



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA EN PETROQUÍMICA

**TRABAJO DE TITULACIÓN PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE
PETROQUÍMICO**

**“ESTUDIO APLICATIVO Y PREDICTIVO DE LOS COMPONENTES DEL DIESEL USANDO LA
TÉCNICA ESPECTROSCÓPICA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR (RMN).”**

AUTORA:

CONDOLO SUAREZ, KARINA ELIZABETH

TUTOR: ING. SANTANA ROMO, FABIÁN MAURICIO PHD.



CONTENIDO

- INTRODUCCIÓN
- OBJETIVOS
- METODOLOGÍA EXPERIMENTAL
- RESULTADOS
- CONCLUSIONES
- RECOMENDACIONES

CONTENIDO

- INTRODUCCIÓN**
- OBJETIVOS
- METODOLOGÍA EXPERIMENTAL
- RESULTADOS
- CONCLUSIONES
- RECOMENDACIONES



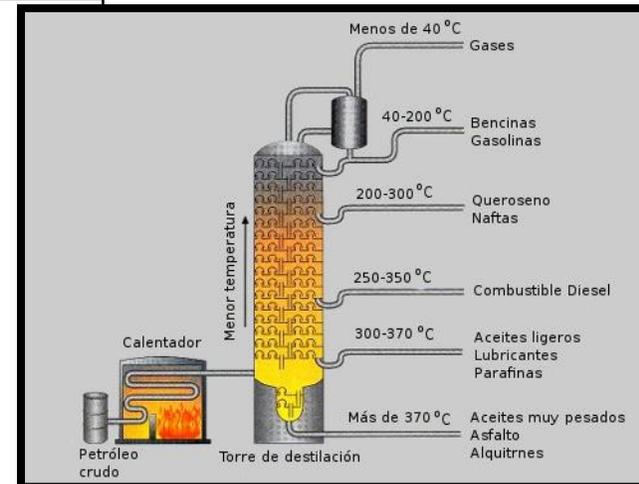
Petróleo

- * Líquido viscoso.
- * Se encuentra en yacimientos.
- * Mezcla de hidrocarburos y otros componentes.



Refinerías

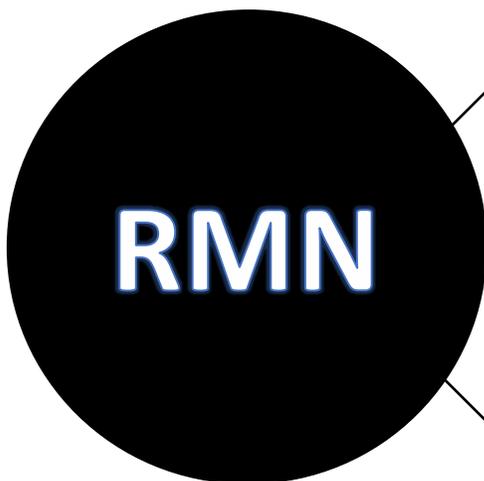
- * Conjunto de operaciones unitarias.
- * Producción continua.





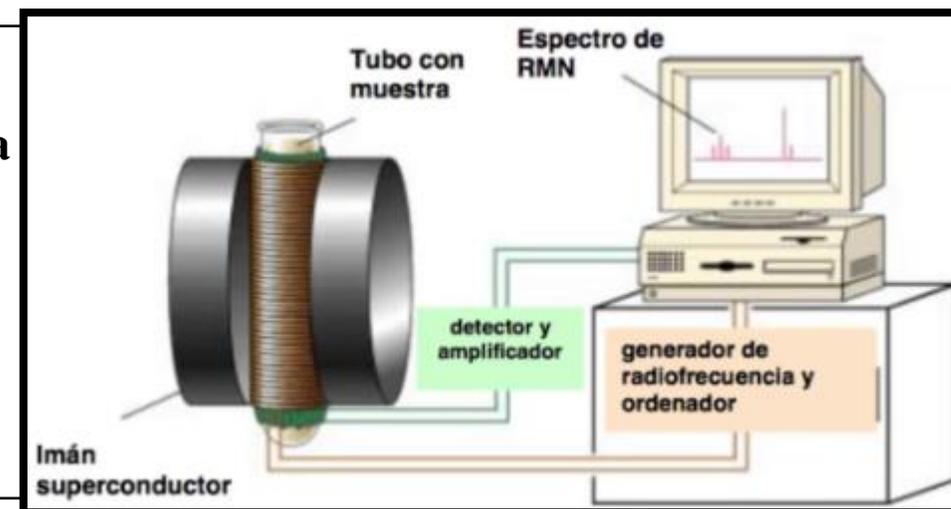
Diésel

- * Combustible líquido aceitoso.
- * Existe el tipo A-B y C.



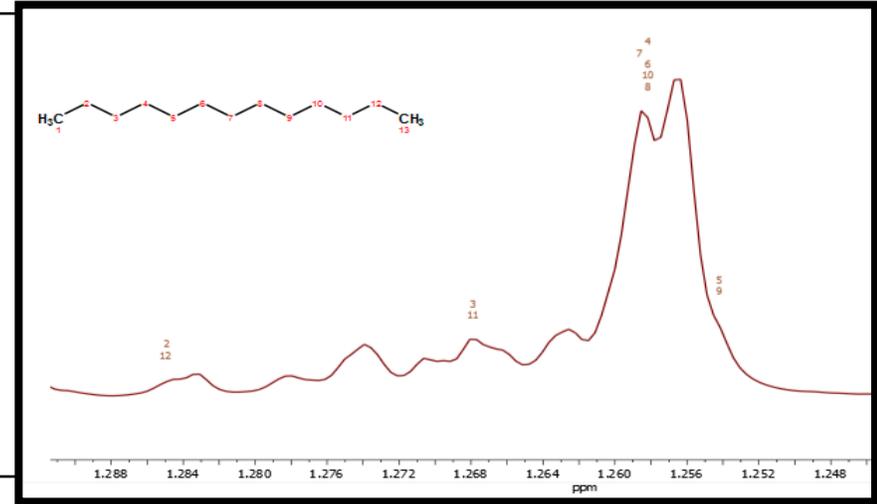
Espectroscopía Resonancia Magnética Nuclear (RMN)

- * Método químico analítico.
- * Detectar tipos de átomos presentes en una molécula.



