

**Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica  
Carrera de Petroquímica**

**Tema:**

**Cálculo de las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial polipropileno (PP).**

**Autor:**

**Juan Carlos Tapia Molina**

**Tutor:**

**Ing. Fabián Mauricio Santana Romo, PhD.**



## Introducción

Objetivos

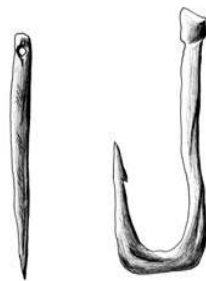
Metodología

Análisis de Resultados

Conclusiones y Recomendaciones

# Introducción

## Los polímeros



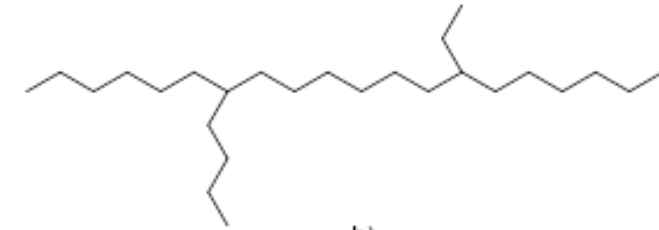
## Polímero



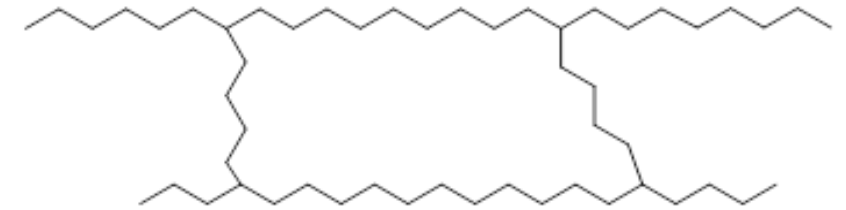
### *Tipos de estructuras de polímeros*



a)



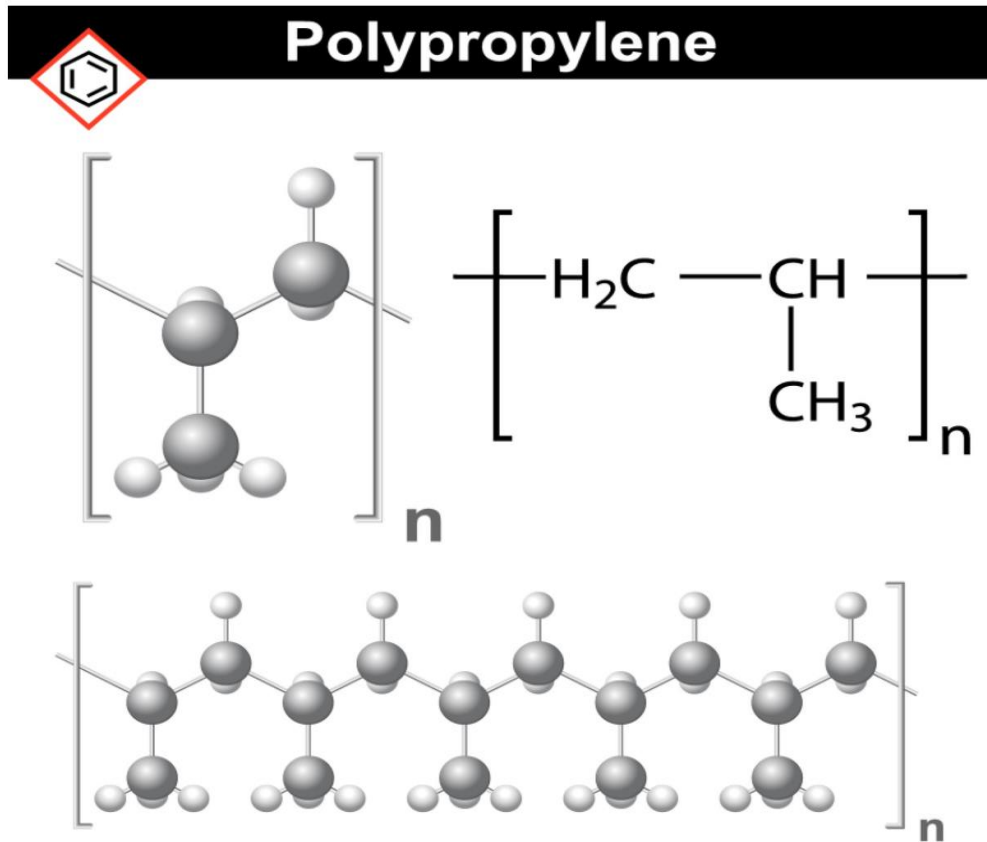
b)



c)

*Nota.* a) lineal, b) ramificada, c) entrecruzada. Tomado de (Serrano & Mijares, 2015)

## El Polipropileno (PP)



## El Polipropileno (PP)



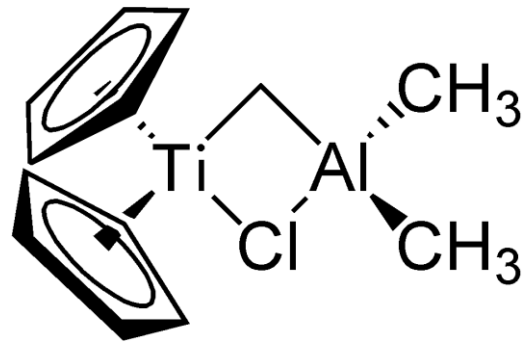
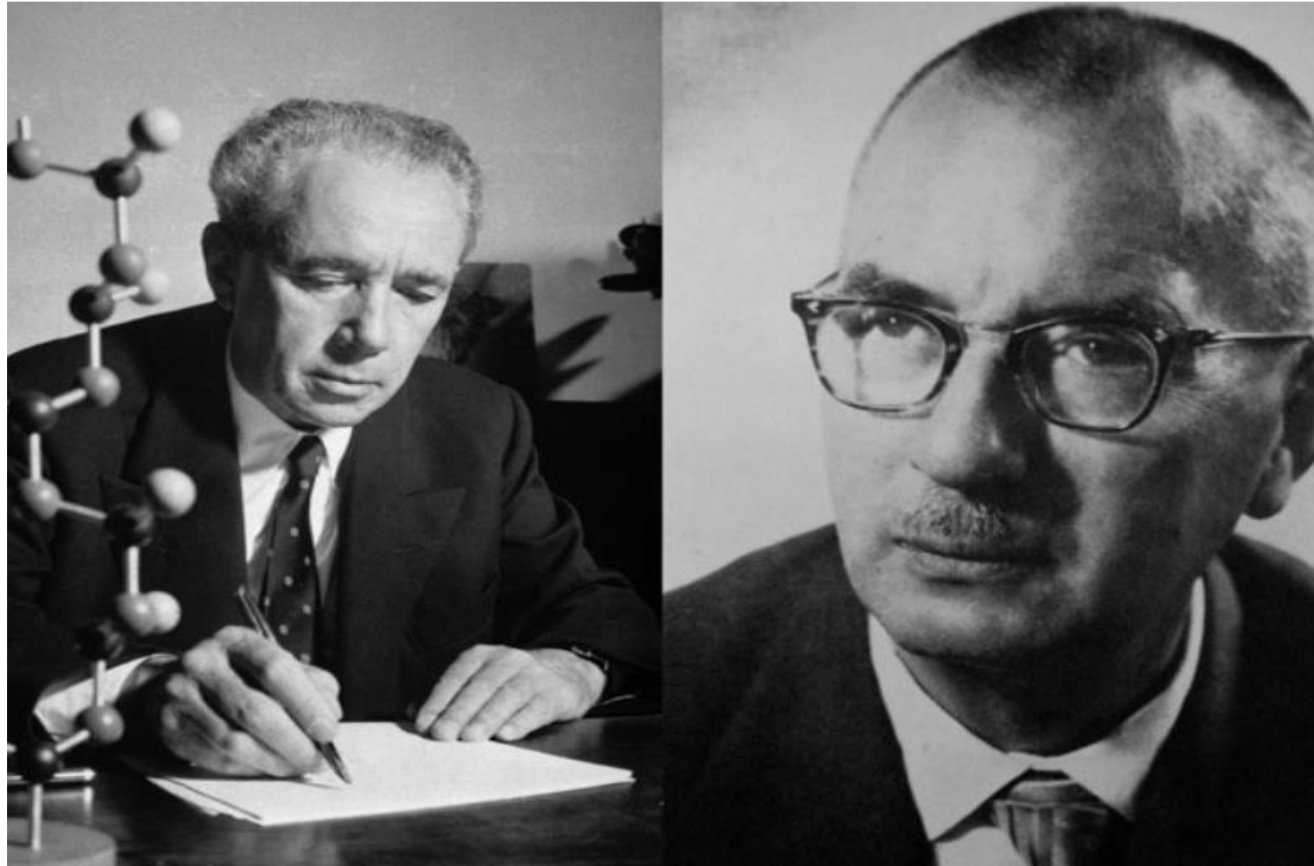
Se puede esperar que las resinas del PP sean una de las principales opciones de **materia prima** para construir la **humanidad del futuro**. (Karian, 2003)

