



UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID  
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR  
DE  
INGENIEROS DE MINAS  
-----

**DEPARTAMENTO DE**  
**INGENIERÍA QUÍMICA Y COMBUSTIBLES**

**PROGRAMA DE LA ASIGNATURA**  
***QUÍMICA DE COMBUSTIBLES Y POLÍMEROS***

<b>Curso</b>	: 3º	<b>Créditos totales</b>
<b>Cuatrimestre</b>	: 2º	Teóricos : 1,7
<b>Carácter</b>	: Optativa	Prácticos : 2,8

**PLAN DE ESTUDIOS 1996**

Edición 1: 1999.09.20

## QUÍMICA DE COMBUSTIBLES Y POLÍMEROS: PROGRAMA

### a) OBJETIVOS Y CONTENIDOS

#### BLOQUE 1: Reactividad de hidrocarburos parafínicos, olefínicos y acetilénicos

##### OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 1.1 Representar estructuras electrónicas de hidrocarburos con enlaces localizados y enlaces deslocalizados.
- 1.2 Aplicar los efectos de desplazamiento electrónico y estéricos en la estabilidad y reactividad de los hidrocarburos.
- 1.3 Ordenar la estabilidad de los intermedios de reacción: carbocationes, carboaniones y radicales libres.
- 1.4 Desarrollar los principales mecanismos de sustitución, eliminación y adición.

##### CONTENIDOS

#### 1.1: ESTRUCTURAS ELECTRÓNICAS DE LOS HIDROCARBUROS

- Estructuras electrónicas localizadas con hibridación  $sp^3$ ,  $sp^2$  y  $sp$ .
- Estructuras deslocalizadas de enlaces múltiples conjugados.
- Parámetros moleculares: distancias, ángulos y energías de enlace.

#### 1.2: EFECTOS DE DESPLAZAMIENTO ELECTRÓNICO Y ESTÉRICOS

- Efectos inductivo y de campo
- Efecto resonante
- Efecto de hiperconjugación
- Efecto estérico

#### 1.3: LOS INTERMEDIOS TRANSITORIOS

- Heterólisis y homólisis
- Estructura y estabilidad de carbocationes y carboniones
- Estructura y estabilidad de radicales libres

#### 1.4: MECANISMOS DE SUSTITUCIÓN NUCLEOFÍLICA Y DE ELIMINACIÓN

- Mecanismos  $S_N1$  y  $S_N2$
- Mecanismos  $E1$  y  $E2$
- La deshidratación catalítica de alcoholes: Síntesis de olefinas

#### 1.5: MECANISMOS DE ADICIÓN

- Adición radicalar y adición electrofílica
- Hidrogenación catalítica de olefinas y acetilénicos
- Hidratación catalítica de olefinas y acetilénicos
- Alquilación: reacción de los carbocationes con olefinas

## BLOQUE 2: Reactividad de compuestos aromáticos

### OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 2.1 Representar estructuras electrónicas deslocalizadas
- 2.2 Aplicar los efectos de desplazamiento electrónico y estéricos en la reactividad de los compuestos aromáticos
- 2.3 Desarrollar mecanismos de nitración, sulfonación y alquilación
- 2.4 Orientar la  $S_E$  en la producción de mayor rendimiento
- 2.5 Comparar los efectos de activación y desactivación en la cinética de la  $S_E$

### CONTENIDOS

#### 2.1: ESTRUCTURAS ELECTRÓNICAS AROMÁTICAS

- Estructuras de Kekulé
- Estructuras deslocalizadas
- Estabilización por resonancia

#### 2.2: MECANISMO DE SUSTITUCIÓN ELECTROFÍLICA, $S_E$

- Efectos de los sustituyentes con carácter nucleofílico y electrofílico
- Efectos de los grupos alquilo

#### 2.3: REACCIONES DE NITRACIÓN DE COMPUESTOS AROMÁTICOS

- Nitración del benceno
- Síntesis del TNF
- Síntesis del TNT

#### 2.4: REACCIONES DE SULFONACIÓN DE COMPUESTOS AROMÁTICOS

- Sulfonación. El  $SO_3$  como electrofílico
- Química de los ácidos sulfónicos y sus derivados

#### 2.5: REACCIONES DE ALQUILACIÓN

- Alquilaciones a partir de derivados halogenados y ácidos de Lewis
- Alquilaciones a partir de alcoholes en medio ácido
- Alquilaciones a partir de olefinas y ácidos protónico y de Lewis.

