



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

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

Vaca Pérez, Juan Pablo y Yugcha Casa, Edwin Javier

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, 20 de abril de 2021



**DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA 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 “ISOMERIZACIÓN CATALÍTICA” 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: **Vaca Pérez, Juan Pablo y Yugcha Casa, Edwin Javier**, el cual han sido revisado y analizado en su totalidad por la herramienta de verificación de similitud de contenido; por lo tanto, cumple con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que lo sustente públicamente.

Latacunga, abril de 2021



Firmado electrónicamente por:
FABIAN
MAURICIO
SANTANA ROMO

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.

Análisis Urkund



Document Information

Analyzed document	Isomerización catalítica.pdf (D101193767)
Submitted	4/10/2021 3:34:00 PM
Submitted by	Fabián Santana
Submitter email	fmsantana@espe.edu.ec
Similarity	3%
Analysis address	fmsantana.espe@analysis.orkund.com



Firmado electrónicamente por:
**FABIAN
 MAURICIO
 SANTANA ROMO**

Sources included in the report

W	URL: https://core.ac.uk/download/pdf/71029632.pdf Fetched: 11/22/2020 6:37:34 AM	1
W	URL: https://www.slideshare.net/luismigellazarodelao/libro-de-quimica-organica Fetched: 8/11/2020 3:12:09 PM	1
W	URL: https://es.slideshare.net/xiuhts/01-a-l-c-a-n-o-s Fetched: 3/14/2020 3:02:38 AM	7
W	URL: https://sb7f3087ea460c28b.jimcontent.com/download/version/1361551211/module/671942 ... Fetched: 4/10/2021 3:35:00 PM	2
W	URL: https://peralta18.files.wordpress.com/2011/12/quimica-organica-marcano-cap-3-1.pdf Fetched: 12/12/2020 2:48:34 AM	8
SA	submission.pdf Document submission.pdf (D77014949)	1



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
CARRERA DE PETROQUÍMICA

Responsabilidad de autoría

Nosotros, **Vaca Pérez, Juan Pablo** con cedula de ciudadanía N° **180463042-2** y **Yugcha Casa, Edwin Javier** con cedula de ciudadanía N° **050258384-2**, declaramos que el contenido, ideas y criterios de la Unidad de Integración Curricular: **“ESTUDIO IN SILICO, TEÓRICO COMPUTACIONAL DE LAS CORRIENTES DE INGRESO Y SALIDA DE UNA REFINERÍA DE PETRÓLEO ENFOCADO EN EL PROCESO DE “ISOMERIZACIÓN CATALÍTICA” CON ÉNFASIS EN LAS ESTRUCTURAS QUÍMICAS INDIVIDUALES PARA CADA FLUJO, Y EL ANÁLISIS DE SUS PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS INTRÍNSECAS, CONFIGURACIONES, CONFORMACIONES Y POTENCIALES INTERACCIONES INTERMOLECULARES ENTRE SÍ”** es de nuestra autoría y responsabilidad, cumpliendo con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, respetando los derechos intelectuales de terceros y referenciando las citas bibliográficas.

Latacunga, 14 de abril de 2021.

Vaca Pérez, Juan Pablo
C. C.: 1804630422

Yugcha Casa, Edwin Javier
C. C.: 0502583842



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
CARRERA DE PETROQUÍMICA

Autorización de publicación

Nosotros, **Vaca Pérez, Juan Pablo** con cedula de ciudadanía N° **1804630422** y **Yugcha Casa, Edwin Javier** con cedula de ciudadanía N° **050258384-2**, 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 “ISOMERIZACIÓN CATALÍTICA” CON ÉNFASIS EN LAS ESTRUCTURAS QUÍMICAS INDIVIDUALES PARA CADA FLUJO, Y EL ANÁLISIS DE SUS PROPIEDADES FISCOQUÍMICAS INTRÍNSECAS, CONFIGURACIONES, CONFORMACIONES Y POTENCIALES INTERACCIONES INTERMOLECULARES ENTRE SÍ”**: en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de nuestra autoría son de mi responsabilidad.

Latacunga, abril 2021.

Una firma manuscrita en tinta azul que parece decir "Juan Pablo Vaca Pérez".

Vaca Pérez, Juan Pablo
C. C.: 1804630422

Una firma manuscrita en tinta azul que parece decir "Edwin Javier Yugcha Casa".

Yugcha Casa, Edwin Javier
C. C.: 0502583842

Dedicatoria

Este proyecto va dedicado a nuestros padres, hermanos, familiares y amigos que han sido parte vital en este proceso, ellos son quienes nos dieron grandes enseñanzas y son los principales influyentes para lograr este sueño.

Agradecimiento

Queremos agradecer a Dios por cuidarnos, a nuestros padres y familiares que nos han apoyado, brindándonos consejos para poder cumplir un objetivo más en nuestras vidas. Por otra parte, queremos brindar nuestro sincero agradecimiento a todos y cada uno de los docentes que han formado parte de nuestra formación académica.

Tabla de contenidos

Carátula	1
Certificación	2
Análisis Urkund	3
Responsabilidad de autoría	4
Autorización de publicación.....	5
Dedicatoria.....	1
Agradecimiento	2
Índice de tablas.....	11
Índice de figuras.....	16
Resumen.....	24
Abstract.....	25
Generalidades.....	30
Introducción.....	30
Planteamiento del problema.....	30
Justificación e importancia.....	31
Objetivos.....	32
<i>Objetivo general.....</i>	<i>32</i>
<i>Objetivos específicos</i>	<i>32</i>
Variables de investigación.....	32
<i>Variables independientes</i>	<i>32</i>
<i>Variables dependientes</i>	<i>32</i>
Fundamentación teórica.....	33
El petróleo.....	33
Refinería.....	33

<i>Destilación atmosférica</i>	34
<i>Isomerización catalítica</i>	35
Proceso Butamer UOP	37
Proceso UOP Penex	38
Proceso One-through	40
Proceso Penex con reciclo Molex UOP	42
Penex con Desisohexanizer Sidecut Recycle	43
Proceso de isomerización zeolítica Once-Through UOP	45
Proceso TIP	47
Unidad de isomerización Par-Isom	49
Química computacional	51
Término in silico	52
Propiedades fisicoquímicas	52
<i>Nomenclatura IUPAC</i>	52
<i>Peso molecular</i>	53
<i>Análisis elemental</i>	53
<i>Fórmula química</i>	53
<i>Fórmula molecular</i>	54
<i>Fórmulas de líneas y ángulos</i>	54
<i>Átomos pesados en una estructura química</i>	54
<i>Hibridación sp³</i>	55
<i>Enlaces rotables</i>	55
<i>Aceptores y donantes de hidrógeno</i>	55
<i>Refractividad molar (RM)</i>	56
<i>Área de superficie polar (PSA)</i>	56

<i>Coefficiente de partición octanol/agua (Lipofilia)</i>	56
<i>Solubilidad en agua</i>	56
Campos de fuerza	57
<i>UFF</i>	57
<i>GAFF</i>	57
<i>MMFF94</i>	57
<i>MMFF94s</i>	57
Fuerzas Intermoleculares	58
<i>Fuerzas dipolo – dipolo</i>	58
<i>Fuerzas ion – dipolo</i>	58
<i>Fuerzas de dispersión</i>	59
<i>Enlaces de hidrógeno</i>	60
Metodología de desarrollo del proyecto	61
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de isomerización catalítica	61
<i>Búsqueda de datos internacionales</i>	61
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	61
Procesamiento y obtención de estructuras químicas 2D y propiedades químicas básicas	62
<i>Generación de estructuras químicas en 2D</i>	62
<i>Procesamiento de propiedades básicas</i>	63
<i>Generación automática de nomenclatura IUPAC</i>	64
<i>Generación automática del código SMILES</i>	65
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	66
Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas	66
<i>Estudio de la interfaz de la plataforma “SwissADME”</i>	66

<i>Procesamiento a través del código SMILES</i>	66
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	68
Cálculo y obtención de estructuras 3D	68
<i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D</i>	68
<i>Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas.</i>	69
<i>Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas optimizadas</i>	70
<i>Reporte la energía de optimización</i>	72
<i>Obtención, organización y reporte de resultados</i>	72
Resultados y discusión	73
Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en los flujos de entrada y salida en el proceso de isomerización catalítica	73
<i>Búsqueda de datos internacionales</i>	73
Procesamiento y obtención de estructuras químicas 2D y propiedades químicas básicas	74
<i>Generación de estructuras químicas en 2D</i>	74
<i>Procesamiento de propiedades básicas.</i>	75
<i>Propiedades químicas básicas del hidrógeno.</i>	76
<i>Propiedades químicas básicas del metano.</i>	76
<i>Propiedades químicas básicas del etano.</i>	76
<i>Propiedades químicas básicas del n-propano.</i>	77
<i>Propiedades químicas básicas del isobutano.</i>	77
<i>Propiedades químicas básicas del n-butano.</i>	78
<i>Propiedades químicas básicas del isopentano.</i>	78
<i>Propiedades químicas básicas del 2,2-dimetilbutano.</i>	79
<i>Propiedades químicas básicas del 2,3-dimetilbutano.</i>	79
<i>Propiedades químicas básicas del n-pentano.</i>	80

<i>Propiedades químicas básicas del 2-metilpentano.....</i>	<i>80</i>
<i>Propiedades químicas básicas del 3-metilpentano.....</i>	<i>81</i>
<i>Propiedades químicas básicas del n-hexano.....</i>	<i>81</i>
<i>Propiedades químicas básicas del 2-metilhexano.....</i>	<i>82</i>
<i>Propiedades químicas básicas del 2,2-dimetilhexano.....</i>	<i>82</i>
<i>Propiedades químicas básicas del 2,3-dimetilhexano.....</i>	<i>83</i>
<i>Propiedades químicas básicas del n-heptano.....</i>	<i>83</i>
<i>Propiedades químicas del ciclopentano.</i>	<i>84</i>
<i>Propiedades químicas básicas del metilciclopentano.</i>	<i>84</i>
<i>Propiedades químicas básicas del benceno.....</i>	<i>85</i>
<i>Propiedades químicas básicas del ciclohexano.....</i>	<i>85</i>
Generación automática de nomenclatura IUPAC.....	86
Generación automática del código SMILES.....	87
Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas	88
<i>Propiedades fisicoquímicas del hidrógeno.</i>	<i>88</i>
<i>Propiedades fisicoquímicas del metano.....</i>	<i>91</i>
<i>Propiedades fisicoquímicas del etano.</i>	<i>94</i>
<i>Propiedades fisicoquímicas del propano.</i>	<i>96</i>
<i>Propiedades fisicoquímicas del isobutano.....</i>	<i>99</i>
<i>Propiedades fisicoquímicas del n-butano.</i>	<i>101</i>
<i>Propiedades fisicoquímicas del isopentano.</i>	<i>104</i>
<i>Propiedades fisicoquímicas del 2,2-dimetilbutano.....</i>	<i>106</i>
<i>Propiedades fisicoquímicas del 2,3-dimetilbutano.....</i>	<i>109</i>
<i>Propiedades fisicoquímicas del n-pentano.</i>	<i>111</i>
<i>Propiedades fisicoquímicas del 2-metilpentano.</i>	<i>114</i>

<i>Propiedades fisicoquímicas del 3-metilpentano.</i>	117
<i>Propiedades fisicoquímicas del n-hexano.</i>	119
<i>Propiedades fisicoquímicas del 2-metilhexano.</i>	122
<i>Propiedades fisicoquímicas del 2,2-dimetilhexano.</i>	124
<i>Propiedades fisicoquímicas del 2,3-dimetilhexano.</i>	127
<i>Propiedades fisicoquímicas del n-heptano.</i>	129
<i>Propiedades fisicoquímicas del ciclopentano.</i>	132
<i>Propiedades fisicoquímicas del metilciclopentano.</i>	134
<i>Propiedades fisicoquímicas del benceno.</i>	137
<i>Propiedades fisicoquímicas del ciclohexano.</i>	140
Cálculo y obtención de estructuras 3D	142
<i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D</i>	142
Hidrógeno	142
Metano	143
Etano	144
Propano.....	146
Isobutano	147
n-Butano.....	149
Isopentano.....	150
2,2-Dimetilbutano.....	151
2,3-Dimetilbutano.....	153
n-Pentano.....	154
2-Metilpentano	156
3-Metilpentano	157
n-Hexano.....	159

2-Metilhexano.....	160
2,2-Dimetilhexano	162
2,3-Dimetilhexano	164
n-Heptano	165
Ciclopentano.....	167
Metilciclopentano.....	168
Benceno	170
Ciclohexano	171
<i>Elaboración de archivos con coordenadas 3D optimizadas</i>	<i>173</i>
Hidrógeno	173
Metano	174
Etano	175
Propano.....	177
Isobutano	179
n-Butano.....	181
Isopentano.....	182
2,2-Dimetilbutano.....	184
2,3-Dimetilbutano.....	186
n-Pentano.....	188
2-Metilpentano	190
3-Metilpentano	192
n-Hexano.....	194
2-Metilhexano.....	196
2,2-Dimetilhexano	198
2,3-Dimetilhexano	200

n-Heptano	203
Ciclopentano	205
Metilciclopentano	206
Benceno	208
Ciclohexano	210
<i>Reporte de Energías de minimización</i>	212
Conclusiones	214
Bibliografía	216
Anexos	218

Índice de tablas

Tabla 1. <i>Composición típica de la alimentación en el proceso BenSat</i>	36
Tabla 2. <i>Estimación de las corrientes del Proceso Butamer UOP</i>	38
Tabla 3. <i>Estimación de las corrientes del Proceso Penex UOP</i>	40
Tabla 4. <i>Rendimientos típicos estimados para el Proceso One-through</i>	41
Tabla 5. <i>Estimación de corrientes del Proceso Penex con reciclaje Molex UOP</i>	43
Tabla 6. <i>Estimación de corrientes del Penex con Desisohexanizer Sidecut Recycle</i>	45
Tabla 7. <i>Estimación de corrientes del Proceso de isomerización zeolítica UOP</i>	47
Tabla 8. <i>Estimación de corrientes del Proceso TIP</i>	49
Tabla 9. <i>Estimación de corrientes de la Unidad de isomerización Par-Isom</i>	51
Tabla 10. <i>Compuesto de la corriente de entrada al proceso de isomerización catalítica</i>	73
Tabla 11. <i>Estructuras químicas 2D de los compuestos de las corrientes de entrada y salida del proceso de isomerización catalítica</i>	74
Tabla 12. <i>Propiedades químicas básicas del hidrógeno</i>	76
Tabla 13. <i>Propiedades químicas básicas del metano</i>	76
Tabla 14. <i>Propiedades químicas básicas del etano</i>	77
Tabla 15. <i>Propiedades químicas básicas del propano</i>	77
Tabla 16. <i>Propiedades químicas básicas del isobutano</i>	78
Tabla 17. <i>Propiedades químicas básicas del n-butano</i>	78
Tabla 18. <i>Propiedades químicas básicas del isopentano</i>	79
Tabla 19. <i>Propiedades químicas básicas del 2,2-dimetilbutano</i>	79
Tabla 20. <i>Propiedades químicas básicas del 2,3-dimetilbutano</i>	80
Tabla 21. <i>Propiedades químicas básicas del n-pentano</i>	80
Tabla 22. <i>Propiedades químicas básicas del 2-metilpentano</i>	81
Tabla 23. <i>Propiedades químicas básicas del 3-metilpentano</i>	81
Tabla 24. <i>Propiedades químicas básicas del n-hexano</i>	82
Tabla 25. <i>Propiedades químicas básicas del 2-metilhexano</i>	82
Tabla 26. <i>Propiedades químicas básicas del 2,2-dimetilhexano</i>	83
Tabla 27. <i>Propiedades químicas básicas del 2,3-dimetilhexano</i>	83
Tabla 28. <i>Propiedades químicas básicas del n-heptano</i>	84
Tabla 29. <i>Propiedades químicas básicas del ciclopentano</i>	84

Tabla 30. <i>Propiedades químicas básicas del metilciclopentano</i>	85
Tabla 31. <i>Propiedades químicas básicas del benceno</i>	85
Tabla 32. <i>Propiedades químicas básicas del ciclohexano</i>	86
Tabla 33. <i>Nombre de los compuestos en nomenclatura IUPAC</i>	86
Tabla 34. <i>Códigos SMILES de los compuestos</i>	87
Tabla 35. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de hidrógeno</i>	89
Tabla 36. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de hidrógeno</i>	90
Tabla 37. <i>Solubilidad en agua para la molécula de hidrógeno</i>	90
Tabla 38. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de metano</i>	92
Tabla 39. <i>Reporte de Lipofilia para la molécula de metano</i>	93
Tabla 40. <i>Solubilidad en agua de la molécula de metano</i>	93
Tabla 41. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de etano</i>	94
Tabla 42. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de etano</i>	95
Tabla 43. <i>Solubilidad en agua de la molécula de etano</i>	96
Tabla 44. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de propano</i>	97
Tabla 45. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de propano</i>	98
Tabla 46. <i>Solubilidad en agua de la molécula de propano</i>	98
Tabla 47. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de isobutano</i>	99
Tabla 48. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de isobutano</i>	100
Tabla 49. <i>Solubilidad en agua de la molécula de isobutano</i>	101
Tabla 50. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de n-butano</i>	102
Tabla 51. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de n-butano</i>	103
Tabla 52. <i>Solubilidad en agua de la molécula de n-butano</i>	103
Tabla 53. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de isopentano</i>	104
Tabla 54. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de isopentano</i>	105
Tabla 55. <i>Solubilidad en agua de la molécula de isopentano</i>	106
Tabla 56. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 2,2-dimetilbutano</i>	107
Tabla 57. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de 2,2-dimetilbutano</i>	108
Tabla 58. <i>Solubilidad en agua de la molécula de 2,2-dimetilbutano</i>	108
Tabla 59. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 2,3-dimetilbutano</i>	109
Tabla 60. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de 2,3-dimetilbutano</i>	110

Tabla 61. <i>Solubilidad en agua de la molécula de 2,3-dimetilbutano</i>	111
Tabla 62. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de n-pentano</i>	112
Tabla 63. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de n-pentano</i>	113
Tabla 64. <i>Solubilidad en agua de la molécula de n-pentano</i>	114
Tabla 65. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 2-metilpentano</i>	115
Tabla 66. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de 2-metilpentano</i>	116
Tabla 67. <i>Solubilidad en agua de la molécula de 2-metilpentano</i>	116
Tabla 68. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 3-metilpentano</i>	117
Tabla 69. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de 3-metilpentano</i>	118
Tabla 70. <i>Solubilidad en agua de la molécula de 3-metilpentano</i>	119
Tabla 71. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de n-hexano</i>	120
Tabla 72. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de n-hexano</i>	121
Tabla 73. <i>Solubilidad en agua de la molécula de n-hexano</i>	121
Tabla 74. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 2-metilhexano</i>	122
Tabla 75. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de 2-metilhexano</i>	123
Tabla 76. <i>Solubilidad en agua de la molécula de 2-metilhexano</i>	124
Tabla 77. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 2,2-dimetilhexano</i>	125
Tabla 78. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de 2,2-dimetilhexano</i>	126
Tabla 79. <i>Solubilidad en agua de la molécula de 2,2-dimetilhexano</i>	126
Tabla 80. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 2,3-dimetilhexano</i>	127
Tabla 81. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de 2,3-dimetilhexano</i>	128
Tabla 82. <i>Solubilidad en agua de la molécula de 2,3-dimetilhexano</i>	129
Tabla 83. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de n-heptano</i>	130
Tabla 84. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de n-heptano</i>	131
Tabla 85. <i>Solubilidad en agua de la molécula de n-heptano</i>	131
Tabla 86. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de ciclopentano</i>	132
Tabla 87. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de ciclopentano</i>	133
Tabla 88. <i>Solubilidad en agua de la molécula de ciclopentano</i>	134
Tabla 89. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de metilciclopentano</i>	135
Tabla 90. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de metilciclopentano</i>	136
Tabla 91. <i>Solubilidad en agua de la molécula de metilciclopentano</i>	137

Tabla 92. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de benceno</i>	138
Tabla 93. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de benceno</i>	139
Tabla 94. <i>Solubilidad en agua de la molécula de benceno</i>	139
Tabla 95. <i>Propiedades fisicoquímicas para la molécula de ciclohexano</i>	140
Tabla 96. <i>Reporte de lipofilia para la molécula de ciclohexano</i>	141
Tabla 97. <i>Solubilidad en agua de la molécula de ciclohexano</i>	142
Tabla 98. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de hidrógeno</i>	143
Tabla 99. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de metano</i>	144
Tabla 100. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de etano</i>	145
Tabla 101. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de propano</i>	147
Tabla 102. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de isobutano</i>	148
Tabla 103. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de n-butano</i>	150
Tabla 104. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de isopentano</i>	151
Tabla 105. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 2,2-dimetilbutano</i>	153
Tabla 106. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 2,3-dimetilbutano</i>	154
Tabla 107. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de n-pentano</i>	156
Tabla 108. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 2-metilpentano</i>	157
Tabla 109. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 3-metilpentano</i>	159
Tabla 110. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de n-hexano</i>	160
Tabla 111. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 2-metilhexano</i>	162
Tabla 112. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 2,2-dimetilhexano</i>	163
Tabla 113. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 2,3-dimetilhexano</i>	165
Tabla 114. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de n-heptano</i>	166
Tabla 115. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de ciclopentano</i>	168
Tabla 116. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de metilciclopentano</i>	170
Tabla 117. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de benceno</i>	171
Tabla 118. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de ciclohexano</i>	173
Tabla 119. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de hidrógen</i>	174
Tabla 120. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de metano</i>	175
Tabla 121. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de etano</i>	177
Tabla 122. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de propano</i>	178

Tabla 123. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de isobutano</i>	180
Tabla 124. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de n-butano</i>	.182
Tabla 125. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de isopentano</i> 184
Tabla 126. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 2,2-dimetilbutano</i>185
Tabla 127. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 2,3-dimetilbutano</i>187
Tabla 128. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de n-pentano</i>189
Tabla 129. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 2-metilpentano</i>191
Tabla 130. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 3-metilpentano</i>193
Tabla 131. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de n-hexano</i>	.195
Tabla 132. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 2-metilhexano</i>197
Tabla 133. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 2,2-dimetilhexano</i>199
Tabla 134. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 2,3-dimetilhexano</i>202
Tabla 135. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de n-heptano</i>204
Tabla 136. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de ciclopentano</i>206
Tabla 137. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de metilciclopentano</i>208
Tabla 138. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de benceno</i>	..210
Tabla 139. <i>Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de ciclohexano</i>211
Tabla 140. <i>Energías de optimización</i>213

Índice de figuras

Figura 1. Diagrama de flujo de las unidades de destilación atmosférica y de vacío	34
Figura 2. Flujo del proceso BenSat	36
Figura 3. Proceso UOP Butamer.....	37
Figura 4. Proceso Penex UOP	39
Figura 5. Proceso Penex con recicló Molex UOP	42
Figura 6. Proceso Penex con desisohexanizer Sidecut Recycle.....	44
Figura 7. Proceso de isomerización zeolítica Once-Through UOP	46
Figura 8. Proceso TIP	48
Figura 9. Unidad de isomerización Par-Isom.....	50
Figura 10. Fórmula lineal.....	54
Figura 11. Hibridación sp^3 para el metano.....	55
Figura 12. Orientación de moléculas polares en un sólido	58
Figura 13. Dos tipos de interacción ion – dipolo	59
Figura 14. Interacción entre dipolos inducidos	60
Figura 15. Enlaces de hidrógeno en el agua, amoníaco y fluoruro de hidrógeno	60
Figura 16. Generación de estructuras químicas 2D paso 1	62
Figura 17. Generación de estructuras químicas 2D paso 2	63
Figura 18. Procesamiento de propiedades básicas paso 1	63
Figura 19. Procesamiento de propiedades básicas paso 2	64
Figura 20. Procesamiento de propiedades básicas paso 3	64
Figura 21. Generación automática de nomenclatura IUPAC paso 1	65
Figura 22. Generación automática de nomenclatura IUPAC paso 2.....	65
Figura 23. Generación automática del código SMILES paso 1	66
Figura 24. Procesamiento a través del código SMILES paso 1.....	67
Figura 25. Procesamiento a través del código SMILES paso 2.....	67
Figura 26. Elaboración de archivos con coordenadas 3D paso 1.....	68
Figura 27. Elaboración de archivos con coordenadas 3D paso 2.....	69
Figura 28. Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas paso 1	69
Figura 29. Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas paso 2	70
Figura 30. Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas paso 3	70

Figura 31. <i>Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas optimizadas</i> <i>paso 1</i>	71
Figura 32. <i>Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas optimizadas</i> <i>paso 2</i>	71
Figura 33. <i>Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas optimizadas</i> <i>paso 3</i>	71
Figura 34. <i>Reporte la energía de optimización</i>	72
Figura 35. <i>Generalidades acerca del compuesto hidrógeno</i>	89
Figura 36. <i>Generalidades acerca del compuesto metano</i>	91
Figura 37. <i>Generalidades acerca del compuesto etano</i>	94
Figura 38. <i>Generalidades acerca del compuesto propano</i>	96
Figura 39. <i>Generalidades acerca del compuesto isobutano</i>	99
Figura 40. <i>Generalidades acerca del compuesto n-butano</i>	101
Figura 41. <i>Generalidades acerca del compuesto isopentano</i>	104
Figura 42. <i>Generalidades acerca del compuesto 2,2-dimetilbutano</i>	106
Figura 43. <i>Generalidades acerca del compuesto 2,3-dimetilbutano</i>	109
Figura 44. <i>Generalidades acerca del compuesto n-pentano</i>	112
Figura 45. <i>Generalidades acerca del compuesto 2-metilpentano</i>	114
Figura 46. <i>Generalidades acerca del compuesto 3-metilpentano</i>	117
Figura 47. <i>Generalidades acerca del compuesto n-hexano</i>	119
Figura 48. <i>Generalidades acerca del compuesto 2-metilhexano</i>	122
Figura 49. <i>Generalidades acerca del compuesto 2,2-dimetilhexano</i>	124
Figura 50. <i>Generalidades acerca del compuesto 2,3-dimetilhexano</i>	127
Figura 51. <i>Generalidades acerca del compuesto n-heptano</i>	129
Figura 52. <i>Generalidades acerca del compuesto ciclopentano</i>	132
Figura 53. <i>Generalidades acerca del compuesto metilciclopentano</i>	135
Figura 54. <i>Generalidades acerca del compuesto benceno</i>	137
Figura 55. <i>Generalidades acerca del compuesto ciclohexano</i>	140
Figura 56. <i>Estructura química 3D de la molécula de hidrógeno obtenida a través de</i> <i>“Avogadro”</i>	142

Figura 57. Estructura química 3D de la molécula de metano obtenida a través de “Pymol”	143
Figura 58. Estructura química 3D de la molécula de metano obtenida a través de “Avogadro”	144
Figura 59. Estructura química 3D de la molécula de etano obtenida a través de “Pymol”	145
Figura 60. Estructura química 3D de la molécula de etano obtenida a través de “Avogadro”	145
Figura 61. Estructura química 3D de la molécula de propano obtenida a través de “Pymol”	146
Figura 62. Estructura química 3D de la molécula de propano obtenida a través de “Avogadro”	146
Figura 63. Estructura química 3D de la molécula de isobutano obtenida a través de “Pymol”	147
Figura 64. Estructura química 3D de la molécula de isobutano obtenida a través de “Avogadro”	148
Figura 65. Estructura química 3D de la molécula de n-butano obtenida a través de “Pymol”	149
Figura 66. Estructura química 3D de la molécula de n-butano obtenida a través de “Avogadro”	149
Figura 67. Estructura química 3D de la molécula de isopentano obtenida a través de “Pymol”	150
Figura 68. Estructura química 3D de la molécula de isopentano obtenida a través de “Avogadro”	151
Figura 69. Estructura química 3D de la molécula de 2,2-dimetilbutano obtenida a través de “Pymol”	152
Figura 70. Estructura química 3D de la molécula de 2,2-dimetilbutano obtenida a través de “Avogadro”	152
Figura 71. Estructura química 3D de la molécula de 2,3-dimetilbutano obtenida a través de “Pymol”	153

Figura 72. Estructura química 3D de la molécula de 2,3-dimetilbutano obtenida a través de “Avogadro”	154
Figura 73. Estructura química 3D de la molécula de n-pentano obtenida a través de “Pymol”	155
Figura 74. Estructura química 3D de la molécula de n-pentano obtenida a través de “Avogadro”	155
Figura 75. Estructura química 3D de la molécula de 2-metilpentano obtenida a través de “Pymol”	156
Figura 76. Estructura química 3D de la molécula de 2-metilpentano obtenida a través de “Avogadro”	157
Figura 77. Estructura química 3D de la molécula de 3-metilpentano obtenida a través de “Pymol”	158
Figura 78. Estructura química 3D de la molécula de 3-metilpentano obtenida a través de “Avogadro”	158
Figura 79. Estructura química 3D de la molécula de n-hexano obtenida a través de “Pymol”	159
Figura 80. Estructura química 3D de la molécula de n-hexano obtenida a través de “Avogadro”	160
Figura 81. Estructura química 3D de la molécula de 2-metilhexano obtenida a través de “Pymol”	161
Figura 82. Estructura química 3D de la molécula de 2-metilhexano obtenida a través de “Avogadro”	161
Figura 83. Estructura química 3D de la molécula de 2,2-dimetilhexano obtenida a través de “Pymol”	162
Figura 84. Estructura química 3D de la molécula de 2,2-dimetilhexano obtenida a través de “Avogadro”	163
Figura 85. Estructura química 3D de la molécula de 2,3-dimetilhexano obtenida a través de “Pymol”	164
Figura 86. Estructura química 3D de la molécula de 2,3-dimetilhexano obtenida a través de “Avogadro”	164

Figura 87. Estructura química 3D de la molécula de n-heptano obtenida a través de “Pymol”	166
Figura 88. Estructura química 3D de la molécula de n-heptano obtenida a través de “Avogadro”	166
Figura 89. Estructura química 3D de la molécula de ciclopentano obtenida a través de “Pymol”	167
Figura 90. Estructura química 3D de la molécula de ciclopentano obtenida a través de “Avogadro”	168
Figura 91. Estructura química 3D de la molécula de metilciclopentano obtenida a través de “Pymol”	169
Figura 92. Estructura química 3D de la molécula de metilciclopentano obtenida a través de “Avogadro”	169
Figura 93. Estructura química 3D de la molécula de benceno obtenida a través de “Pymol”	170
Figura 94. Estructura química 3D de la molécula de benceno obtenida a través de “Avogadro”	171
Figura 95. Estructura química 3D de la molécula de ciclohexano obtenida a través de “Pymol”	172
Figura 96. Estructura química 3D de la molécula de ciclohexano obtenida a través de “Avogadro”	172
Figura 97. Estructura química 3D optimizada para el hidrógeno obtenida en “Chemcraft”	173
Figura 98. Estructura química 3D optimizada para el metano obtenida en “Pymol”.	174
Figura 99. Estructura química 3D optimizada para el metano obtenida en “Chemcraft”	175
Figura 100. Estructura química 3D optimizada para el etano obtenida en “Pymol”..	176
Figura 101. Estructura química 3D optimizada para el etano obtenida en “Chemcraft”	176
Figura 102. Estructura química 3D optimizada para el propano obtenida en “Pymol”	178
Figura 103. Estructura química 3D optimizada para el propano obtenida en “Chemcraft”	178

Figura 104. Estructura química 3D optimizada para el isobutano obtenida en “Pymol”	179
Figura 105. Estructura química 3D optimizada para el isobutano obtenida en “Chemcraft”	180
Figura 106. Estructura química 3D optimizada para el n-butano obtenida en “Pymol”	181
Figura 107. Estructura química 3D optimizada para el n-butano obtenida en “Chemcraft”	181
Figura 108. Estructura química 3D optimizada para el isopentano obtenida en “Pymol”	183
Figura 109. Estructura química 3D optimizada para el isopentano obtenida en “Chemcraft”	183
Figura 110. Estructura química 3D optimizada para el 2,2-dimetilbutano obtenida en “Pymol”	185
Figura 111. Estructura química 3D optimizada para el 2,2-dimetilbutano obtenida en “Chemcraft”	185
Figura 112. Estructura química 3D optimizada para el 2,3-dimetilbutano obtenida en “Pymol”	187
Figura 113. Estructura química 3D optimizada para el 2,3-dimetilbutano obtenida en “Chemcraft”	187
Figura 114. Estructura química 3D optimizada para el n-pentano obtenida en “Pymol”	188
Figura 115. Estructura química 3D optimizada para el n-pentano obtenida en “Chemcraft”	189
Figura 116. Estructura química 3D optimizada para el 2-metilpentano obtenida en “Pymol”	191
Figura 117. Estructura química 3D optimizada para el 2-metilpentano obtenida en “Chemcraft”	191
Figura 118. Estructura química 3D optimizada para el 3-metilpentano obtenida en “Pymol”	192

Figura 119. Estructura química 3D optimizada para el 3-metilpentano obtenida en “Chemcraft”	193
Figura 120. Estructura química 3D optimizada para el n-hexano obtenida en “Pymol”	195
Figura 121. Estructura química 3D optimizada para el n-hexano obtenida en “Chemcraft”	195
Figura 122. Estructura química 3D optimizada para el 2-metilhexano obtenida en “Pymol”	197
Figura 123. Estructura química 3D optimizada para el 2-metilhexano obtenida en “Chemcraft”	197
Figura 124. Estructura química 3D optimizada para el 2,2-dimetilhexano obtenida en “Pymol”	199
Figura 125. Estructura química 3D optimizada para el 2,2-dimetilhexano obtenida en “Chemcraft”	199
Figura 126. Estructura química 3D optimizada para el 2,3-dimetilhexano obtenida en “Pymol”	201
Figura 127. Estructura química 3D optimizada para el 2,3-dimetilhexano obtenida en “Chemcraft”	201
Figura 128. Estructura química 3D optimizada para el n-heptano obtenida en “Pymol”	203
Figura 129. Estructura química 3D optimizada para el n-heptano obtenida en “Chemcraft”	203
Figura 130. Estructura química 3D optimizada para el ciclopentano obtenida en “Pymol”	205
Figura 131. Estructura química 3D optimizada para el ciclopentano obtenida en “Chemcraft”	205
Figura 132. Estructura química 3D optimizada para el metilciclopentano obtenida en “Pymol”	207
Figura 133. Estructura química 3D optimizada para el metilciclopentano obtenida en “Chemcraft”	207

Figura 134. Estructura química 3D optimizada para el benceno obtenida en “Pymol”	209
Figura 135. Estructura química 3D optimizada para el benceno obtenida en “Chemcraft”	209
Figura 136. Estructura química 3D optimizada para el ciclohexano obtenida en “Pymol”	211
Figura 137. Estructura química 3D optimizada para el ciclohexano obtenida en “Chemcraft”	211

Resumen

La isomerización catalítica es una parte del proceso de refinación del petróleo, cuyo principal objetivo se basa en aumentar el octanaje de la nafta ligera procedente de la destilación atmosférica, los compuestos químicos que están presentes en este proceso son el hidrógeno e hidrocarburos como: parafinas lineales que poseen de entre 1 y 6 carbonos en su estructura molecular, cicloparafinas y el benceno, siendo este el único compuesto aromático. Esta operación presenta variantes específicas en su diseño que dependen del objetivo de la empresa en la que se aplica, además, están elaboradas con el fin de tratar corrientes con una composición química diferente para generar productos que estén de acuerdo con las especificaciones establecidas por el consumidor final o empresa interesada. Por otra parte, el análisis de los compuestos presentes en el proceso de isomerización se lo realiza mediante la teoría de la química computacional, la cual es una parte de la química que, mediante el uso de programas, permiten el estudio de las propiedades químicas básicas, estructura molecular. En cuanto a las propiedades fisicoquímicas, solubilidad y lipofilia, la plataforma Suiza de Bioinformática “SwissADME” provee este tipo de información de las moléculas de interés, a partir de su respectivo código SMILES, para su posterior análisis de resultados. Adicionalmente, estos programas químicos permiten la optimización de cada compuesto químico, dicha función muestra la cantidad de energía necesaria por mol de compuesto, para que adopte una forma más realista. Cada compuesto químico simulado y optimizado, presenta coordenadas espaciales en los ejes xyz, las cuales representan la distribución y ubicación de la molécula en el espacio.

