

# PRODUCCIÓN DE ACETONA VÍA CUMENO

## INTRODUCCIÓN

Aunque el proceso es orientado a la producción de fenol; la acetona será un subproducto de la reacción del cumeno con aire atmosférico, donde existe una reacción intermedia muy importante que es la del hidroperóxido de cumeno con ácido sulfuroso diluido.

Si se observa en la literatura existen muchas vías para obtener acetona, como el método del acetileno, el método del propileno, de Isopropil alcohol, de ácido acético, por destilación de la madera, entre otros, pero es de notar que la vía y/o ruta cumeno es la más económica para obtener acetona

El proceso de cumeno tiene muchos factores a su favor, ya que no se desperdician productos costosos, como: el cloro, el hidróxido de sodio o el ácido sulfúrico. Posee condiciones suaves y el costo del equipo es bajo.

Una desventaja que puede ser manejable, es la manipulación del hidroperóxido de cumeno, ya que a ciertas condiciones de temperatura y concentración es explosivo y puede ser inflamable.

## 1. PRODUCCIÓN MUNDIAL. PRODUCCIÓN COLOMBIANA

### ANÁLISIS DE CONSUMO Y CLASIFICACIÓN CIU

Antes de la segunda guerra mundial, la acetona fue sintetizada por destilación seca de Acetato de Calcio, luego nuevos métodos surgieron como el proceso de fermentación desarrollado por Weizmanm y Hamlym que implicaba la conversión de carbohidratos a acetona y alcohol butílico y etílico usando bacilos. Hacia los años de 1950 nuevos métodos aparecieron, entre los que se destacan los procesos de hidroperóxido de cumeno a fenol y la deshidrogenación de alcohol isopropílico.

Pero los procesos descrito por Hock y Lanck Bericht [Vol. 77, Pág. 257, 1944] conocido como método de Hock, el cual implicó una nueva forma de producir acetona y fenol a bajos costos y excelente producción a partir de cumeno, es así que hacia 1985 el 90% del fenol sintético de los Estados Unidos se producía vía cumeno, y en países y territorios como Gran Bretaña, Europa Occidental y otros, implementaron este método como el principal para producir acetona (Ver Tabla N° 1).

**Tabla N° 1. CAPACIDAD DE PRODUCCIÓN MUNDIAL DE ACETONA.**

<b>LOCALIZACIÓN</b>	<b>CAPACIDAD DE PRODUCCIÓN (Kton)</b>
Estados Unidos	1302
Europa Oriental	196
Japón	396
Otros lugares de Asia	34

*Fuente: Montedison USA., Inc. (1985)*

A partir de la tabla anterior, cabe resaltar el hecho de que Estados Unidos sea un gran productor de acetona, lo que implica que los mercados próximos a este país pueden contar con una oferta considerable de este producto, siendo esto una gran

oportunidad para hacer empresa en Colombia, dado que las debilidades, fortalezas, amenazas y oportunidades, que éste presenta frente al mercado internacional, hacen que el montaje de una industria de este tipo sea un negocio viable, productivo y rentable, pues las condiciones del mercado y de la competencia son muy buenas.

### **ANÁLISIS DE CONSUMO Y CLASIFICACIÓN CIIU PARA LA ACETONA**

- **Código CIIU Rev. 2:** 03511177 – 8
- **Unidad de medida:** Kg.
- **Cantidad consumida:** 669 198
- **Valor total consumido (a precio de venta en fábrica sin incurrir en impuestos):** 2 021 675
- **% Consumido de origen extranjero:** 10.94
- **Cantidad comprada:** 196 086 179
- **Valor total comprado:** 2 114 502

Nota: Valores en miles de pesos.

Fuente: Encuesta anual de manufactura 2000. Tomo 3. Materias primas, materiales y empaques, consumidos y comprados, según tipo de artículo. Total nacional.

## 2. UTILIZACIÓN, APLICABILIDAD DE LA ACETONA Y PROYECCIÓN DE MERCADO

Dentro de los compuestos más usados en el ámbito industrial, utilizado no sólo como intermediato químico para la síntesis de otros productos si no también como solvente se encuentra la acetona.

La acetona es un químico que a nivel mundial es extensamente conocida, algunos químicos como los **metevilatos**, la metil isobutil cetona, el bisfenol A. Dentro de los solventes es ampliamente utilizado en barnices, pinturas, lacas y otras resinas.

Tomando como referencia algunos datos de producción, se sabe que la acetona se usa en un 80 – 90% en la manufactura del metil – metacrilato.

Dentro de la industria de solventes se utiliza en la fabricación de adhesivos de neopreno, solventes básicos de nitrocelulosa y de materiales como vinilos, además de la fabricación de compuestos derivados como el alcohol diaceténico, MIK, metilisobutil carbinol e isopreno.

En la industria farmacéutica, se emplea como intermediato en la fabricación de vitaminas, y de igual manera en la industria del bisfenol A, para la obtención de resinas epóxicas, policarbonatos, resinas poliéstericas resistentes a la corrosión y otras resinas.

Otros usos implican la fabricación de índigo del O – nitrobenzaldehído, para la extracción de productos orgánicos, la fabricación de pólvora sin humo por cordita, la absorción de acetileno, entre otros.

### 3. MÉTODOS DE ANÁLISIS DE LA ACETONA

#### 3.1 CONTROL DE CALIDAD

A este punto del trabajo ya se está familiarizado con la producción de acetona vía cumeno, así como con las diferentes utilidades que puede brindar este producto, entre las que se incluyen áreas como la farmacéutica, en la producción de bisfenol – A (resinas epoxi y policarbonatos) y como intermediario químico; adicionalmente cabe resaltar algunas características sobre la acetona que no han sido mencionadas, como las especificaciones y estándares de los que gozaría a nivel internacional y los métodos de análisis, propios de este producto, que al ser aplicados en una planta fabril, mejorarían el control de calidad, evitando la fabricación de químicos deficientes y no competitivos a nivel nacional e internacional.

#### **Especificaciones, estándares y métodos de análisis:**

Dentro de los niveles de flamabilidad, la acetona es considerada como peligrosa, lo que exige el transporte a través de *containers* con indicación de líquido flamable, en tanques y tambores de acero, vagones y ferrocarriles, además, a sus posibles usos delictivos, sólo se permiten el transporte a pasajeros de 946 cm<sup>3</sup> y de 0,0378 m<sup>3</sup>, en el caso de carga aérea.

Las siguientes especificaciones de la IUPAC para la acetona, rigen a nivel mundial, siendo:

- Pureza: No menor que 99,5% v/v
- Densidad a 20° C: 0,790 – 0,793 g / cm<sup>3</sup>                      Norma ASTM D - 891
- Rango de destilación: 55,5 – 57° C                              Norma ASTM D – 1078
- Residuos a 100° C: No exceder 30 ppm                          Norma ASTM D – 1353
- Agua: No debe exceder 0,3%                                        Norma ASTM D – 364

- Color: 5 ó menor (uso de escala APHA) Norma ASTM D – 1209

Mediante la especificación nombrada por la Pat. US 791759, que implica el tiempo de retención de color por 30 minutos al añadir  $\text{KMnO}_4$  a una muestra de acetona. Un test realizado implica que al añadir 1 ml de 0,1% por peso de  $\text{KMnO}_4$  a 100 ml de acetona simple, se debe tener un tiempo de retención de color de 4 horas aproximadamente. Otros tests para el análisis de la acetona indican la determinación por tratamiento con hidroxilamina hidrociorado y con liberación de ácido hidrociorhídrico, la formación de yodoformo a partir de la reacción con iodina; de igual manera la industria utiliza la cromatografía de gases para un buen control de calidad del proceso.

## 3.2 PROPIEDADES Y SEGURIDAD INDUSTRIAL

### 3.2.1 Propiedades físicas y químicas

Peso molecular: 58.08 g/mol

Punto de destello:  $< -20^\circ \text{C cm}^3$

Fórmula molecular:  $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$

Límites de explosión:

Fórmula molecular (estructurada):

Bajo 2.6 Vol% Alto 13 Vol%



Presión de vapor ( $20^\circ \text{C}$ ): 233 hPa

Estado físico: líquido

Densidad de vapor relativa: 2.01

Color: incoloro

Densidad ( $20^\circ \text{C}$ ):  $0.79 \text{ g/cm}^3$

Olor: afrutado

Solubilidad en: agua ( $20^\circ \text{C}$ ) soluble, etanol soluble, éter soluble

Viscosidad dinámica ( $20^\circ \text{C}$ ):

0.32 mPa\*s

Constante dieléctrica ( $25^\circ \text{C}$ ): 20.7

Punto de fusión:  $-95.4^\circ \text{C}$

Punto ebullición (1013 hPa):  $56.2^\circ \text{C}$

Punto de ignición:  $540^\circ \text{C}$

### **3.2.2. Manipulación y almacenamiento**

**Manipulación:** Evitar la carga electrostática. Mantener alejado de fuentes de ignición. Trabajar bajo vitrina extractora. No inhalar la sustancia.

Evítese la generación de vapores / aerosoles.

**Almacenamiento:** Bien cerrado, en lugar bien ventilado, alejado de fuentes de ignición y de calor. De +15° C a +25° C.

### **3.2.3. Identificación de peligros**

Fácilmente inflamable. Irrita los ojos. La exposición repetida puede provocar sequedad o formación de grietas en la piel. La inhalación de vapores puede provocar somnolencia y vértigo.

### **3.2.4. Primeros auxilios**

- Tras inhalación: aire fresco. En caso necesario, respiración asistida o por medios instrumentales.

Mantener libres las vías respiratorias.

- Tras contacto con la piel: aclarar con abundante agua. Eliminar ropa contaminada.
- Tras contacto con los ojos: Aclarar con abundante agua manteniendo abiertos los párpados (al menos durante 10 minutos). Llamar al oftalmólogo.
- Tras ingestión: hacer beber inmediatamente abundante agua.



### **3.2.5. Medidas de lucha contra incendios**

Medios de extinción adecuados: polvo, espuma.

Riesgos especiales: Combustible, vapores más pesados que el aire; son posibles mezclas explosivas con el aire a temperaturas normales. En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios: Permanencia en el área de riesgo sólo con ropa protectora adecuada y con sistemas de respiración artificiales e independientes del ambiente.

### **3.2.6. Estabilidad y reactividad**

*Materias a evitar:* Hidróxidos alcalinos, halógenos, hidrocarburos halogenados / hidróxidos alcalinos, halogenuros de halógeno, oxidante (entre otros  $\text{CrO}_3$ , peróxidos, ácido nítrico, ácido nitrante), halogenóxidos, metales alcalinos, nitrosilos, metales, etanolamina.

*Información complementaria:* Sensible a la luz; sensible al aire; disolvente; materiales inadecuados: plásticos diversos, goma; en estado gaseoso / vapor existe riesgo de explosión con el aire.

### **3.2.7. Información toxicológica**

*Toxicidad aguda:*

- DL50 (oral, rata): 5800 mg/kg;
- CL50 (inhalativo, rata): 76 mg/l /4 h;
- DL50 (dermal, conejo): 20000 mg/kg.

*Informaciones adicionales sobre toxicidad:* Tras inhalación de vapores: irritación de las mucosas, sueño, aturdimiento. A dosis elevadas: cefaleas, flujo salival, náuseas, vómito, vértigo, narcosis. No puede excluirse: coma.

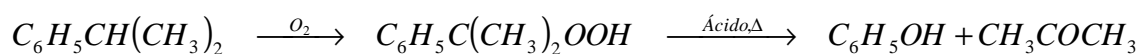
- Tras contacto con la piel: leves irritaciones. Acción desengrasante con formación de piel resquebrajada y agrietada.
- Tras contacto con los ojos: irritaciones. Riesgo de turbidez en la córnea.
- Tras ingestión: trastornos gastrointestinales, cefaleas, flujo salival, náuseas, vómito, vértigo, narcosis, coma.

## 4. MÉTODOS DE PRODUCCIÓN

### MÉTODO DEL CUMENO:

Proceso característico promovido para la fabricación de fenol como producto principal, y acetona como subproducto. Éste fue desarrollado en la década de los 50`s y es uno de los procesos comerciales más importantes para la obtención de este producto, tanto para Estados Unidos, Gran Bretaña, Europa Occidental como a nivel mundial.

El cumeno es oxidado al hacer burbujear aire u Oxígeno hacia Hidroperóxido de cumeno, y éste a su vez es descompuesto bajo condiciones ácidas y térmicas hacia la producción de fenol y acetona.



La elección de este proceso es evidente, dado que se reporta como una síntesis donde no se desperdician productos costosos, posee condiciones suaves y un bajo costo de maquinaria y equipo, de acuerdo con la bibliografía estudiada.

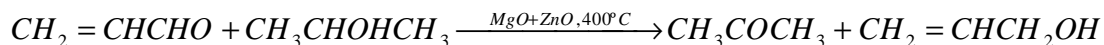
Un método análogo, es el proceso de p – cresol a partir del p – cumeno, aplicándose los principios mencionados anteriormente, aunque esta síntesis no es muy utilizada a nivel mundial.

### MÉTODO DEL ACETILENO:

Ésta síntesis consiste en pasar vapor de agua y acetileno sobre catalizadores adecuados como limonita parcialmente reducida por el Hidrógeno, Óxido de Torio o una sal doble de Torio con sales alcalinotérreas.

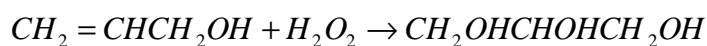
### MÉTODO DEL PROPILENO:

Dentro del proceso de producción del glicerol, implementado por Shell se encuentra la combinación de acroleína más alcohol isopropílico (IPA), para formar acetona y alcohol alílico, a partir de:



La acroleína es obtenida bajo oxidación del propileno bajo catalizadores de Óxido de Cobre a 300-400 °C y el I.P.A es obtenido bajo hidrólisis con agua de sulfato isopropílico, que a su vez se obtiene por absorción de ácido sulfúrico bajo presiones críticas.

El glicerol se obtiene al hacer reaccionar alcohol alílico con peróxido de hidrógeno:



En este proceso nuevamente se obtiene cetona como subproducto.

## MÉTODO DE ISOPROPIL ALCOHOL:

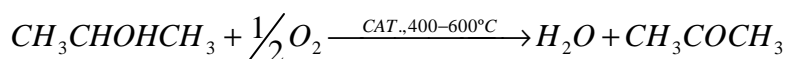
- DESHIDROGENACIÓN:

El otro proceso comercial es la deshidrogenación catalizada con óxido de Zinc sobre piedra pómez u otro catalizador. Ocurre una reacción endotérmica según:



- OXIDACIÓN:

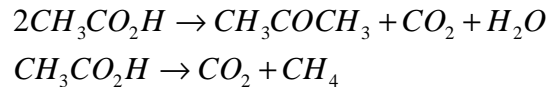
Una modificación al proceso de deshidrogenación es una reacción de oxidación catalizada que provee una reacción endotérmica según:



Donde el catalizador puede ser el mismo utilizado en la deshidrogenación. Es de notar que actualmente el I.P.A. por su condición de alto costo, se está utilizando en procesos que proveen mejores productos y se está aprovechando para otras condiciones como *biodiesels*.

## MÉTODO DE ÁCIDO ACÉTICO:

Reacción descubierta por *Squibb* hacia 1986, utiliza una descomposición catalítica del ácido acético libre, bajo catalizadores como carbón de madera, alúmina a 340 – 400°C, óxidos de Torio y Urano, Cobre a 390 – 410°C, óxidos y polvos de Zinc, entre otros; que proveen una afinidad hacia la reacción principal y no la secundaria.



## MÉTODO DE FERMENTACIÓN:

Método biológico que consiste en la fermentación de sustancias que contengan almidón con bacterias como *aceto butílicus* que, además, produce alcohol butílico, la bacteria *aceto aethylicus* o bacteria *maserans*. Se tiene conocimiento que éste método es utilizado a nivel industrial en Francia y en Norteamérica, pero es de notar que debido al tiempo de residencia y/o fermentación de 57 días, a hecho que esta industria sea relegada a otras especies tales como la fermentación alcohólica.

## OTROS PROCESOS:

Actualmente, se reportan otros métodos que debido a su composición y forma de tratamiento han pasado a un segundo plano.

La obtención de acetona a partir de acetato de Calcio es reportada hacia 1930, esto implica una destilación seca sobre catalizador de Hierro, obteniéndose una acetona bruta que luego tendrá que ser purificada según:



Otro método implica la destilación madera que arroja un producto fraccionado de alcohol y del cual se obtienen productos como alcohol metílico y acetona.

## 5. MATERIA PRIMA

### 5.1 CUMENO

#### 5.1.1. Propiedades físicas y químicas

*Peso molecular:* 120.20 g/mol

Punto de ignición: 420° C

Fórmula molecular: C<sub>9</sub>H<sub>12</sub>

Punto de destello: 31° C cm<sup>3</sup>

Fórmula molecular (estructurada):



Límites de explosión: Bajo 0.8 Vol%,  
Alto 6.0 Vol%

Estado físico: líquido.

Presión de vapor (20° C): 5.3 hPa

Color: incoloro.

Densidad (20° C): 0.86 g/cm<sup>3</sup>

Olor: aromático.

Solubilidad en: agua (20° C)  
insoluble, disolventes orgánicos (20°  
C) soluble

Valor pH: no disponible.

Viscosidad dinámica (20° C) 0.79  
mPa\*s

Información complementaria:

Destilable sin descomposición a  
presión normal.

Punto de fusión: -96° C

Punto ebullición (1013 hPa): 153° C

#### 5.1.2. Identificación de peligros

- Inflamable: Irrita las vías respiratorias. Tóxico para los organismos acuáticos, puede provocar a largo plazo efectos negativos en el medio ambiente acuático.
- Nocivo: si se ingiere puede causar daño pulmonar.

#### 5.1.3. Primeros auxilios

- Tras inhalación: aire fresco.
- Tras contacto con los ojos: Aclarar con abundante agua, manteniendo abiertos los párpados.

- Tras contacto con la piel: aclarar con abundante agua. Eliminar ropa contaminada.
- Tras ingestión: beber abundante agua. Evitar vómito.
- En caso de vómito espontáneo: peligro de aspiración. Posible fallo pulmonar. Consultar al médico.

#### **5.1.4. Medidas de lucha contra incendios**

- Medios de extinción adecuados: CO<sub>2</sub>, espuma, polvo.
- Riesgos especiales: Combustible. Vapores más pesados que el aire. Posible formación de mezclas explosivas con aire.
- Mantener alejado de fuentes de ignición.
- Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios: Permanencia en el área de riesgo sólo con ropa protectora adecuada y con sistemas de respiración artificiales e independientes del ambiente.

#### **5.1.5. Manipulación y almacenamiento. Estabilidad y reactividad**

- Manipulación: Mantener alejado de fuentes de ignición. Evitar la carga electroestática.
- Almacenamiento: Bien cerrado, en lugar bien ventilado, alejado de fuentes de ignición y de calor. De +15° C a +25° C.
- Materias a evitar: oxidantes fuertes.

#### **5.1.6. Información toxicológica**

*Toxicidad aguda:*

- DL50 (oral, rata): 1400 mg/kg
- DL50 (dermal, conejo): 12300 mg/kg

## 5.2 CATALIZADOR

Dentro del proceso de producción de acetona por el método de HOOK (Vía cumeno) se pueden utilizar diferentes catalizadores ácidos en la sección de tratamiento del hidroperóxido de cumeno para generar acetona y fenol por descomposición del mismo. Para la escogencia del catalizador se debe tener en cuenta que el mecanismo muestra que la reacción es de carácter iónico y se debe tener un compuesto que entregue en un medio (generalmente acuoso) iones  $H^+$ .

Compañías como *BP Chemicals, Ltda, Hercules, Inc* y *UOP Cumox* han utilizado generalmente ácido sulfúrico en su proceso (5-25 % peso a T. 50-70° C) puesto que es barato y presenta buenos resultados su utilización; otra clase de catalizadores ácidos sólidos han sido reportados, la U.S Pat N° 4.490.565 que implementa el uso de Beta Zeolita, U.S Pat N° 4.490.566 reporta el uso de *Constraint index 1-12 zeolite* como ZSM-5, U.S Pat N° 6.169.215 usa catalizadores sólidos formado por una modificación de óxidos de los metales del grupo IVB con los oxianiones de los grupos VIB y con sulfatos óxidos de los metales de transición, por último la U.S Pat. 6.441251 reporta el uso de M41S que corresponde a un material sólido con alto número de ácidos sulfónicos y que poseen una gran actividad ácida, el material del poro cristalino es un silicato o aluminosilicato trabajando a condiciones de T. 20-150° C y P. 1000 psig por contacto en una cama estacionaria o fluidizada.