## BLOQUE 3: Química del carbón, petróleo y gas

### OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 3.1 Relacionar la oxidación del carbón con las variaciones de humedad, azufre inorgánico y orgánico y combustión espontánea.
- 3.2 Aplicar la hidrogenación del carbón en la conversión a productos líquidos.
- 3.3 Diferenciar las reacciones de halogenación y alquilación del carbón.
- 3.4 Aplicar los mecanismos generales de los procesos de craqueo térmico y craqueo catalítico del petróleo a la producción de olefinas.
- 3.5 Orientar el mecanismo del reformado catalítico del petróleo a la producción de aromáticos.

- 3.6 *Analizar la influencia de las reacciones de craqueo y reformado catalítico del petróleo en la mejora de la calidad del combustible.*
- 3.7 *Aplicar las reacciones de reformado catalítico y de oxidación parcial en la conversión de gas natural a gas de síntesis.*
- 3.8 *Diferenciar las reacciones de obtención de las principales componentes del gas de síntesis.*

## CONTENIDOS

### 3.1: REACCIONES QUÍMICAS DEL CARBÓN

- Reacciones con oxígeno o aire
- Reacciones con oxidantes
- Reacciones de hidrogenación
- Reacciones de alquilación

### 3.2: REACCIONES QUÍMICAS DEL PETRÓLEO

- Reacciones homolíticas de craqueo
- Reacciones heterolíticas de craqueo
- Reacciones del reformado catalítico

### 3.3: REACCIONES QUÍMICAS DEL GAS

- Reacciones de reformado catalítico
- Reacciones de oxidación parcial
- Reacciones de síntesis del monóxido de carbono
- Reacciones de síntesis del hidrógeno

## BLOQUE 4: Química de los polímeros

### OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 4.1 *Clasificar tecnológicamente los principales grupos de polímeros*
- 4.2 *Determinar la longitud de contorno y el número de unidades estructurales de una cadena polimérica.*
- 4.3 *Diferenciar las fuerzas intermoleculares en las estructuras poliméricas.*
- 4.4 *Calcular las distribuciones medias de pesos macromoleculares :  $\overline{M_n}, \overline{M_v}, \overline{M_w}, y \overline{M_z}$*

## CONTENIDOS

### 4.1: ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE LOS POLÍMEROS

- Poliolefinas
- Nylons
- Resinas epoxi
- Polímeros fenol-formaldehido
- Resinas amino
- Poliuretanos
- Siliconas

#### 4.2: MORFOLOGÍA, REOLOGÍA Y SOLUBILIDAD

- Estereoquímica de los polímeros
- Interacciones macromoleculares
- Reología
- Solubilidad
- Viscosimetría

#### 4.3: PESO MOLECULAR DE LOS POLÍMEROS

- Distribución de pesos moleculares
- Fraccionamiento de los sistemas polidispersos
- Métodos de determinación de los pesos macromoleculares

### **BLOQUE 5: Procesos de polimerización**

#### *OBJETIVOS ESPECÍFICOS*

- 5.1 *Aplicar el mecanismo de poliadición radicalar a la síntesis de homopolímeros y copolímeros.*
- 5.2 *Comparar los mecanismos de polimerización aniónica y catiónica.*
- 5.3 *Aplicar la polimerización por condensación a la síntesis de poliamidas, poliésteres, poliuretanos, resinas de formaldehído y resinas epoxi.*
- 5.4 *Aplicar las polimerizaciones radicalares y de estereoquímica controlada a la síntesis de los cauchos sintéticos.*

#### *CONTENIDOS*

##### 5.1: MECANISMOS DE POLIMERIZACIÓN POR CRECIMIENTO DE CADENA

- Reacciones radicalares
- Reacciones catiónicas
- Reacciones aniónicas

##### 5.2: REACCIONES DE POLIMERIZACIÓN CON LA ESTEREOQUÍMICA CONTROLADA

- Regularidad estereoquímica en las estructuras poliméricas.
- Catálisis heterogénea. Catalizador de Ziegler y Natta.

##### 5.3: POLIMERIZACIÓN DE CRECIMIENTO POR ETAPAS

- Poliamidas y poliésteres
- Poliuretanos
- Polímeros producidos por reacciones de condensación del formaldehído
- Resinas epoxi

##### 5.4: REACCIONES DE POLIMERIZACIÓN EN LA PREPARACIÓN DE CAUCHOS SINTÉTICOS

### **BLOQUE 6: Identificación y reactividad de polímeros**

#### *OBJETIVOS ESPECÍFICOS*

- 6.1 *Aplicar los métodos espectroscópicos de absorción molecular a la identificación de polímeros.*
- 6.2 *Diferenciar las microscopías electrónica y electrónica de barrido en la caracterización de polímeros.*
- 6.3 *Aplicar los métodos de análisis térmico a la caracterización de polímeros*
- 6.4 *Comparar las reacciones de hidrogenación, halogenación y ciclación de homopolímeros y copolímeros.*
- 6.5 *Desarrollar los principales mecanismos de degradación polimérica.*

