

Departamento de ciencias de la energía y mecánica carrera de petroquímica

Trabajo de unidad de integración curricular, previo a la obtención del título de petroquímico

**Tema: “Cálculo de las proporciones estequiométricas, balances de masa,
rendimientos reales y teóricos del polímero comercial poliestireno (PS).”**

**Elaborado por:
Bustillos Buenaño, Josselyn Karolina**

**Tutor del Proyecto
Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio, PhD.**



CONTENIDO

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES

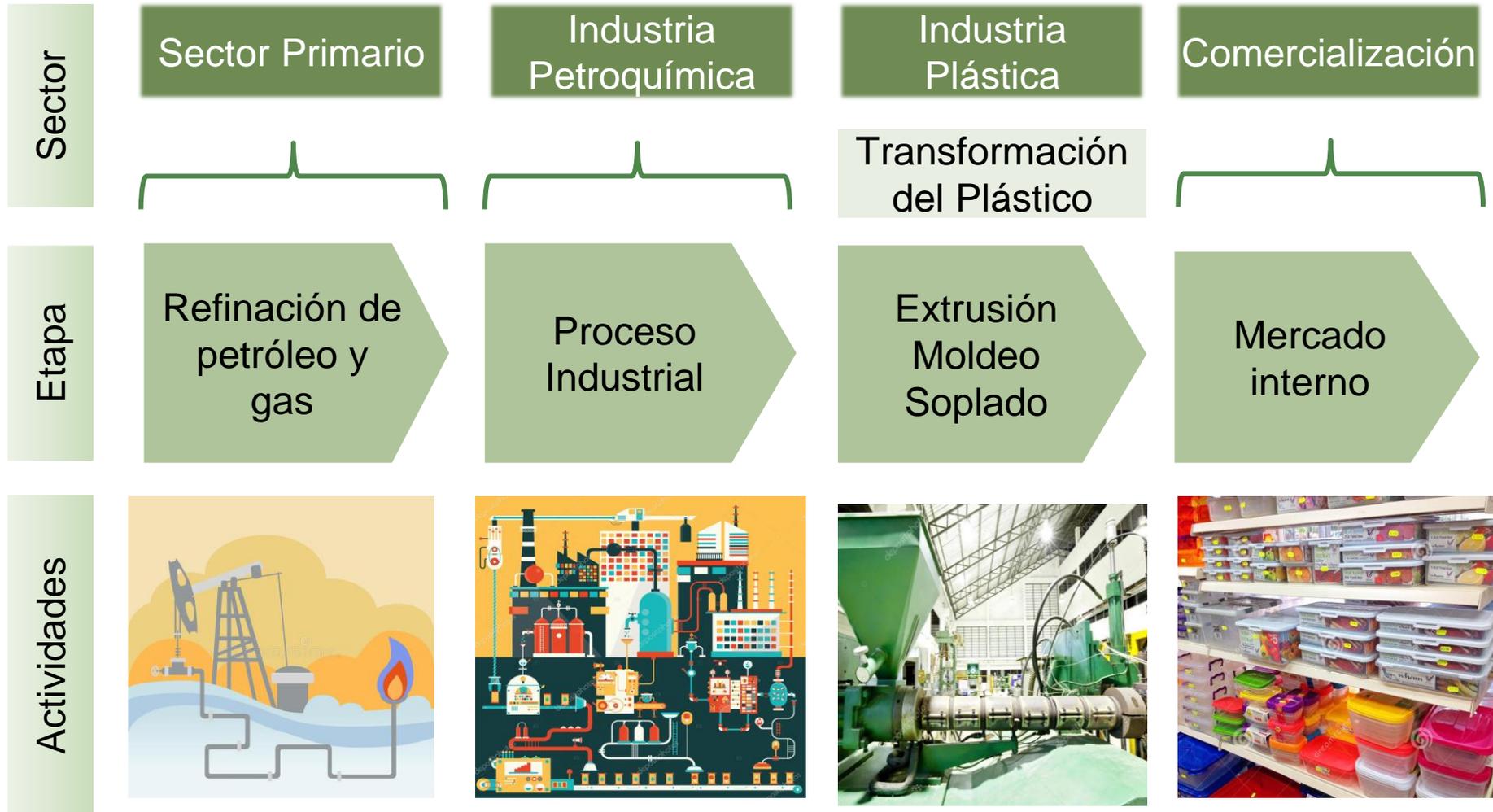


Introducción

Justificación



Introducción



Introducción



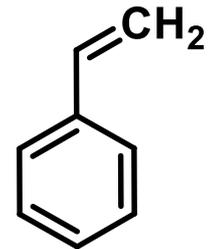
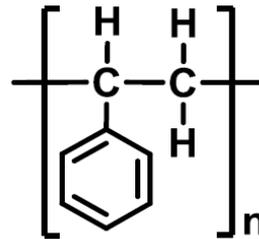
Propiedades

Físicas

Químicas

Mecánicas

Poliestireno (PS)



Polimerización

Masa

Suspensión



CONTENIDO

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES



OBJETIVOS

Objetivo general

Calcular las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial poliestireno (PS).



