

Más allá de la generación energética y el transporte

Aplicaciones del petróleo y sus derivados en el futuro

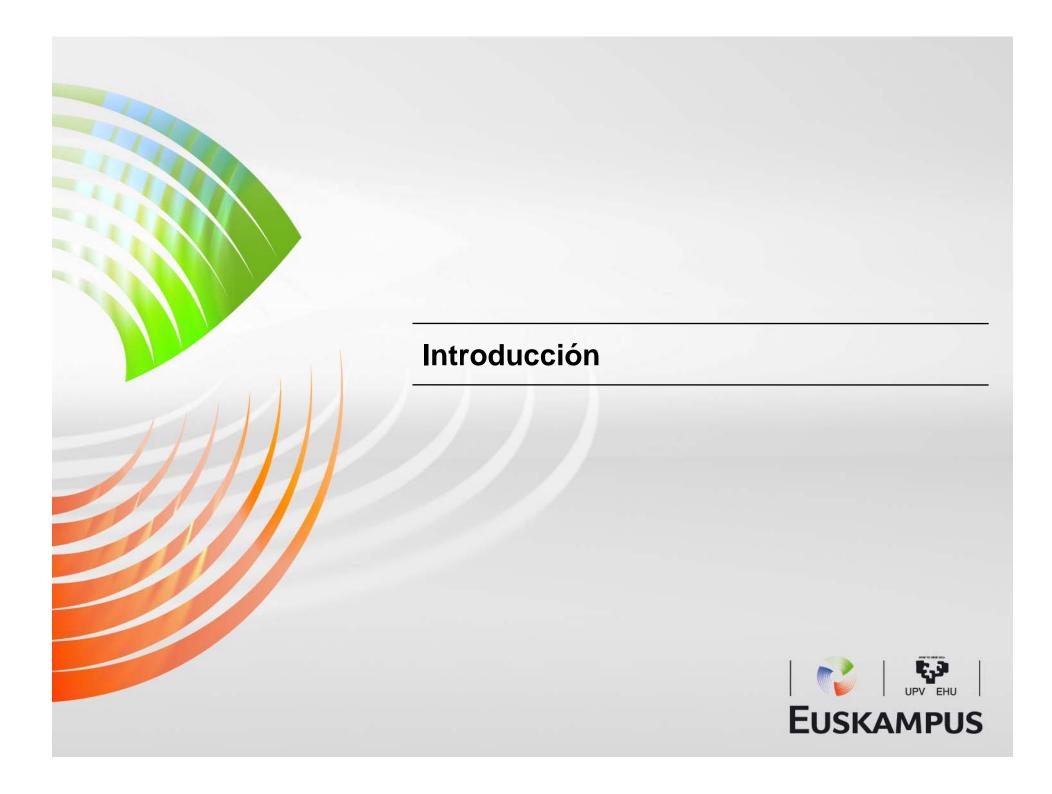
Esther Lete
Uda Ikastaroak / Cursos de Verano
Muskiz 2011



indice

- Cap 1. Introducción
- Cap 2. Materias primas petroquímicas
- Cap 3. Aplicaciones de derivados del petróleo. Materiales
- Cap 4. Aplicaciones de derivados del petróleo. Fármacos





PLÁSTICOS

PINTURAS

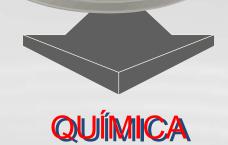
FIBRAS TEXTILES

MEDICAMENTOS

COSMÉTICOS

PESTICIDAS

PETRÓLEO







- Química Biológica
- Química de los Materiales
- Química Computacional
- Investigación Básica



PULL

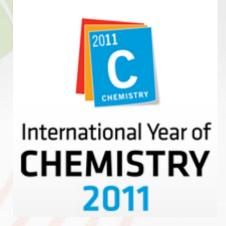
- Seguridad Nacional
- Salud
- Medio ambiente
- Energía

Curiosidad



Utilidad







Celebrando la Química "Química—nuestra vida, nuestro futuro"

Esta declaración es una celebración a nivel mundial de los logros de la química y sus contribuciones al bienestar de la humanidad.

Objetivo mostrar al público en general la contribución de la química en la mejora de la sostenibilidad de nuestro modo de vida, resolviendo problemas globales y esenciales de la Humanidad, como la alimentación, el agua, la salud, la energía o el transporte.

2011 coincide con el centenario del Premio Nobel otorgado a Marie Curie –Marja Sklodowska- por sus aportaciones a la Química

Año Internacional de las Mujeres Científicas

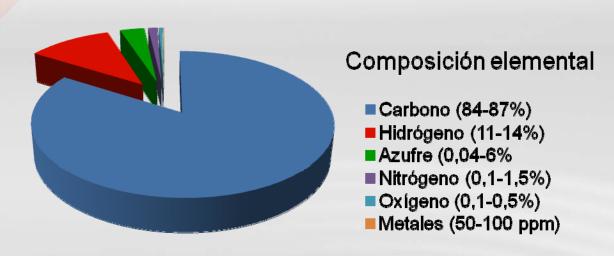




¿Qué es el petróleo?

Líquido natural oleaginoso e inflamable, constituido por una mezcla de hidrocarburos, que se extrae de lechos geológicos continentales o marítimos. Mediante diversas operaciones de destilación y refino se obtienen de él distintos productos utilizables con fines energéticos o industriales, como la gasolina, la nafta, el queroseno, el gasóleo, etc.

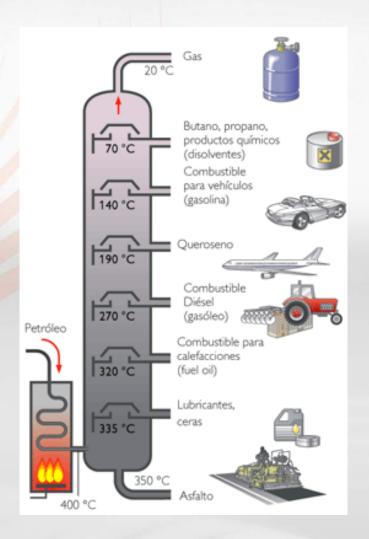
(Definición RAE)





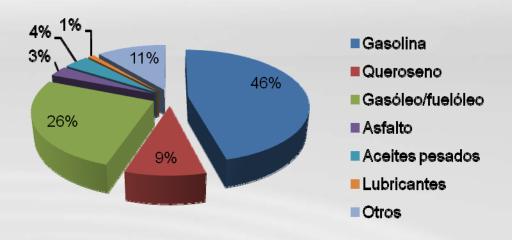


El refino del petróleo



El petróleo crudo es convertido en una gran variedad de productos con distintas aplicaciones.