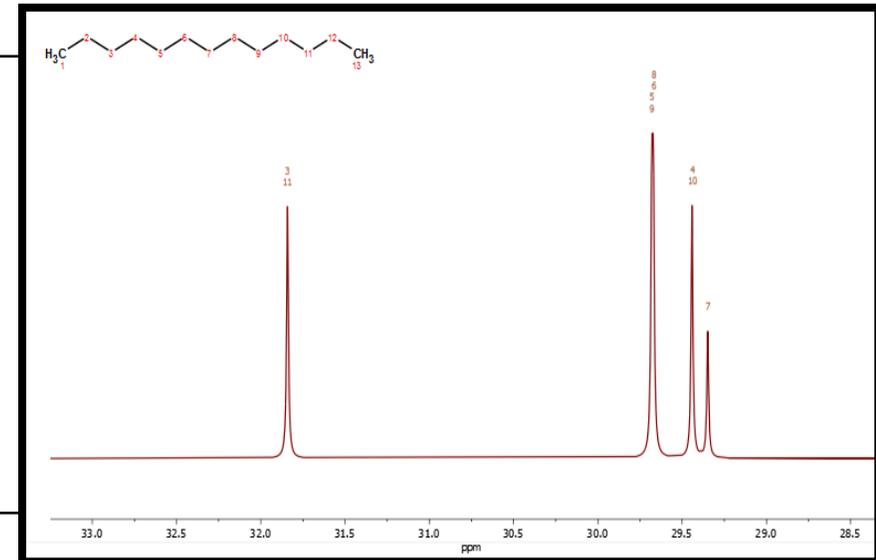
¹H-RMN

Espectro ¹H-RMN



¹³C-RMN

Espectro ¹³C-RMN

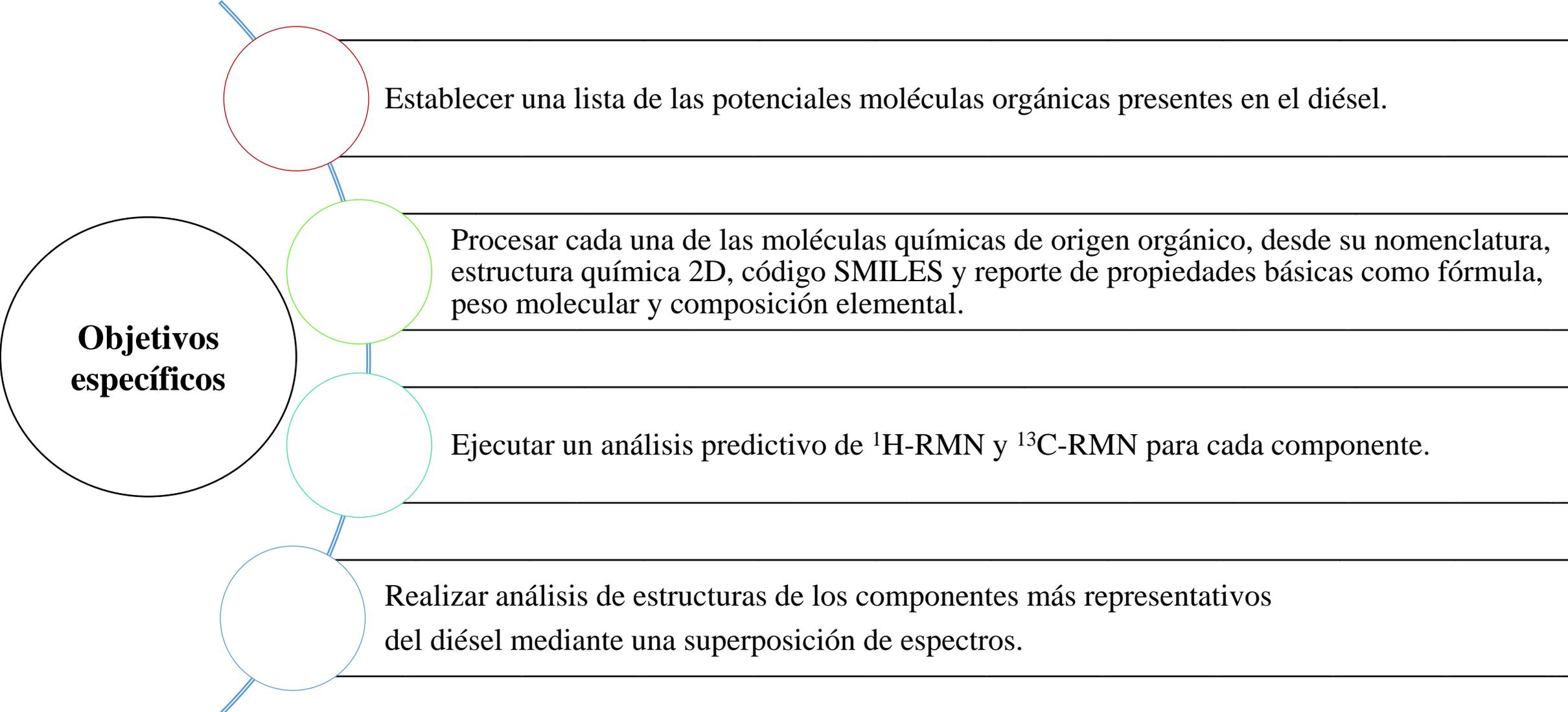


CONTENIDO

- INTRODUCCIÓN
- OBJETIVOS**
- METODOLOGÍA EXPERIMENTAL
- RESULTADOS
- CONCLUSIONES
- RECOMENDACIONES

Objetivo General

“Determinar computacionalmente el análisis estructural mediante espectroscopía RMN de los componentes del diésel.”



**Objetivos
específicos**

Establecer una lista de las potenciales moléculas orgánicas presentes en el diésel.

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.

Ejecutar un análisis predictivo de ^1H -RMN y ^{13}C -RMN para cada componente.

Realizar análisis de estructuras de los componentes más representativos del diésel mediante una superposición de espectros.

CONTENIDO

- INTRODUCCIÓN
- OBJETIVOS
- METODOLOGÍA EXPERIMENTAL**
- RESULTADOS
- CONCLUSIONES
- RECOMENDACIONES

- Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el diésel.



Tabla 1.

Componentes del diésel tipo n-alcános.

Componentes	Abreviatura	Composición [ug/g]
n-decanos	C ₁₀	12115
n-undecano	C ₁₁	11271
n-dodecano	C ₁₂	17149
n-tridecano	C ₁₃	28834
n-tetradecano	C ₁₄	25604
n-pentadecano	C ₁₅	27660
n-hexadecano	C ₁₆	23965
n-heptadecano	C ₁₇	26082
n-octadecano	C ₁₈	8727
n-nonadecano	C ₁₉	4988
n-eicosano	C ₂₀	2193
n-heneicosano	C ₂₁	1092

Nota. La tabla describe la composición y la abreviación de los componentes orgánicos del diésel (Liang et al., 2005).

Tabla 2.

Componentes del diésel tipo Alcanos ramificados.

Componentes	Abreviatura	Composición [ug/g]
Norfarnesano	C ₁₄	11469
Farnesan	C ₁₅	9719
Norpristan	C ₁₈	7992
Pristina	C ₁₉	5871
Fitan	C ₂₀	4775

Nota. La tabla describe la composición y la abreviación de los componentes orgánicos del diésel (Liang et al., 2005).

- Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el diésel.

Tabla 3.

Componentes del diésel tipo Cicloalcanos saturados.

Componentes	Abreviatura	Composición [ug/g]
Heptilciclohexano	C ₁₃	13144
Octilciclohexano	C ₁₄	11467
Nonilciclohexano	C ₁₅	10582
Decilciclohexano	C ₁₆	9135
Undecilciclohexano	C ₁₇	6207
Dodecilciclohexano	C ₁₈	2073
Tridecilciclohexano	C ₁₉	165
Tetradecilciclohexano	C ₂₀	25

Nota. La tabla describe la composición y la abreviación de los componentes orgánicos del diésel (Liang et al., 2005).

Tabla 4.

Componentes del diésel tipo PAHs.

Componentes	Abreviatura	Composición [ug/g]
Naftalina	Nap	753
Acenaftileno	Acy	159
Acenafteno	Ace	85
Fluoreno	Flu	100
Fenantreno	Phe	247
Antraceno	Ant	7.5
Pirineo	Pye	5
Benzo (ghi) perileno	Bgp	Nd

Nota. La tabla describe la composición y la abreviación de los componentes orgánicos del diésel (Liang et al., 2005).

- Generación de una lista de moléculas orgánicas presentes en el diésel.

Tabla 5.

Componentes del diésel tipo HAPs alquilados

Componentes	Abreviatura	Composición [ug/g]
1-metilnaftaleno	1-MN	585
2-metilnaftaleno	2-MN	2291
1,2-dimetilnaftaleno	1,2-DMN	373
1,3-dimetilnaftaleno	-	Nd
1,4-dimetilnaftaleno	-	1540
1,5-dimetilnaftaleno	-	Nd
1,6-dimetilnaftaleno	-	1807
1,7-dimetilnaftaleno	-	2548
1,8-dimetilnaftaleno	-	Nd
2,3-dimetilnaftaleno	-	Nd
2,6-dimetilnaftaleno	-	1224
2,7-dimetilnaftaleno	-	1837
Metiletilnaftaleno	-	Nd
Trimetilnaftaleno	TMN	12327
1-metilfenantreno	1-MPh	242
2-metilfenantreno	2-MPh	528

Nota. La tabla describe la composición y abreviatura de los distintos componentes orgánicos del diésel (Liang et al., 2005).

Tabla 6.

Componentes del diésel tipo Alquilbencenos.

Componentes	Abreviatura	Composición [ug/g]
Tolueno	-	1377
C₂-bencenos	-	12932
C₃-bencenos	-	10003
C₄-bencenos	-	9724
C₅-bencenos	-	5538
C₆-bencenos	-	5222

Nota. La tabla describe la composición y abreviatura de los distintos componentes orgánicos del diésel (Liang et al., 2005).