## El Polipropileno (PP)



El PP fue descubierto por Karl Rehn en 1950

## Catalizadores del (PP)



Ejemplo:  
compuesto organometálico  
de titanio y aluminio.

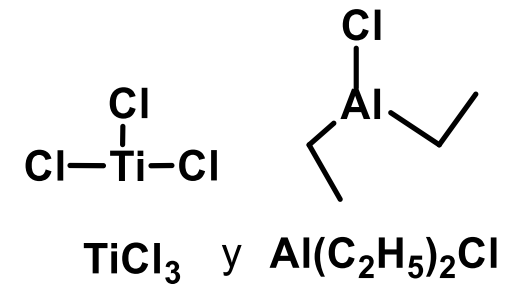
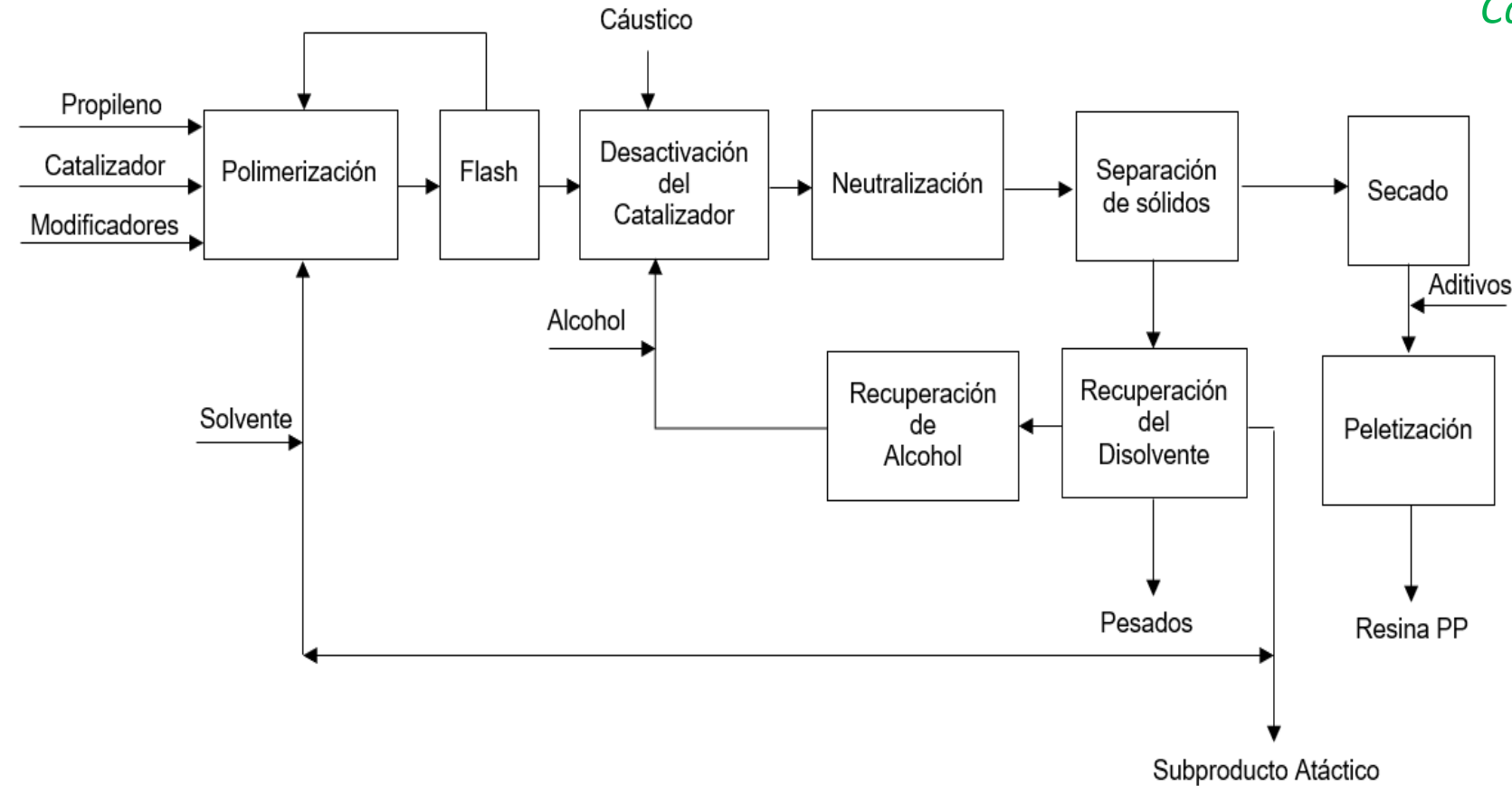
Karl Ziegler y Giulio Natta, ganadores del Premio Nobel en Química 1963