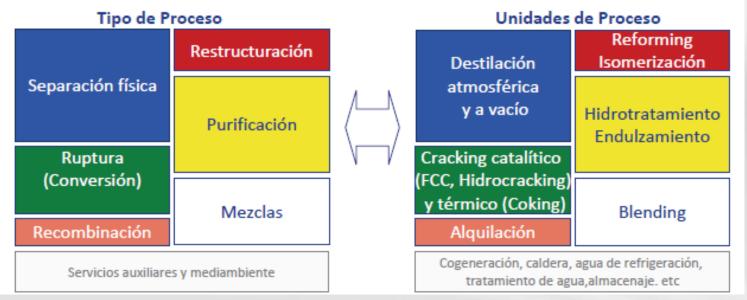
El primer paso es el **fraccionamiento**, en el que se separan los distintos componentes del petróleo por destilación.





Procesos de refino

- ➤El porcentaje de cada fracción obtenida por destilación, en general, no corresponde a la demanda. El petróleo crudo contiene mayor porcentaje de fracciones pesadas, que pueden convertirse en fracciones más valiosas mediante procesos de transformación
- ➤ Adicionalmente se requieren procesos de purificación y de calidad para cumplir las especificaciones del mercado







Materias primas derivadas del petróleo

HC saturados

- Metano
- Propano
- Butano

Olefinas

- Etileno
- Propileno
- Butadieno, 1-buteno, 2-buteno

HC aromáticos

- Benceno
- Tolueno
- Xilenos

Gas de síntesis

 Monóxido de carbono e hidrógeno



