



Al contestar cite Radicado 20252111295003 Id: 1892737
Folios: 14 Fecha: 04-07-2025 14:48:00
Anexos: 1 ARCHIVOS INFORMÁTICOS (PDF, WORD, EXCEL, PPT, ZIP)
Remitente: VICEPRESIDENCIA TECNICA
Destinatario: OFICINA ASESORA JURIDICA

SONDEO DE MERCADO

La ANH está adelantando el presente sondeo de mercado, con el fin de realizar el análisis económico y financiero que soportarán la determinación del presupuesto oficial de un posible proceso de selección contractual, si su Empresa se encuentra interesada en participar le agradecemos remitir la información solicitada, bajo los parámetros establecidos a continuación.

NOTA: La Agencia Nacional de Hidrocarburos – ANH, aclara que ni el envío de esta comunicación ni la respuesta a la misma generan compromiso u obligación de contratar, habida cuenta que no se está formulando invitación para participar en un concurso o proceso selectivo, sino, se reitera, se está realizando un sondeo de mercado del que eventualmente se puede derivar un proceso de selección para la elaboración de un contrato que permita ejecutar el proyecto

I. NUMERO DE PROCESO DE COTIZACION:

II. DE LA NECESIDAD:

Cada año se generan grandes cantidades de polipropileno y poliestireno reciclado procedente de envoltorios, embalajes y desechos industriales, sin una manera eficaz de ser reutilizado. Esto resulta en la acumulación de residuos en vertederos o dispersos en el medio ambiente, lo que contribuye a la contaminación del suelo y del agua, promoviendo la formación de microplásticos. A la vez, se observa un aumento constante en la solicitud de diésel ecológico y renovable, impulsado por la urgencia de disminuir las emisiones de gases de efecto invernadero y la independencia de combustibles fósiles del extranjero. La transformación del polipropileno y poliestireno reciclado mediante pirólisis catalítica se presenta como una alternativa prometedora para cambiar este desecho en componentes de hidrocarburos tipo diésel ($C_{12}-C_{20}$), aprovechando su alto poder calorífico ($\approx 44 \text{ MJ}\cdot\text{kg}^{-1}$) y favoreciendo la reutilización de los materiales plásticos. Sin embargo, la viabilidad técnico-científica de este método requiere ser validada en el laboratorio mediante un enfoque teórico-experimental. Es esencial en el ámbito experimental examinar los resultados obtenidos, la especificidad y la estructura del producto destilado de diésel bajo diferentes situaciones catalíticas y de temperatura. Desde una perspectiva teórica, resulta indispensable entender los procesos de descomposición y los mecanismos de formación de enlaces entre C–C y C–H a nivel molecular. Esto se puede lograr a través de cálculos de química cuántica (DFT) en Gaussian, con el fin de establecer relaciones entre las barreras de activación, la termodinámica y los resultados obtenidos de manera empírica. De este modo, será posible crear una base de datos sólida que funcione como respaldo para próximas pruebas piloto y proyectos a gran escala, a la vez que se fomenta una estrategia de economía circular y se reduce la cantidad de desechos plásticos en la región.

III. OBJETO A CONTRATAR:

Desarrollo de un proyecto de investigación teórico-experimental en laboratorio con el fin de producir diésel a partir de desechos de polipropileno y poliestireno, utilizando la combinación de pirólisis catalítica y simulación cuántica en Gaussian.

El propósito de este contrato es llevar a cabo un proyecto de investigación Para llevar a cabo esta tarea, el contratista debe llevar a cabo el análisis físico-químico del PP y poliestireno reciclado (mediante FTIR-ATR, TGA y DSC), implementar y validar el proceso de pirólisis en un reactor con un catalizador sólido en una atmósfera inerte y temperaturas que oscilen entre 400 y 600 °C, y elaborar un diseño experimental factorial para medir los rendimientos y la selectividad hacia los componentes diésel (C_{12} – C_{20}) a través de GC, además de documentar los respectivos balances de masa y energía. De manera paralela, se efectuarán cálculos de química cuántica (DFT) en Gaussian para optimizar rutas de ruptura y formación de enlaces C–C y C–H, obteniendo optimizaciones geométricas de reactivos, intermediarios y estados de transición (un solo modo imaginario), análisis de IRC y cálculos termoquímicos (ΔH° , ΔS° , ΔG°) a 298, 600 y 800 K con distintos funcionales y bases. Como entregables, el contratista proporcionará documentos y planillas con datos brutos y procesados, archivos de energías y parámetros cinéticos, resultados cromatográficos y termogravimétricos, y borradores editables de manuscritos científicos en formato IMRyD (con resumen gráfico, referencias IEEE, figuras y tablas).