- Generación de una lista de moléculas representativas en el diésel.

Tabla 7.

Componentes orgánicos representativos del diésel.

Componentes	Abreviatura	Composición [ug/g]
n-tridecano	C ₁₃	28834
n-tetradecano	C ₁₄	25604
n-pentadecano	C ₁₅	27660
n-hexadecano	C ₁₆	23965
n-heptadecano	C ₁₇	26082
n-decanos		12115
n-undecano	C ₁₁	11271
n-dodecano	C ₁₂	17149
Norfarnesano	C ₁₄	11469
Heptilciclohexano	C ₁₃	13144

Nota. La tabla describe la composición y la abreviación de los componentes orgánicos del diésel tomado de (Liang et al., 2005).

Tabla 8.

Componentes orgánicos representativos del diésel.

Componentes	Abreviatura	Composición [ug/g]
Octilciclohexano	C ₁₄	11467
Nonilciclohexano	C ₁₅	10582
Trimetilnaftaleno	TMN	12327
C2-bencenos	-	12932
C3-bencenos	-	10003
Bifenilo	-	437
Acenaftileno	Acy	159
Antraceno	Ant	7.5
Benzo (ghi) perileno	Bgp	0

Nota. La tabla describe la composición y la abreviación de los componentes orgánicos del diésel tomado de (Liang et al., 2005).

- Proceso y obtención de propiedades básica, estructuras 2D código *SMILES*, nomenclatura *IUPAC* de cada molécula orgánica del diésel.

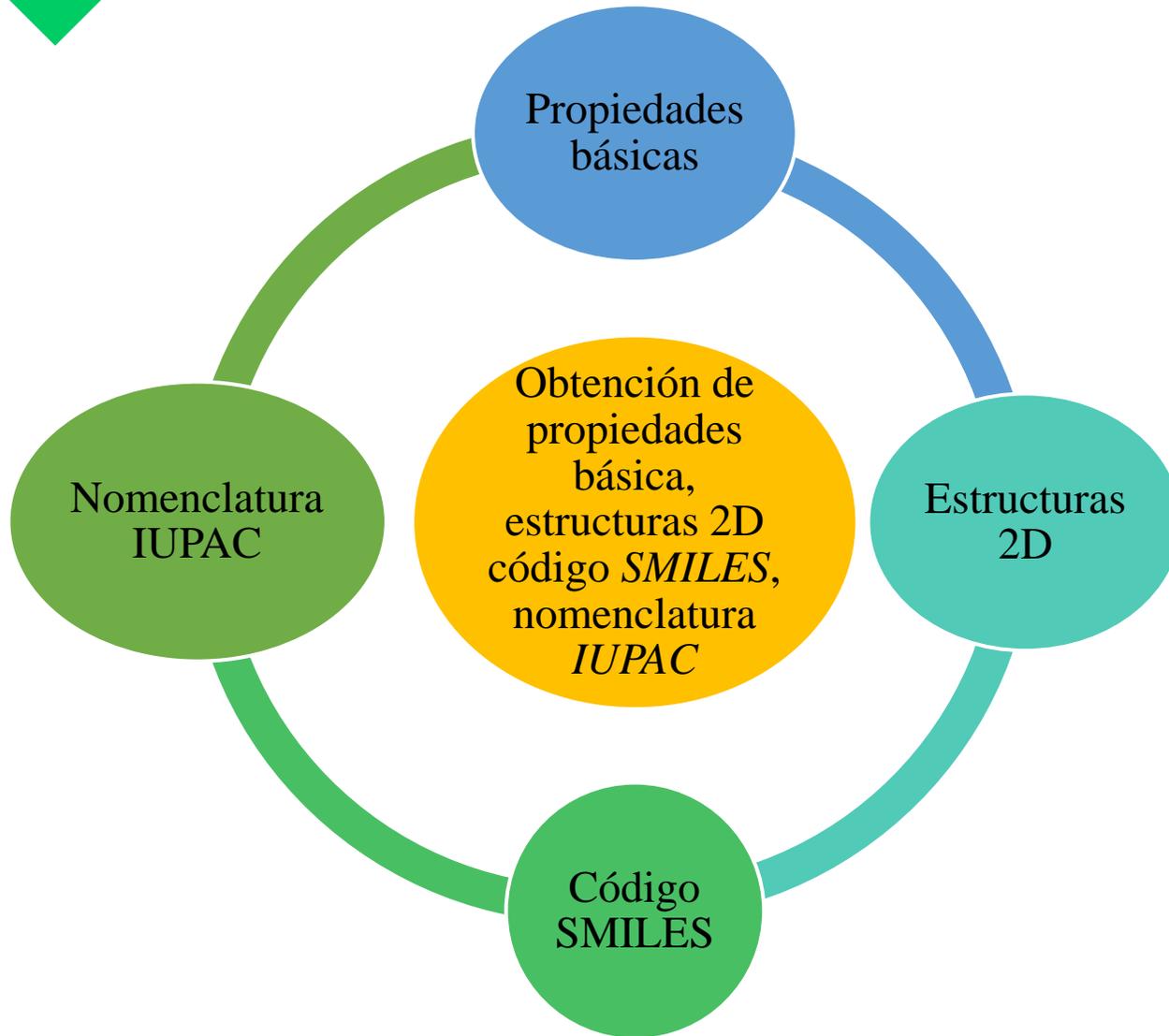
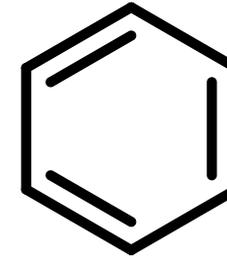


Figura 1.

Estructura 2D del benceno.



Nota. Graficador químico computacional *ChemDraw 20.0*.

Tabla 9.

Propiedades básicas del benceno.

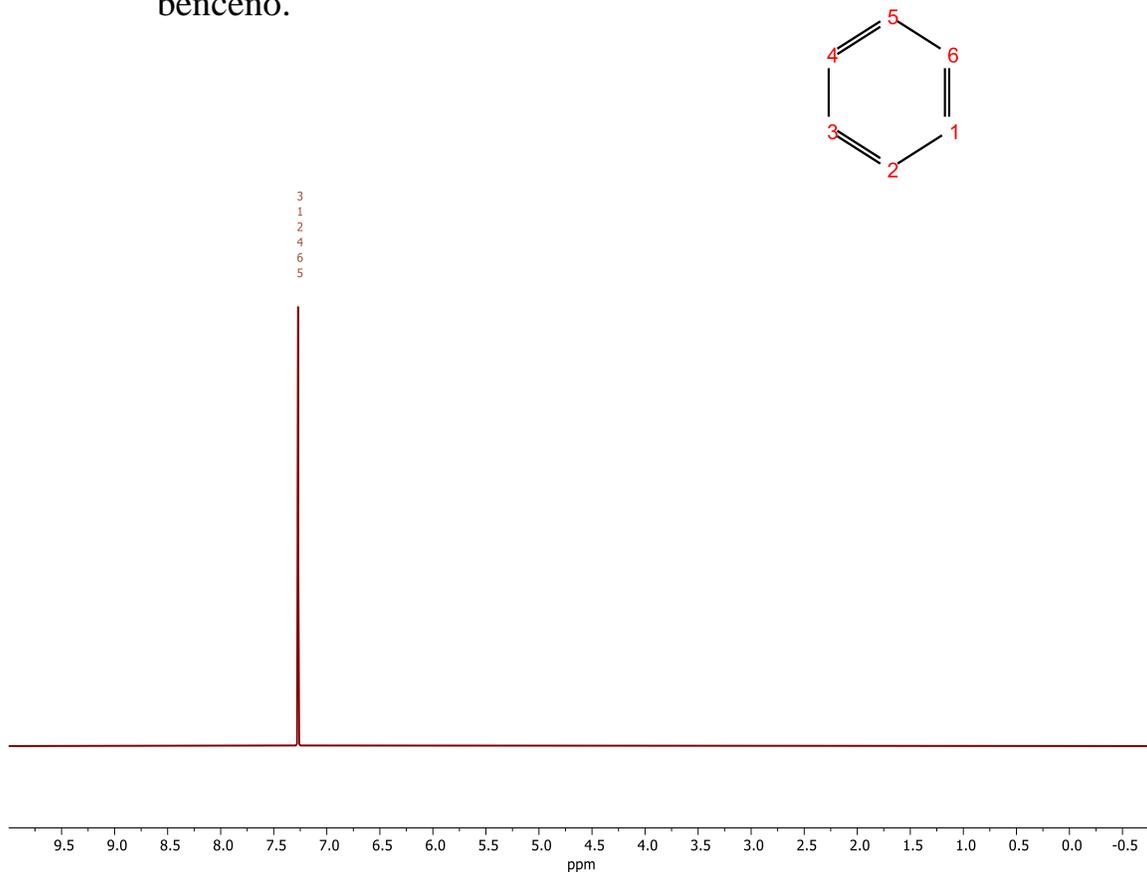
Propiedades básicas	
Formula química	C_6H_6
Peso molecular	78,1140
Análisis elemental	C,92.26; H,7.74

Nota. Graficador químico computacional *ChemDraw 20.0*.

