de magnesio, cloruros de sodio y otras sales minerales también se acompañan con petróleo crudo del pozo, ya sea debido al agua de la formación o al agua y a los productos químicos inyectados durante la perforación y la producción (Chaudhuri, 2016).

**Tabla 2**

*Composición elemental de petróleo crudo*

<b>Elemento</b>	<b>Composición (%w)</b>
Carbono	83 – 87
Hidrogeno	10 – 14
Azufre	0,05 – 6
Nitrógeno	0,1 – 0,2
Oxigeno	0,05 – 2
Níquel	< 120 ppm
Vanadio	< 1200 ppm

*Nota.* Tomado de (Fahim et al., 2010).

De acuerdo con (Fahim et al., 2010) existen tres clases principales de hidrocarburos presentes en el petróleo crudo los cuales se basan en el tipo de enlaces carbono-carbono presentes: parafinas, naftenos, aromáticos y además hay un cuarto tipo, las olefinas que se forman en el proceso de deshidrogenación de parafinas normales.

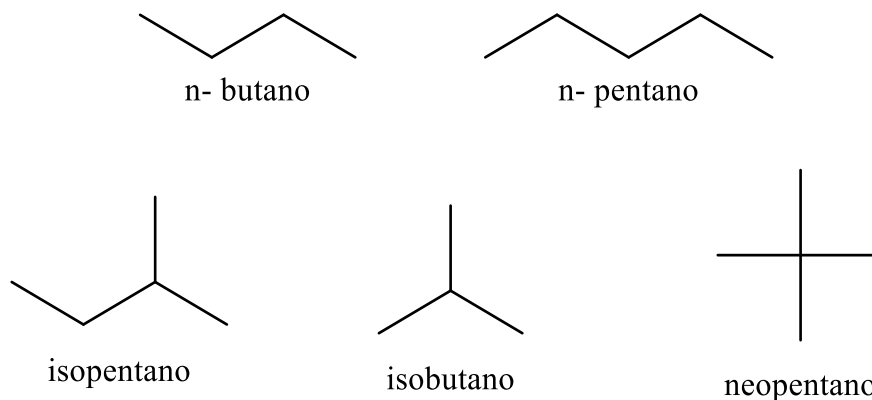
#### **a. Parafinas**

Las parafinas también conocidas como alcanos se caracterizan por la unión de sus átomos de carbono con enlaces sencillos, su fórmula general es  $C_nH_{2n+2}$ , donde  $n$  es el número de átomos de carbono. Se dividen en dos grupos las isoparafinas y las parafinas normales (Riazi, 2005).

Cuando el número de átomos de carbono en la molécula es mayor que tres, pueden existir varios hidrocarburos que contengan el mismo número de átomos de carbono e hidrógeno pero que tienen estructuras diferentes. Esto es debido a que el carbono es capaz de formar no solo cadenas sino también de formar cadenas ramificadas sencillas o dobles las cuales conducen a isómeros que poseen propiedades significativamente distintas (Gary & Handwerk, 2003).

## Figura 1

*Ejemplos de n-parafinas e isoparafinas*



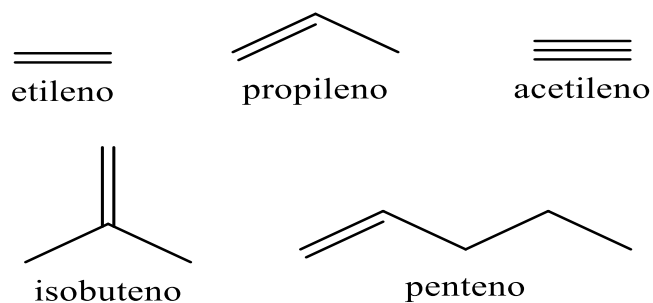
*Nota.* Tomado de ChemDraw.

### b. Olefinas

Las olefinas reaccionan fácilmente con ácidos, álcalis, halógenos, agentes oxidantes, etc, no están presentes en el petróleo crudo, pero se producen por descomposición térmica y catalítica o deshidrogenación de parafinas normales. Como las parafinas, las olefinas pueden ser (iso) hidrocarburos de cadena lineal (normal) o de cadena ramificada, su fórmula general es  $C_nH_{2n}$ . Generalmente las olefinas son indeseables en los productos acabados debido a que los dobles enlaces son reactivos y los compuestos se oxidan y polimerizan más fácilmente. Se convierten fácilmente en diolefinas en presencia de oxígeno y forman una sustancia gomosa. Pero pueden eliminarse mediante absorción en ácido sulfúrico (Chaudhuri, 2016).

**Figura 2**

*Ejemplos de olefinas*



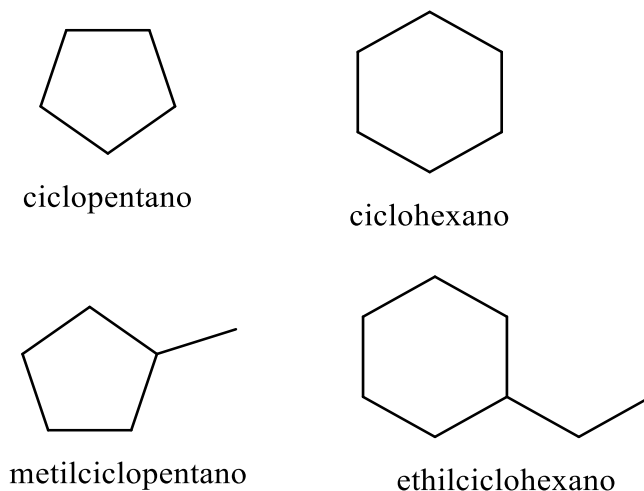
*Nota.* Tomado de ChemDraw.

### **c. Naftenos**

Los naftenos o cicloalcanos son hidrocarburos saturados cíclicos o de anillo con la fórmula general  $C_nH_{2n}$ . Por lo general el ciclopentano ( $C_5H_{10}$ ), el ciclohexano ( $C_6H_{12}$ ) y sus derivados, se encuentran normalmente en los petróleos crudos, son compuestos deseables para la producción de aromáticos y aceites base de aceite lubricante de buena calidad (Riazi, 2005).

**Figura 3**

*Ejemplos de olefinas más representativas*



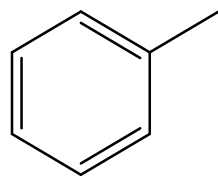
*Nota.* Recuperado de ChemDraw.

**d. Aromáticos**

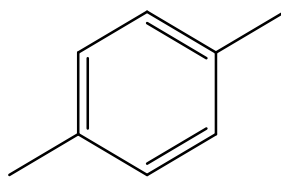
Los aromáticos son una serie importante de hidrocarburos que se encuentran en casi todas las mezclas de petróleo de cualquier parte del mundo, son químicamente muy activos en comparación con otros grupos de hidrocarburos, además son hidrocarburos cíclicos insaturados que comienzan con la molécula de benceno ( $C_6H_6$ ) y contienen dobles enlaces carbono-carbono. Su fórmula general es  $C_nH_{2n-6}$ . El nombre aromático se refiere al hecho de que tales hidrocarburos suelen tener olores fragantes. Los aromáticos inferiores, como el benceno, el tolueno y los xilenos, son buenos disolventes y precursores de muchos productos petroquímicos. Los aromáticos de los productos del petróleo se pueden separar mediante extracción con disolventes como fenol, furfurool y dietilenglicol (Riazi, 2005);(Chaudhuri, 2016).

## Figura 4

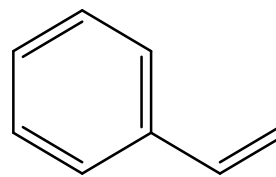
*Ejemplos de aromáticos más representativos*



tolueno



xileno



estireno

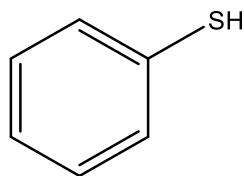
*Nota.* Tomado de ChemDraw.

### e. Compuestos de azufre

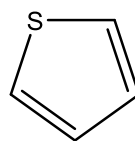
El contenido de azufre de los petróleos crudos se expresa como tanto por ciento en peso y varía desde menos de 0,05 a más de 6% en peso. Los crudos con menos del 1% en peso de azufre se denomina bajo en azufre o dulce, y el que tiene más del 1% en peso de azufre se denomina alto en azufre o ácido y generalmente requieren un procesamiento más extensos (Fahim et al., 2010).

## Figura 5

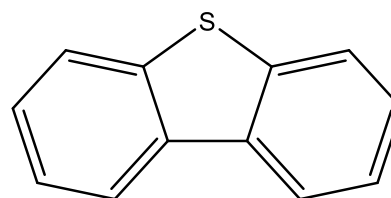
*Ejemplos de compuestos de azufre más representativos*



fenil mercaptano



tiofeno



dibenzotiofeno

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

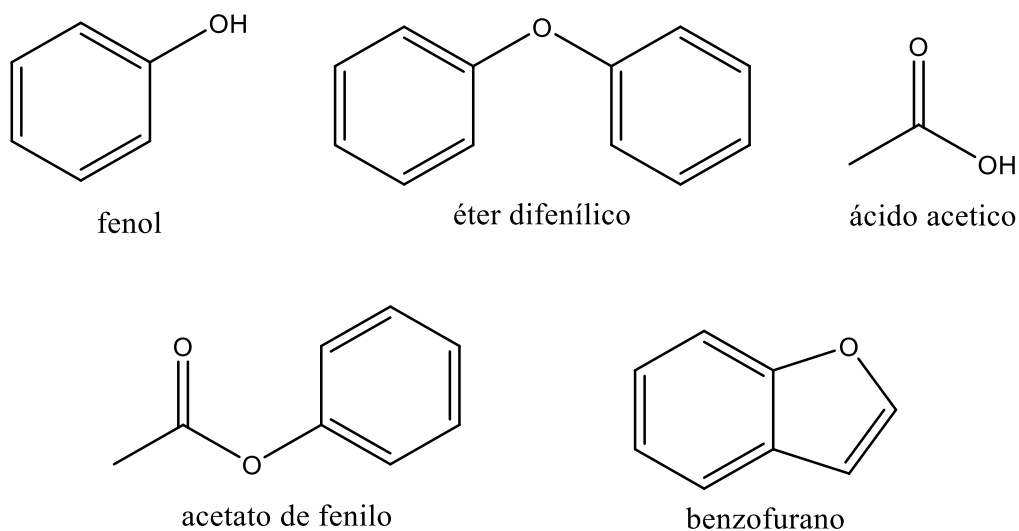


## f. Compuestos de oxígeno

El contenido de oxígeno del petróleo crudo suele estar en un rango de 0,05% al 2% en peso. Cuando el aceite del crudo se ve expuesto a una prolongada exposición a la atmosfera el contenido de oxígeno se vuelve extraordinariamente alto. El oxígeno en el petróleo crudo se presenta de muchas formas las cuales 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. El oxígeno también actúa como veneno para muchos catalizadores. Esto puede eliminarse mediante hidrogenación catalítica. El exceso de compuestos de oxígeno puede incluso provocar una explosión (Fahim et al., 2010);(Chaudhuri, 2016).

### Figura 6

*Ejemplos de compuestos de oxígeno más representativos*



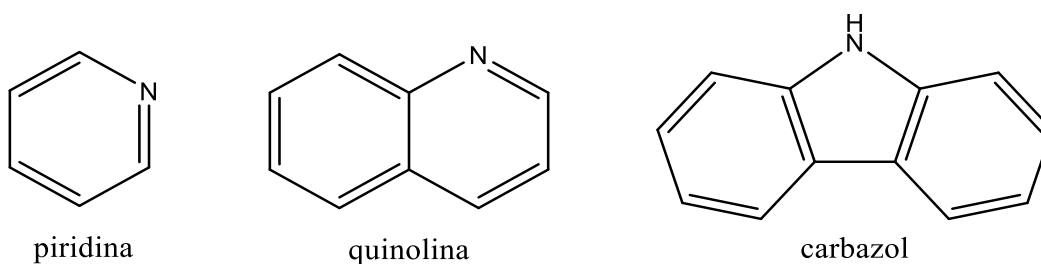
*Nota.* Tomado de ChemDraw.

### g. Compuestos de nitrógeno

Los compuestos de nitrógeno en los hidrocarburos se encuentran generalmente en las partes más pesadas del petróleo crudo en un porcentaje en peso entre 0,1% a 0,2%. Un contenido alto de nitrógeno es indeseable ya que son responsables de la inestabilidad del color y el envenenamiento de ciertos catalizadores. El nitrógeno en los combustibles derivados del petróleo provoca la generación de óxidos de nitrógeno (NOx), que también son fuertes contaminantes de la atmósfera. Si la cantidad de nitrógeno en el crudo es superior al 0,25% se requiere hidrogenación catalítica para eliminarlo. Al igual que el azufre, el nitrógeno de las partes más pesadas del petróleo no se puede eliminar sin reacciones severas de agrietamiento o hidrogenación (Chaudhuri, 2016).

#### Figura 7

*Ejemplos de compuestos de nitrógeno más representativos*



*Nota.* Tomado de ChemDraw.

### h. Compuestos metálicos

Los compuestos metálicos de vanadio, níquel, plomo, arsénico, etc., también se encuentran en el petróleo crudo y su contenido varía desde unas pocas partes por millón hasta más de 1000 ppm. El vanadio y el níquel se encuentran en forma de compuestos organometálicos principalmente en las fracciones más pesadas del

petróleo crudo, cantidades diminutas de estos metales pueden afectar severamente a los catalizadores. Los combustibles derivados del petróleo que contienen estos compuestos metálicos pueden dañar los quemadores, las líneas y las paredes de las cámaras de combustión (Chaudhuri, 2016).

### **i. Asfaltenos**

Los asfaltenos son sólidos negros brillantes que no tienen un punto de fusión definido y por lo general dejan residuos carbonosos al calentarlos. Comprenden una acumulación de capas aromáticas polinucleares condensadas unidas por enlaces saturados. Estas capas se doblan, creando una estructura sólida conocida como micela. Sus pesos moleculares abarcan una amplia gama, pueden variar desde 100 a 100000. Los asfaltenos se obtienen en el laboratorio por precipitación del pentano y el n-heptano. Las fracciones de petróleo licuado (propano y butano) se utilizan comercialmente en residuos de desasfaltado y aceites lubricantes (Fahim et al., 2010).

Por lo general la industria del refinamiento de petróleo busca eliminar los asfaltenos o convertirlos en materiales más livianos porque la presencia de grandes cantidades de estos heteroelementos en el crudo causan graves problemas de contaminación, por ejemplo, azufre y nitrógeno, envenenamiento del catalizador y corrosión (formación de vanadatos metálicos durante la combustión) y también tienden a provocar problemas de transporte ya que atribuyen al aumento de la gravedad y la viscosidad en los crudos de petróleo (Wauquier, 1995).

### **j. Resinas**

Las resinas son moléculas polares y se las denomina “compuestos polares”, son insolubles en propano líquido, pero solubles en n-heptano, tienen características aromáticas y contienen heteroátomos. Se encuentran en el rango de peso molecular de

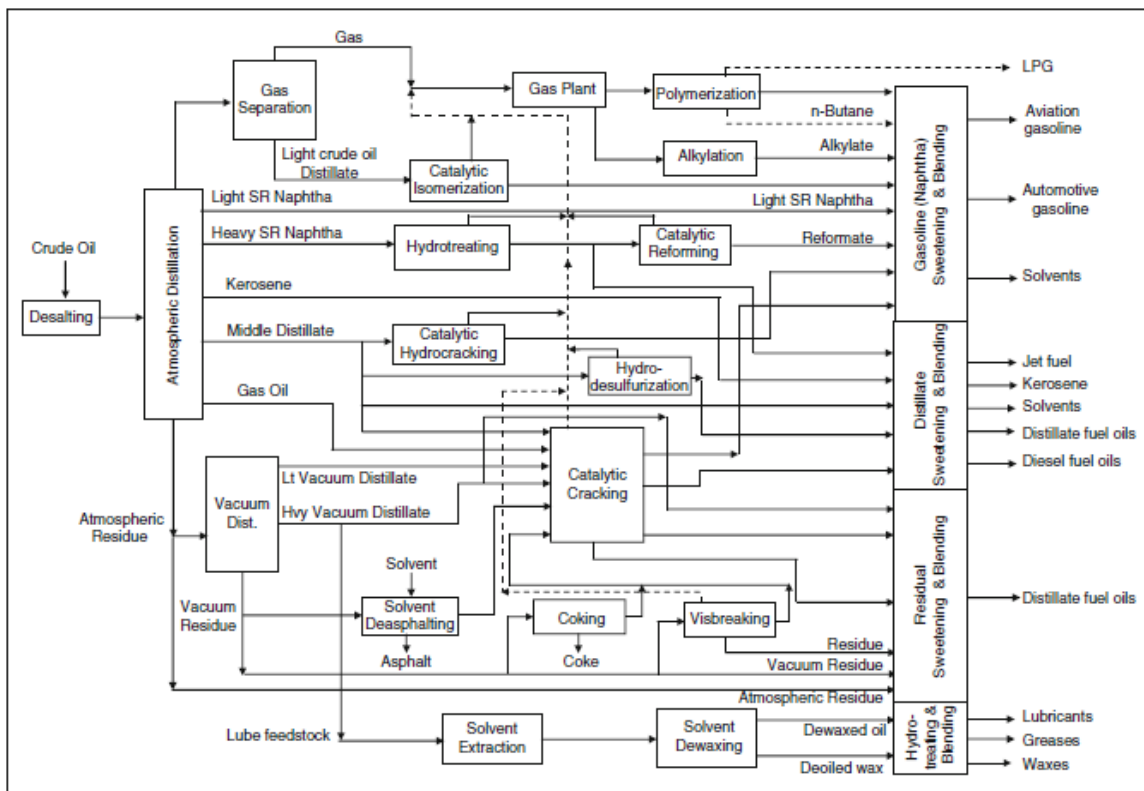
500 a 1000. Se piensa que las resinas son responsables de disolver y estabilizar las moléculas sólidas de asfaltenos en el petróleo. Debido a que cada asfalteno está rodeado por una serie de moléculas de resina, el contenido de resinas en los petróleos crudos es mayor que el de los asfaltenos (Fahim et al., 2010).

### **2.1.3. Refinería de petróleo.**

La refinación de petróleo es muy importante en la vida de ser humano ya que a partir de esta la mayoría de los vehículos de transporte funcionan los mismos que requieren de productos refinados tales como la gasolina, diésel, queroseno y fuel oil. En la figura 7 se muestra un esquema de una refinería moderna con los procesos necesarios para obtener productos terminados a partir del refinamiento de petróleo crudo (Fahim et al., 2010).

Figura 8

## Refinería moderna



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

En la tabla 3 se muestra algunas de las fracciones de petróleo que se obtienen en los diferentes procesos del refinamiento del petróleo crudo, en la cual se especifica los rangos aproximados de hidrocarburos que contienen, así como también el rango aproximado de ebullición que necesitan para separarse.

**Tabla 3***Rango de hidrocarburos y de ebullición de fracciones de petróleo*

Fracción de petróleo	Rango de hidrocarburos	Rango de ebullición (°C)
Gases ligeros	C <sub>2</sub> – C <sub>4</sub>	-90 a 1
Gasolina	C <sub>4</sub> – C <sub>10</sub>	-1 a 200
Naftas	C <sub>4</sub> – C <sub>11</sub>	-1 a 205
Combustible de aviación	C <sub>9</sub> – C <sub>14</sub>	150 a 255
Queroseno	C <sub>11</sub> - C <sub>14</sub>	205 a 255
Combustible diésel	C <sub>11</sub> - C <sub>16</sub>	205 a 290
Gasóleo ligero	C <sub>14</sub> - C <sub>18</sub>	255 a 315
Gasóleo pesado	C <sub>18</sub> – C <sub>28</sub>	315 a 425
Cera	C <sub>18</sub> – C <sub>36</sub>	315 a 500
Aceite lubricante	> C <sub>25</sub>	> 400
Gasóleo de vacío	C <sub>28</sub> – C <sub>55</sub>	425 a 600
Residuo	> C <sub>55</sub>	> 600

*Nota.* Tomado de (Riazi, 2005)

## **2.2. Destilación atmosférica**

### **2.2.1. Definición**

Según (Matar & Hatch, 2000), define destilación atmosférica como:

“Operación unitaria encargada de separar una mezcla compleja (crudo) en diferentes fracciones con rangos de ebullición relativamente estrechos. Esta separación se basa principalmente en la diferencia de los puntos de ebullición de los componentes que forman esta mezcla.”

### **2.2.2. Descripción del proceso**

La unidad de destilación de crudo atmosférico es el primer proceso que se encuentra en cualquier refinería. En esta unidad se destila el crudo para producir corrientes destiladas, las cuales están sujetas a un tratamiento posterior o serán material de alimentación para otros procesos. Desde la alimentación se bombea el petróleo crudo mediante un intercambio con las corrientes de productos calientes en la unidad de crudo, la alimentación se calienta aproximadamente a 320°C a medida que pasa por el tubo calentador (Jones & Pujadó, 1996).

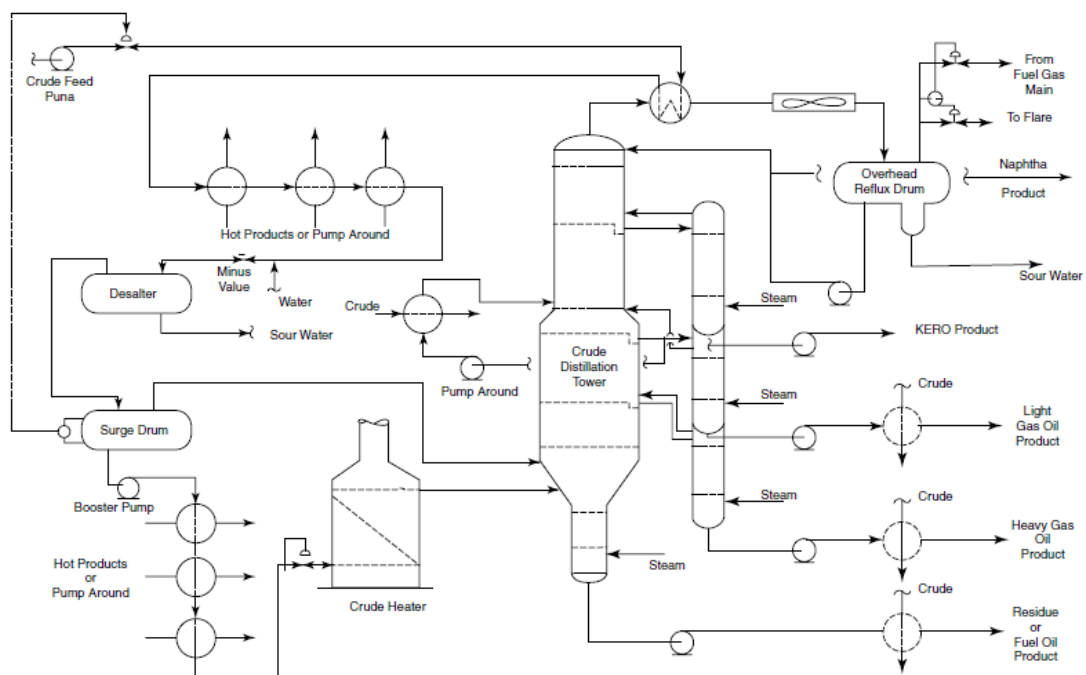
Se inyecta agua al crudo para disolver la sal que generalmente se encuentra presente, para ello la mezcla entra a un tambor desalador que contiene un precipitado electrostático que ayuda a separar el agua salada del crudo. El agua del tambor se envía a un separador de agua agria para limpiarla antes de ser retirada al alcantarillado. Una vez que el petróleo crudo sale del desalador, entra a un tambor de compensación, donde parte de este petróleo se dirige a la zona de evaporación de la torre de destilación, mientras que la otra parte se dirige a un tren de intercambiadores de calor, donde el petróleo crudo se calienta en un horno a una temperatura que vaporizará los productos destilados en la torre de crudo. Esto se realiza para agregar calor adicional al crudo para vaporizar un 5% más de los requerido en las corrientes de destilado, a esto se le conoce como over fhas. También se usa para asegurar buenas corrientes de reflujo en la torre de destilación (Jones & Pujadó, 1996).

El crudo calentado entra a la torre de fraccionamiento en una sección inferior llamada zona flash, los vapores destilados suben por la torre en contracorriente con una corriente líquida proveniente del reflujo, mientras que por el fondo desciende la porción no volátil (Jones & Pujadó, 1996).

La torre está dividida en varias secciones horizontales mediante bandejas o placas metálicas, y cada una equivale a un alambique. Estos obligan a un vapor ascendente a pasar a través de un charco de líquido descendente. Por lo tanto, cuantas más bandejas, más redestilación y, por tanto, mejor es el fraccionamiento o separación de la mezcla alimentada a la torre (Speight & Wyoming, 2006). En las bandejas de fraccionamiento se da la transferencia de calor y masa. En estas secciones de la torre, los productos destilados se retiran de las bandejas de extracción y estos flujos se eliminan y se envían al almacenamiento. Parte del vapor de nafta sale por la parte superior de la torre para que se condense y se recoja en el tambor superior en forma de reflujo, mientras que el resto se entrega a los procesos ligeros para estabilizar y destilar (Jones & Pujadó, 1996).

**Figura 9**

*Una unidad típica de destilación de crudo atmosférico*



*Nota.* Tomado de (Jones & Pujadó, 1996).



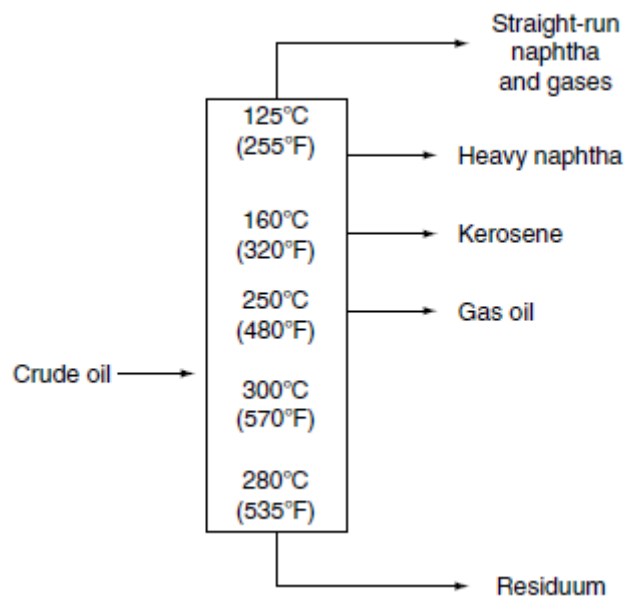
### **2.2.3. Productos obtenidos de la unidad de destilación de crudo atmosférico**

La temperatura de las bandejas de la torre es progresivamente más fría de abajo hacia arriba (Figura 10). A medida que los vapores calientes pasan hacia arriba en la torre, se produce la condensación en las bandejas hasta el momento en que se produce el reflujo (ebullición simultánea de un líquido y condensación del vapor). Los vapores continúan pasando hacia arriba a través de la torre, mientras que el líquido de cualquier bandeja en particular se derrama sobre la bandeja de abajo, y así sucesivamente, hasta que el calor en un punto particular es demasiado intenso para que el material permanezca líquido. Luego se convierte en vapor y se une a los otros vapores que pasan hacia arriba a través de la torre (Speight & Wyoming, 2006).

Así, toda la torre simula una colección de varios (o muchos) alambiques, con la composición del líquido, en cualquier punto o en cualquier bandeja, permaneciendo bastante consistente. Esto permite que parte del líquido en reflujo se extraiga en varios puntos como productos de corriente secundaria. Por lo tanto, en la destilación del petróleo crudo, la nafta ligera y los gases se eliminan como vapor de la parte superior de la torre, la nafta pesada, el queroseno y el gasóleo se eliminan como productos de la corriente secundaria y el crudo reducido se extrae del fondo de la torre (Speight & Wyoming, 2006).

**Figura 10**

*Representación de perfiles de temperatura dentro de una torre de destilación atmosférica*



*Nota.* Tomado de (Speight & Wyoming, 2006).

