



**Cálculo de las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales  
y teóricos del polímero comercial cloruro de polivinilo (PVC)**

Garzón Villagómez, Romina Nikole

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

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio, PhD.

14 de agosto del 2022

Latacunga



**ESPE**  
 UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS  
 INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

## Reporte de verificación de contenido

**COPYLEAKS**

Garzón Romina\_UIC\_corregido.docx

Scanned on: 2:17 August 15, 2022 UTC



Overall Similarity Score



Results Found



Total Words in Text

Identical Words	271
Words with Minor Changes	42
Paraphrased Words	83
Omitted Words	2717



Firmado electrónicamente por:

**FABIAN  
 MAURICIO  
 SANTANA ROMO**

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

**Director**



Website | Education | Businesses



Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

Certificación

Certifico que el trabajo de integración curricular: **“Cálculo de las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial cloruro de polivinilo (PVC)”** fue realizado por la señorita **Garzón Villagómez, Romina Nikole**, el mismo que cumple con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, además fue revisado y analizada en su totalidad por la herramienta de prevención y/o verificación de similitud de contenidos; razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que se lo sustente públicamente.

Latacunga, 14 de agosto del 2022



Firmado electrónicamente por:  
**FABIAN  
MAURICIO  
SANTANA ROMO**

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

C. C.: 1802925139



# ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS  
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

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

Responsabilidad de Autoría

Yo, **Garzón Villagómez, Romina Nikole**, con cédula de ciudadanía N° 0550062988, declaro que el contenido, ideas y criterios del trabajo de integración curricular: **“Cálculo de las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial cloruro de polivinilo (PVC)”** es de mi autoría y responsabilidad, cumpliendo con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos, y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, respetando los derechos intelectuales de terceros y referenciando las citas bibliográficas.

**Latacunga, 14 de agosto del 2022**

Una firma manuscrita en tinta azul que parece decir 'ROMINA'.

**Garzón Villagómez, Romina Nikole**

C.C.: 0550062988



# ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS  
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

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

**Carrera de Petroquímica**

Autorización de Publicación

Yo **Garzón Villagómez, Romina Nikole**, con cédula de ciudadanía N° 0550062988, autorizo a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el trabajo de integración curricular: **“Cálculo de las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial cloruro de polivinilo (PVC)”** en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de mi/nuestra responsabilidad.

**Latacunga, 14 de agosto del 2022**

**Garzón Villagómez, Romina Nikole**

C.C.: 0550062988

### **Dedicatoria**

Dedico este trabajo a Dios que ha sido el quien me ha acompañado en cada momento difícil de mi vida, a mi padre Oscar que, aunque ya no está en este mundo, con sus consejos y su amor me ha impulsado a seguir adelante a pesar de los duros momentos vividos por su ausencia, a mi madre Patricia que me ha guiado con su paciencia a través de este largo camino, a mis hermanos Julián y Sally por ser un ejemplo a seguir y brindarme buenos momentos y apoyo constante, finalmente a mis sobrinos Martín, Juliana, Juan Diego y Adrián por hacer de mis días los mejores.

## **Agradecimiento**

Quiero agradecer a Dios por darme la sabiduría necesaria para lograr cumplir con mis metas y objetivos durante todos estos años de carrera.

A mis padres y hermanos que han sido un pilar fundamental en mi vida, agradezco su amor, paciencia, apoyo tanto académico como personal, por ser ellos quienes han atravesado este camino sosteniéndome para no rendirme, y aunque mi padre ya no está, agradezco los años vividos con él y los buenos momentos compartidos a su lado.

A mis amigos Jorge, Michelle, Johanna, Pamela, por acompañarme durante todos estos años de Universidad, por su apoyo académico y emocional, a Shirley y Jesenia, por estar conmigo desde los años de secundaria, les agradezco por estar presentes en todas nuestras aventuras juntos.

Quiero expresar un profundo agradecimiento a mi tutor de UIC, PhD. Fabián Santana por su paciencia, por guiarnos y expresarnos sus conocimientos de manera concisa y acertada, por responder todas mis dudas de manera clara, sin su guía no hubiera sido posible la ejecución de este trabajo.

Finalmente, quiero agradecer a todos los involucrados en este proceso como mis docentes que han aportado en el desarrollo de mis conocimientos durante este periodo.

**ÍNDICE DE CONTENIDO**

<b>Carátula.....</b>	<b>1</b>
<b>Reporte de verificación de contenido .....</b>	<b>2</b>
<b>Certificación .....</b>	<b>3</b>
<b>Responsabilidad de Autoría .....</b>	<b>4</b>
<b>Autorización de Publicación .....</b>	<b>5</b>
<b>Dedicatoria .....</b>	<b>6</b>
<b>Agradecimiento.....</b>	<b>7</b>
<b>Índice de contenido .....</b>	<b>8</b>
<b>Índice de figuras .....</b>	<b>15</b>
<b>Índice de tablas .....</b>	<b>18</b>
<b>Resumen .....</b>	<b>20</b>
<b>Abstract.....</b>	<b>21</b>
<b>Capítulo I: Generalidades .....</b>	<b>22</b>
<b>Antecedentes.....</b>	<b>22</b>
<b>Planteamiento del problema .....</b>	<b>23</b>
<b>Justificación e importancia.....</b>	<b>24</b>
<b>Objetivos .....</b>	<b>25</b>
<b><i>Objetivo General.....</i></b>	<b>25</b>
<b><i>Objetivos específicos.....</i></b>	<b>25</b>
<b>Hipótesis .....</b>	<b>25</b>
<b>Variables dependientes e independientes .....</b>	<b>25</b>

<i>Variables independientes</i> .....	25
<i>Variables dependientes</i> .....	26
<b>Capítulo II: Fundamentación teórica</b> .....	27
<b>Polímeros</b> .....	27
<i>Producto Interno Bruto PIB, economía y consumo de polímeros</i> .....	27
<b>Demanda de PVC</b> .....	28
<b>PIB de plásticos en Ecuador</b> .....	28
<i>Conceptos básicos</i> .....	29
<i>Generalidades</i> .....	30
<b>Reacciones de polimerización</b> .....	30
<b>Nomenclatura de los polímeros</b> .....	30
<i>Métodos para la Síntesis de Polímeros</i> .....	30
<b>Polimerización por condensación</b> .....	30
<b>Polimerización por adición</b> .....	31
<b>Clasificación de los polímeros</b> .....	32
<i>Por su origen</i> .....	32
<b>Naturales</b> .....	32
<b>Sintéticos</b> .....	32
<i>Por el tipo de enlace químico</i> .....	32
<b>Fibras</b> .....	32
<b>Elastómeros</b> .....	33
<b>Plásticos</b> .....	33

<i>Por las propiedades fisicoquímicas</i> .....	33
<b>Termoplásticos</b> .....	33
<b>Termoestables</b> .....	34
<i>Estructura y propiedades de algunos polímeros comerciales</i> .....	34
<b>Polietileno (PE)</b> .....	34
<b>Polipropileno (PP)</b> .....	35
<b>Nylon</b> .....	35
<b>Poliuretanos</b> .....	36
<i>PVC</i> .....	36
<b>Estructura y características</b> .....	37
<b>Obtención del PVC</b> .....	38
<b>Propiedades físicas y químicas</b> .....	38
<i>Estructura del polímero</i> .....	39
<b>Estereoquímica de los polímeros</b> .....	39
<b>Cristalinidad del polímero</b> .....	40
<i>Definición de parámetros de masa molar</i> .....	40
<b>Peso molecular promedio en número</b> .....	40
<b>Peso molecular promedio en peso</b> .....	41
<i>Balance de materia</i> .....	41
<i>Estequiometría</i> .....	42
<i>Rendimiento</i> .....	42
<b>Real</b> .....	42

Teórico .....	42
<i>Análisis de retrosíntesis</i> .....	42
Capítulo III: Metodología .....	44
Revisión el estado del arte de los reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero en cuestión.....	44
<i>Creación y elaboración de la lista de bibliografía referente a polímero</i> .....	45
<i>Contraste y comparación de la información con artículos científicos</i> .....	45
<i>Contraste de la información obtenida con lo reportado por las industrias nacionales e internacionales</i> .....	46
Elaboración de tablas de síntesis estequiométrica para cada tipo de metodología encontrada .....	47
<i>Elaboración de una tabla formato</i> .....	48
<i>Contraste de la información reportada en las fuentes bibliográficas</i> .....	50
<i>Elaboración de tablas con respecto a la estequiometría de los artículos y procesos industriales</i> .....	51
Ejecución de los balances de masa estructurando la estequiometría propia de cada reacción .....	52
<i>Búsqueda de las reacciones de polimerización del PVC</i> .....	54
<i>Elaboración de diagramas de la polimerización del compuesto PVC</i> .....	56
<i>Reporte de las condiciones específicas del compuesto PVC</i> .....	58
<i>Ejecución de cálculos del balance global del proceso</i> .....	59
<i>Búsqueda de todas las variables faltantes para completar el proceso</i> .....	60
<i>Mejora de rendimientos del polímero con respecto a las variables reportadas ....</i>	60

