

“Si quieres triunfar no te quedes mirando la escalera. Empieza a subir, escalón por escalón, hasta que llegues arriba”

Anónimo



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA



DEPARTAMENTO DE ENERGÍA Y MECÁNICA

INGENIERÍA PETROQUÍMICA

TEMA:

“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”.

**AUTOR: RODRIGUEZ OÑATE, DANNY ALEXANDER
TAPIA TAPIA, ERIKA GABRIELA**

DIRECTOR: DR. SANTANA ROMO, FABIÁN MAURICIO

LATACUNGA, 2021



INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

DISCUSIÓN DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES



APARTADO 1: Introducción

Petróleo



Tabla 2 Composición elemental de petróleo crudo

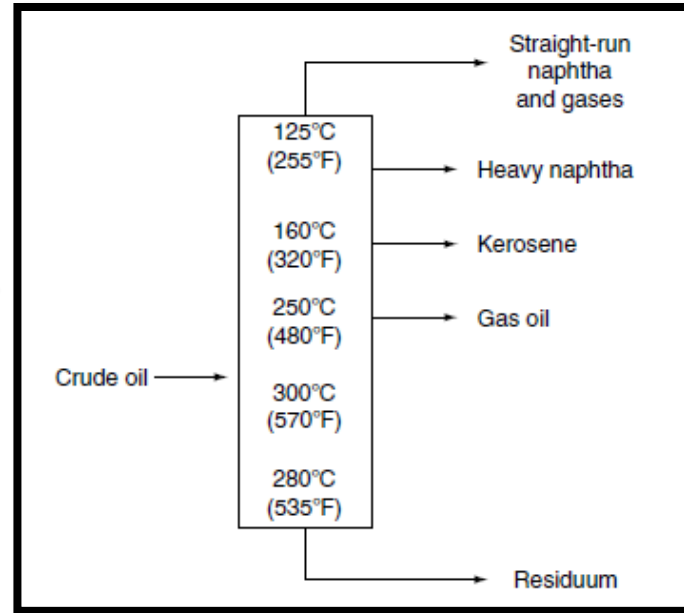
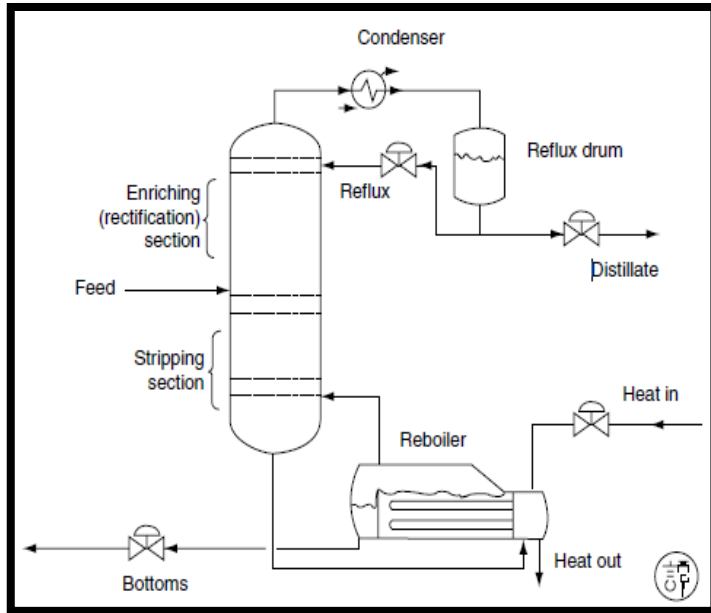
Elemento	Composición (%w)
Carbono	83 – 87
Hidrogeno	10 – 14
Azufre	0,05 – 6
Nitrógeno	0,1 – 0,2
Oxigeno	0,05 – 2
Niquel	< 120 ppm
Vanadio	< 1200 ppm

