

UNIVERSIDAD SAN FRANCISCO DE QUITO

Colegio de Ciencias e Ingeniería

**Cuantificación de los Aditivos BTEX Presentes en la Gasolina
Distribuida en el Distrito Metropolitano de Quito y Análisis
Ingenieril del Trabajo de la Refinería**

Andrés Patricio Salazar Almeida

Carlos Fabara, M.Sc., Director de Tesis

Tesis de grado presentada como requisito para la obtención del título de Ingeniero

Químico

Quito, abril de 2015

Universidad San Francisco de Quito
Colegio de Ciencias e Ingeniería

HOJA DE APROBACION DE TESIS

Cuantificación de los Aditivos BTEX Presentes en la Gasolina
Distribuida en el Distrito Metropolitano de Quito y Análisis
Ingenieril del Trabajo de la Refinería

Andrés Patricio Salazar Almeida

Carlos Fabara, M.Sc.,

Director de Tesis

.....

Daniela Almeida, Dr.-Ing.,

Miembro del Comité de Tesis

.....

David Egas, Ph.D.,

Miembro del Comité de Tesis

.....

Ximena Córdova, Ph.D.,

Decana de la Escuela de Ingeniería

.....

Quito, abril de 2015

© DERECHOS DE AUTOR

Por medio del presente documento certifico que he leído la Política de Propiedad Intelectual de la Universidad San Francisco de Quito y estoy de acuerdo con su contenido, por lo que los derechos de propiedad intelectual del presente trabajo de investigación quedan sujetos a lo dispuesto en la Política.

Asimismo, autorizo a la USFQ para que realice la digitalización y publicación de este trabajo de investigación en el repositorio virtual, de conformidad a lo dispuesto en el Art. 144 de la Ley Orgánica de Educación Superior.

Firma:

Nombre: Andrés Patricio Salazar Almeida

C. I.: 1713993432

Lugar y fecha: Quito, abril de 2015

DEDICATORIA

A mis padres, Marisol y Patricio, por su amor incondicional, por su carácter para enfrentar la vida, por los valores inculcados y por entregar su vida por este hogar. Jamás nos rendiremos.

A mi hermano, Esteban, por su amistad, alegría, cariño y confianza.

A mis amigos, Santiago, Kenny, Martina y Juan Carlos por las risas y aventuras compartidas, por crecer a mi lado y demostrarme el valor de una verdadera amistad.

A Karolina por ser e inspirar nuestro "libro de aventuras".

AGRADECIMIENTOS

A Dios, por su presencia en cada parte de mi vida.

A mis queridos mentores, de los cuales me llevo su amistad y más que conocimientos científicos:

A Daniela Almeida, por enseñarme el valor de la responsabilidad, por ser capaz de ver mi mejor versión.

A Carlos Fabara, por guiarme en los momentos difíciles y por su ayuda en este proyecto de tesis.

A Marcelo Albuja, por su calidad de educador, por su amistad y por enseñarme que hay cosas más importantes que resolver una ecuación.

A David Egas, por su tiempo, por su ayuda, por su paciencia, por buscar siempre soluciones a este proyecto de tesis.

A Silvana Guitarra, por confiar en mí, por enseñarme el valor de una nota merecida.

A Julio Ibarra, por su amistad incondicional.

RESUMEN

Se analizó las gasolinas Súper y Extra distribuidas en el Distrito Metropolitano de Quito mediante Cromatografía de Gases/Espectrometría de Masas, para ello se muestreó 36 estaciones, correspondientes al 30% del total existente para finales de 2014 (72 estaciones). En primera instancia se realizó un análisis cualitativo para determinar todos los hidrocarburos presentes en las gasolinas, así como otros compuestos; y posteriormente se cuantificó la concentración de BTEX (Benceno, Tolueno, Etilbenceno, Xilenos) con el fin de esclarecer el cumplimiento de las normativas ecuatorianas vigentes para regulación de gasolinas.

Se determinó que la gasolina Extra presenta mayor cantidad de isoparafinas e hidrocarburos cíclicos, mientras que la falta de los mismos en la gasolina Súper refleja únicamente una mayor adición de aromáticos. En varias gasolinas Extra, se encontraron hidrocarburos con grupos alcohol, lo cual se explica como el proyecto del Gobierno Ecuatoriano para introducir la "Gasolina Ecopaís", gasolina con etanol, en todas las regiones. Se determinó que el benceno, compuesto cancerígeno, supera los límites permisibles en los dos tipos de gasolina, e incluso es aproximadamente el doble en la gasolina Súper (1.105%). También se observó que no existen normas de adición para el resto de aromáticos.

Finalmente se esclareció que las modificaciones dispuestas en la Refinería de Esmeraldas, se resumen al cambio del reactor y regenerador de la unidad FCC (Fluid Catalytic Cracking). No se pretende aumentar la cantidad de producción de derivados del petróleo.

ABSTRACT

Super and Extra gasolines distributed at the Metropolitan District of Quito were analyzed by Gas Chromatography/Mass Spectrometry. 36 gas stations corresponding to the 30% of all existing until late 2014 (72 stations), were sampled. At first a qualitative analysis was performed to determine all hydrocarbons and other compounds present in gasoline; subsequently, BTEX (Benzene, Toluene, Ethylbenzene, Xylenes) concentration was determined, in order to clarify compliance of the Ecuadorian current regulations for gasolines.

It was determined that Extra gasoline contain a higher amount of isoparafins and cyclic hydrocarbons, while the lack of those in Super gasoline reflects only a greater addition of aromatics. In some Extra gasolines, it was found hydrocarbons with alcohol groups, this could explain the Ecuadorian Government project to introduce "Ecopais" gasoline, with ethanol, in all the country regions. It was determined that benzene, a carcinogenic compound, exceeds the permissible limits in both types of gasoline, and is even practically the double in Super gasoline (1.105%). It also was observed that there is not current regulations for the addition of the rest of aromatics.

Finally it was clarified that the modifications at the Esmeraldas Refinery, are related to the change of the reactor and regenerator of the FCC (Fluid Catalytic Cracking) unit. It is not the aim increase the production of petroleum derivates.

TABLA DE CONTENIDO

1	INTRODUCCIÓN.....	17
1.1	Antecedentes.....	17
1.2	Descripción del Problema	21
1.3	Justificación	22
1.4	Objetivos.....	23
2	FUNDAMENTO TEÓRICO	24
2.1	Petróleo.....	24
2.1.1	Composición del Crudo de Petróleo	25
2.2	Tipos de Hidrocarburos presentes en el Petróleo.....	26
2.2.1	Hidrocarburos Parafínicos	27
2.2.2	Hidrocarburos Olefínicos	29
2.2.3	Hidrocarburos Nafténicos	29
2.2.4	Hidrocarburos Aromáticos e Hidrocarburos Mixtos.....	30
2.3	Clasificación de Crudos API	33
2.4	Principales Productos del Petróleo, Refinación.....	34
2.4.1	Tratamiento Preliminar a la Destilación	34
2.4.2	Destilación Atmosférica	35
2.4.3	Destilación al Vacío	38
2.5	Motores de Combustión Interna	39
2.6	Octanaje	41
2.6.1	Índice Anticascabeleo:.....	42
2.6.2	Sensibilidad del Combustible.....	45
2.7	Gasolina	48

2.8	Procesos Industriales para Obtener Gasolina.....	48
2.8.1	Craqueo Térmico.....	49
2.8.2	Craqueo Catalítico.....	50
2.8.3	Alquilación.....	52
2.8.4	Reformado Catalítico.....	54
2.8.5	Isomerización.....	57
2.9	Contexto Ecuatoriano de Producción de Derivados del Petróleo	57
2.9.1	Refinería La Libertad y Complejo Industrial Shushufindi.....	60
2.9.2	Refinería de Esmeraldas.....	61
2.10	Benceno, Tolueno, Etilbenceno, Meta - Para - Orto Xilenos y su Toxicología.....	67
2.10.1	Benceno.....	68
2.10.2	Tolueno.....	69
2.10.3	Etilbenceno.....	71
2.10.4	Xilenos.....	72
2.11	Normas de Adición de BTEX a las Gasolinas en el Ecuador	73
3	Metodología.....	75
3.1	Cromatografía de Gases/ Espectrometría de Masas (GC/MS).....	75
3.1.1	El espectro de masas.....	77
3.2	Determinación del Área de Estudio.....	78
3.3	Recolección de Muestras.....	78
3.3.1	Sector 1.....	79
3.3.2	Sector 2.....	80
3.3.3	Sector 3.....	81
3.3.4	Sector 4.....	82

3.3.5	Sector 5	83
3.4	Análisis Cualitativo de Muestras	92
3.5	Análisis Cuantitativo de BTEX en las Muestras	96
4	RESULTADOS	100
4.1	Resultados Cualitativos.....	100
4.1.1	Gasolina Súper del Distrito Metropolitano de Quito	100
4.1.2	Gasolina Extra del Distrito Metropolitano de Quito	104
4.2	Resultados Cuantitativos	109
5	DISCUSIÓN DE DATOS Y RESULTADOS	114
6	CONCLUSIONES.....	119
7	RECOMENDACIONES.....	121
8	BIBLIOGRAFÍA.....	122

TABLAS

Tabla 1: Composición Química del Petróleo Crudo (Hyne, 2001) (Paucar, 2011)....	25
Tabla 2: Tipos de Hidrocarburos presentes en el Petróleo (Chow Pangtay, 1996) .	27
Tabla 3: Clasificación de Crudos según su Densidad API (Schifter & López, 1998)	33
Tabla 4: Efectos de variables sobre la demanda de octanaje (Handwerk & Gary, 1980).....	45
Tabla 5: Ejemplificación de la Sensibilidad de un Combustible pertinente a la Figura 2.20	47
Tabla 6: Propiedades y Destino de los Productos del Craqueo Catalítico (Schifter & López, 1998)	51
Tabla 7: Materias Primas y Productos del Reformado Catalítico (Handwerk & Gary, 1980) (Schifter & López, 1998).....	54
Tabla 8: Capacidad de Refinación de Crudo en el Ecuador (Poveda, et al., 2013) .	57
Tabla 9: Productos Derivados de Petróleo Producidos en Ecuador (Poveda, et al., 2013).....	58
Tabla 10: Poliductos Ecuatorianos	59
Tabla 11: Unidades de Proceso de la Refinería de Esmeraldas (Poveda, et al., 2013)	61
Tabla 12: Entrevista al Ing. Henry Ramírez representante de Petroecuador (Ramírez, 2015).....	65
Tabla 13: Propiedades Físicas del Benceno (Acevedo García, 2006) (López Blanco, 2005).....	68

Tabla 14: Propiedades Físicas del Tolueno (Acevedo García, 2006) (López Blanco, 2005).....	69
Tabla 15: Propiedades Físicas del Etilbenceno (Acevedo García, 2006) (López Blanco, 2005).....	71
Tabla 16: Propiedades Físicas de los Xilenos (Acevedo García, 2006) (López Blanco, 2005).....	72
Tabla 17: Comparación entre la NTE INEN 935 y la RTE INEN 028 (INEN, 2012) (INEN, 2011)	74
Tabla 18: Definición de Sectores para la Recolección de Muestras.....	78
Tabla 19: Gasolineras del Sector 1	80
Tabla 20: Gasolineras del Sector 2	81
Tabla 21: Gasolineras del Sector 3	82
Tabla 22: Gasolineras del Sector 4	83
Tabla 23: Gasolineras del Sector 5	83
Tabla 24: Parámetros de Configuración del ASTM D-5769	93
Tabla 25: información de la Columna Utilizada	94
Tabla 26: Certificado de Análisis del Estándar (SIGMA-ALDRICH, 2014)	96
Tabla 27: Hidrocarburos Parafínicos Presentes en la Gasolina Súper.....	100
Tabla 28: Hidrocarburos Isoparafínicos Presentes en la Gasolina Súper	100
Tabla 29: Hidrocarburos Olefínicos Presentes en la Gasolina Súper.....	101
Tabla 30: Hidrocarburos Nafténicos Presentes en la Gasolina Súper.....	102
Tabla 31: Hidrocarburos Aromáticos Presentes en la Gasolina Súper.....	103
Tabla 32: Otros Hidrocarburos Identificados en la Gasolina Súper.....	104
Tabla 33: Hidrocarburos Parafínicos Presentes en la Gasolina Extra.....	104
Tabla 34: Hidrocarburos Isoparafínicos Presentes en la Gasolina Extra	105

Tabla 35: Hidrocarburos Olefínicos Presentes en la Gasolina Extra.....	106
Tabla 36: Hidrocarburos Nafténicos Presentes en la Gasolina Extra.....	107
Tabla 37: Hidrocarburos Aromáticos Presentes en la Gasolina Extra.....	108
Tabla 38: Otros Hidrocarburos Identificados en la Gasolina Extra.....	109
Tabla 39: % en Masa de BTEX Gasolina Extra.....	109
Tabla 40: % en Volumen de BTEX Gasolina Extra.....	110
Tabla 41: g/galón de BTEX Gasolina Extra.....	110
Tabla 42: % en Masa de BTEX Gasolina Súper.....	110
Tabla 43: % en Volumen de BTEX Gasolina Súper.....	111
Tabla 44: g/galón de BTEX Gasolina Súper.....	111
Tabla 45: Diferencias en Hidrocarburos de la Gasolina Súper y Extra.....	115
Tabla 46: Contenido Promedio de BTEX en las Gasolinas del DMQ.....	117

FIGURAS

Figura 1.1: Estructura de la oferta de energía primaria en el Ecuador.....	19
Figura 1.2: Oferta y Demanda de Derivados del Petróleo en el Ecuador (Carvajal & Orbe, Balance Energético Nacional 2014, 2014).....	19
Figura 1.3: Consumo de Gasolinas por Sector (Carvajal & Orbe, Balance Energético Nacional 2014, 2014).....	20
Figura 2.1: n - pentano (parafina de cadena lineal).....	28
Figura 2.2: Iso - pentano (parafina de cadena ramificada).....	28
Figura 2.3: Etileno (hidrocarburo alifático no saturado).....	29
Figura 2.4: a. Ciclopentano; b. 1,2 - Dimetilciclopentano; c. Ciclohexano y d. Metilciclohexano.....	30

Figura 2.5: Compuestos Aromáticos Encontrados en el Petróleo	32
Figura 2.6: Cortes de Petróleo Producidos en la Unidad de Destilación Atmosférica (Chow Pangtay, 1996) (SIEMENS, 2007).....	36
Figura 2.7: Tiempos del Motor de Combustión Interna (Brain, 2014)	40
Figura 2.8: Heptano.....	43
Figura 2.9: Iso - octano / 2, 2, 4 trimetil - pentano.....	43
Figura 2.10: Calidad de Octano en Función de la Severidad de la Máquina (Schifter & López, 1998)	46
Figura 2.11: Reacción de Alquilación para producir Iso-octano (Handwerk & Gary, 1980) (ChemSpider, 2014).....	53
Figura 2.12: Reacción de Alquilación para producir Iso-heptano (Handwerk & Gary, 1980) (ChemSpider, 2014).....	53
Figura 2.13: Reacción de Deshidrogenación de Naftenos a Aromáticos (Schifter & López, 1998) (ChemSpider, 2014)	55
Figura 2.14: Reacción de Deshidrociclación de Parafinas a Aromáticos (Handwerk & Gary, 1980) (ChemSpider, 2014)	56
Figura 2.15: Reacción de Isomerización (Handwerk & Gary, 1980) (ChemSpider, 2014).....	56
Figura 2.16: Reacción de Craqueo con Hidrógeno (Handwerk & Gary, 1980) (ChemSpider, 2014).....	56
Figura 3.1: GC-MS Shimadzu QP-2010 Ultra.....	75
Figura 3.2: Cromatografía de Gases/Espectrometría de Masas (Wade, 2010).....	76
Figura 3.3: Espectro de Masas del Tolueno (NIST Mass Spectrometry Data Center, 2014).....	77
Figura 3.4: Envases Autorizados para la Venta de Gasolina	79

Figura 3.5: Botellas de Almacenamiento de Muestras	79
Figura 3.6: Cartografía del Sector 1 (Google Maps, 2014).....	85
Figura 3.7: Cartografía del Sector 2 Parte 1 (Google Maps, 2014).....	86
Figura 3.8: Cartografía del Sector 2 Parte 2 (Google Maps, 2014).....	87
Figura 3.9: Cartografía del Sector 3 Parte 1 (Google Maps, 2014).....	88
Figura 3.10: Cartografía del Sector 3 Parte 2 (Google Maps, 2014).....	89
Figura 3.11: Cartografía del Sector 4 (Google Maps, 2014).....	90
Figura 3.12: Cartografía del Sector 5 (Google Maps, 2014).....	91
Figura 4.1: % en Masa de BTEX Gasolinas Súper y Extra	112
Figura 4.2: % en Volumen de BTEX Gasolinas Súper y Extra	112
Figura 4.3: g/galón de BTEX Gasolinas Súper y Extra.....	113

1 INTRODUCCIÓN

La gasolina contiene compuestos orgánicos volátiles (COV). Algunos de estos compuestos, como los BTEX (benceno, tolueno, etilbenceno y xilenos), se encuentran en relativa abundancia en los carburantes y presentan efectos graves para la salud humana, tanto cancerígenos como no cancerígenos (Acevedo García, 2006) (Ramírez Peñaherrera, 2012).

En los pocos estudios existentes sobre los riesgos a la exposición de BTEX, se analiza el enfoque de las emisiones gaseosas tanto de automotores, como el producido en las estaciones de servicio (Acevedo García, 2006) (Ramírez Peñaherrera, 2012). Por el contrario este estudio, desde la perspectiva de la Ingeniería de Procesos, pretende adentrarse en las bases del problema, que se traduce en el funcionamiento correcto o incorrecto de la refinería petrolera que produce las gasolinas.

1.1 Antecedentes

Después de la aparición del automóvil, el mundo comenzó a moverse cada vez más a prisa, la expansión acelerada de la industria automovilística, se inició hacia 1922 con el famoso “Modelo T” de Henry Ford. Ese año existían 18 millones de automóviles, para 1938 el número aumentó a 40 millones, en 1956 a 100 millones y a más de 170 millones para 1964 (Chow Pangtay, 1996). Actualmente se estima que existen 1100 millones de automóviles en la Tierra (Kogan, 2014).

El alto consumo de gasolinas, no solo se debe al excesivo número de automóviles circulando, sino también a la muy baja eficiencia de los motores del tipo Otto o de combustión interna (Encyclopædia Britannica, 2014) (Chow Pangtay, 1996).

Los motores diésel presentan mayor eficiencia, generalmente 35%, ya que producen más trabajo mecánico por cada litro de combustible; mientras los automóviles de combustión interna aprovechan solamente del 22 al 24% de la energía consumida (Chow Pangtay, 1996).

El Ecuador es un país energéticamente petrolero como se observa en la Figura 1.1 (Carvajal & Orbe, Balance Energético Nacional 2013, 2013) (Carvajal & Orbe, Balance Energético Nacional 2014, 2014). Sin embargo, la demanda de derivados de petróleo para el año 2014 (95 492 kBEP) no logró abastecerse con la producción (55 580 kBEP), (ver Figura 1.2); por este motivo se recurre a la importación de derivados para cubrir la demanda interna del país (Carvajal & Orbe, Balance Energético Nacional 2014, 2014).

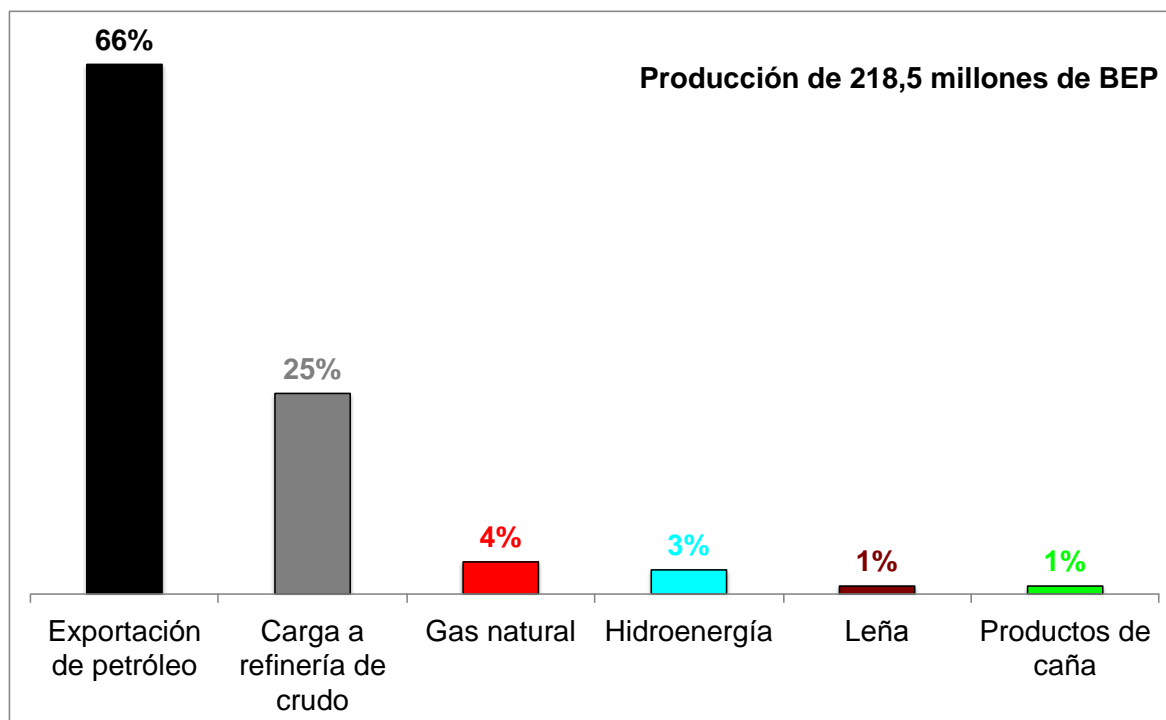


Figura 1.1: Estructura de la oferta de energía primaria en el Ecuador

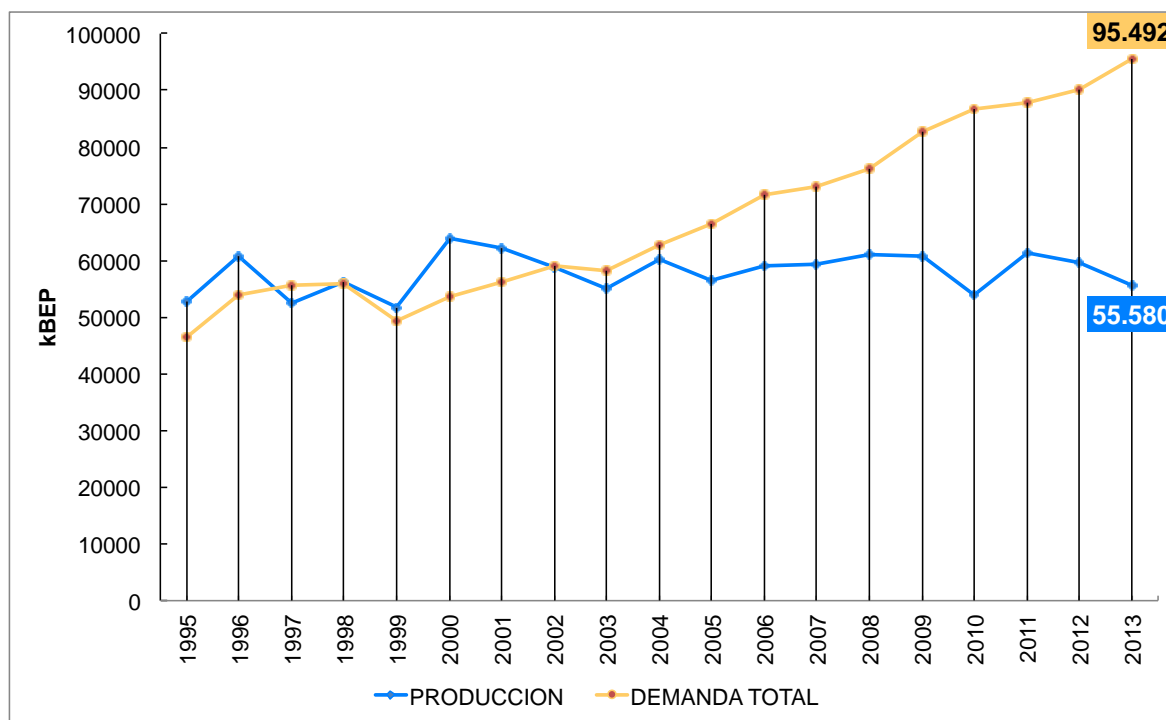


Figura 1.2: Oferta y Demanda de Derivados del Petróleo en el Ecuador
(Carvajal & Orbe, Balance Energético Nacional 2014, 2014)

Hablando específicamente de gasolinas, el total ofertado para 2014 fue de 24 093 kBEP o 1 133 millones de galones; de esta cifra solo el 41% correspondía a producción de las refinerías ecuatorianas y el 59% a importaciones (Carvajal & Orbe, Balance Energético Nacional 2014, 2014). Una de las preguntas que este estudio planea responder es el ¿por qué se recurre a la importación de gasolinas y cuál es la calidad de las mismas?.

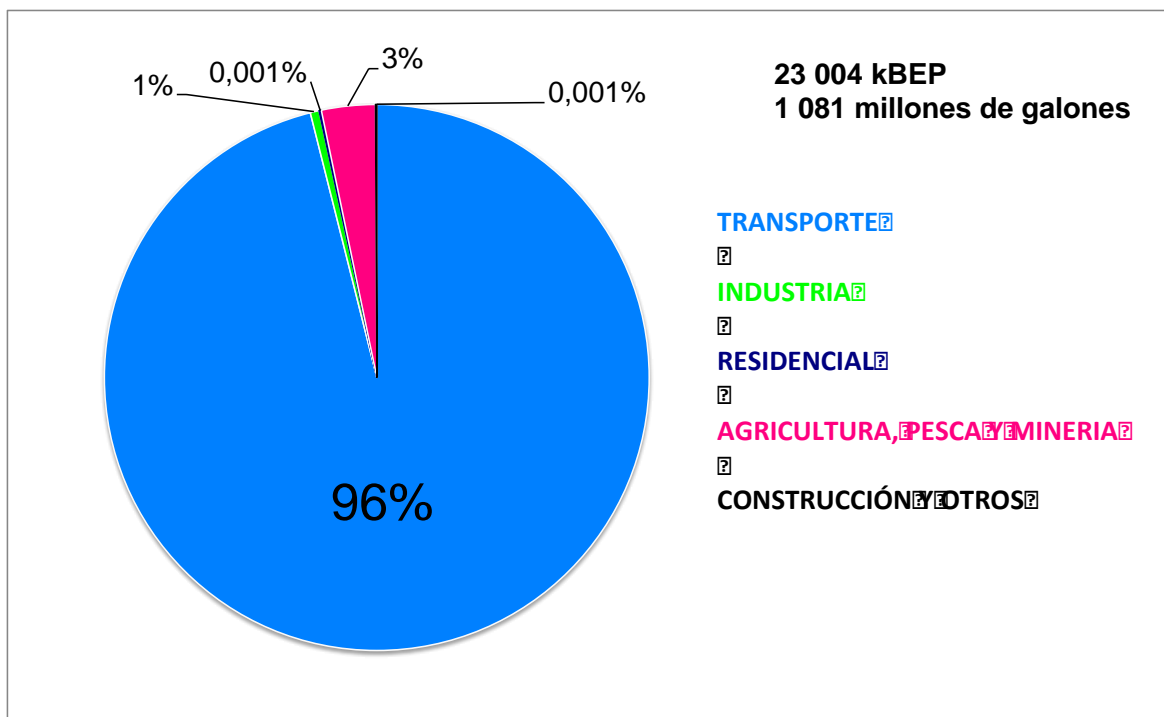


Figura 1.3: Consumo de Gasolinas por Sector (Carvajal & Orbe, Balance Energético Nacional 2014, 2014)

En la Figura 1.3 se observan los sectores que demandan gasolinas, siendo el sector del transporte el de mayor consumo. Una característica fundamental de la gasolina, para el correcto funcionamiento de los motores de combustión interna de ignición por chispa, es un alto octanaje o índice de octano (Véase la Sección

2.6) (BG Latin America, 2013) (Schifter & López, 1998). Los hidrocarburos aromáticos, BTEX, le imparten un alto índice de octano a la gasolina (Chow Pangtay, 1996).

1.2 Descripción del Problema

Las gasolinas de automoción contienen compuestos orgánicos volátiles (COV), como los BTEX (Acevedo García, 2006). De acuerdo a la EPA (Environmental Protection Agency), existen suficientes evidencias de estudios en personas y animales que corroboran que el benceno es cancerígeno (López Blanco, 2005) (Montoya & Páez, 2012) (Pérez Juárez, 2012). Estudios realizados a trabajadores expuestos a niveles altos de benceno han dado como resultado una alta incidencia de leucemia (López Blanco, 2005) (Montoya & Páez, 2012). Otros efectos sobre la salud que incluyen a todos los BTEX, son irritación sensorial, depresión del sistema nervioso central y efectos en el sistema respiratorio (López Blanco, 2005).

El Ecuador, a pesar de ser un país petrolero, requiere de la importación de gasolinas para abastecer su consumo interno (véase la Figura 1.2) (Carvajal & Orbe, Balance Energético Nacional 2014, 2014). La gasolina comercial que se expende al público, es una mezcla de gasolina natural y gasolina procedente de los procesos petroleros de polimerización, alquilación, isomerización, desintegración y en especial reformación (Chow Pangtay, 1996).

