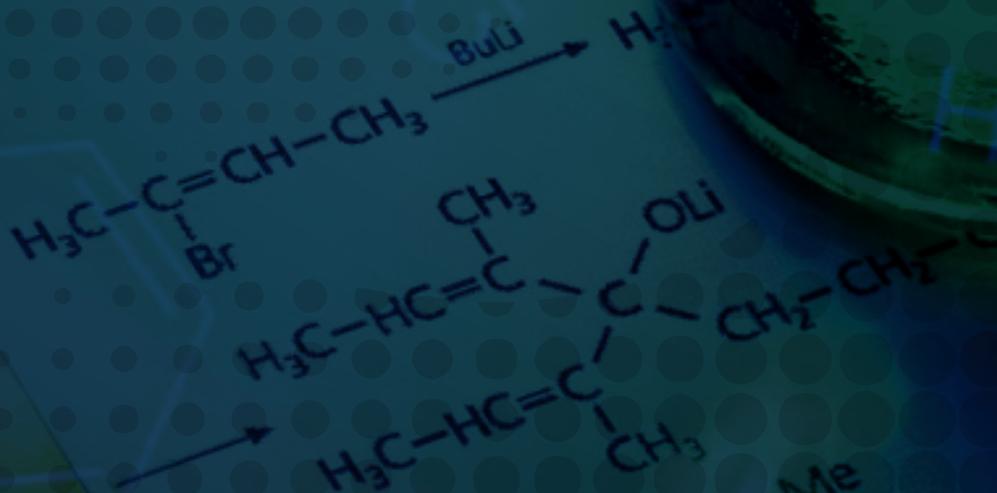


Química orgánica industrial: gas natural y petróleo

Ing. Linda Flores Fiallos. MsC, PhD(c)
 Ing. Juan José Flores Fiallos. MSc.
 Biof. Nora Tahirí Mejía Cabezas. MSc.



Química orgánica industrial: gas natural y petróleo

Ing. Linda Flores Fiallos. MsC, PhD(c)

Ing. Juan José Flores Fiallos. MSc.

Biof. Nora Tahirí Mejía Cabezas. MSc.

Este libro ha sido debidamente examinado y valorado en la modalidad doble par ciego con fin de garantizar la calidad científica del mismo.

© Publicaciones Editorial Grupo Compás
Guayaquil - Ecuador
compasacademico@icloud.com
<https://repositorio.grupocompas.com>

Diseño de la portada es de: Ariadna Tirado Pereira



Flores, L., Flores, J., Mejía, N. (2024) Química orgánica industrial: gas natural y petróleo. Editorial Grupo Compás

© Ing. Linda Flores Fiallos. MsC, PhD(c)
Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (ESPOCH)
Ing. Juan José Flores Fiallos. MSc.
Universidad Nacional de Chimborazo (UNACH)
Biof. Nora Tahirí Mejía Cabezas. MSc.
Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (ESPOCH)

ISBN: 978-9942-33-769-6

El copyright estimula la creatividad, defiende la diversidad en el ámbito de las ideas y el conocimiento, promueve la libre expresión y favorece una cultura viva. Quedan rigurosamente prohibidas, bajo las sanciones en las leyes, la producción o almacenamiento total o parcial de la presente publicación, incluyendo el diseño de la portada, así como la transmisión de la misma por cualquiera de sus medios, tanto si es electrónico, como químico, mecánico, óptico, de grabación o bien de fotocopia, sin la autorización de los titulares del copyright.

Índice

CAPÍTULO I.....	8
Desarrollo evolutivo de la Química Orgánica Industrial.....	8
Uso del petróleo en el siglo XIX	16
Consumo de petróleo a inicios del siglo XX.	17
Consumo de petróleo durante la Segunda Guerra Mundial	18
Producción de plástico posterior a la Segunda Guerra Mundial	19
Producción mundial de petróleo	20
Uso mundial del petróleo.....	21
Producción de productos químicos orgánicos.....	22
Química verde en la Industria.	22
CAPÍTULO II.....	30
Materias primas en la Industria de la Química Orgánica.....	30
GAS NATURAL	32
Propiedades físicas.....	34
Toxicidad:	36
Contenido de Agua en el Gas Natural:.....	37
Origen:	37
Clasificación del gas natural:.....	38
Composición del gas natural.....	39
Procesamiento del gas natural.....	41
Materia prima en Petroquímica	42
PETRÓLEO.....	43
Características:.....	45
Clasificación:	48
Refinación del Petróleo:	51
Procesos básicos y operaciones en el proceso de refinación del Petróleo.....	53

Procesos de conversión del petróleo.	61
Procesos de combinación.	64
Etileno y sus derivados.	64
Propeno y sus derivados.	76
Procesos de rectificación.	81
• Reforma Catalítica.	82
• Isomerización.	82
QUIMICA DEL BENCENO Y DE SUS DERIVADOS	83
PRINCIPALES REACCIONES	89
• Alquilación	90
• Amonólisis	91
• Amoxidación	92
• Carbonilación	93
• Condensación	95
• Deshidratación	96
• Deshidrogenación	97
• Esterificación	98
• Halogenación	99
• Deshidratación	103
• Deshidrogenación	103
• Esterificación	105
• Hidrólisis	107
• Nitración	108
• Oxidación	110
REFERENCIAS	117

INTRODUCCIÓN.

Hoy en día la industria de procesos químicos juega un papel importante en el desarrollo de un país brindando una amplia variedad de productos, utilizando materia prima derivada del petróleo, gas natural, aceites, grasas, biomasa y de la energía del carbón. A pesar de que, la fabricación de productos químicos orgánicos comenzó inicialmente a partir del carbón y alcohol de Industria de fermentación, más tarde la fabricación de productos químicos se dio gracias a la disponibilidad de petróleo y gas natural. Hoy en día más del 90% de las materias primas utilizadas a nivel industrial se producen de las rutas del petróleo y del gas natural. Sin embargo, el aumento del coste del petróleo y gas natural así como la continua disminución de las reservas ha estimulado la industria química Industria de materias primas alternativas como carbón, biomasa, metano, etc.

Sin embargo, los intereses científicos y de ingeniería no siempre han estado alineados por tanto, es importante mantener una colaboración entre químicos e ingenieros químicos como industriales con el enfoque en los procesos industriales y la producción de materia prima sea una oportunidad para que esta industria pueda crecer día con día. Este tipo de colaboración es importante ya que se puede acceder a la experiencia química y a la experiencia de ingeniería que se requiere para el desarrollo de nuevas tecnologías a la vanguardia de las innovaciones de procesos. Desde los dos puntos de vista tanto químico como desde el punto de vista de la ingeniería los dos aportan al desarrollo de la ciencia y la resolución de problemas en un proceso industrial.

Los productos químicos orgánicos industriales se utilizan en cientos de procesos. En general, un conjunto de componentes básicos (materia prima) se combina en una serie de pasos de reacción para producir productos intermedios y finales. Además,

los productos químicos orgánicos, en particular los petroquímicos, desempeñan un papel indispensable en el mundo moderno. De los cuales se puede destacar la fabricación de: plásticos, fibras sintéticas, caucho, fertilizantes, e intermedios químicos, pinturas, detergentes, lubricantes, pigmentos. Los cuales aportan en el desarrollo de las industrias de la salud, alimentación, transporte, vestimenta, comunicaciones, entre otras.

En la Figura 1 se muestran algunos de los productos obtenidos a partir del petróleo y sus derivados, los cuales se detallarán en el desarrollo de los capítulos siguientes.

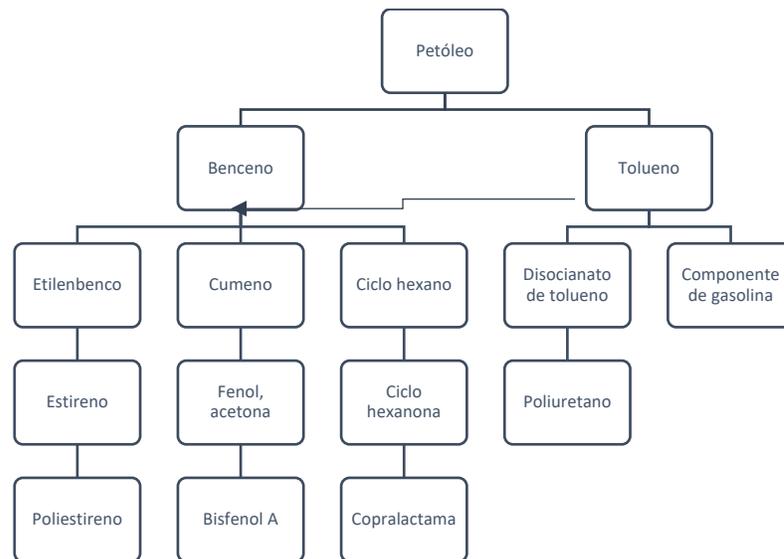


Figura 1. Algunos derivados a partir del petróleo.

La industria química produce materias primas e intermedias, así como una amplia variedad de productos terminados para la industria, las empresas y los consumidores individuales. Las clases importantes de sustancias químicas producidas por las instalaciones de la industria química orgánica incluyen:

1. Productos químicos orgánicos como el ácido acético, cloroacético, adípico, fórmico y oxálico.
2. Solventes tales como alcoholes amílicos, butílicos y etílicos; metanol; amilo, butilo y etilo acetatos; éter etílico, éter de

etilenglicol y éter de dietilenglicol; acetona, disulfuro de carbono y disolventes clorados tales como tetracloruro de carbono, tetrafluoretileno y tricloroetileno.

3. Alcoholes polihídricos como el etilenglicol, sorbitol, pentaeritritol y glicerina sintética.
4. Perfumes sintéticos y materiales aromatizantes como cumarina, salicilato de metilo, sacarina, citral, citronelal, geraniol sintético, ionona, terpineol y vainillina sintética.
5. Productos químicos para el procesamiento del caucho, como aceleradores y antioxidantes, tanto cíclicos como acíclico.
6. Plastificantes, tanto cíclicos como acíclicos, como ésteres de ácido fosfórico, ácido, anhídrido ftálico, ácido adípico, ácido láurico, ácido oleico y ácido esteárico;

La industria química está diseñada para la fabricación de varios productos y subproductos con la finalidad de aprovechar todos los recursos existentes y tener poca producción de desechos. Esta flexibilidad es necesaria para adaptarse a las variaciones en las propiedades de pureza de la materia prima. Además, los subproductos del proceso también son productos vendibles valiosos y el valor de estos los subproductos pueden cambiar la economía del proceso.

El proceso típico de síntesis química implica combinar múltiples materias primas en una serie de operaciones unitarias de las cuales la industria de refinación de petróleo es la mejor.

Los productos químicos básicos tienden a sintetizarse en un reactor continuo, mientras que los productos químicos especiales suelen producirse en un reactor discontinuo. En ambos casos se necesitarán de altas temperaturas, catalizadores y componentes adicionales.

La producción de muchos productos químicos orgánicas a menudo requiere una serie de dos o más pasos de reacción y una vez que se completa la reacción, el producto deseado debe separarse de los subproductos mediante una segunda operación

unitaria. En la etapa de separación, se utilizan una serie de técnicas de separación como sedimentación, destilación o refrigeración y el producto final puede requerir más procesamiento con la finalidad de ofrecer un producto completamente refinado. La tecnología de separación empleada depende de muchos factores, incluidos las fases de las sustancias que se separan, el número de componentes en la mezcla y si la recuperación de subproductos es importante. Se pueden utilizar individualmente numerosas técnicas, como destilación, extracción, filtración y sedimentación.

Finalmente, las leyes regulatorias relativas a las emisiones peligrosas generadas durante la producción de productos químicos orgánicos son dinámicas importantes que dan forma a la industria. Para minimizar los efectos perjudiciales de los contaminantes de la industria química, múltiples las leyes locales, estatales y federales rigen a los productores. Por ejemplo, la Ley federal de planificación de emergencias y derecho a la información de la comunidad exige que muchos fabricantes presenten detalles de cualquier dato de emisiones a los Estados Unidos.

La industria química en general ha logrado reducir las distintas emisiones de residuos que aparecen en el Inventario de Emisiones Tóxicas.

El presente libro de Química Orgánica Industrial pretende ayudar al estudiante a estudiar y comprende los productos orgánicos naturales como a aquellos que se preparan en un laboratorio y después a escala industrial.

CAPÍTULO I

Desarrollo evolutivo de la Química Orgánica Industrial.

Los avances en el desarrollo de la química orgánica industrial son esenciales para la comercialización exitosa de procesos innovadores y eficientes. Desde la producción de amoníaco mediante fijación artificial de nitrógeno hasta los flujos de trabajo de fabricación modernos para terapias peptídicas, estos importantes avances en la química de procesos serían imposibles sin tecnologías de vanguardia y la colaboración entre disciplinas (1)

Estados Unidos, Europa occidental y Japón son las sociedades más complejas que alguna vez han existido. La división del trabajo ha llegado al punto en que la mayoría de la gente. Muchos realizan tareas altamente especializadas y dependen de muchos otros para que les proporcionen los bienes y servicios que necesitan. A cambio de estos bienes y servicios, proporcionan. Proporcionar sus productos para satisfacer las necesidades de otros. Todos los hombres son hermanos en un aspecto material.

Para comprender los avances y desarrollo de la química orgánica industrial daremos un vistazo a los Premios Nobel de Química, que en varios casos han sido otorgados a científicos que realizaron una parte significativa de la investigación reconocida en la industria (en este contexto, también vale la pena señalar que Alfred Nobel fue él mismo un químico industrial altamente productivo) (2). A continuación se enumeran los importantes:

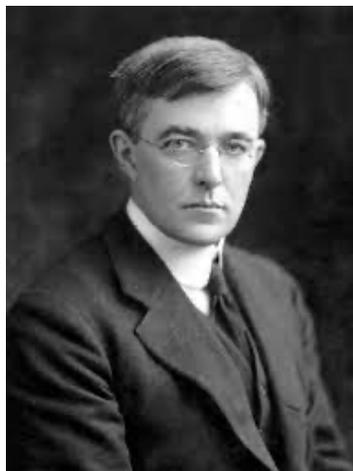


- Carl Bosch (Nobel 1931), a principios del siglo 19, Bosch se interesó por el problema de la fijación de nitrógeno y sus primeros experimentos en este campo se realizaron con cianuros y nitruros metálicos; en 1907 puso en marcha una planta piloto para la producción de cianuro de bario. por métodos de alta presión en la

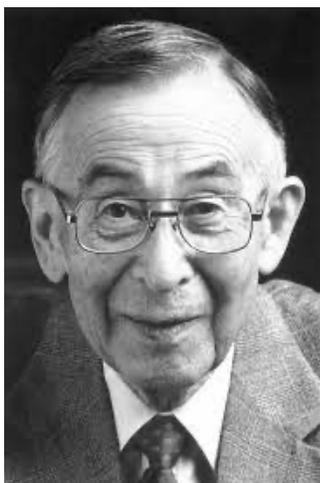
producción de amoníaco y nitrato de amonio (proceso Haber-Bosch), trabajo realizado en I. G. Farbenindustrie. La oportunidad de Bosch para realizar un trabajo realmente a gran escala llegó cuando en 1908 Badische Anilin- und Sodafabrik adquirió el proceso de síntesis de amoníaco a alta presión, que había sido desarrollado por Fritz Haber en la Technische Hochschule de Karlsruhe. A Bosch se le encomendó la tarea de desarrollar este proceso a gran escala industrial. Esta tarea implicó la construcción de plantas y aparatos que resistieran el trabajo a alta presión de gas y altas temperaturas de reacción. Los catalizadores de Haber, el osmio y el uranio, tuvieron que ser reemplazados por una sustancia de contacto que fuera más barata y más fácilmente disponible. Bosch y sus colaboradores encontraron la solución utilizando hierro puro con determinados aditivos. Otros problemas que debían resolverse eran la construcción de altos hornos seguros de alta presión, una forma económica de producir y limpiar los gases necesarios para la síntesis de amoníaco. Poco a poco, Bosch pasó a utilizar unidades de producción cada vez más grandes y creó así la industria que se ocupa de la producción de amoníaco sintético según el proceso de alta presión (3)

• Irving Langmuir (Nobel 1932)

por estudios en química de superficies y teoría electrónica de la química orgánica, trabajo realizado en General Electric, con este trabajo pudo demostrar que Los electrones en los átomos son estacionarios o rotan, giran u oscilan alrededor de posiciones definidas en el átomo. En los



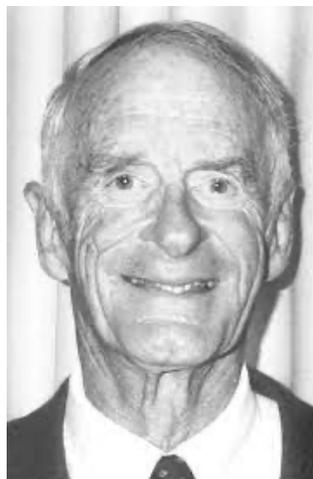
átomos más estables, es decir, los de los gases inertes, los electrones tienen posiciones simétricas con respecto a un plano, llamado plano ecuatorial, que pasa por el núcleo en el centro del átomo. No hay electrones en el plano ecuatorial. Hay un eje de simetría (eje polar) perpendicular a este plano por el que pasan 4 planos secundarios de simetría formando ángulos de 45 grados juntos. Por tanto, estos átomos tienen la simetría de un cristal tetragonal. Cada capa se divide en espacios celulares o células que ocupan iguales áreas en sus respectivas conchas y distribuidas sobre la superficie de las capas de acuerdo con la simetría requerida por el Postulado I. La primera capa por lo tanto contiene z celdas, la segunda 8, la tercera 18 y la cuarta 32 (4)



• Charles Pedersen (Nobel 1987) por el desarrollo y uso de moléculas con interacciones estructurales específicas de alta selectividad, trabajo realizado en DuPont. En este trabajo se trabajó con Treinta y tres poliéteres cíclicos, derivados de dioles aromáticos vecinales y que contienen de 9 a 60 átomos incluyendo de 3 a 20 átomos de oxígeno en el anillo. Algunos de estos han sido preparados con buenos rendimientos sin el uso de

una técnica de alta dilución. Quince de los compuestos se han hidrogenado catalíticamente para dar los correspondientes poliéteres cíclicos saturados. Muchos de los que contienen de cinco a diez átomos de oxígeno forman complejos estables con algunos o todos los cationes de: Li, Na, NH₄, RNH₃, K, Rb, Cs, Ag(I), Au(I), Ca, Sr, Ba, Cd, Hg(I), Hg (II), La(III), Tl(I), Ce(III) y Pb(I). Muchos de estos complejos se pueden aislar en forma cristalina dependiendo del anión. Parecen ser complejos de sal-poliéter formados por la interacción ion-dipolo entre el catión y los átomos de oxígeno cargados negativamente del anillo de poliéter. La estequiometría de los complejos es una molécula de poliéter por ion individual independientemente de la valencia. Algunos de los poliéteres, al formar complejos, solubilizan compuestos inorgánicos, como el hidróxido de potasio y el permanganato, en hidrocarburos aromáticos (5)

• William Knowles (Nobel 2001) por el desarrollo de reacciones de hidrogenación catalítica asimétrica, trabajo realizado en Monsanto. Este mecanismo ha investigado el mecanismo de reacción de la hidrogenación asimétrica de alquenos funcionalizados catalizada por un complejo supramolecular de rodio. El análisis en profundidad de RMN combinado con la determinación de la estructura cristalina



por rayos X muestra que se forman enlaces de hidrógeno entre el catalizador y el sustrato en las primeras etapas del mecanismo. Los datos cinéticos detallados obtenidos de experimentos de flujo detenido UV-vis y de absorción de gas confirman que los enlaces de hidrógeno desempeñan un papel crucial en el mecanismo. Un estudio completo por DFT de las distintas vías competitivas del mecanismo de reacción nos permitió identificar cómo estos enlaces de hidrógeno intervienen en los pasos determinantes de la reacción (6)



- Richard Schrock (Nobel 2005) por su trabajo sobre metátesis de olefinas, incluidos los primeros estudios de alquilidenos se encuentran entre los procesos más importantes en la síntesis orgánica. El avance decisivo para hacer que estas reacciones sean prácticas para fines industriales, que van desde la síntesis de polímeros hasta productos farmacéuticos, se produjo con el descubrimiento del mecanismo de reacción por parte de Yves Chauvin y el desarrollo específico de catalizadores de metátesis basados en metales de transición por parte de Richard Schrock y Robert. Grubbs. Los ganadores del Premio Nobel de Química en 2005 presentan relatos de primera mano de estos avances (7)

•Richard Heck (Nobel 2010) por acoplamientos cruzados catalizados por paladio en síntesis orgánica, estudios iniciales realizados en Hercules. Donde Derivados de arilo, metilo y carboxialquilo de sales de metales del grupo VI¹¹, particularmente paladio, rodio, y sales de rutenio, reaccionan con olefinas para producir olefinas



sustituidas con arilo, metilo o carboxialquilo y se reducen a sal metálica o metal. La reacción se puede hacer catalítica con respecto a la sal metálica empleando cobre, cloruro o cloruro cúprico, aire y cloruro de hidrógeno como reoxidantes. La reacción es insensible al oxígeno y agua y, por lo tanto, proporciona un método extremadamente conveniente para la síntesis de una amplia variedad de compuestos olefínicos (8).

En los siglos XVI al XVIII, casi no había diferencia entre la química y las industrias químicas, y se produjeron numerosas interacciones debido al empleo de aparatos y materiales comunes. En primer lugar, sin embargo, debemos reflexionar brevemente sobre los cambiantes significados de las expresiones "industria química" y "química". Aproximadamente antes de 1850 no existía la "industria química" como tal, tan sólo algunas actividades particulares como el comercio de los álcalis, la producción de jabón, la elaboración de pigmentos como el albayalde, etc. El propio concepto de "industria química" es, en parte, un producto de las estadísticas nacionales del siglo XIX, que decidieron que algunos procesos químicos industriales tales como la cerámica, el vidrio, la fabricación de hierro y otros metales, permanecerían fuera de la industria química, mientras que otros serían incluidos. Por el contrario, la "química" fue una actividad social desde los inicios del siglo XVII. El término surgió en el siglo XVI de la palabra alquimia. En el siglo XVII, la química se convirtió en una disciplina, tal y como indican el nacimiento

de los libros de texto de química, el nombramiento de profesores de química en la universidad, y a finales de este siglo, la fundación de una sección de química en importantes instituciones científicas, incluyendo la Academie des Sciences de París (9)

Hoy en día, millones de productos de la industria orgánica son utilizados como combustibles para el transporte, fertilizantes, polímeros y compuestos, productos farmacéuticos, detergentes, aditivos alimentarios, colorantes, agroquímicos, etc., se utilizan ampliamente, manteniendo o incluso aumentando el nivel de vida de las personas. Hasta ahora se han producido más de 130 millones de sustancias químicas artificiales que antes no existían en la naturaleza. Además, esta producción se basa en gran medida en recursos de carbono fosilizado, es decir, petróleo crudo, gas natural y carbón, lo que hace que nuestra sociedad dependa de los combustibles fósiles. Si bien este número aumenta continuamente en 1 millón por año, se dispone de información limitada sobre el impacto de nuevos compuestos en los organismos vivos y el medio ambiente. Al liberar estos compuestos en la biosfera, estos materiales podrían interactuar con sustancias naturales y una porción muy pequeña puede integrarse en los sistemas vivos existentes sin sufrir daños. El resto hay que considerarlo como más o menos tóxico y que pone en peligro la vida, lo que se manifiesta en la interacción nociva de los xenobióticos con las biomoléculas. Además, en los últimos 50 años los productos químicos han causado varios problemas graves para el medio ambiente y la salud. Por ejemplo, han ocurrido desastres químicos en Seveso (Italia, 1976) (10) y Bhopal (India, 1985), (11) y la utilización a gran escala de sustancias peligrosas como el DDT (1940-1970), (12) los clorofluorocarbonos (1960-1994), (13) o el uso directo de sustancias quirales como la talidomida en humanos (década de 1960), (14) sólo por nombrar algunos, han resultado en problemas globales y/o locales, que han dirigido la atención de

los investigadores hacia el desarrollo de metodologías amigables con el medio ambiente para la síntesis de nuevas sustancias químicas y el uso de sustancias menos nocivas (15).

La Industria Química tuvo su origen en la segunda mitad del siglo XVIII y principios del XIX y consistió principalmente en productos inorgánicos basados en materias primas naturales, tales como el azufre y la sal común. En cuanto a los productos orgánicos inicialmente se utilizaron aquellos que se obtenían de la fermentación de productos agrícolas, a causa de la disponibilidad de tecnología y de materias primas adecuadas basadas en la agricultura. Entre los más conocidos se encuentran etanol, vinagre, ácido láctico, glicerina, acetona, y butanol entre otros. Sin embargo, los procesos de fermentación tienen una aplicabilidad limitada, utilizando generalmente sistemas acuosos y bajas concentraciones, lo que lleva a una purificación relativamente complicada del producto, lo que ha motivado su declive. No obstante en Brasil el etanol utilizado como combustible se obtiene por fermentación de la caña de azúcar.

A principios del siglo XX se desarrollaron los procesos de fabricación para obtener productos orgánicos a partir del carbón; este período estuvo dominado por Alemania y otros países productores de carbón como Estados Unidos, Gran Bretaña y Francia; se establecieron industrias de alquitrán de hulla durante el período de 1914 a 1920. A partir de 1950 comenzó a desarrollarse la industria petroquímica en los Estados Unidos, basada en productos de la industria petrolífera. El crecimiento de la industria petroquímica después de la II Guerra Mundial, gracias a la abundancia de las fuentes, motivó que se desarrollará una industria basada en el petróleo, situación que continúa en la actualidad. Vivimos en un sistema socioeconómico basado en el petróleo y dependiente de él. Si bien hay que tener en cuenta que todos los productos orgánicos requeridos pueden sintetizarse a partir de carbón y agua (16). El valor de producción de la química

Orgánica Industrial es superior al 85% del de toda la industria química.

Una de las materias primas más utilizadas para la conversión es el petróleo, el cual es conocido en varias partes del mundo desde hace milenios, pero nunca fue ampliamente utilizado en la antigüedad. Generalmente se consideraba un material local, encontrado fácilmente en algunas áreas, y nunca fue destilado ni separado en gran medida. Aunque a partir del siglo XVII el aceite de ballena se convirtió en un producto básico a gran escala. El aceite de oliva es un ejemplo de aceite vegetal que se usaba ampliamente en el mundo antiguo, o al menos esa parte se centraba en el Imperio Romano.

Uso del petróleo en el siglo XIX

Si bien el petróleo se ha filtrado a la superficie en varias partes del mundo, como China y Medio Oriente, durante siglos, no se desarrolló como combustible comercial hasta el Siglo XIX. En aquella época, como ya hemos mencionado, el aceite de ballena se utilizaba ampliamente como combustible en Lámparas de aceite, para iluminar viviendas y algunos negocios comerciales durante la noche. De este modo, a mediados del siglo XIX, la tecnología estaba bien desarrollada para aceites para arneses y lo que se conoció como queroseno para uso en aplicaciones residenciales y comerciales, específicamente, farolas y farolas. Este mercado siguió creciendo a medida que la población del mundo desarrollado seguía creciendo.