Materias primas derivadas del petróleo

HC saturados

- Metano
- Propano
- Butano

Hormona vegetal responsable de la maduración de las frutas

Olefinas

- Etileno
- Propileno
- Butadieno, 1-buteno, 2-buteno

HC aromáticos

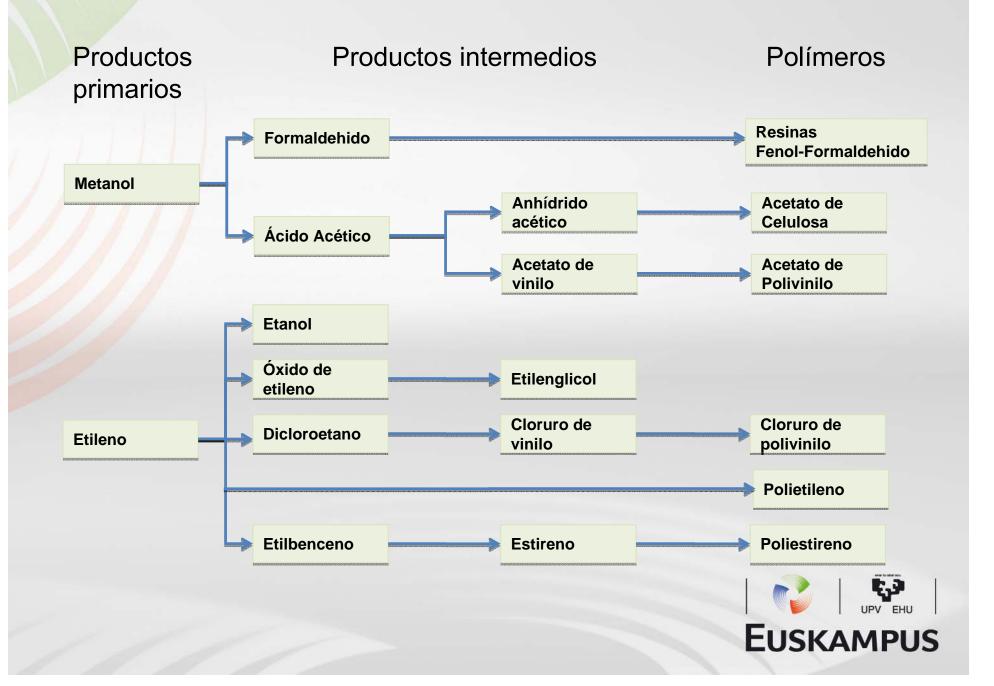
- Benceno
- Tolueno
- Xilenos

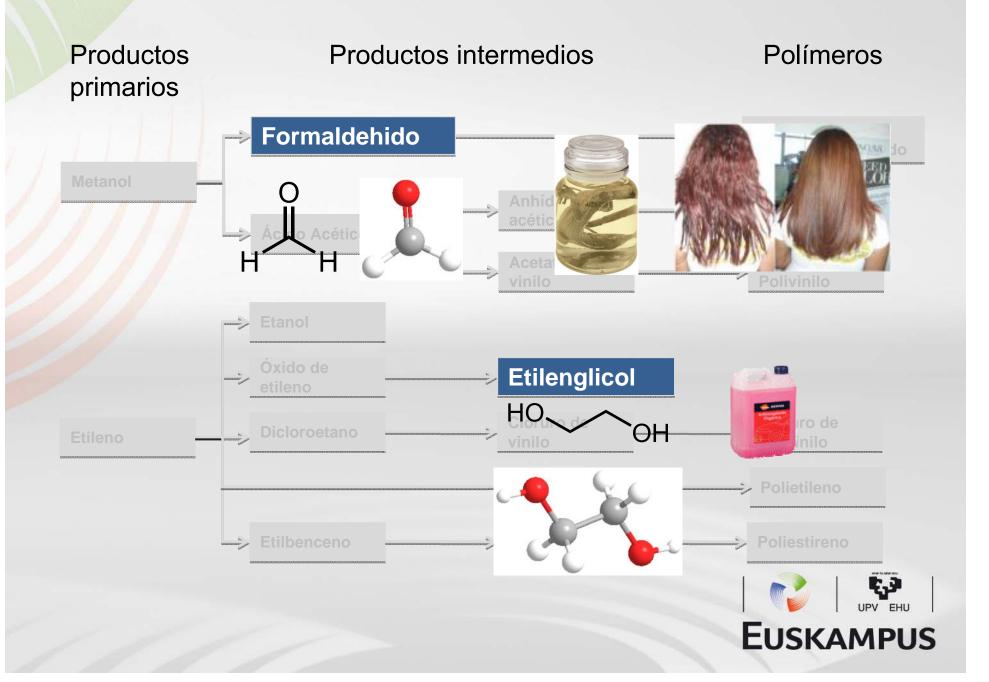
Gas de síntesis

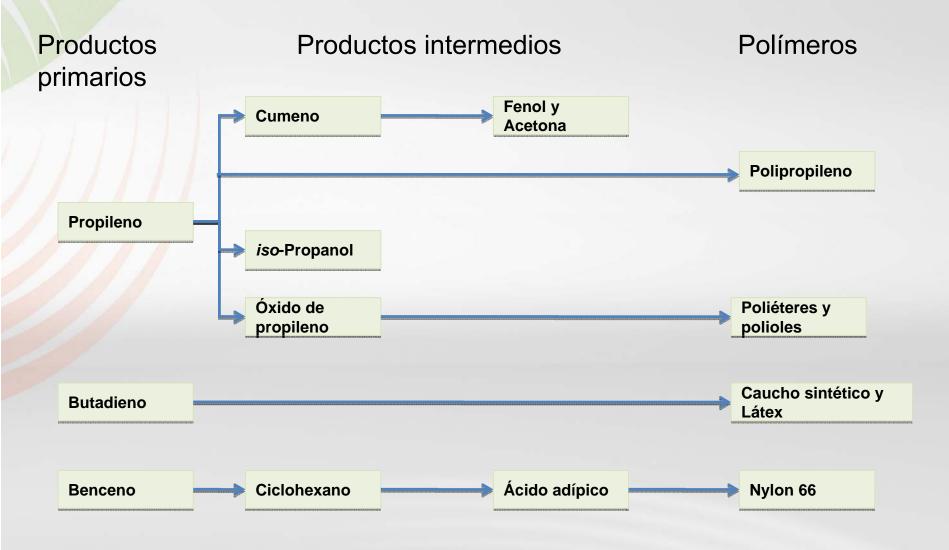
 Monóxido de carbono e hidrógeno



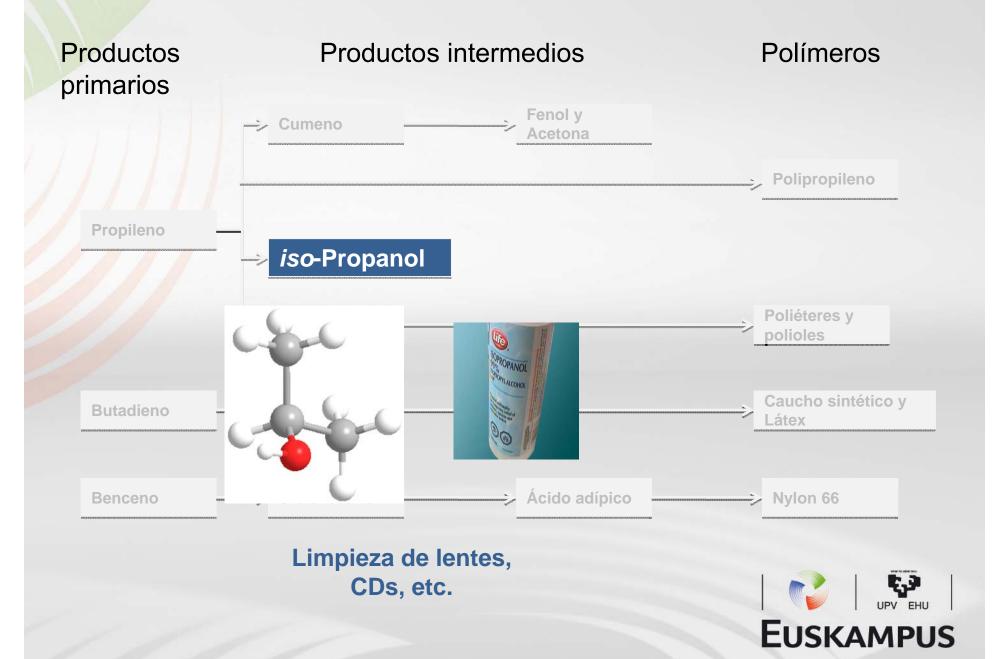


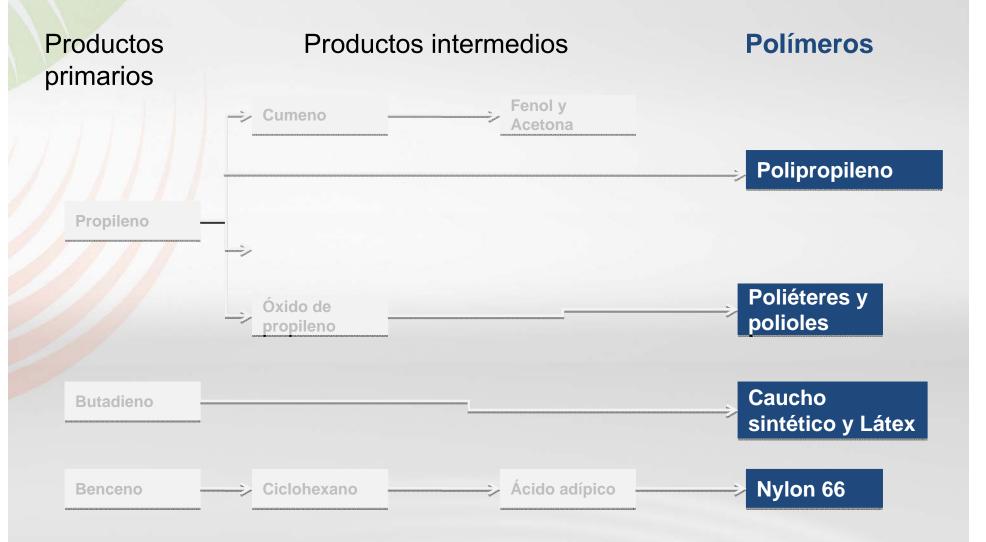








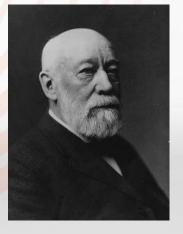




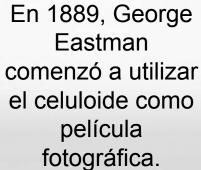


Plásticos, fibras sintéticas, elastómeros, resinas...

Celuloide



John Wesley Hyatt (1860)





"Plásticos", de la palabra griega *plastikos*, que quiere decir moldeable.