### **a. Nafta**

Es un término genérico que se usa en la industria del petróleo para llamar a la fracción líquida que se obtiene en la parte superior de la torre. El rango de ebullición de destilación directa de la nafta ligera (LSR) es aproximadamente de 35–90°C, mientras que los rangos para la nafta de destilación directa pesada (HSR) es aproximadamente 80–200°C. Su composición varía dependiendo del tipo de crudo y de qué proceso se le obtiene, ya que puede ser obtenida de otras unidades de procesamiento de refinerías como las unidades de craqueo catalítico, hidrocraqueo y coquización (Matar & Hatch, 2000).

La nafta que proviene de la unidad de destilación atmosférica se caracteriza por la falta de compuestos olefínicos. Dependiendo del origen del crudo, los principales

constituyentes de la nafta son parafinas de cadena lineal y ramificada, cicloparafinas (naftenos) y aromáticos. En la Tabla 4 se puede observar un análisis típico de nafta de dos tipos de petróleo. El principal uso de la nafta en la industria del petróleo es la producción de gasolina (Matar & Hatch, 2000).

**Tabla 4.**

*Análisis típicos de dos fracciones de nafta pura de dos tipos crudos*

<b>Propiedades</b>	<b>Marine Balayem</b>	<b>Bakr-9</b>
	<b>Egypt</b>	<b>Egypt</b>
Punto de ebullición °C	58-170	71-182
Peso específico 60/60°F	0,7485	0,7350
°API	57,55	
Contenido de azufre % en peso	0,0055	0,26
Tipos de hidrocarburos% vol		
Parafinas	62,7	80,2
Naftenos	29,1	11
Aromáticos	8,2	8,8

*Nota.* Tomado de (Matar & Hatch, 2000).

De las unidades de destilación atmosférica e hidrocrqueo sale nafta pesada con un índice de octanaje bajo, el cual se utiliza como materia prima para la unidad de reformado catalítico. El índice de octanaje de los combustibles de gasolina es una propiedad relacionada con la ignición espontánea de los gases no quemados. La nafta es una materia prima importante para los procesos de craqueo al vapor y reformado al

vapor, ya que se obtienen productos de gran interés como gases con gran contenido de olefinas (eteno) o la producción de síntesis del metanol (Matar & Hatch, 2000).

### **b. Queroseno**

Es un producto más pesado que la nafta y se obtiene de destilado atmosférico, puede obtenerse como producto a partir de unidades de craqueo que suelen ser menos estables que las producidas a partir de la destilación a presión atmosférica debido a la presencia de constituyentes olefínicos. El queroseno es un líquido transparente e incoloro que no deja de fluir excepto a temperaturas muy bajas, aproximadamente de  $-30^{\circ}\text{C}$ . Los principales componentes del queroseno obtenidos de los procesos de destilación atmosférica e hidrocrqueo son las parafinas, cicloparafinas y aromáticos. El queroseno con alto contenido en n-parafinas son materia primas adecuadas para la producción de detergentes biodegradables. Actualmente se utiliza el queroseno para producir combustibles para aviones y combustible para calefacción (Matar & Hatch, 2000).

### **c. Gasóleo (diésel)**

Es una fracción de petróleo más pesada que el queroseno. Se puede obtener a partir de la destilación atmosférica, destilación al vacío o procesos de craqueo e hidrocrqueo. La densidad y el contenido de azufre del gasóleo atmosférico son relativamente más bajos que el producido por la unidad de destilación al vacío. El contenido de aromáticos del gasóleo varía dependiendo del tipo de crudo y del proceso que haya sido sometido. En la Tabla 5 se observa un análisis típico de gasóleos atmosféricos y de vacío. Un uso principal del gasóleo es como combustible para motores diésel. Los gases producidos a partir de estos procesos son fuentes adecuadas para olefinas y GLP (Matar & Hatch, 2000).

**Tabla 5**

*Características del gasóleo atmosférico típico (AGO) y gasóleo de vacío (VGO)*

Propiedades	Gasóleo	
	Atmosférica	Vacío
	AGO	VGO
Punto de ebullición °C	232-327	299-538
Peso específico 15/15°C	0,832	0,876
Peso específico. °API	38,6	30
Hidrógenos % en peso	13,7	13
Aromáticos % en peso	24	28

*Nota.* Tomado de (Matar & Hatch, 2000).

#### **d. Aceite combustible residual**

Se le conoce generalmente como el producto de fondo de la unidad de destilación atmosférica. Este aceite combustible es inestable cuando es producido por unidades de craqueo, cuando se utilizan como combustibles producen humo y bloquea los orificios del quemador. Los componentes que forman este tipo de combustible residual son más complejos que el gasóleo. La mayor parte de compuestos que forman el petróleo crudo como aromáticos polinucleares, los asfáltenos y los metales pesados se encuentran en el residuo (Matar & Hatch, 2000).

El principal uso del combustible residual es para la generación de energía, ya que se quema en hornos de combustión directa y se le utiliza como combustible en procesos químicos y petroleros. Debido al bajo valor de mercado se le utiliza como materia prima en unidades de craqueo catalítico y térmico, siempre y cuando los niveles

de metales pesados no sean altos. Los combustibles residuales con alto contenido de metales pesados pueden servir como materia prima para procesos de craqueo térmico como la coquización retardada. Los gases del producto de las unidades de craqueo se pueden utilizar como fuente de olefinas ligeras y GLP para la producción petroquímica (Matar & Hatch, 2000).

#### **2.2.4. Equipos que forman la unidad de destilación atmosférica**

##### **a. Columna**

Son varios los componentes que forman una columna de destilación y cada uno de ellos se usa para transferir energía térmica o mejorar su transferencia de masa. Una columna de destilación característica está formada de varias partes (Speight & Wyoming, 2006):

- Carcasa vertical, donde se da la separación de los componentes.
- Bandejas, placas o empaquetaduras que sirven para mejorar la separación de los componentes.
- Rehervidor: encargado de proporcionar la vaporización necesaria.
- Condensador: enfría y condensa el vapor que sale de la parte superior de la columna.
- Tambor de reflujo: encargado de contener el vapor condensado de la parte superior de la columna y permite que se pueda recircular el líquido (reflujo) de regreso a la columna.

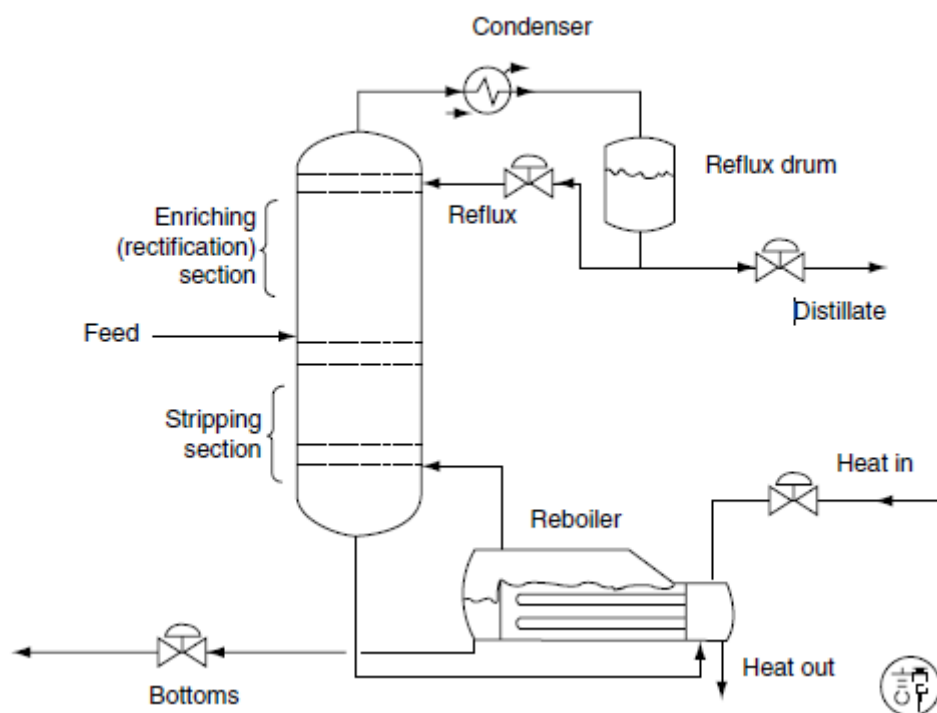
En una columna de destilación de petróleo, generalmente la mezcla líquida se introduce en el centro de la columna (bandeja de alimentación), donde se divide la columna en una sección superior (enriquecimiento) y otra inferior (decapado). La fuente de calor que se suministra al rehervidor puede ser cualquier fluido, aunque normalmente

es vapor. En las refinerías las fuentes de calor son los flujos de salida de otras columnas. El vapor que sube del rehervidor se reintroduce a la columna, mientras que el líquido que se extrae del rehervidor se le conoce como fondos (Speight & Wyoming, 2006).

El vapor que sube por la columna hasta la parte superior, entra al condensador donde la mezcla se enfría y se almacena en un recipiente de almacenamiento llamado tambor de reflujo. Parte de este líquido se recicla y la otra se elimina del sistema (destilado o producto). Por tanto, hay flujos internos de vapor y líquido dentro de la columna, así como flujos externos de alimentaciones y corrientes de producto, dentro y fuera de la columna (Speight & Wyoming, 2006).

### Figura 11

*Partes individuales de una columna de destilación atmosférica*



*Nota.* Tomado de (Speight & Wyoming, 2006).

## **b. Embalajes**

Según (Speight & Wyoming, 2006), los embalajes en una columna de destilación crea un área para que el líquido se propague, proporcionando así un área de superficie alta para la transferencia de masa entre el líquido y el vapor.

## **c. Bandejas**

Por lo general, estas bandejas son de metal, planas y se colocan a una distancia regular en una columna vertical cilíndrica. Las bandejas tienen dos partes principales:

1. La parte donde el líquido y el vapor están en contacto.
2. La parte donde se separa el vapor y el líquido después de haber estado en contacto.

Las bandejas se clasifican según:

1. Tipo de bandeja utilizada en el área de contacto
2. Tipo y número de bajantes que componen el área.
3. Trayectoria y dirección del líquido que fluye a través del área de contacto.
4. El flujo de vapor que pasa a través de los orificios de la placa.
5. Presencia de deflectores, empaquetaduras u otros componentes adicionales de área de contacto con el fin de mejorar el rendimiento de la separación.

Las bandejas que tienen múltiples bajantes suelen tener varias geometrías de diseño y pueden extenderse en paralelo o de pared a pared. El patrón de disposición del tubo, ya sea 90 o 180 grados, determina la disposición de la trayectoria del flujo líquido y su dirección en el área de contacto de las bandejas. De esta forma se controla el caudal, la dirección del flujo líquido, así como su altura (Speight & Wyoming, 2006).



El parámetro más importante que se tiene en cuenta en una bandeja es el rendimiento de separación, ya que es la base del rendimiento de la columna, para ello hay que tener en cuenta varios factores (Speight & Wyoming, 2006):

1. Nivel de eficiencia de la bandeja en el rango de operación normal.
2. Tasa de vapor en la parte superior de la columna (carga máxima).
3. Tasa de vapor en la parte inferior de la columna (carga mínima).
4. Caída de presión en la bandeja.

La calidad de separación de la mezcla se puede juzgar a partir del nivel de pureza de las corrientes superior e inferior. El grado de recuperación de los productos puros establecen los objetivos para una columna de destilación con una operación exitosa (Speight & Wyoming, 2006).

#### ***2.2.5. Desarrollo del balance de masa para la unidad de destilación de crudo***

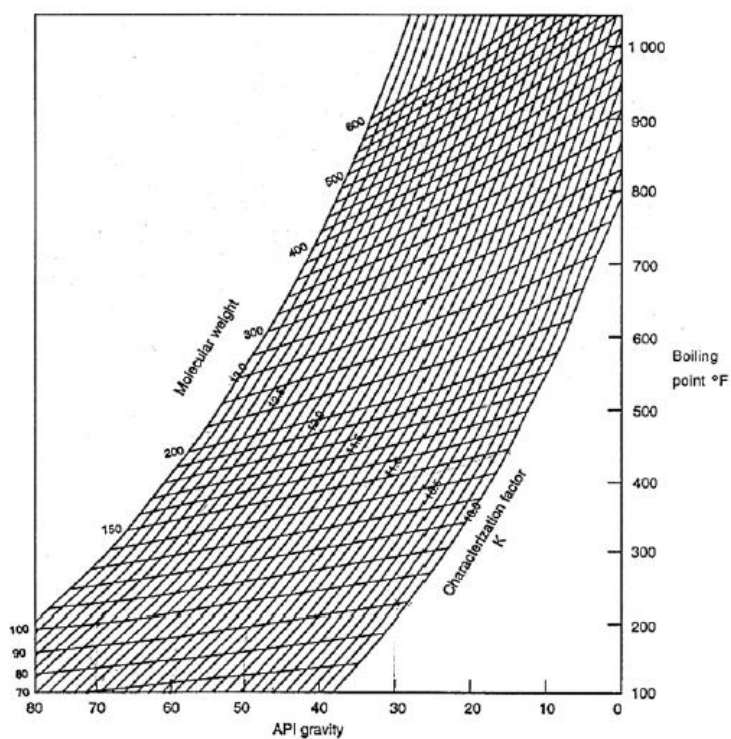
Para cualquier proceso de refinación el conocimiento sobre el balance de materia es importante para asegurar su correcto diseño y funcionamiento. Para ello se debe tomar en cuenta la cantidad de reflujo que se generará, en que parte se generará el reflujo, las temperaturas de extracción del destilado, las condiciones en la parte superior de la torre, las condiciones de la zona de evaporación y similares. El buen funcionamiento de las columna en general será fundamental para el rendimiento de unidades posteriores como el craqueo y reformado catalítico (Jones & Pujadó, 1996).

El balance de masa comienza con un examen y análisis en profundidad en la corriente de alimentación del crudo. Para ello se debe dividir la curva de destilación de TBP (True Boiling Point) de la alimentación en sus pseudocomponentes y asignar las características del producto en relación con el punto de ebullición medio de cada componente. Estas propiedades se proporcionan en los datos de ensayo que da la

gravedad en función del porcentaje del punto de ebullición medio, como se puede observar en la Figura 12. Estas propiedades formaran la base de cualquier proceso de diseño o trabajo de estudio definitivo, por lo que se debe tomar todas las precauciones necesarias para establecerlas con la mayor precisión posible (Jones & Pujadó, 1996).

### Figura 12

*Puntos de ebullición VS peso molecular y gravedad (°API)*



*Nota.* Tomado de (Jones & Pujadó, 1996).

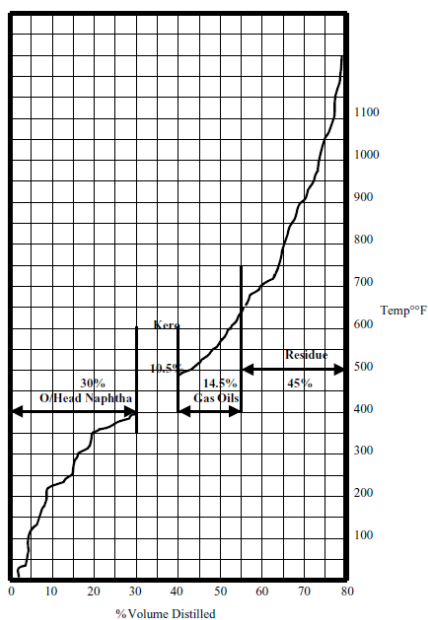
Una vez que se divide la curva de destilación TBP de la alimentación, se establece el punto de corte del residuo. Esa es la temperatura en la curva TBP a la que se pretende separar el residuo de destilado total. Posteriormente, la parte destilada se divide en sus cortes de productos tales como el gasóleo, queroseno y la nafta de la parte superior. El rendimiento de cada producto que se producirá como porcentaje del

crudo total representan los rangos de temperatura y el volumen de estos cortes (Jones & Pujadó, 1996).

Una vez que se tiene los puntos de corte de cada uno de los productos se desarrolla las curvas ASTM. Se fija un punto de ebullición inicial (IBP) por la capacidad de fraccionamiento de la unidad de destilación. Se entiende como capacidad de fraccionamiento a la diferencia de temperatura entre el punto de volumen del 95% de destilación ASTM del corte más ligero y el punto de volumen del 5% del corte más pesado adyacente. Según los productos se vuelven más pesados, la capacidad de separación de las fracciones disminuye hasta que haya una superposición en la curva (Jones & Pujadó, 1996).

### Figura 13

*TBP y puntos de corte de producto para un crudo típico de Oriente Medio*



*Nota.* Tomado de (Jones & Pujadó, 1996).

## **2.3. Química computacional**

La química computacional se llevó a cabo con el objetivo de desarrollar moléculas que pudiesen mostrar la actividad biológica deseada a través de computadoras. Este objetivo fue impulsado por las compañías farmacéuticas más importantes del mundo y coincidió con el desarrollo acelerado de la informática (Cuevas, 2005).

### **2.3.1. Definición.**

El término de química computacional es un término muy utilizado, pero es una palabra subjetiva y arbitraria, ya que diferentes autores tienen una definición propia de este término. Existe también un uso equivocado del término, ya que se emplea de forma errónea el uso del término química teórica para referirse a la química computacional (Cuevas, 2005).

Según (Cuevas, 2005), lo define como:

"La disciplina que comprende todos aquellos aspectos de la investigación en química que se benefician de la aplicación de las computadoras."

Según (Lewars, 2011), lo define como:

"La química computacional, también llamada modelización computacional, es un conjunto de técnicas para investigar problemas químicos en un ordenador."

Lo que está claro es que la química computacional no se centra en el desarrollo de nuevos métodos teóricos, sino en la obtención de resultados relevantes para ciertos problemas químicos. Claramente hay una relación entre la química teórica y la química computacional, ya que los modelos teóricos permiten el estudio de nuevos problemas, independientemente de su complejidad, y la química computacional brinda las técnicas

operacionales para resolver los modelos teóricos y comprobar su validez con los datos experimentales (Jensen, 2007).

### **2.3.2. Modelos Computacionales.**

Según (Jensen, 2007), existen diferentes modelos informáticos que les sirve de herramientas a los químicos computacionales. Estos modelos son:

1. La mecánica molecular: basado en un modelo de moléculas formadas por bolas (átomos) y resortes (enlaces), que permite calcular la energía de un conjunto de bolas, así como permite hacer una optimización de la geometría de una molécula determinada.
2. Los cálculos *ab initio*: es un modelo que se basa en la ecuación de Schrödinger, esta ecuación describe el comportamiento de electrones en una molécula, permitiendo obtener una función de onda con la que puede utilizarse para calcular la distribución de los electrones. Con este dato se puede saber la polaridad de una molécula o que partes de ella es capaz de ser atacada por nucleófilos o por electrolitos.
3. Métodos semiempíricos: al igual que el anterior modelo, se basa en la ecuación de Schrödinger, pero parametrizada con valores experimentales. Es una mezcla de teoría y experimento por lo que se dice que es un método semiempírico. Los cálculos aplicados a este modelo tardan 100 veces más que el cálculo de la mecánica molecular.
4. Teoría funcional de la densidad (DFT): este modelo se basa en los modelos *ab initio* y semiempíricos, con la diferencia que este modelo obtiene directamente la distribución de electrones evitando así la función de onda.
5. Modelo de dinámica molecular: aplica leyes de movimiento a las moléculas y de esta forma simular el movimiento de una enzima o el movimiento de una

molécula de agua alrededor de un soluto. También permite simular reacciones químicas reales.

### **2.3.3. Estructura de optimización.**

La estructura de optimización es la caracterización de la ubicación o localización de un punto estacionario en una superficie de energía potencial (PES). Para la optimización de una estructura se debe empezar con la entrada de una estructura que se asemeje al punto estacionario deseado y posteriormente, esta estructura se somete a un algoritmo informático que ayuda a llegar al punto estacionario deseable (Lewars, 2011).

### **2.3.4. Programas computacionales.**

#### **a. ChemDraw**

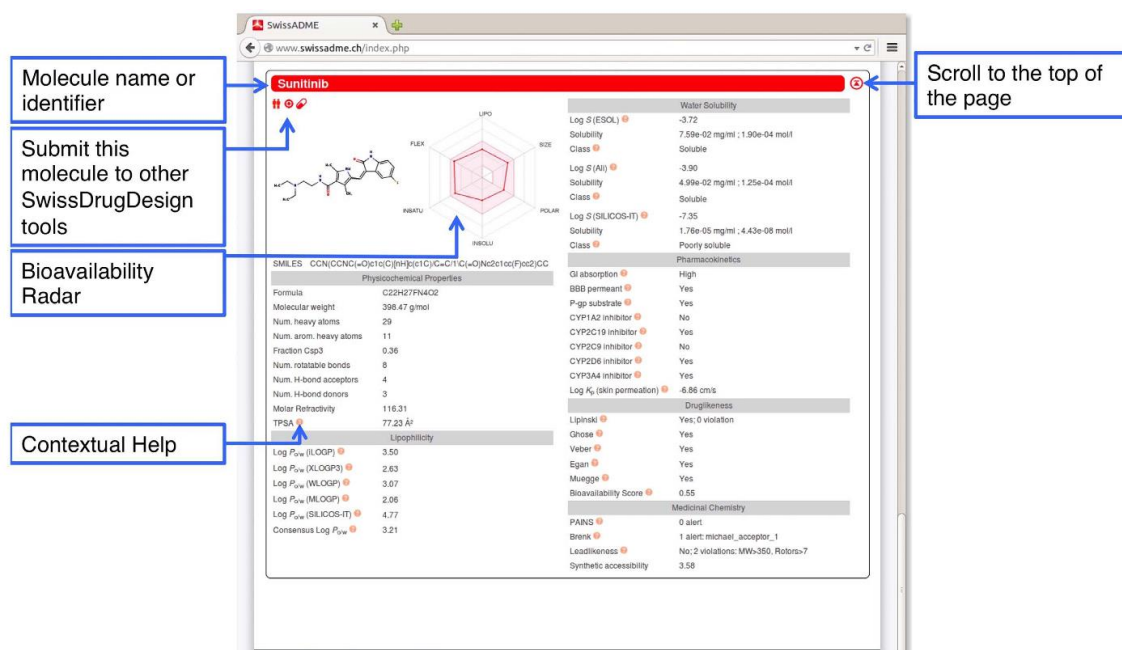
El Chemdraw es un software de gran ayuda como herramienta de dibujo seleccionada por investigadores para dibujar componentes químicos, convertir formulas químicas y nombres químicos en estructuras químicas en 2D, predecir propiedades químicas, construir nombres IUPAC correctos, prever propiedades química-físicas y calcular la estequiometría de las reacciones (Raiyn & Rayan, 2015).

#### **b. Página de Swissadme**

Para acceder a esta página de presentación de SwissADME se debe colocar en el navegador web <http://www.swissadme.ch>. Una vez que se ha entrado a la página se pueden colocar las moléculas que se quieren obtener las propiedades ADME y fisicoquímicas. A través de esta página y con la ayuda de los códigos SMILE se obtienen datos como la forma en la que se ha calculado las predicciones (métodos computacionales), muestra el radar de biodisponibilidad, lipofilia, tamaño, polaridad, solubilidad, flexibilidad y saturación (Daina et al., 2017).

**Figura 14**

*Representación de una molécula química, con sus propiedades fisicoquímicas en Swissadme*



*Nota.* En la parte superior se observa un encabezado de color rojo donde se muestra el nombre de la molécula y debajo del encabezado se encuentra la estructura química junto con el radar de biodisponibilidad correspondiente a la molécula que se quiere representar. Tomado de (Daina et al., 2017).

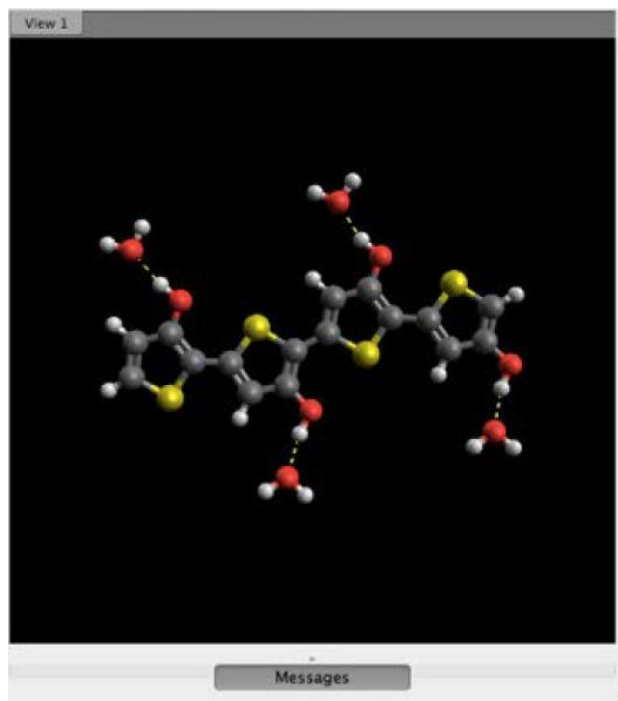
### c. Avogadro

Avogadro es un programa usado para la visualización molecular y la simulación de moléculas en 3D, ya que permite ver las moléculas desde todos los ángulos y perspectivas imaginables. Está diseñado para su uso en diferentes áreas como en la química computacional, ciencia de los materiales o bioinformática, entre otros. Este programa tiene una muy buena interfaz gráfica que ayuda al usuario crear sus propias

estructuras moleculares con sus propios colores y comprender de mejor forma las leyes de la química (Rayan & Rayan, 2017).

### Figura 15

*La interfaz gráfica de Avogadro*



*Nota.* Tomado de (Rayan & Rayan, 2017).

#### d. Pymol

Gracias a los avances en tecnología, hardware e internet se ha podido desarrollar este software que consta de un sistema gratuito de gráficos moleculares multiplataforma. Tiene grandes herramientas que permite representar estructuras comunes macromoleculares, así como sus enlaces, superficies sólidas y de malla de alambre. Pymol permite construir estructuras 3D en tiempo real y guardar o importar las imágenes en diferentes formatos. Es un programa editable en los que se puede mostrar las etiquetas para los átomos, distancias de enlace de hidrogeno, la superficie puede



ser transparente, cambiar el fondo de trabajo, entre otras muchas opciones más (Delano, 2002).

## **2.4. Propiedades químicas básicas**

### **2.4.1. Nombres sistemáticos o de la IUPAC**

En la búsqueda de un sistema para poder nombrar compuestos que fueran fácil de memorizar y de utilizar, en 1892 se reunieron un grupo de químicos de diferentes países conocidos como Unión Internacional de Química Pura y Aplicada, en inglés *International Union of Pure and Applied Chemistry*, por lo que la abreviación quedo como IUPAC (L. Wade, 2011).

Este comité puso reglas para nombrar de forma estándar los compuestos orgánicos. Las reglas establecidas son las siguientes:

- Regla 1: la cadena de átomos de carbono más larga es la que da el nombre base al compuesto.
- Regla 2: se enumera la cadena más larga, empezando por el extremo de la cadena que más cerca esté un sustituyente.
- Regla 3: nombrar los grupos alquilo dependiendo del número de átomo de carbono en que se encuentre.
- Regla 4: cuando haya dos o más sustituyentes, se los ordena por orden alfabético y si hay dos o más sustituyentes alquilo similares se debe utilizar prefijos como por ejemplo di-, tri-, tetra-, etcétera.

### **2.4.2. Fórmula molecular**

A través de la formula estructural se puede obtener la fórmula molecular de cualquier compuesto proporcionando así el número de átomos de cada elemento que

compone el compuesto. Un ejemplo es el compuesto butan-1-ol, donde la fórmula molecular correspondiente sería  $C_4H_{10}O$  (L. Wade, 2011).

### **2.4.3. Peso molecular**

En la mayoría de petróleos crudos el peso molecular promedio se encuentra entre 100 a 500. Las relaciones termodinámicas siempre producen cantidades molares (es decir, densidad molar), mientras que en la práctica se necesitan valores específicos de masa (es decir, densidad absoluta). El peso molecular también se utiliza para caracterizar los aceites, predecir la composición y calidad de los aceites y predecir propiedades físicas como la viscosidad. El método más adecuado para medir el peso molecular se basa en la depresión del punto de congelación (Riazi, 2005);(Fahim et al., 2010).