## Tecnologías del proceso de producción del PP

*Tecnología de proceso de lechada temprana (1960)*

*Catalizador (Z/N) primera generación (1960)*



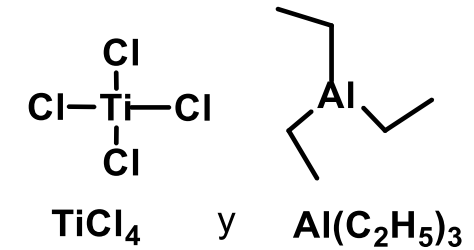
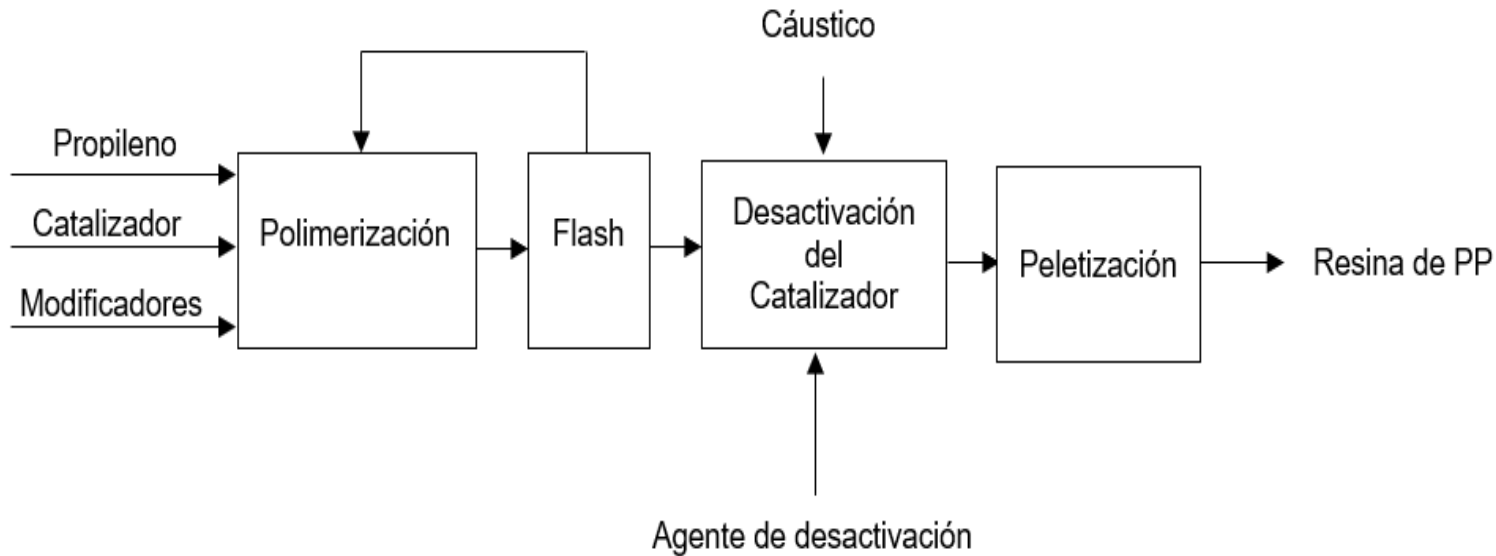
*Nota.* Tomado de (Cornejo, 2018).

*Nota.* Tomado de (Karian, 2003).

## Tecnologías del proceso de producción del PP

*Tecnología de proceso de lodos a granel (1970)*

*Catalizador (Z/N) segunda generación (1970)*

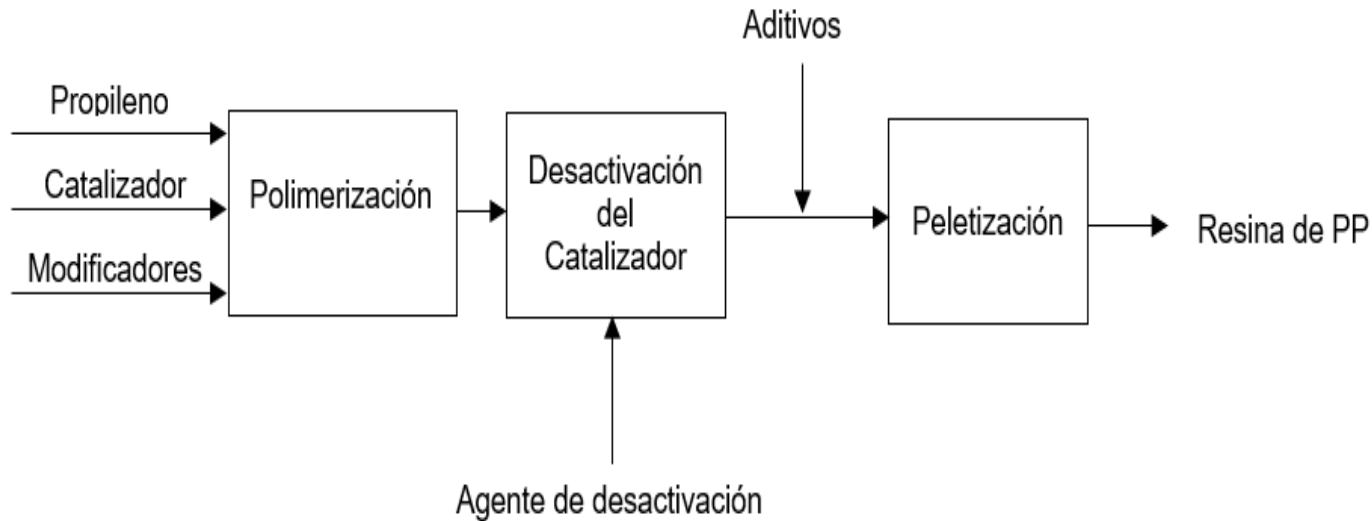


*Nota.* Tomado de (Cornejo, 2018).

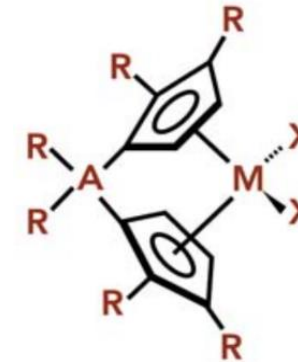
*Nota.* Tomado de (Karian, 2003).

## Tecnologías del proceso de producción del PP

### Tecnología de proceso de fase gaseosa (1988)



### Catalizador metalloceno precursor (1988)



Donde:

- M = Elemento metálico.
  - A = Átomos de enlace (opcionales)
  - R = Hidrogeno, alkil u otros hidrocarburos.
  - X = Halógeno o grupo alkil.
- M es el metal oxidado del grupo 4 (Zr, Ti, Hf).

*Nota.* Tomado de (Cornejo, 2018).

*Nota.* Tomado de (Karian, 2003)

Introducción

**Objetivos**

Metodología

Análisis de Resultados

Conclusiones y Recomendaciones

## Objetivo general:

- ❖ Contrastar las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial PP, basados en fuentes bibliográficas.

## Objetivos específicos:

- ❖ Revisar el estado del arte de los reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero en cuestión.
- ❖ Elaborar tablas de síntesis estequiométrica para cada tipo de metodología encontrada.
- ❖ Ejecutar balances de masa estructurando la estequiometría propia de cada reacción.
- ❖ Contrastar los rendimientos teóricos con los reportados en la literatura.
- ❖ Ejecutar un análisis de retro síntesis *online* con propósito de comparación.
- ❖ Reportar mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización.