Bakelita









Los polímeros Materiales sintéticos versátiles

Un material polímero está formado por macromoléculas, moléculas de relativamente alta masa molecular, cuya estructura consta esencialmente de una múltiple repetición de unidades derivadas, realmente o conceptualmente, de moléculas de masa molecular relativamente baja (definición IUPAC)

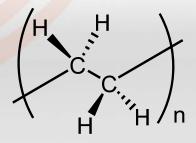
"Polímeros", de las palabras griegas *poly* (muchos) y *meros* (parte o segmento)

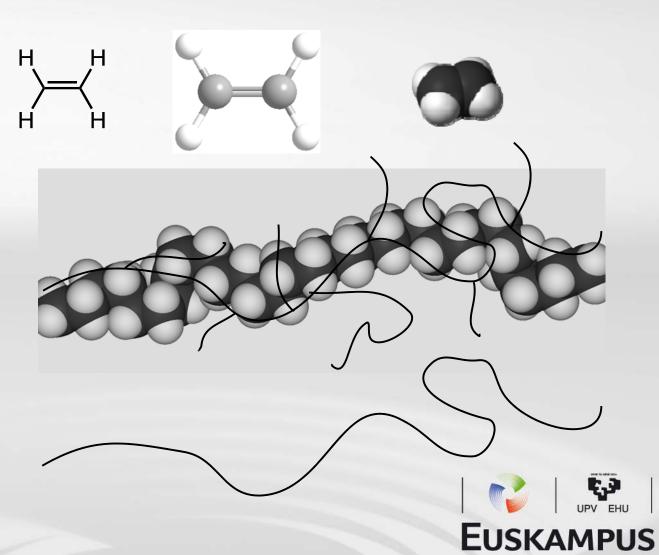


Los polímeros Polietileno

Etileno

Polietileno





Los polímeros Plásticos: polietileno

Polietileno de ultra alto peso molecular



Spectra®, Dyneema ®



Polietileno de baja densidad











EUSKAMPUS

Polietileno de alta densidad











Plásticos: polipropileno

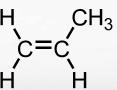
Propileno

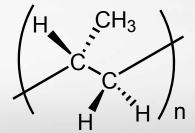
Polipropileno





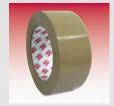
Sobres







Jarra, vasos,...



Cinta adhesiva

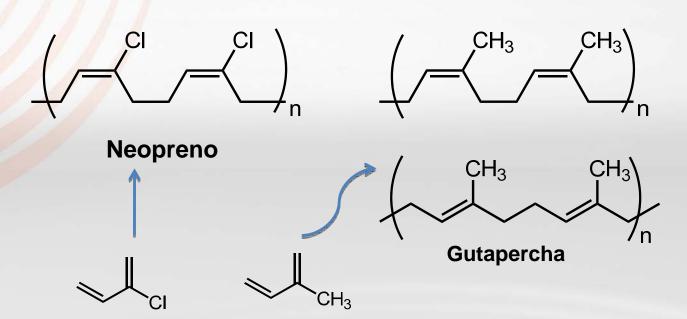


Mobiliario



Elastómeros: caucho natural y sintético

Caucho sintético Policloropreno Caucho natural
Poliisopreno



Otros cauchos sintéticos:

Copolímero estireno-butadieno (SBR), Polibutadieno, Policloropreno, Copolímero etileno- propileno, etc.

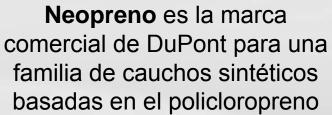


Extracción de látex de un árbol tropical



Elastómeros: caucho sintético















Fibras sintéticas: poliamidas, poliésteres, poliacrilonitrilos,...

Poliamidas



Aramida



Nylon



Spandex o elastane (LYCRA)

Poliésteres







Poliacrilonitrilo



Los plásticos en agricultura

Plásticos rígidos

Polimetacrilato de metilo (PMM)
Policarbonato (PC)
Poliésteres





Plásticos flexibles

Cloruro de polivinilo (PVC)
Polietileno de baja densidad (PE)
Copolímero etileno-acetato de vinilo (EVA)



Los polímeros Plásticos: policarbonatos

















El automóvil del futuro: eXasis





Empresa suiza Rinspeed, diseñado por Frank Rinderknecht, y expertos de la división Bayer MaterialScience.

El exasis es uno de los vehículos más innovadores del mundo

Extraordinariamente ligero, rápido (150 caballos, de 0 a 100 km en 4,8 s), casi libre de emisiones contaminantes, por su motor bicilíndrico de 750 cc que utiliza bioetanol.

Carrocería y piso transparentes de policarbonato Makrolon®, un innovador material capaz de combinar las propiedades de alta resistencia con una excelente protección contra incendios y altas temperaturas.



Materiales inteligentes Los materiales del futuro

Materiales
capaces de
responder de
modo
reversible y
controlado a
un estímulo
físico o
químico
externo
modificando
alguna de sus
propiedades

Materiales con memoria de forma	Materiales electro y magnetoactivos	Materiales foto y cromoactivos
Polímeros	Materiales electro y magnetorreológicos	Fotoactivos electroluminiscentes, fluorescentes, fosforescentes
Aleaciones y ferromagnéticas	Materiales piezoeléctricos	Cromoactivos fotocrómicos, termocrómicos, electrocrómicos
Cerámicas	Materiales electro y magnetorrestrictivos	



Materiales inteligentes Materiales con memoria de forma

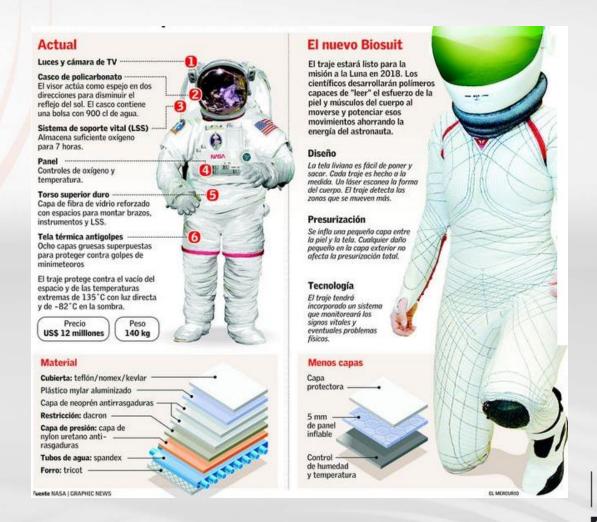


Stents fabricados con materiales con memoria de forma, para abrir arterias. Se deforman cuando son introducidos en el cuerpo con un leve calentamiento a 39 ó 40 °C, agrandándose".



Veriflex, polímero que cuando se calienta por encima de su temperatura de transición, se vuelve elástico y puede ser manipulado para adquirir distintas formas. Cuando se enfría vuleve al estado original.