Palabras clave:

- **IN SILICO**
- **LIPOFILIA**
- **ESTRUCTURA MOLECULAR**
- **ISOMERIZACIÓN**

Abstract

Catalytic isomerization is a part of the oil refining process, whose main objective is based on increasing the octane number of light naphtha from atmospheric distillation. The chemical compounds present in this process are hydrogen and hydrocarbons such as: linear kerosenes that have between 1 and 6 carbons in their molecular structure, cycloparaffins and benzene, the latter being the only aromatic compound. This operation presents specific variants in its design that depend on the objective of the company in which it is applied, in addition, they are elaborated with the purpose of treating currents with a different chemical composition to generate products that agree with the specifications established by the final consumer or interested company. On the other hand, the analysis of the compounds present in the isomerization process is carried out by means of the theory of computational chemistry, which is a part of chemistry that, through the use of programs, allows the study of the basic chemical properties, molecular structure. As for the physicochemical properties, solubility and lipophilicity, the Swiss Bioinformatics platform "SwissADME" provides this type of information of the molecules of interest, from their respective SMILES code, for subsequent analysis of the results. In addition, these chemical programs allow the optimization of each chemical compound, such function shows the amount of energy needed per mole of compound, so that it adopts a more realistic form. Each simulated and optimized chemical compound presents spatial coordinates in the xyz axes, which represent the distribution and location of the molecule in space.

Keywords:

- **IN SILICO**
- **LIPOPHILIC**
- **MOLECULAR STRUCTURE**
- **ISOMERIZATION**

Capítulo I

1. Generalidades

1.1. Introducción

La isomerización catalítica tiene como propósito el incremento del octanaje en la gasolina. El proceso se alimenta por corrientes procedentes de la destilación atmosférica y está compuesta por parafinas que poseen en su estructura molecular entre 5 a 6 carbonos, cicloparafinas, y aromáticos, principalmente (Torres & Castro, 2002).

Los catalizadores forman una parte vital en el proceso, debido a que permiten obtener isómeros con mayor octanaje, que son de particular importancia en el rendimiento de la gasolina. Al principio se usaba como catalizador el cloruro de aluminio para posteriormente usar el platino soportado sobre alúmina o zeolitas ácidas. La zeolita comúnmente utilizada es la H-mordenita (Ertl, Knözinger, Schüth, & Weitkamp, 2010).

Por otra parte, las características de las moléculas presentes en el proceso antes mencionado se pueden obtener mediante la química computacional, la cual permite el análisis de moléculas químicas, la cual ofrece una alternativa complementaria de los laboratorios, para poder analizar las propiedades fisicoquímicas, químicas estructuras 2D y 3D de los compuestos químicos presentes en el proceso de isomerización catalítica.

1.2. Planteamiento del problema

En esta investigación, se desea aportar al conocimiento científico mediante el uso de los conocimientos enfocados en la química pura, y apoyados en los cálculos teóricos computacionales lo que le dan el sustento para la discusión de los resultados. En consecuencia, se logrará intuir la conducta global en una mezcla, al mismo tiempo, de posibles y potenciales interacciones intermoleculares entre ellas para exponer comportamientos tales como solubilidad, y lipofilia, todo esto en el proceso de isomerización catalítica.

Debido a que la industria petrolera es el pilar esencial para la economía ecuatoriana, las leyes y normas que controlan la contaminación de cada una de estas

compañías son severas, lo que hace que una parte del capital que producen esté destinado a la implementación de sistemas que suprima o reduzcan el nivel de contaminación que producen.

1.3. Justificación e importancia

En este trabajo se propone efectuar una investigación bibliográfica minuciosa, enfocada en los componentes orgánicos presentes en la materia prima de entrada al proceso de isomerización catalítica, y asimismo con todas las fracciones de productos obtenidos luego de todos los procesos internos involucrados en el cambio de este en derivados más depurados.

Se plantea indagar en cada molécula de origen orgánico comenzando en su nomenclatura formato científico internacional IUPAC, propiedades básicas como peso molecular y composición elemental mediante procesos computacionales sencillos en programas de uso libre y también con *softwares* especializados para el análisis científico, al cual se puede alcanzar mediante licencias cortas de un año.

Con esto se desea elaborar los datos requeridos para lograr organizarlos, tabularlos, procesarlos, discutirlos y posteriormente plasmar conclusiones acerca de la conducta y características de estas moléculas orgánicas en la composición de las corrientes de ingreso y salida del proceso de transformación dentro de la isomerización catalítica.

Cabe recalcar que toda la indagación y experimentación se realizará con cálculos *in silico*, los mismos que fomentan la utilización de la tecnología para el desarrollo y aplicación de los conocimientos teóricos alcanzados en clases. Mediante la generación de resultados como gráficos 3D, conformaciones y configuraciones de cada compuesto orgánico, también se podrá comprender de mejor manera como cada propiedad individual contribuirá a un comportamiento global en una mezcla, conjuntamente, de posibles y potenciales interacciones intermoleculares entre ellas para interpretar comportamientos tales como solubilidad, y lipofilia.

1.4. 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 isomerización catalítica” 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 isomerización catalítica.
2. Establecer una lista de potenciales moléculas químicas de origen orgánico presentes en el flujo de salida en el proceso de isomerización catalítica.
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.
6. Reportar mediante tablas los datos obtenidos para cada molécula química procesada en los pasos anteriores.

1.5. Variables de investigación

1.5.1. *Variables independientes*

Tipo de compuesto

1.5.2. *Variables dependientes*

Código SMILES

Propiedades fisicoquímicas

Estructura molecular

Capítulo II

2. Fundamentación teórica

2.1. El petróleo

La formación del petróleo crudo se originó por la acumulación de restos orgánicos, estos pueden ser de origen animal o vegetal. Dichos residuos están sometidos a altas condiciones de temperatura y presión, para su posterior descomposición a la forma final que es el petróleo crudo (Sami et al., 1989).

El petróleo crudo es una mezcla líquida compleja y natural de varios compuestos químicos, en su mayoría parafinas, naftenos, cicloparafinas, aromáticos o una combinación de estos. Por otra parte, las olefinas no se encuentran en el crudo, pero estas pueden ser obtenidas en el proceso de refinación (Maples, 2000).

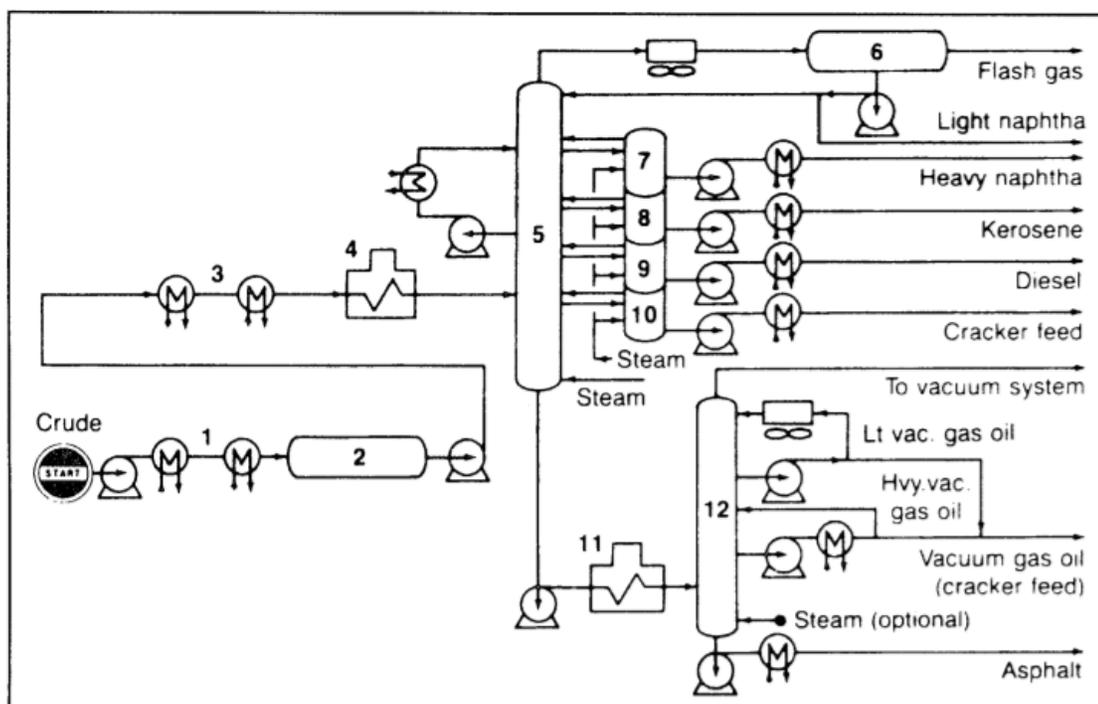
El petróleo puede contener pequeñas trazas de elementos no metálicos, como el azufre, nitrógeno, oxígeno y compuestos organometálicos, estos pueden ser el hierro, níquel y vanadio. Si la concentración de compuestos como el níquel y vanadio son elevadas, puede ocasionar que muchos catalizadores que se usan para los distintos procesos de refinación del petróleo crudo sean envenenados (Sami et al., 1989).

2.2. Refinería

En una refinería ocurre la descomposición del petróleo crudo, en donde de acuerdo a ciertas propiedades físicas como el punto de ebullición y fusión de cada compuesto se separan, las corrientes de salida son dirigidas a las distintas unidades de procesamiento, como se puede visualizar en la figura 1 (Matar & Hatch, 2000).

Figura 1.

Diagrama de flujo de las unidades de destilación atmosférica y de vacío



Nota. (1,3) intercambiadores de calor; (2) desaladora, (3,4) calentador; (5) columna de destilación, (6) condensador superior, (7–10) bomba alrededor de las corrientes, (11) calentador de destilación al vacío; (12) torre de vacío. Tomado de (Matar & Hatch, 2000)

2.2.1. Destilación atmosférica

En esta unidad de procesamiento el petróleo es calentado previamente en un horno a una temperatura de aproximadamente 350 °C, este crudo ingresa a la columna de fraccionamiento en donde se separan por las diferentes placas teóricas los componentes de acuerdo con el punto de ebullición. Los productos son retirados por las corrientes laterales, estos productos pueden ser nafta ligera, nafta pesada, keroseno, gasóleo atmosférico, gasóleo al vacío y residuo de vacío (Matar & Hatch, 2000).

La nafta obtenida como producto de la destilación atmosférica ingresa a un divisor, en donde la nafta ligera y la nafta pesada se separan. La nafta ligera está compuesta por carbonos de C5 hasta C6 con pequeñas cantidades de butanos, los cuales son empleados para el proceso de isomerización catalítica, la nafta pesada contiene en su

mayoría moléculas de carbono de C6 hasta C12, son usados para el proceso de reformado catalítico (Hsu & Robinson, 2019).

2.2.2. Isomerización catalítica

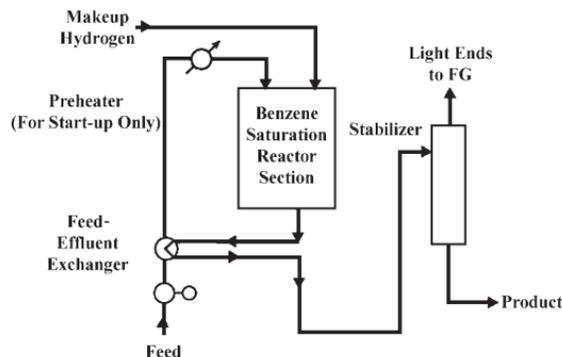
La isomerización catalítica es un proceso que consiste en una serie de reacciones con el fin de reorganizar la estructura de una molécula, en especial parafinas y cicloparafinas en su mayoría de 5 o 6 carbonos. Este proceso se lo realiza en la refinería con el fin de aumentar el índice de octano en el producto (Matar & Hatch, 2000).

a. Proceso UOP BENSAT

Debido a la introducción de gasolina reformulada con límites obligatorios en el contenido de benceno muchas refinerías han implementado procesos adicionales a la unidad de isomerización catalítica con el fin de reducir la concentración de dicho compuesto químico (Meyers, 2003).

Es un proceso diseñado para tratar corrientes de hidrocarburos de 5 a 6 carbonos que posee altos niveles de benceno, requiere condiciones moderadas y un leve exceso de hidrógeno sobre el nivel estequiométrico. En base a la estequiometría de la reacción de saturación se requiere 3 moles hidrogeno por cada mol de benceno.

El producto de este proceso tiene un bajo octanaje debido a la conversión de benceno a ciclohexano, pero incrementa su nivel al pasar por la unidad de isomerización catalítica. Se utiliza un catalizador de metal noble para la producción de ciclohexano (Meyers, 2003).

Figura 2.*Flujo del proceso BenSat**Nota.* Tomado de (Meyers, 2003)

A continuación, en la tabla 1 se muestra la composición porcentual de la corriente de entrada al proceso, en dicha tabla se verifica la presencia de naftenos y parafinas de C5 y C6. Cabe resaltar que esta composición se ve reflejada en las diversas variantes del proceso de isomerización catalítica. (Meyers, 2003).

Tabla 1.*Composición típica de la alimentación en el proceso BenSat*

Componente	Reformado ligero		
	LSR	Corte ligero	Heartcut
C5 parafinas	28	29	0
C5 naftenos	4	0	0
C6 parafinas	35	34	47
C6 naftenos	17	3	3
C7 +	8	16	24
Benceno	8	18	26
Total	100	100	100

Nota. recuperado de (Meyers, 2003)

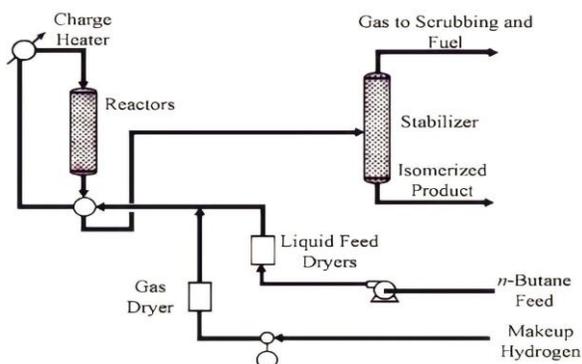
b. Proceso Butamer UOP

Proceso es fase vapor de lecho fijo que se promueve inyectando trazas de cloruro orgánico y una cantidad menor de hidrogeno con el fin de eliminar la formación de olefinas. En dicho proceso se genera cloruro de hidrogeno, pero la construcción de acero al carbono no presenta daños debido al ambiente seco en el que se encuentra.

Se utiliza un catalizador metálico selectivo de alta actividad que promueve la formación de isobutano a partir del *n*-butano. El producto contiene una fracción del 60% del *n*-butano independientemente de la concentración que presente en la alimentación, esto hace que el rendimiento de la planta sea la adecuada para producir un componente de mezcla de gasolina de alto octanaje (Meyers, 2003).

Figura 3.

Proceso UOP Butamer



Nota. Tomado de (Meyers, 2003)

A continuación, en la tabla 2 se presenta la composición de las corrientes de entrada y salida del proceso UOP Butamer. Además, estas corrientes están formadas de parafinas lineales sin presencia de naftenos ni olefinas. En adición a esto, se evidencia que la corriente de entrada posee una alta concentración de isómeros de las parafinas (Meyers, 2003).

Tabla 2.*Estimación de las corrientes del Proceso Butamer UOP*

Alimentación	Toneladas métricas por año (MTA)	Porcentaje en peso (wt %)	Productos	Toneladas métricas por año (MTA)	Porcentaje en peso (wt %)
Propano	978	0,85		Isobutano:	
Isobutano	29325	25,5	Propano	978	0,85
<i>n</i> -butano	82282	71,55	Isobutano	104190	90,6
Isopentano	1805	1,57	<i>n</i> -butano	3922	3,41
<i>n</i> -pentano	610	0,53	Total	109090	94,86
Total	115000	100		Subproducto pesado:	
			Isobutano	69	0,06
			<i>n</i> -butano	2702	2,35
			Isopentano	1058	0,92
			<i>n</i> -pentano	978	0,85
			Total	4807	4,18
				Gas ligero:	
			Metano	252	0,22
			Etano	357	0,31
			Propano	541	0,47
			Total	1150	1

Nota. Recuperado de (Meyers, 2003)

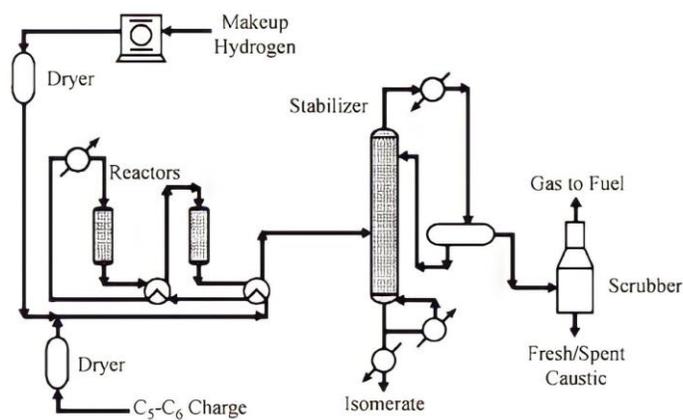
c. Proceso UOP Penex

Es un proceso diseñado para isomerización catalítica de pentano y hexanos. Las reacciones ocurren en presencia de hidrógeno, sobre un lecho fijo de catalizador a condiciones que promuevan la reacción las cuales no son severas como moderada presión de funcionamiento, bajas temperaturas y baja presión parcial de hidrógeno. El pentano se

transforma en isopentano, mientras que el hexano cambia a 2-metilpentano, 3-metilpentano y 2,3-dimetilbutano. Por otra parte, el benceno se hidrogena formando ciclohexano (Meyers, 2003).

Figura 4.

Proceso Penex UOP



Nota. Tomado de (Meyers, 2003)

A continuación, se muestra en la tabla 3, la composición típica de las corrientes de entrada y salida del proceso. En las corrientes se observa la presencia de parafinas y compuestos cíclicos. Además, se evidencia el incremento de la concentración de isómeros de las parafinas presentes en la corriente de salida del proceso (Meyers, 2003).

Tabla 3.*Estimación de las corrientes del Proceso Penex UOP*

Compuesto	Porcentaje total	Alimentación (BPD)	Porcentaje de alimentación	Producto (BPD)	Porcentaje de producto
Parafinas C₅ %	47,5				
Isopentano		42	14	77	25,67
<i>n</i> -pentano		58	19,33	23	7,67
Parafinas C₆ %	45,2				
2,2-dimetilbutano		0,9	0,3	31,6	10,53
2,3-dimetilbutano		5	1,67	10,4	3,46
Metilpentano		48,2	16,06	46,9	15,63
<i>n</i> -hexano		45,9	15,3	11,1	3,7
Cíclicos C₆ %	7,3				
Metilciclopentano		57	19	52	17,33
Ciclohexano		17	5,67	48	16
Benceno		26	8,67	0	0
TOTAL	100	300	100	300	100

Nota. Recuperado de (Meyers, 2003)

El proceso posee algunas configuraciones disponibles en las cuales se configura el diagrama de flujo añadiendo o mejorando equipos. La implementación de estas nuevas configuraciones va a depender del propósito que se tenga en la empresa, la composición del material de carga y del número de octano del producto. A continuación, se observa las diversas configuraciones del proceso.

d. Proceso One-through

Proceso Penex de un solo paso utilizado para aumentar el octanaje en corrientes ricas en parafinas y naftenos mediante la isomerización de estos. Las corrientes de este proceso son ricas en parafinas de cadena relativamente corta como son C₄, C₅, C₆, las cuales son transformadas en sus respectivos isómeros (Meyers, 2003).

A continuación, se representa en la tabla 4, la composición típica de las corrientes de entrada y salida del proceso. Las corrientes están conformadas en su mayoría de parafinas con sus respectivos isómeros. Además, se evidencia el incremento de la concentración de los isómeros de las parafinas presentes (Meyers, 2003).

Tabla 4.

Rendimientos típicos estimados para el Proceso One-through

Componentes	Alimentación al reactor (BPD)	Productos del reactor (BPD)	Porcentaje en peso de la alimentación (wt %)	Porcentaje en peso de los productos (wt %)
isobutano	10	109	0,1	1,084
<i>n</i> -butano	170	159	1,7	1,58
isopentano	1700	3215	17	31,97
<i>n</i> -pentano	2369	940	23,69	9,35
Ciclopentano	172	121	1,72	1,20
2,2-dimetilbutano	100	1565	1	15,57
2,3-dimetilbutano	197	473	1,97	4,70
2-metilpentano	1234	1502	12,34	14,94
3-metilpentano	899	761	8,99	7,57
<i>n</i> -hexano	2076	477	20,76	4,74
metilciclopentano	328	290	3,28	2,88
Ciclohexano	278	279	2,78	2,78
Benceno	277	0	2,77	0
<i>n</i> -heptano	190	164	1,9	1,63
Total	10000	10055	100	100

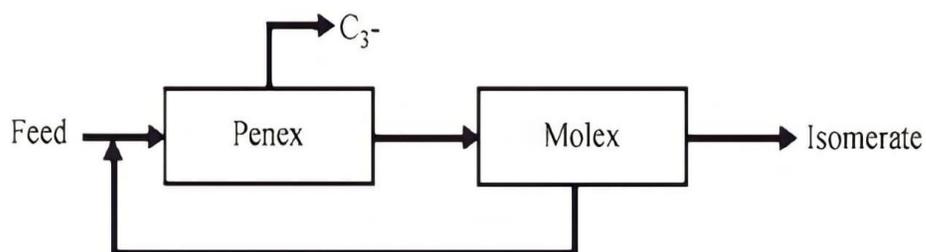
Nota. Recuperado de (Meyers, 2003)

e. Proceso Penex con reciclo Molex UOP

Es un proceso obtenido mediante la combinación del proceso Penex con el proceso Molex, donde se utiliza tamices moleculares con el fin de separar el producto Penex estabilizado en una corriente de isoparafina de alto octanaje y una corriente de parafina de bajo octanaje, el producto isomerizado se recupera para mezclar con la gasolina (Meyers, 2003).

Figura 5.

Proceso Penex con reciclo Molex UOP



Nota. Tomado de (Meyers, 2003)

A continuación, se observa en la tabla 5 la composición de las corrientes de entrada y salida del proceso. Las corrientes están conformadas en su mayoría de parafinas y naftenos con sus respectivos isómeros. Además, se evidencia el aumento de la concentración de isómeros en la corriente de salida (Meyers, 2003).

Tabla 5.*Estimación de corrientes del Proceso Penex con reciclado Molex UOP*

Componente	Alimentación fresca al reactor (BPD)	Porcentaje Alimentación	Producto isomerado de molex (BPD)	Porcentaje producto isomerado de molex
isobutano	10	0,1	210	2,06794682
n-butano	170	1,7	163	1,60512063
isopentano	1700	17	4093	40,3052683
n-pentano	2369	23,69	66	0,64992614
Ciclopentano	172	1,72	120	1,1816839
2,2dimetilbutano	100	1	1613	15,8838011
2,3-dimetilbutano	197	1,97	531	5,22895126
2-metilpentano	1234	12,34	1733	17,065485
3-metilpentano	899	8,99	908	8,94140817
n-hexano	2076	20,76	30	0,29542097
metilciclopentano	328	3,28	261	2,57016248
ciclohexano	278	2,78	255	2,51107829
benceno	277	2,77	0	0
n-heptano	190	1,9	172	1,69374692
Total	10000	100	10155	100

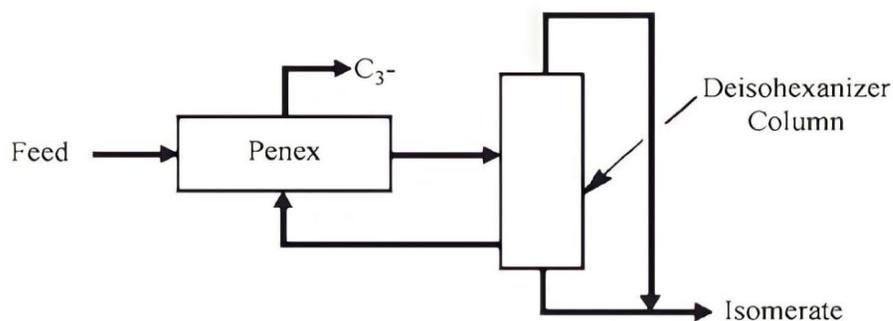
Nota: Recuperado de (Meyers, 2003).

f. Penex con Desisohexanizer Sidecut Recycle

Es un proceso obtenido por la combinación del proceso Penex y una columna de desisohexanizadora. El propósito de este proceso es reciclar los metil-pentanos de bajo octanaje hacia el reactor Penex con el fin de aumentar la concentración de isómeros de alto octanaje y evitar pérdidas de materia prima. Se dice que este proceso requiere menos capital (Meyers, 2003).

Figura 6.

Proceso Penex con desisohexanizer Sidecut Recycle



Nota. Tomado de (Meyers, 2003)

A continuación, se observa en la tabla 6 la composición típica para las corrientes de entrada y salida de este proceso. Las corrientes están conformadas en su mayoría de parafinas y naftenos con sus respectivos isómeros. Además, se observa el incremento de la concentración de isómeros en la corriente de salida del proceso (Meyers, 2003).

Tabla 6.*Estimación de corrientes del Penex con Desisohexanizer Sidecut Recycle*

Componentes	Alimentación al reactor (BPD)	Producto isomerado (BPD)	Porcentaje en peso de la alimentación (wt %)	Porcentaje en peso del producto (wt %)
Iso-butano	2	315	0,02	3,31265117
<i>n</i> -butano	49	94	0,49	0,98853718
Iso-pentano	2433	3381	24,33	35,5557893
<i>n</i> -pentano	1885	1033	18,85	10,8633926
Ciclopentano	100	70	1	0,73614471
2,2-dimetilbutano	57	2754	0,57	28,962036
2,3-dimetilbutano	222	527	2,22	5,54211799
2-metilpentano	1532	1142	15,32	12,009675
3-metilpentano	992	190	9,92	1,99810706
<i>n</i> -hexano	1487	3	14,87	0,03154906
metilciclopentano	561	0	5,61	0
Ciclohexano	179	0	1,79	0
Benceno	195	0	1,95	0
<i>n</i> -heptano	306	0	3,06	0
Total	10000	9509	100	100

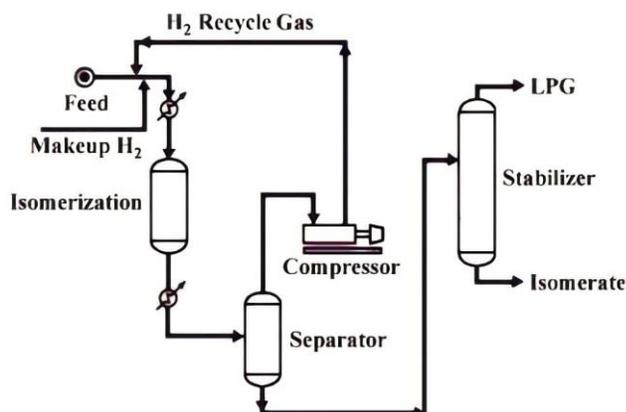
Nota: Recuperado de (Meyers, 2003).

g. Proceso de isomerización zeolítica Once-Through UOP

Es un proceso de isomerización catalítica en fase vapor, para moléculas de *n*-pentano y *n*-hexano que aumenta el número de octanaje de 10 a 12, produciendo isoparafinas de estos. La temperatura de reacción está entre 245 a 270 °C y una presión de aproximadamente 300 a 500 psia en presencia de hidrógeno (Meyers, 2003).

Figura 7.

Proceso de isomerización zeolítica Once-Through UOP



Nota. Tomado de (Meyers, 2003)

A continuación, se observa en la tabla 7, la composición de las corrientes de entrada y salida del proceso. Las corrientes están conformadas en su mayoría de parafinas y naftenos con sus respectivos isómeros. Además, en esta tabla se evidencia el aumento de la concentración de isómeros (Meyers, 2003).