IV. CÓDIGO UNSPSC (The United Nations Standard Products and Services Code® - UNSPSC, Código Estándar de Productos y Servicios de Naciones Unidas), correspondiente al bien, obra o servicios a contratar:

Identifique el o los Códigos UNSPSC:

SEGMENTO	FAMILIA	CLASE	PRODUCTO	NOMBRE
13	10	20	26	Poliestireno.
41	11	30	00	Instrumentos y suministros para evaluación química (GC-FID, GC-MS, etc.)
41	11	31	00	Analizadores y monitores de gases (control on-line de efluentes)
41	10	46	03	Hornos de tubo de laboratorio (reactores de pirólisis)
76	12	23	12	Reciclaje de diseños plásticos
81	10	18	02	Servicios de ingeniería de procesos químicos (diseño experimental y operación)

ASPECTOS TÉCNICOS Y ACTIVIDADES A EJECUTAR:

Con el propósito de llevar a cabo este proyecto teórico-experimental, el contratista comenzará recolectando de forma organizada los desechos plásticos de lugares específicos de recolección (mercados, hoteles y campus universitarios), tomando nota de la fecha, procedencia y peso exacto de cada conjunto. Posteriormente, se procederá a triturar las muestras y se secarán para asegurar la homogeneidad. A continuación, se realizará la evaluación de las propiedades físico-químicas, que abarcará espectros FTIR-ATR, gráficos de DSC y TGA, con posterior análisis estadístico de los datos por grupo. Una vez que se hayan establecido los criterios de los insumos, se llevará a cabo el diseño experimental factorial en un reactor, utilizado en un entorno inerte de nitrógeno (N_2) y con medidas de seguridad y confirmación de la temperatura; se investigarán diferentes rangos de temperatura (400–800 °C), tiempo de residencia y, si se desea, la aplicación de catalizadores, registrando las pruebas de manera duplicada y recopilando las muestras gaseosas y líquidas. Se documentarán los resultados de los rendimientos, la composición del diésel obtenido y los balances de masa y energía. Se llevarán a cabo cálculos de química cuántica en Gaussian (DFT) para diversas moléculas. Se obtendrán optimizaciones geométricas de reactivos, intermediarios y estados de transición, confirmando un solo modo imaginario y realizando un análisis de IRC. Se determinarán ΔH° , ΔS° y ΔG° a temperaturas de 298, 600 y 800 K utilizando distintos funcionales y bases. Además, se proporcionarán versiones preliminares de documentos

	<p style="text-align: center;">AGENCIA NACIONAL DE HIDROCARBUROS FORMATO SONDEO DE MERCADO</p>	<p>ANH-GCO-FR-121 31/11/2023 Versión N°4 Página 3 de 14</p>
---	---	---

en formato IMRyD (con resumen visual, citas en estilo IEEE, gráficos y tablas que se pueden editar) preparadas para ser enviadas a revistas científicas indexadas.

ACTIVIDADES DEL PROYECTO

Con el fin de asegurar el logro de los objetivos establecidos y supervisar el avance en cada fase, a continuación, se describen los pasos que se llevarán a cabo en el proyecto. Cada actividad ha sido diseñada con la finalidad de lograr un resultado tangible que promueva la integración de datos experimentales y cálculos teóricos, facilitando de esta manera la comprobación de la viabilidad de la transformación de desechos de PP en combustible diésel. Se emplea una combinación de técnicas de laboratorio, como análisis físico - químico y pirólisis catalítica, junto con modelado cuántico en Gaussian. De esta forma, se pueden contrastar y mejorar los resultados a través de evaluaciones estadísticas. A continuación, se describen las actividades principales que se llevarán a cabo.

- 1. Cálculos termodinámicos en Gaussian 16:** Se modelarán las reacciones de fragmentación de un oligómero representativo de polipropileno ($-(C_3H_6-)_n$)₁₀ o polietileno o poliestireno en radicales $C_{10}-C_{20}$, optimizando geometrías de reactivos, productos y estados de transición con funcionales como M06-2X/6-311+G(d,p), M05-2X/6-311+G(d,p), B3LYP-D3/6-311+G(d,p) y M06-2X/6-311++G(d,p); se validará que los mínimos no presenten frecuencias imaginarias y que cada TS exhiba exactamente una, y a partir de los archivos .log se extraerán entalpías y energías libres corregidas a siete temperaturas entre 298 K y 873 K, presentando la evolución de ΔH° y ΔG° por paso de escisión y la tendencia endotérmica global.
- 2. Registro y descripción de lotes de PP y poliestireno posconsumo:** Se entregará una planilla en la que se consignarán fecha de recepción, procedencia (cadena de suministro o punto de acopio), peso neto tras descontar contaminantes, porcentaje de impurezas sólidas y líquidas, humedad antes y después del secado a 105 °C (ASTM E1756) y granulometría final (< 5 mm, tamiz Tyler), garantizando trazabilidad y homogeneidad de materia prima para todos los ensayos.
- 3. Caracterización espectroscópica y térmica:** Se entregará un documento que tabule los datos FTIR-ATR (4 000–400 cm^{-1} , resolución 4 cm^{-1}), y las curvas de TGA y DSC registradas entre 25 °C y 800 °C (10 °C·min⁻¹ en atmósfera de N₂); cada técnica incluirá gráficos, tablas de temperaturas de transición y análisis de pérdida de masa, todo organizado para su comparación estadística.
- 4. Ensayos de pirólisis catalítica:** Se realizará un estudio a 400, 450 y 500 °C en un reactor, registrando masa de PP y poliestireno, masa de catalizador, tiempo de residencia, flujo de N₂, y porcentajes de aceite, gas y residuo; se cuantificará la fracción de C_6-C_{30} y la porción de $C_{12}-C_{20}$ (diésel) por GC, con cada condición triplicada para cálculo de desviación estándar, compilándose todos los datos en un documento unificado.
- 5. Diseño de una fase de validación experimental y tecnológica para llevarlo a un piloto funcional,** acorde a los resultados obtenidos a nivel general del proyecto.
- 6. Redacción de manuscrito IMRyD:** Se preparará un borrador completo siguiendo directrices de revistas indexadas y normas IEEE, que incluya resumen gráfico, metodología detallada, resultados experimentales y teóricos, discusión crítica y conclusiones; el documento se entregará en formato editable para su revisión y envío.