Explicación y detalle de los rendimientos reportados en la literatura .....	61
<i>Búsqueda de los rendimientos teóricos del polímero en condiciones industriales y de laboratorio .....</i>	<i>62</i>
<i>Reporte de las condiciones de los rendimientos en cuanto a las nuevas técnicas o tecnologías utilizadas en la industria .....</i>	<i>62</i>
Ejecutar un análisis de retro síntesis online con propósito de comparación.....	64
<i>Reporte del producto final.....</i>	<i>65</i>
<i>Búsqueda de una plataforma con el fin de realizar una retro síntesis del producto final.....</i>	<i>66</i>
<i>Interpretar las reacciones químicas y los mecanismos de reacción mediante la ingeniería inversa .....</i>	<i>66</i>
Reporte mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización .....	67
Capítulo IV: Resultados y discusión .....	70
Revisión el estado del arte de los reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero en cuestión.....	70
<i>Creación y elaboración de la lista de bibliografía referente al polímero.....</i>	<i>70</i>
<i>Contraste y comparación de la información con artículos científicos.....</i>	<i>72</i>
<i>Contraste de la información obtenida con lo reportado por las industrias nacionales e internacionales .....</i>	<i>73</i>
Elaboración de tablas de síntesis estequiométrica para cada tipo de metodología encontrada .....	76
<i>Elaboración de una tabla de formato.....</i>	<i>76</i>
<i>Contraste de la información reportada en las fuentes bibliográficas .....</i>	<i>76</i>

<i>Elaboración de tablas con respecto a la estequiometría de los artículos y procesos industriales .....</i>	<i>77</i>
<b>Ejecución de los balances de masa estructurando la estequiometría propia de la reacción.....</b>	<b>80</b>
<i>Búsqueda de la reacción química de elaboración de la polimerización para el polímero PVC .....</i>	<i>80</i>
<i>Elaboración de un diagrama de acuerdo con el proceso de polimerización del compuesto PVC .....</i>	<i>81</i>
<i>Reporte de las condiciones específicas del compuesto PVC .....</i>	<i>83</i>
<i>Elaboración de los cálculos del balance global del proceso .....</i>	<i>84</i>
<i>Búsqueda de todas las variables faltantes para completar el proceso.....</i>	<i>88</i>
<i>Mejora de rendimientos del polímero con respecto a las variables reportadas y propuestas .....</i>	<i>89</i>
<b>Explicación y detalle de los rendimientos reportados en la literatura .....</b>	<b>90</b>
<i>Reporte de las condiciones de los rendimientos en cuanto a las nuevas técnicas o tecnologías utilizadas en la industria .....</i>	<i>90</i>
<i>Análisis de la conversión y flujos de entrada para el agente de transferencia de Cadena (IBA). .....</i>	<i>92</i>
<b>Ejecutar un análisis de retro síntesis online con propósito de comparación.....</b>	<b>95</b>
<i>Reporte del producto final.....</i>	<i>95</i>
<i>Búsqueda de una plataforma con el fin de realizar una retro síntesis del producto final.....</i>	<i>96</i>
<i>Interpretar las reacciones químicas y los mecanismos de reacción mediante la ingeniería inversa .....</i>	<i>96</i>

<b>Reporte mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización .....</b>	<b>97</b>
<b>Capítulo V: Conclusiones y Recomendaciones.....</b>	<b>100</b>
<b>Conclusiones.....</b>	<b>100</b>
<b>Recomendaciones .....</b>	<b>102</b>
<b>Bibliografía .....</b>	<b>103</b>
<b>Anexos .....</b>	<b>107</b>

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1</b> <i>Población, PIB y consumo de plásticos en India</i> .....	27
<b>Figura 2</b> <i>Patrón de consumo en India en 2000</i> .....	28
<b>Figura 3</b> <i>Estructura molecular del PE</i> .....	34
<b>Figura 4</b> <i>Estructura molecular del PP</i> .....	35
<b>Figura 5</b> <i>Estructura molecular del Nylon</i> .....	35
<b>Figura 6</b> <i>Estructura molecular del Poliuretano</i> .....	36
<b>Figura 7</b> <i>Estructura molecular del PVC</i> .....	37
<b>Figura 8</b> <i>Disposición de los carbonos quirales</i> .....	40
<b>Figura 9</b> <i>Esquema de búsqueda de información bibliográfica</i> .....	44
<b>Figura 10</b> <i>Indexaciones utilizadas en la búsqueda de bibliografía</i> .....	45
<b>Figura 11</b> <i>Esquema de reporte de datos</i> .....	46
<b>Figura 12</b> <i>Crecimiento del PIB del sector plásticos y caucho</i> .....	47
<b>Figura 13</b> <i>Tipos de polimerización</i> .....	48
<b>Figura 14</b> <i>Tipos de disolventes</i> .....	50
<b>Figura 15</b> <i>Comparación de escalas de temperatura</i> .....	51
<b>Figura 16</b> <i>Estequiometría del polímero</i> .....	52
<b>Figura 17</b> <i>Principio de conservación de la masa para un sistema de flujo estacionario</i> .....	53
<b>Figura 18</b> <i>Esquema de un sistema de balance de materia con reacción</i> .....	54
<b>Figura 19</b> <i>Plataforma virtual Reaxys</i> .....	55
<b>Figura 20</b> <i>Plataforma virtual SciFinder</i> .....	55
<b>Figura 21</b> <i>Esquema del proceso de búsqueda de reacciones de obtención de PVC</i> .....	56

<b>Figura 22</b> <i>Corrientes y especificaciones, con sus respectivos diagramas de bloques</i> .....	57
<b>Figura 23</b> <i>Esquema de etapas de una reacción de polimerización</i> .....	57
<b>Figura 24</b> <i>Esquema del proceso de reporte de condiciones del PVC</i> .....	58
<b>Figura 25</b> <i>Ficha Técnica del PVC rígido</i> .....	58
<b>Figura 26</b> <i>Diagrama para la ejecución de un balance de masa</i> .....	59
<b>Figura 27</b> <i>Esquema de variables necesarias para el proceso</i> .....	60
<b>Figura 28</b> <i>Esquema de pasos para la mejora de un proceso</i> .....	61
<b>Figura 29</b> <i>Diagrama de resumen de rendimientos teóricos y reales</i> .....	61
<b>Figura 30</b> <i>Esquema de revisión de las nuevas tecnologías usadas en la industria</i> .....	63
<b>Figura 31</b> <i>Esquema de elaboración de una tabla de comparación entre los rendimientos</i> ..	63
<b>Figura 32</b> <i>Esquema de como ejecutar un análisis de retrosíntesis</i> .....	64
<b>Figura 33</b> <i>Esquema de reporte de producto final</i> .....	65
<b>Figura 34</b> <i>Esquema de páginas web de retrosíntesis</i> .....	66
<b>Figura 35</b> <i>Esquema de interpretación de reacciones y sus mecanismos</i> .....	67
<b>Figura 36</b> <i>Reporte final de datos</i> .....	69
<b>Figura 37</b> <i>Google Patents</i> .....	70
<b>Figura 38</b> <i>Perfil general de la reacción de polimerización en suspensión</i> .....	73
<b>Figura 39</b> <i>Demanda mundial del PVC</i> .....	74
<b>Figura 40</b> <i>PVC por proceso de suspensión, diagrama de flujo de bloques</i> .....	81
<b>Figura 41</b> <i>Diagrama de bloque del proceso de PVC simplificado</i> .....	82
<b>Figura 42</b> <i>Diagrama de proceso de obtención del PVC</i> .....	83
<b>Figura 43</b> <i>Reactor de polimerización</i> .....	85

<b>Figura 44</b> <i>Desgasado</i> .....	86
<b>Figura 45</b> <i>Stripping</i> .....	87
<b>Figura 46</b> <i>Centrifugado</i> .....	87
<b>Figura 47</b> <i>Secado</i> .....	88
<b>Figura 48</b> <i>Mezclador continuo de mezcla en seco</i> .....	91
<b>Figura 49</b> <i>Sistema de mezcla Gelimat, un proceso de mezcla de ultra alta velocidad</i> .....	91
<b>Figura 50</b> <i>Gráfica de residuos 4 en 1</i> .....	93
<b>Figura 51</b> <i>Gráfica de efectos principales</i> .....	94
<b>Figura 53</b> <i>Target de la molécula de PVC</i> .....	96
<b>Figura 54</b> <i>Retrosíntesis de PVC realizada en IBM RXN</i> .....	96