Al requerirse la adquisición de gasolinas de mercados exteriores, surgen varias incógnitas. Entre ellas, ¿cuál es la concentración de BTEX en g/galón de la

gasolina comercial?, ¿satisface esa concentración las normas regulativas del país? y adentrándose en las bases del problema, ¿por qué las refinerías instaladas actualmente en el Ecuador, no abastecen por completo el mercado interno? ¿cuáles son las dificultades que presentan?.

1.3 Justificación

La escasa existencia de estudios específicos que valoren la cantidad promedio de BTEX presente en las gasolinas distribuidas en el Distrito Metropolitano de Quito, ha limitado la capacidad de reacción frente a los problemas que estos representan, por parte de los organismos de control involucrados (Acevedo García, 2006) (Ramírez Peñaherrera, 2012). A través de este tipo de estudios se pueden verificar medidas de control existentes, como las normas INEN; proponer e implantar nuevas medidas de control y proporcionar posibles soluciones a las bases del problema.

Este proyecto investigativo pretende generar una base de datos con las concentraciones promedio reales de BTEX encontradas en las gasolinas, lo cual puede tener aplicaciones en los sectores de salud, control medioambiental, transporte, e investigación. A la vez puede potenciar el desarrollo de tecnologías de petróleos, que reemplacen a los BTEX como los principales aditivos para el aumento del octanaje.

El área de estudio que abarca este proyecto de investigación, es el Distrito Metropolitano de Quito; por lo que se pretende también, conocer la situación

actual de la Refinería de Esmeraldas, que provee los derivados de petróleo a la ciudad.

1.4 Objetivos

El objetivo general de este trabajo es cuantificar los compuestos aromáticos BTEX, presentes en las gasolinas distribuidas en el Distrito Metropolitano de Quito.

A través del objetivo general se plantean los siguientes objetivos específicos:

- Determinar el cumplimiento de las normas regulativas INEN y ambientales para la adición de BTEX en las gasolinas.
- Analizar desde el punto de vista de la Ingeniería de Procesos, la situación actual de la Refinería de Esmeraldas de acuerdo a la producción de gasolinas.

2 FUNDAMENTO TEÓRICO

2.1 Petróleo

El petróleo es un mineral combustible que varía desde un líquido amarillo y pardo oscuro hasta un producto viscoso, a veces semisólido, de color negro con reflejos verdes. (Paucar, 2011) (Chow Pangtay, 1996). Su nombre se deriva del griego petro, piedra y oleum, aceite (Hyne, 2001). Está constituido por una mezcla de hidrocarburos (compuestos formados únicamente de carbono e hidrógeno) que de acuerdo a su estructura y el número de átomos de carbono que los conforman, pueden ser gaseosos de 1 a 4 átomos; líquidos de 5 a 20 átomos y sólidos, a temperatura ambiente, los de más de 20 átomos. (Chow Pangtay, 1996).

Existen varias teorías sobre la formación del crudo¹ de petróleo. La teoría inorgánica, plantea que el “carbono y el hidrógeno” se mezclaron a grandes profundidades dentro del globo terrestre y bajo condiciones de altas temperaturas y presiones extremas dieron como resultado crudo y gas natural (Trujillo, 2010). La teoría de formación, afirma que múltiples cambios geológicos hundieron y presionaron estratos de roca que se impregnaron de diversos materiales y formaron franjas orgánicas que a través de los siglos dieron paso al petróleo crudo (Trujillo, 2010).

Y la teoría más aceptada, la teoría orgánica, establece que la materia orgánica procedente de la descomposición anaeróbica de restos animales y vegetales acumulados en el fondo de las lagunas y en el curso inferior de los ríos, se cubrió

¹ Según la Real Academia Española, crudo o petróleo crudo se refiere al “mineral viscoso que una vez refinado proporciona el petróleo, el asfalto y otros productos” (Real Academia Española, 2014).

paulatinamente con capas cada vez más gruesas de sedimentos, bajo la acción de las cuales a determinadas condiciones de presión, temperatura y tiempo formaron hidrocarburos, con pequeñas cantidades de azufre, oxígeno, nitrógeno y trazas de metales, cuya mezcla constituye el petróleo crudo (Chow Pangtay, 1996) (Paucar, 2011).

2.1.1 Composición del Crudo de Petróleo

En la composición del crudo, además de hidrocarburos, también figuran derivados del azufre y pequeñas cantidades (del orden de partes por millón [ppm]), de compuestos con átomos de nitrógeno, oxígeno, o de metales como: hierro, níquel, cromo, vanadio y cobalto (Chow Pangtay, 1996) (Schifter & López, 1998).

A pesar de una decantación prolongada, el crudo presenta sedimentos y agua salada emulsionada, que lleva en disolución cloruro de magnesio, cloruro de sodio, sulfatos de calcio y magnesio y en algunos casos yoduros y bromuros. (Paucar, 2011).

La Tabla 1 presenta la composición química del petróleo crudo.

Tabla 1: Composición Química del Petróleo Crudo (Hyne, 2001) (Paucar, 2011)

Elemento		%
Carbono	C	84 - 87
Hidrógeno	H	11 - 14
Azufre	S	0.06 - 2
Oxígeno	O	0.1 - 2
Nitrógeno	N	0.1 - 2
Metales	Fe, Ni, Cr, V, Co	< 0.03

2.2 Tipos de Hidrocarburos presentes en el Petróleo

La manera en la que se unen los átomos de carbono e hidrógeno, átomos de carbono tetravalentes con átomos de hidrógeno monovalentes, sigue dos reglas generales: la adición de los átomos de carbono en cadena o en ciclos; y la presencia o ausencia de insaturaciones (Secretaría de Energía República Argentina, 2013) (Paucar, 2011). Los hidrocarburos que presentan enlaces simples entre los átomos de carbono son llamados saturados y si contienen uno o más dobles enlaces, son insaturados (Hyne, 2001). Una clasificación general de los hidrocarburos los separa en alifáticos o cíclicos (Secretaría de Energía República Argentina, 2013).

Los hidrocarburos alifáticos se caracterizan porque sus átomos de carbono forman cadenas abiertas, saturadas o insaturadas, que pueden ser lineales o ramificadas (Paucar, 2011). En los hidrocarburos cíclicos, el núcleo o ciclo puede estar constituido por un número cualquiera de átomos de carbono, siendo más frecuente la estructura de seis átomos^{II}. Los ciclos pueden ser saturados o insaturados; si se toma en cuenta sólo el ciclo de seis átomos de carbono, se puede encontrar uno, dos o tres dobles enlaces de insaturación, la estructura con tres dobles enlaces corresponde a los aromáticos y es químicamente más estable y frecuente que las dos anteriores (Secretaría de Energía República Argentina, 2013). La molécula más simple de hidrocarburo que podemos encontrar es la de metano, CH_4 . (Schifter & López, 1998)

^{II} En los hidrocarburos cíclicos es más frecuente la estructura de seis átomos, ya que corresponde a los 109° del ángulo normal de unión de los átomos de carbono (Secretaría de Energía República Argentina, 2013).

Cuatro tipos de moléculas de hidrocarburos, llamadas *Series de Hidrocarburos*, están presentes en cada crudo. Las Series de Hidrocarburos incluyen las parafinas, olefinas, naftenos y aromáticos. El porcentaje relativo de cada serie de hidrocarburo varía según el tipo de crudo, controlando las propiedades químicas y físicas de ese crudo; y por tanto su proceso de refinación. (Hyne, 2001) (Handwerk & Gary, 1980). La Tabla 2 presenta los tipos de hidrocarburos presentes en el petróleo junto con su fórmula general, donde n es un número entero positivo.

Tabla 2: Tipos de Hidrocarburos presentes en el Petróleo (Chow Pangtay, 1996)

Hidrocarburos	Fórmula General
Parafínicos	C_nH_{2n+2}
Olefínicos	C_nH_{2n}
Nafténicos	C_nH_{2n}
Aromáticos	C_nH_{2n-6}

2.2.1 Hidrocarburos Parafínicos

En la serie parafínica de los hidrocarburos, los átomos de carbono están unidos entre sí mediante enlaces simples y están saturados con átomos de hidrogeno. (Handwerk & Gary, 1980). Se los llama así porque no reaccionan fácilmente con otros compuestos^{III} (Chow Pangtay, 1996).

El metano (CH_4), el etano (C_2H_6), el propano (C_3H_8) y el butano (C_4H_{10}), son los cuatro primeros hidrocarburos de esta serie y son los principales componentes de los gases del petróleo (Chow Pangtay, 1996). A partir del pentano de cadena lineal

^{III} El nombre parafínicos viene de las raíces griegas “parum”, pequeña y “affinis”, afinidad (Chow Pangtay, 1996).

hasta el cetano lineal, C_{16} , los hidrocarburos son líquidos a temperatura ambiente, y los de peso molecular superior son sólidos (Paucar, 2011).

Cuando el número de átomos de carbono en la molécula es mayor a tres, pueden existir hidrocarburos que contengan el mismo número de átomos de carbono e hidrógeno, pero estructuras diferentes. Esto se debe a que el carbono no solo puede formar cadenas lineales sino también ramificadas, que conducen a isómeros con propiedades químicas y físicas significativamente distintas; estos hidrocarburos toman el nombre de iso-parafinas. El número de isómeros crece a manera de progresión geométrica al aumentar el número de átomos de carbono (Handwerk & Gary, 1980) (Schifter & López, 1998).

En la Figura 2.1 se puede observar una parafina de cadena lineal presente en el crudo de petróleo; mientras que en la Figura 2.2 se encuentra una iso - parafina.

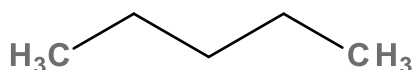


Figura 2.1: n - pentano (parafina de cadena lineal)

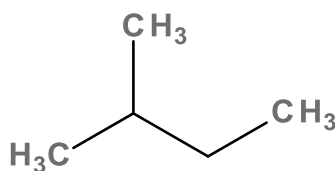


Figura 2.2: Iso - pentano (parafina de cadena ramificada)

2.2.2 Hidrocarburos Olefínicos

El origen de las olefinas no es natural; se da en el procesado del crudo de petróleo, específicamente en la pirólisis a altas temperaturas de otros hidrocarburos (parafinas o cadenas laterales parafínicas de los sistemas de anillos complejos). Son similares en la estructura a las parafinas, pero como mínimo presentan un doble enlace entre los átomos de carbono (Paucar, 2011) (Handwerk & Gary, 1980).

Los primeros hidrocarburos de la serie que corresponde a una olefina normal (un doble enlace), son el etileno (Figura 2.3) y el propileno; existen también las diolefinas (dos dobles enlaces) y los acetilénicos (un triple enlace) (Secretaría de Energía República Argentina, 2013). Por lo general las olefinas son indeseables en los productos acabados de petróleo, ya que los dobles enlaces son reactivos y los compuestos se oxidan y polimerizan fácilmente (Handwerk & Gary, 1980).

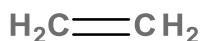


Figura 2.3: Etileno (hidrocarburo alifático no saturado)

2.2.3 Hidrocarburos Nafténicos

Son hidrocarburos cicloparafínicos en los que todos los enlaces disponibles de los átomos de carbono están saturados con hidrógeno (Handwerk & Gary, 1980). Estas moléculas tienen 5 y más, átomos de carbono de longitud (Hyne, 2001). Su denominación es la misma de los parafínicos, anteponiendo el prefijo ciclo; tales como el Ciclopentano (C_5H_{10}), el 1, 2 - Dimetilciclopentano (C_7H_{14}), el ciclohexano (C_6H_{12}), o el Metilciclohexano (C_7H_{14}); (ver Figura 2.4) (Handwerk & Gary, 1980).

Los crudos con alto contenido de naftenos tienden a tener un porcentaje elevado de asfaltos, lo cual reduce el valor comercial de ese crudo; por lo general se busca obtener mayor cantidad de gasolinas como productos terminados de una refinería en lugar de asfaltos. Los asfaltos son hidrocarburos que contienen desde 40 a más de 60 átomos de carbono y su aspecto varía desde café a negro, sólido o semisólido, a temperatura ambiente (Hyne, 2001).

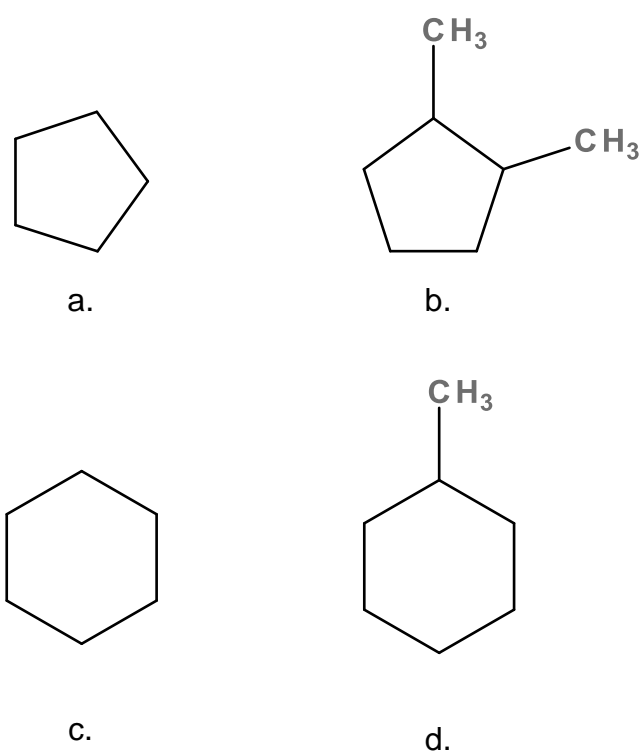


Figura 2.4: a. Ciclopentano; b. 1,2 - Dimetilciclopentano; c. Ciclohexano y d. Metilciclohexano

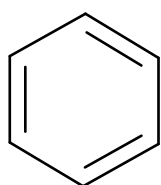
2.2.4 Hidrocarburos Aromáticos e Hidrocarburos Mixtos

Los conforman hidrocarburos cíclicos no saturados, que contienen como base un anillo bencénico (anillo de 6 átomos de carbono con tres dobles enlaces), que es muy estable y se comporta frecuentemente como un compuesto saturado. (Handwerk & Gary, 1980)

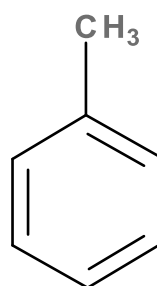
En la refinería, un crudo ricamente aromático produce gasolina de alto octanaje y se convierte en una materia prima valiosa para la industria petroquímica. El crudo normal recién extraído del pozo petrolero, tiene un fuerte olor a gasolina; sin embargo, un crudo rico en aromáticos, tiene un olor afrutado (Hyne, 2001).

Los hidrocarburos aromáticos se encuentran en los crudos en proporciones variables y aquellos de bajo punto de ebullición, en porciones relativamente pequeñas. Su presencia es frecuente en los procesos de craqueo (reformado catalítico), donde mediante catalizadores se obtienen formas bencénicas atractivas por su propiedad antidetonante (Secretaría de Energía República Argentina, 2013) (Paucar, 2011) (Paucar, 2011).

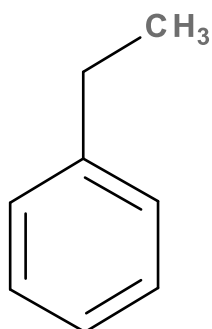
Los hidrocarburos mixtos son el resultado de la adición de cadenas laterales parafínicas, en los hidrocarburos cíclicos, nafténicos o aromáticos, en lugar de alguno de los hidrógenos unidos a los carbonos del anillo; formando una estructura mixta, que posee varias de las características físicas y químicas de ambos de sus compuestos originales, pero que se clasifica acorde al compuesto cíclico original (Handwerk & Gary, 1980) (Paucar, 2011).



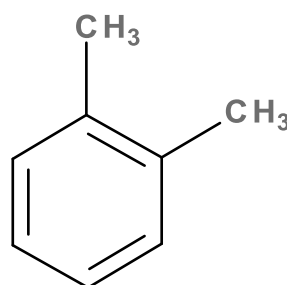
a. Benceno



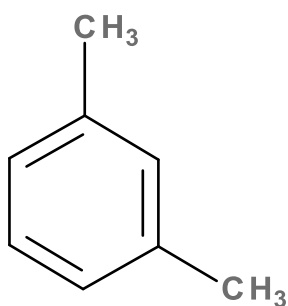
b. Tolueno



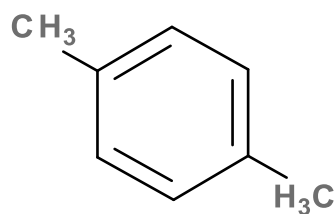
c. Etilbenceno



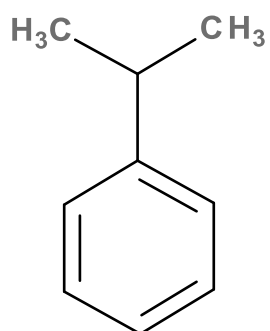
d. Orto-Xileno



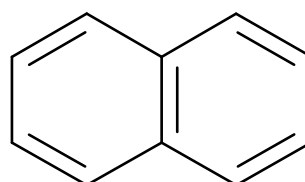
e. Meta-Xileno



f. Para-Xileno



g. Cumeno



h. Naftaleno

Figura 2.5: Compuestos Aromáticos Encontrados en el Petróleo

2.3 Clasificación de Crudos API

La clasificación más empleada para los crudos es aquella que se basa en su Densidad API. API viene de American Petroleum Institute, una institución que estandariza equipo industrial y procedimientos de petróleo (Schifter & López, 1998) (Hyne, 2001). Las unidades de Densidad API son los °API y se calculan con el peso específico mediante la siguiente ecuación (Handwerk & Gary, 1980):

$$^{\circ}API = \left(\frac{141.5}{p. \text{específico}(60^{\circ}F)} \right) - 131.5$$

Ecuación 1

En la Tabla 3 observamos la clasificación de los crudos de petróleo de acuerdo a su Densidad API.

Tabla 3: Clasificación de Crudos según su Densidad API (Schifter & López, 1998)

Tipo de Crudo	Densidad API
Ligeros	> 30 grados
Intermedios	20 – 30 grados
Pesados	10 – 20 grados

Los crudos ligeros son bastante fluidos, generalmente transparentes, ricos en fracciones ligeras como la gasolina y los más valiosos comercialmente. Los crudos pesados son viscosos, de color oscuro, contienen cantidades considerables de asfalto y son menos valiosos (Schifter & López, 1998) (Hyne, 2001). Mientras más pesado sea el crudo (baja densidad API), su proceso de refinación y transformación de moléculas requiere de procedimientos más

complejos y costosos, es por ello que su precio comercial es menor que el de un crudo ligero (Schifter & López, 1998).

2.4 Principales Productos del Petróleo, Refinación

Generalmente, tal y como se extrae de los pozos, el petróleo no se utiliza como material energético pues requiere de altas temperaturas para arder. Para poder aprovecharlo como energético, es necesario separarlo en diferentes fracciones que constituyen los combustibles como la gasolina, el diésel, el jet fuel, entre otros (Chow Pangtay, 1996). En las refinerías petroleras, estas separaciones se efectúan generalmente en dos etapas: la destilación atmosférica y la destilación al vacío (Paucar, 2011).

Durante el proceso de refinación, varios componentes del crudo de petróleo son separados tomando como principio sus diferentes puntos de ebullición. En general, mientras más grande es la molécula de hidrocarburo, mayor es su punto de ebullición (Hyne, 2001).

Un estudio realizado por el American Petroleum Institute (API), reveló que se fabrican por encima de 2000 productos derivados del crudo de petróleo en las refinerías y plantas petroquímicas de los Estados Unidos (Handwerk & Gary, 1980).

2.4.1 Tratamiento Preliminar a la Destilación

El petróleo crudo no se extrae en estado puro, viene acompañado de gas, metales pesados, azufre e incluso sal y otras impurezas (Poveda, y otros, 2013). El gas contenido se separa con la ayuda de una trampa de gas, el agua que fluye en

el crudo de forma libre se separa en depósitos cúbicos abiertos, por decantación y precipitación; y el agua emulsionada, altamente corrosiva por ser salina, se somete a desalinización, un proceso físico de separación de fases con la ayuda de campos eléctricos. Antes de ingresar a los procesos de destilación, el crudo debe presentar un contenido de sal inferior a 6 libras por cada 1000 barriles de petróleo; así como de 1.2 - 3% de agua y sedimentos (Paucar, 2011).

2.4.2 Destilación Atmosférica

Posterior al tratamiento preliminar, el petróleo crudo pasa a un horno donde se calienta a temperaturas de hasta 350 °C y entra en forma de vapor a la columna de destilación atmosférica^{IV} (Poveda, y otros, 2013). Aquí los vapores suben a través de pisos o compartimientos llamados platos de burbujas, ubicados a diferentes alturas y temperaturas, que impiden el paso de los líquidos de un nivel a otro. Al ascender por los pisos los vapores se van enfriando, se condensan en distintas fracciones, y el líquido se extrae mediante salidas laterales. Cada líquido removido por enfriamiento recibe el nombre de corte de petróleo (Chow Pangtay, 1996) (Hyne, 2001) (Poveda, y otros, 2013).

Los hidrocarburos más livianos o volátiles, como los gases, se ubican en la parte superior de la columna de destilación, los demás quedan como líquidos en varios puntos de la columna y en el fondo de la misma se deposita el residuo o crudo de cabeza; es decir, la parte pesada del petróleo, de punto de ebullición más alto,

^{IV} En la columna de destilación atmosférica se destila sin presión, por lo que solo se pueden separar sin descomponerse los hidrocarburos que contienen de 1 a 20 átomos de carbono aproximadamente (Chow Pangtay, 1996).

que no pudo dividirse en la primera fase bajo las condiciones de temperatura y presión existentes (Poveda, y otros, 2013) (Handwerk & Gary, 1980) (Paucar, 2011).

En la Figura 2.6 se presentan los cortes que generalmente se producen en la unidad de destilación atmosférica, en orden creciente de punto de ebullición, de arriba hacia abajo.

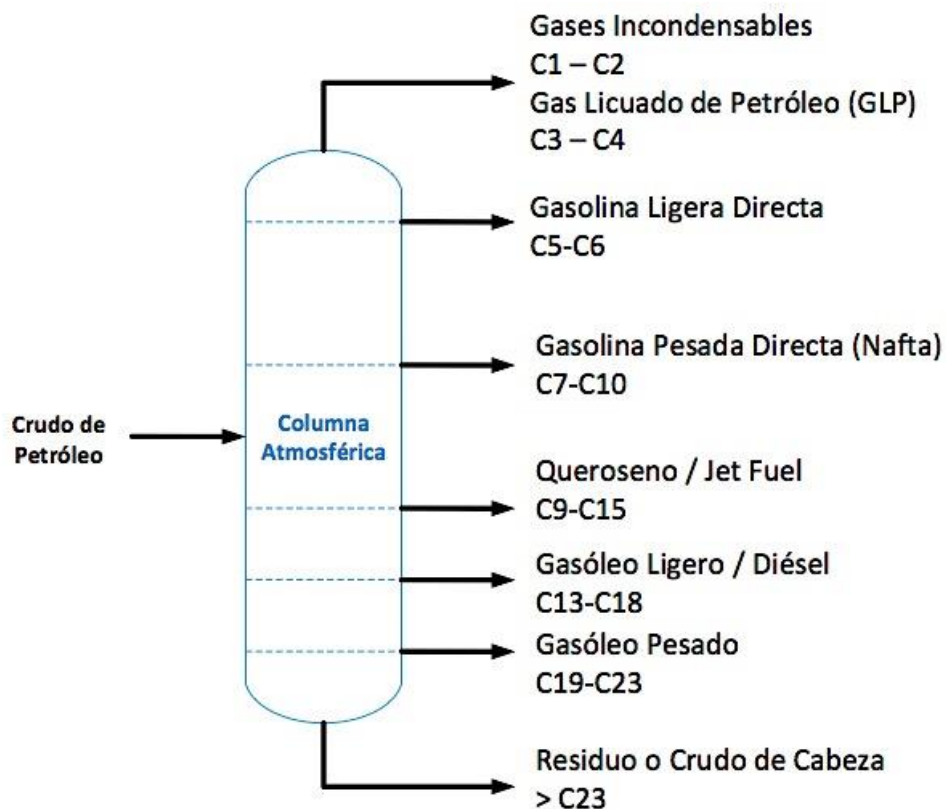


Figura 2.6: Cortes de Petróleo Producidos en la Unidad de Destilación Atmosférica (Chow Pangtay, 1996) (SIEMENS, 2007)

- Los gases incondensables o gas seco ($C_1 - C_2$) y el gas licuado de petróleo o gas mojado ($C_3 - C_4$) se encuentran disueltos en el crudo que entra a la destilación primaria; sin embargo suelen ser eliminados al máximo en las

torres de despunte (estabilizador^V) que se encuentran antes de precalentar el crudo para las torres de fraccionamiento (SIEMENS, 2007) (Chow Pangtay, 1996).

- La gasolina ligera directa (LSR) es desulfurizada y usada en la mezcla de gasolinas finales o procesada en una unidad de isomerización para mejorar el número de octano antes del mezclado (SIEMENS, 2007).
- La nafta es usada como materia prima del Reformador Catalítico para producir gasolina de alto octanaje y recuperar aromáticos (SIEMENS, 2007).

Las gasolinas obtenidas en la destilación atmosférica presentan octanajes bajos, entre cincuenta y sesenta octanos; estos índices de octano son demasiados bajos para los motores modernos de combustión interna, por lo que requieren de reactores que modifican químicamente las moléculas de las gasolinas para convertirlas en otras de mayor octanaje (Chow Pangtay, 1996) (Poveda, y otros, 2013). Estos reactores son conocidos como unidades FCC (Fluid Catalytic Cracking) y CCR (Continuous Catalyst Regeneration), su función es reducir el contenido de azufre y mejorar la calidad del gas y las gasolinas (Poveda, y otros, 2013) (EMERSON Process Management, 2013).

- La fracción denominada kerosina es tratada y luego se envía a una piscina de mezclado para su comercialización como queroseno; se utiliza además para producir combustible de avión o Jet Fuel (Paucar, 2011) (SIEMENS, 2007).
- Del gasóleo ligero, luego de ser tratado, se obtiene el combustible para motores a diésel (Chow Pangtay, 1996).

^V Unidad de fraccionamiento que remueve los butanos (C_4) e hidrocarburos más livianos (SIEMENS, 2007).

- El crudo de cabeza puede considerarse como un producto terminado para su comercialización como Fuel Oil o ser enviado como alimentación a la unidad de destilación por vacío (Paucar, 2011).

2.4.3 Destilación al Vacío

Para recuperar más combustibles del residuo de la destilación primaria, se ingresa el mismo a otra columna de fraccionamiento que trabaja a alto vacío (presiones inferiores a la atmosférica), evitando su descomposición térmica (Chow Pangtay, 1996). Las altas temperaturas necesarias para vaporizar el crudo de cabeza a la presión atmosférica, darían lugar al craqueo térmico^{VI}; lo cual conlleva pérdidas por gas seco, decoloración del producto y contaminación del equipo debido a la formación de coque (Handwerk & Gary, 1980).

La presión se reduce por medio de eyectores de vapor o bombas de vacío, disminuyendo los puntos de ebullición y permitiendo que la destilación se realice a temperaturas más bajas (Paucar, 2011).

En la torre de vacío se obtienen dos fracciones: una de destilados y otra de residuos (Chow Pangtay, 1996). De acuerdo al tipo de crudo que se este procesando, por lo general, se encuentra:

- Destilados: contienen los hidrocarburos que constituyen los aceites lubricantes y las parafinas ($C_{20} - C_{35}$). Aquellos destilados que no se usan como lubricantes se usan como materia prima para combustibles ligeros (gasolina, diésel, kerosene, gasóleo) (Chow Pangtay, 1996).

^{VI} La descomposición térmica o craqueo térmico se refiere a la ruptura de las moléculas de los hidrocarburos (Paucar, 2011).

- Residuos: contienen los hidrocarburos que constituyen el combustóleo pesado ($C_{25} - C_{35}$) y los asfaltos ($> C_{39}$) (Chow Pangtay, 1996). Los residuos son utilizados para pavimentación, calefacción industrial, combustible para calderas termoeléctricas, entre otros (Schifter & López, 1998).

2.5 Motores de Combustión Interna

Los motores de combustión interna trabajan en 4 tiempos: la admisión, la compresión, la explosión y el escape (Chow Pangtay, 1996).

En el primer tiempo, el cigüeñal arrastra hacia abajo el pistón, aspirando dentro del cilindro la mezcla carburante compuesta por aire procedente del carburador y gasolina. En el segundo tiempo se realiza la compresión, el pistón impulsado por el cigüeñal a través de la biela, comprime fuertemente la mezcla carburante en la cámara de combustión. Para el tercer tiempo se produce una explosión iniciada por la chispa que salta entre los electrodos de la bujía; los gases de combustión se expanden y empujan el pistón nuevamente hacia abajo, esta acción del pistón se traduce en trabajo mecánico mediante el cigüeñal que a su vez mueve las llantas del automóvil y lo hace avanzar. Finalmente en el cuarto tiempo, los gases de combustión escapan hacia el mofle del automóvil cuando el pistón vuelve a subir (Chow Pangtay, 1996). Los 4 tiempos del motor de combustión interna se observan en la Figura 2.7.