OBJETIVOS

Objetivos específicos

- Revisar el estado del arte de los reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero PS.
- Elaborar tablas de síntesis estequiométricas para cada tipo de metodología encontrada.
- Ejecutar balances de masa estructurando la estequiometría propia de cada reacción.
- Contrastar los rendimientos teóricos con los reportados en la literatura.
- Ejecutar un análisis de retro síntesis *online* con propósito de comparación.
- Interpretar las reacciones químicas y los mecanismos de reacción mediante la ingeniería inversa.

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

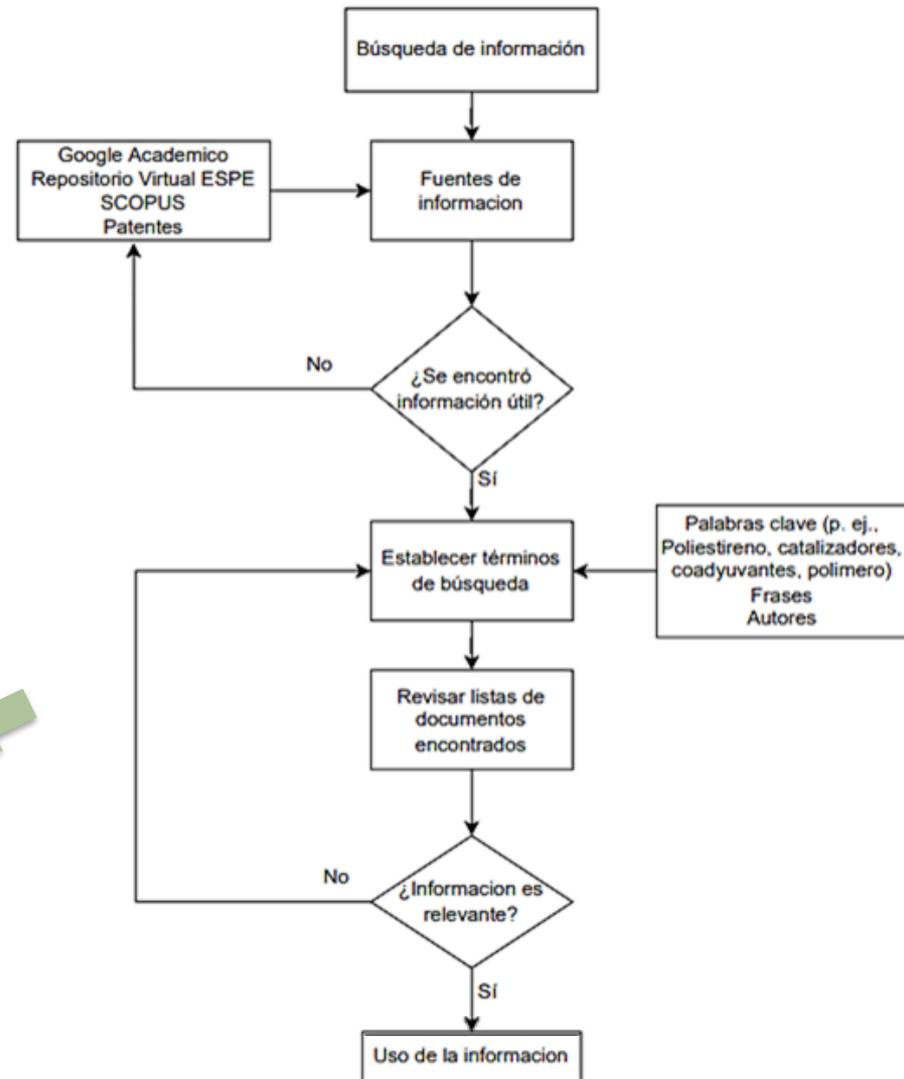
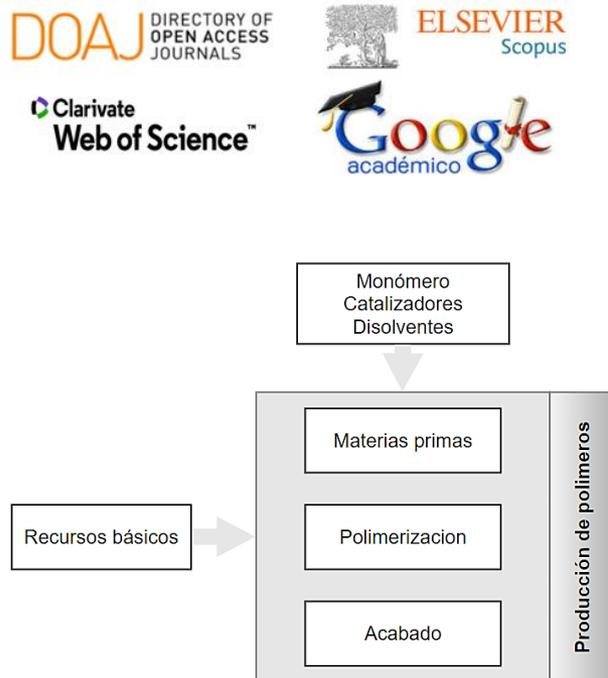
CONCLUSIONES



