

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### 4.1. Introducción

### 4.2. Naturaleza y propiedades

### 4.3. Petróleo y derivados en el medio ambiente

Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### 4.1. Introducción

- **Definición:** del griego “*aceite de roca*” es una mezcla heterogénea de compuestos orgánicos de origen fósil, principalmente hidrocarburos (entre  $C_1$  y  $C_{30}$  átomos de carbono y en proporciones variables dependiendo de su origen), insolubles en agua. También es conocido como *petróleo crudo* o simplemente *crudo*.

- **Mercado de petróleo. Tipos**

Un barril de crudo equivale aproximadamente a 159 litros (74 gasolina)

- **Brent.** Petróleo ligero (baja viscosidad), dulce (poco azufre), 0.37 S útil para obtener gasolina (Mar del Norte)
- **West Texas Intermediate (WTI)** ligero y dulce
- **OPEP**, mezcla de petróleos ligeros y pesados
- **Crudo de Dubai** ligero, agrio (>1%) 2% azufre  
**contamina más el agrio por motivo del azufre**

Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

Extracción, refino, transporte, procesado, almacenamiento, utilización

**Estos procesos incorporan petróleo y/o sus derivados al aire, agua y suelo**

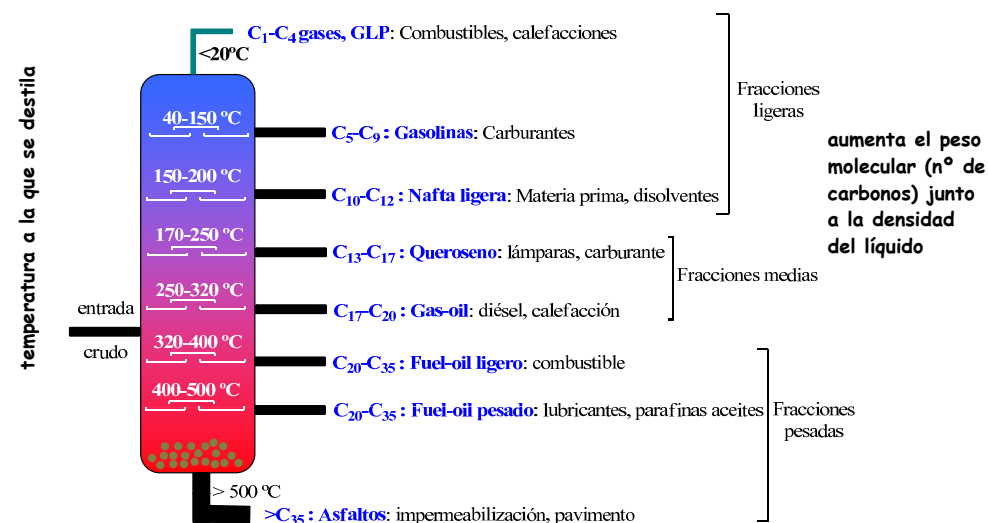
*Origen de la contaminación marina	Porcentaje estimado del total
Descargas desde tierra: Residuos urbanos e industriales, ríos...	37-38%
Operaciones en buques: Limpieza, residuos, ...	32-33%
Accidentes en transporte	12%
Atmósfera: Combustión incompleta, evaporación y posterior deposición	9%
Natural: filtraciones, erosión	7,5%
Plataformas petrolíferas	1-2%

\* Tomado de referencia 2

Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### Fraciones del petróleo (adaptado de referencia 2)



Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

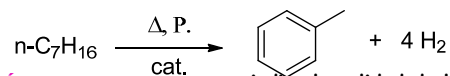
## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

**Craqueo del petróleo:** con hidrocarburos de muchos c, romperlo para obtener productos de menor peso molecular y así darle otros usos.

obtención de mayor cantidad de gasolina  $C_{12}H_{26} \rightarrow C_6H_{14} + C_6H_{12}$   
 alcano                      alqueno

**Reformado del petróleo:**

mejora de la calidad de la gasolina, aumento del Índice de octano (I.O.)

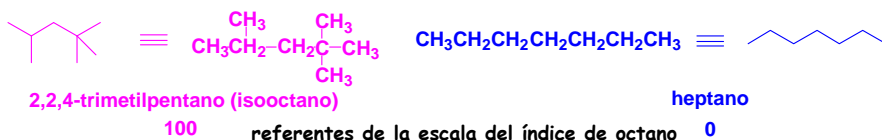


**Índice de octano** indica la calidad de la gasolina, es decir, la capacidad que tiene para suprimirse bastante sin llegar a explotar

Indica la capacidad antidetonante de una gasolina. Da una idea de cuanto

se puede comprimir una gasolina sin que detone.