### **2.4.4. Composición en porcentaje**

Según (Harris, 2003), mediante la siguiente fórmula se puede calcular el porcentaje en peso de cualquier compuesto, sabiendo que el porcentaje de un componente de un soluto o disolución se expresa así:

$$\text{Porcentaje en peso (\%w)} = \frac{\text{masa de soluto}}{\text{masa total de mezcla o de disolucion}}$$

### **2.4.5. Análisis elemental**

El objetivo del análisis elemental es conocer la proporción y naturaleza de los elementos que contienen los compuestos orgánicos. Los principios de este análisis son la averiguación de los elementos, la proporción en la que se encuentran, la determinación de la sustancia analizada y la posterior deducción de la fórmula experimental. Actualmente el análisis elemental se suele realizar en los laboratorios de análisis químico a una escala micro (Beyer & Wolfgang, 1987).

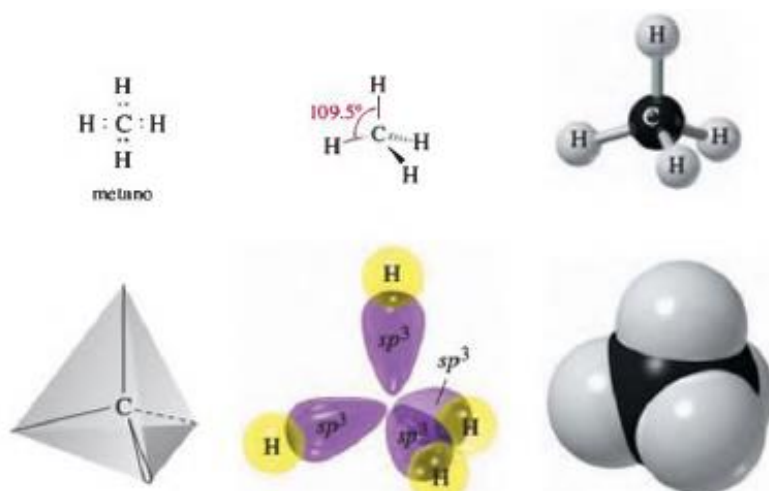
## 2.5. Propiedades fisicoquímicas

### 2.5.1. Hibridación $sp^3$

La mayoría de compuestos orgánicos tienen carbonos que se encuentran enlazados a otros átomos. Si estos átomos se están enlazados de tal forma que se encuentren lo más alejados posible conforman un tetraedro regular con ángulos de enlace de  $109,5^\circ$ . Este tetraedro está formado por una combinación de orbitales, un orbital s y tres orbitales p. a este tipo de orbitales se les conoce como orbitales híbrido  $sp^3$  (L. Wade, 2011)

#### Figura 16

*Diversas vistas del metano.*



*Nota.* El metano tiene una geometría tetraédrica; utiliza cuatro orbitales híbridos  $sp^3$  para formar enlaces sigma con los cuatro átomos de hidrogeno. Tomado de (L. Wade, 2011).

### 2.5.2. Refractividad molar

Según (Cirilo et al., 2004), la refractividad molar abreviada como MR es una propiedad fisicoquímica que se determina a partir de la ley de aditiva de refractividades

ópticas de Lorentz-Lorentz. Esta propiedad depende del peso molecular (PM), la densidad (d) y el índice de refracción (n). La expresión es la siguiente:

$$MR = \frac{PM * (n^2 - 1)}{d * (n^2 + 2)}$$

### **2.5.3. Lipofilicidad**

La lipofilia se describe por la partición entre el n-octanol y agua  $\left(\frac{\log P_o}{w}\right)$ . Existen varios métodos computacionales que sirven para estimar el rendimiento de este parámetro, utilizando métodos precisos que permiten generar un estimación aproximada para una determinada serie química (Daina et al., 2017).

Según (Daina et al., 2017), swissadme tiene acceso a cinco modelos predictivos:

1. XLOGP3: es un método atomístico en el que se incluye una biblioteca de conocimiento y factores correctivos.
2. WLOGP: este modelo se basa principalmente en el sistema fragmentario de Widman y Crippen.
3. MLOGP: se basa en una relación lineal con 13 descriptores moleculares.
4. SILICOS-IT: es un método híbrido basado en 27 fragmentos y 7 descriptores topológicos.
5. iLOGP: este método se basa en la energías libres de solvatación del n-octano y agua en un modelo de superficie accesibles a solventes.

### **2.5.4. Solubilidad de compuestos orgánicos**

Se conoce como solubilidad a la capacidad de una sustancia a disolverse en un líquido. La solubilidad de los compuestos orgánicos viene determinada por las fuerzas intermoleculares. Al momento cuando un soluto se disuelve ocurre una separación de moléculas o iones, en el que estas moléculas quedan distribuidas y rodeadas por las

moléculas del disolvente, a este proceso se le llama solvatación. El efecto de la salubridad de un compuesto también viene determinada por la polaridad del soluto y del disolvente (Tovar & Grande, 2019).

## **2.6. Interacciones intermoleculares**

Las fuerzas intermoleculares afectan las propiedades físicas de los compuestos orgánicos, cuando dos moléculas se aproximan se atraen o se repelen entre sí. Las fuerzas son de atracción hasta el punto en que se acercan tanto que la pequeña fuerza de atracción se convierte de manera inmediata en una gran fuerza de repulsión y las moléculas se rechazan entre sí (L. G. Wade, 2012).

De acuerdo con (L. G. Wade, 2012), cuando los compuestos están en fase líquida y sólida las atracciones entre las moléculas se vuelven más importantes ya que en estas fases, las moléculas están en contacto continuo una de otra. Las propiedades de los compuestos orgánicos que dan a conocer los efectos que tienen estas fuerzas en las moléculas son los puntos de fusión, los puntos de ebullición y las solubilidades. Existen tres tipos de fuerzas de atracción que ocasionan que las moléculas se asocien en líquidos y sólidos:

### **2.6.1. Fuerzas dipolo-dipolo**

Las fuerzas dipolo-dipolo, son fuerzas intermoleculares de atracción de moléculas polares que en sus momentos dipolares permanentes provocan atracción en los extremos positivos y negativos de dicha molécula. Cuando dos extremos negativos o dos positivos se acercan, se repelen, pero pueden girar y orientarse ellos mismos hacia el arreglo positivo-negativo más estable, ya que en el caso de un líquido o un sólido la fuerza neta es de atracción (L. G. Wade, 2012).

### **2.6.2. Fuerzas de dispersión de London**

Para las moléculas no polares, la fuerza de atracción principal es la fuerza de dispersión de London, que se da de momentos dipolares temporales, cuando una molécula se aproxima a otra molécula en la que los electrones están ligeramente desplazados de un arreglo simétrico se produce un pequeño momento dipolar temporal. Los electrones de la molécula que se aproximan son desplazados ligeramente, de tal manera que se genera una interacción dipolo-dipolo de atracción (L. G. Wade, 2012).

### **2.6.3. Enlace por puente hidrógeno**

Los enlaces por puente de hidrógeno son considerados un tipo de atracción dipolo-dipolo particularmente fuerte, en el cual un átomo de hidrogeno sirve como puente entre dos átomos electronegativos, sujetando a uno con un enlace covalente y al otro con fuerzas puramente electrostáticas. Estos enlaces son representados por una línea de puntos, y es importante tomar en cuenta que los enlaces por puente de hidrogeno se dan a partir de los elementos flúor (F), oxígeno (O) y nitrógeno (N), ya que el hidrogeno es lo suficientemente positivo cuando se une a uno de estos tres elementos, que son lo suficientemente negativos para que exista la atracción necesaria (Morrison & Boyd, 1998).

## CAPITULO III

### Metodología

#### **3.1. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de destilación atmosférica**

Para la búsqueda de compuestos orgánicos que forman la entrada de la unidad de destilación atmosférica se hizo una investigación bibliográfica, exactamente de los libros de "*Tecnología y margen de refino del petróleo*" de José Lluch Urpi y "*Fundamentals of Petroleum Refining*" de Mohamed A., fueron los textos de donde se encontraron los compuestos principales que constituyen el petróleo crudo. Sabiendo que el crudo está formado por átomos de carbono, hidrogeno, oxigeno, azufre, nitrógeno y metales pesados se obtuvieron diferentes compuestos formados por dichos átomos, entre los cuales se encontró parafinas e isoparafinas, naftenos, aromáticos, compuestos sulfurados, compuestos con oxígeno y compuestos nitrogenados. Junto a la búsqueda de los compuestos, también se obtuvo los números API de los compuestos formados por carbono e hidrogeno, que sirvió para determinar qué tipo de petróleo puede conformar dicho compuesto. Para los compuestos sulfurados, oxigenados y nitrogenados se encontró el porcentaje en masa de cada compuesto, ya que todos estos compuestos constituyen una mínima parte de toda la masa que forma el petróleo crudo.

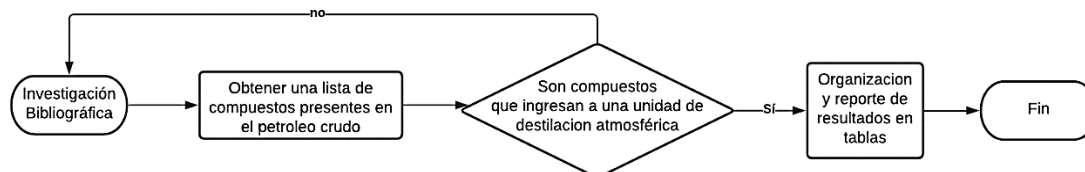
##### **3.1.1. Obtención, organización y reporte de resultados**

Una vez obtenidos los compuestos de entrada a la unidad de destilación atmosférica se prosiguió a organizar esta información en tablas, ordenando de menor a mayor los compuestos según el número de átomo de carbono que tenga y el tipo de hidrocarburo que sea. Los resultados obtenidos fueron seis tablas con sus diferentes

compuestos que conforman la corriente de entrada a la columna de destilación en una refinería.

### Esquema 1

*Diagrama de flujo para la obtención de componentes presentes en el crudo*



*Nota.* Realizada por el autor.

## 3.2. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de destilación atmosférica

Para la búsqueda de compuestos orgánicos que forman la salida de la unidad de destilación atmosférica se hizo una investigación bibliográfica, para ello se indagó cuantas y cuáles eran las corrientes de salida de una columna de destilación en una refinería, obteniendo un total de seis corrientes de salida. Las corrientes de salida que se encontraron fueron: gas combustible, gasolina, nafta, queroseno, diésel y residuo atmosférico. Posteriormente se buscó los componentes que conformaban cada corriente, así como una propiedad esencial con la que ayudaba a determinar el compuesto predominante en cada corriente, por ejemplo el número RON, MON, el octanaje, el cetaje o el porcentaje en peso. Para la obtención de esta información fueron de gran ayuda los textos de Simanzhenkov, Antos, Bacosa, Czylkowski y Creton.

### 3.2.1. Obtención, organización y reporte de resultados

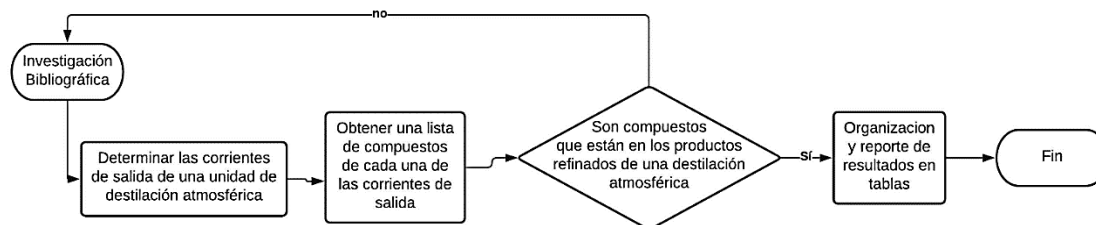
Una vez obtenidos los compuestos de salida de la unidad de destilación atmosférica se prosiguió a organizar esta información en tablas. Los resultados



obtenidos fueron seis tablas con sus diferentes compuestos que conforman cada una de las corrientes de salida de la columna de destilación en una refinería.

## Esquema 2

*Diagrama de flujo para la obtención de compuestos orgánicos presentes en las corrientes de salida de la columna de destilación*



*Nota.* Realizada por el autor.

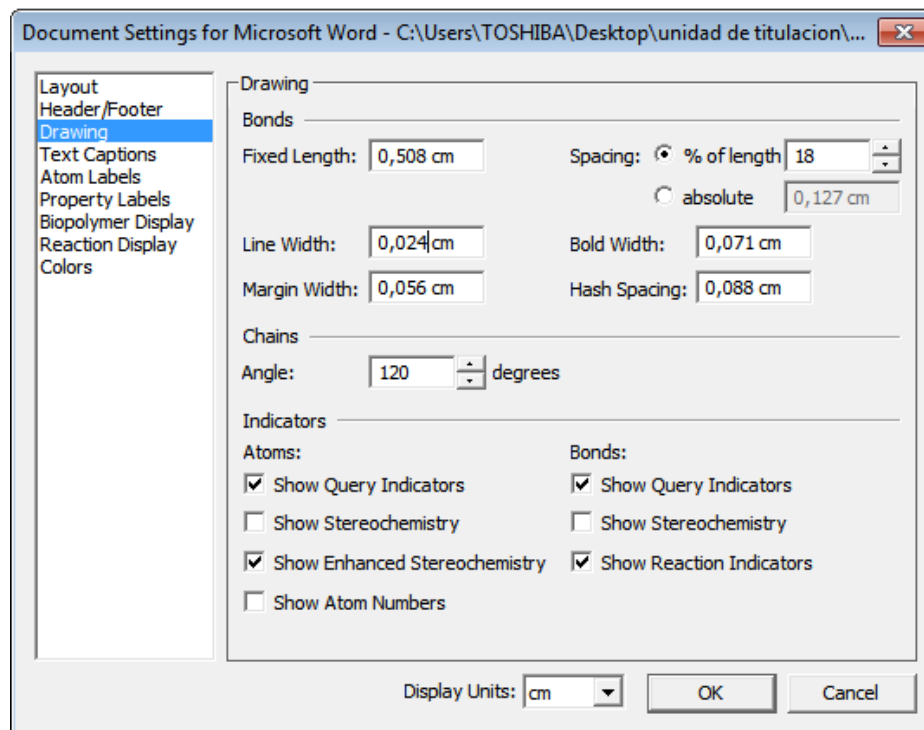
### 3.3. Procesamiento y obtención de estructuras químicas 2D y propiedades químicas básicas

#### 3.3.1. Generación de estructuras químicas en 2D

Con la ayuda del software ChemDraw, se pudo obtener las estructuras químicas en 2D pertenecientes a cada compuesto que constituyen las corrientes de entrada y de salida de la columna de destilación. Para ello con el nombre del compuesto obtenido en la revisión bibliográfica se procedió a graficar la estructura en 2D con la opción “structure” y “Convert name to structure” de dicho programa, para que la estructura resalte, se aplicó ACS Document 1996 y se editó el ancho de línea y el estilo de letra, como se muestra en la figura 17.

Figura 17

Ventana para la edición de texto, longitud, colores..etc.



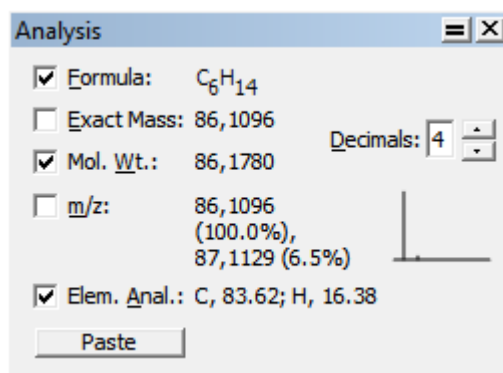
Nota. Tomado de ChemDraw.

### 3.3.2. Procesamiento de propiedades básicas

Las propiedades básicas que se reportan en el software ChemDraw, se encuentran en la ventana “*Analysis Window*”, donde se indica la fórmula química de compuesto que se quiere generar, representado por el número de átomos que forman la molécula; el peso molecular expresado en términos de unidades de masa atómica y el análisis elemental donde se analiza la fracción de masa de carbono, hidrogeno, nitrógeno y heteroátomos de cada componente, como se muestra en la figura 18.

**Figura 18**

*Ventana de las propiedades químicas básicas*



Nota. Tomado de ChemDraw.

### **3.3.3. Generación automática del código SMILES**

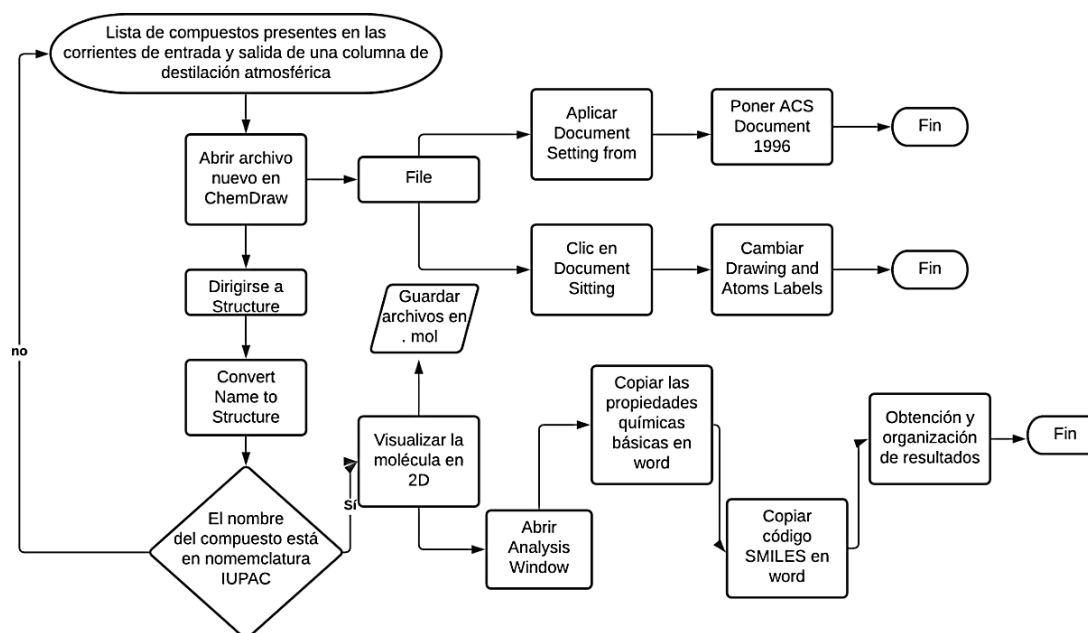
Con la estructura química generada en 2D de todos los compuestos, se procedió a generar el código SMILES seleccionando la estructura del componente y copiando dicho código en la plataforma SwissADME para obtener las propiedades fisicoquímicas de todos los componentes. El archivo que se creó de cada una de las moléculas se lo guardo en formato (.mol) para que posteriormente se pueda visualizar la molécula tridimensionalmente en el software de Avogadro.

### **3.3.4. Obtención, organización y reporte de resultados**

Una vez obtenidos todos los datos de cada compuesto se procedió a organizar dicha información en tablas, los cuales se estructuran con la generación de la molécula en 2D en la primera fila, seguida de la formula química, peso molecular, análisis elemental y por último el código SMILES, como se puede observar en las tablas del capítulo de resultados y el Apéndice 1.

### Esquema 3

Diagrama de flujo para la generación de estructuras 2D, propiedades químicas básicas y códigos SMILES.



Nota. Realizada por el autor.

### 3.4 Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas

Mediante la utilización de la plataforma SwissADME (<http://www.swissadme.ch/>) del Instituto Suizo de Bioinformática, se calculó las propiedades fisicoquímicas básicas de cada una de las moléculas orgánicas presentes en la corriente de entrada y salida del proceso de destilación atmosférica en una refinería de petróleo.

#### 3.4.1. Procesamiento a través del código SMILES

Para el procesamiento de las propiedades fisicoquímicas básicas de las moléculas se utilizó el código SMILES obtenido en pasos anteriores mediante la ayuda del programa ChemDraw, el mismo que se copia en la plataforma para obtener el

respectivo análisis como se muestra en la figura 19 y se procedió a correr el programa para posteriormente dar con los resultados de las propiedades deseadas.

### Figura 19

*Código SMILES en la plataforma SwissADME*

Enter a list of SMILES here:

```

CC(C)(C)CCC
CC(C)(C)C(C)C
CC(C)(C)CC(C)C
C1CCCC1
CC1CCCC1
C1CCCCC1
CC1CCCCC1
C1=CC=CC=C1
CC1=CC=CC=C1
CCC1=CC=CC=C1
CC1=CC=CC(C)=C1
CC1=CC=C(C)C=C1
CC1=CC=CC=C1C
CC1=CC=CC(CC)=C1
CC1=CC(C)=CC(C)=C1
CC1=CC=C(C)C(C)=C1
C/C=C/CC
C/C(C)=C/C
C/C(C)=C\CC
C1=CCCC1
CC1=CCCC1
C1=CC=CC1
C12C=CCC1C3C=CC2C3
CO
CCO
CC(O)C

```

Fill with an example Clear Run!

*Nota.* Tomado de la plataforma gratuita SwissADME.

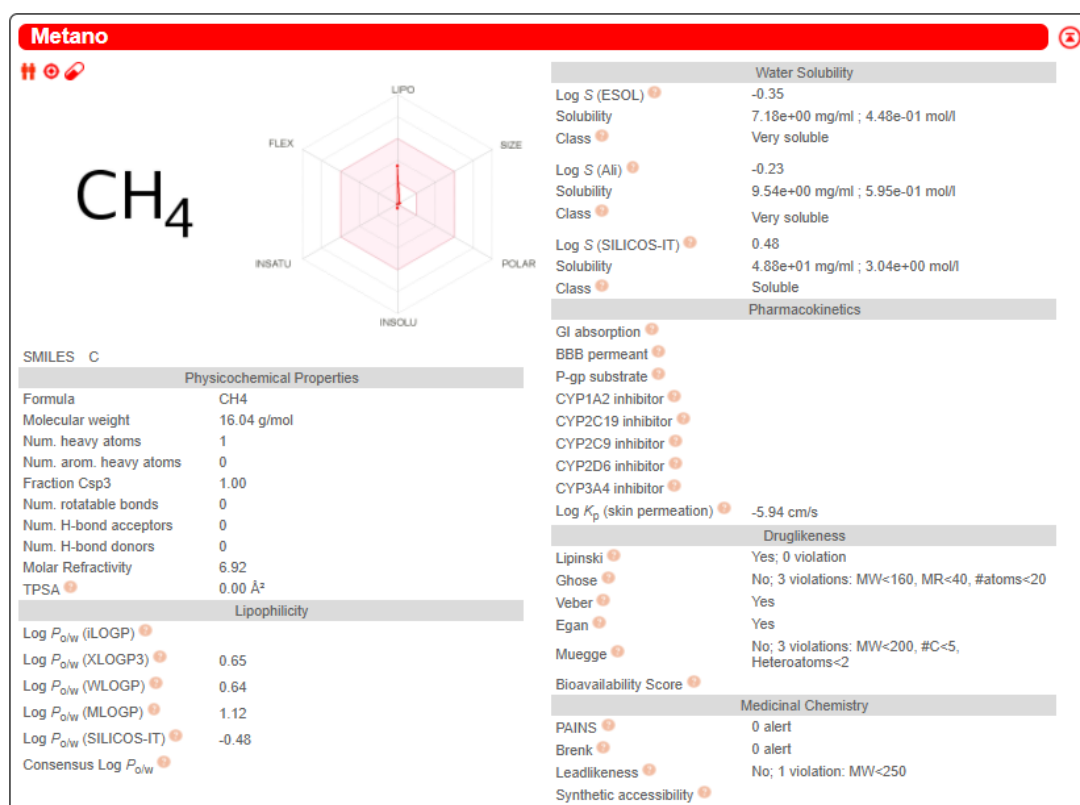
#### 3.4.2. Obtención, organización y reporte de resultados

Después del análisis de SwissADME se obtiene un resumen de las propiedades fisicoquímicas de las moléculas como se puede observar en la figura 20, se da a conocer el radar de biodisponibilidad que describe el espacio fisicoquímico dentro de rangos óptimos para cada propiedad en las que se incluye la lipofilia, tamaño, polaridad, flexibilidad, solubilidad y saturación. También se obtiene datos de la lipofilicidad el cual se mide con el coeficiente de partición entre n-Octanol y agua (Log Po/w) y datos de la

solubilidad en agua el cual se mide con el logaritmo de la solubilidad molar en agua de la molécula (Log S), dichas tablas se reportan en capítulo de resultados y en el Apéndice 2.

**Figura 20**

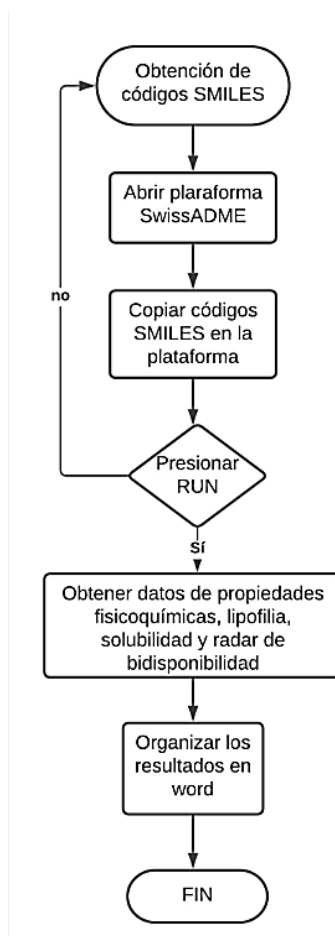
*Ejemplo del análisis de una molécula en SwissADME*



*Nota.* Tomado de la plataforma gratuita SwissADME.

## Esquema 4

*Diagrama de flujo para la obtención de propiedades fisicoquímicas, lipofilia, solubilidad en el agua y radar de biodisponibilidad*



*Nota.* Realizada por el autor.

### 3.5 Cálculo y obtención de estructuras 3D

#### 3.5.1. *Elaboración de archivos con coordenadas 3D optimizadas y reporte de la energía de optimización*

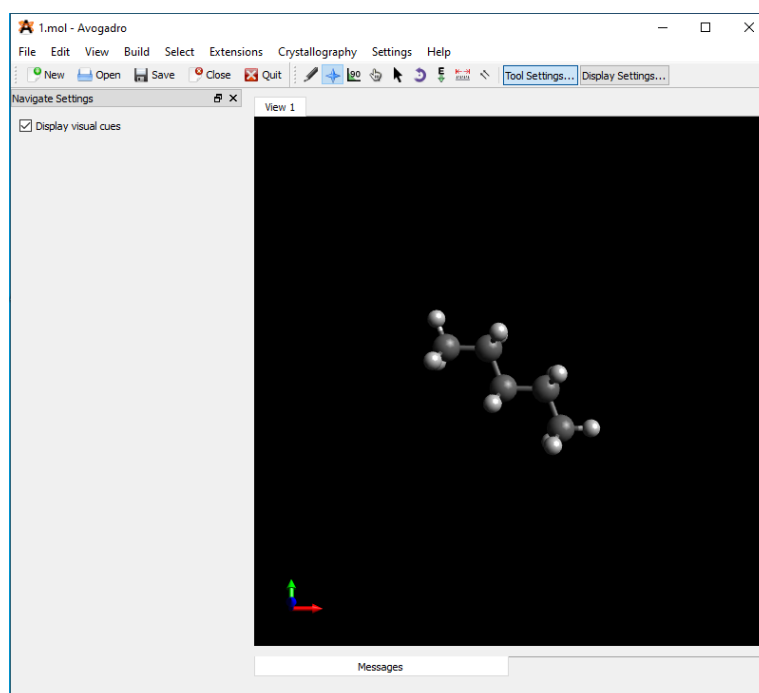
Con la ayuda del software Avogrado se obtiene las estructuras químicas 3D de las moléculas presentes en la entrada y salida del proceso de destilación atmosférica de una

refinería de petróleo. A continuación se muestran los pasos a seguir para la obtención de la estructura 3D de una molécula y de su respectiva energía de optimización.

*Paso 1.* Se abre en el software Avogadro el archivo en formato de coordenadas extensión (.mol) de la estructura química 2D de una molécula obtenida en pasos anteriores por medio del software ChemDraw, con la opción de “file” y “open”, para que el programa genere la estructura en 3D sin optimizar de dicha molécula, como se observa en la figura 21 .

### Figura 21

*Estructura 3D sin optimizar de una molécula en el software Avogadro*



*Nota.* Tomado del software Avogadro.