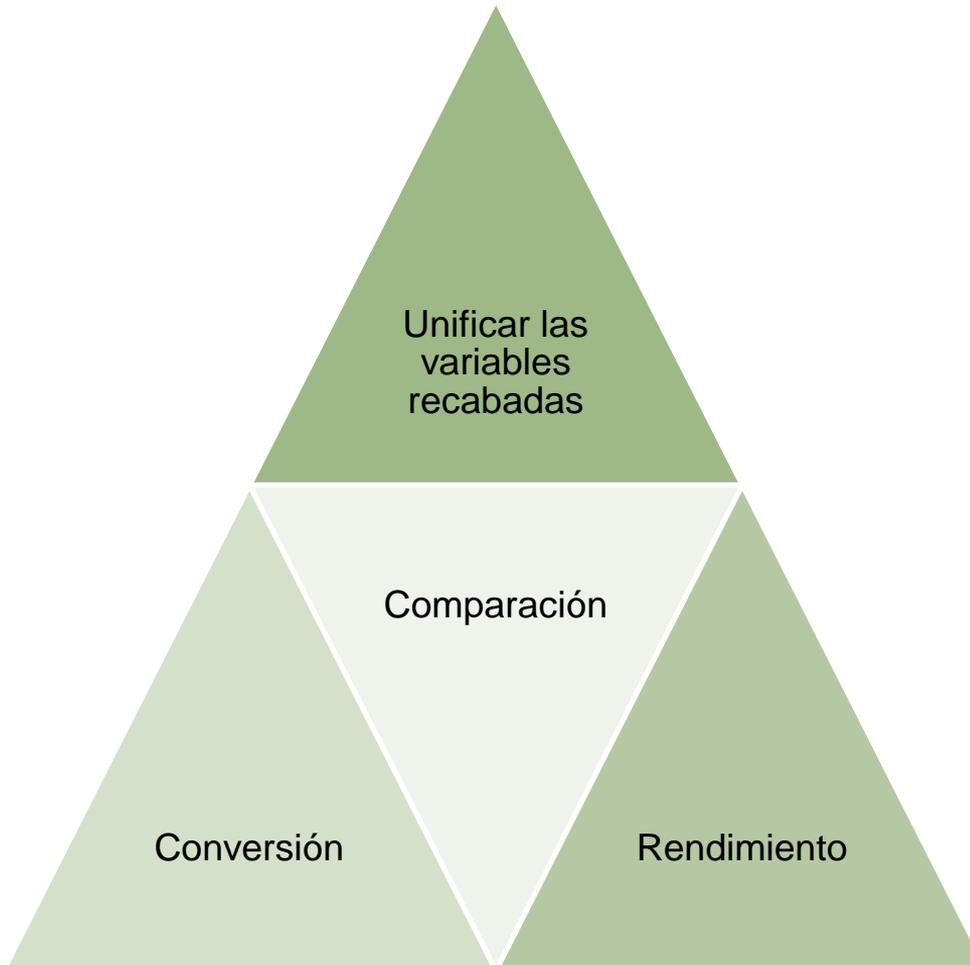
ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

METODOLOGÍA

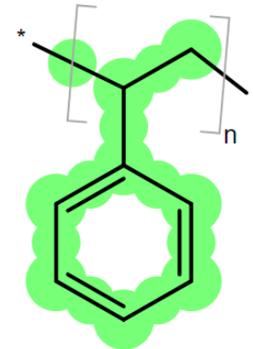
Revisión del estado del arte de los reactivos, catalizadores y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero PS.