Tabla 7.*Estimación de corrientes del Proceso de isomerización zeolítica Once-Through UOP*

Componente	Alimentación fresca al reactor (BPD)	Porcentaje de alimentación fresca	Producto (BPD)	Porcentaje del producto
Hidrógeno consumido	2018			
Corrientes C₄₊				
isobutano	1000	0,1	25000	2,5
<i>n</i> -butano	5800	0,58	14100	1,41
isopentano	168400	16,84	303900	30,39
<i>n</i> -pentano	290700	29,07	161700	16,17
Ciclopentano	16900	1,69	12400	1,24
2,2-dimetilbutano	5100	0,51	82600	8,26
2,3-dimetilbutano	19300	1,93	37400	3,74
2-metilpentano	120800	12,08	144300	14,43
3-metilpentano	88000	8,8	92100	9,21
<i>n</i> -hexano	193500	19,35	82400	8,24
metilciclopentano	19500	1,95	33500	3,35
Ciclohexano	34100	3,41	9600	0,96
Benceno	17500	1,75	0	0
<i>n</i> -heptano	19400	1,94	9700	0,97
TOTAL	1000000	100	1008700	100,87

Nota: Recuperado de (Meyers, 2003).

h. Proceso TIP

Proceso de isomerización catalítica trabaja a presiones constantes y en fase vapor, las condiciones de operación son: temperatura de 245 y 370 °C y a una presión de 200 a 500 psia. El proceso TIP está diseñado con el fin de evitar pérdidas en el catalizador por

Tabla 8.*Estimación de corrientes del Proceso TIP*

Componente	Alimentación fresca al reactor (BPD)	Porcentaje de alimentación fresca	Producto isomerizado (BPD)	Porcentaje producto isomerizado
Hidrógeno consumido	2175			
Corrientes C₄₊				
isobutano	10	0,1	288	2,86652732
<i>n</i> -butano	58	0,58	136	1,3536379
isopentano	1684	16,84	4523	45,0184135
<i>n</i> -pentano	2907	29,07	142	1,41335722
Ciclopentano	169	1,69	132	1,31382502
2,2-dimetilbutano	51	0,51	910	9,05743008
2,3-dimetilbutano	193	1,93	458	4,5585747
2-metilpentano	1208	12,08	1771	17,6271524
3-metilpentano	880	8,8	1134	11,2869513
<i>n</i> -hexano	1935	19,35	22	0,21897084
metilciclopentano	195	1,95	344	3,42390763
Ciclohexano	341	3,41	98	0,97541555
Benceno	175	1,75	0	0
<i>n</i> -heptano	194	1,94	89	0,88583657
TOTAL	10000	100	10047	100

Nota: Recuperado de (Meyers, 2003).

i. Unidad de isomerización Par-Isom

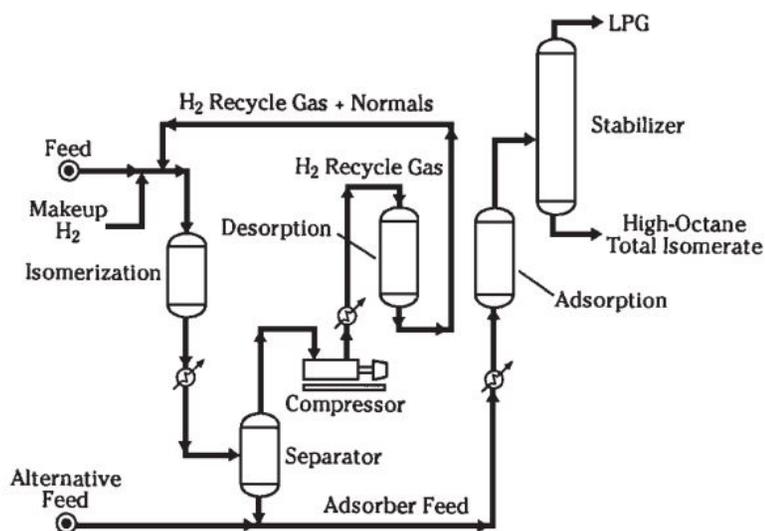
Es un proceso de isomerización catalítica diseñado para la isomerización de pentanos, hexanos y mezclas de ellos. El hidrogeno es fundamental ya que produce las

reacciones sobre un lecho fijo de catalizador. El proceso opera a temperatura más baja que el proceso Penex. El índice de octanaje para este proceso es de 13,7

En el proceso se producen isómeros del n-pentano y n-hexano como el isopentano y 2,2 y 2,3-dimetilbutanos respectivamente. A continuación, se representa en la figura 9 un diagrama del proceso y la composición de las corrientes de entrada y salida se observa en la tabla 9 (Meyers, 2003).

Figura 9.

Unidad de isomerización Par-Isom



Nota. Tomado de (Meyers, 2003)

A continuación, se muestra en la tabla 9 la composición de las corrientes de entrada y salida del proceso. Las corrientes están conformadas en su mayoría de parafinas y naftenos con sus respectivos isómeros. Además, se evidencia el aumento de la concentración de isómeros de las parafinas y naftenos presentes (Meyers, 2003).

Tabla 9.*Estimación de corrientes de la Unidad de isomerización Par-Isom*

Componentes	Alimentación al reactor (BPD)	Productos del reactor (BPD)	Porcentaje en peso de la alimentación (wt %)	Porcentaje en peso de los productos (wt %)
isobutano	10	278	0,1	2,77085617
<i>n</i> -butano	58	135	0,58	1,34555965
isopentano	1684	3185	16,84	31,7452407
<i>n</i> -pentano	2907	1368	29,07	13,6350045
Ciclopentano	169	169	1,69	1,68444134
2,2-dimetilbutano	51	984	0,51	9,80763481
2,3-dimetilbutano	193	461	1,93	4,59483704
2-metilpentano	1208	1555	12,08	15,4988538
3-metilpentano	880	903	8,8	9,00029901
<i>n</i> -hexano	1935	572	19,35	5,70118609
metilciclopentano	195	216	1,95	2,15289545
Ciclohexano	341	121	3,41	1,20602013
Benceno	175	0	1,75	0
<i>n</i> -heptano	194	86	1,94	0,85717133

Nota: Recuperado de (Meyers, 2003).

2.3. Química computacional

La química computacional se basa en el estudio de un conjunto de métodos, que nos permite desarrollar el cálculo de propiedades y así poder comparar las estructuras químicas de manera sistemática mediante el uso de la computadora (Lewars, 2011).

El desarrollo de la tecnología computacional acoplado a la química, ha permitido proporcionar una generación de sistemas que permitan calcular la geometría y la energía

molecular de estructuras químicas a ser analizadas, estos sistemas permiten generar datos que pueden ser interpretados previamente en una investigación experimental, que servirán para la interpretación de los resultados obtenidos, así como también ayudara a reducir información que no sea accesible experimentalmente (Cabrera, Rodríguez, & Tesorero, 2016).

A continuación, se presentan algunas propiedades que comúnmente son investigadas computacionalmente.

- **Geometría molecular.** Permite el estudio de las distintas formas que pueden presentar una molécula, como las longitudes del enlace y ángulos tipo diedros.
- **Energías de moléculas y estados de transición.** Esto nos indica si un isómero se favorece en el equilibrio, así como también nos ayuda a predecir qué tan rápida es una reacción química.
- **Reactividad química.** Esta propiedad nos permite predecir si una molécula puede ser atacado por varios reactivos, de acuerdo con el tipo de sitio nucleofílico o electrófilo.
- **Propiedades físicas de sustancias.** Es este punto se analizan propiedades como la resistencia, punto de fusión de un polímero, etc.

2.3.1 Término in silico.

El término in silico se refiere a buscar plataformas digitales y computacionales, que permitan proporcionar predicciones moleculares necesarias para mejorar las propiedades de los compuestos que se están analizando, programas utilizados para construir, visualizar y analizar propiedades de estructuras químicas son ChemDraw, Pymol, Chemcraft, Avogadro, entre otros (Petitjean & Camproux, 2016).

2.4. Propiedades fisicoquímicas.

2.4.1. Nomenclatura IUPAC

El grupo internacional de química pura y aplicada denominada IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry), desarrollo el sistema de reglas para

la nomenclatura IUPAC, dichas reglas son usadas para nombrar a los compuestos orgánicos. Son cuatro reglas que rigen el proceso para nombrar a la estructura química de acuerdo a la nomenclatura IUPAC (Wade, 2011).

1. Seleccionar la cadena principal
2. Numerar la cadena principal
3. Nombrar los grupos alquilo
4. Organizar grupos múltiples

2.4.2. Peso molecular

El peso molecular o también llamado masa molecular de un compuesto químico es el resultado de la sumatoria, entre la multiplicación de cada átomo presente en el compuesto por su respectiva masa molecular, previo al método del cálculo del peso molecular es necesario considerar la formula molecular del compuesto y sus respectivos pesos atómicos de cada uno (Wade, 2011).

2.4.3. Análisis elemental

El análisis elemental permite determinar el contenido de carbono, hidrógeno, nitrógeno y azufre, que se encuentran presentes en una muestra orgánica o inorgánica. Para determinar el análisis elemental de un compuesto químico se necesita de una muestra pura del compuesto a ser analizado, la técnica instrumental que permite obtener la masa molecular y la formula molecular de un compuesto es la espectroscopia de masas (Yurkanis, 2008).

2.4.4. Fórmula química

Existen diversas formas en las cuales se pueden representar a las moléculas orgánicas, estas fórmulas químicas nos proporcionaran información de cómo va a estar expresada gráficamente los elementos que están constituyendo el compuesto químico. A continuación, se detalla dos fórmulas químicas empleadas usualmente (Wade, 2011).

a. Fórmula molecular

En esta fórmula solo se proporcionan el número de átomos de cada elemento presentes en una molécula del compuesto. A continuación se representa mediante un ejemplo, para la molécula de isobutano donde su fórmula molecular será: C_4H_{10} , como se puede observar la formula está compuesta por 4 átomos de carbono y 10 átomos de hidrogeno (Wade, 2011).

b. Fórmulas de líneas y ángulos

Se utiliza para estructuras orgánicas, cuyos compuestos son cíclicos o lineales. En este tipo de fórmulas al átomo de carbono se lo puede identificar cuando dos líneas se unen, o cuando una línea comience o finalice, los átomos de nitrógeno, oxígeno y halógenos si aparecen en la estructura química, mientras que los átomos de hidrógeno no se muestran. Se tiene que tomar en cuenta que para cada átomo de carbono se tiene que tener los átomos suficientes de hidrógeno para dar un total de cuatro enlaces que permita cumplir la ley del octeto (Wade, 2011).

Por ejemplo, para la molécula de n-hexano la fórmula lineal se lo puede observar en la figura 10.

Figura 10.

Fórmula lineal



Nota. Tomado de (Wade, 2011).

2.4.5. Átomos pesados en una estructura química

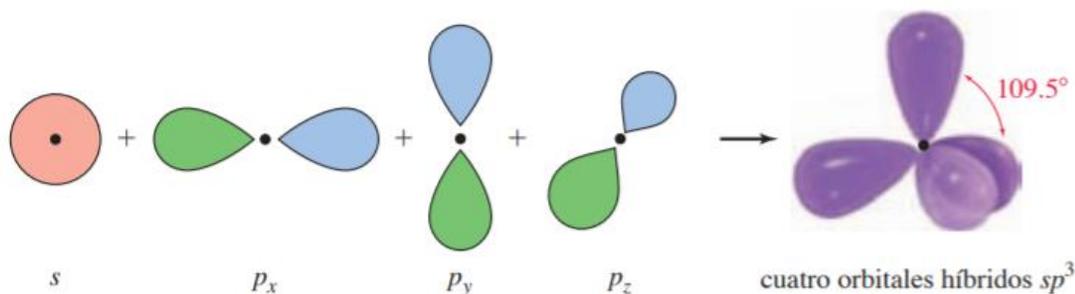
En una molécula orgánica como en las estructuras químicas de los alcanos o en los aromáticos, el número de átomos pesados presentes en la , resulta de la sumatoria de los átomos presentes en la estructura química, se consideran como átomos pesados al carbono ©, oxígeno (O) y nitrógeno (N) (Mcmurry, 2008).

2.4.6. Hibridación sp^3

En la mayoría de los compuestos orgánicos el átomo de carbono está enlazado con cuatro átomos. Si los enlaces están orientados de tal forma que estén lo más alejados posibles, estos enlaces tienden a formar un tetraedro regular es decir sus ángulos de enlace son de $109,5^\circ$. El arreglo tetraédrico resulta de la combinación del orbital s con sus tres orbitales p, estos cuatro orbitales se los conoce como orbitales híbridos sp^3 debido a que están formados por un orbital s y tres orbitales p, como por ejemplo para el metano, como se lo puede visualizar en la figura 11 (Wade, 2011).

Figura 11.

Hibridación sp^3 para el metano



Nota. Tomado de (Wade, 2011).

2.4.7. Enlaces rotables

En la estructura química es muy importante tener en cuenta cuáles son los enlaces que están rotando y cuáles no. Si un enlace rota con facilidad, esta molécula puede rotar de acuerdo a los distintos arreglos angulares de átomos, para enlaces que no pueden rotar en distintos arreglos angulares pueden generar isómeros con propiedades diferentes (Wade, 2011).

2.4.8. Aceptores y donantes de hidrógeno

Hay diversas formas en las que se puede calcular el número de átomos de hidrógeno aceptores o donadores en una estructura molecular, el donante de enlaces hidrógeno H es considerado como el aceptor de pares de electrones, mientras que el

aceptor de los enlaces H se los llama donantes de pares de electrones (Petitjean & Camproux, 2016).

2.4.9. Refractividad molar (RM)

La refractividad molar está relacionada con el volumen de las moléculas y con la fuerza de dispersión de London, es considerado como un parámetro estérico mixto en la que se mide el volumen molecular y la facilidad de polarizarse. La RM es definida mediante la ecuación de Lorentz-Lorenz como el producto del volumen molar por la polarizabilidad (Cabrera et al., 2016).

2.4.10. Área de superficie polar (PSA)

El PSA sirve como descriptor fisicoquímico que es muy utilizado mayormente en la fabricación de fármacos, y se lo puede determinar mediante la suma del área superficial de todos los átomos polares que están presentes en una molécula estructural tridimensional, por lo tanto para hallar el PSA es muy importante tener en cuenta el modelo de la estructura con conformación 3D, para poder hallar los cálculos de dicho compuesto químico (Petitjean & Camproux, 2016).

2.4.11. Coeficiente de partición octanol/agua (Lipofilia)

El coeficiente de partición octanol/agua indica la posición que tomará una sustancia cuando existe una fase orgánica y una acuosa, esta propiedad fisicoquímica permite identificar la existencia de una capa de hidrocarburo que estará flotando sobre el agua. Cada hidrocarburo presentan valores distintos de coeficiente de partición (Saval, Lara, Lesser, & Nieto, 2004).

2.4.12. Solubilidad en agua

La solubilidad en agua de los hidrocarburos van disminuyendo de acuerdo al grupo alquilo presente en la estructura química, por ejemplo para un grupo alquilo con cuatro átomos de carbono son lo suficientemente grandes para que algunos isómeros no sean miscibles, por lo tanto esta molécula no se va a disolver en agua (Wade, 2011).

2.4.13. Campos de fuerza

Los campos de fuerza son procesos que permite encontrar una estructura molecular que corresponda a un estado de energía baja, de acuerdo a sus distintas coordenadas espaciales, permiten también generar configuraciones distintas a la original de acuerdo a los distintos tipos de optimización geométrica (Jász, Rák, Ladjánszki, & Cserey, 2019).

a. UFF

Es un campo de fuerza general que está diseñado para funcionar con todos los átomos de la tabla periódica, determina también los parámetros en función del elemento, su hibridación y conectividad, la principal diferencia entre los otros campos de fuerza es que no usa interacciones electroestáticas, por tanto, no puede manejar enlaces de hidrógeno (Jász et al., 2019).

b. GAFF

Este tipo de campo de fuerza es utilizado para moléculas orgánicas estas pueden ser proteínas, ácidos nucleicos o compuestos farmacéuticos. Estos compuestos en su mayoría están formadas por átomos como: hidrógeno (H), carbono (C), nitrógeno (N), oxígeno (O), fósforo (P) y halógenos (Wang, Wolf, Caldwell, Kollman, & Case, 2004)

c. MMFF94

El MMFF94, conocido por sus siglas en inglés como Merck Molecular Force Field, se utiliza el método de cálculo de van der Waals, que es computacionalmente más intensivo y preciso en comparación con los otros campos de fuerza y es ampliamente usado en cálculos de química orgánica y para el análisis de fármacos (Jász et al., 2019).

d. MMFF94s

El MMFF94, conocido por sus siglas en inglés como Merck Molecular Force Field, es un campo de fuerza ligeramente modificado del MMFF94, debido a que utiliza

diferentes parámetros para la flexión fuera del plano y en algunos casos las interacciones de torsión, se aplica especialmente para el análisis de hidrocarburos (Jász et al., 2019).

2.5. Fuerzas Intermoleculares

Se define como fuerzas intermoleculares a la fuerza de atracción entre moléculas. Estas interacciones tienen mayor influencia en materia que se encuentra en fases condensadas como líquido o sólido. El punto de ebullición de cada compuesto indica la magnitud de la fuerza intermolecular. Es decir, si un compuesto necesita menos energía para cambiar de fase se dice que está unida por fuerzas intermoleculares más débiles (Chang & Goldsdy, 2017).

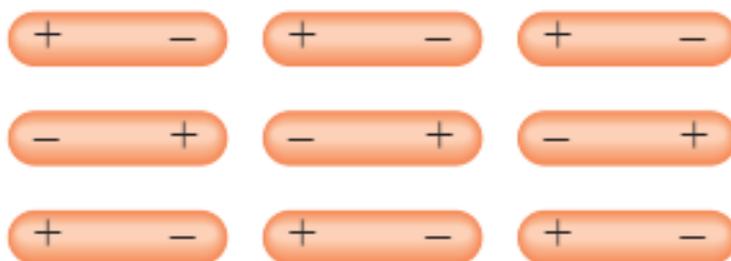
Entre las principales fuerzas intermoleculares tenemos:

2.5.1. Fuerzas dipolo – dipolo

Son las fuerzas de atracción que existen entre moléculas polares, en otras palabras, entre moléculas que poseen momentos dipolares, cabe resaltar que a mayor momento dipolar mayor será la fuerza. Poseen un origen electrostático y se las entiende mediante la ley de Coulomb (Chang & Goldsdy, 2017).

Figura 12.

Orientación de moléculas polares en un sólido



Nota: Tomado de (Chang & Goldsdy, 2017).

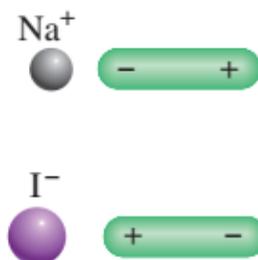
2.5.2. Fuerzas ion – dipolo

Las fuerzas de ion – dipolo son fuerzas que también se explica con la ley de Coulomb y consiste en la atracción entre un ion, seas este positivo (catión) o negativo

(anión), y una molécula polar. La intensidad de esta fuerza depende tanto de la magnitud dipolar y el tamaño de la molécula como de la carga y el tamaño del ion (Chang & Goldsdy, 2017).

Figura 13.

Dos tipos de interacción ion – dipolo



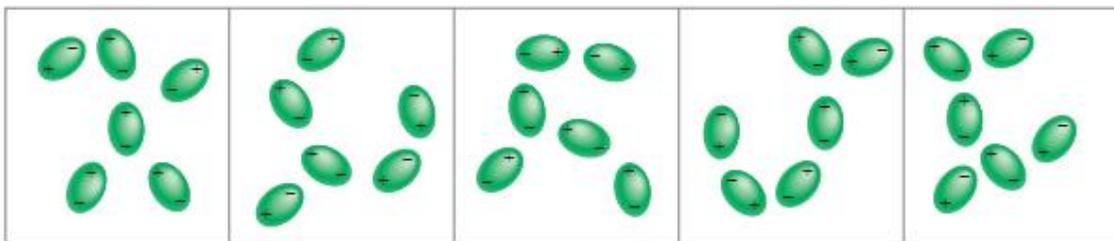
Nota: Tomado de (Chang & Goldsdy, 2017).

2.5.3. Fuerzas de dispersión

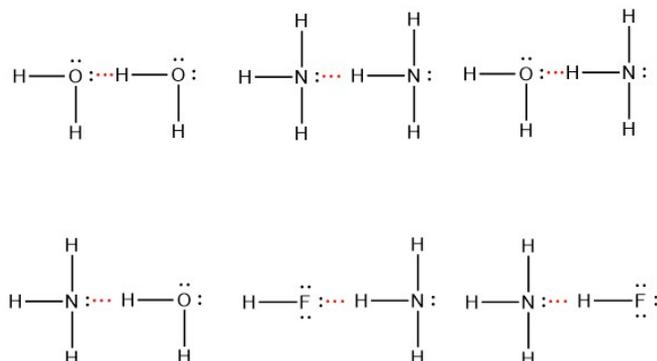
Cuando un ion o una molécula polar se aproxima a un átomo, la distribución electrónica del átomo se modifica o distorsiona por la fuerza ejercida por el ion o molécula polar lo que da lugar el dipolo inducido. Se conoce como interacción ion – dipolo inducido a la interacción atractiva entre un ion y un dipolo inducido, por otra parte, se conoce como interacción dipolo – dipolo inducido a la atracción entre una molécula polar y un dipolo inducido.

Un dipolo instantáneo es un momento dipolar que se genera por las posiciones específicas de los electrones de un átomo y dura una fracción de segundo. Es posible que el dipolo instantáneo de un átomo pueda inducir un dipolo en cada átomo vecino y este puede generar dipolos temporales en los átomos que lo rodean.

Entonces las fuerzas de dispersión son fuerzas de atracción que se generan por dos dipolos temporales inducidos en moléculas o átomos. Esta fuerza es directamente proporcional a la masa molar ya que las moléculas que presentan mayor masa poseen mayor cantidad de electrones (Chang & Goldsdy, 2017).

Figura 14.*Interacción entre dipolos inducidos**Nota:* Tomado de (Chang & Goldsdy, 2017).**2.5.4. Enlaces de hidrógeno**

Los puntos de ebullición de compuestos parecidos que poseen elementos del mismo grupo periódico son directamente proporcionales a su masa, debido al aumento de las fuerzas de dispersión. Los compuestos con hidrógeno del grupo 4A siguen esta tendencia, pero los compuestos de los grupos 5A, 6A y 7A no siguen esta tendencia. El compuesto más ligero posee un punto de ebullición más alto y viceversa. Esto se debe a una tracción intermolecular más fuerte llamada enlace de hidrógeno, la cual es un tipo especial de interacción dipolo – dipolo entre el hidrógeno y un átomo electronegativo de O, N, F (Chang & Goldsdy, 2017).

Figura 15.*Enlaces de hidrógeno en el agua, amoníaco y fluoruro de hidrógeno**Nota:* Tomado de (Chang & Goldsdy, 2017).

Capítulo III

3. Metodología de desarrollo del proyecto

3.1. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el flujo de entrada y salida en el proceso de isomerización catalítica.

3.1.1. *Búsqueda de datos internacionales.*

La revisión bibliográfica se llevó a cabo en base a una búsqueda realizada en libros y papers referentes al proceso de isomerización catalítica, donde se presenta las composiciones de las corrientes de entrada y salida. Dicha información se encuentra tabulada en el capítulo I para cada una de las posibles variaciones que tiene el proceso.

La bibliografía reporta que el proceso de isomerización catalítica trabaja con corrientes de nafta ligera, constituidas principalmente por compuestos de entre 5 a 6 carbonos y en pequeñas cantidades se encuentra moléculas de 1 a 4 carbonos en su estructura molecular. Además, cabe resaltar que el proceso TIP inyecta hidrógeno con el fin de evitar la formación de alquenos.

Documentos nacionales optan por generalizar el nombre de los compuestos presentes en el proceso de isomerización catalítica como nafta ligera. Este tipo de alimentación está constituido por hidrocarburos de entre 5 y 6 carbonos en su estructura molecular. Por lo que para la generación de la lista de compuestos de análisis únicamente se tomará en cuenta la bibliografía a nivel internacional debido a que se encuentra mejor detallada la información referente a la caracterización de las corrientes de entrada y salida al proceso.

3.1.2. *Obtención, organización y reporte de resultados*

En base a la revisión bibliográfica realizada en el capítulo I, se extrajo una lista generalizada de los compuestos presentes en cada una de las corrientes de entrada y salida de los diferentes procesos de isomerización catalítica. En dicha lista se evidencia la presencia de parafinas, naftenos y sus correspondientes isómeros.

Los datos fueron organizados mediante el uso de una tabla en donde se enlistaron los compuestos presentes en las corrientes. En la mayoría de las corrientes se evidenció que la composición era similar casi en su mayoría, por lo que se reportó cada compuesto una sola vez en la tabla formulada.

3.2. Procesamiento y obtención de estructuras químicas 2D y propiedades químicas básicas

3.2.1. Generación de estructuras químicas en 2D

Para este punto se ocupó el programa graficador químico “ChemDraw 18.2”, ya que dicho software permite dibujar las distintas moléculas. A continuación, mediante un ejemplo con el etano, se muestran los pasos seguidos para la obtención de la estructura 2D de cada compuesto.

Paso 1: en la sección de herramientas se selecciona la opción solid bonds, esta opción permite dibujar la estructura química del compuesto de interés, como se observa en la figura 16. Paso 2: se selecciona toda la molécula dibujada, después se dirige a la ventana file y se selecciona la opción Apply Document Settings from, finalmente, se elige la opción ACS Document 1996 y se obtiene la estructura 2D, como se observa en la figura 17.

Figura 16.

Generación de estructuras químicas 2D paso 1

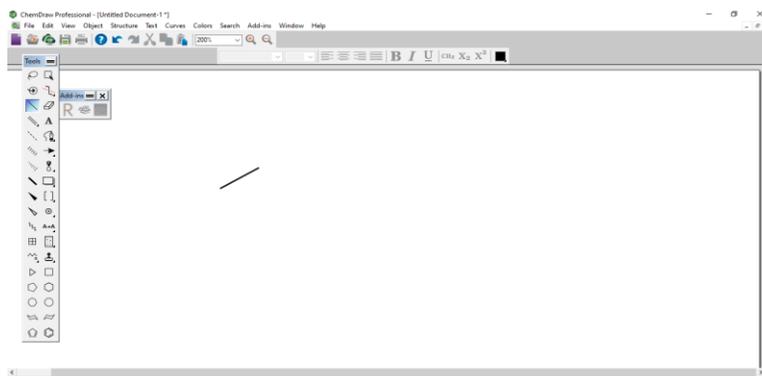
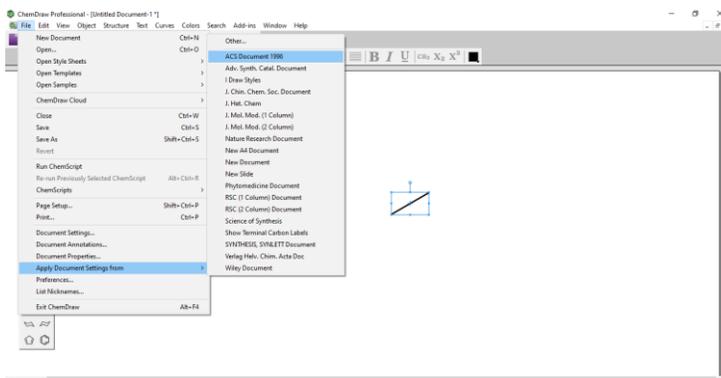


Figura 17.

Generación de estructuras químicas 2D paso 2



3.2.2. Procesamiento de propiedades básicas

Mediante el uso del programa ChemDraw, se procede a la obtención de las propiedades químicas básicas. A continuación, mediante un ejemplo con el etano, se muestran los pasos seguidos para la obtención de dichas propiedades.

Paso 1: se señala toda la molécula dibujada, se selecciona la pestaña view y se elige la opción show analysis window, como se observa en la figura 18. Paso 2: en la ventana de show analysis window, se selecciona los puntos de fórmula, peso molecular y análisis elemental, como se observa en la figura 19. Paso 3: Finalmente se pega y se procede a cambia manualmente el idioma del texto de inglés a español, como se observa en la figura 20.

Figura 18.

Procesamiento de propiedades básicas paso 1

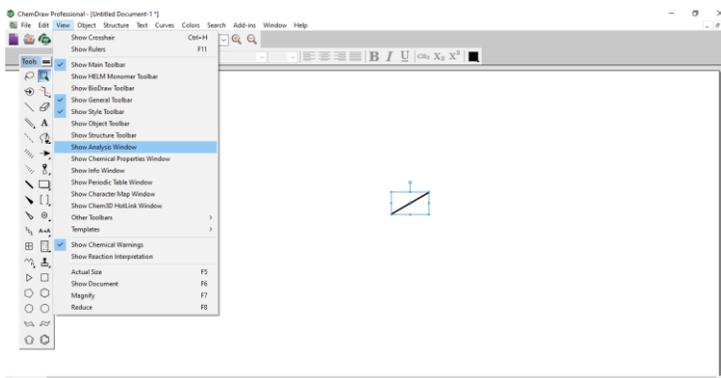
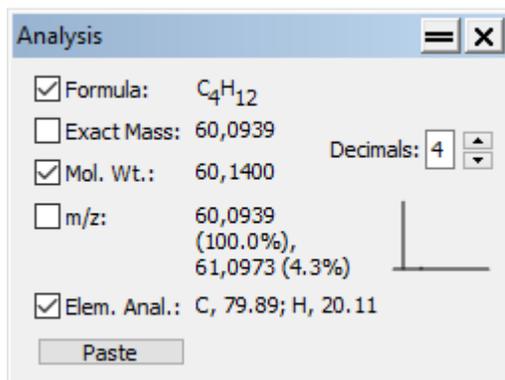
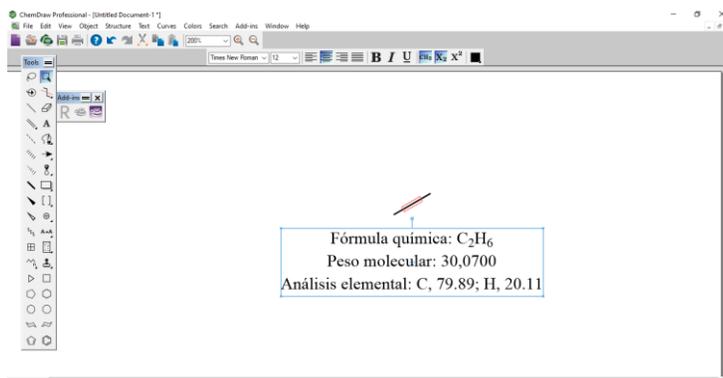


Figura 19.*Procesamiento de propiedades básicas paso 2***Figura 20.***Procesamiento de propiedades básicas paso 3*

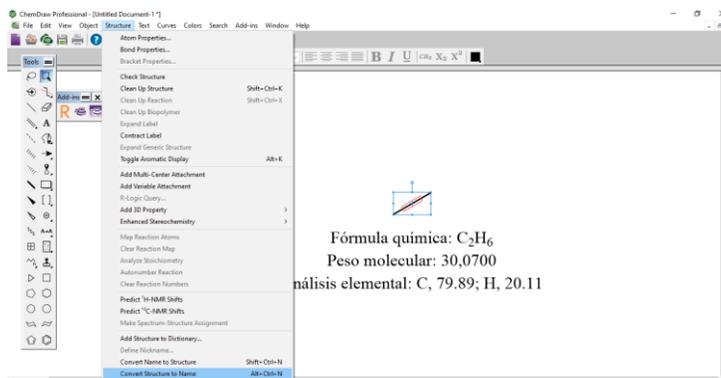
3.2.3. Generación automática de nomenclatura IUPAC

Por intermedio del programa ChemDraw se procede a la generación de la nomenclatura IUPAC. A continuación, mediante un ejemplo con el etano, se muestran los pasos seguidos para la obtención de dichas propiedades.