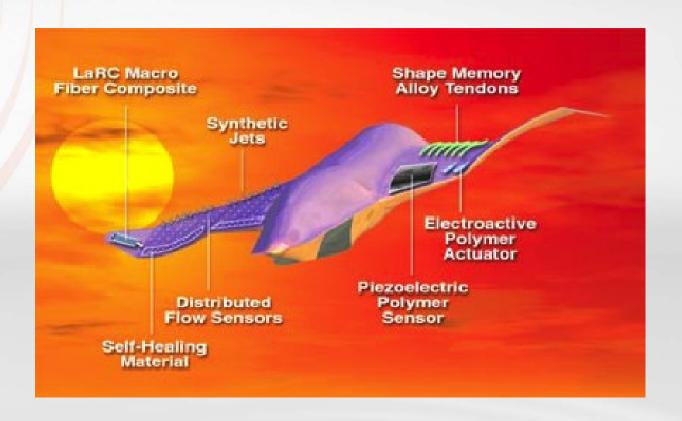
Materiales multifuncionales Los materiales del futuro







Materiales multifuncionales Los materiales del futuro





Programa Proyecto Morphing del Centro de Investigaciones Langley de la NASA

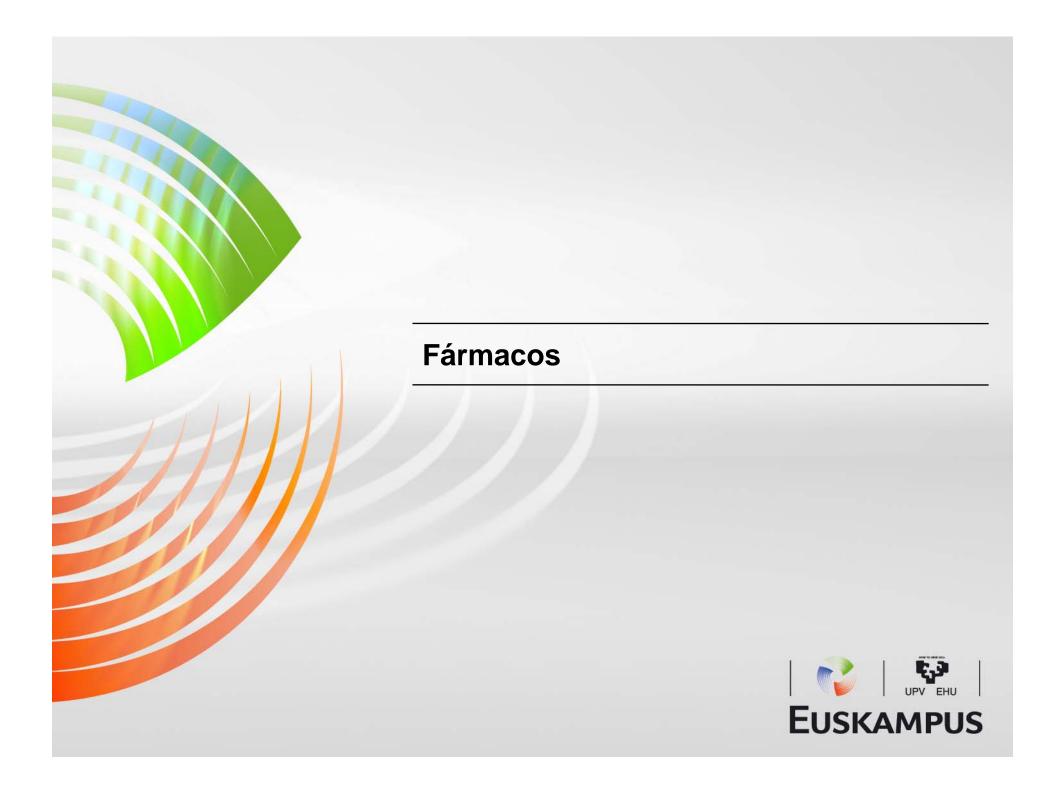


Materiales multifuncionales Los materiales del futuro









Aspirina



Sauce blanco Salix alba

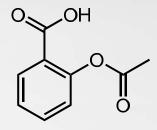
Aislamiento E. Stone (1763)



Reina de los prados Spiraea ulmaria

ácido salicílico

Síntesis H. Kolbe(1859)



ácido acetilsalicílico aspirina Síntesis F. Hoffmann (1898)





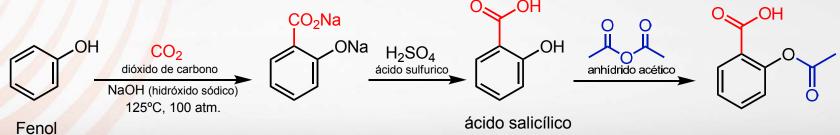
Aspirina

Síntesis del ácido salicílico

H. Kolbe (1859)

Síntesis de la aspirina

F. Hoffmann (1898)



ácido acetilsalicílico aspirina

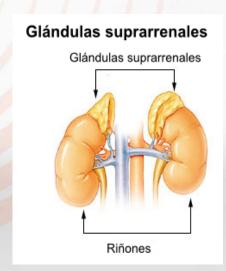


Reina de los prados Spiraea ulmaria

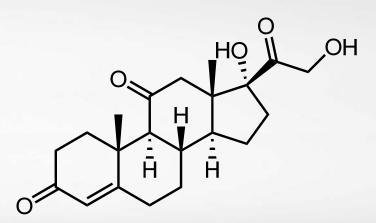




Cortisona



Se extraía de las glándulas suprarrenales de animales, actualmente se sintetiza.



Síntesis Woodward y Robinson (1951)









Hormonas naturales y sintéticas

prednisona

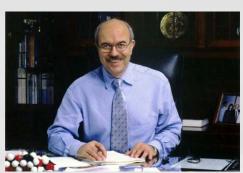
noretindrona, $R = CH_3$ levonorgestrel, $R = CH_2CH_3$

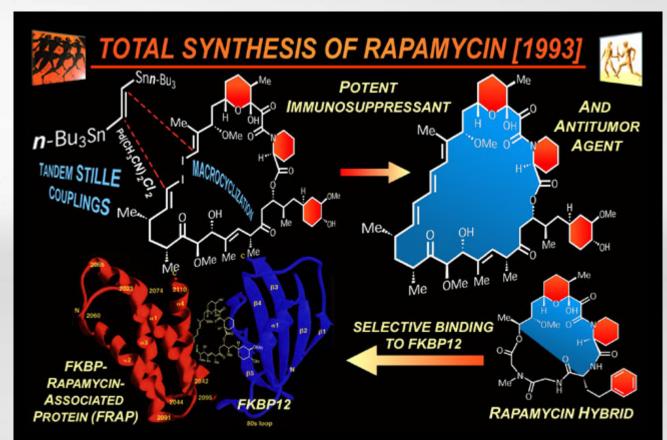
> El control de la fertilidad La píldora anticonceptiva