Mejora de rendimientos del polímero con respecto a las variables reportadas



Análisis de ingeniería inversa



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES



Contraste de la información reportada en las fuentes bibliográficas

	Ejemplo 1	Ejemplo 2	Ejemplo 3	Ejemplo 4
Reactor	Tanque agitado	Tanque agitado	Tanque agitado	Tanque agitado
Temperatura de reacción	130	128	128	128
Peróxido	d	e	f	g
Conversión en la prepolimerización	35	40	39	31
Conversión final	81	85	84	73
M_w	354000	387000	382000	315000
M_n	141000	161000	159000	83000
Índice de polidispersión	2,5	2,4	2,4	3,8

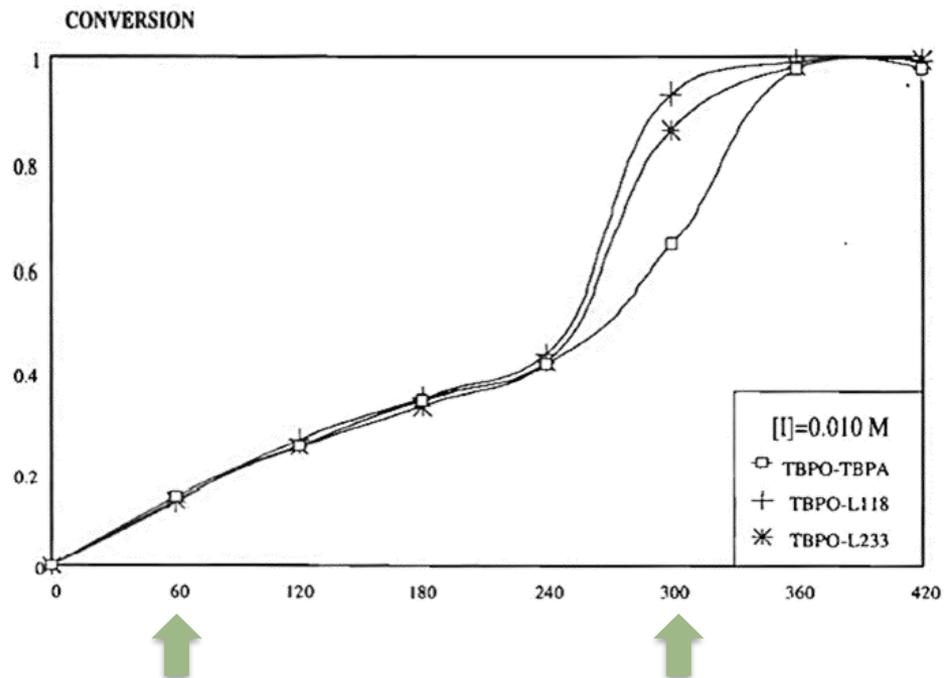
Tabla 1. Recopilación de datos de la patente para la polimerización de estireno en masa

Donde d, e, f, g son 2,2-di(terc-butilperoxi)butano; 1,1-di-t-butilperoxi-3,3,5 trimetilciclohexano sin iniciador; peroxibenzoato de t-butilo respectivamente

(Morita & Shimazu, 1987), Patent number, US4948847A



Información recopilada para la mejora de los flujos molares



Conversion	Rango de conversión (%)	Tiempo de reacción (h)	Iniciador
Reactor 1	16	1	TBPO-L233
	17		TBPO-L118
	40		$C_{17}H_{34}O_4$
Reactor 2	86	5	TBPO-L233
	92		TBPO-L118
	85		$C_{17}H_{34}O_4$

