

## DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE ENERGÍA Y MECÁNICA

### CARRERA DE PETROQUÍMICA

**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**

**AUTORES: VACA PÉREZ, JUAN PABLO  
YUGCHA CASA, EDWIN JAVIER**

**DIRECTOR: ING. FABIÁN MAURICIO SANTANA ROMO, PhD.**

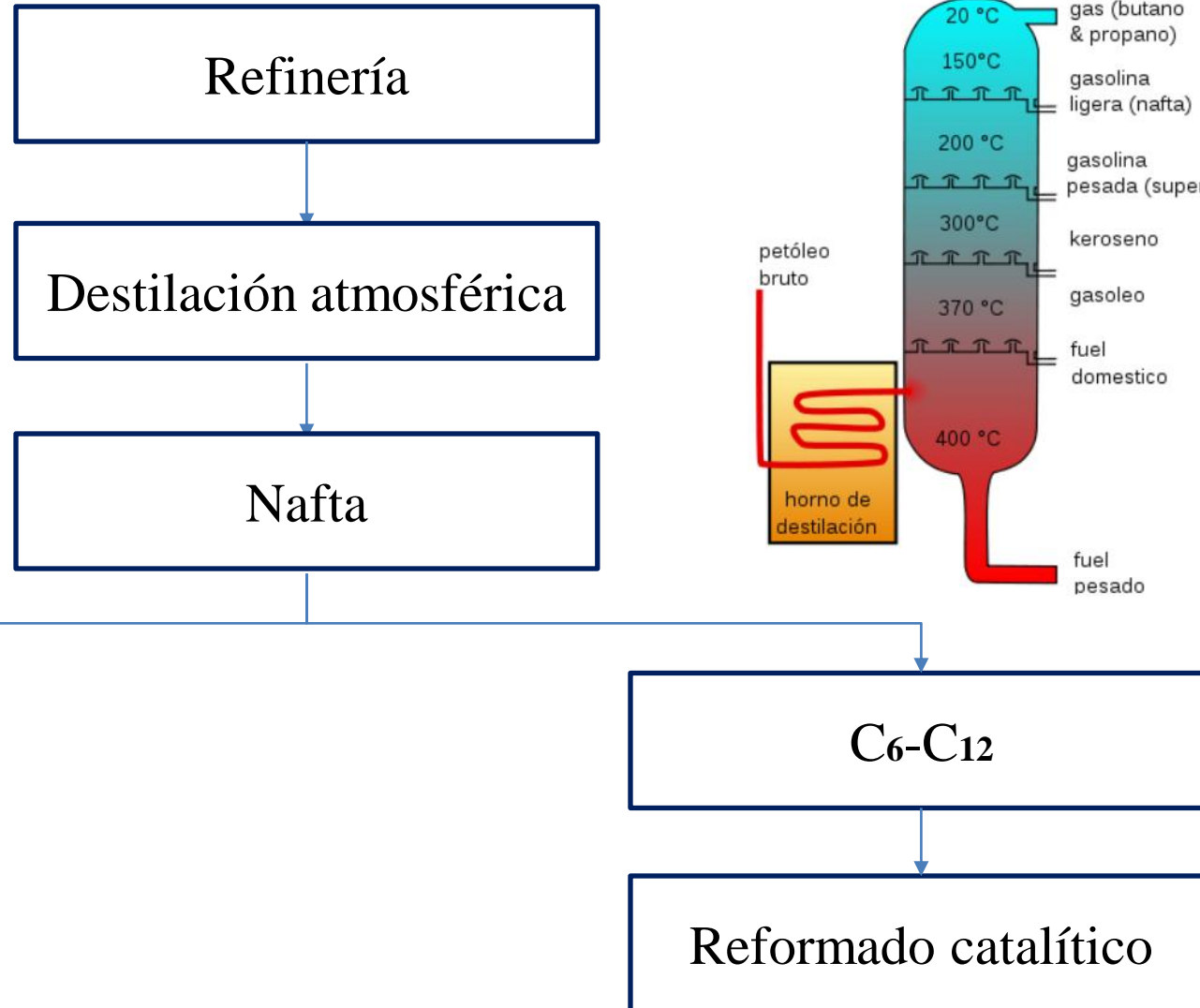








# Introducción





## Isomerización catalítica

- Aumenta el octanaje
- Zeolitas
- Química computacional







- 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.