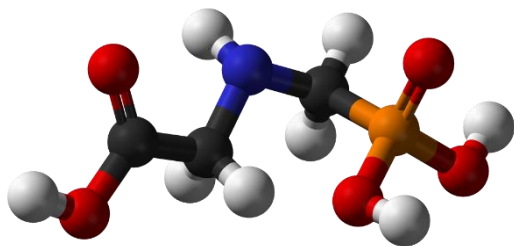
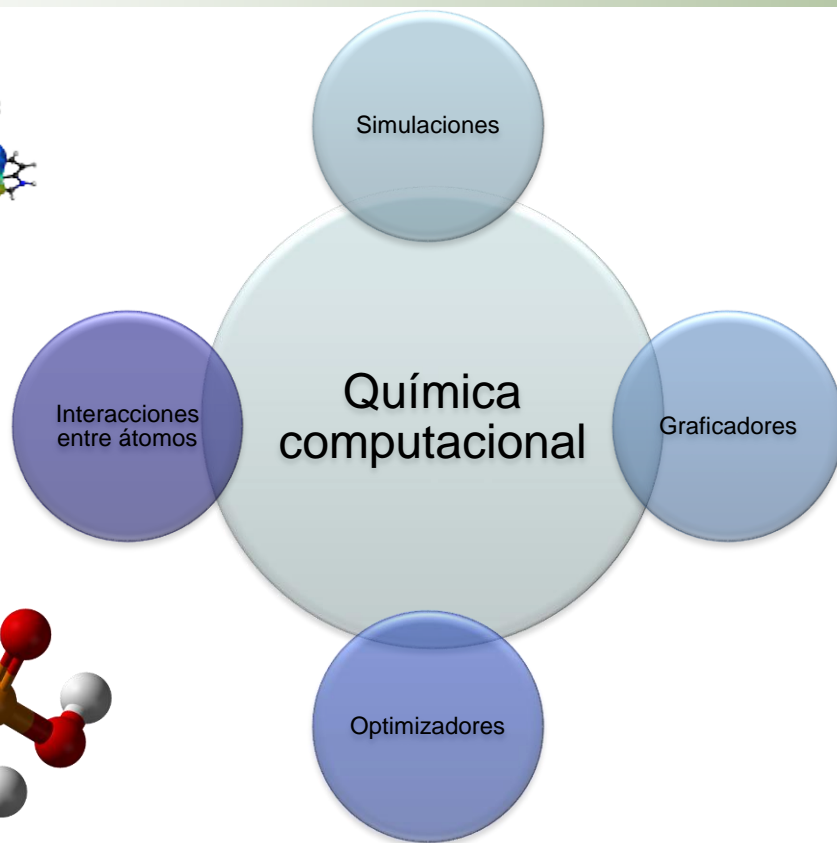
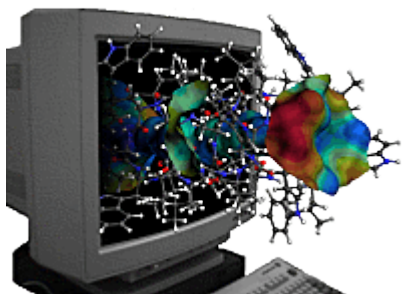
Nota. Tomado de (Fahim et al., 2010).



Destilación atmosférica

“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.”





APARTADO 2: Objetivos

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.