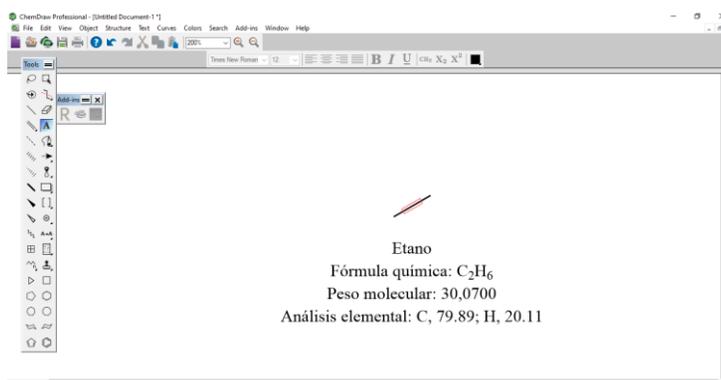
Paso 1: se señala toda la estructura de análisis, después, en la pestaña structure se señala la opción Convert structure to name. Paso 2: finalmente se procede a generar el nombre y a cambiar el texto a español, como se observa en la figura 21 y 22 respectivamente.

Figura 21.

Generación automática de nomenclatura IUPAC paso 1

**Figura 22.**

Generación automática de nomenclatura IUPAC paso 2



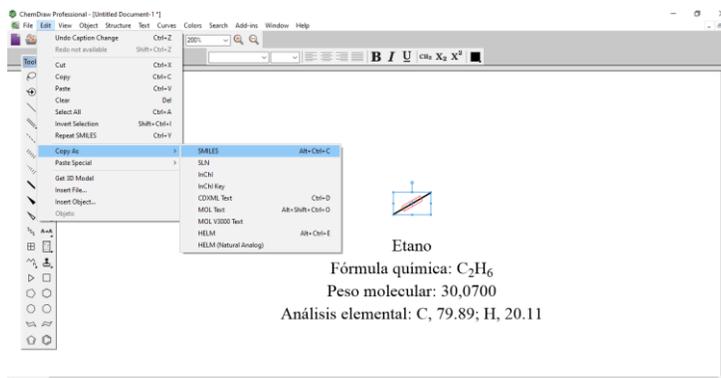
3.2.4. Generación automática del código SMILES

Por medio del programa ChemDraw se procede a la generación del código SMILES. A continuación, mediante un ejemplo con el etano, se muestran los pasos seguidos para la obtención de dichas propiedades.

Paso 1: se selecciona toda la molécula, en la pestaña Edit seleccionamos la opción copy As, seguidamente seleccionar la opción SMILES, como se observa en la figura 23.
Paso 2: Mediante una tabla en el programa Excel se copia el código SMILES generado para reportarlo en resultados.

Figura 23.

Generación automática del código SMILES paso 1



3.2.5. Obtención, organización y reporte de resultados

En este punto se generan tablas individuales de los puntos solicitados anteriormente para cada uno de los compuestos presentes en el proceso de isomerización catalítica con el fin de obtener una mejor organización. Los archivos generados para cada uno de los compuestos se los guardó en formato “.MOL”.

3.3. Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas

3.3.1. Estudio de la interfaz de la plataforma “SwissADME”

La plataforma Suiza de Bioinformática “SwissADME” permite reportar una serie de propiedades específicas para cada uno de los compuestos de interés en este proyecto. Mediante el código SMILES generado para cada molécula en el programa ChemDraw se procedió a reportar tres tablas que son: propiedades físicoquímicas, lipofilia y solubilidad en agua.

3.3.2. Procesamiento a través del código SMILES

Mediante el uso de la plataforma Suiza de Bioinformática SwissADME se procede a la generación de las tablas de propiedades para cada uno de los compuestos. A continuación, mediante un ejemplo con el etano, se muestran los pasos seguidos para la obtención de dichas propiedades.

Paso 1: en Google se buscó la plataforma Suiza de Bioinformática “SwissADME”, como se observa en la figura 24. Paso 2: en la sección enter a list of SMILES here, se colocó el código SMILES generado por el programa ChemDraw juntamente con el nombre de la molécula y realizamos click en “Run”, como se observa en la figura 25. Paso 3: finalmente, se copió las tablas requeridas para este trabajo.

Figura 24.

Procesamiento a través del código SMILES paso 1



Nota: Tomado de (Daina, Michielin, & Zoete, 2017).

Figura 25.

Procesamiento a través del código SMILES paso 2



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

3.3.3. Obtención, organización y reporte de resultados

Las tablas obtenidas en la plataforma Suiza de Bioinformática “SwissADME” fueron copiadas en el programa Excel con el fin de cambiar el idioma a español para un mejor entendimiento. Además, se copió la estructura lineal y el radar de biodisponibilidad generada por la plataforma. Finalmente se reportó dichas tablas en el capítulo de resultados.

3.4. Cálculo y obtención de estructuras 3D

3.4.1. Elaboración de archivos con coordenadas 3D

Los archivos generados en el programa ChemDraw se los abrió en el programa “Chemcraft”, con el fin de que este software genere las coordenadas espaciales tanto para las moléculas optimizadas y no optimizadas. A continuación, mediante un ejemplo con la estructura química de etano optimizado, se muestran los pasos seguidos para la obtención de las coordenadas espaciales.

Paso 1: se abrió el archivo generado con el programa ChemDraw en el software Chemcraft, como se observa en la figura 26. Paso 2: Seleccionar la pestaña Coord y reportar los valores obtenidos en una tabla, como se observa en la figura 27.

Figura 26.

Elaboración de archivos con coordenadas 3D paso 1

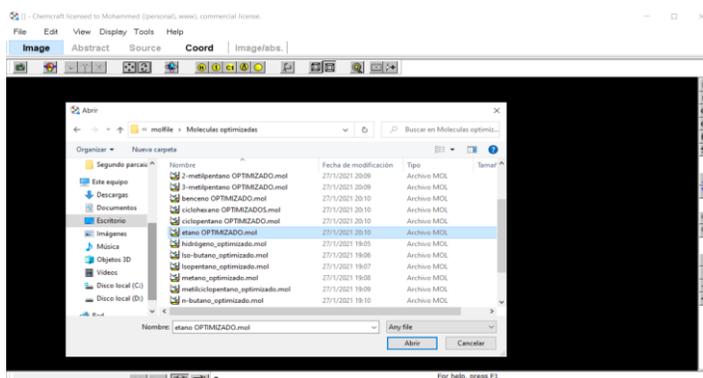


Figura 27.

Elaboración de archivos con coordenadas 3D paso 2

	Image	Abstract	Source	Coord	Image/Label
C1	0.974800000	0.082400000	0.044600000		
2	2.471700000	0.202400000	0.344600000		
4	0.590400000	0.364700000	0.569000000		
1	0.590400000	-0.364700000	0.569000000		
2	0.590400000	0.364700000	-0.569000000		
1	2.971400000	0.072800000	1.072800000		
2	2.971400000	0.072800000	-1.072800000		
1	2.971400000	-0.799900000	-0.471900000		

3.4.2. Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas.

Los archivos generados en el programa ChemDraw se los abrió en el programa “Avogadro”, con el fin de que este software genere una molécula en 3D. A continuación, mediante un ejemplo con el etano, se muestran los pasos seguidos para la obtención de la estructura 3D.

Paso 1: se abrió el archivo generado con el programa ChemDraw en el software “Avogadro”, como se observa en la figura 28. Paso 2: se generó la estructura 3D y se reportó, como se observa en la figura 29. Paso 3: Se guarda el archivo en formato “.mol”, como se observa en la figura 30.

Figura 28.

Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas paso 1

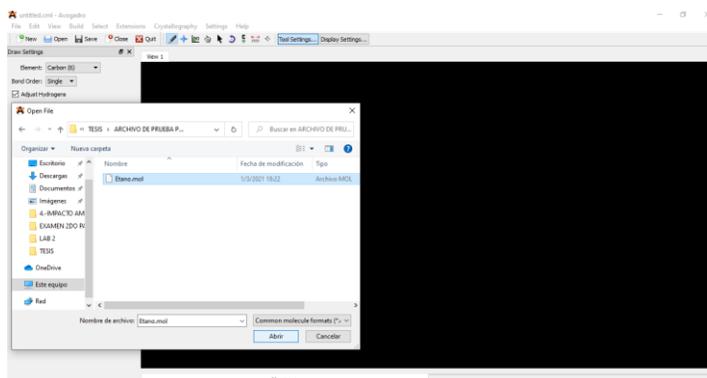
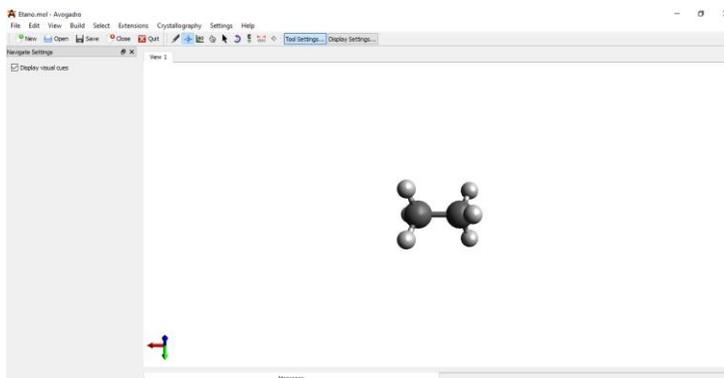
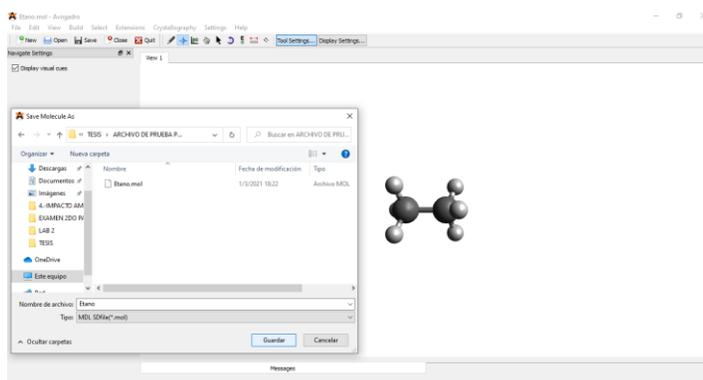


Figura 29.

Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas paso 2

**Figura 30.**

Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas paso 3



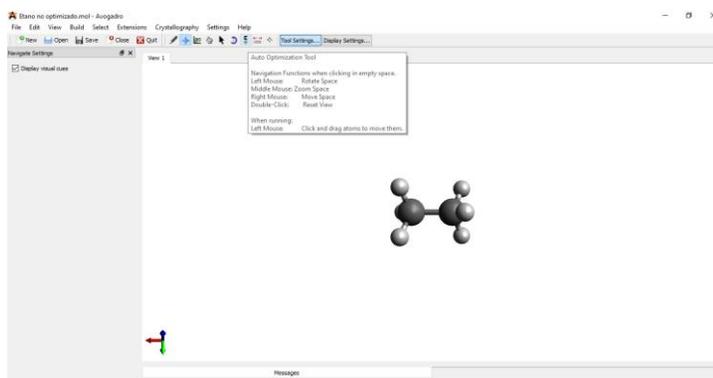
3.4.3. Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas optimizadas

Para este punto, se utilizó la estructura molecular en 3D y se obtuvo la molécula optimizada mediante el uso de fuerzas de campo. Estas fuerzas permiten obtener una estructura más realista de la molécula. A continuación, mediante un ejemplo con el etano, se muestran los pasos seguidos para la obtención de la estructura 3D optimizada.

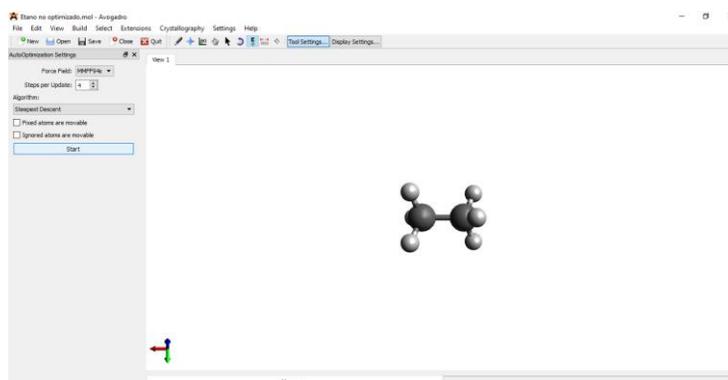
Paso 1: se seleccionó la herramienta de auto optimización. Paso 2. Se eligió la fuerza de campo “MMFF94s” debido a que la bibliografía reporta que este campo es adecuado para este tipo de moléculas y se presiona “Start”. Paso 3: finalmente se obtiene, se guarda y reporta la estructura 3D optimizada, como se observa en las figuras 31, 32. 33 respectivamente.

Figura 31.

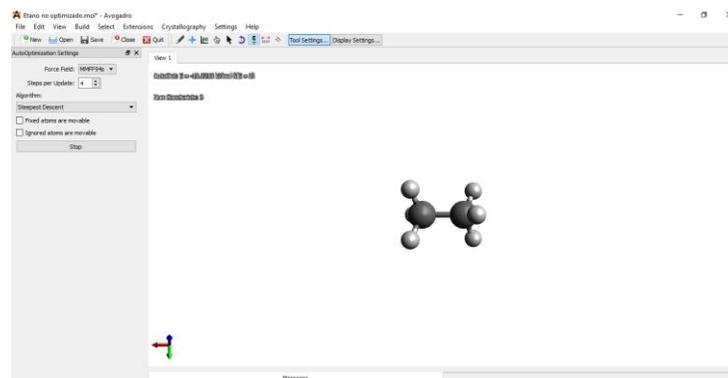
Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas optimizadas paso 1

**Figura 32.**

Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas optimizadas paso 2

**Figura 33.**

Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas optimizadas paso 3

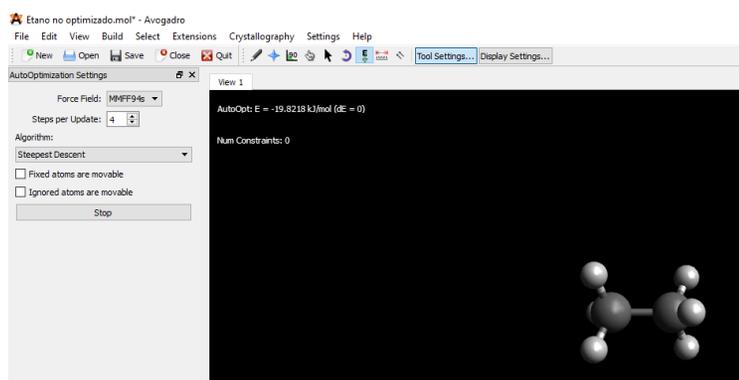


3.4.4. Reporte la energía de optimización

La energía de optimización se derivó del proceso de optimización de la estructura 3D. esta energía se encuentra en la parte superior izquierda de la ventana de trabajo. A continuación, mediante un ejemplo con el etano, se muestran los pasos seguidos para la obtención de la energía de optimización, como se muestra en la figura 34.

Figura 34.

Reporte la energía de optimización



3.4.5. Obtención, organización y reporte de resultados

Para este punto se reportó la estructura química 3D no optimizada y optimizada, la energía de optimización y las coordenadas espaciales para cada molécula presente en las corrientes de entrada y salida del proceso de isomerización catalítica. Cabe resaltar que se usó los programas "Pymol" y "Chemcraft 18.2" con el fin de incrementar la calidad de las imágenes de las estructuras obtenidas en el programa "Avogadro".

Capítulo IV

4. Resultados y discusión

4.1. Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en los flujos de entrada y salida en el proceso de isomerización catalítica

4.1.1. Búsqueda de datos internacionales

Se generó una tabla general de los compuestos presentes en las corrientes de entrada y salida al proceso reportados por fuentes bibliográficas, como se observa en la tabla 10. Dentro de dicha tabla se verifica la presencia de hidrocarburos livianos, especialmente los que poseen entre 5 y 6 carbonos en su estructura molecular. Además, se observa que en el proceso de isomerización catalítica no se producen alquenos.

Tabla 10.

Compuesto de la corriente de entrada al proceso de isomerización catalítica

#	Compuestos
1	Hidrógeno
2	Metano
3	Etano
4	Propano
5	Iso-butano
6	<i>n</i> -butano
7	Iso-pentano
8	<i>n</i> -pentano
9	2,2-dimetilbutano
10	2,3-dimetilbutano
11	<i>n</i> -hexano
12	2-metilpentano
13	3-metilpentano
14	<i>n</i> -heptano
15	2,2-dimetilhexano

#	Compuestos
16	2,3-dimetilhexano
17	Iso-hexano
18	Metilciclopentano
19	Benceno
20	Ciclopentano
21	Ciclohexano

4.2. Procesamiento y obtención de estructuras químicas 2D y propiedades químicas básicas

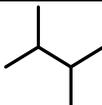
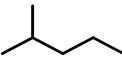
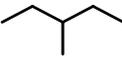
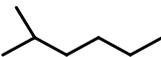
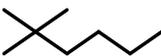
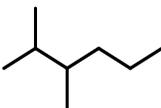
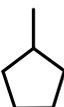
4.2.1. Generación de estructuras químicas en 2D

Mediante el uso del programa ChemDraw se generó las estructuras químicas 2D de los compuestos presentes en las corrientes de entrada y salida del proceso de isomerización catalítica reportados en la bibliografía, como se observa en la tabla 11. En esta lista se encuentra presentes parafinas, naftenos y sus respectivos isómeros. Además, se evidenció la ausencia de olefinas.

Tabla 11.

Estructuras químicas 2D de los compuestos de las corrientes de entrada y salida del proceso de isomerización catalítica

#	NOMBRE	Estructura química 2D
1	hidrógeno	H-H
2	metano	CH ₄
3	etano	
4	propano	
5	isobutano	
6	n-butano	
7	isopentano	
8	2,2-dimetilbutano	

#	NOMBRE	Estructura química 2D
9	2,3-dimetilbutano	
10	<i>n</i> -pentano	
11	2-metilpentano	
12	3-metilpentano	
13	<i>n</i> -hexano	
14	2-metilhexano	
15	2,2-dimetilhexano	
16	2,3-dimetilhexano	
17	<i>n</i> -heptano	
18	ciclopentano	
19	metilciclopentano	
20	benceno	
21	ciclohexano	

4.2.2. Procesamiento de propiedades básicas.

Las propiedades químicas básicas fueron obtenidas mediante el uso del software “ChemDraw”. Dicho programa reporta la fórmula química, el peso molecular y el análisis elemental de cada uno de los compuestos presentes en el proceso de isomerización catalítica reportados en la bibliografía.

a. Propiedades químicas básicas del hidrógeno.

Como se puede observar en la tabla 12, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de hidrógeno posee un peso molecular de 2,0160 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es H₂, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta en su totalidad por hidrógeno.

Tabla 12.

Propiedades químicas básicas del hidrógeno

Fórmula química	H₂
Peso molecular	2,0160
Análisis elemental	H, 100.00

b. Propiedades químicas básicas del metano.

Como se puede observar en la tabla 13, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de metano posee un peso molecular de 16,0430 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es CH₄, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 74,87 por ciento de carbono y 25,13 por ciento de hidrógeno.

Tabla 13.

Propiedades químicas básicas del metano

Fórmula química	CH₄
Peso molecular	16,0430
Análisis elemental	C, 74.87; H, 25.13

c. Propiedades químicas básicas del etano.

Como se puede observar en la tabla 14, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de etano posee un peso molecular de 30,0700 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₂H₆, por lo que se

evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 79,89 por ciento de carbono y 20,11 por ciento de hidrógeno.

Tabla 14.

Propiedades químicas básicas del etano

Fórmula química	C₂H₆
Peso molecular	30,0700
Análisis elemental	C, 79.89; H, 20.11

d. Propiedades químicas básicas del n-propano.

Como se puede observar en la tabla 15, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de propano posee un peso molecular de 44,0970 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₃H₈, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 81,71 por ciento de carbono y 18,29 por ciento de hidrógeno.

Tabla 15.

Propiedades químicas básicas del propano

Fórmula química	C₃H₈
Peso molecular	44,0970
Análisis elemental	C, 81.71; H, 18.29

e. Propiedades químicas básicas del isobutano.

Como se puede observar en la tabla 16, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de isobutano posee un peso molecular de 58,1240 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₄H₁₀, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 82,66 por ciento de carbono y 17,34 por ciento de hidrógeno.

Tabla 16.*Propiedades químicas básicas del isobutano*

Fórmula química	C₄H₁₀
Peso molecular	58,1240
Análisis elemental	C, 82.66; H, 17.34

f. Propiedades químicas básicas del n-butano.

Como se puede observar en la tabla 17, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de n-butano posee un peso molecular de 58,1240 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₄H₁₀, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 82,66 por ciento de carbono y 17,34 por ciento de hidrógeno.

Tabla 17.*Propiedades químicas básicas del n-butano*

Fórmula química	C₄H₁₀
Peso molecular	58,1240
Análisis elemental	C, 82.66; H, 17.34

g. Propiedades químicas básicas del isopentano.

Como se puede observar en la tabla 18, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de isopentano posee un peso molecular de 72,1510 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₅H₁₂, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 83,24 por ciento de carbono y 16,76 por ciento de hidrógeno.

Tabla 18.*Propiedades químicas básicas del isopentano*

Fórmula química	C₅H₁₂
Peso molecular	72,1510
Análisis elemental	C, 83.24; H, 16.76

h. Propiedades químicas básicas del 2,2-dimetilbutano.

Como se puede observar en la tabla 19, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de 2,2-dimetilbutano posee un peso molecular de 86,1780 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₆H₁₄, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 83,62 por ciento de carbono y 16,38 por ciento de hidrógeno.

Tabla 19.*Propiedades químicas básicas del 2,2-dimetilbutano*

Fórmula química	C₆H₁₄
Peso molecular	86,1780
Análisis elemental	C, 83.62; H, 16.38

i. Propiedades químicas básicas del 2,3-dimetilbutano.

Como se puede observar en la tabla 20, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de 2,3-dimetilbutano posee un peso molecular de 86,1780 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₆H₁₄, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 83,62 por ciento de carbono y 16,38 por ciento de hidrógeno.

Tabla 20.*Propiedades químicas básicas del 2,3-dimetilbutano*

Fórmula química	C₆H₁₄
Peso molecular	86,1780
Análisis elemental	C, 83.62; H, 16.38

j. Propiedades químicas básicas del n-pentano.

Como se puede observar en la tabla 21, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de n-pentano posee un peso molecular de 72,1510 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₅H₁₂, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 83,24 por ciento de carbono y 16,76 por ciento de hidrógeno.

Tabla 21.*Propiedades químicas básicas del n-pentano*

Fórmula química	C₅H₁₂
Peso molecular	72,1510
Análisis elemental	C, 83.24; H, 16.76

k. Propiedades químicas básicas del 2-metilpentano.

Como se puede observar en la tabla 22, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de 2-metilpentano posee un peso molecular de 86,1780 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₆H₁₄, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 83,62 por ciento de carbono y 16,38 por ciento de hidrógeno.

Tabla 22.*Propiedades químicas básicas del 2-metilpentano*

Fórmula química	C₆H₁₄
Peso molecular	86,1780
Análisis elemental	C, 83.62; H, 16.38

l. Propiedades químicas básicas del 3-metilpentano.

Como se puede observar en la tabla 23, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de 3-metilpentano posee un peso molecular de 86,1780 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₆H₁₄, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 83,62 por ciento de carbono y 16,38 por ciento de hidrógeno.

Tabla 23.*Propiedades químicas básicas del 3-metilpentano*

Fórmula química	C₆H₁₄
Peso molecular	86,1780
Análisis elemental	C, 83.62; H, 16.38

m. Propiedades químicas básicas del n-hexano.

Como se puede observar en la tabla 24, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de n-hexano posee un peso molecular de 86,1780 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₆H₁₄, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 83,62 por ciento de carbono y 16,38 por ciento de hidrógeno.

Tabla 24.*Propiedades químicas básicas del n-hexano*

Fórmula química	C₆H₁₄
Peso molecular	86,1780
Análisis elemental	C, 83.62; H, 16.38

n. Propiedades químicas básicas del 2-metilhexano.

Como se puede observar en la tabla 25, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de 2-metilhexano posee un peso molecular de 100,2050 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₇H₁₆, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 83,90 por ciento de carbono y 16,10 por ciento de hidrógeno.

Tabla 25.*Propiedades químicas básicas del 2-metilhexano*

Fórmula química	C₇H₁₆
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10

o. Propiedades químicas básicas del 2,2-dimetilhexano.

Como se puede observar en la tabla 26, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de 2,2-dimetilhexano posee un peso molecular de 114,2320 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₈H₁₈, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 84,12 por ciento de carbono y 15,88 por ciento de hidrógeno.

Tabla 26.*Propiedades químicas básicas del 2,2-dimetilhexano*

Fórmula química	C₈H₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

p. Propiedades químicas básicas del 2,3-dimetilhexano.

Como se puede observar en la tabla 27, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de 2,3-dimetilhexano posee un peso molecular de 114,2320 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₈H₁₈, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 84,12 por ciento de carbono y 15,88 por ciento de hidrógeno.

Tabla 27.*Propiedades químicas básicas del 2,3-dimetilhexano*

Fórmula química	C₈H₁₈
Peso molecular	114,2320
Análisis elemental	C, 84.12; H, 15.88

q. Propiedades químicas básicas del n-heptano.

Como se puede observar en la tabla 28, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de n-heptano posee un peso molecular de 100,2050 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₇H₁₆, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 83,90 por ciento de carbono y 16,10 por ciento de hidrógeno.

Tabla 28.*Propiedades químicas básicas del n-heptano*

Fórmula química	C₇H₁₆
Peso molecular	100,2050
Análisis elemental	C, 83.90; H, 16.10

r. Propiedades químicas del ciclopentano.

Como se puede observar en la tabla 29, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de ciclopentano posee un peso molecular de 70,1350 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₅H₁₀, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 85,63 por ciento de carbono y 14,37 por ciento de hidrógeno.

Tabla 29.*Propiedades químicas básicas del ciclopentano*

Fórmula química	C₅H₁₀
Peso molecular	70,1350
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

s. Propiedades químicas básicas del metilciclopentano.

Como se puede observar en la tabla 30, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de metilciclopentano posee un peso molecular de 84,1620 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₆H₁₂, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 85,63 por ciento de carbono y 14,37 por ciento de hidrógeno.

Tabla 30.*Propiedades químicas básicas del metilciclopentano*

Fórmula química	C₆H₁₂
Peso molecular	84,1620
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

t. Propiedades químicas básicas del benceno.

Como se puede observar en la tabla 31, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de benceno posee un peso molecular de 78,1140 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₆H₆, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 92,26 por ciento de carbono y 7,74 por ciento de hidrógeno.

Tabla 31.*Propiedades químicas básicas del benceno*

Fórmula química	C₆H₆
Peso molecular	78,1140
Análisis elemental	C, 92.26; H, 7.74

u. Propiedades químicas básicas del ciclohexano.

Como se puede observar en la tabla 32, se reportó, mediante el uso del programa ChemDraw, que la molécula de ciclohexano posee un peso molecular de 84,1620 unidades de masa por mol. Además, la fórmula química para el compuesto es C₆H₁₂, por lo que se evidencia que su estructura molecular está compuesta por un 85,63 por ciento de carbono y 14,37 por ciento de hidrógeno.

Tabla 32.*Propiedades químicas básicas del ciclohexano*

Fórmula química	C₆H₁₂
Peso molecular	84,1620
Análisis elemental	C, 85.63; H, 14.37

4.2.3. Generación automática de nomenclatura IUPAC.

La nomenclatura IUPAC fue obtenida mediante el uso del software ChemDraw. Dicho programa permitió convertir la estructura química 2D en el respectivo nombre de cada uno de los compuestos químicos presentes en las corrientes de entrada y salida del proceso de isomerización catalítica reportados en la bibliografía, como se observa en la tabla 33.

Tabla 33.*Nombre de los compuestos en nomenclatura IUPAC*

#	NOMENCLATURA IUPAC
1	hidrógeno
2	metano
3	etano
4	propano
5	isobutano
6	n-butano
7	isopentano
8	2,2-dimetilbutano
9	2,3-dimetilbutano
10	n-pentano
11	2-metilpentano
12	3-metilpentano
13	n-hexano
14	2-metilhexano

#	NOMENCLATURA IUPAC
15	2,2-dimetilhexano
16	2,3-dimetilhexano
17	n-heptano
18	ciclopentano
19	metilciclopentano
20	benceno
21	ciclohexano

4.2.4. Generación automática del código SMILES.

El código SMILES fue obtenido mediante el uso del software ChemDraw. Dicho programa permitió convertir la estructura química 2D en el respectivo código de cada uno de los compuestos químicos presentes en las corrientes de entrada y salida del proceso de isomerización catalítica reportados en la bibliografía, como se observa en la tabla 34.

Tabla 34.

Códigos SMILES de los compuestos

#	NOMBRE	CÓDIGO SMILES
1	hidrógeno	[H][H]
2	metano	C
3	etano	CC
4	propano	CCC
5	isobutano	CC(C)C
6	<i>n</i> -butano	CC(C)C
7	isopentano	CCC(C)C
8	2,2-dimetilbutano	CC(C)(C)CC
9	2,3-dimetilbutano	CC(C)C(C)C
10	<i>n</i> -pentano	CCCCC
11	2-metilpentano	CC(C)CCC
12	3-metilpentano	CCC(C)CC

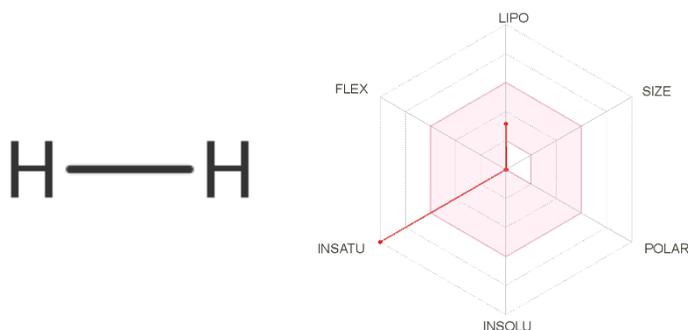
#	NOMBRE	CÓDIGO SMILES
13	<i>n</i> -hexano	CCCCCC
14	2-metilhexano	CC(C)CCCC
15	2,2-dimetilhexano	CC(C)(C)CCCC
16	2,3-dimetilhexano	CC(C)C(C)CCC
17	<i>n</i> -heptano	CCCCCCC
18	ciclopentano	C1CCCC1
19	metilciclopentano	CC1CCCC1
20	benceno	C1=CC=CC=C1
21	ciclohexano	C1CCCCC1

4.3. Cálculo de propiedades fisicoquímicas básicas

Las propiedades fisicoquímicas fueron obtenidas mediante el uso de la plataforma virtual “SwissADME”. Dicha plataforma reporta propiedades fisicoquímicas, lipofilia, el radar de biodisponibilidad y solubilidad de cada uno de los compuestos presentes en el proceso de isomerización catalítica reportados en la bibliografía.

4.3.1. Propiedades fisicoquímicas del hidrógeno.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D de la molécula de hidrógeno y el radar de biodisponibilidad a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”, como se observa en la figura 35.

Figura 35.*Generalidades acerca del compuesto hidrógeno**Nota:* Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de hidrógeno, por lo cual se evidencia que la molécula de hidrógeno no presentó propiedades relevantes, como se observa en la tabla 35. Además, se puede corroborar los valores de las propiedades básicas reportadas por el programa “ChemDraw”.

Tabla 35.*Propiedades fisicoquímicas para la molécula de hidrógeno*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	H ₂
Peso molecular	2.02 g/mol
Número de átomos pesados	0
Número de átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	-
Número de enlaces rotables	0
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	-
Número de donantes de puentes hidrógeno	-
Refractividad molar	0.00
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia obtenido mediante la plataforma virtual “SwissADME”, se observa que la molécula carece de datos numéricos para la molécula de interés, como se observa en la tabla 36. En consecuencia, no se puede definir si el compuesto químico es permeable por las membranas celulares.