Al analizar lo anterior, se llega a la conclusión de que el ácido sulfúrico es el catalizador más apropiado para el trabajo de descomposición del HCP, dado que es más barato, más fácil de utilizar y asequible para este territorio, además, es la materia prima más utilizada en las industrias, la cual ha presentado buenos resultados; los catalizadores sólidos reportados implican gastos energéticos puesto que la temperatura a la que ocurre la reacción es mucho mayor y la presión que se exige es mayor con la que se contaría al trabajar con ácido sulfúrico.



## 5.2.1 ÁCIDO SULFÚRICO

### 5.2.1.1 1. Propiedades físicas y químicas

*Peso molecular:* 98.08 g/mol

*Fórmula molecular:* H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>

*Fórmula molecular (estructurada):*



*Estado físico:* líquido.

*Color:* incoloro.

*Olor:* inodoro.

*Valor pH a 49 g/l H<sub>2</sub>O (25° C):* 0.3

*Viscosidad dinámica (20° C):* 26.9  
mPa\*s

*Punto de fusión:* -15° C

*Punto de ebullición:* 310° C

*Punto de ignición:* no disponible.

*Punto de destello:* no disponible.

*Límites de explosión:* Bajo no disponible, Alto no disponible.

*Presión de vapor (20° C):* 0.0001  
hPa

*Densidad de vapor relativa:* 3.4

*Densidad (20° C):* 1.84 g/cm<sup>3</sup>

*Solubilidad en:* agua (20° C) soluble  
(¡Atención! (Desprendimiento de calor), etanol soluble  
(¡Atención!)Desprendimiento de calor).

*Descomposición térmica:* 338° C

### 5.2.1.2. Primeros auxilios

- Tras inhalación: aire fresco. Avisar al médico.
- Tras contacto con la piel: Aclarar con abundante agua. Extraer la sustancia por medio de algodón impregnado con polietilenglicol 400. Despojarse inmediatamente de la ropa contaminada.
- Tras contacto con los ojos: Aclarar con abundante agua, manteniendo los párpados abiertos (al menos durante 10 minutos). Avisar inmediatamente al oftalmólogo.

- Tras ingestión: beber abundante agua (hasta varios litros), evitar vómitos (Riesgo de perforación). Avisar inmediatamente al médico. No efectuar medidas de neutralización.

#### **5.2.1.3. Medidas a tomar en caso de vertido accidental**

- Medidas de precaución relativas a las personas: No inhalar los vapores / aerosoles. Evitar el contacto con la sustancia.
- Medidas de protección del medio ambiente: No lanzar por el sumidero.
- Observaciones adicionales: Eliminación de la nocividad: neutralizar con sosa cáustica diluida, cal, arena de cal o carbonato sódico.

#### **5.2.1.4. Manipulación y almacenamiento. Estabilidad y reactividad**

- *Almacenamiento:* Bien cerrado, seco. Temperatura de almacenamiento: sin limitaciones.
- *Condiciones a evitar:* Calentamiento fuerte.
- *Materias a evitar:* Agua, metales alcalinos, compuestos alcalinos, amoníaco, metales alcalinotérreos, soluciones de hidróxidos alcalinos, ácidos, compuestos alcalinotérreos, metales, aleaciones metálicas, óxidos de fósforo, fósforo, hidruros, halogenuros de halógeno, halogenatos, permanganatos, nitratos, carburos, sustancias inflamables, disolventes orgánicos, acetiluros, nitrilos, nitrocompuestos orgánicos, anilinas, peróxidos, picratos, nitruros, litio siliciuro.
- *Información complementaria:* Higroscópico, corrosivo, incompatible con metales, tejidos de plantas / animales.

#### **5.2.1.5. Información toxicológica**

*Toxicidad aguda:*

- DL50 (oral, rata): 2140 mg/kg (Con soluciones al 25%).
- CL50 (inhalativo, rata): 0.51 mg/l /2 h (referido a la sustancia pura).

*Informaciones adicionales sobre toxicidad:* Tras inhalación de aerosoles: lesión de las mucosas afectadas.

- Tras contacto con la piel: graves quemaduras con formación de costras.
- Tras contacto con los ojos: quemaduras, lesiones de la córnea.
- Tras ingestión: fuertes dolores (¡peligro de perforación!), malestar, vómitos y diarrea. Tras un periodo de latencia de algunas semanas, posibilidad de estrechamiento de la salida del estómago (estenosis del píloro).

*Información complementaria:* El producto debe manejarse con las precauciones apropiadas para los productos químicos.

## 6. SUBPRODUCTOS Y DESECHOS

### 6.1 FENOL

#### 6.1.1. Propiedades físicas y químicas

Peso molecular: 94.11 g/mol

Fórmula molecular: C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>O

Fórmula molecular (estructurada):  
C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>OH

Estado físico: sólido.

Color: incoloro.

Olor: característico.

Valor pH a 50 g/l H<sub>2</sub>O (20° C): 5

Viscosidad dinámica (50° C): 3.437  
mPa\*s

Punto de fusión: 40.8° C

Punto de ebullición (1013 hPa):  
181.8° C

Punto de ignición: 595° C

Punto de destello: 81° C cm<sup>3</sup>, 85° C  
o.c.

Límites de explosión: Bajo 1.3 Vol%,  
Alto 9.5 Vol%

Presión de vapor (20° C): 0.2 hPa

Densidad de vapor relativa: 3.24

Densidad (20° C): 1.06 g/cm<sup>3</sup>

Densidad de amontonamiento: 620  
kg/m<sup>3</sup>

Solubilidad en: agua (20° C) 84 g/l,  
etanol fácilmente soluble, éter  
fácilmente soluble.

#### 6.1. 2. Primeros auxilios

- Tras inhalación: aire fresco. Llamar al médico. Introducción de oxígeno.
- Tras contacto con la piel: aclarar con abundante agua. Extraer la sustancia por medio de algodón impregnado con polietilenglicol 400. Despojarse inmediatamente de la ropa contaminada.

- Tras contacto con los ojos: Aclarar con abundante agua manteniendo los párpados abiertos (min. 10 minutos). Llamar enseguida al oftalmólogo.
- Tras ingestión: beber abundante agua; evitar vómitos (¡riesgo de perforación!). Aplicación posterior: Carbón activo (20-40g de suspensión al 10%). Llamar inmediatamente al médico.

### **6.1.3. Medidas de lucha contra incendios**

- Medios de extinción adecuados: Agua, espuma.
- Riesgos especiales: Inflamable. Vapores más pesados que el aire. Con aire se forman mezclas explosivas. En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

### **6.1.4 Manipulación y almacenamiento. Estabilidad. y reactividad**

- *Manipulación:* Proteger de la luz.
- *Almacenamiento:* Bien cerrado. Seco. Protegido de la luz. En lugar bien ventilado. De +15° C a +25° C. Sólo accesible a expertos.
- *Condiciones a evitar:* Calentamiento.
- *Materias a evitar:* aluminio, aldehídos, halógenos, nitritos, nitratos, peróxido de hidrógeno / agua oxigenada / compuestos férricos, halogenatos, peróxidos.
- *Productos de descomposición peligrosos:* información no disponible

### **6.1.5. Información toxicológica**

*Toxicidad aguda:*

- DLo (oral, hombre): 140 mg/kg;
- DL50 (oral, rata): 317 mg/kg;

- DL50 (dermal, rata): 669 mg/kg,
- CL50 (inhalativo, rata): 316 mg/m<sup>3</sup>.

## 6.2 HIDROPERÓXIDO DE CUMENO

### 6.2.1. Propiedades físicas y químicas

Estado físico: líquido.	Punto de ebullición (20 hPa) 116° C
Color: incoloro a amarillento.	
Olor: aromático, débilmente. Penetrante	Punto de destello 57° C
Viscosidad dinámica (20° C) 12 mPa*s	Densidad (20° C) 1.03 g/cm <sup>3</sup>
Punto de fusión < -25° C	Solubilidad en agua (23° C) 8 g/l metanol (20° C) soluble acetona (20° C) soluble.
Descomposición térmica > 80° C	

### 6.2.2 Identificación de peligros

Puede provocar incendios. Nocivo en contacto con la piel y por ingestión. Tóxico por inhalación. Provoca quemaduras. Nocivo: riesgo de efectos graves para la salud en caso de exposición prolongada por inhalación e ingestión.

### 6.2.3 Primeros auxilios

- Tras inhalación: aire fresco. Avisar al médico.
- Tras contacto con la piel: Aclarar con abundante agua. Extraer la sustancia por medio de algodón impregnado con polietilenglicol 400. Despojarse inmediatamente de la ropa contaminada.
- Tras contacto con los ojos: Aclarar con abundante agua, manteniendo los párpados abiertos (al menos durante 10 minutos).

#### **6.2.4 Medidas de lucha contra incendios**

Medios de extinción adecuados:

Agua, CO<sub>2</sub>, espuma, polvo.

Riesgos especiales:

Favorece un incendio. Alejar de sustancias combustibles.

#### **6.2.5. Manipulación y almacenamiento. Estabilidad y reactividad**

- *Manipulación:*

Indicaciones para una manipulación segura:

Evítase la generación de vapores / aerosoles. Trabajar bajo vitrina extractora. No inhalar la sustancia.

Observaciones sobre la protección de incendios y explosiones:

Mantener alejado de fuentes de ignición. Evitar la carga electrostática.

- *Materias a evitar* sustancias inflamables, fuerte soluciones de hidróxidos alcalinos, ácidos.

#### **6.2.6. Información toxicológica**

- *Toxicidad aguda* DL50 (oral, rata): 382 mg/kg
- *Toxicidad subaguda a crónica.*
- Tras inhalación: Irritación de las mucosas, tos y dificultad para respirar.
- Tras contacto con la piel: quemaduras. Riesgo de absorción por la piel.

- Tras contacto con los ojos: quemaduras

## 6.3 ALFA-METILESTIRENO

### 6.3.1. Propiedades físicas y químicas

*Peso molecular:* 118.18 g/mol

*Fórmula molecular:* C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>

*Estado físico:* líquido.

*Color:* incoloro.

*Olor:* desagradable.

*Valor pH a 500 g/l H<sub>2</sub>O* 5-6

*Punto de fusión:* -23 ° C

*Punto de ebullición:* 165 ° C

*Punto de ignición:* 420 ° C

*Punto de destello:* 47 ° C

*Límites de explosión:* Bajo 0.9 Vol%,  
Alto 6.6 Vol%

*Presión de vapor (20 ° C):* 2.9 hPa  
(30 ° C) 5.3 hPa (50 ° C) 15 hPa

*Densidad (20 ° C)* 0.91 g/cm<sup>3</sup>

*Solubilidad en:* agua (20 ° C)  
insoluble, etanol (20 ° C) soluble.



### 6.3.2. Primeros auxilios

- Tras inhalación: aire fresco.
- Tras contacto con la piel: aclarar con abundante agua. Eliminar ropa contaminada. Tras contacto con los ojos: aclarar con abundante agua, manteniendo abiertos los párpados. Llamar al oftalmólogo.
- Tras ingestión: Aplicación posterior: Carbón activo (20-40g de suspensión al 10%). No provocar el vómito. Llamar al médico.

### 6.3.3 Medidas de lucha contra incendios

- Medios de extinción adecuados: Agua, CO<sub>2</sub>, espuma, polvo.
- Riesgos especiales: Inflamable, vapores más pesados que el aire. Con aire se forman mezclas explosivas. En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

### 6.3.4 Manipulación y almacenamiento. Estabilidad y reactividad

- *Manipulación:* Observaciones sobre la protección de incendios y explosiones: Mantener alejado de fuentes de ignición. Evitar la carga electroestática.
- *Almacenamiento:* Bien cerrado, en lugar bien ventilado, alejado de fuentes de ignición y de calor. De +15° C a +25° C.
- *Materias a evitar:* iniciadores de polimerización.
- *Información complementaria:* Mantener alejado de fuentes de ignición.

### 6.3.5 Información toxicológica

#### *Toxicidad aguda:*

- DL50 (oral, rata): 4900 mg/kg.

- Tras inhalación: Irritación de las mucosas, tos y dificultad para respirar.
- Tras contacto con la piel: irritaciones.
- Tras contacto con los ojos: irritaciones.
- Tras ingestión: Irritaciones de las mucosas en la boca, garganta, esófago y tracto estomago-intestinal.

## **DESCRIPCION GENERAL DEL PROCESO**

Como se ha mencionado la acetona es un producto que puede obtenerse fácilmente por medio de determinados procesos en los cuales están incluidos diferentes compuestos: pero es la vía de cumeno la que mejor se adapta a las necesidades de montaje de un proceso; el método de HOOK como es conocido ha sido implementado en casi todo el mundo en la producción de fenol, resultando la acetona como un subproducto rentable que podría llegar a dejar muchas ganancias, a continuación se pretende ilustrar el trabajo de la planta con lo cual se recurrirá a toda la información bibliográfica que se tenga a la disposición, se intentará ser muy prudentes con la información para no incurrir en ninguna contradicción con lo que se trabaja industrialmente.

## **OXIDACIÓN**

Se realizará en una columna de burbujeo a la cual entrará aire atmosférico por la parte inferior, con el propósito de hacerlo burbujear en el cumeno y provocar la oxidación del mismo, ello provee una reacción exotérmica que envuelve 356 Btu de calor por cada libra de hidroperóxido de cumeno formado. Se pueden utilizar entre 3 a 4 oxidadores en serie ya que la conversión de cumeno a hidroperóxido es baja, siendo la conversión del cumeno a hidroperóxido de cumeno de 25 a 40 % (se escogerá una conversión de 35%), además, la reacción debe ser catalizada utilizando un emulsificante (promotor) para mejorar la conversión a los valores mencionados, para ello se utiliza una solución acuosa de carbonato de sodio o hidróxido de sodio utilizando relaciones de fase acuosa a orgánica de 2 a 5 (se utilizó una relación de 2 con carbonato de sodio).

El mecanismo de reacción predominante es la reacción de radicales libres. Los pasos para formar el hidroperóxido y demás compuestos es:

1. Se inicia la descomposición de algunos hidroperóxidos de cumeno (ROOH) para dar  $RO^*$  y radicales  $OH^*$ , los que reaccionan con el cumeno para formar radicales  $R^*$ .
2. Se propagan los radicales  $R^*$ , el cual forma rápidamente  $ROO^*$  en la presencia de Oxígeno, además, interactúa con el cumeno para formar el hidroperóxido y generar el radical  $R^*$ .
3. Se termina cuando los radicales se recombinan; los principales productos formados en la oxidación además del HCP son productos que se originan a partir del radical  $RO^*$ , siendo así la formación de dimetil fenil carbinol (DMPC) a partir del cumeno, además, se origina acetofenona por descomposición Homolítica quedando un radical metilo que reacciona con Oxígeno para obtenerse otros productos como metanol, formaldehído, ácido fórmico y dióxido de carbono.

Algunas condiciones son consideradas en la bibliografía, se reporta un tiempo de residencia de 3 a 6 horas, una presión ligeramente superior a la atmosférica.

## **LAVADO Y CONCENTRACIÓN**

Al quedar la mezcla de reacción después del oxigenador con cierta cantidad  $CaCO_3$  se hace imprescindible realizar un lavado o en el más apropiado caso una separación por decantación en la que se logre desagregar la solución orgánica de la mezcla acuosa, pasando la S.O a un concentrador para llevar el HPC hasta una concentración de 65 a 90 wt% (se escogerá una concentración de 90 wt%) en una torre de destilación a vacío en la que se elimina gran cantidad de cumeno, normalmente, la destilación es llevada en más de una etapa, es de observar que concentraciones mayores de 92 wt% de HCP conducen una inestabilidad en el proceso que lo vuelve explosivo, y por lo mismo peligroso para cualquier trabajo con éste.

## DESCOMPOSICIÓN DEL HIDROPERÓXIDO

El hidroperóxido de cumeno se descompone por completo, para dar inicialmente cantidades equimoleculares de fenol y acetona, se producen, además, pequeñas cantidades de  $\alpha$  - metilestireno al deshidratarse el DMPC. Los pasos incluyen:

- **REACTOR:**

Los productos de la mezcla de la oxidación del cumeno se añaden en un reactor CSTR o BATCH (recipiente agitado) comercialmente en el que se produce una descomposición de HCP al añadir un catalizador (líquido o sólido); generalmente el ácido sulfúrico se utiliza en concentraciones entre 5 – 15 wt% (se escogió uno de 10wt%) suministrándolo por un acidificador de rejilla hacia la zona de reacción, que está entre 50 y 90° C (termodinámicamente escogido en 50° C) por un tiempo suficiente de 30 a 120 minutos hasta bajar la concentración de HPC entre 0,2 y 3 wt% (escogida una de 2 wt%).

La reacción de descomposición de HPC en fenol y acetona es altamente exotérmica, por lo cual la temperatura es mantenida por medio de circulación a través de un sistema de refrigeración; si al diseñar el reactor se escoge un sistema de enfriamiento alterno, se debe incluir el tiempo gastado en la refrigeración, lo cual es función del diseño del sistema de intercambio de calor y de la naturaleza del fluido de enfriamiento; un límite mínimo que se acostumbra utilizar es de aproximadamente 5 minutos, si el fluido usado es agua. Lo anterior implicaría introducir un menor tiempo de residencia al emplear el sistema de refrigeración.

- **CONVERTIDOR:**

La mezcla de reacción del paso anterior es acondicionada a una temperatura entre 110 y 130° C bajo condiciones de flujo tapón (reactor PFR) por un tiempo suficiente para descomponer todo el HCP residual y convertir el DMPC en AMS, dado que, con estas condiciones es más favorable su condición.

## **TORRE DE LAVADO**

Después del convertidor, se hace necesario remover el ácido residual y sales inorgánicas que pueden encontrarse con lo cual se neutralizan los productos de la descomposición con fenóxido de sodio u otra solución alcalina como NaOH, algún álcali o resina de intercambio, además, se puede adicionar agua a contracorriente dentro de la torre empacada.

## **ZONA DE DESTILACIÓN**

La separación de los compuestos después de la reacción se lleva a cabo en columnas de destilación, siendo la acetona el primer compuesto en volatilizarse al tener un punto de ebullición de 56,1° C, luego el cumeno y  $\alpha$  - metilestirenos y por último el fenol con punto de ebullición de 454,9 K.

- **Torre N° 1:**

En esta torre la acetona cruda que sale en la cima contiene agua y otros componentes, que son usualmente tratados con álcali en un lavado posterior y luego puede ser purificado por destilación para venta.

La columna de acetona es operada a una temperatura de cima entre 30 y 60° C, los fondos son preferiblemente establecidos a una temperatura entre 40 y 110° C particularmente deseables entre 50 y 80° C. La temperatura de la corriente tomada de un punto cualquiera de la altura de torre de destilación de donde se obtiene la acetona pura, es preferible entre 30 y 60° C. Las etapas teóricas de la columna son 10 y 120. La zona de condensación (platos de cima) perteneciente a la columna de destilación tiene una separación potencial entre el 80 y el 99% preferiblemente entre el 90 y el 95%. La alimentación a la columna de destilación se produce en la sección donde haya una separación potencial entre el 0 y el 30%

- **TORRE N° 2:**

Se destilan los productos provenientes de la primera torre, principalmente AMS y Cumeno, que posteriormente pueden ser recirculados a la corriente del cumeno al pasar por un hidrogenador en presencia de Níquel entre “Raney” con un tiempo de residencia entre 15 y 30 minutos en el que se convierte el AMS en cumeno; si no se hace una recirculación el AMS y el cumeno pueden ser separados mediante destilación azeotrópica con agua.

La cima de la columna de cumeno es preferiblemente operada de una manera suficiente a una temperatura de 40 a 170° C. La temperatura de fondos es preferiblemente entre 110 y 180° C. La temperatura de la corriente tomada desde un punto cualquiera de la altura de torre de destilación de donde se obtiene el cumeno y/o AMS puros, es preferible entre 110 a 180° C. Las etapas teóricas de la columna de cumeno están entre 10 y 90. El plato de alimentación óptimo de la fase orgánica de la columna anterior se realiza en la región de la columna de cumeno que posee una separación potencial entre 10 y 80%. El punto de derivación en el que el cumeno y/o AMS es derivado se sitúa en la región de la columna que posee una separación potencial entre el 0 y el 50%.