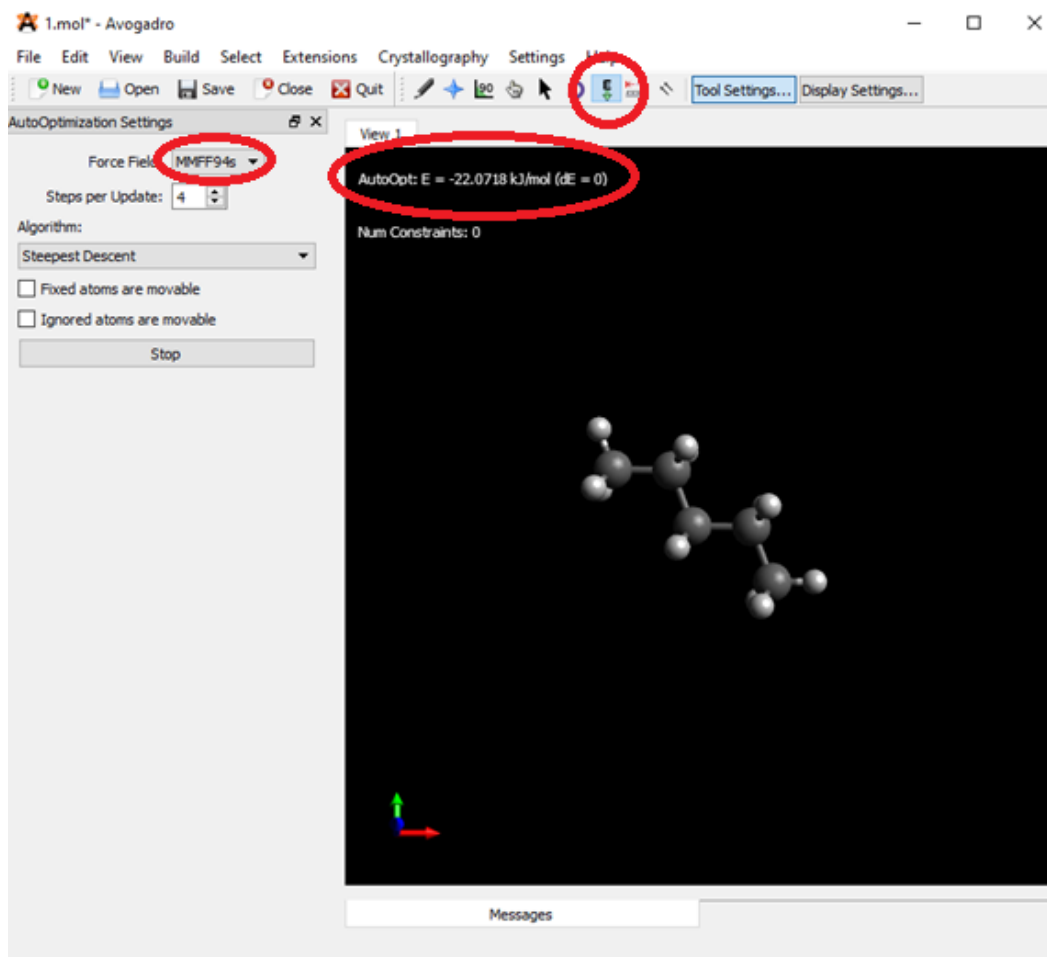
*Paso 2.* Para optimizar la molécula y generar su respectiva energía de optimización, se acudió a la utilización de los campos de fuerzas (MMFF94s) que es el campo más óptimo para moléculas orgánicas, obteniendo así el valor de la energía de



optimización en KJ/mol (dE), como se muestra en la figura 22 y se procedió a guardar el archivo generado en extensión (.mol).

## Figura 22

*Estructura 3D optimizada de una molécula en el software Avogadro*



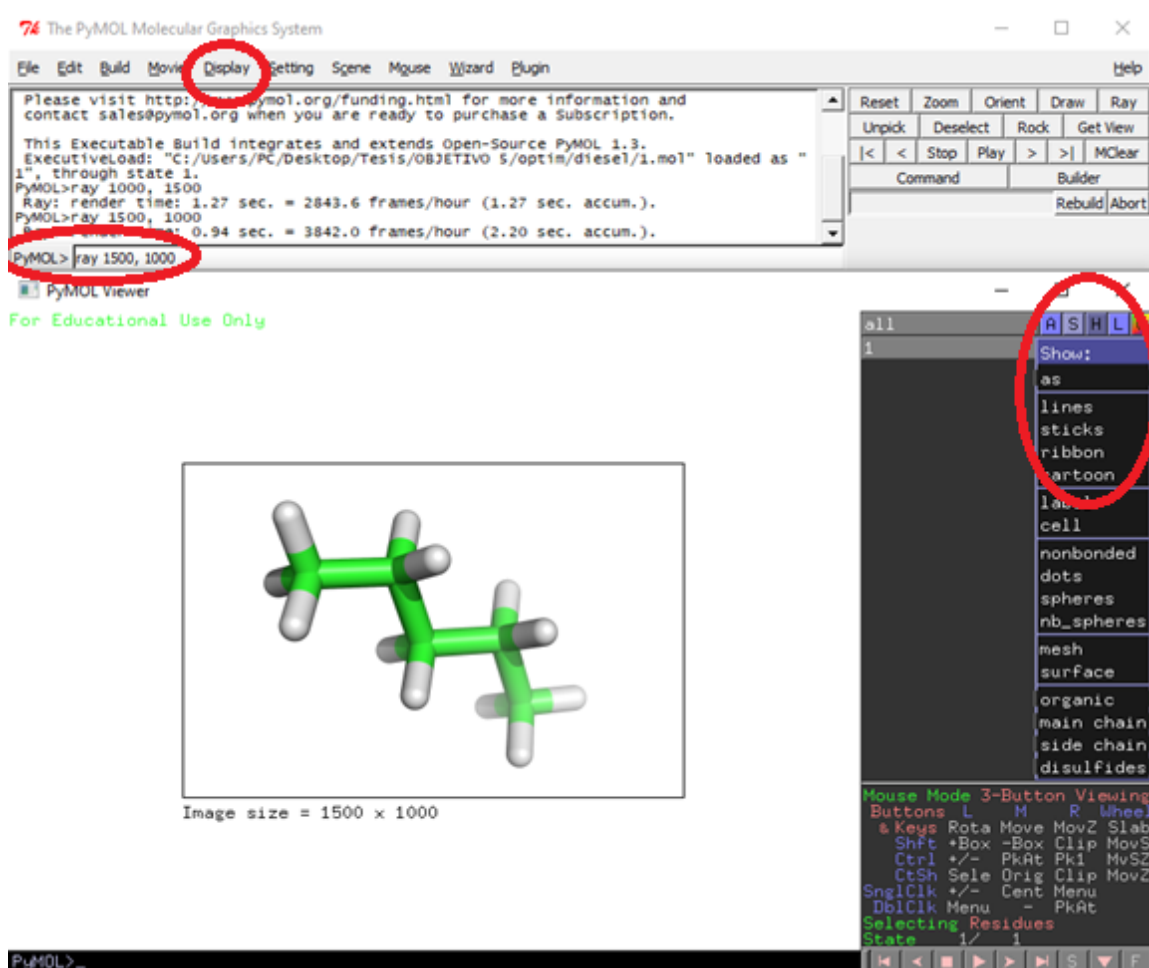
*Nota.* Tomado del software Avogadro.

*Paso 3.* Mediante el visor molecular de código abierto PyMOL se abrió el archivo con coordenadas 3D optimizadas para la obtención de imágenes de mejor calidad, en el mencionado programa se procedió a mejorar la estructura 3D, con la opción "Display" y "Background" se cambió el color de fondo del programa, en la opción "Show" y "Sticks"

se mejoró el tamaño de la molécula y con el código "ray 1500, 1000" se obtuvo una estructura 3D más nítida, como se puede ver en la figura 23, finalmente se procedió a guardar el archivo de la imagen en extensión (.JPG o .PNG).

**Figura 23**

*Estructura 3D de una molécula en el sistema gráfico molecular PyMOL*



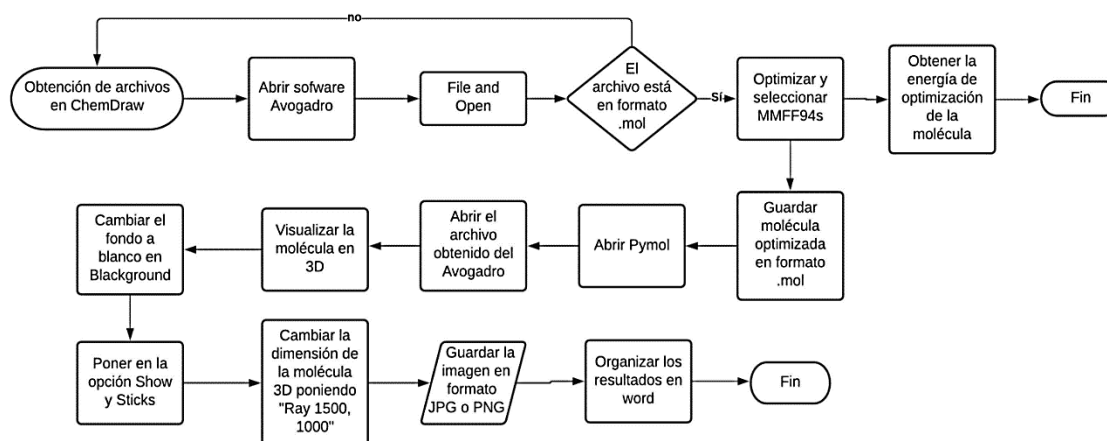
*Nota.* Tomado del software Avogadro.

### 3.5.2. Obtención, organización y reporte de resultados

Una vez obtenidas todas las imágenes en extensión (.JPG o .PNG) de las estructuras 3D de cada compuesto, se procedió a organizar dicha información en el capítulo de resultados para su posterior discusión, así como también se encuentran reportadas en el Apéndice 3, junto con la imagen de cada molécula se menciona la respectiva energía de optimización como una nota.

#### Esquema 5

Diagrama de flujo para la optimización de la molécula y visualización de la molécula en 3D



*Nota.* Realizada por el autor

## CAPITULO IV

## Resultados y discusión

**4.1. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada en el proceso de destilación atmosférica**

**4.1.1. Compuestos Parafínicos**

**Tabla 6**

*Lista de moléculas orgánicas de hidrocarburos parafínicos*

Nº	Compuestos	Fórmula	°API
1	metano	$CH_4$	340
2	etano	$C_2H_6$	265,76
3	propano	$C_3H_8$	147,6
4	n-butano	$C_4H_{10}$	110,79
5	iso-butano	$C_4H_{10}$	119,89
6	n-pentano	$C_5H_{12}$	92,7
7	iso-pentano	$C_5H_{12}$	95,01
8	n-hexano	$C_6H_{14}$	81,66
9	iso-hexano	$C_6H_{14}$	79,65
10	2,3-dimetilbutano	$C_6H_{14}$	75,46
11	n-heptano	$C_7H_{16}$	74,11
12	iso-heptano	$C_7H_{16}$	73,28
13	n-octano	$C_8H_{18}$	68,65
14	2,2,4-trimetilpentano	$C_8H_{18}$	66,95
15	n-nonano	$C_9H_{20}$	64,52

<b>Nº</b>	<b>Compuestos</b>	<b>Fórmula</b>	<b>°API</b>
16	n-decano	$C_{10}H_{22}$	61,22
17	n-undecano	$C_{11}H_{24}$	58,56
18	n-dodecano	$C_{12}H_{26}$	56,48
19	n-tridecano	$C_{13}H_{28}$	54,26
20	n-tetradecano	$C_{14}H_{30}$	53,87
21	n-pentadecano	$C_{15}H_{32}$	51,75
22	n-hexadecano	$C_{16}H_{34}$	50,56
23	n-heptadecano	$C_{17}H_{36}$	49,99
24	n-octadecano	$C_{18}H_{38}$	48,31
25	n-nonadecano	$C_{19}H_{40}$	47,1
26	n-eicosano	$C_{20}H_{42}$	46,41
27	n-heneicosano	$C_{21}H_{44}$	45,79
28	n-docosano	$C_{22}H_{46}$	45,79
29	n-tricosano	$C_{23}H_{48}$	45,28
30	n-tetracosano	$C_{24}H_{50}$	44,82
31	n-pentacosano	$C_{25}H_{52}$	44,79
32	n-hexacosano	$C_{26}H_{54}$	43,64
33	n-heptacosano	$C_{27}H_{56}$	43,5
34	n-octacosano	$C_{28}H_{58}$	43,17
35	n-nonacosano	$C_{29}H_{60}$	42,76
36	n-triacontano	$C_{30}H_{62}$	42,5

Nota. Tomado de (Lluch Urpi, 2012).

En la presente tabla se muestra los compuestos parafínicos existentes en el crudo, son compuestos saturados que tienen la fórmula general  $C_nH_{2n+2}$ , donde  $n$  es el número de átomos de carbono que componen la molécula. En la tabla se presentan dos tipos de compuestos parafinados: las parafinas normales y las isoparafinas. Estos dos tipos de parafinas difieren en la estructura molecular y en sus propiedades químicas y físicas.

Se puede observar como el valor del número °API va disminuyendo según va incrementando el número de átomos de carbono en cada compuesto hasta un número máximo de 30 átomos de carbono que se muestran en la tabla, siendo el metano el compuesto con mayor valor de °API (340) y el n-tricontano el compuesto con menor valor de °API (42,5).

#### 4.1.2. Compuestos Nafténicos

**Tabla 7**

*Lista de moléculas orgánicas de hidrocarburos nafténicos*

Nº	Nombre	Fórmula	°API
1	ciclopentano	$C_5H_{10}$	54,61
2	metilciclopentano	$C_6H_{12}$	56,17
3	ciclohexano	$C_6H_{12}$	49,1
4	etilciclopentano	$C_7H_{14}$	51,98
5	metilciclohexano	$C_7H_{14}$	51,13
6	cicloheptano	$C_7H_{14}$	42,24
7	etilciclohexano	$C_8H_{16}$	47,14
8	ciclooctano	$C_8H_{16}$	36,86

<b>N°</b>	<b>Compuestos</b>	<b>Fórmula</b>	<b>°API</b>
9	n-propilciclohexano	$C_9H_{18}$	45,79
10	ciclononano	$C_9H_{18}$	34,86
11	etilcicloheptano	$C_9H_{18}$	45,55
12	n-pentilciclopentano	$C_{10}H_{20}$	46,41
13	n-butilciclohexano	$C_{10}H_{20}$	44,64
14	decalin	$C_{10}H_{18}$	44,25
15	n-hexilciclopentano	$C_{11}H_{22}$	45,24
16	n-pentilciclohexano	$C_{11}H_{22}$	43,69
17	n-heptilciclopentano	$C_{12}H_{24}$	44,26
18	n-hexilciclohexano	$C_{12}H_{24}$	42,86
19	n-octilciclopentano	$C_{13}H_{26}$	43,45
20	n.heptilciclohexano	$C_{13}H_{26}$	42,94
21	n-nonilciclopentano	$C_{14}H_{28}$	42,73
22	n-octilciclohexano	$C_{14}H_{28}$	41,55
23	n-nonilciclohexano	$C_{15}H_{30}$	41,02
24	n-decilciclohexano	$C_{16}H_{32}$	40,57
25	n-undecilciclohexano	$C_{17}H_{34}$	40,14
26	n-dodecilciclohexano	$C_{18}H_{36}$	39,8
27	n-tridecilciclohexano	$C_{19}H_{38}$	39,45
28	n-tetradecilciclohexano	$C_{20}H_{40}$	39,18

Nota. Tomado de (Lluch Urpi, 2012).

En la presente tabla se muestran los cicloalcanos que forman el crudo, los cuales son hidrocarburos saturados que forman un anillo de átomos de carbono. Su fórmula general es  $C_nH_{2n}$ . Los naftenos presentes en la tabla son anillos con cinco hasta nueve átomos de carbono, los cuales algunos tienen sustituyentes alquílicos unidos a ellos. Los anillos de naftenos múltiples como el decalin están presentes en las partes más pesadas del petróleo crudo. La mayoría de los compuestos tienen un valor medio de °API entre 56,17 y 34,86.

#### 4.1.3. Compuestos Aromáticos

**Tabla 8**

*Lista de moléculas orgánicas de hidrocarburos aromáticos*

Nº	Nombre	Fórmula	°API
1	isopreno	$C_5H_8$	53,65
2	benceno	$C_6H_6$	28,77
3	tolueno	$C_7H_8$	30,34
4	etilbenceno	$C_8H_{10}$	30,32
5	1,3-dimetilbenceno	$C_8H_{10}$	28,4
6	1,2-dimetilbenceno	$C_8H_{10}$	31,26
7	1,4-dimetilbenceno	$C_8H_{10}$	31,78
8	estireno	$C_8H_8$	24,22
9	n-propilbenceno	$C_9H_{12}$	31,45
10	isopropilbenceno	$C_9H_{12}$	31,43
11	o-etiltolueno	$C_9H_{12}$	28,43
12	m-etiltolueno	$C_9H_{12}$	31,43
13	p-etiltolueno	$C_9H_{12}$	32,04



Nº	Compuestos	Fórmula	°API
14	n-butilbenceno	$C_{10}H_{14}$	31,9
15	o-dicetilbenceno	$C_{38}H_{70}$	28,59
16	n-hexilbenceno	$C_{12}H_{18}$	32,64
17	ciclohexilbenceno	$C_{12}H_{18}$	17,88
18	n-heptilbenceno	$C_{13}H_{20}$	32,87
19	n-octilbenceno	$C_{14}H_{22}$	32,99
20	fenantreno	$C_{14}H_{10}$	32,34
21	n-nonilbenceno	$C_{15}H_{24}$	33,06
22	n-decilbenceno	$C_{16}H_{26}$	33,17
23	pireno	$C_{16}H_{10}$	33,59
24	n-undecilbenceno	$C_{17}H_{28}$	33,28
25	n-dodecilbenceno	$C_{18}H_{30}$	33,94
26	n-tridecilbenceno	$C_{19}H_{32}$	33,25
27	n-tetradecilbenceno	$C_{20}H_{34}$	33,29
28	3,4-bencilpireno	$C_{23}H_{14}$	32,65
29	n-pentadecilbenceno	$C_{21}H_{36}$	33,29
30	n-hexadecilbenceno	$C_{22}H_{38}$	33,31

*Nota.* Tomado de (Lluch Urpi, 2012).

En la tabla 8 se muestra los compuestos aromáticos que forman el crudo en la corriente de entrada, siendo compuestos cíclicos insaturados formados por uno o varios anillos de benceno. Se puede observar que el crudo está formado por compuestos que contienen monoaromáticos, que tienen un anillo de benceno sustituido por otro átomo o grupos alquilo. La tabla muestra compuestos formados con 5 átomos de carbono hasta

un máximo de 22 y un °API con un rango pequeño de valores, a diferencia de las parafinas.

#### 4.1.4. Compuestos orgánicos con contenido de azufre.

**Tabla 9**

*Lista de moléculas orgánicas del crudo de petróleo con contenido de azufre*

<b>N°</b>	<b>Nombre</b>	<b>Fórmula</b>	<b>% Masa</b>
1	metanotiol	$CH_4S$	3,56
2	1-butantioi	$C_4H_{10}S$	1,564
3	tiofenol	$C_6H_6S$	1,256
4	tiofeno	$C_4H_4S$	0,164
5	benzotiofeno	$C_8H_6S$	0,985
6	dibenzitiofeno	$C_{12}H_8S$	0,059

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

En esta tabla se muestra los componentes orgánicos que contiene azufre y son compuestos que forman el crudo al reaccionar el azufre elemental con los compuestos hidrocarbonados. Los compuestos que se muestran en la tabla son mercaptanos y tioles, con un porcentaje en masa promedio de 1,37.

#### 4.1.5. Compuestos orgánicos con contenido de oxígeno

**Tabla 10**

*Lista de moléculas orgánicas del crudo de petróleo con contenido de oxígeno*

<b>Nº</b>	<b>Nombre</b>	<b>Fórmula</b>	<b>% Masa</b>
1	metanol	$CH_4O$	0,0264
2	2-propanol	$C_3H_8O$	0,0162
3	fenol	$C_6H_6O$	0,0054
4	etil metil eter	$C_3H_8O$	0,0152
5	difenil eter	$C_{12}H_{10}O$	0,0654
6	tetrahidropirano	$C_5H_{10}O$	0,0048
7	ácido etanoico	$C_2H_4O_2$	0,0058
8	acido benzoico	$C_7H_6O_2$	0,0694
9	anhídrido acético	$C_4H_6O_3$	0,0314
10	Etanoato de fenilo	$C_4H_8O_2$	0,0846
11	acetato de fenilo	$C_8H_8O_2$	0,0348
12	propanona	$C_3H_6O$	0,0684
13	furano	$C_4H_4O$	0,6913
14	benzofurano	$C_8H_6O$	0,0085
15	criseno	$C_{17}H_{14}O_7$	0,542

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

En la presente tabla se muestra los compuestos con oxígeno que se encuentran en el crudo. Este contenido de oxígeno en el petróleo crudo suele ser inferior al 2% en peso como se puede observar. Si el petróleo crudo tiene un alto porcentaje en oxígeno,

indica que el petróleo ha sufrido una exposición prolongada a la atmósfera. En la tabla se encuentran compuestos como alcoholes, éteres, ácidos carboxílicos, cetonas y anhídridos.

#### 4.1.6. Compuestos orgánicos con contenido en nitrógeno

**Tabla 11**

*Lista de moléculas orgánicas del crudo de petróleo con contenido de nitrógeno*

Nº	Nombre	Fórmula	% Masa
1	piridina	$C_5H_5N$	0,0484
2	pirrol	$C_4H_5N$	0,0096
3	isoquinolina	$C_9H_7N$	0,0085
4	quinolina	$C_8H_5N$	0,0542
5	indole	$C_8H_7N$	0,0064
6	carbazol	$C_{12}H_9N$	0,00054

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

La presente tabla muestra algunos de los compuestos que contienen nitrógeno y los cuales forman el petróleo crudo. Se observa que el porcentaje en masa que contiene el crudo es muy pequeño. Esta tabla está formada por compuestos nitrogenados básicos como las piridinas y los compuestos no básicos como el pirrol.

## 4.2. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de salida en el proceso de destilación atmosférica

### 4.2.1. Gas combustible

**Tabla 12**

*Lista de moléculas orgánicas del gas combustible*

<b>N°</b>	<b>Compuestos</b>	<b>Fórmula</b>	<b>% Masa</b>
1	metano	$CH_4$	86
2	etano	$C_2H_6$	10
3	propano	$C_3H_8$	3
4	butano	$C_4H_{10}$	1
<b>Total</b>			<b>100 %</b>

La presente tabla se muestra los compuestos que forman el gas combustible, siendo el metano su mayor componente con un 86% en masa, estos compuestos son hidrocarburos parafínicos con una estructura lineal. Estos compuestos son los que forman el gas combustible porque son los más livianos y se evaporan sin necesidad de agregar calor.

### 4.2.2. Gasolina

**Tabla 13**

*Lista de moléculas orgánicas de la gasolina*

Nº	Compuestos	Fórmula	RON	MON
1	n-pentano	$C_5H_{12}$	62	66
2	n-hexano	$C_6H_{14}$	19	22
3	n-heptano	$C_7H_{16}$	0	0
4	n-octano	$C_8H_{18}$	-18	-16
5	n-decano	$C_{10}H_{22}$	-41	-38
6	n-dodecano	$C_{12}H_{26}$	-88	-90
7	n-tetradecano	$C_{14}H_{30}$	-90	-99
8	2-metilpropano	$C_4H_{10}$	122	120
9	2-metilbutano	$C_5H_{12}$	100	104
10	2-metilpentano	$C_6H_{14}$	82	78
11	3-metilpentano	$C_6H_{14}$	86	80
12	2-metilhexano	$C_7H_{16}$	40	42
13	3-metilhexano	$C_7H_{16}$	56	57
14	2,2-dimetilpentano	$C_7H_{16}$	89	93
15	2,2,3-trimetilbutano	$C_7H_{16}$	112	112
16	2,2,4-trimetilpentano	$C_8H_{18}$	100	100
17	ciclopentano	$C_5H_{10}$	141	141
18	metilciclopentano	$C_6H_{12}$	107	99
19	ciclohexano	$C_6H_{12}$	110	97
20	metilciclohexano	$C_7H_{14}$	104	84

Nº	Compuestos	Fórmula	RON	MON
21	benceno	$C_6H_6$	98	91
22	tolueno	$C_7H_8$	124	112
23	etilbenceno	$C_8H_{10}$	124	107
24	meta-xileno	$C_8H_{10}$	162	124
25	para-xileno	$C_8H_{10}$	155	126
26	orto-xileno	$C_8H_{10}$	126	102
27	3-etiltolueno	$C_9H_{12}$	162	138
28	1,3,5-trimetilbenceno	$C_9H_{12}$	170	136
29	1,2,4-trimetilbenceno	$C_9H_{12}$	148	124
30	2-penteno	$C_5H_{10}$	154	138
31	2-metilbuteno-2	$C_5H_{10}$	176	140
32	2-metilpenteno-2	$C_6H_{12}$	159	148
33	ciclopenteno	$C_5H_8$	171	126
34	1-metilciclopenteno	$C_6H_{10}$	184	146
35	1,3-ciclopentadieno	$C_5H_6$	218	149
36	diciclopentadieno	$C_{10}H_{12}$	229	167
37	metanol	$CH_3OH$	133	105
38	etanol	$C_2H_5OH$	129	102
39	2-propanol	$C_3H_8O$	118	98

*Nota.* Tomado de (Simanzhenkov & Idem, 2003)

En la siguiente tabla se presenta los compuestos que conforman la gasolina, como se puede observar está compuesto por parafinas, isoparafinas, naftenos, aromáticos y alcoholes. Estos compuestos vienen dados por el RON (research octane

number) y el MON (motor octane number). El número de octano viene dado por el volumen de octanaje en una mezcla de heptano y octano de ahí que los números RON y MON en el heptano sea cero. Para la producción de gasolina se prefieren compuestos con altos números de octanaje por lo que los compuestos que cumplen este requisito son las parafinas, las cuales tienen un valor alto de número de RON y MON cuando el número de átomos de carbono es pequeño, como por ejemplo el 2-metilpropano.