Tabla 2. Iniciadores para la evaluación del cambio de flujo

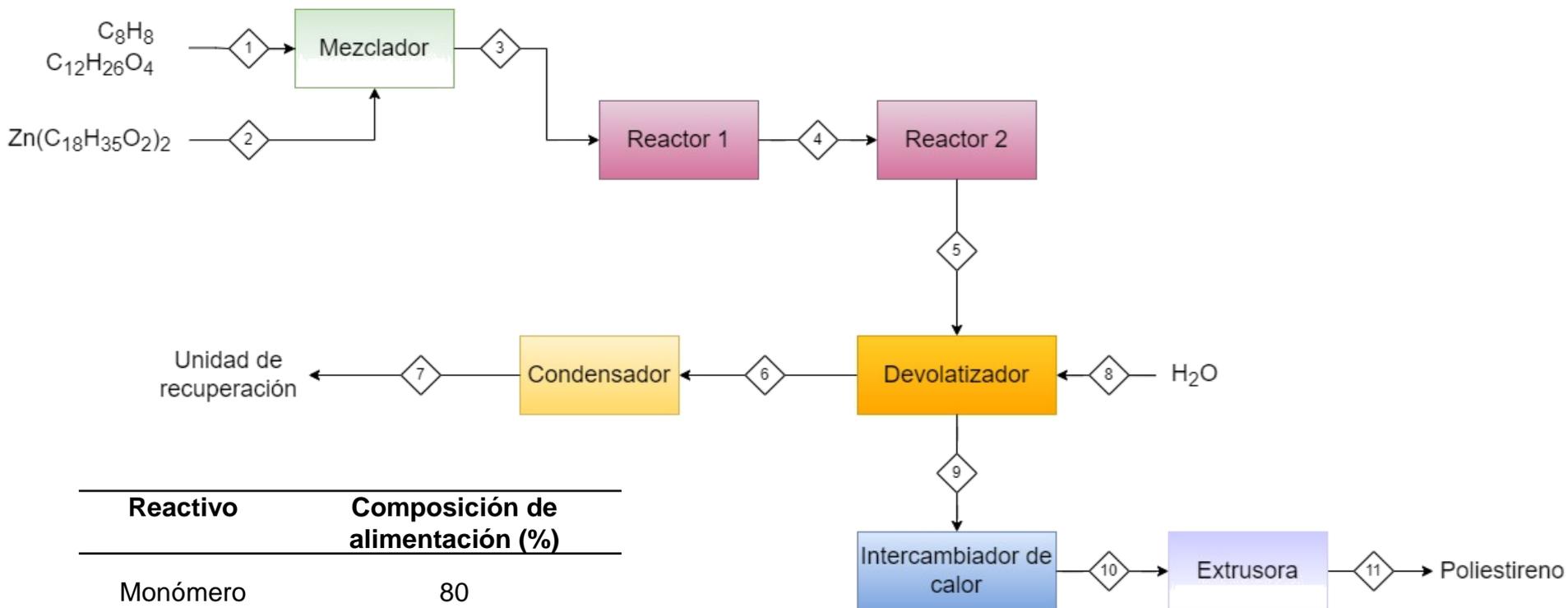
- Terbutilperoctoato y etil 3,3 (t-butil peroxi) butirato
- Terbutilperoctoato y 2,5 dimetil-2,5 bis (benzoil peroxi) hexano
- 1,1-di-t-butilperoxi-3,3,5 trimetilciclohexano

I, Gonzales & H. Oliva, 1995, Revista Técnica
Universidad del Zulia.



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

Elaboración de un diagrama de acuerdo con el proceso de polimerización del compuesto PS



Reactivo	Composición de alimentación (%)
Monómero	80
Iniciador	20
Aditivo	100

Tabla 3. Composición de la entrada con el iniciador 2,2-di(terc-butilperoxi)butano

Organic Chemical Process Industry, US EPA, 2014



Resultados de los balances másicos obtenidos del proceso de polimerización en masa

Entrada de la corriente de alimentación	
Componentes	Flujos molares (kmol/año)
C_8H_8	33000
$C_{12}H_{26}O_4$	8250
Total	41250

Tabla 4. Flujos masicos de la alimentación

Salida de las corrientes	
Componentes	Flujos molares (kmol/año)
C_8H_8	4,0755
$C_{12}H_{26}O_4$	0
$(C_8H_8)_n$	28491,0663
H_2O	0
Total	28495,1418

Tabla 5. Flujos masicos resultantes del proceso de polimerización en masa

Alimentación de estireno (kmol/año)	Cantidad de PS (kmol/año)	Rendimiento (%)
33000	28491,0664	0,8633
33000	28682,8488	0,8691
33000	30347,1301	0,9196
33000	29580,0005	0,8963

Tabla 6. Rendimientos teóricos



Análisis de conversión y flujos de entrada para evaluar las fuentes de variabilidad

$H_0: T1=T2=T3=T4=T5=T6=T7=T8=0$

$H_1: T1 \neq T2 \neq T3 \neq T4 \neq T5 \neq T6 \neq T7 \neq T8 \neq 0$



Conversión	Flujos de entrada	Flujos optimizados	Tratamientos
81	41250	28491,06637	T1
81	53625	34384,63767	T2
86	41250	28682,84879	T3
86	53625	37287,70342	T4
92	41250	30347,13013	T5
92	53625	38454,00059	T6
85	41250	29580,00045	T7
85	53625	37038,38628	T8