Escala para medir el "golpeteo" producido por la gasolina en los motores.

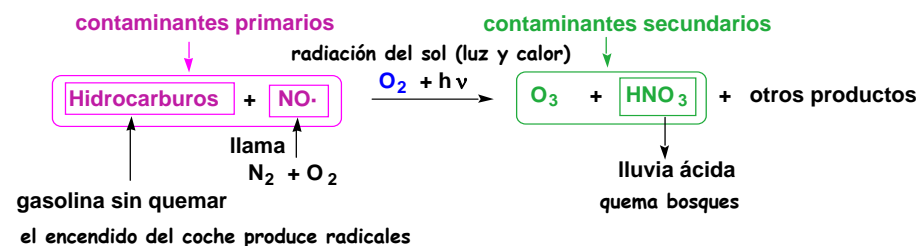


## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

Para aumentar el octanaje se utilizan aditivos. El  $(CH_3CH_2)_4Pb$

Compuesto	Índice de octano	Compuesto	Índice de octano
Benceno	106	Metanol	116
Tolueno	118	Etanol	112
p-Xileno	116	MTBE (metil terc-butil éter)	116

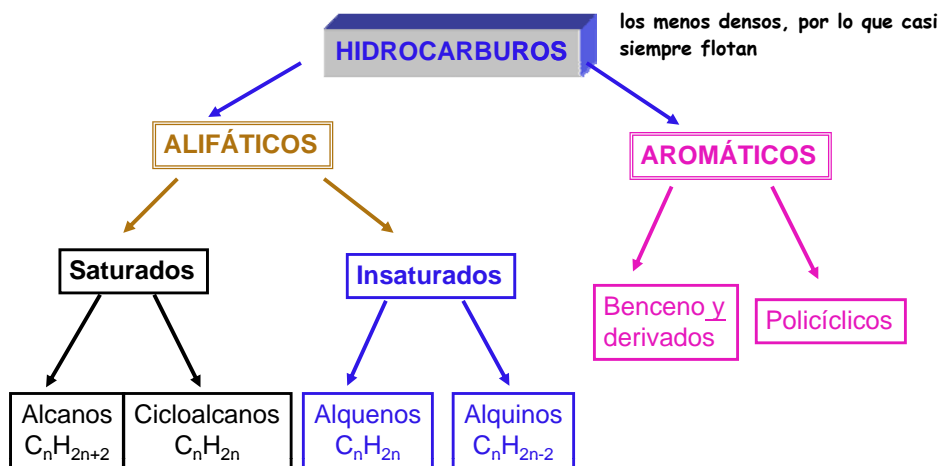
Efectos contaminantes



## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### 4.2. Naturaleza y propiedades

#### a. Hidrocarburos (50-90%)

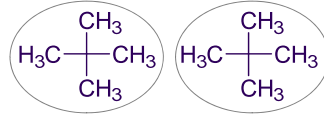
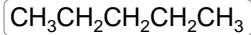


## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### o Propiedades físicas

- Densidad:** son los menos densos de todos los compuestos orgánicos  $d < 1 \text{ g/ml}$
  - Solubilidad:** insolubles en agua (no polares)
  - Menor **punto de ebullición** que la mayoría de los compuestos orgánicos del mismo peso molecular. *ya que están unidos entre sí mediante fuerzas de Van der Waals*
  - Al aumentar el peso molecular aumenta el punto de ebullición, entre 20-30 °C por átomo de carbono.
  - Al aumentar la ramificación disminuye el punto de ebullición.
- Las moléculas de alcanos se unen mediante fuerzas de van der Waals y su magnitud depende del área de contacto de dichas fuerzas. A mayor área mayor intensidad y mayor energía se necesita para separarlas, por tanto aumenta el punto de ebullición

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados



Mayor contacto mayor p.e.

Menor contacto menor p.e.