#### 4.2.3. Nafta

**Tabla 14**

*Lista de moléculas orgánicas de la nafta*

Nº	Compuestos	Fórmula	% Masa
1	2,4-dimetilpentano	$C_7H_{16}$	0,018
2	3,3-dimetilpentano	$C_7H_{16}$	0,078
3	2-metilhexano	$C_7H_{16}$	2,287
4	2,3-dimetilpentano	$C_7H_{16}$	1,14
5	1,1-dimetilciclopentano	$C_7H_{14}$	0,716
6	3-metilhexano	$C_7H_{16}$	3,216
7	cis-1,3-dimetilciclopentano	$C_7H_{14}$	1,742
8	trans-1,3-dimetilciclopentano	$C_7H_{14}$	1,65
9	trans-1,2-dimetilciclopentano	$C_7H_{14}$	3,328
10	n-heptano	$C_7H_{16}$	7,902
11	metilciclohexano	$C_7H_{14}$	17,38
12	1,1,3-trimetilciclopentano	$C_8H_{16}$	0,866
13	2,2-dimetilhexano	$C_8H_{18}$	0,105
14	etilciclopentano	$C_7H_{14}$	1,056



Nº	Compuestos	Fórmula	% Masa
15	2,2,3-trimetilpentano	$C_8H_{18}$	0,409
16	2,4-dimetilhexano	$C_8H_{18}$	0,595
17	cis-1,2,4-trimetilciclopentano	$C_8H_{16}$	0,99
18	3,3-dimetilhexano	$C_8H_{18}$	0,137
19	1,2,3-trimetilpentano	$C_8H_{18}$	1,051
20	2,3,4-trimetilpentano	$C_8H_{18}$	0,162
21	tolueno	$C_7H_8$	6,765
22	1,1,2-trimetilciclopentano	$C_8H_{16}$	0,308
23	2,3-dimetilhexano	$C_8H_{18}$	0,452
24	2-metil-3-etilpentano	$C_8H_{18}$	0,18
25	2-metilheptano	$C_8H_{18}$	2,741
26	4-metilheptano	$C_8H_{18}$	0,888
27	3,4-dimetilhexano	$C_8H_{18}$	0,123
28	cis-1,3-dimetilciclohexano	$C_8H_{16}$	2,904
29	3-metilheptano	$C_8H_{18}$	1,699
30	3-etilhexano	$C_8H_{18}$	1,664
31	1,1-dimetilciclohexano	$C_8H_{16}$	0,454
32	trans-1-etil-3-metilciclopentano	$C_8H_{16}$	0,374
33	cis-1-etil-3-metilciclopentano	$C_8H_{16}$	0,413
34	trans-1-etil-2-metilciclopentano	$C_8H_{16}$	0,733
35	1-metil-1-etilciclopentano	$C_8H_{16}$	0,107
36	tans-1,2-dimetilciclohexano	$C_8H_{16}$	1,649
37	cis-1,2,3-trimetilciclopentano	$C_8H_{16}$	0,023
38	cis-1,4-dimetilciclohexano	$C_8H_{16}$	0,914

<b>N°</b>	<b>Compuestos</b>	<b>Fórmula</b>	<b>% Masa</b>
539	n-octano	$C_8H_{18}$	5,263
40	isopropilciclopentano	$C_8H_{16}$	0,065
41	cis-2-octeno	$C_8H_{16}$	0,066
42	cis-1-etil-2-metilciclopentano	$C_8H_{16}$	0,154
43	2,2-dimetilheptano	$C_9H_{20}$	0,089
44	cis-1,2-dimetilciclohexano	$C_8H_{16}$	0,279
45	2,2,3-trimetilhexano	$C_9H_{20}$	0,106
46	2,4-dimetilheptano	$C_9H_{20}$	0,276
47	4,4-dimetilheptano	$C_9H_{20}$	0,035
48	etilciclohexano	$C_8H_{16}$	3,255
49	2-metil-4-etil-hexano	$C_9H_{20}$	0,038
50	2,6-dimetilheptano	$C_9H_{20}$	0,719
51	1,1,3-trimetilciclohexano	$C_9H_{18}$	0,918
52	1,1,4-trimetilciclohexano	$C_9H_{18}$	0,136
53	2,5-dimetilheptano	$C_9H_{20}$	0,394
54	3,5-dimetilheptano	$C_9H_{20}$	0,205
55	etilbenceno	$C_8H_{10}$	1,265
56	trans-1,2,4-trimetilciclohexano	$C_9H_{18}$	0,472
57	m-xileno	$C_8H_{10}$	3,039
58	p-xileno	$C_8H_{10}$	0,927
59	2,3-dimetilheptano	$C_9H_{20}$	0,86
60	3,3-dimetilheptano	$C_9H_{20}$	0,09
61	4-etilheptano	$C_9H_{20}$	0,105
62	4-metiloctano	$C_9H_{20}$	0,433

<b>N°</b>	<b>Compuestos</b>	<b>Fórmula</b>	<b>% Masa</b>
63	2-metiloctano	$C_9H_{20}$	0,57
64	3-etilheptano	$C_9H_{20}$	0,157
65	3-metiloctano	$C_9H_{20}$	0,571
66	o-xileno	$C_8H_{10}$	1,26
67	n-nonano	$C_9H_{20}$	2,226
68	isopropilbenceno	$C_9H_{12}$	0,547
69	isopropilciclohexano	$C_9H_{18}$	2,74
70	2,2-dimetiloctano	$C_{10}H_{22}$	0,549
71	n-propilciclohexano	$C_9H_{18}$	0,519
72	n-butilciclopentano	$C_9H_{18}$	0,096
73	3,3-dimetiloctano	$C_{10}H_{22}$	0,25
74	n-propilbenceno	$C_9H_{12}$	0,278
75	2,6-dimetiloctano	$C_{10}H_{22}$	0,145
76	1-metil-3-etilbenceno	$C_9H_{12}$	0,383
77	1-metil-4-etilbenceno	$C_9H_{12}$	0,15
78	1,3,5-trimetilbenceno	$C_9H_{12}$	0,166
79	4-metilnonano	$C_{10}H_{22}$	0,025
80	1-metil-2-etilbenceno	$C_9H_{12}$	0,225
81	3-etiloctano	$C_{10}H_{22}$	0,094
82	3-metilnonano	$C_{10}H_{22}$	0,073
83	1,2,4-trimetilbenceno	$C_9H_{12}$	0,281
84	isobutilciclohexano	$C_{10}H_{20}$	0,745
85	isobutilbenceno	$C_{10}H_{14}$	0,037
86	secbutilbenceno	$C_{10}H_{14}$	0,055

<b>N°</b>	<b>Compuestos</b>	<b>Fórmula</b>	<b>% Masa</b>
87	n-decano	$C_{10}H_{22}$	0,947
88	1,2,3-trimetilbenceno	$C_9H_{12}$	0,079
89	1-metil-3-isopropilbenceno	$C_{10}H_{14}$	0,087
90	1-metil-4-isopropilbenceno	$C_{10}H_{14}$	0,132
91	n-butilciclohexano	$C_{10}H_{20}$	0,036
92	1,3-dietilbenceno	$C_{10}H_{14}$	0,012
93	1-metil-3-n-propilbenceno	$C_{10}H_{14}$	0,026
94	1-metil-4-n-propilbenceno	$C_{10}H_{14}$	0,009
95	n-butilbenceno	$C_{10}H_{14}$	0,012
96	1,3-dimetil-5-etilbenceno	$C_{10}H_{14}$	0,009
97	1-metil-2-n-propilbenceno	$C_{10}H_{14}$	0,015
98	1,4-dimetil-2-etilbenceno	$C_{10}H_{14}$	0,015
99	1,2-dimetil-4-etilbenceno	$C_{10}H_{14}$	0,013
100	n-undecano	$C_{11}H_{24}$	0,058
<b>Total</b>			<b>100 %</b>

*Nota.* Tomado de (Antos et al., 2004)

La presente tabla muestra los compuestos que componen la nafta, formada por hidrocarburos parafínicos, aromáticos y naftenos. El componente mayoritario en la composición de la nafta es el metilciclohexano con un porcentaje en más de 17,38. Hay otros componentes que también sobresalen en la composición de la nafta a diferencia de otros compuestos que contribuyen a un pequeño valor en su composición, estos componentes son: 2-metilhexano, 3-metilhexano, n-heptano, tolueno, n-octano, m-xileno entre otros.

#### 4.2.4. Queroseno

**Tabla 15**

*Lista de moléculas orgánicas del queroseno*

Nº	Compuestos	Fórmula	% Peso
1	n-decano	$C_{10}H_{22}$	19,6
2	n-dodecano	$C_{12}H_{26}$	27,2
3	n-hexadecano	$C_{16}H_{34}$	31,7
4	n-octadecano	$C_{18}H_{38}$	1,35
5	tolueno	$C_7H_8$	0,15
6	etilbenzeno	$C_8H_{10}$	0,71
7	naftaleno	$C_{10}H_8$	7,43
8	acenafteno	$C_{12}H_{10}$	9,87
9	fluoreno	$C_{13}H_{10}$	0,72
10	n-hexano	$C_6H_{14}$	
11	isohexano	$C_6H_{14}$	
12	3-metilpentano	$C_6H_{14}$	
13	2,3-dimetilbutano	$C_6H_{14}$	0,25
14	2,2-dimetilbutano	$C_6H_{14}$	
15	n-heptano	$C_7H_{16}$	
16	2 2-metilhexano	$C_7H_{16}$	
17	3 2,2-dimetilpentano	$C_7H_{16}$	
18	4 2,2,3-trimetilbutano	$C_7H_{16}$	
19	5 2,3-dimetilpentano	$C_7H_{16}$	
20	6 2,4-dimetilpentano	$C_7H_{16}$	0,65

Nº	Compuestos	Fórmula	
21	7 3-etilpentano	$C_7H_{16}$	
22	8 3-metilhexano	$C_7H_{16}$	
23	9 3,3-dimetilpentano	$C_7H_{16}$	
24	metilciclohexano	$C_7H_{16}$	
25	propilbenzeno	$C_7H_{16}$	
26	n-octano,	$C_8H_{18}$	
27	2-metilheptano	$C_8H_{18}$	
28	3-metilheptano	$C_8H_{18}$	
29	4-metilheptano	$C_8H_{18}$	
30	2,2-dimetilhexano	$C_8H_{18}$	
31	2,3-dimetilhexano	$C_8H_{18}$	
32	2,4-dimetilhexano	$C_8H_{18}$	
33	2,5-dimetilhexano	$C_8H_{18}$	
34	3,3-dimetilhexano	$C_8H_{18}$	
35	3,4-dimetilhexano	$C_8H_{18}$	
36	3 - etilhexano	$C_8H_{18}$	
37	2,2,3-trimetilpentano	$C_8H_{18}$	
38	2,2,4-trimetilpentano	$C_8H_{18}$	
39	2,3,3-trimetilpentano	$C_8H_{18}$	0,6
40	2,3,4-trimetilpentano	$C_8H_{18}$	
41	3-etil-2-metilpentano	$C_8H_{18}$	
42	3-etil-3-metilpentano	$C_8H_{18}$	
43	2,2,3,3-tetrametilbutano	$C_8H_{18}$	
<b>Total</b>			<b>100%</b>

Nota. Tomado de (Bacosa et al., 2010); (Czylkowski et al., 2018).

La tabla 15 presenta los compuestos que forman el queroseno, siendo estos hidrocarburos aromáticos, cicloalcanos, parafínicos y sus isómeros. Los compuestos que conforma mayoritariamente al queroseno es el n-decano, n-dodecano y el n-hexadecano con un porcentaje en masa superior a los demás compuestos, mientras que el tolueno es el compuesto con menor porcentaje en peso que forma el queroseno. Hay varios compuestos como el n-hexano, n-heptano y n-octano que forman isómeros, pero con un porcentaje pequeño en la formación del queroseno.

#### 4.2.5. Diésel

**Tabla 16**

*Lista de moléculas orgánicas del diésel*

Nº	Compuestos	Fórmula	Cetaje
1	n-pentano	$C_5H_{12}$	30
2	n-hexano	$C_6H_{14}$	44
3	n-heptano	$C_7H_{16}$	55
4	n-octano	$C_8H_{18}$	64
5	n-nonano	$C_9H_{20}$	72
6	n-decano	$C_{10}H_{22}$	76
7	n-undecano	$C_{11}H_{24}$	81
8	n-tridecano	$C_{13}H_{28}$	90
9	n-tetradecano	$C_{14}H_{30}$	95
10	n-pentadecano	$C_{15}H_{32}$	96

<b>Nº</b>	<b>Compuestos</b>	<b>Fórmula</b>	<b>Cetaje</b>
11	n-hexadecano	$C_{16}H_{34}$	100
12	n-heptadecano	$C_{17}H_{36}$	105
13	n-octadecano	$C_{18}H_{38}$	106
14	n-nonadecano	$C_{19}H_{40}$	110
15	2,2-dimetilbutano	$C_6H_{14}$	24
16	3-metilpentano	$C_6H_{14}$	30
17	2,3-dimetilpentano	$C_7H_{16}$	21
18	2,2,4-trimetilpentano	$C_8H_{18}$	15
19	2,2,5-trimetilhexano	$C_9H_{20}$	24
20	2,2-dimetiloctano	$C_{10}H_{22}$	59
21	2,2,4,6,6-pentametilheptano	$C_{12}H_{26}$	9
22	4,5-dietiloctano	$C_{12}H_{26}$	20
23	3-etildecano	$C_{12}H_{26}$	47
24	2,5-dimetilundecano	$C_{13}H_{28}$	58
25	4-propildecano	$C_{13}H_{28}$	39
26	5-butilnonano	$C_{13}H_{28}$	53
27	2,7-dimetil-4,5-dietiloctano	$C_{14}H_{30}$	39
28	2,2,4,4,6,8,8-heptametilnonano	$C_{16}H_{34}$	15
29	7,8-dimetiltetradecano	$C_{16}H_{34}$	40
30	9-metilheptadecano	$C_{18}H_{38}$	66
31	7,8-dietiltetradecano	$C_{18}H_{38}$	67
32	9,10-dimetiloctadecano	$C_{20}H_{42}$	59
33	9,10-dipropiloctadecano	$C_{24}H_{50}$	47



Nº	Compuestos	Fórmula	Cetaje
34	n-dodecano	$C_{12}H_{26}$	85
35	n-eicosano	$C_{20}H_{42}$	110
36	2,4-dimetilpentano	$C_7H_{16}$	29
37	2,3,4,5,6-pentametilheptano	$C_{12}H_{26}$	9
38	5-butildodecano	$C_{16}H_{34}$	45
39	7-butiltridecano	$C_{17}H_{36}$	70
40	8-propilpentadecano	$C_{18}H_{38}$	48
41	5,6-dibutildecano	$C_{18}H_{38}$	30
42	ciclohexano	$C_6H_{12}$	15
43	ciclooctano	$C_8H_{16}$	22
44	etilciclohexano	$C_8H_{16}$	45
45	propilciclohexano	$C_9H_{18}$	52
46	butilciclohexano	$C_{10}H_{20}$	47
47	3-ciclohexilhexano	$C_{12}H_{24}$	36
48	1-metil-3-dodecilciclohexano	$C_{19}H_{38}$	70
49	2-ciclohexiltetradecano	$C_{20}H_{40}$	57
50	1,2,4-trimetil-5-hexadecilciclohexano	$C_{25}H_{50}$	42
51	5-ciclohexileicosano	$C_{26}H_{52}$	66
52	biciclohexil	$C_{12}H_{22}$	51
53	2-metil-3-ciclohexilnonano	$C_{16}H_{32}$	63
54	metilciclohexano	$C_7H_{14}$	21
55	1,3,5-trimetilciclohexano	$C_9H_{18}$	31
	metil-2-		

Nº	Compuestos	Fórmula	Cetaje
56	ciclohexilpentadecano	$C_{22}H_{44}$	45
57	1-metil-3-propilciclohexano	$C_{10}H_{20}$	38
58	1-metil-3-heptilciclohexano	$C_{14}H_{28}$	52
59	1-metil-3-nonilciclohexano	$C_{16}H_{32}$	55
60	1-metil-3-undecilciclohexano	$C_{18}H_{36}$	64
61	etilbenceno	$C_8H_{10}$	8
62	1,3-dimetilbenceno	$C_8H_{10}$	1
63	1,2-dimetilbenceno	$C_8H_{10}$	8
64	1,4-dimetilbenceno	$C_8H_{10}$	13
65	isopropilbenceno	$C_9H_{12}$	15
66	sec-butilbenceno	$C_{10}H_{14}$	6
67	1-metil-4-isopropilbenceno	$C_{10}H_{14}$	2
68	1,2,3,4-tetrametilbenceno	$C_{10}H_{14}$	17
69	hexilbenceno	$C_{12}H_{18}$	26
70	diisopropilbenceno	$C_{12}H_{18}$	8
71	2-feniloctano	$C_{14}H_{22}$	33
72	nonilbenceno	$C_{15}H_{24}$	50
73	2-fenilundecano	$C_{17}H_{28}$	51
74	2-fenil-undec-2-eno	$C_{17}H_{26}$	23
75	7-feniltridecano	$C_{19}H_{32}$	41
76	tetradecilbenceno	$C_{20}H_{34}$	72
77	2-feniltetradecano	$C_{20}H_{34}$	49
78	2-metil-2-fenilpentadecano	$C_{22}H_{38}$	39
79	5-fenileicosano	$C_{26}H_{46}$	39

<b>Nº</b>	<b>Compuestos</b>	<b>Fórmula</b>	<b>Cetaje</b>
80	tetralina	$C_{10}H_{12}$	13
81	butiltetralina	$C_{14}H_{20}$	18
82	sec-butiltetralina	$C_{14}H_{20}$	7
83	octiltetralina	$C_{18}H_{28}$	18
84	1,4-dioctiltetralina	$C_{28}H_{44}$	26
85	bifenilo	$C_{12}H_{10}$	21
86	2,6-dimetilnaftaleno	$C_{12}H_{12}$	13
87	difenilmetano	$C_{13}H_{12}$	11
88	2-terc-butyl-naftaleno	$C_{14}H_{16}$	3
89	2-metil-2-naftilhexano	$C_{17}H_{22}$	10
90	2-octilnaftaleno	$C_{18}H_{24}$	18
91	4-metil-4-naftilheptano	$C_{18}H_{24}$	9
92	dimetil-3-naftiloctano	$C_{20}H_{28}$	18
93	hex-1-eno	$C_6H_{12}$	27
94	hept-1-eno	$C_7H_{14}$	22
95	vinilciclohexano	$C_8H_{14}$	38
96	oct-1-eno	$C_8H_{16}$	41
97	2,4,4-trimetilpent-1-eno	$C_8H_{16}$	10
98	no-1-eno	$C_9H_{18}$	51
99	2,6-dimetilhept-1-eno	$C_9H_{18}$	51
100	dec-1-eno	$C_{10}H_{20}$	59
101	dodec-1-eno	$C_{12}H_{24}$	71
102	hexadec-1-eno	$C_{16}H_{32}$	86
103	5-butildodec-5-eno	$C_{16}H_{32}$	45

Nº	Compuestos	Fórmula	Cetaje
104	2,2,6,6,8,8-hexametil-4-metilenonano	$C_{16}H_{34}$	4,5
105	butiltridec-1-eno	$C_{17}H_{34}$	36
106	3,12-dietiltetradec-3,11-dieno	$C_{18}H_{34}$	26
107	9-metilheptadec-9-eno	$C_{18}H_{36}$	66
108	metilhexadec-8-eno	$C_{17}H_{34}$	43
109	octadec-1-eno	$C_{18}H_{36}$	90
110	dimetildoeicos-11-eno	$C_{24}H_{48}$	56

*Nota.* Tomado de (Creton et al., 2010).

La presente tabla 16 muestra los componentes que forman el diésel. Estos compuestos son hidrocarburos parafínicos, isoparafínicos, olefínicos, aromáticos y nafténicos. La mayoría de estos compuestos son moléculas con varios átomos de carbono y vienen dados por el cetaje. Lo que se observa es que en los compuestos parafínicos según van aumentando los átomos de carbono, el cetaje también aumenta.

Los compuestos isoparafínicos tienen el valor de cetaje dependiendo del número de sustituyentes que tiene la cadena principal, es decir si el compuesto tiene varios sustituyentes el valor de número de cetaje disminuye, como es el caso de 2,2,4,6,6-pentametilheptano y 2,2,4,4,6,8,8-heptametilnonano con un valor de cetaje de 9 y 15 respectivamente. Por otro lado para los compuestos aromáticos el número de cetaje es muy bajo en general. Para los compuestos olefínicos con cadenas lineales siguen la regla de los compuestos parafínicos, pero cuando empiezan a tener sustituyentes en la cadena principal ocurre lo mismo que los compuestos isoparafínicos.

#### 4.2.6 Residuo atmosférico

**Tabla 17**

*Lista de moléculas orgánicas más representativas del residuo atmosférico*

<b>Nº</b>	<b>Compuestos</b>	<b>Fórmula</b>
1	o-dicetilbenceno	$C_{38}H_{70}$
2	n-hexadecilbenceno	$C_{22}H_{38}$
3	3,4-bencilpireno	$C_{20}H_{12}$
4	criseno	$C_{17}H_{14}O_7$

La presente tabla muestra los componentes que se encuentran en el residuo atmosférico, los cuales presentan un alto peso molecular debido al número de átomos de carbono que componen el compuesto, lo que hace que estos compuestos no sean muy volátiles con respecto a los demás compuestos que forman las otras corrientes de salida. Como se puede observar son compuestos policíclicos.


### 4.3 Procesamiento de las moléculas químicas de origen orgánico, desde su estructura química 2D, nomenclatura, código SMILES y reporte de propiedades básicas como fórmula, peso molecular y análisis elemental.

#### 4.3.1 Crudo de petróleo

Mediante el procesamiento del nombre IUPAC reportado en la tabla 6 de la bibliografía y con ayuda del software ChemDraw Professional, se obtuvo la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES de la molécula de iso-butano presente en los hidrocarburos parafínicos del crudo de petróleo con un °API de 119,89.

**Tabla 18**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de iso-butano*


	
Nomenclatura IUPAC	iso-butano
Fórmula química	$C_4H_{10}$
Peso molecular	58,1240
Análisis elemental	C, 82.66; H, 17.34
Código SMILES	CC(C)C

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

Mediante el procesamiento del nombre IUPAC reportado en la tabla 7 de la bibliografía y con ayuda del software ChemDraw Professional, se obtuvo la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES de la molécula de ciclopentano presente en los hidrocarburos nafténicos del crudo de petróleo con un °API de 54,61.

**Tabla 19**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de ciclopentano*

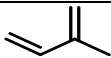
	
Nomenclatura IUPAC	ciclopentano
Fórmula química	$C_5H_{10}$
Peso molecular	70,1350
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37
Código SMILES	C1CCCC1

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

Mediante el procesamiento del nombre IUPAC reportado en la tabla 8 de la bibliografía y con ayuda del software ChemDraw Professional, se obtuvo la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES de la molécula de isopreno presente en los hidrocarburos aromáticos del crudo de petróleo con un °API de 53,65.

**Tabla 20**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de isopreno*

	
Nomenclatura IUPAC	isopreno
Fórmula química	$C_5H_8$
Peso molecular	68,1190
Análisis elemental	C, 88.16; H, 11.84
Código SMILES	C=CC(C)=C

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

Mediante el procesamiento del nombre IUPAC reportado en la tabla 9 de la bibliografía y con ayuda del software ChemDraw Professional, se obtuvo la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES de la molécula de metanotiol presente en el crudo de petróleo con contenido de azufre con un porcentaje en masa de 3,56.

**Tabla 21**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de metanotiol*

—SH	
Nomenclatura IUPAC	metanotiol
Fórmula química	$CH_4S$
Peso molecular	48,1030
Análisis elemental	C, 24.97; H, 8.38; S, 66.65
Código SMILES	CS

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

Mediante el procesamiento del nombre IUPAC reportado en la tabla 10 de la bibliografía y con ayuda del software ChemDraw Professional, se obtuvo la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES de la molécula de metanol presente en el crudo de petróleo con contenido de oxígeno con un porcentaje en masa de 0,0264.




**Tabla 22***Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de metanol*

—OH	
Nomenclatura IUPAC	metanol
Fórmula química	$CH_4O$
Peso molecular	32,0420
Análisis elemental	C, 37.49; H, 12.58; O, 49.93
Código SMILES	CO

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

Mediante el procesamiento del nombre IUPAC reportado en la tabla 11 de la bibliografía y con ayuda del software ChemDraw Professional, se obtuvo la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES de la molécula de piridina presente en el crudo de petróleo con contenido de nitrógeno con un porcentaje en masa de 0,0484.

**Tabla 23***Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de piridina*

	
Nomenclatura IUPAC	piridina
Fórmula química	$C_5H_5N$
Peso molecular	79,1020
Análisis elemental	C, 75.92; H, 6.37; N, 17.71
Código SMILES	C1=NC=CC=C1

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

De acuerdo con que la corriente de entrada de crudo de petróleo cuenta con 121 moléculas orgánicas reportadas en seis diferentes tablas, se discutió la molécula más representativa de cada una de las tablas de dicha entrada presentadas en la bibliografía, caso por el cual se muestra la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES del resto de las moléculas orgánicas presentes en el crudo de petróleo en el Apéndice 1.

#### 4.3.2. Gas combustible

Mediante el procesamiento del nombre IUPAC reportado en la tabla 12 de la bibliografía y con ayuda del software ChemDraw Professional, se obtuvo la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES de la molécula de metano, etano, propano y butano, presentes en la corriente de salida del gas combustible obtenida del proceso de destilación atmosférica del crudo de petróleo, las cuales se presentan en forma de gas y son los compuestos más livianos.

**Tabla 24**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de metano*

$CH_4$	
Nomenclatura IUPAC	metano
Fórmula química	$CH_4$
Peso molecular	16,0430
Análisis elemental	C, 74.87; H, 25.13
Código SMILES	C

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

**Tabla 25***Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de etano*


---

—

---

Nomenclatura IUPAC	etano
Fórmula química	$C_2H_6$
Peso molecular	30,0700
Análisis elemental	C, 79.89; H, 20.11
Código SMILES	CC

---

*Nota.* Tomado de ChemDraw.**Tabla 26***Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de propano*


---

∧


---

Nomenclatura IUPAC	propano
Fórmula química	$C_3H_8$
Peso molecular	44,0970
Análisis elemental	C, 81.71; H, 18.29
Código SMILES	CCC

---

*Nota.* Tomado de ChemDraw.


**Tabla 27***Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de butano*

	
Nomenclatura IUPAC	butano
Fórmula química	$C_4H_{10}$
Peso molecular	58,1240
Análisis elemental	C, 82.66; H, 17.34
Código SMILES	CCCC

*Nota.* Tomado de ChemDraw.**5.3.3 Gasolina**

Mediante el procesamiento del nombre IUPAC reportado en la tabla 13 de la bibliografía y con ayuda del software ChemDraw Professional, se obtuvo la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES de la molécula de n-pentano, ciclohexano y benceno, cuyos compuestos son los más representativos que se presentan en la corriente de salida de la gasolina, los cuales muestran un RON y MON alto, mismo que es un indicativo del grado de octanaje en la gasolina.

**Tabla 28***Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de n-pentano*


	
---	--

Nomenclatura IUPAC	n-pentano
Fórmula química	$C_5H_{12}$
Peso molecular	72,1510
Análisis elemental	C, 83.24; H, 16.76
Código SMILES	CCCCC

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

### Tabla 29


*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de ciclohexano*

	
Nomenclatura IUPAC	ciclohexano
Fórmula química	$C_6H_{12}$
Peso molecular	84,1620
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37
Código SMILES	C1CCCCC1

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

**Tabla 30**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de benceno*

	
Nomenclatura IUPAC	benceno
Fórmula química	$C_6H_6$
Peso molecular	78,1140
Análisis elemental	C, 92.26; H, 7.74
Código SMILES	<chem>C1=CC=CC=C1</chem>

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

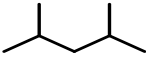
De acuerdo con que la corriente de salida de la gasolina cuenta con 39 moléculas orgánicas reportadas en la tabla 13 de la bibliografía, se discutió las moléculas más representativas, caso por el cual se muestra la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES del resto de las moléculas orgánicas presentes en la gasolina en el Apéndice 1.

#### **4.3.4. Nafta**

Mediante el procesamiento del nombre IUPAC reportado en la tabla 14 de la bibliografía y con ayuda del software ChemDraw Professional, se obtuvo la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES de la molécula de ,4-dimetilpentano, isopropilciclopentano y 1, 3,5-trimetilbenceno, cuyos compuestos son los más representativos que se presentan en la corriente de salida de la nafta.

**Tabla 31**

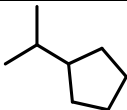
*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de 2,4-dimetilpentano*

	
Nomenclatura IUPAC	2,4-dimetilpentano
Fórmula química	$C_7H_{16}$
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10
Código SMILES	CC(C)CC(C)C

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

**Tabla 32**

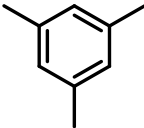
*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de isopropilciclopentano*

	
Nomenclatura IUPAC	isopropilciclopentano
Fórmula química	$C_8H_{16}$
Peso molecular	112,2160
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37
Código SMILES	CC(C1CCCC1)C

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

**Tabla 33**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de 1, 3,5-trimetilbenceno*

	
Nomenclatura IUPAC	1,3,5-trimetilbenceno
Fórmula química	$C_9H_{12}$
Peso molecular	120,1950
Análisis elemental	C, 89.94; H, 10.06
Código SMILES	<chem>CC1=CC(C)=CC(C)=C1</chem>

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

De acuerdo con que la corriente de salida de la nafta cuenta con 100 moléculas orgánicas reportadas en la tabla 14 de la bibliografía, se discutió las moléculas más representativas, caso por el cual se muestra la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES del resto de las moléculas orgánicas presentes en la nafta en el Apéndice 1.


#### **4.3.5. Queroseno**

Mediante el procesamiento del nombre IUPAC reportado en la tabla 15 de la bibliografía y con ayuda del software ChemDraw Professional, se obtuvo la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES de la molécula de, n-octadecano, tolueno y fluoreno, cuyos compuestos son los más representativos que se presentan en la corriente de salida del queroseno.