Tabla 36.

Reporte de lipofilia para la molécula de hidrógeno

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	-
Log P _{o/w} (XLOGP3)	-
Log P _{o/w} (WLOGP)	-
Log P _{o/w} (MLOGP)	-
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	-
Promedio Log P _{o/w}	-

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

De igual manera, el programa “SwissADME”, no reporta valores numéricos correspondientes a la solubilidad en agua de la molécula de hidrógeno, como se observa en la tabla 37. Por lo que no se puede verificar si el compuesto es soluble o no.

Tabla 37.

Solubilidad en agua para la molécula de hidrógeno

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-
Solubilidad	mg/ml; mol/l
Clase	-
Log S (Ali)	-
Solubilidad	mg/ml; mol/l
Clase	-
Log S (SILICOS-IT)	-
Solubilidad	mg/ml; mol/l

Solubilidad en agua	
Clase	-

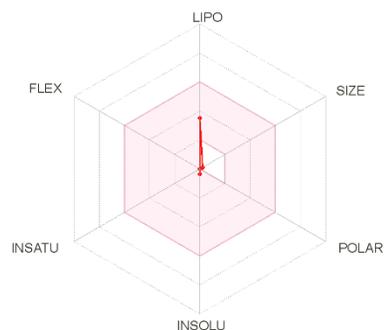
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.2. Propiedades fisicoquímicas del metano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de metano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 36.

Figura 36.

Generalidades acerca del compuesto metano



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de metano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 1 átomo pesado, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1 y una refractividad molar de 6.92, como se observa en la tabla 38. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 38.*Propiedades fisicoquímicas para la molécula de metano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	CH ₄
Peso molecular	16.04 g/mol
Número de átomos pesados	1
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	1.00
Número de enlaces rotables	0
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	6.92
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 39. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares.

Tabla 39.*Reporte de Lipofilia para la molécula de metano*

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	-
Log P _{o/w} (XLOGP3)	0.65
Log P _{o/w} (WLOGP)	0.64
Log P _{o/w} (MLOGP)	1.12
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	-0.48
Promedio Log P _{o/w}	-

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 40.

Tabla 40.*Solubilidad en agua de la molécula de metano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-0.35
Solubilidad	7.18e+00 mg/ml; 4.48e-01 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (Ali)	-0.23
Solubilidad	9.54e+00 mg/ml; 5.95e-01 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (SILICOS-IT)	0.48
Solubilidad	4.88e+01 mg/ml; 3.04e+00 mol/l
Clase	Soluble

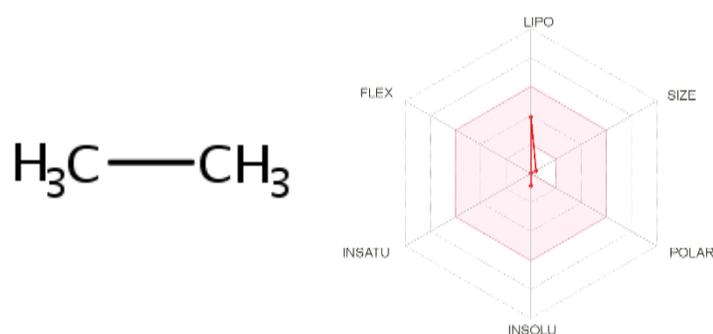
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.3. Propiedades fisicoquímicas del etano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de etano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 37.

Figura 37.

Generalidades acerca del compuesto etano



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas, se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de etano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 2 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1 y una refractividad molar de 11,73, como se observa en la tabla 41. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 41.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de etano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_2H_6
Peso molecular	30.07 g/mol
Número de átomos pesados	2

Propiedades fisicoquímicas	
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	1.00
Número de enlaces rotables	0
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	11.73
PSA	0,00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 42. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 1.10 para el etano.

Tabla 42.

Reporte de lipofilia para la molécula de etano

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	1.47
Log P _{o/w} (XLOGP3)	1.30
Log P _{o/w} (WLOGP)	0.96
Log P _{o/w} (MLOGP)	1.76
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	0.01
Promedio Log P _{o/w}	1.10

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es muy soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 43.

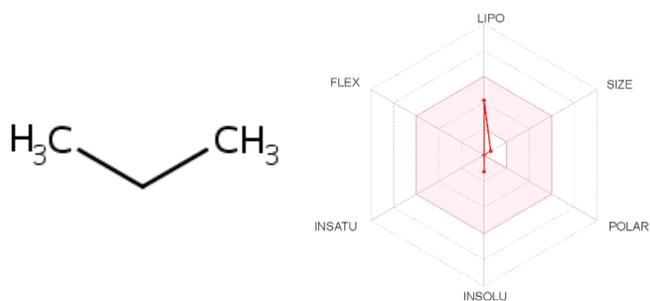
Tabla 43.*Solubilidad en agua de la molécula de etano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-0.85
Solubilidad	4.29e+00 mg/ml; 1.43e-01 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (Ali)	-0.90
Solubilidad	3.78e+00 mg/ml; 1.26e-01 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (SILICOS-IT)	-0.35
Solubilidad	1.35e+01 mg/ml; 4.49e-01 mol/l
Clase	Soluble

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.4. Propiedades fisicoquímicas del propano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de propano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 38.

Figura 38.*Generalidades acerca del compuesto propano*

Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de propano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 3 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1 y una refractividad molar de 16.54, como se observa en la tabla 44. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 44.

Propiedades fisicoquímicas para 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^3	1.00
Número de enlaces rotables	0
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	16.54
PSA	0.00 Å^2

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 45. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 1.54 para el propano.

Tabla 45.*Reporte de lipofilia para la molécula de propano*

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	1.71
Log P _{o/w} (XLOGP3)	1.84
Log P _{o/w} (WLOGP)	1.42
Log P _{o/w} (MLOGP)	2.28
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	0.45
Promedio Log P _{o/w}	1.54

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es muy soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 46.

Tabla 46.*Solubilidad en agua de la molécula de propano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-1.27
Solubilidad	2.35e+00 mg/ml; 5.34e-02 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (Ali)	-1.46
Solubilidad	1.53e+00 mg/ml; 3.46e-02 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (SILICOS-IT)	-0.82
Solubilidad	6.61e+00 mg/ml; 1.50e-01 mol/l
Clase	Soluble

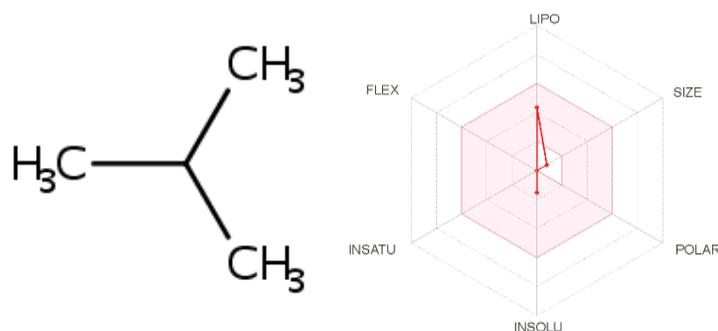
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.5. Propiedades fisicoquímicas del isobutano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de isobutano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 39.

Figura 39.

Generalidades acerca del compuesto isobutano



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de isobutano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 4 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp³ igual a 1 y una refractividad molar de 21.34, como se observa en la tabla 47. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 47.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de isobutano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C ₄ H ₁₀
Peso molecular	58.12 g/mol
Número de átomos pesados	4

Propiedades fisicoquímicas	
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	1.00
Número de enlaces rotables	0
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	21.34
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 48. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 1.82 para el isobutano.

Tabla 48.

Reporte de lipofilia para la molécula de isobutano

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	1.91
Log P _{o/w} (XLOGP3)	2.09
Log P _{o/w} (WLOGP)	1.66
Log P _{o/w} (MLOGP)	2.73
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	0.72
Promedio Log P _{o/w}	1.82

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es muy soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 49.

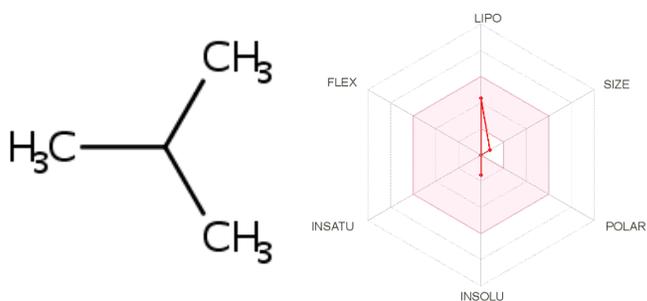
Tabla 49.*Solubilidad en agua de la molécula de isobutano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-1.52
Solubilidad	1.77e+00 mg/ml; 3.04e-02 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (Ali)	-1.72
Solubilidad	1.11e+00 mg/ml; 1.91e-02 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (SILICOS-IT)	-0.91
Solubilidad	7.17e+00 mg/ml; 1.23e-01 mol/l
Clase	Soluble

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.6. Propiedades fisicoquímicas del n-butano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de n-butano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 40.

Figura 40.*Generalidades acerca del compuesto n-butano*

Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de n-butano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 4 átomo pesado, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1 y una refractividad molar de 21.34, como se observa en la tabla 50. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la formula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 50.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de n-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 rotables	0
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	21.34
PSA	0.00 \AA^2

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 51. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 1.82 para el n-butano.

Tabla 51.*Reporte de lipofilia para la molécula de n-butano*

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	1.91
Log P _{o/w} (XLOGP3)	2.09
Log P _{o/w} (WLOGP)	1.66
Log P _{o/w} (MLOGP)	2.73
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	0.72
Promedio Log P _{o/w}	1.82

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es muy soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 52.

Tabla 52.*Solubilidad en agua de la molécula de n-butano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-1.52
Solubilidad	1.77e+00 mg/ml; 3.04e-02 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (Ali)	-1.72
Solubilidad	1.11e+00 mg/ml; 1.91e-02 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (SILICOS-IT)	-0.91
Solubilidad	7.17e+00 mg/ml; 1.23e-01 mol/l
Clase	Soluble

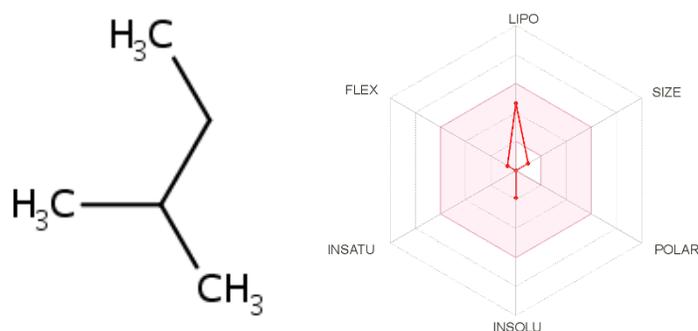
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.7. Propiedades fisicoquímicas del isopentano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de isopentano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 41.

Figura 41.

Generalidades acerca del compuesto isopentano



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de isopentano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 5 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1, enlaces rotables igual a 1 y una refractividad molar de 26.15, como se observa en la tabla 53. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 53.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de isopentano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_5H_{12}
Peso molecular	72.15 g/mol
Número de átomos pesados	5

Propiedades fisicoquímicas	
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	1.00
Número de enlaces rotables	1
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	26.15
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 54. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 2.22 para el isopentano.

Tabla 54.

Reporte de lipofilia para la molécula de isopentano

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.11
Log P _{o/w} (XLOGP3)	2.64
Log P _{o/w} (WLOGP)	2.05
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.14
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	1.17
Promedio Log P _{o/w}	2.22

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 55.

Tabla 55.*Solubilidad en agua de la molécula de isopentano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-1.88
Solubilidad	9.41e-01 mg/ml; 1.30e-02 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (Ali)	-2.29
Solubilidad	3.69e-01 mg/ml; 5.12e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-1.35
Solubilidad	3.19e+00 mg/ml; 4.42e-02 mol/l
Clase	Soluble

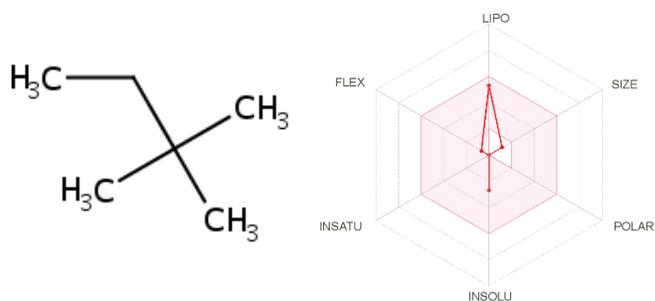
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.8. Propiedades fisicoquímicas del 2,2-dimetilbutano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de 2,2-dimetilbutano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 42.

Figura 42.

Generalidades acerca del compuesto 2,2-dimetilbutano.



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de 2,2-dimetilbutano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 6 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1, enlaces rotables igual a 1 y una refractividad molar de 30.70, como se observa en la tabla 56. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 56.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 2,2-dimetilbutano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_6H_{14}
Peso molecular	86.18 g/mol
Número de átomos pesados	6
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp^3	1.00
Número de enlaces rotables	1
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	30.70
PSA	0.00 \AA^2

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 57. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 2.70 para el 2,2-dimetilbutano.

Tabla 57.*Reporte de lipofilia para la molécula de 2,2-dimetilbutano*

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.25
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3.82
Log P _{o/w} (WLOGP)	2.44
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.52
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	1.46
Promedio Log P _{o/w}	2.70

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 58.

Tabla 58.*Solubilidad en agua de la molécula de 2,2-dimetilbutano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.71
Solubilidad	1.66e-01 mg/ml; 1.93e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-3.52
Solubilidad	2.63e-02 mg/ml; 3.05e-04 mol/l
Clase	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-1.78
Solubilidad	1.44e+00 mg/ml; 1.67e-02 mol/l
Clase	Soluble

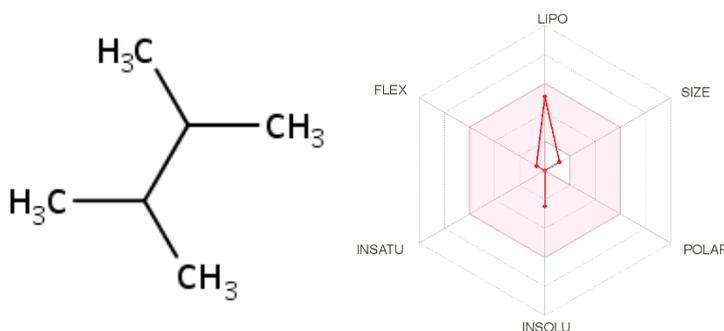
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.9. Propiedades fisicoquímicas del 2,3-dimetilbutano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de 2,3-dimetilbutano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 43.

Figura 43.

Generalidades acerca del compuesto 2,3-dimetilbutano



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de 2,3-dimetilbutano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 6 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1, enlaces rotables igual a 1 y una refractividad molar de 30.96, como se observa en la tabla 59. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 59.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 2,3-dimetilbutano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_6H_{14}
Peso molecular	86.18 g/mol
Número de átomos pesados	6

Propiedades fisicoquímicas	
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	1.00
Número de enlaces rotables	1
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	30.96
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 60. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 2.59 para el 2,3-dimetilbutano.

Tabla 60.

Reporte de lipofilia para la molécula de 2,3-dimetilbutano

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.27
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3.42
Log P _{o/w} (WLOGP)	2.30
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.52
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	1.44
Promedio Log P _{o/w}	2.59

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos

presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 61.

Tabla 61.

Solubilidad en agua de la molécula de 2,3-dimetilbutano

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.46
Solubilidad	2.97e-01 mg/ml; 3.44e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-3.10
Solubilidad	6.84e-02 mg/ml; 7.94e-04 mol/l
Clase	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-1.42
Solubilidad	3.28e+00 mg/ml; 3.80e-02 mol/l
Clase	Soluble

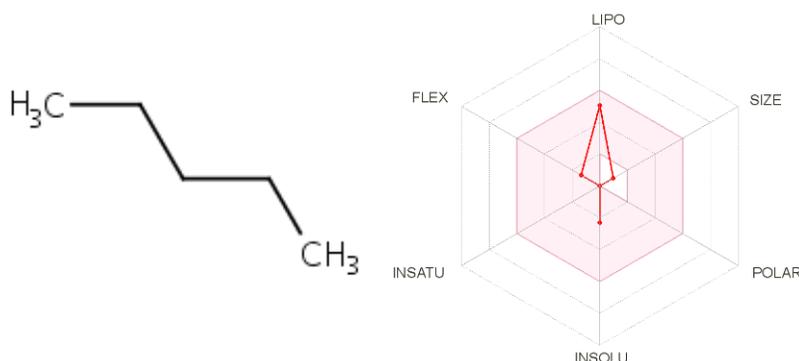
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.10. Propiedades fisicoquímicas del n-pentano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de n-pentano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 44.

Figura 44.

Generalidades acerca del compuesto n-pentano



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de n-pentano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 5 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp³ igual a 1, enlaces rotables igual a 2 y una refractividad molar de 26.15, como se observa en la tabla 62. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 62.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de n-pentano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C ₅ H 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 rotables	2
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0

Propiedades fisicoquímicas	
Refractividad molar	26.15
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 63. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 2.45 para el n-pentano.

Tabla 63.

Reporte de lipofilia para la molécula de n-pentano

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.18
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3.39
Log P _{o/w} (WLOGP)	2.20
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.14
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	1.34
Promedio Log P _{o/w}	2.45

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 64.

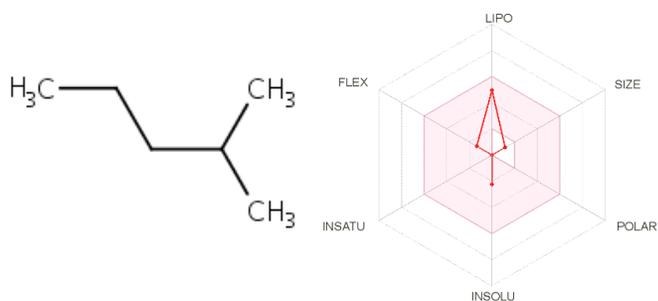
Tabla 64.*Solubilidad en agua de la molécula de n-pentano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.29
Solubilidad	3.69e-01 mg/ml; 5.12e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-3.07
Solubilidad	6.15e-02 mg/ml; 8.53e-04 mol/l
Clase	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-1.73
Solubilidad	1.35e+00 mg/ml; 1.87e-02 mol/l
Clase	Soluble

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.11. Propiedades fisicoquímicas del 2-metilpentano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de 2-metilpentano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 45.

Figura 45.*Generalidades acerca del compuesto 2-metilpentano*

Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de 2-metilpentano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 6 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1, enlaces rotables igual a 2 y una refractividad molar de 30.96, como se observa en la tabla 65. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 65.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 2-metilpentano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_6H_{14}
Peso molecular	86.18 g/mol
Número de átomos pesados	6
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp^3	1.00
Número de enlaces rotables	2
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	30.96
PSA	0.00 \AA^2

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 66. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 2.61 para el 2-metilpentano.

Tabla 66.*Reporte de lipofilia para la molécula de 2-metilpentano*

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.31
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3.18
Log P _{o/w} (WLOGP)	2.44
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.52
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	1.61
Promedio Log P _{o/w}	2.61

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 67.

Tabla 67.*Solubilidad en agua de la molécula de 2-metilpentano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.25
Solubilidad	4.89e-01 mg/ml; 5.68e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-2.85
Solubilidad	1.21e-01 mg/ml; 1.41e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-1.79
Solubilidad	1.38e+00 mg/ml; 1.61e-02 mol/l
Clase	Soluble

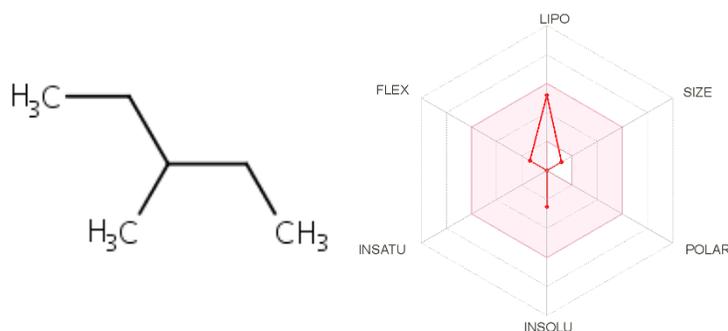
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.12. Propiedades fisicoquímicas del 3-metilpentano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de 3-metilpentano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 46.

Figura 46.

Generalidades acerca del compuesto 3-metilpentano



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de 3-metilpentano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 6 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1, enlaces rotables igual a 2 y una refractividad molar de 30.96, como se observa en la tabla 68. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 68.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 3-metilpentano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_6H_{14}
Peso molecular	86.18 g/mol
Número de átomos pesados	6

Propiedades fisicoquímicas	
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	1.00
Número de enlaces rotables	2
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	30.96
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 69. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 2.70 para el 3-metilpentano.

Tabla 69.

Reporte de lipofilia para la molécula de 3-metilpentano

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.32
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3.60
Log P _{o/w} (WLOGP)	2.44
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.52
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	1.61
Promedio Log P _{o/w}	2.70

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 70.

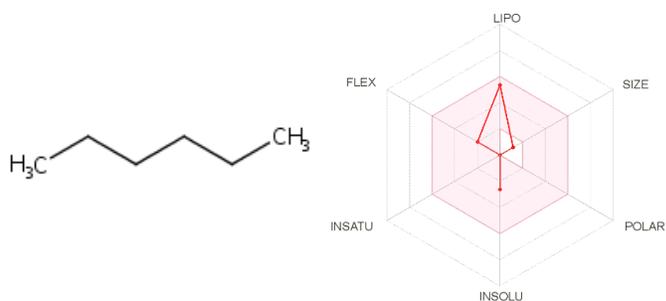
Tabla 70.*Solubilidad en agua de la molécula de 3-metilpentano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.51
Solubilidad	2.66e-01 mg/ml 3.09e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-3.29
Solubilidad	4.45e-02 mg/ml; 5.17e-04 mol/l
Clase	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-1.79
Solubilidad	1.38e+00 mg/ml; 1.61e-02 mol/l
Clase	Soluble

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.13. Propiedades fisicoquímicas del n-hexano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de n-hexano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 47.

Figura 47.*Generalidades acerca del compuesto n-hexano*

Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de n-hexano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 6 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1, enlaces rotables igual a 3 y una refractividad molar de 30.96, como se observa en la tabla 71. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 71.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de n-hexano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_6H_{14}
Peso molecular	86.18 g/mol
Número de átomos pesados	6
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp^3	1.00
Número de enlaces rotables	3
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	30.96
PSA	0.00 Å^2

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 72. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 2.83 para el n-hexano.

Tabla 72.*Reporte de lipofilia para la molécula de n-hexano*

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.35
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3.90
Log P _{o/w} (WLOGP)	2.59
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.52
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	1.78
Promedio Log P _{o/w}	2.83

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 73.

Tabla 73.*Solubilidad en agua de la molécula de n-hexano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.63
Solubilidad	2.00e-01 mg/ml; 2.33e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-3.60
Solubilidad	2.17e-02 mg/ml; 2.52e-04 mol/l
Clase	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-2.17
Solubilidad	5.87e-01 mg/ml; 6.81e-03 mol/l
Clase	Soluble

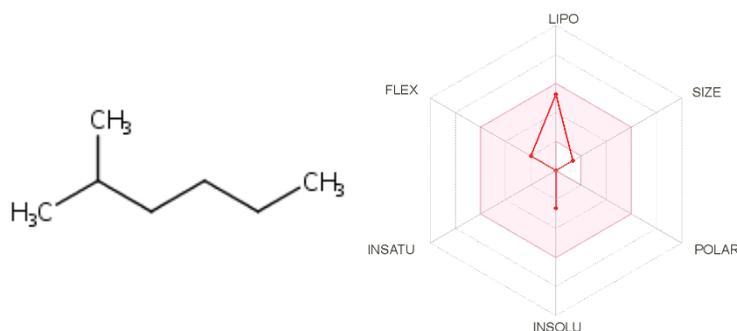
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.14. Propiedades fisicoquímicas del 2-metilhexano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de 2-metilhexano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 48.

Figura 48.

Generalidades acerca del compuesto 2-metilhexano



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de 2-metilhexano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 7 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1, enlaces rotables igual a 3 y una refractividad molar de 35.76, como se observa en la tabla 74. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 74.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 2-metilhexano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_7H_{16}
Peso molecular	100.20 g/mol
Número de átomos pesados	7

Propiedades fisicoquímicas	
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	1.00
Número de enlaces rotables	3
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	35.76
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 75. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 3.01 para el 2-metilhexano.

Tabla 75.

Reporte de lipofilia para la molécula de 2-metilhexano

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.58
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3.72
Log P _{o/w} (WLOGP)	2.83
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.87
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	2.05
Promedio Log P _{o/w}	3.01

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 76.

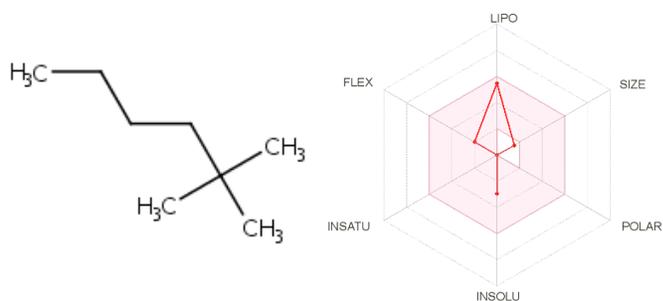
Tabla 76.*Solubilidad en agua de la molécula de 2-metilhexano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.61
Solubilidad	2.48e-01 mg/ml; 2.47e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-3.41
Solubilidad	3.89e-02 mg/ml; 3.88e-04 mol/l
Clase	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-2.23
Solubilidad	5.97e-01 mg/ml; 5.96e-03 mol/l
Clase	Soluble

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.15. Propiedades fisicoquímicas del 2,2-dimetilhexano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de 2,2-dimetilhexano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 49.

Figura 49.*Generalidades acerca del compuesto 2,2-dimetilhexano*

Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de 2,2-dimetilhexano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 8 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1, enlaces rotables igual a 3 y una refractividad molar de 40.31, como se observa en la tabla 77. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 77.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 2,2-dimetilhexano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_8H_{18}
Peso molecular	114.23 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 rotables	3
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	40.31
PSA	0.00 Å^2

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 78. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 3.32 para el 2,2-dimetilhexano.

Tabla 78.*Reporte de lipofilia para la molécula de 2,2-dimetilhexano*

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.72
Log P _{o/w} (XLOGP3)	4.11
Log P _{o/w} (WLOGP)	3.22
Log P _{o/w} (MLOGP)	4.20
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	2.34
Promedio Log P _{o/w}	3.32

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 79.

Tabla 79.*Solubilidad en agua de la molécula de 2,2-dimetilhexano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.94
Solubilidad	1.31e-01 mg/ml; 1.15e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-3.82
Solubilidad	1.74e-02 mg/ml; 1.53e-04 mol/l
Clase	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-2.63
Solubilidad	2.65e-01 mg/ml; 2.32e-03 mol/l
Clase	Soluble

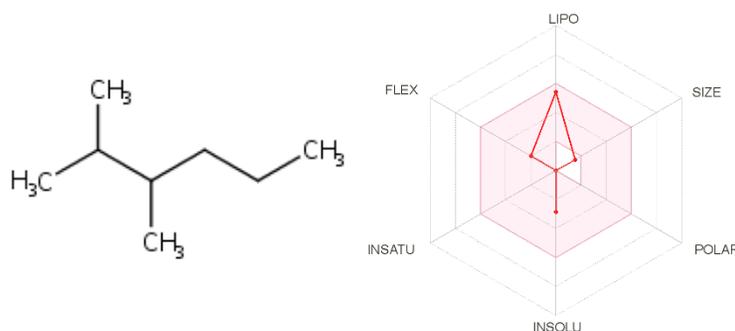
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.16. Propiedades fisicoquímicas del 2,3-dimetilhexano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de 2,3-dimetilhexano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 50.

Figura 50.

Generalidades acerca del compuesto 2,3-dimetilhexano



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de 3-metilpentano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 8 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1, enlaces rotables igual a 3 y una refractividad molar de 40.57, como se observa en la tabla 80. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 80.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de 2,3-dimetilhexano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_8H_{18}
Peso molecular	114.23 g/mol
Número de átomos pesados	8

Propiedades fisicoquímicas	
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	1.00
Número de enlaces rotables	3
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	40.57
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 81. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 3.26 para el 2,3-dimetilhexano.

Tabla 81.

Reporte de lipofilia para la molécula de 2,3-dimetilhexano

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.71
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3.97
Log P _{o/w} (WLOGP)	3.08
Log P _{o/w} (MLOGP)	4.20
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	2.32
Promedio Log P _{o/w}	3.26

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 82.

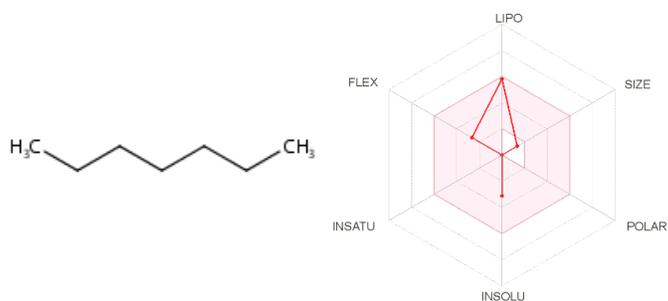
Tabla 82.*Solubilidad en agua de la molécula de 2,3-dimetilhexano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.85
Solubilidad	1.61e-01 mg/ml; 1.41e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-3.67
Solubilidad	2.44e-02 mg/ml; 2.13e-04 mol/l
Clase	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-2.28
Solubilidad	6.02e-01 mg/ml; 5.27e-03 mol/l
Clase	Soluble

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.17. Propiedades fisicoquímicas del n-heptano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de n-heptano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 51.

Figura 51.*Generalidades acerca del compuesto n-heptano*

Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de *n*-heptano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 7 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1, enlaces rotables igual a 4 y una refractividad molar de 35.76, como se observa en la tabla 83. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 83.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de n-heptano

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^3	1.00
Número de enlaces rotables	4
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	35.76
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 84. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 3.28 para el *n*-heptano.

Tabla 84.*Reporte de lipofilia para la molécula de n-heptano*

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.65
Log P _{o/w} (XLOGP3)	4.66
Log P _{o/w} (WLOGP)	2.98
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.87
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	2.22
Promedio Log P _{o/w}	3.28

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 85.

Tabla 85.*Solubilidad en agua de la molécula de n-heptano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-3.13
Solubilidad	7.38e-02 mg/ml; 7.36e-04 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-4.39
Solubilidad	4.11e-03 mg/ml; 4.10e-05 mol/l
Clase	Moderadamente soluble
Log S (SILICOS-IT)	-2.60
Solubilidad	2.52e-01 mg/ml; 2.52e-03 mol/l
Clase	Soluble

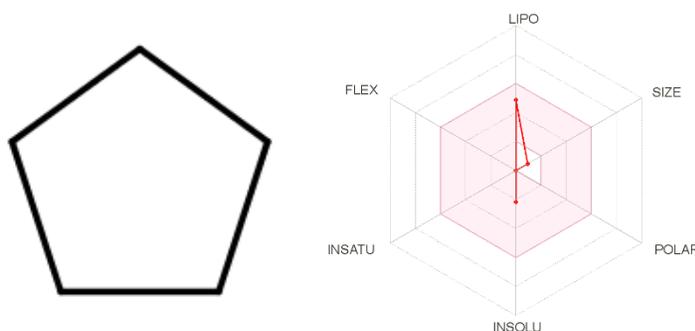
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.18. Propiedades fisicoquímicas del ciclopentano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de ciclopentano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 52.

Figura 52.