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



## Estimación de corrientes del proceso TIP

Componente	Alimentación fresca al reactor (BPD)	Porcentaje de alimentación fresca	Producto isomerizado (BPD)	Porcentaje de producto isomerizado
Hidrógeno consumido	2175			
Corrientes C <sub>4+</sub>				
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



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



Propiedades químicas básicas



Nomenclatura IUPAC



Análisis elemental



Peso molecular



Fórmula química

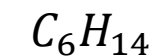


Código SMILES

Fórmula lineal



Fórmula molecular

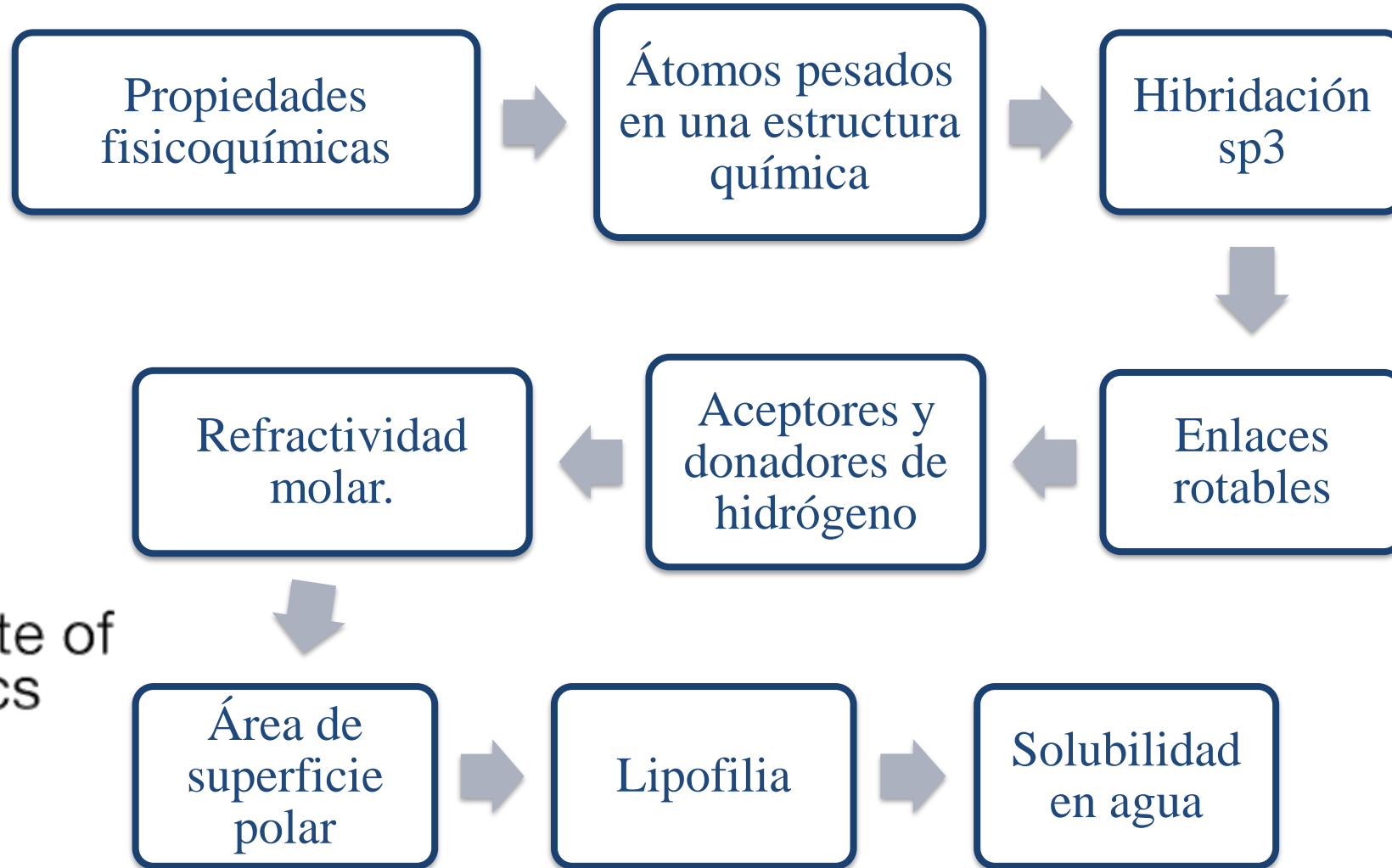


Código SMILES

CCCCCC



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



Swiss Institute of Bioinformatics

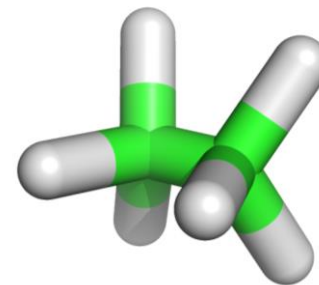
## Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas.