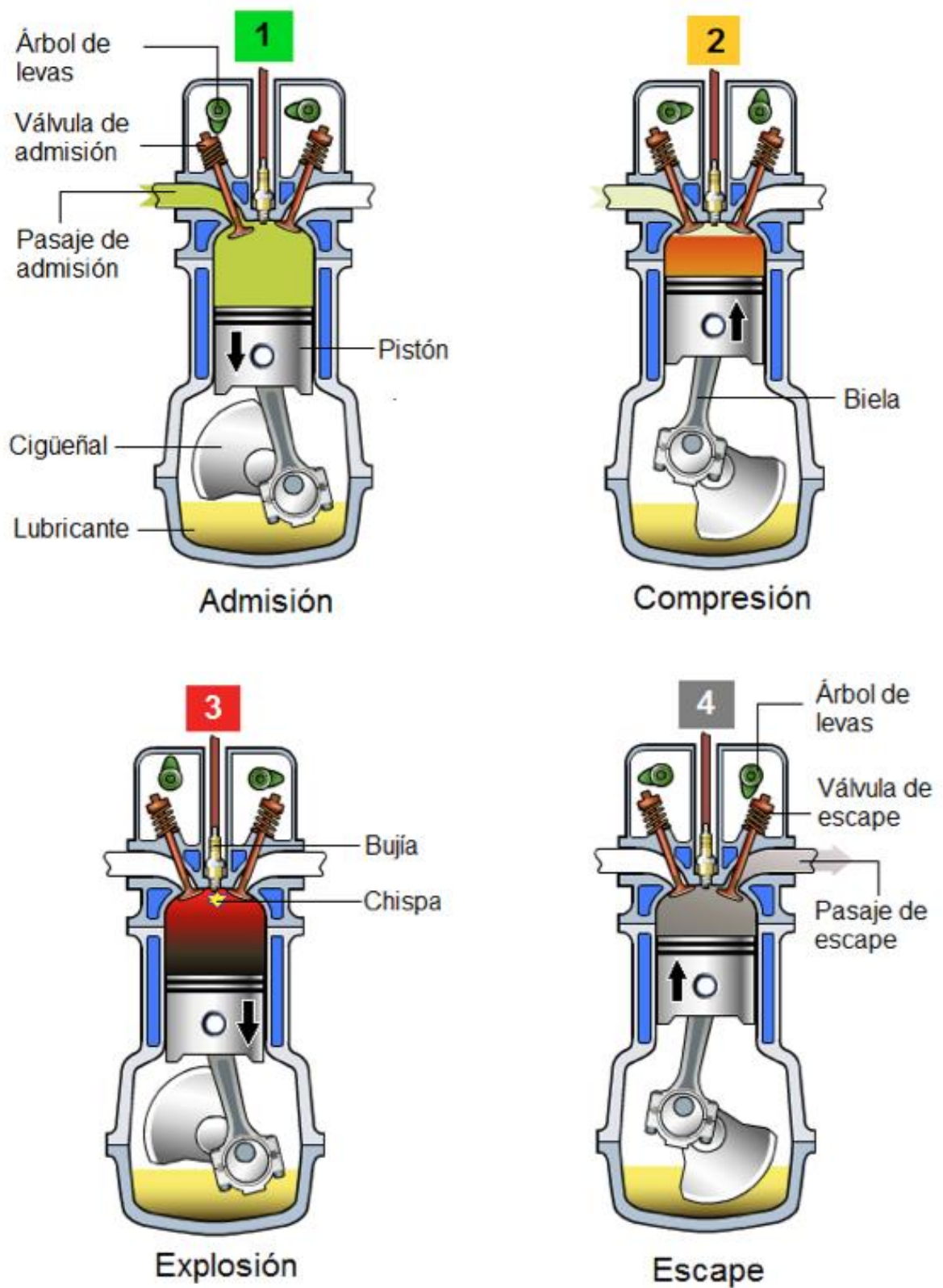


Figura 2.7: Tiempos del Motor de Combustión Interna (Brain, 2014)

La apertura de las válvulas de admisión y escape, así como la producción de la chispa dentro de la cámara de combustión, están reguladas por mecanismos sincronizados en el cigüeñal. Si se observa la Figura 2.7, se advierte que si la explosión dentro del cilindro no se da en el instante correcto, la fuerza explosiva golpea al pistón demasiado rápido y se generan fuerzas intempestivas, que sacuden la máquina y pueden llegar a destruirla. Este fenómeno se conoce como detonación o “cascabeleo” del motor (Chow Pangtay, 1996).

El fenómeno del cascabeleo se observa también cuando el automotor está mal carburado; es decir, cuando la cantidad de aire que se mezcla con la gasolina no esta correctamente regulada. Cuando este no es el caso, el cascabeleo se debe al tipo de gasolina que se está utilizando, a su octanaje (Chow Pangtay, 1996).

2.6 Octanaje

El octanaje se define como una medida de la resistencia a la auto - ignición de la gasolina bajo un incremento de presión. La auto - ignición causa ineficiencias y se conoce también como cascabeleo, debido al sonido producido cuando el combustible se enciende muy temprano en el ciclo de compresión. El cascabeleo (detonación) puede destruir los elementos mecánicos del motor. Mientras menor sea el octanaje, más alta es la probabilidad de que se produzca el cascabeleo (BG Latin America, 2013) (Schifter & López, 1998). Por lo tanto, durante el proceso de refinación del crudo del petróleo, se buscan obtener gasolinas con altos índices de octano.

Los hidrocarburos aromáticos, BTEX, le imparten un alto índice de octano a la gasolina; se forman a través del reformado catalítico de la gasolina natural (benceno, tolueno y xilenos) y a partir de la alquilación del benceno con etileno (etilbenceno) (Chow Pangtay, 1996) (Schifter & López, 1998).

2.6.1 Índice Anticascabeleo:

El cascabeleo o golpeteo se origina por la dirección opuesta de dos frentes de llama: el debido a la explosión anticipada del combustible (por encontrarse a elevada temperatura) y el que produce la bujía. La dirección opuesta de ambos frentes produce las vibraciones (Schifter & López, 1998).

Thomas Midgley Jr., ingeniero mecánico e inventor estadounidense, descubrió que las detonaciones se debían al aumento brusco de la presión una vez que se llevaba a cabo la ignición. El mismo Midgley, luego de experimentar con varios compuestos químicos en los laboratorios de DELCO (Dayton Engineering Laboratories), descubrió para 1921 el Tetraetilo de Plomo^{VII}; un líquido con capacidad antidetonante apropiado como aditivo en los motores a combustión, ya que aumentaba la compresión sin riesgo de explosión. Posteriormente con el fin de comercializarlo y de evitar el rechazo ambiental, la General Motors la llamo "Etil Gasolina" (Schifter & López, 1998) (Cuaderno de la Cultura Científica, 2014) (Biografías y Vidas, 2004).

^{VII} Cerca de 50 años de investigación han propuesto, que el TEP $(C_2H_5)_4Pb$, funciona produciendo partículas minúsculas de óxidos de plomo, sobre cuyas superficies se interrumpen ciertas cadenas de reacciones (Altamirano Sánchez & Fernández Villagómez, 2001).

Para 1926, Graham Edgar, investigó la tendencia al cascabeleo de compuestos similares a la gasolina y concluyó que, el Iso – octano (2, 4, 4, trimetil – pentano) no producía cascabeleo, bajo cualquier condición de operación, mientras que el n – heptano siempre lo producía. Mezclando Iso – octano y n – heptano en diferentes cantidades, Graham obtuvo gasolinas de diversos porcentajes, siendo el porcentaje de Iso – octano en la mezcla el “Número de octano” (Howard, 2000).

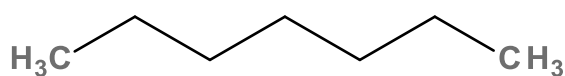


Figura 2.8: Heptano

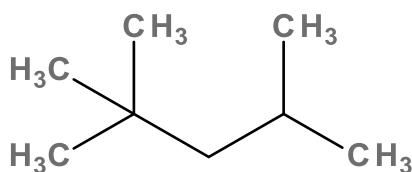


Figura 2.9: Iso - octano / 2, 2, 4 trimetil - pentano

Así, por ejemplo, si una gasolina tiene características detonantes similares a las de una mezcla de 90% de Iso-octano y 10% de heptano, se le asigna un índice de octano de 90 (Chow Pangtay, 1996). Esto no significa que la gasolina analizada contiene esos hidrocarburos en aquella proporción, sino solamente la misma resistencia a la auto-ignición que esa mezcla experimental (BG Latin America, 2013).

Existen dos tipos de número de octano para los motores de gasolina: el determinado por el “Método del motor” (Motor Octane Number, MON) y el determinado por el “Método de Investigación” (Research Octane Number, RON).

Ambos métodos emplean el mismo ensayo básico del motor, pero operan bajo condiciones diferentes (Handwerk & Gary, 1980).

En los años treinta se observó que no era posible relacionar los resultados obtenidos en el laboratorio, con aquellos obtenidos para el automóvil en carretera o los que resultaban del manejo en la ciudad, donde las condiciones son sumamente diferentes (Schifter & López, 1998). El RON relaciona la habilidad antidetonante del motor conducido a baja velocidad, cuando la aceleración es relativamente frecuente y la carga no es elevada. Si el RON es muy bajo, se darán cascabeleos al apagar el motor. Por otro lado, el MON relaciona la capacidad antidetonante del motor cuando está sujeto a altas velocidades o condiciones de elevada carga; así como también condiciones severas de manejo; por ejemplo, subir por caminos empinados o adelantar autos. (Schifter & López, 1998) (Handwerk & Gary, 1980).

Hasta los años sesenta predominó el “Método RON”, por ser el más cercano al octano necesario para los autos y carreteras disponibles. Hoy en día, la gasolina se especifica por el “Índice anticascabeleo” que presenta la siguiente fórmula:

$$\text{Índice anticascabeleo} = \frac{1}{2}(\text{RON} + \text{MON})$$

Ecuación 2 (Schifter & López, 1998)

El número de octano, registrado para una gasolina, es la media aritmética entre el Número de Octano del Motor (MON) y el Número de Octano de Investigación (RON); y por término medio es cuatro unidades inferior al RON (Handwerk & Gary, 1980).

Un factor primordial, que afecta la demanda de octanaje en la ciudad de Quito, es su localización geográfica. La altitud afecta significativamente la demanda de número de octano y para un avance del encendido constante, es alrededor de tres unidades inferior por cada 304.8 metros de altura. En la práctica, sin embargo, el encendido está avanzado para alturas importantes; siendo el efecto neto el reducir el RON de la gasolina, alrededor de tres unidades por cada 1524 metros de altitud (Handwerk & Gary, 1980).

La tabla presentada a continuación contiene algunos efectos generales, sobre el número de octano, debido a diferentes variables:

Tabla 4: Efectos de variables sobre la demanda de octanaje (Handwerk & Gary, 1980)

Variable	Efecto sobre la demanda de octanaje
Altitud	-3 RON por 304.8 metros de incremento en la altitud
Humedad	-0.5 RON para un incremento del 10% en la humedad relativa a $\approx 21^{\circ}\text{C}$
Velocidad del motor	-1 RON para un incremento de 300 rpm
Temperatura del aire	+1 RON por cada $\approx 11^{\circ}\text{C}$ de aumento
Avance del encendido	+1.5 RON por 1° de avance
Temperatura del refrigerante	+1 RON por cada $\approx 6^{\circ}\text{C}$ de aumento
Depósitos en la cámara de combustión	+1 a 2 RON de 1600 Km. a 9600 Km.

2.6.2 Sensibilidad del Combustible

La diferencia numérica entre los valores del RON y el MON se conoce como la “Sensibilidad del Combustible” e indica la capacidad que tiene la gasolina para

soportar cambios en la severidad de las condiciones de operación, sin alterar la capacidad antidetonante. (Schifter & López, 1998) (Handwerk & Gary, 1980)

Para una mejor comprensión sobre la “Sensibilidad de un Combustible”, en la Figura 2.10 presentada a continuación, observamos el número de octano en función de la severidad del motor. Se presentan 3 combustibles (A, B y C) con diferentes MON, RON e Índice Anticascabeleo.

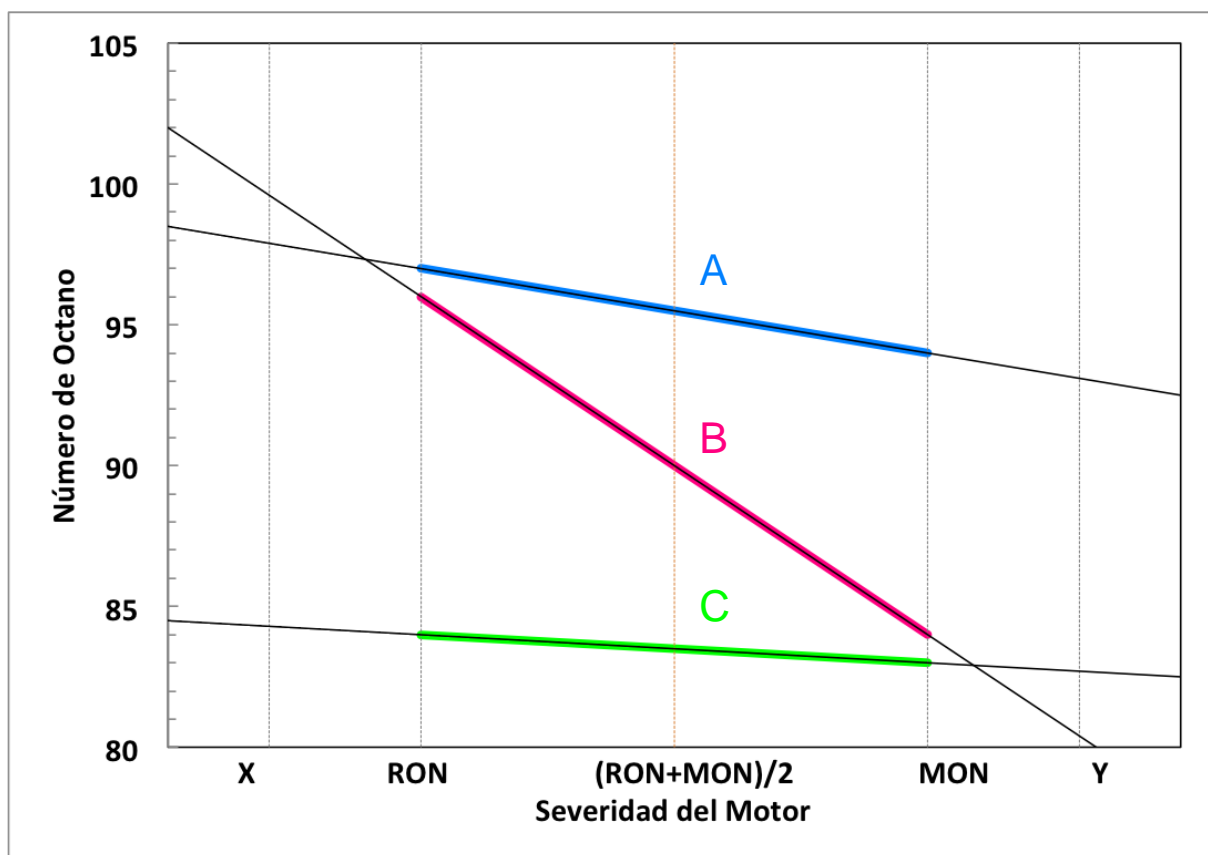


Figura 2.10: Calidad de Octano en Función de la Severidad de la Máquina
(Schifter & López, 1998)

Tabla 5: Ejemplificación de la Sensibilidad de un Combustible pertinente a la Figura 2.10

Parámetro	Combustible A	Combustible B	Combustible C
RON	97	96	84
MON	94	84	83
Índice Anticascabeleo	95.5	90	83.5
Sensibilidad	3	12	1

En la Tabla 5 y la Figura 2.10, se observa que bajo una severidad X del motor el Carburante B, se comporta de mejor manera que el A, a pesar de tener menores RON y MON. De la misma manera, si el motor opera bajo una severidad Y, el Carburante C se comporta mejor que el B, a pesar de tener, como en el otro caso, menores RON y MON. Pero en los niveles de severidad que ocurren en la mayoría de los vehículos, representado por el Índice Anticascabeleo, el Carburante A es mejor que el B y a su vez este, mejor que el C (Schifter & López, 1998).

Existen compuestos que superan las características antidetonantes del iso-octano, octanaje >100. En estos casos el octanaje se calcula midiendo los mililitros/galón de TEP necesarios por el iso-octano puro, para igualar el desempeño de aquel compuesto o mezcla en cuestión, para ello se utiliza la Ecuación 3 (Altamirano Sánchez & Fernández Villagómez, 2001).

$$OCT = 100 + \frac{1 + 0.736(TEP) - \sqrt{1 + 1.472(TEP) - 0.035216(TEP)^2}}{0.0204(TEP)}$$

Ecuación 3

Donde OCT es el octanaje y (TEP) representa los mililitros de tetraetilo de plomo adicionados por cada galón de iso-octano.

2.7 Gasolina

Las gasolinas son una mezcla compleja de hidrocarburos que presentan un intervalo de ebullición entre 40 - 200 °C y se usan como combustible para motores de combustión interna (Altamirano Sánchez & Fernández Villagómez, 2001) (Handwerk & Gary, 1980). Las refinerías ecuatorianas producen gasolinas de dos categorías, Súper y Extra (Poveda, y otros, 2013).

Los constituyentes de la gasolina comercial se mezclan para proporcionar una elevada calidad antidetonante, un fácil arranque, un rápido calentamiento del motor, una baja tendencia a las bolsas de vapor y una baja formación de contenidos en el motor; para esto se requiere de antioxidantes, desactivadores de metal, agentes anti-atascantes y productos químicos antidetonantes. Sin embargo, para la obtención de gasolina comercial de motor, los componentes pueden limitarse a la gasolina ligera del primer destilado, el reformado catalítico, la gasolina craqueada catalíticamente, gasolina hidrogenada, el polímero de alquilato y el n-butano (Handwerk & Gary, 1980).

2.8 Procesos Industriales para Obtener Gasolina

La gasolina comercial es un producto sintético. Los crudos tienen un máximo de 25 - 30% de gasolina natural con bajos índices de octano (< 60 octanos). El porcentaje restante de crudo, que no es apto para producir gasolina; lo es porque en su composición no cuenta con suficientes átomos de carbono por molécula (<

C_5), o porque cuenta con demasiados ($> C_{10}$); o incluso porque cumple con el número necesario de carbonos, pero sus moléculas están en forma lineal y no ramificada (Chow Pangtay, 1996).

La cantidad y calidad insuficiente de gasolinas contenidas en el crudo, se resuelve transformando a través de diversos procesos los cortes del crudo; reestructurando así las moléculas originales en moléculas útiles para ser quemadas en los automóviles (Schifter & López, 1998).

En los laboratorios de la General Motors, se investigó cuales hidrocarburos se quemaban sin producir detonaciones indeseables. Se determinó que los hidrocarburos aromáticos eran los más resistentes y las parafinas los menos resistentes. También se observó que los alcoholes prevenían la detonación (Schifter & López, 1998).

- **Procesos para hacer más gasolina**

Existen procesos para hacer más gasolina y procesos para mejorar la gasolina natural; los primeros son la desintegración térmica, la desintegración catalítica y la alquilación (Chow Pangtay, 1996).

2.8.1 Craqueo Térmico

Este proceso utiliza básicamente presión y temperatura altas para romper las moléculas. Las fracciones de alimentación, materia prima de este proceso, pueden ser gasolinas pesadas hasta gasóleos pesados (Chow Pangtay, 1996).

Produce hidrocarburos que se caracterizan por tener dobles enlaces entre sus moléculas, las olefinas, que son muy reactivas. Estas olefinas, cuando tienen entre 5 y 9 átomos de carbono, y se incorporan a las gasolinas, ayudan a subir el índice de octano. Sin embargo, como son reactivas, al polimerizarse forman gomas que perjudican a los motores; en las mezclas de gasolinas donde se utilizan fracciones con alto contenido de olefinas se debe agregar aditivos que inhiban la formación de gomas. También se producen olefinas ligeras como el etileno, propileno, buteno, butadieno, penteno e isopropeno (Chow Pangtay, 1996).

Los procesos de craqueo catalítico han reemplazado casi por completo el craqueo térmico, debido a que se producen mayor cantidad de gasolinas de mayor octanaje y menos aceites pesados y gases no saturados (Handwerk & Gary, 1980).

2.8.2 Craqueo Catalítico

El craqueo o desintegración catalítica, es el proceso más importante y utilizado de la refinería, para la conversión de aceites pesados en gasolina valiosa comercialmente y productos más ligeros (Handwerk & Gary, 1980).

Este proceso utiliza temperatura y presión para romper los hidrocarburos de cadena larga, que componen el gasóleo pesado ($C_{14}\sim C_{20}$). Sin embargo, a diferencia de la desintegración térmica, las presiones y temperaturas son menores, debido a compuestos químicos denominados catalizadores (Chow Pangtay, 1996) (Schifter & López, 1998).

Los catalizadores permiten bajar la temperatura y presión del proceso, aumentar la velocidad de reacción y direccionar la reacción para la formación de un tipo específico de hidrocarburos (Chow Pangtay, 1996).

Las gasolinas obtenidas en este proceso contienen hidrocarburos altamente ramificados, alrededor de 30% de aromáticos y de 20 - 30% de olefinas. Estas moléculas contenidas en la fracción de la gasolina le confieren un alto índice de octano. Otros productos de este proceso son el iso-butano, etileno, propileno y butenos; así como diésel, kerosina y productos más pesados (Chow Pangtay, 1996) (Schifter & López, 1998). También se produce coque (carbón), que se ubica sobre las partículas del catalizador más que en los productos líquidos residuales, rebajando su actividad (Paucar, 2011)

Los procesos de craqueo catalítico se pueden clasificar en unidades de lecho móvil Thermofor (TCC) o lecho fluidizado (FCC). La Refinería de Esmeraldas utiliza la unidad FCC (Handwerk & Gary, 1980) (Paucar, 2011).

Tabla 6: Propiedades y Destino de los Productos del Craqueo Catalítico (Schifter & López, 1998)

Producto	Propiedades	Destino
Coque	Disminuye la actividad del catalizador	Consumido en el proceso
C ₂ y ligeros	Gas Combustible	-
Propileno	Olefínico	Carga de Alquilación, Petroquímicos
Propano	Gas Combustible	Venta de propano
Butileno	Olefínico	Carga de Alquilación
Iso-butano	Gas	Carga de Alquilación
Butano	93 RON, 92 MON, 51.6 RVP	Mezclado de gasolinas

> C ₅ (gasolinas)	92-99 RON, 78-85 MON	Mezclado de gasolinas
Aceite cíclico ligero	Bajo índice de cetano	Combustible destilado
Aceite cíclico pesado	Densidad API muy baja (-5 a 10 °API)	Combustóleo Residual, reciclado, carga de coquización ^{VIII}

Las olefinas gaseosas producidas en los procesos de craqueo, forman también parte de la materia prima para hacer más gasolina. Como tienen de 2 a 4 átomos de carbono, necesitan de procesos que unan las moléculas hasta alcanzar los carbonos necesarios. Estos procesos de síntesis se conocen como polimerización y alquilación (Chow Pangtay, 1996).

2.8.3 Alquilación

En términos de refinación de petróleo, la alquilación^{IX} se refiere a la reacción de olefinas de bajo peso molecular (etileno, propileno, buteno) con una isoparafina (isobutano) en presencia de un catalizador, para producir isoparafinas de mayor peso molecular (Chow Pangtay, 1996) (Handwerk & Gary, 1980).

La mayor parte de los productos de la alquilación, pueden incluirse en el rango de ebullición de la gasolina, con números de octano de 88 - 94 MON y 94 - 99 RON. El alto número de octano se debe a las ramificaciones de los hidrocarburos que la conforman. Por lo general, la gasolina de alquilación, también se usa para hacer

^{VIII} La coquización retardada, puede considerarse como un proceso de craqueo térmico en el cual uno de los productos finales es el carbón (Handwerk & Gary, 1980).

^{IX} Cuando no hablamos de petróleo, la adición de un grupo alquilo a cualquier compuesto, es una reacción de alquilación (Handwerk & Gary, 1980).

gasavión, combustible que utilizan las avionetas con motores a pistón (Handwerk & Gary, 1980) (Chow Pangtay, 1996).

Los procesos de alquilación emplean por lo general ácido fluorhídrico y ácido sulfúrico como catalizadores. En las reacciones participan solo isoparafinas con átomos de carbono terciarios, como el isobutano o el isopentano. Sin embargo, se utiliza solamente isobutano, pues el isopentano tiene un octanaje suficientemente alto y presión de vapor baja, para mezclarse directamente con las gasolinas (Handwerk & Gary, 1980).

En la Figura 2.11 y la Figura 2.12 se pueden observar las principales reacciones que tienen lugar en la alquilación.

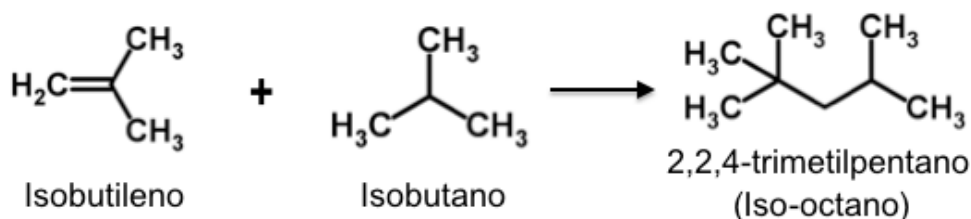


Figura 2.11: Reacción de Alquilación para producir Iso-octano (Handwerk & Gary, 1980) (ChemSpider, 2014)

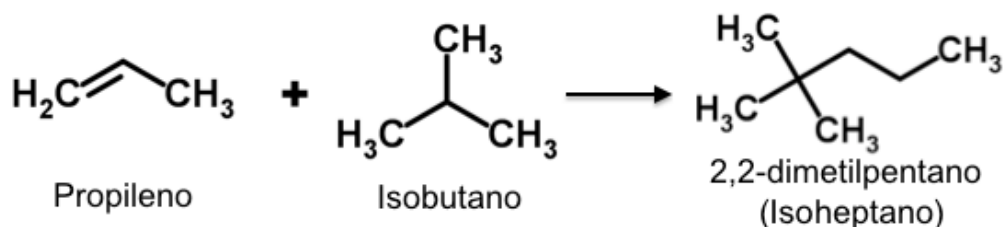


Figura 2.12: Reacción de Alquilación para producir Iso-heptano (Handwerk & Gary, 1980) (ChemSpider, 2014)

- **Procesos para mejorar la gasolina natural**

La gasolina natural o de primera destilación, está compuesta por el número adecuado de carbonos, pero la forma en que están colocados dentro de la molécula no le otorga un buen octanaje. Existen dos procesos para mejorar la calidad de esta gasolina: el reformado catalítico y la isomerización, ambos requieren de catalizadores (Chow Pangtay, 1996).

2.8.4 Reformado Catalítico

En el reformado catalítico, no existe un cambio significativo en el punto de ebullición de las materias que atraviesan la unidad; las moléculas hidrocarbonadas no se craquean, pero su estructura se reordena para formar aromáticos de mayor octanaje (Handwerk & Gary, 1980).

La materia prima utilizada para el proceso de reformado catalítico es la nafta (gasolina pesada directa) (Handwerk & Gary, 1980). En la Tabla 7 se pueden observar los porcentajes en volumen de hidrocarburos alimentados y productos obtenidos.

Tabla 7: Materias Primas y Productos del Reformado Catalítico (Handwerk & Gary, 1980) (Schifter & López, 1998)

Componente	% Volumen	
	Alimentación	Producto
Parafinas	45 - 55	30 - 50
Olefinas	0 - 2	0
Naftenos	30 - 40	5 - 10
Aromáticos	5 - 10	45 - 60

Las reacciones deseadas en un reformador catalítico conducen a la formación de aromáticos o isoparafinas (Handwerk & Gary, 1980):

- a. Las parafinas se isomerizan y en cierto grado se convierten en naftenos. Los naftenos se convierten seguidamente en aromáticos.
- b. Las olefinas se saturan para formar parafinas, que luego reaccionan como en a.
- c. Los naftenos se convierten en aromáticos.
- d. Los aromáticos permanecen prácticamente sin cambio.

Las reacciones indeseadas en el reformado catalítico son (Handwerk & Gary, 1980):

- i. La desalquilación de cadenas laterales sobre naftenos y aromáticos para formar butanos y parafinas más ligeras.
- ii. Craqueo de parafinas y naftenos para formar butano y parafinas más ligeras.

Existen 4 reacciones principales que tienen lugar durante el reformado catalítico: deshidrogenación de naftenos a aromáticos (Figura 2.13), deshidrociclación de parafinas a aromáticos (Figura 2.14), isomerización (Figura 2.15) y craqueo con hidrógeno (Figura 2.16) (Handwerk & Gary, 1980).