Nombre	Fórmula	P.e. °C
pentano	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	36
isopentano	$\text{H}_3\text{C}-\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}-\text{CH}_2\text{CH}_3$ menor p.e. por la ramificación	28
neopentano	$\text{H}_3\text{C}-\underset{\text{CH}_3}{\overset{\text{CH}_3}{\text{C}}}-\text{CH}_3$	10
hexano	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	69
isohexano	$\text{H}_3\text{C}-\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	60,3
neohexano	$\text{H}_3\text{C}-\underset{\text{CH}_3}{\overset{\text{CH}_3}{\text{C}}}-\text{CH}_2\text{CH}_3$	49,7

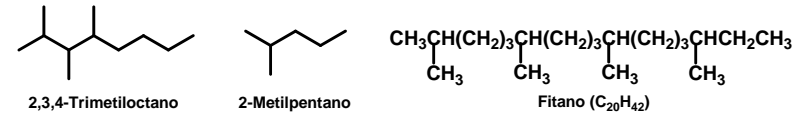
mayor p.e.  
por el mayor  
peso  
molecular

Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados o tipos de hidrocarburos

i. Alcanos lineales	estructura	p.e. °C ( p.f.)
Butano (g)	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	-0,5
Pentano (l)	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	36
Hexano (l)	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	69
Eicosano (s)	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{18}\text{CH}_3$	205 (36,4)

### ii. Alcanos ramificados



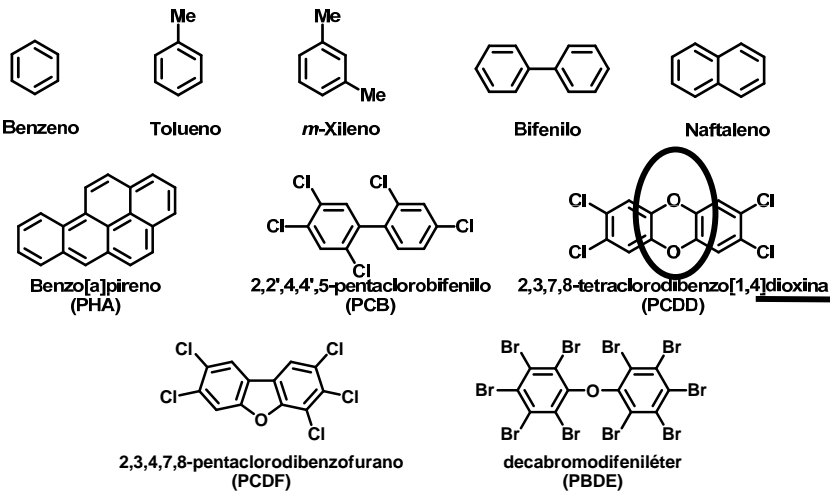
### iii. Cicloalcanos



Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

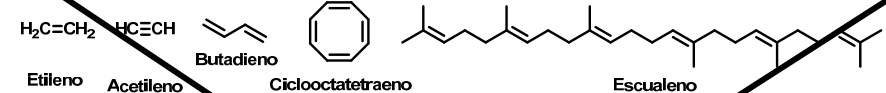
### iv. Aromáticos



Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

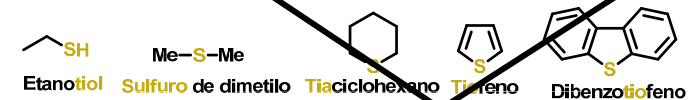
## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### v. Compuestos insaturados

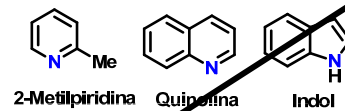


### b. Otros compuestos

#### i. Compuestos que contienen átomos de azufre



#### ii. Compuestos con nitrógeno



#### iii. Compuestos con oxígeno



#### iv. Compuestos con contenido metálico: V, Ni, Co y Fe



Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### 4.3. Petróleo y derivados en el medio ambiente