- Obtención de los espectros de RMN ^1H y ^{13}C de las moléculas orgánicas del diésel a través del programa computacional predictivo *MestReNova*.

Figura 2.

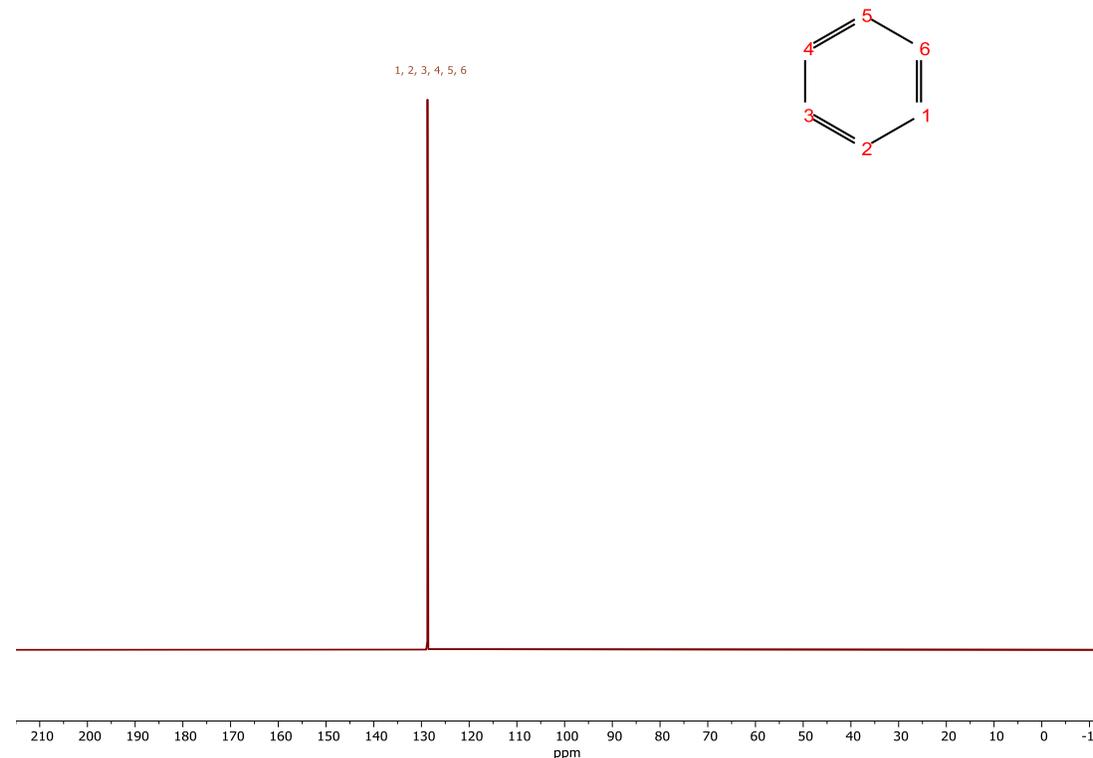
Ventana principal con el espectro ^1H de la molécula benceno.



Nota. Programa de simulación computacional predictivo *MestReNova*.

Figura 3.

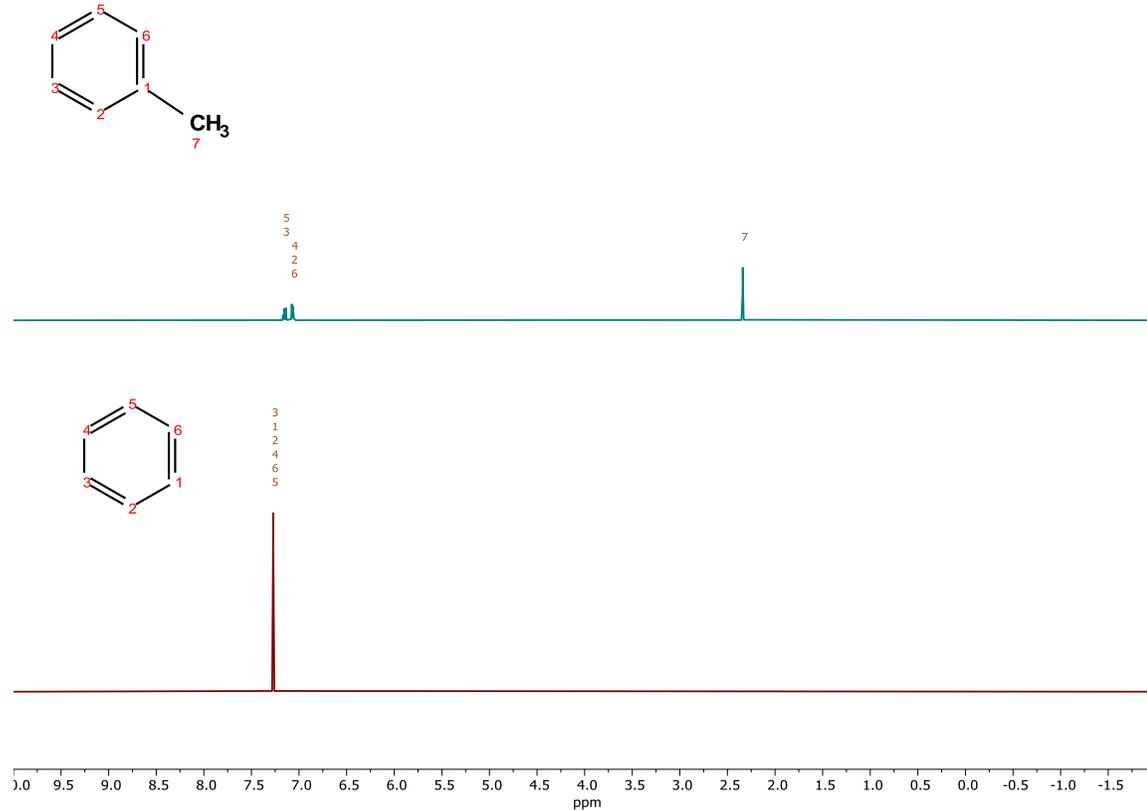
Ventana principal con el espectro ^{13}C de la molécula benceno.



Nota. Programa de simulación computacional predictivo *MestReNova*.

Figura 8.