- **TORRE N° 3:**

Se separa el fenol crudo proveniente de la segunda columna, fenol que puede ser purificado por destilación extractiva con agua o por tratamiento con una resina de intercambio iónico ácida y subsecuente destilación.

La columna de fenol crudo es preferiblemente operada en la parte superior de la columna a una temperatura entre 120 y 200° C, particularmente entre 130 y 180° C. La temperatura de fondos está entre 120 y 220° C. . La temperatura de la corriente tomada desde un punto cualquiera de la altura de torre de destilación de donde se obtiene el fenol puro, es preferible entre 120 a 190° C, particularmente entre 140 y 190° C. Las etapas teóricas de la columna están entre 10 y 70. La alimentación se realiza al lado de la columna que presente una separación

potencial entre el 0 y el 80%. La parte donde se deriva el fenol es tomado en el lado donde presente una separación entre el 30 y el 90%.



## CÁLCULOS DEL ANÁLISIS TERMODINÁMICO Y CONDICIONES ÓPTIMAS

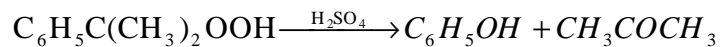


Tabla N° 1.

COMPUESTO	FASE	$\Delta H_f^\circ$	$\Delta H_v^\circ$	$\Delta G_f^\circ$	PM	T <sub>b</sub>
CUMENO	Líquido	-41.4	45.15	124.3	120.19 5	425. 6
	Gaseoso	4.0		137.0		
HIDROPERÓXIDO DE CUMENO	Líquido	-149	69.9	-166.67**	152.19 3	373. 7
	Gaseoso	-78.7		-101.67*		
ACETONA	Líquido	-242.1	31.27	-155.8	58.080	329. 2
	Gaseoso	-217.7		-153.2		
FENOL	Líquido	158.2 6	-----	-46.14	94.113	455. 0
	Gaseoso	-96.4		-32.9		

$\Delta H_f^\circ$  (KJ/mol)

T<sub>b</sub> (K)

$\Delta H_v^\circ$  (KJ/mol)

PM (g/gmol)

$\Delta G_f^\circ$  (KJ/mol\*k)

Las propiedades de los compuestos fueron sacadas del “*Lange’s Handbook Chemistry*”. Tabla 6-1 de Jhon A. Dean, excepto las del hidropéroxido de cumeno que fueron sacadas de la pagina web Nist.

Como la reacción se efectúa en fase líquida, tenemos que calcular la energía libre de Gibbs de la siguiente manera:

El problema que se presenta, es que no se tiene la energía libre de Gibbs líquida del hidropéroxido de cumeno, pues se necesita para calcular la energía de reacción libre de Gibbs estándar; entonces, se procede a calcularla como se muestra a continuación:

- Cálculo de la energía Libre de Gibbs líquida:

Como no se tiene la energía libre de Gibbs líquida del hidropéroxido de cumeno, se debe calcular hallando en primera instancia, la entropía normal de evaporización y luego corregirla con la temperatura de ebullición del hidropéroxido de cumeno. Teniendo esta última, se calcula la energía libre de Gibbs de evaporización, para luego calcular lo deseado.

Primero se determina la entropía normal de evaporización con la ecuación de *Kistiakowsky* del libro “*The properties of gases and liquids*” de Reid. Pág.230.

$$\Delta S_{vb} = 44.367 + 15.33 \log T_b + 0.39137 \frac{T_b}{PM} + 4.33 \cdot 10^{-3} \frac{T_b^2}{PM} - 5.627 \cdot 10^{-6} \frac{T_b^3}{PM}$$

$$\Delta S_{vb} = 44.367 + 15.33 \log 373.7 + 0.39137 \frac{373.7}{152.193} + 4.33 \cdot 10^{-3} \frac{373.7^2}{152.193} - 5.627 \cdot 10^{-6} \frac{373.7^3}{152.193}$$

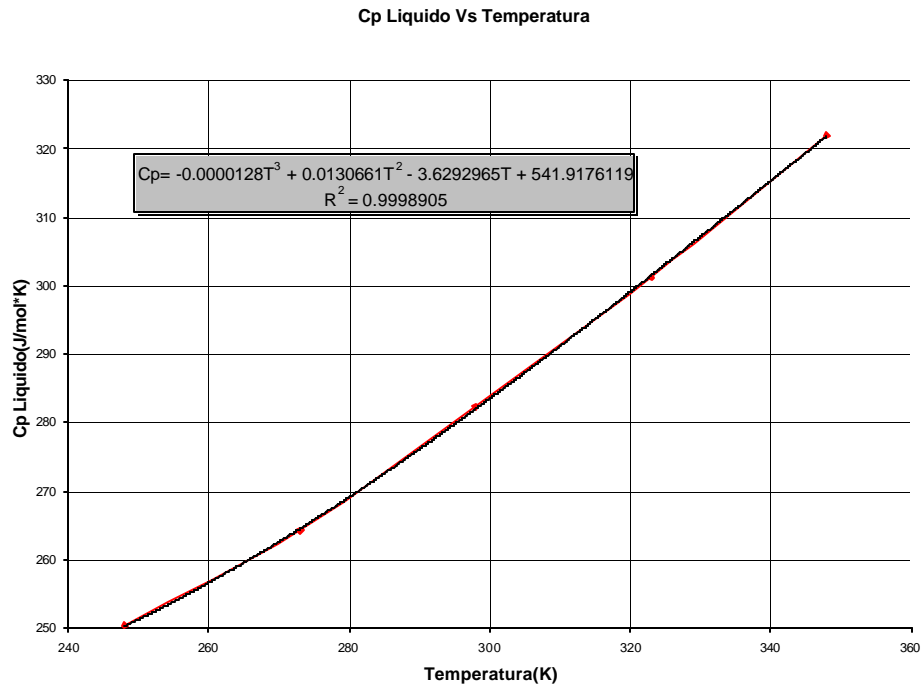
$$\Delta S_{vb} = 86.61 \text{ J / mol} \cdot \text{K}$$

Ahora, se determina el Cp líquido por métodos de grupos de contribución a diferentes temperaturas, y así hallar una correlación. Método de Missenard. Pág.139 del Reid.

## Tabla Nº 2.

CP líquido (J/mol.K)
----------------------

<b>TEMPERATURA (k)</b>	<b>248</b>	<b>273</b>	<b>298</b>	<b>323</b>	<b>348</b>
<b>GRUPOS</b>					
<b>-CH<sub>3</sub></b>	38.5	40.0	41.6	43.5	45.8
<b>-C-</b>	8.4	8.4	8.4	8.4	8.4
<b>-O-</b>	28.9	29.3	29.7	30.1	30.5
<b>-OH</b>	27.2	33.5	43.9	52.3	61.7
<b>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>-</b>	108.8	113.0	117.2	123.4	129.7



**Gráfica N° 1.  $C_p$  Vs. Temperatura.**

Con la correlación del  $C_p$  líquido del hidroperóxido de cumeno, se puede calcular la entropía de evaporación estándar del hidroperóxido de cumeno.

**Tabla N° 4.**

<b><math>C_{pLíquido}</math> DE LOS COMPUESTOS(J/mol.K)=<math>A+BT+CT^2+DT^3</math></b>				
<b>COMPUESTOS</b>	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>D</b>
<b>HIDROPERÓXIDO DE CUMENO</b>	541.9176119	-3.6292965	$1.30661 \cdot 10^{-2}$	$1.28 \cdot 10^{-5}$
<b>ACETONA</b>	16.8022	$8.48409 \cdot 10^{-1}$	$-2.64114 \cdot 10^{-3}$	$3.39139 \cdot 10^{-6}$
<b>FENOL</b>	-36.1614	1.15354	$-2.12291 \cdot 10^{-3}$	$1.74183 \cdot 10^{-6}$

Las constantes del fenol y la acetona fueron sacadas del libro de Reklaitis.

Calculando la entropía de evaporación estándar:

$$\Delta S_v^\circ = \Delta S_{vb} + \int_{373.7}^{298} C_{p_{liq}} \partial \ln T$$

$$\Delta S_v^\circ = 86.61 + \left( 541.9176119 \ln T - 3.6292965T + \frac{0.0130661}{2} T^2 - \frac{0.0000128}{3} T^3 \right)$$

$$\Delta S_v^\circ = 16.4441 J / mol \cdot K$$

Calculando el  $\Delta S_v^\circ$  y  $\Delta H_v^\circ$  (De la Tabla N° 2), se determina la energía de evaporización libre de Gibbs del hidroperóxido de cumeno.

$$\Delta G_v^\circ = H_v^\circ - T^\circ \cdot \Delta S_v^\circ$$

$$\Delta G_v^\circ = 69900 J / mol - 298 K \cdot 1.44441 J / mol \cdot K$$

$$\Delta G_v^\circ = 64999.67 J / mol \cdot K$$

Ahora, se calcula la energía libre de Gibbs gaseosa por el método de contribución de Joback. Pág.155 del Reid.

**Tabla N° 5.**

GRUPOS	$\Delta G_{gas}^\circ$ (KJ/mol)
-CH <sub>3</sub>	-43.96
-C-	116.02
-OH	-189.2
-O-	-105.0
=CH-	11.30
=C-	54.05

$$\Delta G_{gas}^\circ = 53.88 + \sum_j n_j \Delta G$$

$$\Delta G_{gas}^\circ = 53.88 + (2 \cdot (-43.96) + 116.02 - 189.2 - 105 + 5 \cdot (11.3) + 54.05) KJ / mol$$

$$\Delta G_{gas}^{\circ} = -101.67 \text{ KJ} / \text{mol}$$

Después de haber hecho todos los cálculos pertinentes, se procede por último al calcular la energía libre de Gibbs líquida del hidroperóxido de cumeno.

$$\Delta G_{gas}^{\circ} = \Delta G_{liq}^{\circ} + \Delta H_v^{\circ}$$

$$\Delta G_{liq}^{\circ} = (-101670 - 64999.67) \text{ J} / \text{mol}$$

$$\Delta G_{liq}^{\circ} = -166669.67 \text{ J} / \text{mol}$$

Con los calores de reacción de todos los compuestos reaccionantes líquidos, se halla el calor de reacción estándar.

$$\Delta H_{rxn}^{\circ}(298\text{K}) = \Delta H_{liq,acetona}^{\circ} + \Delta H_{liq,fenol}^{\circ} - \Delta H_{liq,hidrop}^{\circ}$$

$$\Delta H_{rxn}^{\circ}(298\text{K}) = ((-242.1) + (-158.26) - (-149)) \text{ KJ} / \text{mol}$$

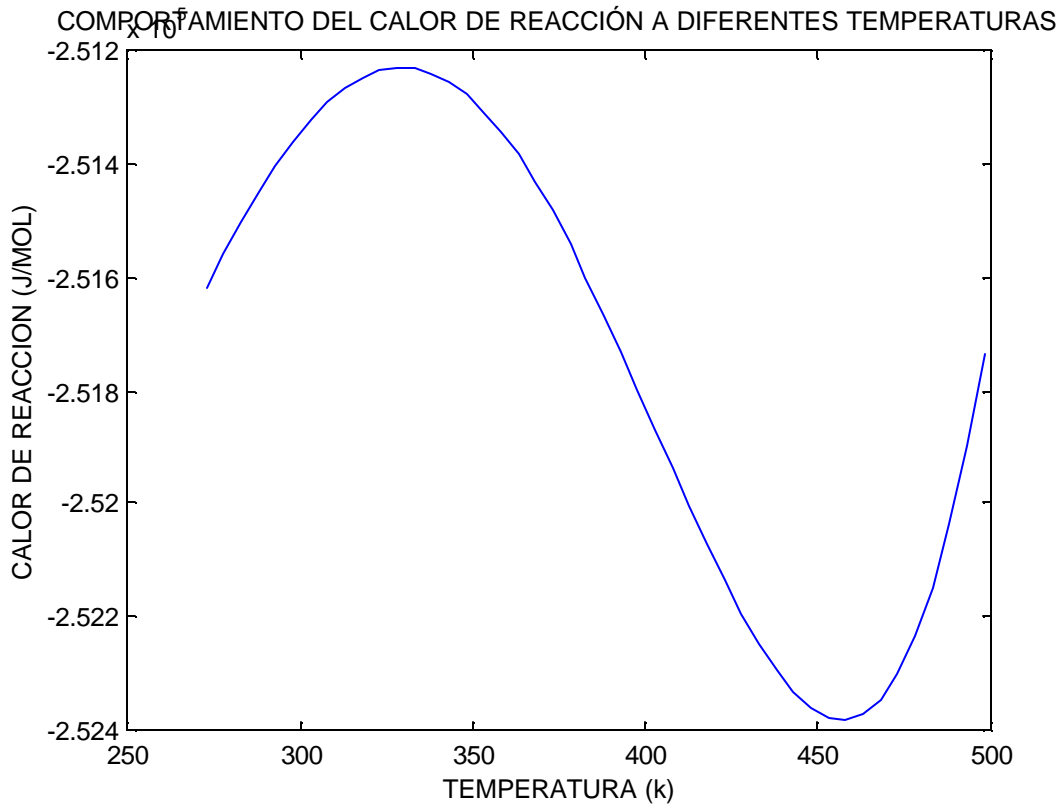
$$\Delta H_{rxn}^{\circ}(298\text{K}) = -251.36 \text{ KJ} / \text{mol}$$

Hallando el calor de reacción estándar, se procede a corregir el calor de reacción a diferentes temperaturas por medio de la ecuación siguiente.

$$\Delta H(T) = \Delta H_{rxn}^{\circ}(298\text{K}) + \sum_j \int_{298}^T n_j C_{p,j}^{\circ} dT$$

Este calor de reacción a diferentes temperaturas, se realizó a través del software *matlab*, donde se graficó con respecto a la temperatura (ver en anexos).

## Gráfica N° 2. Comportamiento del calor de reacción con respecto a la temperatura



La gráfica anterior indica que la reacción del hidroperóxido de cumeno es exotérmica y que a medida que aumenta la temperatura, tiende a volverse endotérmica, pero llega un momento (450K) donde y tiende a subir su exotermicidad con el aumento de la temperatura. Como esta reacción es exotérmica se recomienda trabajar con un reactor que facilite el control de la temperatura.

Como ya se determinó la energía libre de Gibbs líquida del hidroperóxido de cumeno, se dispone a calcular la energía libre de Gibbs estándar de la reacción.

$$\Delta G^{\circ}_{rxn}(298K) = \Delta G^{\circ}_{liq,acetona} + \Delta G^{\circ}_{liq,fenol} - \Delta G^{\circ}_{liq,hidrop}$$

$$\Delta G^{\circ}_{rxn}(298K) = ((-155.8) + (-46.14) - (-166.67))KJ/mol$$

$$\Delta G^{\circ}_{rxn}(298K) = -35.27KJ/mol$$

Con la ecuación siguiente se halló la constante de equilibrio estándar.

$$-G^{\circ}_{rxn} = R \cdot T^{\circ} \cdot \ln K^{\circ}$$

$$K^{\circ} = \exp\left(\frac{-G^{\circ}_{rxn}}{R \cdot T^{\circ}}\right)$$

$$K^{\circ} = \exp\left(\frac{-(-35.27)}{0.00831451 \cdot 298}\right)$$

$$K^{\circ} = 1520242.68$$

Con la constante estándar y el calor de reacción a las diferentes temperaturas, se calculan las constantes de equilibrio a esas temperaturas, de la siguiente manera.

$$K(T) = K^{\circ} \cdot \exp\left(-\Delta H_{rxn}(T) \cdot \left(\frac{\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}}{R}\right)\right)$$

Hallando las constantes de equilibrio a las diferentes temperaturas, se puede determinar la energía libre de Gibbs a diferentes temperaturas, con su respectiva constante de equilibrio.

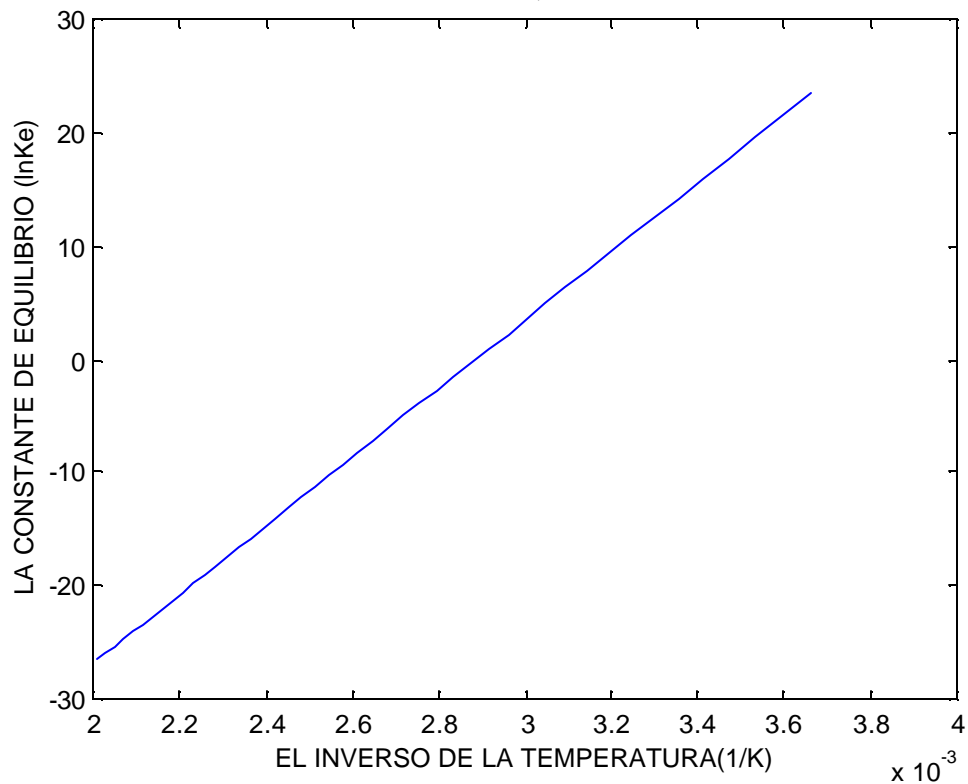
$$-G_{rxn}(T) = R \cdot T \cdot \ln K(T)$$

A continuación se indican las gráficas de la constante de equilibrio y la energía libre de Gibbs con respecto a la temperatura.



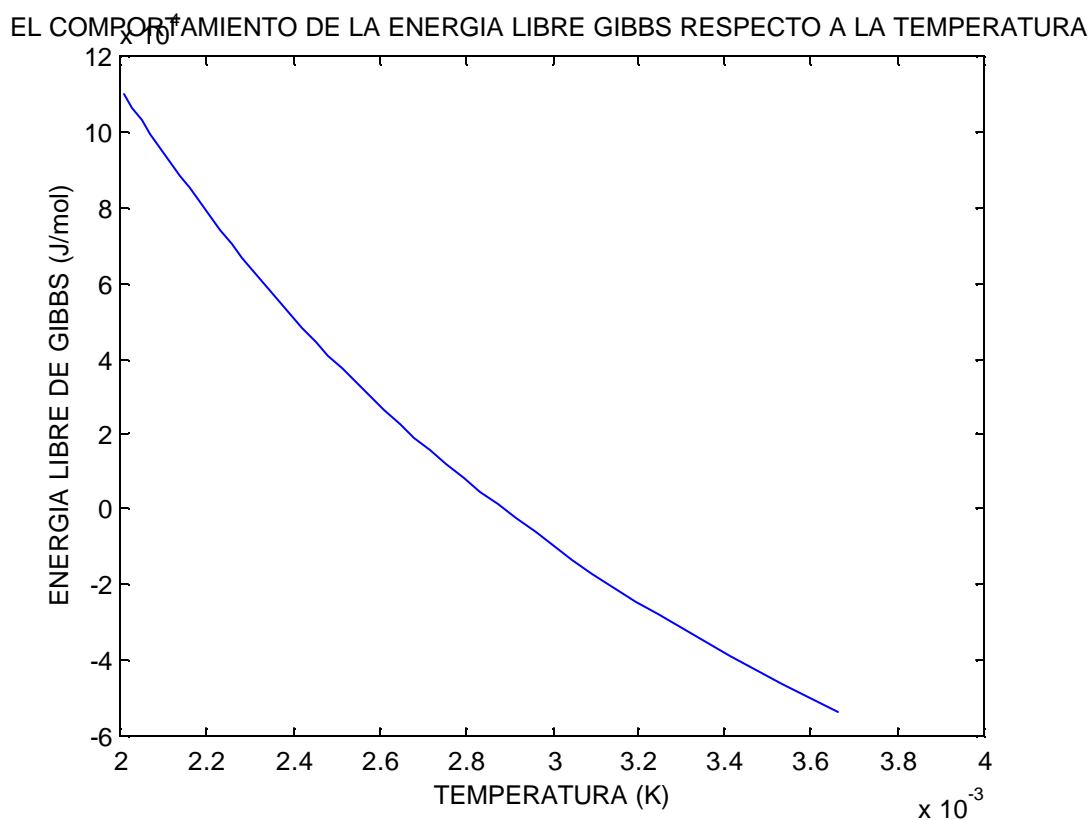
**Gráfica N° 3. Comportamiento de la constante de equilibrio con respecto a la temperatura.**

COMPORTAMIENTO DE LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO CON RESPECTO A LA TEMPERAT



La gráfica N° 3 indica que a menor temperatura, mayor es la constante de equilibrio; y entre más grande sea la constante de equilibrio mayor será la cantidad de productos que se tendrán.