Introducción

Objetivos

**Metodología**

Análisis de Resultados

Conclusiones y Recomendaciones

## Indexaciones de revistas científicas

## Búsqueda de la información



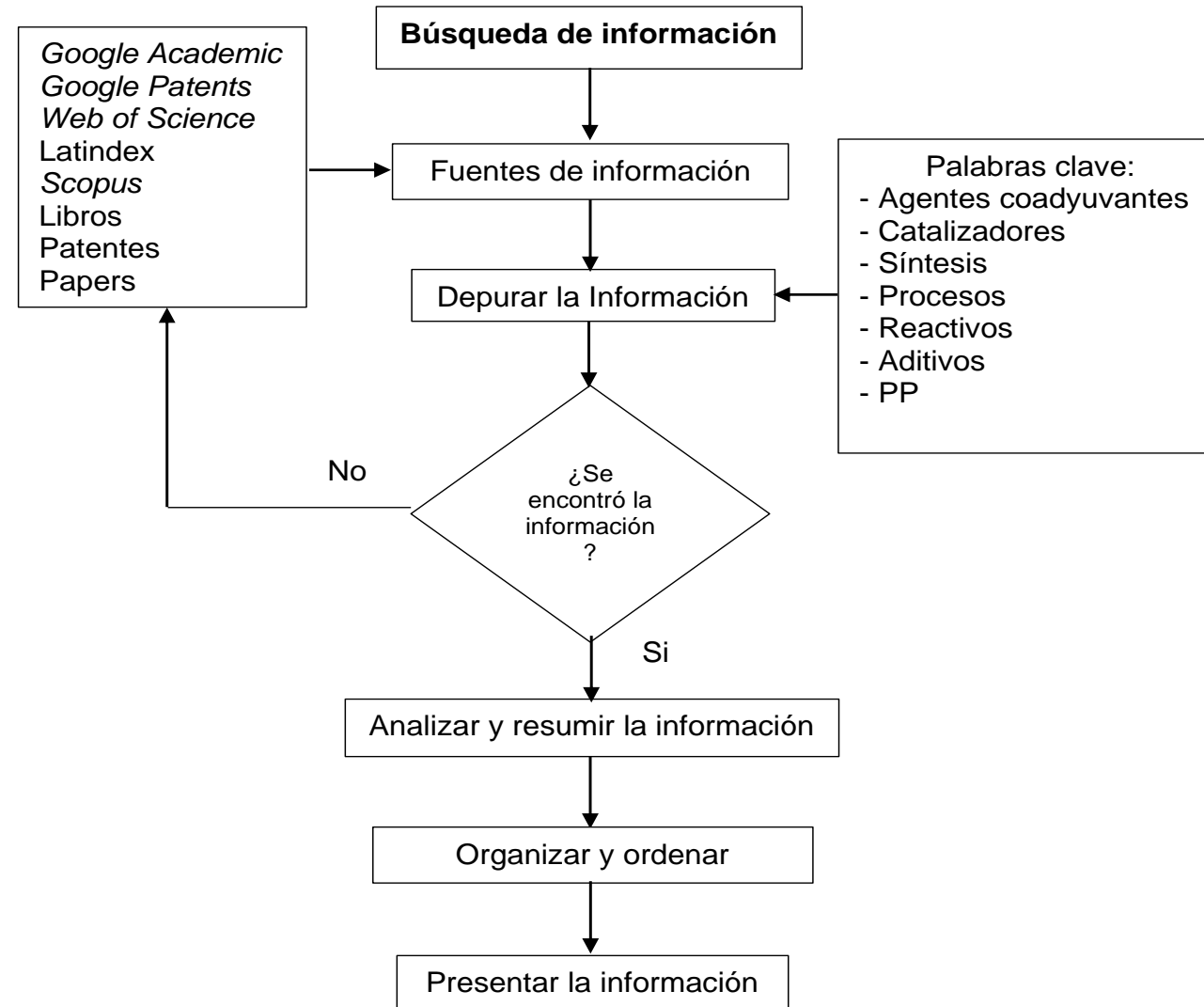
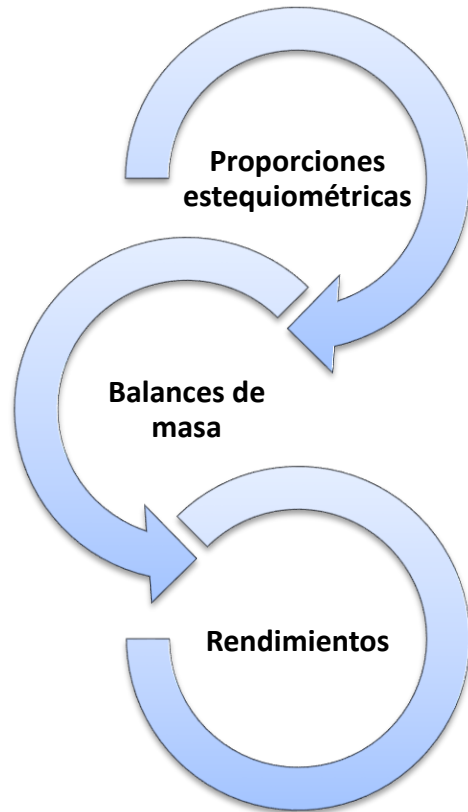
(Seventh Sense Research Group & International Journal of Applied Chemistry, 2022).