Figura 2 Primeros campos de petróleo (17)

El pozo Drake cerca de Titusville, Pensilvania, que comenzó a producir en 1859 como el primero. Dado que las primeras reclamaciones se produjeron en las décadas de 1840 y 1850, y desde la clara. El combustible derivado del petróleo crudo, llamado entonces queroseno, se quemaba de manera más limpia que aceite de ballena, el aumento de la extracción y destilación de petróleo crudo corresponde a la disminución de la industria ballenera.

Consumo de petróleo a inicios del siglo XX.

El motor de combustión interna fue inventado, mejorado y utilizado en de numerosas maneras a principios del siglo XX. Surgieron varias empresas en esa época que producían automóviles, todos ellos anunciando la superioridad de como en carruajes tirados por caballos. Sin embargo, curiosamente, no todos los automóviles eran conducidos por motores de combustión interna en los primeros años del siglo XX. Más bien, se comercializaron automóviles propulsados por vapor, al igual que vehículos eléctricos, el último de ellos que funcionaba con una serie de baterías de plomo-ácido. Pero el poder generado por el interior de los motores de combustión hizo que los automóviles que los utilizaban se convirtieran en los favoritos predominantes entre los propietarios. El año 1913, por ejemplo, fue el último año en el que la Ford Motor Company vendió más automóviles eléctricos que de combustión interna.

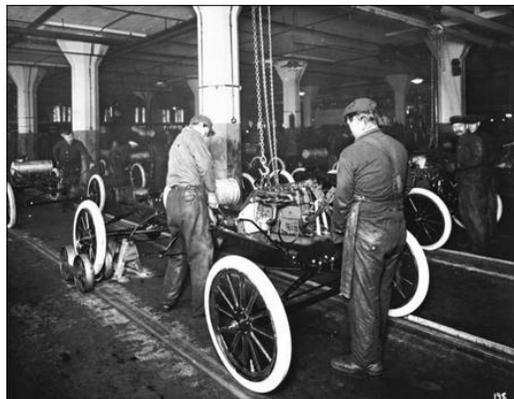


Figura 3 Auto Ford 1913 (18)

Este desarrollo de los automóviles estimuló la demanda de combustible para motores, pero incluso la producción en masa del Ford Modelo T no aumentó la demanda de combustible petroquímico tan dramáticamente como lo hizo la Primera Guerra Mundial. Mientras que la mayoría de los ejércitos del mundo en ese conflicto se utilizaron vehículos de suministro tirados por caballos, al final de la guerra, el tanque había hecho su debut en el frente occidental, utilizando lo que entonces era una enorme (y bastante ineficiente) motor. Más allá de esto, los buques de guerra propulsados por carbón estaban siendo reemplazados por buques propulsados por petróleo porque la eficiencia de la combustión era tal que, cuando se comparaba grandes masas de carbón y petróleo, un barco a veces podía viajar el doble de distancia usando petróleo. Esta guerra fue esencialmente el primero en el que los combustibles de hidrocarburos se convirtieron en un requisito para ejércitos y armadas modernos.

Consumo de petróleo durante la Segunda Guerra Mundial

Cuando estalló la Segunda Guerra Mundial, los ejércitos de varios países todavía no se habían convertido en fuerzas enteramente mecanizadas, pero se habían logrado avances significativos hecho en esa dirección. La famosa guerra relámpago nazi en Holanda, Bélgica, Luxemburgo y Francia son probablemente el ejemplo más conocido de un uso militar de equipos que dependían de gasolina o diésel. En efecto, en ese durante la maniobra, las líneas de suministro se extendían tan lejos de los tanques atacantes que este problema logístico parece ser una de las principales razones por las que la Blitzkrieg se detuvo cuando lo hizo.

A una escala más global, la búsqueda de petróleo y de las áreas donde se puede producir impulsó a las fuerzas de la Wehrmacht nazi a intentar arrebatarse el Cáucaso al luego Unión Soviética y

obligó a las fuerzas del Imperio del Sol a anexar grandes partes de Indonesia. Al mismo tiempo, los líderes de los aliados cortejaban a los líderes de varios países del Medio Oriente debido al petróleo disponible en la Península Arábiga y Irán actual.

Pero en aquella época el petróleo no sólo se refinaba para convertirlo en gasolina y diésel, sino que separándose en monómeros componentes, para una nueva clase de moléculas: los plásticos. Para ser justos, varios plásticos tienen una historia anterior a la Segunda Guerra Mundial. Baquelita, una resina de formaldehído, se conocía desde hacía décadas. El nailon había sido descubierto en década de 1930 y rápidamente se puso en servicio para diversas aplicaciones durante la guerra. Como Bueno, el caucho sintético era conocido antes de la guerra, pero rápidamente pasó a ser industrial. producción a gran escala cuando los árboles de caucho del sudeste asiático cayeron bajo el control de los Imperio japonés. Es justo decir que la Segunda Guerra Mundial fue un acontecimiento pionero en el uso tanto de combustibles de hidrocarburos y plásticos sintéticos.

Producción de plástico posterior a la Segunda Guerra Mundial

A medida que la producción de plástico alcanzó una enorme economía de escala, los plásticos comenzaron a competir con los materiales tradicionales de muchas maneras: el plástico versus madera para los alféizares de las ventanas, plástico versus vidrio para las ventanas, plástico versus metal para piezas de automóviles para fabricar coches más ligeros y con mayor economía de combustible, plásticos versus cuero para zapatos y otras prendas de vestir, y plásticos versus telas para bolsas de supermercado. La lista parece casi interminable. En la década de 1950, algunos de los primeros plásticos producidos en masa se comercializaron como materiales que nunca necesitarían ser reemplazados. Pero cada año, se lanzaban nuevos productos desarrollado, y se instó a los consumidores a comprar más y así

descartar sus productos más viejos elementos. Debido a que los plásticos se han fabricado para ser extraordinariamente duraderos, su impacto a largo plazo la eliminación se ha convertido en un problema enorme (19)

Los plásticos no sólo se han convertido en materiales que se utilizan en una variedad cada vez mayor de aplicaciones, sino también el número de automóviles, camiones y vehículos militares motorizados. Los vehículos (todos los cuales requieren gasolina o diésel) significan que es necesario encontrar y refinar cantidades cada vez mayores de combustibles para motores. Aunque mejoras en los motores significa que los vehículos actuales tienden a funcionar con menos combustible que los automóviles y camiones anteriores, la gran cantidad de ellos que existen significa que los contaminantes del tubo de escape, como el carbono, el dióxido y el monóxido de carbono, así como otros productos de la combustión, siguen siendo un problema de contaminación que afecta al aire y al agua y, en cierta medida, al suelo.

Producción mundial de petróleo

Tal vez sea obvio que la producción de petróleo está vinculada a las áreas geológicas en las que se produce el petróleo está encerrado en la Tierra. Dado que tales formaciones están distribuidas de manera desigual en toda la Tierra, algunas naciones se han convertido en importantes productores de petróleo y otras convertirse en grandes consumidores. La Organización de Países Exportadores de Petróleo (OPEP) es una organización de naciones, todas las cuales tienen importantes reservas de petróleo, que afirma: “coordinar y unificar las políticas petroleras de sus países miembros” (20).

Dado que los países miembros controlan la producción de poco menos de la mitad del petróleo mundial, esta organización ejerce una influencia significativa sobre el precio del petróleo [8]. OPEP actual los estados miembros son Argelia, Angola, Ecuador,

Gabón, Indonesia, Irán, Irak, Kuwait, Libia, Nigeria, Qatar, Arabia Saudita, Emiratos Árabes Unidos y Venezuela (20).

En términos generales, la extracción de petróleo se puede dividir en perforación terrestre y marina y perforación y extracción terrestres. La perforación en alta mar en lo que se conoce como aguas litorales (generalmente, aguas que se encuentran dentro de los límites de una nación específica) es a menudo están bien establecidos simplemente porque se trata de aguas relativamente poco profundas. Costa afuera perforaciones en aguas profundas, y especialmente en aguas que no han sido reclamadas por ninguna nación, presenta una serie de problemas políticos relacionados con la jurisdicción y, en última instancia, propiedad del petróleo que se extrae.

Uso mundial del petróleo

Como se analizó anteriormente, el uso del petróleo se expandió enormemente en el siglo XX, impulsado en parte por dos guerras mundiales y un posterior aumento del nivel de vida (21).

El precio del petróleo crudo ligero cotiza diariamente en los mercados mundiales, junto con otros productos básicos como el oro y la plata. Además, como se ha mencionado, el petróleo no se utiliza simple y exclusivamente como combustible para motores. El petróleo sigue siendo el material de partida de numerosas moléculas pequeñas que se fabrican en plástico, así como moléculas orgánicas que pueden tener algún uso final no plástico o uso intermedio en la producción de algún material adicional. Un simple, pero a menudo pasado por alto, un ejemplo es la producción a gran escala de aspirina. Este analgésico se encontraba originalmente en la corteza de los sauces, pero ahora se produce a partir de lo que se llama fracción aromática de la destilación del petróleo crudo el cual será detallado en capítulos posteriores.

Producción de productos químicos orgánicos.

El desarrollo de los llamados biocombustibles, así como de los bioplásticos, es un fenómeno relativamente reciente, aunque alguna forma de biocombustible existe desde hace poco más de 100 años (22). Un biocombustible es cualquier combustible de hidrocarburos cuyo origen no se remonta a petróleo. En Estados Unidos, el maíz ha sido la principal fuente de biocombustibles, específicamente de etanol. En Brasil, la soja se ha convertido en una importante fuente de biocombustible. También, la caña de azúcar se ha utilizado a gran escala para producir bioetanol.

El malestar político de los años 1970 en el Medio Oriente, que involucró a varios de los países miembros de la OPEP de Medio Oriente, y que se produjo después de 15 años de expansión crecimiento económico a escala global, se ha asociado con el aumento a largo plazo costo del petróleo crudo y la creciente comprensión de que las fuentes de combustibles fósiles son finitas. Este y otros factores han llevado a una extensa investigación y desarrollo en la producción de combustibles y plásticos de origen biológico. El uso de biocombustibles y bioplásticos sigue siendo mucho menor que el de lo que ahora se puede llamar petro combustibles y petroquímicos, pero ha crecido lo suficiente como para que ahora existan sitios web, revistas y organizaciones dedicada a la producción de biocombustibles y bioplásticos (23). Además, varios de los principales las compañías petroleras se han expandido hacia la producción de materiales de base biológica, viendo en ello el potencial de ganancias futuras y un medio por el cual pueden ser parte del creciente uso de biocombustibles y bioplásticos.

Química verde en la Industria.

El metabolismo industrial puede ejemplificarse con el segundo principio de la Química Verde. Como ha propuesto Barry M. Trost, todos los métodos sintéticos deben ser diseñados con la finalidad de maximizar la incorporación de todos los átomos

utilizados en la reacción al producto final, lo que permite minimizar o incluso eliminar desechos inútiles o nocivos (24). La economía atómica puede considerarse un excelente “métrica verdes” de transformaciones a nivel molecular y es capaz de definir una reacción como “verde”. Sin embargo, la química de procesos normalmente necesita sustancias auxiliares para ayudar a establecer las condiciones para una reacción 100% económica de átomos. Por lo tanto, los aspectos medioambientales deberían evaluarse posteriormente mediante el destino de las sustancias auxiliares tras el aislamiento y la purificación del producto o productos obtenidos. Para ello, Sheldon introdujo el factor ambiental (factor E) como métrica aplicable para la evaluación del desempeño de un proceso productivo completo. Hace poco, ha sido generalmente aceptado y utilizado por la industria química. El factor E se define como la relación entre la masa de residuos y el producto deseado. Tanto el factor E como la economía atómica están fuertemente relacionados con el carácter ecológico de un proceso químico desde el laboratorio hasta la escala industrial y representan medidas ampliamente aceptadas del impacto ambiental de dichos procesos.

No hace falta decir que las reacciones de adición son excelentes ejemplos de transformaciones que representan el 100% de la economía atómica. Uno de los primeros artículos de Várady, Horváth y Pályi describieron la conversión de monóxido de carbono y acetileno en bifurandiones, que pueden considerarse **compuestos atractivos para la industria de los polímeros**.

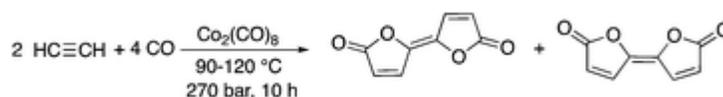


Figura 4 Síntesis de bifurandiones

La reacción catalizada por $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ representa una economía atómica del 100%; sin embargo, la eficiencia de la transformación es bastante baja, como lo indica un rendimiento del producto de sólo 4 a 6 %. Se demostró que la adición de trialquilfosfinas terciarias o trialquilfosfitos dio como resultado una mejora considerable en los rendimientos, alcanzando 30 a 6 %. 72% dependiendo del tipo de sustituyentes alquilo presentes en el ligando de fósforo. Se logró un rendimiento del 72 % mediante la conversión de acetileno y CO en presencia de $\text{P}(\text{nBu})_3$ a 120 °C.16

Las reacciones de polimerización se utilizaron para producir más de 300 millones de toneladas de materiales en 2014 en todo el mundo y ayudan en la vida cotidiana de la sociedad humana, desde bolsas de plástico, ropa y cubiertos, automóviles hasta atención médica, electrónica y materiales inteligentes, y también son excelentes ejemplos. de economía 100% atómica. El mecanismo de polimerización de etileno (u otra olefina) catalizada por metales de transición, que tiene un papel destacado en la química de polímeros, comienza con la coordinación del enlace C=C con el centro metálico activado del catalizador de metalloceno y seguido de la inserción de una olefina coordinada en el enlace metal-carbono de la cadena polimérica en crecimiento. Según el mecanismo de Cossee-Arlman, se propuso un paso de inserción migratoria β , que tiene lugar a través de un complejo intermedio de alquil-olefina. Sin embargo, su presencia no se detectó hasta 1990, cuando Brookhart y Horváth et al informaron por primera vez de complejos de co-alquilo en la polimerización de etileno catalizada por $[\text{C}_5\text{Me}_5(\text{P}(\text{OMe})_3)\text{CoCH}_2\text{CH}_2-\mu\text{-H}]^+$.

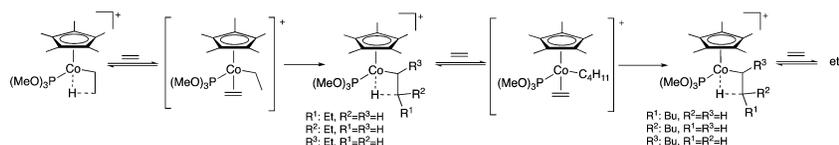


Figura 5 Mecanismo de polimerización del etileno (15)

Las reacciones de hidrogenación selectiva también pueden ejemplificar procesos económicos atómicos. Entre estas transformaciones, la conversión de una plataforma química inicial furfural en alcohol furfúrico es una de las reacciones de hidrogenación más importantes a nivel industrial. Tiene lugar en fase líquida o gaseosa en presencia de un catalizador de cromito de cobre altamente tóxico a gran escala (15) Por lo tanto, para reducir el riesgo ambiental de esta transformación, se han realizado varios intentos para desarrollar sistemas catalizadores alternativos (25) Recientemente se demostró que un catalizador de Ru/Ph₂P(CH₂)₄PPh₂ era capaz de convertir FAL en FOL en ausencia de disolventes externos u otros materiales auxiliares, abriendo una ruta respetuosa con el medio ambiente para esta reacción. Se descubrió que el catalizador era reciclable durante doce procesos consecutivos sin ninguna disminución en su actividad y selectividad.

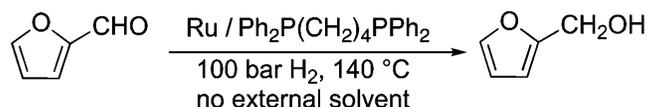


Figura 6 Síntesis de furfural a alcohol furfúrico (25)

La oxidación de etileno a óxido de etileno también es una reacción importante en la industria química a gran escala. La reacción original, el llamado “proceso de clorhidrina”, presentaba varios problemas ambientales graves, incluida la pérdida de cloro gaseoso que se utilizaba en la formación de cloruro de calcio y la generación de subproductos no deseados que contienen cloro. Desde el descubrimiento de un catalizador heterogéneo a base de Ag por Lefort en 1931 que permite la oxidación directa de etileno a óxido de etileno, el proceso de fabricación se ha convertido teóricamente en un proceso 100% económico de átomos; sin embargo, la selectividad práctica del proceso a escala industrial está entre 80 y 90% dependiendo del tipo de sistema catalizador utilizado, es decir, el tipo de soporte sólido utilizado, la presencia de promotores, etc. Cabe señalar

que ningún otro metal tiene. Se ha descubierto que pueden competir con Ag para este propósito.

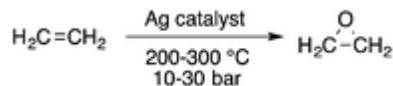


Figura 7 Oxidación del etileno

El carbonato de dimetilo (DMC), el carbonato orgánico más simple, tiene un papel importante en la industria química y, además, su baja toxicidad (LD₅₀, rata = 13 000 mg kg⁻¹) (26) para la salud humana y otras formas de vida lo convierte en un producto seguro. La producción convencional de DMC se basa en la reacción de metanol con fosgeno altamente tóxico utilizando un disolvente clorado. El primer proceso alternativo sin fosgeno se basó en la carbonilación oxidativa de metanol en presencia de cloruro de Cu(I). Sin embargo, debido a la formación de HCl húmedo por la hidrólisis del cloruro que contiene especies de Cu, el proceso es extremadamente corrosivo y, por lo tanto, todos los equipos comerciales expuestos a la mezcla CuCl-MeOH-H₂O-HCl deben estar revestidos de vidrio. Además, la formación de subproductos orgánicos clorados también podría provocar problemas medioambientales. Debido a que el precursor del catalizador es la única fuente de cloro en el sistema, la aplicación de un catalizador libre de cloro supera los inconvenientes del proceso.

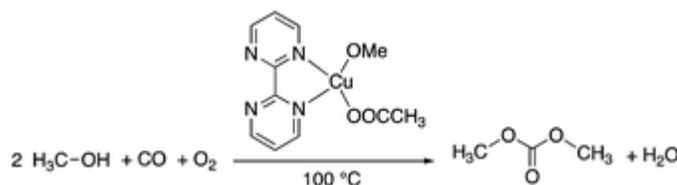


Figura 8 Carbonilación oxidativa del metanol en dimetilcarbonato (26)

El ácido láctico y sus ésteres son disolventes de base biológica baratos y fácilmente disponibles y pueden producirse industrialmente a gran escala mediante fermentación. El ácido láctico se ha utilizado por primera vez para promover reacciones

orgánicas, como las reacciones de tres componentes de estirenos, formaldehído y un derivado de fenol activo. Las reacciones de tres componentes de acetilendicarboxilato de dietilo, anilinas y aldehídos aromáticos, las condensaciones catalizadas por anilina entre salicilaldehídos y acetilendicarboxilato de dietilo y la síntesis de quinolinas sustituidas a través de la reacción de Friedländer entre 2'-aminoacetofenona y compuestos de 1,3-dicarbonilo dan como resultado excelentes rendimientos. El protocolo toleró las reacciones de varios haluros de arilo sustituidos y ácidos arilbóricos en condiciones suaves, lo que representa un bajo impacto ambiental y una metodología no tóxica. Se demostró la quimioselectividad de la reacción para la síntesis de biarilos bromosustituidos, que podrían tener una relevancia sintética significativa (27). Las 1,4-dihidropiridinas, que representan una clase importante de estructuras N-heterocíclicas, podrían actuar como ligandos para receptores biológicos en el campo de Medicina, estos compuestos tienen efectos antifúngicos, antimicrobacterianos, antitumorales, antioxidantes, antimicrobianos y antipalúdicos, y también pueden servir como sintones para alcaloides naturales y de importancia farmacéutica.

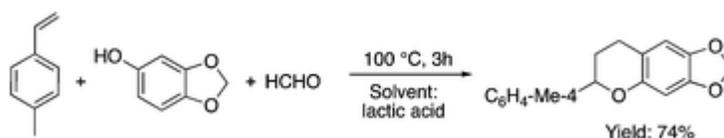


Figura 9 Reacción del ácido láctico (27)

Los alcoholes representan una familia de disolventes fácilmente sintonizables mediante la variación en el número de grupos funcionales hidroxilo polares y próticos en los grupos alquilo apolares y no próticos. Esta propiedad se puede demostrar espectacularmente en el proceso Shell Higher Olefin Process (SHOP), que fabrica α -olefinas superiores a partir de etileno mediante oligomerización controlada. Si bien el 1,4-butanodiol sirve como fase que contiene el catalizador a base de

Ni, donde tiene lugar la oligomerización, la solubilidad limitada de las α -olefinas resulta en una fácil separación del producto (28). Es importante señalar que el proceso SHOP fue la primera realización de un Sistema catalítico bifásico industrial.

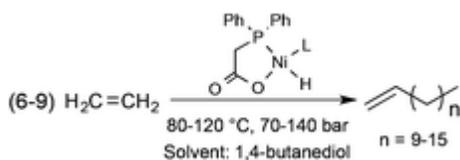


Figura 10 Oligomerización del etileno (28)

El **5-hidroximetilfurfural** se ha identificado como un componente prometedor que sirve como alternativa renovable para polímeros, productos farmacéuticos, agroquímicos, sabores y fragancias, macro y heterociclos y productos naturales (29). También se ha propuesto como un precursor de los componentes del combustible. El ácido furano-2,5-dicarboxílico, que se puede obtener por oxidación, también fue destacado por el Departamento de Energía de EE. UU. como una sustancia química básica bioderivada clave que representa un punto de partida para la síntesis de varias moléculas, es decir, el ácido succínico. También es un posible sustituto de los ácidos tereftálico o isoftálico en la fabricación de poliamidas, poliésteres y poliuretanos (30). También se puede aplicar como agente reticulante para poli (alcohol vinílico) en separadores de baterías y como componente para aglutinantes de arena de fundición.

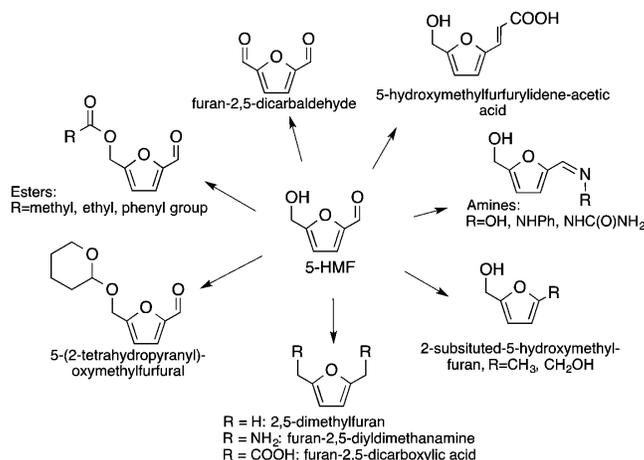


Figura 11 Derivados del hidroximetilfurfural (30)

La química juega un papel fundamental en nuestra sociedad moderna y ha contribuido mucho a la evolución tecnológica al permitir la invención de millones de reacciones químicas que han llevado a la formación de nuevos materiales, que nunca antes existieron en la historia del universo. Las nuevas sustancias, si interactúan con los sistemas vivos en cantidad suficiente, pueden ser nocivas o incluso venenosas, y esta es una de las razones por las que la química tiene mala imagen ante el público. Esto corresponde al principio de la evolución conservadora, es decir, que sólo pueden sobrevivir nuevos bloques de construcción, surgidos a lo largo de la larga historia del universo, que estén bien anclados a los ya existentes. Los bloques de construcción exitosos sobreviven incluso durante miles de millones de años, mientras que los materiales o procesos que no encajan en el orden natural desaparecen en un tiempo limitado.

CAPÍTULO II

Materias primas en la Industria de la Química Orgánica.

La gran mayoría de compuestos orgánicos se obtienen a partir de los hidrocarburos saturados que se encuentran en el gas natural y en el petróleo. Como se conoce en la actualidad el petróleo conjuntamente con el gas natural constituyen la principal fuente de energía, la cual es utilizada por la sociedad actual. Aproximadamente constituye el 90% de la energía que se consume debido a la combustión de recursos fósiles.

Durante la segunda década del siglo XIX se utilizó el gas como fuente de combustible y fue hasta el siglo XX que fue utilizado como fuente de energía debido a su alta producción y mejora productiva. En la actualidad el gas natural tiene gran importancia ya que es utilizado como materia prima en el sector químico industrial. El consumo de gas natural incrementará en un 3,3% hasta el 2030 esto según la IEA (International Energy Agency).

El petróleo por su parte es el recurso natural de mayor importancia ya que el 58% de energía consumida proviene del petróleo. El petróleo se transforma en múltiples derivados, la gran mayoría de ellos son utilizados como combustibles de autos, aviones, barcos. El uso del combustible remota del siglo XIX con la aparición del motor. A mediados del siglo XIX comienza la refinación del petróleo obteniendo fracciones con mayor valor comercial, permitiendo el desarrollo social actual.

El Medio Oriente sigue siendo la región productora de petróleo más grande, la dominación en reservas del petróleo, o sea la cantidad estimada de petróleo de Medio Oriente que se puede producir de depósitos sabidos, es aún más pronunciada: la región posee más de la mitad de los 1.200 millones de barriles de las reservas globales probadas del petróleo, el papel central de la región como la fuente de abastecimiento de petróleo del mundo

continuará y crecerá en los próximos años. Los Estados Unidos, por el contrario, tienen solamente un 7% de reservas probadas a escala global. Algunos progresos centrales han formado el nuevo patrón de la producción petrolífera regional:

- Los precios más altos del petróleo de los años 70 y de principios de los 80 produjeron un incentivo económico fuerte para explorar y para producir el petróleo, y la producción se incrementó en muchas áreas. Al mismo tiempo, la demanda de petróleo declinó como respuesta previsible a los elevados precios. Arabia Saudita jugó un papel de estabilización, reduciendo sus niveles de producción tanto como fuera necesario para balancear la oferta y la demanda. Abandonando ese papel hacia 1985, se desequilibró el mercado colapsando los precios internacionales ya en 1986. Los precios no volvieron a niveles pre-1986 hasta el conflicto del Golfo Pérsico de 1990-91 cuando lo hicieron sólo por un período de tiempo corto. Cuando, en 1998, la demanda asiática vaciló con las economías de la región, y la demanda del hemisferio norte se desplomó con el invierno caliente, los altos niveles de la producción dieron lugar a otro derrumbamiento del precio. La reacción del mercado en 1998 no era igual que en 1986: la demanda no se recuperó tan rápidamente y la oferta no disminuyó en la misma proporción. Por lo tanto, el período de precios bajos duró más en 1998 que en 1986. A principios de 2000, los precios del petróleo excedieron en términos nominales los niveles del conflicto del Golfo Pérsico. Si bien a principios del 2000 hubo un sostenido aumento del precio internacional, los precios del petróleo crudo seguían siendo menos que la mitad de los precios de los años 80 en términos del poder adquisitivo global (31).
- Norteamérica es la segunda mayor área de producción después del Oriente Medio. Los Estados Unidos, el segundo productor más grande del mundo, representa el 60% del total de la región norteamericana. Canadá, los Estados Unidos y México tienen

largas historias como productores, y la extracción de petróleo de pozos maduros ha estado declinando.