**Gráfica N° 4. Comportamiento de la energía libre de Gibbs respecto a la temperatura.**



Al observar la Gráfica N° 4. La energía libre de Gibbs nos indica, si la reacción puede ser posible. En caso del hidroperóxido de cumeno, es posible la reacción por debajo de una temperatura de 84°C.

## BALANCES DE MATERIA

### REACTOR:

Flujo asignado  $F^7=10000$  Ton/hora

- Agua ( $H_2O$ )

$$F^7 W_{H_2O}^7 + F^{18} W_{H_2O}^{18} = F_{H_2O}^8 \rightarrow 10000(0,02) + F^{18}(0,9) = F_{H_2O}^8$$

- Ácido Sulfúrico (AS)

$$F^{18} W_{AS}^{18} = F^8 W_{AS}^8 \rightarrow F^{18}(0,1) = F^8(0,02) \quad F^{18} = 0.2 * F^8$$

- Total

$$10000 = F^8 - F^{18}$$

Resolviendo balance de A.S y Total

$$F^8 = 12500$$

$$F^{18} = 2500$$

- HPC (HPC) Hidroperóxido de Cumeno.

$$F^7 W_{HPC}^7 = M_{HPC} \gamma_5 + F^8 W_{HPC}^8 \rightarrow 10000 * 0.9 = 152 \gamma_5 + 12500 * 0.02 \quad \gamma_5 = 57.5658$$

- Acetona (Ace)

$$M_{(Ace)} \gamma_5 = F_{Ace}^8 \rightarrow 58 * 57.5658 = F_{Ace}^8 \quad F_{Ace}^8 = 3338.2105$$

- Cumeno (C)

$$F_C^7 = F_C^8$$

- DMPC (DMPC) Dimetil Fenil Carbinol

$$F^7 W_{DMPC}^7 = F_{DMPC}^8 \rightarrow 10000 * 0,005 = F_{DMPC}^8 \quad F_{DMPC}^8 = 50$$

- Fenol (F)

$$M_F g_5 = F_F^8 \rightarrow (94)(57.5658) = F_F^8 \quad F_F^8 = 5411.1842$$

- Acetofenona y otros (AF)

$$F_{AF}^7 = F_{AF}^8$$

A partir de la corriente (7).

Re *solviendo* :

$$\begin{aligned} F_C^7 &= 600 & \rightarrow W_C^7 &= 0.06 \\ F_{AF}^7 &= 150 & \rightarrow W_{AF}^7 &= 0.015 \\ F_{DMPC}^7 &= 50 & \rightarrow W_{DMPC}^7 &= 0.005 \\ F_{H_2O}^7 &= 200 & \rightarrow W_{H_2O}^7 &= 0.02 \\ F_{HPC}^7 &= 9000 & \rightarrow W_{HPC}^7 &= 0.9 \\ & & \Sigma &= 1 \end{aligned}$$

A partir de la corriente (8).

Re *solviendo* :

$$\begin{aligned} F_C^8 &= 60 & \rightarrow W_C^8 &= 0.048 \\ F_F^8 &= 5411.1842 & \rightarrow W_F^8 &= 0.4329 \\ F_{ACE}^8 &= 3338.2105 & \rightarrow W_{ACE}^8 &= 0.2671 \\ F_{AF}^8 &= 150 & \rightarrow W_{AF}^8 &= 0.012 \\ F_{DMPC}^8 &= 50 & \rightarrow W_{DMPC}^8 &= 0.004 \\ F_{H_2O}^8 &= 2450 & \rightarrow W_{H_2O}^8 &= 0.1964 \\ F_{AS}^8 &= 250 & \rightarrow W_{AS}^8 &= 0.02 \\ F_{HPC}^8 &= 250 & \rightarrow W_{HPC}^8 &= 0.02 \\ & & \Sigma &= 1 \end{aligned}$$

### CONVERTIDOR:

- HPC (HPC) Hidroperóxido de Cumeno.

$$Si W_{HPC}^9 = 0.004\%$$

$$F_{HPC}^8 = M_{HPC} g_5 + F^9 W_{HPC}^9 \quad 250 = 152 g_5^\circ + 12500 * 0.00004 \quad g_5^\circ = 1.6447$$

- Fenol (F)

$$F_F^8 + M_F^* g_5^o = F_F^9 \quad \text{②} \quad 5411.184 + 94 * 1.6447 + F_F^9 \quad F_F^9 = 5565.7870$$

- Acetona (Ace)

$$F_{ACE}^8 + M_F^* g_5^o = F_{ACE}^9 \quad \text{②} \quad 5411.184 + 58 * 1.6447 + F_{ACE}^9 \quad F_F^9 = 3434.2105$$

- Cumeno (C)

$$F_C^8 = F_C^9 \quad 600 = F_C^9$$

- Acetofenona y otros (AF)

$$F_{AF}^8 = F_{AF}^9 \quad 150 = F_{AF}^9$$

- Ácido Sulfúrico (AS)

$$F_{AS}^8 = F_{AS}^9 \quad 250 = F_{AS}^9$$

- Agua (H<sub>2</sub>O)

$$F_{H_2O}^8 + M_{H_2O} g_7 = F_{H_2O}^9 \quad 2450 + (18)(g_7) = F_{H_2O}^9$$

- Dimetil fenil carbinol (DMPC)

$$F_{DMPC}^8 = M_{DMPC} g_7 \quad 50 = (136)g_7 \quad g_7 = 0.3676$$

- **a** - Metil estireno (AMS)  $M_{AMS} g_7 = F_{AMS}^9 \quad (118)0.3676 = F_{AMS}^9$

Re *solviendo* :

$$F_C^9 = 600 \quad \rightarrow W_C^9 = 0.048$$

$$F_F^9 = 5565.7870 \quad \rightarrow W_F^9 = 0.4453$$

$$F_{ACE}^9 = 3434.2105 \rightarrow W_{ACE}^9 = 0.2747$$

$$F_{AF}^9 = 150 \quad \rightarrow W_{AF}^9 = 0.012$$

$$F_{AMS}^9 = 43.3768 \quad \rightarrow W_{AMS}^9 = 0.0035$$

$$F_{H_2O}^9 = 2456.6168 \rightarrow W_{H_2O}^9 = 0.1965$$

$$F_{AS}^9 = 250 \quad \rightarrow W_{AS}^9 = 0.02$$

$$\sum = 12499.9921 \quad \sum = 1$$

$$\approx 12500$$

### TORRE DE LAVADO:

- Fenol (F)

$$F_F^9 = F_F^{11} \quad 5565.7870 = F_F^{11}$$

- Acetona (Ace)

$$F_{Ace}^9 = F_{Ace}^{11} \quad 3434.2105 = F_{Ace}^{11}$$

- Cumeno (C)

$$F_C^9 = F_C^{11} \quad 600 = F_C^{11}$$

- **a** - Metil estireno (AMS)

$$F_{AMS}^9 = F_{AMS}^{11} \quad 43.3768 = F_{AMS}^{11}$$

- Acetofenona y otros (AF)

$$F_{AF}^9 = F_{AF}^{11} \quad 150 = F_{AF}^{11}$$

- Agua (H<sub>2</sub>O)

$$F_{H_2O}^9 + F^{19} = F_{H_2O}^{11} + F_{H_2O}^{10} \quad 2456.6168 + F^{19} = F_{H_2O}^{11} + F_{H_2O}^{10}$$

- Ácido Sulfúrico (AS)

$$F_{AS}^9 = F_{AS}^{10} \quad 250 = F_{AS}^{10}$$

### Solucion Acuosa

$$F_{AS}^{10} + F_{H_2O}^{10} = F^{10} \rightarrow 250 + F_{H_2O}^{10} = F^{10}$$

$$F_{H_2O}^9 + F^{19} * W_{H_2O}^{19} = F_{H_2O}^{10} + F_{H_2O}^{11} \rightarrow 24566168 + F^{19} * 0.995 = F_{H_2O}^{10} + F_{H_2O}^{11}$$

Si  $W_{H_2O}^{10} = 0,9476$  a partir solucion acuosa

$$F^{10} = 5000 \quad F_{H_2O}^{10} = 47380762 \quad W_{H_2O}^{10} = 0.9476$$

$$F_{AS}^{10} = 250 \quad W_{AS}^{10} = 0.05$$

$$F_{NEU}^{10} = 11.9238 \quad W_{NEU}^{10} = 0.00238$$

NEU = NEUTRALIZANTE

### Total

$$F^9 + F^{19} = F^{11} + F^{10} \rightarrow 12500 + F^{19} = F^{11} + 5000$$

Si  $W_{H_2O}^{11} = 0,005$  a partir de B.total y B.agua

$$F^{11} = 9482.5962$$

$$F^{19} = 2342.3832$$

Re solviendo :

$$F_C^{11} = 600 \quad \rightarrow W_C^{11} = 0.06$$

$$F_F^{11} = 5565.7870 \quad \rightarrow W_F^{11} = 0.5655$$

$$F_{ACE}^{11} = 3434.2105 \quad \rightarrow W_{ACE}^{11} = 0.3409$$

$$F_{AF}^{11} = 150 \quad \rightarrow W_{AF}^{11} = 0.0152$$

$$F_{AMS}^{11} = 43.3768 \quad \rightarrow W_{AMS}^{11} = 0.0044$$

$$F_{H_2O}^{11} = 49.2119 \quad \rightarrow W_{H_2O}^{11} = 0.005$$

$$\sum = 9482.5862 \quad \sum = 1$$

### TORRE N° 1:

- Fenol (F)

$$F_F^{11} = F_F^{13} \quad 5565.7870 = F_F^{13}$$

- Acetona (Ace)

$$F_{Ace}^{11} = F_{Ace}^{12} \quad 3434.2105 = F_{Ace}^{12}$$

- Cumeno (C)

$$F_C^{11} = F_C^{13} \quad 600 = F_C^{13}$$

- **a** - Metil estireno (AMS)

$$F_{AMS}^{11} = F_{AMS}^{13} \quad 43.3768 = F_{AMS}^{13}$$

- Relación

$$F_{AF,OTROS}^{11} * 0.75 = F_{AF}^{11} \quad 112.5 = F_{AF}^{11} = F_{AF}^{11}$$

- Acetofenona (AF)

$$F_{AF}^{11} = F_{AF}^{13} \quad 112.5 = F_{AF}^{13}$$

- Agua (H<sub>2</sub>O)

$$F_{H_2O}^{11} = F_{H_2O}^{12} \quad 49.2119 = F_{H_2O}^{12}$$

- Otros

$$F_{Otros}^{11} = F_{Otros}^{12} \quad 37.5 = F_{Otros}^{12}$$

Re *solviendo* :

$$F_{ACE}^{12} = 3434.2105 \rightarrow W_{ACE}^{12} = 0.9754$$

$$F_{otros}^{12} = 37.5 \rightarrow W_{otros}^{12} = 0.0140$$

$$F_{H_2O}^{12} = 49.2119 \rightarrow W_{H_2O}^{12} = 0.0107$$

$$F^{12} = \sum = 3520.9224 \quad \sum = 1$$

Re *solviendo* :

$$F_C^{13} = 600 \rightarrow W_C^{13} = 0.8804$$

$$F_F^{13} = 5565.7870 \rightarrow W_F^{13} = 0.0949$$

$$F_{AF}^{13} = 12.5 \rightarrow W_{AF}^{13} = 0.0069$$

$$F_{AMS}^{13} = 43.3768 \rightarrow W_{AMS}^{13} = 0.0178$$

$$F^{13} = \sum = 6321.6638 \quad \sum = 1$$

## TORRE N° 2:

- Fenol (F)



$$F_F^{13} = F_F^{15} \quad 5565.7870 = F_F^{15}$$

- **a** - Metil estireno (AMS)

$$F_{AMS}^{13} = F_{AMS}^{14} \quad 43.7368 = F_{AMS}^{14}$$

- Acetofenona (AF)

$$F_{AF}^{13} = F_{AF}^{15} \quad 112.5 = F_{AF}^{15}$$

- Cumeno (C)

$$F_C^{13} = F_C^{14} \quad 600 = F_C^{14}$$

Re solviendo :

Re solviendo :

$$\begin{array}{llll} F_C^{14} = 600 & \rightarrow W_C^{13} = 0.9326 & F_F^{15} = 5565.7870 & \rightarrow W_F^{15} = 0.9802 \\ F_{AMS}^{13} = 43.3768 & \rightarrow W_{AMS}^{13} = 0.0674 & F_{AF}^{15} = 112.5 & \rightarrow W_{AF}^{15} = 0.0198 \\ F^{14} = \sum = 643.3768 & \sum = 1 & F^{15} = \sum = 5678.2870 & \sum = 1 \end{array}$$

### TORRE N° 3:

- Fenol (F)

$$F_F^{15} = F_F^{16} \quad 5565.7870 = F_F^{16}$$

$$F_{AF}^{15} = F_{AF}^{17} \quad 112.5 = F_{AF}^{17}$$

### GLOBALES:

- Relaciones

$$F^3 = 3.62 * F_F^{16} \quad F^3 = 3.62 * 5565.7870 \quad F^3 = 20168.0672$$

$$F^1 = 64.9548 * F_F^{16} \quad F^1 = 64.9548 * 5565.7870 \quad F^1 = 361524.5814$$

$$F^2 = 2 * F^3 \quad F^2 = 2 * 20168.0672 \quad F^2 = 40336.1344$$

$$X_{HCP}^C = \frac{\sum ri}{M^3} = 0.35 \quad r1 = \frac{0.35 * 20168.0672}{120} = 58.8238$$

### OTROS

$$M_{\text{otros}} * g_4 = F_{\text{OTROS}}^{12} \quad 320 * g_4 = 37.5 \quad g_4 = 0.1172$$

- Nitrógeno

$$F^1 W_{N_2}^1 = F_{N_2}^4 \quad 361524.5814 * 0.6817 = F_{N_2}^4 \quad F_{N_2}^4 = 346451.3071$$

- CO<sub>2</sub>

$$44 g_4 = F_{CO_2}^4 \quad 44 * 0.1172 = F_{CO_2}^4 \quad 5.1568 = F_{CO_2}^4$$

Arrastrando las variables encontradas hacia el balance del Oxigenador

### OXIGENADOR:

- HPC (HPC) Hidroperóxido de Cumeno.

$$F_{HPC}^5 = M_{HPC} g_1 \rightarrow 153 * 58.8235 = F_{HPC}^5 \quad F_{HPC}^5 = 9000$$

- Cumeno (C)

$$F_C^3 - 120(g_1 + g_3 + 8 * g_4) = F_C^5 \rightarrow 20168.0672 - 120(58.8235 + g_3 + 8 * 0.1172) = F_C^5$$

- DMPC (DMPC) dimetil fenil carbinol

$$M_{DMPC} * g_3 = F_{DMPC}^5 \rightarrow 136 * g_3 = F_{DMPC}^5$$

- Estabilizante (CaCO<sub>3</sub>)

$$F^2 W_{CaCO_3}^2 = F_{CaCO_3}^5 \rightarrow 40336.1344 * 0.1 = F_{CaCO_3}^5 \quad F_{CaCO_3}^5 = 2016.867$$

- Acetofenona

$$M_{AF} * 8 * g_4 = F_{AF}^5 \quad F_{AF}^5 = 112.5$$

- Otros

$$M_{\text{OTROS}} * 1 * g_4 = F_{\text{OTROS}}^5 \quad F_{\text{OTROS}}^5 = 37.5$$

- Oxígeno

$$F^1 W_{O_2}^1 - 32(g_1 + 0.5g_3 + 13g_4) = F_{O_2}^4 \rightarrow$$

$$361524.5814 * 0.3182 - 32(58.8235 + 0.5g_3 + 13 * 0.1172) = F_{O_2}^4$$

- Agua (H<sub>2</sub>O)

$$F^2 W_{H_2O}^2 = F_{H_2O}^5 \rightarrow 0.95 * 40336.1344 = F_{H_2O}^5$$

Por Balances Anteriores

$$F_{DMPC}^7 = F_{DMPC}^{21} = F_{DMPC}^5 = 50$$

$$\text{Reemplazando.....B.DMPC} \rightarrow g_3 = 0.3676$$

$$\text{En...B.Cumeno} \rightarrow F_C^5 = 12952.6232$$

Re solviendo :

$$F_C^5 = 12952.6232 \rightarrow W_C^5 = 0.2073$$

$$F_{CaCO_3}^5 = 2016.867 \rightarrow W_{CaCO_3}^5 = 0.0323$$

$$F_{AF}^5 = 112.5 \rightarrow W_{AF}^5 = 1.8003x - 3$$

$$F_{DMPC}^8 = 50 \rightarrow W_{DMPC}^5 = 8.001x - 4$$

$$F_{H_2O}^8 = 38317.3277 \rightarrow W_{H_2O}^5 = 0.6132$$

$$F_{HPC}^8 = 9000 \rightarrow W_{HPC}^5 = 0.1440$$

$$F_{otros}^5 = 37.5 \rightarrow W_{OTROS}^5 = 6.001x - 4$$

$$F^5 = \sum = 62488.8179 \quad \sum = 1$$

Re solviendo :

$$F_{O_2}^4 = 113100.13 \rightarrow W_{O_2}^4 = 0.6854$$

$$F_{N_2}^4 = 246451.3071 \rightarrow W_{N_2}^4 = 0.3118$$

$$F_{CO_2}^4 = 5.1568 \rightarrow W_{CO_2}^4 = 1.442x - 5$$

$$F^4 = \sum = 359556.5969 \quad \sum = 1$$



## DECANTADOR:

- HPC (HPC) Hidroperóxido de Cumeno.

$$F_{HPC}^5 = F_{HPC}^{21} \rightarrow 12952.6232 = F_{HPC}^{21}$$

- Cumeno (C)

$$F_C^5 = F_C^{21} \rightarrow 12952.6232 = F_C^{21}$$

- DMPC (DMPC) Dimetil Fenil Carbinol

$$F_{DMPC}^5 = F_{DMPC}^{21} \rightarrow 50 = F_{DMPC}^{21}$$

- Estabilizante (CaCO<sub>3</sub>)

$$F_{CaCO_3}^5 = F_{CaCO_3}^6 \rightarrow 2016.867 = F_{CaCO_3}^6$$

- Acetofenona

$$F_{AF}^5 = F_{AF}^{21} \quad F_{AF}^{21} = 112.5$$

- Otros

$$F_{OTROS}^5 = F_{OTROS}^{21} \quad F_{OTROS}^{21} = 37.5$$

- Agua (H<sub>2</sub>O)

$$F_{H_2O}^5 = F_{H_2O}^6 + F_{H_2O}^{21} \rightarrow 38319.3277 = F_{H_2O}^6 + F_{H_2O}^{21}$$