7. Ejecución de al menos una (1) jornada de socialización de los resultados del proyecto en las instalaciones de la ANH, así como un mínimo de dos (2) jornadas de capacitación enfocadas en las temáticas desarrolladas en el marco de este.

PRODUCTOS ESPECIFICOS

Las actividades y productos ya han sido abordados anteriormente, pero a continuación se enumerarán de manera específica:

1. **Cálculos termodinámicos usando DFT.** Se generará un documento que contenga los datos recopilados de los cálculos termodinámicos realizados en Gaussian 16. Para ello se modelarán las reacciones paso a paso que fragmentan un oligómero representativo de polipropileno ($-C_3H_6-$)₁₀ en radicales C₁₀–C₂₀. Cada especie interviniente (reactivos, productos y estados de transición críticos) se optimizará con diversos funcionales y bases (por ejemplo: M06-2X/6-311+G(d,p), M06-2X/6-311++G(d,p)), validando que los mínimos no presenten frecuencias imaginarias y que los TS exhiban exactamente una. A partir de las salidas .log se extraerán las entalpías y energías libres corregidas por temperatura para siete puntos entre 298 K y 873 K (25 °C → 600 °C). El documento incluirá la evolución de ΔH° y ΔG° para cada paso de escisión, así como la tendencia global endotérmica del proceso (**Actividad 1**).

Informe técnico de cálculos termodinámicos por DFT sobre la fragmentación de polipropileno: Documento detallado que compile los resultados obtenidos mediante cálculos de estructura electrónica realizados en Gaussian 16, orientados a modelar las reacciones paso a paso de fragmentación de un oligómero representativo de polipropileno ($-C_3H_6-$)₁₀ en radicales C₁₀–C₂₀, el informe contendrá:

- Descripción de la metodología computacional utilizada, especificando los diferentes funcionales y bases empleados (e.g., M06-2X/6-311+G(d,p), M06-2X/6-311++G(d,p)).
 - Geometrías optimizadas de reactivos, productos y estados de transición (TS), validando:
 - Ausencia de frecuencias imaginarias para los mínimos.
 - Presencia de una única frecuencia imaginaria en los TS.
 - Extracción y análisis de propiedades termodinámicas (ΔH° , ΔG°) corregidas por temperatura para siete puntos entre 298 K y 873 K (25 °C a 600 °C), directamente obtenidas a partir de los archivos .log generados.
 - Evolución paso a paso de las entalpías y energías libres para cada escisión del oligómero, con gráficas comparativas que ilustren:
 - La variación térmica de ΔH° y ΔG° .
 - La tendencia global endotérmica del proceso de fragmentación.
 - Explicar por qué se realizaron estos cálculos, generar una comparación de la selección de uno y de los análisis, aplicación y aporte general al proyecto.
 - Qué se espera obtener a partir de ellas, presentar y discutir los resultados obtenidos, aspectos positivos y negativos y aplicación, explicar cómo se relacionan y cuál es su importancia y aporte general al proyecto.
2. **Registro y descripción de lotes de PP y poliestireno posconsumo.** Se entregará una planilla con la información de cada lote de residuo plástico recibido, con la fecha de entrada, la procedencia (cadena de suministro o punto de acopio), el peso neto tras la eliminación de contaminantes, el porcentaje de impurezas sólidos/líquidos, la humedad antes y después del secado a 105 °C (método ASTM E1756) y la granulometría final (< 5 mm, tamiz Tyler) (**Actividad 2**).