**Tabla 34***Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de n-octadecano*


---



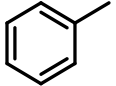
---

Nomenclatura IUPAC	n-octadecano
Fórmula química	$C_{18}H_{38}$
Peso molecular	254,5020
Análisis elemental	C, 84.95; H, 15.05
Código SMILES	CCCCCCCCCCCCCCCCCC

---

*Nota.* Tomado de ChemDraw.**Tabla 35***Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de tolueno*


---



---

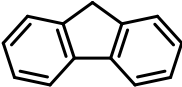
Nomenclatura IUPAC	tolueno
Fórmula química	$C_7H_8$
Peso molecular	92,1410
Análisis elemental	C, 91.25; H, 8.75
Código SMILES	CC1=CC=CC=C1

---

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

**Tabla 36**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de fluoreno*

	
Nomenclatura IUPAC	fluoreno
Fórmula química	$C_{13}H_{10}$
Peso molecular	166,2230
Análisis elemental	C, 93.94; H, 6.06
Código SMILES	<chem>C1(CC2=C3C=CC=C2)=C3C=CC=C1</chem>

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

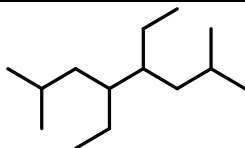
De acuerdo con que la corriente de salida del queroseno cuenta con 43 moléculas orgánicas reportadas en la tabla 15 de la bibliografía, se discutió las moléculas más representativas, caso por el cual se muestra la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES del resto de las moléculas orgánicas presentes en el queroseno en el Apéndice 1.

#### **4.3.6. Diésel**

Mediante el procesamiento del nombre IUPAC reportado en la tabla 16 de la bibliografía y con ayuda del software ChemDraw Professional, se obtuvo la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES de la molécula de, 2,7-dimetil-4,5-dietiloctano, 2-feniltetradecano y dimetil-3-naftiloctano, cuyos compuestos son los más representativos que se presentan en la corriente de salida del diésel.

**Tabla 37**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de 2,7-dimetil-4,5-dietiloctano*

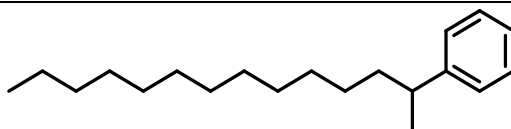


Nomenclatura IUPAC	2,7-dimetil-4,5-dietiloctano
Fórmula química	$C_{14}H_{30}$
Peso molecular	198,3940
Análisis elemental	C, 84.76; H, 15.24
Código SMILES	<chem>CC(C)CC(CC)C(CC)CC(C)C</chem>

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

**Tabla 38**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de 2-feniltetradecano*

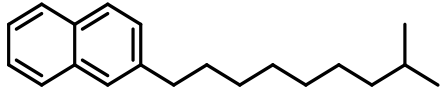


Nomenclatura IUPAC	2-feniltetradecano
Fórmula química	$C_{20}H_{34}$
Peso molecular	274,4920
Análisis elemental	C, 87.51; H, 12.49
Código SMILES	<chem>CC(C1=CC=CC=C1)CCCCCCCCCCCC</chem>

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

**Tabla 39**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de dimetil-3-naftiloctano*

	
Nomenclatura IUPAC	dimetil-3-naftiloctano
Fórmula química	$C_{20}H_{28}$
Peso molecular	268,4440
Análisis elemental	C, 89.49; H, 10.51
Código SMILES	<chem>CC(C)CCCCCCC1=CC=CC=C2C=CC=C12</chem>

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

De acuerdo con que la corriente de salida del diésel cuenta con 110 moléculas orgánicas reportadas en la tabla 16 de la bibliografía, se discutió las moléculas más representativas, caso por el cual se muestra la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES del resto de las moléculas orgánicas presentes en el diésel en el Apéndice 1.

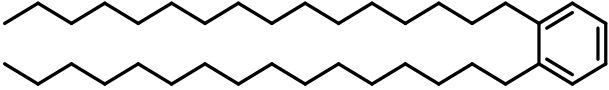
### **6.3.7. Residuo atmosférico**

Mediante el procesamiento del nombre IUPAC reportado en la tabla 17 de la bibliografía y con ayuda del software ChemDraw Professional, se obtuvo la estructura química 2D, las propiedades básicas y el código SMILES de la molécula de, o-dicetilbenceno, n-hexadecilbenceno, 3,4-bencilpireno y criseno, cuyos compuestos son los más representativos que se presentan en la corriente de salida del residuo atmosférico.

**Tabla 40**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de o-dicetilbenceno*

---



---

Nomenclatura IUPAC	o-dicetilbenceno
Fórmula química	$C_{38}H_{70}$
Peso molecular	526,9780
Análisis elemental	C, 86.61; H, 13.39
Código SMILES	CCCCCCCCCCCCCCCCC1=CC=CC=C1CCCC CCCCCCCCCCCCCCC

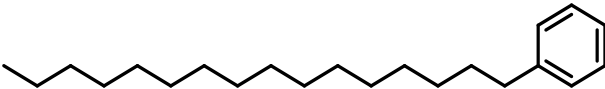
---

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

**Tabla 41**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de n-hexadecilbenceno*

---



---

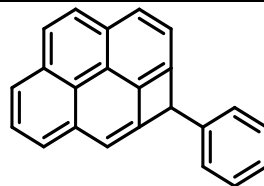
Nomenclatura IUPAC	n-hexadecilbenceno
Fórmula química	$C_{22}H_{38}$
Peso molecular	302,5460
Análisis elemental	C, 87.34; H, 12.66
Código SMILES	CCCCCCCCCCCCCCCCC1=CC=CC=C1

---

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

**Tabla 42**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de 3,4-bencilpireno*

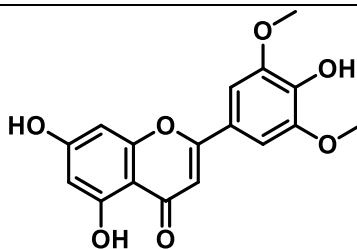


Nomenclatura IUPAC	3,4-bencilpireno
Fórmula química	$C_{20}H_{12}$
Peso molecular	290,3650
Análisis elemental	C, 95.14; H, 4.86
Código SMILES	<chem>C1(C2C3=CC=CC=C3)=C4C2=CC5=CC=CC6=CC=C(C4=C56)C=C1</chem>

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

**Tabla 43**

*Propiedades básicas y estructura 2D de la molécula de criseno*



Nomenclatura IUPAC	criseno
Fórmula química	$C_{17}H_{14}O_7$
Peso molecular	330,2920

Análisis elemental	C, 61.82; H, 4.27; O, 33.91
Código SMILES	O=C1C=C(C2=CC(OC)=C(O)C(OC)=C2)OC3 =C1C(O)=CC(O)=C3

*Nota.* Tomado de ChemDraw.

#### 4.4. Cálculo de las propiedades fisicoquímicas básicas de las moléculas de origen orgánico, mediante la plataforma gratuita del Instituto Suizo de Bioinformática SwissADME

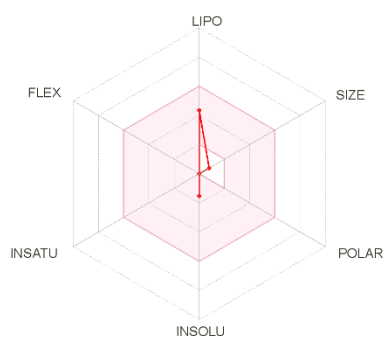
##### 4.4.1. Crudo de petróleo

En la corriente de entrada de crudo de petróleo se muestra de la figura 24 a la figura 29 el espacio fisicoquímico de las respectivas moléculas en la cual se representa el radar de biodisponibilidad de las siguientes propiedades dentro de un rango óptimo de prioridad: Lipofilia (LIPO):  $[-0,7 < XLOGP3 < +5,0]$ , Peso molecular (SIZE):  $[150\text{g/mol} < MV < 500\text{g/mol}]$ , Polaridad (POLAR):  $[20\text{Å}^2 < TPSA < 130\text{Å}^2]$ , Insolubilidad (INSOLU):  $[0 < \text{Log S (ESOL)} < 6]$ , Insaturación (INSATU):  $[0,25 < \text{Fracción Csp3} < 1]$ , Flexibilidad (FLEX):  $[0 < \text{Número enlaces rotativos} < 9]$ .

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó las tablas de resultados, tomando en cuenta que se reportan los números de aceptores y donadores de átomos de hidrogeno, que permiten determinar si se podrán formar interacciones del tipo puente de hidrogeno, con respecto a la lipofilia se puede apreciar que los valores están dentro del rango óptimo de -0,7 a 5, así como los valores promedios que las moléculas presentan respecto a la partición de n-octano/agua (Log Po/w), también se da a conocer la solubilidad que tienen en el agua la cual se ve influenciada directamente por la cantidad de heteroátomos presentes, llegando a la conclusión que las moléculas presentes en el crudo de petróleo son muy solubles en agua. Los respectivos resultados se muestran de la tabla 44 a la tabla 55.

**Figura 24**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de iso-butano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 44**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de iso-butano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_4H_{10}$
Peso molecular	58,12 g/mol
Número de átomos pesados	4
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación $sp^3$	1,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	21,34
TPSA	0,00 $\text{Å}^2$

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.



**Tabla 45**

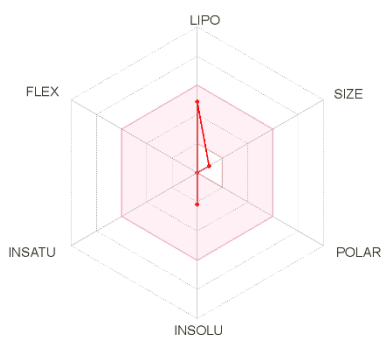
*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de iso-butano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	1,91	Log S (ESOL)	-1,52
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	2,09	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	1,66	Log S (Ali)	-1,72
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	2,73	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	0,72	Log S (SILICOS-IT)	-1,28
Consenso Log $P_{o/w}$	1,82	Solubilidad	Soluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Figura 25**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de ciclopentano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 46***Propiedades fisicoquímicas de la molécula de ciclopentano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_5H_{10}$
Peso molecular	70,13g/mol
Número de átomos pesados	5
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	1,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	24,04
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

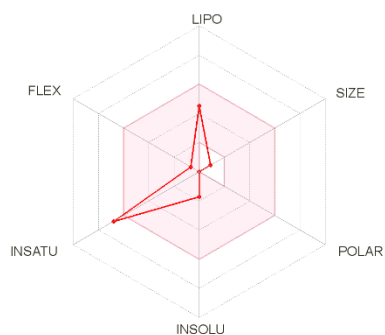
*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 47***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de ciclopentano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	1,94	Log S (ESOL)	-2,16
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	3,00	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	1,95	Log S (Ali)	-2,66
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	2,75	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	2,40	Log S (SILICOS-IT)	-1,12
Consenso Log $P_{o/w}$	2,41	Solubilidad	Soluble

**Figura 26**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de isopreno*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 48**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de isopreno*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_5H_8$
Peso molecular	68,12 g/mol
Número de átomos pesados	5
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación $sp^3$	0,20
Número de enlaces rotativos	1
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	25,20
TPSA	0,00 $\text{Å}^2$

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 49**

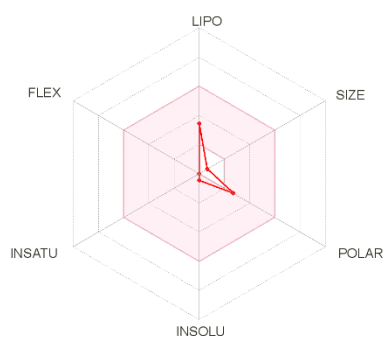
*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de isopreno*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	1,86	Log S (ESOL)	-1,72
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	2,42	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	1,75	Log S (Ali)	-2,06
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	1,97	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	1,17	Log S (SILICOS-IT)	-1,01
Consenso Log $P_{o/w}$	1,83	Solubilidad	Soluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Figura 27**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de metanotiol*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 50***Propiedades fisicoquímicas de la molécula de metanotiol*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$CH_{10}S$
Peso molecular	48,11 g/mol
Número de átomos pesados	2
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	1,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	14,85
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

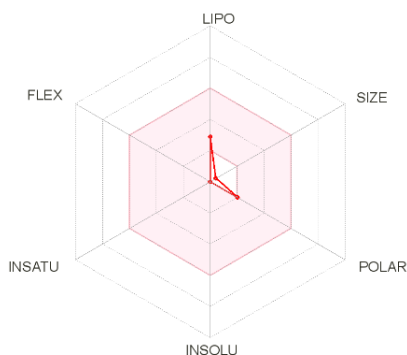
*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME

**Tabla 51***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de metanotiol*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	1,13	Log S (ESOL)	-0,46
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	0,51	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	0,55	Log S (Ali)	-0,90
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	0,20	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	0,27	Log S (SILICOS-IT)	-0,16
Consenso Log $P_{o/w}$	0,53	Solubilidad	Soluble

**Figura 28**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de metanol*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 52**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de metanol*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$CH_4O$
Peso molecular	32,04 g/mol
Número de átomos pesados	2
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	1,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	1
Número de donantes de enlaces hidrógeno	1
Refractividad molar	8,08
TPSA	20,23 Å <sup>2</sup>

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME

**Tabla 53**

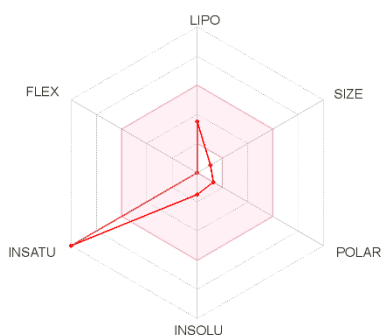
*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de metanol*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	0,81	Log S (ESOL)	0,25
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	-0,46	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	-0,39	Log S (Ali)	0,50
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	-0,87	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	-0,49	Log S (SILICOS-IT)	0,60
Consenso Log $P_{o/w}$	-0,28	Solubilidad	Soluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME

**Figura 29**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de piridina*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 54***Propiedades fisicoquímicas de la molécula de piridina*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_5H_5N$
Peso molecular	79,10 g/mol
Número de átomos pesados	6
Número de átomos aromáticos pesados	6
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	0,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	1
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	24,24
TPSA	12,89 Å <sup>2</sup>

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 55***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de piridina*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	1,32	Log S (ESOL)	-1,48
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	0,65	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	1,08	Log S (Ali)	-0,50
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	0,41	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	1,63	Log S (SILICOS-IT)	-1,90
Consenso Log $P_{o/w}$	1,02	Solubilidad	Soluble



De acuerdo con que la corriente de entrada de crudo de petróleo cuenta con 121 moléculas orgánicas reportadas en seis diferentes tablas, se discutió la molécula más representativa de cada una de las tablas de dicha entrada presentadas en la bibliografía, caso por el cual se muestra la figura del espacio fisicoquímico y las tablas de las propiedades fisicoquímicas, lipofilicidad y solubilidad en el agua del resto de las moléculas orgánicas presentes en el crudo de petróleo en el Apéndice 2.

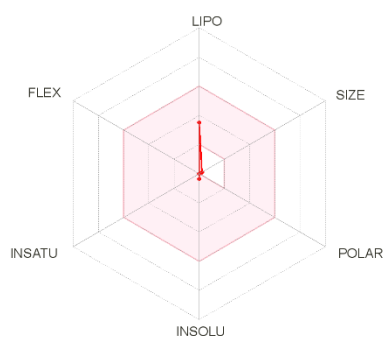
#### **4.4.2. Gas combustible**

En la corriente de salida del gas combustible se muestra de la figura 30 a la figura 33 el espacio fisicoquímico de las respectivas moléculas en la cual se representa el radar de biodisponibilidad de las siguientes propiedades dentro de un rango óptimo de prioridad: Lipofilicidad (LIPO):  $[-0,7 < XLOGP3 < +5,0]$ , Peso molecular (SIZE):  $[150\text{g/mol} < MV < 500\text{g/mol}]$ , Polaridad (POLAR):  $[20\text{Å}^2 < TPSA < 130\text{Å}^2]$ , Insolubilidad (INSOLU):  $[0 < \text{Log S (ESOL)} < 6]$ , Instauración (INSATU):  $[0,25 < \text{Fracción Csp3} < 1]$ , Flexibilidad (FLEX):  $[0 < \text{Número enlaces rotativos} < 9]$ .

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó las tablas de resultados, tomando en cuenta que se reportan los números de aceptores y donadores de átomos de hidrogeno, que permiten determinar si se podrán formar interacciones del tipo puente de hidrogeno, con respecto a la lipofilia se puede apreciar que los valores están dentro del rango óptimo de -0,7 a 5, así como los valores promedios que las moléculas presentan respecto a la partición de n-octano/agua ( $\text{Log Po/w}$ ), también se da a conocer la solubilidad que tienen en el agua la cual se ve influenciada directamente por la cantidad de heteroátomos presentes, llegando a la conclusión que las moléculas presentes en el gas combustible son muy solubles en agua. Los respectivos resultados se muestran de la tabla 56 a la tabla 63.

**Figura 30**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de metano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 56**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de metano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	CH <sub>4</sub>
Peso molecular	16,04 g/mol
Número de átomos pesados	1
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	1,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	6,92
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 57**

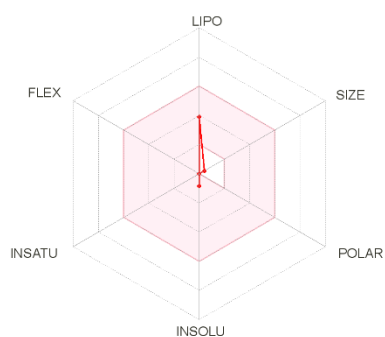
*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de metano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)		Log S (ESOL)	-0,35
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	0,65	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	0,64	Log S (Ali)	-0,23
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	1,12	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	-0,48	Log S (SILICOS-IT)	0,48
Consenso Log $P_{o/w}$		Solubilidad	Soluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Figura 31**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de etano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 58***Propiedades fisicoquímicas de la molécula de etano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_2H_6$
Peso molecular	30,07 g/mol
Número de átomos pesados	2
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	1,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	11,73
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

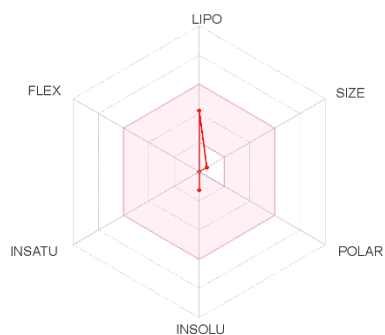
*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 59***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de etano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	1,47	Log S (ESOL)	-0,85
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	1,30	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	0,96	Log S (Ali)	-0,90
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	1,76	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	0,01	Log S (SILICOS-IT)	-0,35
Consenso Log $P_{o/w}$	1,10	Solubilidad	Soluble

**Figura 32**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de propano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 60**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de propano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_3H_8$
Peso molecular	44,10 g/mol
Número de átomos pesados	3
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	1,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	16,54
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 61**

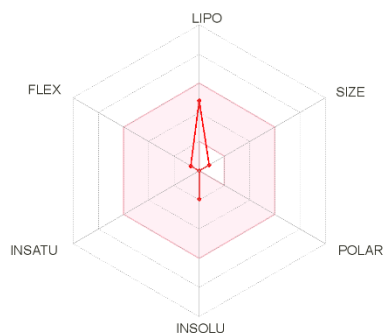
*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de propano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	1,71	Log S (ESOL)	-1,27
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	1,84	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	1,42	Log S (Ali)	-1,46
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	2,28	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	0,45	Log S (SILICOS-IT)	-0,82
Consenso Log $P_{o/w}$	1,54	Solubilidad	Soluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Figura 33**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de butano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME

**Tabla 62***Propiedades fisicoquímicas de la molécula de butano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_4H_{10}$
Peso molecular	58,12 g/mol
Número de átomos pesados	4
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	1,00
Número de enlaces rotativos	1
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	21,34
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME**Tabla 63***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de butano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	1,94	Log S (ESOL)	-1,96
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	2,89	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	1,81	Log S (Ali)	-2,55
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	2,73	Solubilidad	Muy soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	0,89	Log S (SILICOS-IT)	-1,28
Consenso Log $P_{o/w}$	2,05	Solubilidad	Soluble

#### 4.4.3. Gasolina

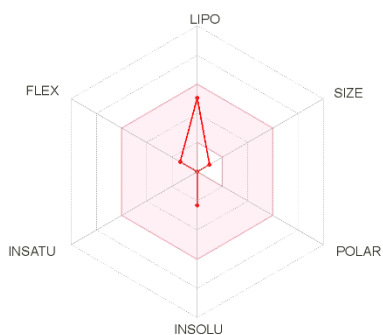
En la corriente de salida de la gasolina se muestra de la figura 34 a la figura 36 el espacio fisicoquímico de las respectivas moléculas en la cual se representa el radar de biodisponibilidad de las siguientes propiedades dentro de un rango óptimo de prioridad: Lipofilia (LIPO):  $[-0,7 < XLOGP3 < +5,0]$ , Peso molecular (SIZE):  $[150\text{g/mol} < MV < 500\text{g/mol}]$ , Polaridad (POLAR):  $[20\text{Å}^2 < TPSA < 130\text{Å}^2]$ , Insolubilidad (INSOLU):  $[0 < \text{Log S (ESOL)} < 6]$ , Insaturación (INSATU):  $[0,25 < \text{Fracción Csp3} < 1]$ , Flexibilidad (FLEX):  $[0 < \text{Número enlaces rotativos} < 9]$ .

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó las tablas de resultados, tomando en cuenta que se reportan los números de aceptores y donadores de átomos de hidrogeno, que permiten determinar si se podrán formar interacciones del tipo puente de hidrogeno, con respecto a la lipofilia se puede apreciar que los valores están dentro del rango óptimo de -0,7 a 5, así como los valores promedios que las moléculas presentan respecto a la partición de n-octano/agua ( $\text{Log Po/w}$ ), también se da a conocer la solubilidad que tienen en el agua la cual se ve influenciada directamente por la cantidad de heteroátomos presentes, llegando a la conclusión que las moléculas presentes en la gasolina son solubles en agua. Los respectivos resultados se muestran de la tabla 64 a la tabla 69.



**Figura 34**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de n-pentano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 64**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de n-pentano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_5H_{12}$
Peso molecular	72,15 g/mol
Número de átomos pesados	5
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación $sp^3$	1,00
Número de enlaces rotativos	2
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	26,15
TPSA	0,00 $\text{Å}^2$

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 65**

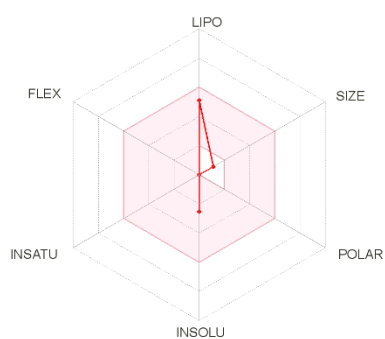
*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de n-pentano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	2,18	Log S (ESOL)	-2,29
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	3,39	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	2,20	Log S (Ali)	-3,07
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	3,14	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	1,34	Log S (SILICOS-IT)	-1,73
Consenso Log $P_{o/w}$	2,45	Solubilidad	Soluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Figura 35**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de ciclohexano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 66***Propiedades fisicoquímicas de la molécula de ciclohexano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_6H_{12}$
Peso molecular	84,16 g/mol
Número de átomos pesados	6
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	1,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	28,84
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

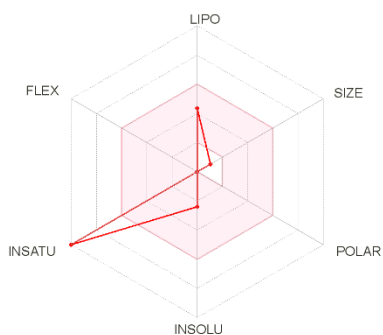
*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 67***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de ciclohexano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	2,10	Log S (ESOL)	-2,53
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	3,44	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	2,34	Log S (Ali)	-3,12
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	3,12	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	2,63	Log S (SILICOS-IT)	-1,44
Consenso Log $P_{o/w}$	2,73	Solubilidad	Soluble

**Figura 36**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de benceno*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 68**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de benceno*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_6H_6$
Peso molecular	78,11 g/mol
Número de átomos pesados	6
Número de átomos aromáticos pesados	6
Fracción de carbonos con hibridación $sp^3$	0,00
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	26,44
TPSA	0,00 $\text{Å}^2$

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 69***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de benceno*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	1,58	Log S (ESOL)	-2,41
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	2,13	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	1,69	Log S (Ali)	-1,76
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	3,17	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	2,12	Log S (SILICOS-IT)	-2,27
Consenso Log $P_{o/w}$	2,14	Solubilidad	Soluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

De acuerdo con que la corriente de salida de la gasolina cuenta con 39 moléculas orgánicas reportadas en la tabla 13 de la bibliografía, se discutió las moléculas más representativas, caso por el cual se muestra la figura del espacio fisicoquímico y las tablas de las propiedades fisicoquímicas, lipofilicidad y solubilidad en el agua del resto de las moléculas orgánicas presentes en la gasolina en el Apéndice 2.

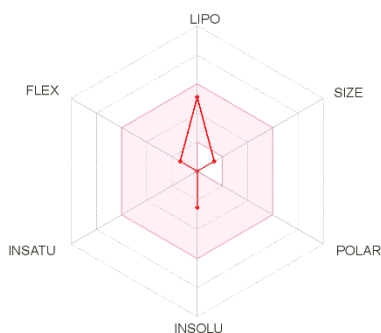
#### **4.4.4. Nafta**

En la corriente de salida de la nafta se muestra de la figura 37 a la figura 39 el espacio fisicoquímico de las respectivas moléculas en la cual se representa el radar de biodisponibilidad de las siguientes propiedades dentro de un rango óptimo de prioridad: Lipofilicidad (LIPO):  $[-0,7 < XLOGP3 < +5,0]$ , Peso molecular (SIZE):  $[150\text{g/mol} < MV < 500\text{g/mol}]$ , Polaridad (POLAR):  $[20\text{Å}^2 < TPSA < 130\text{Å}^2]$ , Insolubilidad (INSOLU):  $[0 < \text{Log S (ESOL)} < 6]$ , Instauración (INSATU):  $[0,25 < \text{Fracción Csp3} < 1]$ , Flexibilidad (FLEX):  $[0 < \text{Número enlaces rotativos} < 9]$ .

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó las tablas de resultados, tomando en cuenta que se reportan los números de aceptores y donadores de átomos de hidrogeno, que permiten determinar si se podrán formar interacciones del tipo puente de hidrogeno, con respecto a la lipofilia se puede apreciar que los valores están dentro del rango óptimo de -0,7 a 5, así como los valores promedios que las moléculas presentan respecto a la partición de n-octano/agua (Log Po/w), también se da a conocer la solubilidad que tienen en el agua la cual se ve influenciada directamente por la cantidad de heteroátomos presentes, llegando a la conclusión que las moléculas presentes en la nafta son solubles en agua. Los respectivos resultados se muestran de la tabla 70 a la tabla 75.

### Figura 37

*Espacio fisicoquímico de la molécula de 2,4-dimetilpentano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 70***Propiedades fisicoquímicas de la molécula de 2,4-dimetilpentano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_7H_{16}$
Peso molecular	100,20 g/mol
Número de átomos pesados	7
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	1,00
Número de enlaces rotativos	2
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	35,76
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

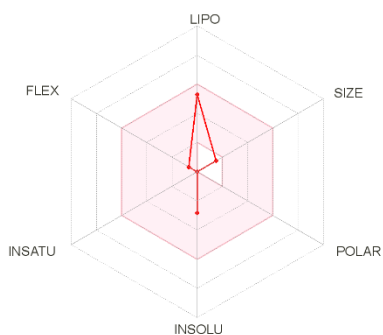
*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 71***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de 2,4-dimetilpentano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	2,51	Log S (ESOL)	-2,49
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	3,43	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	2,69	Log S (Ali)	-3,11
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	3,87	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	1,88	Log S (SILICOS-IT)	-1,85
Consenso Log $P_{o/w}$	2,88	Solubilidad	Soluble

**Figura 38**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de isopropilciclopentano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 72**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de isopropilciclopentano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_8H_{16}$
Peso molecular	112,21 g/mol
Número de átomos pesados	8
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación $sp^3$	1,00
Número de enlaces rotativos	1
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	38,46
TPSA	0,00 $\text{Å}^2$

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.