- La producción de la ex Unión Soviética llegó a cerca de 12 millones de barriles al día durante gran parte de la década del 80, cuando era el mayor productor de petróleo del mundo. El derrumbamiento de la demanda de la región, conjuntamente con su estrategia de producción agresiva para exportar y mantener el tipo de cambio de su moneda, enmascaró su declinación rápida de la producción a finales de los 80's mientras que la Unión Soviética se desintegró. La ex Unión Soviética ha sido recientemente el tercer productor mundial, después de Arabia Saudita y de los Estados Unidos. Una de las nuevas perspectivas más viables ha sido el Mar Caspio en Asia central, a pesar de las enormes dificultades logísticas y políticas implicadas en conseguir y producir el petróleo para los mercados mundiales (31)

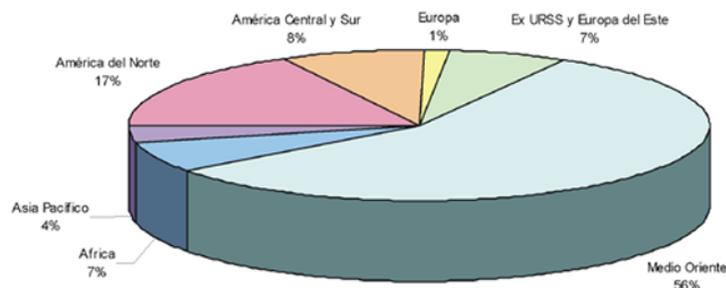


Figura 12 Producción de petróleo a nivel mundial

En un futuro no muy lejano se piensa que el petróleo se puede llegar agotar debido al crecimiento industrial y a la alta demanda del desarrollo social. Cabe recalcar que este crecimiento trae consigo un aumento en la contaminación ambiental debido a los gases de efecto invernadero que se generan durante la quema de combustibles fósiles.

GAS NATURAL

El gas natural es una corriente gaseosa compuesta por una mezcla de hidrocarburos y no hidrocarburos. Los hidrocarburos

son los parafínicos que incluyen el metano, etano, propano y otros hidrocarburos más pesados que a condiciones atmosféricas son gaseosos. Los no hidrocarburos los representan algunos gases inertes tales como nitrógeno y dióxido de carbono al igual que pequeñas cantidades de otros componentes tales como ácido sulfhídrico, helio, oxígeno y el vapor de agua.

Tabla 1 Composición del gas natural

Compuesto	Fórmula	Porcentaje
Metano	CH ₄	70-90%
Etano	C ₂ H ₆	0-20%
Propano	C ₃ H ₈	0-20%
Butano	C ₄ H ₁₀	0-20%
Dióxido de carbono	CO ₂	0-8%
Oxígeno	O ₂	0-0,2%
Nitrógeno	N ₂	0-5%
Sulfuro de hidrógeno	H ₂ S	0-5%
Otros gases nobles	Ar, He, Ne, Xe	Trazas

El gas natural se encuentra en la naturaleza en las “bolsas de gas”, ya sea bajo tierra o en el subsuelo de los océanos. Éstas se pueden encontrar encima de los depósitos de crudo de petróleo (gas natural asociado) o bien en yacimientos exclusivos de gas natural (gas natural no asociado, en este caso se puede distinguir entre: “gas húmedo”, en caso de contener hidrocarburos líquidos en suspensión, y “gas seco”, si no los contiene). Se lo puede encontrar como:

- Gas natural comprimido: el procedente de yacimientos de gas y condensado de gas se prepara en el mismo yacimiento para su transporte antes de comprimirlo y conducirlo a los gasoductos donde se encuentra comprimido a altas presiones entre 200-220 bar, almacenado en tanques.
- Gas natural licuado: el gas natural se transporta por gasoductos desde los campos de extracción hasta las plantas de licuefacción,

donde se comprime y se enfría hasta aproximadamente $-162\text{ }^{\circ}\text{C}$. Es menos denso que el agua, la composición del gas natural licuado es distinta de la del gas natural debido a la eliminación de algunas impurezas y componentes durante el proceso de licuefacción. Se añade nitrógeno y aire para hacerlo equivalente al gas natural antes de introducirlo en las tuberías de suministro. Se utiliza sobre todo para aumentar la provisión de gas natural durante los períodos de fuerte demanda y para abastecer gas a zonas alejadas.

El gas natural obtenido de perforaciones en forma de gas libre, así como gas asociado, se compone principalmente de hidrocarburos que incluyen gas natural licuado (GNL), gas natural comprimido (GNC), gas importado a través de gasoductos transnacionales y metano de lecho de carbón (CBM), obtenido de vetas de carbón, etc. Las demandas de energía han aumentado significativamente con el desarrollo de la civilización. Además, el aumento de la demanda de energía ha aumentado la dependencia de combustibles fósiles como el carbón y el petróleo crudo, especialmente el de los países en desarrollo. Además, la mayor dependencia de una única fuente de energía representa una amenaza significativa para la seguridad energética y la sostenibilidad de la nación (32).

Propiedades físicas.

Como se puede observar en la tabla 2 se destacan algunas de las propiedades del gas natural a 15°C y 1 atm de presión:

Tabla 2 Propiedades del gas natural a 15 °C y 1 atm (33)

Combustible	P.F. °C	P.E. °C	P.M. kg	Densidad kg/m ³	Poder Calorífico kcal/m ³	Calor de Combustión kcal/kg
Metano	-182,5	-161,5	0,016	0,7175	9.024	13.187
Etano	-183	-87	0,030	1,3551	15.916	12.267
Etileno	-169,4	-103,8	0,028	1,26	-	-
Propano	-189,9	-42,1	0,044	2,0098	22.846	11.955
n-butano	-138,3	-0,5	0,058	2,7068	30.144	11.862
i-butano	-145	-10,2	0,058	2,7091	29.955	-
n-pentano	-130	36	0,072	3,5066	38.149	-
i-pentano	-	-	0,072	3,4354	37.630	-
Benceno	5,5	80,1	0,078	890	-	10.026
Ciclohexano	6,55	80,74	0,084	-	-	11.167

El gas natural es mas ligero que el aire, es incoloro, inodoro, no corrosivo, no tóxico. A temperaturas superiores a los -161 °C se presenta gaseoso.

EL proceso de combustión también conocido como oxidación se produce por el incremento de temperatura en presencia de luz o calor en presencia de oxígeno lo cual produce la formación de dióxido de carbono, agua, calor de combustión y la formación de otros productos como el dióxido de azufre. Cuando el gas natural arde alcanza temperaturas que superan los 1930 °C. Las reacciones de combustión se pueden resumir en:

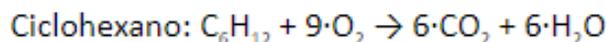
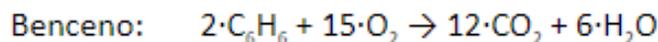
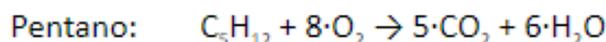
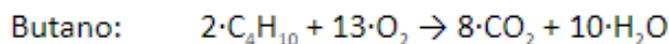
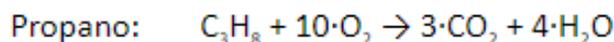
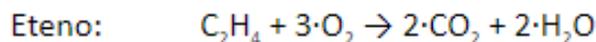
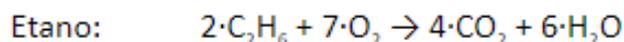
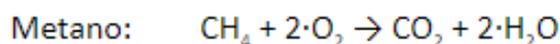


Figura 13 Reacciones de combustión en el gas natural (33)

El gas natural es susceptible de reaccionar con aire u oxígeno produciendo llama y gran cantidad de calor, el gas como combustible y el aire como comburente. La inflamación del gas depende de los límites de inflamabilidad, la temperatura de autoignición y la mínima energía para su inflamación.

Al producirse una combustión completa del gas natural el poder calorífico oscila entre un mínimo de 35.4 y 42.8 MJ/m³ (950 y 1150 BTU/pie³). En otros términos, la consideración de un sistema en que hay la condensación completa del vapor de agua de los gases de combustión. Sin embargo, en las instalaciones de combustión completa de una cantidad de gas, el agua resultante de la combustión permanece en estado de vapor como los demás productos de la combustión. Al diseñarlo y calcular el consumo de gas combustible, es necesario descontar el calor latente aproximadamente 100 BTU/ pie³ de vaporización del agua, de donde resultan los valores de poder calorífico neto.

Es importante destacar que la especificación de poder calorífico se establece con la necesidad de satisfacer los requisitos energéticos del consumidor a un costo aceptable y queda convertida en parte integral del negocio de transporte y distribución de gas natural.

Toxicidad:

La presencia de sulfuro de hidrógeno y monóxido de carbono le otorgan el carácter tóxico al gas natural. El sulfuro de hidrógeno es un gas incoloro, tiene olor desagradable. Por otra parte, el monóxido de carbono es un gas incoloro e inodoro, inflamable con una acción tóxica sobre la sangre; el manejo de este gas debe hacerse en áreas muy bien ventiladas y usar filtro para monóxido de carbono. Las concentraciones permisibles de sulfuro de hidrógeno son de 10 partes por millón de partes de aire para exposición controlada.

Contenido de Agua en el Gas Natural:

El contenido de agua en el gas natural se basa según la norma ISO 10101. La especificación de contenido de agua en el gas natural es necesaria para prevenir la condensación de agua libre y la formación de hidratos en los gaseoductos. Se establece como la masa de agua por unidad de volumen de gas que se encuentre presente en éste. El gas natural al extraerse del subsuelo y llevarlo a la superficie tiene una capacidad para soportar agua conocida como contenido de agua de saturación, la cual depende de la composición química del gas o en otros términos de la densidad relativa (gravedad específica), así como de la presión y temperatura de flujo de la corriente gaseosa.

Las condiciones que determinan el máximo contenido de agua son la máxima presión de operación de la línea o del proceso y la temperatura mínima a la cual puede estar sometida la corriente de gas.

En el diseño de sistemas es necesario prever la remoción de agua y prevención de hidratos. El hidrato es un sólido de estructura sólida cristalina; es una forma de compuesto químico que puede existir en forma estable pero no es el resultado de una verdadera reacción química. El hidrato es como un enrejado con una serie de espacios abiertos o hendiduras. Puede ser un sólido estable si estos espacios los llenan las moléculas de gas. Los espacios pueden acomodar moléculas de metano, etano, propano, sulfuro de hidrógeno, dióxido de carbono y moléculas que sean de tamaño similar al de estos compuestos pero ningún compuesto molecular más grande que el isobutano puede acomodarse. Cuando en el hidrato está presente el dióxido de carbono, recibe el nombre de hidrato triple y equivale a grandes dificultades operacionales de los sistemas.

Origen:

El gas natural se origina de tres procesos: térmicos, biogénicos y abiogénicos.

- **Térmicos:** Este proceso implica la descomposición lenta de material orgánico que ocurre en cuencas sedimentarias bajo la influencia de la temperatura y presión asociadas con el aumento de profundidad. Los microorganismos degradan la materia viva de manera lenta e incompleta. Los residuos se acumulan formando macromoléculas ricas en carbono conocido como petróleo seguido de la formación de gas térmico.
- **Proceso biogénico:** En este proceso el metano se forma por la acción de organismos vivos conocidos como bacterias metanogénicas sobre material orgánico en proceso de descomposición. Los hábitats habituales para las bacterias metanogénicas incluyen los gestores anaeróbicos, sedimentos anóxicos, suelos inundados. Las bacterias metanogénicas se pueden obtener a partir del carbón vegetal mediante la hidrólisis de polímeros complejos como azúcares, alcoholes. Otro medio de producción es mediante la fermentación para producir acetatos, H₂ y CO₂.
- **Proceso abiogénico:** El material de partida son los gases volcánicos, en donde el metano se forma por la reducción del dióxido de carbono durante el enfriamiento del magma.

Clasificación del gas natural:

El gas natural se clasifica de acuerdo con el origen y la composición química.

Clasificación de acuerdo con el origen:

- El gas convencional se encuentra en embalses profundos que están asociados con petróleo crudo (gas asociado) o contienen poco o nada de petróleo crudo (gas no asociado). **El gas asociado** existe en una roca de yacimiento con un depósito de petróleo. Puede estar presente en diferentes formas como gas en solución en el petróleo (gas disuelto) o como gas de capa de gas, que se encuentra encima del depósito de petróleo (gas de cabeza de revestimiento). Suele ser más pobre en metano y más rico en constituyentes parafínicos de mayor peso molecular. **El gas no**

asociado también llamado gas de pozo o gas seco se produce a partir de una formación geológica que normalmente no contiene muchos, si es que contiene alguno, hidrocarburos de aceite crudo que tienen un punto de ebullición más alto que el metano. Este gas suele ser más rico en metano y notablemente más pobre con respecto a los hidrocarburos y materiales condensados de mayor peso molecular.

- El gas no convencional es poco conocido dentro de esta clasificación se encuentra el gas de esquisto (carbonatos arenosos), el metano de lechos de carbón, gas de acuíferos profundos e hidratos de gas.

Clasificación de acuerdo con la composición química:

- Según el contenido de hidrocarburos Contenido de hidrocarburos. El gas seco (gas no asociado) consiste en metano como el componente principal con poco o ningún componente de etano, mientras que el gas húmedo (gas asociado) contiene componentes de etano superiores al 10% en volumen.
- De acuerdo con el contenido de azufre, en esta clasificación, el gas natural podría ser más dulce o ácido. cantidades aceptables de H₂S (más de 5 (mg/Nm³))

Composición del gas natural

Según el yacimiento del que se extrae el gas natural, su composición variará. El gas natural puede contener diferentes componentes de hidrocarburos y no hidrocarburos; en consecuencia, la composición del gas nunca es constante.

El metano, etano, propano, butano y pentano se asocian a los compuestos con hidrocarburos, algunos pueden contener compuestos aromáticos como el benceno, tolueno y xileno. Mientras que los constituyentes del gas natural que no son hidrocarburos pueden ser contaminantes, diluyentes (CO₂, N₂, He los cuales reducen el poder calorífico del gas) y materia sólida.

El CO_2 se puede producir durante la sedimentación, por la acción de la degradación bacteriana anaeróbica de desechos orgánicos en sedimentos recientes mediante un mecanismo bioquímico, el mecanismo orgánico, que implica la reacción entre los residuos resultantes de la degradación querogénica (hidrocarburos y carbonosos) con agua a extrema profundidad, también podría producirse a muy gran profundidad durante la reducción de sulfatos por hidrocarburos y finalmente el mecanismo inorgánico que implica la descomposición térmica de los carbonatos a temperaturas superiores a $200\text{ }^\circ\text{C}$.

El N_2 se puede producir en el gas natural de diferentes formas: Mediante reducción bacteriana de los nitratos disueltos en el agua y mediante degradación térmica de materia orgánica. Del aire atrapado, que es la principal fuente de nitrógeno en los sedimentos.

Se cree que el hidrógeno se produce durante el craqueo térmico de querógenos y petróleos a gran profundidad porque la energía requerida es mayor que la de la formación de metano. Los niveles de hidrógeno en el gas producido no son lo suficientemente altos como para causar un problema.

Los contaminantes son gases que son perjudiciales para los equipos de producción y transporte, además de ser contaminantes desagradables. Estos contaminantes incluyen:

- Especies de azufre: el sulfuro de hidrógeno (H_2S) se puede formar durante la reducción de iones sulfato en sulfatos disueltos en agua mediante bacterias reductoras de azufre en sedimentos mediante un mecanismo bioquímico.
- El mercurio se forma mediante la reducción o descomposición térmica del sulfuro de mercurio en contacto con hidrocarburos. El mercurio tiene una alta afinidad por el carbono así como por los sulfuros. El mercurio puede estar presente en diferentes formas como compuestos organometálicos, como dimetilmercurio, metiletilmercurio y dimetilmercurio.

- El arsénico se puede encontrar en operaciones de gas y petróleo, y se cree que es el resultado de la formación de gas geológico. Se ha encontrado en diferentes formas en el gas natural y en el condensado de gas, se pueden encontrar minerales de sulfuro de arsénico.

Procesamiento del gas natural

Se necesitan diferentes procesos para la limpieza del gas natural crudo que cumpla con las especificaciones del ducto (Gas Natural de Calidad de ducto) y para el gas de combustión ambientalmente limpia (34). Se aplica:

- Purificación del gas crudo a partir de materiales que inhiben el uso del gas como combustible (residencial o industrial).
- Separación de componentes valiosos del gas crudo que pueden usarse como materias primas petroquímicas, combustibles (por ejemplo, propano) o gases industriales (por ejemplo, etano, helio).
- Licuefacción del gas natural a transportar o almacenar. En la planta de gas.

Las operaciones industriales dependerán de la composición del gas, el tipo de instalación y las especificaciones del producto. Dentro de las cuales se puede destacar:

- Eliminación de hidrocarburos líquidos, los líquidos de gas natural son productos valiosos. Se pueden separar del gas natural licuado, recuperar y fraccionar como gasolina natural o condensado, gas licuado de petróleo (GLP) y gas natural licuado (GNL).
- Eliminación de agua, el gas producido puede contener agua, que es una impureza común. Debe eliminarse de la corriente de gas por las siguientes razones: Disminución del valor calorífico del gas producido, aumentando en consecuencia su volumen. Los hidratos podrían formarse en condiciones específicas que taponan válvulas, accesorios o incluso tuberías. La eliminación del agua asociada con el gas natural podría lograrse mediante un

método de separación simple cerca de la boca del pozo, o el agua podría simplemente eliminarse mediante enfriamiento. La deshidratación del gas natural generalmente implica las siguientes operaciones: **Proceso de absorción**, que se puede llevar a cabo utilizando: líquidos orgánicos (por ejemplo, dietileno o trietilenglicol), una solución acuosa de sales (por ejemplo, cloruro de litio), absorbentes sólidos (por ejemplo, sulfato de calcio anhidro fundido, cal y magnesio), absorbente deliquescente (por ejemplo, cloruro de calcio e hidróxido de potasio) El absorbente sólido elimina el vapor de agua mediante una reacción química, mientras que el absorbente deliquescente elimina el vapor de agua mediante reacción química y disolución. **Proceso de adsorción** que se puede llevar a cabo mediante el uso de adsorbentes sólidos como alúmina activada, gel de sílice o tamices moleculares.

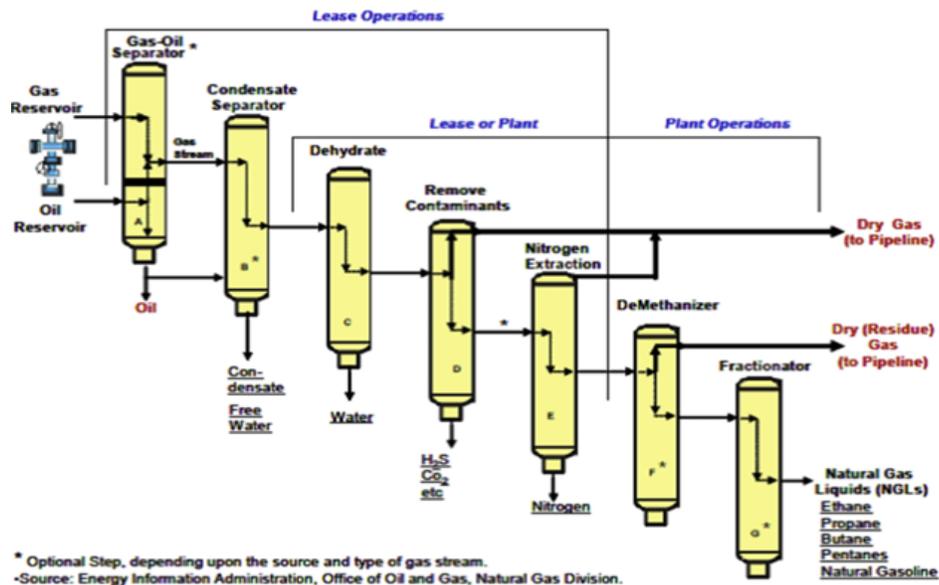


Figura 14 Diagrama general del proceso de producción de gas natural

Materia prima en Petroquímica

El gas natural es utilizado como materia prima en la industria Petroquímica para la obtención de varios derivados debido a sus componentes hidrocarburos, empleando procesos de

deshidrogenación, pirólisis y similares permite obtener etileno, propileno, butileno e isobutileno.

El etileno es materia prima para los procesos de obtención de polietileno; alfa alcoholes y éteres de etilen glicol; etanol aminas; etanol y etil mercaptanos; acetaldehído, ácido acético, lisina y vinil acetato; óxido de etileno, etilen glicol, ácido oxálico y etilen diaminas; el óxido de etileno mezclado con alcoholes secundarios conduce a los tosيلات; cloruro de vinilo y cloruro de polivinilo; y cloroetileno.

La mezcla de etileno y propileno es materia prima en procesos de obtención de cauchos, el cual se detallará más adelante.

El propileno lo utilizan como materia prima en la producción de polipropileno; isopropanol, acetona y metilisobutilcetona; alcohol alílico y glicerina; ácido acrílico, etil acrilato y ésteres acrílicos; óxidos de propileno; butiraldehido y etilhexanol; acrilonitrilo y adiponitrilo, y éste mezclado con ácido adípico produce hexametilendiamina.

Del gas de síntesis que se forma, el hidrógeno es actualmente utilizado en la hidrogenación de gasóleos y destilados para bases lubricantes. Y por la industria de fertilizantes en la obtención de amoníaco. El gas de síntesis, mezclado con gas natural fresco y desulfurizado, puede servir de carga a un posterior reformado con oxígeno, como una alternativa para la producción de metanol. Del metanol derivan formaldehido, metilformato, cloruro de metilo, etanol, anhídrido acético y metil aminas.

PETRÓLEO

El petróleo es una mezcla de compuestos orgánicos, principalmente está compuesta por hidrocarburos los cuales son insolubles en agua, generalmente se encuentra constituido por un 85% de Carbono, 12 % de Hidrógeno, 3% de azufre, oxígeno y

otros elementos. Su nombre deriva del griego petra “piedra” y óleum “aceite”, en medio Oriente es conocido como “asfalto” o “brea”.

El petróleo está constituido por hidrocarburos el más sencillo es el metano C_4H_{10} hasta hidrocarburos que superan los 40 átomos de Carbono e inclusive más átomos los cuales son difíciles de aislar por técnicas de destilación.

El petróleo se puede encontrar en dos tipos de yacimiento: los que contienen únicamente gas natural en donde se encontrarán hidrocarburos gaseosos desde el metano hasta el butano e hidrocarburos líquidos desde el pentano hasta el octano. Y en los yacimientos que son menos profundos se pueden encontrar fracciones más ligeras gracias a la evaporación que sufren cuando el crudo llega a la superficie.

La identificación de hidrocarburos es posible en las fracciones más ligeras. A partir del término 8-10 Carbonos ya es más difícil por la presencia de muchos isómeros la cuales presentan la mayoría estructuras complejas, puede decirse que se han utilizado todas las técnicas físicas y químicas conocidas para identificar y separar las especies contenidas, pero aun así, algunas estructuras no se han podido identificar.

En el petróleo podemos encontrar:

- **Cicloalcanos:** Su fórmula general es C_nH_{2n} . Son hidrocarburos cíclicos saturados, derivados del ciclopropano (C_3H_6) y del ciclohexano (C_6H_{12}). Muchos de estos hidrocarburos contienen grupos metilo en contacto con cadenas parafínicas ramificadas.
- **Hidrocarburos aromáticos:** Su fórmula general es C_nH_n . Son hidrocarburos cíclicos insaturados constituidos por el benceno (C_6H_6) y sus derivados.
- **Alquenos u olefinas:** Su fórmula general es C_nH_{2n} . Son moléculas lineales o ramificadas que contienen un enlace doble de carbono ($-C=C-$) son insaturados.

- Dienos: Su fórmula general es C_nH_{2n-2} . Son moléculas lineales o ramificadas que contienen dos enlaces dobles de carbono (-C=C-C=C-), también son sistemas insaturados.
- Alquinos: Su fórmula general es: C_nH_{2n-2} . Son moléculas lineales o ramificadas que contienen un enlace triple de carbono.

Cabe destacar que el petróleo contiene otros compuestos orgánicos, entre los que destacan sulfuros orgánicos, compuestos de nitrógeno y de oxígeno. También se pueden encontrar pequeñas trazas de compuestos metálicos, tales como sodio, hierro, níquel, vanadio o plomo.

En los compuestos oxigenados del petróleo están los fenoles y ácidos alifáticos y, en particular, por funciones ácidas como los ácidos nafténicos, se caracterizan porque no se dan en proporciones superiores al 0.06% del petróleo bruto. Mientras que, los compuestos nitrogenados existen como máximo en proporción de un 0.5%. Se consideran como bases orgánicas la piridina y sus análogos derivados. Y los compuestos de azufre son de gran significación, no sólo por su cantidad que puede ir desde el 0,5% al 5%, sino también por su gran corrosividad, olor y otras propiedades indeseables que comunican las fracciones petrolíferas, que obligan a una depuración conocida también como refino. El azufre se puede encontrar en gases sulfhídrico, en líquidos como tiofeno, mercaptanos, disulfuros, sulfuros orgánicos, inclusive en las fracciones sólidas como los asfaltos y compuestos resinosos de alto peso molecular.

Debido a la complejidad y enorme número de especies presentes en el petróleo se utilizan técnicas de fraccionamiento debido a las diferentes volatilidades que cada hidrocarburo presenta.

Características:

- Olor: Presentan un olor característico a gasolina, queroseno y otros derivados. Si el crudo contiene azufre su olor es fuerte e inclusive repugnante. Al contener sulfuro de hidrogeno, los vapores son bastante irritantes, tóxicos e inclusive pueden llegar

a ser mortíferos. Para atestiguar la buena calidad de los crudos es común que la industria los designe como: **Petróleo Dulce** (Sweet Crude Oil), como aquel que contiene menos de 0,5% de contenido de azufre, se caracteriza por ser un petróleo de alta calidad el cual es ampliamente usado para ser procesado como gasolina. **Petróleo Agrio** (Sour Crude Oil), es aquel que contiene al menos 1% de contenido de azufre, esto hace que su costo de refinamiento sea mayor, razón por la cual es usado mayormente en productos destilados como el diésel, ya que su costo de tratamiento es menor.

- **Color:** Se podría pensar que el petróleo es totalmente negro pero debido a la transmisión de la luz, los crudos pueden tener color amarillo pálido, tonos que varían entre rojo y marrón hasta llegar a negro. Mientras que, por reflexión de la luz pueden aparecer en tonos verdes, amarillos, azules, rojo, marrón y negro. Los crudos pesados y extrapesados son negros casi en su totalidad. Los crudos con un alto contenido de cera son livianos y de color amarillo. Y el crudo más liviano llega a tener un color blanquecino, lechoso y a veces es utilizado en el campo como gasolina cruda.
- **Coefficiente de expansión:** Mide el cambio relativo de un volumen que se produce cuando un fluido experimenta un cambio en su temperatura.
- **Punto de congelación:** Varía desde 15,5 °C hasta -45 °C, esto depende de las propiedades y características de cada crudo o derivado. Este factor es importante al momento de considerar el transporte de los hidrocarburos y las estaciones, principalmente en el invierno.
- **Poder calorífico:** Varía entre 8.500 a 11.350 calorías/gramo.
- **Calor específico:** Se refiere a la cantidad de calor requerida para que la unidad de masa de gas aumente su temperatura un grado. La mayoría de los crudos presentan un promedio 1884,06 J/kg K.