APARTADO 2: Objetivos

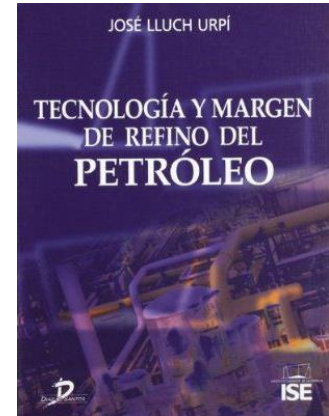
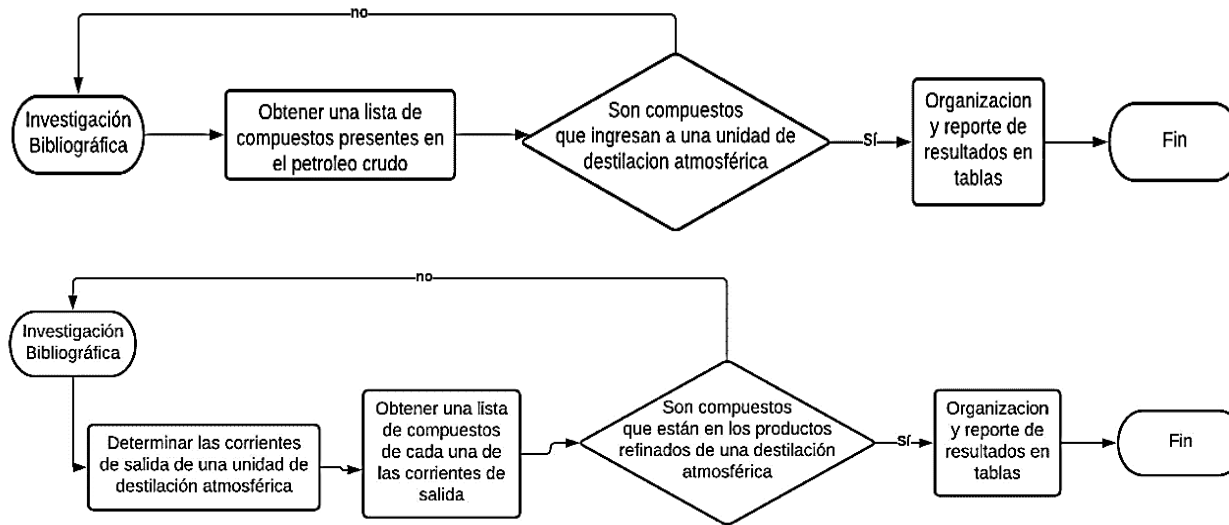
Específicos

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



APARTADO 3: Metodología

Diagrama de flujo para la obtención de moléculas orgánicas presentes en la corriente de entrada y salida de un proceso de destilación atmosférica.



Autores

Simanzhenkov

Antos

Bacosa

Creton



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

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

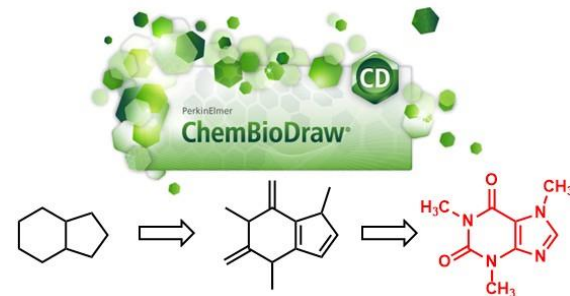
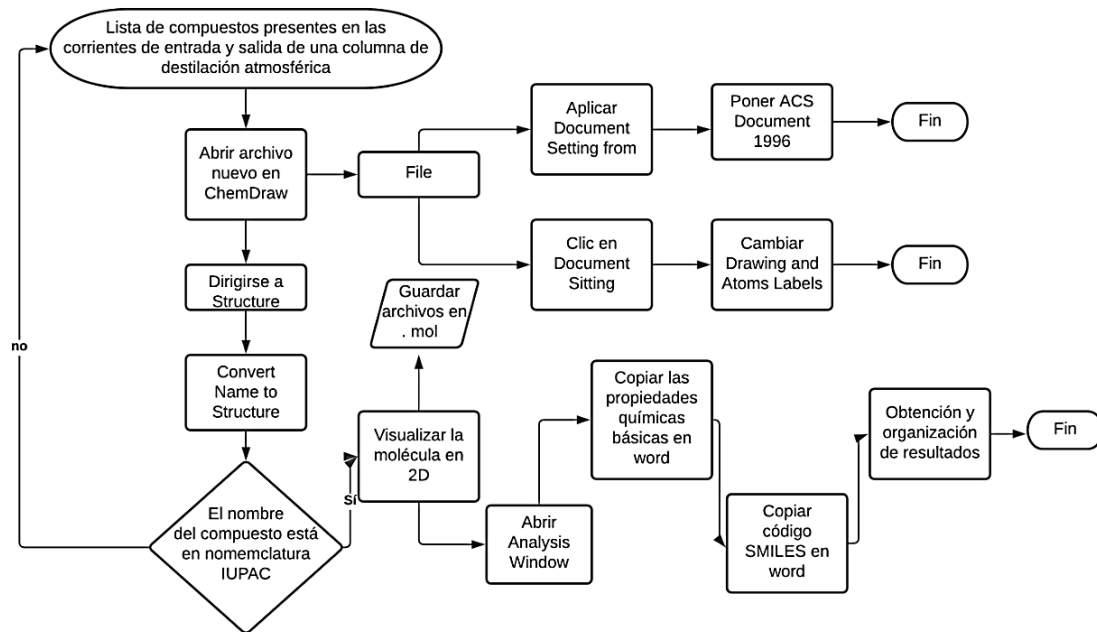