Rapamicina

K. C. Nicolaou
The Scripps
Research Institute
Department of
Chemistry
University of
California





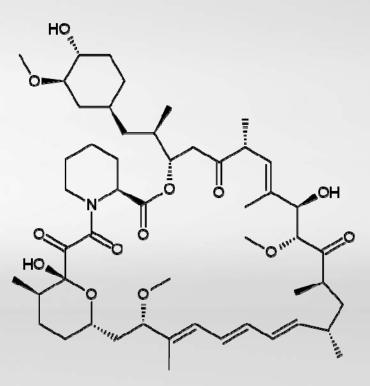


Rapamicina



Cultivo de la bacteria Streptomyces hygroscopycus





- •Potente inmunodepresor
- Propiedades antibióticas y citotóxicas



Rapamicina







Cultivo de la bacteria Streptomyces hygroscopycus

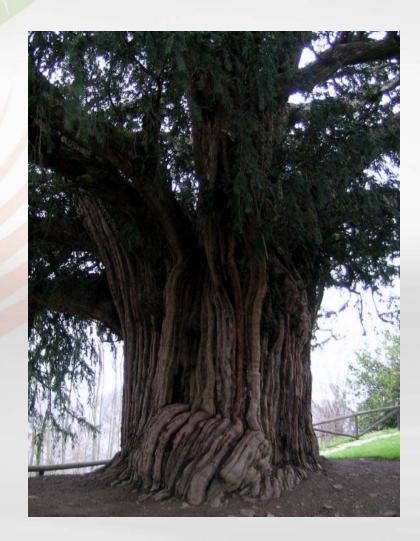




- Potente inmunodepresor
- Propiedades antibióticas y citotóxicas



Taxol



Tejo

Paclitaxel (Taxol®)

Bristol-Myers Squibb



Vancomicina



Cristales de vancomicina

Producida principalmente por fermentación de la bacteria actinomicete Amycolatopsis orientalis (antes Nocardia orientalis)



Nuevos antibióticos



Ecteinascidia turbinata
Tunicata de los
manglares

Actividad antibacteriana prometedora frente

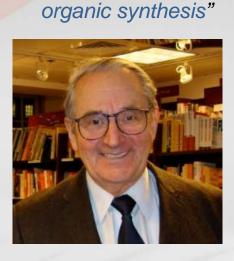
- ➤ Staphylococcus aureus resistentes a meticilina y tetraciclina
- > Enterococcus faecalis resistentes a vancomicina



Yondelis

E. J. Corey
Harvard University
Premio Nobel de Química
(1990)
"for his development of the

theory and methodology of

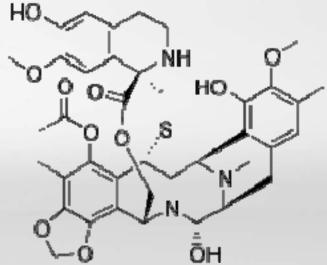




Ecteinascidia turbinata
Tunicata de los
manglares

Yondelis® (Trabectedin)





Tratamiento de sarcoma de tejidos blandos



La Química Sostenible es la utilización de normas conducentes a reducir o eliminar el uso o generación de sustancias peligrosas en el diseño, fabricación y aplicación de productos químicos





La Química Sostenible trata de



Residuos

Materiales

Toxicidad

Riesgo

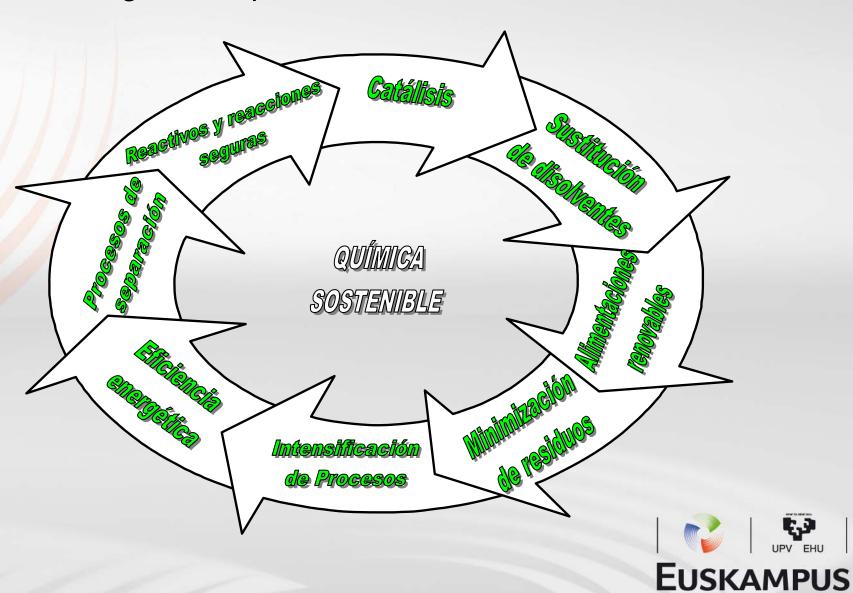
Energía

Impacto ambiental

Coste



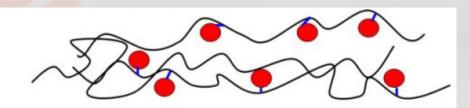
Algunos aspectos de la Química Sostenible



Plásticos más seguros y biodegradables

Toxicidad

PVC más seguro. Nuevos plastificantes covalentemente anclados: Plastificación con migración suprimida



Plásticos biodegradables

Se investiga la formulación de plásticos que permita la degradación por parte de los microorganismos



Helmut Reinecke Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros





Catálisis y Química Sostenible

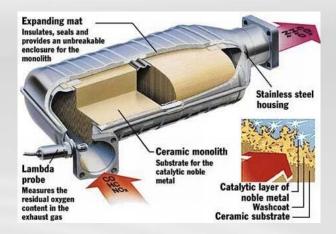
Un catalizador es una sustancia que aumenta la velocidad de una reacción química, sin sufrir ningún cambio permanente en el curso de la reacción



pueden recuperarse y reutilizarse

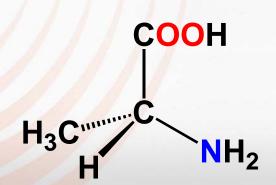
Catalizadores de los automóviles.

Aceleran la reacción de las sustancias tóxicas (monóxido de carbono, compuestos orgánicos volátiles ...), que no se han quemado de forma completa en el proceso de combustión, con el aire dando sustancias químicamente menos contaminantes, como el anhídrido carbónico y el agua.