## CONTENIDOS

### 6.1: CARACTERIZACIÓN DE POLÍMEROS

- Espectroscopía infrarroja (IR)
- Espectroscopía ultravioleta (UV)
- Espectroscopía de resonancia magnética protónica (RMNP)
- Microscopía electrónica y microscopía electrónica de barrido (SEM)
- Análisis térmico (TGA, DSC, DTA, TBA, TMA y PGC)

### 6.2: REACCIONES DE POLÍMEROS

- Reacciones con poliolefinas
- Reacciones de polienos
- Reacciones de grupos alifáticos
- Reacciones de grupos aromáticos

### 6.3: DEGRADACIÓN DE POLÍMEROS

## **BLOQUE 7: Polímeros en la ingeniería**

### OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 7.1 *Diferenciar los métodos del procesado de plásticos por extrusión, soplado e inyección.*
- 7.2 *Aplicar los métodos normalizados para la determinación de las propiedades físicas, térmicas, eléctricas y mecánicas de los plásticos.*
- 7.3 *Comparar las aplicaciones de los diferentes tipos de resinas.*
- 7.4 *Comparar las aplicaciones de las fibras de carbono, orgánicas e inorgánicas.*

## CONTENIDOS

### 7.1: PLÁSTICOS EN LA INGENIERÍA

- Procesado y propiedades
- Resinas de poliéster aromático-alifático
- Resinas de policarbonato-bisfenol A
- Copolímeros de poliéster carbonatado

### 7.2: FIBRAS EN LA INGENIERÍA

- Fibras de carbono
- Fibras orgánicas
- Fibras inorgánicas

## 7.3: CAUCHOS SINTÉTICOS

**b) BIBLIOGRAFIA**

## BÁSICA

- CLEMENTE JUL, C., LLORENTE GÓMEZ, E. y ALCÁNTARA PEDREIRA, R., 1998. Mecanismos de las reacciones en Química Orgánica. Fundación Gómez-Pardo.
- SEYHAN EGE, 1998. Química Orgánica: Estructura y Reactividad. Tomos I y II. Reverté.
- SEYMOUR, R. y CARRAHER, C, 1995. Introducción a la Química de los Polímeros. Marcel Dekker.
- WITTCOFF, H y REUBEN, B, 1991. Productos Químicos Orgánicos Industriales. Tomos I y II. Noriega-Limusa.

## COMPLEMENTARIA

- KROSCSWITZ, J., 1987. Polymers: An encyclopedic Sourcebook of Engineering Properties. Wiley.
- LOWRY, T. and SCHUELLER, K., 1987. Mechanism and Theory in Organic Chemistry. Harper.
- NICHOLSON, J., 1991. The Chemistry of Polymers. Royal Society of Chemistry.
- SCHWARZENBACH, R., GSCHWENB, P. and IMBODEN, D., 1997. Environmental Organic Chemistry. Wiley.
- SPEIGHT, J., 1994. The Chemistry and Technology of Coal. Dekker.

**d) PRÁCTICAS EN GRUPOS REDUCIDOS**

N1 de prácticas por curso y alumnos: 5

N1 de alumnos por grupo: 30 (máximo)

<u>Relación de contenidos:</u>	<u>Lugar de realización</u>
Práctica N1 1: Reacciones de eliminación y de adición: Síntesis del etileno y del bromuro de etileno.	Laboratorio
Práctica N1 2: Reacciones de sustitución electrofílica en compuestos aromáticos: Síntesis de los o- y p-nitrofenoles y del trinitrofenol.	Laboratorio
Práctica N1 3: Las principales procesos de conversión en la Industria del Petróleo.	Externa
Práctica N1 4: Polimerización del estireno.	Laboratorio
Práctica N1 5: Las principales procesos petroquímicos: Fabricación de plásticos, fibras y elastómeros.	Externa

Las prácticas 1, 2 y 4 se realizarán en el Laboratorio de Ensayos Químicos Industriales. Las prácticas 3 y 4 se realizarán en el Complejo Industrial de Repsol Petróleo y Petroquímica en Puertollano.

**d) PROCEDIMIENTO DE EVALUACIÓN**

La calificación se basará en una evaluación progresiva, que será cuantificada por las puntuaciones correspondientes a:

1. Las pruebas que se efectuarán con relación a las Prácticas de Laboratorio. Es necesario tener aprobadas las prácticas para poder presentarse a los exámenes de la asignatura.

2. El examen final de la asignatura.

La calificación de la asignatura se obtendrá promediando las puntuaciones descritas en 1 y 2. Para el aprobado final se ha de obtener, como mínimo el 50% de la puntuación total máxima, siendo además necesaria una calificación de aprobado en cada una de las partes 1 y 2.