*Estructura química 3D de la molécula de etano obtenida a través de "Pymol"*

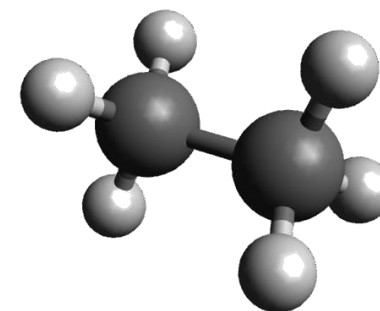
**PyMOL**

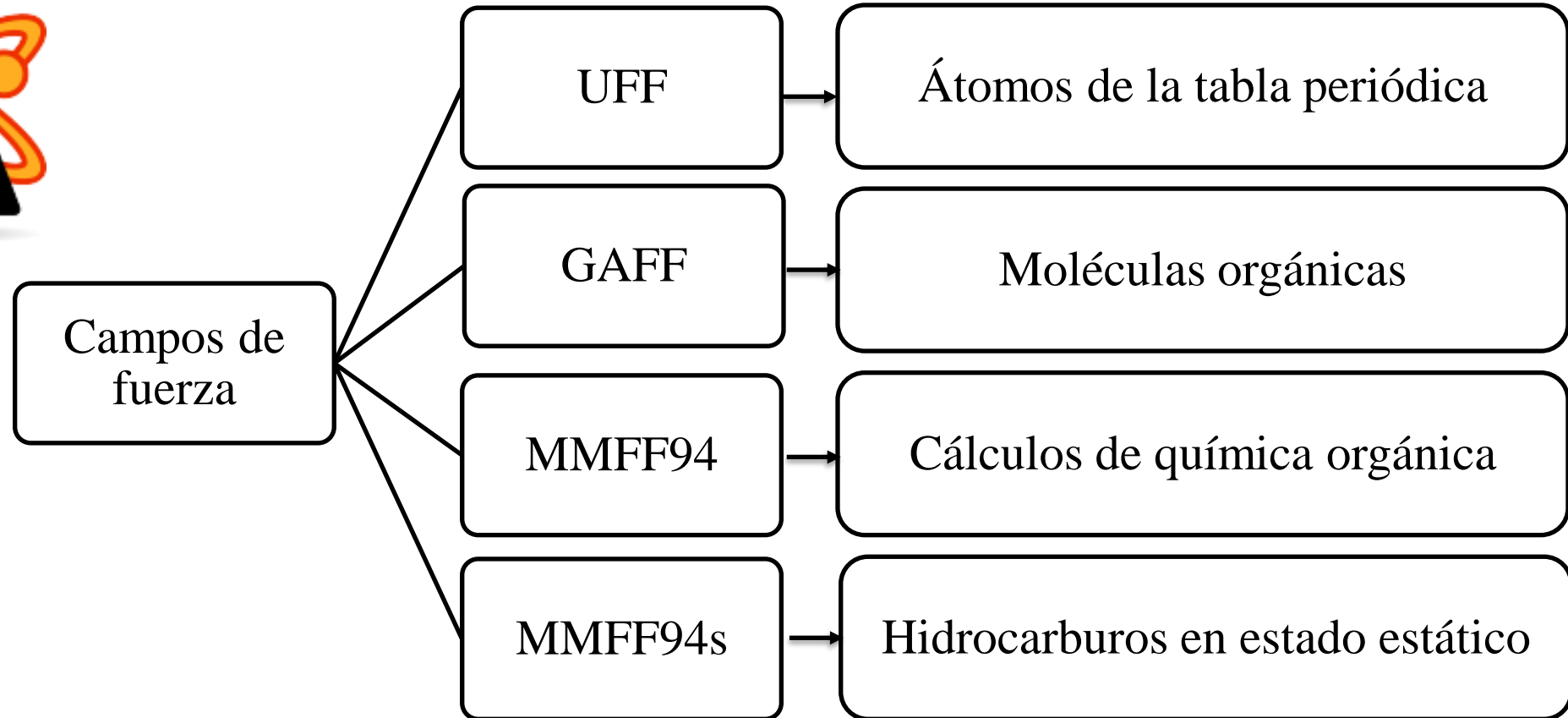


**Chemcraft**



*Estructura química 3D de la molécula de etano obtenida a través de "Chemcraft"*







## Reporte la energía de optimización



Etano no optimizado.mol\* - Avogadro

File Edit View Build Select Extensions Crystallography Settings Help

New Open Save Close Quit Tool Settings... Display Settings...

AutoOptimization Settings

Force Field: MMFF94s

Steps per Update: 4

Algorithm:  
Steepest Descent

Fixed atoms are movable

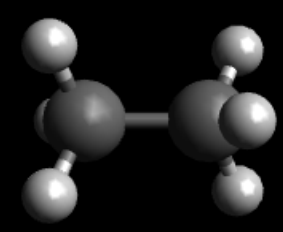
Ignored atoms are movable

Stop

View 1

AutoOpt: E = -19.8218 kJ/mol (dE = 0)