- Calor latente de vaporización: Es la energía absorbida por las sustancias al cambiar de estado de líquido a gaseoso, los valores para los hidrocarburos parafínicos y metilenos varía entre 70 a 90 kilocalorías/kilogramo.
- Índice de refracción: Es la relación de la velocidad de la luz al pasar de uno a otro cuerpo. Es un valor tridimensional. Se mide con un refractómetro, en los hidrocarburos los valores van desde 1,39 a 1,49.
- Densidad: Es una magnitud referida a la cantidad de masa contenida en un determinado volumen, generalmente se representa con el símbolo ρ . Los crudos livianos y medianos pueden pesar menos que el agua y los crudos pesados y extrapesados pueden pesar tanto o más que el agua. De allí que la densidad expresada en grados API puede ser de 57,2 y -3 ° API. La gravedad API es medida con un instrumento denominado hidrómetro y no tiene unidades. La gravedad API es también usada para comparar densidades de fracciones extraídas del petróleo, si una fracción de petróleo flota en otra, significa que es más liviana, por lo tanto su gravedad API es mayor.
- Viscosidad: Indica la resistencia que opone el crudo al flujo interno, se obtiene por varios métodos. Es una de las características más importantes de los hidrocarburos en: producción, transporte, refinó y petroquímica. Es importante el efecto de la temperatura sobre la viscosidad de los crudos, especialmente en los crudos pesados y extrapesados.
- Humedad: Un gran porcentaje de humedad puede provocar el atasco de las válvulas usadas para regular de presión y otros equipos similares por congelación del agua. Además se pueden formar hidratos principalmente con el etano y propano.
- Volatilidad: Un alto contenido de etano, propano y butano dará una volatilidad excesiva pudiendo dar lugar a graves problemas de seguridad en la manipulación.
- Residuo volátil: Indica el contenido en hidrocarburos pesados y otros compuestos contaminantes. Mide la proporción de

componentes que no han destilado antes de los 37,8 °C como son los hidrocarburos a partir del pentano en adelante, aceites lubricantes procedentes de compresores, grasas de válvulas, hidratos, etc.

Clasificación:

La clasificación del petróleo crudo varía según su lugar de origen y el peso API el cual puede ser ligero, medio, pesado, extrapesado; otros también lo clasifican de acuerdo con el contenido de azufre así se tiene el “petróleo dulce”, que significa que contiene relativamente poco azufre, o "petróleo ácido", el cual contiene mayores cantidades de azufre necesitando más operaciones de refinamiento para cumplir las especificaciones actuales de los productos refinados.

- Según la gravedad API se pueden clasificar:
 - API mayores a 31,1 Crudo liviano o ligero.
 - API entre 22,3 y 31,1 Crudo mediano.
 - API entre 10 y 22,3 Crudo pesado.
 - API menores a 10 crudo extrapesado.
- Según el hidrocarburo predominante:
 - Parafínicos cuando presenta un 75% de cadenas parafínicas.
 - Naftalenos cuando presentan un 75% de naftalenos.
 - Aromáticos cuando presentan un mínimo del 50% de compuestos aromáticos.

El petróleo tal como se encuentra en los yacimientos no puede ser utilizado de manera directa, para alcanzar el valor que posee debe pasar por varias fases industriales de explotación:

- Estudio geológico del suelo.
- Perforación.
- Extracción.
- Transporte (terrestre o marítimo)
- Refinación.
- Transformación.

Estudio geológico del suelo.

Para realizar un estudio geológico del suelo deben existir indicadores tales como: filtraciones de gas o de petróleo, fuentes de aguas con alto grado de contaminación, olores fuertes a petróleo. Una vez identificada la zona se realizan estudios de **prospección gravimétrica** los cuales permiten determinar la presencia de rocas porosas con poca densidad las cuales pueden albergar en su interior petróleo. Una de las técnicas más utilizadas en la actualidad para determinar la presencia de petróleo es la **prospección sísmica** la cual utiliza ondas de sonido en el subsuelo las cuales atraviesan ciertos estratos de rocas y también identifican la presencia de rocas porosas.

Perforación.

Una vez finalizados los estudios geológicos donde se identifican los posibles posos petroleros se procede a perforarlos, se encontrará capas de agua salada, gas y rocas porosas las cuales almacenan petróleo. Para el proceso de perforación se utilizan grandes rodillos de metal con dientes en el extremo las cuales alcanzan hasta 150 revoluciones por minuto, por la parte superior se agregan tubos conforme avance la perforación.

Tal como se muestra en la Fig. 15 el sistema de perforación consta de una mesa giratoria la cual está accionada por un motor el cual permite el movimiento de las tuberías hacia el sistema de preparación, bombeo y filtración.

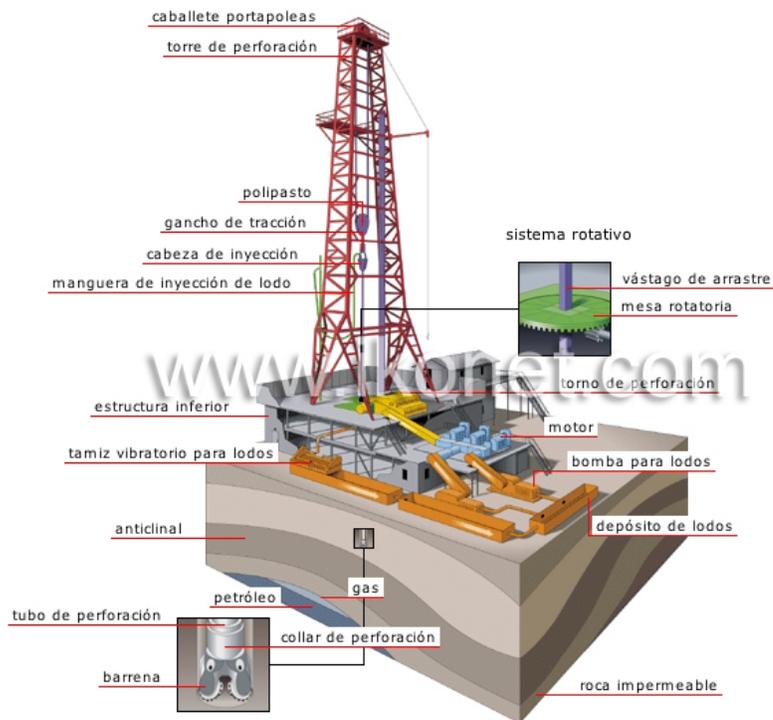


Figura 15 Torre de perforación petrolera

Extracción.

Una vez finalizado el proceso de extracción, la presión existente en los pozos petroleros permite que el petróleo brote hacia las afueras del pozo, si la presión existente en el pozo es mínima se recurre al uso de un sistema de bombeo el cual es accionado por un vástago inyectando gas procedente de la mezcla de polímeros-agua. Los pozos en promedio dan un 25% de petróleo y otro 20% mediante procesos de recuperación.

Una vez extraído el petróleo es necesario separar el agua, sólidos interpuestos ya que interfieren e el transporte lo cual ocasiona pérdidas.

Almacenamiento.

El almacenamiento del petróleo garantiza que no exista desabastecimiento, este proceso puede ocurrir en los procesos de perforación, distribución.

Transporte.

Por lo general el petróleo es transportado por líneas de tuberías las cuales forman redes, en donde el crudo es empujado por un sistema de bombeo hasta llegar a los puestos de embarque. El petróleo es transportado en vía terrestre y vía marítima en barriles o cisternas incorporadas en los buques.



Figura 16 Sistema de transporte por tubos

Refinación del Petróleo:

La refinación del Petróleo empieza con el fraccionamiento según los puntos de ebullición de los diferentes derivados, los cuales pueden ser transformados en nuevos productos mediante craqueo o algún proceso de transformación. A continuación la tabla.... Detalla un cronograma sobre el proceso de refinamiento del petróleo:

Tabla 3: Cronograma proceso de refinación del Petróleo

Año	Nombre del Proceso	Finalidad del Proceso	Subproductos del proceso
1862	Destilación atmosférica	Producir queroseno	Nafta, alquitrán
1870	Destilación al vacío	Lubricantes	Asfaltos
1913	Craqueo térmico	Aumentar gasolina	Combustibles para barcos
1916	Mesemercaptanización	Reducir azufre y olor	Azufre
1930	Reforma térmica	Mejorar índice de octano	Residuo
1932	Coquización	Materiales a base de gasolina	Coque
1933	Extracción de disolventes	Mejorar índice de viscosidad de lubricantes	Aromáticos
1935	Polimerización Catalítica	Mejorar el rendimiento de la gasolina	Cargas petroquímicas
1937	Craqueo catalítico	Gasolina de mejor octanaje	Cargas petroquímicas
1939	Ruptura de viscosidad	Reducción de la viscosidad	Alquitrán
1940	Isomerización	Carga de alquilación	Nafta
1942	Craqueo catalítico en líquidos	Aumentar el rendimiento de la gasolina	Cargas petroquímicas
1950	Desfaltado	Aumentar carga de craqueo	Asfalto

1954	Hidrodeshulfuración	Eliminar azufre	Azufre
1957	Isomerización catalítica	Aumentar el índice de octanaje	Cargas de alquilación
1960	Hidrocraqueo	Reducir azufre	Cargas de alquilación
1974	Desparafinado catalítico	Mejorar goteo	Cera
1975	Hidrocraqueo de residuos	Aumentar rendimiento de los residuos	Residuos pesados

Procesos básicos y operaciones en el proceso de refinación del Petróleo.

Las operaciones principales son: separación, conversión, tratamiento, formulación y mezcla, operaciones auxiliares y operaciones fuera del proceso.

En el proceso de separación se utilizan torres de destilación tanto atmosféricas como al vacío separando los productos obtenidos en fracciones. En el proceso de conversión se transforman los productos modificando el tamaño y estructura de los hidrocarburos, dentro de los procesos de conversión se encuentran: descomposición mediante craqueo térmico y catalítico, descomposición por polimerización, isomerización, reforma catalítica. Los diferentes tratamientos involucran tanto reacciones químicas como separaciones físicas (Disolución, absorción y precipitación). Además, algunos tratamientos utilizan ácidos para eliminar el azufre, otros tratamientos ayudan a eliminar las sales presentes en el crudo.

En el proceso de formulación y mezcla se mezclan diferentes fracciones de hidrocarburos juntamente con algunos aditivos para obtener mejores productos con características específicas.

Las operaciones auxiliares de refinación son necesarias para la recuperación de residuos ligeros cuya finalidad es eliminar agua amarga, aguas residuales, recuperación de azufre.

El proceso de refinación de petróleo ha evolucionado con el pasar del tiempo dando respuesta a la demanda de productos refinados para los consumidores. Inicialmente la refinación tenía como objetivo producir queroseno. Después, con el uso del motor de combustión interna condujo a la producción de benceno, gasolina y gasóleos diésel. El incremento del transporte aéreo hizo necesario la obtención de la gasolina de aviación de alto octanaje y el combustible para aviones de reacción. Actualmente las refinerías producen varios productos, muchos de los cuales se utilizan como materia prima para procesos de craqueo y fabricación de lubricantes, y para la industria petroquímica, dentro de los cuales se puede destacar: y productos especiales, como cera, asfalto y coque, combustibles, cargas petroquímicas, disolventes, aceites de proceso, lubricantes.

Tal como se muestra en la tabla 4 a partir de los hidrocarburos gaseosos se puede obtener lo siguiente:

Tabla 4 Subproductos a partir de los gases licuados

Subproductos	Usos
Gases licuados	Pinturas y barnices
	Resinas y fibras para plásticos
	Plastificantes
	Disolventes y acetona
	Alcoholes
	Fertilizantes sintéticos
	Amoniaco
	Gas combustible para motores
	Gas de cocina
Materia prima para la industria química	Goma
Negro de humo	Industria de caucho

A continuación la tabla 5 se muestran los subproductos a partir de los destilados ligeros:

Tabla 5 Subproductos a partir de los destilados ligeros:

Subproductos	Usos
Naftas ligeras	Alquenos
	Disolventes y diluyentes

	Materias primas para la industria química
Naftas intermedias	Gasolina para motores y aviones
	Disolventes para solventes en seco
Naftas pesadas	Combustible para aviones militares
	Queroseno
	Combustibles para tractores
Gasóleo	Carga de craqueo
	Gas para calefacción
	Combustible industria metalúrgica

A continuación la tabla 6 muestra los subproductos obtenidos a partir de los destilados pesados:

Tabla 6 Subproductos a partir de los destilados pesados

Subproductos	Usos
Lubricantes	Industria textil
	Industria farmacéutica
	Industria alimentaria
Aceites lubricantes	Aceites para transformadores
	Lubricantes para motores
	Aceites para turbinas
	Lubricantes para ejes
	Inhibidores de corrosión
	Aceites para imprentas
Cera de parafina	Industria de caucho
	Productos cosméticos
	Industria papelera

	Velas
--	-------

La tabla 7 muestra los subproductos obtenidos a partir de los residuos a partir del asfalto:

Tabla 7 Subproductos a partir del asfalto

Subproductos	Usos
Asfaltos	Asfalto para pavimento
	Aislantes para cimientos
	Impermeabilización del papel

Debido a sus propiedades físicas y químicas, estos derivados simples de sustancias naturales tienen una enorme cantidad de usos en las industrias de energía, construcción y fabricación de metales primarios, como acero y aluminio.

La operación generalmente comienza con la **desalinización**, el cual es un proceso que elimina sales inorgánicas, agua y compuestos solubles en agua. Todo esto a fin de prevenir la corrosión, taponamiento y la formación de incrustaciones para prevenir la contaminación y deterioro de ciertos catalizadores. Existen tres formas para desalinizar el petróleo:

- **Método químico:** En este método se utilizan surfactantes juntamente con agua, se lleva a calentamiento con la finalidad que las impurezas se disuelvan en el agua, se unan a los surfactantes y puedan separarse en un tanque de decantación.
- **Método eléctrico:** Este método utiliza cargas electrostáticas para suspender las impurezas en la superficie que los contiene, para reducir la tensión y la viscosidad se utiliza una temperatura de 170° C.

En ambos métodos el agua residual es descargada por el fondo del tanque que la contiene y el petróleo tratado se extrae por la

parte superior del tanque llevándole a una torre de destilación. Si no se realiza un correcto proceso de desalinización se puede producir incrustaciones en los intercambiadores de calor durante el resto del proceso de refinación provocando incrementos de presión y temperatura. Además, provocaría problemas de corrosión ya que se tiene un incremento en la presencia de ácido sulfhídrico, cloruro de hidrógeno, ácidos nafténicos (orgánicos) y otros contaminantes del petróleo crudo.

Dependiendo del crudo utilizado (agrio o dulce) como carga y de los productos químicos de tratamiento empleados, el agua residual contendrá cantidades variables de cloruros, sulfuros, bicarbonatos, amoníaco, hidrocarburos, fenol y sólidos en suspensión.

Luego, el petróleo crudo desalinizado se envía a **destilación**, lo que separa físicamente el petróleo en fracciones según el rango según los puntos de ebullición por orden decreciente de volatilidad, en gases, destilados ligeros, destilados intermedios, gasóleos y residuo. El fraccionamiento funciona porque la temperatura que se emite desde el fondo hacia la parte superior de la torre de destilación permite que se condensen primero los componentes con punto de ebullición más elevado, mientras que, en la parte superior se encuentran las fracciones con punto de ebullición más bajo. En el interior de la torre, se mezclan los vapores ascendentes y los líquidos descendentes (reflujo) de tal manera que existe un equilibrio entre sí. Los platos extraen una fracción del líquido que se condensa en cada nivel. La destilación del crudo ocurre en dos fases: la primera una destilación atmosférica en la cual el crudo desalinizado se precalienta a temperaturas entre 343 °C y 371 °C evitando el craqueo térmico para obtener destilados ligeros tal como lo muestra la Figura 17 y una segunda destilación al vacío que procesa los residuos atmosféricos en este tipo de destilación también se evita el craqueo térmico por lo que se trabaja a una presión reducida tal como se indica en la Figura 18.

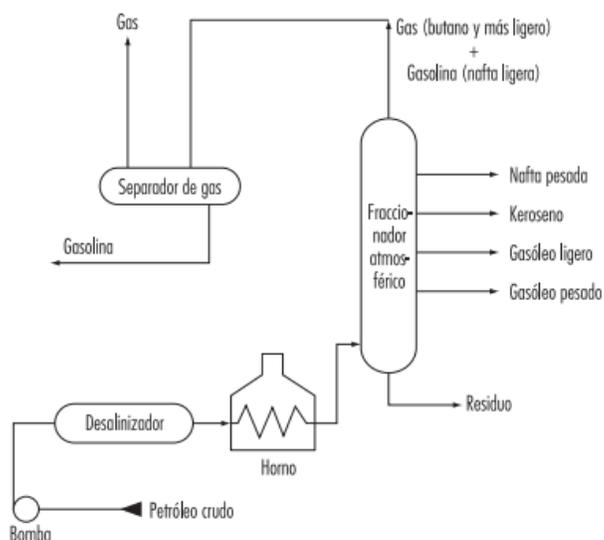


Figura 17 Proceso de destilación atmosférica (35)

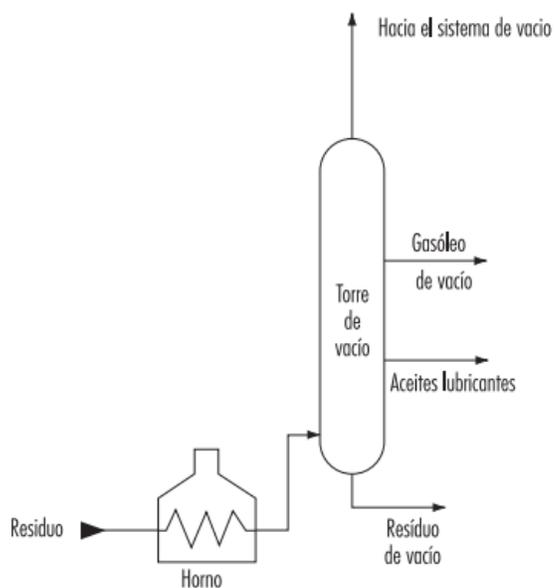


Figura 18 Proceso de destilación al vacío (35)

Para separar productos específicos se utilizan **columnas de destilación** las cuales trabajan bajo el mismo principio que la destilación atmosférica. Las torres rectificadoras utilizan vapor para eliminar vestigios de productos ligeros (gasolina) de los productos más pesados. Para evitar el craqueo térmico se recomienda que las condiciones de operación se encuentren en los parámetros establecidos. Además, se utilizan sistemas de

descarga manuales ya que pueden producirse desviaciones de presión, temperatura o niveles de líquidos afectando el sistema automático. Se vigilan las operaciones con la finalidad de evitar la entrada de crudo en la carga de la unidad de reforma. A veces los crudos utilizados como materia prima contienen cantidades apreciables de agua en suspensión la cual se separa al principio del proceso y que, junto con el agua procedente de la purga de vapor que queda en la torre, se deposita en el fondo de ésta. Es posible que esta agua se caliente hasta alcanzar el punto de ebullición, originando una explosión por vaporización instantánea al entrar en contacto con el aceite de la unidad (35).

Por efecto del ácido clorhídrico (HCl), el ácido sulfhídrico (H₂S), el agua, los compuestos de azufre y los ácidos orgánicos, el intercambiador de precalentamiento, el horno de precalentamiento, el intercambiador de calor de residuos, la torre atmosférica, el horno de vacío, la torre de vacío y la sección superior de evaporación sufren. Cuando los crudos sulfurosos son procesados es posible que la corrosión sea intensa tanto en las torres atmosféricas como en las de vacío más aún si la temperatura de las partes metálicas excede de 232 °C, y en los tubos de los hornos. El ácido sulfhídrico húmedo también produce grietas en el acero. De igual manera al procesar crudos con alto contenido de nitrógeno se forman óxidos de nitrógeno, que son corrosivos para el acero cuando este se enfría a bajas temperaturas en presencia de agua.

Para controlar la corrosión por ácido clorhídrico producida en las unidades de destilación se utilizan productos químicos. Puede inyectarse amoníaco en la corriente de la sección superior antes de la condensación inicial. Si no se inyecta suficiente agua de lavado, se forman depósitos de cloruro de amonio produciendo una intensa corrosión. Tanto la destilación atmosférica como al vacío se caracterizan por ser procesos cerrados. Cuando se procesan crudos agrios se produce exposición de ácido sulfhídrico en el intercambiador, en el horno de

precalentamiento y en el sistema de evaporación superior de la torre, el horno y la torre de vacío, y el intercambiador de calor de residuos.

Todos los crudos de petróleo y los productos de destilación contienen compuestos aromáticos de alto punto de ebullición, como los HAP (Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos) los cuales se caracterizan por ser cancerígenos.

Procesos de conversión del petróleo.

Los procesos de conversión del petróleo tienen como finalidad modificar el tamaño y la estructura de ciertas fracciones para obtener productos de mayor valor. Estos procesos pueden ser conversión, rectificación, craqueo. Los alquenos, dienos, alquinos se forman tanto por craqueo térmico como catalítico ya que no se encuentran como tal en el petróleo crudo. Los alquenos se caracterizan por tener una insaturación siendo el más sencillo de ellos el etileno, los dienos por su parte se caracterizan por tener dos insaturaciones como el 1,2-butadieno y el 1,3-butadieno y el alquino más representativo es el acetileno.

Las fracciones resultantes sufren más procesamiento dependiendo de las especificaciones del producto y factores económicos. Como se observa en la Fig. 17 el crudo se calienta en la columna y por destilación la primera fracción que se obtiene de la cabeza es la gasolina y el gas, de la segunda fracción se obtiene queroseno y gasóleo, de las fracciones centrales se obtienen productos lubricantes y asfalto.

- **Craqueo:** Es un proceso que rompe las fracciones más pesadas del petróleo aquellas que presentan mayor punto de ebullición para obtener productos de mayor valor: materias para mezclas de gasolina, hidrocarburos gaseosos, gasóleo. Los tipos de craqueo son térmico, catalítico e hidrocrqueo.

El craqueo térmico se caracteriza por utilizar calor durante la destilación de aceites pesados y combustibles hasta que las moléculas se rompen. Se puede tener ruptura de viscosidad la

cual se caracteriza por ser una forma suave de craqueo térmico reduciendo la viscosidad de los residuos parafínicos. El craqueo en fase de vapor se utiliza para la producción únicamente de olefinas a presiones ligeramente superiores a la atmosférica y altas temperaturas en este proceso se obtiene nafta.

Al igual que el craqueo térmico el **craqueo catalítico** también rompe y descompone hidrocarburos para obtener productos más ligeros de mayor valor. En este proceso los hidrocarburos se someten a altas temperaturas, baja presión y catalizadores los cuales favorecen a la producción de reacciones químicas. Mediante este proceso se pueden obtener fracciones más ligeras como la gasolina, queroseno, GLP. Los catalizadores usados normalmente en este tipo de procesos son: zeolitas, hidrosilicato de aluminio, alúmina sílice, los cuales pueden ser añadidos como polvos o en forma de pastillas. EL craqueo catalítico tiene como finalidad cumplir con tres funciones: La primera y más importante es la interacción de la carga con el catalizador para descomponer en diferentes hidrocarburos, la segunda es la regeneración del catalizador y la tercera una vez obtenidos los diferentes productos estos se separan fácilmente por la diferencia de densidades.

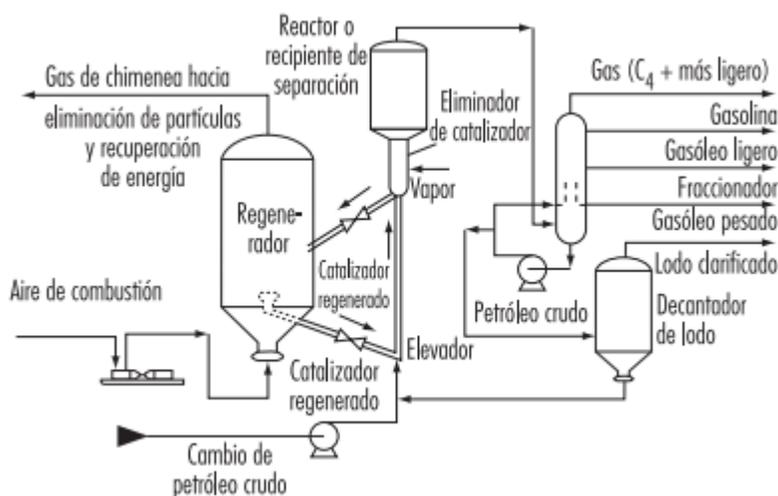


Figura 19 Proceso craqueo catalítico (35)

Existen tres procesos básicos de craqueo catalítico:

- 1. Craqueo catalítico de líquidos:** El catalizador utilizado se caracteriza por ser un polvo finamente pulverizado el cual es añadido al proceso mediante vapor, el craqueo ocurre en el elevador o tubería de alimentación. Mientras la mezcla crudo-catalizador asciende por el reactor la carga es craqueada a baja presión, el proceso continúa hasta que el catalizador queda libre de vapores de petróleo.
- 2. Craqueo catalítico de lecho móvil:** Este método es similar al craqueo catalítico de líquidos pero el catalizador está presente en forma de pastillas, las cuales son añadidas a la parte superior de la unidad y por gravedad caen hasta llegar a un regenerador. Este tipo de craqueo es útil para la obtención de nafta, gas, aceite clarificado.
- 3. Craqueo catalítico termofor:** Para este tipo de craqueo catalítico la mezcla debe estar previamente calentada, se caracteriza porque el catalizador se regenera y puede ser recuperado.

Para verificar el correcto funcionamiento del proceso de craqueo ya sea térmico a catalítico se recomienda la toma de muestras periódicas tanto de carga como en las corrientes de productos obtenidos para evitar la fuga de Hidrocarburos Policíclicos Aromáticos (HAP). Cuando la carga contiene altas cantidades de azufre se recomienda trabajar con temperaturas inferiores a los 480 °C con la finalidad de prevenir la corrosión. También, se recomienda realizar mantenimientos permanentes a: bombas, intercambiadores de calor, hornos ya que en estos sitios es frecuente la acumulación de catalizador lo cual puede provocar reacciones exotérmicas.

En el proceso de **Hidrocrqueo** se combina el craqueo catalítico con la hidrogenación en donde la presencia de Hidrógeno ayuda a la descomposición de las fracciones del destilado para obtener productos de mayor valor. Se caracteriza por trabajar con carga que presentes aromáticos pesados para obtener aromáticos más ligeros.

Procesos de combinación.

Los procesos de combinación tienen como finalidad unir olefinas ya sea por polimerización o alquilación para obtener materiales de mezcla de alto valor.