Tabla 7. Tabla de datos para realizar la prueba ANOVA



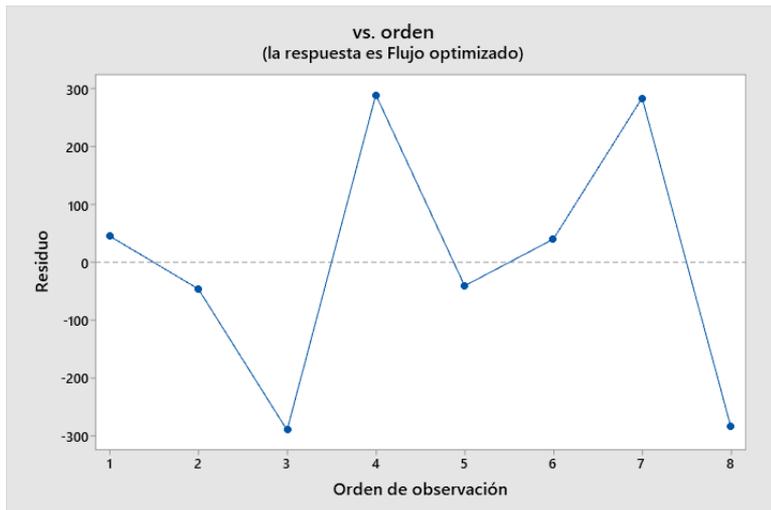
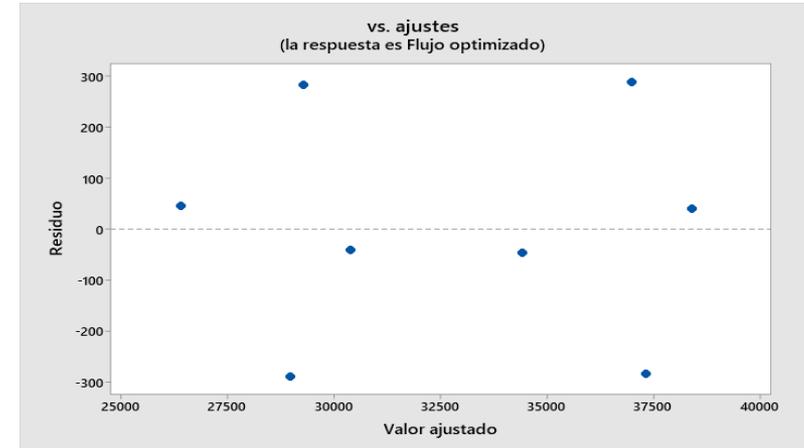
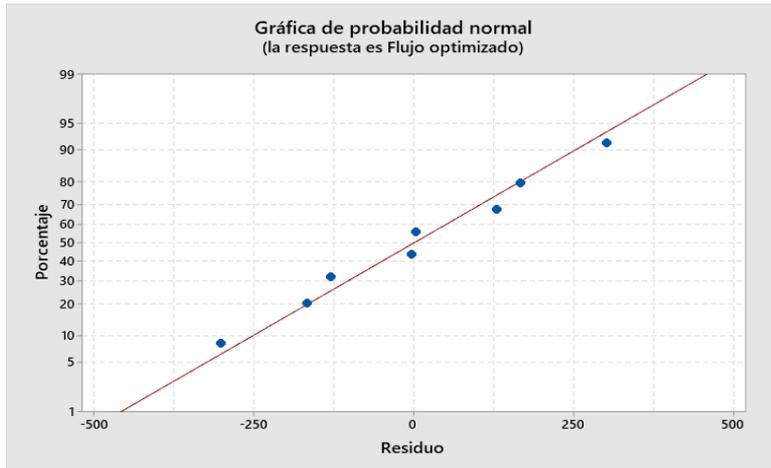
Análisis de conversión y flujos de entrada para evaluar las fuentes de variabilidad

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Conversión	3	17062643	5687548	50,77	0,005
Flujos de entrada	1	128841597	128841597	1150,21	0,000
Error	3	336047	112016		
Total	7	146240288			

Tabla 8. Resultado del análisis ANOVA que fue realizada con intervalo de confianza del 95%



Análisis de conversión y flujos de entrada para evaluar las fuentes de variabilidad

