

Análisis de la lipófilia de compuestos en el flujo de entrada al proceso de alquilación en refinería mediante química computacional

Analysis of the lipophilicity of compounds in the refinery alkylation process upstream using computational chemistry

- ¹ Carlos Jeanpier Yagos Arias
Universidad de las Fuerzas Armadas (ESPE)
cjyagos@espe.edu.ec  <https://orcid.org/0009-0000-4978-2574>
- ² Franklin Wladimir Espin Almachi
Investigador independiente
frank_2706@live.com  <https://orcid.org/0009-0004-0152-7100>
- ³ Sandra Elizabeth Trávez Osorio
Investigador independiente
sandt197@gmail.com  <https://orcid.org/0000-0002-4546-4541>
- ⁴ Alex Santiago Moreno Corrales
Investigador independiente
asmoreno354@gmail.com  <https://orcid.org/0009-0002-2284-3052>



Artículo de Investigación Científica y Tecnológica

Enviado: 15/04/2024

Revisado: 10/05/2024

Aceptado: 10/06/2024

Publicado: 05/07/2024

DOI: <https://doi.org/10.33262/cienciadigital.v8i3.3080>

Cítese:

Yagos Arias, C. J., Espin Almachi, F. W., Trávez Osorio, S. E., & Moreno Corrales, A. S. (2024). Análisis de la lipófilia de compuestos en el flujo de entrada al proceso de alquilación en refinería mediante química computacional. *Ciencia Digital*, 8(3), 64-79. <https://doi.org/10.33262/cienciadigital.v8i3.3080>



CIENCIA DIGITAL, es una revista multidisciplinaria, trimestral, que se publicará en soporte electrónico tiene como misión contribuir a la formación de profesionales competentes con visión humanística y crítica que sean capaces de exponer sus resultados investigativos y científicos en la misma medida que se promueva mediante su intervención cambios positivos en la sociedad. <https://cienciadigital.org>
La revista es editada por la Editorial Ciencia Digital (Editorial de prestigio registrada en la Cámara Ecuatoriana de Libro con No de Afiliación 663) www.celibro.org.ec



Esta revista está protegida bajo una licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 4.0 International. Copia de la licencia: <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/deed.es>

Palabras claves:

lipófilia,
alquilación,
refinería, química
computacional.

Resumen

Introducción: La alquilación en refinerías es crucial para la producción de gasolina de alto octanaje con bajas emisiones, cumpliendo con requerimientos ambientales y exigencias de la industria automotriz actual. Este estudio provee datos obtenidos mediante análisis con química computacional de los compuestos químicos del flujo de entrada al proceso de alquilación en refinería, con lo cual se prevé mejorar significativamente la calidad del combustible y la eficiencia del proceso. **Objetivo:** El objetivo de este estudio es analizar los valores de lipófilia de los compuestos químicos del flujo de entrada al proceso de alquilación en refinería, los cuales son identificados a través de una exhaustiva búsqueda bibliográfica y analizados mediante química computacional utilizando los métodos iLOGP, XLOGP3, MLOGP, WLOGP y SILICOS-IT. Se busca entender cómo la lipófilia de estos compuestos influye en su comportamiento durante este proceso de refinado de crudo, con el fin de mejorar la eficiencia y selectividad de dicho proceso. **Metodología:** En este estudio se realizan observación, medición, experimentación e interpretación sistemática y rigurosa de los resultados. Mediante análisis y búsqueda bibliográfica, se determinan los compuestos presentes en el flujo de entrada al proceso de alquilación en refinería. Estos compuestos son procesados mediante química computacional para obtener los valores de lipófilia de cada molécula. Posteriormente, se procede al análisis meticuloso de dichos valores y su influencia en las variables relevantes del proceso de refinado. **Resultados:** El Consensus Log Po/w combina métodos computacionales para estimar el Log Po/w de cada molécula, mejorando la precisión de las predicciones. Este estudio se centra en analizar la lipófilia de compuestos en el flujo de entrada para la alquilación en refinería. El propileno presenta el menor valor, mientras que el n-pentano tiene el mayor. La lipófilia garantiza la solubilidad y eficiencia del proceso. **Conclusiones:** Las características lipofílicas en compuestos del flujo de entrada a la alquilación son cruciales en el refinado de crudo. La comprensión y predicción de la lipofilia pueden lograrse con métodos computacionales como iLOGP, XLOGP3, WLOGP, MLOGP y SILICOS-IT. Los valores consensus de lipofilia oscilan entre 1.35 y 2.45, afectando la solubilidad en fases orgánicas y la interacción con catalizadores, lo

que influye en la eficiencia y rendimiento de la alquilación en refinería.