- **Polimerización:** Es un proceso orgánico importante ya que permite combinar olefinas (Libres de azufre) para obtener cadenas más largas, las principales olefinas son: etileno, propileno y butadieno en las cuales el craqueo térmico y de líquidos permite obtener productos con mayor índice de octanaje. Se trata de una reacción altamente exotérmica para lo cual es necesario una corriente de agua fría con la finalidad de controlar la temperatura y la presión.

Etileno y sus derivados.

Al etileno se le conoce a veces como el "rey de los petroquímicos" porque se producen más productos químicos comerciales a partir de etileno que de cualquier otro intermedio (36). Esta posición única del etileno entre otros hidrocarburos intermedios se debe a algunas propiedades favorables, así como a factores técnicos y económicos. Actualmente es la materia prima de mayor consumo en la industria petroquímica, representa el 30% de esta industria. A partir de esta olefina se obtiene el mayor porcentaje de plásticos: polietileno, cloruro de vinilo, poliacetato de vinilo, poliestireno. Presenta las siguientes características:

- Estructura simple con alta reactividad.
- Compuesto relativamente económico.
- Se produce fácilmente a partir de cualquier fuente de hidrocarburos mediante craqueo con vapor y con altos rendimientos.
- Se generan menos subproductos de las reacciones del etileno con otros compuestos que de otras olefinas.
- Reacciona mediante la adición de muchos reactivos económicos como agua, cloro, cloruro de hidrógeno y oxígeno para producir valiosos productos químicos.

- Puede ser iniciado por radicales libres o por catalizadores de coordinación.

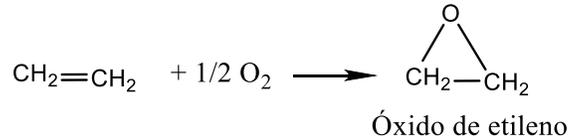
A continuación la Tabla 8 resume los principales productos y reacciones participantes:

Tabla 8 Principales productos obtenidos a partir del Etileno

ETILENO	REACCIÓN	PRODUCTO 1	PRODUCTO 2
	Hidrólisis	Etanol	Acetaldehído
	Oxidación/Carbonilación	Ácido acrílico	Poliacrilatos
	Oxidación	Vinil acetatos	Polivinil acetatos
	Reacción de Wacker	Acetaldehído	Ácido acético
	Oxidación	Óxido de etileno	Etoxilatos, etilén glicol, etanolaminas.
	Polimerización	Alfa olefinas	Detergentes
	Polimerización oxidativa	Alcoholes lineales	Etoxilatos
	Alquilación	Estireno	Poliestirenos
	Cloración	Cloruro de vinilo	Policloruro de vinilo
	Oxo síntesis	Propanaldehído	n-propanol

Óxido de etileno (OE): Es un gas incoloro que se licua cuando se enfría por debajo de 12°, es soluble en agua y en disolventes orgánicos. Es un precursor de muchas sustancias químicas de gran utilidad comercial, importancia, incluidos etilenglicoles, etanolaminas y alcohol. El etilenglicol es uno de los monómeros de los poliésteres, utilizado en la fabricación de Polímeros de fibras sintéticas más utilizados.

La ruta principal hacia el óxido de etileno es la oxidación del etileno con oxígeno o aire utilizando un catalizador de plata. La reacción se caracteriza por ser exotérmica, donde el control del calor es importante:



Si se tiene una oxidación completa del etileno se tendrá una reacción contaminante donde los productos obtenidos serán Dióxido de carbono y agua. La Figura 20 muestra la producción de etileno a escala industrial.

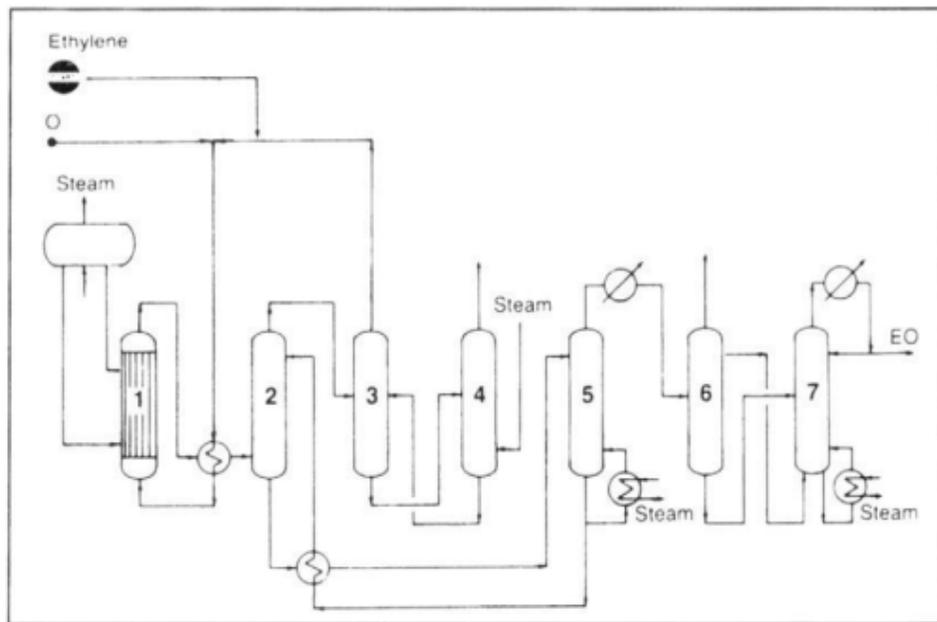


Figura 20 Proceso industrial para la obtención del óxido de etileno (1) reactor, (2) depurador, (3,4) eliminación de CO₂, (5) decapado, (6,7) fraccionadores. (36)

La temperatura de oxidación se controla hirviendo agua en el lado de la carcasa del reactor. Los gases se enfrían y pasan al depurador donde se extrae el óxido de etileno absorbido como una solución acuosa diluida. Los gases que no han reaccionado se reciclan. La reacción de epoxidación ocurre aproximadamente a 200-300°C con un corto tiempo de residencia de un segundo. Se puede alcanzar una selectividad del 70-75% para el proceso

basado en oxígeno. La selectividad es la proporción de moles de etileno, óxido producido por mol de etileno reaccionado.

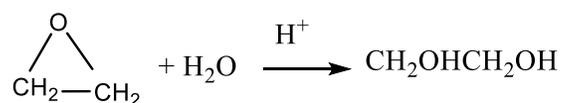
El óxido de etileno es un intermedio altamente activo. Reacciona con todos los compuestos que tienen un hidrógeno lábil como agua, alcoholes, ácidos orgánicos, y aminas. El anillo epóxido se abre y se forma un nuevo compuesto, la mayor reacción del óxido de etileno produce derivados de óxido de polietileno con mayor solubilidad del agua. Muchos productos comerciales se derivan del óxido de etileno al reaccionar con diferentes reactivos.

Uno de los principales derivados es el **Etilenglicol** ($\text{CH}_2\text{OHCH}_2\text{OH}$) el cual es un líquido almibarado incoloro y muy soluble en agua. Los puntos de ebullición y congelación del etilenglicol son $197,2\text{ }^\circ\text{C}$ y $-13,2\text{ }^\circ\text{C}$ respectivamente.

La producción mundial actual de etilenglicol es de aproximadamente 15 mil millones de libras. La mayor parte se utiliza para producir resinas de tereftalato de polietileno (PET) (para fibras, películas, botellas), anticongelantes y otros productos.

Aproximadamente el 50% del etilenglicol mundial se consumió en la fabricación de fibras de poliéster y otro 25% fue al anticongelante.

La ruta principal para producir etilenglicol es la hidratación del óxido de etileno en presencia de ácido sulfúrico diluido.



La reacción de hidrólisis ocurre en un rango de temperatura de $50\text{ }^\circ\text{C}$ a $100\text{ }^\circ\text{C}$. Donde el tiempo de contacto es de aproximadamente 30 minutos. Los derivados di y trietilenglicoles son coproductos con el monoglicol. El aumento de agua y óxido de etileno en la misma relación, así como el disminuir el tiempo de contacto disminuye la formación de

glicoles. Normalmente se utiliza una relación agua-óxido de etileno de 10 para obtener aproximadamente 90% de rendimiento del monoglicol. Sin embargo, el di y el triglicoles no suponen una carga económica debido a sus usos comerciales.

La Figura 21 muestra el esquema de producción industrial del etilén glicol:

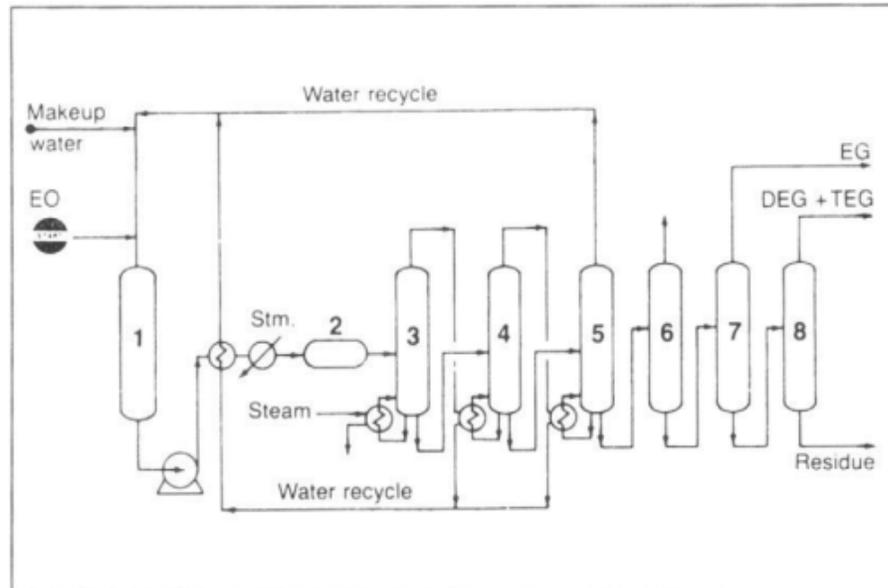


Figura 21 Esquema industrial de producción del etilenglicol (1) tanque de alimentación, (2) reactor, (3,4,5) evaporadores de múltiples etapas, #4 opera a menor presión que el #3, mientras que el #5 opera bajo vacío, evaporado el agua se recicla al tanque de alimentación, (6) separador de extremos ligeros, (7,8) columnas de destilación al vacío. (36)

Otro de los derivados a partir del etileno son los **Etoxilatos** los cuales actúan como tensoactivos no iónicos también conocidos como Polioxietilenos, la reacción entre el óxido de etileno y los alcoholes grasos de cadena larga o ácidos grasos se conoce como etoxilación. La etoxilación de alcoholes lineales C_{10} - C_{14} y los alquilfenoles lineales producen detergentes no iónicos. La reacción con los alcoholes ocurre de la siguiente manera:

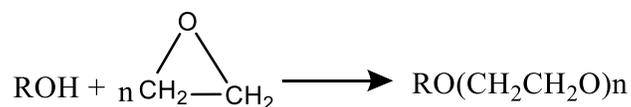


Figura 22 Etoxilación a partir de alcoholes

La solubilidad de los productos etoxilados puede variarse según el número de unidades de óxido de etileno en la molécula. La solubilidad también guarda relación con la longitud de cadena del grupo alquilo en el alcohol o en el fenol. Los grupos alquilo de cadena más larga reducen la solubilidad en agua. En la práctica, el número de unidades de óxido de etileno y la longitud de la cadena del alquilo. El grupo varía para producir superficies solubles en agua o en aceite agentes activos (37).

Las **Etanolaminas** son productos industriales que se obtienen mediante la reacción entre óxido de etileno (EO) y amoníaco acuoso dando como lugar una mezcla de mono, di y trietanolaminas. La reacción ocurre condiciones son aproximadamente 30-40 °C y presión atmosférica:



Figura 23 Obtención de etanolaminas

Las proporciones relativas de las etanolaminas producidas dependen principalmente de la relación óxido de etileno/amoníaco. Una relación baja de óxido de etileno y amoníaco aumenta rendimiento de monoetanolamina. El aumento de esta relación aumenta el rendimiento de di y trietanolaminas. La monoetanolamina y la dietanolamina se caracterizan por ser líquidos viscosos empleados en la fabricación de suavizantes y cosméticos.

Acetaldehído: es un líquido incoloro con un olor picoso, es un reactivo compuesto sin uso directo excepto para la síntesis de

otros compuestos. Por ejemplo, se oxida a ácido y anhídrido acético. Participa en la producción de 2-etilhexanol el cual es utilizado en la síntesis de plastificantes y también en la producción de pentaeritritol, un compuesto polihídrico utilizado en resinas alquídicas.

Históricamente el acetaldehído fue producido por oxidación catalizada por plata o por oxidación de cromo. Actualmente, el acetaldehído se obtiene a partir de etileno mediante el uso de un catalizador homogéneo (Catalizador Wacker), el catalizador está constituido por PdCl₂ (cloruro de paladio II) y CuCl₂ (cloruro de cobre II).



Figura 24 Obtención del Acetaldehído

La reacción de oxidación puede llevarse a cabo en un proceso con una o dos etapas. En el proceso de etapa única, se alimentan etileno conjuntamente con oxígeno y gas reciclado a un reactor vertical que contiene la solución de catalizador. El calor se controla hirviendo parte del agua. Las condiciones de reacción son aproximadamente 130 °C y 3 atmósferas. Mientras que, en el proceso de dos etapas, la reacción se produce bajo una presión relativamente más alta (aproximadamente 8 atmósferas) para asegurar una mayor conversión de etileno. La temperatura de reacción es aproximadamente 130 °C.

El rendimiento de acetaldehído de cualquiera de los procesos es alrededor del 95%. Los subproductos de esta reacción incluyen ácido acético, etilo cloruro, cloroacetaldehído y dióxido de carbono.

La reacción de Wacker también se puede llevar a cabo para otras olefinas con dobles enlaces terminales. Con propeno, por ejemplo, aproximadamente el 90% se obtiene un rendimiento de acetona. El 1-buteno dio aproximadamente un 80 % de rendimiento de metiletilcetona.

El acetaldehído es un intermediario para muchas sustancias químicas como el ácido acético, n-butanol, pentaeritritol y poliacetaldehído. El ácido acético se obtiene de diferentes fuentes a partir de la carbonilación del metanol es actualmente la ruta principal. Otra forma de obtención es a partir de la oxidación de butanos y butenos. También se produce por la oxidación catalizada del acetaldehído:

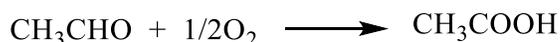


Figura 25 Obtención del ácido acético

Butanol: El n-butanol normalmente se produce a partir de propileno mediante la reacción Oxo. También se puede obtener de la condensación aldólica de acetaldehído en presencia de una base.



Figura 26 Obtención del butanol

El 3-hidroxibutanal formado elimina un mol de agua en presencia de un ácido que produce buta-2-enal. La hidrogenación del buta-2-enal produce n-butanol:

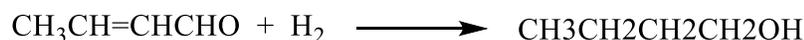
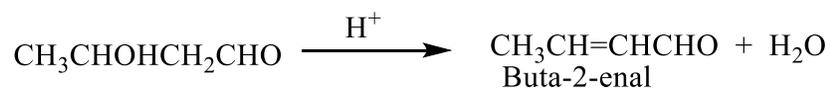


Figura 27 Obtención del butanol a partir del 3-hidroxibutanal

Acetato de Vinilo: El acetato de vinilo es un líquido reactivo incoloro que se polimeriza fácilmente, es un monómero importante para la producción de acetato de polivinilo, alcohol polivinílico y copolímeros de acetato de vinilo.

El acetato de vinilo se produjo originalmente mediante la reacción de acetileno y ácido acético en presencia de acetato de mercurio (II). Actualmente se produce por oxidación catalítica de etileno con oxígeno, con ácido acético como reactivo y paladio como catalizador:

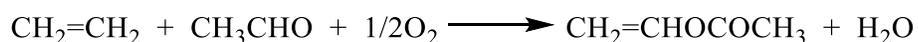


Figura 28 Obtención del acetato de vinilo

El proceso es similar a la oxidación catalítica del etileno en fase líquida. La diferencia entre los dos procesos es la presencia de ácido acético. En la práctica, el acetaldehído es un coproducto importante. La relación molar de acetaldehído a acetato de vinilo se puede variar de 0,3:1 a 2,5: 1, El proceso en fase líquida no se utiliza mucho debido a problemas de corrosión y a la formación de una variedad bastante amplia de subproductos.

Ácido acrílico: La reacción en fase líquida del etileno con monóxido de carbono y oxígeno sobre un sistema catalizador $\text{Pd}^{2+}/\text{Cu}^{2+}$ produce ácido acrílico. El rendimiento basado en etileno es aproximadamente el 85%. Las condiciones de reacción son aproximadamente 140 °C y 75 atmósferas.



Figura 29 Obtención del ácido acrílico

El catalizador es similar al de la reacción de Wacker para la oxidación de etileno a acetaldehído; sin embargo, esta reacción ocurre en presencia de monóxido de carbono.

Clorohidrina: La adición directa de cloro al etileno produce dicloruro de etileno (1,2-dicloroetano). El dicloruro de etileno es

el principal precursor de cloruro de vinilo, el cual actúa como un monómero importante para la obtención del cloruro de polivinilo el cual es utilizado para la producción de plásticos y resinas.

Otros usos del dicloruro de etileno incluyen su formulación con soluciones de tetraetilo y tetrametilo de plomo como eliminador de plomo, como agente desengrasante y como intermediario en la síntesis de muchos derivados de etileno. Por otra parte, la reacción del etileno con el cloruro de hidrógeno produce cloruro de etilo utilizado como agente alquilante, refrigerante, disolvente.

El etileno también reacciona con el ácido hipocloroso, produciendo etilén clorhidrina:

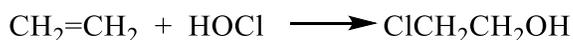


Figura 30 Obtención de la Clorohidrina

Actualmente, la ruta de oxiclорación catalítica es una alternativa para producir etilenglicol donde la etilénclorhidrina es un intermedio.

Cloruro de vinilo: El cloruro de vinilo se caracteriza por ser un gas reactivo soluble en alcohol pero ligeramente soluble en agua. Es el monómero vinílico más importante en la industria de los polímeros.

El monómero de cloruro de vinilo se produjo originalmente mediante la reacción de ácido clorhídrico y acetileno en presencia de un catalizador de HgCl_2 . La reacción es sencilla y se desarrolla con una alta conversión (96% sobre acetileno):



Figura 31 Obtención del cloruro de vinilo

Sin embargo, el etileno como materia prima barata ha reemplazado al acetileno en obtención de cloruro de vinilo. La producción de cloruro de vinilo a través de etileno es un proceso

de tres pasos. El primer paso es la cloración directa del etileno para producir dicloruro de etileno, ya sea un proceso en fase líquida o de vapor. La reacción es exotérmica ocurre a aproximadamente 4 atmósferas y 40-50 °C en presencia de catalizadores Cloruro férrico (FeCl₃), Cloruro cúprico (CuCl₂) o Cloruro antimónico (SbCl₃). El bromuro de Etileno también se puede utilizar como catalizador.

El segundo paso es la deshidrocloración del dicloruro de etileno a cloruro de vinilo y HCl. La reacción de pirólisis ocurre en aproximadamente 500 °C y 25 atmósferas en presencia de piedra pómez sobre carbón:

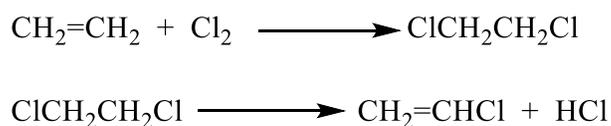


Figura 32 Deshidrohalogenación del 1,2-dicloroetano

El tercer paso, la oxiclорación de etileno, utiliza el subproducto HCl del paso anterior para producir más dicloruro de etileno:



Figura 33 Oxidación del etileno

El dicloruro de etileno de este paso se combina con el producido a partir de la cloración del etileno y se introduce en el horno de pirólisis. Las condiciones de reacción son aproximadamente 225°C y 2-4 atmósferas. En la práctica, los tres pasos, cloración, oxiclорación y deshidroclорación, se integran en un solo proceso para que no se pierda cloro.

Hidratación del Etileno: La obtención de alcohol es uno de los procesos más antiguos del mundo. La reacción de hidratación se lleva a cabo en un reactor a aproximadamente 300°C. y 70 atmósferas. La reacción se ve favorecida a temperaturas relativamente más bajas y presiones más altas. El ácido fosfórico actúa como catalizador. Para evitar pérdidas de catalizador, se

recomienda una relación molar de agua/etileno inferior a uno. La conversión de etileno se limita al 4-5% en estas condiciones y el etileno que no ha reaccionado se recicla. Una alta selectividad al etanol se obtiene (95-97%).

El etanol puede ser utilizado como disolvente, ya que disuelve muchos materiales de base orgánica, como grasas, aceites e hidrocarburos. Además, el etanol es un precursor del acetaldehído, el ácido acético y el éter dietílico, y se utiliza en la fabricación de éteres etílicos de glicol, etilaminas y muchos ésteres etílicos.

Oligomerización del Etileno: La oligomerización es la adición de una molécula de olefina a una segunda y a una tercera, etc. La reacción es normalmente catalizada por ácido. Cuando se utilizan propeno o butenos, los compuestos formados se ramifican porque se forma un carbocatión intermedio.

Estos compuestos se utilizaron como agentes alquilantes para producir benceno, alquilatos pero los productos no eran biodegradables.

La oligomerización de etileno utilizando un catalizador Ziegler produce alfa olefinas no ramificadas en el rango C₁₂-C₁₆ mediante un mecanismo de inserción. Una reacción similar usando trietilaluminio produce alcoholes lineales utilizados para la producción de detergentes biodegradables.

La dimerización de etileno a buteno-1 ha sido desarrollada recientemente por utilizando un catalizador selectivo a base de titanio. El buteno-1 está encontrando nuevos mercados como comonomero con etileno en la fabricación de polietileno lineal de baja densidad (LLDPE).

Propeno y sus derivados.

El propeno es el segundo compuesto orgánico más importante a nivel industrial, la principal aplicación es como materia prima para la obtención de plásticos de polipropileno y el acrilonitrilo.

Epiclorohidrina: También conocida como 1-cloro-2,3-epoxipropano es un líquido transparente e incoloro con un olor dulce que se utiliza principalmente para la fabricación de resinas epoxi, además, son utilizadas para el tratamiento de agua, productos químicos para el papel, cauchos sintéticos y tensioactivos.

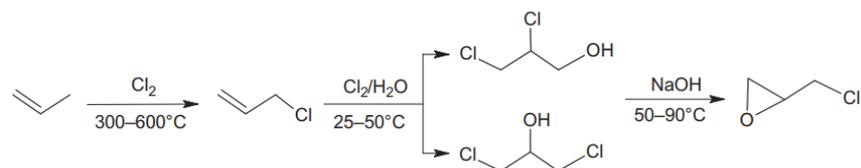


Figura 34 Proceso industrial para la obtención de la epiclorohidrina a partir del propeno

Actualmente, alrededor del 85 % de la demanda industrial de la Epiclorohidrina todavía se satisface mediante la reacción convencional a altas temperaturas a partir del propileno con cloro donde se produce una mezcla de 30% de 1,2-dicloropropanol y 70% 1,3-dicloropropanol, seguida de hidrólisis básica.

El alto porcentaje de 1,2-dicloropropanol formado requiere una conversión adicional al isómero 1,3-dicloro-2-propanol, lo cual produce que el proceso sea lento. El rendimiento global finalmente es del 97%, pero grandes cantidades de aguas residuales contaminadas con subproductos clorados como 1,2-dicloropropano y 1,3-dicloropropano, 1,2,3-tricloropropano, pentaclorohexano y hexaclorohexano. De hecho, en el proceso tradicional de fabricación de Epiclorohidrina a partir de propeno, sólo uno de los cuatro átomos de cloro implicados se retiene en la molécula del producto, el resto encontrado en HCl y NaCl formado en tres de las cuatro reacciones involucradas.

A partir de la epiclorohidrina se puede obtener el Glicerol mediante un mecanismo de reacción tal como lo indica la Figura 23 que ocurre en tres pasos: la esterificación mediante sustitución nucleofílica en el carbono acílico con formación de agua, seguido de la formación de un grupo oxonio y liberación de ácido carboxílico para formar clorhidrina mediante la adición de cloruro al α - o al átomo de carbono β .

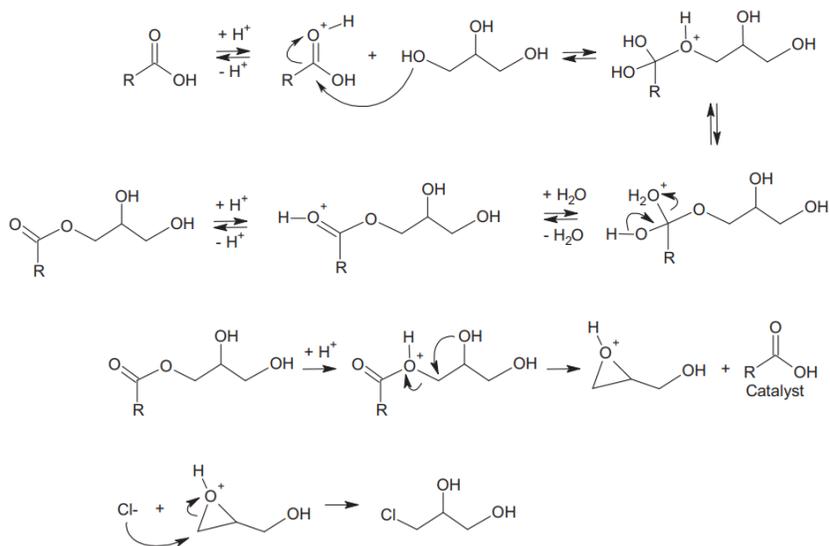


Figura 35 Mecanismo de reacción para la obtención de glicerol Clorohidrina (38)

Resinas: Muchos plásticos, en particular policarbonatos y resinas epoxi, se copolimerizan con Bisfenol A, el cual se obtiene mediante una condensación aromática electrófila catalizada por ácido de fenol y acetona utilizando un gran exceso de fenol para reducir la formación de oligómeros utilizados para proteger latas de metal de la corrosión causada por alimentos y bebidas.

Las resinas epoxi termoestables fabricadas por la industria petroquímica son Éteres diglicídicos de bisfenol A (39).