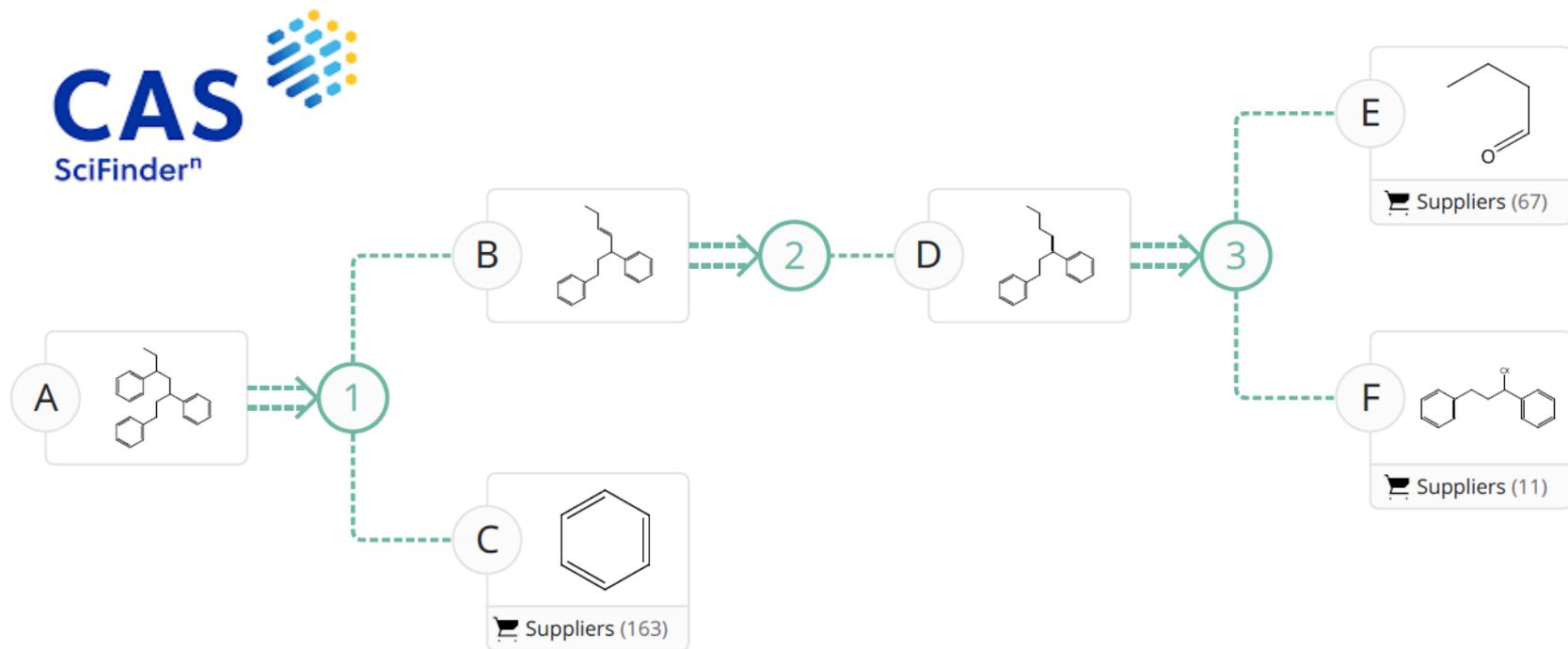


Prueba de rangos múltiples

Conversión	Agrupación
92	A
85	B
86	B
81	C



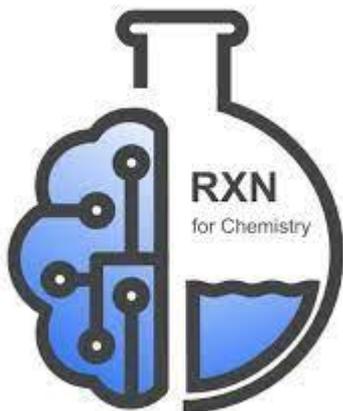
Ejecución del análisis de retro síntesis



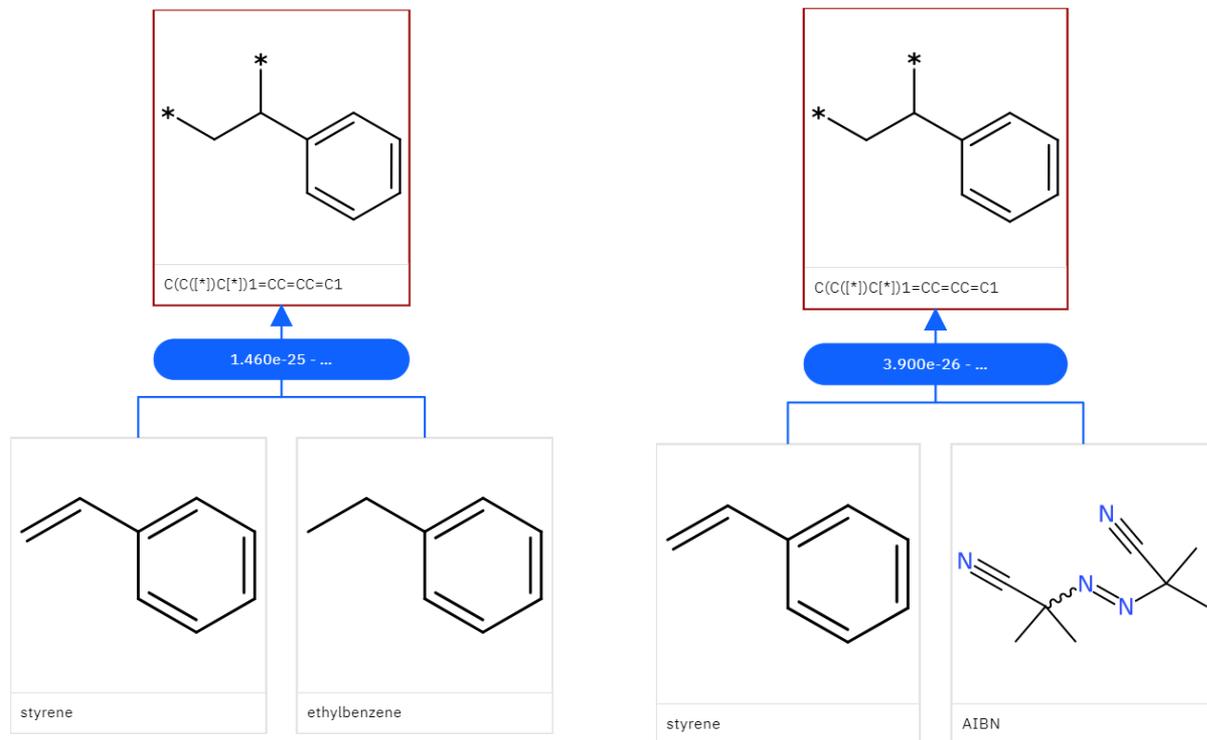
Resultados de la exploración de las vías de retrosíntesis mediante SciFinder