## Sitio web y plataformas empleadas



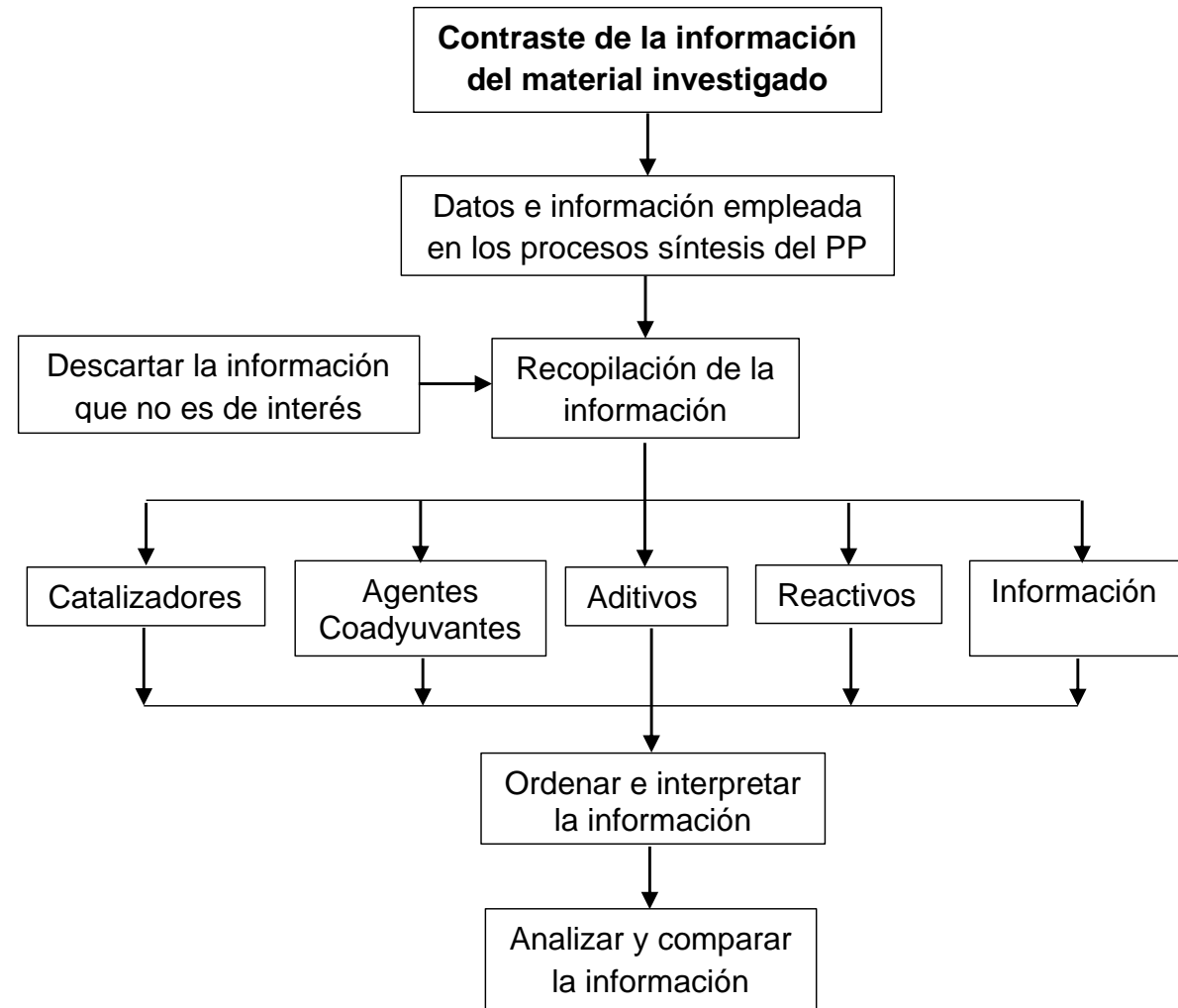


## Diagrama de flujo para realizar la búsqueda general de información



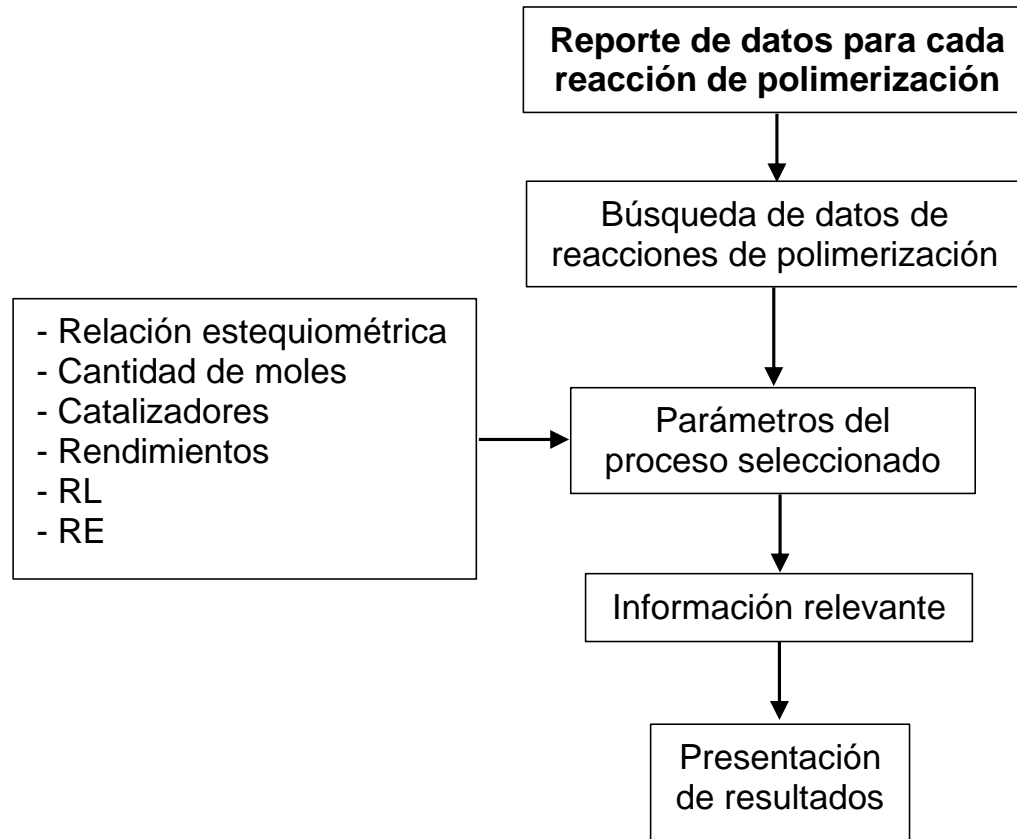
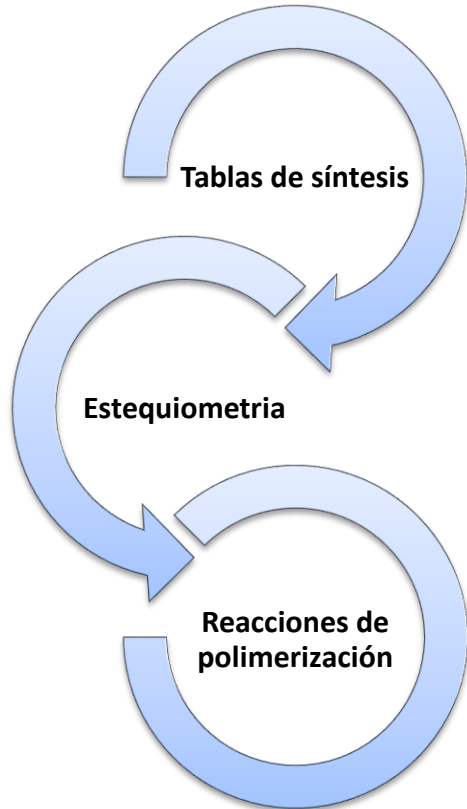
# Metodología