**Tabla 73**

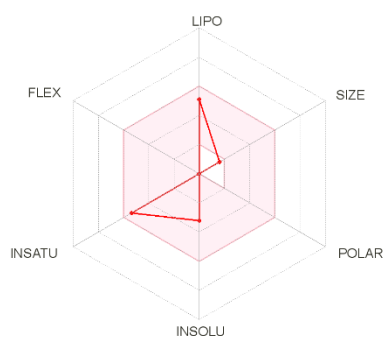
*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de isopropilciclopentano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	2,52	Log S (ESOL)	-2,83
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	3,75	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	2,83	Log S (Ali)	-3,44
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	3,81	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	2,63	Log S (SILICOS-IT)	-1,80
Consenso Log $P_{o/w}$	3,11	Solubilidad	Soluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Figura 39**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de 1,3,5-trimetilbenceno*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 74***Propiedades fisicoquímicas de la molécula de 1,3,5-trimetilbenceno*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_9H_{12}$
Peso molecular	120,19 g/mol
Número de átomos pesados	9
Número de átomos aromáticos pesados	6
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	0,33
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	41,34
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 75***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de 1,3,5-trimetilbenceno*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	2,34	Log S (ESOL)	-3,23
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	3,42	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	2,61	Log S (Ali)	-3,10
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	4,17	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	3,26	Log S (SILICOS-IT)	-3,51
Consenso Log $P_{o/w}$	3,16	Solubilidad	Soluble

De acuerdo con que la corriente de salida de la nafta cuenta con 100 moléculas orgánicas reportadas en la tabla 14 de la bibliografía, se discutió las moléculas más representativas, caso por el cual se muestra la figura del espacio fisicoquímico y las tablas de las propiedades fisicoquímicas, lipofilicidad y solubilidad en el agua del resto de las moléculas orgánicas presentes en la nafta en el Apéndice 2.

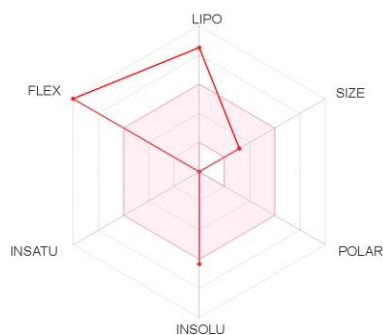
#### **4.4.5. Queroseno**

En la corriente de salida del queroseno se muestra de la figura 40 a la figura 42 el espacio fisicoquímico de las respectivas moléculas en la cual se representa el radar de biodisponibilidad de las siguientes propiedades dentro de un rango óptimo de prioridad: Lipofilicidad (LIPO):  $[-0,7 < XLOGP3 < +5,0]$ , Peso molecular (SIZE):  $[150\text{g/mol} < MV < 500\text{g/mol}]$ , Polaridad (POLAR):  $[20\text{Å}^2 < TPSA < 130\text{Å}^2]$ , Insolubilidad (INSOLU):  $[0 < \text{Log S (ESOL)} < 6]$ , Instauración (INSATU):  $[0,25 < \text{Fracción Csp3} < 1]$ , Flexibilidad (FLEX):  $[0 < \text{Número enlaces rotativos} < 9]$ .

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó las tablas de resultados, tomando en cuenta que se reportan los números de aceptores y donadores de átomos de hidrogeno, que permiten determinar si se podrán formar interacciones del tipo puente de hidrogeno, con respecto a la lipofilia se puede apreciar que los valores no se encuentra dentro del rango óptimo de -0,7 a 5, así como los valores promedios que las moléculas presentan respecto a la partición de n-octano/agua ( $\text{Log Po/w}$ ), también se da a conocer la solubilidad que tienen en el agua la cual se ve influenciada directamente por la cantidad de heteroátomos presentes, llegando a la conclusión que las moléculas presentes en el queroseno son poco solubles en agua. Los respectivos resultados se muestran de la tabla 76 a la tabla 81.

**Figura 40**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de n-octadecano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 76**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de n-octadecano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_{18}H_{38}$
Peso molecular	254,49 g/mol
Número de átomos pesados	18
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	1,00
Número de enlaces rotativos	15
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	88,64
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 77**

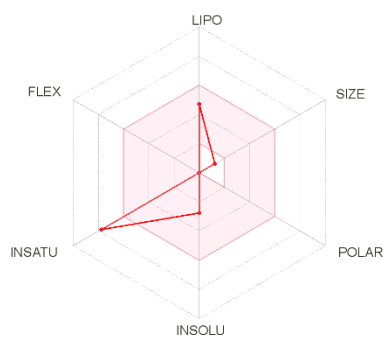
*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de n-octadecano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	5,23	Log S (ESOL)	-6,33
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	9,37	Solubilidad	Poco soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	7,27	Log S (Ali)	-9,27
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	6,92	Solubilidad	Poco soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	7,10	Log S (SILICOS-IT)	-7,13
Consenso Log $P_{o/w}$	7,18	Solubilidad	Poco soluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Figura 41**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de tolueno*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 78***Propiedades fisicoquímicas de la molécula de tolueno*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_7H_{14}$
Peso molecular	92,14g/mol
Número de átomos pesados	7
Número de átomos aromáticos pesados	6
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	0,14
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	31,41
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

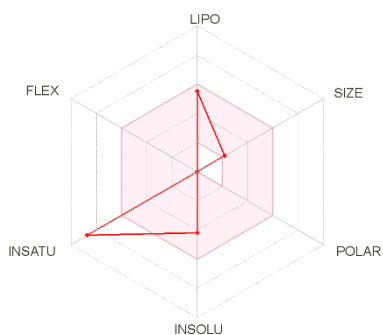
*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 79***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de tolueno*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	1,85	Log S (ESOL)	-2,77
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	2,73	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	2,00	Log S (Ali)	-2,38
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	3,52	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	2,44	Log S (SILICOS-IT)	-2,69
Consenso Log $P_{o/w}$	2,51	Solubilidad	Soluble

**Figura 42**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de fluoreno*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 80**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de fluoreno*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_{13}H_{10}$
Peso molecular	166,22 g/mol
Número de átomos pesados	13
Número de átomos aromáticos pesados	12
Fracción de carbonos con hibridación $sp^3$	0,08
Número de enlaces rotativos	0
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	54,89
TPSA	0,00 $\text{Å}^2$

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 81**

*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de fluoreno*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	2,32	Log S (ESOL)	-4,19
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	4,18	Solubilidad	Mod. soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	3,26	Log S (Ali)	-3,89
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	4,67	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	4,04	Log S (SILICOS-IT)	-5,18
Consenso Log $P_{o/w}$	3,69	Solubilidad	Mod. soluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME

De acuerdo con que la corriente de salida del queroseno cuenta con 43 moléculas orgánicas reportadas en la tabla 15 de la bibliografía, se discutió las moléculas más representativas, caso por el cual se muestra la figura del espacio fisicoquímico y las tablas de las propiedades fisicoquímicas, lipofilicidad y solubilidad en el agua del resto de las moléculas orgánicas presentes en el queroseno en el Apéndice 2.

#### **4.4.6. Diésel**

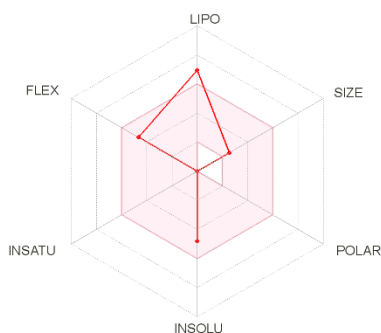
En la corriente de salida del diésel se muestra de la figura 43 a la figura 45 el espacio fisicoquímico de las respectivas moléculas en la cual se representa el radar de biodisponibilidad de las siguientes propiedades dentro de un rango óptimo de prioridad: Lipofilicidad (LIPO):  $[-0,7 < XLOGP3 < +5,0]$ , Peso molecular (SIZE):  $[150\text{g/mol} < MV < 500\text{g/mol}]$ , Polaridad (POLAR):  $[20\text{Å}^2 < TPSA < 130\text{Å}^2]$ , Insolubilidad (INSOLU):  $[0 < \text{Log S (ESOL)} < 6]$ , Instauración (INSATU):  $[0,25 < \text{Fracción Csp3} < 1]$ , Flexibilidad (FLEX):  $[0 < \text{Número enlaces rotativos} < 9]$ .



En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó las tablas de resultados, tomando en cuenta que se reportan los números de aceptores y donadores de átomos de hidrogeno, que permiten determinar si se podrán formar interacciones del tipo puente de hidrogeno, con respecto a la lipofilia se puede apreciar que los valores ya no se encuentran dentro del rango óptimo de -0,7 a 5, así como los valores promedios que las moléculas presentan respecto a la partición de n-octano/agua (Log Po/w), también se da a conocer la solubilidad que tienen en el agua la cual se ve influenciada directamente por la cantidad de heteroátomos presentes, llegando a la conclusión que las moléculas presentes en el diésel son moderadamente solubles en agua. Los respectivos resultados se muestran de la tabla 82 a la tabla 87.

### Figura 43

*Espacio fisicoquímico de la molécula de 2,7-dimetil-4,5-dietiloctano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 82**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de 2,7-dimetil-4,5-dietiloctano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_{14}H_{30}$
Peso molecular	198,39 g/mol
Número de átomos pesados	14
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	1,00
Número de enlaces rotativos	7
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	69,41
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

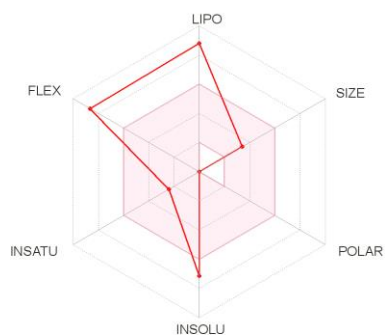
**Tabla 83**

*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de 2,7-dimetil-4,5-dietiloctano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	3,70	Log S (ESOL)	-4,79
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	6,64	Solubilidad	Moderada solu.
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	5,13	Log S (Ali)	-6,44
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	5,93	Solubilidad	Poco soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	4,64	Log S (SILICOS-IT)	-4,02
Consenso Log $P_{o/w}$	5,21	Solubilidad	Moderada solu.

**Figura 44**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de 2-feniltetradecano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 84**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de 2-feniltetradecano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_{20}H_{34}$
Peso molecular	274,48 g/mol
Número de átomos pesados	20
Número de átomos aromáticos pesados	6
Fracción de carbonos con hibridación $sp^3$	0,70
Número de enlaces rotativos	12
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	93,90
TPSA	0,00 $\text{Å}^2$

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 85**

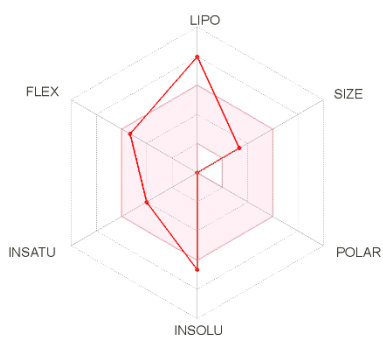
*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de 2-feniltetradecano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	4,79	Log S (ESOL)	-6,82
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	9,29	Solubilidad	Poco soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	7,10	Log S (Ali)	-9,19
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	7,03	Solubilidad	Poco soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	7,07	Log S (SILICOS-IT)	-7,67
Consenso Log $P_{o/w}$	7,05	Solubilidad	Poco soluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Figura 45**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de dimetil-3-naftiloctano*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 86***Propiedades fisicoquímicas de la molécula de dimetil-3-naftiloctano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_{20}H_{28}$
Peso molecular	268,44 g/mol
Número de átomos pesados	20
Número de átomos aromáticos pesados	10
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	0,50
Número de enlaces rotativos	8
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	92,18
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 87***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de dimetil-3-naftiloctano*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	4,25	Log S (ESOL)	-6,65
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	8,42	Solubilidad	Poco soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	6,38	Log S (Ali)	-8,29
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	6,81	Solubilidad	Poco soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	6,63	Log S (SILICOS-IT)	-7,73
Consenso Log $P_{o/w}$	6,50	Solubilidad	Poco soluble

De acuerdo con que la corriente de salida del diésel cuenta con 110 moléculas orgánicas reportadas en la tabla 16 de la bibliografía, se discutió las moléculas más representativas, caso por el cual se muestra la figura del espacio fisicoquímico y las tablas de las propiedades fisicoquímicas, lipofilicidad y solubilidad en el agua del resto de las moléculas orgánicas presentes en el diésel en el Apéndice 2.

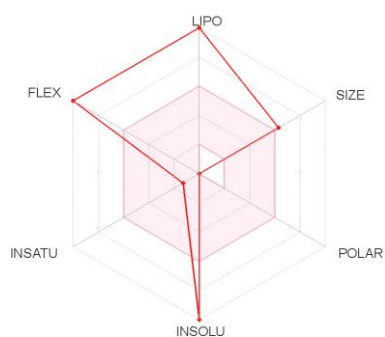
#### **5.4.7. Residuo atmosférico**

En la corriente de salida del residuo atmosférico se muestra de la figura 46 a la figura 49 el espacio fisicoquímico de las respectivas moléculas en la cual se representa el radar de biodisponibilidad de las siguientes propiedades dentro de un rango óptimo de prioridad: Lipofilicidad (LIPO):  $[-0,7 < XLOGP3 < +5,0]$ , Peso molecular (SIZE):  $[150\text{g/mol} < MV < 500\text{g/mol}]$ , Polaridad (POLAR):  $[20\text{Å}^2 < TPSA < 130\text{Å}^2]$ , Insolubilidad (INSOLU):  $[0 < \text{Log S (ESOL)} < 6]$ , Instauración (INSATU):  $[0,25 < \text{Fracción Csp3} < 1]$ , Flexibilidad (FLEX):  $[0 < \text{Número enlaces rotativos} < 9]$ .

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó las tablas de resultados, tomando en cuenta que se reportan los números de aceptores y donadores de átomos de hidrogeno, que permiten determinar si se podrán formar interacciones del tipo puente de hidrogeno, con respecto a la lipofilia se puede apreciar que los valores no se encuentran dentro del rango óptimo de -0,7 a 5, así como los valores promedios que las moléculas presentan respecto a la partición de n-octano/agua ( $\text{Log Po/w}$ ), también se da a conocer la solubilidad que tienen en el agua la cual se ve influenciada directamente por la cantidad de heteroátomos presentes, llegando a la conclusión que las moléculas presentes en el residuo atmosférico son insolubles en agua. Los respectivos resultados se muestran de la tabla 88 a la tabla 95.

**Figura 46**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de o-dicetilbenceno*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 88**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de o-dicetilbenceno*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_{38}H_{70}$
Peso molecular	526,96g/mol
Número de átomos pesados	38
Número de átomos aromáticos pesados	6
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	0,84
Número de enlaces rotativos	30
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	180,58
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 89**

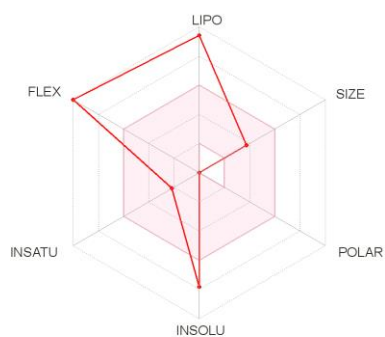
*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de o-dicetilbenceno*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	9,02	Log S (ESOL)	-13,01
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	18,68	Solubilidad	Insoluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	13,73	Log S (Ali)	-18,94
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	10,55	Solubilidad	Insoluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	15,10	Log S (SILICOS-IT)	-15,10
Consenso Log $P_{o/w}$	13,42	Solubilidad	Insoluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Figura 47**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de n-hexadecilbenceno*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.



**Tabla 90***Propiedades fisicoquímicas de la molécula de n-hexadecilbenceno*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_{22}H_{38}$
Peso molecular	302,54 g/mol
Número de átomos pesados	22
Número de átomos aromáticos pesados	6
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	0,73
Número de enlaces rotativos	15
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	103,51
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

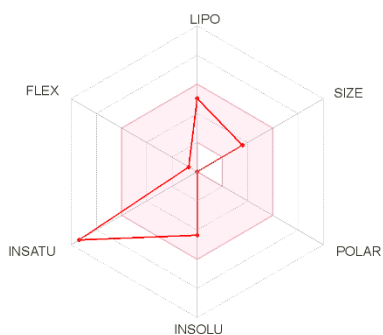
*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 91***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de n-hexadecilbenceno*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	5,32	Log S (ESOL)	-7,84
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	10,98	Solubilidad	Poco soluble
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	7,71	Log S (Ali)	-10,95
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	7,47	Solubilidad	Insoluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	8,07	Log S (SILICOS-IT)	-8,84
Consenso Log $P_{o/w}$	7,91	Solubilidad	Poco soluble

**Figura 48**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de 3,4-bencilpireno*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 92**

*Propiedades fisicoquímicas de la molécula de 3,4-bencilpireno*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_{23}H_{14}$
Peso molecular	290,36g/mol
Número de átomos pesados	23
Número de átomos aromáticos pesados	22
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	0,04
Número de enlaces rotativos	1
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	0
Número de donantes de enlaces hidrógeno	0
Refractividad molar	97,64
TPSA	0,00 Å <sup>2</sup>

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 93**

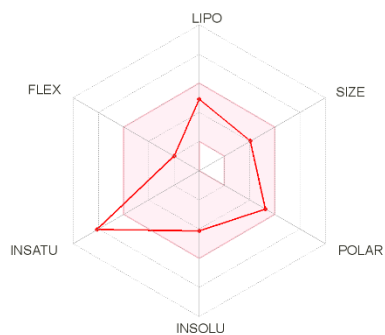
*Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de 3,4-bencilpireno*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	3,30	Log S (ESOL)	-4,35
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	3,29	Solubilidad	Moderada solu
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	6,08	Log S (Ali)	-2,97
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	6,55	Solubilidad	Soluble
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	6,57	Log S (SILICOS-IT)	-9,13
Consenso Log $P_{o/w}$	5,16	Solubilidad	Poco soluble

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Figura 49**

*Espacio fisicoquímico de la molécula de criseno*



*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 94***Propiedades fisicoquímicas de la molécula de criseno*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	$C_{17}H_{14}O_7$
Peso molecular	330,29 g/mol
Número de átomos pesados	24
Número de átomos aromáticos pesados	16
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	0,12
Número de enlaces rotativos	3
Número de aceptores de enlaces hidrógeno	7
Número de donantes de enlaces hidrógeno	3
Refractividad molar	86,97
TPSA	109,36 Å <sup>2</sup>

*Nota.* Tomado de la plataforma web SwissADME.

**Tabla 95***Lipofilicidad y solubilidad del agua de la molécula de criseno*

Lipofilicidad		Solubilidad	
Log $P_{o/w}$ (iLOGP)	2,54	Log S (ESOL)	-4,12
Log $P_{o/w}$ (XLOGP3)	3,07	Solubilidad	Moderada solub
Log $P_{o/w}$ (WLOGP)	2,59	Log S (Ali)	-5,03
Log $P_{o/w}$ (MLOGP)	-0,07	Solubilidad	Moderada solub
Log $P_{o/w}$ (SILICOS-IT)	2,59	Log S (SILICOS-IT)	-4,63
Consenso Log $P_{o/w}$	2,15	Solubilidad	Moderada solub

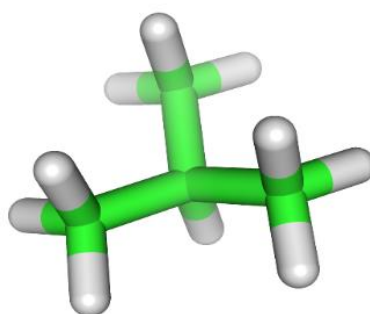
#### 4.5. Cálculo de las estructuras 3D de las moléculas orgánicas, mediante el software Avogadro, con la obtención de las configuraciones y conformaciones finales

##### 4.5.1. Crudo de petróleo

Con la ayuda del software Avogadro y PyMOL se obtuvieron las estructuras químicas 3D de las moléculas orgánicas presentes en la corriente de entrada del crudo de petróleo, las mismas que se muestran de la figura 50 a la figura 55, donde los átomos de hidrogeno están representados de color blanco, los átomos de carbono de color verde, los átomos de azufre de color dorado, los átomos de oxigeno de color rojo y los átomos de nitrógeno de color azul, junto con la figura se encuentra en la nota la energía de optimización que la molécula utilizo para optimizar la estructura 3D del compuesto.

#### Figura 50

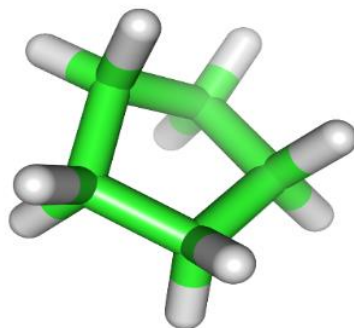
*Estructura 3D de la molécula de iso-butano.*



*Nota.* Energía de optimización = -1,99924 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 51**

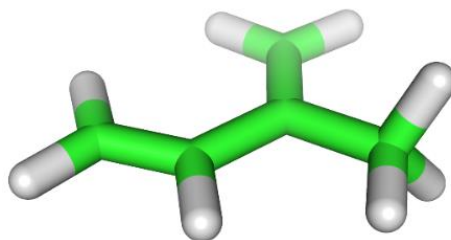
*Estructura 3D de la molécula de ciclopentano.*



*Nota.* Energía de optimización = 6,4805 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 52**

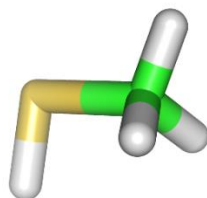
*Estructura 3D de la molécula de isopreno.*



*Nota.* Energía de optimización = 53,7435 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 53**

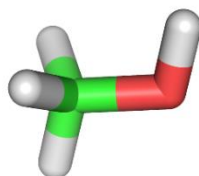
*Estructura 3D de la molécula de metanotiol.*



*Nota.* Energía de optimización = 2,53889 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 54**

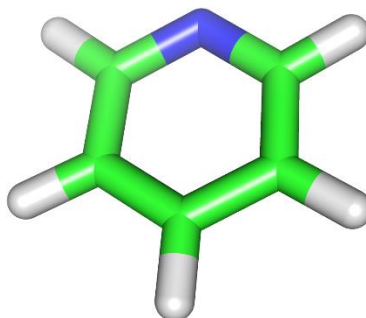
*Estructura 3D de la molécula de metanol.*



*Nota.* Energía de optimización = 2,78744 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 55**

*Estructura 3D de la molécula de piridina.*



*Nota.* Energía de optimización = 64,9935 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

De acuerdo con que la corriente de entrada de crudo de petróleo cuenta con 121 moléculas orgánicas reportadas en seis diferentes tablas, se discutió la molécula más representativa de cada una de las tablas de dicha entrada presentadas en la bibliografía, caso por el cual se muestra la estructura química 3D y la energía de optimización del resto de las moléculas orgánicas presentes en el crudo de petróleo en el Apéndice 3.

**5.5.2. Gas combustible**

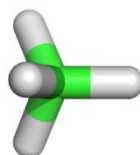
Con la ayuda del software Avogadro y PyMOL se obtuvieron las estructuras químicas 3D de las moléculas orgánicas presentes en la corriente de salida del gas combustible, las mismas que se muestran de la figura 56 a la figura 59, donde los átomos de hidrogeno están representados de color blanco, los átomos de carbono de color verde, los átomos de azufre de color dorado, los átomos de oxigeno de color rojo y los átomos de nitrógeno de color azul, junto con la figura se encuentra en la nota la



energía de optimización que la molécula utilizo para optimizar la estructura 3D del compuesto.

### Figura 56

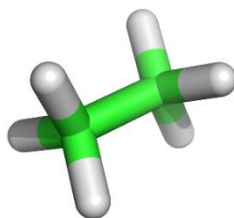
*Estructura 3D de la molécula de metano*



*Nota.* Energía de optimización = 0,110457 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

### Figura 57

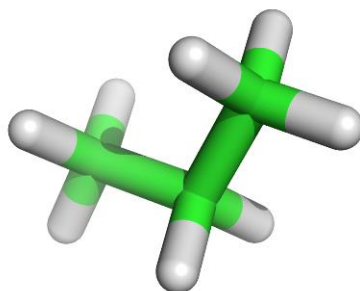
*Estructura 3D de la molécula de etano*



*Nota.* Energía de optimización = 19,8218 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 58**

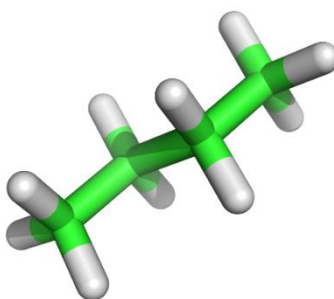
*Estructura 3D de la molécula de propano*



*Nota.* Energía de optimización = 20,504 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 59**

*Estructura 3D de la molécula de butano*



*Nota.* Energía de optimización = 21,2521 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

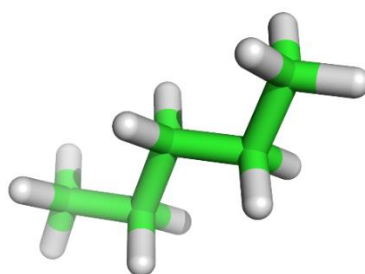
**4.5.3. Gasolina**

Con la ayuda del software Avogadro y PyMOL se obtuvieron las estructuras químicas 3D de las moléculas orgánicas presentes en la corriente de salida de la gasolina, las mismas que se muestran de la figura 60 a la figura 62, donde los átomos de hidrogeno están representados de color blanco, los átomos de carbono de color

verde, los átomos de azufre de color dorado, los átomos de oxígeno de color rojo y los átomos de nitrógeno de color azul, junto con la figura se encuentra en la nota la energía de optimización que la molécula utilizó para optimizar la estructura 3D del compuesto.

### Figura 60

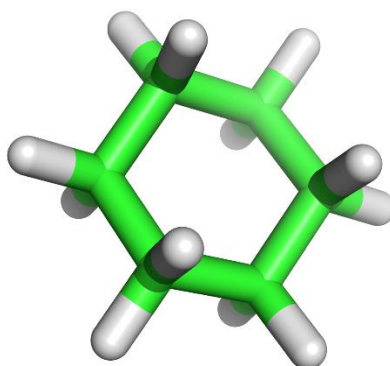
*Estructura 3D de la molécula de n-pentano*



*Nota.* Energía de optimización = 22,0718 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

### Figura 61

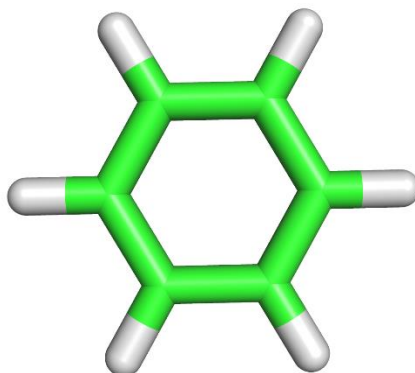
*Estructura 3D de la molécula de ciclohexano*



*Nota.* Energía de optimización = -14,909 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 62**

*Estructura 3D de la molécula de benceno*



*Nota.* Energía de optimización = 67,9391 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

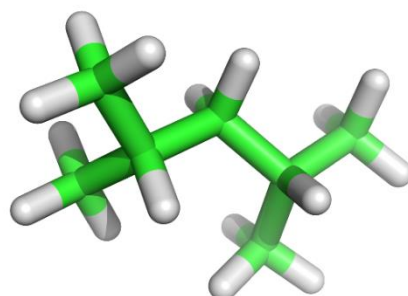
De acuerdo con que la corriente de salida de la gasolina cuenta con 39 moléculas orgánicas reportadas en la tabla 13 de la bibliografía, se discutió las moléculas más representativas, caso por el cual se muestra la estructura química 3D y la energía de optimización del resto de las moléculas orgánicas presentes en la gasolina en el Apéndice 3.

**4.5.4. Nafta**

Con la ayuda del software Avogadro y PyMOL se obtuvieron las estructuras químicas 3D de las moléculas orgánicas presentes en la corriente de salida de la nafta, las mismas que se muestran de la figura 63 a la figura 65, donde los átomos de hidrogeno están representados de color blanco, los átomos de carbono de color verde, los átomos de azufre de color dorado, los átomos de oxigeno de color rojo y los átomos de nitrógeno de color azul, junto con la figura se encuentra en la nota la energía de optimización que la molécula utilizo para optimizar la estructura 3D del compuesto.