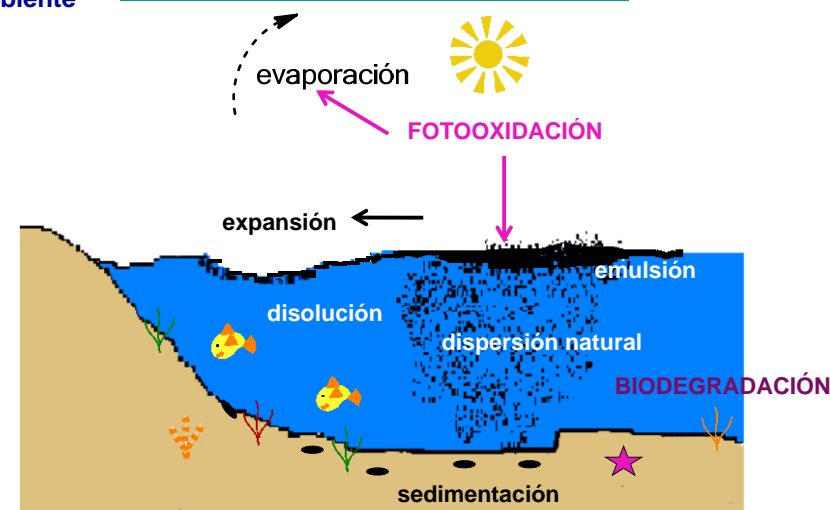
- Forman una película superficial que disminuye la transmisión de luz (alteración de la actividad fotosintética) y la difusión del oxígeno molecular (densidad menor que el agua)
- Requieren consumo de oxígeno para su degradación, por lo que disminuye considerablemente las concentraciones de oxígeno en las aguas
- Sus componentes pueden ocasionar efectos tóxicos. Estos efectos se refieren tanto a la vida vegetal (asfixia de algas y líquenes) como animal (toxicidad en peces y aves acuáticas, extendiéndose hasta el hombre a través de la cadena trófica)
- Afectan a las características organolépticas del agua, especialmente en el sabor y olor

Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### 4.3.1. Evolución natural de un vertido de petróleo en el medio ambiente

<http://www.itopf.com/knowledge-resources/documents-guides/fate-of-oil-spills/weathering/>



Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### Expansión

- Las fuerzas hidrostáticas y la tensión superficial hacen que la masa de petróleo forme una fina capa de unos 0,1mm de espesor
- El movimiento de la mancha de petróleo depende de las corrientes de agua y el viento
- La velocidad de esparcimiento es mayor con el petróleo ligero

### Evaporación

- Afecta a los componentes más volátiles (C1-C8)
- Se evapora entre el 20-50%
- Depende de la concentración de los componentes y su presión de vapor (ley de Henry)
- También depende de la temperatura del agua, la superficie de la mancha, la velocidad del viento y la agitación del agua

Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### Dispersión natural

- Es el proceso de formación de pequeñas gotas de petróleo de 0,01 a 1 mm de diámetro que pasan al agua y luego se transforman
- Se favorece por la agitación del agua

### Disolución

- Menor del 1%

Compuesto	Solubilidad en agua	
	g/m <sup>3</sup>	Mol/m <sup>3</sup>
CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> CH <sub>3</sub>	9.5	0.11
$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	13.8	0.16
	55	0.65
	1780	22.8

Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### Emulsión

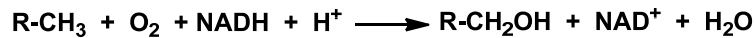
- Es un sistema coloidal de un líquido disperso en otro
  - Agua en petróleo
  - Petróleo en agua

### Sedimentación

- Debido a la evaporación y a la disolución, el vertido se vuelve más denso y se hunde.

### Biodegradación

- Proceso lento
- Comienza aproximadamente una semana después del vertido
- Actúa sobre las moléculas disueltas o dispersas
- Se degradan más fácilmente los alcanos lineales