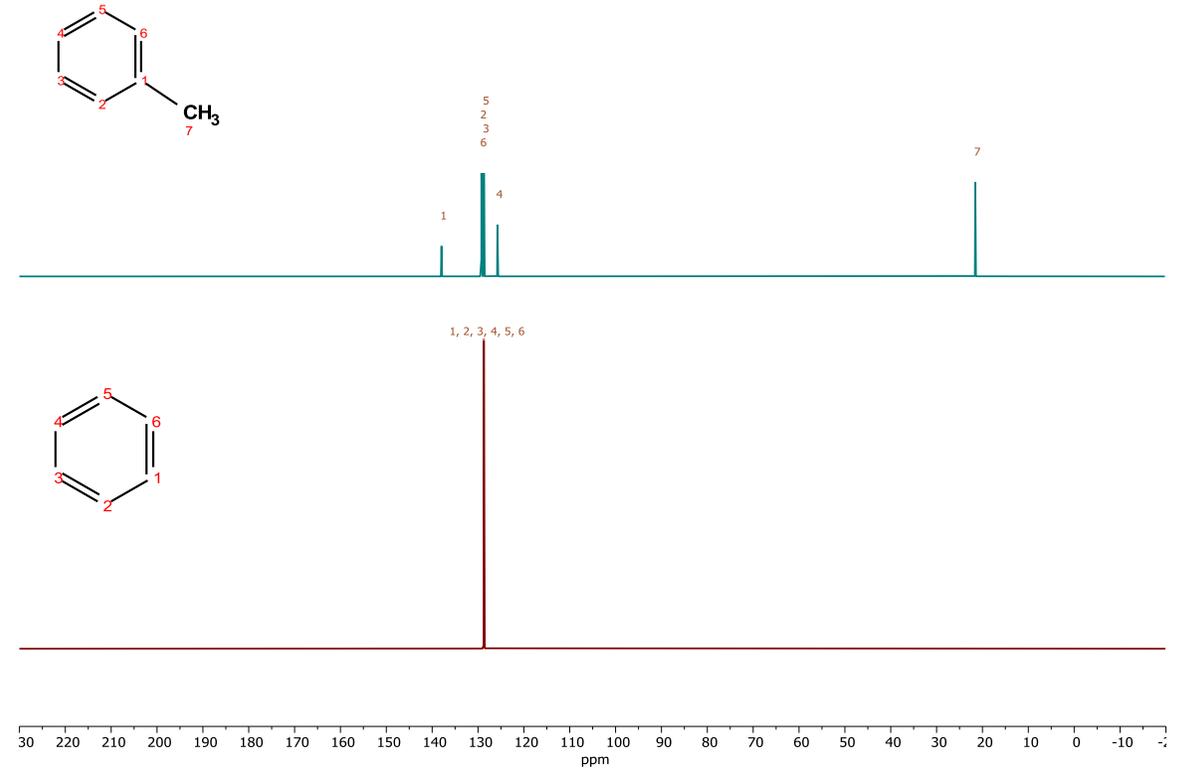
Superposición de los espectros ^1H de dos moléculas.



Nota. Programa de simulación computacional predictivo *MestReNova*.

Figura 9.

Superposición de los espectros ^{13}C de dos moléculas.



Nota. Programa de simulación computacional predictivo *MestReNova*.



- INTRODUCCIÓN
- OBJETIVOS
- METODOLOGÍA EXPERIMENTAL
- RESULTADOS**
- CONCLUSIONES
- RECOMENDACIONES

N-TRIDECANO

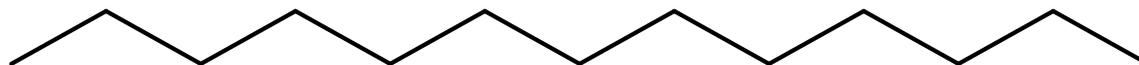


Tabla 10.

Propiedades básicas del n-tridecano.

Propiedades básicas	
Formula química	$C_{13}H_{28}$
Peso molecular	184,3670
Análisis elemental	C,84.69; H,15.31

Nota. Graficador químico computacional

ChemDraw 20.0.

Tabla 11.

Código SMILES del n-tridecano.

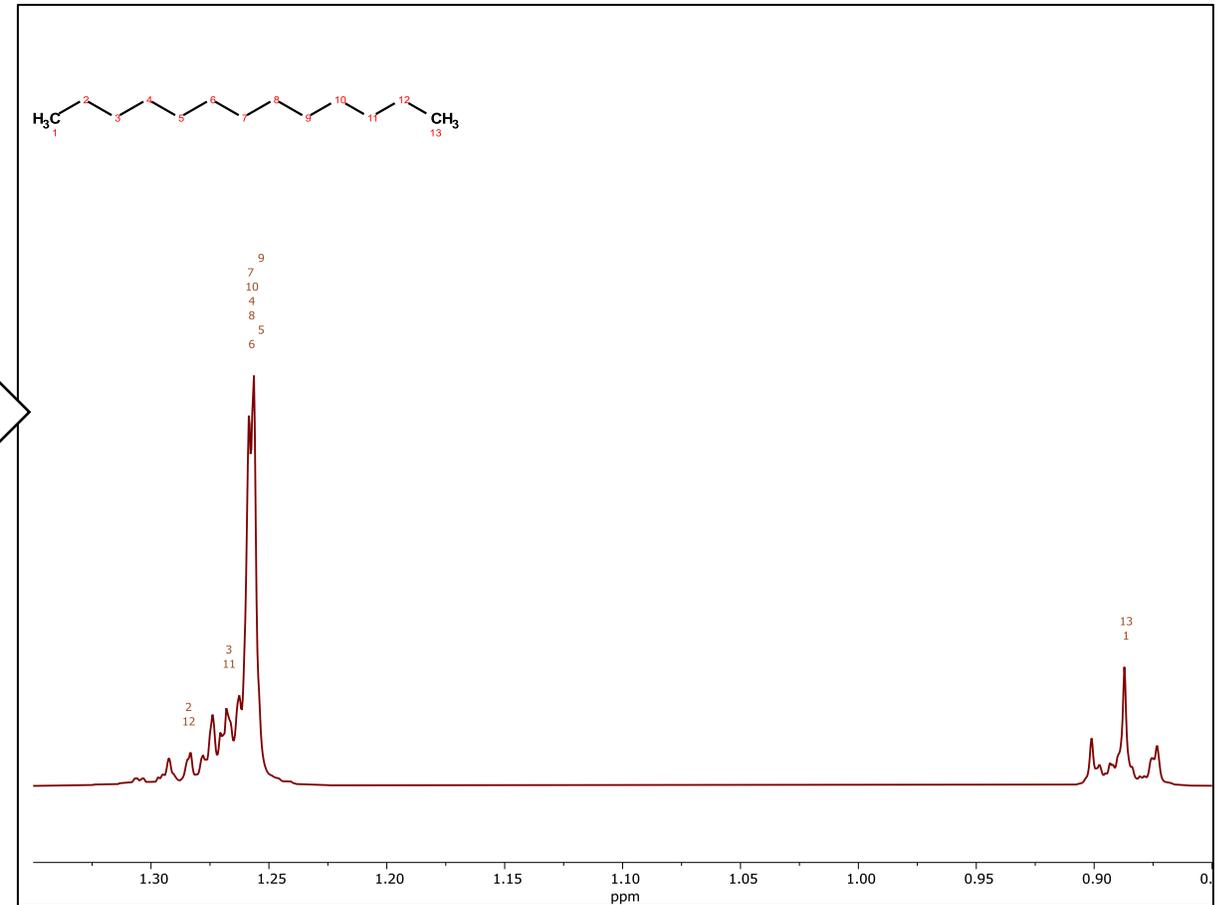
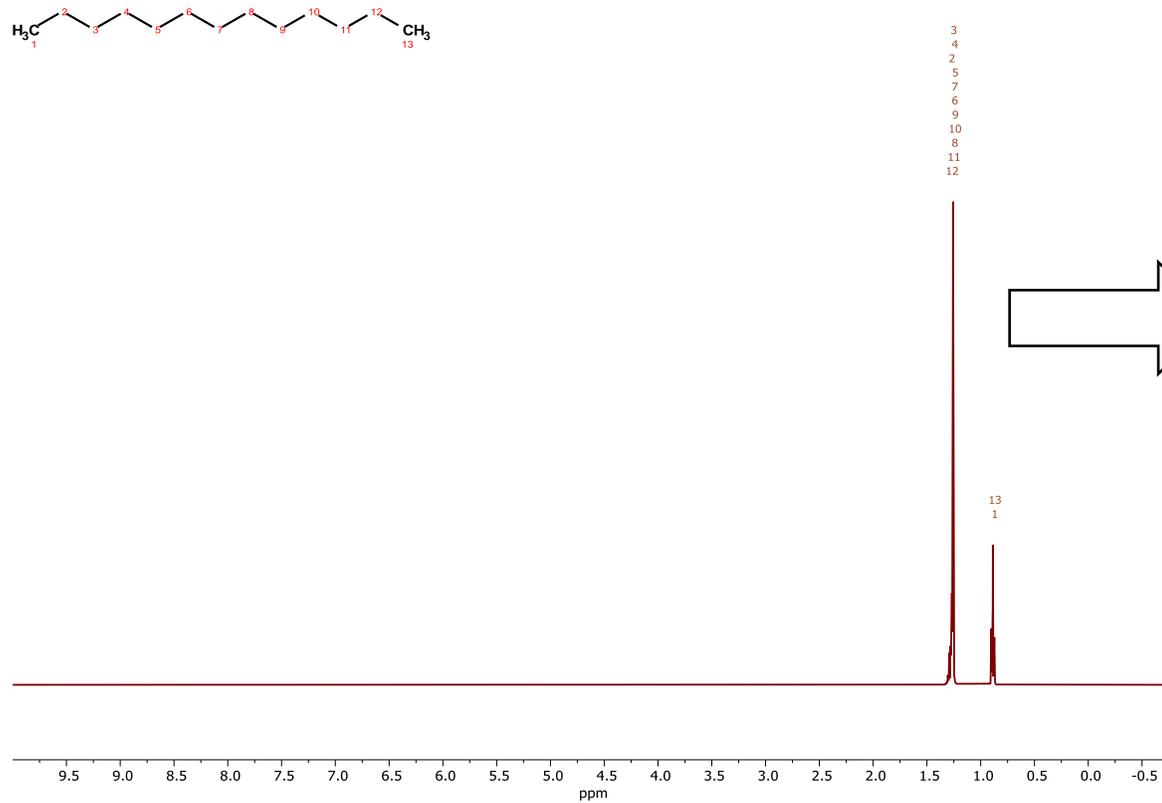
Número de molécula	Código SMILES
1	CCCCCCCCCCCCC