Num Constraints: 0

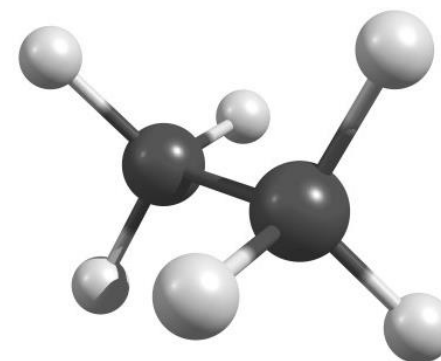


## Elaboración de archivos con coordenadas 3D

*Estructura química 3D optimizada para el etano obtenida en "Chemcraft"*

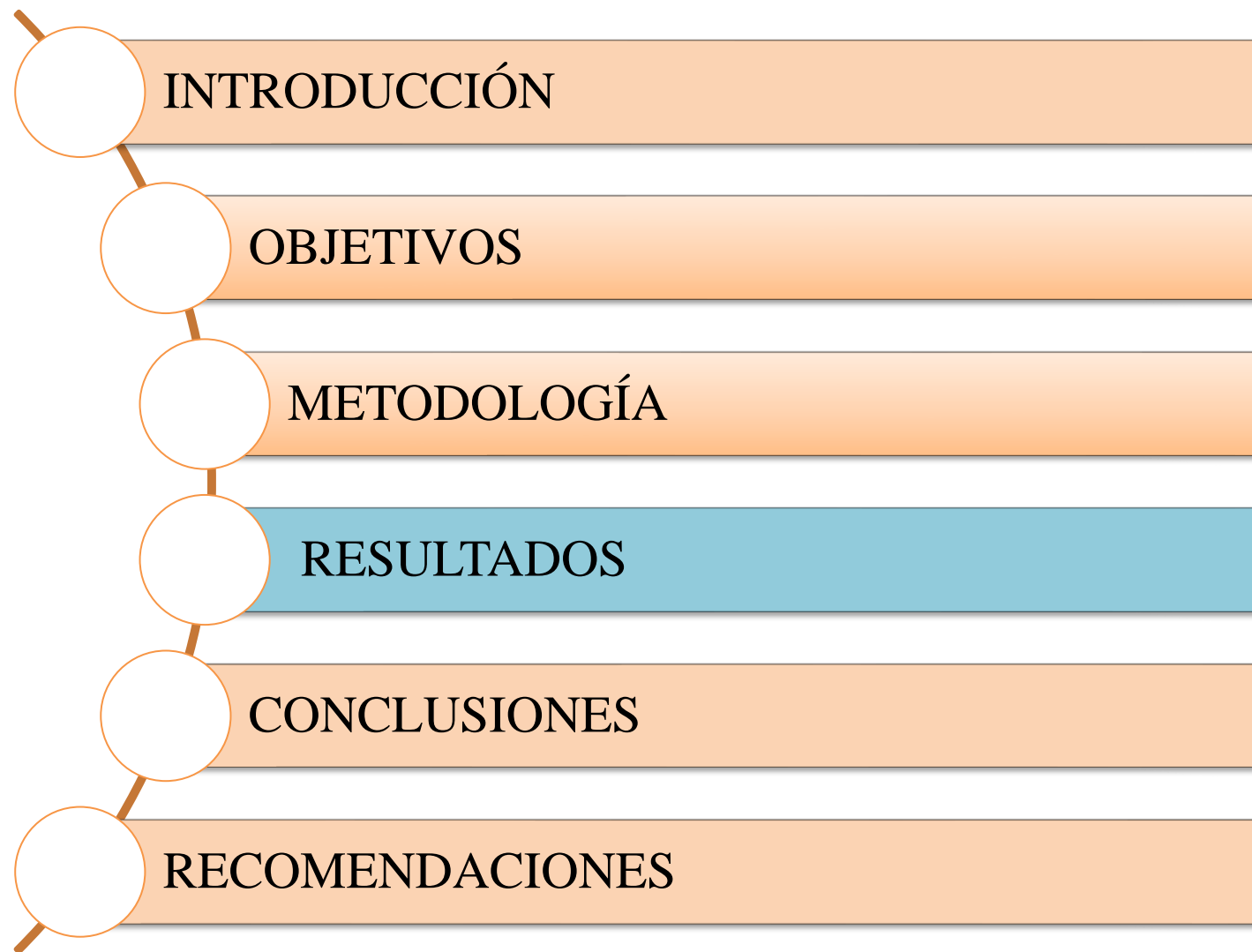


**Chemcraft**



OpenBabel01272119113D

	Image	Abstract	Source	Coord	Image/abs.
<b>C2H6</b>					
6	0.974900000	0.082400000	0.048600000	0.048600000	
6	2.487000000	0.082400000	0.048600000	0.048600000	
1	0.590600000	0.964700000	0.569000000	0.569000000	
1	0.590600000	-0.809400000	0.552500000	0.552500000	
1	0.590600000	0.091900000	-0.975700000	-0.975700000	
1	2.871400000	0.072900000	1.072900000	1.072900000	
1	2.871400000	0.974200000	-0.455300000	-0.455300000	
1	2.871400000	-0.799900000	-0.471800000	-0.471800000	





## Búsqueda de datos internacionales



#	Compuestos
1	Hidrógeno
2	Metano
3	Etano
4	Propano
5	Iso-butano
6	n-butano
7	Iso-pentano
8	n-pentano
9	2,2-dimetilbutano
10	2,3-dimetilbutano

#	Compuestos
11	n-hexano
12	2-metilpentano
13	3-metilpentano
14	n-heptano
15	2,2-dimetilhexano
16	2,3-dimetilhexano
17	Iso-hexano
18	Metilciclopentano
19	Benceno
20	Ciclopentano
21	Ciclohexano



## Generación de estructuras químicas en 2D

#	NOMBRE	Estructura química 2D
1	hidrógeno	H-H
2	metano	CH <sub>4</sub>
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	

#	NOMBRE	Estructura química 2D
13	n-hexano	
14	2-metilhexano	
15	2,2-dimetilhexano	
16	2,3-dimetilhexano	
17	n-heptano	
18	ciclopentano	
19	metilciclopentano	
20	benceno	
21	ciclohexano	



## Procesamiento de propiedades básicas

### Isopentano

#### *Propiedades químicas básicas del isopentano*

<b>Fórmula química</b>	<b>C<sub>5</sub>H<sub>12</sub></b>
Peso molecular	72,1510
Análisis elemental	C, 83.24; H, 16.76



## Generación automática de 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

#	NOMENCLATURA IUPAC
12	3-metilpentano
13	n-hexano
14	2-metilhexano
15	2,2-dimetilhexano
16	2,3-dimetilhexano
17	n-heptano
18	ciclopentano
19	metilciclopentano
20	benceno
21	ciclohexano