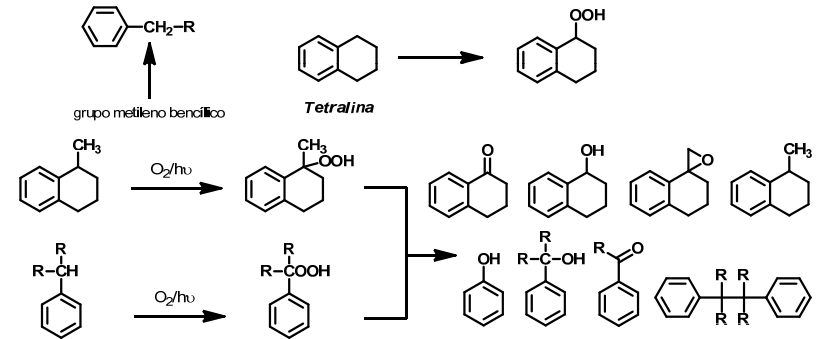


Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### Fotooxidación

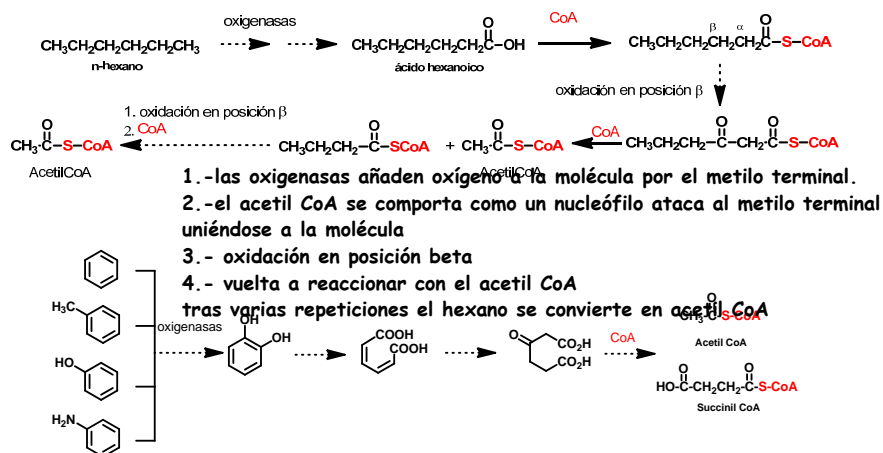
- oxidación iniciada por luz (UV)
- Importante en la superficie del agua y en los HC evaporados
- La luz solar transforma los componentes del crudo en presencia de O<sub>2</sub> molecular introduciendo grupos funcionales oxigenados (alcoholes, aldehídos, cetonas, ácidos carboxílicos, peróxidos)



Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

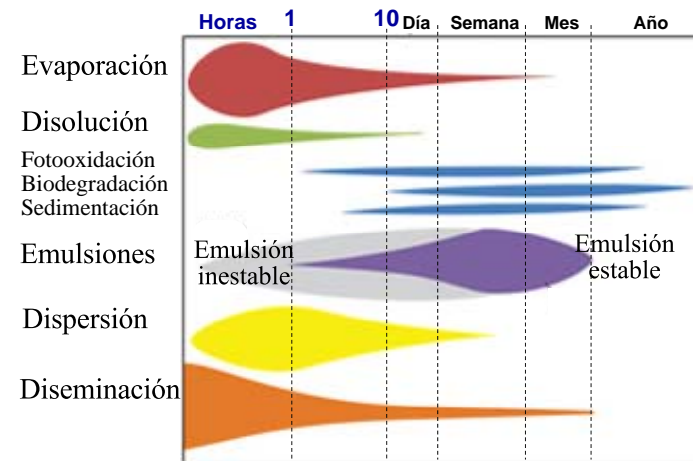
### Biodegradación



Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### Evolución de un vertido



inicialmente se da la evaporación, la dispersión y la diseminación, a medida que avanza el tiempo también ocurre fotooxidación y sedimentación y por último ocurre la emulsión tras varios meses.

Adaptado de: <http://www.itopf.com/knowledge-resources/documents-guides/fate-of-oil-spills/weathering/>

Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

### 4.3.2. Tratamiento de un vertido de petróleo en el medio ambiente

#### A) Contención del vertido

Barreras físicas y/o químicas

#### B) Limpieza y eliminación<sup>4</sup>

Combustión

Métodos mecánicos

Agentes dispersantes y/o adsorbentes

Biorremediación



### 4.3.3. Algunos vertidos accidentales en el mar

- Amoco Cádiz- costas de Bretaña Francia (1978)
- Exxon Valdez – costas de Alaska (1989)
- Braer – costas de las Shetland (1993)
- Nakhodka – costas de Japón (1997)
- Prestige – costas gallegas (2002)
- Plataforma de British Petroleum (BP) – golfo de México (2010)

Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20

## Tema 4. Química del petróleo y sus derivados

1. Principios de Química medioambiental. Miguel A. Sierra, Mar Gómez Gallego. Ed. Síntesis. 2007
2. Orozco Barrenetxea C, Pérez Serrano A, González Delgado M<sup>a</sup> N, Rodríguez Vidal FJ, Alfayate Blanco JM. Contaminación Ambiental Una visión desde la Química. Madrid: Editorial Thomson; 2º reimpresión 2004
3. Fate of marine oil spills. Disponible en: <http://www.itopf.org/knowledge-resources/documents-guides/fate-of-oil-spills/weathering/> Consultado 5 marzo 2020
4. Spill response. Disponible en: <http://www.itopf.org/knowledge-resources/documents-guides/response-techniques/> Consultado 5 marzo 2020

Facultad de Farmacia. UPV/EHU. Química II. 1º curso Ciencias Ambientales. Curso 2019-20