Generalidades acerca del compuesto ciclopentano



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de ciclopentano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 5 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1 y una refractividad molar de 24.04, como se observa en la tabla 86. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 86.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de ciclopentano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_5H_{10}
Peso molecular	70.13 g/mol
Número de átomos pesados	5

Propiedades fisicoquímicas	
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	1.00
Número de enlaces rotables	0
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	24.04
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 87. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 2.41 para el ciclopentano.

Tabla 87.

Reporte de lipofilia para la molécula de ciclopentano

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	1.94
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3.00
Log P _{o/w} (WLOGP)	1.95
Log P _{o/w} (MLOGP)	2.75
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	2.40
Promedio Log P _{o/w}	2.41

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos

presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 88.

Tabla 88.

Solubilidad en agua de la molécula de ciclopentano

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.16
Solubilidad	4.80e-01 mg/ml; 6.84e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-2.66
Solubilidad	1.52e-01 mg/ml; 2.17e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-1.12
Solubilidad	5.28e+00 mg/ml; 7.53e-02 mol/l
Clase	Soluble

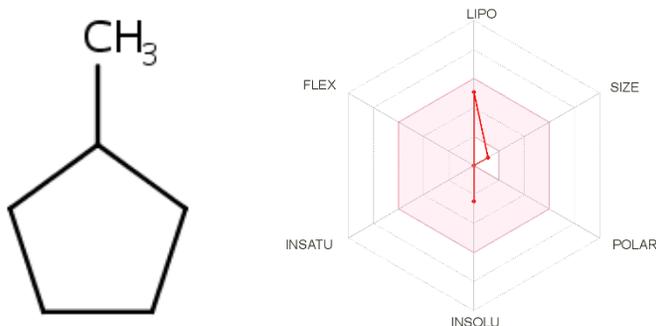
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.19. Propiedades fisicoquímicas del metilciclopentano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de metilciclopentano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 53.

Figura 53.

Generalidades acerca del compuesto metilciclopentano



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de metilciclopentano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 6 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp³ igual a 1 y una refractividad molar de 28.84, como se observa en la tabla 89. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 89.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de metilciclopentano.

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C ₆ H ₁₂
Peso molecular	84.16 g/mol
Número de átomos pesados	6
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	1.00
Número de enlaces rotables	0
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	28.84

Propiedades fisicoquímicas	
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 90. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 2.62 para el metilciclopentano.

Tabla 90.

Reporte de lipofilia para la molécula de metilciclopentano

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.15
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3.37
Log P _{o/w} (WLOGP)	2.20
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.12
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	2.27
Promedio Log P _{o/w}	2.62

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 91.

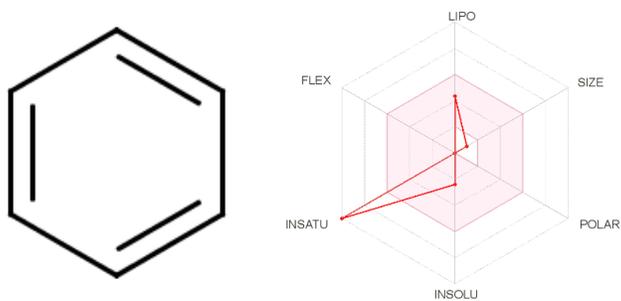
Tabla 91.*Solubilidad en agua de la molécula de metilciclopentano*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.48
Solubilidad	2.76e-01 mg/ml; 3.27e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-3.05
Solubilidad	7.53e-02 mg/ml; 8.95e-04 mol/l
Clase	Soluble
Log S (SILICOS-IT)	-1.31
Solubilidad	4.08e+00 mg/ml; 4.85e-02 mol/l
Clase	Soluble

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.20. Propiedades fisicoquímicas del benceno.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de benceno, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 54.

Figura 54.*Generalidades acerca del compuesto benceno*

Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de benceno, por lo cual se evidencia que la molécula posee 6 átomo pesado, 6 átomos aromáticos pesados y una refractividad molar de 26.44, como se observa en la tabla 92. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la formula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 92.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de benceno

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C ₆ H 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 rotables	0
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	26.44
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 93. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 2.14 para el benceno.

Tabla 93.*Reporte de lipofilia para la molécula de benceno*

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	1.58
Log P _{o/w} (XLOGP3)	2.13
Log P _{o/w} (WLOGP)	1.69
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.17
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	2.12
Promedio Log P _{o/w}	2.14

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 94.

Tabla 94.*Solubilidad en agua de la molécula de benceno*

Solubilidad en agua	
Log S (ESOL)	-2.41
Solubilidad	3.07e-01 mg/ml; 3.92e-03 mol/l
Clase	Soluble
Log S (Ali)	-1.76
Solubilidad	1.35e+00 mg/ml; 1.73e-02 mol/l
Clase	Muy soluble
Log S (SILICOS-IT)	-2.27
Solubilidad	4.18e-01 mg/ml; 5.35e-03 mol/l
Clase	Soluble

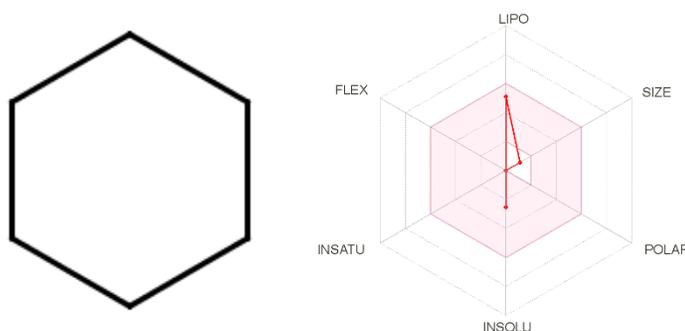
Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.3.21. Propiedades fisicoquímicas del ciclohexano.

Mediante el sitio web “SwissADME” se obtuvo una representación 2D y el radar de biodisponibilidad de la molécula de ciclohexano, a partir del código SMILES obtenido mediante el programa “ChemDraw”. Mediante el radar se observa que el compuesto es permeable en las membranas celulares, como se observa en la figura 55.

Figura 55.

Generalidades acerca del compuesto ciclohexano



Nota: Tomado de (Daina et al., 2017).

En cuanto a las propiedades fisicoquímicas se generó el reporte del estudio, el cual nos permitirá entender de mejor manera la molécula de ciclohexano, por lo cual se evidencia que la molécula posee 6 átomos pesados, la fracción de carbono con hibridación sp^3 igual a 1 y una refractividad molar de 28.84, como se observa en la tabla 95. Además, se puede corroborar el valor del peso molecular y la fórmula con los datos obtenidos en el programa “ChemDraw”.

Tabla 95.

Propiedades fisicoquímicas para la molécula de ciclohexano

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C_6H_{12}
Peso molecular	84.16 g/mol
Número de átomos pesados	6

Propiedades fisicoquímicas	
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp ³	1.00
Número de enlaces rotables	0
Número de aceptores de puentes de hidrógeno	0
Número de donantes de puentes hidrógeno	0
Refractividad molar	28.84
PSA	0.00 Å ²

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

En cuanto al reporte de lipofilia, obtenido mediante la plataforma “SwissADME”, se reportan varios cálculos en base al coeficiente de partición octanol/agua, donde se observa que todos los valores se encuentran dentro del rango de -2 a 5, como se observa en la tabla 96. Dichos datos confirman que el compuesto es permeable por las membranas celulares. Obteniéndose así un promedio de 2.73 para el ciclohexano.

Tabla 96.

Reporte de lipofilia para la molécula de ciclohexano

Lipofilia	
Log P _{o/w} (iLOGP)	2.10
Log P _{o/w} (XLOGP3)	3.44
Log P _{o/w} (WLOGP)	2.34
Log P _{o/w} (MLOGP)	3.12
Log P _{o/w} (SILICOS-IT)	2.63
Promedio Log P _{o/w}	2.73

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

Por otra parte, los valores correspondientes a la solubilidad en agua obtenidos reflejan que el compuesto es soluble en agua debido a la ausencia de heteroátomos presentes, insaturaciones y la cantidad de interacciones tipo puente de hidrógeno que se puedan generar en la molécula con el entorno, como se observa en la tabla 97.

Tabla 97.*Solubilidad en agua de la molécula de ciclohexano*

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

Nota: Recuperado de (Daina et al., 2017).

4.4. Cálculo y obtención de estructuras 3D

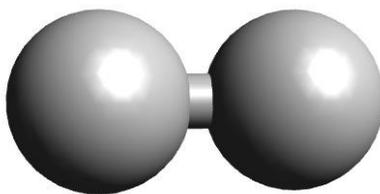
4.4.1. Elaboración de archivos con coordenadas 3D

a. Hidrógeno

A través del uso del programa “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de hidrógeno, como se observa en la figura 56. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se lo presenta en esferas de color plomo. Además, se observa que dicho compuesto está formado únicamente por hidrogeno, como se lo expuso en el punto 5.2.2.

Figura 56.

Estructura química 3D de la molécula de hidrógeno obtenida a través de “Chemcraft”.



Por intermedio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de hidrógeno, como se observa en la tabla 98. Dicha molécula carece de valores en los ejes Y, Z, por consiguiente, la molécula de análisis se encuentra ubicada en el eje X.

Tabla 98.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de hidrógeno

	x	y	z
H	-4,125	0,000	0,000
H	4,125	0,000	0,000

Nota. Obtenida a través de “ChemCraft”.

b. Metano

Mediante el uso de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de metano, como se observa en las figuras 57 y 58. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso en el punto 5.2.2.

Figura 57.

Estructura química 3D de la molécula de metano obtenida a través de “Pymol”

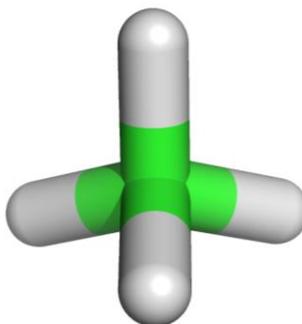
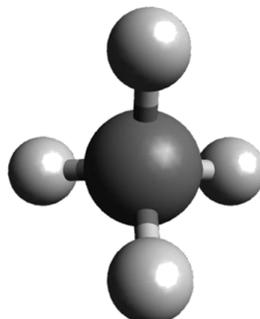


Figura 58.

Estructura química 3D de la molécula de metano obtenida a través de “Avogadro”



Gracias al programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de metano, como se observa en la tabla 99. Dicha molécula carece de valores en los ejes X, Y, Z. Esto se debe a que su estructura no posee una cadena larga ya que solo está compuesta de un átomo de carbono.

Tabla 99.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de metano

	x	y	z
C	0,000	0,000	0,000

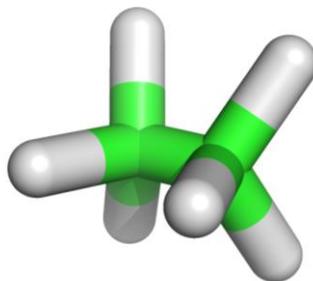
Nota. Obtenida a través de “ChemCraft”.

c. Etano

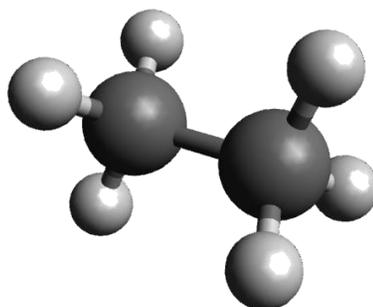
Con los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de etano, como se observa en las figuras 59 y 60. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 59.

Estructura química 3D de la molécula de etano obtenida a través de “Pymol”

**Figura 60.**

Estructura química 3D de la molécula de etano obtenida a través de “Chemcraft”



Por medio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de etano, como se observa en la tabla 100. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 100.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de etano

	x	y	z
C	-0,3572	-0,2062	0,0000
C	0,3572	0,2062	0,0000

Nota. Obtenida a través de “ChemCraft”.

d. Propano

Con la ayuda de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de propano, como se observa en las figuras 61 y 62. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 61.

Estructura química 3D de la molécula de propano obtenida a través de “Pymol”

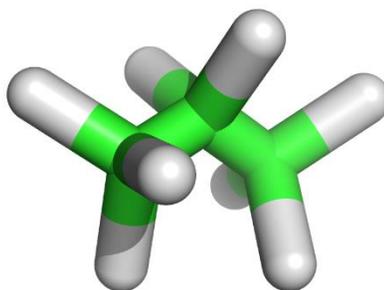
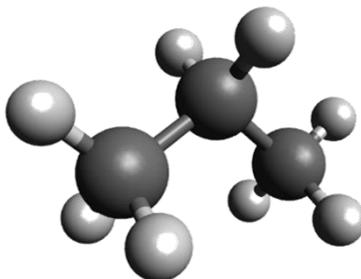


Figura 62.

Estructura química 3D de la molécula de propano obtenida a través de “Avogadro”



Con la ayuda del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de propano, como se observa en la tabla 101. Dicha

molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 101.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de propano

	x	y	z
C	-0,7145	-0,2062	0,0000
C	0,0000	0,2062	0,0000
C	0,7145	-0,2062	0,0000

Nota. Obtenida a través de “ChemCraft”.

e. Isobutano

Por medio de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de isobutano, como se observa en las figuras 63 y 64. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 63.

Estructura química 3D de la molécula de isobutano obtenida a través de “Pymol”

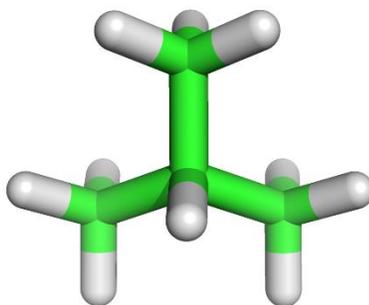
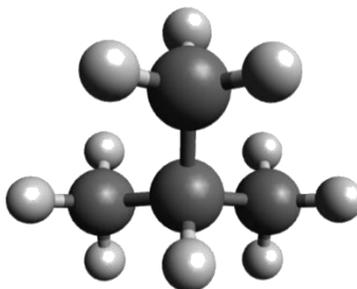


Figura 64.

Estructura química 3D de la molécula de isobutano obtenida a través de “Avogadro”



Con la ayuda del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de isobutano, como se observa en la tabla 102. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y, Z del plano.

Tabla 102.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de isobutano

	x	y	z
C	-0,0201	0,3045	0,0776
C	1,1342	1,2412	0,4270
C	1,9584	1,5649	-0,8171
C	0,6099	2,5222	1,0720
H	0,3542	-0,6276	-0,3587
H	-0,7033	0,7657	-0,6438
H	-0,5962	0,0470	0,9726
H	1,7847	0,7326	1,1490
H	1,3537	2,0762	-1,5740
H	2,3603	0,6504	-1,2659
H	2,8043	2,2132	-0,5650
H	1,4370	3,1838	1,3504
H	-0,0483	3,0713	0,3901
H	0,0426	2,2955	1,9809

Nota. Obtenida a través de “ChemCraft”.

f. *n*-Butano

Gracias a los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de *n*-butano, como se observa en las figuras 65 y 66. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 65.

Estructura química 3D de la molécula de n-butano obtenida a través de “Pymol”

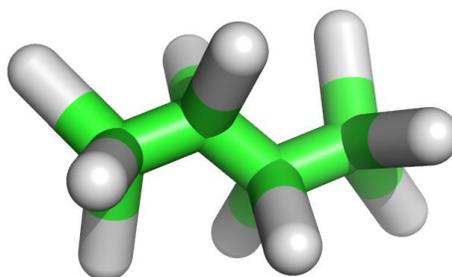
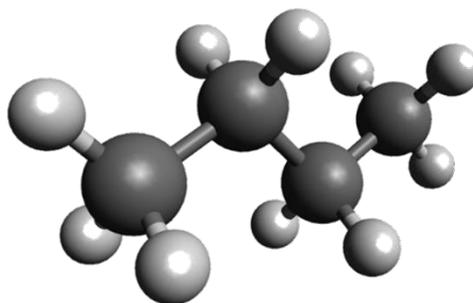


Figura 66.

Estructura química 3D de la molécula de n-butano obtenida a través de “Avogadro”



Con el programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de *n*-butano, como se observa en la tabla 103. Dicha

molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 103.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de n-butano

	x	y	z
C	-1,0717	-0,2062	0,0000
C	-0,3572	0,2062	0,0000
C	0,3572	-0,2062	0,0000
C	1,0717	0,2062	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

g. Isopentano

Por intermedio de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de isopentano, como se observa en las figuras 67 y 68. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 67.

Estructura química 3D de la molécula de isopentano obtenida a través de “Pymol”

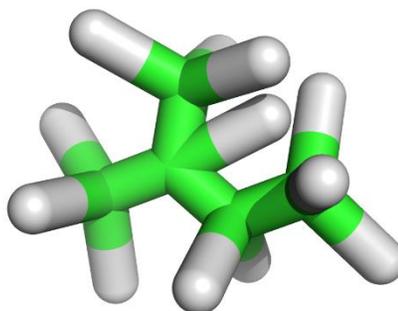
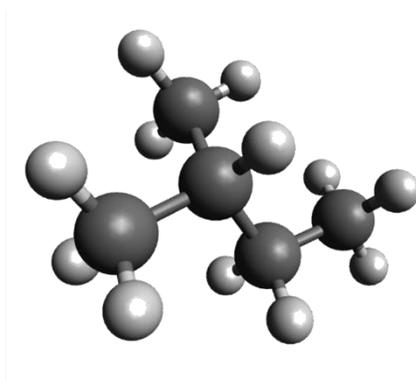


Figura 68.

Estructura química 3D de la molécula de isopentano obtenida a través de “Chemcraft”



Mediante el uso del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de isopentano, como se observa en la tabla 104. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 104.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de isopentano

	x	y	z
C	-1,0717	0,2062	0,0000
C	-0,3572	0,6187	0,0000
C	0,3572	0,2062	0,0000
C	1,0717	0,6187	0,0000
C	0,3572	-0,6187	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

h. 2,2-Dimetilbutano

A través de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 2,2-dimetilbutano, como se observa en las figuras 69 y 70. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos

de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 69.

Estructura química 3D de la molécula de 2,2-dimetilbutano obtenida a través de “Pymol”

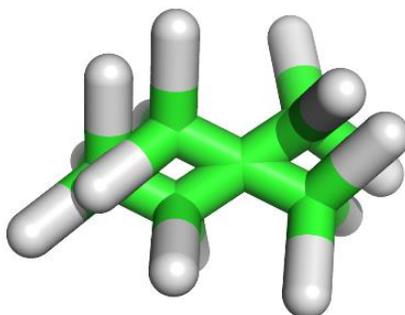
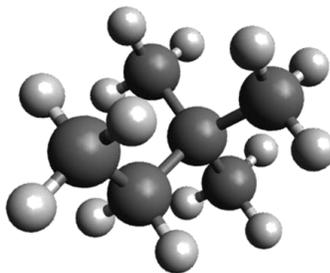


Figura 70.

Estructura química 3D de la molécula de 2,2-dimetilbutano obtenida a través de “Avogadro”



A través del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 2,2-dimetilbutano, como se observa en la tabla 105. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 105.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 2,2-dimetilbutano

	x	y	z
C	-1,0717	-0,4125	0,0000
C	-0,3572	0,0000	0,0000
C	0,3572	-0,4125	0,0000
C	1,0717	0,0000	0,0000
C	0,3572	0,4125	0,0000
C	-1,0717	0,4125	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

i. 2,3-Dimetilbutano

Mediante el uso de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 2,3-dimetilbutano, como se observa en las figuras 71 y 72. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 71.

Estructura química 3D de la molécula de 2,3-dimetilbutano obtenida a través de “Pymol”

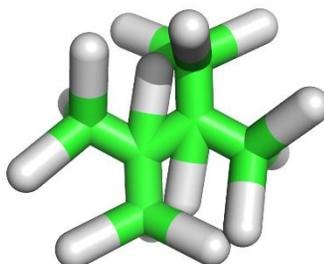
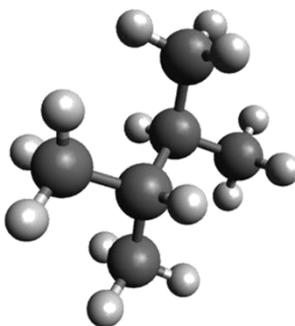


Figura 72.

Estructura química 3D de la molécula de 2,3-dimetilbutano obtenida a través de “Avogadro”



Por intermedio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 2,3-dimetilbutano, como se observa en la tabla 106. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 106

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 2,3-dimetilbutano

	x	y	z
C	-1,0717	-0,2062	0,0000
C	-0,3572	0,2062	0,0000
C	0,3572	-0,2062	0,0000
C	1,0717	0,2062	0,0000
C	-0,3572	1,0313	0,0000
C	0,3572	-1,0313	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

j. n-Pentano

Con los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de *n*-pentano, como se observa en las figuras 73 y 74. Cabe resaltar que la

representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 73.

Estructura química 3D de la molécula de n-pentano obtenida a través de “Pymol”

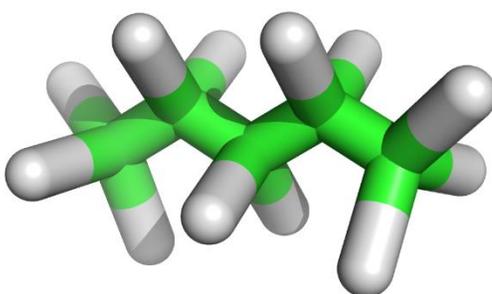
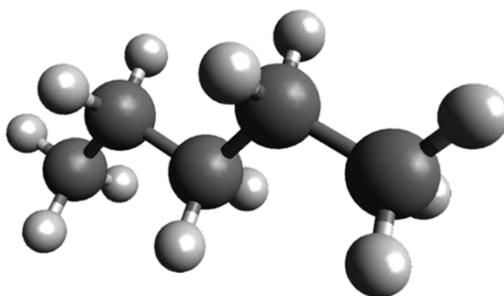


Figura 74.

Estructura química 3D de la molécula de n-pentano obtenida a través de “Avogadro”



Gracias al programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de *n*-pentano, como se observa en la tabla 107. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 107*Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de n-pentano*

	x	y	z
C	-1,4289	-0,2062	0,0000
C	-0,7145	0,2062	0,0000
C	0,0000	-0,2062	0,0000
C	0,7145	0,2062	0,0000
C	1,4289	-0,2062	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

k. 2-Metilpentano

Con la ayuda de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 2-metilpentano, como se observa en las figuras 75 y 76. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 75.

Estructura química 3D de la molécula de 2-metilpentano obtenida a través de “Pymol”

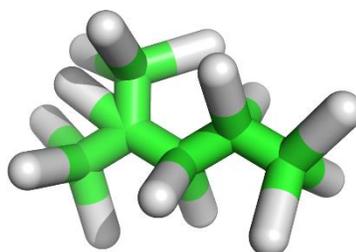
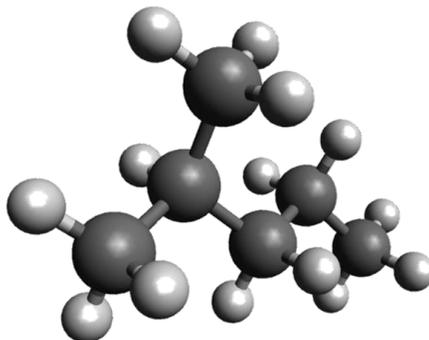


Figura 76.

Estructura química 3D de la molécula de 2-metilpentano obtenida a través de “Avogadro”



Por medio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 2-metilpentano, como se observa en la tabla 108. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 108.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 2-metilpentano

	x	y	z
C	-1,4289	-0,6187	0,0000
C	-0,7145	-0,2062	0,0000
C	0,0000	-0,6187	0,0000
C	0,7145	-0,2062	0,0000
C	1,4289	-0,6187	0,0000
C	-0,7145	0,6187	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

1. 3-Metilpentano

Por medio de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 3-metilpentano, como se observa en las figuras 77 y 78.

Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 77.

Estructura química 3D de la molécula de 3-metilpentano obtenida a través de “Pymol”

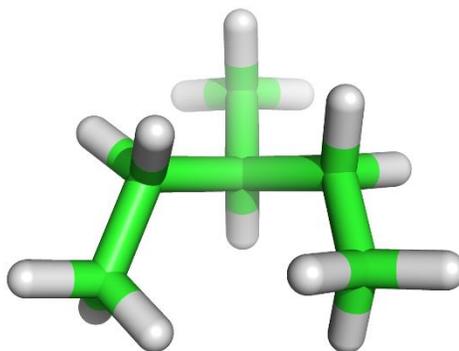
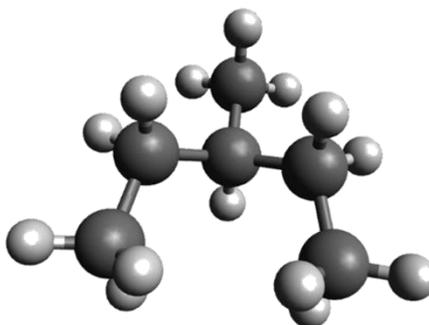


Figura 78.

Estructura química 3D de la molécula de 3-metilpentano obtenida a través de “Avogadro”



Con la ayuda del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 3-metilpentano, como se observa en la tabla 109. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 109.*Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 3-metilpentano*

	x	y	z
C	-1,4289	0,2062	0,0000
C	-0,7145	0,6187	0,0000
C	0,0000	0,2062	0,0000
C	0,7145	0,6187	0,0000
C	1,4289	0,2062	0,0000
C	0,0000	-0,6187	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.**m. *n*-Hexano**

Gracias a los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de *n*-hexano, como se observa en las figuras 79 y 80. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

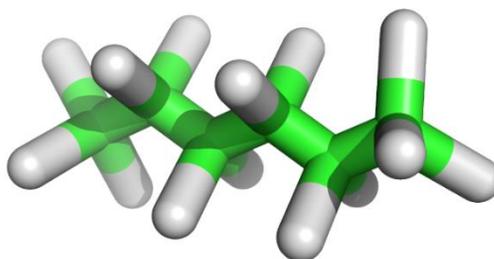
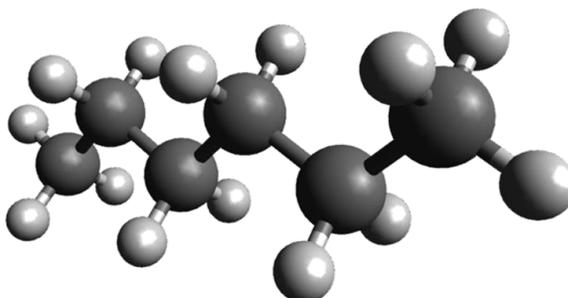
Figura 79.*Estructura química 3D de la molécula de *n*-hexano obtenida a través de “Pymol”*

Figura 80.

Estructura química 3D de la molécula de n-hexano obtenida a través de “Avogadro”



Con el programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de *n*-hexano, como se observa en la tabla 110. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 110.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de n-hexano

	x	y	z
C	-1,7862	-0,2062	0,0000
C	-1,0717	0,2062	0,0000
C	-0,3572	-0,2062	0,0000
C	0,3572	0,2062	0,0000
C	1,0717	-0,2062	0,0000
C	1,7862	0,2062	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

n. 2-Metilhexano

Por intermedio de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 2-metilhexano, como se observa en las figuras 81 y 82. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas

de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 81.

Estructura química 3D de la molécula de 2-metilhexano obtenida a través de “Pymol”

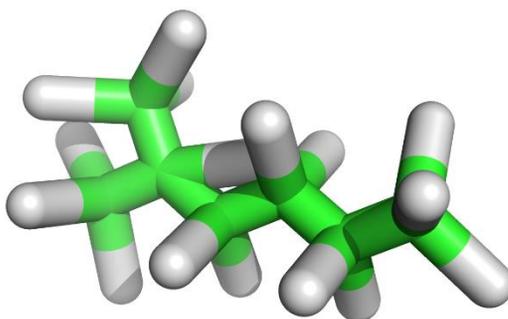
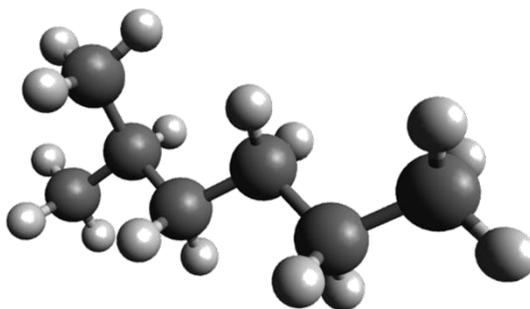


Figura 82.

Estructura química 3D de la molécula de 2-metilhexano obtenida a través de “Avogadro”



Mediante el uso del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 2-metilhexano, como se observa en la tabla 111. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 111.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 2-metilhexano

	x	y	z
C	-1,7862	-0,5635	0,0000
C	-1,0717	-0,1510	0,0000
C	-0,3572	-0,5635	0,0000
C	0,3572	-0,1510	0,0000
C	1,0717	-0,5635	0,0000
C	1,7862	-0,1510	0,0000
C	-1,4842	0,5635	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

o. 2,2-Dimetilhexano

A través de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 2,2-dimetilhexano, como se observa en las figuras 83 y 84. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 83.

Estructura química 3D de la molécula de 2,2-dimetilhexano obtenida a través de “Pymol”

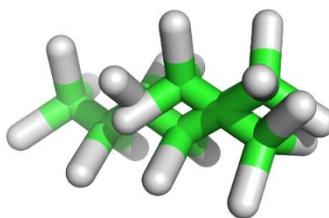
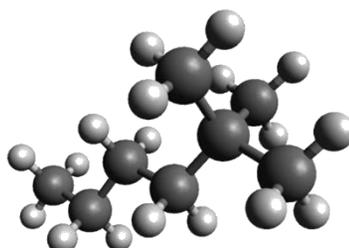


Figura 84.

Estructura química 3D de la molécula de 2,2-dimetilhexano obtenida a través de “Avogadro”



A través del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 2,2-dimetilhexano, como se observa en la tabla 112.

Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 112.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 2,2-dimetilhexano

	x	y	z
C	-1,7862	-0,4125	0,0000
C	-1,0717	0,0000	0,0000
C	-0,3572	-0,4125	0,0000
C	0,3572	0,0000	0,0000
C	1,0717	-0,4125	0,0000
C	1,7862	0,0000	0,0000
C	-1,7862	0,4125	0,0000
C	-0,3572	0,4125	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

p. 2,3-Dimetilhexano

Mediante el uso de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 2,3-dimetilhexano, como se observa en las figuras 85 y 86. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 85.

Estructura química 3D de la molécula de 2,3-dimetilhexano obtenida a través de “Pymol”

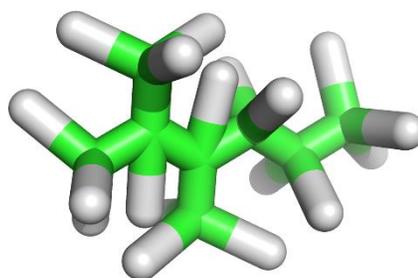
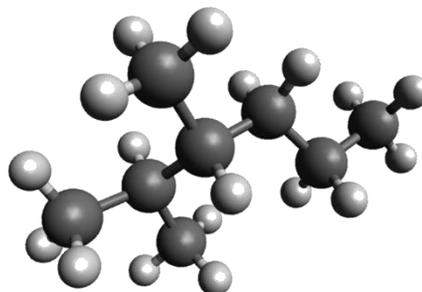


Figura 86.