Keywords:

lipophilicity,
alkylation,
refinery,
computational
chemistry.

Abstract

Introduction: Refinery alkylation is crucial for the production of high-octane gasoline with low emissions, meeting environmental requirements and demands of today's automotive industry. This study provides data obtained by computational chemistry analysis of the chemical compounds in the refinery alkylation process input stream, which is expected to significantly improve fuel quality and process efficiency. **Objective:** The objective of this study is to analyse the lipophilicity values of chemical compounds in the refinery alkylation process input stream, which are identified through an exhaustive literature search and analysed by computational chemistry using the iLOGP, XLOGP3, MLOGP, WLOGP and SILICOS-IT methods. The aim is to understand how the lipophilicity of these compounds influences their behaviour during this crude oil refining process, in order to improve the efficiency and selectivity of this process. **Methodology:** In this study, observation, measurement, experimentation and systematic and rigorous interpretation of the results are carried out. By means of analysis and bibliographic search, the compounds present in the input flow to the alkylation process in the refinery are determined. These compounds are processed by computational chemistry to obtain the lipophilicity values of each molecule. Subsequently, these values and their influence on the relevant variables of the refining process are meticulously analysed. **Results:** Consensus Log Po/w combines computational methods to estimate the Log Po/w of each molecule, improving the accuracy of the predictions. This study focuses on analysing the lipophilicity of compounds in the inlet stream for refinery alkylation. Propylene has the lowest value, while n-pentane has the highest. Lipophilicity ensures the solubility and efficiency of the process. **Conclusions:** The lipophilic characteristics of compounds in the alkylation feed stream are crucial in crude oil refining. Understanding and predicting lipophilicity can be achieved with computational methods such as iLOGP, XLOGP3, WLOGP, MLOGP and SILICOS-IT. Consensus values of lipophilicity range from 1.35 to 2.45, affecting solubility in organic phases and interaction with catalysts, which influences the efficiency and yield of alkylation in refinery.

Introducción

La alquilación en refinerías es crucial para la industria automotriz y sus partes interesadas, ya que este proceso tiene la capacidad de convertir hidrocarburos ligeros en alquilatos, componentes esenciales de la gasolina de alto octanaje, como la gasolina premium. Este proceso mejora significativamente la calidad del combustible, aumentando su resistencia a la detonación y eficiencia. Además, los alquilatos tienen bajos niveles de compuestos aromáticos y olefínicos, reduciendo las emisiones contaminantes y cumpliendo así con las demandas de motores modernos y regulaciones ambientales.

La motivación de esta investigación radica en optimizar el proceso de alquilación para mejorar la eficiencia y calidad del producto final en refinerías. Evaluar la lipofilia de los compuestos químicos es crucial, ya que la creciente demanda de combustibles limpios y eficientes, junto con estrictas regulaciones ambientales, requiere procesos refinados más efectivos. De modo que, el proceso de alquilación en refinería es esencial para producir gasolina de alto octanaje con bajas emisiones, cumpliendo con los requerimientos ambientales y las exigencias de la industria automotriz.

El objetivo de este estudio es analizar los valores de lipofilia de los compuestos químicos del flujo de entrada al proceso de alquilación en refinería, los cuales son identificados a través de una exhaustiva búsqueda bibliográfica y analizados mediante química computacional utilizando los métodos iLOGP, XLOGP3, MLOGP, WLOGP y SILICOS-IT. Se busca entender cómo la lipofilia de estos compuestos influye en su comportamiento durante este proceso de refinado de crudo, con el fin de mejorar la eficiencia y selectividad de dicho proceso.

Este estudio busca contribuir al campo de la química computacional y la ingeniería de procesos, aportando conocimientos relevantes sobre la lipofilia de los compuestos químicos y su relación con el proceso de alquilación en refinería. Los resultados presentados en esta investigación pueden tener implicaciones significativas en la optimización de este proceso industrial clave, así como en el diseño de compuestos químicos más eficaces para aplicaciones futuras en la industria del refinado de petróleo.