## Generación automática del código SMILES

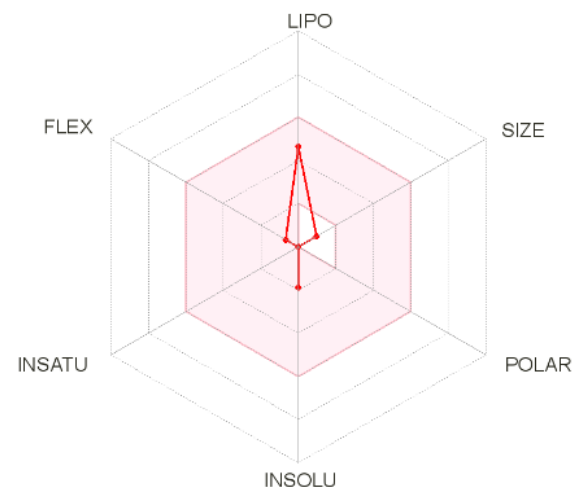
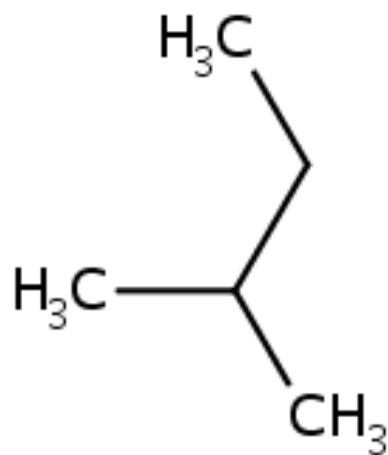
#	NOMBRE	CÓDIGO SMILES
1	hidrógeno	[H][H]
2	metano	C
3	etano	CC
4	propano	CCC
5	isobutano	CC(C)C
6	n-butano	CC(C)C
7	isopentano	CCC(C)C
8	2,2-dimetilbutano	CC(C)(C)CC
9	2,3-dimetilbutano	CC(C)C(C)C
10	n-pentano	CCCCC
11	2-metilpentano	CC(C)CCC

#	NOMBRE	CÓDIGO SMILES
12	3-metilpentano	CCC(C)CC
13	n-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	n-heptano	CCCCCCC
18	ciclopentano	C1CCCC1
19	metilciclopentano	CC1CCCC1
20	benceno	C1=CC=CC=C1
21	ciclohexano	C1CCCCC1

## Procesamiento a través del código SMILES

### Isopentano

*Generalidades acerca del compuesto isopentano*



## Procesamiento a través del código SMILES

### Isopentano

*Propiedades fisicoquímicas para la molécula de isopentano*

Propiedades fisicoquímicas	
Fórmula	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>
Peso molecular	72.15 g/mol
Número de átomos pesados	5
Número de Átomos aromáticos pesados	0
Fracción de carbonos con hibridación sp <sup>3</sup>	1.00
Número de enlaces 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 <sup>2</sup>

## Procesamiento a través del código SMILES

### Isopentano

*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

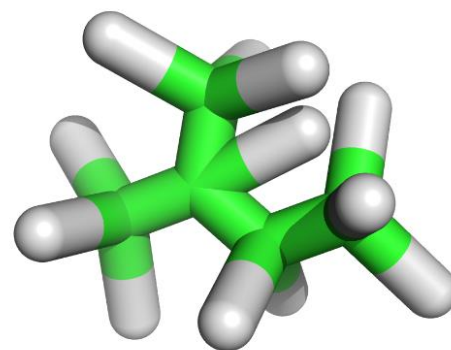
*Solubilidad en agua de la molécula de isopentano*

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

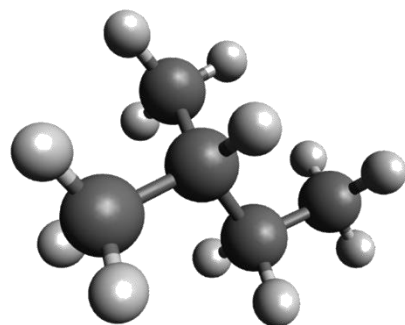
## Elaboración de archivos con coordenadas 3D

### Isopentano

*Estructura química 3D de la molécula de isopentano obtenida a través de "Pymol"*



*Estructura química 3D de la molécula de isopentano obtenida a través de "Chemcraft"*