*Por Arrastre del concentrador*

$$F_{H_2O}^7 = F_{H_2O}^{21} = 200 \quad F_{H_2O}^6 = 38119.3277$$

Re solviendo :

$$F_C^{21} = 12952.6232 \quad \rightarrow \quad W_C^{21} = 0.5795$$

$$F_{AF}^{21} = 112.5 \quad \rightarrow \quad W_{AF}^{21} = 0.005$$

$$F_{DMPC}^{21} = 50 \quad \rightarrow \quad W_{DMPC}^{21} = 0.0022$$

$$F_{H_2O}^{21} = 200 \quad \rightarrow \quad W_{H_2O}^{21} = 0.0089$$

$$F_{HPC}^{21} = 9000 \quad \rightarrow \quad W_{HPC}^{21} = 0.4026$$

$$F_{otros}^{21} = 37.5 \quad \rightarrow \quad W_{OTROS}^{21} = 0.0017$$

$$F^{21} = \sum = 22352.6232 \quad \sum = 1$$

Re solviendo :

$$F_{CaCO_2}^6 = 2016.867 \quad \rightarrow \quad W_{CaCO_2}^6 = 0.0503$$

$$F_{H_2O}^6 = 38119.3277 \quad \rightarrow \quad W_{H_2O}^6 = 0.9497$$

$$F^4 = \sum = 40136.1947 \quad \sum = 1$$

## CONCENTRADOR:

- Total

$$F^{21} - F^7 = F^{20} \quad 22352.6232 - 10000 = F^{20} \quad 12352.6232 = F^{20}$$

Comprobando en el Balance del Cumeno (C)

$$F_C^{21} - F_C^7 = F_C^{20} \rightarrow 12952 - 600 = F_C^{20} = 12352.6232$$

**TABLA DE GRADOS DE LIBERTAD**

GRADOS DE LIBERTAD										
	OXIGENADOR	DECANTADOR	CONCENTRADOR	REACTOR	CONVERTIDOR	TORRE DE LAVADO	TORRE 1	TORRE 2	TORRE 3	GLOBAL
<b>NV</b>	16+3	14	12	14+1	14+1	16	14	8	4	23+5
<b>NB</b>	10	7	6	8	8	7	7	4	2	12
<b>NC C</b>	1	0	3	5	1	0	-	-		3
<b>FC</b>	0	0	-	1	1	-	-	-		0
<b>NR</b>	4		-	1	-	1	1	-		4
<b>GL</b>	4	7	3	0	5	8	6	4	2	9

**TABLA DE ACTUALIZACIÓN DE GRADOS DE LIBERTAD**

ACTUALIZACIÓN GRADOS DE LIBERTAD										
	OXIGENADOR	DECANTADOR	CONCENTRADOR	REACTOR	CONVERTIDOR	TORRE DE LAVADO	TORRE 1	TORRE 2	TORRE 3	GLOBAL
<b>ACTUALIZACIÓN REACTOR</b>										
<b>NCC</b>	-	-	1	-	5	-	-	-	-	1

<b>NFC - R</b>	-	-	1	-	1	-	-	-	-	1
<b>NGL</b>	-	-	1	-	-1	-	-	-	-	7
<b>ACTUALIZACION CONVERTIDOR</b>										
<b>NCC</b>	-	-	-	-	-	6	-	-	-	1
<b>NFC - R</b>	-	-	-	-	-	1	-	-	-	3
<b>NGL</b>	-	-	-	-	-	0	-	-	-	6
<b>ACTUALIZACION TORRE DE LAVADO</b>										
<b>NCC</b>	-	-	-	-	-	-	6	-	-	
<b>NFC - R</b>	-	-	-	-	-	-	1	-	-	2
<b>NGL</b>	-	-	-	-	-	-	0	-	-	4
<b>ACTUALIZACION TORRE 1</b>										
<b>NCC</b>	-	-	-	-	-	-	-	3	-	2
<b>NFC - R</b>	-	-	-	-	-	-	-	1	-	1
<b>NGL</b>	-	-	-	-	-	-	-	0	-	1
<b>ACTUALIZACION TORRE 2</b>										
<b>NCC</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	1	1
<b>NFC - R</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	1	1
<b>NGL</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	0	-1
<b>ACTUALIZACION TORRE 3</b>										
<b>NCC</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
<b>NFC - R</b>	1	-	-	-	-	-	-	-	-	2



NGL	3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-3
<b>ACTUALIZACIÓN GLOBALES</b>											
NCC	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NFC - R	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NGL	2-2B.A=0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>ACTUALIZACIÓN OXIGENADOR</b>											
NCC	-	5	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NFC - R	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NGL	-	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>ACTUALIZACIÓN DECANTADOR</b>											
NCC	-	-	5	-	-	-	-	-	-	-	-
NFC - R	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-
NGL	-	-	-5	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>ACTUALIZACIÓN CONCENTRADOR</b>											
NCC	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NFC - R	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NGL	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

**BALANCES ESCALADOS TON / DÍA (FLUJOS) A PRODUCCIÓN DE 5000 TON / DÍA ACETONA**

COMPUESTOS	F <sub>1</sub>	F <sub>2</sub>	F <sub>3</sub>	F <sub>4</sub>	F <sub>5</sub>	F <sub>6</sub>	F <sub>7</sub>	F <sub>8</sub>	F <sub>9</sub>	F <sub>10</sub>	F <sub>11</sub>	F <sub>12</sub>	F <sub>13</sub>	F <sub>14</sub>	F <sub>15</sub>	F <sub>16</sub>	F <sub>17</sub>	F <sub>18</sub>	F <sub>19</sub>	F <sub>20</sub>	F <sub>21</sub>
<b>Cumeno</b>	---	---	293 63. 469 7	---	188 58. 225	---	873.563	873 .56 3	873 .56 3	---	873 .56 3	---	873 .56 3	873 .56 3	---	---	---	---	---	179 84. 662	188 58. 225
<b>CaCO<sub>3</sub></b>	---	293 6.1 347	---	---	293 6.4 35	293 6.4 35	∴	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
<b>H<sub>2</sub>O</b>	---	557 90. 592 5	---	---	557 87. 681	554 99. 405	291.188	356 7.0 50	357 6.6 83	689 8.3 49	71. 650	71. 650	---	---	---	---	---	357 6.6 835	539 3.3 71	---	291 .18 8
<b>N<sub>2</sub></b>	504 411 .86 9	---	---	358 817 .99 8	---	---	∴	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
<b>O<sub>2</sub></b>	167 486 .99 85	---	---	164 666 .85 7	---	---	∴	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
<b>CO<sub>2</sub></b>	---	---	---	7.5 08	---	---	∴	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

<b>DMPC</b>	---	---	---	---	72. 797	---	72. 797	72. 797	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	72. 797
<b>HPC</b>	---	---	---	---	131 03. 448	---	13103.4 48	363 .98 5	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	131 03. 448
<b>AF</b>	---	---	---	---	163 .79 3	---	218.391	218 .39 1	218 .39 1	---	218 .39 1	---	163 .79 31	---	163 .79 3	---	163 .79 3	---	---	---	163 .79 3
<b>Otros</b>	---	---	---	---	54. 598	---	---	---	---	---	---	54. 598	---	---	---	---	---	---	---	---	54. 598
<b>H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub></b>	---	---	---	---	---	---	---	363 .985	363 .985	363 .985	---	---	---	---	---	---	---	---	---	363 .98 47	---
<b>Acetona</b>	---	---	---	---	---	---	---	486 0.2 30	500 0	---	500 0	500 0	---	---	---	---	---	---	---	---	---
<b>Fenol</b>	---	---	---	---	---	---	---	787 8.3 53	810 3.4 45	---	810 3.4 45	---	810 3.4 45	---	810 3.4 45	810 3.4 45	---	---	---	---	---

<b>AMS</b>	---	---	---	---	---	---	:	---	63. 154	---	63. 153	---	63. 154	63. 154	---	---	---	---	---	---	---	
<b>NEU</b>	---	---	---	---	---	---	:	---	---	17. 36	---	---	---	---	---	---	---	---	---	17. 052	---	---

**BALANCES MOLARES (TON . MOL / DÍA)**

COMPUESTOS	N <sub>1</sub>	N <sub>2</sub>	N <sub>3</sub>	N <sub>4</sub>	N <sub>5</sub>	N <sub>6</sub>	N <sub>7</sub>	N <sub>8</sub>	N <sub>9</sub>	N <sub>10</sub>	N <sub>11</sub>	N <sub>12</sub>	N <sub>13</sub>	N <sub>14</sub>	N <sub>15</sub>	N <sub>16</sub>	N <sub>17</sub>	N <sub>18</sub>	N <sub>19</sub>	N <sub>20</sub>	N <sub>21</sub>	
<b>Cumeno</b>	---	---	244 .69 56	---	157 .15 2	---	7.2 80	7.2 80	7.2 80	---	7.2 80	---	7.2 80	7.2 80	---	---	---	---	---	---	149 .87 2	157 .15 2
<b>CaCO<sub>3</sub></b>	---	29. 364 3	---	---	29. 364	29. 364	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
<b>H<sub>2</sub>O</b>	---	309 9.4 774	---	---	309 9.3 16	308 3.3 00	16. 177	198 .16 9	198 .70 5	383 .24 2	3.9 81	3.9 81	---	---	---	---	---	198 .70 46	188 .52 1	---	---	16. 177
<b>N<sub>2</sub></b>	180 14. 710	---	---	128 14. 929	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
<b>O<sub>2</sub></b>	523 3.9 687	---	---	514 5.8 39	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
<b>CO<sub>2</sub></b>	---	---	---	0.1 71	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
<b>DMPC</b>	---	---	---	---	0.5 35	---	0.5 35	0.5 35	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	0.5 35
<b>HPC</b>	---	---	---	---	86. 207	---	86. 207	2.3 95	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	86. 207

<b>AF</b>	---	---	---	---	1.3 65	---	1.8 20	1.8 20	1.8 20	---	1.8 20	---	1.3 645	---	1.3 65	---	1.3 65	---	---	---	1.3 65	
<b>Otros</b>	---	---	---	---	1.7 06	---	---	---	---	---	---	1.7 06	---	---	---	---	---	---	---	---	---	1.7 06
<b>H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub></b>	---	---	---	---	---	---	---	3.1 74	3.7 14	3.7 14	---	---	---	---	---	---	---	---	3.7 141	---	---	---
<b>Acetona</b>	---	---	---	---	---	---	---	83. 797	86. 207	---	86. 207	86. 207	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
<b>Fenol</b>	---	---	---	---	---	---	---	83. 812	86. 207	---	86. 207	---	86. 207	---	86. 207	86. 207	---	---	---	---	---	---
<b>AMS</b>	---	---	---	---	---	---	---	---	0.5 35	---	0.5 35	---	0.5 35	0.5 35	---	---	---	---	---	---	---	---
<b>NEU</b>	---	---	---	---	---	---	---	---	---	0.4 34	---	---	---	---	---	---	---	---	---	0.4 26	---	---
<b>TOTALES</b>	235 48. 678 7	312 8.8 417	244 .69 56	179 60. 939	337 5.6 45	311 2.6 64	112 .01 9	384 .46 8	384 .46 8	387 .39 0	186 .03 0	91. 894	95. 385	7.8 15	87. 572	86. 207	1.3 65	202 .41 87	188 .94 7	149 .87 2	263 .14 2	

### COMPOSICIONES MOLARES

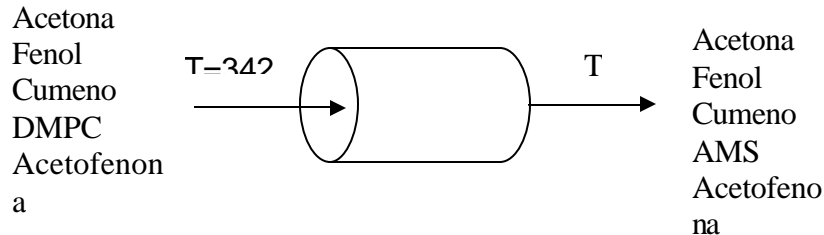
COMPUESTOS	N <sub>1</sub>	N <sub>2</sub>	N <sub>3</sub>	N <sub>4</sub>	N <sub>5</sub>	N <sub>6</sub>	N <sub>7</sub>	N <sub>8</sub>	N <sub>9</sub>	N <sub>10</sub>	N <sub>11</sub>	N <sub>12</sub>	N <sub>13</sub>	N <sub>14</sub>	N <sub>15</sub>	N <sub>16</sub>	N <sub>17</sub>	N <sub>18</sub>	N <sub>19</sub>	N <sub>20</sub>	N <sub>21</sub>
Cumeno	---	---	1.0 0	---	0.04 7	---	0.0 65	0.0 19	0.0 19	---	0.0 39	---	0.0 76	0.9 32	---	---	---	---	---	1.0 0	0.5 97
CaCO <sub>3</sub>	---	0.0 09	---	---	0.00 9	0.0 09	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
H <sub>2</sub> O	---	0.9 91	---	---	0.91 8	0.9 91	0.1 44	0.5 15	0.5 17	0.9 89	0.0 21	0.0 43	---	---	---	---	---	0.9 82	0.9 98	---	0.0 61
N <sub>2</sub>	0.7 75	---	---	0.71 3	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
O <sub>2</sub>	0.2	---	---	0.28	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

	25			7																	
<b>CO<sub>2</sub></b>	---	---	---	9.52 1x10 <sup>-6</sup>	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
<b>DMPC</b>	---	---	---	---	1.58 x10 <sup>-4</sup>	---	0.0 05	0.0 01	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	0.0 02
<b>HPC</b>	---	---	---	---	0.02 6	---	0.7 7	0.0 06	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	0.3 28
<b>AF</b>	---	---	---	---	4.04 4x10 <sup>-4</sup>	---	0.0 16	0.0 05	0.0 05	---	0.0 10	---	0.0 14	---	0.0 16	---	1.0 0	---	---	---	0.0 05
<b>Otros</b>	---	---	---	---	0.00 1	---	---	---	---	---	---	0.0 19	---	---	---	---	---	---	---	---	0.0 06
<b>H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub></b>	---	---	---	---	---	---	---	0.0 10	0.0 10	0.0 10	---	---	---	---	---	---	---	0.0 18	---	---	---
<b>Acetona</b>	---	---	---	---	---	---	---	0.2 18	0.2 24	---	0.4 63	0.9 38	---	---	---	---	---	---	---	---	---
<b>Fenol</b>	---	---	---	---	---	---	---	0.2 18	0.2 24	---	0.4 63	---	0.8 99	---	0.9 84	---	---	---	---	---	---
<b>AMS</b>	---	---	---	---	---	---	---	---	0.0 01	---	0.0 03	---	0.0 06	0.0 68	---	1.0 0	---	---	---	---	---
<b>NEU</b>	---	---	---	---	---	---	---	---	---	0.0 01	---	---	---	---	---	---	---	---	---	0.0 02	---



## BALANCE DE ENERGÍA

### Reactor PFR:



$$\frac{dQ}{dt} = r\Delta Hr(T) + \sum N^{sal} + \sum N^{ent} H^{ent}$$

El reactor PFR se asume adiabático, ya que la reacción que genera más calor es la que ocurre en el CSTR y si en ella es adiabática, probablemente esta sea la misma.

Según el balance de energía y tomando como temperatura de referencia 342 K, queda:

$$0 = r\Delta H_{reacción}(Tr) + \sum N^{sal} (H^{sal}(T) - H^{sal}(Tr)) - \sum N^{ent} (H^{ent}(342) - H^{ent}(Tr))$$

$$0 = r\Delta H_{rxn}(Tr) + \sum N^{sal} (H^{sal}(T) - H^{sal}(342))$$

Según el balance de materia:

$$N_{HPC}^{sal} = N_{HPC}^{ent} - r$$

$$9,7931 \frac{mol}{min} = 4224,13978 \frac{mol}{min} - r$$

$$r = 4514,35 \frac{mol}{min}$$

$$\Delta H_{rxn}(Tr) = \Delta H_{rxn}^0(25^\circ C) + \sum s_s \int_{298}^{342} C_{p_s} dT$$

$$\Delta H^o_{rxn}(25^\circ C) = (-242100 - 158261,04 - (-149000)) J / mol$$

$$\Delta H_{rxn}(25^\circ C) = -251361,04 J / mol$$

$$\int_{298}^{342} C_{p_s} dT = A(T - T_o) + \frac{B}{2}(T^2 - T_o^2) + \frac{C}{3}(T^3 - T_o^3) + \frac{d}{4}(T^4 - T_o^4)$$

$$\int_{298}^{342} C_{p_{HPC}} dt = 13165,093 J / mol$$

$$\int_{298}^{342} c_{p_{acetona}} dT = 5679,13424 J / mol$$

$$\int_{298}^{342} c_{p_{Fend}} dT = 7593,91512 J / mol$$

$$\Delta H_{rxn}(352 K) = ((-251361,04) + (5679,13424 + 7593,91512 - 13165,093)) J / mol$$

$$\Delta H_{rxn}(342 K) = -251253,084 J / mol$$

$$\sum N^{sal} (H^{sal}(T) - H^{sal}(342)) = N_i (A_i (T - T_o) + \frac{B_i}{2} (T - T_o)^2 + \frac{C_i}{3} (T - T_o)^3 + \frac{D_i}{4} (T - T_o)^4)$$

**Tabla 6.**

SUSTANCIA	A	B	C	D	N <sup>sal</sup> mol/min
HPC	541,9176	-3,62926	1,30661 x 10 <sup>-2</sup>	-1,28 x 10 <sup>-5</sup>	9,7931
Acetona	1,68022 x 10 <sup>1</sup>	8,48 x 10 <sup>1</sup>	-2,64111 x 10 <sup>-3</sup>	3,39139 x 10 <sup>-6</sup>	1628, 092
Fenol	-3,6161 x 10 <sup>1</sup>	1,15354	-2,1229 x 10 <sup>-3</sup>	1,74183 x 10 <sup>-6</sup>	162878,7
AMS	202,2	0	0	0	1010,820

$$\sum N_s^{sal} A_s = 204387,885$$

$$\sum N_s^{sal} B_s = 326015,0895$$

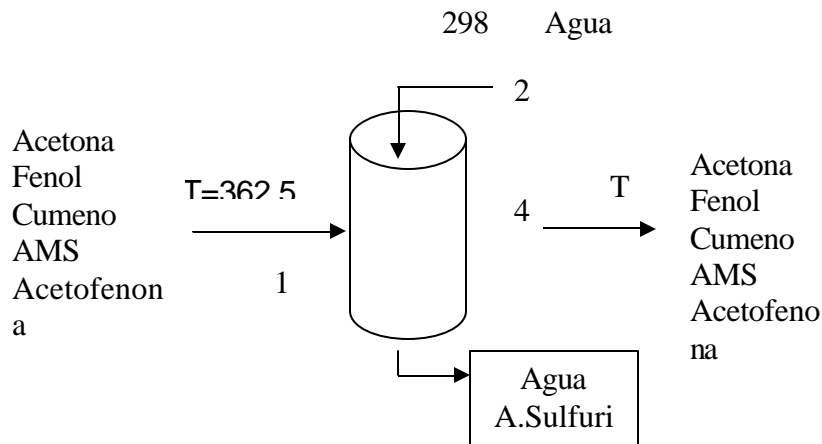
$$\sum N_s^{sal} C_s = 775,75462$$

$$\sum N_s^{sal} D_s = 0,83587$$

$$0 = 4514,35 * (-251253,084) + \left( -3,1484 \times 10^{-6} (T - 342) + \frac{326015,09}{2} (T^2 - 342^2) \right) - \frac{775.75462}{3} (T^3 - 342^3) + \frac{0.83587}{4} (T^4 - 342^4)$$

$$T = 362,5 \text{ k}$$

**Torre de lavado:**



$$\frac{dQ}{dt} = N^4 (H^4(T) - H^4(Tr)) + N^3 (H(50^\circ C) - H(Tr)) - N^2 (H(25^\circ C) - H(Tr)) - N^1 (H(89,5^\circ C) - H(Tr))$$

Tomo temperatura de referencia T= 25°C, que es adiabática, para quedar:

$$0 = \sum N^4 (H^4(T) - H^4(25^\circ C)) + \sum N^3 (H(50^\circ C) - H(25^\circ C)) - \sum N^1 (H(89,5^\circ C) - H(25^\circ C))$$

$$\sum N^1 (H(89,5^\circ C) - H(25^\circ C)) = 3'435955532.29$$

Las constantes se encuentran en la primera tabla, solo hay que integrar desde 289K hasta 362,5 K.

$$\sum N_i^3 (H(50^\circ\text{C}) - H(25^\circ\text{C})):$$

$$N_{H_2O}^3 \int_{298}^{323} C_{P_{H_2O}} = 724965,486 \frac{\text{mol}}{\text{min}} * 1867,599 \frac{\text{J}}{\text{mol}} = 1353944736,61 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

$$N_{H_2SO_4}^3 \int_{298}^{323} C_{P_{H_2O}} = 7020,79 \frac{\text{mol}}{\text{min}} 47,54845 \frac{\text{J}}{\text{mol}} = 333827,68 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

$$\sum N_i^3 (H(50^\circ\text{C}) - H(25^\circ\text{C})) = 1354278563,69 \text{ J / mol}$$

$$\sum N_i^4 (H(T) - H^4(25^\circ\text{C})):$$

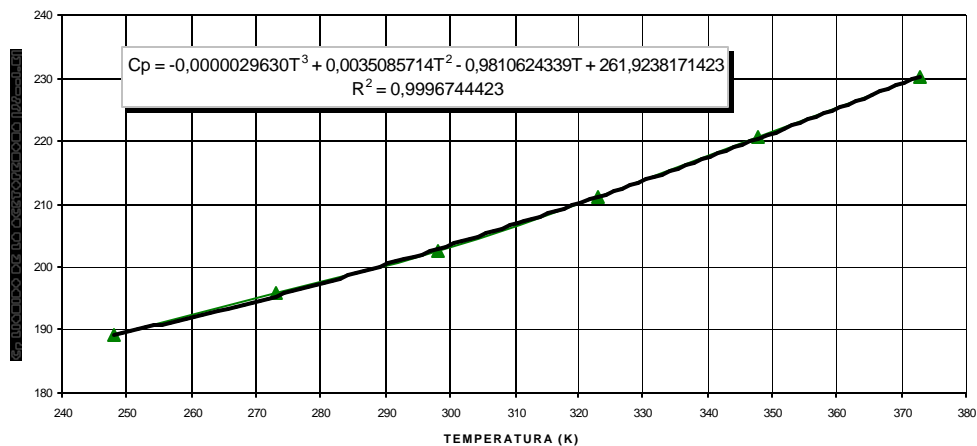
Tabla 7:

SUSTANCIA	A	B	C	D	Ns (mol/min)
Acetona	4,68022x10 <sup>1</sup>	8,48409x10 <sup>-1</sup>	- 2.641114x10 <sup>-3</sup>	3,39139x10 <sup>-6</sup>	162850,09 2
Fenol	3,61614x10 <sup>1</sup>	1,15354	-2,12291 x 10 <sup>-3</sup>	1,74183x10 <sup>-6</sup>	162878,74 5
Cumeno	196,4	-135,4 x 10 <sup>-3</sup>	574,97 x 10 <sup>-6</sup>	0	13748,934
Acetofemona	261,923817	-9,81 x 10 <sup>-1</sup>	3,508 x 10 <sup>-3</sup>	-2,96 x10 <sup>-6</sup>	2578,7
AMS	202,2	0	0	0	1010,8204
Agua	1,82964x10 <sup>1</sup>	4,72118x 10 <sup>-1</sup>	-1,33878 x 10 <sup>-3</sup>	1,31424x10 <sup>-6</sup>	7523,6146

Las constantes de los Cp de la acetofenona y la del dimetil fenil carbinol, se halló por el método de grupos de contribución de Missenard, a diferentes temperaturas, sacando una ecuación polinomial de cuarto orden.