Desarrollo

Petróleo

El petróleo, el hidrocarburo más importante del mundo, no solo proporciona combustible y energía para el transporte, sino que también se utiliza en diversas industrias para la producción de plásticos, pinturas, fertilizantes, insecticidas y fármacos, entre otros (Ancheyta, 2011). Sus componentes principales son el hidrógeno y el carbono, y en menores cantidades contiene azufre, nitrógeno, oxígeno y metales. Este hidrocarburo, generalmente extraído desde las profundidades subterráneas, es de color negro y tiene

un olor característico, similar a sustancias químicas que contienen azufre, nitrógeno y otros metales pesados (Kumar & Mohan, 2015). Tras su extracción, el petróleo se separa de las impurezas, obteniéndose el crudo, que finalmente se somete a refinación para obtener sus múltiples derivados.

Refinería

Una refinería es una instalación industrial donde se procesa el petróleo crudo para producir productos refinados como gasolina, diésel, queroseno, fuel oil, entre otros. El proceso implica una serie de operaciones como destilación, craqueo, reformado y tratamiento químico para separar y transformar los componentes del petróleo crudo en productos útiles y de mayor valor añadido (Ancheyta, 2011; Kumar & Mohan, 2015).

Proceso de Alquilación

Según Espin & Travez (2021), el proceso de alquilación implica la combinación de un hidrocarburo de cadena corta, como el propileno o el butileno, con un hidrocarburo de cadena larga, como el isobutano, para formar un hidrocarburo más grande y ramificado, conocido como alquilato. Asimismo, para Shokri & Karimi (2021), la reacción se lleva a cabo en presencia de un catalizador ácido, como el ácido fluorhídrico (HF) o el ácido sulfúrico (H₂SO₄), a temperaturas y presiones específicas. La alquilación es un proceso fundamental en la refinería para mejorar la calidad de la gasolina.

¿Qué es un flujo de entrada?

Un flujo de entrada es la corriente de materiales que se introduce en el sistema para ser procesada. Estos materiales pueden ser materias primas, reactivos, solventes, catalizadores u otros compuestos necesarios para llevar a cabo las reacciones químicas deseadas. El flujo de entrada es una parte crucial del proceso químico, ya que determina la composición y las condiciones iniciales del sistema. Además, el control preciso del flujo de entrada es importante para garantizar que se cumplan las condiciones óptimas de operación del proceso, como la relación estequiométrica de los reactivos, la temperatura, la presión y otros parámetros de proceso (Kumar & Mohan, 2015).

Química computacional

La química computacional es un campo de estudio que depende en gran medida de los datos experimentales producidos en un laboratorio tradicional. Consiste en utilizar ordenadores para convertir datos químicos, como reacciones químicas, compuestos, datos de actividad biológica, etc., en información y luego en conocimiento. Este proceso permite reducir costes y aumentar la eficacia de los procesos. Por ello, ha tenido un impacto significativo en la sociedad y ha dado lugar a un número creciente de aplicaciones

que se refleja en un aumento de artículos y publicaciones científicas (Saldívar et al., 2023).

Lipofilia

La lipofilia es un factor crucial en el diseño de compuestos químicos, sobre todo en relación con la solubilidad. La incorporación de grupos metilo aumenta significativamente la lipofilia de un compuesto. Esta característica no solo es pertinente para los procesos de absorción que determinan las propiedades de los productos farmacéuticos, sino también para la predicción de la permeabilidad (Espín & Trávez, 2021). Además, según Wang et al. (2019), es la propiedad de un compuesto al disolverse en grasas, es crucial en el diseño de fármacos debido a su impacto en la solubilidad, la absorción y la permeabilidad. Se mide por el logaritmo de la relación de concentración entre n-octanol y agua (logP).

Por otro lado, Delgado C. et al. (2003) definen a la lipofilia como la afinidad de un compuesto químico por los solventes orgánicos, característica clave en muchos procesos industriales, incluyendo la alquilación en refinerías. Las moléculas lipofílicas son generalmente no polares y tienden a disolverse mejor en medios no acuosos (Dhiman, N. et al., 2017). En este estudio se analiza mediante química computacional la lipofilia de las especies químicas halladas en el flujo de entrada al proceso de Alquilación en refinería que, según Espin & Travez (2021), se registra mediante búsqueda bibliográfica veinte compuestos químicos, presentados en la siguiente tabla. Los compuestos químicos hallados, que forman parte del flujo de entrada al proceso de alquilación de refinería, constatan de: alcanos saturados, alquenos con dos dobles enlaces conjugados, alquenos cíclicos, alquenos con un doble enlace terminal, grupos metilos como sustituyentes, alquenos con doble enlace interno en configuración trans y cis. Cada compuesto químico encontrado se detalla en la siguiente tabla.