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1</b> <i>Valor Agregado Bruto del sector de fabricación de plásticos</i> .....	29
<b>Tabla 2</b> <i>Propiedades del PVC</i> .....	39
<b>Tabla 3</b> <i>Ejemplo de tabla formato</i> .....	49
<b>Tabla 4</b> <i>Referencias bibliográficas de polímeros (artículos científicos)</i> .....	71
<b>Tabla 5</b> <i>Referencias bibliográficas de polímeros (libros)</i> .....	71
<b>Tabla 6</b> <i>Patentes relacionadas con PVC</i> .....	72
<b>Tabla 7</b> <i>Comparación de métodos de polimerización por radicales de cloruro de vinilo</i> .....	72
<b>Tabla 8</b> <i>Número de productores de PVC</i> .....	75
<b>Tabla 9</b> <i>Participación en los procesos de producción de PVC (%)</i> .....	75
<b>Tabla 10</b> <i>Comparación de la información de diferentes patentes</i> .....	77
<b>Tabla 11</b> <i>Propiedades físicas del PVC modificado resistente a los rayos UV</i> .....	78
<b>Tabla 12</b> <i>Comparación de TCE con aldehídos como agentes de transferencia de cadena</i> .79	
<b>Tabla 13</b> <i>Receta de polimerización en suspensión del CVM</i> .....	80
<b>Tabla 14</b> <i>Condiciones de trabajo de la polimerización por suspensión de PVC</i> .....	84
<b>Tabla 15</b> <i>Receta para preparar resina de PVC modificado</i> .....	89
<b>Tabla 16</b> <i>Rendimientos globales para cada conversión de CVM a PVC</i> .....	90
<b>Tabla 17</b> <i>Tratamientos con variación de flujos y conversiones</i> .....	92
<b>Tabla 18</b> <i>Análisis de varianza</i> .....	94
<b>Tabla 19</b> <i>Comparación por parejas de Tukey: conversión</i> .....	95
<b>Tabla 20</b> <i>Comparación por parejas de Tukey: Flujo de entrada</i> .....	95
<b>Tabla 21</b> <i>Datos del reactor obtenidos del balance de masa</i> .....	97

<b>Tabla 22</b> <i>Datos del desgasado obtenidos del balance de masa</i> .....	97
<b>Tabla 23</b> <i>Datos del Stripping obtenidos del balance de masa</i> .....	98
<b>Tabla 24</b> <i>Datos del centrifugado obtenidos del balance de masa</i> .....	98
<b>Tabla 25</b> <i>Datos del secado obtenidos del balance de masa</i> .....	98
<b>Tabla 26</b> <i>Flujos másicos para la obtención del PVC con una conversión del 95%</i> .....	99

## Resumen

En la presente investigación se realizó una revisión bibliográfica, con enfoque en las reacciones de polimerización para el polímero comercial cloruro de polivinilo (PVC), debido a que estas reacciones suelen tener rendimientos diferentes, por diferentes rutas de fabricación, y distintas patentes, determinando que el método de polimerización más utilizado es el de suspensión. Con esta indagación se determinó la variación de los reactivos utilizados en las reacciones químicas para producción del PVC. Con este trabajo se mejoró los rendimientos y conversiones globales de dicho polímero, mediante el cambio de la conversión en el reactor, es decir, se modificó la misma de tal forma que se logró incrementar el flujo de salida del proceso en toneladas/año. Para esto se añadió un agente de crecimiento de cadena como es el isobutiraldehído (IBA), lo cual fue sustentando por una patente mencionada en el desarrollo de la investigación. Como resultado, se obtuvo los datos requeridos del PVC, en donde se organizó, esquematizó y tabuló la información obtenida, así como también se realizó un resumen de las condiciones de reacción, agentes de diferentes tipos y datos estequiométricos, así como también se elaboró en base a fuentes bibliográficas los diagramas de flujo de bloques para la ejecución de los balances de masa. Finalmente se realizó una retrosíntesis del producto PVC para contrastar los reactivos obtenidos en este proceso con los investigados previamente.

*Palabras clave:* estequiometría, polímero, investigación, rendimiento, PVC.

### Abstract

In the present investigation, a bibliographic review was carried out, focusing on the polymerization reactions for the commercial polymer polyvinyl chloride (PVC), because these reactions usually have different yields, due to different manufacturing routes and different patents. With this investigation, the variation of the reagents used in the chemical reactions for the production of PVC will be extended. With this work, the yields and global conversions of said polymer were improved, by change the conversion in the reactor, that is, the same form was modified in such a way that the output flow of the process in tons/year was increased. For this, a chain growth agent such as isobutyraldehyde (IBA) was added, which was supported by a patent mentioned in the development of the research. As a result, the required PVC data were obtained, where the information obtained was organized, outlined and tabulated, as well as a summary of the reaction conditions, agents of different types and stoichiometric data, as well as carried out in Based on bibliographical sources, the block flow diagrams for the execution of the mass balances. Finally, a retrosynthesis of the PVC product was carried out to contrast the reagents obtained in this process with those previously investigated.

*Keywords:* stoichiometry, polymer, research, yield, PVC.

## Capítulo I

### Generalidades

#### Antecedentes

Los polímeros han sido a lo largo de la historia un descubrimiento relativamente nuevo en comparación con otros materiales. El uso de forma empírica durante décadas ha sido solo mediante materia natural, lo cual, tiene sus orígenes con el uso del caucho natural y otros materiales a lo largo de algunos siglos en el pasado, las primeras civilizaciones sudamericanas, como los aztecas, usaban caucho natural (*Hevea brasiliensis*) para fabricar artículos elásticos y telas impermeabilizantes (Carraher Jr., 2003).

En los años veinte, el galardonado Hermann Staudinger con un premio Nobel, proporcionó una base para comprender de manera sistemática este tipo de materiales. Desde ese entonces en las décadas transcurridas, la ciencia que involucra a los polímeros se desarrolla constantemente, siendo cada vez más exigente tanto técnicamente como industrialmente volviéndose un área extremadamente importante (Koltzenburg et al., 2017).

El uso de los polímeros a lo largo de las décadas no ha tenido un gran cambio. Hace más de un siglo se ha utilizado varias fibras naturales y sintéticas en la elaboración de prendas de ropa y muebles de hogar, tal como se lo sigue haciendo hasta la actualidad. Las partes que constituyen un automóvil son dos tercios del caucho utilizado en Estados Unidos, como se lo utilizaba medio siglo atrás. De manera notoria la aplicación y diversidad de materiales plásticos ha aumentado significativamente, es así que en 1980 al 2000 incrementó las aplicaciones nuevas y ampliadas de estos materiales, como por ejemplo, el PVC se utilizó para revestimientos, tuberías y conductos en el área de la construcción siendo esta aplicación una revolución dentro de esta industria (Rodríguez et al., 2015).

El PVC es un polímero plástico utilizado ampliamente por lo que a su vez ha provocado contaminación ambiental de diversas formas, siendo China el mayor productor y consumidor de este material como consecuencia de rápida urbanización y crecimiento

económico. La cantidad total de consumo de PVC en todo tipo de productos aumentó drásticamente de 0,4 Mt (0,4 kg per cápita) en 1980 a 14,5 Mt (10,7 kg per cápita) en 2015, con una cantidad acumulada de 173,7 Mt. El rápido aumento del consumo de PVC en China apresuró de forma significativa la acumulación de residuos de PVC, alcanzando 66,3 Mt, lo que representa el 38,2% del uso total de PVC desde 1980 hasta 2015 (Liu et al., 2020).

### **Planteamiento del problema**

En el transcurso del desarrollo de la investigación se plantea como objetivo determinar como varían las proporciones de los reactivos dentro de los balances de masa de varias patentes y métodos de obtención del PVC, así como también realizar una investigación bibliográfica de las condiciones que presentan las reacciones para así establecer mejoras en las mismas, con la finalidad de obtener mejores rendimientos y conversiones globales para mejores resultados y menos variados, debido a que cada vez existe mayor población a nivel mundial, por ende hay más consumo de este material generalmente en construcciones, factor que requiere obtener mayor cantidad de producto en la industria, mediante el mejoramiento del proceso, como la adición de agentes que ayuden en la polimerización del monómero, mejoramiento de equipos o adición de nuevas tecnologías.

Debido a la competencia dentro del mercado y demanda por parte del consumidor de un mejor producto, es necesario la revisión de las rutas para la fabricación del PVC y la comparación de los procesos para llevar a cabo la polimerización a partir de los reactivos necesarios y con sus respectivos balances de masa y proporciones estequiométricas, mediante fuentes de investigación confiables, todo esto con el fin de aportar a la investigación y mejorar la situación actual con una mejora de condiciones físicas y químicas dentro del proceso para la obtención del polímero en cuestión.

## **Justificación e importancia**

Se va a obtener datos mediante la consulta bibliográfica y revisión del estado del arte de reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos que se utilizan en la síntesis del PVC, mediante la comparación de lo investigado teóricamente con la información de industrias nacionales e internacionales inscrita en patentes, así como también la metodología y procesos utilizados por cada industria para la síntesis estequiométrica mediante tablas de la información obtenida.

En la presente investigación se realizará balances de masas con todas las variables posibles para obtener un rendimiento óptimo al momento de obtener el producto en función de su alimentación y así generar un producto de mayor valor agregado y con mejores características físicas y químicas para su posterior consumo. Mediante diagramas del proceso de polimerización, se observan todas las condiciones requeridas del PVC y mediante la ejecución de cálculos se pretende comparar los rendimientos del PVC tanto con variables encontradas y propuestas. Al final mediante un análisis de retrosíntesis, mediante softwares libres en la web se logrará obtener el producto final e interpretar los mecanismos dentro de las reacciones químicas dentro del proceso.