Planilla técnica de registro y caracterización de lotes de residuos plásticos posconsumo (PP y PS): Documento en formato editable (Excel u otro formato tabular) que consolide la información detallada de cada lote de polipropileno (PP) y poliestireno (PS) posconsumo recibido, la planilla incluirá, para cada lote:

- Fecha de ingreso del material.
- Procedencia del residuo (especificando cadena de suministro o punto de acopio).
- Peso neto después de la remoción de contaminantes.
- Porcentaje de impurezas diferenciadas por tipo (sólidas y líquidas).
- Contenido de humedad antes y después del proceso de secado, conforme al método estándar ASTM E1756 (secado a 105 °C).
- Distribución granulométrica final, especificando si cumple con el tamaño inferior a 5 mm, verificado mediante tamizado (tamiz tipo Tyler).
- Este producto permitirá establecer una línea base de calidad del material posconsumo que alimentará los procesos experimentales posteriores.
- Explicar por qué se realizaron estos registros, generar una comparación, explicación de la aplicación y aporte general al proyecto.
- Qué se espera obtener a partir de ellas, presentar y discutir los resultados obtenidos, aspectos positivos y negativos y aplicación, explicar cómo se relacionan y cuál es su importancia y aporte general al proyecto.

3. Caracterización espectroscópica y térmica de las muestras. Se entregará un documento con los resultados de los análisis FTIR, TGA y DSC. En “FTIR”, se tabularán los datos de los espectros ATR (4000–400 cm^{-1} , resolución 4 cm^{-1}). En las técnicas TGA y DSC se incluirán los datos de las curvas desde 25 °C hasta 800 °C (**Actividad 3**).

Informe técnico de caracterización espectroscópica y térmica de muestras plásticas: Documento que recopile y analice los resultados obtenidos mediante técnicas de espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR), análisis termogravimétrico (TGA) y calorimetría diferencial de barrido (DSC) aplicadas a las muestras de polipropileno (PP) y poliestireno (PS) posconsumo, el informe incluirá:

- FTIR-ATR: Tabla de datos de espectros obtenidos en el rango de 4000–400 cm^{-1} , con resolución de 4 cm^{-1} , indicando las bandas características, intensidades relativas y asignación de grupos funcionales.
- TGA: Resultados tabulados y graficados de la pérdida de masa en función de la temperatura, desde 25 °C hasta 800 °C, identificando las etapas térmicas clave (p. ej., volatilización, degradación).
- DSC: Datos y curvas de flujo de calor en el mismo rango térmico (25 °C a 800 °C), señalando temperaturas de transición, fusión o descomposición, y valores de entalpía asociados.
- Adicionalmente, se podrán incluir comparaciones entre muestras y análisis integrados que evidencien patrones de composición o comportamiento térmico.
- Explicar por qué se realizaron estas caracterizaciones, generar una comparación, explicación de la aplicación y aporte general al proyecto.
- Qué se espera obtener a partir de ellas, presentar y discutir los resultados obtenidos, aspectos positivos y negativos y aplicación, explicar cómo se relacionan y cuál es su importancia y aporte general al proyecto.

4. **Ensayos de pirólisis catalítica.** Un documento que recopile todos los ensayos de pirólisis catalítica realizados a 400, 450 y 500 °C. En el documento se debe encontrar la siguiente información: masa de PP, masa de catalizador usado, tiempo efectivo de residencia, flujo de N₂, % peso de aceite, gas y residuo, fracción C₆-C₃₀ determinada por GC y, el porcentaje C₁₀-C₂₀. Cada condición se reproducirá por triplicado e incluirá el desvío estándar (**Actividad 4**).

Informe técnico de ensayos de pirólisis catalítica de polipropileno: Documento que compile de forma sistemática los resultados obtenidos en los ensayos experimentales de pirólisis catalítica realizados a temperaturas de 400, 450 y 500 °C, el informe incluirá, para cada condición evaluada (realizada por triplicado):

- Masa inicial de PP y masa de catalizador utilizado.
 - Tiempo efectivo de residencia durante el pirólisis.
 - Flujo de nitrógeno (N₂) empleado como gas inerte.
 - Distribución de productos (% en peso): aceite, gas y residuo sólido.
 - Fracción de hidrocarburos C₆-C₃₀, determinada mediante cromatografía de gases (GC).
 - Porcentaje específico de hidrocarburos C₁₀-C₂₀, como fracción objetivo de interés energético.
 - Desvío estándar para cada parámetro, calculado a partir de los ensayos replicados, con análisis de repetibilidad y variabilidad experimental.
 - Este producto permitirá evaluar la eficiencia del proceso catalítico bajo diferentes condiciones operativas, con énfasis en la optimización de la producción de fracciones líquidas útiles.
 - Explicar por qué se realizaron estos ensayos, generar una comparación, explicación de la aplicación y aporte general al proyecto.
 - Qué se espera obtener a partir de ellas, presentar y discutir los resultados obtenidos, aspectos positivos y negativos y aplicación, explicar cómo se relacionan y cuál es su importancia y aporte general al proyecto.
5. Diseño de una fase de validación experimental y tecnológica para llevarlo a un piloto funcional, acorde a los resultados obtenidos a nivel general del proyecto. (**Actividad 5**).
6. **Redacción de manuscrito IMRyD.** Se entregará un informe técnico en versión preliminar, redactado conforme al estilo IMRyD, que incluirá un título provisional, resumen gráfico, figuras numeradas, tablas y gráficos correspondientes a los datos, así como las referencias bibliográficas conforme al formato IEEE. El documento estará estructurado y completo, con miras a su posterior postulación en una revista científica de clasificación Q1. (**Actividad 6**).