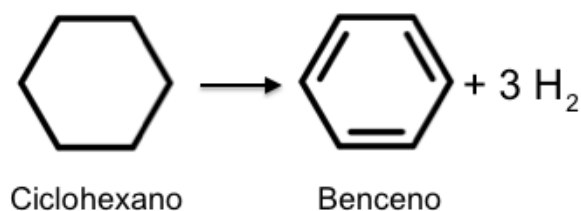


Figura 2.13: Reacción de Deshidrogenación de Naftenos a Aromáticos (Schifter & López, 1998) (ChemSpider, 2014)

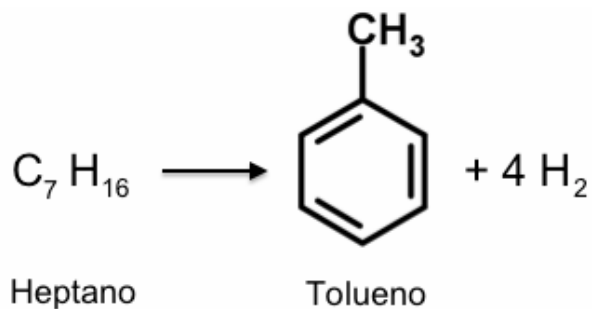


Figura 2.14: Reacción de Deshidrociclación de Parafinas a Aromáticos
(Handwerk & Gary, 1980) (ChemSpider, 2014)

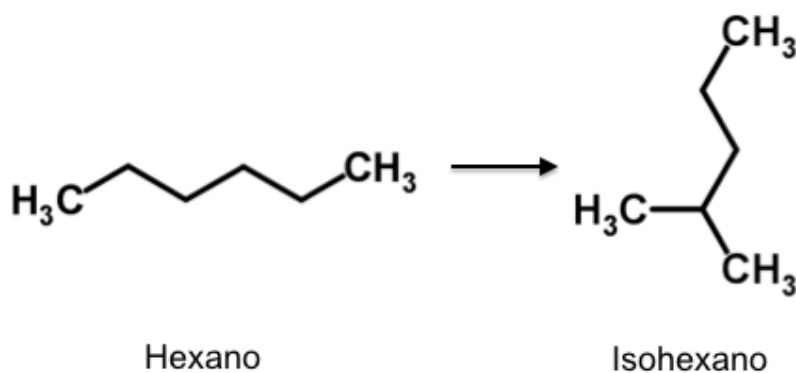


Figura 2.15: Reacción de Isomerización (Handwerk & Gary, 1980) (ChemSpider, 2014)

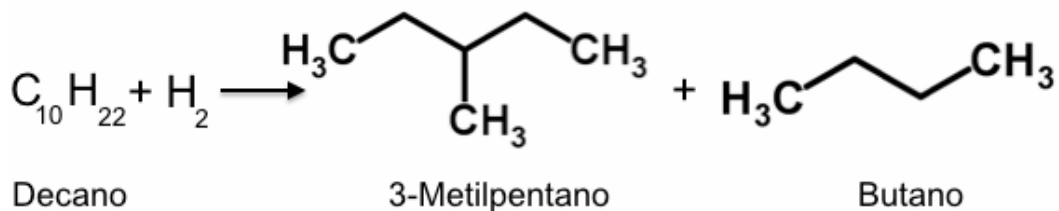


Figura 2.16: Reacción de Craqueo con Hidrógeno (Handwerk & Gary, 1980)
(ChemSpider, 2014)

2.8.5 Isomerización

El proceso de isomerización convierte las moléculas de cadena lineal en hidrocarburos isómeros de cadenas ramificadas, en presencia de un catalizador. La materia prima para este proceso es la gasolina procedente de la destilación atmosférica (Schifter & López, 1998) (Chow Pangtay, 1996).

El producto es gasolina de alto octanaje debida a las ramificaciones. Por ejemplo, el heptano, de cadena lineal, presenta un índice de octano de cero. Sin embargo, su isómero, el isoheptano, presenta un octanaje de 110 (Chow Pangtay, 1996).

Uno de los productos más importantes de la isomerización es el isobutano, que sirve como reactivo limitante para la alquilación (Schifter & López, 1998).

2.9 Contexto Ecuatoriano de Producción de Derivados del Petróleo

El Ecuador tiene tres complejos de producción de derivados: la Refinería de Esmeraldas, la Refinería de La Libertad y el Complejo Industrial Shushufindi, que agrupa a la Refinería Amazonas y la planta de procesamiento de gas asociado. Además cuenta con una pequeña planta de procesamiento de 1000 bpd (barriles por día) en Lago Agrio (Poveda, y otros, 2013).

Tabla 8: Capacidad de Refinación de Crudo en el Ecuador (Poveda, y otros, 2013)

Unidad de Refinación	Capacidad Operativa Instalada (bpd)	Capacidad Operativa a Marzo de 2013 (bpd)
Refinería de Esmeraldas	110 000	50 806
Refinería La Libertad	45 000	45 355

Complejo Industrial Shushufindi ^X	20 000	20 890
Total	175 000	117 051

Los productos derivados de petróleo de cada complejo de refinación en el Ecuador se muestran en la Tabla 9.

Tabla 9: Productos Derivados de Petróleo Producidos en Ecuador (Poveda, y otros, 2013)

Unidad de Refinación	Productos Derivados de Petróleo Producidos
Refinería de Esmeraldas	GLP
	Gasolina 87 octanos
	Gasolina 92 octanos
	Combustible para motores de dos tiempos
	Jet fuel A-1
	Diésel premium
	Diésel 2
	Fuel oil 4
	Fuel oil base (residuo)
	Asfalto RC-250
	Cemento asfáltico AC-20
	Fuel oil de exportación
Refinería La Libertad	GLP
	Rubber solvent
	Gasolina 87 octanos
	Gasolina 92 octanos
	Combustible para motores de dos tiempos
	Mineral turpentine
	Jet fuel A-1
	Diésel 1
	Diésel 2
	Spray oil
	Absorver oil
	Fuel oil 4

^X El Complejo Industrial Shushufindi comprende además, una capacidad operativa de captación de gas de 25000 millones de pies cúbicos por día (Poveda, et al., 2013).

Complejo Industrial Shushufindi	Gas natural procesado (MMSCF)
	GLP
	Gasolina 87 octanos
	Jet fuel A-1
	Diésel 1
	Diésel 2
	Residuo

El transporte de crudo producido en la Región Amazónica se realiza mediante oleoductos; mientras que los derivados para el consumo interno, se transportan desde las refinerías por el Sistema Nacional de Poliductos, hasta los centros de despacho y, de ahí, a las comercializadoras (Poveda, y otros, 2013).

Este estudio se centra en los derivados (gasolinas), presentes en el Distrito Metropolitano de Quito, los cuales son abastecidos desde la Refinería de Esmeraldas. En la Tabla 10 se pueden observar las características de los poliductos ecuatorianos (Poveda, y otros, 2013).

Tabla 10: Poliductos Ecuatorianos

Poliducto	Extensión (Km)	Diámetro (in)	Capacidad de transporte (bpd)	Productos transportados
Esmeraldas-Santo Domingo- Quito	252.9	16 y 12	48 000	Gasolinas súper y extra, diésel, destilado 1, diésel premium, jet fuel
Shushufindi-Oyambaro- Quito	305	6 y 4	10 815	GLP, nafta base, destilado 1, diésel 2, jet fuel
Quito - Ambato	111	6	11 700	Gasolina extra, diésel, destilado 1
Santo Domingo-Pascuales	247	10	38 400	Gasolinas súper y extra, diésel, diésel 2, jet fuel

Libertad-Pascuales	128	10	21 600	Gasolina súper, nafta, diésel destilado 1, jet fuel
Libertad-Manta	170	6	8 400	Gasolina extra, diésel, destilado 1
Tres Bocas-Pascuales	20	12	108 000	Nao, gasolinas súper y extra, diésel, destilado 1
Tres Bocas-Fuel Oil	5.6	14	48 000	Fuel oil
Tres Bocas-Salitral	5.5	8 y 6	30 000	GLP

2.9.1 Refinería La Libertad y Complejo Industrial Shushufindi

- **Refinería La Libertad**

Ubicada en la península de Santa Elena, esta refinería está equipada con tres unidades de destilación primaria: la Planta Parson con capacidad para 26 000 bpd, la Planta Universal con capacidad para 10 000 bpd y la Planta Cautivo con capacidad para 9 000 bpd. Procesa un crudo de 28.5 °API (Poveda, y otros, 2013).

Los productos derivados de petróleo obtenidos en la Refinería La Libertad, cubren la mayor parte de la demanda de las provincias de Guayas, El Oro, Manabí, Cañar, Morona Santiago, Azuay, Galápagos y Loja (Poveda, y otros, 2013).

- **Complejo Industrial Shushufindi**

Está ubicado en la provincia de Sucumbíos y lo conforman dos plantas industriales: la Planta de Gas Shushufindi y la Refinería Amazonas. La planta de

gas posee una carga máxima de 25 millones de pies cúbicos de gas asociado y tiene capacidad para producir hasta 500 toneladas métricas por día (tm/día) de GLP y 2 800 bpd de gasolina. El gas que produce se transporta a través del poliducto Shushufindi – Quito de donde se distribuye para el consumo doméstico e industrial. Por su parte, la Refinería Amazonas cuenta con dos unidades de destilación atmosférica con capacidad de 10 000 bpd, cada una.

2.9.2 Refinería de Esmeraldas

En la Tabla 10 se detalla que el principal proveedor de gasolinas para el Distrito Metropolitano de Quito es la Refinería de Esmeraldas, por lo tanto en este estudio se hace énfasis en entender de manera profunda el funcionamiento de esta refinería.

A continuación, en la Tabla 11, se detallan las unidades de proceso que comprenden la Refinería de Esmeraldas.

Tabla 11: Unidades de Proceso de la Refinería de Esmeraldas (Poveda, y otros, 2013)

Unidad de Proceso	Descripción
<p align="center">Unidad de Destilación Atmosférica</p>	<p>Consta de dos unidades de 55 000 bpd de capacidad, cada una. Antes de ingresar a las unidades, el petróleo se somete a desalinización para evitar la corrosión en los equipos de la refinería. Se calienta el petróleo hasta 350 °C e ingresa a las unidades de destilación atmosférica donde se separa en</p>

	distintas fracciones según los diferentes puntos de ebullición.
Unidad de Vacío	Las fracciones de petróleo que sobre los 350 °C se descompone térmicamente, forman el crudo reducido. Este crudo se calienta y se somete a fraccionamiento por presión de vacío donde se separa en gasóleo pesado, gasóleo liviano y fondos de vacío. Los gasóleos se alimentan posteriormente a la unidad FCC.
Unidad Visco – Reductora	Los fondos de vacío poseen alta viscosidad y peso molecular; mediante craqueo térmico, se produce un producto menos viscoso llamado fuel oil. Adicionalmente se obtiene gasolina de mayor valor que la carga.
Unidad de Craqueo Catalítico Fluido FCC - UOP	Consta de una unidad de 18 000 bpd de capacidad. La unidad se alimenta con gasóleo de vacío, se somete a temperaturas de 520 °C y en contacto con el catalizador zeolítico, se transforma en fracciones moleculares más livianas como: gases, GLP, gasolina de alto octanaje, fuel oil, etc.
Unidad Reformadora Semiregenerativa	Consta con una capacidad de 2 780 bpd de capacidad. Procesa nafta procedente de la destilación primaria o atmosférica, esta nafta posee bajo octanaje (53 octanos) y es inadecuada para el uso en automotores. En esta unidad se utiliza un tren de reactores, catalizadores de platino y renio, y altas temperaturas para modificar la estructura molecular de la nafta y obtener compuestos de mayor octanaje.

<p>Hidrodessulfuradora de Diésel - HDS</p>	<p>En esta unidad el diésel se somete a hidrotratamiento y resulta en diésel con bajo contenido en azufre, menor al 0.05% en peso y libre de compuestos nitrogenados. La unidad consta de un reactor de lecho fijo con dos diferentes catalizadores: para hidrogenación selectiva y para hidrodessulfuración de diésel.</p>
<p>Unidad Reformadora Catalítica Continua – CCR</p>	<p>Unidad P1: Hidrotratadora de nafta pesada</p> <p>Tiene una capacidad de 13 000 bpd. Posee un reactor con catalizador bimetálico en lecho fijo. Se obtiene nafta hidrotratada con bajo contenido de contaminantes (azufre, agua, halógenos, olefinas, arsénico y metales), para que no afecten el comportamiento de la sección de reformación catalítica.</p> <p>Unidad P2: Reformadora catalítica</p> <p>Tiene una capacidad de 10 000 bpd, consiste de tres reactores con un lecho móvil de catalizador bimetálico en atmósfera de hidrógeno. Produce un reformado de alto octanaje rico en aromáticos para el pool o grupo de mezcla de gasolina.</p> <p>Unidad P3: Lazo de regeneración</p> <p>Su función es la regeneración continua del catalizador durante la operación de la reformadora.</p>

<p>Procesos Merox</p> <p>El objetivo de estas unidades es mejorar la calidad de las gasolinas y el GLP, a través de la disminución de elementos nocivos como el azufre.</p>	<p>Tratamiento de jet fuel</p> <p>Elimina totalmente el agua que contiene el combustible, elimina gomas y otros compuestos ácidos; para satisfacer las normas de calidad de los combustibles de aviación.</p>
	<p>Tratamiento de gases</p> <p>Los gases contenidos en el petróleo y los procedentes de las unidades de proceso se utilizan como combustible en la refinería, para ello requieren la eliminación de compuestos de azufre y nitrógeno.</p>
	<p>Tratamiento de aguas amargas</p> <p>Las aguas contaminadas procedentes de las diferentes unidades de proceso, se tratan para la eliminación de compuestos de azufre y nitrógeno, para su reutilización o su descarga libres de contaminantes.</p>
<p>Unidad de Recuperación de Azufre</p>	<p>Se obtiene gas sulfhídrico del tratamiento de aguas amargas, tratamiento de gases de refinería y proceso Merox GLP, para producir mediante el proceso Claus, azufre de alta pureza.</p>
<p>Planta Oxidadora de Asfaltos</p>	<p>Mediante un proceso de oxidación, el residuo de vacío y el residuo de las viscoreductoras, produce asfalto. El asfalto se utiliza como recubrimiento impermeabilizante y para fabricar pilas y baterías eléctricas.</p>

Isomerizadora	Es una unidad relativamente nueva de la Refinería de Esmeraldas, introducida en 2007. Su objetivo es transformar la nafta de bajo octano y alto contenido aromático, en nafta de alto octano y bajo contenido aromático. Este proceso reduce la cantidad de nafta importada para la fabricación de gasolinas.
----------------------	---

No existe documentación pública disponible, con respecto a todos los cambios estructurales programados a realizarse en la Refinería de Esmeraldas. La información detallada se maneja solo a niveles gerenciales. Sin embargo, se tuvo acceso a un resumen de los cambios programados, en una entrevista realizada al Ing. Henry Ramírez, director de contenidos públicos e imagen empresarial de Petroecuador. En la entrevista se constató lo siguiente:

Tabla 12: Entrevista al Ing. Henry Ramírez representante de Petroecuador (Ramírez, 2015)

Detalle	Descripción
Paro de la Refinería	Inicio: 12 de Julio de 2014 Días hasta la fecha: 215 Programado hasta: 15 de Septiembre de 2015
Unidades a reemplazarse	Básicamente se reemplazará únicamente la unidad FCC, esto comprende el cambio en el Reactor y en el Regenerador. El motivo del cambio es poder regenerar de manera más eficiente el catalizador y recuperar toda la capacidad de producción de derivados de la Refinería.

<p>Objetivos de los cambios estructurales programados</p>	<p>No se pretende aumentar la capacidad de producción de derivados de la Refinería. La refinería consta con una capacidad de refinación aproximada de 110 000 bpd. Y actualmente procesa 85 000 bpd. Con los cambios estructurales se pretende recuperar de 20 000 a 25 000 bpd de capacidad.</p>
<p>Argumentos de los cambios estructurales</p>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Recuperar la capacidad total de refinación de crudo de la Refinería de Esmeraldas ▪ Cambiar la unidad FCC existente por una de tecnología actual, que se ajuste a las normas ambientales existentes para contenidos de azufre, aromáticos y otros contaminantes ▪ Aumentar la vida útil de la refinería ▪ Procesar el crudo existente en la actualidad, debido a que la refinería fue diseñada para procesar crudo más liviano que el actual
<p>¿Por qué no se pretende aumentar la capacidad de producción y mejorar otras unidades para mejorar la calidad de las gasolinas?</p>	<p>El objetivo de los cambios que se están realizando en la Refinería no es mejorar la calidad de los combustibles. Petroecuador pretende introducir la gasolina Ecopaís en todo el Ecuador, gasolina con etanol, que actualmente se distribuye en Guayaquil desde mediados de 2014.</p> <p>Se pretende en un futuro eliminar la gasolina Extra y ofrecer únicamente Gasolina Súper de 92 octanos y Gasolina Ecopaís de un valor de octano aún no determinado.</p>

Como se observa en la Tabla 8, esta refinería opera muy por debajo de su capacidad instalada; esto se debe a que fue diseñada para procesar crudos

ligeramente livianos (28 °API) y actualmente procesa un crudo semi pesado (23 °API) (Asociación de la Industria Hidrocarburífera del Ecuador AIHE, 2008).

2.10 Benceno, Tolueno, Etilbenceno, Meta - Para - Orto Xilenos y su Toxicología

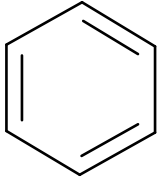
Los BTEX son compuestos orgánicos volátiles pertenecientes a los hidrocarburos aromáticos, que se encuentran como constituyentes de la gasolina comercial (Ramírez Peñaherrera, 2012)

El benceno, tolueno y xilenos son un subproducto de la destilación del petróleo y procesos petroleros como el reformado catalítico y craqueo catalítico; mientras el etilbenceno se forma por la alquilación de etileno con benceno (Chow Pangtay, 1996) (Schifter & López, 1998).

La función de los BTEX en la gasolina comercial es elevar el octanaje, lamentablemente se ha comprobado que estos compuestos presentan riesgos graves e incluso cancerígenos para la salud humana (Chow Pangtay, 1996) (Acevedo García, 2006) (Ramírez Peñaherrera, 2012).

2.10.1 Benceno

Tabla 13: Propiedades Físicas del Benceno (Acevedo García, 2006) (López Blanco, 2005)

Compuesto	Propiedades	Estructura Química
Benceno	<ul style="list-style-type: none"> – Número CAS: 71-43-2 – Apariencia: Líquido incoloro – Fórmula: C_6H_6 – Peso molecular: 78.11 g/mol – Punto de ebullición: 80 °C – Punto de fusión: 5.5 °C – Densidad relativa: 0.8765 ($H_2O = 1$) / 2.7 (<i>Aire</i> = 1) – Presión de vapor: 10 kPa 	

La absorción del benceno tiene lugar por inhalación, por ingestión y por vía cutánea; siendo la inhalación, la ruta de exposición más importante. El efecto tóxico más grave del benceno es su toxicidad en la sangre. La exposición crónica puede provocar daño en la médula ósea, manifestándose como anemia, trombocitopenia, leucemia, o una combinación de estas (Ramírez Peñaherrera, 2012) (Acevedo García, 2006). La EPA ha clasificado al benceno como un carcinógeno humano del Grupo A^{XI} (EPA, 2000).

Efectos tóxicos por inhalación incluyen: alteración en el sistema nervioso central, náuseas, euforia, entumecimiento, somnolencia, vértigo, dolor de cabeza, inconsciencia (Pérez Juárez, 2012) (Ramírez Peñaherrera, 2012).

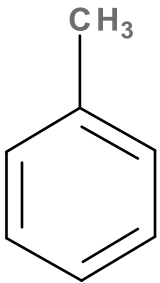
^{XI} En el Grupo A se encuentran los químicos o agentes de los cuales existe suficiente evidencia de que causan cáncer en humanos (GreenFacts, 2015).

Efectos tóxicos por exposición cutánea a vapores de benceno, incluyen: irritación de la piel, ojos y tracto respiratorio (Pérez Juárez, 2012).

Por lo general, una persona puede empezar a detectar el olor del benceno en el aire, cuando está en concentraciones de 1.5 a 4.7 ppm (Ramírez Peñaherrera, 2012).

2.10.2 Tolueno

Tabla 14: Propiedades Físicas del Tolueno (Acevedo García, 2006) (López Blanco, 2005)

Compuesto	Propiedades	Estructura Química
Tolueno	<ul style="list-style-type: none"> – Número CAS: 108-88-3 – Apariencia: Líquido incoloro – Fórmula: C_7H_8 – Peso molecular: 92.13 g/mol – Punto de ebullición: 111 °C – Punto de fusión: -95 °C – Densidad relativa: 0.8660 ($H_2O = 1$) / 3.2 (<i>Aire</i> = 1) – Presión de vapor: 2.9 kPa 	

La principal ruta de exposición a tolueno es la inhalación, aunque se absorbe también rápidamente, en el tracto digestivo, por aguas contaminadas o ingestión accidental. Una vez inhalado se transporta por la sangre a varios tejidos y órganos, afecta principalmente al hígado, riñones y órganos del sistema nervioso central y periférico. El tolueno se acumula, en altos niveles de concentración, en

el tejido adiposo (Pérez Juárez, 2012) (Acevedo García, 2006) (Ramírez Peñaherrera, 2012).

Efectos agudos por inhalación de tolueno provocan la depresión del sistema nervioso central e incluyen: náusea, fatiga, dolor de cabeza, vértigo, descoordinación y arritmia. Efectos más graves incluyen la muerte por hipoxia y paro cardíaco (Trujillo, 2010) (Acevedo García, 2006).

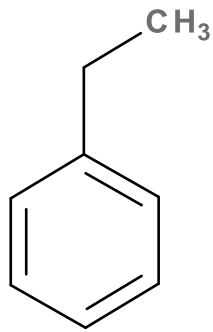
La inhalación crónica de tolueno se traduce en: degeneración neuronal, desordenes de personalidad, insuficiencia hepatorrenal y síndromes gastrointestinales con dolores (Acevedo García, 2006) (Ramírez Peñaherrera, 2012).

La exposición a vapores de tolueno provoca: dermatitis, irritación ocular, irritación del tracto respiratorio y lesiones de la córnea (Pérez Juárez, 2012) (Trujillo, 2010).

Por lo general, una persona empieza a detectar el olor del tolueno, cuando su concentración es de 8 ppm en el aire (Ramírez Peñaherrera, 2012).

2.10.3 Etilbenceno

Tabla 15: Propiedades Físicas del Etilbenceno (Acevedo García, 2006) (López Blanco, 2005)

Compuesto	Propiedades	Estructura Química
Etilbenceno	<ul style="list-style-type: none"> – Número CAS: 100-41-4 – Apariencia: Líquido incoloro – Fórmula: C_8H_{10} – Peso molecular: 106.16 g/mol – Punto de ebullición: 136 °C – Punto de fusión: -95 °C – Densidad relativa: 0.8670 ($H_2O = 1$) / 3.66 ($Aire = 1$) – Presión de vapor: 0.9 kPa 	

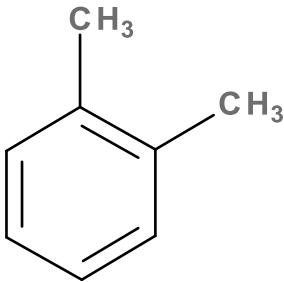
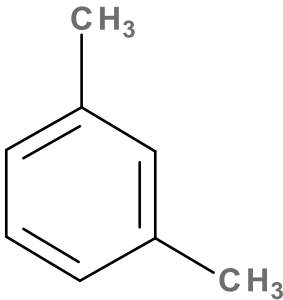
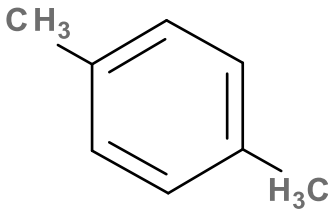
El etilbenceno se absorbe principalmente por inhalación. En los estudios realizados hasta la actualidad, su toxicidad no se refleja tan intensa como la de los otros BTX. (Acevedo García, 2006).

Los principales síntomas y efectos que se describen tras su inhalación o exposición son: mareo, irritación a la garganta, irritación ocular y opresión en el pecho (Ramírez Peñaherrera, 2012). En estudios con animales se ha comprobado que la exposición a concentraciones relativamente bajas, de etilbenceno en aire, por varios meses, produce daños en los riñones y nervios de la audición; así como, la exposición por 2 años produce un aumento de tumores del riñón en ratas y de tumores de pulmón e hígado en ratones (ATSDR, 2014).

Por lo general, una persona puede empezar a percibir el benceno, cuando este alcanza una concentración de 2 ppm en el aire (ATSDR, 2014).

2.10.4 Xilenos

Tabla 16: Propiedades Físicas de los Xilenos (Acevedo García, 2006) (López Blanco, 2005)

Compuesto	o-Xileno	m-Xileno	p-Xileno
Estructura Química			
Número CAS	95-47-6	108-38-3	106-42-3
Apariencia	Líquido incoloro	Líquido incoloro	Líquido incoloro
Fórmula	C_8H_{10}	C_8H_{10}	C_8H_{10}
Peso molecular	106.16 g/mol	106.16 g/mol	106.16g/mol
Punto de ebullición	144 °C	139.3 °C	138.3 °C
Punto de fusión	-25 °C	-47.8 °C	13 °C
Densidad relativa	0.8800 ($H_2O = 1$) / 3.7 (<i>Aire</i> = 1)	0.8684 ($H_2O = 1$) / 3.7 (<i>Aire</i> = 1)	0.8610 ($H_2O = 1$) / 3.7 (<i>Aire</i> = 1)
Presión de vapor	0.7 kPa	1.0 kPa	0.9 kPa

La principal ruta de absorción de xilenos es la inhalación, aunque la ingestión accidental constituye también una ruta efectiva. El contacto dérmico representa solo el 1% del total absorbido de xilenos y toluenos en el ambiente ocupacional (Acevedo García, 2006).

La sintomatología principal a la exposición de xilenos, es muy similar a la del benceno, incluye: irritación de las mucosas, náusea, vómito, dolor de cabeza, vértigo, fatiga, descoordinación, entre otros (Pérez Juárez, 2012) (Trujillo, 2010). La exposición crónica de xileno produce irritabilidad, insomnio, pérdida de memoria; así como desordenes funcionales en hígado, riñones y corazón (Ramírez Peñaherrera, 2012) (Acevedo García, 2006).

Por lo general, una persona puede empezar a percibir los xilenos, cuando se encuentran en concentraciones de 0.8 a 3.7 ppm (Ramírez Peñaherrera, 2012).

2.11 Normas de Adición de BTEX a las Gasolinas en el Ecuador

El organismo encargado de regular los requisitos de la gasolina en el Ecuador es el INEN (Instituto Ecuatoriano de Normalización), a través de la Norma Técnica Ecuatoriana: NTE INEN 935. Esta norma se aplica a las gasolinas comercializadas en el país, sean de producción nacional o importada; exceptuando la gasolina de aviación (INEN, 2012).

De acuerdo al INEN, las gasolinas según su octanaje se clasifican en dos tipos (INEN, 2012):

- Extra: Gasolina de 87 octanos RON
- Súper: Gasolina de 92 octanos RON

La norma presenta dos disposiciones generales: (1) el producto observado a simple vista debe ser límpido, exento de agua y de materiales en suspensión; (2) A las gasolinas no se deben agregar aditivos mejoradores de octanaje, órgano-metálicos que contengan hierro, manganeso y plomo (INEN, 2012).

En cuanto a los requisitos de las gasolinas para motores de ciclo Otto, encontramos dos referencias: la primera es la Norma Técnica Ecuatoriana: NTE 935:2012 y la segunda el Reglamento Técnico Ecuatoriano RTE INEN 028:2011. El RTE^{XII} muestra un panorama de evaluación más actual al de este estudio, ya que aclara los requisitos de gasolina Extra y Súper vigentes a partir de agosto de 2014 (INEN, 2011).

En el Anexo A y el Anexo B se muestran los requisitos para ambos tipos de gasolina por parte de la norma NTE INEN 935 y el reglamento RTE INEN 028, respectivamente.

En la Tabla 17 se encuentran los requisitos de octanaje, contenido de aromáticos y contenido de benceno que presentan las dos referencias INEN.

Tabla 17: Comparación entre la NTE INEN 935 y la RTE INEN 028 (INEN, 2012) (INEN, 2011)

Requisitos	Unidad	NTE INEN 935		RTE INEN 028	
		Extra	Súper	Extra	Súper
Octanaje	RON	87	92	91	95
Contenido de aromáticos	%	30	35	35	35
Contenido de benceno	%	1	2	0.6	0.6

^{XII} RTE se refiere a Reglamento Técnico Ecuatoriano y NTE a Norma Técnica Ecuatoriana (INEN, 2011) (INEN, 2012)

3 METODOLOGÍA

3.1 Cromatografía de Gases/ Espectrometría de Masas (GC/MS)



Figura 3.1: GC-MS Shimadzu QP-2010 Ultra

La técnica combinada de cromatografía de gases y espectrometría de masas, llamada GC/MS por sus siglas en inglés, permite realizar análisis de mezclas de compuestos, como los obtenidos en las reacciones o en el medio ambiente (Wade, 2010). En la Figura 3.1 se observa el equipo utilizado para esta investigación.

La Figura 3.2 muestra un diagrama simplificado del funcionamiento de un GC-MS. En primer lugar se inyecta una pequeña cantidad de muestra en un inyector calentado, que permite la volatilización. El cromatógrafo de gases utiliza una columna capilar incluida en un horno termostaticado; los componentes volátiles son empujados a lo largo de la columna por una corriente de helio, esta columna

contiene en su interior gel de sílice, cuya diferente interacción con las sustancias de la mezcla permite separar los componentes de la misma (Wade, 2010).

Los componentes separados abandonan la columna a tiempos diferentes, los más volátiles (o los que interaccionan menos con el gel de sílice) se mueven más rápidamente que los componentes menos volátiles; luego pasan a través de un conducto de transferencia a la fuente de iones del espectrómetro de masas, donde las moléculas se ionizan y se fragmentan (Wade, 2010).

Posteriormente, las moléculas ionizadas pasan a alto vacío por un cuadrupolo^{XIII} sometido a voltajes variables, que sirve como sistema de “filtrado” o discriminación de masas, para separar los iones. Los campos eléctricos variables hacen que los iones sigan trayectorias complejas y que, en diferentes instantes, solo fragmentos de una cierta masa lleguen al detector. Finalmente, los componentes de la mezcla son identificados mediante su espectro de masas, el cual se va almacenando en el computador (Wade, 2010).