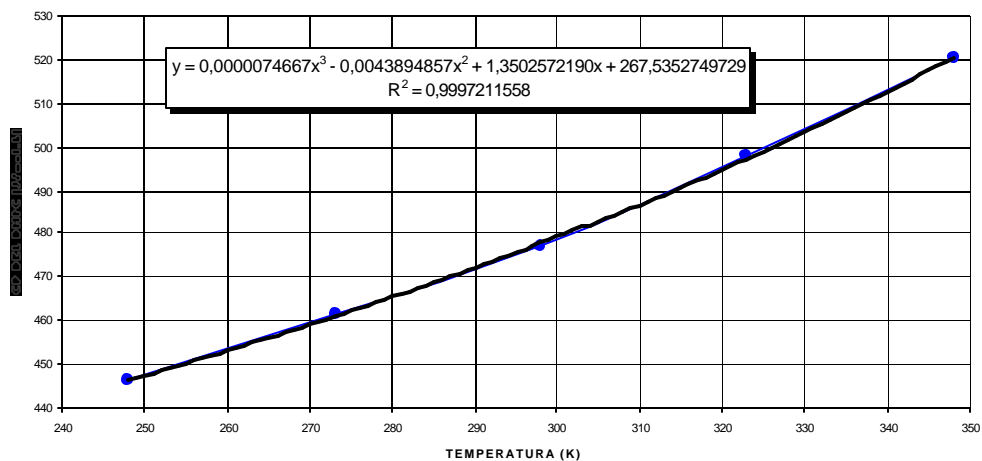
## Grafica 5. Correlación de la acetofenona.

CP LIQUIDO DEL ACETOFENONA CON RESPECTO A LA TEMPERATURA



## Grafica 6. Correlación del Dimetil Fenil Carbinol.

CP LIQUIDO DEL DMPC CON RESPECTO A LA TEMPERATURA



$$\sum N_s A_s = 564084,423$$

$$\sum N_s B_s = 325211,1547$$

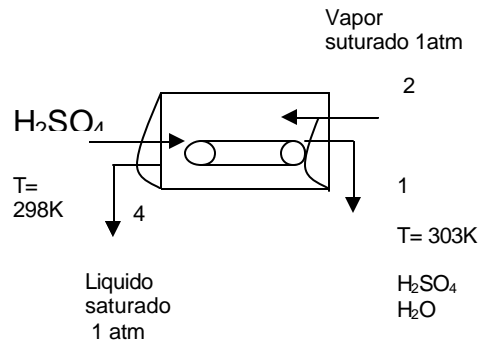
$$\sum N_s C_s = 769,00211$$

$$\sum N_s D_s = 0,8382423$$

$$0 = 564084,423(T - 298) + \frac{325211,152}{2}(T^2 - 298^2) - \frac{769,00211}{3}(T^3 - 298^3) + \frac{0,8382423}{4}(T^4 - 298^4) + 1354278563,69 - 3435955532,29$$

$$T = 337,17 \text{ k}$$

**Intercambiador de calor entre la torre de lavado y la torre de destilación:**



Se supone que es adiabático.

$$0 = N_i^4 (H(368K)) + N_i^3 (H_{liq}(1bar) - N^2 (H_{vap}(1bar)) - N^1 (H(337.2K))$$

Como  $N^4 = N^1$  y  $N^3 = N^2$ , la ecuación se reduce a:

$$N_i^4 (H(360K) - H(337.2K)) + N^3 (H_{liq}(1bar) - H_{vap}(1bar)) = 0$$

$$\sum N_i^4 \int_{337}^{368} C_{pi} = 1747544079,8 \text{ J / min}$$

Con la tabla 7, hallo el  $C_p$ .

De las tablas de Reklaitis y a una presión de 1,0 bar,

$$H_{liq} = 417,5 \frac{Jk}{Kg} \quad H_{vapor} = 2575,4 kg / kg$$

$$1747544079,8 J / \text{min} = N^3 (2675,4 - 417,5) \frac{kg}{kg} * \frac{100J}{1kg} * \frac{18kg}{kmol}$$

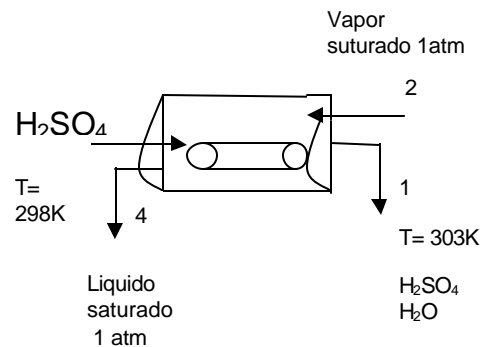
$$N^3 = 42,9983 \text{ Kmol} / \text{min}$$

La cantidad de calor necesaria es:

$$Q = N_i^4 * \Delta H_i^4$$

$$Q = 1747544,0798 \text{ kJ} / \text{min}$$

**Intercambiador antes de entrar el H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> al reactor CSTR:**



$$\frac{dQ}{dT} = \sum N^1 (H(30^\circ C)) + N_{liq}^4 H_{liq}(1atm) - \sum N^3 (H(25^\circ C)) - N^2 (H_{vap}(1atm))$$

Como:  $N_1 = N^3$  y  $N^2 = N^4$  y se asume que es ADIABÁTICO.

$$\sum N^1 (H(30^\circ C) - H(25^\circ C)) = N^4 (H_v(1atm) - H_{liq}(1atm))$$

De las tablas de REKLAITIS, las propiedades del agua a 1 atm.

$$H_{liq}(1atm) = 419.1 \text{ KJ/Kg}$$

$$H_{vap}(1atm) = 2676 \text{ KJ/Kg}$$

$$H_{vap}(1atm) - H_{liq}(1atm) = 2256.9 \text{ KJ/Kg} * \frac{1000J}{1Kg} * \frac{18Kg}{Kmol}$$

$$H_{vap}(1atm) - H_{liq}(1atm) = 40624200 \text{ J / Kmol}$$

$$\sum N_i^1 \int_{25^\circ C}^{30} C_{p_i} dT :$$

$$N_{H_2O}^1 \int_{25^\circ C}^{30} C_{p_{H_2O}} = 128892012.214 \text{ J/min}$$

$$N_{H_2SO_4}^2 \int_{25}^{30} C_{p_{H_2SO_4}} = 66614.24 \text{ J/min}$$

$$\sum N_i^1 \int_{25}^{30} C_{p_i} dT = 128958626.454 \text{ J/min}$$

Reemplazo;

$$128958626.454 \text{ J/min} = N^4 (406242001 \text{ J/Kmol})$$

$$3.17443 \text{ Kmol/min} = N^4$$

El calor requerido es:

$$Q = 128958626.454 \text{ J/min}$$



**Para el concentrador:**

Trabaja a presión de vacío:

**Tabla 8.**

SUSTANCIA	A	B	D
CUMENO	4.05419	14.551811	-65.948
ACETOFENONA	4.64896	2006.397	-43.472
AGUA	16.5362	3785.44	-38.9974

Por la ecuación de ANTOINE y a una temperatura de 303 K, hallo la presión a que trabaja la torre de concentrado, claro que se asume idealidad:

$$P_{sat} = \sum x_i P_i$$

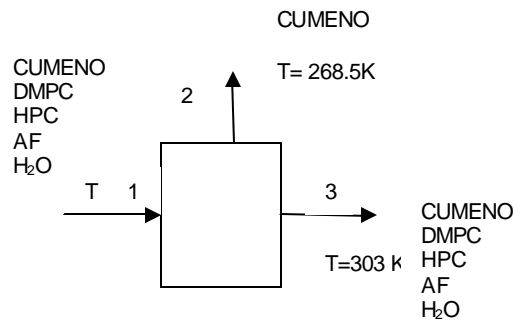
$$P_{sat} = 4.3639 \times 10^{-2} \text{ bar}$$

$$P_{sat} = 4.3068 \times 10^{-2} \text{ atm}$$

Con esta presión, hallamos la presión a la que trabaja la torre de concentrador:

$$T_{sat} = 268.54 \text{ K}$$

Balance de energía para el **concentrador**:



Tomamos como temperatura de referencia 303 K

$$O = \sum n_i^3 (H(303K) - H(303K)) + N^2 (H(268.5K) - H(303)) - N^1 (H(T) - H(303))$$

$$N^2(H(268.5K) - H(303K)) - N^1(H(T) - H(303K)) = 0$$

$$N_{cumeno}^2 \int_{303}^{268.5} C_{p_{cumeno}} dT = -1999154207.4 \text{ J/min}$$

$$N_i^1(H(T) - H(303K)):$$

**Tabla 9.**

SUSTANCI A	A	B	C	D	Ni
HPC	541.9176	-3.62926	$1.30661 \times 10^{-2}$	$-1.28 \times 10^{-5}$	$162871.125_3$
CUMENO	196.4	$135.4 \times 10^{-3}$	$574.97 \times 10^{-6}$	0	$296809.0946_3$
DMPC	267.5327	1.350257	$-4.38948^{-3}$	$7.4667 \times 10^{-6}$	509.32151
AF	261.9238	$0.981062$	$3.50857 \times 10^{-3}$	$-2.963 \times 10^{-6}$	3438.3777
H <sub>2</sub> O	$1.82964 \times 10_1$	$4.72118^{-1}$	$1.31424 \times 10^{-6}$	$1.31424 \times 10^{-6}$	30576.4317

$$\sum N_i a_i = 148152327.254$$

$$\sum N_i b_i = -5939454.41646$$

$$\sum N_i c_i = 2266.9085$$

$$\sum N_i d_i = -2.050951$$

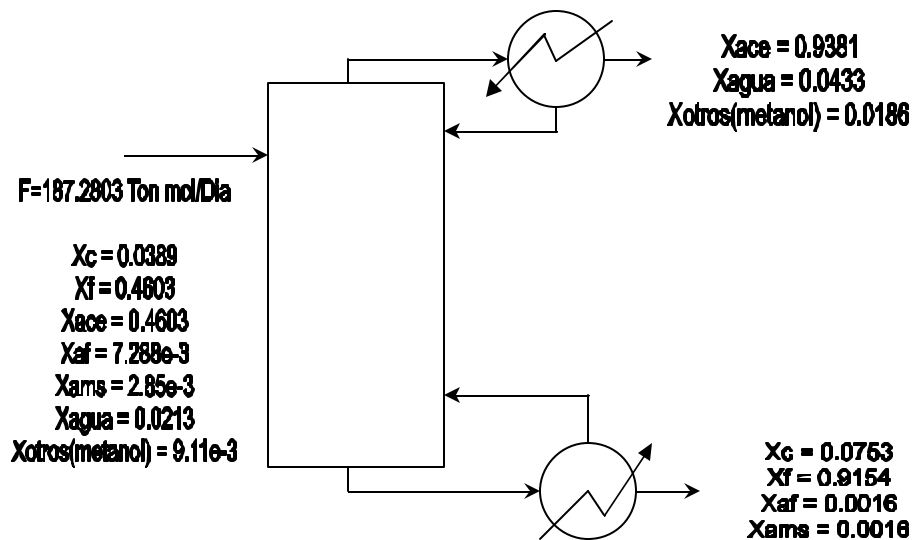
$$T = 304.33K$$

## 7. MAQUINARIA Y EQUIPOS

### 7.1 DISEÑO A PRIORI DE MAQUINARIA Y EQUIPO.

#### 7.1.1 Torre de separación de acetona (TORRE I)

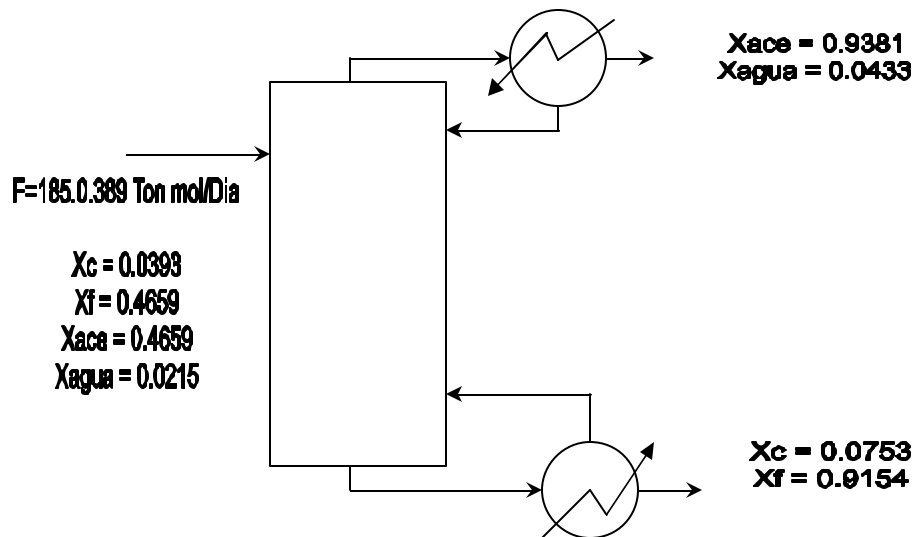
FIGURA 1 .DISEÑO DE COLUMNA DE DESTILACIÓN MULTICOMPONENTE



Dentro de la corriente de otros se tendrá en cuenta como si fuera metanol, aunque hay que recordar que la corriente "otros" posee ácido fórmico, metanol, y acetaldehído, pero por la reacción de oxidación del cumeno se genera mayor cantidad de metanol que de los otros compuestos.

Es de aclarar que a la Torre N° 1 entra mayor cantidad de Cumeno, Fenol, Acetona y Agua, y como se desea un cálculo aproximado no se tendrá en cuenta las corrientes de acetofenona, alfa-metilestireno y la de otros por su bajo contenido (baja composición molar) y por que las temperaturas de ebullición se encuentran entre los límites del más y menos volátil.

Por lo anterior la visión de la torre es la siguiente:



### Método de Fenske-Underwood-Gilliland

Fuente: HENLEY, Ernest. Operaciones de separación por etapas de equilibrio en I.Q. Reverte S.A. Barcelona 86. Capítulo 12.

Pasos:

1. Alimentación Especificada:

Cumeno: 0.0393

Fenol: 0.4659

Acetona: 0.4659

Agua: 0.0215

2. Especificaciones de dos componentes claves y no claves.

La corriente de cumeno y fenol corresponden a la corriente de pesados, la perteneciente a acetona y agua la de ligeros; por puntos de ebullición de los componentes al acetona y el fenol son los extremos ligeros y pesados, por lo que tener en cuenta que alguna parte de ellos estará en la corriente opuesta a la que

debe de pertenecer será algo a no tener en cuenta, con lo anterior se observa que

SUSTANCIA	DESTILADO		COLAS	
	FLUJOS (Tmol/día)	COMPOSICIÓN MOLAR	FLUJOS (Tmol/día)	COMPOSICIÓN MOLAR
Cumeno	0.0007	7.7615e-6	7.2790	0.077862
Fenol	0	0	86.2069	0.922133
Acetona	86.2069	0.9486	0	0
Agua	3.9800	0.044	0.0005	5.3483e-6
<b>Total</b>	<b>90.1876</b>	<b>1</b>	<b>93.4864</b>	<b>1</b>

el componente clave ligero es el agua y clave pesado es el cumeno.

**Tabla N 10.**

Las composiciones de salida de cumeno en destilado y de agua en colas se hacen lo más pequeñas posibles para asimilar a lo que debe de suceder en el proceso y con ello podría asumirse como cero.

3. Determinar presión de Columna y tipo de condensador.

“Muchos de los sistemas multicomponentes de importancia industrial pueden considerarse casi ideales en la fase líquida para todos los fines prácticos” (TREYBALL, Robert. Operaciones de transferencia de masa. México 1980. Pág. 398.)

Para un calculo rápido se aplicará Raoult  $P_{burbuja} = \sum_{i=1}^C z_i P_i^C$ .

Ecuación de **Antoine**, P(mmHg),T(°C).