**Figura 63**

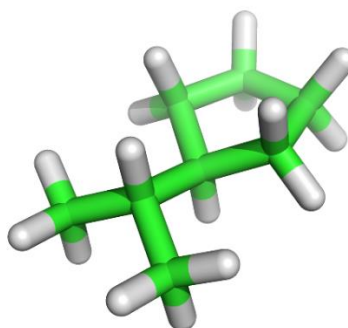
*Estructura 3D de la molécula de 2,4-dimetilpentano*



*Nota.* Energía de optimización = 34,9972 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 64**

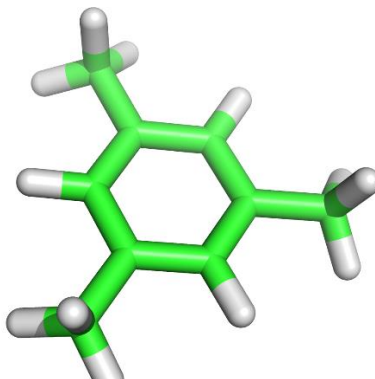
*Estructura 3D de la molécula de isopropilciclopentano*



*Nota.* Energía de optimización = 44,953 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 65**

*Estructura 3D de la molécula de 1,3,5-trimetilbenceno*



*Nota.* Energía de optimización = 95,5611 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

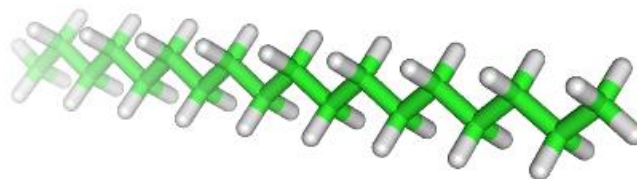
De acuerdo con que la corriente de salida de la nafta cuenta con 100 moléculas orgánicas reportadas en la tabla 14 de la bibliografía, se discutió las moléculas más representativas, caso por el cual se muestra la estructura química 3D y la energía de optimización del resto de las moléculas orgánicas presentes en la nafta en el Apéndice 3.

**4.5.5. Queroseno**

Con la ayuda del software Avogadro y PyMOL se obtuvieron las estructuras químicas 3D de las moléculas orgánicas presentes en la corriente de salida del queroseno, las mismas que se muestran de la figura 66 a la figura 68, donde los átomos de hidrogeno están representados de color blanco, los átomos de carbono de color verde, los átomos de azufre de color dorado, los átomos de oxigeno de color rojo y los átomos de nitrógeno de color azul, junto con la figura se encuentra en la nota la energía de optimización que la molécula utilizo para optimizar la estructura 3D del compuesto.

**Figura 66**

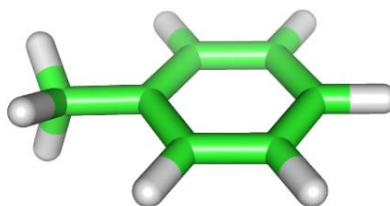
*Estructura 3D de la molécula de n-octadecano*



*Nota.* Energía de optimización = -33,3038 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 67**

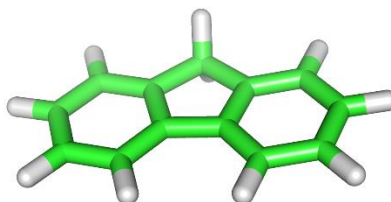
*Estructura 3D de la molécula de tolueno*



*Nota.* Energía de optimización = 77,1107 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 68**

*Estructura 3D de la molécula de fluoreno.*



*Nota.* Energía de optimización = 219,198 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

De acuerdo con que la corriente de salida del queroseno cuenta con 43 moléculas orgánicas reportadas en la tabla 15 de la bibliografía, se discutió las moléculas más representativas, caso por el cual se muestra la estructura química 3D y la energía de optimización del resto de las moléculas orgánicas presentes en el queroseno en el Apéndice 3.

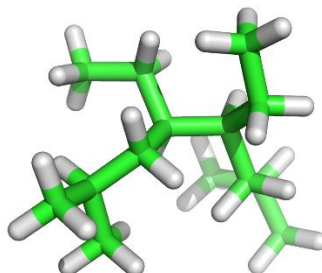
**4.5.6. Diésel**

Con la ayuda del software Avogadro y PyMOL se obtuvieron las estructuras químicas 3D de las moléculas orgánicas presentes en la corriente de salida del diésel, las mismas que se muestran de la figura 69 a la figura 71, donde los átomos de hidrogeno están representados de color blanco, los átomos de carbono de color verde, los átomos de azufre de color dorado, los átomos de oxigeno de color rojo y los átomos de nitrógeno de color azul, junto con la figura se encuentra en la nota la energía de optimización que la molécula utilizo para optimizar la estructura 3D del compuesto.



**Figura 69**

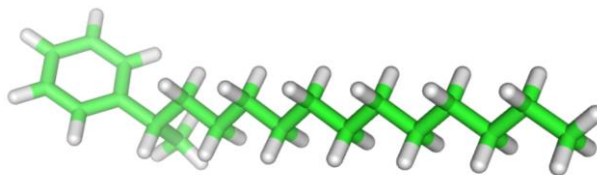
*Estructura 3D de la molécula de 2,7-dimetil-4,5-dietiloctano*



*Nota.* Energía de optimización = 119,561 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 70**

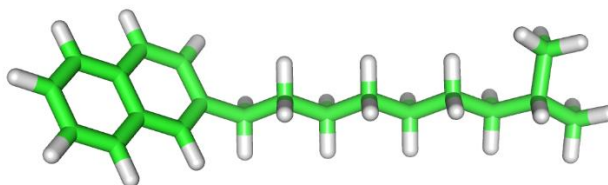
*Estructura 3D de la molécula de 2-feniltetradecano*



*Nota.* Energía de optimización = 90,1128 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 71**

*Estructura 3D de la molécula de dimetil-3-naftiloctano*



*Nota.* Energía de optimización = 153,529 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

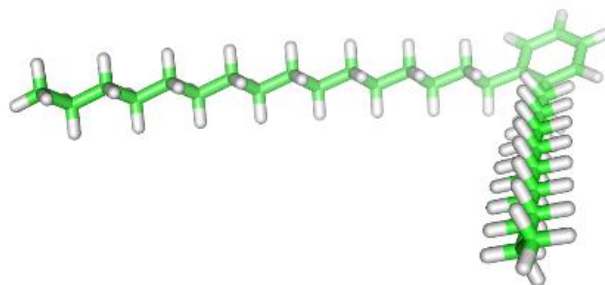
De acuerdo con que la corriente de salida del diésel cuenta con 110 moléculas orgánicas reportadas en la tabla 16 de la bibliografía, se discutió las moléculas más representativas, caso por el cual se muestra la estructura química 3D y la energía de optimización del resto de las moléculas orgánicas presentes en el diésel en el Apéndice 3.

**4.5.7. Residuo atmosférico**

Con la ayuda del software Avogadro y PyMOL se obtuvieron las estructuras químicas 3D de las moléculas orgánicas presentes en la corriente de salida del residuo atmosférico, las mismas que se muestran de la figura 72 a la figura 74, donde los átomos de hidrogeno están representados de color blanco, los átomos de carbono de color verde, los átomos de azufre de color dorado, los átomos de oxígeno de color rojo y los átomos de nitrógeno de color azul, junto con la figura se encuentra en la nota la energía de optimización que la molécula utilizo para optimizar la estructura 3D del compuesto.

**Figura 72**

*Estructura 3D de la molécula de o-dicetilbenceno*



*Nota.* Energía de optimización = 128,3651 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 73**

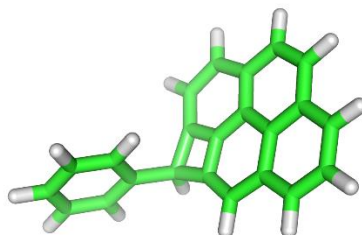
*Estructura 3D de la molécula de n-hexadecilbenceno*



*Nota.* Energía de optimización = 68,5286 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 74**

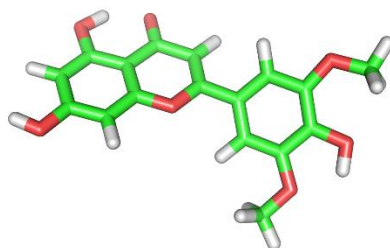
*Estructura 3D de la molécula de 3,4-bencilpireno.*



*Nota.* Energía de optimización = 528,459 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

**Figura 75**

*Estructura 3D de la molécula de criseno*



*Nota.* Energía de optimización = 1999,181 KJ/mol. Tomado de Avogadro.

## CAPÍTULO V

### Conclusiones y recomendaciones

#### Conclusiones

Después de realizar las revisiones bibliográficas correspondientes a las moléculas orgánicas presente en el crudo, se obtuvieron un total de 121 compuestos representativos, de los cuales solo se eligieron seis compuestos para discutir sus propiedades y estructura, esta elección se basó en el mayor grado API de cada tipo de hidrocarburo. Siendo estos isobutano, ciclopentano, isopreno, metanotiol, metanol y piridina.

Mediante la búsqueda bibliográfica se determinó que en una unidad de destilación atmosférica existen seis corrientes de salida: gas combustible, gasolina, nafta, queroseno, diésel y residuo atmosférico. Obteniendo un total de 300 compuestos que forman los distintos productos refinados de los cuales se eligieron 20 compuestos para su respectiva discusión, para ellos nos basamos en una propiedad esencial (RON, MON, el octanaje, el cetaje o el porcentaje en peso) siendo estos los compuestos más representativos.

Se observó que existe una relación entre el peso molecular y el punto de ebullición de un compuesto, ya que los componentes más livianos tienen un punto de ebullición menor que los componentes más pesados, creando diferentes rangos de ebullición para las seis corrientes de salida que componen el proceso.

Se determinó que para la corriente de entrada, de los seis compuestos elegidos, la molécula más pesada fue la piridina con un peso molecular de 79,1020 g/mol debido al número de átomos de carbono que componen la molécula. Este tipo de moléculas, que aunque tienen un porcentaje en peso pequeño, se une con las cadenas carbonadas de los otros compuestos creando así una macromolécula llamada asfálteno.

Respecto a la lipofilia se determinó que las moléculas orgánicas con un número de átomos de carbono menor a catorce se encuentran dentro del rango óptimo de lipofilia que comprende de -0,7 a 5 en relación a la partición de n-octano sobre agua, de igual forma en la solubilidad de los compuestos orgánicos con menor peso molecular son muy solubles en el agua, mientras que las moléculas muy pesadas se vuelven prácticamente insolubles. La refractividad molar de los compuestos, al igual que la lipofilia y la solubilidad, es directamente proporcional al peso molecular del componente.

La energía potencial molecular que se necesita para optimizar las estructuras tridimensionales de los compuestos orgánicos es directamente proporcional a número de átomos de carbono que compone la molécula, sin embargo las moléculas oxigenadas, sulfuradas y nitrogenadas necesitan de una gran energía potencial para lograr la optimización adecuada a diferencia con los componentes parafínicas, nafténicas y aromáticas.

Se pudo notar que dentro de la mezcla de crudo de petróleo, al igual que los productos refinados existen moléculas con estructuras muy simples como el metano hasta estructuras muy complejas como los asfaltenos, que al ser moléculas formadas por grandes cadenas carbonadas no tienen un nombre específico y por ende no se les puede representar.

## **Recomendaciones**

Se recomienda que en el programa ChemDraw al momento de convertir el nombre IUPAC a la estructura 2D se ponga el nombre en inglés ya que este programa no tiene versiones en español.

Se recomienda que en la utilización del programa ChemDraw se guarden los archivos generados en extensión .mol, ya que a partir de este archivo se consigue la optimización y generación de la molécula tridimensional.

Para optimizar las moléculas orgánicas en 3D se recomienda utilizar el campo de fuerza MMFF94s, ya que este campo está diseñado para compuestos orgánicos, específicamente para naftenos, aromáticos, parafinas...etc.

**LISTA DE ABREVIACIONES**

GLP	Gas licuado de petróleo
API	Instituto americano de petroleo
Tp	Punto de fluidez
TM	Punto de fusión
ASTM	Sociedad Americana para Pruebas y Materiales
MON	Número de octanaje del motor
RON	Número de octano de investigación
LSR	Nafta ligera de primera destilación
HSR	Nafta pesada de primera destilación
AGO	Gasóleo atmosférico
VGO	Gasóleo de vacío
TBP	Curvas de punto de ebullición
IBP	Punto de ebullición inicial
DFT	Teoría funcional de la densidad
PES	Superficie de energía potencial
ADME	Propiedades de Absorción, distribución, metabolismo y excreción
IUPAC	Unión Internacional de Química Pura y Aplicada
%w	Porcentaje en peso



## Bibliografía

- Antos, G. J., Aitani, A. M., & Parera, J. M. (2004). *Catalytic Naphtha Reforming* (Second). Marcel Dekker, Inc. Recuperado el 20 de Enero del 2021.  
[https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=ic79DwAAQBAJ&oi=fnd&pg=PP1&dq=Catalytic+Naphtha+Reforming.+antos&ots=cdklwXZMQ5&sig=0sG\\_Cl25aGb6YssvjAwYXclodFY#v=onepage&q=Catalytic%20Naphtha%20Reforming.%20antos&f=false](https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=ic79DwAAQBAJ&oi=fnd&pg=PP1&dq=Catalytic+Naphtha+Reforming.+antos&ots=cdklwXZMQ5&sig=0sG_Cl25aGb6YssvjAwYXclodFY#v=onepage&q=Catalytic%20Naphtha%20Reforming.%20antos&f=false)
- Bacosa, H., Suto, K., & Inoue, C. (2010). Preferential degradation of aromatic hydrocarbons in kerosene by a microbial consortium. Recuperado el 24 de Enero del 2021. *International Biodeterioration & Biodegradation*, 64(8), 702–710.  
<https://doi.org/10.1016/j.ibiod.2010.03.008>
- Beyer, H., & Wolfgang, W. (1987). *Manual de química orgánica*. Reverté. Recuperado el 12 de Marzo del 2021.  
[https://books.google.es/books?id=Pm7INZzKlaoC&printsec=frontcover&hl=es&source=gbs\\_ge\\_summary\\_r&cad=0#v=onepage&q&f=false](https://books.google.es/books?id=Pm7INZzKlaoC&printsec=frontcover&hl=es&source=gbs_ge_summary_r&cad=0#v=onepage&q&f=false)
- Chaudhuri, U. R. (2016). *Fundamentals of Petroleum and Petrochemical Engineering*. In *Fundamentals of Petroleum and Petrochemical Engineering*. CRC Press.  
Recuperado el 25 de Marzo del 2021. <https://doi.org/10.1201/b10486>
- Cirilo, A., Llombart, C., & Tamargo, J. (2004). *Introducción a la Química Terapéutica*. Díaz de Santos. Recuperado el 28 de Febrero del 2021.  
[https://books.google.es/books?id=BiK5BgAAQBAJ&dq=refractividad+molar&hl=es&source=gbs\\_navlinks\\_s](https://books.google.es/books?id=BiK5BgAAQBAJ&dq=refractividad+molar&hl=es&source=gbs_navlinks_s)
- Creton, B., Dartiguelongue, C., de Bruin, T., & Toulhoat, H. (2010). Prediction of the Cetane Number of Diesel Compounds Using the Quantitative Structure Property

Relationship. Recuperado el 28 de Enero del 2021. *Energy & Fuels*, 24(10), 5396–5403. <https://doi.org/10.1021/ef1008456>

Cuevas, G. (2005). Química computacional. Recuperado el 2 de Marzo del 2021.

*Ciencia*, 33–42.

[https://www.amc.edu.mx/revistaciencia/images/revista/56\\_2/quimica\\_comutacional.pdf](https://www.amc.edu.mx/revistaciencia/images/revista/56_2/quimica_comutacional.pdf)

Czylkowski, D., Hrycak, B., Miotk, R., Jasiński, M., Dors, M., & Mizeraczyk, J. (2018).

Hydrogen-enriched gas production from kerosene using an atmospheric pressure microwave plasma system. Recuperado el 5 de Marzo del 2021. *Fuel*, 215, 686–694. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.11.137>

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

Delano, W. L. (2002). PyMOL: An Open-Source Molecular Graphics Tool. In *CCP4*

*NEWSLETTER ON PROTEIN CRYSTALLOGRAPHY* (pp. 44–53). BBSRC

Collaborative. Recuperado el 3 de Marzo del 2021.

<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.231.5879&rep=rep1&type=pdf#page=44>

Fahim, M., Alsahhaf, T., & Elkilani, A. (2010). *Fundamentals of petroleum refining* (1st ed.). Elsevier. Recuperado el 22 de Marzo del 2021.

[https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=UcFsv1mMFHIC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Fahim,+M.,+Alsahhaf,+T.,+%26+Elkilani,+A.+\(2010\).+Fundamentals+of+petroleum+refining+\(1st+ed.\).+Elsevier&ots=E25mj\\_tlsw&sig=JC5UP89YOHPMU0uvplxpA](https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=UcFsv1mMFHIC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Fahim,+M.,+Alsahhaf,+T.,+%26+Elkilani,+A.+(2010).+Fundamentals+of+petroleum+refining+(1st+ed.).+Elsevier&ots=E25mj_tlsw&sig=JC5UP89YOHPMU0uvplxpA)

oRky4Q#v=onepage&q&f=false

Gary, J. H., & Handwerk, G. E. (2003). *Refino de petróleo* (Revérte (ed.)). Recuperado el 28 de Enero del 2021.

[https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=uGK8J8fK4F4C&oi=fnd&pg=PA1&dq=Gary,+J.+H.,+%26+Handwerk,+G.+E.+\(2003\).+Refino+de+petr%C3%B3leo+\(Rev+%C3%A9rte+\(ed.\)\).&ots=OUWYcc5q2b&sig=p3bjj6gnLCdKpFr5P2SDdGTQcK#v=onepage&q&f=false](https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=uGK8J8fK4F4C&oi=fnd&pg=PA1&dq=Gary,+J.+H.,+%26+Handwerk,+G.+E.+(2003).+Refino+de+petr%C3%B3leo+(Rev+%C3%A9rte+(ed.)).&ots=OUWYcc5q2b&sig=p3bjj6gnLCdKpFr5P2SDdGTQcK#v=onepage&q&f=false)

Harris, D. C. (2003). *Análisis químico cuantitativo*. Reverté. Recuperado el 14 de Marzo del 2021. [https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=H-](https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=H-_8vZYdL70C&oi=fnd&pg=PA1&dq=an%C3%A1lisis+qu%C3%ADmico+cuantitativo+harris&ots=QJZ6biQxJq&sig=mvbW4KmqCQ1JJ2cuBSyWM32UAM4#v=onepage&q=an%C3%A1lisis%20qu%C3%ADmico%20cuantitativo%20harris&f=false)

[\\_8vZYdL70C&oi=fnd&pg=PA1&dq=an%C3%A1lisis+qu%C3%ADmico+cuantitativo+harris&ots=QJZ6biQxJq&sig=mvbW4KmqCQ1JJ2cuBSyWM32UAM4#v=onepage&q=an%C3%A1lisis%20qu%C3%ADmico%20cuantitativo%20harris&f=false](https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=H-_8vZYdL70C&oi=fnd&pg=PA1&dq=an%C3%A1lisis+qu%C3%ADmico+cuantitativo+harris&ots=QJZ6biQxJq&sig=mvbW4KmqCQ1JJ2cuBSyWM32UAM4#v=onepage&q=an%C3%A1lisis%20qu%C3%ADmico%20cuantitativo%20harris&f=false)

Jensen, F. (2007). *Introduction to Computational Chemistry* (2nd ed.). John Wiley & Sons, Ltd. Recuperado el 17 de Marzo del 2021. <https://doi.org/10.1007/s00214-013-1372-6>

Jones, D., & Pujadó, P. (Eds.). (1996). *Handbook of Petroleum Processing*. Springer. Recuperado el 13 de Febrero del 2021.

Lewars, E. G. (2011). Computational chemistry. Introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics. In *Computational Chemistry* (segunda). Springer science+Business media b.v. Recuperado el 22 de Febrero del 2021. [https://doi.org/10.1007/978-90-481-3862-3\\_8](https://doi.org/10.1007/978-90-481-3862-3_8)

Lluch Urpi, J. (2012). *Tecnología y margen de refino del petróleo*. Díaz de Santos S.A. Recuperado el 5 de Marzo del 2021.

<https://books.google.es/books?id=p7OOXBSKtewC&printsec=frontcover&hl=es&so>

urce=gbs\_ge\_summary\_r&cad=0#v=onepage&q&f=false

Matar, S., & Hatch, L. (2000a). *Chemistry of PETROCHEMICAL PROCESSES*

(segunda). Gulf Publishing Company. Recuperado el 27 de Enero del 2021.

[https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=wp5ZV7BQU1UC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Matar,+S.,+%26+Hatch,+L.+\(2000a\).+Chemistry+of+PETROCHEMICAL+PROCESSES+\(segunda\).+Gulf+Publishing+Company.&ots=GH4WMvP\\_PP&sig=Gsfu0jV VNxq8JwCML2jpZV1RcX0#v=onepage&q&f=false](https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=wp5ZV7BQU1UC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Matar,+S.,+%26+Hatch,+L.+(2000a).+Chemistry+of+PETROCHEMICAL+PROCESSES+(segunda).+Gulf+Publishing+Company.&ots=GH4WMvP_PP&sig=Gsfu0jV VNxq8JwCML2jpZV1RcX0#v=onepage&q&f=false)

Matar, S., & Hatch, L. F. (2000b). *Chemistry of Petrochemical Processes (second)*. Gulf Publishing Company. Recuperado el 27 de Enero del 2021.

[https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=wp5ZV7BQU1UC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Matar,+S.,+%26+Hatch,+L.+\(2000a\).+Chemistry+of+PETROCHEMICAL+PROCESSES+\(segunda\).+Gulf+Publishing+Company.&ots=GH4WMvP\\_PP&sig=Gsfu0jV VNxq8JwCML2jpZV1RcX0#v=onepage&q&f=false](https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=wp5ZV7BQU1UC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Matar,+S.,+%26+Hatch,+L.+(2000a).+Chemistry+of+PETROCHEMICAL+PROCESSES+(segunda).+Gulf+Publishing+Company.&ots=GH4WMvP_PP&sig=Gsfu0jV VNxq8JwCML2jpZV1RcX0#v=onepage&q&f=false)

Mohamed, A., Fahim, T. A., & Al-Sahhaf, A. E. (2010). *Fundamentals of Petroleum Refining* (p. 484). Elsevier. Recuperado el 6 de Febrero del 2021.

[https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=UcFsv1mMFHIC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Mohamed,+A.,+Fahim,+T.+A.,+%26+Al-Sahhaf,+A.+E.+\(2010\).+Fundamentals+of+Petroleum+Refining+\(p.+484\).+Elsevier.&ots=E25mj\\_uDpA&sig=cKO1WLJg\\_ngW-jyqtFwC\\_lhFCyc#v=onepage&q&f=false](https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=UcFsv1mMFHIC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Mohamed,+A.,+Fahim,+T.+A.,+%26+Al-Sahhaf,+A.+E.+(2010).+Fundamentals+of+Petroleum+Refining+(p.+484).+Elsevier.&ots=E25mj_uDpA&sig=cKO1WLJg_ngW-jyqtFwC_lhFCyc#v=onepage&q&f=false)

Morrison, R. T., & Boyd, R. N. (1998). *QUÍMICA ORGÁNICA* (quinta). Addison Wesley Longman. Recuperado el 11 de Febrero del 2021.

[https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=3b2Yk\\_dzH70C&oi=fnd&pg=PA1&dq=Morrison,+R.+T.,+%26+Boyd,+R.+N.+\(1998\).+QU%C3%8DMICA+ORG%C3%81NICA+\(quinta\).+Addison+Wesley+Longman.&ots=Rurb2nOXSw&sig=aYI58H7oxTnw](https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=3b2Yk_dzH70C&oi=fnd&pg=PA1&dq=Morrison,+R.+T.,+%26+Boyd,+R.+N.+(1998).+QU%C3%8DMICA+ORG%C3%81NICA+(quinta).+Addison+Wesley+Longman.&ots=Rurb2nOXSw&sig=aYI58H7oxTnw)

8\_QF74D5NgG37zQ#v=onepage&q&f=false

- Raiyn, J., & Rayan, A. (2015). How Chemicals' Drawing and Modeling Improve Chemistry Teaching in Colleges of Education. Recuperado el 21 de Enero del 2021. *World Journal of Chemical Education*, 3(1), 1–4.  
<https://doi.org/10.12691/wjce-3-1-1>
- Rayan, B., & Rayan, A. (2017). Avogadro Program for Chemistry Education: To What Extent can Molecular Visualization and Three-dimensional Simulations Enhance Meaningful Chemistry Learning. Recuperado el 10 de Marzo del 2021. *World Journal of Chemical Education*, 5(4), 136–141. <https://doi.org/10.12691/wjce-5-4-4>
- Riazi, M. R. (2005). *Characterization and Properties of Petroleum Fractions* (First edit). ASTM International. Recuperado el 19 de Marzo del 2021.  
[https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=9CCusIFh47cC&oi=fnd&pg=PR16&dq=Riazi,+M.+R.+\(2005\).+Characterization+and+Properties+of+Petroleum+Fractions+\(First+edit\).+ASTM+International.&ots=jAYrUpX\\_CG&sig=2gQbGFaDLvmxxhLNMd6Vel4pA4c#v=onepage&q=Riazi%2C%20M.%20R.%20\(2005\).%20Characterization%20and%20Properties%20of%20Petroleum%20Fractions%20\(First%20edit\).%20ASTM%20International.&f=false](https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=9CCusIFh47cC&oi=fnd&pg=PR16&dq=Riazi,+M.+R.+(2005).+Characterization+and+Properties+of+Petroleum+Fractions+(First+edit).+ASTM+International.&ots=jAYrUpX_CG&sig=2gQbGFaDLvmxxhLNMd6Vel4pA4c#v=onepage&q=Riazi%2C%20M.%20R.%20(2005).%20Characterization%20and%20Properties%20of%20Petroleum%20Fractions%20(First%20edit).%20ASTM%20International.&f=false)
- Simanzhenkov, V., & Idem, R. (2003). *Crude Oil Chemistry*. Marcel Dekker, Inc. Recuperado el 25 de Marzo del 2021. <https://doi.org/10.1201/9780203014042>
- Speight, J., & Wyoming, L. (2006a). *The Chemistry and Technology of Petroleum* (Fourth Edi). CRC Press. Recuperado el 8 de Marzo del 2021.  
<https://doi.org/10.1201/9780824742119>
- Speight, J., & Wyoming, L. (2006b). *The Chemistry and Technology of Petroleum* (Fourth). CRC Press. Recuperado el 8 de Marzo del 2021.

<https://doi.org/10.1201/9780824742119>

- Suárez, D. (2012). Objetivos y características de la química computacional y su aplicación al estudio de los materiales de carbono. Recuperado el 6 de Marzo del 2021. *Boletín Del Grupo Español Del Carbón*, 25, 23–28.  
[https://digital.csic.es/bitstream/10261/81892/1/boletinGEC\\_025\\_art.4\\_Su%C3%A1r ez.pdf](https://digital.csic.es/bitstream/10261/81892/1/boletinGEC_025_art.4_Su%C3%A1r ez.pdf)
- Tovar, J., & Grande, J. (2019). *PRUEBAS DE SOLUBILIDAD*. Recuperado el 29 de Marzo del 2021.
- Valencia, D., & García, I. (2010). La química computacional, una herramienta útil en la industria del petróleo. *Qei*, 38–43. Recuperado el 10 de Febrero del 2021.  
<http://www.xrqtc.org/wp-content/uploads/2014/07/petroquimicaqei591.pdf>
- Verruschi, E., Padron, J., Moreno, T. L., & Angulo, W. (2009). Cómo planificar óptimamente la cadena de suministros de una refinería de petróleo. *Universidad, Ciencia y Tecnología*, 13(53), 339–344. Recuperado el 22 de Enero del 2021.  
[http://ve.scielo.org/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1316-48212009000400008](http://ve.scielo.org/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1316-48212009000400008)
- Wade, L. (2011). *Química Orgánica* (7th ed.). Pearson Educación. Recuperado el 21 de Marzo del 2021.
- Wade, L. G. (2012). *Química Orgánica Volumen 1*. Pearson Educación. Recuperado el 21 de Marzo del 2021.
- Wauquier, J.-P. (1995). *PETROLEUM REFINING V.1: Crude Oil. Petroleum Products. Process Flowsheets* (p. 471). Recuperado el 27 de Enero del 2021.  
<http://books.google.com/books?id=9rq1Jdy3CTUC&pgis=1>

# Anexos