Nota. Graficador químico computacional

ChemDraw 20.0.

Figura 10.

Predicción de espectro RMN 1H del n-tridecano.

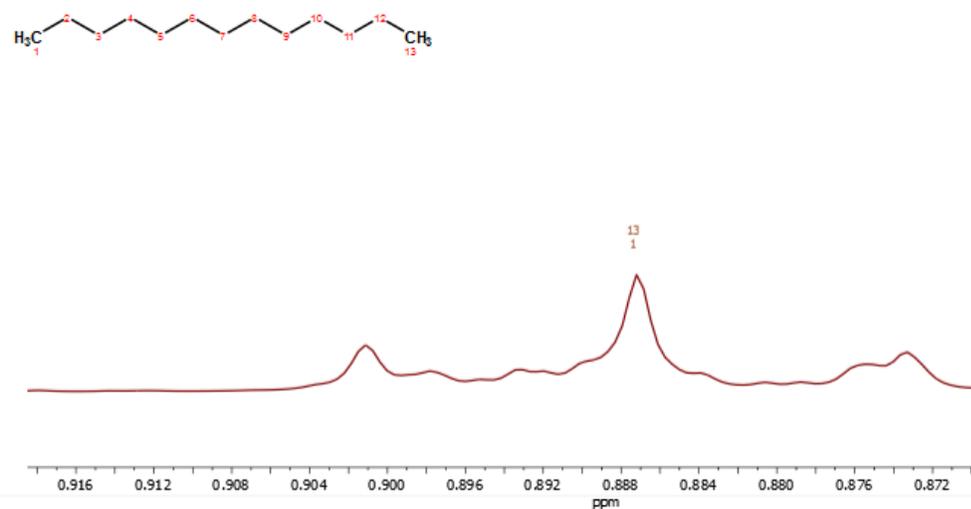
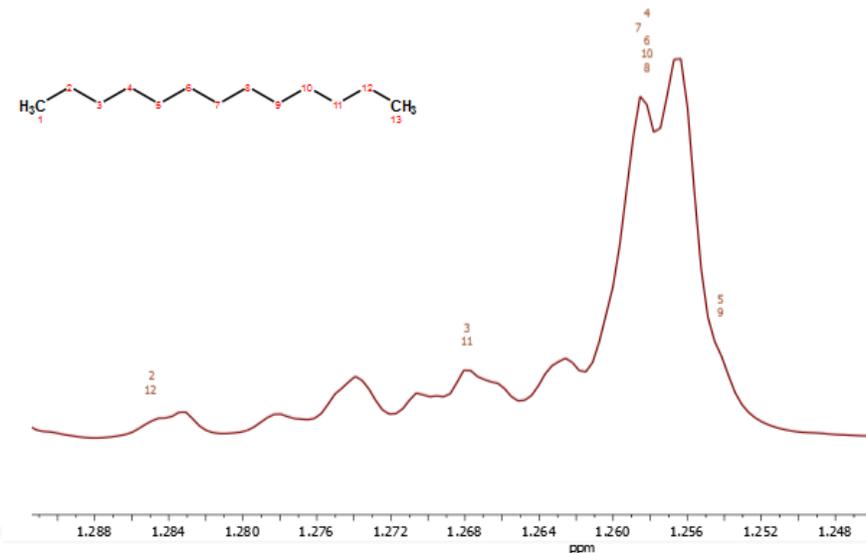


Nota. Programa de simulación computacional predictivo
MestReNova.

Tabla 11.

Tabla de desplazamiento químico y multiplicidad del *n*-tridecano del espectro RMN ¹H.

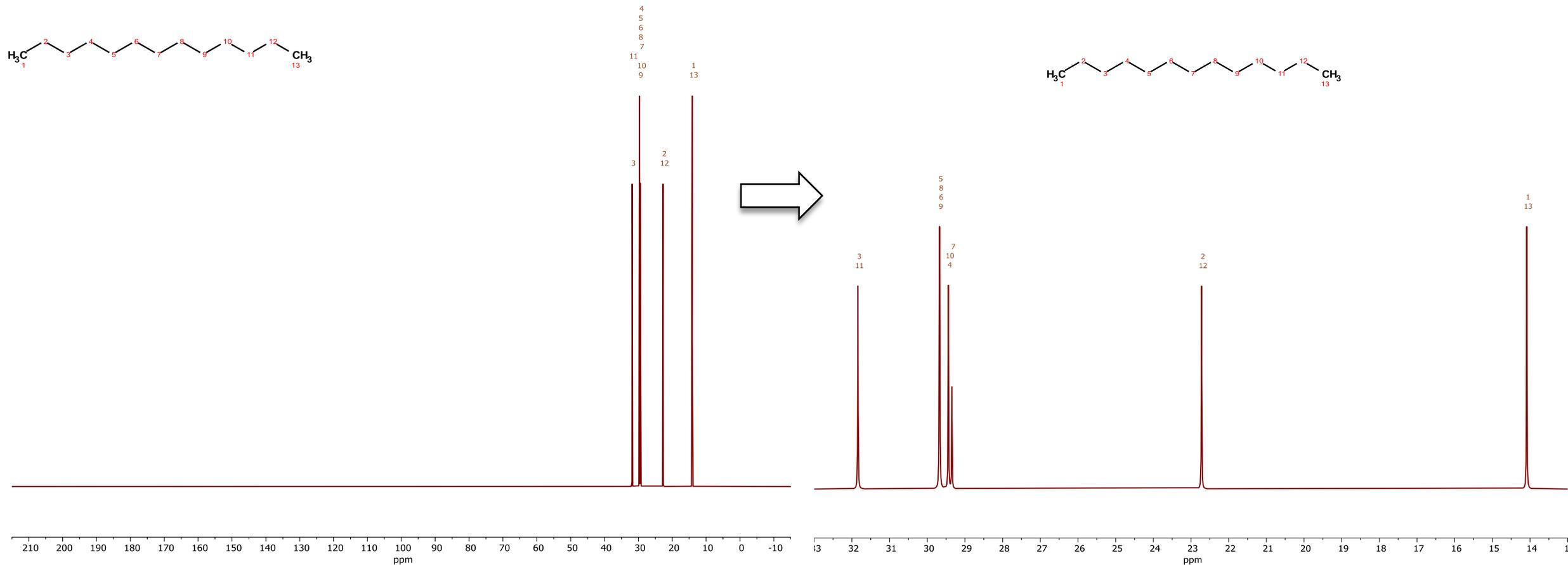
Número de carbono	Protones	Identificación	Desplazamiento químico	Multiplicidad
C1	3	CH ₃	0,94 – 0,85	
C2	2	CH ₂		
C3	2	CH ₂		
C4	2	CH ₂		
C5	2	CH ₂		
C6	2	CH ₂	1,34-1,22	multiplete
C7	2	CH ₂		
C8	2	CH ₂		
C9	2	CH ₂		
C10	2	CH ₂		
C11	2	CH ₂		
C12	2	CH ₂		
C13	3	CH ₃	0,94 – 0,85	



Nota. Programa de simulación computacional predictivo *MestReNova* : RMN ¹H (500 MHz, Cloroformo-d) δ 1,34 – 1,22 (m, 22H), 0,94 – 0,85 (m, 6H).