Asimismo, contendrá una discusión crítica de los resultados obtenidos mediante las simulaciones computacionales, detallando la determinación, interpretación y conclusiones derivadas de la aplicación de cada una de las metodologías empleadas. Se presentarán tanto los resultados positivos como aquellos que no cumplieron con las expectativas iniciales, junto con las respectivas recomendaciones. Finalmente, se incluirá una sección de perspectivas orientada a la validación experimental futura del proyecto.

Como resultado de la Actividad 6, se espera que el documento contenga un desarrollo técnico detallado que incluya los siguientes productos específicos:

- a. **Borrador completo con estructura científica estándar (formato IMRyD)**

- Título tentativo claro, específico e informativo, que refleje el sistema, la metodología y el objetivo central.
- Resumen estructurado (\approx 200–250 palabras), incluyendo:
 - Contexto general y motivación
 - Metodología computacional
 - Principales hallazgos (ej. ΔG ads, centros d-band, transferencias electrónicas)
 - Implicaciones catalíticas
 - Perspectiva futura
- Resumen gráfico (Graphical Abstract):
 - Imagen sintetizada que combine el modelo estructural, transferencia electrónica y valores clave (tipo TOC figure).
 - Tamaño y resolución compatibles con políticas editoriales (ej. ACS, Elsevier, RSC).
- Material para elaboración de figuras científicas de alta calidad (revistas Q1).
- Insumos para futuras secciones de discusión o gráficas clave del artículo o tesis.
- Posible presentación en formato poster técnico o ponencia.

b. Cuerpo del artículo con figuras y tablas integradas

- Introducción: relevancia de la catálisis de CO_2 , justificación del sistema Cu–Sc, vacío en la literatura, hipótesis del trabajo.
- Metodología computacional:
 - Software, nivel teórico (M06-2X, etc.), condiciones, criterios de convergencia.
 - Detalle de modelos, superficie dopada, espín, ZPE, análisis PDOS y d-band.
- Resultados y discusión crítica:
 - Figuras numeradas: geometrías optimizadas, diagramas PDOS, mapas de carga diferencial, perfiles de energía libre, correlaciones descriptor–actividad.
 - Tablas de datos termoquímicos: ΔH° , ΔS° , ΔG° a distintas temperaturas, energías de adsorción, barreras de reacción, desviaciones por método.
 - Análisis cruzado: impacto de simetría, espín, composición Cu/Sc, tipo de sitio activo.
 - Comparación con literatura (teórica y experimental).
 - Validación del descriptor unificado propuesto.
- Consolidación del conocimiento generado a lo largo del proyecto.
- Difusión científica de alto nivel, con proyección internacional.

c. Sección de proyección y validación futura

- Discusión sobre posibles rutas para validar experimentalmente los hallazgos (ej. espectroscopía XPS, DRIFTS, microcalorimetría).
- Condiciones experimentales esperadas para observar las especies modeladas.
- Sugerencia de sistemas modelo o síntesis de materiales tipo CuSc–C/N/S.
- Transferencia de los resultados a sistemas catalíticos reales (electrocatalizadores, catálisis térmica, plasma, etc.).
- Archivos complementarios:
 - Imágenes originales en alta calidad (TIFF, EPS, PNG)
 - Tablas en Excel/CSV, formuladas y con ficha explicativa de todos los cálculos.
 - Scripts de procesamiento si aplica

7. Ejecución de al menos una (1) jornada de socialización de los resultados del proyecto en las instalaciones de la ANH, así como un mínimo de dos (2) jornadas de capacitación enfocadas en las temáticas desarrolladas en el marco de este. **(Actividad 7)**.

Para el desarrollo de cada uno de estos productos deberán considerarse de manera integral cada uno de los ítems indicados a continuación, asegurando el cumplimiento de los lineamientos establecidos en la Norma ISO 1486 para trabajos escritos, en su versión más actual.

1. Resumen Ejecutivo o Abstract

Breve descripción del objetivo, metodología, resultados y conclusiones.

2. Índice o Tabla de Contenido

Con numeración de capítulos y secciones.

3. Introducción

Contexto, objetivos y alcance del informe.

4. Marco teórico o antecedentes

- a. Glosario técnico.
- b. Fundamentos técnicos o científicos del tema.

5. Metodología

Se deberá incluir una descripción detallada y secuencial de los procedimientos a implementar, especificando el tiempo estimado de ejecución para cada etapa, el personal requerido y la justificación de cada perfil profesional involucrado.

Asimismo, deberán señalarse las técnicas e instrumentos y equipos a utilizar, presentando toda la información de manera clara, precisa y debidamente estructurada.

8. Desarrollo y análisis de resultados

a. Desarrollo

Se deberá describir de manera concreta y detallada cada uno de los pasos desarrollados, indicando los equipos, software y recursos humanos requeridos para su ejecución.