Ejecución del análisis de retro síntesis



Resultados de la exploración de las vías de retro síntesis mediante IBM RXN



(Twaddle et al., 1955)

Azobisisobutyronitrilo como un agente de soplado para plásticos



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES

CONCLUSIONES

- En este **trabajo bibliográfico** se investigó y recabó información sobre el polímero comercial PS. Se incluye información desde la estructura del polímero hasta los procesos industriales de producción de poliestireno, por lo cual, fue necesario llevar a cabo un contraste de las diferentes fuentes bibliográficas, como artículos científicos y patentes para estructurar correctamente el proceso de polimerización.
- Se presento el diagrama de proceso que permitirá la producción de PS para lo cual se analizaron alternativas de producción, en este caso se eligió el **método de polimerización en masa**, puesto que, este método se destaca por lograr una buena economía mediante un proceso sencillo al emplear como materias primas principales el monómero en conjunto con especies iniciadoras, generalmente peróxidos y azocompuestos, para promover la reacción de radicales libres.
- Siguiendo las especificaciones de la bibliografía se seleccionó la especie **2,2-di(tert-butilperoxi)butano (C₁₂H₂₆O₄)** como iniciador de reacción que produce conversiones de 35 y 81 por ciento en las zonas de prepolimerización y polimerización final respectivamente, dando como resultado un flujo molar de **28491,066 kmol/año** equivalente a **2967,344 t/año**. Para contrastar el proceso se emplea **TBPO-L118** que está compuesto de terbutilperoctoato y 2,5 dimetil-2,5 bis (benzoilperoxi) hexano dando como resultado un flujo molar total de **30347,13 kmol/año** que es equivalente a **3160,653 t/año**.



CONCLUSIONES

- Mediante el contraste de los valores resultantes en el balance másico para la obtención de PS se logró constatar que la **conversión** influencia a los flujos resultantes del polímero se consideran estadísticamente diferentes para cada tipo de iniciador empleado.
- Para el reporte final se realizó la prueba estadística ANOVA que indica que el flujo másico experimenta un incremento significativo cuando se emplean iniciadores de reacción diferentes a $C_{12}H_{26}O_4$ para la síntesis de PS a partir de 28491,066 kmol/año equivalente a 3436.95 t/año de estireno, debido a que la conversión es una **f fuente de variabilidad**. Adicionalmente se realizó un análisis de retro síntesis mediante las plataformas *SciFinder* e *IBM RXN for Chemistry*, para proporcionar información adicional referente a las vías de síntesis para la producción de PS. Mismas que fueron constatadas mediante la bibliografía para revisar su posibilidad de síntesis



RECOMENDACIONES

- Se sugiere implementar el análisis de costos orientado a la implementación de maquinaria y equipos de producción, así como a los costos de instalación, para lograr estructurar una visión más amplia del trabajo investigativo.
- Se recomienda completar la información recopilada en este trabajo orientada al mejoramiento del proceso con el fin desarrollar operaciones amigables con el ambiente para mitigar el impacto causado por el mal uso del poliestireno.
- Implementar el uso de plataformas de retro síntesis química como SciFinder, debido a que este tipo de herramienta propician información valiosa para la implementación de vías de síntesis, así como información sobre los proveedores de especies químicas.



GRACIAS