Toda la información recolectada a lo largo de la investigación se reporta en gráficos, esquemas, diagramas y tablas con el fin de condensar todos los datos obtenidos de balances de masa, reacciones químicas, rendimientos y proporciones estequiométricas.

Dentro de la industria petroquímica existe una gran oferta de diversos materiales poliméricos, por lo que es importante realizar estos estudios e investigación dentro de esta área con el fin de aportar al desarrollo de esta dentro del país, por medio de la mejora de los rendimientos del proceso de obtención de PVC, con la adición de aditivos que ayudan en el aumento de la conversión del monómero cloruro de vinilo, lo mencionado puede tener un aporte significativo tanto en el ámbito académico como en la misma industria Petroquímica.

## **Objetivos**

### ***Objetivo General***

Comparar las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial PVC.

### ***Objetivos específicos***

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

## **Hipótesis**

Mediante el cálculo de las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del PVC, se logrará tener una mejora en la producción, en el planteamiento de las reacciones en un futuro, por tanto, se modificará la adición de aditivos los cuales ayuden al aumento de la conversión dentro del reactor y así obtener mayor producción del polímero.

## **Variables dependientes e independientes**

### ***Variables independientes***

Rendimientos empleados en la síntesis del polímero en cuestión.

***Variables dependientes***

Polímero comercial PVC.

## Capítulo II

### Fundamentación teórica

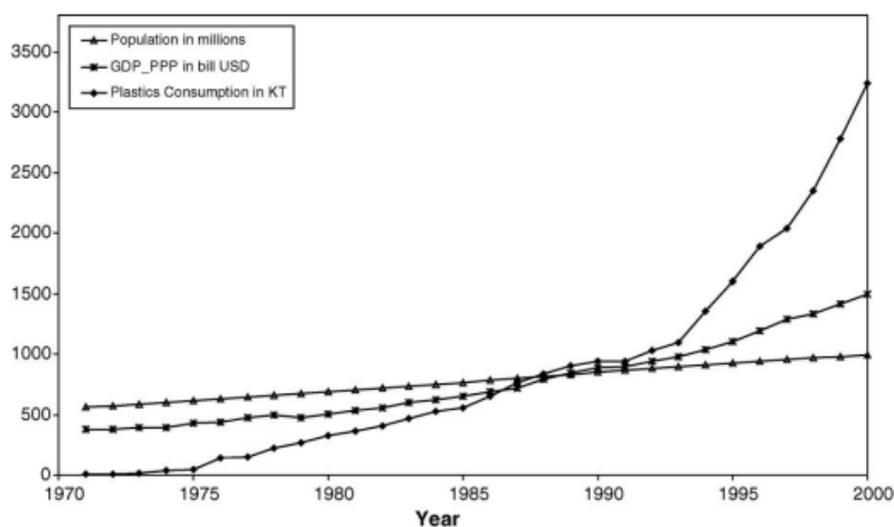
#### Polímeros

##### *Producto Interno Bruto PIB, economía y consumo de polímeros*

En India, el consumo de plásticos creció exponencialmente en la década de 1990. Durante la década de los años 2000, el consumo total de plásticos creció dos veces más rápido (12% anual) que la tasa del (PIB) basado en paridades de poder adquisitivo (6% anual) como se observa en la Figura 1. La tasa de crecimiento actual en el consumo de polímeros en la India (16% anual) es claramente mayor que la de China (10% anual) y muchos otros países asiáticos clave (Mutha et al., 2006).

#### Figura 1

##### *Población, PIB y consumo de plásticos en India*



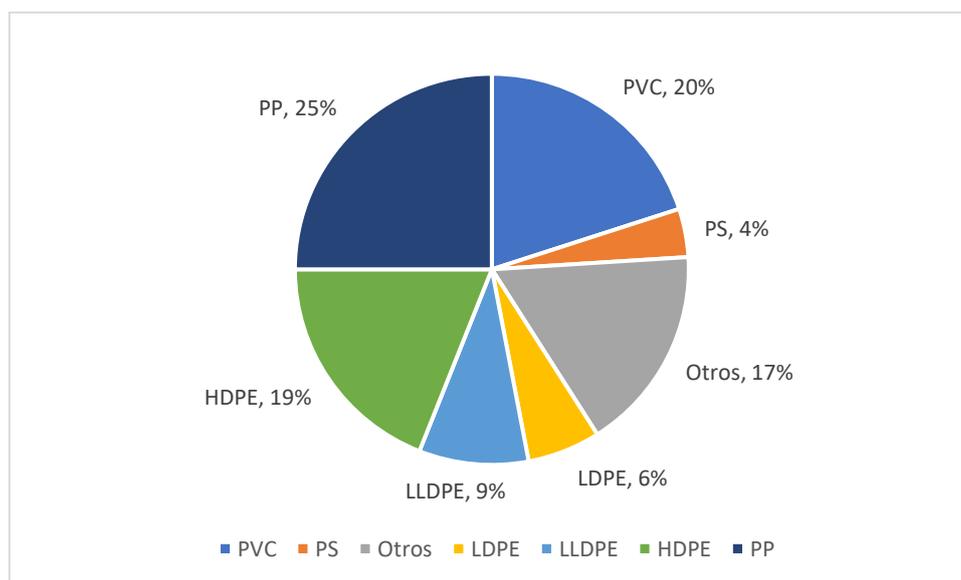
*Nota.* Tomado de (Plastics materials flow analysis for India).

El PE, el PP y el PVC disfrutaban de altas posiciones en el mercado indio gracias a su bajo costo, alta durabilidad y fácil maleabilidad (Figura 2). Las poliolefinas representan alrededor del 60 % del consumo total de plásticos, seguidas por el PVC y el poliestireno (PS). Juntos, los plásticos básicos (PE, PP, PVC y PS) representaron el 83 % del consumo

total de plásticos en la India en 2000/2001, y las proporciones de los polímeros individuales son comparables a las de Europa Occidental. Entre 1990 y 2000, el LLDPE fue el material con la mayor tasa de crecimiento (20 % anual), seguido del PP (16 % anual), HDPE (14 % anual), PVC (12 % anual), PS (10 % anual) y LDPE (3% anual) (Mutha et al., 2006).

## Figura 2

*Patrón de consumo en India en 2000*



*Nota.* Tomado de (Plastics materials flow analysis for India).

**Demanda de PVC.** La demanda de PVC en la Comunidad de Estados Independientes (CEI) está dominada por Rusia, que representa el 86%. Rusia solía ser un exportador neto de PVC, pero ahora se espera que el crecimiento del PIB supere el 5% hasta 2012. Las importaciones de PVC están creciendo y alcanzaron las 300.000 toneladas métricas en 2008. No se prevén aumentos significativos de la capacidad de PVC hasta 2010 (Eskilsen, 2008).

**PIB de plásticos en Ecuador.** En Ecuador el sector de obtención de productos como caucho y plásticos de mayor consumo mostró una cifra que evidenció alrededor de \$307,59 MM en el año 2020 (Tabla 1), lo que es equivalente a una contribución sobre el PIB

del 0,47%. A su vez, este valor fue un 6,2% inferior en comparación a la cifra reflejada en el 2019 (Corporación Financiera Nacional, 2021).

**Tabla 1**

*Valor Agregado Bruto del sector de fabricación de plásticos*

<b>Año</b>	<b>Fabricación de productos del caucho y plástico (MM \$ de 2007)</b>	<b>PIB Total (MM \$ de 2007)</b>	<b>Participación en el PIB</b>
2016	335,46	69314	0,48%
2017	333,08	70956	0,47%
2018	332,49	71871	0,46%
2019 p	327,75	71909	0,46%
2020 p	307,59	65535	0,47%

*Nota.* Tomado de (Ficha sectorial. Fabricación de productos de plástico, por Corporación Financiera Nacional).

### **Conceptos básicos**

La definición de polímeros viene dada por el prefijo “poli” proveniente de la palabra griega “muchos” y “meros” que significa “partes”, mientras que el prefijo “mono” representa el significado de “único”, por lo tanto, los polímeros se definen como moléculas formadas a partir de una gran cantidad de monómeros unidos por enlaces covalentes en su mayoría de veces con el fin de formar macromoléculas (Koltzenburg et al., 2017).

El número de unidades repetitivas se denomina  $n$  (también llamado grado de polimerización), no existe un número límite de estas unidades para asociar con la definición de polímero, pero si se tiene en cuenta que  $n$  debe ser lo suficientemente grande para cumplir con las propiedades fisicoquímicas de la molécula final para que no sea alterada con la adición de otras unidades repetitivas. Si las moléculas están compuestas por pocos monómeros se dice que es un oligómero, término proveniente de “oligo” que significa “pocos” (Koltzenburg et al., 2017).

Un ejemplo es el polímero comercial en estudio PVC el cual se obtiene a partir del monómero cloruro de vinilo ( $C_2H_3Cl$ ), unidad repetitiva del polímero la cual corresponde al monómero del cual se fabricó el polímero policloruro de vinilo  $[C_2H_3Cl]_n$  (Nicholson, 2017).