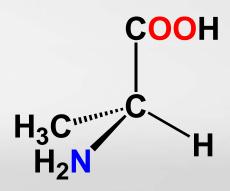


La Naturaleza es Quiral



(R)-Alanina





(5)-Alanina

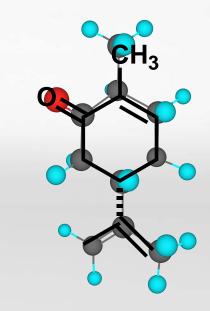




La Naturaleza es Quiral Reconocimiento molecular

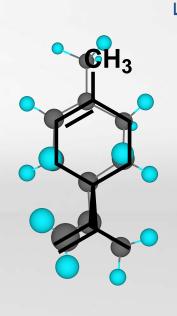
CH₃

(R)-Carvona Menta

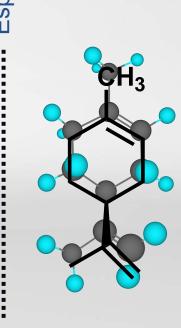


Espejo

(S)-Carvona Alcaravea



(R)-Limoneno Naranja



(S)-Limoneno Limón



Reconocimiento molecular Relaciones estructura-actividad

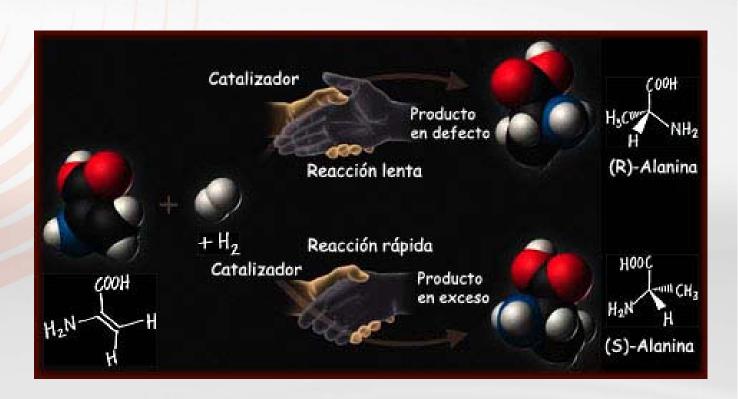
Nicotina

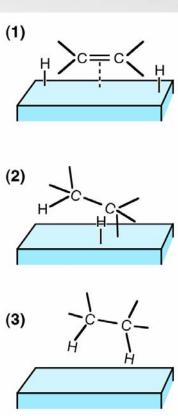
(R)-Talidomida

Penicilina V



Hidrogenación asimétrica catalítica









Hidrogenación asimétrica catalítica Aplicación industrial



 H_3O^+

L-DOPA

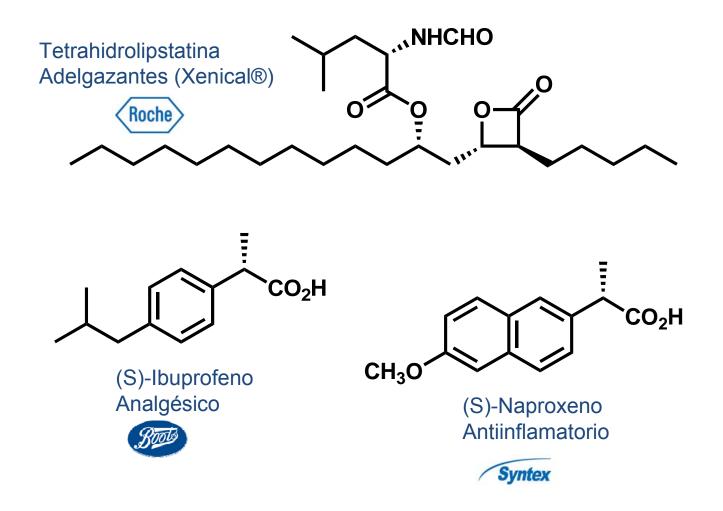


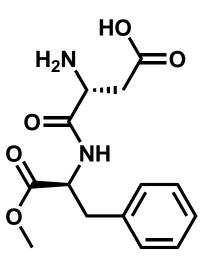
W. S. Knowles Premio Nobel de Química (2001)

L-DOPA, fármaco utilizado en el tratamiento de la enfermedad de Parkinson.



Hidrogenación asimétrica catalítica Aplicación industrial





Aspartame® Edulcorante



Mentol

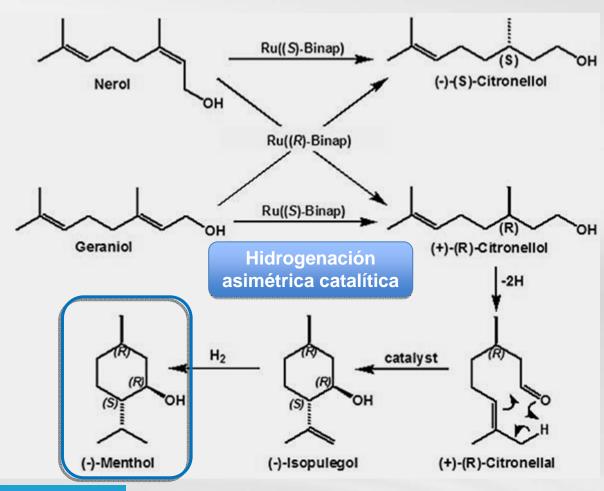


Mentol

















Catálisis ¿Por qué y para qué?

A Reacción limpia.

Economía de átomos.

Reacción reproducible a escala industrial.

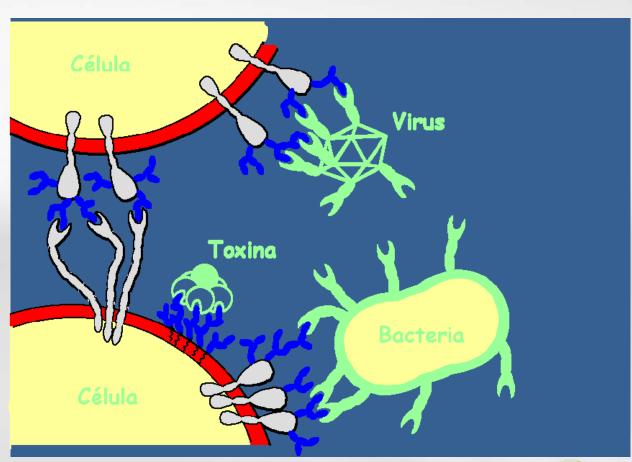
Respetuosa con el medio ambiente.

PRODUCTO FINAL DE GRAN VALOR AÑADIDO

- Metales de transición tóxicos y caros.
- Tigandos quirales no comerciales y caros
- Ausencia de catalizadores genéricos.
- Fquipos especiales para trabajar a altas presiones.