**Tabla N 11.**

SUSTANCIA	A	B	C	PRESIÓN DE VAPOR (MMHG A

				<b>50°C)</b>
<b>Cumeno</b>	6.93666	1460.793	207.777	18.6106
<b>Fenol</b>	7.1345	1516.070	174.570	2.4182
<b>Acetona</b>	7.2316	1277.030	237.230	610.35
<b>Agua*</b>	16.5362	3985.44	-38.9974	92.3404

\* Constantes para P(KPa) y T(K)

Cálculo de presión  $P_D$  del punto de burbuja del destilado a 120° F.

$$P_{burbuja} = 7.7615e-6 * 18.6106 + 0.9486 * 610.35 + 0.044 * 92.3404$$

$$= 583.041 \text{ mmHg} @ 11.274 \text{ psia}$$

Si  $P_D < 215 \text{ psi}$ , se utiliza un condensador total si  $P_D < 30 \text{ psi}$  reponer a  $P_D = 30 \text{ psi}$ .

$$T^D(30 \text{ psi}) = 7.7615e-6 * 182.1918 + 0.9486 * 78.7990 + 0.044 * 116.5556$$

$$= 79.879 \text{ °C} \cong 353.029 \text{ K}$$

Cálculo de presión  $P_B$  del punto de rocío de colas 120° F.

$$P_B = 0.922133 * 2.4183 + 0.077862 * 18.6112 + 5.3483e-6 * 92.3404$$

$$= 3.6798 \text{ mmHg}$$

$$T^B = 0.922133 * 56.2330 + 0.077862 * 21.5168 + 5.3483e-6 * -3.0902$$

$$= 53.5296 \text{ °C} \cong 326.68 \text{ K}$$

4. Calcular el número mínimo de etapas teóricas (ecuación de **Fenske**)

$$N_{\min} = \frac{\log \left[ \left( \frac{X_{i,N+1}}{X_{i,1}} \right) \left( \frac{X_{j,1}}{X_{j,N+1}} \right) \right]}{\log a_{i,j}}$$

Donde i = Clave Ligero y j = Clave Pesado, además  $\alpha_{i,j} = P_i^{\text{sat}}/P_j^{\text{sat}}$ , aplicando la Ley de Raoult.  $\alpha_{i,j} = 4.885$  (adimensional).  $T = 67^\circ \text{ C}$

$$N_{\min} = \frac{\log \left[ \left( \frac{0.044}{5.3483e-6} \right) \left( \frac{0.077862}{7.7615e-6} \right) \right]}{\log 4.885} = 11.38 \text{ etapas}$$

5. Distribución de componentes no claves a reflujo total (método de **Winn**)

$$b_i = \frac{f_i}{1 + \left( \frac{dr}{br} \right)^a i, r_m^{N_{\min}}}$$

**Tabla N 12.**

Sustancia	$P^{\text{sat}}$ (79.879 °C)	$P^{\text{sat}}$ (53.5296°C)	a i,agua (79.879 °C)	a i,agua (53.5296°C)	a i,agua <sub>m</sub>
Fenol	15.0056	3.0759	0.043	0.02804	0.03552
Cumeno	72.1766	22.1983	0.2057	0.2023	0.204
Acetona	1.6014e+003	691.1183	4.566	6.301	5.4335
Agua	350.7166	109.6798	1	1	1

$$b_{\text{fenol}} = \frac{86.2069}{1 + \left( \frac{0.0007}{7.2790} \right) 0.03552^{11.38}} = 86.2069, \text{ donde, } d_{\text{fenol}}=0$$

$$b_{\text{acetona}} = \frac{86.2069}{1 + \left( \frac{0.0007}{7.2790} \right) 5.4335^{11.38}} = 3.8662e-3, \text{ donde, } d_{\text{acetona}} = 86.2030$$

Con lo anterior se observa que la escisiones estimadas de los componentes no claves no difieren considerablemente, con lo cual el flujo de acetona en los fondos no se tendrá en cuenta ya que se considera  $\cong 0$ .

6. Dimensiones físicas:

Para las destilaciones a presión atmosférica se recomienda utilizar una velocidad del vapor de 3 pies/seg y una pérdida de carga de 3 pulgadas agua/plato real. La separación entre platos de 2 pies. Con lo anterior la torre de separación posee una altura aproximada de 7 metros si se manejan las 11.38 etapas mínimas que se obtuvieron.

### 7.1.2 Separador liquido-liquido y liquido-solido (decantador)

al observar el proceso se puede ver que la existencia de un separador (decantadora) es evidente y su diseño puede partir de la expresión general de una esfera que se mueve a través de un fluido continuo bajo la fuerza de gravedad, la expresión general para diseño reportada en Economía de los procesos químicos. HAPPEL, D.G. John Wiley and Sons. NY. 1968. apéndice C.

$$V=6.55(D\rho/C)^{0.5}[(r_s-r)/r]^{0.5}$$

Para fines de diseño en un separación agua-liquido organico, el tamaño y la forma real de la partícula dependerá de la intensidad de la mezcla y de las propiedades del sistema en cuestión, pero para diseño  $D_p=0.004$  in;  $C=17$  ;  $\rho=62$ ;  $\rho=50$ ., de las definiciones anteriores se obtiene:

$$V=0.22(D\rho/C)[(r_s-r)/r]^{0.25}Q^{0.5}$$

Donde D es diámetro del depósito en pies, Q, caudal de fluido de proceso (ambas fases),  $\text{pie}^3/\text{s}$  y razón  $L/D=4$ .

### 7.1.4 BOMBAS.

%PROGRAMA PARA CALCULAR LA POTENCIA DE LAS BOMBAS



```

disp('1.Acetofenona'); s{1}='Acetofenona';
disp('2.fenol'); s{2}='fenol';
disp('3.alfametilestireno');s{3}='alfametilestireno';
disp('4.cumeno');s{4}='cumeno';
disp('5. acetona');s{5}='acetona';
disp('6.agua');s{6}='agua';
disp('7.otros');s{7}='otros';
disp('8.DMPC');s{6}='agua';
disp('9.HPC');s{7}='otros';
disp('10.ACIDO SULFURICO');s{7}='otros';

ROC=[1.0329 1.071 0.47 0.8619 0.81 1 0.793 1.054 1.03
1.836]
n=input('seleccione los compuestos para el equilibrio [ ] ');
for i=1:length(n)
    XI(i)=input(['entre la fraccion mol para ',s{n(i)}  ]);
    FM(i)=input(['entre FLUJO MOLAR para ',s{n(i)}  ]);
end
for i=1:length(n)
    RO(i)=ROC(n(i))*XI(n(i));
    FMI(i)=FM(n(i))*XI(n(i));
end

ROMIX=sum(RO); %g/CM3
FMIX=sum(FMI); %TON/DIA

Q=FMIX/ROMIX/1.1023e-6;
Q1=Q/(8*3600); %M3/S
PB=101.325 %KPA
PA=77.99 %KPA
ROV=ROMIX*1000 %KG/M3
ZB=1 %M
G=9.8 %M/S

% EN EL APENDICE 6 DEL mCcABE PARA UNA TUBERIA DE 1.5 PLG
SCHEDULE 40 LA CAPACIDAD
... PARA LA VELOCIDAD DE 1 M/S EN L/SEG ES DE 1.3132 L/S

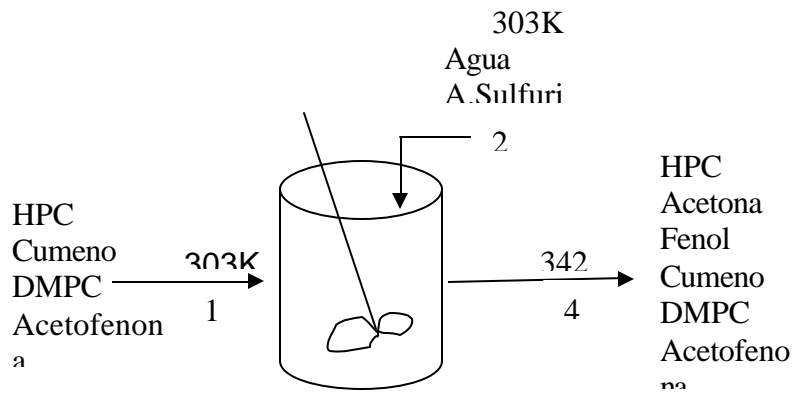
VB=Q1/0.0013132 %M/S
VA=0.0013132
NS=0.7

WP=1/NS*((PB-PA)/ROV+G*ZB+(VB^2-VA^2)/2);
POTENCIA=WP*FMIX/(1.1023e-6*3600)

```



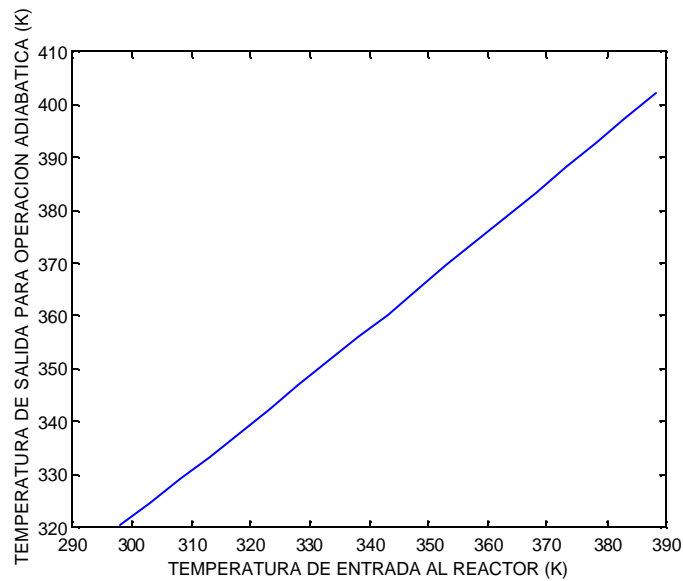
## 7. REACTOR



El reactor diseñado para la producción de la acetona a partir del cumeno, es un CSTR, debido a las condiciones de operación en cuanto a su temperatura y control de ella, y la agitación constante del reactivo y unas pocas cantidades de otras sustancias no deseadas.

Los criterios que se tuvieron en cuenta para la elección de un reactor adiabático o no adiabático, fue el cambio de temperatura con respecto a la inicial, es decir, calculo de la temperatura de llama. Se asumió que el reactor era adiabático, y se calcularon temperaturas de salida a diferentes temperaturas de entrada (programado en matlab, ver anexos).

**Grafica 7. Temperatura de entrada con respecto a la temperatura de salida del reactor.**



Si observamos la grafica 7. la temperatura de entrada de nuestro reactor (303K) con respecto a la temperatura de salida, nos damos cuenta que la temperatura es aproximadamente 320K, lo que indica que la variacion de la temperatura es minima, por lo cual se dice que nuestro reactor es adiabatico.

## 8.1 ECUACIÓN DE DISEÑO

La ecuación de un reactor CSTR.

$$V = \frac{F_{A0} \cdot X}{-r_{HPC}}$$

$$-r_{HPC} = K(T) \cdot C_{H^+} \cdot C_{HPC}$$

$$K(T) = k_0 \cdot \exp\left(\frac{Ea}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right)$$

Si reemplazo K(T), en la velocidad de reacción específica, y esta luego, en la ecuación de diseño del reactor CSTR.

Como tengo, ko; Ea; R; To y T de salida podemos calcular la constante de velocidad de reaccion específica.

$$K(T) = 29.9776 \cdot \exp\left(\frac{3135.4527}{8.314} \cdot \left(\frac{1}{303.15} - \frac{1}{342.2545}\right)\right)$$

$$K(T) = 34.55625 m^3 / \min .mol$$

Teniendo K(T) puedo reemplazarla en la ecuacion de diseño.

$$V = \frac{F_{A0} \cdot X}{K \cdot C_{H^+} \cdot C_{HPC} \cdot (1 - X)}$$

$$V = \frac{162871.1253 \cdot 0.97222}{34.55625 \cdot 2.1053 \cdot 10^2 \cdot 4889.8 \cdot (1 - 0.97222)}$$

$$V = 0.16022 m^3$$

## 8.2 CINÉTICA QUÍMICA Y CONSTANTE CINÉTICA

Descomposición de HPC táctico mediante catalizador ácido.  
Fuente: Patente US 4358618.

CORRIENTE ORGANICA:

$$\begin{aligned}W_{\text{HPC}} &= 83 \text{ wt\%} \\W_{\text{DMPC}} &= 3.2 \text{ wt\%} \\W_{\text{AF}} &= 0.4 \text{ wt\%} \\W_{\text{cumeno}} &= 13.4 \text{ wt\%}\end{aligned}$$

CORRIENTE CATALITICA:

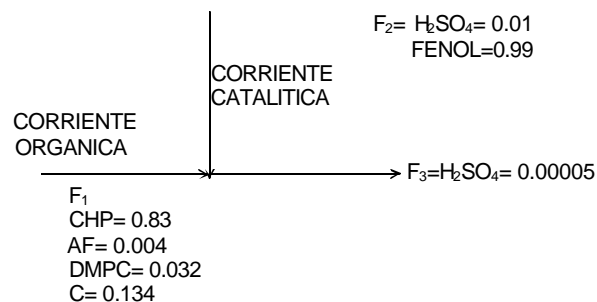
$$W_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 1\% \text{ en Fenol}$$

El flujo de la corriente catalítica se mantendrá nivelado hasta tener una concentración en la mezcla de reacción de ácido sulfúrico de 50 ppm (0.005 wt%).

Tiempo Total de Residencia= 17 min.

$$W_{\text{CHP}} = 1\% \text{ al final a una } T = 50^\circ\text{C}$$

*Balance de masa:*



Asumiendo:  $F_2=100\text{Ton/día}$   $F_3= 200.000\text{Ton/día}$   $F_1=19900\text{Ton/día}$

Por balance de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>

Composiciones

Densidades  $\langle \text{g/cm}^3 \rangle$

AF= 0.00398  
 DMPC= 0.0318  
 FENOL= 0.00495  
 HPC= 0.8259  
 C<sub>U</sub>= 0.1334

SUSTANCIA	VALOR
Ácido	1.836
Fenol	1.071
Cumeno	0.8619
AF	1.0329
DMPC	1.054
HPC	1.03

$$r_{mix} = \sum w \cdot r_i$$

$$r_{mix} = 1.008675 \text{ g / cm}^3$$

$$X = \frac{0.8259 - 0.01}{0.8259}$$

$$X = 0.9879$$

Por ecuación de diseño de CSTR:

$$K^* = \frac{X}{t \cdot (1 - X)}$$

$$K^* = \frac{0.9879}{17 \cdot (1 - 0.9879)}$$

$$K^* = 4.8026 \text{ min}^{-1}$$

$$-r_{HPC} = K \cdot C_{H^+} \cdot C_{HPC}$$

$$-r_{HPC} = K^* \cdot C_{HPC}$$

$$K^* = K \cdot C_{H^+}$$

Si wt H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>= 0.00005 masa ácido/masa total

$$K = 96052 \text{ masa total/min. masa ácido} \cdot 1/r_{mix} \cdot \text{PM ácido (98.0640)}$$

$$K = 9.33203490 \text{ cm}^3 / \text{gmol.min}$$

$$K = 9.332 \times 10^6 \text{ cm}^3 / \text{gmol.min.}$$

## EXPERIMENTO 2:

T= 75°C

Condiciones

Entrada: Igual que el anterior en corriente catalítica y corriente orgánica.

Tiempo de residencia: 13 min.

Concentración de ácido en la mezcla: 50 ppm.

Concentración final de MPC= 1.2 %wt.

Resolviendo balances:

CHP= 0.8259
DMPC= 0.0318
AF= 0.004
C= 0.133
Ácido= 0.00005
Fenol= 0.0049
Agua= 0.00005

$$X = \frac{0.8259 - 0.012}{0.8259}$$

$$X = 0.9855$$

$$K^* = 5.2173 \text{ min}^{-1}$$

$$K^* = 10148387.874$$

$$K^* = 10.15 * 10^6 \text{ cm}^3 / \text{gmol} \cdot \text{min}$$

## ENERGIA DE ACTIVACIÓN Y CONSTANTE DE PROPORCIONALIDAD

$$9.332034.903 = K_0 \cdot e^{\frac{E_a}{R \cdot T}}$$

$$T = 50^\circ\text{C}$$

$$T = 323.15$$

$$10148387.8740 = K_0 \cdot e^{\frac{E_a}{R \cdot T}} \quad T = 75$$

$$R = 8.3143 \text{ (J/mol.K)} \cdot (\text{m}^3 \cdot \text{Pa}) \quad T = 348.15$$

Resolviendo :  $E_a = 3135.4527 \text{ J/gmol}$

$$K_0 = 29977643.15$$

$$K_0 \cong 29.97 \times 10^6 \text{ cm}^3/\text{gmol}$$

## 9. PREDISEÑO MECÁNICO

Para el diseño de reactores químicos es necesario combinar dos hechos experimentales con conocimientos de agitación, transmisión de calor, transferencia de materia, tipo de flujo en equipos e instalaciones de funcionamiento continuo y las propiedades de los materiales, y así diseñar un equipo mecánico que reúna los requisitos de la reacción. Un diseño aproximado debe reunir las siguientes especificaciones:

### 1. Volumen del Reactor.

Por medio de la ecuación de balance para un CSTR que trabaja a 50 °C y que posee una constante cinética de  $31.9954 \times 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{min} \cdot \text{gmol}$  corregido mediante diseño de un reactor no isotérmico adiabático se puede hallar un volumen de reacción según:

$$F_{A0} = 13013.4484 \text{ ton/día @ } 77668432.9164 \text{ g}_{\text{mol(HPC)}}/\text{día}$$

$$\text{@ } 161809.2352 \text{ g}_{\text{mol(HPC)}}/\text{min}$$

$$V = \frac{F_{A0} X}{K \cdot C_{H^+} \cdot C_{HPC}^0 (1 - X)} \quad X_{HPC} = 0.9727 \text{ (balance de materia)}$$

$$C_{H^+} = 2.1053 \times 10^{-4} \text{ gmol/cm}^3$$



$$C_{HPC}=4.8898e-3 \text{ gmol/cm}^3$$

El volumen del reactor es 161.8092 litros  $\cong 0.1618 \text{ m}^3$ , sobredimensionando al 25% el volumen se aproxima a  $0.2 \text{ m}^3$ .

2. La geometría del reactor: razón longitud / diámetro, diámetro o longitud, diámetro y número de tubos.

Suponiendo una altura  $H = 0.75 \text{ m}$ , área transversal de  $0.2667 \text{ m}^2$ .

Si  $A_T = p \cdot D^2/4$ , el diámetro interno corresponde a  $D_i = 0.5827 \text{ metros}$ .

Cabeza del recipiente, de forma elíptica con relación 2:1 con volumen basado en la porción cilíndrica del reactor, con ecuación  $\pi D^3/24$  igual a  $0.0259 \text{ m}^3$ .

3. La superficie necesaria de transmisión de calor, así como su disposición y geometría.

Para el reactor de descomposición de acetona se verificó que el reactor es adiabático y que el cambio de temperatura con respecto al aentrada es de  $20 \pm 3^\circ\text{C}$ , con lo que la necesidad de tener una chaqueta de refrigerante no es necesaria, lo que si es evidente es tener un aislante de tipo industrial como los utilizados en bloques, tableros y tuberías como el papel asbestino, laminado y corrugado de 4 pliegues que se utilizara en el recubrimiento del reactor, el radio crítico de aislante se debe de estimar a partir de  $R_{cri}=Ka/h_o$

4. Los materiales de construcción.

Si el poder corrosivo de la masa reaccionante es pequeño el reactor puede construirse de materiales convencionales (acero) y casi con cualquier forma. Por el contrario, si existe un problema importante de corrosión deben de utilizarse materiales cerámicos, el tamaño y la forma, a la vez que las características de transmisión de calor y transferencia de materia queden fuertemente restringidas. Además la resistencia del metal a la corrosión en recipientes a presión deben ser seleccionados para proveer la tolerancia mas alta permisible por costo unitario.

Dentro de los materiales de construcción encontramos el acero que es una aleación de hierro que contiene entre 0.02 y 2.11% de carbono en peso. Frecuentemente se incluyen otros elementos aleados como: manganeso, cromo, níquel y molibdeno, pero el contenido de carbono es el que convierte el hierro en acero. Existen cientos de composiciones disponibles en el mercado que se clasifican en : Acero al carbono (contiene carbono como principal elemento de aleación) que a su vez se subdivide en aceros al bajo carbono (con menos de 0.20% de C), al medio carbono (contenido de carbono entre 0.20 y 0.50%), y al alto carbono (en cantidades mayores al 0.50%), otras divisiones son los aceros de baja aleación (aleaciones Fe – C con aleados que totalizan menos del 5 % en peso) que son los mas utilizados debido a sus propiedades mecánicas superiores.

Los elementos de aleación mas utilizados son:

- ✘ Cromo: mejora la resistencia, dureza, resistencia la desgaste y dureza en caliente. Es uno de los mas efectivos aleantes para incrementar la templabilidad. Mejora significativamente las propiedades de resistencia la corrosión.
- ✘ Manganeso: mejora la resistencia y dureza del acero.
- ✘ Molibdeno: aumenta la tenacidad, la dureza en caliente, y la resistencia a la termoinfluencia.
- ✘ Níquel: mejora la resistencia y tenacidad, incrementa la templabilidad, pero no tanto como los otros elementos anteriores.
- ✘ Vanadio-, inhibe el crecimiento de granos durante el procesamiento a temperaturas elevadas, lo que mejora la resistencia y tenacidad del acero.

El grupo de los aceros inoxidable, es altamente aleado y diseñado para suministrar una alta resistencia a la corrosión (materiales de aleación como Cr>15%), se subdividen en tres grupos cuyo nombre se determina por la fase predominante en la aleación a temperatura ambiente como: austeníticos (composición típica de 18% Cr y 8 % Ni, y son los mas resistentes a la corrosión,

se usan para fabricar equipos de proceso químicos y alimenticios), ferríticos (Cr 15-20%, bajo carbono y nada de Ni), Martensíticos (con contenido mas alto de carbono y 18 % de Cr )

Para la reacción de producción de acetona, se intento escoger un material acorde a las necesidades de corrosión (presencia de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>), que ofreciera una resistencia media a los cambios del temperatura y que el costo fuera accesible., para los fines anteriores se escogió un acero inoxidable austenítico designación ASTM 304L-304.