Diagrama de flujo para realizar el contraste de información

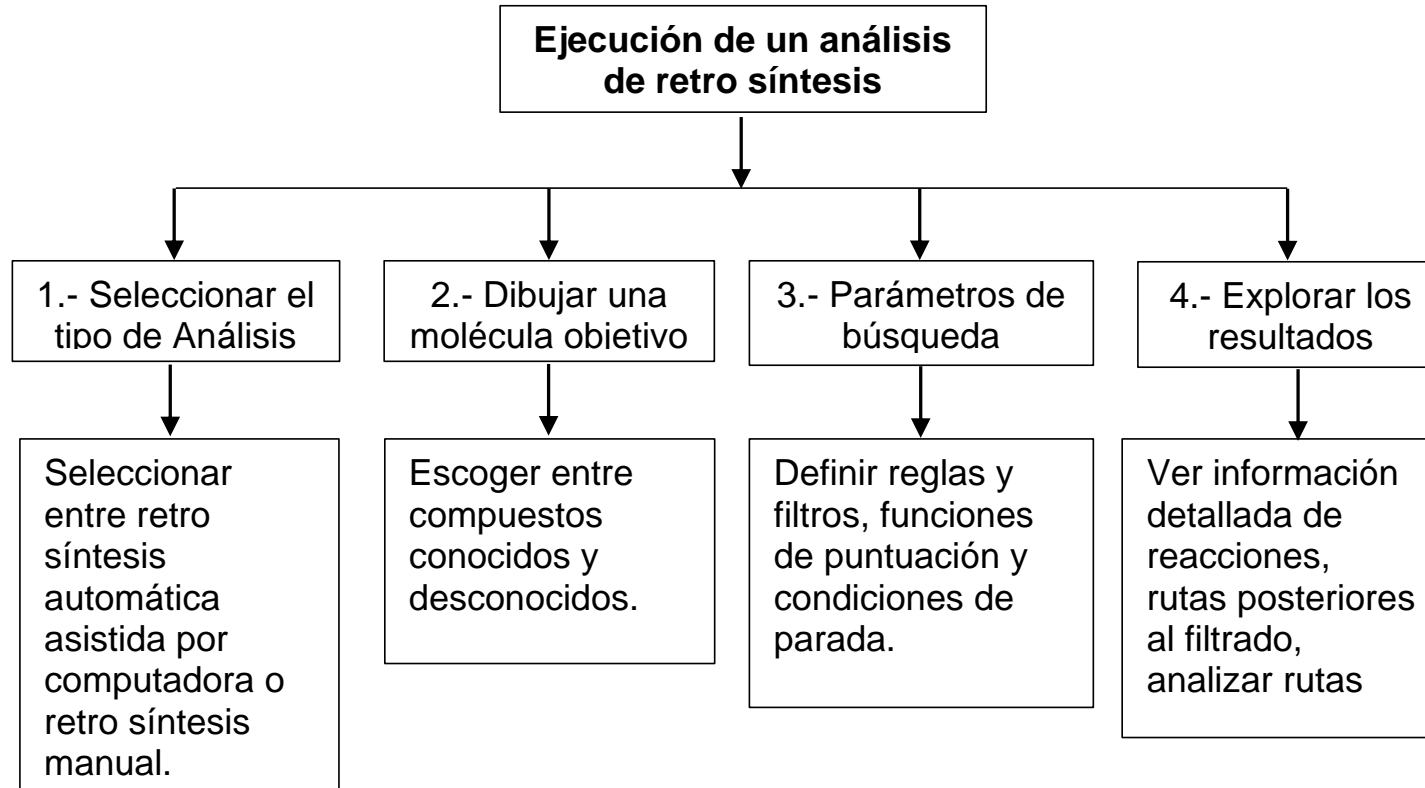


# Metodología

Diagrama de flujo de datos para cada reacción de polimerización



## Pasos para realizar un análisis de retro síntesis



Introducción

Objetivos

Metodología

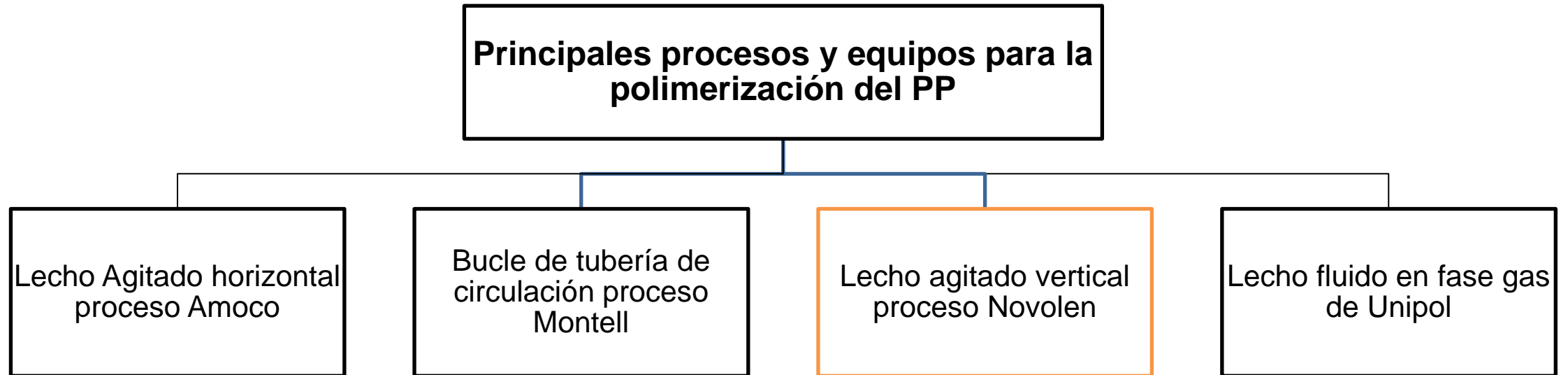
**Análisis de Resultados**

Conclusiones y Recomendaciones

## Contraste de la información obtenida con lo reportado por las industrias internacionales

Producción de PP empresas internacionales				
Empresa	Tecnología	País	Capacidad (Tn/año)	INV Aprox.(\$)
Indelpro	Spheripol	México	240.000	152'904.331,7000
Indelpro	Spherizone	México	350.000	222'985.438,8000
Propilven	Hypol	Venezuela	144.000	91'742.599,0300
Propilco	Spheripol	Colombia	320.000	203'872.442,3000
YPFB (en construcción)	-	Bolivia	250.000	159'275.345,5000
LyondellBasell	Spheripol	España	360.000	229'356.497,6000
Braskem	-	Brasil	350.000	222'985.483,8000
Braskem	-	Brasil	150.000	95'565.207,32000
Suzano	-	Brasil	200.000	127'420.276,4000
NGC	En estudio	Trinidad y Tobago	400.000	254'840.552,9000
Petroken	Lipp	Argentina	180.000	114'678.248,8000
Petroquímica Cuyo	Novolen	Argentina	130.000	82'823.179,6800

## *Contraste de la información con artículos científicos*

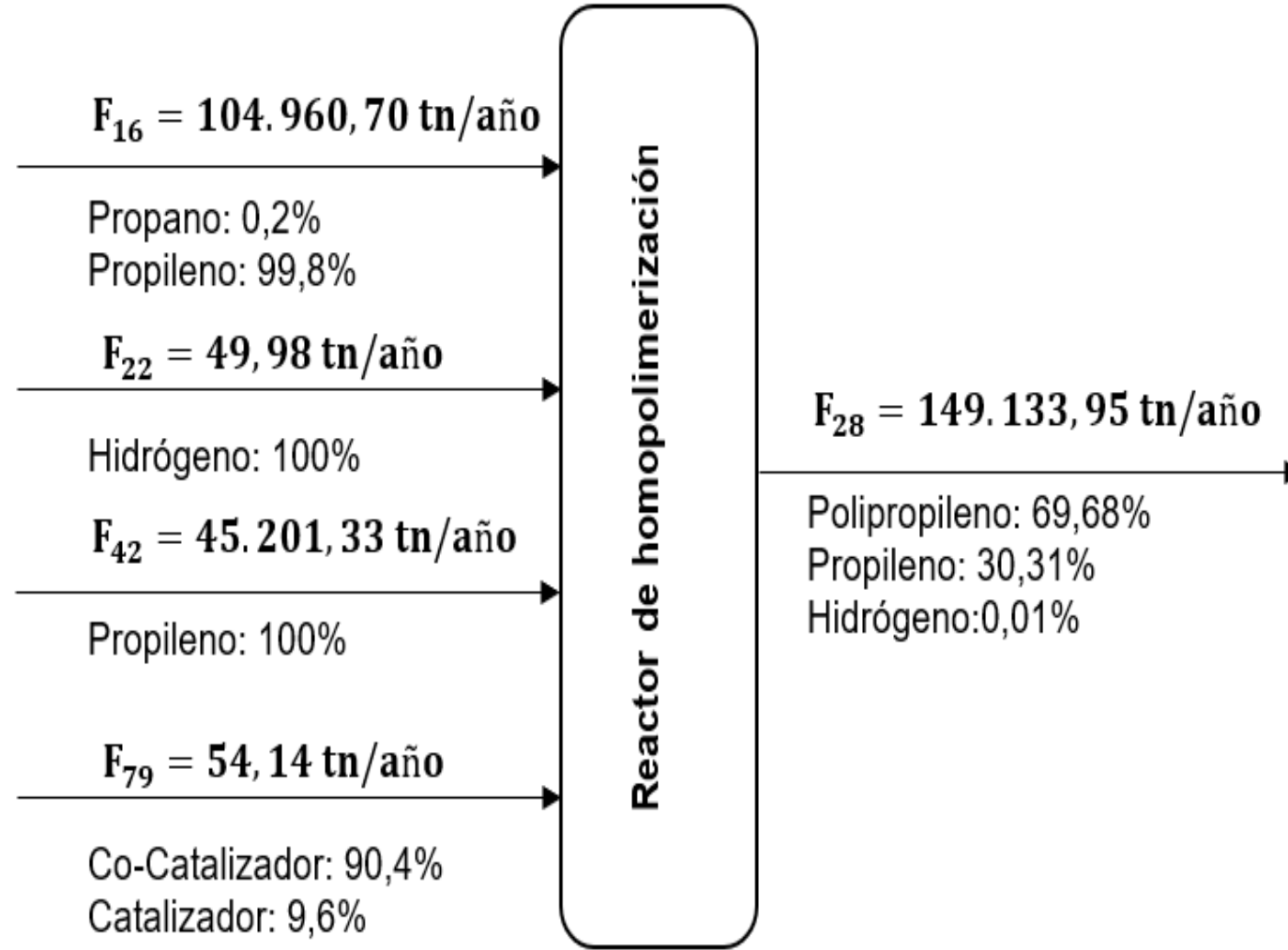


## Elaboración de una lista de bibliografía referente al polímero PP

Patente	Asignatario actual	N.º de patente
(Ohtaki et al., 2011).	Japan Polypropylene Corp.	US7906599B2 Caducidad ajustada: 2027-04-17
(Marin & Razavi, 2008).	Fina Technology Inc	US7470759B2 Caducidad ajustada: 2026-08-23
(Schottek et al., 2007)	Novolen Technology Holdings, C.V.	US7285608B2 Caducidad ajustada: 2024-07-16
(Voskoboynikov et al., 2006)	ExxonMobil Patentes químicas Inc.	US7868197B2 Caducidad ajustada: 2028-09-05
(Yamaguchi et al., 2007).	Mitsui productos químicos Inc Mitsuri Chemicals Inc.	US20100069588A1 Caducidad ajustada: 2028-01-20
(Sita, Lawrencehang, 2008).	Universidad de Maryland en College Park	US20110028654A1 Caducidad ajustada: 2028-11-10
(Gebhart et al., 2008)	Novolen Technology Holdings, C.V.	US7459506B2 Caducidad ajustada: 2024-10-12