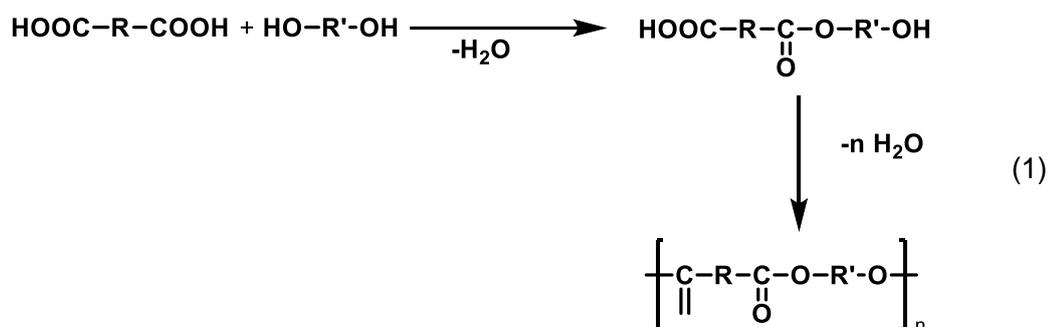
### **Generalidades**

**Reacciones de polimerización.** Para la síntesis de polímeros existen dos posibilidades básicas dependiendo de cómo las cadenas poliméricas se van formando en el transcurso de la reacción de los monómeros, existiendo el crecimiento escalonado que puede aplicarse a los compuestos orgánicos con dos grupos funcionales que forman un enlace químico como los ésteres, amidas o uretanos con sus polímeros resultantes poliésteres, poliamidas o poliuretanos y por otra parte se tiene las reacciones en cadena en las cuales añade un grupo funcional, el cual se pueda polimerizar, especialmente un doble enlace o mediante la apertura de un anillo, la cadena crece debido a la presencia de una partícula activa con alta energía e inestable (Koltzenburg et al., 2017).

**Nomenclatura de los polímeros.** La nomenclatura de los polímeros se basa en un principio básico que corresponde a la designación del monómero o unidad repetitiva antecedida por el prefijo “poli” como por ejemplo, el poliestireno que se obtiene a partir del estireno (Koltzenburg et al., 2017).

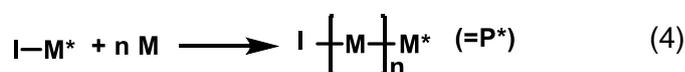
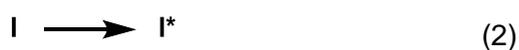
### **Métodos para la Síntesis de Polímeros**

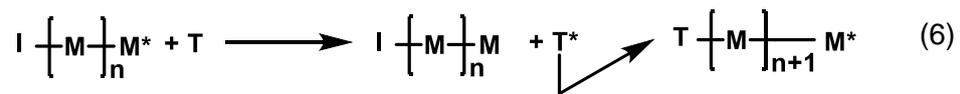
**Polimerización por condensación.** O también llamada policondensación, son reacciones por etapas o pasos entre componentes bifuncionales o polifuncionales, es decir, con dos o más grupos funcionales en su estructura, con eliminación de moléculas pequeñas como agua, alcohol o hidrógeno y formación de sustancias macromoleculares, como se observa en la Ecuación 1 (Braun et al., 2013).



**Polimerización por adición.** También llamada polimerizaciones de crecimiento de cadena, se caracterizan por la aparición de especies activadas (iniciadores)/centros activos. Se agrega una molécula de monómero tras otra de manera que en el extremo de cada nueva especie formada por un paso de adición de monómero se crea un centro activo. Dichas especies se forman a partir de compuestos que crean radicales a través de la escisión de enlaces homolíticos, de complejos metálicos o de moléculas iónicas en los pasos iniciales (2) y (3) (Braun et al., 2013).

A partir de los pasos iniciales, el crecimiento de la cadena puede comenzar como una reacción en cascada o propagación (4) tras múltiples repeticiones de la adición del monómero y el restablecimiento del centro activo al final del nuevo producto respectivo. Finalmente, el crecimiento de una macromolécula individual se detiene en un paso de terminación o de transferencia (5) o (6), en donde S es un agente de terminación de cadena (tapón) y T es un agente de transferencia de cadena (disolvente, monómero, iniciador, polímero, regulador, entre otros) (Braun et al., 2013).





Dentro de la polimerización por adición o crecimiento de cadena se tiene diferentes técnicas para la obtención de polímeros, estos procesos para la fabricación de macromoléculas se pueden dividir en tres categorías diferentes como son: procesos en masa (fases líquida, sólida y gaseosa), procesos en solución (solución acuosa y orgánica) y por último procesos en dispersión (suspensión y emulsión) (Braun et al., 2013).

## Clasificación de los polímeros

### *Por su origen*

**Naturales.** Los polímeros naturales se refieren a los que provienen directamente de la naturaleza como plantas o animales, especialmente incluyen carbohidratos y proteínas que existen en los seres vivos mencionados principalmente estos proporcionan soporte estructural, un ejemplo es la extracción de celulosa o lignina de la madera o procesos biológicos como la síntesis bacteriana o la fermentación (Olatunji, 2016).

**Sintéticos.** Polímeros los cuales son elaborados por el hombre, los cuales tienen grandes ventajas sobre los polímeros naturales porque se pueden adaptar de tal manera que produzcan una amplia gama de posibilidades con diferentes tipos de productos pero estos polímeros están disponibles con una amplia gama de enlaces químicos que pueden afectar en gran medida la degradación y otras propiedades (Bhatia, 2016).

### *Por el tipo de enlace químico*

**Fibras.** Las fibras son polímeros lineales con fuerzas moleculares fuertes resultado de la presencia de grupos funcionales polares y se caracteriza por su alta simetría entre sus unidades repetitivas debido a la estructura regular de las moléculas (Ebewele, 2000).

Las fibras provenientes de los polímeros naturales son una parte importante en la industria, por ejemplo, la celulosa regenerada (rayón) y el acetato de celulosa se introdujeron alrededor de los años noventa, siendo el nailon el único polímero totalmente sintético producido mayormente antes de la Segunda Guerra Mundial. En los años sesenta, el uso de algodón y lana bajó, debido a la producción masiva de poliéster y nailon como alternativa a estos productos por sus características y bajo costo de producción (Rodriguez et al., 2015).

**Elastómeros.** Los elastómeros están constituidos por moléculas con estructuras irregulares, con fuerzas intermoleculares débiles y presentan cadenas poliméricas demasiado flexibles. Los segmentos de las cadenas pueden sufrir una gran movilidad, pero de toda la cadena en sí, presenta movilidad restringida, debido a la poca presencia de entrecruzamiento de los enlaces en la estructura (Ebewele, 2000).

**Plásticos.** Los plásticos suelen ser polímeros con capacidad de ser moldeados mediante la aplicación de calor y presión adecuados y acorde al tipo de plástico, por lo que tiene una estructura media entre fibras y elastómeros, por lo que estos materiales suelen tener una cristalinidad y resistencia moderada (Rodriguez et al., 2015).

A pesar de que existen posibles diferencias en la estructura química, la diferencia y su límite entre fibras y plásticos a veces esta no puede ser muy clara. Los polímeros como el polipropileno y las poliamidas se pueden usar como fibras y como plásticos mediante una elección adecuada de las condiciones de procesamiento (Ebewele, 2000).

### ***Por las propiedades fisicoquímicas***

**Termoplásticos.** Son aquellos que se moldean bajo cierta presión y calor, la forma obtenida se mantiene cuando se enfría. Las características mecánicas de estos tipos de polímeros se pueden mejorar aumentando su masa molar y evitando o eliminando restos de baja masa molar o mediante la cristalización de estos, cuando las partes no polares a lo largo de la cadena molecular se reemplazan por partes polares, por ejemplo, si un grupo del

tipo C–C- (alquilo) se reemplaza por un grupo CO–NH (amida), la rigidez, la resistencia y la viscosidad del polímero aumentan (Koltzenburg et al., 2017).

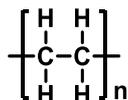
**Termoestables.** Estos polímeros tienden a moldearse bajo presión y calor por una sola vez, debido a la formación de entrecruzamientos lo que provoca endurecimiento permanente. Estos compuestos requieren un proceso de obtención más extenso y suelen ser menos resistentes a los impactos que los termoplásticos. Estos materiales son ligeros, resistentes y de alto rendimiento y son utilizados con más frecuencia en la industria aeroespacial con el fin de reemplazar los componentes metálicos, se utilizan también en generadores de energía eólica y equipos deportivos y están ingresando al mercado automotriz debido a que su precio continúa elevado (Koltzenburg et al., 2017).

### ***Estructura y propiedades de algunos polímeros comerciales***

#### **Polietileno (PE)**

#### **Figura 3**

*Estructura molecular del PE*



*Nota.* Tomado de (The chemistry of polymers).