Metodología

La metodología para este estudio implica el análisis de documentos científicos, procedimientos, herramientas y técnicas utilizadas en la investigación científica en el campo de la química. Esta metodología incluye la observación, la medición, la experimentación e interpretación sistemática y rigurosa de los resultados. Es importante destacar que esta investigación científica es controlada, objetiva, rigurosa, sistemática e innovadora. Su objetivo es aportar conocimientos sobre la lipofilia y cómo esta influye en las variables más significativas del proceso de alquilación en el refinado de crudo.

Procesamiento mediante química computacional

SwissADME (2024) es una plataforma en línea desarrollada por el Instituto Suizo de Bioinformática, que ofrece un análisis exhaustivo de propiedades moleculares de

compuestos químicos. Esta herramienta web calcula diversos parámetros, como la solubilidad, la lipofilia y la biodisponibilidad, utilizando el código de entrada molecular simplificado (SMILES) de una o varias moléculas. Los datos procesados se organizan de forma estructurada, asignando a cada molécula un título único. Los resultados se pueden exportar fácilmente en un formato compatible con Microsoft Excel (Daina et al., 2017).

Para el procesamiento en SwissADME, es necesario generar el código SMILES de cada especie química. ChemDraw (2024) es una suite de comunicación para la gestión, la elaboración de informes y la presentación de investigaciones en química. Es una herramienta que permite dibujar moléculas y, a partir de la creación de estas estructuras, facilita la obtención del código SMILES. Este código es fundamental para el análisis de química computacional en SwissADME.

En la siguiente tabla se proporciona el código SMILES de cada compuesto químico de manera computacional.

Tabla 1*Código SMILES de cada especie química*

Número De molécula	Nomenclatura IUPAC	Fórmula	Código SMILES
1	propano	C_3H_8	CCC
2	propileno	$CH_2=CHCH_3$	C=CC
3	isobutano	$(CH_3)_3CH$	CC(C)C
4	n-butano	$CH_3CH_2CH_2CH_3$	CCCC
5	buteno	$CH_2=CHCH_2CH_3$	C=CCC
6	isopentano	$(CH_3)_2CHCH_2CH_3$	CCC(C)C
7	n-pentano	$CH_3CH_2CH_2CH_2CH_3$	CCCCC
8	3-metil-1-buteno	$(CH_3)_2C=CHCH_3$	C=CC(C)C
9	1-penteno	$CH_2=CHCH_2CH_2CH_3$	C=CCCC
10	2-metil-1-buteno	$(CH_3)CHCH=CH_2$	C=C(C)CC

Tabla 1*Código SMILES de cada especie química (continuación)*

Número De molécula	Nomenclatura IUPAC	Fórmula	Código SMILES
11	2-penteno	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$	<chem>CC=CCC</chem>
12	2-metil-2-buteno	$\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CHCH}_3$	<chem>C/C(C)=C/C</chem>
13	ciclopenteno		<chem>C1=CCCC1</chem>
14	2-metil-1,3-butadieno	$\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)\text{CH}=\text{CH}_2$	<chem>C=C(C)C=C</chem>
15	trans-1,3-pentadieno	$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}=\text{CH}_2$	<chem>C=C/C=C/C</chem>
16	ciclopentadieno		<chem>C1=CC=CC1</chem>
17	isobuteno	$\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$	<chem>C=C(C)C</chem>
18	1,3-butadieno	$\text{CH}_2=\text{CHCH}=\text{CH}_2$	<chem>C=CC=C</chem>
19	trans-2-buteno	$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_3$	<chem>C/C=C/C</chem>
20	cis-2-buteno	$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_3$	<chem>C/C=C\C</chem>

Nota: Se presentan las especies químicas halladas mediante búsqueda bibliográfica del flujo de entrada al proceso de Alquilación en refinería según (Espin & Travez, 2021).

Presentación de tablas de características lipofílicas de cada especie química

Una vez procesados los códigos SMILES de los compuestos químicos en SwissADME, se obtienen los datos de lipofilia calculados a partir de varios métodos para estimar el coeficiente de partición octanol-agua ($\log P$), los cuales son parámetros fisicoquímicos clave en el descubrimiento, diseño y desarrollo de fármacos (Daina et al., 2019). En cuanto al proceso de refinería de crudo para el proceso de alquilación, la lipofilia de una molécula relaciona la afinidad de un compuesto por solventes orgánicos. En alquilación, esto asegura la solubilidad y la eficiencia del proceso (Delgado et al., 2003).