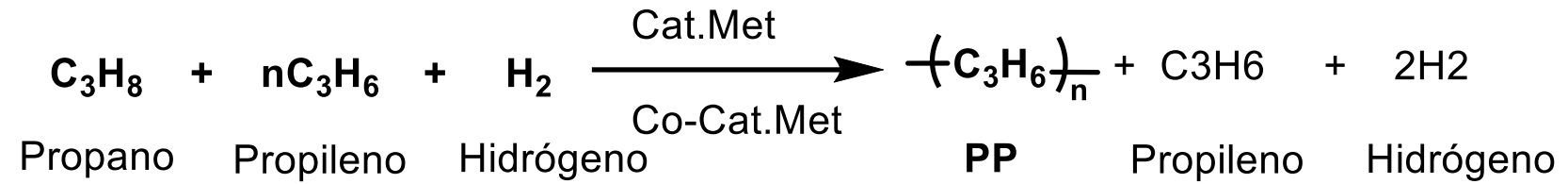


## Ejecución de los cálculos del balance de masa del reactor principal del proceso



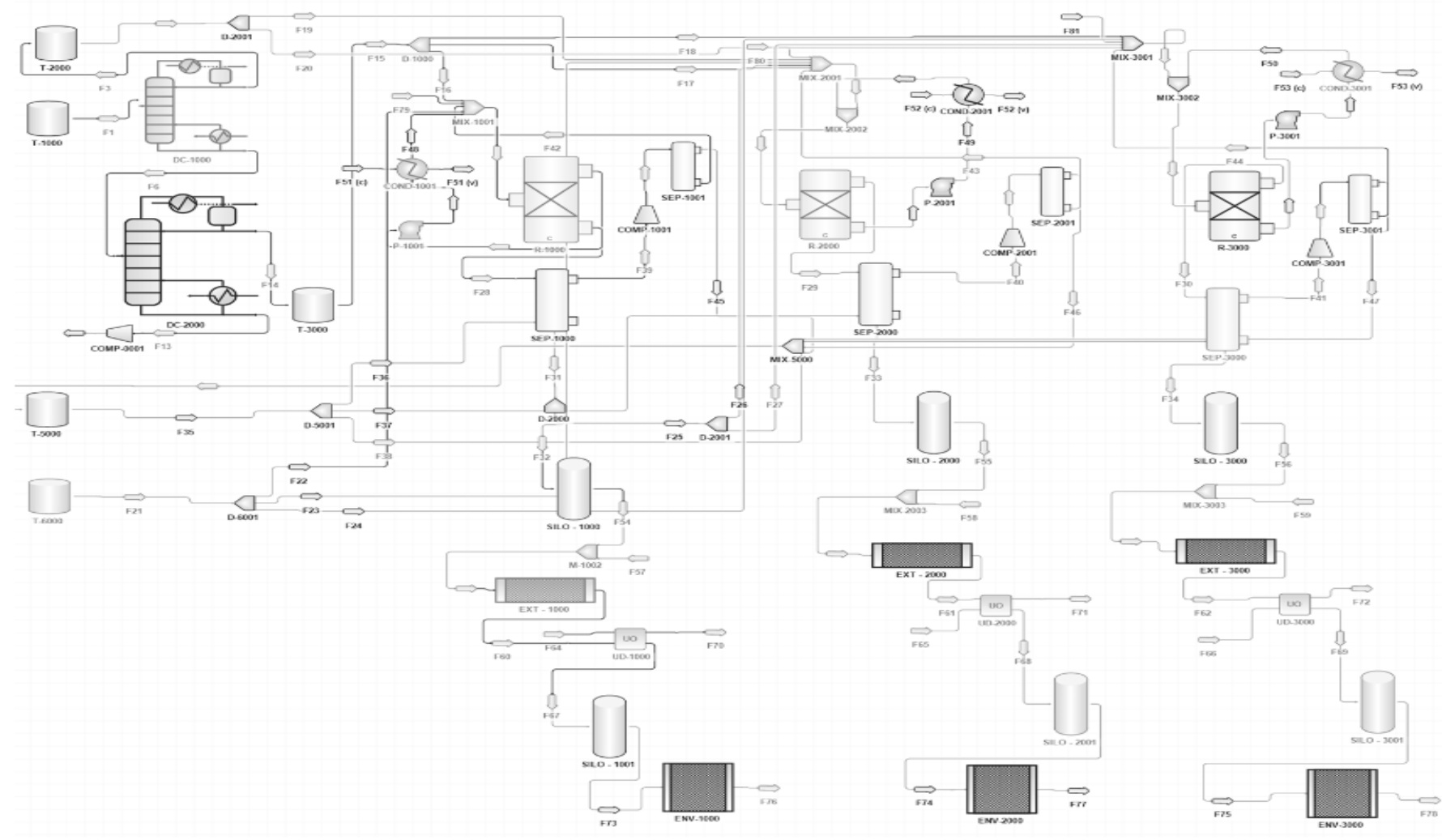
## Reporte de los datos obtenidos para la reacción de polimerización

### Estequiometria de la reacción de homopolimerización



	Flujo de entrada (tn/año)	Coficiente de reactivos	Flujo de salida (tn/año)	Coficiente de productos
Propano	209,9200	1	0,0000	0
Propileno	149.952,1000	n	45.202,5000	1
Hidrógeno	49,9800	1	14,9100	2
<b>PP</b>	<b>0,0000</b>	<b>0</b>	<b>103.916,5300</b>	<b>n</b>

**Diagrama del proceso Novolen de polimerización del compuesto del PP**



## Comparación de todos los rendimientos reportados

	Teóricos (%)	Condición industrial (%)	Forma alternativa (%)
<b>Homopolímero</b>	80,0000	87,1000	87,2200
<b>Copolímero aleatorio</b>	80,0000	79,4200	79,5500
<b>Copolímero en bloque</b>	80,0000	90,0000	90,1400

## Ejecución un análisis de retro síntesis online con propósito de comparación

CAS SciFinder® Reactions Enter a query... Edit Search

Retrosynthesis Plan for drawn structure Powered by ChemPlanner®

Overview Steps Predicted Results

View Excluded Options Save

**Plan Information**

Estimated Yield: 52%  
Overall Price: \$177.87  
(USD per 100 grams)

Commercially Available: C, D

**Plan Options**

Synthetic Depth: 3  
Predicted Rules: Common  
Break & Protect Bonds: No  
Starting Material Cost Limit: \$1,000.00/mol  
[Edit Plan Options](#)