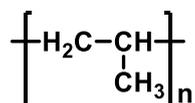
Polímero de forma sólida cerosa, bastante comercializado a nivel mundial por su versatilidad, fácil obtención, buena resistencia química y bajo costo de producción, siendo el más simple de todos estructuralmente (Figura 3). Existen cuatro rutas de obtención, con productos de características ligeramente diferentes los cuales son: proceso de alta presión, proceso de Ziegler, proceso Philips y proceso de *Standard Oil* (Indiana). Debido a su baja masa molar sufre el llamado "agrietamiento por estrés ambiental", es decir, tiende a romperse por exposición a la humedad y luz solar. Sus usos son generalmente tuberías,

empaquetamiento, componentes para plantas químicas, envases y artículos para aislamiento eléctrico (Nicholson, 2017).

### Polipropileno (PP)

#### Figura 4

*Estructura molecular del PP*



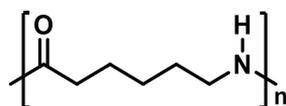
*Nota.* Tomado de (The chemistry of polymers).

La primera vez que se sintetizó el PP (Figura 4), se descubrió que existen dos formas de este material, el uno parecido a PE, pero con mayor dureza y rigidez, el cual era isotáctico es decir, con una estereoquímica regular en cada átomo de carbono alterno y el otro resultó ser amorfo y bastante débil, el cual es atáctico, es decir, con una distribución aleatoria de diferentes arreglos estereoquímicos en cada átomo de carbono que contiene un radical metilo. El PP comercial es isotáctico y similar al PE (Nicholson, 2017).

### Nylon

#### Figura 5

*Estructura molecular del Nylon*



*Nota.* Tomado de (The chemistry of polymers).

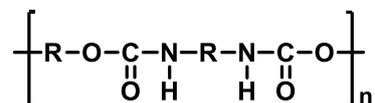
Polímero sintético de tipo poliamida (Figura 5), son obtenidos por condensación o también llamados escalonados, por lo que son diferentes a los demás polímeros comerciales. Se distinguen entre sí por un sistema de numeración basado en el número de átomos de carbono en los reactivos para su obtención. Los diversos tipos de nylon tienen propiedades físicas similares. Estos incluyen alta resistencia al impacto, tenacidad,

flexibilidad y resistencia a la abrasión. Además, por su estructura lineal, forman excelentes fibras. El más comercializado es el nylon 6,6 (Nicholson, 2017).

### **Poliuretanos**

#### **Figura 6**

*Estructura molecular del Poliuretano*



*Nota.* Tomado de (The chemistry of polymers).

Los poliuretanos son polímeros termoestables formados a partir de diisocianatos y compuestos polifuncionales que contienen numerosos grupos hidroxilo. Por lo general, los reactivos son oligómeros los cuales son especies de baja masa molar relativa. Los oligómeros típicos para la preparación de poliuretanos son poliésteres y poliéteres. Éstos se preparan normalmente para incluir una pequeña proporción de compuestos hidroxilo trifuncionales monoméricos, como trimetilolpropano, en el esqueleto, de modo que contengan hidroxilos colgantes que actúan como sitios de reticulación. Se utilizan comercialmente varios diisocianatos diferentes (Nicholson, 2017).

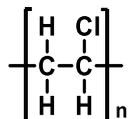
### **PVC**

El PVC es un material versátil utilizado en la industria de la construcción. Siempre existe una controversia sobre si existen o no riesgos para la salud asociados con su uso, porque hay una serie de aditivos tóxicos involucrados y, por lo tanto, queda la cuestión de si los riesgos para la salud del uso de PVC superan sus variados usos. El PVC, o utilizando el nombre IUPAC 'cloroetano' o 'poli (cloroetanodiilo)', con 57% en masa de cloro, es un material termoplástico utilizado en infraestructura (Akovali, 2012).

## Estructura y características

### Figura 7

*Estructura molecular del PVC*



*Nota.* Tomado de (The chemistry of polymers).

Este polímero es uno de los tres más utilizado en la actualidad, los otros son el PE y el PP. El PVC (Figura 7) no compuesto es incoloro y rígido, y posee poca estabilidad frente al calor y la luz, es el menos estable de los polímeros comerciales de alto tonelaje. La exposición a la luz o al calor a temperaturas muy por debajo del punto de reblandecimiento provoca una serie de cambios indeseables como la decoloración que es evidente, se vuelve amarillo y pasa progresivamente de un ámbar oscuro a negro al aumentar el tiempo de exposición, al mismo tiempo, el material se vuelve más frágil, esto suele ser causados por la deshidrocloración del polímero (pérdida de HCl) a lo largo de la cadena principal. Tal pérdida es autocatalítica y puede continuar hasta que solo queden rastros de cloro en la macromolécula. Tiene el efecto de reducir la flexibilidad molecular y permitir la absorción de luz en la parte visible del espectro electromagnético (Nicholson, 2017).

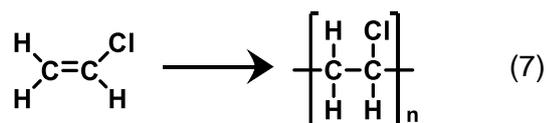
Para fabricar artículos de PVC y luego usarlos en lugares donde estarán expuestos a la luz solar, es necesario agregar estabilizadores en la etapa de composición. Se ha utilizado una gran cantidad de productos químicos como estabilizadores para el PVC, incluidos jabones de plomo, lauratos de bario y cadmio, y compuestos orgánicos de estaño como el diisooctiltioglicolato de estaño (Nicholson, 2017).

El PVC es un polímero termoplástico, el cual también es resistente a la acción del agua, ácidos, bases, aceites minerales, hidrocarburos, oxígeno y ozono. Se disuelve en

ésteres, cetonas, derivados orgánicos clorados, tetrahidrofurano, piridina y disulfuro de carbono (Kochnev et al., 2016).

**Obtención del PVC.** El PVC se produce a partir de la polimerización por radicales libres del cloruro de vinilo (Ecuación 7), La velocidad de polimerización del cloruro de vinilo en presencia del iniciador de peróxido aumenta gradualmente hasta aproximadamente el 40% del monómero reaccionado y luego permanece estable hasta aproximadamente el 80% de conversión. Al final de la reacción la velocidad disminuye, lo que se debe a la falta de solubilidad del polímero formado en el monómero (Kochnev et al., 2016).

La polimerización adicional tiene lugar en los nódulos con cabeza de polímero. El crecimiento de las macromoléculas del PVC finaliza mediante la transferencia de la reacción en cadena a las moléculas de monómero o polímero. A esta última reacción le sigue la ramificación de la cadena. El peso molecular medio del PVC depende del método de polimerización utilizado y disminuye al aumentar la concentración del iniciador y la temperatura de reacción como se observa en la reacción 1 (Kochnev et al., 2016).



**Propiedades físicas y químicas.** Para caracterizar las propiedades del PVC, se introdujo una constante llamada número  $K$  (Ecuación 8), también conocida como número de Fikentscher. Esta constante depende del tamaño y la forma de las macromoléculas y es proporcional al peso molecular. La relación entre la viscosidad relativa y la constante  $K$  viene dada por la ecuación 8, en donde " $\eta_0$ " es la viscosidad de la ciclohexanona a una temperatura de 25 °C; " $\eta$ " es la viscosidad de 1 g de solución de PVC en 100 cm<sup>3</sup> de ciclohexanona a 25 °C; " $K$ " es la constante de Fikentscher y " $c$ " es la concentración (Kochnev et al., 2016).

$$\log \frac{\eta}{\eta_0} = \frac{75K^2}{1 + 1.5c} + K \quad (8)$$

El número K se deriva de las mediciones de viscosidad. Se lee de nomogramas especiales o de tablas para la viscosidad medida. Por lo tanto, no es necesario resolver la ecuación citada anteriormente para obtener el valor de K. Algunas veces, los valores de K están en el rango de 50 a 80. Corresponde al peso molecular medio entre 40.000 y 129.000, en la Tabla 2 se tiene algunas propiedades del PVC (Kochnev et al., 2016).

**Tabla 2**

*Propiedades del PVC*

<b>Propiedades físicas del PVC</b>	
Densidad [g/cm <sup>3</sup> ]	1,38
Fuerza de explosión [MPa]	45-60
Alargamiento a la rotura por tracción [%]	8-20
Temperatura de transición vítrea [°C]	80
Temperatura de ablandamiento [°C]	145-170

*Nota.* Esta tabla muestra los valores medios que caracterizan las propiedades del PVC.

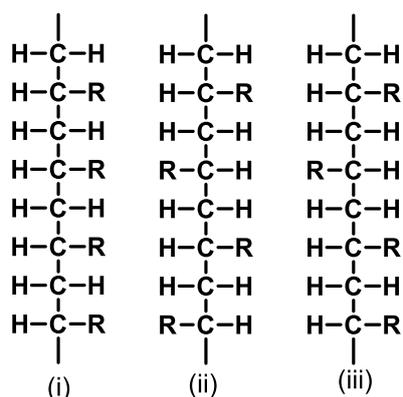
Tomado de (Compositional Analysis of Polymers: An Engineering Approach).