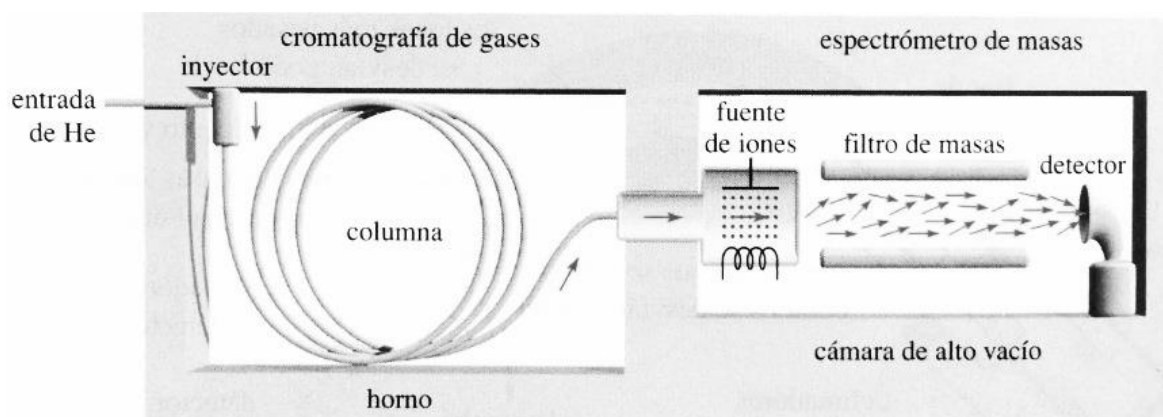


Figura 3.2: Cromatografía de Gases/Espectrometría de Masas (Wade, 2010)

^{XIII} En la Figura 3.2 se muestran solo dos de los cuatro rodillos del cuadrupolo (Wade, 2010).

3.1.1 El espectro de masas

El espectro de masas se representa como un gráfico de barras, entre la abundancia relativa y la relación masa-carga (m/z). Las diferentes alturas de los picos, representan las abundancias, en forma de porcentaje, respecto del pico más intenso, denominado “pico base”. En la representación del espectro, todas las masas están redondeadas al número entero más próximo (Wade, 2010).

El pico base, no corresponde a la masa del ión molecular, solo representa el pico más intenso. El valor (m/z) del ión molecular indica la masa molecular del compuesto (Wade, 2010). En la Figura 3.3 se observa el espectro de masas del p-Xileno (NIST Mass Spectrometry Data Center, 2014).

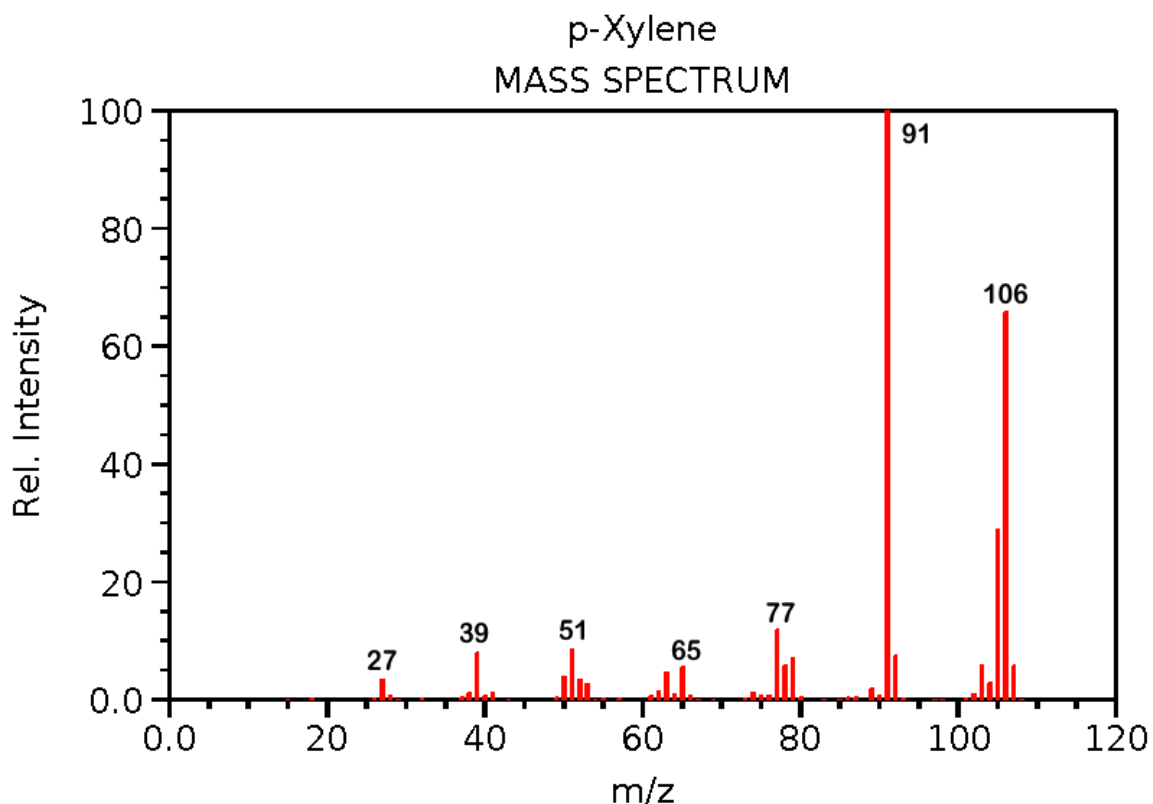


Figura 3.3: Espectro de Masas del Tolueno (NIST Mass Spectrometry Data Center, 2014)

3.2 Determinación del Área de Estudio

En esta investigación se examinó las gasolinas Súper y Extra comercializadas en el Distrito Metropolitano de Quito. En la ciudad existen 119 gasolineras, las cuales expenden gasolina de 87 octanos, gasolina de 92 octanos y diésel (ARCH, 2014).

Se muestrearon 36 gasolineras (30% del total), en cada una gasolina Súper y gasolina Extra, resultando 72 muestras para el análisis. Para el muestreo se tomaron en cuenta las áreas de mayor congestión vehicular. En la Tabla 18 se puede observar la asignación de sectores y el área que comprende cada uno.

Tabla 18: Definición de Sectores para la Recolección de Muestras

Nº de Sector	Sector	Límites	Nº de Gasolineras
1	Sur	Centro Comercial Quicentro Sur → La Villaflora	10
2	Centro - Norte	La Villaflora → Parque La Carolina	10
3	Norte	Parque La Carolina → Carcelén	10
4	Valle de Cumbayá	Centro Comercial Plaza Cumbayá → Tumbaco	3
5	Valle de los Chillos	Redondel del Colibrí → Av. Ilaló	3
Total			36

3.3 Recolección de Muestras

Desde el 2014, por regulaciones establecidas por la ARCH, las estaciones de servicio no pueden expender gasolina en envases no autorizados. Los envases adecuados en los que se realizó la recolección se muestran en la Figura 3.4.

Una vez recolectada, cada muestra de gasolina, se almacenó en botellas color ámbar, etiquetadas con: fecha de recolección, nombre comercial de la gasolinera,

ubicación y tipo. Las botellas utilizadas tenían una contratapa a presión y una tapa de rosca (Figura 3.5).



Figura 3.4: Envases Autorizados para la Venta de Gasolina

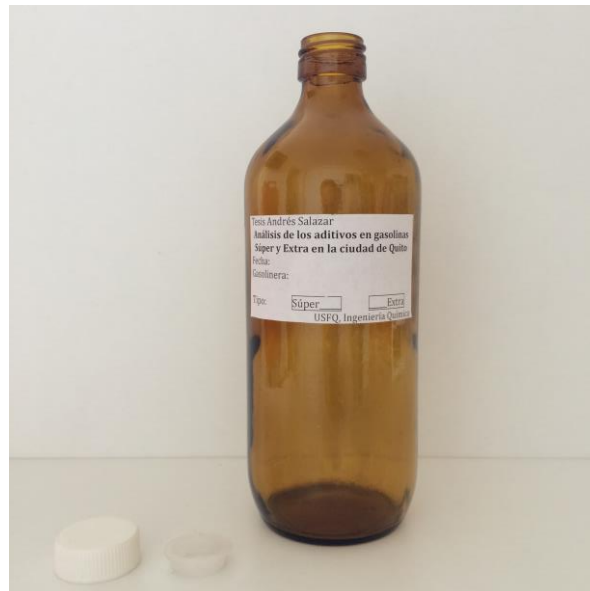


Figura 3.5: Botellas de Almacenamiento de Muestras

La recolección de las muestras se realizó a partir de las 8 pm por dos razones, para evitar la congestión de las estaciones durante el día y primordialmente por la temperatura más baja del medio ambiente, procurando disminuir la evaporación. Las muestras se trasladaron al laboratorio en coolers de poliestireno y fueron almacenadas en un congelador.

A continuación se detalla cada sector de muestreo por separado.

3.3.1 Sector 1

Este sector comprende la zona sur de la ciudad de Quito, los límites en que se basó la recolección son al sur, el Centro Comercial Quicentro Sur, y al norte el

barrio de la Villaflora. En la Tabla 19 se detallan las gasolineras escogidas, su marca comercial y ubicación.

Tabla 19: Gasolineras del Sector 1

Nº de Gasolinera	Código de Referencia	Marca Comercial	Ubicación
1	S1S	PRIMAX	Av. Pedro Vicente Maldonado y Francisco Gómez
	S1E		
2	S2S	PRIMAX	Av. Pedro Vicente Maldonado y Pujilí
	S2E		
3	S3S	TERPEL	Av. Pedro Vicente Maldonado y Gaspar Lozano
	S3E		
4	S4S	TERPEL	Av. Mariscal Sucre y Pilalo
	S4E		
5	S5S	MASGAS	Av. Simón Bolívar y Camino de los Incas
	S5E		
6	S6S	PETROCONDOR	Av. Pedro Vicente Maldonado y Pusir
	S6E		
7	S7S	MOBIL	Av. Jacinto Collahuazo y Quitus
	S7E		
8	S8S	P y S	Av. Pedro Vicente Maldonado y Calle el Corazón
	S8E		
9	S9S	DISPETROL	Av. Pedro Vicente Maldonado y Moraspungo
	S9E		
10	S10S	MOBIL	Av. Pedro Vicente Maldonado y Joaquin Gutiérrez
	S10E		

3.3.2 Sector 2

Este sector comprende la zona centro - norte de la ciudad de Quito, los límites en que se basó la recolección son al sur, el barrio de la Villaflora, y al norte el Parque

de la Carolina. En la Tabla 20 se detallan las gasolineras escogidas, su marca comercial y ubicación.

Tabla 20: Gasolineras del Sector 2

Nº de Gasolinera	Código de Referencia	Marca Comercial	Ubicación
1	CN1S	PRIMAX	Av. América y Colón
	CN1E		
2	CN2S	PRIMAX	Av. Colón y Mariscal Foch
	CN2E		
3	CN3S	MOBIL	Av. Vargas y José Riofrío
	CN3E		
4	CN4S	DISPETROL	Av. América y Mañosca
	CN4E		
5	CN5S	PRIMAX	Av. Francisco de Orellana y 9 de Octubre
	CN5E		
6	CN6S	PETROECUADOR	Av. Amazonas y Gral. Eloy Alfaro
	CN6E		
7	CN7S	DISPETROL	Av. 6 de Diciembre y Bélgica
	CN7E		
8	CN8S	PETROECUADOR	Av. Gral. Eloy Alfaro y 10 de Agosto
	CN8E		
9	CN9S	MOBIL	Av. Oriental (Sector Coliseo Rumiñahui)
	CN9E		
10	CN10S	PETROECUADOR	Av. Napo y Pedro Pinto Guzmán
	CN10E		

3.3.3 Sector 3

Este sector comprende la zona norte de la ciudad de Quito, los límites en que se basó la recolección son al sur, el Parque de la Carolina y al norte el barrio de

Carcelén. En la Tabla 21 se detallan las gasolineras escogidas, su marca comercial y ubicación.

Tabla 21: Gasolineras del Sector 3

Nº de Gasolinera	Código de Referencia	Marca Comercial	Ubicación
1	N1S	PRIMAX	Av. Gral. Eloy Alfaro y De los Alamos
	N1E		
2	N2S	PETROECUADOR	Av. Galo Plaza Lasso y Calle C - N74
	N2E		
3	N3S	PRIMAX	Av. Gral. Eloy Alfaro y De las Anonas
	N3E		
4	N4S	PRIMAX	Av. Naciones Unidas y 10 de Agosto
	N4E		
5	N5S	MASGAS	Av. De la Prensa y 10 de Agosto
	N5E		
6	N6S	PETROECUADOR	Av. Simón Bolívar (Sector Redondel del Ciclista)
	N6E		
7	N7S	PETROECUADOR	Av. De la Prensa y Río Alao
	N7E		
8	N8S	TERPEL	Av. Gral. Eloy Alfaro y Calle A - N73
	N8E		
9	N9S	MOBIL	Av. Interoceánica y Bernardo Rodríguez
	N9E		
10	N10S	PRIMAX	Av. Gral. Eloy Alfaro y De las Higueras
	N10E		

3.3.4 Sector 4

Este sector comprende el Valle de Cumbayá anexo a la ciudad de Quito, los límites en que se basó la recolección son al sur, el Centro Comercial Plaza

Cumbayá, y al norte el inicio de Tumbaco. En la Tabla 22 se detallan las gasolineras escogidas, su marca comercial y ubicación.

Tabla 22: Gasolineras del Sector 4

Nº de Gasolinera	Código de Referencia	Marca Comercial	Ubicación
1	C1S	PETROECUADOR	Av. Oswaldo Guayasamín y Rodrigo Núñez
	C1E		
2	C2S	PRIMAX	Av. Interoceánica (Sector Centro Comercial Cumbayá)
	C2E		
3	C3S	PUMA	Av. Oswaldo Guayasamín y Federico González
	C3E		

3.3.5 Sector 5

Este sector comprende el Valle de los Chillos anexo a la ciudad de Quito, los límites en que se basó la recolección son al sur, el redondel del Colibrí, y al norte la Avenida Ilaló. En la Tabla 23 se detallan las gasolineras escogidas, su marca comercial y ubicación.

Tabla 23: Gasolineras del Sector 5

Nº de Gasolinera	Código de Referencia	Marca Comercial	Ubicación
1	V1S	PUMA	Av. Gral. Rumiñahui y Calle D
	V1E		
2	V2S	PETROECUADOR	Av. Gral. Rumiñahui y Zaruma
	V2E		
3	V3S	PETROECUADOR	Av. Ilaló y 7ma transversal
	V3E		

De las Figura 3.6 a la Figura 3.12 se observa la cartografía de los todos los sectores de recolección.

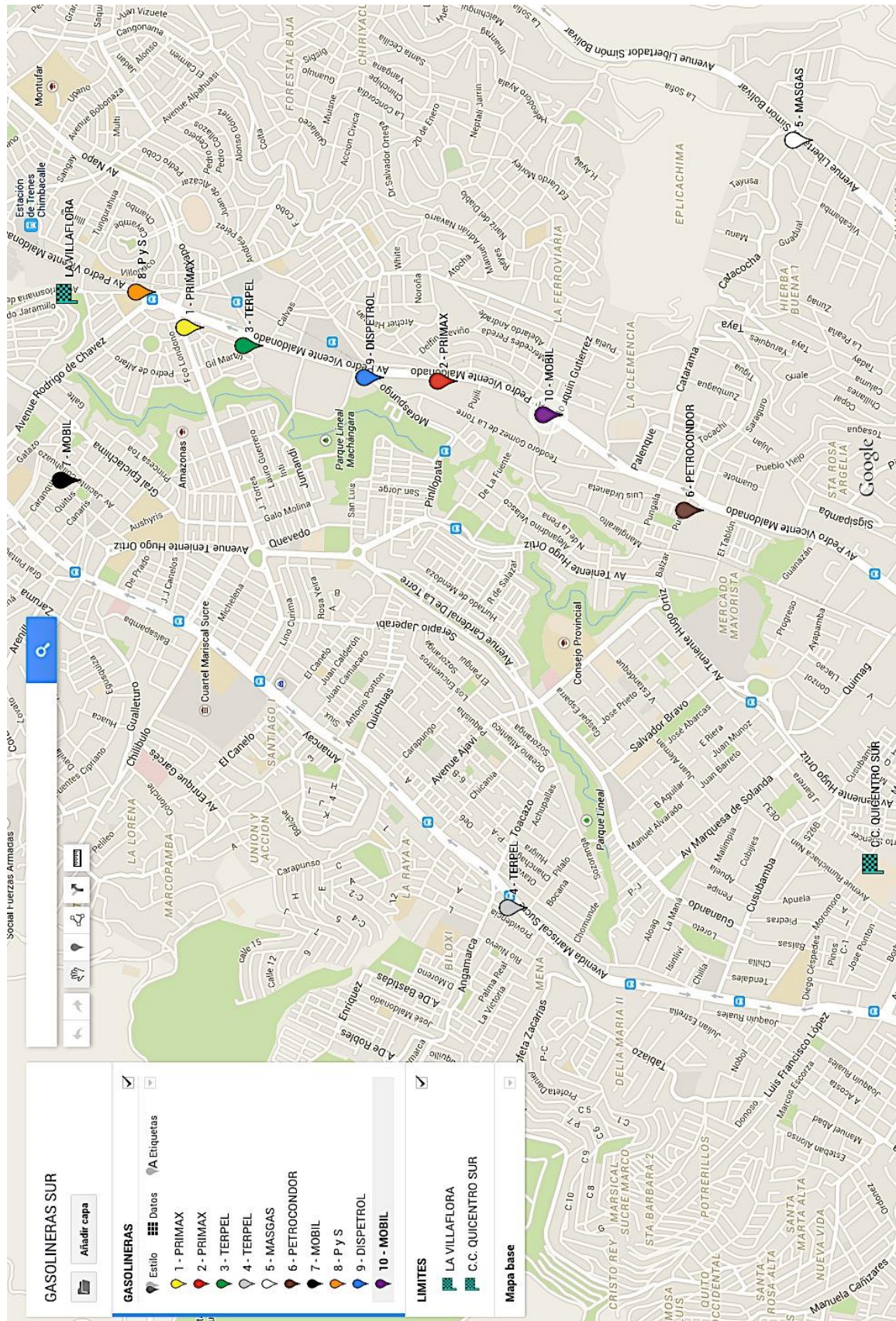


Figura 3.6: Cartografía del Sector 1 (Google Maps, 2014)

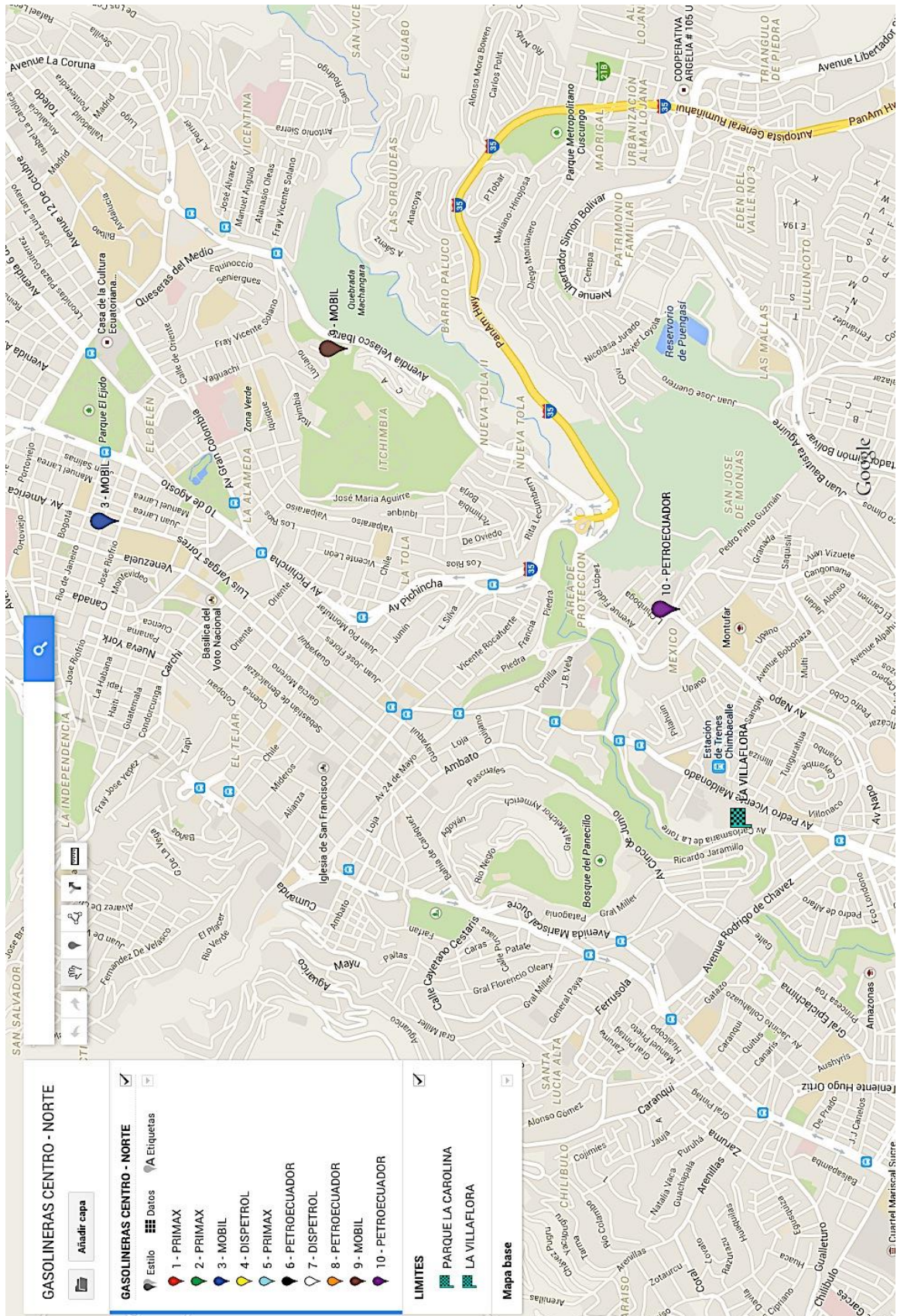


Figura 3.7: Cartografía del Sector 2 Parte 1 (Google Maps, 2014)

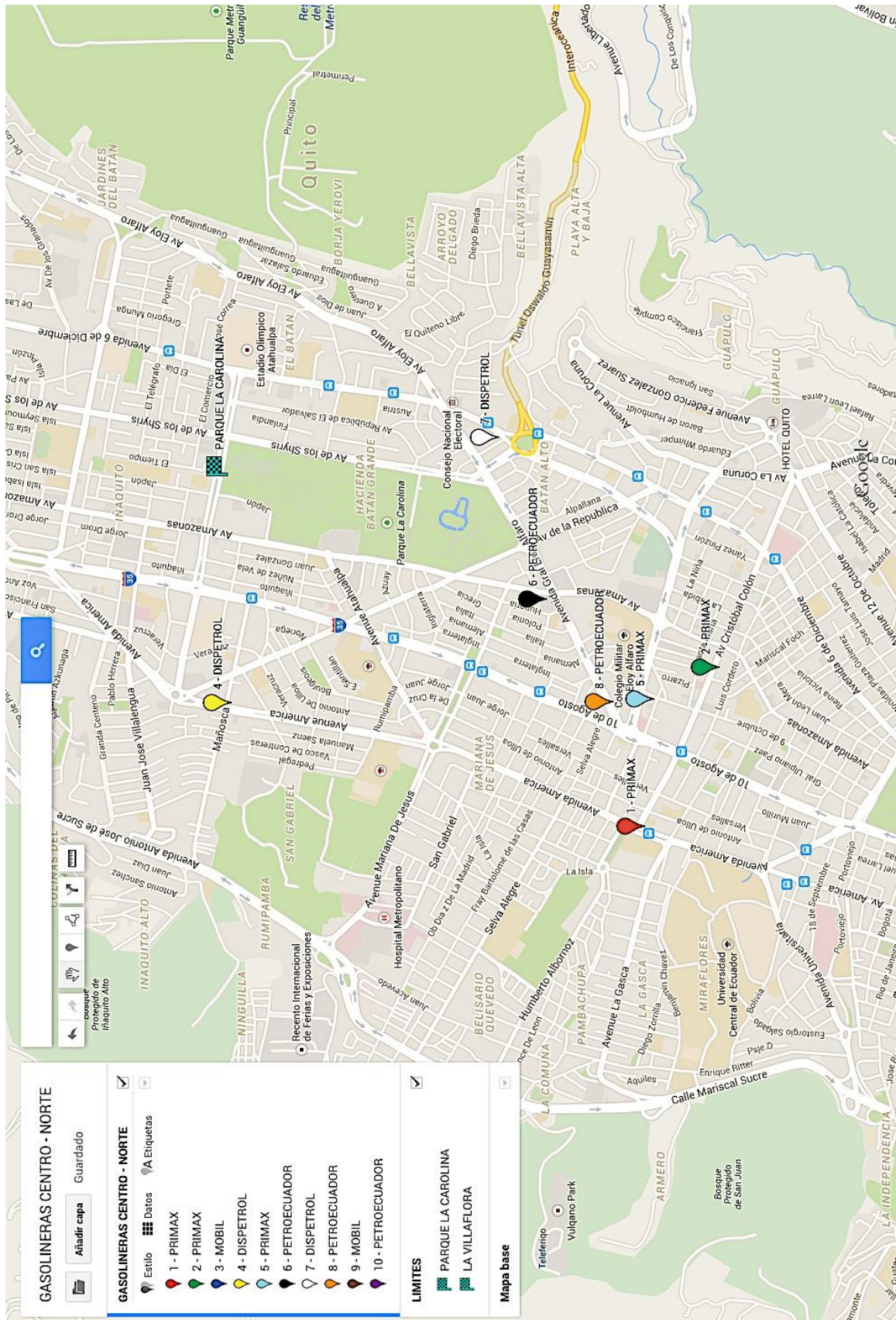


Figura 3.8: Cartografía del Sector 2 Parte 2 (Google Maps, 2014)

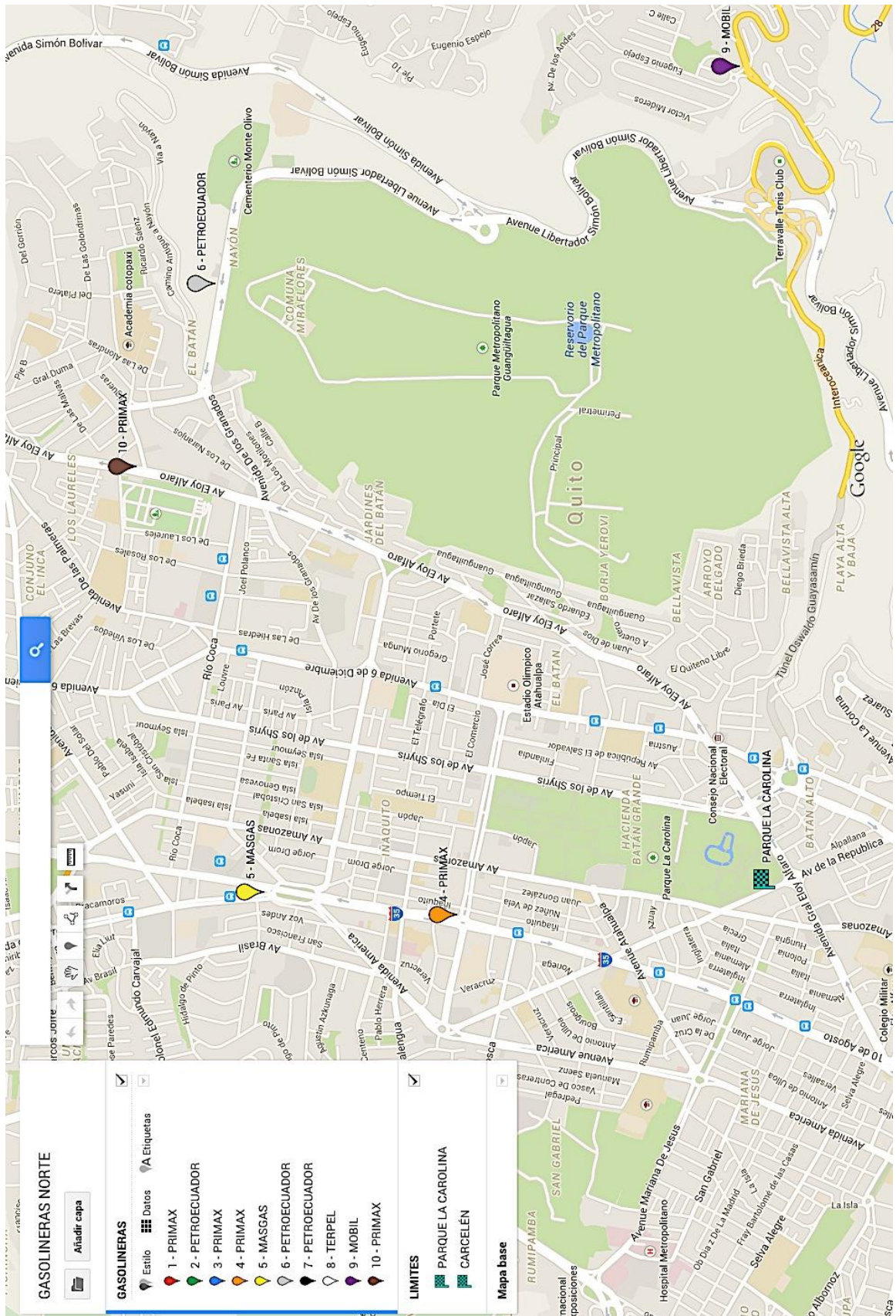


Figura 3.9: Cartografía del Sector 3 Parte 1 (Google Maps, 2014)