Tabla 2

Datos de liofilia para de los compuestos la corriente de entrada al proceso de alquilación

Número de molécula	1	2	3	4	5
Fórmula empírica	C3H8	C3H6	C4H10	C4H10	C4H8
Log Po/w (iLOGP)	1.71	1.57	1.91	1.94	1.78
Log Po/w (XLOGP3)	1.84	1.44	2.09	2.89	2.40
Log Po/w (WLOGP)	1.42	1.19	1.66	1.81	1.58
Log Po/w (MLOGP)	2.28	2.13	2.73	2.73	2.58
Log Po/w (SILICOS-IT)	0.45	0.44	0.72	0.89	0.89
Consensus Log Po/w	1.54	1.35	1.82	2.05	1.85
Número de molécula	6	7	8	9	10
Fórmula empírica	C5H12	C5H12	C5H10	C5H10	C5H10
Log Po/w (iLOGP)	2.11	2.18	2.04	2.02	2.01
Log Po/w (XLOGP3)	2.64	3.39	2.20	2.41	2.49
Log Po/w (WLOGP)	2.05	2.20	1.83	1.97	1.97
Log Po/w (MLOGP)	3.14	3.14	2.99	2.99	2.99
Log Po/w (SILICOS-IT)	1.17	1.34	1.16	1.33	1.17
Consensus Log Po/w	2.22	2.45	2.04	2.14	2.13
Número de molécula	11	12	13	14	15
Fórmula empírica	C5H10	C5H10	C5H8	C5H8	C5H8
Log Po/w (iLOGP)	2.08	2.01	1.80	1.86	1.94
Log Po/w (XLOGP3)	2.10	2.67	1.92	2.42	2.40
Log Po/w (WLOGP)	1.97	1.97	1.73	1.75	1.75
Log Po/w (MLOGP)	2.99	2.99	2.60	1.97	1.97
Log Po/w (SILICOS-IT)	1.16	1.00	2.00	1.17	1.15
Consensus Log Po/w	2.06	2.13	2.01	1.83	1.84
Número de molécula	16	17	18	19	20
Fórmula empírica	C5H6	C4H8	C4H6	C4H8	C4H8
Log Po/w (iLOGP)	1.65	1.79	1.68	1.83	1.79
Log Po/w (XLOGP3)	1.84	2.06	1.99	2.33	2.33
Log Po/w (WLOGP)	1.50	1.58	1.36	1.58	1.58
Log Po/w (MLOGP)	1.58	2.58	1.56	2.58	2.58
Log Po/w (SILICOS-IT)	1.59	0.73	0.88	0.71	0.71
Consensus Log Po/w	1.63	1.75	1.49	1.81	1.80

Discusión y análisis de resultados

Para el análisis de lipofilia con Log Po/w (iLOGP), se tiene en cuenta que, según Daina et al. (2014), Log Po/w describe la distribución de una sustancia entre octanol y agua, lo que indica su lipofiliidad y su relevancia en la farmacocinética. Mientras tanto, iLOGP corresponde a la química computacional y predice el coeficiente de partición de manera precisa y eficiente. Es ampliamente utilizado en el diseño de fármacos y ayuda a comprender el comportamiento de nuevas moléculas.

La lipofilia, un factor crucial en el refinado de crudo influye significativamente en los procesos de alquilación, donde la interacción de moléculas con componentes lipofílicos determina la eficiencia y selectividad de las reacciones químicas involucradas. El cálculo del Log Po/w (iLOGP) mediante la energía libre de solvatación en disolventes implícitos demuestra una fuerte correlación lineal con valores experimentales, estableciéndose como un predictor fiable de la hidrofobicidad y lipofilia de una molécula (Saha & Pal, 2017). En el contexto de la presente investigación, los valores reportados en la tabla 3 para propano y propileno, ambos con tres carbonos, son 1.71 y 1.57 respectivamente, sugiriendo que la lipofilia de estas moléculas indica su afinidad por entornos lipofílicos, esencial para procesos de alquilación en refinerías.