Diagrama de flujo para la obtención de propiedades fisicoquímicas, lipofilia, solubilidad en el agua y radar de biodisponibilidad

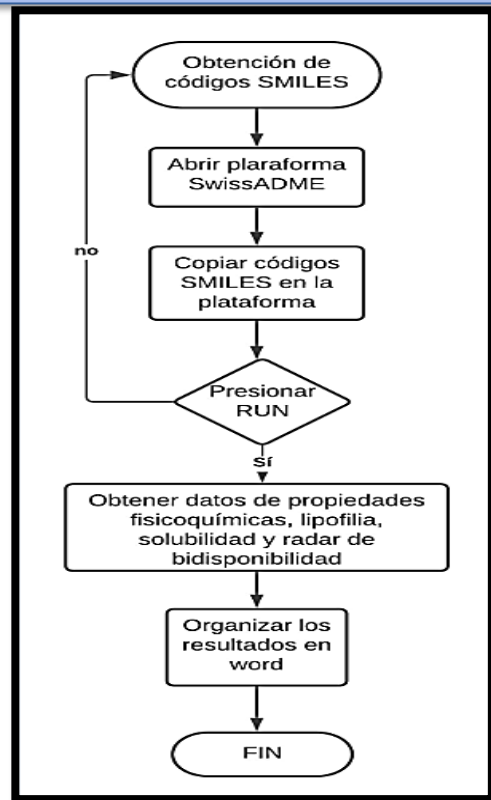
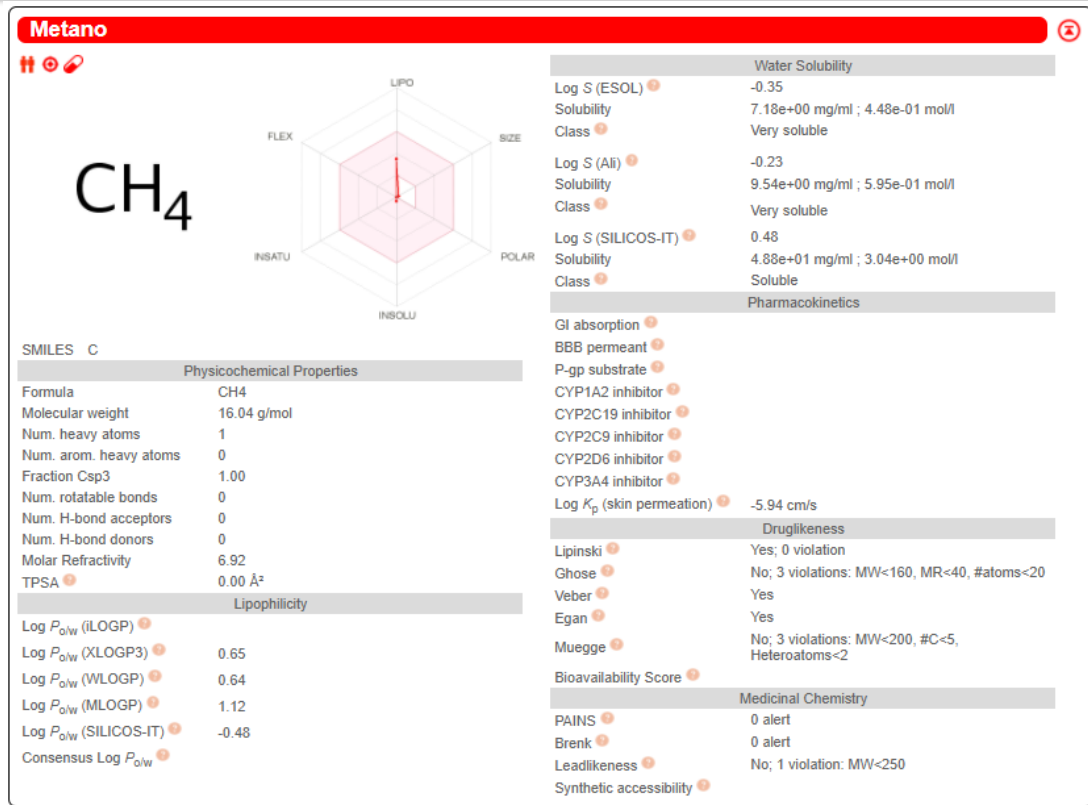
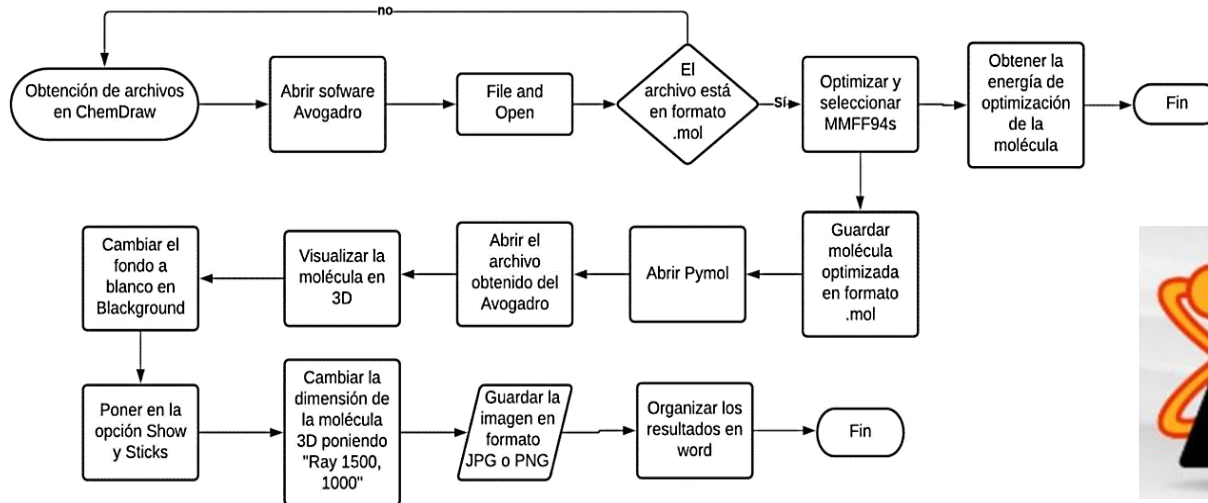


Diagrama de flujo para la optimización y visualización de la molécula en 3D



APARTADO 4: Discusión de resultados

Corriente de entrada (Crudo de petróleo)

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.