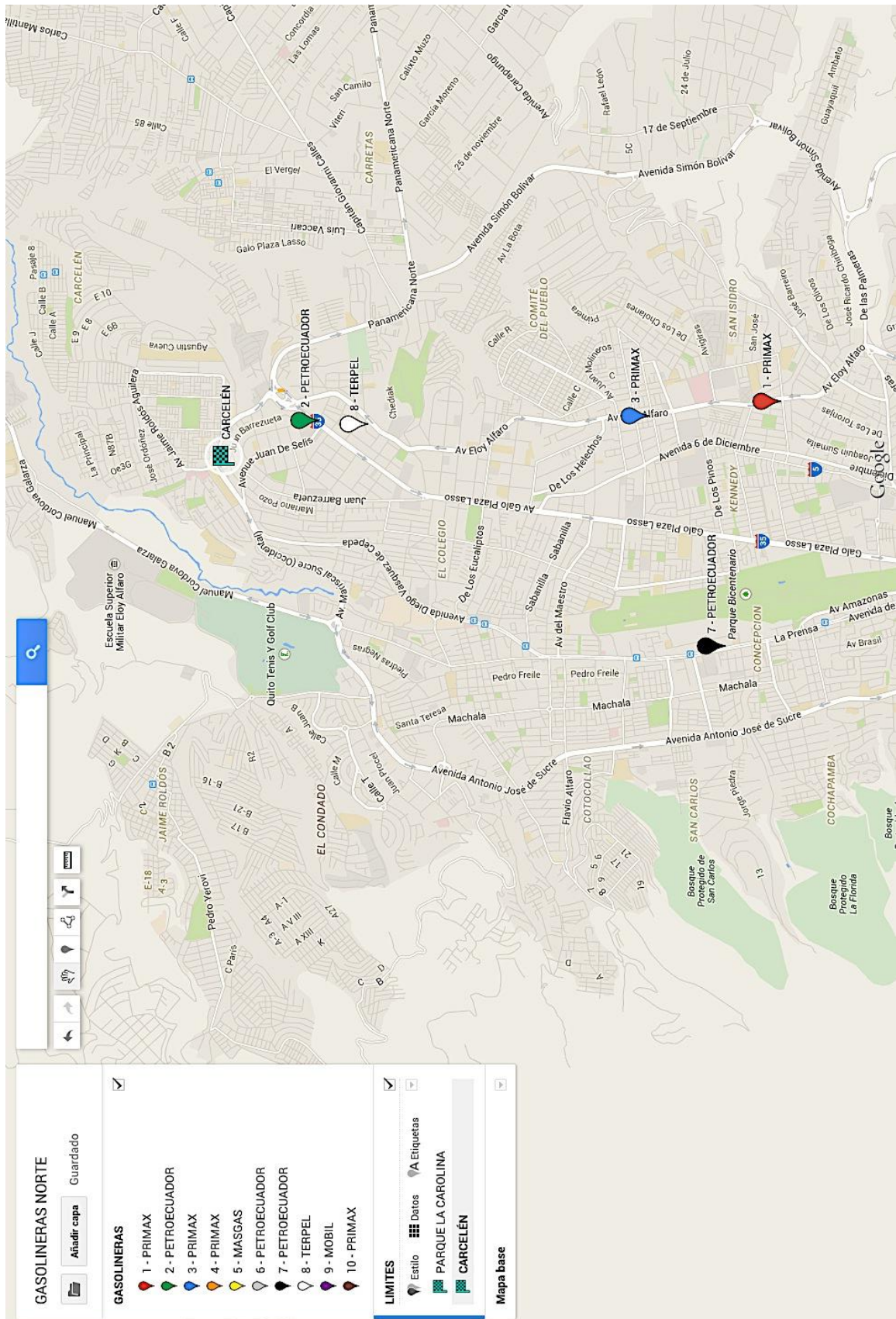


Figura 3.10: Cartografía del Sector 3 Parte 2 (Google Maps, 2014)

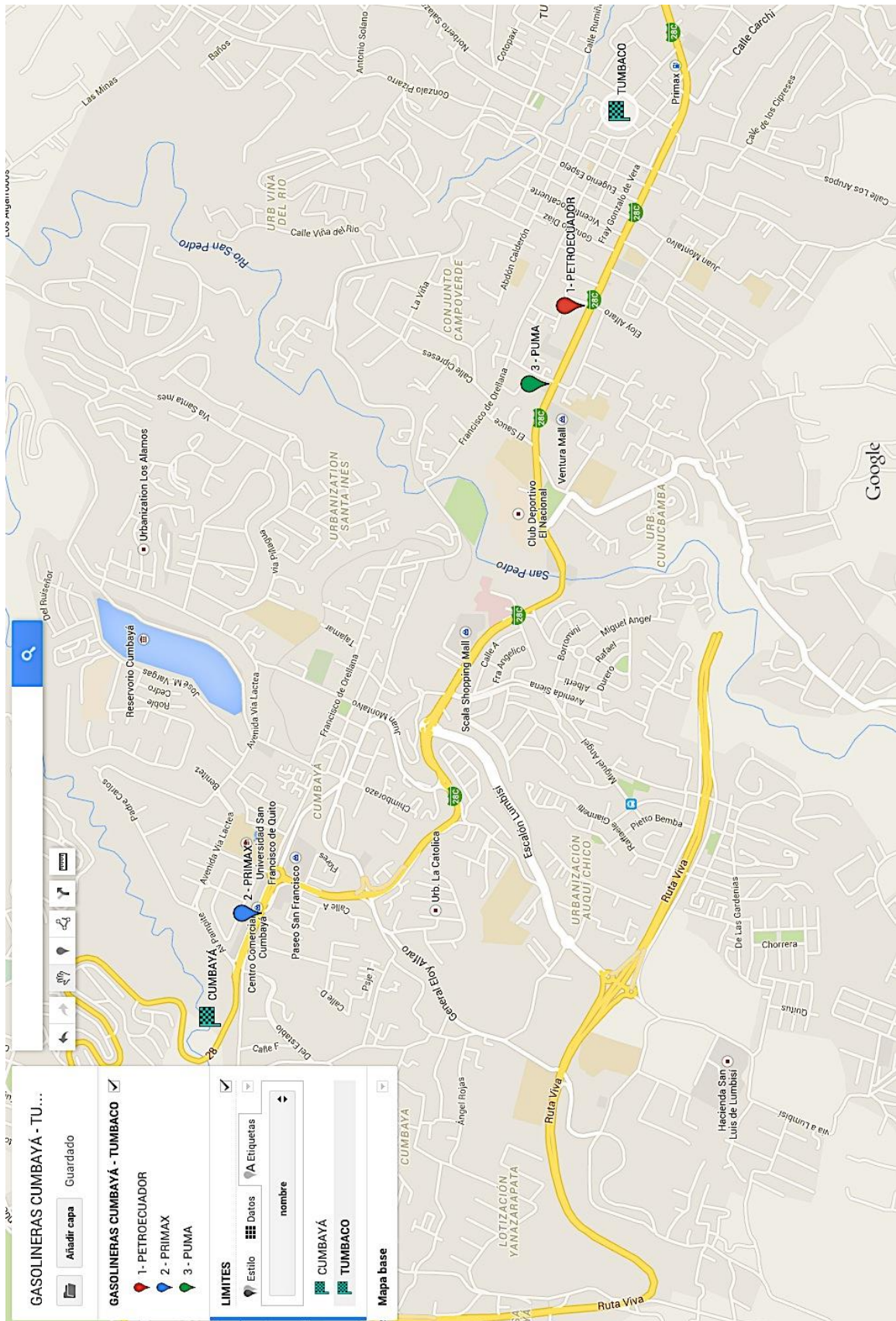


Figura 3.11: Cartografía del Sector 4 (Google Maps, 2014)

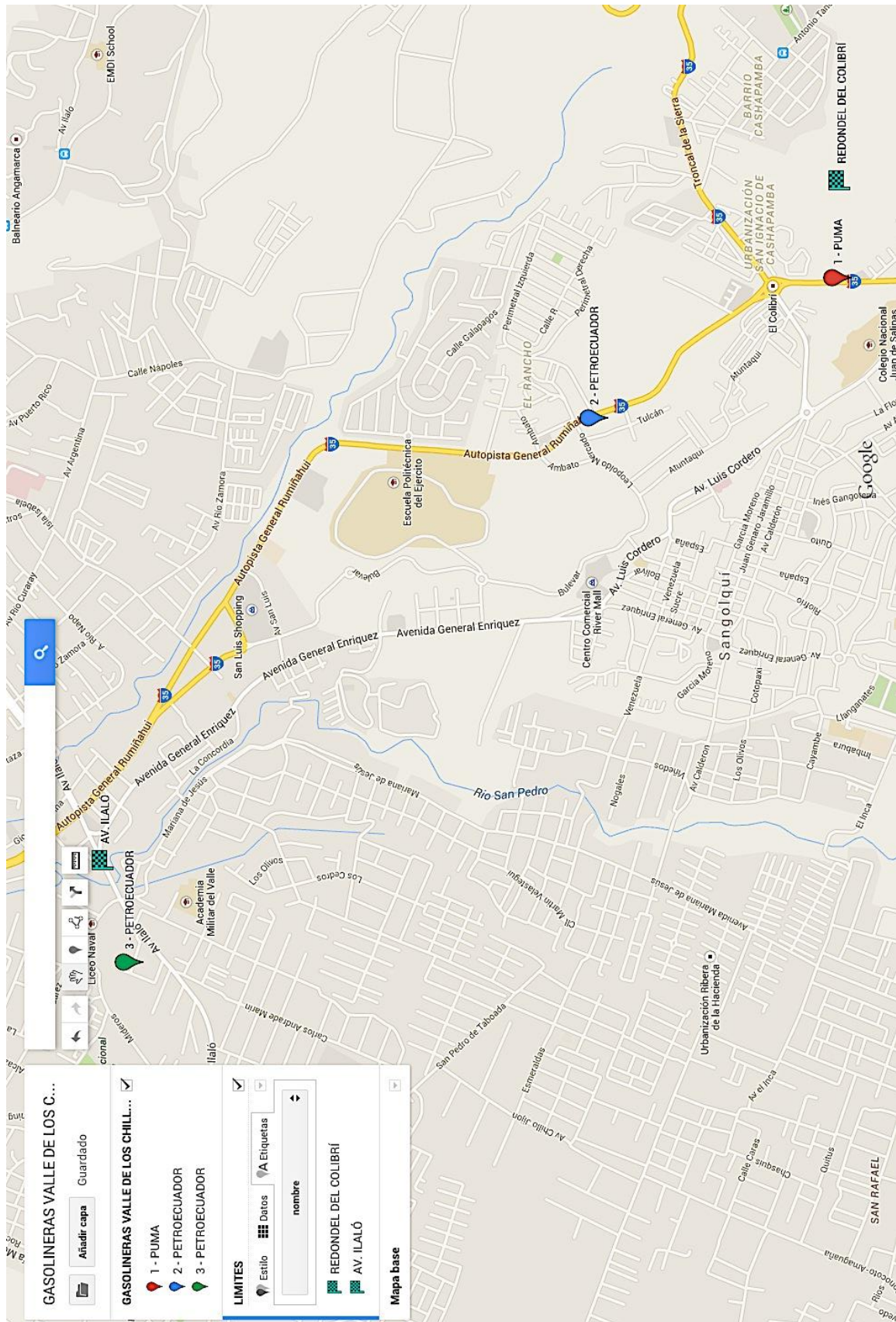


Figura 3.12: Cartografía del Sector 5 (Google Maps, 2014)

3.4 Análisis Cualitativo de Muestras

Se realizó un primer análisis de las 72 gasolinas recolectadas con el objetivo de determinar todos los hidrocarburos y posibles otros compuestos presentes en la gasolina comercial del Distrito Metropolitano de Quito. Este análisis se realizó por Cromatografía de Gases/ Espectrometría de Masas en el equipo Shimadzu GCMS - QP2010 Ultra de la Universidad San Francisco de Quito.

Con el fin de omitir los compuestos identificados erróneamente en el GC-MS, cada vial fue analizado por triplicado.

Los materiales utilizados fueron:

- Micropipeta de 1000 μL
- 72 Puntas para micropipeta de 1000 μL
- 72 Viales transparentes estándar de 1500 μL

Para la preparación de los viales se procedió de la siguiente manera:

- Se enumeraron los viales del 1 al 72 para identificar el sector y gasolinera a la que pertenecen.
- Se introdujo la gasolina, 1200 μL en cada vial, directamente de la botella ámbar respectiva, tapando los viales inmediatamente.

Una vez preparados los viales se procede a configurar el GC-MS con el batch a analizarse y con los parámetros del método escogido para analizar la gasolina. Ambas acciones son realizadas a través del software de interacción (GC-MS Solutions) incluido en el equipo.

El “Batch de Análisis” representa los viales que serán tomados por el equipo, ahí se introduce el número de vial correspondiente para cada gasolina, su código de identificación, el método de análisis (en este caso BTX), el volumen de inyección de cada vial (en este caso 0.1 μL), el método de reporte, la ubicación de la gasolinera y el archivo donde será guardado el reporte. Además se incluye el análisis por triplicado; para simplificar, en el Batch, se le instruye al equipo en que orden debe tomar los viales para su análisis y cuantas veces debe procesar los mismos. Un ejemplo de preparación de un Batch se puede observar en el Anexo C.

Existen diferentes métodos para el análisis de gasolina en equipos GC-MS, estos métodos han sido determinados por entidades como la ASTM^{XIV} (American Society for Testing and Materials). El método utilizado para el análisis de este estudio es el: ASTM D-5769, está indicado para analistas que tengan que certificar el contenido de aromáticos en la gasolina comercial de motores de combustión (Leibrand, 1999). El método describe la columna a utilizarse, las temperaturas de trabajo del equipo, el tiempo de análisis, los rangos de detección, entre otros. En la Tabla 24 y Tabla 25 podemos observar los parámetros de configuración del método, así como la información de la columna utilizada.

Tabla 24: Parámetros de Configuración del ASTM D-5769

GC	
Parámetro	Valor
Temperatura de inyección	250 °C
Modo lineal de velocidad	35 cm/s

^{XIV} La ASTM es una organización que proporciona normas técnicas para el análisis de materiales, productos, sistemas y servicios (ASTM, 2015).

Split ratio	250
Ahorrador de Gas	ON (Split ratio de 250 → 5 después de 1 minuto)
Columna	60 °C; 3 °C/min → 120 °C; 10 °C/min → 250 °C
Volumen de inyección	0.1 µL
Gas de transporte	Helio
MS	
Parámetro	Valor
Temperatura fuente ionizante	200 °C
Temperatura interfaz	280 °C
Detector de voltaje	-0.1 KV relativo para (-0.98 KV)
Rango de escaneo	45 - 300
Intervalo de escaneo	0.10 s
Velocidad de barrido	10 spectra/s
Software	
– GCMSsolution	
– Shimadzu Aromatics Report Software	

Tabla 25: información de la Columna Utilizada

Parámetro	Descripción
Fase	SH - Rxi - 5Sil MS
Dimensiones	Longitud 30 m
	ID 0.25
	DF 0.25
Rango de temperatura	320 - 350 °C
Número serial	1216594
Número de catálogo	221 - 75954 - 30

Una vez configurados los parámetros, el equipo procede al análisis automáticamente y se tiene acceso a los “Reportes Iniciales^{XV}” a través del Postrun Software Analysis.

Para generar los resultados o “Reportes Finales” (CD Anexo) y saber que hidrocarburos están presentes, en los dos tipos de gasolina a analizarse, se realizó el siguiente procedimiento para cada “Reporte Inicial”:

1. Se abrió el reporte desde el GCMS Postrun Analysis (Anexo D).
2. Se abrió la Tabla Cualitativa, en donde se detallan todos los picos identificados por el equipo, estos superan generalmente los 300 en todas las muestras.
3. Se eliminaron los picos identificados de áreas menores a 1%, considerando que representan ruido de fondo en el GC-MS. Los picos resultantes varían entre 20 y 35, la gasolina Extra presenta mayor número de picos identificados que la Súper. Véase el (Anexo E).
4. Se nombraron manualmente todos los picos de áreas mayores al 1%. Para ello se seleccionó la opción “Similarity Search” en el espectro de masas de cada pico. Esta opción le permite al analista elegir el nombre del compuesto, observando y comparando el espectro original (1er espectro) con otros espectros, de una base de datos incluida en el equipo (Anexo F).

Asimismo la opción de “Similarity Search” es útil, para la diferenciación de isómeros, en donde se necesita la precisión visual y criterio del analista, a pesar de contar con un sistema poderoso de detección como el GC/MS.

^{XV} Se han denominado “Reportes Iniciales”, ya que necesitan del análisis manual del laboratorista para identificar, basándose en el espectro de masas, cuales son los hidrocarburos identificados.

Por ejemplo, en el (Anexo G) observamos que para el pico 16, el espectro puede corresponder mayormente al “1-etil 3-metil benceno” (97% similitud), “1-etil 2-metil benceno” (97% de similitud), o al “1-etil 4-metil benceno” (96% similitud). Observando los espectros, se eligió como resultado el “1-etil 2-metil benceno”, a pesar de no ser el primer compuesto de la lista de posibilidades, por presentar el pico característico de 122.

5. Finalmente se generó un archivo PDF para cada “Reporte Final”, todos los archivos se pueden observar en el CD Anexo.

3.5 Análisis Cuantitativo de BTEX en las Muestras

Se realizó un segundo análisis de las 72 muestras para cuantificar el benceno, tolueno, etilbenceno, orto - meta y para xilenos presentes en cada gasolina. Para ello se adquirieron los estándares, de concentraciones conocidas, de estos compuestos.

El estándar adquirido fue el: Fluka BTEX - Analytical Standard de Sigma Aldrich.

Los detalles de este estándar se observan a continuación en la Tabla 26:

Tabla 26: Certificado de Análisis del Estándar (SIGMA-ALDRICH, 2014)

Parámetro	Especificación
Lote	BCBL5504V
Apariencia	Líquido incoloro
Presentación	10 ampollas de 1 mL
Densidad relativa	1.1
Solvente de transporte	DMSO, Dimetilsulfóxido

Compuestos contenidos	Benceno	0.837 mg/mL
	Tolueno	0.859 mg/mL
	Etilbenceno	0.870 mg/mL
	Para - Xileno	0.863 mg/mL
	Meta - Xileno	0.862 mg/mL
	Orto - Xileno	0.870 mg/mL

Posteriormente, se prepararon 4 viales del GCMS: uno con el estándar sin diluir, y los otros 3 con diluciones en alcohol absoluto de 1:10, 1:100 y 1:1000, respectivamente. Estos viales se examinaron en el GCMS, configurando el mismo, para que los tome como estándares y proceda al trazado de la curva de calibración.

En el CD Anexo se observa la curva de calibración de todos los compuestos.

Seguidamente se procedió a abrir los “Reportes Finales” del primer análisis, para observar si la concentración de la gasolina sin diluir caía dentro del rango de los estándares. Se determinó que se debía diluir la gasolina a 1:40 para que la concentración de BTEX se encuentre dentro de la curva de calibración.

La dilución 1:40 se realizó con n-hexano para las 72 muestras y se preparó de la siguiente manera:

1 parte de gasolina + 39 partes de n – hexano

35 μ L de gasolina + 1365 μ L de n – hexano = 1400 μ L de muestra

Los materiales utilizados fueron:

- Micropipeta de 1000 μ L

- Micropipeta de 100 μL
- Punta para micropipeta de 1000 μL
- 72 Puntas para micropipeta de 100 μL
- 72 Viales transparentes estándar de 1500 μL

Las 72 muestras diluidas se analizaron nuevamente en el Shimadzu GCMS, configurando el “Batch de análisis” y el equipo como se describió en la Sección 3.4. Nuevamente se realizaron los análisis por triplicado.

Para encontrar las “Concentraciones de BTEX resultantes” (CD Anexo), se procedió de la siguiente manera para cada muestra:

1. Se abrió el reporte desde el GCMS Browser Data Analysis. Allí se observan las concentraciones resultantes de Benceno, Tolueno, Etilbenceno, Para-Xileno y Orto-Xileno en ese orden, de acuerdo a los tiempos de retención.
2. Para que las concentraciones determinadas por el equipo sean aún más exactas, se procedió a integrar manualmente los 5 picos de cada muestra. Para ello, se escoge la opción “Manual Peak Integrate” y se seleccionan el punto donde empieza el pico y el punto en donde termina. Un ejemplo de esta acción se observa en el Anexo H.
3. A continuación se tabularon en archivos de Microsoft Excel, los triplicados de cada muestra, obteniendo para cada BTEX, una concentración promedio y un tiempo de retención promedio.
4. Seguidamente se multiplicó la concentración promedio de cada BTEX por el factor de dilución, 40, obteniéndose la concentración en la gasolina original.

5. Para determinar el porcentaje en masa y porcentaje en volumen de cada BTEX, en cada gasolina, se utilizaron las densidades de la gasolina Súper (0.75 g/mL), de la gasolina Extra (0.7 g/mL) y de cada BTEX.

4 RESULTADOS

4.1 Resultados Cualitativos

Las siguientes tablas muestran todos los compuestos encontrados en la Gasolina Súper y Extra del Distrito Metropolitano de Quito, clasificados según la familia de hidrocarburos a la que pertenecen.

4.1.1 Gasolina Súper del Distrito Metropolitano de Quito

Tabla 27: Hidrocarburos Parafínicos Presentes en la Gasolina Súper

Nº de C	Parafínicos				
	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos
C7	✓ Heptano	✓ Heptano	✓ Heptano	✓ Heptano	✓ Heptano
C9	✓ Nonano	✓ Nonano	✓ Nonano	✓ Nonano	
C11	✓ Undecano		✓ Undecano		

Tabla 28: Hidrocarburos Isoparafínicos Presentes en la Gasolina Súper

Nº de C	Isoparafínicos				
	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos
C7	✓ 3-metil hexano ✓ 2-metil hexano	✓ 3-metil hexano	✓ 3-metil hexano ✓ 3-etil pentano ✓ 2,3-dimetil pentano	✓ 2-metil hexano ✓ 3-etil pentano	✓ 3-metil hexano
C8	✓ 2,2,4-trimetil pentano ✓ 2,3,3-trimetil pentano ✓ 2-metil heptano ✓ 2,3,4-trimetil	✓ 2,2,4-trimetil pentano ✓ 2,3,3-trimetil pentano ✓ 2-metil heptano ✓ 2,3,4-trimetil	✓ 2,2,4-trimetil pentano ✓ 2,3,3-trimetil pentano ✓ 2-metil heptano ✓ 2,3,4-trimetil	✓ 2,2,4-trimetil pentano ✓ 2,3,3-trimetil pentano ✓ 2-metil heptano ✓ 2,3,4-trimetil	✓ 2,2,4-trimetil pentano ✓ 2,3,3-trimetil pentano ✓ 2-metil heptano ✓ 2,3,4-trimetil

	pentano	pentano	pentano	pentano	pentano
C9	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,5-trimetil hexano ✓ 2,4-dimetil heptano ✓ 3,5-dimetil heptano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,5-trimetil hexano ✓ 2,4-dimetil heptano ✓ 2,2-dimetil heptano ✓ 3,3,4-trimetil hexano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,5-trimetil hexano ✓ 2,4-dimetil heptano ✓ 2,3,4-trimetil hexano ✓ 3,3,4-trimetil hexano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,5-trimetil hexano ✓ 2,4-dimetil heptano ✓ 3,3,4-trimetil hexano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,5-trimetil hexano ✓ 2,4-dimetil heptano ✓ 2,2-dimetil heptano
C10	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 4,5-dimetil octano ✓ 3-etil 4-metil heptano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 4,5-dimetil octano ✓ 3-etil 4-metil heptano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 4,5-dimetil octano ✓ 3-etil 4-metil heptano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 4,5-dimetil octano ✓ 3-etil 4-metil heptano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 4,5-dimetil octano ✓ 3-etil 4-metil heptano
C12	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,4-dimetil 1 decano 				
C13	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 3,3,4-trimetil decano 		<ul style="list-style-type: none"> ✓ 3,3,4-trimetil decano ✓ 4,4-dimetil undecano 		

Tabla 29: Hidrocarburos Olefínicos Presentes en la Gasolina Súper

Nº de C	Olefínicos				
	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos
C7		<ul style="list-style-type: none"> ✓ 3-metil 3-hexeno ✓ 4-metil 2-hexeno 		<ul style="list-style-type: none"> ✓ 3-metil 3-hexeno 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 3-metil 3-hexeno
C8		<ul style="list-style-type: none"> ✓ 5,5-dimetil 1-hexeno 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 5,5-dimetil 1-hexeno ✓ 2,4,4-trimetil 1-penteno ✓ 5,5-dimetil 2-hexeno 		<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,4,4-trimetil 1-penteno

C12	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 5-metil 2-undeceno ✓ 6-metil 3-undeceno ✓ 2,4-dimetil 1-deceno 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 6-metil 3-undeceno 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 6-metil 3-undeceno ✓ 3,4-dimetil 1-deceno 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 6-metil 3-undeceno 	
------------	--	--	--	--	--

Tabla 30: Hidrocarburos Nafténicos Presentes en la Gasolina Súper

Nº de C	Nafténicos				
	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos
C6		<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo pentano
C7	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo hexano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo hexano ✓ Etil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo hexano ✓ Etil ciclo pentano ✓ trans 1,2-dimetil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo hexano ✓ Etil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo hexano ✓ Etil ciclo pentano
C8	<ul style="list-style-type: none"> ✓ cis 1,3-dimetil ciclo hexano ✓ 1-etil 3-metil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ trans 1,2-dimetil ciclo hexano ✓ 1,2,4 trimetil ciclo pentano ✓ 1-etil 3-metil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ cis 1,3-dimetil ciclo hexano ✓ 1,4-dimetil ciclo hexano ✓ 1-etil 3-metil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ trans 1,2-dimetil ciclo hexano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 1,2,4 trimetil ciclo pentano ✓ 1-etil 3-metil ciclo pentano
C9	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 1,1,3-trimetil ciclo hexano 		<ul style="list-style-type: none"> ✓ 1,1,3-trimetil ciclo hexano 		

Tabla 31: Hidrocarburos Aromáticos Presentes en la Gasolina Súper

Nº de C	Aromáticos				
	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos
C6	✓ Benceno	✓ Benceno	✓ Benceno	✓ Benceno	✓ Benceno
C7	✓ Tolueno	✓ Tolueno	✓ Tolueno	✓ Tolueno	✓ Tolueno
C8	✓ Etilbenceno ✓ P-Xileno ✓ O-Xileno	✓ Etilbenceno ✓ P-Xileno ✓ O-Xileno	✓ Etilbenceno ✓ P-Xileno ✓ O-Xileno ✓ 1,3-dimetil benceno	✓ Etilbenceno ✓ P-Xileno ✓ O-Xileno	✓ Etilbenceno ✓ P-Xileno ✓ O-Xileno
C9	✓ Propil benceno ✓ 1-etil 2-metil benceno ✓ 1-etil 3-metil benceno ✓ Mesitileno ✓ 1-etil 4-metil benceno ✓ 1,2,3-trimetil benceno ✓ 1,2,4-trimetil benceno	✓ Propil benceno ✓ 1-etil 2-metil benceno ✓ 1-etil 3-metil benceno ✓ Mesitileno ✓ 1-etil 4-metil benceno ✓ 1,2,3-trimetil benceno ✓ 1,2,4-trimetil benceno	✓ Propil benceno ✓ 1-etil 2-metil benceno ✓ 1-etil 3-metil benceno ✓ Mesitileno ✓ 1-etil 4-metil benceno ✓ 1,2,3-trimetil benceno ✓ 1,2,4-trimetil benceno ✓ Cumeno	✓ Propil benceno ✓ 1-etil 2-metil benceno ✓ 1-etil 3-metil benceno ✓ Mesitileno ✓ 1-etil 4-metil benceno ✓ 1,2,3-trimetil benceno ✓ 1,2,4-trimetil benceno ✓ Cumeno	✓ Propil benceno ✓ 1-etil 2-metil benceno ✓ 1-etil 3-metil benceno ✓ Mesitileno ✓ 1-etil 4-metil benceno ✓ 1,2,3-trimetil benceno ✓ 1,2,4-trimetil benceno ✓ Cumeno
C10	✓ 1,3-dietil benceno ✓ 1-metil 3-propil benceno ✓ 1-etil 2,3-dimetil benceno ✓ 1,2-dietil benceno ✓ Tert butil benceno	✓ 1-metil 3-propil benceno ✓ 1-etil 2,3-dimetil benceno	✓ 1-metil 3-propil benceno ✓ 1-etil 2,3-dimetil benceno ✓ 1-metil 2-propil benceno	✓ 1-metil 3-propil benceno ✓ 1-etil 2,3-dimetil benceno	✓ 1-metil 3-propil benceno ✓ 1-etil 2,3-dimetil benceno

	✓ 2-etil 1,3-dimetil benceno				
--	------------------------------	--	--	--	--

Tabla 32: Otros Hidrocarburos Identificados en la Gasolina Súper

Nº de C	Otros				
	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos
C6		✓ 1-metil ciclo penteno		✓ 1-metil ciclo penteno	✓ 1-metil ciclo penteno
C7		✓ 1,5-dimetil ciclo penteno	✓ 1,5-dimetil ciclo penteno	✓ 1,5-dimetil ciclo penteno	✓ 1,5-dimetil ciclo penteno
C8		✓ 1,2,3-trimetil ciclo penteno			✓ 1,2,3-trimetil ciclo penteno
C9	✓ Indano	✓ Indano	✓ Indano	✓ Indano	✓ Indano
C10	✓ Naftaleno				

4.1.2 Gasolina Extra del Distrito Metropolitano de Quito

Tabla 33: Hidrocarburos Parafínicos Presentes en la Gasolina Extra

Nº de C	Parafínicos				
	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos
C7	✓ Heptano	✓ Heptano	✓ Heptano	✓ Heptano	✓ Heptano
C9	✓ Nonano	✓ Nonano	✓ Nonano	✓ Nonano	✓ Nonano
C11	✓ Undecano	✓ Undecano	✓ Undecano	✓ Undecano	✓ Undecano