- Cada proceso deberá indicar los cálculos que fueron realizados en él, las metodologías empleadas, el motivo de su adopción y los objetivos perseguidos con cada proceso.
- Así mismo, se deberá indicar el tiempo empleado para la ejecución de cada etapa, señalar cual fue su finalidad dentro del proyecto, así como su relación e importancia dentro de la totalidad del proyecto.
- Identificación de los costos asociados y análisis detallado de los gastos incurridos en la implementación de cada una de las metodologías aplicadas.
- Identificación de casos puntuales de aplicación en Colombia, Sur América y contexto global, señalando su estado actual, nivel de éxito y el sector en el que fueron aplicadas.

b. Resultados y análisis

Presentar de manera organizada y estructurada los resultados y/o datos obtenidos en cada una de las etapas del proceso, acompañados de su respectiva explicación. Esta presentación deberá incluir gráficos interpretativos, cálculos desarrollados en Excel con sus fórmulas correspondientes, fichas técnicas y tablas explicativas para cada fase, con el fin de facilitar la comprensión y el análisis de los resultados obtenidos.

Identificar y definir la utilidad específica de cada una de las metodologías aplicadas, tanto en el desarrollo del proyecto como en su contexto general.

Realizar un análisis que permita establecer si la implementación de estas metodologías ha generado mejoras y evolución en los procesos, y si, conforme al análisis de costos realizado, es viable económicamente su implementación o no.

Se deberá identificar y formular conclusiones parciales para cada una de las etapas del proyecto, detallando los procesos que, tanto a nivel experimental como de laboratorio, no generaron resultados positivos, explicando las causas correspondientes, así como los que fueron exitosos y su debida argumentación. Asimismo, se deberá realizar un análisis comparativo entre las distintas metodologías implementadas, indicando cuál de ellas resultó ser la más exitosa o viable, con base en criterios técnicos, operativos y económicos, y justificando dicha elección. Finalmente, se deberá presentar una conclusión general integradora que consolide el análisis de toda la información recopilada a lo largo del proyecto.

Establecer la forma en que este proyecto se articula con las funciones y objetivos misionales de la Agencia Nacional de Hidrocarburos – ANH, así como los beneficios y aportes que puede generar, no solo en el ámbito científico, sino también en el sector industrial y en el desarrollo sustentable del país. De igual forma, se deberá establecer la proyección del alcance del proyecto, resaltando su componente diferenciador o propuesta innovadora, y justificando de manera técnica y argumentada cómo y por qué dicha propuesta tiene el potencial de aportar significativamente a la transición energética del país.

9. Conclusiones

Presentar los principales hallazgos y conclusiones del informe, identificando los aspectos positivos y negativos, las limitaciones de la aplicación de cada metodología, en función de su grado de desarrollo científico, costos asociados y retos. Asimismo, se solicita definir los escenarios específicos de aplicación en Colombia, Colombia, Sur América y contexto global para cada método, justificando su pertinencia.

10. Recomendaciones

Finalmente, se deberá incluir una propuesta de mejoramiento para cada una de las actividades contempladas en el proyecto o relacionadas con la aplicación de las metodologías evaluadas. Asimismo, se solicita una recomendación concreta y sintética sobre la forma en que dichas metodologías deberían ser implementadas, considerando las particularidades del sector y la región del país, así como estrategias que permitan asegurar la viabilidad financiera y optimizar los costos. Cada sección deberá concluirse de manera precisa y concisa, mediante textos breves que resuman los aspectos clave.

11. Anexos

- Se deberá adjuntar información complementaria, incluyendo los cálculos desarrollados en Excel con sus respectivas fórmulas, así como las fichas técnicas correspondientes.
- Adjuntar las gráficas explicativas que ilustren cada una de las etapas del proceso y los resultados.
- Imagen que represente de manera clara las zonas potenciales de aplicación en Colombia, (mapa de las zonas en donde se tomen muestras y registro fotográfico cuando a ello haya lugar dentro de los productos a presentar).
- Entregar los reportes de laboratorio y reportes generados por los diferentes equipos empleados para desarrollar el proyecto.
- Para efectos de controles del cumplimiento de las normas de calidad de la entidad presentar la certificación de los equipos empleados para el desarrollo del proyecto.
- Fichas técnicas explicativa en donde se describan de manera concreta y resumida los equipos y software utilizados en el desarrollo del proyecto. En dichas fichas se debe indicar, de forma concreta la manera en que fueron empleados, los resultados específicos obtenidos con ellos, los márgenes de error asociados y las metodologías de cálculo empleadas.

Estilo de redacción

- Objetivo, claro, preciso y sin ambigüedades.
- Uso de voz pasiva y tercera persona (según la formalidad requerida).
- Uso de lenguaje técnico.

PLAZO DE EJECUCIÓN: El proyecto se realizará en el año 2025 con un plazo estimado de ejecución de cinco (5) meses, con plazo máximo de finalización a 31 de diciembre de 2025.

PERSONAL MÍNIMO

Tabla 1. Tabla de personal mínimo.