Figura 11.

Predicción de espectro RMN ^{13}C del *n*-tridecano.

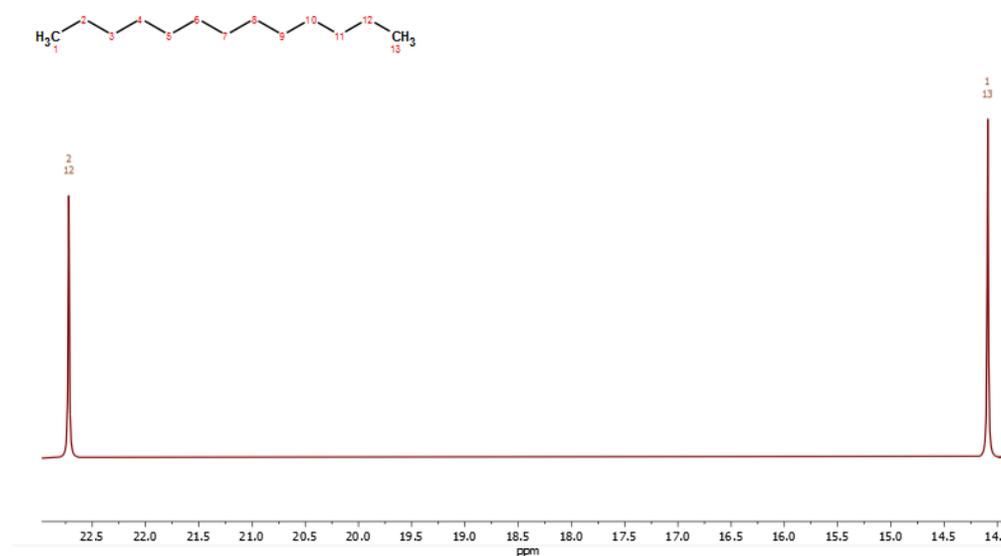
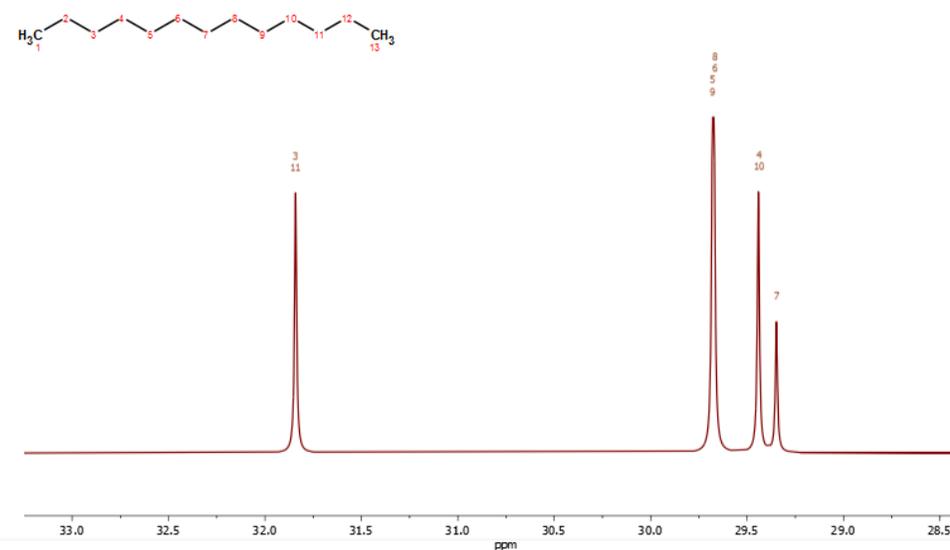


Nota. Programa de simulación computacional predictivo
MestReNova.

Tabla 12.

Tabla de desplazamiento químico y multiplicidad del n-tridecano del espectro RMN ¹³C.

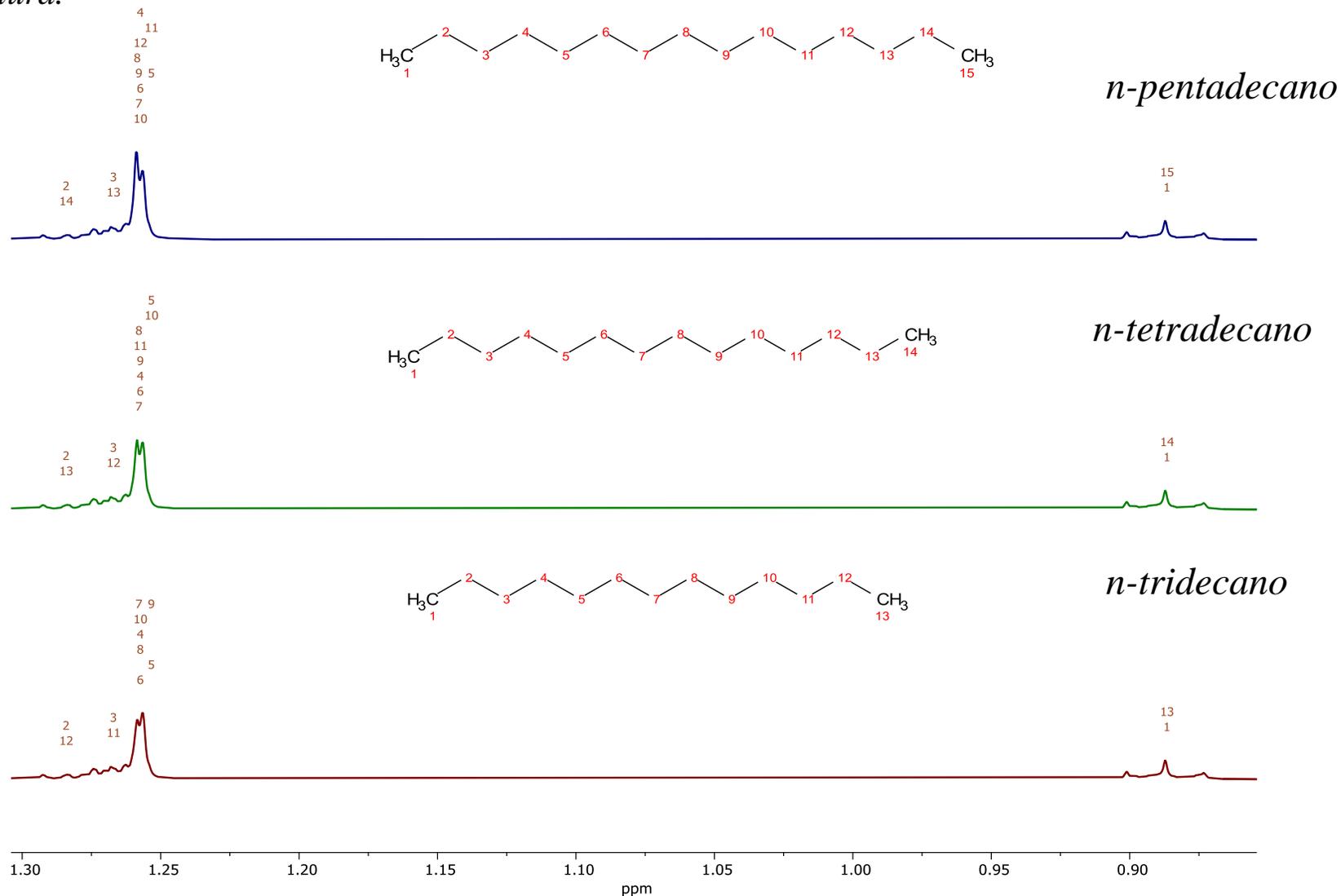
Número de carbono	Desplazamiento químico	Multiplicidad
C1	14,089	singlete
C2	22,720	
C3	31,838	
C4	29,438	
C5	29,677	
C6	29,667	
C7	29,346	
C8	29,667	
C9	29,677	
C10	29,438	
C11	31,838	
C12	22,720	
C13	14,107	



Nota. Programa de simulación computacional predictivo *MestReNova*. ¹³C RMN (125 MHz, Common RMN Solventes)

Figura 12.