Estructura química 3D de la molécula de 2,3-dimetilhexano obtenida a través de “Avogadro”



Por intermedio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 2,3-dimetilhexano, como se observa en la tabla 113. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 113.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de 2,3-dimetilhexano

	x	y	z
C	-1,7862	-0,2062	0,0000
C	-1,0717	0,2062	0,0000
C	-0,3572	-0,2062	0,0000
C	0,3572	0,2062	0,0000
C	1,0717	-0,2062	0,0000
C	1,7862	0,2062	0,0000
C	-1,0717	1,0313	0,0000
C	-0,3572	-1,0313	0,0000

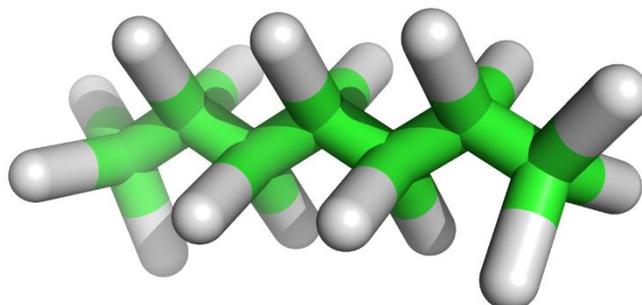
Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

q. *n*-Heptano

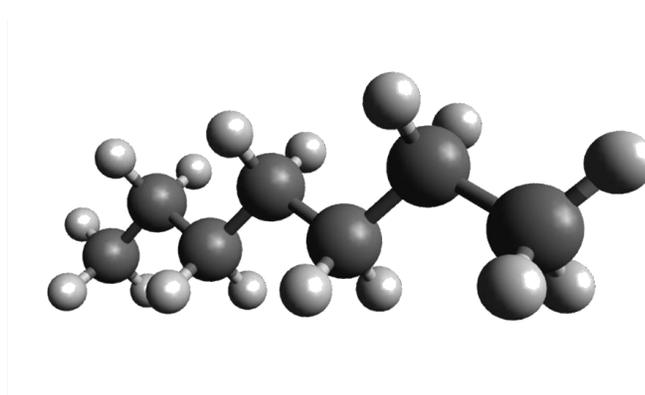
Con los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de *n*-heptano, como se observa en las figuras 87 y 88. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 87.

Estructura química 3D de la molécula de n-heptano obtenida a través de “Pymol”

**Figura 88.**

Estructura química 3D de la molécula de n-heptano obtenida a través de “Avogadro”



Gracias al programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de *n*-heptano, como se observa en la tabla 114. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 114.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de n-heptano

	x	y	z
C	-2,1434	-0,2062	0,0000
C	-1,4289	0,2062	0,0000
C	-0,7145	-0,2062	0,0000

	x	y	z
C	0,0000	0,2062	0,0000
C	0,7145	-0,2062	0,0000
C	1,4289	0,2062	0,0000
C	2,1434	-0,2062	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

r. Ciclopentano

Con la ayuda de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de ciclopentano, como se observa en las figuras 89 y 90. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 89.

Estructura química 3D de la molécula de ciclopentano obtenida a través de “Pymol”

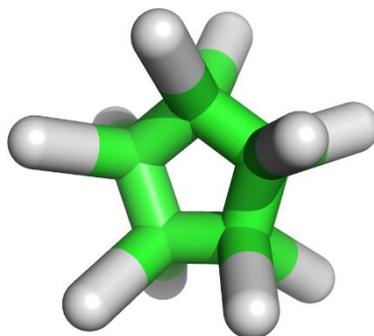
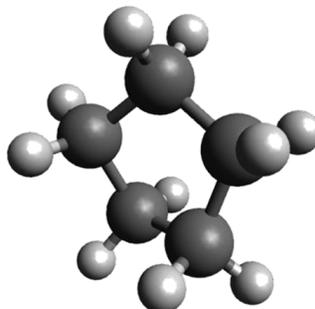


Figura 90.

Estructura química 3D de la molécula de ciclopentano obtenida a través de “Avogadro”



Por medio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de ciclopentano, como se observa en la tabla 115. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 115.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de ciclopentano

	x	y	z
C	-0,4125	-0,6348	0,0000
C	0,4125	-0,6348	0,0000
C	0,6674	0,1498	0,0000
C	0,0000	0,6348	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

s. Metilciclopentano

Por medio de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de metilciclopentano, como se observa en las figuras 91 y 92. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”.

Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 91.

Estructura química 3D de la molécula de metilciclopentano obtenida a través de “Pymol”

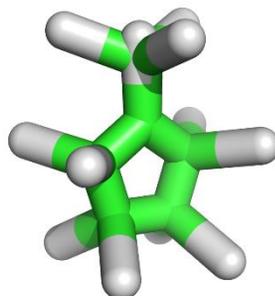
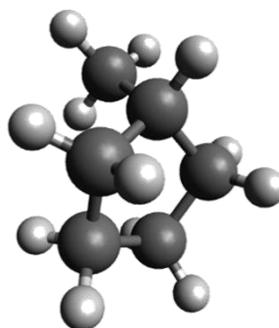


Figura 92.

Estructura química 3D de la molécula de metilciclopentano obtenida a través de “Avogadro”



Por medio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de metilciclopentano, como se observa en la tabla 116. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 116.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de metilciclopentano

	x	y	z
C	-0,6674	-0,2668	0,0000
C	-0,4054	-1,0491	0,0000
C	0,4196	-1,0417	0,0000
C	0,6674	-0,2548	0,0000
C	-0,0044	0,2241	0,0000
C	-0,0044	1,0491	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

t. Benceno

Gracias a los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de benceno, como se observa en las figuras 93 y 94. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 93.

Estructura química 3D de la molécula de benceno obtenida a través de “Pymol”

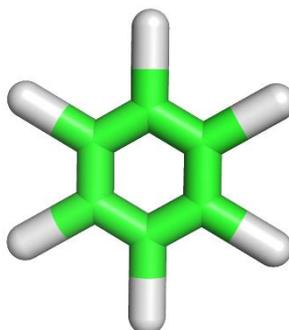
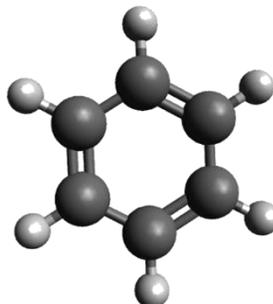


Figura 94.

Estructura química 3D de la molécula de benceno obtenida a través de “Avogadro”



Con la ayuda del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de benceno, como se observa en la tabla 117. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 117.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de benceno

	x	y	z
C	-0,7145	0,4125	0,0000
C	-0,7145	-0,4125	0,0000
C	0,0000	-0,8250	0,0000
C	0,7145	-0,4125	0,0000
C	0,7145	0,4125	0,0000
C	0,0000	0,8250	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

u. Ciclohexano

Por intermedio de los programas “Pymol” y “Avogadro”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de ciclohexano, como se observa en las figuras 95 y 96. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de

color blanco, para “Pymol” y plomo para “Avogadro”. Por otra parte, para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Avogadro”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 95.

Estructura química 3D de la molécula de ciclohexano obtenida a través de “Pymol”

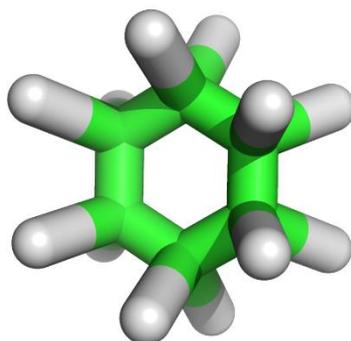
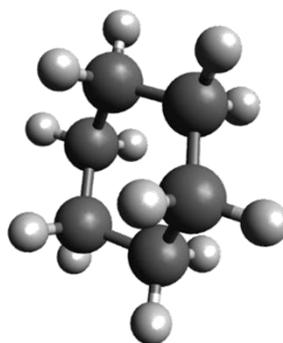


Figura 96.

Estructura química 3D de la molécula de ciclohexano obtenida a través de “Avogadro”



Con el programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de ciclohexano, como se observa en la tabla 118. Dicha molécula carece de valores en el eje Z. Cabe resaltar que la molécula no es optimizada y está ubicada en los ejes X, Y del plano.

Tabla 118.*Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de ciclohexano*

	x	y	z
C	-0,7145	0,4125	0,0000
C	-0,7145	-0,4125	0,0000
C	0,0000	-0,8250	0,0000
C	0,7145	-0,4125	0,0000
C	0,7145	0,4125	0,0000
C	0,0000	0,8250	0,0000

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

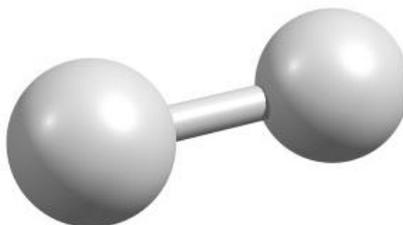
4.4.2. Elaboración de archivos con coordenadas 3D optimizadas

a. Hidrógeno

A través del programa “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de hidrógeno optimizada, como se observa en la figura 97. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se lo presenta en esferas de color blanco. Como se observa dicho compuesto está formado únicamente por hidrogeno como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 97.

Estructura química 3D optimizada para el hidrógeno obtenida en “Chemcraft”



Mediante el uso programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de hidrógeno, como se observa en la tabla 119. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 119.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de hidrógeno

	x	y	z
H	1,1058	0,0631	-0,0663
H	1,8138	0,0631	-0,0663

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

b. Metano

Mediante el uso de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de metano optimizada, como se observa en las figuras 98 y 99. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 98.

Estructura química 3D optimizada para el metano obtenida en “Pymol”

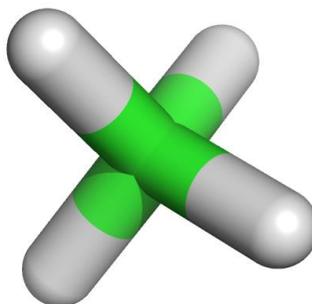
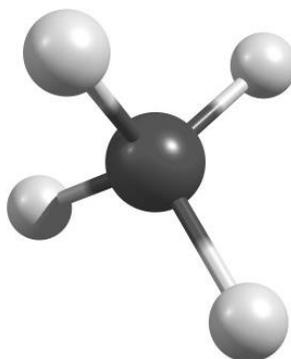


Figura 99.

Estructura química 3D optimizada para el metano obtenida en “Chemcraft”



Con el programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de metano, como se observa en la tabla 120. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 120.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de metano

	x	y	z
C	0,9521	0,0618	-0,0624
H	2,0443	0,0618	-0,0624
H	0,5881	0,7863	-0,7941
H	0,5880	0,3332	0,9309
H	0,5880	-0,9342	-0,3240

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

c. Etano

Con los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de etano optimizada, como se observa en las figuras 100 y 101. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por

hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 100.

Estructura química 3D optimizada para el etano obtenida en “Pymol”

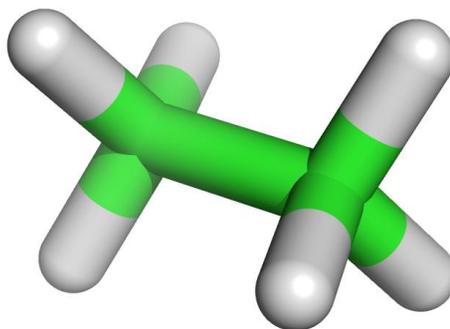
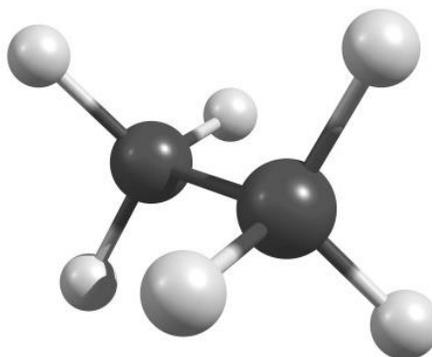


Figura 101.

Estructura química 3D optimizada para el etano obtenida en “Chemcraft”



A través del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de etano, como se observa en la tabla 121. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 121.*Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de etano*

	x	y	z
C	0,9749	0,0824	0,0486
C	2,4870	0,0824	0,0486
H	0,5906	0,9647	0,5690
H	0,5906	-0,8094	0,5525
H	0,5906	0,0919	-0,9757
H	2,8714	0,0729	1,0729
H	2,8714	0,9742	-0,4553
H	2,8714	-0,7999	-0,4718

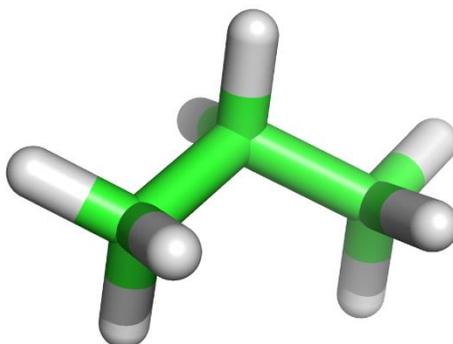
Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

d. Propano

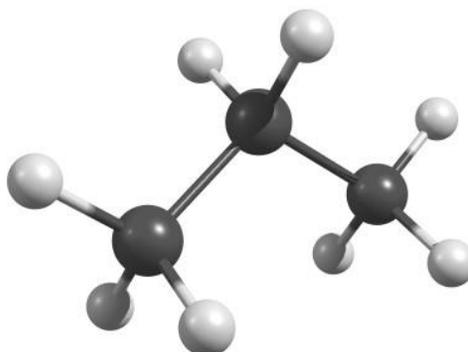
Con la ayuda uso de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de propano optimizada, como se observa en las figuras 102 y 103. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 102.

Estructura química 3D optimizada para el propano obtenida en “Pymol”

**Figura 103.**

Estructura química 3D optimizada para el propano obtenida en “Chemcraft”



Por intermedio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de propano, como se observa en la tabla 122. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 122.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de propano

	x	y	z
C	0,9626	-0,0361	0,0691
C	2,4817	-0,0499	0,0948
C	3,0152	-0,7204	1,3495

	x	y	z
H	0,6032	0,4512	-0,8426
H	0,5606	0,5109	0,9279
H	0,5606	-1,0541	0,0915
H	2,8567	0,9783	0,0432
H	2,8567	-0,5782	-0,7887
H	2,6780	-0,1950	2,2488
H	4,1097	-0,7179	1,3447
H	2,6781	-1,7600	1,4124

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

e. Isobutano

Por medio de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de isobutano optimizada, como se observa en las figuras 104 y 105. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 104.

Estructura química 3D optimizada para el isobutano obtenida en “Pymol”

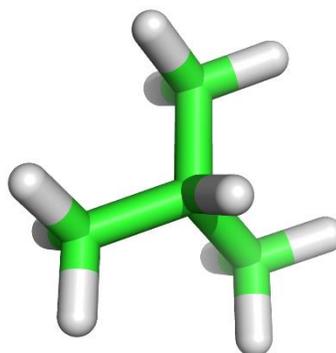
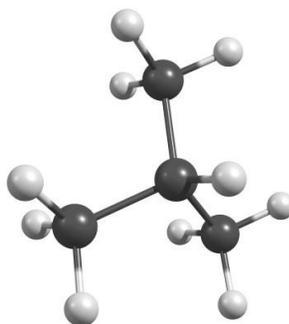


Figura 105.

Estructura química 3D optimizada para el isobutano obtenida en “Chemcraft”



Gracias al programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de isobutano, como se observa en la tabla 123. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 123.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de isobutano

	x	y	z
C	-0,0201	0,3045	0,0776
C	1,1342	1,2412	0,4270
C	1,9584	1,5649	-0,8171
C	0,6099	2,5222	1,0720
H	0,3542	-0,6276	-0,3587
H	-0,7033	0,7657	-0,6438
H	-0,5962	0,0470	0,9726
H	1,7847	0,7326	1,1490
H	1,3537	2,0762	-1,5740
H	2,3603	0,6503	-1,2659
H	2,8043	2,2132	-0,5650
H	1,4370	3,1838	1,3504
H	-0,0483	3,0713	0,3901
H	0,0426	2,2955	1,9809

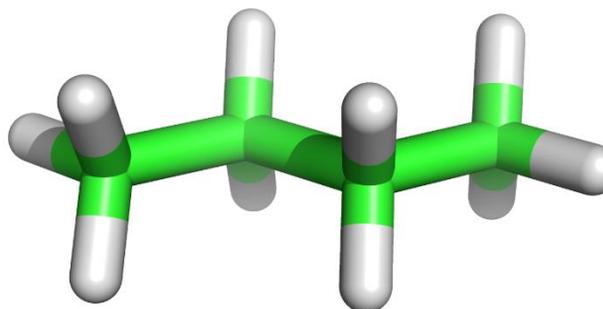
Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

f. *n*-Butano

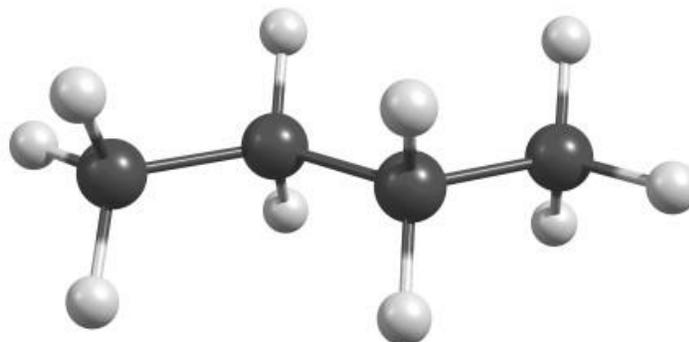
Gracias a los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de *n*-butano optimizada, como se observa en las figuras 106 y 107. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 106.

Estructura química 3D optimizada para el n-butano obtenida en “Pymol”

**Figura 107.**

Estructura química 3D optimizada para el n-butano obtenida en “Chemcraft”



Por medio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de *n*-butano, como se observa en la tabla 124. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 124.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de n-butano

	x	y	z
C	0,9390	0,0540	0,0611
C	2,4593	0,0630	0,0713
C	3,0062	1,0072	1,1399
C	4,5265	1,0162	1,1501
H	0,5691	-0,6281	-0,7108
H	0,5422	1,0523	-0,1492
H	0,5422	-0,2776	1,0259
H	2,8238	0,3674	-0,9168
H	2,8238	-0,9550	0,2517
H	2,6417	0,7028	2,1280
H	2,6417	2,0253	0,9594
H	4,9233	0,0179	1,3604
H	4,8963	1,6983	1,9220
H	4,9233	1,3479	0,1853

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

g. Isopentano

Por intermedio de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de isopentano optimizada, como se observa en las figuras 108 y 109. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado

por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 108.

Estructura química 3D optimizada para el isopentano obtenida en “Pymol”

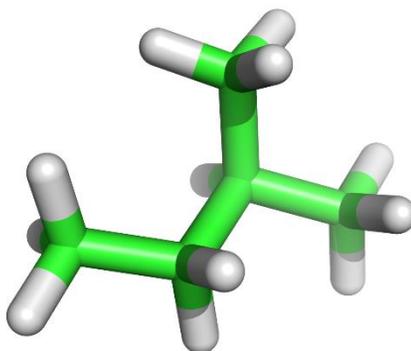
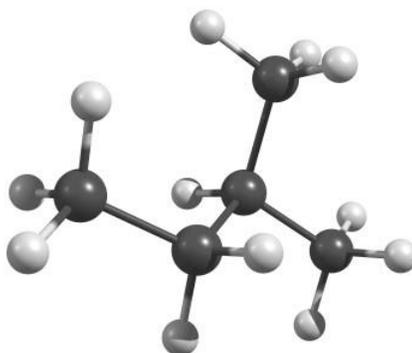


Figura 109.

Estructura química 3D optimizada para el isopentano obtenida en “Chemcraft”



Con la ayuda del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de isopentano, como se observa en la tabla 125. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 125.*Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de isopentano*

	x	y	z
C	0,8781	-0,1170	0,0672
C	2,3960	-0,0083	0,0387
C	2,9318	0,8178	-1,1436
C	2,4784	2,2773	-1,0873
C	4,4606	0,7520	-1,1727
H	0,5663	-0,7988	0,8652
H	0,4938	-0,5073	-0,8805
H	0,4089	0,8520	0,2603
H	2,8093	-1,0231	-0,0168
H	2,7424	0,4213	0,9867
H	2,5588	0,3786	-2,0775
H	2,7727	2,7485	-0,1434
H	1,3920	2,3611	-1,1866
H	2,9237	2,8538	-1,9055
H	4,8947	1,1819	-0,2634
H	4,8579	1,3035	-2,0315
H	4,8043	-0,2845	-1,2556

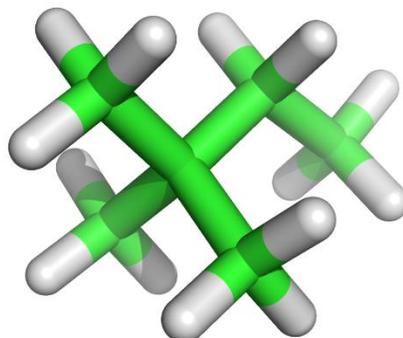
Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

h. 2,2-Dimetilbutano

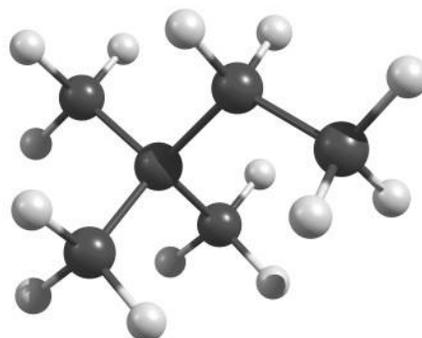
A través de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 2,2-dimetilbutano optimizada, como se observa en las figuras 110 y 111. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 110.

Estructura química 3D optimizada para el 2,2-dimetilbutano obtenida en “Pymol”

**Figura 111.**

Estructura química 3D optimizada para el 2,2-dimetilbutano obtenida en “Chemcraft”



Con el programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 2,2-dimetilbutano, como se observa en la tabla 126. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 126.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 2,2-dimetilbutano

	x	y	z
C	0,9123	0,1000	-0,0941
C	2,4487	0,1134	-0,0356
C	2,9582	-0,2536	1,3821

	x	y	z
C	2,5254	0,6809	2,5054
C	2,9854	-0,9377	-1,0267
C	2,9595	1,4978	-0,4680
H	0,5123	-0,8600	0,2507
H	0,5559	0,2596	-1,1183
H	0,4755	0,8896	0,5260
H	4,0556	-0,2890	1,3741
H	2,6222	-1,2675	1,6359
H	2,8889	1,6998	2,3465
H	2,9386	0,3303	3,4572
H	1,4375	0,7090	2,6115
H	2,6352	-1,9428	-0,7658
H	4,0811	-0,9556	-1,0299
H	2,6539	-0,7258	-2,0496
H	2,5373	2,2973	0,1495
H	2,6836	1,7124	-1,5069
H	4,0512	1,5563	-0,3956

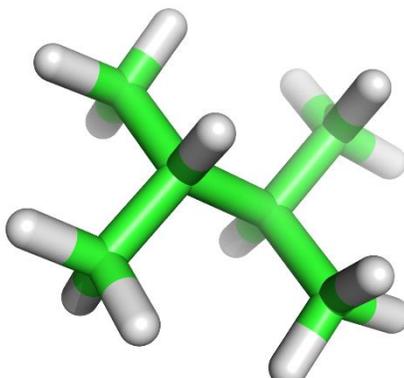
Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

i. 2,3-Dimetilbutano

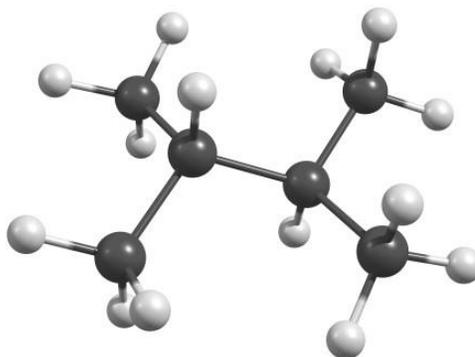
Mediante el uso de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 2,3-dimetilbutano optimizada, como se observa en las figuras 112 y 113. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 112.

Estructura química 3D optimizada para el 2,3-dimetilbutano obtenida en “Pymol”

**Figura 113.**

Estructura química 3D optimizada para el 2,3-dimetilbutano obtenida en “Chemcraft”



A través del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 2,3-dimetilbutano, como se observa en la tabla 127. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 127.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 2,3-dimetilbutano

	x	y	Z
C	0,9076	-0,0826	0,0907
C	2,4406	-0,0311	0,0955
C	2,9799	1,3843	-0,2565

	x	y	Z
C	4,5129	1,4357	-0,2517
C	2,9421	-0,5171	1,4611
C	2,4785	1,8703	-1,6221
H	0,5040	0,0861	-0,9120
H	0,4841	0,6700	0,7644
H	0,5487	-1,0658	0,4146
H	2,7983	-0,7420	-0,6611
H	2,6221	2,0952	0,5001
H	4,9364	0,6831	-0,9253
H	4,9165	1,2671	0,7511
H	4,8718	2,4189	-0,5755
H	2,6926	0,1983	2,2520
H	4,0259	-0,6662	1,4603
H	2,4908	-1,4806	1,7228
H	2,7279	1,1548	-2,4129
H	2,9297	2,8337	-1,8838
H	1,3947	2,0193	-1,6213

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

j. *n*-Pentano

Con los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de *n*-pentano optimizada, como se observa en las figuras 114 y 115. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 114.

*Estructura química 3D optimizada para el *n*-pentano obtenida en “Pymol”*

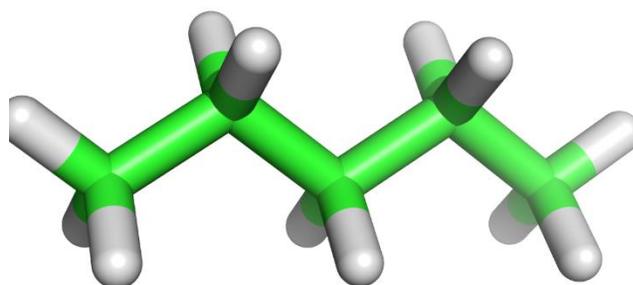
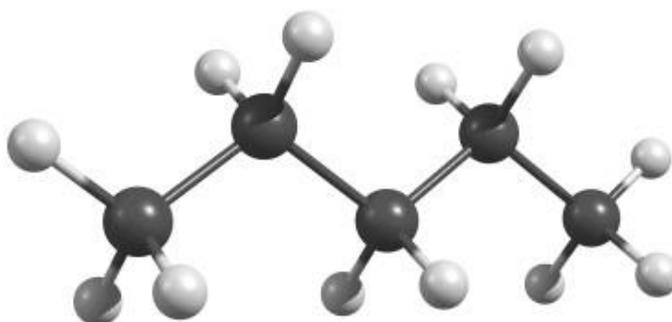


Figura 115.

Estructura química 3D optimizada para el n-pentano obtenida en “Chemcraft”



Por intermedio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de *n*-pentano, como se observa en la tabla 128. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 128.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de n-pentano

	x	y	z
C	0,9512	-0,0498	-0,0495
C	2,4713	-0,0702	-0,0701
C	3,0042	-1,0831	-1,0831
C	4,5325	-1,1003	-1,1006
C	5,0668	-2,1068	-2,1071

	x	y	z
H	0,5918	0,6812	0,6815
H	0,5494	-1,0304	0,2249
H	0,5492	0,2245	-1,0301
H	2,8412	-0,3158	0,9322
H	2,8409	0,9322	-0,3158
H	2,6280	-0,8355	-2,0832
H	2,6282	-2,0833	-0,8354
H	4,9136	-1,3516	-0,1039
H	4,9134	-0,1036	-1,3520
H	4,7302	-3,1200	-1,8653
H	6,1613	-2,1024	-2,1029
H	4,7300	-1,8651	-3,1202

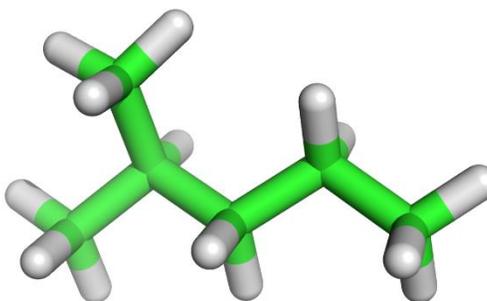
Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

k. 2-Metilpentano

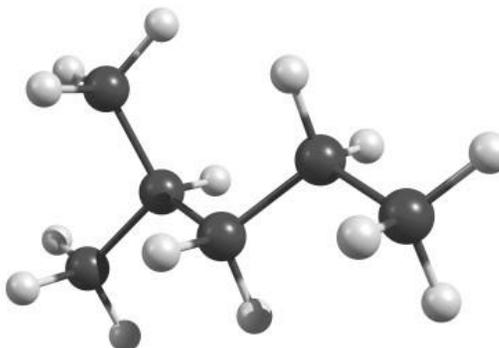
Con la ayuda de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 2-metilpentano optimizada, como se observa en las figuras 116 y 117. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 116.

Estructura química 3D optimizada para el 2-metilpentano obtenida en “Pymol”

**Figura 117.**

Estructura química 3D optimizada para el 2-metilpentano obtenida en “Chemcraft”



Gracias al programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 2-metilpentano, como se observa en la tabla 129. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 129.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 2-metilpentano

	x	y	z
C	0,9041	0,1905	-0,0763
C	2,4287	0,0711	-0,0870
C	2,9063	-1,3303	-0,5106
C	2,4817	-2,4375	0,4569

	x	y	z
C	3,0810	-3,7789	0,0617
C	3,0223	1,1265	-1,0235
H	0,4581	-0,4638	0,6787
H	0,4784	-0,0716	-1,0507
H	0,5967	1,2146	0,1618
H	2,7964	0,2768	0,9263
H	4,0020	-1,3244	-0,5780
H	2,5320	-1,5620	-1,5160
H	1,3910	-2,5345	0,4713
H	2,8025	-2,1870	1,4746
H	2,7582	-4,0719	-0,9424
H	2,7622	-4,5573	0,7620
H	4,1749	-3,7392	0,0737
H	2,6873	0,9760	-2,0555
H	4,1167	1,0858	-1,0125
H	2,7243	2,1339	-0,7138

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

1. 3-Metilpentano

Por medio de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 3-metilpentano optimizada, como se observa en las figuras 118 y 119. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 118.

Estructura química 3D optimizada para el 3-metilpentano obtenida en “Pymol”

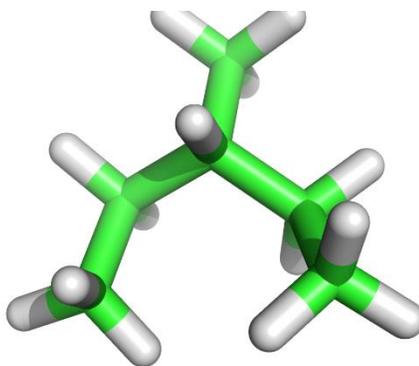
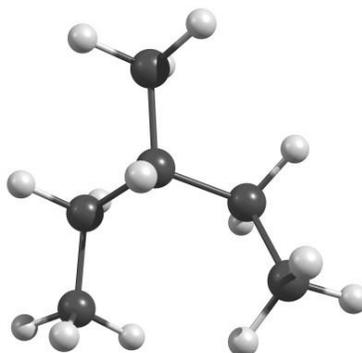


Figura 119.

Estructura química 3D optimizada para el 3-metilpentano obtenida en “Chemcraft”



Por medio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 3-metilpentano, como se observa en la tabla 130. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 130.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 3-metilpentano

	x	y	z
C	1,0015	-0,3577	-0,3215
C	2,4870	-0,0803	-0,1616
C	2,8268	1,1134	0,7546
C	2,3548	0,9235	2,2111
C	0,9906	1,5438	2,4864

	x	y	z
C	4,3470	1,3250	0,7318
H	0,8438	-1,1136	-1,0979
H	0,4591	0,5460	-0,6155
H	0,5677	-0,7481	0,6033
H	2,9019	0,1126	-1,1593
H	2,9794	-0,9884	0,2082
H	2,3671	2,0183	0,3368
H	3,0650	1,3981	2,8999
H	2,3356	-0,1409	2,4734
H	1,0074	2,6208	2,2902
H	0,7199	1,3998	3,5375
H	0,2016	1,0996	1,8765
H	4,8748	0,4606	1,1491
H	4,6255	2,2087	1,3159
H	4,7048	1,4808	-0,2916

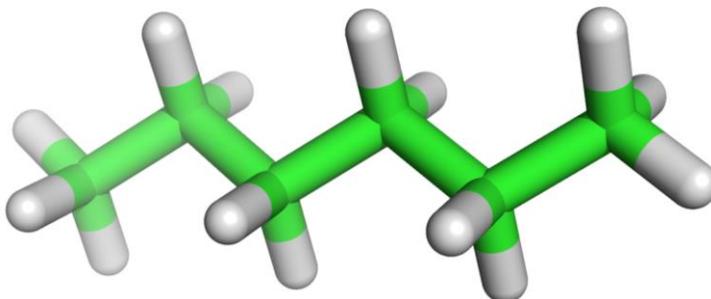
Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

m. *n*-Hexano

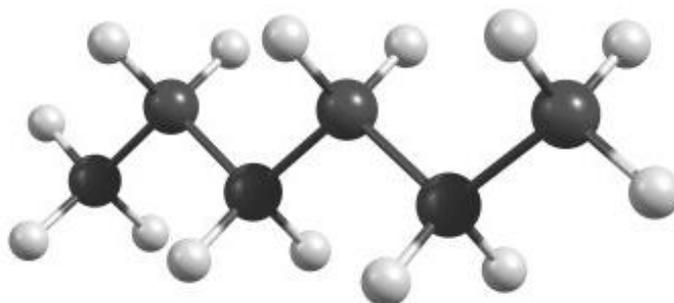
Gracias a los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de *n*-hexano optimizada, como se observa en las figuras 120 y 121. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 120.