Tabla 34: Hidrocarburos Isoparafínicos Presentes en la Gasolina Extra

Nº de C	Isoparafínicos				
	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos
C7	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2-metil hexano ✓ 2,3-dimetil pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 3-metil hexano ✓ 3-etil pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 3-metil hexano 		<ul style="list-style-type: none"> ✓ 3-metil hexano
C8	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,4-trimetil pentano ✓ 2,3,3-trimetil pentano ✓ 2-metil heptano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,4-trimetil pentano ✓ 2,3,3-trimetil pentano ✓ 2-metil heptano ✓ 2,3,4-trimetil pentano ✓ 4-metil heptano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,4-trimetil pentano ✓ 2,3,3-trimetil pentano ✓ 2-metil heptano ✓ 2,3,4-trimetil pentano ✓ 4-metil heptano ✓ 2,3-dimetil hexano ✓ 3-etil 2-metil pentano ✓ 2,2-dimetil hexano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,4-trimetil pentano ✓ 2,3,3-trimetil pentano ✓ 2-metil heptano ✓ 2,3,4-trimetil pentano ✓ 2,2-dimetil hexano ✓ 2,3-dimetil hexano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,4-trimetil pentano ✓ 2,3,3-trimetil pentano ✓ 2-metil heptano ✓ 2,3,4-trimetil pentano ✓ 4-metil heptano ✓ 2,2-dimetil hexano
C9	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,5-trimetil hexano ✓ 2,4-dimetil heptano ✓ 3,5-dimetil heptano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,5-trimetil hexano ✓ 2,4-dimetil heptano ✓ 2,6-dimetil heptano ✓ 3,3,4-trimetil hexano ✓ 3-etil 2,2-dimetil 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,5-trimetil hexano ✓ 2,4-dimetil heptano ✓ 2,6-dimetil heptano ✓ 3,3,4-trimetil hexano ✓ 4-etil 2-metil 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,5-trimetil hexano ✓ 2,4-dimetil heptano ✓ 3,3,4-trimetil hexano ✓ 2,6-dimetil heptano ✓ 3-etil 2,2-dimetil pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 2,2,5-trimetil hexano ✓ 2,4-dimetil heptano ✓ 2,6-dimetil heptano ✓ 3-etil 2,2-dimetil pentano

		pentano ✓ 4-etil 2-metil hexano	hexano ✓ 2,5-dimetil heptano ✓ 3,5-dimetil heptano		
C10		✓ 4,5-dimetil octano ✓ 3-etil 4-metil heptano	✓ 4,5-dimetil octano ✓ 3-etil 4-metil heptano ✓ 3,4-dietil hexano	✓ 4,5-dimetil octano ✓ 3-etil 4-metil heptano ✓ 3,4-dietil hexano	✓ 4,5-dimetil octano ✓ 3-etil 4-metil heptano
C11	✓ 2,5-dimetil nonano				
C13	✓ 3,3,4-trimetil decano		✓ 3,3,4-trimetil decano		

Tabla 35: Hidrocarburos Olefínicos Presentes en la Gasolina Extra

Nº de C	Olefínicos				
	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos
C8			✓ 2,4,4-trimetil 1-penteno		✓ 2,4,4-trimetil 1-penteno
C12	✓ 5-metil 2-undeceno ✓ 6-metil 3-undeceno ✓ 3,4-dimetil 1-deceno	✓ 5-metil 2-undeceno ✓ 6-metil 3-undeceno ✓ 6-metil 2-undeceno ✓ 2,2,4,6,6 pentametil 3-hepteno ✓ 3,4-dimetil 1-deceno	✓ 5-metil 2-undeceno ✓ 6-metil 3-undeceno ✓ 3,4-dimetil 1-deceno	✓ 5-metil 2-undeceno ✓ 6-metil 3-undeceno ✓ 3,4-dimetil 1-deceno	✓ 6-metil 3-undeceno ✓ 3,4-dimetil 1-deceno

Tabla 36: Hidrocarburos Nafténicos Presentes en la Gasolina Extra

Nº de C	Nafténicos				
	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos
C6		✓ Metil ciclo pentano	✓ Metil ciclo pentano	✓ Metil ciclo pentano	✓ Metil ciclo pentano
C7	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo hexano ✓ Isopropil ciclo butano ✓ Etil ciclo pentano ✓ trans 1,2-dimetil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo hexano ✓ Etil ciclo pentano ✓ trans 1,2-dimetil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo hexano ✓ Isopropil ciclo butano ✓ Etil ciclo pentano ✓ trans 1,2-dimetil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo hexano ✓ trans 1,2-dimetil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Metil ciclo hexano ✓ Etil ciclo pentano ✓ trans 1,2-dimetil ciclo pentano
C8	<ul style="list-style-type: none"> ✓ cis 1,3-dimetil ciclo hexano ✓ 1-etil 3-metil ciclo pentano ✓ 1,4-dimetil ciclo hexano ✓ 1,2,4-trimetil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ cis 1,3-dimetil ciclo hexano ✓ 1-etil 3-metil ciclo pentano ✓ 1,4-dimetil ciclo hexano ✓ trans 1,2-dimetil ciclo hexano ✓ Etil ciclo hexano ✓ 1-etil 2-metil ciclo pentano ✓ 1,2,4-trimetil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ cis 1,3-dimetil ciclo hexano ✓ 1-etil 3-metil ciclo pentano ✓ trans 1,2-dimetil ciclo hexano ✓ Etil ciclo hexano ✓ 1,2,4-trimetil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ cis 1,3-dimetil ciclo hexano ✓ 1-etil 3-metil ciclo pentano 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ cis 1,3-dimetil ciclo hexano ✓ 1-etil 3-metil ciclo pentano ✓ 1,4-dimetil ciclo hexano ✓ 1,2,4-trimetil ciclo pentano
C9	✓ 1,1,3-trimetil ciclo hexano	✓ 1,1,3-trimetil ciclo hexano	✓ 1,1,3-trimetil ciclo hexano	✓ 1,1,3-trimetil ciclo hexano	✓ 1,1,3-trimetil ciclo hexano

Tabla 37: Hidrocarburos Aromáticos Presentes en la Gasolina Extra

Nº de C	Aromáticos				
	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos
C6	✓ Benceno	✓ Benceno	✓ Benceno	✓ Benceno	✓ Benceno
C7	✓ Tolueno	✓ Tolueno	✓ Tolueno	✓ Tolueno	✓ Tolueno
C8	✓ Etilbenceno ✓ P-Xileno ✓ O-Xileno	✓ Etilbenceno ✓ P-Xileno ✓ O-Xileno	✓ Etilbenceno ✓ P-Xileno ✓ O-Xileno	✓ Etilbenceno ✓ P-Xileno ✓ O-Xileno	✓ Etilbenceno ✓ P-Xileno ✓ O-Xileno
C9	✓ Propil benceno ✓ 1-etil 2-metil benceno ✓ 1-etil 3-metil benceno ✓ Mesitileno ✓ 1-etil 4-metil benceno ✓ 1,2,3-trimetil benceno ✓ 1,2,4-trimetil benceno	✓ Propil benceno ✓ 1-etil 2-metil benceno ✓ 1-etil 3-metil benceno ✓ Mesitileno ✓ 1-etil 4-metil benceno ✓ 1,2,3-trimetil benceno ✓ 1,2,4-trimetil benceno	✓ Propil benceno ✓ 1-etil 2-metil benceno ✓ 1-etil 3-metil benceno ✓ Mesitileno ✓ 1-etil 4-metil benceno ✓ 1,2,3-trimetil benceno ✓ 1,2,4-trimetil benceno	✓ Propil benceno ✓ 1-etil 2-metil benceno ✓ 1-etil 3-metil benceno ✓ Mesitileno ✓ 1-etil 4-metil benceno ✓ 1,2,3-trimetil benceno ✓ 1,2,4-trimetil benceno	✓ Propil benceno ✓ 1-etil 2-metil benceno ✓ 1-etil 3-metil benceno ✓ Mesitileno ✓ 1-etil 4-metil benceno ✓ 1,2,3-trimetil benceno ✓ 1,2,4-trimetil benceno
C10	✓ 1-metil 3-propil benceno ✓ 1-etil 2,3-dimetil benceno ✓ 1,2-dietil benceno ✓ Tert butil benceno ✓ 2-etil 1,3-dimetil benceno	✓ 1-metil 3-propil benceno ✓ 1-etil 2,3-dimetil benceno	✓ 1-metil 3-propil benceno ✓ 1-etil 2,3-dimetil benceno	✓ 1-etil 2,3-dimetil benceno	✓ Tert butil benceno

Tabla 38: Otros Hidrocarburos Identificados en la Gasolina Extra

Nº de C	Otros				
	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos
C7		✓ 1,5-dimetil ciclo penteno			✓ 1,5-dimetil ciclo penteno
C8	✓ 2-propil 1-pentanol ✓ 2-etil 1-hexanol		✓ 2-propil 1-pentanol		
C9	✓ Indano	✓ Indano	✓ Indano	✓ Indano	✓ Indano

4.2 Resultados Cuantitativos

En primera instancia, se muestran los resultados de acuerdo a los sectores escogidos en la ciudad y posteriormente en un contexto global del Distrito Metropolitano de Quito.

Tabla 39: % en Masa de BTEX Gasolina Extra

EXTRA						
% masa	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos	Promedio
Benceno	1.063	1.039	1.208	1.182	1.045	1.108
Tolueno	8.546	8.639	8.615	8.960	8.639	8.680
Etilbenceno	1.341	1.027	1.330	1.548	1.357	1.320
Para-Xileno	1.196	0.9510	1.222	1.174	1.167	1.142
Orto-Xileno	1.650	1.176	1.590	1.718	1.535	1.534
Total	13.80	12.83	13.97	14.58	13.75	13.78

Tabla 40: % en Volumen de BTEX Gasolina Extra

EXTRA						
% volumen	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos	Promedio
Benceno	0.8490	0.8300	0.9650	0.9440	0.8350	0.8850
Tolueno	6.908	6.983	6.964	7.243	6.983	7.016
Etilbenceno	1.083	0.8290	1.074	1.250	1.096	1.066
Para-Xileno	0.9720	0.7730	0.9940	0.9550	0.9490	0.9290
Orto-Xileno	1.313	0.9360	1.265	1.367	1.221	1.220
Total	11.13	10.35	11.26	11.76	11.09	11.12

Tabla 41: g/galón de BTEX Gasolina Extra

EXTRA						
g/galón	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos	Promedio
Benceno	28.18	27.54	32.02	31.32	27.70	29.35
Tolueno	226.4	228.9	228.3	237.4	228.9	230.0
Etilbenceno	35.54	27.20	35.23	41.02	35.96	34.99
Para-Xileno	31.69	25.20	32.39	31.11	30.94	30.27
Orto-Xileno	43.73	31.17	42.15	45.52	40.69	40.65
Total	365.6	340.0	370.1	386.4	364.2	365.3

Tabla 42: % en Masa de BTEX Gasolina Súper

SUPER						
% masa	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos	Promedio
Benceno	1.285	1.176	1.239	1.528	1.230	1.291
Tolueno	9.568	9.244	9.677	10.22	10.02	9.745
Etilbenceno	1.268	0.8450	1.290	1.313	1.305	1.204
Para-Xileno	1.655	1.008	1.547	1.836	1.582	1.525
Orto-Xileno	1.417	0.9290	1.437	1.533	1.608	1.385
Total	15.19	13.20	15.19	16.43	15.75	15.15

Tabla 43: % en Volumen de BTEX Gasolina Súper

SUPER						
% volumen	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos	Promedio
Benceno	1.099	1.006	1.060	1.307	1.053	1.105
Tolueno	8.286	8.006	8.381	8.849	8.678	8.440
Etilbenceno	1.097	0.7310	1.116	1.136	1.129	1.042
Para-Xileno	1.441	0.8780	1.348	1.599	1.378	1.329
Orto-Xileno	1.208	0.7920	1.225	1.306	1.370	1.180
Total	13.13	11.41	13.13	14.20	13.61	13.10

Tabla 44: g/galón de BTEX Gasolina Súper

SUPER						
g/galón	Sur	Centro - Norte	Norte	Cumbayá	Valle de los Chillos	Promedio
Benceno	36.47	33.39	35.16	43.37	34.93	36.66
Tolueno	271.6	262.4	274.7	290.1	284.5	276.7
Etilbenceno	36.01	24.00	36.61	37.28	37.06	34.19
Para-Xileno	46.97	28.60	43.93	52.12	44.91	43.31
Orto-Xileno	40.24	26.38	40.80	43.51	45.65	39.32
Total	431.3	374.8	431.2	466.4	447.0	430.2

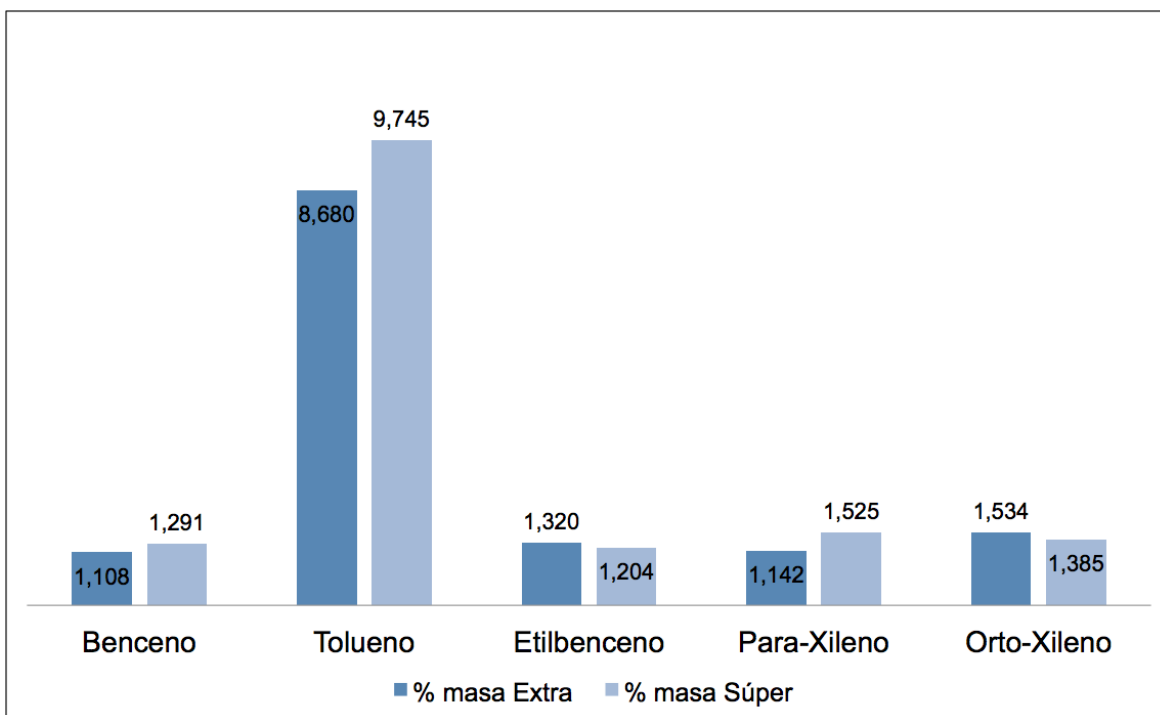


Figura 4.1: % en Masa de BTEX Gasolinas Súper y Extra

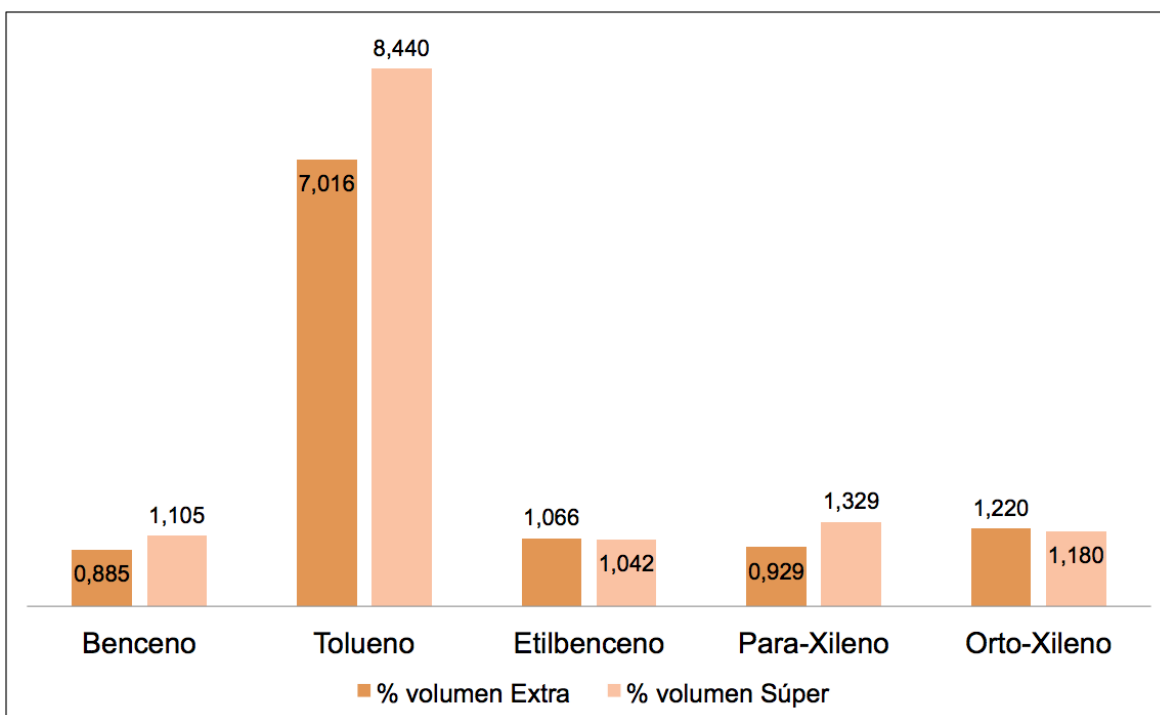


Figura 4.2: % en Volumen de BTEX Gasolinas Súper y Extra

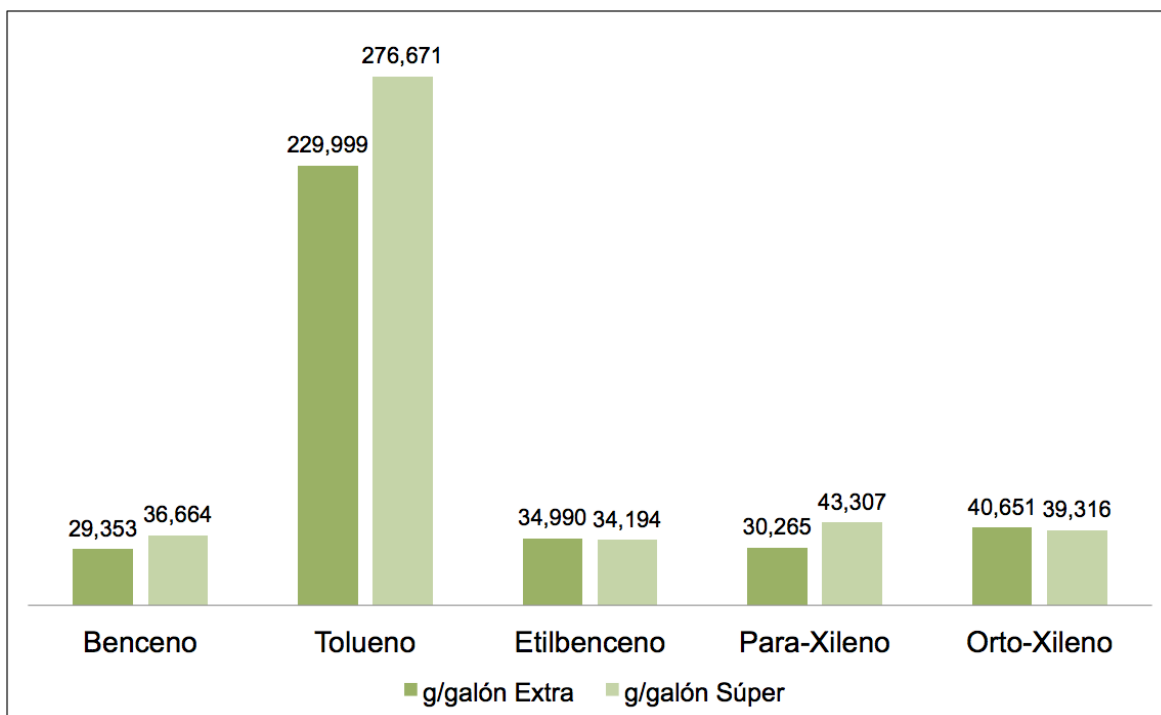


Figura 4.3: g/galón de BTEX Gasolinas Súper y Extra

5 DISCUSIÓN DE DATOS Y RESULTADOS

Todos los estudios existentes con respecto al análisis de BTEX presente en la gasolina, se centran en las emisiones gaseosas o particuladas de estos compuestos, pero no reflejan la base del problema. El problema del alto contenido de aromáticos en las emisiones gaseosas, reflejado en todos los estudios, tiene su origen en la calidad de las gasolinas combustionadas en los automóviles; y más específicamente, en las unidades que producen dichas gasolinas. En el caso específico de las gasolinas distribuidas en el Distrito Metropolitano de Quito, una gasolina de alto octanaje se produce en las unidades de Craqueo Catalítico e Isomerización, de la Refinería de Esmeraldas.

Por lo tanto, el análisis cualitativo puede reflejar de que manera están trabajando las unidades de producción de derivados de la refinería y el análisis cuantitativo puede reflejar de que manera, correcta o incorrecta, se están cubriendo las faltas de aquellas unidades; llegando a establecer un contexto real, sin aproximados, de la situación actual de la refinería principal del Ecuador.

Cualitativamente se identificaron en la gasolina Súper: 23 compuestos aromáticos, tomando en cuenta el Indano y el Naftaleno; 20 compuestos isoparafínicos, 10 compuestos nafténicos, 10 compuestos olefínicos, 3 compuestos parafínicos y otros 3 compuestos que pueden clasificarse como ciclo olefínicos.

En la gasolina Extra se identificaron: 26 compuestos isoparafínicos, 18 compuestos aromáticos incluido el Indano, 13 compuestos nafténicos, 6 compuestos olefínicos, 3 compuestos parafínicos y otros 3 compuestos, dos de cuales se pueden clasificar como alcoholes y el último como ciclo olefínico.

Tabla 45: Diferencias en Hidrocarburos de la Gasolina Súper y Extra

Tipo de Hidrocarburo	Presente solo en Súper	Presente solo en Extra
Parafínico	-	-
Isoparafínico	2,4-dimetil 1-decano 4,4-dimetil undecano	4-metil heptano 2,3-dimetil hexano 3-etil 2-metil pentano 2,2-dimetil hexano 2,6-dimetil heptano 3-etil 2,2-dimetil pentano 4-etil 2-metil hexano 2,5-dimetil heptano 3,4-dietil hexano 2,5-dimetil nonano
Olefínico	3-metil 3-hexeno 4-metil 2-hexeno 5,5-dimetil 1-hexeno 5,5-dimetil 2-hexeno 2,4-dimetil 1-deceno	6-metil 2-undeceno 2,2,4,6,6-pentametil 3-hepteno
Nafténico	-	Isopropil ciclobutano 1,4-dimetil ciclohexano Etil ciclohexano 1-etil 2-metil ciclopentano
Aromático	1,3-dimetil benceno Cumeno 1,3-dietil benceno 1-metil 2-propil benceno Naftaleno	-
Otros	1-metil ciclopenteno 1,2,3-trimetil ciclopenteno	2-propil 1-pentanol 2-etil 1-hexanol

Como se observa en la Tabla 45, no existe diferencia en cuanto a los compuestos parafínicos de ambas gasolinas. Sin embargo, en la gasolina Extra resalta la cantidad superior de isoparafinas y naftenos encontrados; esto explica porque no se encuentran más aromáticos en la gasolina Extra, como se observó en las Secciones 2.6 y 2.8 las moléculas altamente ramificadas (isoparafinas) y los

compuestos cíclicos favorecen al número de octano. Por otro lado, la ausencia de otros aromáticos en la gasolina Extra (87 octanos), se explica para el aumento del octanaje de la gasolina Súper (92 octanos), debido a la ausencia de compuestos altamente ramificados u otros cíclicos en esta última.

En ambas gasolinas se observan hidrocarburos olefínicos, algo no recomendable en derivados comerciales del crudo de petróleo, ya que dichos hidrocarburos son altamente reactivos y tienden a la formación de gomas en los motores.

En más de una de las gasolinas Extra muestreadas, pero no en la mayoría, se encontraron hidrocarburos con grupos alcohol. Esto se entiende como parte del proyecto de Petroecuador, para introducir la gasolina Ecopaís (gasolina con etanol) en todo el Ecuador, como lo manifestó el Ing. Henry Ramírez representante de la empresa. Las gasolinas muestreadas que presentaron grupos alcohol pueden ser parte de un estudio de Petroecuador para observar la factibilidad de la inclusión de gasolinas con etanol en la Región Sierra del país.

También se observan, en ambas gasolinas, hidrocarburos parafínicos, en los cuales destaca la presencia de heptano, hidrocarburo que tiene el valor de cero en la escala de octanaje.

La gasolina Extra es una mejor opción a la hora de considerar el aspecto de contaminación ambiental y riesgos para la salud, ya que presenta mayor cantidad de isoparafinas y menor cantidad de aromáticos.

Cabe recalcar que en este estudio solo se detectaron el para - Xileno y el orto - Xileno; la ausencia del meta - Xileno, en los resultados del primer análisis (Sección 4.1) y en la curva de calibración del segundo análisis, se explica por la

similitud del para y meta Xilenos, ambos presentan prácticamente el mismo punto de ebullición, como se observa en la Tabla 16.

Cuantitativamente se encontró, en promedio, las siguientes cantidades de BTEX en las gasolinas del Distrito Metropolitano de Quito.

Tabla 46: Contenido Promedio de BTEX en las Gasolinas del DMQ

Compuesto	Gasolina Extra			Gasolina Súper		
	% masa	% volumen	g/galón	% masa	% volumen	g/galón
Benceno	1.108	0.8850	29.35	1.291	1.105	36.66
Tolueno	8.680	7.016	230.0	9.745	8.440	276.7
Etilbenceno	1.320	1.066	34.99	1.204	1.042	34.19
P-Xileno	1.142	0.9290	30.27	1.525	1.329	43.31
O-Xileno	1.534	1.220	40.65	1.385	1.180	39.32
Total	13.78	11.12	365.3	15.15	13.10	430.2

Como es de esperarse el contenido de BTEX es mayor en la gasolina Súper; supera en un 2% al contenido de BTEX en la gasolina Extra de acuerdo al porcentaje en volumen, porcentaje de contenido de aromáticos en el que se detallan las normas INEN.

Aunque el 2% en volumen no parezca algo excesivo, si se observan las diferencias en g/galón se puede apreciar la magnitud de esta diferencia.

Se observó que el Tolueno es el aromático de mayor contenido en los dos tipos de gasolina. En la gasolina Extra después de Tolueno, de mayor a menor contenido, encontramos: O-Xileno, Etilbenceno, P-Xileno y Benceno. En la gasolina Súper después de Tolueno, de mayor a menor contenido, encontramos: P-Xileno, O-Xileno, Benceno y Etilbenceno.

Las normas INEN correspondientes a los requisitos de la gasolina en el Ecuador, no establecen niveles máximos permisibles de Tolueno, Etilbenceno y Xilenos; solo establecen un valor máximo para el benceno, sin contar con un valor mínimo que serviría como estandarización para la calidad de la gasolina en el país. El valor promedio de benceno, en porcentaje en volumen, encontrado en la gasolina Extra es de 0.8850% y el de la gasolina Súper es de 1.105%. Actualmente, según el Reglamento Técnico Ecuatoriano INEN 028:2011, que detalla los requisitos de la gasolina a partir de agosto de 2014, el contenido de benceno encontrado supera al permisible, que es 0.6% en volumen tanto para la gasolina Extra como para la Súper. Se observó que en la gasolina Súper el contenido máximo de benceno es prácticamente el doble del permitido.

El RTE INEN 028:2011 también detalla el contenido máximo de aromáticos en la gasolina, 35% para los dos tipos. Esto se contradice con la otra referencia, la NTE INEN 935:2012, ya que en ella se establecen niveles máximos de benceno de 1% y 2%; y de aromáticos de 30% y 35% para la gasolina Extra y Súper respectivamente. Es decir, se pretende bajar el contenido de benceno en la gasolina Extra, de 1% a 0.6% en volumen, pero aumentar en un 5% su contenido de otros aromáticos.

Solamente de BTEX, el porcentaje en volumen asciende a 11.12% y 13.10% para la gasolina Extra y Súper respectivamente. Con todos los aromáticos encontrados en el análisis cualitativo se esperaría que el contenido en volumen de aromáticos supere el 35% permisible fácilmente.

6 CONCLUSIONES

- Se determinaron todos los hidrocarburos que conforman la gasolina Súper y Extra del Distrito Metropolitano de Quito. Se determinó que la gasolina Extra presenta mayor cantidad de isoparafinas y compuestos cíclicos, que la gasolina Súper; que presenta mayor cantidad de aromáticos.
- Se determinó que en más de una de las gasolinas Extra analizadas existen hidrocarburos con grupos alcohol, lo que aduce la introducción de la gasolina Ecopaís (gasolina con etanol) en la Región Sierra del Ecuador.
- Cuantitativamente se encontró, en promedio, las siguientes cantidades de BTEX en las gasolinas del Distrito Metropolitano de Quito:

Compuesto	Gasolina Extra			Gasolina Súper		
	% masa	% volumen	g/galón	% masa	% volumen	g/galón
Benceno	1.108	0.8850	29.35	1.291	1.105	36.66
Tolueno	8.680	7.016	230.0	9.745	8.440	276.7
Etilbenceno	1.320	1.066	34.99	1.204	1.042	34.19
P-Xileno	1.142	0.9290	30.27	1.525	1.329	43.31
O-Xileno	1.534	1.220	40.65	1.385	1.180	39.32
Total	13.78	11.12	365.3	15.15	13.10	430.2

- Se determinó que el contenido de BTEX en la gasolina Súper es 2% mayor, en volumen, que en la gasolina Extra.
- Se determinó que el Tolueno es el aromático de mayor contenido en los dos tipos de gasolina.
- Se determinó que no todos los BTEX se encuentran en mayor proporción en la gasolina Súper. El Etilbenceno (1.066%) y el O-Xileno (1.220%) se encuentran en mayor porcentaje en la gasolina Extra.