##### 5. Espesor, tipo y grado de agitación.

Para el calculo del espesor del reactor CSTR deberá de considerarse la presión de operación, siendo la presión de diseño especificada como un 10% 0 de 10 a 25 psia por encima de la presión máxima permisible, escogiéndose l o que sea mayor. La presión máxima se determina teniendo en cuenta la variaciones normales debidas a los cambios de presión del vapor, presión de descarga, de bombeo(considerando condiciones de taponamiento ), presión estática, y el gradiente de presión del sistema. Siendo el

$$\text{espesor: } t = \frac{PR}{SE - 0.6P} + C$$

t = espesor de la carcasa, in

P = presión de diseño, psi (14.9666 psi+25 psia = 39.6959 psi)

E = Coeficiente de eficiencia de uniones, varía entre 0.8 y 0.95.

E = 1 (eficiencia común, doble soldadura en las uniones de la cabeza)

R = radio interior de la carcasa , in (0.2914 m  $\cong$  11.4705 m)

C = Previsión por corrosión, in (0.25)

S = tensión de trabajo admisible, Psi (14600, fuente: RASE, H.F y otros, Design of process Plants).

t = 0.2812 in  $\cong$  0.0071 m  $\cong$  7.1434 mm.

Para el diseño del sistema de agitación se recurrirá al diseño estándar de la turbina, con lo cual se garantizará que los estándares hallados estén dentro de lo establecido a nivel comercial.

$$\frac{Da}{Dt} = \frac{1}{3} \quad \frac{H}{Dt} = \frac{1}{1} \quad \frac{J}{Dt} = \frac{1}{12} \quad \frac{E}{Da} = \frac{1}{1} \quad \frac{W}{Da} = \frac{1}{5} \quad \frac{L}{Da} = \frac{1}{4}$$

ESPECIFICACIONES	VALOR
Diámetro del tanque	0.5827
Diámetro del agitador	0.1942
Altura de líquido en el tanque	0.5827
Anchura de placas deflectoras	0.0486 m
Distancia fondo turbina	0.1942
Anchura de paletas	0.0486
Altura de paletas	0.0388

Se escogerán 4 placas deflectoras y 6 palas para el agitador.

Para  $n = 500$  rpm , y una turbina de 6 palas planas,  $K_T=6.30$ . (fuente: McCabe, Warren y otros. Operaciones Unitarias en Ingeniería química. Mc Gras hill. 4ª edición. Tabla 9.2)

Potencia = 1.4156 Hp a partir de  $\rho_{mix}=1.0323$  g/cm<sup>3</sup>.

Si  $n = 500 \text{ rpm} \cong 8.3333 \text{ r/s}$ , el número de  $Re = 27035.9657$ , valor que al ser superior a 10000 indica que la mezcla idealmente se encuentra bien mezclada.

$$ds = \left[ \frac{16\sqrt{TQ_{\max}^2 + M_{\max}^2}}{p^* s_s} \right]^{1/3}$$

$$TQ_{\max} = 63025 * 1.4034 / 500 = 176.8986 \text{ in-lb}$$

$$M_{\max} = 19000 * 1.4034 * 0.6043 / 500 * 0.1942 = 165.9466 \text{ in-lb}$$

Si  $\sigma_s$  = esfuerzo cortante permisible, psi (6000 psi)

A partir de lo anterior  $ds = 1.4998 \text{ cm} \cong 1.5 \text{ cm} \cong 0.015 \text{ m}$  (15 mm)

## 6. Conexiones, embocaduras y Bridas.

Los reactores del proceso poseen embocaduras que deben de conectarse a tuberías, válvulas, y a otros recipientes. Las conexiones son normalmente cortas secciones de tubería o tubos conocidos como tubuladuras que en general se sueldan al recipiente y están conectadas a otros elementos mediante bridas

## 7. Ubicación, mantenimiento y amortización

Al calcular el volumen del reactor (espesor) nos damos cuenta que posee una masa de 313 kg al tomar como densidad de  $7986 \text{ Kg/m}^3$  para acero inoxidable de ASTM 302 y teniendo en cuenta que en el mercado el Kg cuesta 24000 pesos colombianos

### Amortización (SERIE UNIFORME)

Los Costos de compra del agitador de propulsor y de turbina incluyen motor, reductor de velocidad y el impulsor listo para instalarse en un recipiente, se utiliza sellos de prensaestopaque pueden resistir presiones hasta de 10 bares.

Fuente: (ULRICH, Gael. Procesos de ingeniería química. Graficos de diseño y economía de los procesos químicos. Interamericana. Mexico)

$C_{BM}=C_p$  a  $F_{BM}$ , el  $F_{BM}$  es el factor para acero inoxidable (2.5) según la potencia del agitador de 1.4034 Hp.

$C_{BM}$  (costo de equipo de agitación)= \$12500 (precio a 1971), corregido a 2003 da \$ 49971.92 dolares.

En total el costo de la inversión es de \$ 15631220 millones de pesos (colombianos), en la actualidad la tasa de interés de retorno mes /vencido es de 6.5 %, calculando el periodo para que el inversionista recupere la inversión es de 48 meses, el valor de la cuota mensual es calculada a partir de:

$$R = 15631220 * \left( \frac{0.065}{1 - (1 + 0.065)^{-48}} - 28 \right) = 1068003.964 \text{ millones de pesos}$$

El contenido de la amortización a la cuota 45 es de.

$$C_{45} = 1068003.964 * \left( \frac{1}{(1 + 0.065)^{48-45+1}} \right) = 830184.142 \text{ millones de pesos}$$

La inversion se pagara en su totalidad equivalente a 15631220 millones de pesos, los intereses corresponden a 35632970,272 millones de pesos, lo que indica que el credito se pagará 2.28 veces el valor base.

## CONCLUSIONES

El diseño de reactores dentro de los procesos químicos indica que deben de considerarse diferentes factores que hacen de la ingeniería química base, para fundamentar sus teorías, se pueden ver que los conceptos cinéticos, termodinámicos, de transferencia de calor y masa, mecánicas de fluidos fueron los que se aplicaron en todo el proceso de diseño del proceso de producción de acetona vía cumeno.

Dentro del trabajo se observa los diferentes vacíos que se han presentado a lo largo de la carrera de ING: Química, pero ello no indica que se puedan superar, siendo este espacio el mas apropiado no solo para asumir el reto de poner a prueba sus conocimientos sobre diseño si no para aprender y observar el mundo laboral que se puede ver enfrentado el estudiante de esta carrera.

## BIBLIOGRAFIA

HENLEY, Ernest. Operaciones de separacion por etapas de equilibrio en ingenieria quimica. Editorial Reverte. John Wiley & sons. 1988.

TREYBALL, Robert E. Operaciones de transferencia de masa. Mc Graw Hill. 2ª edicion. USA.

REKLAITIS, G.V. Balance de Materia y Energía. Publicaciones de la Universidad Nacional de Colombia-sede Manizales.

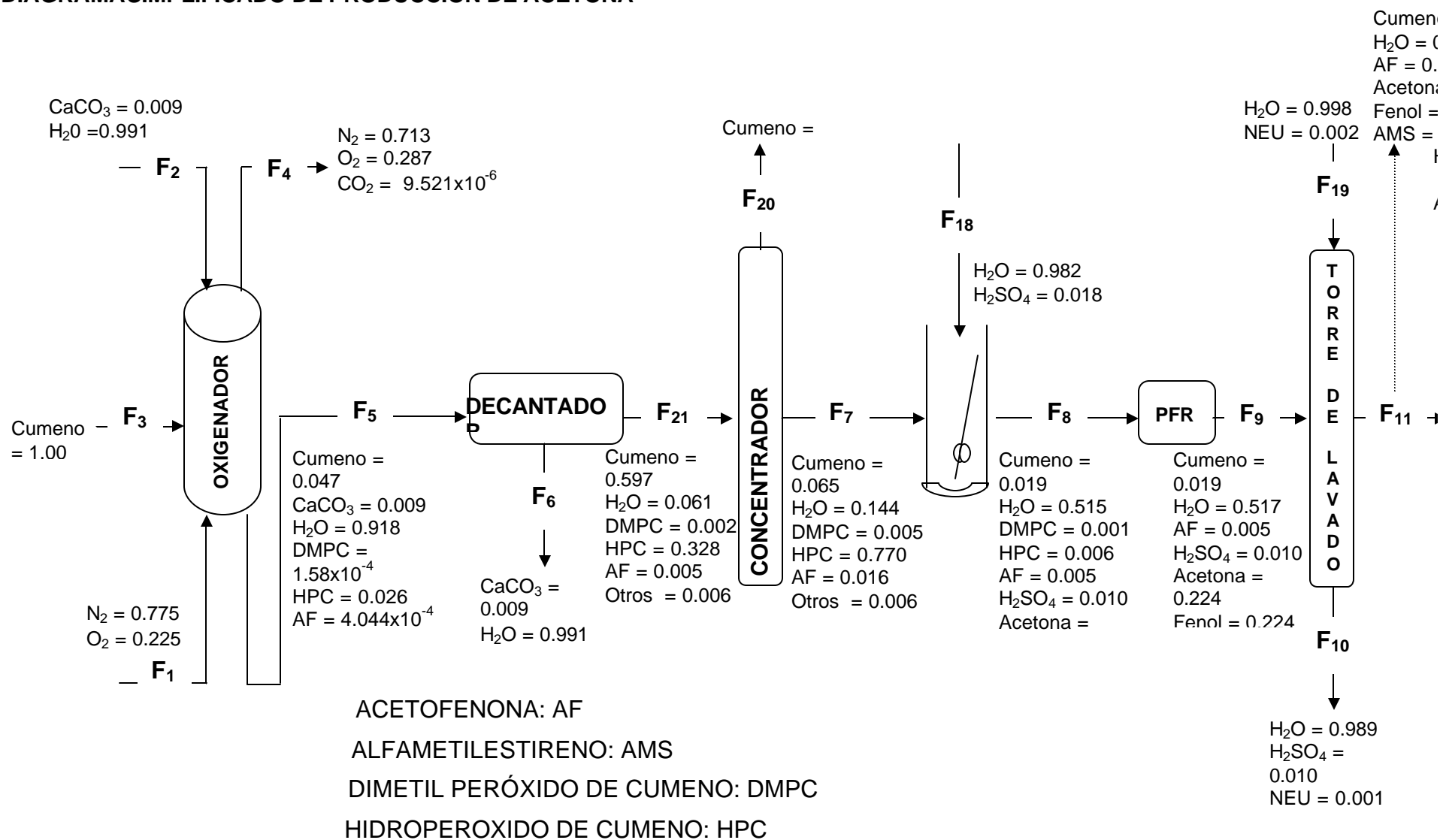
ULRICH, Gael D. Procesos de ingeniería química. Editorial interamericana. 1986

FOGLER, H.Scott. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. Editorial Prentice Hall, 3ª edicion.



## ANEXOS

# DIAGRAMA SIMPLIFICADO DE PRODUCCIÓN DE ACETONA



## CALCULO DEL ANALISIS TERMODINAMICO

```

%*****BASE DE
DATOS*****
%*****
*****
%*****CALCULO DE
ENTALPIA*****
%*****
*****

%CP1=[prop.hidrop ; prop.acetona ; prop.fenol] (J/mol*K)
%CP1=[dT^3+cT^2+bT+a]
disp('1. Hidroperoxido de cumeno');
disp('2. Acetona');
disp('3. Fenol');
CP1=[ -0.0000128      0.0130661  -3.6292965  541.9176119;
      0.00000339139  -0.00264114  0.848409   16.8022;
      0.00000174183  -0.00212291  1.15354   -36.1614];
%X=[Coef.esteq. H°liq(J/mol)  Teb(K)  G°liq(J/mol)]
%X=[prop.hidrop ; prop.acetona ; prop.fenol]

      X=[-1 -149000      373.7   -166669.67;
          1 -242100      329.2    -155800;
          1 -158261.04  455        -46138.536];

%*****CALCULO          DE          LA          ENTALPIA
REACCION*****
function [HrxnT,T]=entalpia
Datos
Hrxnstandar=X(3,2)+X(2,2)-X(1,2)
for i=1:3
a(i)=X(i,1)*CP1(i,4);
b(i)=X(i,1)*CP1(i,3);
c(i)=X(i,1)*CP1(i,2);
d(i)=X(i,1)*CP1(i,1);
end
To=298;
T=[273:5:500];
for j=1:length(T)
A(j)=sum(a)*(T(j)-To);
B(j)=sum(b)*(T(j)^2-To^2)/2;
C(j)=sum(c)*(T(j)^3-To^3)/3;
D(j)=sum(d)*(T(j)^4-To^4)/4;
HrxnT(j)=Hrxnstandar+((A(j)+B(j)+C(j)+D(j)));
end

figure(1)

```

```

plot(T,HrxnT,'-');
title ('COMPORTAMIENTO DEL CALOR DE REACCIÓN A DIFERENTES
TEMPERATURAS')
xlabel('TEMPERATURA (k)');
ylabel('CALOR DE REACCION (J/MOL)');

%*****CALCULO DE LA ENERGIA LIBRE DE GIBBS DE
REACCION*****
function [Ke]=kteequilibrio
Datos
Grxnstandar=X(3,4)+X(2,4)-X(1,4)
To=298;
R=8.31451;
Kestandar=exp((-Grxnstandar)/(R*To))
[HrxnT,T]=entalpia
for i=1:length(T)
    Ke(i)=Kestandar*exp(-HrxnT(i)*((1/T(i))-(1/To))/R);
TT(i)=1/T(i);
Kee=log(Ke);
end
for i=1:length(T)
    Grxn(i)=-log(Ke(i))*R*T(i)
end
figure(2)
plot(TT,Kee)
title('EL COMPORTAMIENTO DE LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO CON
RESPECTO A LA TEMPERATURA')
xlabel('EL INVERSO DE LA TEMPERATURA(1/K)')
ylabel('LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO (lnKe)')

figure(3)
plot(TT,Grxn)
%plot(T,Grxn)
title('EL COMPORTAMIENTO DE LA ENERGIA LIBRE GIBBS RESPECTO A
LA TEMPERATURA')
xlabel('TEMPERATURA (K)')
ylabel('ENERGIA LIBRE DE GIBBS (J/mol)')

```

### CALCULO DE LA TEMPERATURA DE LLAMA

```

%-----PROPIEDADES-----
%-----
%-----
%-----
% $C_p = [A + BT^2 + CT^3 + DT^4]$ 

```

```

cp=[ 5.419176119e2 -3.6292965      1.30661e-2  -1.28e-5;%HPC
      1.68022e1      8.48409e-1  -2.64114e-3  3.39139e-
6;%ACETONA
      -3.61614e1      1.15354      -2.12291e-3  1.74183e-
6;%FENOL
      196.44      -135.4e-3      574.97e-6      0;%CUMENO
      267.535275      -4.389486e-3  35.02572      7.4667e-
6;%DMPC
      261.923817      -9.81062e-1      3.508571e-3  -2.963e-
6;%ACETOFENONA
      1.82964e1      4.72118e-1      -1.33878e-3  1.31424e-
6;%AGUA
      1.4193      1.59098e-3      0
0];%AC.SULFURICO
%-----
%-----
%-----
%P=[coef.  Hf  Teb  Gf]
P=[-1  -149000      373.7  -166669.67;%HPC
      1  -242100      329.2  -155800;%ACETONA
      1  -158261.04  455      -46138.536];%FENOL
%-----
%-----
%-----
%N=[HPC ACETONA FENOL CUMENO DMPC ACETOFENONA AGUA
SULFURICO(salida)]
N=[4524.13978 158297.78036 158354.4974 13748.9336 509.3215125
3438.3777.... 374558.40041 7020.78956];

```

```

%-----CALCULO DEL CALOR DE REACCION-----
%-----
%-----
function [Hrxn]=reaccion(T)
base;
r=158346.986;%mol/min
Hrestandar=P(3,1)*P(3,2)+P(2,1)*P(2,2)+P(1,1)*P(1,2);%J/mol
To=298.15;

```

```
%Cp=[HPC ACETONA FENOL CUMENO DMPC ACETOFENONA AGUA  
SULFURICO]
```

```
%1 Hpc; 2 Aceftona; 3 Fenol;
```

```
a1=P(1,1)*cp(1,1);
```

```
a2=P(2,1)*cp(2,1);
```

```
a3=P(3,1)*cp(3,1);
```

```
b1=P(1,1)*cp(1,2);
```

```
b2=P(2,1)*cp(2,2);
```

```
b3=P(3,1)*cp(3,2);
```

```
c1=P(1,1)*cp(1,3);
```

```
c2=P(2,1)*cp(2,3);
```

```
c3=P(3,1)*cp(3,3);
```

```
d1=P(1,1)*cp(1,4);
```

```
d2=P(2,1)*cp(2,4);
```

```
d3=P(3,1)*cp(3,4);
```

```
%CALCULO DE LA INTEGRAL
```

```
    A=(a1+a2+a3)*(T-To);
```

```
    B=((b1+b2+b3)/2)*(T^2-To^2);
```

```
    C=((c1+c2+c3)/3)*(T^3-To^3);
```

```
    D=((d1+d2+d3)/4)*(T^4-To^4);
```

```
Hrxn=r*(Hrestandar+(A+B+C+D))%J/min
```

```
%CALCULO DEL BALANCE EDE ENERGIA CON RESPECTO A LA  
TEMPERATURA DE ENTRADA
```

```
%-----  
-----
```

```
function [I]=integral(T,To)
```

```
base;
```

```
%A
```

```
aA=N(1)*cp(1,1);
```

```
aB=N(2)*cp(2,1);
```

```
aC=N(3)*cp(3,1);
```

```
aD=N(4)*cp(4,1);
```

```
aE=N(5)*cp(5,1);
```

```
aF=N(6)*cp(6,1);
```

```
aG=N(7)*cp(7,1);
```

```
aH=N(8)*cp(8,1);
```

```
%B
```

```
bA=N(1)*cp(1,2);
```

```
bB=N(2)*cp(2,2);
```

```
bC=N(3)*cp(3,2);
```

```
bD=N(4)*cp(4,2);
```

```
bE=N(5)*cp(5,2);
```

```
bF=N(6)*cp(6,2);
```

```
bG=N(7)*cp(7,2);
```

```
bH=N(8)*cp(8,2);
```

```

%C
cA=N(1)*cp(1,3);
cB=N(2)*cp(2,3);
cC=N(3)*cp(3,3);
cD=N(4)*cp(4,3);
cE=N(5)*cp(5,3);
cF=N(6)*cp(6,3);
cG=N(7)*cp(7,3);
cH=N(8)*cp(8,3);
%D
dA=N(1)*cp(1,4);
dB=N(2)*cp(2,4);
dC=N(3)*cp(3,4);
dD=N(4)*cp(4,4);
dE=N(5)*cp(5,4);
dF=N(6)*cp(6,4);
dG=N(7)*cp(7,4);
dH=N(8)*cp(8,4);
%---BALANCE DE ENERGIA EN FUNCION DE LA TEMPERATURA DE
ENTRADA SALIDA----
%-----
-----
[Hrxn]=reaccion(To);
I=Hrxn+( (aA+aB+aC+aD+aE+aF+aG+aH) *(T-
To) )+(( (bA+bB+bC+bD+bE+bF+bG+bH) / 2) *(T^2-
To^2) )+(( (cA+cB+cC+cD+cE+cF+cG+cH) / 3) *(T^3-
To^3) )+(( (dA+dB+dC+dD+dE+dF+dG+dH) / 4) *(T^4-To^4) );

%-----NEWTON-RAPHSON PARA LA TEMPERATURA DE RXN
ADIABATICA-----
clear all
close all
clc
%-----
-----
To=[298.15:5:390];
for i=1:length(To)
    Te=450;
    h=1e-6;
    tol=1;
    it=1;
    while abs(tol)>=h
        [I]=integral(Te,To(i));
        Tee=Te+h;
        [Id]=integral(Tee,To(i));
        Der=(Id-I)/h;
    end
end

```

```
Tn=Te-I/Der;  
tol=Tn-Te;  
Te=Tn;  
it=it+1;  
end  
Ts(i)=Tn;  
end  
plot(To,Ts);  
xlabel('TEMPERATURA DE ENTRADA AL REACTOR (K)');  
ylabel('TEMPERATURA DE SALIDA PARA OPERACION ADIABATICA  
(K)');
```