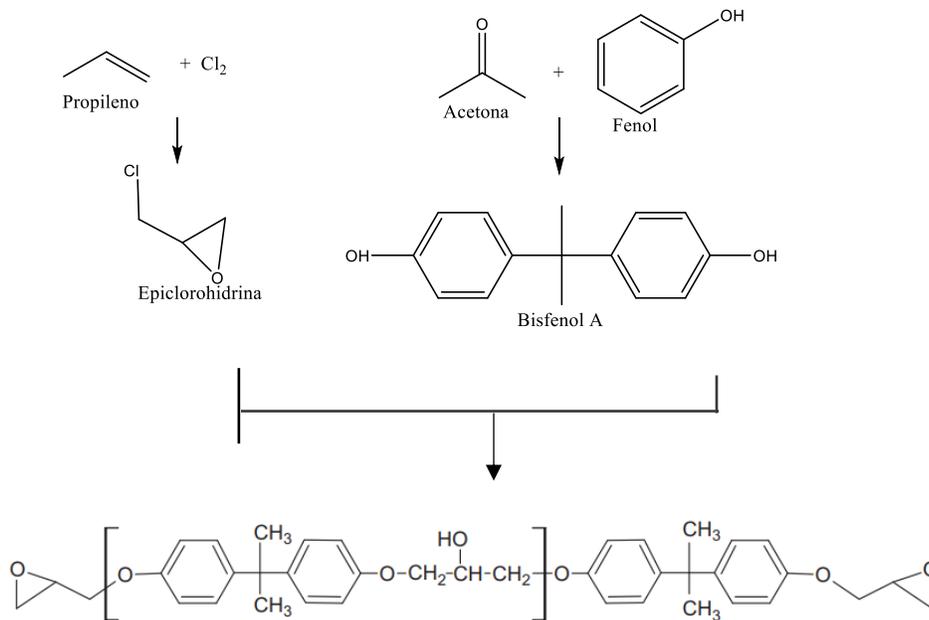


Figura 36 Obtención de resinas epoxi

Las resinas se transforman con un agente de curado en redes reticuladas presentando excelente resistencia a la corrosión, solventes, humedad y productos químicos, alta estabilidad térmica, dureza y buena adherencia. Por estas propiedades, las resinas epoxis son ampliamente utilizadas para fabricar adhesivos, recubrimientos (ampliamente utilizados en la industria alimentaria y electrónica), y piezas estructurales para las industrias de turbinas eólicas, automotrices, aeroespaciales y las industrias de la construcción.

Propilenglicol: Es un líquido de bajo peso molecular, sólidos cuando su peso molecular es superior a 1000. La toxicidad disminuye al aumentar el peso molecular. En general, la toxicidad es baja. Es utilizado como solvente para diferentes fines.

El mono propilenglicol (1,2-propanodiol) se utiliza en la fabricación de Resinas de poliéster insaturado de alto rendimiento, así como refrigerante de motor, anticongelante, agente descongelante y disolvente en productos farmacéuticos y cosméticos. Se deriva principalmente del óxido de propileno en

una atmósfera de alta presión (2025 bar), alta temperatura (120 °C -190°C), hidrólisis no catalítica de óxido de etileno usando un gran exceso de agua.

El mono propilenglicol se obtiene mediante hidrodeshidrogenación selectiva, es decir, mediante la eliminación de un átomo de oxígeno a partir de la adición de hidrógeno, tal como lo indica el siguiente mecanismo de reacción:

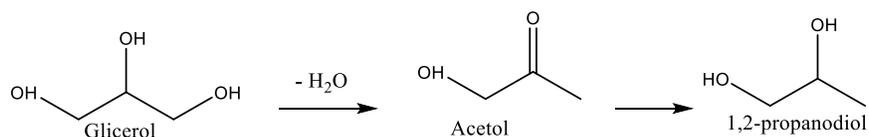


Figura 37 Obtención del 1,2-propanodiol

Acroleína y ácido acrílico: La producción de acroleína, otro valioso derivado propileno a partir del glicerol, mediante deshidratación intramolecular doble de glicerol ha sido objeto de intensos esfuerzos de investigación académica e industrial en la última década.

En general, la deshidratación a acroleína se lleva a cabo en condiciones ácidas. Cuando la molécula de glicerol sufre una protonación, la reacción se lleva a cabo preferentemente en fase gaseosa para limitar la formación de coque. Sin embargo, la principal dificultad de esta química sigue siendo la lenta pero constante desactivación de los catalizadores debido a la fuerte deposición de coque, causada inevitablemente por la naturaleza ácida de los catalizadores y la alta temperatura de reacción (40).

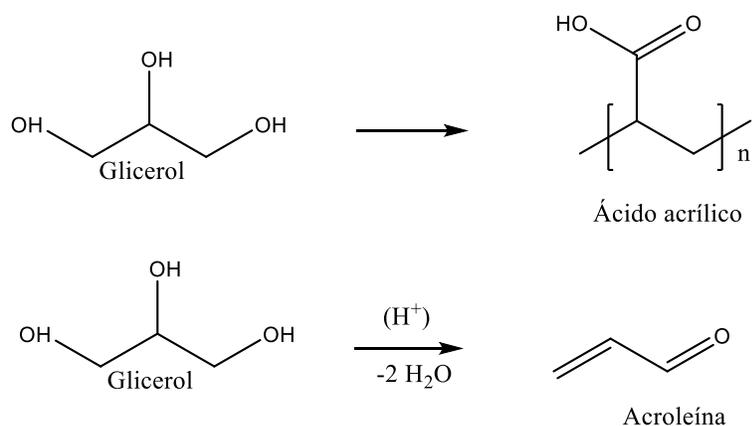


Figura 38 Obtención del ácido acrílico y acroleína

BIOPRODUCTOS DE OXIDACIÓN DE GLICEROL

A partir de la oxidación selectiva de uno, dos, o tres grupos hidroxilo del glicerol se puede obtener diferentes sustancias químicas finas valoradas por las cuales se han desarrollado nuevas rutas catalíticas químicas, electroquímicas y biológicas, tal como se indica en la Figura 27.

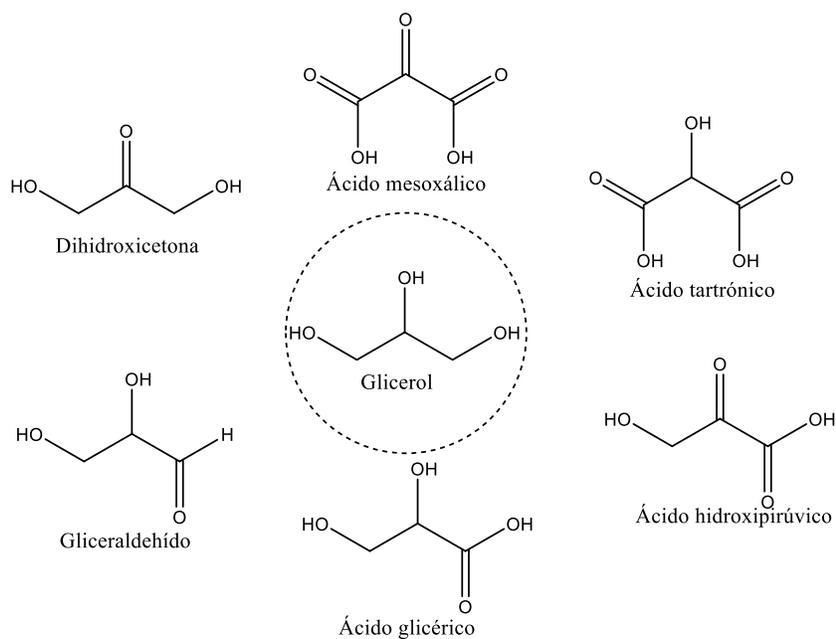


Figura 39 Productos obtenidos a partir de la oxidación del glicerol.

- **Alquilación:** La alquilación las moléculas de las olefinas producidas en el craqueo catalítico se combinan con las de isoparafinas para aumentar el volumen y octanaje de las mezclas de gasolina. La reacción ocurre en presencia de un catalizador muy activo: sulfúrico o ácido fluorhídrico y en ocasiones se utiliza cloruro de aluminio para crear una molécula parafínica de cadena ramificada larga, denominada alquilato el más común es el isooctano, el cual presenta excepcionales cualidades antidetonantes. A continuación, el alquilato se separa y se fracciona. La reacción ocurre con temperaturas relativamente bajas, de 10 °C a 16 °C para el ácido sulfúrico, 27 °C a 0 °C para el ácido fluorhídrico y 0 °C para el cloruro de aluminio.

La alquilación con ácido sulfúrico ocurre en un reactor el cual se encuentra dividido en zonas, la carga es de propileno, butileno, amileno e isobutano fresco, entre otras, y allí entran en contacto con el catalizador. El residuo del reactor se decanta y el ácido sulfúrico se extrae del fondo del recipiente y se recicla. Para eliminar pequeñas cantidades de ácido de la corriente de proceso se utilizan lavadores cáusticos o de agua.

La alquilación con ácido fluorhídrico puede ocurrir por dos procesos: En el proceso Phillips la carga es olefina con isobutano más el catalizador fluorhídrico. El proceso UOP utiliza dos reactores en el cual el catalizador se añade en el primero de estos.

Procesos de rectificación.

Después del proceso de craqueo, algunos productos necesitan un proceso adicional para mejorar el índice de octano, el contenido de azufre incluso el rendimiento de estos. Esto ocurre por proceso de rectificación los cuales pueden ser: Reforma térmica e isomerización.

- **Reforma Catalítica.**

Este proceso convierte las naftas pesadas de bajo octanaje en hidrocarburos aromáticos como el tolueno, benceno, xileno y otros aromáticos usados como materia prima en petroquímica y componentes de gasolina de alto índice de octano, que reciben el nombre de reformados. En este proceso el hidrógeno, es un subproducto importante, se separa del reformado para reciclarlo y utilizarlo en otros procesos. El hidrógeno elimina contaminantes tales como los compuestos de cloro, azufre y nitrógeno, que podrían envenenar el catalizador. El producto resultante depende de la temperatura y presión del reactor, el catalizador utilizado y la velocidad de reciclaje del hidrógeno.

- **Isomerización.**

Este proceso convierte el n-butano, n-pentano y n-hexano ya presentan como cadenas rectas de destilación de la nafta ligera presentando un bajo índice de octano. Algunos de los componentes parafínicos normales de tales componentes se convierten en isómeros de cadena ramificada y alto octanaje reorganizando los enlaces entre átomos, sin cambiar el número o la clase de átomos. Los dos procesos de isomerización claramente diferenciados son el de butano, pentano y hexano.

La isomerización de butano produce materia prima para la alquilación. Un proceso de baja temperatura utiliza un catalizador muy activo de cloruro de aluminio o cloruro de hidrógeno sin calentadores caldeados para isomerizar n-butano. La carga tratada y precalentada se añade a la corriente de reciclaje, se mezcla con HCl y se hace pasar por el reactor tal como se muestra en la Figura

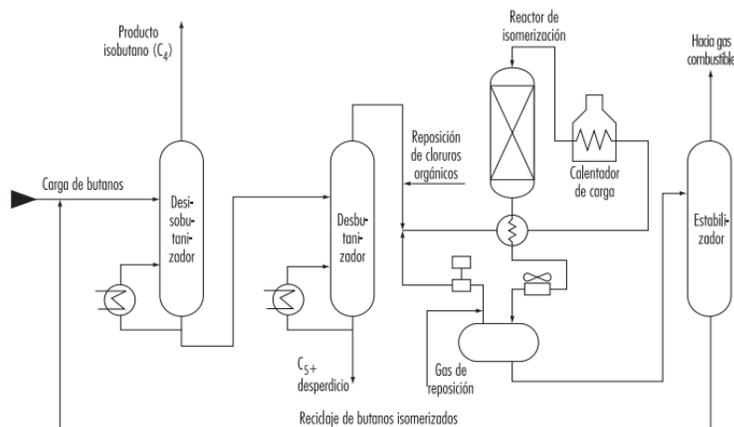


Figura 40 Isomerización del Butano.

La isomerización del pentano y hexano se utiliza para elevar el índice de octano. En este proceso la carga previamente desecada y desulfurada se mezcla con una pequeña cantidad de cloruro orgánico e hidrógeno reciclado, y se calienta a la temperatura del reactor donde las parafinas se isomerizan catalíticamente en isoparafinas, se enfrían y pasan a un separador. El gas y el hidrógeno del separador se reciclan.

QUIMICA DEL BENCENO Y DE SUS DERIVADOS

La industria utiliza la química orgánica, relacionada con ciertos compuestos de carbono como los hidrocarburos, combinaciones de hidrógeno y carbono. En la década de 1960 se empezó a utilizar la frase “químicos orgánicos pesados” para compuestos como benceno, fenol, etileno y cloruro de vinilo. El benceno y el fenol son relacionados químicamente, y también están relacionados con el tolueno y los xilenos, que pueden considerarse juntos como parte del grupo aromático de sustancias químicas orgánicas, los compuestos aromáticos se definen más fácilmente como aquellos con propiedades químicas como las del benceno, el tolueno y los isómeros del xileno.

En las industrias petroquímica y de refinación de petróleo crudo, las siglas BTX se refiere a mezclas de benceno, tolueno y los tres xilenos (1,2-dimetilbenceno, 1,3-dimetilbenceno y 1,4-dimetilbenceno), todos son hidrocarburos aromáticos.

Los tres xilenos isoméricos (1,2- $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3$, 1,3- $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3$ y 1,4- $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3$) y otro isómero, el etilbenceno ($\text{C}_6\text{H}_5\text{C}_2\text{H}_5$) puede ser separado con dificultad, pero se han utilizado numerosos métodos de separación.

El orto-xileno se utiliza principalmente para producir anhídrido ftálico, un importante intermediario que conduce principalmente a diversos recubrimientos y plásticos. El menos valorado de los isómeros es el meta-xileno, pero tiene usos en la fabricación de revestimientos y plásticos. El para-xileno conduce a poliésteres, que llegan al consumidor final como fibras de poliéster bajo diversos nombres de marcas registradas.

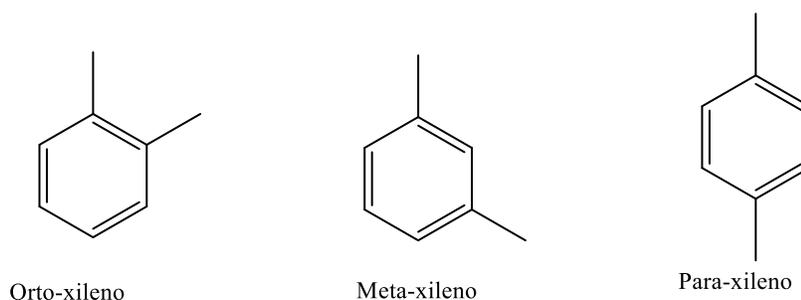


Figura 41 Xilenos posición orto meta y para

El benceno es un intermediario importante en la fabricación de productos industriales.

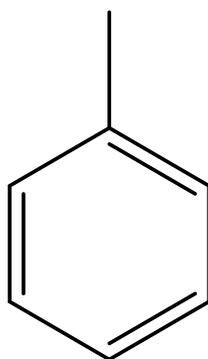
Las sustancias químicas (cuadro 3.7) y los productos del benceno son frecuentemente materias primas para la síntesis de sustancias químicas orgánicas adicionales. Químicamente el benceno, que forma la base de los aromáticos y se considera carcinógeno para el ser Humano.

Es una estructura de anillo cerrada de seis átomos de carbono con un átomo de hidrógeno en cada esquina de la estructura hexagonal. De este modo,

El benceno es el más simple y es considerado como uno de los aromáticos más estables y es un sistema de anillo único que contiene dobles enlaces conjugados.

En los primeros días de la industria química orgánica, el benceno se obtenía de la carbonización del carbón, que produce gas combustible, coque, así como una serie de subproductos, incluido el benceno. Carbonización del carbón para producir gas de iluminación se remonta en Inglaterra a los primeros años del siglo XIX y el proceso todavía se emplea en algunos países, pero más se está haciendo uso del gas natural. También se utiliza el proceso de carbonización (con algunas ligeras modificaciones) para producir coque metalúrgico, indispensable para la fabricación de hierro y por tanto de acero.

El tolueno se diferencia del benceno en que uno de los átomos de hidrógeno se reemplaza por una combinación especial de carbono e hidrógeno llamada grupo metilo (CH_3).



Tolueno

Figura 42 Tolueno

El tolueno también se utiliza como disolvente; donde la sustancia disuelta suele ser también un compuesto orgánico. Los isómeros de xileno tienen dos grupos metilo en diferentes posiciones en el anillo de benceno y, por lo tanto, todos los aromáticos son hasta cierto punto intercambiables. De hecho, uno de los usos del tolueno es producir benceno eliminando el grupo metilo. Todos estos hidrocarburos son útiles como gasolina debido a sus propiedades antidetonantes (altos índices de octanaje).

El benceno en sí es quizás el producto químico industrial con los usos más variados.

Hay varias rutas para llegar al fenol, que en sí mismo es una importante sustancia química industrial, para transformar el benceno en los productos que se obtienen de él, se utilizan otras materias primas; por ejemplo, etileno para la producción de estireno y sulfúrico. El cumeno (isopropilbenceno) se produce mediante la alquilación de Friedel-Crafts de benceno con propileno usando un catalizador ácido.

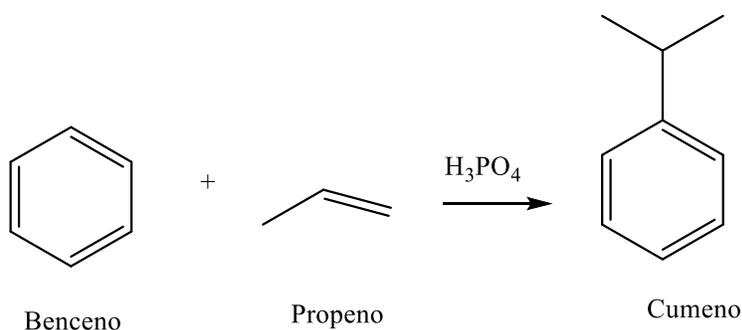


Figura 43 Síntesis del Cumeno

Aunque el cumeno es un combustible para automóviles de alto octanaje y índice de octanaje lo hace deseable en la gasolina, la mayor parte del cumeno se oxida fácilmente a hidroperóxido, que se escinde fácilmente en ácido diluido a fenol y acetona.



Figura 44 Oxidación del Cumeno

Así, casi todo el cumeno producido se utiliza para fabricar fenol ($\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$) y acetona $[(\text{CH}_3)_2\text{CO}]$ que tienen varios usos comerciales importantes, pero también tienen un uso importante juntos. El fenol y la acetona se pueden condensar para formar bisfenol A, que se utiliza en la producción de policarbonato y resinas epoxi.

La acetona $[(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{O}]$, es una sustancia química orgánica altamente volátil e inflamable, irritante para los ojos, la nariz y la garganta. Síntomas de exposición a grandes cantidades.

Los efectos de la acetona pueden incluir dolor de cabeza, inestabilidad, confusión, lasitud, somnolencia, vómitos y depresión respiratoria. Reacciones de acetona en la parte inferior.

La atmósfera contribuye a la formación de ozono a nivel del suelo. El ozono (un importante componente del smog urbano) puede afectar el sistema respiratorio, especialmente en personas sensibles como asmáticos o alérgicos. Si se libera al agua, la acetona será degradada por microorganismos o se evaporará a la atmósfera, aunque la degradación por microorganismos será la eliminación principal mecanismo. Una vez que la acetona llega a la troposfera reaccionará con otros gases, contribuyendo a la formación del ozono troposférico (O_3) y otros contaminantes del aire.

El benceno también es un material de partida importante para la fabricación de ciclohexano (C_6H_{12}). El proceso implica la hidrogenación del benceno (durante un catalizador de níquel o platino). Sin embargo, la mayor parte del ciclohexano se convierte al ácido adípico $[(CH_2)_4(COOH)_2]$, ácido hexanodioico, hexano-1,6-dicarboxílico, ácido hexano-1,6-dioico].

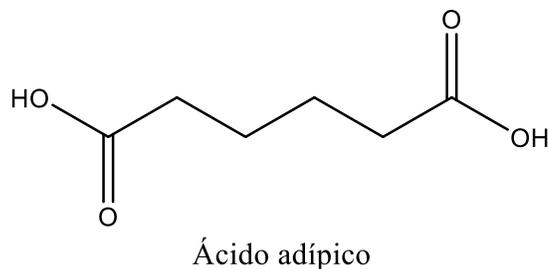


Figura 45 Estructura ácido adípico

El proceso es un proceso de oxidación en el que los químicos intermedios ciclohexanol y ciclohexanona se oxidan al ácido adípico:

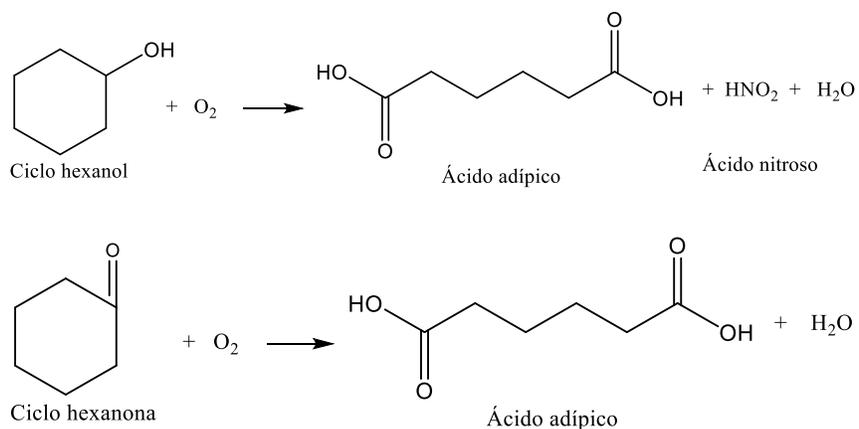


Figura 46 Oxidación del ciclo hexanol y ciclo hexanona

Además, el ácido adípico se puede hacer reaccionar con 1,6-hexametilendiamina ($\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$) para producir nailon-6,6, una fibra sintética muy resistente.

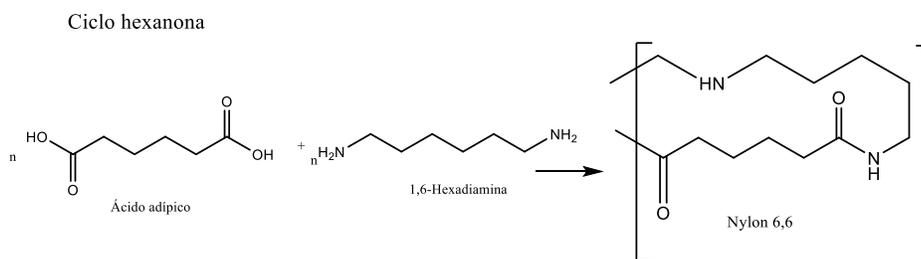


Figura 47 Síntesis del Nylon 6,6

La mayoría de las alfombras están hechas de nailon, al igual que muchas prendas parecidas a la seda, algunos tipos de cuerdas y muchos artículos moldeados por inyección. La Caprolactama ($\text{C}_6\text{H}_{11}\text{NO}$) también se utiliza para fabricar nailon. El nailon-6,6 se obtiene mediante polimerización directa de caprolactama, que a menudo se obtiene mediante la reacción de ciclohexanona con hidroxilamina, seguido de reordenamiento de la oxima.

La anilina ($\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2$) se obtiene mediante nitración de benceno a nitrobenzenu seguida de hidrogenación del nitrobenzenu utilizando un catalizador a base de cobre en el que el cobre se suspende en sílice (Cu/SiO_2) para producir anilina.

El uso principal de la anilina es en la producción de diisocianatos ($\text{RN}=\text{C}=\text{O}$), que son materiales de producción de poliuretano (como el aislamiento del hogar).

Los alquilbencenosulfonatos ($\text{RC}_6\text{H}_5\text{SO}_3\text{Na}$) son compuestos tensioactivos importantes que se utilizan en los detergentes para ropa. En el proceso de fabricación, los alquilbencenos (elaborado mediante alquilación de benceno de Friedel-Crafts utilizando moléculas de olefina lineales que tienen hasta 12 átomos de carbono) se sulfonan, y luego los ácidos sulfónicos se neutralizan con hidróxido de sodio (NaOH).

El diisocianato de tolueno (TDI) se polimeriza con dioles para producir poliuretanos, que se utilizan para fabricar espuma flexible para cojines de muebles, colchones, y almohadillas para alfombras. El trinitrotolueno (TNT) se obtiene mediante una nitración gradual de tolueno en las posiciones 2, 4 y 6: el TNT es un alto explosivo y misil propulsor. El anhídrido ftálico se obtiene mediante oxidación del ortoxileno con aire.

Aproximadamente el 50% p/p del anhídrido ftálico producido se utiliza para fabricar plastificantes, especialmente el compuesto ftalato de dioctilo [también llamado bis (2-ftalato de etilhexilo, ftalato de di-2-etilhexilo, ftalato de dietilhexilo, DEHP] para ablandar el plástico PVC. El anhídrido ftálico también se utiliza para fabricar resinas de poliéster insaturado y pinturas alquídicas.

PRINCIPALES REACCIONES

Existe una amplia variedad de reacciones químicas que se utilizan para producir sustancias químicas orgánicas, algunas de las cuales son específicos de uno o dos productos, mientras que otros (por ejemplo, oxidación, halogenación, hidrogenación) se utilizan ampliamente en muchos procesos. Por esta razón, la mayoría de las emisiones procedentes de la producción industrial de productos químicos orgánicos se originan en pocos procesos unitarios, pero de uso común.

- **Alquilación**

La alquilación es la introducción de un grupo alquilo en un compuesto orgánico mediante sustitución o adición. Hay seis tipos de reacciones de alquilación:

(1) Sustitución de hidrógeno unido al carbono, como etilbenceno ($C_6H_5C_2H_5$) a partir de benceno (C_6H_6) y etileno (CH_2CH_2)

(2) Sustitución de hidrógeno unido a nitrógeno

(3) Sustitución de hidrógeno en un grupo hidroxilo de un alcohol o fenol y;

(4) Adición a una amina terciaria para formar un amonio cuaternario.

Las reacciones de acilación que quedan fuera del contexto de este texto, como la adición a un metal para formar un enlace carbono-metal, así como adiciones a azufre o silicio no están incluidos en esta lista. El mayor uso de la alquilación. El proceso se realiza en refinerías para la producción de alquilatos que se utilizan como mezclas para producir gasolina.

Otros productos importantes de alquilación incluyen etilbenceno ($C_6H_5CH_2CH_3$), cumeno [$C_6H_5CH(CH_3)_2$] y lineal derivados de alquilbenceno [$C_6H_5(CH_2)_nCH_3$, donde n suele ser 3 o mayor]. La alquilación se lleva a cabo comúnmente en fase líquida a temperaturas superiores de $200^\circ C$ a presiones superiores a la atmosférica. A veces fase de vapor la alquilación es más efectiva. Los agentes de alquilación suelen ser olefinas, alcoholes, sulfatos de alquilo o haluros de alquilo y los catalizadores típicos son el ácido fluorhídrico (HF), ácido sulfúrico (H_2SO_4) o ácido fosfórico (H_3PO_4 , que también se conoce como ácido ortofosfórico o ácido fosfórico(V)). Las temperaturas de proceso más altas puede provocar la reducción esperada de la especificidad del producto y el aumento de subproductos.

Algunos procesos de alquilación más recientes (como los utilizados para la producción de etilbenceno y cumeno) utilizan catalizadores de zeolita, ya que pueden ser más eficientes y tener menores emisiones. Ácidos de Lewis, como el cloruro de aluminio (AlCl_3) o trifluoruro de boro (BF_3), también pueden usarse como catalizadores.

Hay problemas ambientales, relacionados con la emisión de compuestos orgánicos volátiles (COV), que surgen durante los procesos de alquilación y que incluyen la producción de etilbenceno, cumeno y lineal alquilbencenos, la emisión de COV de las reacciones de alquilación tiende a ser baja en comparación con la emisión de COV de otros procesos de refinería. Sin embargo, la eliminación de subproductos y residuos de haluros de alquilo y derivados de sulfato puede ser problemático.