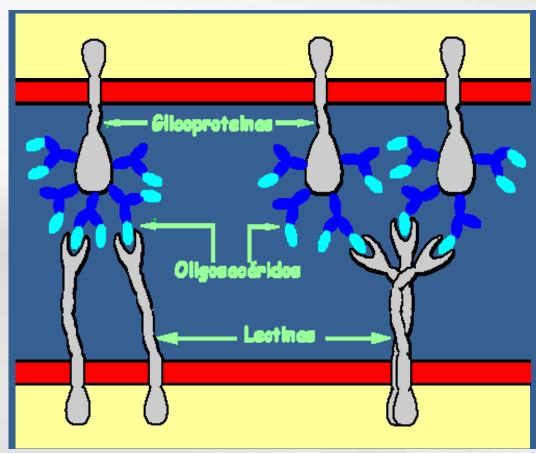


Interacciones carbohidratoproteína

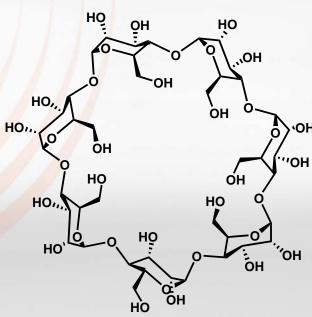




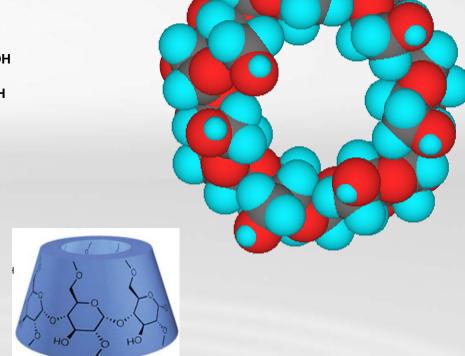
Interacciones carbohidratoproteína





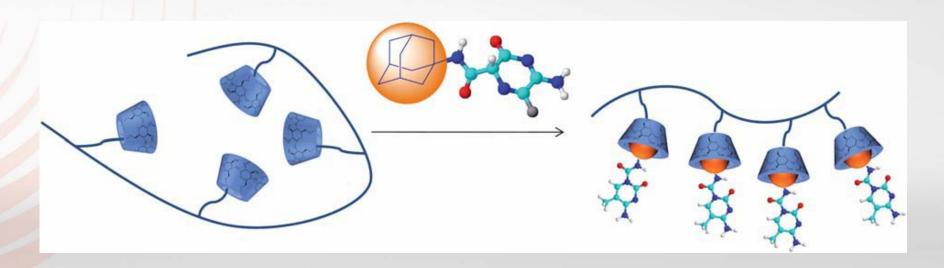


Ciclodextrinas:
Cápsulas inteligentes
Liberación controlada
de fármacos

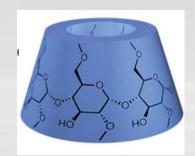


J. Fraser Stoddart UCLA



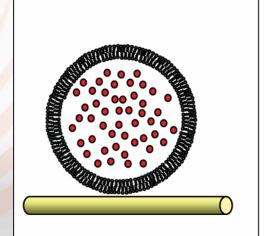


H. Ritter University of Düsseldorf

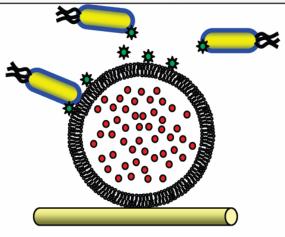




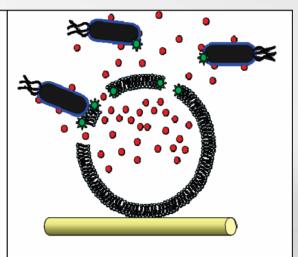
Vendajes inteligentes



Vesicle containing sodium azide or fluorescein dye



Pathogenic bacteria secrete array of toxins and enzymes, some of which cause lysis of vesicle wall



Sodium azide kills bacteria or encapsulated fluorescein released.

A. Toby A. Jenkins University of Bath



Recipiente: esfera, sílice porosa

Nanoválvulas

- molécula en forma de anillo : cucurbituril
- encajada en otra con forma cilíndrica

Cargo
CLOSED
Cucurbituril

A pH neutro a ácido, la barra y el anillo están estrechamente unidos entre sí.
La nanoválvula (400 nm) tapa el poro.

A pH es básico, el anillo se desliza de la barra, se abre el poro y se libera la droga.

Las pequeñas diferencias en el pH entre tejido sano y enfermo pueden permitir la selección precisa de la droga

Rod
OPEN

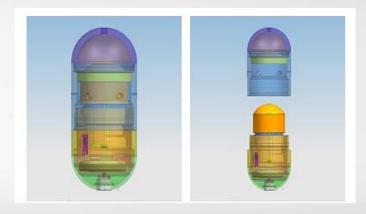
Ammonium
Recognition
Unit

Jeffrey Zink California Nanosystems Institute, UCLA



Cápsula desechable, aproximadamente del mismo tamaño que una píldora normal, con microprocesador, una emisora, y una serie de sensores.





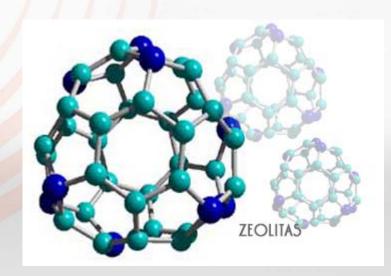
El microprocesador monitoriza la localización de la píldora usando datos de pH, temperatura y tiempo transcurrido desde la ingestión. Así, se determina cuando y dónde se debe dispensar el medicamento...



Tratamiento de enfernedad de Crohn, colitis y cáncer de colón



Tratamiento de cáncer



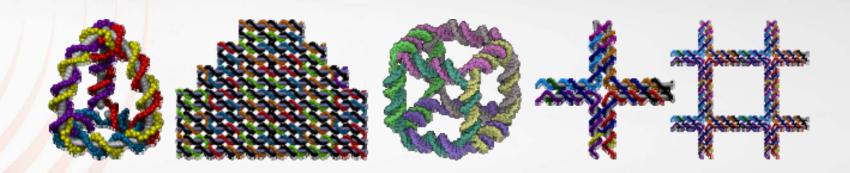
Estas nuevas cápsulas están integradas por una pequeña partícula de oro de tamaño nanométrico, en la cual se ancla el medicamento, insertados en los poros de un material mesoporoso –sus poros son 1 millón de veces más pequeño que el grosor de un pelo- que se encarga de liberarlos exclusivamente en las células enfermas del organismo...



INSTITUTO DE TECNOLOGÍA QUÍMICA



Nanotecnología





Kim Eric Drexler MIT

La nanotecnologia es el estudio, diseño, creación, síntesis, manipulación y aplicación de materiales, aparatos y sistemas funcionales a través del control de la materia a nano escala, y la explotación de fenómenos y propiedades de la materia a nano escala.

Cuando se manipula la materia a la escala tan minúscula de átomos y moléculas, demuestra fenómenos y propiedades totalmente nuevas. Por lo que la nanotecnología sirve para crear materiales, aparatos y sistemas novedosos y poco costosos con propiedades únicas