El Log Po/w (XLOGP3) es un algoritmo esencial para obtener un modelo aditivo atómico que se complementa con varios factores como la contribución del *i*-ésimo tipo de átomo de la molécula, lo que ayuda a predecir el comportamiento de la molécula como fármaco. Este modelo predictivo posee un rango de valoración sobre la propiedad de la lipofiliidad entre -0.7 a 5.0, por lo que en base a los resultados obtenidos podemos predecir que todas las moléculas de la tabla 3 son biodisponibles por vía oral porque son demasiado flexibles y se consideran similares a un fármaco (Mannhold et al., 2019). Este enfoque ayuda a predecir el comportamiento de la molécula no solo como fármaco, sino también en reacciones de refinado, ya que las propiedades de lipofilia influyen en la biodisponibilidad y reactividad de los hidrocarburos.

El método Log Po/w (WLOGP), basado en el sistema fragmentario de Wildman y Crippen, evalúa el comportamiento y las propiedades moleculares mediante 27 fragmentos y 7 descriptores topológicos. Este método híbrido proporciona información sobre la flexibilidad y polaridad de las moléculas, fundamentales para el diseño y la optimización de procesos en la industria del refinado (Daina et al., 2017). Los valores obtenidos de +0.2 a +6.0 en la tabla 3 indican que estas moléculas son moderadamente polares y relativamente lipofílicas, características esenciales para su eficiencia en reacciones de alquilación, donde una mayor lipofilia puede mejorar la solubilidad de los hidrocarburos en fases orgánicas, facilitando la interacción con catalizadores y mejorando la selectividad del proceso (Wildman & Crippen, 1999; Daina & Zoete, 2016).

El Log Po/w (MLOGP) evalúa la afinidad relativa de compuestos químicos en la fase lipídica en contraste con la fase acuosa. MLOGP es un método computacional de alta precisión y rapidez para la optimización de la lipofilia en el desarrollo de nuevos agentes terapéuticos (Parveen & Alnoman, 2021), ya que está basado en la contribución de fragmentos para estimar el Log Po/w de una molécula. Con este enfoque, se descompone la estructura molecular en fragmentos específicos y se suman las contribuciones individuales de dichos fragmentos, proporcionando una predicción del Log Po/w (Mishra & Dahima, 2019).

De los compuestos químicos que forman parte de la corriente de entrada al proceso de alquilación en refinería, se han considerado rangos de lipofilia entre 1.35 y 1.8 para la absorción oral según Velmourougane (2024), correspondientes a valores de 1.58 para el ciclopentadieno y 1.56 para el 1,3-butadieno. Log Po/w (SILICOS-IT) es una herramienta computacional que utiliza un método híbrido fragmental/topológico para calcular el Log Po/w de manera precisa, combinando la descomposición molecular y la información topológica para predecir la lipofilia y otras propiedades fisicoquímicas en compuestos químicos (Udugade et al., 2019), ayudando a predecir el comportamiento de nuevas sustancias en sistemas biológicos (Arias, 2002). El rango adecuado para los niveles de lipofilia según este método puede variar dependiendo del contexto específico del proceso de refinación. En la investigación farmacológica, un buen compuesto lipofílico tiene un Log Po/w mayor a 1 (Aleixandre & Puerro, 2009). Singh et al. (2024) sitúan los valores óptimos de lipofilia entre 0.65 y 5.47.

Finalmente, el Consensus Log Po/w combina métodos computacionales como iLOGP, XLOGP3, WLOGP, MLOGP y SILICOS-IT para proporcionar una estimación robusta del Log Po/w de cada molécula, mejorando la precisión de las predicciones (Daina et al., 2017; Mansouri et al., 2018). Este estudio se enfoca en el análisis de lipofilia de compuestos químicos del flujo de entrada al proceso de alquilación en refinería, aunque la evaluación de la lipofilia y otros parámetros fisicoquímicos son fundamentales en el diseño de fármacos (Mishra & Dahima, 2019). En el proceso de alquilación en refinería, la lipofilia puede asegurar la solubilidad y eficiencia del proceso (Sempere, 2020). Los compuestos alquilados, como los isoparafinos, son esenciales para producir gasolina de alto octanaje (PennState College of Earth and Mineral Sciences, 2024).

Los valores Consensus Log Po/w muestran que los alcanos de cadena larga tienden a ser menos lipofílicos que los de cadena corta debido a su mayor peso molecular y menor solubilidad en lípidos (Mäki-Arvela et al., 2019). Por ello, los compuestos utilizados en la alquilación en refinería deben tener una lipofilia moderada a baja, como los presentados en este estudio.