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

Piridina

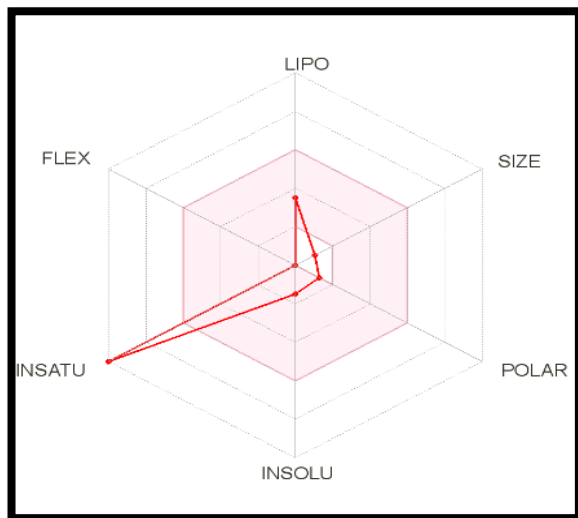


Tabla 54 Propiedades fisicoquímicas de la molécula de piridina

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^3	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^2

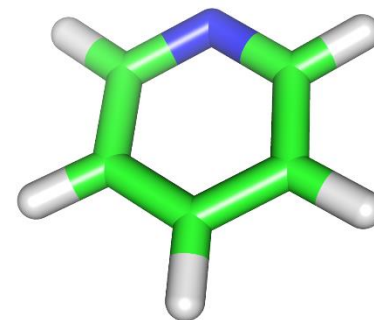
Nota. Tomado de la plataforma web SwissADME.



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

Nota. Tomado de la plataforma web SwissADME.



Energía de optimización =
64,9935 KJ/mol.

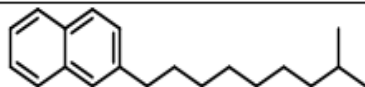


ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

APARTADO 4: Discusión de resultados

Corriente de salida

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=C2C=CC=CC2=C1</chem>

Nota. Tomado de ChemDraw.



dimetil-3-naftiloctano

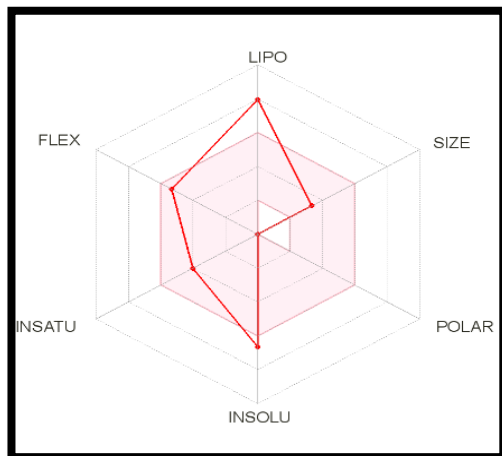


Tabla 86 Propiedades fisicoquímicas de la molécula de dimetil-3-naftiloctano

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 ³	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 ²

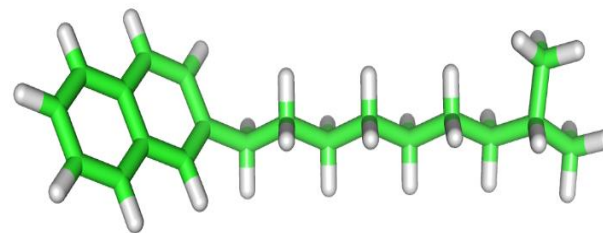
Nota. Tomado de la plataforma web SwissADME.



Tabla 87 Lipofilicidad y solubilidad del agua de la mólécula 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

Nota. Tomado de la plataforma web SwissADME.



Energía de optimización =
153,529 KJ/mol.



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

APARTADO 5: Conclusiones

Se concluyó 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.

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, es directamente proporcional al peso molecular del componente.

Se observó que existen moléculas orgánicas que necesitan de una energía de optimización negativa dado que son espontaneas, así como también de otras moléculas que utilizan una energía de optimización positiva ya que requieren de calor o energía para ser optimizadas.



APARTADO 5: Conclusiones

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.



APARTADO 5: 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, entre otros.



Gracias por su atención



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA



DEPARTAMENTO DE ENERGÍA Y MECÁNICA

INGENIERÍA PETROQUÍMICA

TEMA:

“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”.

**AUTOR: RODRIGUEZ OÑATE, DANNY ALEXANDER
TAPIA TAPIA, ERIKA GABRIELA**

DIRECTOR: DR. SANTANA ROMO, FABIÁN MAURICIO

LATACUNGA, 2021