Ítem	Cargo	Cant.	Profesión	Perfil
1	Director del proyecto	1	Profesional Químico, ingeniero químico o ingeniero en cualquier disciplina en la industria de polímeros y plantas petroquímicas, formación PhD en ingeniería.	Experiencia profesional de Veinte (20) años en la industria de polímeros y plantas petroquímicas, formación PhD en ingeniería. Demostrar publicación de más de 60 artículos científicos. Demostrar experiencia de más de 5 años en docencia universitarias. Demostrar ranking de investigador senior en minciencias. Demostrar producción de mínimo 2 patentes nacionales o internacionales. Demostrar la participación específica en al menos un (1) proyecto o investigación como director en temas de pirolisis.
6	Químico o Químico Farmacéutico	1	Profesional Químico o Químico Farmacéutico	Con experiencia en redacción, análisis de datos, publicación de articulo científicos, con más de 2 años de experiencia.

			Con maestría o doctorado	
2	Químico	1	Profesional químico y estudiante de maestría en química	Tener experiencia de más de 1 año en investigación científica y contar con más de 1 artículo científico en revistas indexadas Q1 o Q2.
3	Simulador	1	Profesional químico con Maestría en química	Experiencia profesional de más de 5 años en estudios computacionales. Participación en mínimo 1 artículo científico publicado en revistas indexadas.
3	Estudiantes de Química	2	Estudiantes de química entre séptimo y último semestre	Mínimo 1 año de experiencia en grupos de investigación en química computacional y con participación en por lo menos 1 artículo científico publicado en revistas indexadas Q1 o Q2.
5	Estudiantes de Química	2	Estudiantes de química entre séptimo y último semestre	Contar con experiencia en toma de muestras, análisis de laboratorio y uso de herramientas computacionales.

LUGAR DE EJECUCION:

Teniendo en cuenta que es un trabajo documental, se puede desarrollar en el lugar donde el contratista disponga su centro de operaciones y en Bogotá, cuando se necesita su presencia en las instalaciones de la ANH.

PROPUESTA ECONÓMICA:

Se requiere cotizar el presente proyecto por cotización por productos, a continuación, se relaciona la tabla 2 como guía; se adjunta archivo Excel para facilidad en su diligenciamiento.

(*) Se recomienda diligenciar el documento Excel que acompaña al presente sondeo técnico sin modificarla y enviarla el correo indicado junto con una versión PDF.

1. COTIZACIÓN POR PRODUCTOS

Tabla 2. Cotización consolidada por productos.

PRESUPUESTO DE GASTOS DEL PROYECTO				
Proyecto de investigación teórico-experimental en laboratorio con el fin de producir diésel a partir de desechos de polipropileno y poliestireno, utilizando la combinación de pirólisis catalítica y simulación cuántica en Gaussian.				
No.	PRODUCTO	CANTIDAD	VALOR UNITARIO	VALOR FINAL

1	Cálculos termodinámicos usando DFT: Se generará un documento que contenga los datos recopilados de los cálculos termodinámicos realizados en Gaussian 16. Para ello se modelarán las reacciones paso a paso que fragmentan un oligómero representativo de polipropileno ($-C_3H_6-$) ₁₀ en radicales C ₁₀ -C ₂₀ . Cada especie interviniente (reactivos, productos y estados de transición críticos) se optimizará con diversos funcionales y bases (por ejemplo: M06-2X/6-311+G(d,p), M06-2X/6-311++G(d,p)), validando que los mínimos no presenten frecuencias imaginarias y que los TS exhiban exactamente una. A partir de las salidas .log se extraerán las entalpías y energías libres corregidas por temperatura para siete puntos entre 298 K y 873 K (25 °C → 600 °C). El documento incluirá la evolución de ΔH° y ΔG° para cada paso de escisión, así como la tendencia global endotérmica del proceso (Actividad 1).	1		
2	Registro y descripción de lotes de PP y poliestireno posconsumo: Se entregará una planilla con la información de cada lote de residuo plástico recibido, con la fecha de entrada, la procedencia (cadena de suministro o punto de acopio), el peso neto tras la eliminación de contaminantes, el porcentaje de impurezas sólidos/líquidos, la humedad antes y después del secado a 105 °C (método ASTM E1756) y la granulometría final (< 5 mm, tamiz Tyler) (Actividad 2).	1		
3	Caracterización espectroscópica y térmica de las muestras: Se entregará un documento con los resultados de los análisis FTIR, TGA y DSC. En "FTIR", se tabularán los datos de los espectros ATR (4000–400 cm ⁻¹ , resolución 4 cm ⁻¹). En las técnicas TGA y DSC se incluirán los datos de las curvas desde 25 °C hasta 800 °C (Actividad 3).	1		
4	Ensayos de pirólisis catalítica. Un documento que recopile todos los ensayos de pirólisis catalítica realizados a 400, 450 y 500 °C. En el documento se debe encontrar la siguiente información: masa de PP, masa de catalizador usado, tiempo efectivo de residencia, flujo de N ₂ , % peso de aceite, gas y residuo, fracción C ₆ -C ₃₀ determinada por GC y, el porcentaje C ₁₀ -C ₂₀ . Cada condición se reproducirá por triplicado e incluirá el desvío estándar (Actividad 4).	1		
5	Diseño de una fase de validación experimental y tecnológica para llevarlo a un piloto funcional, acorde a los resultados obtenidos a nivel general del proyecto. (Actividad 5).	1		
6	Redacción de manuscrito IMRyD: Se entregará un informe técnico en versión preliminar, redactado conforme al estilo IMRyD, que incluirá un título provisional, resumen gráfico, figuras numeradas, tablas y gráficos correspondientes a los datos, así como las referencias bibliográficas conforme al formato IEEE. El documento estará estructurado y completo, con miras a su posterior postulación en una revista científica de clasificación Q1. (Actividad 6).	1		
7	Ejecución de al menos una (1) jornada de socialización de los resultados del proyecto en las instalaciones de la ANH, así como un mínimo de dos (2) jornadas de capacitación enfocadas en las temáticas desarrolladas en el marco de este. (Actividad 7).	3		
SUBTOTAL PRODUCTOS				
IVA 19%				
VALOR TOTAL DE LA PROPUESTA				