CONCLUSIONES

- Estas características lipofílicas en compuestos químicos típicos del flujo de entrada a la alquilación son cruciales para el proceso de refinado de crudo. La comprensión y predicción de la lipofilia de las moléculas implicadas en estos procesos pueden ser realizadas con química computacional mediante los métodos iLOGP, XLOGP3, WLOGP, MLOGP y SILICOS-IT. Como resultado, se halla que permiten optimizar las condiciones de refinado y maximizar la producción de compuestos deseados, producto de la alquilación en la industria del refinado de petróleo.
- Para alquilación, las moléculas tienen valores consensus de lipofilia entre 1.35 y 2.45, debido a que es más probable que se disuelvan en la fase orgánica, lo que es evidente en el coeficiente de partición más alto. Por lo tanto, los niveles de lipofilia de los compuestos químicos afectan directamente su capacidad para moverse entre las fases acuosa y orgánica en el proceso de alquilación en refinería, lo que puede influir en la eficiencia y el rendimiento de este proceso de refinería. Además, afecta la formación de productos deseados y la eficiencia global del proceso de alquilación. Los valores adecuados de lipofilia en los compuestos químicos del flujo de entrada al proceso de alquilación pueden afectar su solubilidad y la interacción con el catalizador ácido utilizado, ya sea HF o H₂SO₄.

Conflicto de intereses

No existe conflicto de intereses en relación con el artículo presentado.

Referencias bibliográficas

- Aleixandre, A., & Puerro, M. (2009). Parte I. Farmacología básica. Médica Panamericana. Obtenido de https://bibliotecas.unr.edu.ar/muestra/medica_panamericana/9788498351682.pdf
- Ancheyta, J. (2011). Modeling and Simulation of Catalytic Reactors for Petroleum Refining. (J. W. Sons, Ed.) Wiley. Obtenido de <https://books.google.com.ec/books?id=86shQ7GZOWIC>
- Arias, T. (2002). Glosario de medicamentos: desarrollo, evaluación y uso. Organización Panamericana de la Salud. Obtenido de <https://iris.paho.org/bitstream/handle/10665.2/751/9275323054.pdf>
- ChemDraw. (14 de Mayo de 2024). Harness the Power of your Data for Scientific Breakthroughs in Pharma & Biotech, Chemicals & Materials. Obtenido de Millions of downloads: #1 trusted chemical drawing solution since 1985: <https://revvitysignals.com/products/research/chemdraw>

- Daina, A., & Zoete, V. (2016). A boiled-egg to predict gastrointestinal absorption and brain penetration of small molecules. *ChemMedChem*, 11(11), 1117-1121. <https://doi.org/10.1002/cmdc.201600182>
- Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2014). iLOGP: A Simple, Robust, and Efficient Description of n-Octanol/Water Partition Coefficient for Drug Design Using the GB/SA Approach. *Journal of chemical information and modeling*, 54 12, 3284-301. DOI:10.1021/ci500467k
- Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2017). SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific reports*, 7, 42717. <https://doi.org/10.1038/srep42717>
- Delgado Cirilo, A., Minguillón Llombart, C., Joglar Tamargo, J. (2003). *Introducción a la química terapéutica*. España: Díaz de Santos. https://www.google.com.ec/books/edition/Introducci%C3%B3n_a_la_qu%C3%A9mica_terap%C3%A9utica/4LwpfcjAhoMC?hl=es-419&gbpv=1
- Dhiman, N., Awasthi, R., Sharma, B., Kharkwal, H., & Kulkarni, G. T. (2021). Lipid nanoparticles as carriers for bioactive delivery. *Frontiers in chemistry*, 9, 580118. <https://doi.org/10.3389/fchem.2021.580118>
- Espin, W. & Travez, S. (2021). Estudio in silico, teórico computacional de las corrientes de ingreso y salida de una refinería de petróleo enfocado en el proceso de “Polimerización y Alquilación” 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 [Tesis de pregrado, Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE]. Repositorio de la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE. <http://repositorio.espe.edu.ec/handle/21000/25027>
- Kumar, B., & Raj Mohan, B. (2015). Microwave-Assisted Extraction of Wax from Oily Sludge: An Experimental Study and its Process Variables Optimization Using Response Surface Methodology. *Soil and Sediment Contamination: An International Journal*, 24(5), 588–607. <https://doi.org/10.1080/15320383.2015.988780>
- Mäki-Arvela, P., Kaka khel, T. A., Azkaar, M., Engblom, S., & Murzin, D. Y. (2018). Catalytic hydroisomerization of long-chain hydrocarbons for the production of fuels. *Catalysts*, 8(11), 534. <https://doi.org/10.3390/catal8110534>
- Mansouri, K., Ringsted, T., Ballabio, D., Todeschini, R., & Consonni, V. (2013). Quantitative structure–activity relationship models for ready biodegradability of

chemicals. *Journal of chemical information and modeling*, 53(4), 867-878.
<https://doi.org/10.1021/ci4000213>