- **Amonólisis**

La amonólisis es el proceso de formación de aminas utilizando, como agentes aminantes amoníaco o aminas primarias y secundarias. Estas reacciones también pueden incluir hidroamonólisis en la que las aminas se forman directamente a partir de compuestos carbonílicos utilizando una mezcla de amoníaco-hidrógeno y un catalizador de hidrogenación.

Los cuatro tipos principales de reacciones de amonólisis son:

(1) Doble descomposición en que el amoníaco (NH_3) se divide en la función amino (NH_2) que pasa a formar parte de la amina, y un átomo de hidrógeno que reacciona con un radical que se está sustituyendo.

(2) Deshidratación, en la que el amoníaco reacciona para producir agua y aminas.

(3) Adición simple, en la que ambos fragmentos de la molécula de amoníaco pasan a formar parte de la nueva amina.

(4) Actividad múltiple, en la que el amoníaco reacciona con los productos de amina para formar derivados de amina secundaria y derivados de amina terciaria.

Sin embargo, normalmente los principales productos de la amonólisis son el ácido carbámico. (H_2NCOOH), derivados de etanolamina ($\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{NHR}$) y alquilamina (RNH_2) derivados.

En el caso de la producción de etanolamina, la emisión de COV resultantes de los reactores es mínima aunque tiende a haber gases residuales asociados con cualquier destilación. Cualquier gas de escape que contenga amoníaco o derivados de amina se lavado o incinerado para evitar problemas de olores y cualquier cianuro de hidrógeno que se produzca durante la producción de acrilonitrilo ($\text{CH}_2=\text{CHCN}$) podrá recuperarse.

En caso de contaminación del agua, se puede recuperar el amoníaco que no ha reaccionado de efluentes alcalinos mediante extracción con vapor y reciclado de regreso al proceso.

El amoníaco que queda en el efluente se puede neutralizar con ácido sulfúrico para producir un precipitado de sulfato de amonio [$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$] que se puede separar para utilizar como fertilizante o tratado biológicamente. Además, las aguas residuales que contienen impurezas como metanol y derivados de amina se pueden eliminar por incineración o por tratamiento biológico. Materiales de desecho sólidos de la base de la unidad de extracción se incineran.

- **Amoxidación**

En la industria de productos químicos orgánicos, la amoxidación es un proceso para la producción de derivados de nitrilo que implican el uso de amoníaco y oxígeno; la materia prima habitual es un alqueno. El proceso es una aplicación importante en la producción de acrilonitrilo ($\text{CH}_2=\text{CHCN}$) y el proceso implica la oxidación en fase gaseosa de olefinas, como propileno con

amoníaco en presencia de oxígeno y catalizadores a base de vanadio o molibdeno:



Figura 48 Síntesis del acrilonitrilo

El acetonitrilo (CH_3CN) es un subproducto de este proceso. Este líquido incoloro es el nitrilo orgánico más simple y se utiliza como disolvente aprótico polar en compuestos orgánicos. El acetonitrilo también es un bloque de construcción de dos carbonos en la síntesis de sustancias químicas orgánicas, las aplicaciones importantes son en la producción de fibras acrílicas, termoplásticos, y adiponitrilo ($\text{NCCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CN}$, un líquido viscoso e incoloro, un importante precursor del polímero Nylon-6,6).

- **Carbonilación**

La carbonilación (carboxilación) es la combinación de un compuesto orgánico con el monóxido de carbono y la carbonilación se refieren a reacciones que introducen carbono. La reacción de carbonilación se utiliza para producir aldehídos y alcoholes que contienen un átomo de carbono adicional. El producto principal implica la introducción del grupo carbonilo ($>\text{C}=\text{O}$) en los materiales de partida para producir aldehídos ($-\text{CHO}$), ácidos carboxílicos ($-\text{CO}_2\text{H}$), y ésteres ($-\text{CO}_2\text{R}$). En el laboratorio y en la industria, las reacciones de carbonilación son la base de dos tipos principales de reacciones, la hidroformilación y la química de Reppe.

La reacción de hidroformilación implica la adición de monóxido de carbono e hidrógeno a compuestos orgánicos insaturados, generalmente derivados de alquenos para producir derivados de aldehído.

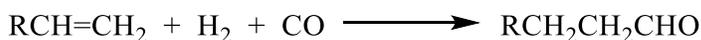


Figura 49 Síntesis de derivados de aldehídos a partir de alquenos

La reacción requiere la presencia de catalizadores metálicos para unir el monóxido de carbono y el hidrógeno a la olefina. La hidroformilación (proceso "oxo") es una variante en la que las olefinas se hacen reaccionar con monóxido de carbono e hidrógeno ("gas de síntesis") en presencia de un catalizador de cobalto o rodio (como en la producción de n-butiraldehído a partir de propileno).



Figura 50 Síntesis del n-butiraldehído

Por otro lado, la reacción de Reppe implica la adición de monóxido de carbono y un donador de hidrógeno ácido al sustrato orgánico. Gran escala las aplicaciones de este tipo de carbonilación son la conversión de metanol en ácido acético.



Figura 51 Síntesis del ácido acético

En una hidrocarboxilación relacionada, los derivados de alqueno se convierten en derivados de ácido carboxílico en presencia de catalizadores metálicos:

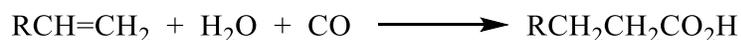


Figura 52 Síntesis de ácido con catalizadores metálicos

Por ejemplo, en el marco de la síntesis industrial del ibuprofeno, un derivado del alcohol bencílico se convierte en los ácidos carboxílicos correspondientes mediante reacción de carbonilación catalizada por paladio:

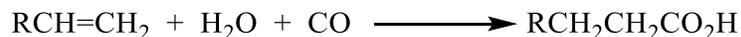


Figura 53 Reacción de carbonilación catalizada por paladio

Además, el ácido propanoico se produce principalmente mediante la hidrocarboxilación de etileno utilizando carbonilo de níquel [tetracarbonilo de níquel, $\text{Ni}(\text{CO})_4$] como catalizador:

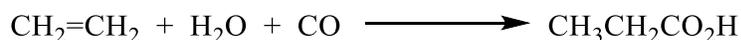


Figura 54 Hidrocarboxilación del etileno

La hidroesterificación es similar a la hidrocarboxilación, pero utiliza derivados alcohólicos en lugar de agua. Otras reacciones relacionadas de orientación industrial incluyen la Reacción de Koch, que implica la adición de monóxido de carbono a compuestos insaturados en presencia de un catalizador, como en la producción del importante intermedio, el ácido glicólico:

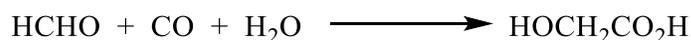


Figura 55 Síntesis del ácido glicólico

Los haluros de alquilo, bencilo, vinilo, arilo y alilo también se pueden carbonilar en presencia de monóxido de carbono y catalizadores adecuados como manganeso (Mn), hierro (Fe) o níquel (Ni).

En términos de cuestiones ambientales de los procesos de carbonilación, los procesos generalmente generan corrientes de ventilación que contienen COV además de carbono, dióxido de carbono y otros no COV. El gas residual se recupera y utiliza como combustible. Además, los metales pesados (del catalizador) deben eliminarse de aguas residuales antes del tratamiento biológico. Los residuos sólidos suelen ser los catalizadores, pero se recomienda precaución al planificar el proceso de eliminación debido a el potencial de material adsorbido, que podría lixivarse del sólido durante períodos de lluvia intensa, nieve derretida o lluvia ácida.

- **Condensación**

Una reacción de condensación es una reacción química en la que dos reactivos (cada uno contiene un grupo funcional) se combinan para formar un compuesto molecular superior.

Un tipo común de reacción de condensación industrial es una reacción de polimerización por condensación en la que tiene

lugar una serie de pasos de condensación mediante los cuales los monómeros o cadenas de monómeros se suman entre sí para formar cadenas más largas.

La reacción también se conoce como polimerización de crecimiento escalonado y se utiliza en procesos como la síntesis de poliésteres o nailon. Esta reacción puede ser

(1) Homopolimerización, como en el uso de un monómero único con dos grupos terminales diferentes que se condensan.

(2) Copolimerización de dos comonómeros con los grupos funcionales necesarios en cada uno de los monómeros (como se muestra en la ecuación anterior).

Las moléculas pequeñas suelen ser liberadas en estos pasos de condensación, a diferencia de las reacciones de poliadición como en la polimerización del etileno, que es una reacción de adición y sin eliminación de subproductos de menor peso molecular.

Los problemas ambientales que surgen durante el uso de procesos de condensación son por lo general, se limitan a las emisiones de los reactores, que generalmente son pequeñas y pueden mitigarse en una unidad de combustión. Además, los volúmenes de aguas residuales son generalmente bajos y los efluentes consisten principalmente en agua de reacción si se recicla después de la fase la separación no es posible. El efluente está compuesto de componentes de alto punto de ebullición (productos/subproductos de condensación) que a menudo muestran una biodegradabilidad moderada o pobre, y componentes de bajo punto de ebullición que normalmente son más susceptibles a la biodegradación.

- **Deshidratación**

La deshidratación de sustancias químicas orgánicas es una reacción de descomposición en la que el nuevo compuesto se forma por la expulsión de agua. El proceso de deshidratación es

un subproceso del proceso de condensación que requiere un catalizador.

Los agentes deshidratantes típicos utilizados en la síntesis orgánica incluyen concentrados ácido sulfúrico (H_2SO_4), ácido fosfórico concentrado (H_3PO_4) y óxido de aluminio (Al_2O_3). En la reacción de condensación relacionada, se libera agua de dos reactivos diferentes.

- **Deshidrogenación**

La deshidrogenación es el proceso mediante el cual se elimina el hidrógeno de una sustancia orgánica para formar una nueva sustancia química (por ejemplo, para convertir compuestos saturados en insaturados). Se utiliza para producir aldehídos y cetonas mediante la deshidrogenación de alcoholes. Los productos importantes incluyen acetona, ciclohexanona, metil etilcetona y estireno.

La deshidrogenación es más importante en el proceso de craqueo de la refinería, donde los hidrocarburos saturados se convierten en olefinas. El proceso se aplica a materias primas de hidrocarburos apropiadas (por ejemplo, nafta) para producir grandes volúmenes de etileno, propileno, derivados de buteno y derivados de butadieno que se requieren como materia prima para la industria de productos químicos orgánicos.

Se puede lograr el craqueo (descomposición térmica) de compuestos orgánicos mediante procesos térmicos (no catalíticos) o mediante procesos catalíticos y proporciona un proceso para convertir fracciones de mayor punto de ebullición en parafinas saturadas y no lineales, naftenos y aromáticos. La concentración de derivados de olefinas en el flujo de producto es muy bajo, por lo que este método es más útil para la preparación de mezclas (como nafta y queroseno) para la producción de combustibles (gasolina y diésel, respectivamente). Los derivados de olefinas son más ampliamente producidos por el craqueo con vapor de fracciones de petróleo, en el proceso se calienta una

corriente de hidrocarburos, se mezcla con vapor y, dependiendo de la materia prima, se calienta aún más hasta una temperatura de craqueo del orden de 600 a 650 °C. La conversión de corrientes de hidrocarburos saturados en compuestos insaturados es altamente endotérmica, por lo que el proceso requiere un alto entrada de energía. El craqueo a alta temperatura también se utiliza para producir gasolina de pirólisis a partir de nafta, gasóleo o corrientes de refinería de alto punto de ebullición.

Los problemas ambientales que surgen de los procesos de deshidrogenación incluyen el potencial de corrientes de ventilación ricas en hidrógeno que se producen como resultado del proceso pero que puede emplearse como materia prima de hidrógeno para otros procesos o como combustible de refinería. Cualquier hidrocarburo volátil que se produzca en la purga y los gases de ventilación requerirán recolección y tratamiento y pueden combinarse con producción de energía beneficiosa. Por otro lado, agua de enfriamiento, vapor de dilución. El agua de descoquización y las descargas de agua de antorcha requerirán tratamiento.

- **Esterificación**

La esterificación típicamente implica la formación de ésteres a partir de un ácido orgánico y un alcohol. Los ésteres suelen tener un olor característico, agradable y afrutado, que los hace apropiados para un uso extensivo en la industria de fragancias y sabores. El método más común de esterificación es la reacción de un alcohol y un ácido carboxílico concentrado con eliminación de agua tal como se describe a continuación:

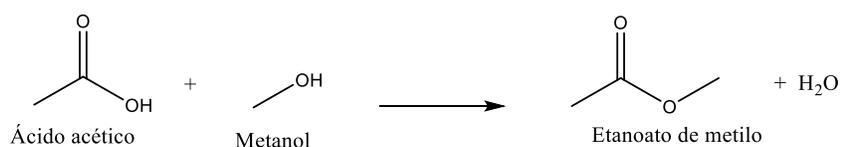


Figura 56 Síntesis de Ésteres

Sólo ácidos carboxílicos fuertes reaccionan lo suficientemente rápido sin un catalizador, por lo que un ácido mineral fuerte (Por lo general, se debe agregar ácido sulfúrico o cloruro de hidrógeno) para ayudar a la reacción. Los anhídridos de ácido también se utilizan, por ejemplo, en la producción de ftalato de dialquilo. El grupo ácido sulfónico puede unirse químicamente a un material polimérico y para formar el poliestireno sulfonado, permitiendo una esterificación en condiciones suaves.

El equilibrio de la reacción se puede desplazar hacia el éster aumentando la concentración de uno de los reactivos, generalmente el alcohol. En escala de esterificación, la mezcla de reacción se pone a reflujo hasta que toda el agua de condensación se forma, y el agua o el producto éster se elimina continuamente del equilibrio por destilación. Los principales productos de las reacciones de esterificación. son tereftalato de dimetilo, acrilato de etilo, acrilato de metilo y acetato de etilo que tienen una importancia económica considerable en muchas aplicaciones (como para fibras, películas, adhesivos y plásticos). Algunos ésteres volátiles se utilizan como materiales aromáticos en perfumes, cosméticos y alimentos.

- **Halogenación**

Generalmente, la halogenación es la reacción de un halógeno con un alcano en la introducción de átomos de halógeno se produce en la molécula orgánica mediante una adición o por una reacción de sustitución. En síntesis orgánica esto puede implicar la adición de halógenos moleculares: cloro, bromo, yodo o flúor (Cl_2 , Br_2 , I_2 o F_2) o hidrohalogenación utilizando: cloruro de hidrógeno, bromuro de hidrógeno, yoduro de hidrógeno o fluoruro de hidrógeno (HCl , HBr , HI o HF) a carbono-carbono dobles enlaces. Las reacciones de sustitución implican reemplazar átomos de hidrógeno en olefinas, derivados de parafina o derivados aromáticos con átomos de halógeno.

La cloración es la reacción de halogenación industrial más importante y los productos orgánicos clorados incluyen derivados aromáticos clorados, derivados del metano y derivados del etano clorados, pero se recomienda precaución ya que los problemas de toxicidad exigirán medidas de control adicionales. La fluoración es utilizada casi exclusivamente en la fabricación de fluorocarbonos.

Existen varias vías para la halogenación de compuestos orgánicos, incluida la halogenación por radicales libres, la halogenación electrófila y la reacción de adición de halógeno. Por ejemplo, derivados de hidrocarburos saturados (alcanos).

Normalmente no se añaden halógenos, sino que se somete a una halogenación de radicales libres que implica la sustitución de un átomo de hidrógeno (o átomos de hidrógeno) por un halógeno (o átomos de halógeno). La química de la halogenación de derivados de alcanos suele estar determinada por la relativa debilidad de los enlaces carbono-hidrógeno (C-H) disponibles. La halogenación de radicales libres se utiliza para la producción de derivados clorados del metano:

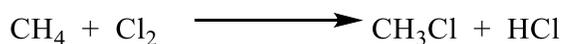


Figura 57 Halogenación del metano por radicales libres

El reordenamiento suele acompañar a estas reacciones de radicales libres. Por otro lado, los compuestos insaturados, especialmente los derivados de alquenos y los derivados de alquinos, añaden halógenos a través del enlace insaturado:

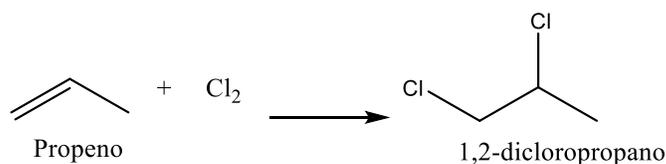


Figura 58 Halogenación de alquenos

Sin embargo, los compuestos aromáticos están sujetos a halogenación electrófila pero la adición al sistema de anillos puede ocurrir bajo condiciones extremas:

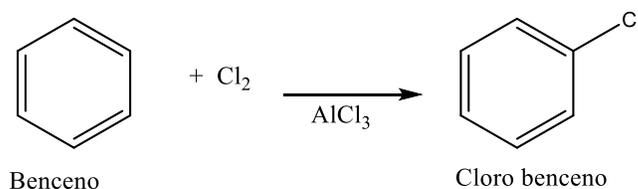


Figura 59 Halogenación de aromáticos

La facilidad de la reacción está influenciada por el halógeno: el flúor y el cloro son más electrófilos y, como resultado, son agentes halogenantes más agresivos. Por otro lado, el bromo es un agente halogenante más débil que el flúor y el el cloro, mientras que el yodo es el agente halogenante menos reactivo de los halógenos. En consecuencia, la facilidad de hidrogenólisis (eliminación del halógeno con hidrógeno como HX) sigue la tendencia inversa: el yodo se elimina más fácilmente de los compuestos orgánicos y los compuestos organoflúor son los compuestos halogenados más estables.

Las cuestiones medioambientales de los procesos de halogenación implican el tratamiento de gases residuales, lo que requiere una distinción entre corrientes ácidas, gases de reacción, y flujos de residuos neutros. Corrientes de aire de tanques, columnas de destilación y los respiraderos del proceso se pueden recolectar y tratar utilizando técnicas como la condensación a baja temperatura o la incineración. Sin embargo, el tratamiento de corrientes de gases ácidos es más complejo porque cualquier equipo en contacto con gases ácidos y agua debe estar construido con materiales resistentes a los ácidos o recubierto internamente para evitar corrosión. El contenido de halógeno del gas residual puede representar una valiosa materia prima y las técnicas de control de la contaminación ofrecen una

oportunidad para su recuperación y reutilización (ya sea como hidrógeno-halógeno o soluciones acuosas). Las técnicas pueden incluir:

(1) Recuperación del producto (mediante separación con vapor del líquido corrientes seguidas de reciclaje al proceso).

(2) Lavar el gas ácido con un compuesto fácilmente halogenado preferiblemente una materia prima utilizada en el proceso.

(3) Absorber el gas ácido en agua para dar ácido acuoso, que a menudo sigue mediante lavado cáustico para la protección del medio ambiente.

(4) Lavado de componentes orgánicos con disolventes orgánicos y:

(5) Condensación de subproductos orgánicos para utilizar como materia prima en otro proceso.

También surgen problemas ambientales con las corrientes de aguas residuales porque la degradabilidad biológica (biodegradabilidad) de los hidrocarburos halogenados (especialmente derivados aromáticos) disminuye a medida que aumenta el contenido de halógenos. Sólo los derivados de hidrocarburos clorados con un bajo grado de cloración son degradables en plantas de tratamiento biológico de aguas residuales, pero sólo si la concentración de los derivados de hidrocarburos clorados no supera determinados niveles.

Antes del tratamiento biológico, las aguas residuales que contienen compuestos orgánicos clorados generalmente requieren una purificación preliminar mediante extracción, extracción y adsorción (utilizando carbón activado o resinas poliméricas adecuadas). La contaminación se puede reducir sustancialmente evitando el enfriamiento con agua para separar el cloruro de hidrógeno (por ejemplo en la producción de derivados clorados de etano y derivados clorados de etileno).

Finalmente, los materiales de desecho sólidos como resultado del proceso de halogenación surgen de fuentes como residuos de reactores o catalizadores gastados. La incineración es un método común para la destrucción de los componentes orgánicos de los desechos sólidos pero se debe prestar considerable atención a las condiciones de incineración para evitar la formación de dioxinas. Si se utiliza la incineración, existe la necesidad de una operación eficiente de lavado de gases de combustión.

- **Deshidratación**

La deshidratación de sustancias químicas orgánicas es una reacción de descomposición por la expulsión de agua. El proceso de deshidratación es un subproceso del proceso de condensación que requiere un catalizador. Ejemplos de las reacciones de deshidratación comunes incluyen:

- (1) Conversión de alcoholes a éteres.
- (2) Conversión de alcoholes a alquenos.
- (3) Conversión de ácidos carboxílicos a anhídridos.
- (4) Conversión de amidas a nitrilos.

Los agentes deshidratantes típicos utilizados en la síntesis orgánica incluyen concentrados por ejemplo ácido sulfúrico (H_2SO_4), ácido fosfórico concentrado (H_3PO_4) y óxido de aluminio (Al_2O_3). En la reacción de condensación relacionada, se libera agua de dos reactivos diferentes.

- **Deshidrogenación**

La deshidrogenación es el proceso mediante el cual se elimina el hidrógeno de una sustancia orgánica para formar una nueva sustancia química (por ejemplo, para convertir compuestos saturados en insaturados). Se utiliza para producir aldehídos y cetonas mediante la deshidrogenación de alcoholes. Los productos importantes incluyen acetona, ciclohexanona, metil etilcetona y estireno.

La deshidrogenación es más importante en el proceso de craqueo de la refinería, donde los hidrocarburos saturados se convierten en olefinas. El proceso se aplica a materias primas de hidrocarburos apropiadas (por ejemplo, nafta) para producir grandes volúmenes de etileno, propileno, derivados de buteno y derivados de butadieno que se requieren como materia prima para la industria de productos químicos orgánicos.

Se puede lograr el craqueo (descomposición térmica) de compuestos orgánicos mediante procesos térmicos (no catalíticos) o mediante procesos catalíticos y proporciona un proceso para convertir fracciones de mayor punto de ebullición en parafinas saturadas y no lineales, naftenos y aromáticos. La concentración de derivados de olefinas en el flujo de producto es muy bajo, por lo que este método es más útil para la preparación de mezclas (como nafta y queroseno) para la producción de combustibles (gasolina y diésel, respectivamente). Los derivados de olefinas se producen más por el craqueo con vapor de fracciones de petróleo, en el proceso se calienta una corriente de hidrocarburos, se mezcla con vapor y, dependiendo de la materia prima, se calienta aún más hasta una temperatura de craqueo del orden de 600 a 650 °C. La conversión de corrientes de hidrocarburos saturados en compuestos insaturados es altamente endotérmica, por lo que el proceso requiere de una gran entrada de energía. El craqueo a alta temperatura también se utiliza para producir gasolina de pirólisis a partir de nafta, gasóleo o corrientes de refinería de alto punto de ebullición.

Problemas ambientales que surgen de los procesos de deshidrogenación incluyen el potencial de corrientes de ventilación ricas en hidrógeno que se producen como resultado del proceso pero que puede emplearse como materia prima de hidrógeno para otros procesos o como combustible de refinería. Cualquier hidrocarburo volátil que se produzca en la purga y los gases de ventilación requerirán recolección y tratamiento y pueden combinarse con producción de energía beneficiosa. Por

otro lado, agua de enfriamiento, vapor de dilución, agua de descoquización y las descargas de agua de antorcha requerirán tratamiento y las corrientes de aguas residuales con un alto contenido de contaminantes requerirán tratamiento previo antes de su aceptación en una planta de degradación biológica.

- **Esterificación**

La esterificación típicamente implica la formación de ésteres a partir de un ácido orgánico y un alcohol. Los ésteres suelen tener un olor característico, agradable y afrutado, que los hace apropiados para un uso extensivo en la industria de fragancias y sabores.

El método más común de esterificación es la reacción de un concentrado alcohol y un ácido carboxílico concentrado con eliminación de agua:

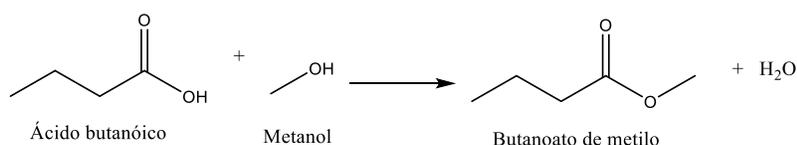


Figura 60 Reacción de esterificación

Sólo ácidos carboxílicos fuertes reaccionan lo suficientemente rápido sin un catalizador, por lo que un ácido mineral fuerte (Por lo general, se debe agregar ácido sulfúrico o cloruro de hidrógeno) para ayudar a la reacción. Los anhídridos de ácido también se utilizan, por ejemplo, en la producción de ftalato de dialquilo. El grupo ácido sulfónico puede unirse químicamente a un material polimérico y con la formación de catión, como el poliestireno sulfonado, permiten la esterificación en condiciones suaves.

El equilibrio de la reacción se puede desplazar hacia el éster aumentando la concentración de uno de los reactivos, generalmente el alcohol. En escala de producción, la mezcla de

reacción se pone a reflujo hasta que toda el agua de condensación se forma, y el agua o el producto éster se elimina continuamente del equilibrio por destilación. Los principales productos de las reacciones de esterificación son tereftalato de dimetilo, acrilato de etilo, acrilato de metilo y acetato de etilo que tienen una importancia económica considerable en muchas aplicaciones (como para fibras, películas, adhesivos y plásticos). Algunos ésteres volátiles se utilizan como materiales aromáticos en perfumes, cosméticos y alimentos.

Además, la reacción de los derivados del alcohol con los derivados del ácido carboxílico no es el único proceso para producir derivados de éster. Los alcoholes reaccionan con Cloruros de acilo (cloruros de ácido) y anhídridos de ácido para producir ésteres:

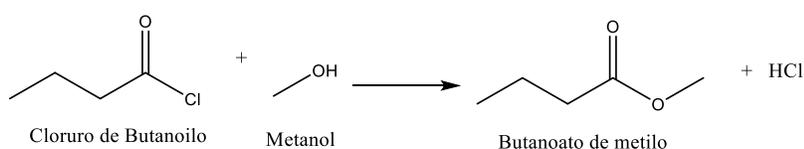


Figura 61 Síntesis de ésteres mediante cloruros ácidos

Las reacciones son irreversibles, simplificando e impulsando el proceso hasta su finalización. Dado que los cloruros de acilo y los anhídridos de ácido también reaccionan con el agua, se prefieren condiciones anhidras. La acilación análoga de derivados de amina para producir derivados de amida es menos sensible porque las aminas son nucleófilos más fuertes y reaccionan más rápidamente que el agua. Finalmente, reaccionan el etileno, el ácido acético y el oxígeno (en presencia de catalizadores a base de paladio) para producir acetato de vinilo:

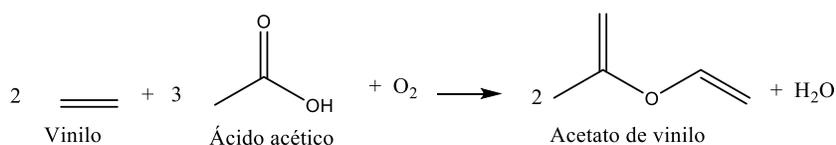


Figura 62 Síntesis del acetato de vinilo

Las rutas directas (como la reacción alcohol-ácido) a este mismo éster no son posibles porque el alcohol vinílico ($\text{CH}_2=\text{CHOH}$) es inestable y tiene propensión en condiciones normales (temperatura y presión ambiente) a convertirse en acetaldehído (CH_3CHO).