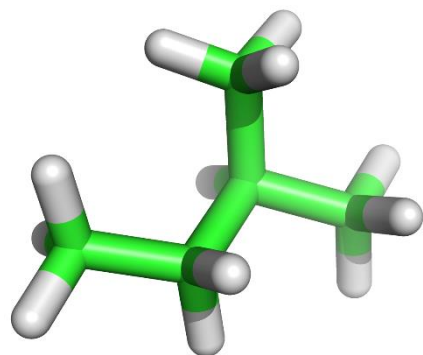
*Coordenadas de la estructura 3D de la molécula de isopentano*

	x	y	z
6	-1,0717	0,2062	0,0000
6	-0,3572	0,6187	0,0000
6	0,3572	0,2062	0,0000
6	1,0717	0,6187	0,0000
6	0,3572	-0,6187	0,0000

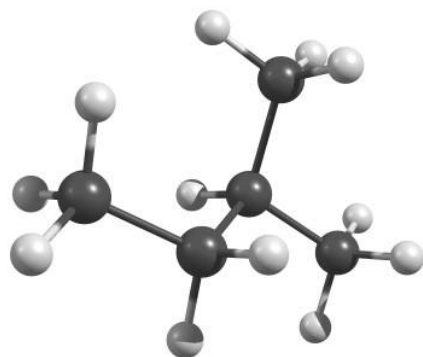
## Elaboración de archivos 3D de las estructuras químicas optimizadas

### Isopentano

*Estructura química 3D optimizada para el isopentano obtenida en "Pymol"*      *Coordenadas de la estructura 3D de la molécula optimizada de isopentano*



*Estructura química 3D optimizada para el isopentano obtenida en "Chemcraft"*



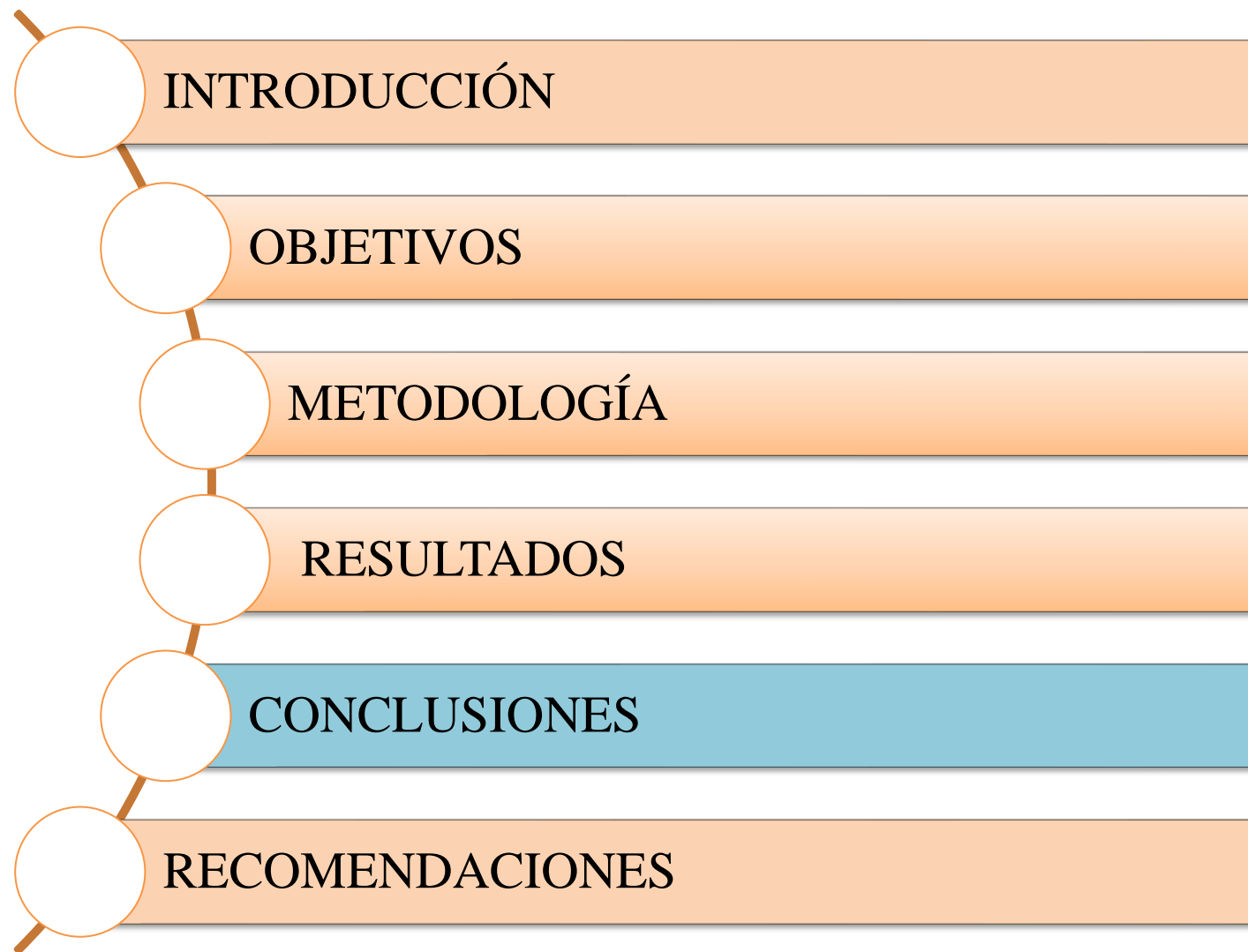
	x	y	z
6	0,8781	-0,1170	0,0672
6	2,3960	-0,0083	0,0387
6	2,9318	0,8178	-1,1436
6	2,4784	2,2773	-1,0873
6	4,4606	0,7520	-1,1727
1	0,5663	-0,7988	0,8652
1	0,4938	-0,5073	-0,8805
1	0,4089	0,8520	0,2603
1	2,8093	-1,0231	-0,0168
1	2,7424	0,4213	0,9867
1	2,5588	0,3786	-2,0775
1	2,7727	2,7485	-0,1434
1	1,3920	2,3611	-1,1866
1	2,9237	2,8538	-1,9055
1	4,8947	1,1819	-0,2634
1	4,8579	1,3035	-2,0315
1	4,8043	-0,2845	-1,2556