- El contenido máximo de benceno establecido en el RTE INEN 028:2011, 0.6% en volumen, no se está cumpliendo en los dos tipos de gasolina; en la gasolina Extra es de 0.8850% y en la gasolina Súper es 1.105%, casi el doble.
- La Refinería de Esmeraldas se encuentra en remodelación hasta el 15 de Septiembre de 2015. Los principales cambios a realizarse son el Reactor y Regenerador de la unidad FCC, para procesar el crudo existente en la actualidad.
- Los cambios en la Refinería de Esmeraldas no pretenden aumentar la capacidad de producción de derivados de petróleo, sino simplemente recuperar la capacidad perdida .

7 RECOMENDACIONES

Los 216 análisis correspondientes al análisis cuantitativo se encuentran guardados en la base de datos del GC-MS Shimadzu QP-2010 Ultra. Para saber con exactitud el contenido de parafinas, isoparafinas, olefinas, naftenos, aromáticos (aparte de BTEX) y otros hidrocarburos, ya determinados; se recomienda adquirir los estándares de estos compuestos y simplemente realizar la curva de calibración de los mismos para la cuantificación.

Como proyecto anexo se pueden identificar otras propiedades de la gasolina en el Ecuador, como verificar el número de octanaje a través de las normas ASTM existentes.

Otro proyecto anexo que puede desarrollarse, de acuerdo a la ingeniería de procesos, es la remediación de aguas contaminadas con BTEX. Específicamente la foto - remediación a través de luz ultravioleta y exposición a ozono, que se ha comprobado elimina la mayor parte de BTEX en aguas contaminadas.

8 BIBLIOGRAFÍA

- Acevedo García, J. (2006). *Evaluación del riesgo para la salud humana asociado a la exposición a BTEX en las gasolineras de Quito*. Quito: Universidad San Francisco de Quito.
- Altamirano Sánchez, E., & Fernández Villagómez, G. (2001). *Prácticas apropiadas para disminuir los riesgos ambientales por el manejo de gasolina en estaciones de servicio*. (V. Ramos Radilla, Ed.) México, D.F., México: Centro Nacional de Prevención de Desastres.
- ARCH. (2014). *Listado Estaciones de Servicio Ubicadas en la Ciudad de Quito*. Agencia de Regulación y Control Hidrocarburífero, Quito.
- Asociación de la Industria Hidrocarburífera del Ecuador AIHE. (15 de Junio de 2008). Precio del Petróleo: Impacto en la Economía Ecuatoriana . *Revista Petróleo y Gas*.
- ASTM. (2015). *About ASTM*. Recuperado el 13 de Noviembre de 2014, de American Society for Testing and Materials : <http://www.astm.org/ABOUT/faqs.html>
- ATSDR. (9 de Diciembre de 2014). *Resúmenes de Salud Pública - Etilbenceno*. Recuperado el 13 de Noviembre de 2014, de Agencia para Sustancias Tóxicas y el Registro de Enfermedades: http://www.atsdr.cdc.gov/es/phs/es_phs110.html
- BG Latin America. (20 de Septiembre de 2013). *BG LAT*. Recuperado el 15 de Octubre de 2014, de Octanaje (Índice de Octano): <http://www.bglat.com/articles/octanaje.html>

- Biografías y Vidas. (2004). *Thomas Midgley*. Recuperado el 26 de Mayo de 2014, de <http://www.biografiasyvidas.com/biografia/m/midgley.htm>
- Brain, M. (2014). *How Stuff Works*. Recuperado el 11 de Noviembre de 2014, de How Car Engines Work: <http://auto.howstuffworks.com/engine1.htm>
- Carvajal, P., & Orbe, A. (2013). *Balance Energético Nacional 2013*. Quito: Ministerio Coordinador de Sectores Estratégicos.
- Carvajal, P., & Orbe, A. (2014). *Balance Energético Nacional 2014*. Quito: Ministerio Coordinador de Sectores Estratégicos.
- ChemSpider. (2014). *ChemSpider Search and share chemistry*. (Royal Society of Chemistry) Recuperado el 29 de Mayo de 2014, de <http://www.chemspider.com>
- Chow Pangtay, S. (1996). *Petroquímica y Sociedad*. México D.F., México: Fondo de Cultura Económica.
- Cuaderno de la Cultura Científica. (24 de Marzo de 2014). *El caso de Thomas Midgley, Jr.* Recuperado el 26 de Mayo de 2014, de <http://culturacientifica.com/2014/03/24/el-caso-de-thomas-midgley-jr/>
- EMERSON Process Management. (15 de Junio de 2013). Recuperado el 15 de Octubre de 2014, de Continuous Catalyst Regeneration: http://www.documentation.emersonprocess.com/groups/publicreadonly/documents/webpage/ad129_ref.hcsp

Encyclopædia Britannica. (2014). *Nikolaus August Otto*. Recuperado el 15 de Octubre de 2014, de Encyclopædia Britannica Online: <http://www.britannica.com/EBchecked/topic/434878/Nikolaus-August-Otto>

EPA. (19 de Enero de 2000). *What is benzene and what are its health effects? What is EPA doing about benzene?* Recuperado el 13 de Noviembre de 2014, de United States Environmental Protection Agency: <http://www.epa.gov/iris/subst/0276.htm#carc>

Google Maps. (2014). Recuperado el 10 de Octubre de 2014, de Maps Engine: <https://mapsengine.google.com>

GreenFacts. (2015). *EPA Cancer Classification*. Recuperado el 11 de Diciembre de 2014, de <http://www.greenfacts.org/glossary/def/epa-cancer-classification.htm>

Handwerk, G. E., & Gary, J. H. (1980). *Refino de Petróleo - Tecnología y Economía*. Barcelona, España: Reverté.

Hidrobo, A. (2004). *Síntesis y Caracterización de Aluminosilicatos Mesoporosos con Aplicación en el Craqueo Catalítico del Petróleo*. Santiago, Chile: Universidad de Chile, Tesis de Doctorado.

Howard, F. (2000). *The Octane Scale*. (Polymer Science Learning Center and the Chemical Heritage Foundation) Recuperado el 26 de Mayo de 2014, de The Birth of an Industry: <http://pslc.ws/macrog/exp/rubber/synth/octane.htm>

Hyne, N. (2001). *Nontechnical Guide to Petroleum Geology, Exploration, Drilling, and Production*. Tulsa, Oklahoma, USA: PennWell Corporation.

INEN. (2011). *Reglamento Técnico Ecuatoriano RTE INEN 028*. Quito, Ecuador: Instituto Ecuatoriano de Normalización.

INEN. (2012). *Norma Técnica Ecuatoriana NTE INEN 935*. Quito, Ecuador: Instituto Ecuatoriano de Normalización.

Kogan, E. (28 de Noviembre de 2014). *Huffington Post*. Recuperado el 15 de Octubre de 2014, de Cuántos vehículos hay en el mundo, quienes los fabrican y que se espera para el futuro: http://voces.huffingtonpost.com/enrique-kogan/numero-de-vehiculos-en-el-mundo_b_6237052.html

Leibrand, R. J. (1999). *Latest Enhancements to the GC/MS Analysis of Gasoline by ASTM Method D-5769*. Agilent Technologies. Agilent Technologies.

López Blanco, M. E. (2005). *Estudio de la contaminación por hidrocarburos volátiles (BTEX) en un sitio de derrame de gasolina*. Managua, Nicaragua: Universidad Nacional Autónoma de Nicaragua.

Montoya, S. A., & Páez, C. A. (2012). *Documentación de la Técnica de Cromatografía de Gases en el Análisis de Hidrocarburos Alifáticos en Aguas Residuales*. Pereira, Colombia: Universidad Tecnológica de Pereira.

NIST Mass Spectrometry Data Center. (2014). *NIST National Institute of Standards and Technology*. Recuperado el 5 de Agosto de 2014, de p-Xylene: <http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C106423&Mask=200>

- Paucar, M. (2011). *Estudio de la actividad del catalizador circulante en la unidad de craqueo catalítico fluidizado (FCC) de la Refinería Estatal Esmeraldas (REE)*. Quito, Ecuador: Universidad San Francisco de Quito.
- Pérez Juárez, N. (2012). *Métodos Semiautomáticos para la Medida de Benceno, Tolueno y Xilenos (BTX) en aire*. La Coruña, España: Universidad de A Coruña.
- Poveda, R., Merizalde, P., Calvopiña, M., Pareja, C., Carrillo, R., Ordoñez, C., y otros. (2013). *El Petróleo en el Ecuador - La Nueva Era Petrolera* (1ª Edición ed.). Ecuador: Manthra Comunicación Integral y Producción Editorial.
- Ramírez Peñaherrera, V. (2012). *Cuantificación de compuestos aromáticos (BTEX) en las emisiones gaseosas de fuentes móviles terrestres de gasolina en el Distrito Metropolitano de Quito*. Quito: Universidad Central del Ecuador.
- Ramírez, H. (26 de Enero de 2015). Cambios Estructurales Programados en la Refinería de Esmeraldas. (A. Salazar Almeida, Entrevistador) Quito, Ecuador.
- Real Academia Española. (2014). *Real Academia Española. Diccionario Usual*. Recuperado el 15 de Octubre de 2014, de <http://buscon.rae.es/drae/srv/search?val=crudo>
- Schifter, I., & López, E. (1998). *Usos y Abusos de la Gasolina*. México D.F.: Fondo de Cultura Económica.

Secretaría de Energía República Argentina. (2013). Recuperado el 22 de Octubre de 2014, de Conceptos sobre Hidrocarburos: http://www.energia.gov.ar/contenidos/archivos/Reorganizacion/contenidos_didacticos/publicaciones/hidrocarburos.pdf

SIEMENS. (Julio de 2007). *Crude Distillation Unit*. Recuperado el 12 de Octubre de 2014, de https://extranet.w3.siemens.com/us/internet-dms/ia/appliedautomation/appliedautomation/docs_ap/crudedistillationunit.pdf

SIGMA-ALDRICH. (2014). *Certificate of Analysis BTEX-Standard*. Saint Louis.

Trujillo, R. (2010). *Hidrocarburos. Manejo seguro* (4ta edición ed.). Bogotá, Colombia: Ecoe Ediciones.

Wade, L. G. (2010). *Química Orgánica*. Madrid, España: Pearson Prentice Hall.

ANEXO A

Anexo A: Requisitos de Gasolina Súper y Extra NTE INEN 935:2012

REQUISITOS	UNIDAD	EXTRA		SÚPER		MÉTODO DE ENSAYO
		Mínimo	Máximo	Mínimo	Máximo	
Número de Octano de Investigación	RON	87	---	92	---	NTE INEN 2102
Destilación: 10%	°C	---	70	---	70	NTE INEN 926
50%	°C	77	121	77	121	
90%	°C	---	189	---	190	
Punto final	°C	---	215	---	220	
Residuo de destilación, φ	%	---	2	---	2	
Relación vapor - líquido a 60 °C, V/L	---	---	20	---	20	NTE INEN 932 ASTM D 5188
Presión de vapor	kPa	---	60	---	60	NTE INEN 928 ASTM D 4953 ASTM D 5191
Corrosión a la lámina de cobre (3 h a 50 °C)	---	---	1	---	1	NTE INEN 927
Contenido de gomas	mg/100 cm ³	---	3	---	4	NTE INEN 933
Contenido de azufre, W _s	ppm	---	650	---	650	NTE INEN 929 ASTM D 4294
Contenido de aromáticos, φ_a	%	---	30	---	35	NTE INEN 2252 ASTM D 6730
Contenido de benceno, φ_b	%	---	1	---	2	ASTM D 3606 ASTM D 5580 ASTM D 6277
Contenido de olefinas, φ_o	%	---	18	---	25	NTE INEN 2252 ASTM D 6730
Estabilidad a la oxidación	mín	240	---	240	---	NTE INEN 934
Contenido de oxígeno, φ_{O_2}	%	---	2.7	---	2.7	ASTM D 4815 ASTM D 5845
Contenido de plomo	mg/L	---	Ver * y **	---	Ver * y **	ASTM D 3237 ASTM D 5185
Contenido de manganeso	mg/L	---	Ver * y **	---	Ver * y **	ASTM D 3831 ASTM D 5185
Contenido de hierro	mg/L	---	Ver * y **	---	Ver * y **	ASTM D 5185

* Sin adición intencional

** No detectable de acuerdo al método de ensayo

 φ Porcentaje en volumen

ANEXO B

Anexo B: Requisitos de Gasolina Súper y Extra RTE INEN 028:2011

REQUISITOS	UNIDAD	EXTRA		SÚPER		MÉTODO DE ENSAYO
		Mínimo	Máximo	Mínimo	Máximo	
Número de Octano de Investigación	RON	91	---	95	---	NTE INEN 2102
Destilación: 10%	°C	---	70	---	70	NTE INEN 926
50%	°C	77	121	77	121	
90%	°C	---	189	---	190	
Punto final	°C	---	215	---	220	
Residuo de destilación, φ	%	---	2	---	2	
Relación vapor - líquido a 60 °C, V/L	---	---	20	---	20	NTE INEN 932 ASTM D 5188
Presión de vapor	kPa	---	56	---	56	NTE INEN 928 ASTM D 4953 ASTM D 5191
Corrosión a la lámina de cobre (3 h a 50 °C)	---	---	1	---	1	NTE INEN 927
Contenido de gomas	mg/100 cm ³	---	2	---	3	NTE INEN 933
Contenido de azufre, W_s	%	---	0.0010	---	0.0010	NTE INEN 929 ASTM D 4294
Contenido de aromáticos, φ_a	%	---	35	---	35	NTE INEN 2252 ASTM D 6730
Contenido de benceno, φ_b	%	---	0.6	---	0.6	ASTM D 3606 ASTM D 5580 ASTM D 6277
Contenido de olefinas, φ_o	%	---	18	---	18	NTE INEN 2252 ASTM D 6730
Estabilidad a la oxidación	mín	240	---	240	---	NTE INEN 934
Contenido de oxígeno, φ_{O_2}	%	---	3.5	---	3.5	ASTM D 4815 ASTM D 5845
Contenido de plomo	mg/L	---	Ver * y **	---	Ver * y **	ASTM D 3237 ASTM D 5185
Contenido de manganeso	mg/L	---	Ver * y **	---	Ver * y **	ASTM D 3831 ASTM D 5185
Contenido de hierro	mg/L	---	Ver * y **	---	Ver * y **	ASTM D 5185

* Sin adición intencional

** No detectable de acuerdo al método de ensayo

 φ Porcentaje en volumen

ANEXO C

Anexo C: Ejemplo de Preparación de un Batch de Análisis

GC Ready

MS Not Ready

Line1 Line2

Flow: 60 2

Press Totaf: 30 30 30

Spill(Valve Open): 30 30 30

Temperature: 26

SPLI: 26

Oven: IonSic

Vacuum: 30 30 30

L.Vac: H.Vac.

Ionization Mode: EI

GC Consumables:

MS Consumables:

Detail...

Val#	Sample Name	Sample ID	Sample Type	Analysis Type	Method File	Data File	Level#	Inj. Volume	ISTD Amt.	Report Output	Report File	Tuning File	Data Description
1	CN35	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 001.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	MOBIL AV VARGAS Y	
2	CN3E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 002.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	MOBIL AV VARGAS Y	
3	CN3E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 002.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	DISPETROL AV AME	
4	CN4S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 003.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	DISPETROL AV AME	
5	CN4S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 003.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	DISPETROL AV AME	
6	CN4E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 004.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PRIMAX AV FCO DE	
7	CN4E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 004.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PRIMAX AV FCO DE	
8	CN5S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 005.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR. A	
9	CN5E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 006.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR. A	
10	CN5E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 006.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	DISPETROL AV. 6 DE	
11	CN7S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 009.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	DISPETROL AV. 6 DE	
12	CN7E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 010.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR AV.	
13	CN7E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 010.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR AV.	
14	CN8S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 011.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR AV.	
15	CN8S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 011.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR AV.	
16	CN8E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 012.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	MOBIL AV ORIENTAL	
17	CN8E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 012.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	MOBIL AV ORIENTAL	
18	CN9S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 013.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR AV.	
19	CN9E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 014.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR AV.	
20	CN10S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 015.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR AV.	
21	CN10S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 015.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR AV.	
22	CN10E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 016.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PRIMAX AV GRAL E	
23	CN10E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 016.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PRIMAX AV GRAL E	
24	N1S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 017.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR AV.	
25	N1S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 017.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR AV.	
26	N1E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 018.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PRIMAX AV GRAL E	
27	N1E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 018.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PRIMAX AV GRAL E	
28	N2S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 019.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR AV.	
29	N2S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 019.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PETROECUADOR AV.	
30	N2E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 020.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PRIMAX AV GRAL E	
31	N2E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 020.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PRIMAX AV GRAL E	
32	N3S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 021.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PRIMAX AV GRAL E	
33	N3S	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 021.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PRIMAX AV GRAL E	
34	N3E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 021.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PRIMAX AV GRAL E	
35	N3E	0:Uknown	IT Q1 LT STT LS	file: BTX.qgm	sto 021.gpd	1	0.1	Level1 Con	<input checked="" type="checkbox"/>	z:\modelo 2 agr	S 12-9-14.ggt	PRIMAX AV GRAL E	

Folder: C:\GC\MSolution\Data\DavidE\Trabajo Andrés Sáezar

Batch: Top Settings Wizard Start Pause/Restart Stop Method Development Guide

Batch Table

ANEXO D

Anexo D: GCMS Postrun Software Analysis

The screenshot displays the GCMS Postrun software interface. At the top, there is a menu bar with options like 'File', 'Compound Table', 'View', 'Qualitative', 'Quantitative', 'Layout', 'Tools', 'Window', and 'Help'. Below the menu is a toolbar with various icons for file operations and analysis.

The main window is divided into several sections:

- Method File Name:** 2-line_81X.dgm
- Analyzed by:** Admin
- [Analyzed]:**
- [Sample Type]:** Unknown
- [Sample Name]:** CNTS
- [Sample ID]:** CNTS
- [Comment]:** PRIMAX AV. AMERICA Y CO

The central part of the interface shows a Total Ion Chromatogram (TIC) plot. The x-axis represents time in minutes, ranging from approximately 2.5 to 32.5. The y-axis represents intensity. Two peaks are highlighted with their retention times and scan numbers: one at 2.9100 (Scan 1100) and another at 4.5277 (Scan 1108). The plot is labeled 'TIC & MIC #1>#1'.

Below the chromatogram, there is a table listing files and their properties:

File Name	Modified Date	Size
BATCHCH125...	11/18/2014 10:20 AM	656...
BATCHCH124...	11/18/2014 10:12 AM	659...
BATCHCH123...	11/18/2014 10:05 AM	656...
BATCHCH122...	11/18/2014 10:01 AM	657...
BATCHCH121...	11/18/2014 9:56 AM	662...
BATCHCH120...	11/18/2014 9:51 AM	657...
BATCHCH119...	11/18/2014 9:46 AM	660...
BATCHCH118...	11/18/2014 9:40 AM	664...
BATCHCH117...	11/18/2014 9:34 AM	657...
BATCHCH116...	11/18/2014 9:30 AM	657...
BATCHCH115...	11/18/2014 9:20 AM	667...
BATCHCH114...	11/18/2014 9:15 AM	656...
BATCHCH113...	11/18/2014 9:09 AM	661...
BATCHCH112...	11/17/2014 6:35 PM	662...
BATCHCH111...	11/17/2014 6:23 PM	667...
BATCHCH110...	11/17/2014 6:12 PM	668...
BATCHCH109...	11/17/2014 6:00 PM	669...
BATCHCH108...	11/17/2014 4:58 PM	663...
BATCHCH107...	11/17/2014 4:47 PM	518...
BATCHCH106...	11/17/2014 4:36 PM	634...
BATCHCH105...	11/17/2014 4:22 PM	656...
BATCHCH104...	11/17/2014 3:53 PM	665...
BATCHCH103...	11/17/2014 3:42 PM	652...
BATCHCH102...	11/17/2014 3:31 PM	659...
BATCHCH101...	11/17/2014 3:21 PM	660...

At the bottom right, there is a mass spectrum plot showing relative intensity versus m/z. The x-axis ranges from 50 to 300. The y-axis represents relative intensity from 0 to 100%. A base peak is observed at m/z 57. Other significant peaks are labeled at m/z 49, 71, 85, 92, 112, 122, 142, 161, 172, 180, 194, 215, 224, 242, 254, 271, 282, and 292.

Navigation buttons at the bottom include 'Top', 'Fragment Table', 'Peak Integration for All TICs', 'Qualitative Table', 'Similarity Search', 'Report', and 'Guide'.

ANEXO E

Anexo E: Picos Resultantes Mayores al 1% en Área

Qualitative Table

Peak#	Ret. Time	Start Time	End Time	m/z	Area	Area%	Height	Height%	A/H	Mark	Name
1	1.207	1.193	1.253	TIC	1803458	1.96	158893	5.20	1.13	V	Hexane, 3,4-dimethyl-
2	1.295	1.253	1.347	TIC	6695723	7.26	3411465	11.17	1.96		Pentane, 2,2-dimethyl-
3	1.368	1.347	1.387	TIC	2280189	2.47	1416355	4.64	1.61	V	Heptane
4	1.399	1.387	1.460	TIC	1911577	2.07	730167	2.39	2.62	V	Cyclopentane, 1,5-dimethyl-
5	1.729	1.620	1.780	TIC	4232327	4.93	1267239	4.15	3.34		Cyclohexane, methyl-
6	2.033	1.967	2.100	TIC	297261	3.23	887938	2.91	3.35	V	Pentane, 2,3-dimethyl-
7	2.152	2.100	2.193	TIC	2568359	2.79	98407	3.24	2.60	V	Pentane, 2,3-dimethyl-
8	2.294	2.193	2.280	TIC	2316574	2.51	799122	2.62	2.90	V	Heptane, 2-methyl-
9	2.336	2.280	2.400	TIC	18616467	18.04	493497	16.17	3.37	V	Toluene
10	2.500	2.440	2.533	TIC	1157271	1.26	447979	1.47	2.58	V	Hexane, 2,5-dimethyl-
11	2.828	2.787	2.893	TIC	2087334	2.26	763783	2.50	2.73	V	Heptane, 2,4-dimethyl-
12	4.182	4.127	4.267	TIC	3547086	3.85	122684	4.02	2.89	V	Ethylbenzene
13	4.399	4.267	4.507	TIC	8669402	9.40	2209014	7.23	3.92	V	p-Xylene
14	4.978	4.880	5.067	TIC	4146572	4.50	1378312	4.51	3.01	V	o-Xylene
15	6.379	6.640	6.827	TIC	2028933	2.20	646414	2.12	3.14	V	Benzene, propyl-
16	6.979	6.827	7.033	TIC	6164737	6.63	1701378	5.57	3.62		Benzene, 1-ethyl-2-methyl-
17	7.078	7.033	7.167	TIC	2942004	3.19	861561	3.15	3.06	V	Benzene, 1-ethyl-3-methyl-
18	7.248	7.167	7.327	TIC	3159593	3.42	96928	3.17	3.26	V	Benzene, 1,2-dimethyl-
19	7.548	7.473	7.613	TIC	2446513	2.65	763800	2.50	3.20	V	Benzene, 1-ethyl-4-methyl-
20	8.110	8.013	8.220	TIC	8914385	9.67	2275448	7.45	3.92	V	Benzene, 1,2,4-trimethyl-
21	9.062	8.920	9.147	TIC	2783106	3.02	695359	2.28	4.00	V	Benzene, 1-ethyl-3-methyl-
22	9.563	9.433	9.573	TIC	1329960	1.44	246072	0.81	5.10	V	Indane
23	10.403	10.300	10.513	TIC	1414454	1.53	223367	0.73	6.93	V	1,3,5-Cycloheptatriene, 3,7,7-trimethyl-

Data Explorer - Data

Project in: C:\GDS\solution\Data\Dev\E\Trabajo Andres Salazar

File Name	Modified Date	Size
BATCH\CH25...	11/18/2014 10:20 AM	656...
BATCH\CH24...	11/18/2014 10:12 AM	659...
BATCH\CH23...	11/18/2014 10:05 AM	656...
BATCH\CH22...	11/18/2014 10:01 AM	657...
BATCH\CH21...	11/18/2014 9:56 AM	662...
BATCH\CH20...	11/18/2014 9:51 AM	657...
BATCH\CH19...	11/18/2014 9:46 AM	660...
BATCH\CH18...	11/18/2014 9:40 AM	664...
BATCH\CH17...	11/18/2014 9:34 AM	657...
BATCH\CH16...	11/18/2014 9:30 AM	657...
BATCH\CH15...	11/18/2014 9:20 AM	667...
BATCH\CH14...	11/18/2014 9:15 AM	656...
BATCH\CH13...	11/18/2014 9:09 AM	661...
BATCH\CH12...	11/17/2014 6:35 PM	662...
BATCH\CH11...	11/17/2014 6:23 PM	667...
BATCH\CH10...	11/17/2014 6:12 PM	668...
BATCH\CH09...	11/17/2014 6:00 PM	669...
BATCH\CH08...	11/17/2014 4:58 PM	663...
BATCH\CH07...	11/17/2014 4:47 PM	518...
BATCH\CH06...	11/17/2014 4:36 PM	654...
BATCH\CH05...	11/17/2014 4:22 PM	656...
BATCH\CH04...	11/17/2014 3:53 PM	665...
BATCH\CH03...	11/17/2014 3:42 PM	652...
BATCH\CH02...	11/17/2014 3:31 PM	659...
BATCH\CH01...	11/17/2014 3:21 PM	660...

Max Intensity: 4,948,657

Analyzed by: Admin
 Analyzed: 11/13/2014 12:31
 Sample Type: Unknown
 Level #: 1
 Sample Name: CNIS
 Sample ID: PRIMAX AV
 Description: AMERICA Y COLON

ANEXO G

Anexo G: Utilidad del Similarity Search

Similarity Search Results

Report View Compound Info Process Help

Hit#	Similar Regis	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	97	Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	120	C9H12	NST11.lib
2	97	Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	120	C9H12	NST11.lib
3	96	Benzene, 1-ethyl-4-methyl-	120	C9H12	NST11.lib
4	94	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	138	C9H12	NST11.lib
5	93	Benzene, 1,2,4-trimethyl-	138	C9H12	NST11.lib
6	91	Benzene, (1-methyl-ethyl)-	138	C9H12	NST11.lib
7	91	Mesitylene	134	C9H12	NST11.lib
8	91	Hydroquinone, methyl-(phenylethyl)-	151	C9H13NO	NST11.lib
9	89	Ether, p-methylbenzyl vinyl	148	C10H12O	NST11.lib
10	89	1-Ethoxy-4-methylbenzene	134	C9H10O	NST11.lib

Qualitative Table

Peak#	Ret. Time	Start	End	Time	m/z	Area	Area%	Height	Height%	A/H	Mark	Nea
9	2.336	2.280	2.440	2.440	TIC	16616467	18.04	4934897	16.17	3.37	V	Toluene
10	2.800	2.440	2.533	2.533	TIC	1157271	1.26	447979	1.47	2.88	V	Heptane, 2,2,5-trimethyl-
11	2.828	2.787	2.893	2.893	TIC	2087834	2.26	76783	2.50	2.73	V	Heptane, 2,4-dimethyl-
12	4.182	4.127	4.267	4.267	TIC	3547086	3.85	129064	4.02	2.89	V	Ethylbenzene
13	4.399	4.267	4.507	4.507	TIC	8689402	9.40	228014	7.23	3.92	V	p-Xylene
14	4.978	4.880	5.067	5.067	TIC	4145572	4.50	1378312	4.51	3.01	V	o-Xylene
15	6.297	6.840	6.827	7.033	TIC	2028893	2.20	646414	2.12	3.14	V	Benzene, propyl-
16	6.379	6.827	7.033	7.033	TIC	6164737	6.69	1709378	5.57	3.62	V	Benzene, 1-ethyl-2-methyl-
17	7.078	7.033	7.167	7.167	TIC	2942004	3.19	961661	3.15	3.06	V	Benzene, 1-ethyl-3-methyl-
18	7.248	7.167	7.327	7.327	TIC	3155593	3.42	969228	3.17	3.26	V	Benzene, 1,2,3-trimethyl-
19	7.548	7.473	7.613	7.613	TIC	2445513	2.65	763880	2.50	3.20	V	Benzene, 1-ethyl-4-methyl-
20	8.110	8.013	8.220	8.220	TIC	8914385	9.67	2275448	7.45	3.92	V	Benzene, 1,2,4-trimethyl-

Target

Base Peak: 105/10.000

Similarity Search Results

1: 120: Benzene, 1-ethyl-3-methyl-
CC1=CC=C(C=C1)CC

2: 120: Benzene, 1-ethyl-2-methyl-
CC1=CC=C(C=C1)C

3: 120: Benzene, 1-ethyl-4-methyl-
CC1=CC=C(C=C1)CC

Event#1: Scan Ret. Time (6.973 > 6.987) < 7.033 Scan# (1799 > 1797) < 1811

Base Peak: 105/646.719
 50 Rel. Inten. 0.01