Los problemas ambientales relacionados con el proceso de esterificación se relacionan con el solvente el vapor que puede recogerse y tratarse (por ejemplo, mediante incineración o adsorción). La generación de efluentes acuosos no es extensiva ya que el agua es el único subproducto de la reacción de esterificación. Además, la elección del sólido, las resinas de intercambio iónico a base de polímeros para el tratamiento de aguas residuales evitan la necesidad para amplias instalaciones de tratamiento. La mayoría de los ésteres poseen baja toxicidad porque se hidrolizan fácilmente al contacto con agua o aire húmedo, por lo que las propiedades de los componentes ácido y alcohol son más importantes. Además, los flujos de desechos se pueden reducir recuperando (y reutilizando) cualquier materia orgánica, disolventes, agua y componentes alcohólicos. Cualquier desperdicio de aguas residuales.

El tratamiento puede ser incinerado (residuos de alto punto de ebullición) o recuperado por destilación para su reutilización (residuos de bajo punto de ebullición).

- **Hidrólisis**

La hidrólisis implica la reacción de una sustancia química orgánica con agua para formar dos o más sustancias nuevas y generalmente significa la ruptura de enlaces químicos por la adición de agua. De hecho, la hidrólisis puede ser lo contrario de una condensación en la que dos moléculas se unen formando una más grande y expulsan agua. Así, la hidrólisis añade agua para descomponerse, mientras que la condensación se acumula al eliminar el agua. La hidratación es la variante del proceso donde el agua reacciona con un compuesto sin provocar su

descomposición. Estas rutas son utilizadas en la fabricación de alcoholes (p. ej., etanol), glicoles (p. ej., etilenglicol, propilenglicol) y óxido de propileno.

Las reacciones y procesos de hidrólisis catalizados por ácido-base son muy comunes: un ejemplo es la hidrólisis de derivados de éster o derivados de amida. La reacción de hidrólisis ocurre cuando el reactivo nucleofílico (un núcleo que busca agente, por ejemplo, agua o ion hidroxilo) ataca el carbono del grupo carbonilo del éster o la amida usando un medio base acuoso ya que los iones hidroxilo son mejores nucleófilos que las moléculas polares como el agua. En medio ácido, el grupo carbonilo se protona, lo que conduce a una formación nucleofílica mucho más fácil. Los productos de ambas hidrólisis son derivados de ácidos carboxílicos. El ejemplo más antiguo practicado comercialmente de hidrólisis de ésteres es la saponificación. Reacción que da como resultado la formación de jabón e implica la hidrólisis de un triglicérido (grasa) con una base acuosa como el hidróxido de sodio

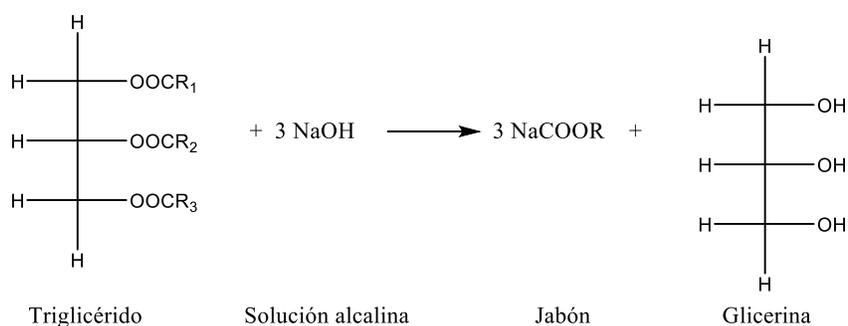


Figura 63 Reacción de Saponificación

- **Nitración**

El proceso de nitración es una clase general de proceso químico para la introducción de un grupo nitro (-NO₂) en un compuesto químico orgánico. El término también es aplicado (algo incorrectamente) a los diferentes procesos de formación de ésteres de nitrato entre los derivados del alcohol y el ácido

nítrico, como ocurre en la síntesis de nitroglicerina. La diferencia entre la estructura resultante de los compuestos nitro y nitratos es que el átomo de nitrógeno en los compuestos nitro está directamente unido a un átomo que no es oxígeno, típicamente carbono u otro átomo de nitrógeno, mientras que en los nitratos, también llamados nitratos orgánicos, el nitrógeno está unido a un átomo de oxígeno que a su vez suele estar unido a un átomo de carbono.

Hay muchas industrias importantes que aplican la nitración en sentido estricto; los más importantes por volumen son para la producción de compuestos nitroaromáticos como el nitrobenzeno. Las reacciones se utilizan especialmente para la producción de explosivos, por ejemplo la conversión de tolueno en TNT (2,4,6-trinitrotolueno).

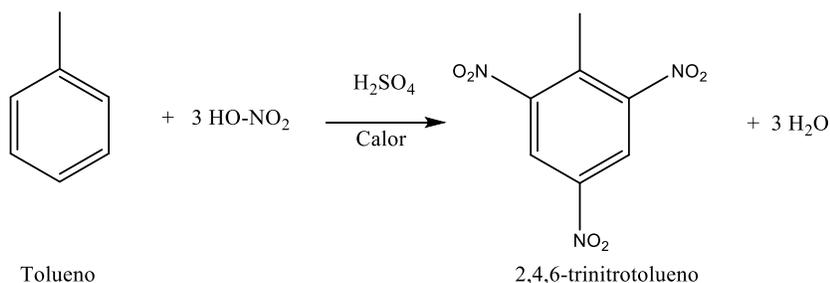


Figura 64 Síntesis de TNT

Sin embargo, dejando a un lado los explosivos, los compuestos nitro son de gran importancia como intermediarios y precursores químicos.

Por tanto, la nitración implica la sustitución de un átomo de hidrógeno (en un medio orgánico) con uno o más grupos nitro (-NO₂). Los subproductos pueden ser inevitable debido a las altas temperaturas de reacción y a la alta oxidación, aunque muchas reacciones de nitración se llevan a cabo a baja temperatura por razones de seguridad. La reacción de nitración se puede llevar a cabo con compuestos alifáticos (para producir derivados de

nitroparafina) pero la nitración de aromáticos es más importante comercialmente (para producir explosivos y propulsores como derivados de nitrobenzono y nitrotolueno). Esto se logra con ácido nítrico (HNO_3) o, en el caso de reacciones de nitración aromática, una mezcla de compuestos nítricos y ácidos sulfúricos.

Cuestiones ambientales de los procesos de nitración (excluyendo las más obvias propiedades potencialmente explosivas) se relacionan con la aparición de vapores ácidos (en gran parte ácido nítrico o sulfúrico) de la reacción y el enfriamiento rápido, así como cualquier material que no haya reaccionado.

El agente nitrante que surge del uso de un exceso del agente para completar la reacción de nitración. También existe la posibilidad de que se emitan COV así como otras corrientes de gas que contienen los diversos óxidos de nitrógeno. En términos de contaminantes del agua, la nitración de materias primas aromáticas puede producir grandes cantidades de residuos de ácido mixto que requieren neutralización y eliminación, o recuperación (por ejemplo, por destilación) y reutilización. Los productos y subproductos del proceso de nitración a menudo se biodegradan lentamente (si es que es biodegradable) y es tóxico, por lo que el tratamiento adicional de los productos de desecho (como la extracción o la incineración de desechos acuosos).

- **Oxidación**

El término oxidación incluye muchos procesos diferentes, pero en general describe la adición de uno o más átomos de oxígeno a un compuesto. Los procesos de oxidación son procesos que utilizan catalizadores para mejorar la reacción de oxidación: los catalizadores de oxidación típicos son óxidos metálicos y carboxilatos metálicos.

La catálisis del proceso de oxidación se produce mediante el uso de ambas catálisis heterogéneos y catálisis homogénea. En los procesos heterogéneos, se hacen pasar sustrato gaseoso y

oxígeno (o aire) a través de catalizadores sólidos. Los catalizadores típicos son platino, óxidos de hierro con actividad redox, vanadio y molibdeno. En muchos casos, los catalizadores se modifican con la elección adecuada (de una lista extensa) de aditivos o promotores que mejoran la velocidad de reacción o la selectividad del producto.

Los catalizadores homogéneos importantes para la oxidación de compuestos orgánicos son las sales de ácidos carboxílicos de cobalto, hierro y manganeso. Conferir buena solubilidad en el disolvente orgánico, estos catalizadores a menudo se derivan de ácidos nafténicos y ácido etilhexanoico que son altamente lipófilos. Estos catalizadores inician reacciones en cadena radicales que producen radicales orgánicos que se combinan con oxígeno para dar intermedios de hidroperóxido. Generalmente, la selectividad de la oxidación está determinada por la energía del enlace; por ejemplo, el carbono bencílico. Los enlaces de hidrógeno (C₆H₅CH-H) son reemplazados por oxígeno más rápido que los enlaces aromáticos carbono-hidrógeno (C₆H₅-H).

Las aplicaciones comunes del proceso implican la oxidación de compuestos orgánicos por el oxígeno del aire. Estos procesos se llevan a cabo a gran escala para la remediación de contaminantes, la producción de sustancias químicas valiosas y la producción de energía. Una oxidación catalítica ilustrativa es la conversión de metanol en el compuesto más valioso formaldehído (metanal) utilizando oxígeno del aire:

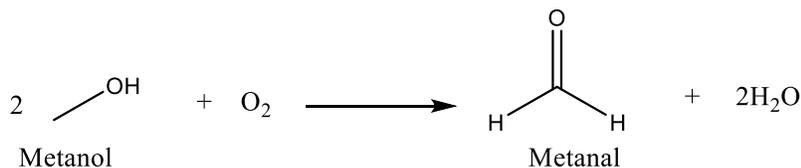


Figura 65 Síntesis del metanal

A continuación se describen algunos productos químicos que se forman durante el proceso de refino:

- **Agua amarga:** Este tipo de agua se caracteriza por tener la presencia de amoníaco, ácido sulfhídrico, fenoles. Se produce en procesos que requieran el uso de catalizadores y en procesos de adición de agua para la absorción de amoníaco y ácido sulfhídrico.
- **Dióxido de Azufre:** Se suele obtener como Dióxido de Azufre al someter a combustión a los combustibles con alto contenido de azufre. Se elimina con lavados mediante el uso de agua.
- **Ácido sulfhídrico:** Se forma por la descomposición de compuestos con azufre inestable, se caracteriza por ser un gas extremadamente tóxico, inflamable e incoloro, con un olor característico de huevos podridos. A pesar de esto se necesita de detectores especiales para alertar posibles fugas.
- **Óxidos de nitrógeno:** Se forman en el gas de chimenea el cual reacciona con oxígeno para formar dióxido de nitrógeno. El óxido de nitrógeno no se elimina utilizando agua.

Así mismo, se detallará algunos productos obtenidos durante la refinación del petróleo:

- **Gas de refinería:** Es una mezcla de hidrocarburos metano CH_4 y etano C_2H_6 los cuales se presentan como gases a temperatura ambiente. Se caracteriza por ser un gas no condensable. Generalmente se utiliza en las mismas refinerías como combustible de hornos, también forman parte de las bombonas de gas de uso doméstico.
- **Gas Licuado de petróleo (GLP):** Es una mezcla de propano C_3H_8 y butano C_4H_{10} , presentan puntos de ebullición de 74°C hasta 112°C , es incoloro. Estos hidrocarburos se comprimen para ser manejados como líquidos y forman parte de las bombonas de cocina.
- **Gasolina:** Es el resultado de una mezcla de distintos componentes que se obtienen en el proceso de refino. Las características de esta mezcla están en función de obtener el máximo rendimiento en los motores de explosión y en limitar el

nivel de contaminantes que se producen durante su combustión. Estas mezclas están constituidas por moléculas cuyo número de átomos de carbono están entre 4 y 11, los cuales destilan entre los 25 °C y los 220 °C se encuentran además: n-parafinas, isoparafinas, aromáticos, naftenos y hasta un 30 % de olefinas. Tiene también un contenido muy bajo, del orden de las partes por millón, de azufre y nitrógeno.

Una característica en las gasolinas es el **Índice de Octano** el cual mide la capacidad de una gasolina de soportar elevadas presiones y temperaturas dentro del cilindro del motor, sin que produzca una detonación espontánea. El método para su cálculo se basa en la cuantificación sobre la tendencia a la detonación del combustible en un motor mono cilíndrico en ciertas condiciones determinadas y la comparación de dicha tendencia con compuestos de comportamiento antidetonante ya establecidos como referencia. Se toma como referencia al heptano (número de octano 0 y al 2,2,4-trimetilpentano número de octano 100).

El componente principal de las gasolinas es la denominada Nafta Reformada la cual se obtiene en el proceso de Reforming de la Nafta Pesada en la de destilación directa de crudo.

La masa de combustible inyectada en la cámara de combustión en el motor depende de la densidad, porque pueden producirse variaciones de la relación entre el aire y combustible que deben ser reguladas por un sistema de control adecuado, es un factor importante en las transacciones comerciales se debe realizar la corrección necesaria de volumen en función de la temperatura en que se encuentra el producto a vender, normalmente a ambiente. La especificación de densidad se sitúa entre un mínimo de 0,72 kg/m³ y un máximo de 0,775 kg/m³.

Hoy en día el contenido en aromáticos en una gasolina se ha venido reduciendo en las especificaciones a lo largo de los últimos años, en la actualidad se permite un máximo de 35 % volumen.

- **Gasoil o Diesel:** Es una mezcla de distintos componentes obtenidos en procesos de refinación, encontrándose parafinas y naftenos. El intervalo de ebullición está comprendido entre los 160-360°C. En los motores a Diesel, la combustión se produce por autoinflamación del combustible en las condiciones de presión y temperatura que se producen en la cámara de combustión. Se conoce como “tiempo de retraso” para un combustible en un motor al tiempo que transcurre entre la inyección del combustible y la autoinflamación de este. Cuanta mayor autoinflamación menor tiempo de retraso.

En cuanto a la densidad los valores son similares a los valores para la gasolina, aunque es más significativa debido a su influencia en la regulación de los motores. La especificación exige un valor mínimo de densidad para el gasóleo de 0,820 kg/m³, la densidad máxima está limitada a 0,845 kg/m³.

La volatilidad de un gasoil tiene gran influencia en el rendimiento de los motores diésel. Las principales diferencias con la gasolina se representan en la tabla 4:

Tabla 9 Diferencias entre la gasolina y el diésel

Propiedades	Gasolina	Diésel
API	50-75	25-35
Rango de destilación	30-205	180-370
Número de Carbonos	04-10	12-30

- **Queroseno:** Presenta una mezcla de hidrocarburos: parafinas lineales, iso-parafinas, naftalenos, alquilbencenos y olefinas, poseen puntos de ebullición de 160° C a 288 ° C un líquido transparente en ocasiones se presenta con ligera coloración amarillenta con una densidad intermedia entre la gasolina y el diésel, presenta entre 9 a 17 Carbonos en su estructura, se utiliza como combustible de aviación. Generalmente se utiliza para calefacción, alumbrado.

- **Combustibles para motores:** Es un destilado intermedio del queroseno con un punto de ebullición de 191° C a 274 ° C.
- **Combustibles residuales:** Son combustibles utilizados por barcos e instalaciones, poseen puntos de ebullición superiores a 121° C.

Los productos industriales que se derivan a partir del petróleo son:

- **Gasolina Blanca:** También conocida como Solvente Parafínico, es utilizada para motores de inyección interna. Además, es utilizada en actividades de limpieza y desengrasado, actúa como diluyente en pinturas, breas y alquitranes.
- **Xileno Industrial:** Es un derivado del petróleo obtenido mediante destilación fraccionada, completamente insoluble en agua pero soluble en algunos compuestos orgánicos como éteres (éter dietílico), tetracloruro de carbono. Es una mezcla de dimetilbenceno en posiciones orto, meta y para. Poseen un olor similar al tolueno. Además, son los principales precursores para la obtención del ácido ftálico.

Los productos especiales que derivan de la refinación del Petróleo son:

- **Cera:** Se utiliza como revestimiento de alimentos para conservar sus propiedades organolépticas. Se presentan como sólidos a temperatura ambiente. No presenta ningún riesgo al contacto con la piel.
- **Asfalto:** Generalmente se utiliza para pavimentar carreteras al igual que en la elaboración de tejas ya que es inerte a las condiciones meteorológicas.
- **Coque:** Se utilizan como pastillas para encendido.

En toda la refinería existe procedimientos operativos, métodos de trabajo seguros y prendas, equipos de protección personal. La exposición directa con el crudo es mínima ya que la mayoría de los procesos de la refinería son continuos y las corrientes de

proceso están confinadas en recipientes y tuberías cerradas. A pesar de que las operaciones de la refinería son procesos cerrados, el riesgo de incendio existe, pues si se produce una fuga o emanación de líquido, vapor o gas de hidrocarburos.

REFERENCIAS

1. author//author/kate-qualmann, author//author/kate-qualmann. ACS Publications Chemistry Blog. 2019 [citado 1 de octubre de 2023]. Excellence in Industrial Organic Synthesis: Celebrating the Past, Looking to the Future. Disponible en: <https://axial.acs.org/organic-chemistry/excellence-in-industrial-organic-synthesis-celebrating-the-past-looking-to-the-future>
2. Excellence in Industrial Organic Synthesis 2019: The Past, Present, and Future [Internet]. 2019 [citado 1 de octubre de 2023]. Disponible en: <https://pubs.acs.org/doi/epdf/10.1021/acs.joc.9b00847>
3. NobelPrize.org [Internet]. [citado 1 de octubre de 2023]. The Nobel Prize in Chemistry 1931. Disponible en: <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/1931/bosch/biographical/>
4. Langmuir I. THE ARRANGEMENT OF ELECTRONS IN ATOMS AND MOLECULES. *J Am Chem Soc.* junio de 1919;41(6):868-934.
5. Pedersen CJ. Cyclic polyethers and their complexes with metal salts. *J Am Chem Soc.* diciembre de 1967;89(26):7017-36.
6. Daubignard J, Lutz M, Detz RJ, de Bruin B, Reek JNH. Origin of the Selectivity and Activity in the Rhodium-Catalyzed Asymmetric Hydrogenation Using Supramolecular Ligands. *ACS Catal.* 2 de agosto de 2019;9(8):7535-47.
7. Schrock RR. Multiple Metal–Carbon Bonds for Catalytic Metathesis Reactions (Nobel Lecture). *Angewandte Chemie International Edition.* 2006;45(23):3748-59.

8. Heck RF. Arylation, methylation, and carboxyalkylation of olefins by Group VIII metal derivatives. *J Am Chem Soc.* septiembre de 1968;90(20):5518-26.
9. Homburg E. Química e industria, 1500-2000 [Internet]. 2008. Disponible en: file:///C:/Users/LINDA/Downloads/Dialnet-QuimicaEIndustria15002000-2931439.pdf
10. Eskenazi B, Mocarelli P, Warner M, Needham L, Patterson DG, Samuels S, et al. Relationship of Serum TCDD Concentrations and Age at Exposure of Female Residents of Seveso, Italy. *Environmental Health Perspectives.* 2004;112(1):22-7.
11. Broughton E. The Bhopal disaster and its aftermath: a review. *Environmental Health.* 10 de mayo de 2005;4(1):6.
12. Eskenazi B, Chevrier J, Rosas LG, Anderson HA, Bornman MS, Bouwman H, et al. The Pine River statement: human health consequences of DDT use. *Environ Health Perspect.* septiembre de 2009;117(9):1359-67.
13. Stratospheric sink for chlorofluoromethanes: chlorine atom-catalysed destruction of ozone | *Nature* [Internet]. [citado 3 de octubre de 2023]. Disponible en: <https://www.nature.com/articles/249810a0>
14. Thalidomide: The Tragedy of Birth Defects and the Effective Treatment of Disease | *Toxicological Sciences* | Oxford Academic [Internet]. [citado 3 de octubre de 2023]. Disponible en: <https://academic.oup.com/toxsci/article/122/1/1/1672454>
15. Náráy-Szabó G, Mika LT. Conservative evolution and industrial metabolism in Green Chemistry. *Green Chem.* 21 de mayo de 2018;20(10):2171-91.

16. Química Orgánica Industrial [Internet]. [citado 3 de octubre de 2023]. Disponible en: <https://www.eii.uva.es/organica/qoi/tema-01.php>
17. La Vanguardia [Internet]. 2017 [citado 3 de octubre de 2023]. ¿Cómo se convirtió el petróleo en el combustible de la modernidad? Disponible en: <https://www.lavanguardia.com/historiayvida/historia-contemporanea/20171211/47313522972/como-se-convirtio-el-petroleo-en-el-combustible-de-la-modernidad.html>
18. Historia del Ford Model T y de la cadena de montaje [Internet]. [citado 3 de octubre de 2023]. Disponible en: <https://www.motorpasion.com/industria/100-anos-de-ford-en-cadena-o-cuando-ford-reinvento-la-industria>
19. American Chemistry Council [Internet]. [citado 3 de octubre de 2023]. Plastics. Disponible en: <https://www.americanchemistry.com/chemistry-in-america/chemistry-in-everyday-products/plastics>
20. OPEC: Home [Internet]. [citado 3 de octubre de 2023]. Disponible en: https://www.opec.org/opec_web/en/
21. Society of Petroleum Engineers (SPE) | Oil & Gas Membership Association [Internet]. [citado 3 de octubre de 2023]. Disponible en: <https://www.spe.org/en/>
22. Land Energy [Internet]. [citado 3 de octubre de 2023]. Home. Disponible en: <https://www.land-energy.com/>
23. Leaders in Biodegradable Plastic Technology | Bio-Tec Environmental [Internet]. [citado 3 de octubre de 2023]. Disponible en: https://goecopure.com/?gclid=CjwKCAjw9-6oBhBaEiwAHv1QvOmo2IB-bb9zBnBh5LvHXXCZU4395Lx16-fEE5EsHJ-mSzTirfrQLxoCyusQAvD_BwE

24. Trost BM. The atom economy--a search for synthetic efficiency. *Science*. 6 de diciembre de 1991;254(5037):1471-7.
25. Mariscal R, Maireles-Torres P, Ojeda M, Sádaba I, Granados ML. Furfural: a renewable and versatile platform molecule for the synthesis of chemicals and fuels. *Energy Environ Sci*. 13 de abril de 2016;9(4):1144-89.
26. Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials , R. J. Lewis Sr. Wiley-Interscience, Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, 2004, 2407.
27. Wilson KL, Kennedy AR, Murray J, Greatrex B, Jamieson C, Watson AJB. Scope and limitations of a DMF bio-alternative within Sonogashira cross-coupling and Cacchi-type annulation. *Beilstein J Org Chem*. 8 de septiembre de 2016;12:2005-11.
28. Oligomerization of Ethylene to α -Olefins: Discovery and Development of the Shell Higher Olefin Process (SHOP) - Keim - 2013 - *Angewandte Chemie International Edition - Wiley Online Library* [Internet]. [citado 3 de octubre de 2023]. Disponible en: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/anie.201305308>
29. van Putten RJ, van der Waal JC, de Jong E, Rasrendra CB, Heeres HJ, de Vries JG. Hydroxymethylfurfural, a versatile platform chemical made from renewable resources. *Chem Rev*. 13 de marzo de 2013;113(3):1499-597.
30. Delidovich I, Hausoul PJC, Deng L, Pfützenreuter R, Rose M, Palkovits R. Alternative Monomers Based on Lignocellulose and Their Use for Polymer Production. *Chem Rev*. 10 de febrero de 2016;116(3):1540-99.
31. Angelucci H. Mercado internacional de l petróleo [Internet]. 2008. Disponible en: chrome-extension://efaidnbnmnnibpcajpcglcfindmkaj/http://reposit

orio.ub.edu.ar/bitstream/handle/123456789/87/209_monferrer.pdf?sequence=1&isAllowed=y

32. Fundación Ramón Areces. Energy security indices in Europe [Internet]. 2011. Disponible en: Delgado, B.M., 2011. Energy Security Indices in Europe.
33. Pumar ARB Ricardo Santiago Netto, Osvaldo Daniel. Fisicanet. 2000 [citado 5 de octubre de 2023]. Propiedades físicas y químicas del gas natural. Disponible en: <https://www.fisicanet.com.ar/energias/gases/en01-gas-natural-b.php>
34. IEA [Internet]. [citado 5 de octubre de 2023]. IEA – International Energy Agency. Disponible en: <https://www.iea.org>
35. Kraus S R. Petróleo y Gas Natural. Enciclopedia de salud y seguridad en el trabajo.
36. Matar S, Hatch LF. Chapter Seven - Chemicals Based on Ethylene. En: Matar S, Hatch LF, editores. Chemistry of Petrochemical Processes (Second Edition) [Internet]. Woburn: Gulf Professional Publishing; 2001 [citado 14 de diciembre de 2023]. p. 188-212. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780884153153500080>
37. Performances of Guerbet Alcohol Ethoxylates for Surfactant–Polymer Flooding Free of Alkali | Energy & Fuels [Internet]. [citado 14 de diciembre de 2023]. Disponible en: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.energyfuels.7b01843>
38. Tesser R, Santacesaria E, Di Serio M, Di Nuzzi G, Fiandra V. Kinetics of Glycerol Chlorination with Hydrochloric Acid: A New Route to α,γ -Dichlorohydrin. Ind Eng Chem Res. 1 de septiembre de 2007;46(20):6456-65.

39. Biobased Thermosetting Epoxy: Present and Future | Chemical Reviews [Internet]. [citado 18 de diciembre de 2023]. Disponible en: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/cr3001274>

40. Assessment UENC for E. Coke promoters improve acrolein selectivity in the gas-phase dehydration of glycerol to acrolein [Internet]. 2009 [citado 20 de diciembre de 2023]. Disponible en:
https://hero.epa.gov/hero/index.cfm/reference/details/reference_id/4095518



Ing. Linda Flores Fiallos. MsC, PhD(c)

Ingeniera Química
Máster Universitario en Química Orgánica
Doctorado en Química – Universidad de Granada. España
Docente investigador del grupo de investigación GIADE
Grupo de Investigación de Ambiente y Desarrollo
Docente Ocasional – Escuela Superior Politécnica de
Chimborazo



Ing. Juan José Flores Fiallos. MSc.

Ingeniero Mecánico
Magister en Ciencias de la Ingeniería mención Ingeniería
Mecánica
Máster Universitario en Ingeniería Matemática y Computación
Dirección de Posgrado – Universidad Nacional de Chimbo-
razo



Biof. Nora Tahirí Mejía Cabezas. MSc.

Biofísica
Máster Universitario en Física
Docente investigadora del grupo de investigación "IDEA"
(Investigación y Desarrollo en Agroindustria)
Docente Ocasional – Escuela Superior Politécnica de
Chimborazo

ISBN: 978-9942-33-769-6



compAs
Grupo de capacitación e investigación pedagógica

   @grupocompas.ec
compasacademico@icloud.com