### ***Estructura del polímero***

**Estereoquímica de los polímeros.** Los monómeros de vinilo monosustituidos forman polímeros que contienen una serie de átomos de carbono asimétricos a lo largo de la molécula. La disposición precisa de estos carbonos asimétricos da lugar a tres posibles disposiciones estereoquímicas diferentes. En primer lugar, donde todos los átomos de carbono asimétricos adoptan configuraciones idénticas, el polímero resultante se describe como isotáctico. En segundo lugar, cuando hay una disposición alterna regular de átomos de carbono asimétricos, el polímero se describe como sindiotáctico. Por último, donde no hay regularidad en la disposición de los átomos de carbono asimétricos, la estructura resultante se conoce como atáctica como se muestra en la figura 8 (Nicholson, 2017).

**Figura 8**

*Disposición de los carbonos quirales*



*Nota.* El gráfico representa la estereoquímica de los polímeros con sus carbonos quirales.

Tomado de (The chemistry of polymers).

**Cristalinidad del polímero.** La idea fundamental crucial aquí es que la cristalinidad de un material depende de si los segmentos de la cadena en la estructura cristalina pueden organizarse de manera ordenada, mientras que la temperatura de transición vítrea-líquido depende más de qué tan móviles sean las moléculas en la estructura cristalina de las cadenas poliméricas (Koltzenburg et al., 2017).

#### ***Definición de parámetros de masa molar***

**Peso molecular promedio en número.** Por lo general, el número o cantidad  $n_i$  de las moléculas que tienen una masa molar  $M_i$  se multiplica por esta masa molar  $M_i$ , y la suma de estos productos dividida por el número total de moléculas o la cantidad total de la muestra. Alternativamente, se puede usar el producto de la masa molar  $M_i$  y la fracción molar ( $x_i = n_i / \sum n_i$ ). El "promedio" calculado a partir de esta fórmula se denomina "peso molecular promedio en peso"  $M_n$  definido por la ecuación 9, donde  $m_i$  es la masa total de todas las moléculas con una masa molar  $M_i$ , Esto viene dado por el producto del número de moléculas con una masa molar  $M_i$ ,  $n_i$ , y su masa molar individual  $M_i$  (Koltzenburg et al., 2017).

$$M_n = \frac{\sum_i n_i \cdot M_i}{\sum_i n_i} = \frac{\sum_i m_i}{\sum_i n_i} = \sum_i \left( \frac{n_i}{\sum_i n_i} \cdot M_i \right) = \sum_i x_i \cdot M_i \quad (9)$$

**Peso molecular promedio en peso.** De manera análoga a la fórmula para la masa molar promedio en número, esta denominada masa molar promedio en peso  $M_w$  se puede calcular de la siguiente manera. La masa de todas las moléculas con la masa molar  $M_i$  viene dada por el producto de  $n_i$  y su masa individual  $M_i$ . Por lo tanto, se utiliza su masa  $m_i$  o la fracción molar con la fracción de masa  $w_i$  (Ecuación 10), donde  $w_i$  es la fracción de masa de las moléculas con masa molar  $M_i$ , es decir, su masa dividida por la masa total de la muestra. Como la masa de las moléculas en la muestra viene dada por la suma de los productos de la cantidad de sustancia y la masa molar se puede utilizar la Ecuación 11 (Koltzenburg et al., 2017).

$$M_w = \frac{\sum_i m_i \cdot M_i}{\sum_i m_i} = \sum_i \left( \frac{m_i}{\sum_i m_i} \cdot M_i \right) = \sum_i w_i \cdot M_i \quad (10)$$

$$M_w = \frac{\sum_i n_i \cdot M_i^3}{\sum_i n_i \cdot M_i^2} = \frac{\sum_i w_i \cdot M_i^2}{\sum_i w_i \cdot M_i} \quad (11)$$

$$M_n = \frac{m_2}{n_r/\xi} \quad (12)$$

### **Balance de materia**

El balance de materia obedece a la ley de la conservación de la materia, la cual postula que la materia no se crea ni se destruye solo se transforma como, por ejemplo, entrada total de masa = salida total de masa. El balance de una cantidad que se conserva (masa total, masa de una especie determinada) en un sistema (una sola unidad de proceso, un conjunto de unidades o un proceso completo) se puede escribir de manera general a través de la ecuación general de balance de masa (Felder & Rousseau, 2003).

### **Estequiometría**

La estequiometría es una relación cuantitativa que conforma las cantidades de ya sea en moles o en masa de especies químicas que reaccionan. La estequiometría en una reacción relaciona el número de moles de reactantes y productos representados por una ecuación química balanceada mediante los coeficientes o números estequiométricos representados por  $\nu_a$  siendo  $a$ , el reactivo o producto (Skoog et al., 2015).

### **Rendimiento**

El rendimiento de una reacción es una especificación del desempeño del sistema para un reactor o reacción, en donde se tiene la relación de los moles del reactivo convertido al producto deseado el cual se divide entre los moles del reactivo alimentado al reactor (Murphy, 2007).

**Real.** El rendimiento real es la cantidad de producto generado durante una reacción química real, este siempre va a ser menor que el rendimiento teórico como consecuencia de las pérdidas dadas durante las etapas de purificación y aislamiento, también otro factor es que se obtienen subproductos en menor cantidad (Daub & Seese, 2005).

**Teórico.** El rendimiento teórico es la cantidad de producto esperada o ideal, si todo el reactivo limitante es consumido y forma productos sin ninguna sobra o trazas de productos, lo que supondría que no hay pérdida de ningún producto durante las etapas de purificación y aislamiento. La relación entre los rendimientos se tiene en la Ecuación 13 (Daub & Seese, 2005).

$$\% \text{ de rendimiento} = \frac{\text{rendimiento real}}{\text{rendimiento teórico}} \times 100 \quad (13)$$

### **Análisis de retrosíntesis**

El método de análisis de retrosíntesis (RTSA) es un enfoque computacional basado en datos diseñado para identificar rutas de síntesis potenciales para una estructura de interés, o lo que es una estructura de hipótesis. El método utiliza como entrada un conjunto

de datos de ejemplos de reacciones para preparar reglas de análisis de retro síntesis utilizadas para descomponer estructuras de hipótesis en bloques de construcción virtuales. Al igual que con todos los métodos basados en datos, el rendimiento de RTSA depende en gran medida de la calidad de los datos de entrada suministrados (Watson et al., 2019).

Las necesidades de investigación para la previsibilidad de la síntesis química, la planificación de rutas sintéticas y el mejorar las reacciones han motivado el desarrollo de varias herramientas computacionales en los últimos años. Tradicionalmente, estas herramientas implementan métodos basados en la búsqueda de reacciones precedentes o soluciones de análisis de retro síntesis (Watson et al., 2019).

## Capítulo III

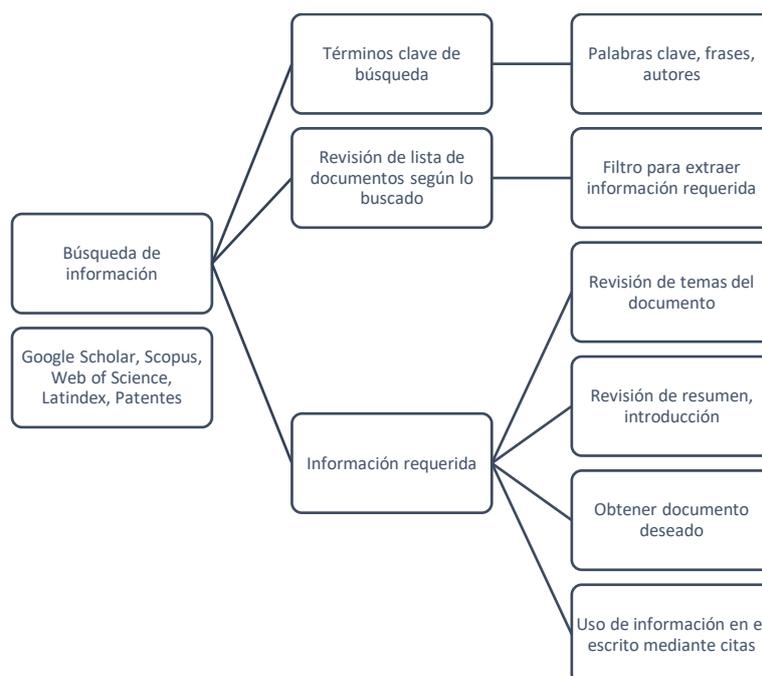
### Metodología

#### Revisión el estado del arte de los reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero en cuestión.

Para efectuar el desarrollo de la investigación, se realizó una revisión bibliográfica con el fin de obtener fuentes de información relevantes a partir de artículos científicos, libros, manuales, revistas, publicaciones, así como bibliografía confiable de páginas certificadas disponibles en la web relacionados al tema de estudio. La búsqueda y compilación de información se logró por medio de trabajos investigativos y proyectos disponibles en el repositorio de la biblioteca virtual de la UFA - ESPE y motores de búsqueda como Google Académico y Patentes, *Web of Science*, Scopus y Latindex para contrastar información referente a la producción del PVC en la industria (Figura 9).