Estructura química 3D optimizada para el n-hexano obtenida en “Pymol”

**Figura 121.**

Estructura química 3D optimizada para el n-hexano obtenida en “Chemcraft”



Con la ayuda del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de *n*-hexano, como se observa en la tabla 131. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 131.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de n-hexano

	x	y	z
C	0,9209	-0,0523	0,0472
C	2,4412	-0,0664	0,0597
C	2,9836	-1,1288	1,0155
C	4,5131	-1,1397	1,0252

	x	y	z
C	5,0555	-2,2020	1,9810
C	6,5757	-2,2160	1,9936
H	0,5547	0,7144	-0,6426
H	0,5224	0,1680	1,0427
H	0,5223	-1,0191	-0,2767
H	2,8075	0,9233	0,3562
H	2,8073	-0,2571	-0,9558
H	2,6110	-2,1162	0,7169
H	2,6110	-0,9358	2,0289
H	4,8857	-0,1522	1,3238
H	4,8857	-1,3326	0,0118
H	4,6893	-3,1918	1,6844
H	4,6893	-2,0113	2,9965
H	6,9743	-2,4363	0,9981
H	6,9420	-2,9828	2,6834
H	6,9743	-1,2493	2,3174

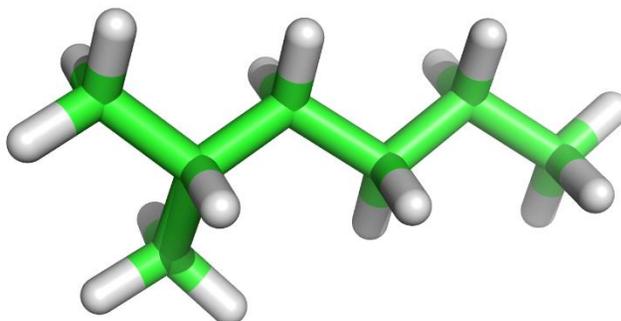
Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

n. 2-Metilhexano

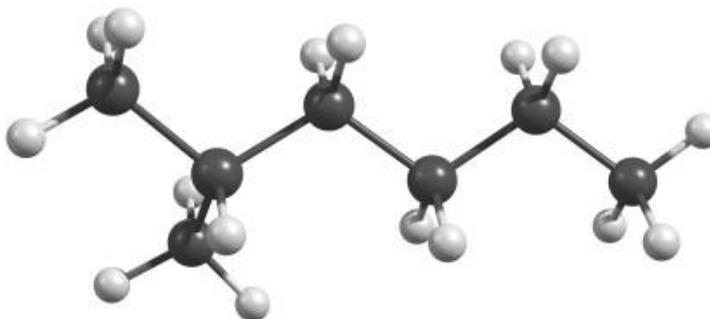
Por intermedio de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 2-metilhexano optimizada, como se observa en las figuras 122 y 123. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 122.

Estructura química 3D optimizada para el 2-metilhexano obtenida en “Pymol”

**Figura 123.**

Estructura química 3D optimizada para el 2-metilhexano obtenida en “Chemcraft”



Con el programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 2-metilhexano, como se observa en la tabla 132. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 132.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 2-metilhexano

	x	y	z
C	0,8880	0,1571	-0,1803
C	2,4107	0,0336	-0,1095
C	2,8702	-1,3958	0,2329
C	2,4221	-1,8652	1,6203

	x	y	z
C	3,0101	-3,2366	1,9570
C	2,5655	-3,7112	3,3313
C	3,0262	0,4712	-1,4410
H	0,4273	-0,0247	0,7952
H	0,4647	-0,5551	-0,8967
H	0,5945	1,1651	-0,4931
H	2,7747	0,7162	0,6688
H	3,9663	-1,4345	0,1864
H	2,4993	-2,0968	-0,5258
H	1,3290	-1,9264	1,6623
H	2,7379	-1,1355	2,3755
H	4,1050	-3,1897	1,9304
H	2,6980	-3,9702	1,2045
H	2,8897	-3,0143	4,1108
H	2,9978	-4,6923	3,5516
H	1,4757	-3,8011	3,3818
H	2,6958	-0,1733	-2,2627
H	4,1197	0,4309	-1,3966
H	2,7414	1,5009	-1,6821

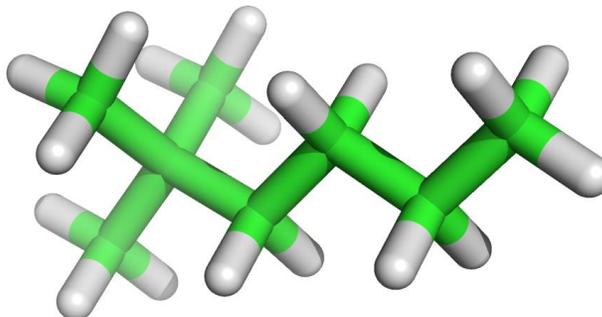
Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

o. 2,2-Dimetilhexano

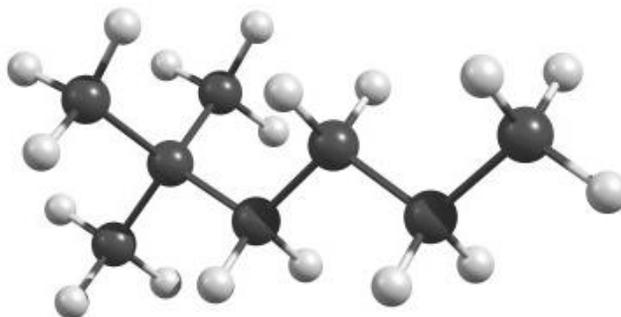
A través de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 2,2-dimetilhexano optimizada, como se observa en las figuras 124 y 125. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 124.

Estructura química 3D optimizada para el 2,2-dimetilhexano obtenida en “Pymol”

**Figura 125.**

Estructura química 3D optimizada para el 2,2-dimetilhexano obtenida en “Chemcraft”



A través del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 2,2-dimetilhexano, como se observa en la tabla 133. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 133.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 2,2-dimetilhexano

	x	y	z
C	0,8927	0,0678	-0,1583
C	2,4272	0,0984	-0,0661
C	2,9071	-0,1151	1,3944

	x	y	z
C	2,4419	0,9362	2,4097
C	2,9752	0,6215	3,8096
C	2,5202	1,6575	4,8253
C	2,9910	-1,0482	-0,9286
C	2,9421	1,4320	-0,6322
H	0,4888	-0,8505	0,2822
H	0,5602	0,1096	-1,2020
H	0,4375	0,9188	0,3587
H	4,0051	-0,1474	1,4064
H	2,5702	-1,1026	1,7382
H	1,3477	0,9693	2,4456
H	2,7914	1,9305	2,1117
H	4,0709	0,5919	3,7930
H	2,6280	-0,3688	4,1266
H	2,8785	2,6559	4,5547
H	2,9123	1,4132	5,8175
H	1,4279	1,6900	4,8901
H	2,6392	-2,0225	-0,5707
H	4,0866	-1,0590	-0,9054
H	2,6822	-0,9479	-1,9753
H	2,4980	2,2904	-0,1178
H	2,6942	1,5302	-1,6954
H	4,0310	1,5075	-0,5369

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

p. 2,3-Dimetilhexano

Mediante el uso de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de 2,3-dimetilhexano optimizada, como se observa en las figuras 126 y 127. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los

presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 126.

Estructura química 3D optimizada para el 2,3-dimetilhexano obtenida en “Pymol”

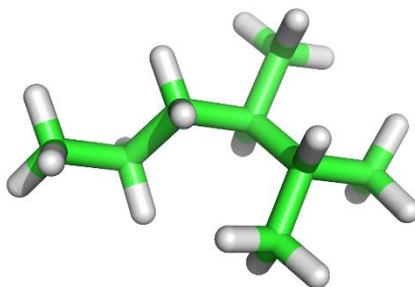
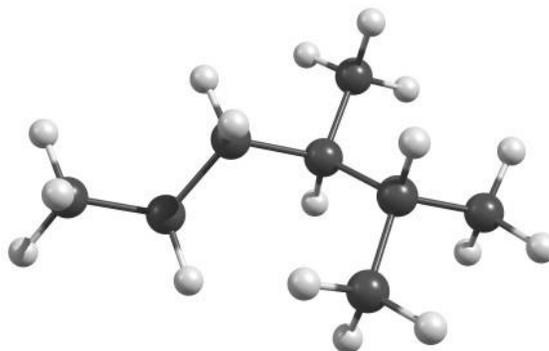


Figura 127.

Estructura química 3D optimizada para el 2,3-dimetilhexano obtenida en “Chemcraft”



Por intermedio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de 2,3-dimetilhexano, como se observa en la tabla 134. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 134.*Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de 2,3-dimetilhexano*

	x	y	z
C	0,7492	0,0644	-0,0002
C	2,2758	0,0241	0,1553
C	2,9984	-0,2429	-1,2015
C	4,5419	-0,2755	-1,0626
C	5,2028	1,0447	-1,4745
C	6,7121	0,9896	-1,2939
C	2,7265	1,3279	0,8228
C	2,5340	-1,5707	-1,8224
H	0,3484	-0,9116	-0,2889
H	0,4477	0,7990	-0,7544
H	0,2666	0,3344	0,9457
H	2,5145	-0,7973	0,8441
H	2,7209	0,5524	-1,9064
H	4,9625	-1,0627	-1,7017
H	4,8276	-0,5394	-0,0371
H	4,8075	1,8812	-0,8915
H	4,9776	1,2540	-2,5270
H	6,9749	0,8134	-0,2459
H	7,1656	1,9365	-1,6034
H	7,1513	0,1895	-1,8983
H	2,5797	2,1849	0,1572
H	3,7803	1,2867	1,1126
H	2,1563	1,5141	1,7397
H	2,7031	-2,4084	-1,1375
H	3,0760	-1,7767	-2,7522
H	1,4718	-1,5450	-2,0821

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

q. *n*-Heptano

Con los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de *n*-heptano optimizada, como se observa en las figuras 128 y 129. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 128.

Estructura química 3D optimizada para el n-heptano obtenida en “Pymol”

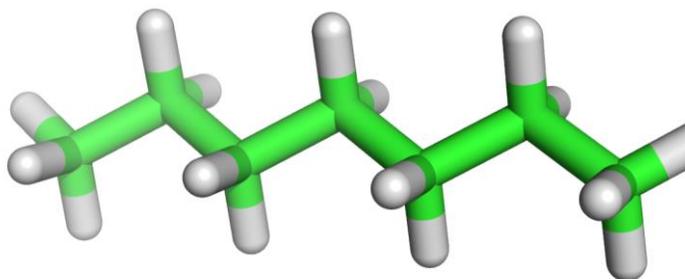
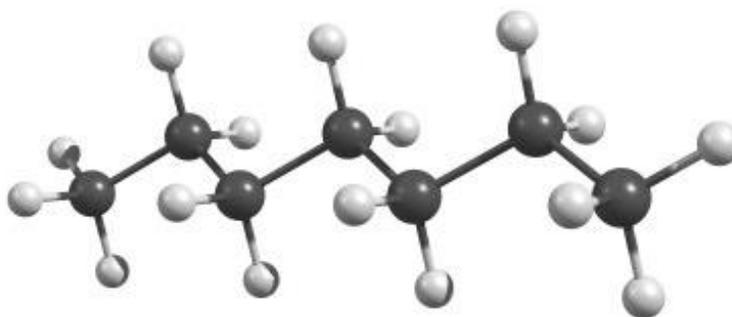


Figura 129.

Estructura química 3D optimizada para el n-heptano obtenida en “Chemcraft”



Gracias al programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de *n*-heptano, como se observa en la tabla 135. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 135.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de n-heptano

	x	y	z
C	0,9211	-0,0317	0,0442
C	2,4412	-0,0494	0,0673
C	2,9739	-0,9137	1,2099
C	4,5032	-0,9290	1,2297
C	5,0364	-1,7938	2,3731
C	6,5647	-1,8089	2,3928
C	7,0987	-2,6676	3,5281
H	0,5619	0,5920	-0,7804
H	0,5193	0,3749	0,9777
H	0,5190	-1,0406	-0,0928
H	2,8112	0,9770	0,1730
H	2,8110	-0,4306	-0,8917
H	2,5975	-1,9383	1,1018
H	2,5977	-0,5307	2,1664
H	4,8794	0,0957	1,3380
H	4,8792	-1,3121	0,2732
H	4,6603	-2,8185	2,2651
H	4,6604	-1,4109	3,3297
H	6,9459	-0,7872	2,5048
H	6,9457	-2,1949	1,4402
H	6,7620	-2,2889	4,4984
H	8,1932	-2,6642	3,5234
H	6,7618	-3,7043	3,4279

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

r. Ciclopentano

Con la ayuda de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de ciclopentano optimizada, como se observa en las figuras 130 y 130. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 130.

Estructura química 3D optimizada para el ciclopentano obtenida en “Pymol”

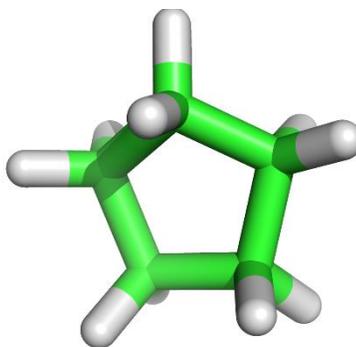
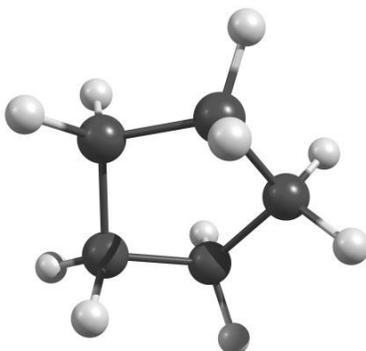


Figura 131.

Estructura química 3D optimizada para el ciclopentano obtenida en “Chemcraft”



Por medio del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de ciclopentano, como se observa en la tabla 136. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 136.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de ciclopentano

	x	y	z
C	-0,7948	-0,9921	-0,1396
C	0,7250	-1,0531	0,0030
C	1,2033	0,3925	0,1288
C	0,0058	1,2485	-0,2543
C	-1,1769	0,4314	0,2356
H	-1,2994	-1,7337	0,4869
H	-1,0745	-1,1915	-1,1810
H	1,1715	-1,5439	-0,8686
H	1,0165	-1,6297	0,8876
H	2,0742	0,5965	-0,5014
H	1,4905	0,5955	1,1675
H	-0,0404	1,3683	-1,3432
H	0,0435	2,2432	0,1988
H	-2,1196	0,7435	-0,2227
H	-1,2767	0,5220	1,3237

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

s. Metilciclopentano

Por medio de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de metilciclopentano optimizada, como se observa en las figuras 132 y 133. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto

está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 132.

Estructura química 3D optimizada para el metilciclopentano obtenida en “Pymol”

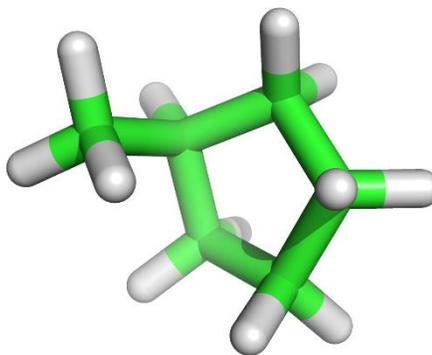
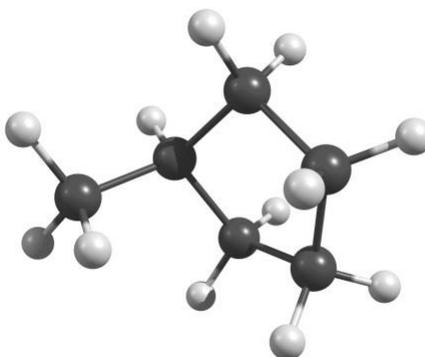


Figura 133.

Estructura química 3D optimizada para el metilciclopentano obtenida en “Chemcraft”



Con la ayuda del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de metilciclopentano, como se observa en la tabla 137. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 137.*Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de metilciclopentano*

	x	y	z
C	-0,7705	-0,9977	-0,1784
C	0,7360	-1,0663	0,0531
C	1,2342	0,3787	0,0454
C	0,0047	1,2509	-0,1905
C	-1,1781	0,4032	0,2726
C	-1,3947	0,4860	1,7823
H	-1,3057	-1,7942	0,3478
H	-0,9765	-1,1121	-1,2500
H	1,2287	-1,6702	-0,7157
H	0,9544	-1,5303	1,0219
H	1,9919	0,5432	-0,7276
H	1,6953	0,6189	1,0103
H	-0,0906	1,4575	-1,2639
H	0,0758	2,2130	0,3262
H	-2,1004	0,7185	-0,2279
H	-0,5073	0,1831	2,3472
H	-2,2228	-0,1630	2,0861
H	-1,6458	1,5104	2,0771

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

t. Benceno

Gracias a los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de benceno optimizada, como se observa en las figuras 134 y 135. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por

hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 134.

Estructura química 3D optimizada para el benceno obtenida en “Pymol”

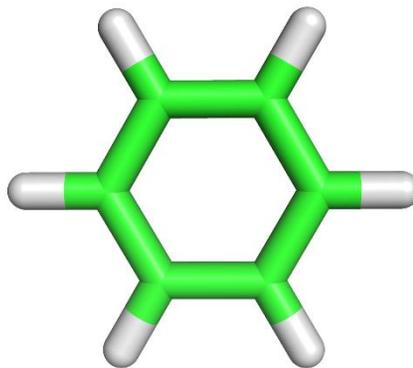
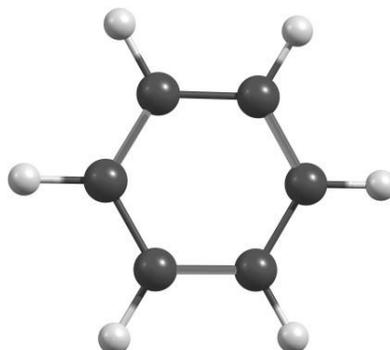


Figura 135.

Estructura química 3D optimizada para el benceno obtenida en “Chemcraft”



Con el programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de benceno, como se observa en la tabla 138. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 138.*Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de benceno*

	x	y	z
C	-0,7622	1,1791	-0,0045
C	-1,3938	-0,0645	-0,0038
C	-0,6325	-1,2333	-0,0059
C	0,7603	-1,1584	-0,0087
C	1,3919	0,0852	-0,0095
C	0,6306	1,2540	-0,0074
H	-1,3553	2,0897	-0,0029
H	-2,4789	-0,1229	-0,0015
H	-1,1246	-2,2023	-0,0053
H	1,3534	-2,0690	-0,0103
H	2,4770	0,1436	-0,0117
H	1,1227	2,2229	-0,0080

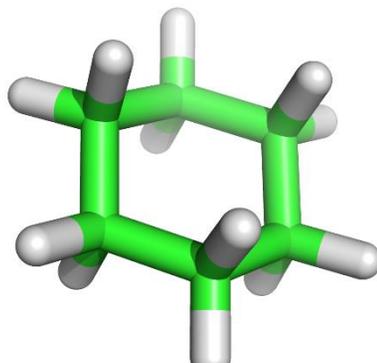
Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

u. Ciclohexano

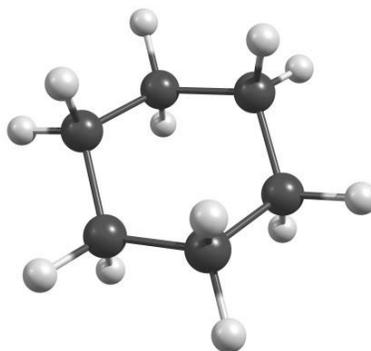
Por intermedio de los programas “Pymol” y “Chemcraft”, se obtuvo la estructura química 3D de la molécula de ciclohexano optimizada, como se observa en las figuras 136 y 137. Cabe resaltar que la representación de los átomos de hidrogeno se los presenta en esferas de color blanco y para los átomos de carbono se los representa en color verde, para “Pymol” y negro para “Chemcraft”. Como se observa dicho compuesto está formado por hidrogeno y carbono como se lo expuso anteriormente en las propiedades químicas básicas.

Figura 136.

Estructura química 3D optimizada para el ciclohexano obtenida en “Pymol”

**Figura 137.**

Estructura química 3D optimizada para el ciclohexano obtenida en “Chemcraft”



A través del programa “Chemcraft”, se extrajeron las coordenadas espaciales de la estructura 3D de la molécula de ciclohexano, como se observa en la tabla 139. Dicha molécula posee valores en los ejes X, Y, Z. Cabe resaltar que la molécula es optimizada.

Tabla 139.

Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de ciclohexano

	x	y	z
C	0,7376	1,2614	-0,2209
C	1,4650	-0,0017	0,2322
C	0,7366	-1,2640	-0,2215
C	-0,7225	-1,2635	0,2265

	x	y	z
C	-1,4499	-0,0004	-0,2266
C	-0,7215	1,2619	0,2271
H	0,7830	1,3355	-1,3144
H	1,2471	2,1446	0,1806
H	1,5475	-0,0020	1,3261
H	2,4862	-0,0020	-0,1653
H	1,2453	-2,1478	0,1795
H	0,7819	-1,3375	-1,3151
H	-0,7679	-1,3376	1,3200
H	-1,2320	-2,1467	-0,1750
H	-2,4711	-0,0001	0,1709
H	-1,5325	-0,0001	-1,3205
H	-0,7668	1,3354	1,3207
H	-1,2303	2,1457	-0,1739

Nota. Obtenida a través de “Chemcraft”.

4.4.3. Reporte de Energías de minimización

Con el programa “Avogadro”, se obtuvo la energía libre del sistema necesaria para adoptar una cierta forma de la molécula en el vacío. Para este cálculo se usaron los campos de fuerza UFF solo para el hidrógeno y el MMFF94s para los demás compuestos debido a que este campo se lo usa para hidrocarburos, como se observa en la tabla 140.

El compuesto que requiere mayor energía para la optimización de su estructura es el benceno con 67,9391 kJ/mol. Por otra parte, el compuesto que requiere menor energía para la optimización de su estructura es el n-heptano con -23,7798 kJ/mol. Finalmente se obtiene un promedio de 6.09 kJ/mol.

Tabla 140.*Energías de optimización*

#	Compuesto	Energía libre del sistema (kJ/mol)	Campo de fuerza
1	hidrógeno	1,74E-21	UFF
2	metano	0,110457	MMFF94s
3	etano	-19,8218	MMFF94s
4	propano	-20,504	MMFF94s
5	isobutano	-1,99924	MMFF94s
6	<i>n</i> -butano	-21,2521	MMFF94s
7	isopentano	1,38367	MMFF94s
8	2,2-dimetilbutano	42,8532	MMFF94s
9	2,3-dimetilbutano	27,7672	MMFF94s
10	<i>n</i> -pentano	-22,0718	MMFF94s
11	2-metilpentano	0,77389	MMFF94s
12	3-metilpentano	15,8191	MMFF94s
13	<i>n</i> -hexano	-22,9204	MMFF94s
14	2-metilhexano	-0,107135	MMFF94s
15	2,2-dimetilhexano	41,409	MMFF94s
16	2,3-dimetilhexano	42,841	MMFF94s
17	<i>n</i> -heptano	-23,7798	MMFF94s
18	ciclopentano	6,48011	MMFF94s
19	metilciclopentano	27,907	MMFF94s
20	benceno	67,9391	MMFF94s
21	ciclohexano	-14,909	MMFF94s
	PROMEDIO	6.09	

Nota. Obtenida a través de “Avogadro”.

Capítulo V

5. Conclusiones

Mediante la búsqueda bibliográfica se obtuvo el listado de compuesto químicos presentes en las corrientes de entrada y salida del proceso de isomerización catalítica, siendo estos en su mayoría hidrocarburos de entre 5 y 6 carbonos en su estructura molecular con sus respectivos isómeros.

Las propiedades básicas, tales como, código SMILES y estructura 2D de los compuestos presentes en el proceso de isomerización catalítica, se generaron automáticamente a través de la interfaz amigable con el usuario, debido a que mediante clics consecutivos se generaron todos los componentes requeridos, con el fin de facilitar la transferencia de conocimiento para su posterior socialización.

La plataforma suiza bioinformática “SwissADME” permitió la obtención de propiedades fisicoquímicas mediante la importación de los códigos SMILES obtenidos anteriormente, para cada hidrocarburo presente en el proceso de isomerización catalítica y se determinó tanto la solubilidad como la lipofilia, con lo cual se obtuvo una perspectiva de análisis más amplia. Mediante este análisis se pudo comprobar que los hidrocarburos son relativamente solubles en agua, y que a su vez tienen la capacidad de permear las membranas celulares a excepción de la molécula de hidrógeno.

Se utilizó ChemDraw versión 18.2, Avogadro, así como también la plataforma suiza bioinformática “SwissADME” (Daina et al., 2017), en un periodo de tiempo entre diciembre 2020 y marzo 2021, juntamente con la utilización de otros programas de apoyo tales como Pymol y Chemcraft.

La estructura molecular 3D y la energía de optimización, de los compuestos de análisis, se obtuvo mediante el programa Avogadro usando como campos de fuerza el MMFF94s que es el adecuado para simular la conformación instantánea, más acorde al tiempo mínimo que se puede dar para la optimización de los hidrocarburos, mientras que el campo de fuerza UFF se utilizó para la molécula de hidrógeno.

Se observó que las moléculas no optimizadas no presentaron coordenadas en el eje z a excepción del compuesto químico isobutano, además no exhiben una buena visualización

de sus átomos en la estructura química 3D, mientras que las moléculas optimizadas presentaron valores en los tres ejes, con una distribución adecuada de sus átomos en el espacio.

Las moléculas que requieren mayor cantidad de energía para la optimización de su estructura son: para las parafinas el 2,2-dimetilbutano, 2,2-dimetilhexano y el 2,3-dimetilhexano con 42,8532 kJ/mol, 41,409 kJ/mol, 42,841 kJ/mol respectivamente. Para los cicloalcanos tenemos el metilciclopentano con 27,907 kJ/mol. Finalmente, para los aromáticos tenemos el benceno con 67,9391 kJ/mol, este último también requiere la mayor energía para su optimización de entre todos los compuestos presentes el proceso de isomerización catalítica.

Bibliografía

- Cabrera, G., Rodríguez, M., & Tesorero, Z. (2016). Correlación estructura-LD50 de quinolinas sustituidas utilizando teoría del funcional de la densidad (DFT). Recuperado el 10 de Febrero de 2021. *Avances En Química*, 11(1), 25–33.
- Chang, R., & Goldsdy, K. (2017). *QUÍMICA* (Duodécima). Recuperado el 17 de Febrero de 2021. México D.F: McGraw-Hill.
- Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2017). SwissADME: A free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. Recuperado el 09 de Marzo de 2021. *Scientific Reports*, 7(October 2016), 42717. <https://doi.org/10.1038/srep42717>
- Ertl, G., Knözinger, H., Schüth, F., & Weitkamp, J. (2010). *Handbook of Heterogeneous Catalysis* (Segunda). Recuperado el 21 de Enero de 2021. Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. FGA.
- Hsu, C. S., & Robinson, P. R. (2019). Petroleum Processing and Refineries. In *Petroleum Science and Technology* (pp. 129–157). Recuperado el 21 de Enero de 2021. Cham: Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-030-16275-7_8
- Jász, Á., Rák, Á., Ladjánszki, I., & Cserey, G. (2019). Optimized GPU implementation of Merck Molecular Force Field and Universal Force Field. Recuperado el 24 de Febrero de 2021. *Journal of Molecular Structure*, 1188, 227–233. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.04.007>
- Lewars, E. G. (2011). Some “Special” Topics: Solvation, Singlet Diradicals, A Note on Heavy Atoms and Transition Metals. Recuperado el 28 de Enero de 2021. In *Computational Chemistry* (Segunda, p. 664). Dordrecht: Springer Netherlands. https://doi.org/10.1007/978-90-481-3862-3_8
- Maples, R. E. (2000). *Petroleum Refinery Process Economics. Petroleum Science* (Segunda). Recuperado el 21 de Enero de 2021. USA: Penn Well Corporation.
- Matar, S., & Hatch, L. (2000). *Chemistry of PETROCHEMICAL PROCESSES* (segunda). Recuperado el 21 de Enero de 2021. Texas: Gulf Publishing Company.

- McMurry, J. (2008). *Química orgánica 7* (Septima). Recuperado el 16 de Febrero de 2021. México: Cengage learning.
- Meyers, R. (2003). *HANDBOOK OF PETROLEUM REFINING PROCESSES* (Tercera). Recuperado el 21 de Enero de 2021. New York: McGraw-Hill.
- Petitjean, M., & Camproux, A.-C. (2016). In Silico Medicinal Chemistry: Computational Methods to Support Drug Design. Edited by Nathan Brown. Recuperado el 20 de Febrero de 2021. *ChemMedChem*, 11(13), 227.
<https://doi.org/10.1002/cmdc.201600165>
- Sami, M., Manfred, M., & Hassan, T. (1989). *CATALYSIS IN PETROCHEMICAL PROCESSES* (Primera). Recuperado el 21 de Enero de 2021. London: KLUWER ACADEMIC.
- Saval, S., Lara, F., Lesser, J. M., & Nieto, J. M. (2004). Contaminación de acuíferos con hidrocarburos: Causas, efectos, riesgos asociados y medidas de prevención. Recuperado el 18 de Febrero de 2021. *El Agua En México Vista Desde La Academia. Academia Mexicana de Ciencias. México, DF ISBN, 968–7428.*
- Torres, R., & Castro, J. (2002). *Análisis y imulación de procesos de refinación del petróleo*. Recuperado el 21 de Enero de 2021. (J. Espinosa & A. Lepre, Eds.) (Primera). México: Alfaomega.
- Wade, L. (2011). *Química orgánica. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* (Séptima, Vol. 1). Recuperado el 23 de Febrero de 2021. México: Pearson.
- Wang, J., Wolf, R. M., Caldwell, J. W., Kollman, P. A., & Case, D. A. (2004). Development and testing of a general amber force field. Recuperado el 23 de Febrero de 2021. *Journal of Computational Chemistry*, 25(9), 1157–1174.
<https://doi.org/10.1002/jcc.20035>
- Yurkanis, P. (2008). *Química orgánica* (Quinta). Recuperado el 23 de Febrero de 2021. México: PEARSON EDUCACIÓN.

Anexos

Lista de abreviaciones

AMBER: Construcción de modelos asistidos con refinamiento energético.

ACS: American Chemical Society.

BPD: Barriles por Día.

GAFF: Campo de fuerza general AMBER.

IUPAC: International Union of Pure and Applied Chemistry.

LPG: Gas Licuado de Petróleo.

LSR: destilación directa ligera.

MMFF94: Merck Molecular Force Field.

MMFF94s: Merck Molecular Force Field modificado.

MTA: Miles de Toneladas por Día.

PSA: Área de superficie polar.

RM: Refractividad Molar.

SMILES: Simplified Molecular Input Line Entry Specification.

TIP: Total Isomerization Process.

UFF: Campo de Fuerza Universal.

UOP: Universal Oil Products.

WT: Peso.