Mishra, S., & Dahima, R. (2019). In Vitro Adme Studies Of Tug-891, A Gpr-120 Inhibitor Using Swiss Adme Predictor. *Journal of Drug Delivery and Therapeutics*, 9(2-s), 366-369. DOI:10.61744/hjp.v2i2.54

Parveen, S., & Alnoman, R. B. (2021). Potential exploration of recent FDA-approved anticancer drugs against models of SARS-CoV-2's main protease and spike glycoprotein: a computational study. *Biointerface Research in Applied Chemistry*, 11(3), 10059-10073. <https://doi.org/10.33263/BRIAC113.1005910073>

PennState College of Earth and Mineral Sciences. (20 de Mayo de 2024). John A. Dutton Institute for Teaching and Learning Excellence. Obtenido de FSC 432 Petroleum Processing: <https://www.e-education.psu.edu/fsc432/content/alkylation>

Saha, S., & Pal, D. (2017). log P. *Encyclopedia of Physical Organic Chemistry* (1ª ed.). USA: Zerong Wang.
https://www.researchgate.net/publication/314216649_Log_P_in_Encyclopedia_of_Physical_Organic_Chemistry

Saldívar-González F. I., Chávez-Hernández, A. L., Prado-Romero, D. L., & González-Medina, M. (2023). ¿Por qué hay que hablar de mujeres en Química Computacional y no sólo de Química Computacional?. *Revista Ciencia UANL*, 26(121), 8-19. <https://doi.org/10.29105/cienciauanl26.121-1>

Sempere Pérez, I. (2020). Diastereoselective Deacylative Addition Of 3-Acetyl-3-Fluorooxindoles to Aldehydes. [Tesi de màster, Universitat d' Alacant].
Repositorio de la Universitat d' Alacant. Obtenido de
<http://hdl.handle.net/10045/107742>

Shokri, A., & Karimi, S. (2021). A review in linear Alkylbenzene (LAB) production processes in the petrochemical industry. *Russian Journal of Applied Chemistry*, 94(11), 1546-1559. Doi: 10.1134/S1070427221110094

Singh, N., Sharma, P., Pal, M. K., Kahera, R., Badoni, H., Pant, K., Sharma, N., & Bhist, B. (2024). In silico targeting of the nacht/pyd domain in nlrp3 inflammasome using phytochemical alkaloids: a computational drug discovery approach. <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-4149517/v1>

SwissADME. (1 de Mayo de 2024). Swiss Institute of Bioinformatics. Obtenido de <https://www.molecular-modelling.ch/swiss-drug-design.html>

- Udugade, S. B., Doijad, R. C., & Udugade, B. V. (2019). In silico evaluation of pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of momordicin1: an active chemical constituent of momordica charantia. *Journal of Advanced Scientific Research*, 10(03 Suppl 1), 222-229. Retrieved from <http://www.sciensage.info/index.php/JASR/article/view/369>
- Velmourougane, G. (16 de Mayo de 2024). Understanding Lipinski's Rule of 5 and the Role of LogP Value in Drug Design and Development. Obtenido de <https://www.sailife.com/understanding-lipinskis-rule-of-5-and-the-role-of-logp-value-in-drug-design-and-development/>
- Wang, Z., Jeffries, B. F., Felstead, H. R., Wells, N. J., Chiarparin, E., & Linclau, B. (2019). A New Straightforward Method for Lipophilicity (logP) Measurement using ¹⁹F NMR Spectroscopy. *JoVE (Journal of Visualized Experiments)*, (143), e58567. doi:10.3791/58567
- Wildman, S. A., & Crippen, G. M. (1999). Prediction of physicochemical parameters by atomic contributions. *Journal of chemical information and computer sciences*, 39(5), 868-873. <https://doi.org/10.1021/ci9903071>

El artículo que se publica es de exclusiva responsabilidad de los autores y no necesariamente reflejan el pensamiento de la **Revista Ciencia Digital**.



El artículo queda en propiedad de la revista y, por tanto, su publicación parcial y/o total en otro medio tiene que ser autorizado por el director de la **Revista Ciencia Digital**.



Indexaciones