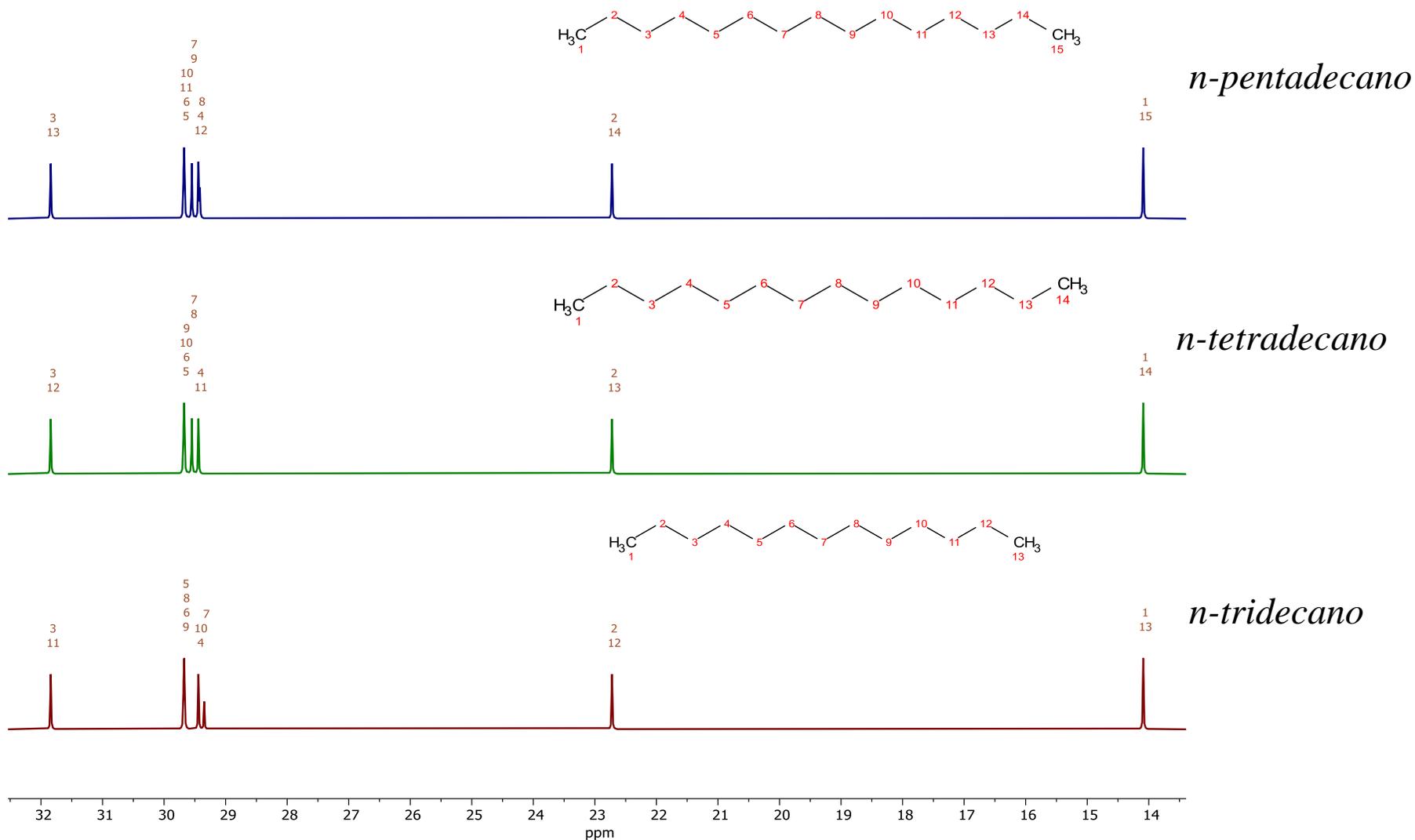
Superposición de los espectros ^1H del *n*-tridecano, *n*-tetradecano y *n*-pentadecano por similitud en su estructura.



Nota. Programa de simulación computacional predictivo *MestReNova*.

Figura 13.

Superposición de los espectros ^{13}C del *n*-tridecano, *n*-tetradecano y *n*-pentadecano por similitud en su estructura.



Nota. Programa de simulación computacional predictivo *MestReNova*.



Se indago a través de plataformas virtuales de conocimiento científico, información acerca de los componentes del **diésel**, verificando así la existencia de 86 componentes presentes en el diésel, en donde el componente con mayor composición es el ***n*-tridecano**; además existe una gran variedad de componentes cuya **composición no está determinada**.

Los resultados obtenidos a través de la utilización del programa graficador computacional, indica que el componente representativo con mayor peso molecular es el **Benzo (ghi) perileno** y el componente con menor peso molecular es el **C2- benceno**.

Los resultados indican **similitud en las estructuras 2D** obtenidas a través del programa graficador computacional, en donde el n-tridecano, n-tetradecano y n-pentadecano tienen diferencia en los **metilenos** intermedios; en el nonilciclohexano, octilciclohexano y heptilciclohexano tienen diferencia en los **metilos** que conforman la estructura; por último en el antraceno, Benzo (ghi) perileno y acenaftileno tienen diferencia en la cantidad de **bencenos** presentes en la estructura.

Al ejecutar el análisis predictivo del ^1H -RMN, se determinó que en las estructuras lineales el rango del desplazamiento químico es aproximadamente de **1.5 ppm hasta 0.5 ppm**, y en las estructuras que están formadas por bencenos tienen un rango de **8.5 ppm a 7.5 ppm**. El análisis predictivo del ^1H -RMN, verifica que los carbonos que cubren todos sus sustituyentes no se encuentran en el espectro, ya que son considerados **carbonos cuaternarios**.

Al ejecutar el análisis predictivo del ^{13}C -RMN, se determinó que en las estructuras lineales el rango del desplazamiento químico es aproximadamente de **40 ppm hasta 11 ppm** y en las estructuras que están formadas por bencenos tienen un rango de **135 ppm a 120 ppm**. El análisis predictivo del ^{13}C -RMN considera todos los carbonos de la estructura.

Basado en los resultados obtenidos del análisis de superposición, los espectros de ^1H -RMN y ^{13}C -RMN tienen una **similitud en su desplazamiento químico y en la multiplicidad**; debido a que comparten un mismo ambiente químico, por ende, la señal detectada por el equipo de RMN es la misma.



Al generar el peso molecular de cada estructura a través del programa graficador computacional es necesario colocar **4 decimales** para que la validez de los datos que este programa proporciona sea confiable.

Al generar los espectros en el programa computacional predictivo, es necesario **guardar de manera particular cada estructura**, porque al finalizar el trabajo este no guarda las hojas creadas en el mismo y no se volverán a mostrar.

Se recomienda utilizar **máximo tres componentes** para realizar la superposición de las estructuras, el programa al tener un solo formato de hoja, hace que los espectros se vean más pequeño cada vez y no se logra visualizar los resultados

Se recomienda **copiar la estructura directamente del programa** graficador computacional, en el programa computacional predictivo, para que permita graficar el espectro, caso contrario no se detectara la estructura.

GRACIAS



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA EN PETROQUÍMICA

**TRABAJO DE TITULACIÓN PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE
PETROQUÍMICO**

**“ESTUDIO APLICATIVO Y PREDICTIVO DE LOS COMPONENTES DEL DIESEL USANDO LA
TÉCNICA ESPECTROSCÓPICA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR (RMN).”**

AUTORA:

CONDOLO SUAREZ, KARINA ELIZABETH

TUTOR: ING. SANTANA ROMO, FABIÁN MAURICIO PHD.