NOTA 1: Las tablas de cotización deben estar diligenciadas en **pesos colombianos** y debe tener incluido todos los costos directos e indirectos, es decir, todos aquellos que resulten necesarios para la ejecución del contrato en las condiciones de tiempo requeridos con sus respectivas tasas e impuestos, manteniendo su vigencia durante el año 2025.

NOTA 2: Cotización por productos:

- Las tarifas deben ser sumas fijas, no sujetas a reajuste o modificaciones de ninguna clase.
- En los valores unitarios de cada producto deben estar incluidos todos los costos administrativos, financieros y técnicos como (personal técnico y Software) indispensables para la ejecución del proyecto.
- Software: Se enfatiza que en la estimación de los costos de los productos que requieren un software específico de SIG o similares, este incluido el costo por el licenciamiento.

NOTA 3: Se solicita DILIGENCIAR LA FORMA DE COTIZACIÓN POR PRODUCTOS SIN CAMBIAR LAS TABLAS ECONÓMICAS PROPUESTAS con el fin de poder ser comparada y analizada junto con otras respuestas. Si estas tablas son ajustadas, difícilmente podrán ser ingresadas al análisis económico previsto. Si se tienen propuestas, comentarios, recomendaciones o cualquier otro concepto que no se haya incluido dentro del formato para el sondeo, por favor allegarlas como comentarios por aparte.

MIPYMES:

Por favor marcar con una X si el cotizante es o no MIPYME domiciliada en Colombia, observándose los rangos de clasificación empresarial establecidos, de conformidad con la Ley 590 de 2000 y el Decreto 1074 de 2015.

SI ____ NO ____

EMPRENDIMIENTOS Y EMPRESAS DE MUJERES:

Por favor marcar con una X si el cotizante es o no emprendimiento o empresa de mujeres, entendida esta cuando:

- Más del cincuenta por ciento (50%) de las acciones, partes de interés o cuotas de participación de la persona jurídica pertenezcan a mujeres y los derechos de propiedad hayan pertenecido a estas durante al menos el último año.
- Cuando por lo menos el cincuenta por ciento (50%) de los empleos del nivel directivo de la persona jurídica sean ejercidos por mujeres y éstas hayan estado vinculadas laboralmente a la empresa durante al menos el último año en el mismo cargo u otro del mismo nivel.

Se entenderá como empleos del nivel directivo aquellos cuyas funciones están relacionadas con la dirección de áreas misionales de la empresa y la toma de decisiones a nivel estratégico. En este sentido, serán cargos de nivel directivo los que dentro de la organización de la empresa se encuentran ubicados en un nivel de mando o los que por su jerarquía desempeñan cargos encaminados al cumplimiento de funciones orientadas a representar al empleador.

- Cuando la persona natural sea una mujer y haya ejercido actividades comerciales a través de un establecimiento de comercio durante al menos el último año.
- Para las asociaciones y cooperativas, cuando más del cincuenta por ciento (50%) de los asociados sean mujeres y la participación haya correspondido a estas durante al menos el último año.

SI ____ NO ____

PLAZO PARA SOLICITAR ACLARACIONES AL SONDEO DE MERCADO: Las compañías interesadas podrán formular observaciones y aclaraciones al presente documento al correo electrónico estudios.mercado@anh.gov.co hasta el día 8 de julio de 2025.

ENTREGA DE INFORMACIÓN DEL SONDEO DE MERCADO: Las compañías invitadas deberán presentar la información solicitada en el presente sondeo de mercado al correo electrónico estudios.mercado@anh.gov.co hasta el día 14 de julio de 2025.

Cordialmente,

Maria Cecilia Ruiz

Maria Cecilia Ruiz Cardona
Vicepresidenta Técnica
C.C. 43.996.511

Anexo: uno (1) archivo tipo Excel - tabla de cotización

Aprobó: Maria Cecilia Ruiz Cardona – vicepresidenta Técnica

Revisó: Carolina Diosa Rosas / Gestor T1 Grado 17 / Componente técnico. *CDR*