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

### Energías de optimización

#	Compuesto	Energía libre del sistema (kJ/mol)	Campo de fuerza	#	Compuesto	Energía libre del sistema (kJ/mol)	Campo de fuerza
1	hidrógeno	1,74E-21	UFF	12	3-metilpentano	15,8191	MMFF94s
2	metano	0,110457	MMFF94s	13	n-hexano	-22,9204	MMFF94s
3	etano	-19,8218	MMFF94s	14	2-metilhexano	-0,107135	MMFF94s
4	propano	-20,504	MMFF94s	15	2,2-dimetilhexano	41,409	MMFF94s
5	isobutano	-1,99924	MMFF94s	16	2,3-dimetilhexano	42,841	MMFF94s
6	n-butano	-21,2521	MMFF94s	17	n-heptano	-23,7798	MMFF94s
7	isopentano	1,38367	MMFF94s	18	ciclopentano	6,48011	MMFF94s
8	2,2-dimetilbutano	42,8532	MMFF94s	19	metilciclopentano	27,907	MMFF94s
9	2,3-dimetilbutano	27,7672	MMFF94s	20	benceno	67,9391	MMFF94s
10	n-pentano	-22,0718	MMFF94s	21	ciclohexano	-14,909	MMFF94s
11	2-metilpentano	0,77389	MMFF94s		PROMEDIO	6.09	





- Mediante la búsqueda bibliográfica se obtuvo el listado de compuesto químicos presentes en la corrientes de entrada 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 de 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**, 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.



- **Caracterizar las corrientes de entrada y salida al proceso de isomerización catalítica** en una industria nacional, para poder comparar con datos obtenidos internacionalmente y así poder tener un punto de vista local.
- **Buscar nuevos programas** que sean usados para este tipo de análisis, con el fin de corroborar los resultados obtenidos.
- **Guardar los archivos generados en el programa Chemdraw en el formato adecuado** para poder ejecutarlos en los programas graficadores de estructuras químicas en 3D como por ejemplo Pymol y Chemcraft.

## DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE ENERGÍA Y MECÁNICA

### CARRERA DE PETROQUÍMICA

**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**

**AUTORES: VACA PÉREZ, JUAN PABLO  
YUGCHA CASA, EDWIN JAVIER**

**DIRECTOR: ING. FABIÁN MAURICIO SANTANA ROMO, PhD.**