**Scoring Profiles**

Complexity Reduction

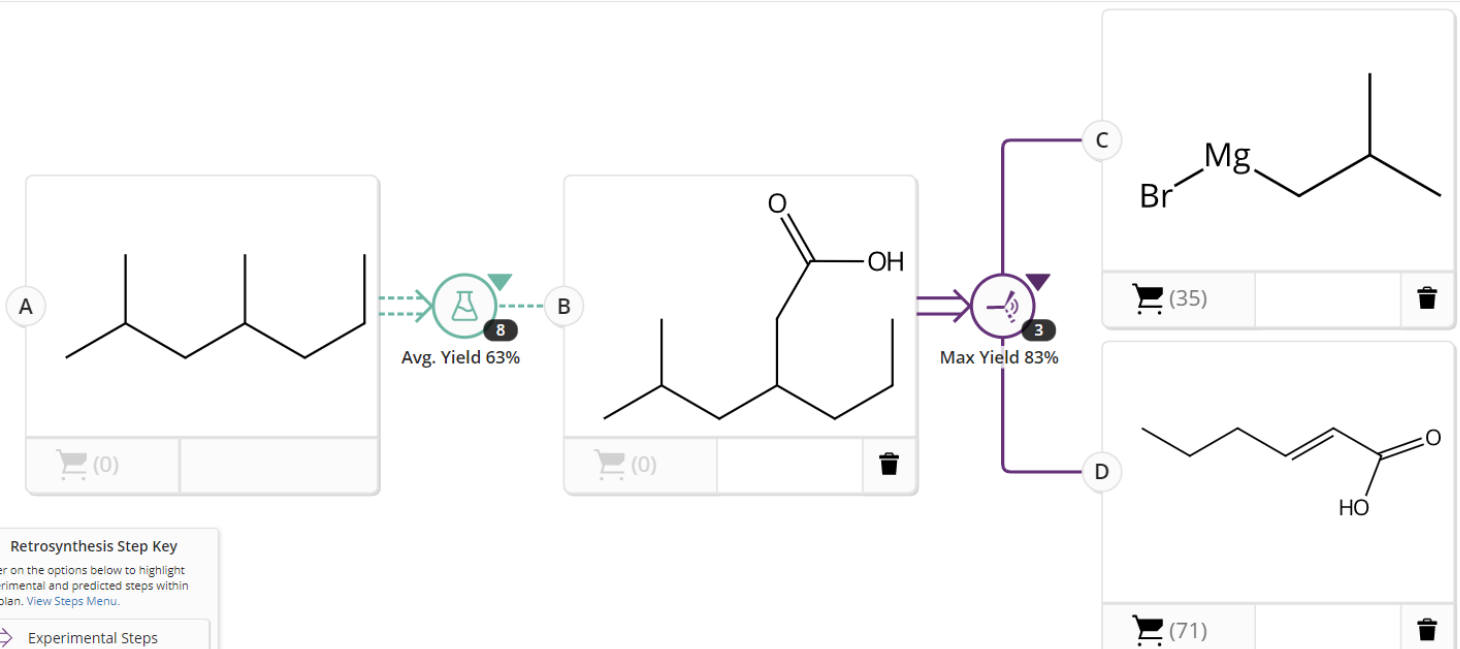
Convergence

Evidence

Cost

Yield

Atom Efficiency



**Retrosynthesis Step Key**  
Hover on the options below to highlight experimental and predicted steps within this plan. [View Steps Menu.](#)

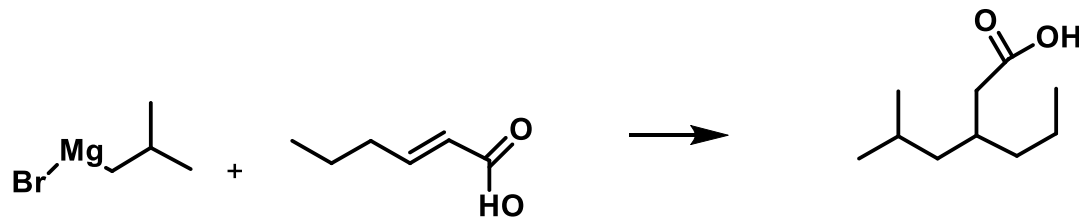
- Experimental Steps
- Predicted Steps

Reset

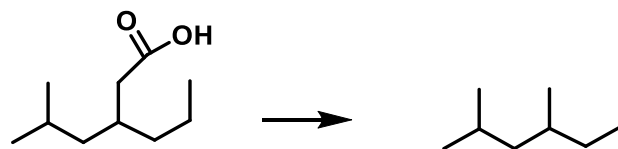
Feedback

## Reporte de los datos obtenidos para cada reacción de polimerización

Paso 2 de reacción de: Adición enantioselectiva catalítica de organometálicos a ácidos carboxílicos entre: **ácido trans-2-hexenoico** y **Bromuro de isobutilmagnesio** para sintetizar: **Ácido hexanoico, 5-metil-3-propil-** (ACI).



Paso 1 de Reacción de: Descarboxilación, de **Ácido hexanoico, 5-metil-3-propil-** (ACI), para sintetizar para sintetizar la unidad polimérica de polipropileno: **2,4-dimetilheptano**.



Las 2 diferentes pasos de reacción son una alternativa para la síntesis de la unidad monomérica de polipropileno.

## *Resumen de la evaluación económica del proceso Novolen*

MAQUINARIA Y EQUIPOS	CANTIDAD	PRECIO UNITARIO (\$)	COSTO TOTAL (\$)	COSTO INSTALADO (\$)
Reactor PPH1	1	50.000,00	50.000,00	95.000,00
Reactor PPC1	1	30.000,00	30.000,00	57.000,00
Reactor PPC2	1	45.000,00	45.000,00	85.500,00

Equipamiento y maquinarias subtotal: **\$ 73'318.720,00**

El costo total para equipos y maquinaria actualizada al momento 0 del proyecto asciende a **\$ 95'013.445,67**

Introducción

Objetivos

Metodología

Análisis de Resultados

**Conclusiones y Recomendaciones**



- Se revisó el **estado del arte** de los **reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos** a utilizarse en la síntesis del PP.
- Las tecnologías **relevantes** son **Novolen<sup>®</sup>, Unipol<sup>®</sup>** (procesos en **fase gaseosa**), **Borstar<sup>®</sup> y Spheripol<sup>®</sup>** (procesos en **fase líquida**), de las cuales la más **notable** de las tecnologías fue la **tecnología de Novolen** debido a su **simplicidad y bajo costos** ya que utiliza **pocos equipos** y cuenta con varias **patentes de catalizadores, agentes coadyuvantes, aditivos, reactores** del cesionario **Novolen Technology Holdings, C.V.** Es **versátil y adaptable** a nuestro sector; que con respecto **otras tecnologías.**
- Se determino y ejecuto las **proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos teóricos** basados en el **proceso Novolen de cada reacción de polimerización: homopolimerización, copolimerización aleatoria y copolimerización en bloque** de producción del polímero comercial PP, reportados en las **fuentes bibliográficas**

- **Se comparó los rendimientos teóricos con los reportados en la literatura, y se contrastó de forma alterna se determinó que existe una diferencia en el rendimiento del proceso Novolen con tecnología del cesionario Novolen Technology Holdings, C.V., mediante el empleo de dos patentes: No. 7285608, y la patente No. 7459506.**
- Se ejecutó un análisis de **retro síntesis online** en la plataforma *SciFinder* con el propósito de comprar las diferentes rutas de síntesis que constó de **dos pasos de reacción** para sintetizar la unidad polimérica **2,4-dimetilheptano**, la cual es una alternativa para la producción del PP.

# Recomendaciones

- **Realizar un estudio con mayor profundidad del proceso para determinar la factibilidad y su implementación en nuestro país, a través de la parte experimental del proceso Novolen.**

**Gracias por su atención.**

**Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica  
Carrera de Petroquímica**

**Tema:**

**Revisión bibliográfica acerca de las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial polipropileno (PP).**

**Autor:**

**Juan Carlos Tapia Molina**

**Tutor:**

**Ing. Fabián Mauricio Santana Romo, PhD.**