#### Figura 9

*Esquema de búsqueda de información bibliográfica*



### **Creación y elaboración de la lista de bibliografía referente a polímero**

La realización de la lista de contenido bibliográfico se estructuró con respecto a información importante sobre el polímero PVC, donde constan datos relacionados a los reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero PVC. Para lograr este propósito, se emplearon referencias tomadas de libros, manuales, artículos y revistas científicas. Para la selección de las revistas se consideró que las mismas presenten indexaciones (Universidad de Oviedo, 2022), algunos ejemplos se pueden visualizar en la figura 10.

#### **Figura 10**

*Indexaciones utilizadas en la búsqueda de bibliografía*



*Nota.* Tomado de (Instituto de Investigación e Innovación Educativa INIE - Indexación).

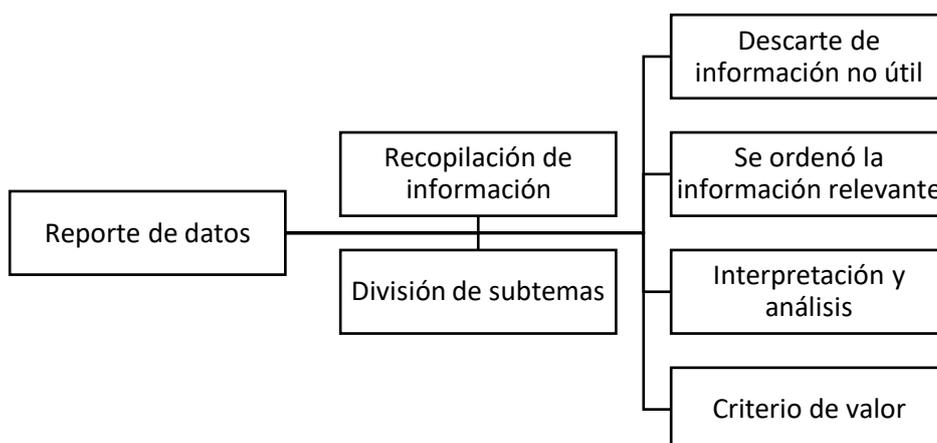
### **Contraste y comparación de la información con artículos científicos**

Para efectuar la comparación de información se realizó el reporte de datos recabados de distintas fuentes bibliográficas. Los datos encontrados se abordaron y organizaron estratégicamente para permitir el contraste de aspectos entre los diferentes métodos industriales de obtención del PVC.

El reporte de datos (Figura 11) inicia con la recopilación de la información seleccionada de las fuentes bibliográficas que se lleva a cabo por la división de subtemas generales hasta llegar a un detalle minucioso de la información. Como primera actividad, se realizó el descarte de información no útil con respecto a los catalizadores agentes coadyuvantes y aditivos, seguidamente se ordenó la información relevante para la posterior interpretación y análisis de los contenidos planteados en el desarrollo del trabajo. Finalmente se emitió un criterio de valor con el fin de estipular y determinar las condiciones más adecuadas para el mejoramiento de las conversiones y rendimientos tanto reales como teóricos de las reacciones químicas, mismo que cuenta con una sustentación documentada.

### Figura 11

*Esquema de reporte de datos*



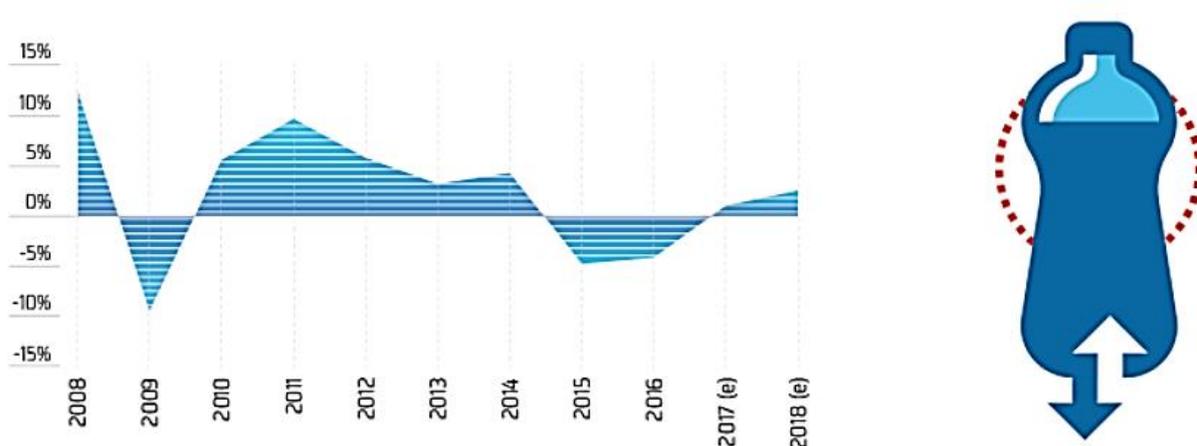
### ***Contraste de la información obtenida con lo reportado por las industrias nacionales e internacionales***

Para lograr contrastar la situación actual de Ecuador con respecto al uso y fabricación del polímero PVC en comparación con el ámbito internacional, se investigaron datos estadísticos referentes a la industria química productora de plásticos en el mercado global, esta indagación se enfocó en encontrar referencias de gigantes industrializados

como Alemania, Estados Unidos de América, Inglaterra, Holanda, China y Francia, donde se encuentran las empresas de mayor volumen de producción de polímeros. Para esta comparación se consideró el PIB (Figura 12) y la tecnología disponible en cuanto a procesos de producción industrializada de polímeros de cada país (Ekos, 2018).

### Figura 12

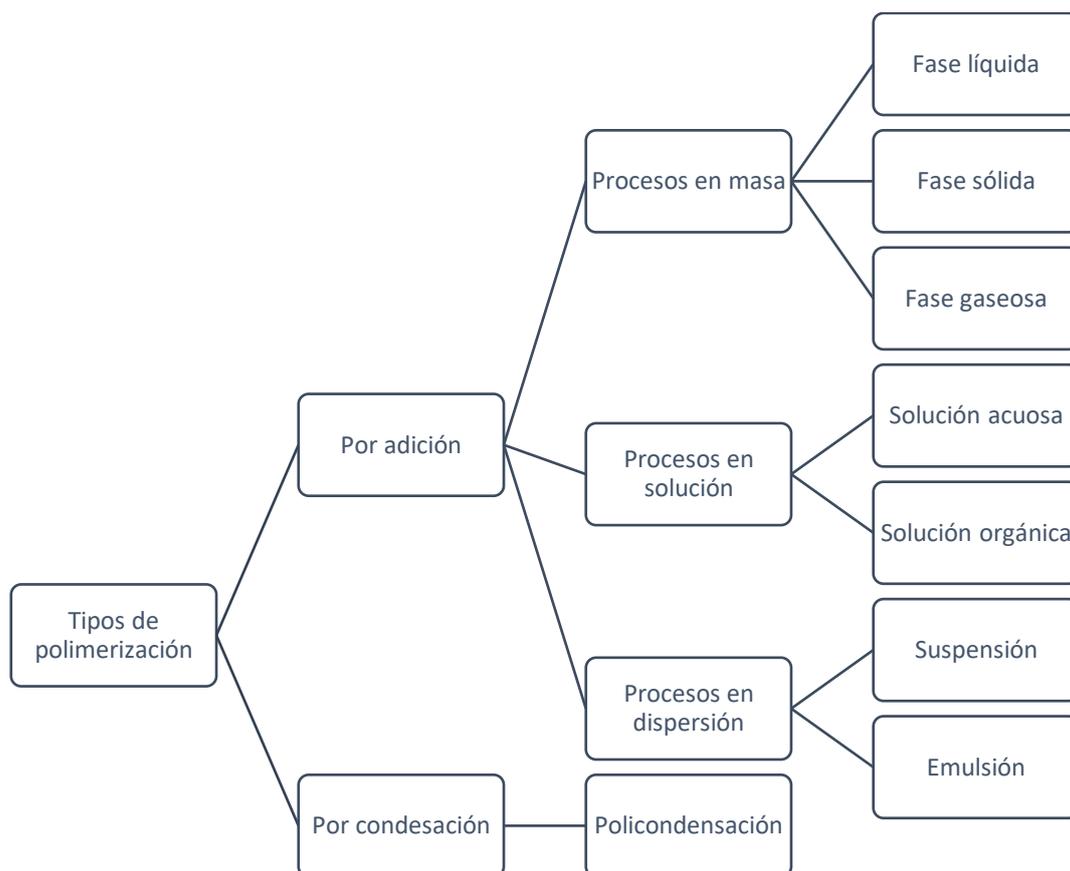
*Crecimiento del PIB del sector plásticos y caucho*



*Nota.* Tomado de (Producción de plásticos: Un pilar para el encadenamiento productivo).

### Elaboración de tablas de síntesis estequiométrica para cada tipo de metodología encontrada

Se desarrollo una tabla tomando datos de distintas fuentes bibliográficas como patentes, artículos científicos, libros de ejemplos de acuerdo con la metodología de manera generalizada y se añadió parámetros específicos de información relevante de acuerdo al polímero comercial PVC, para lo cual se agrupo y determino las variaciones existentes significativas entre los métodos aplicados en cada ejemplo y se obtuvo un resultado de calidad y favorable en tiempos y costos de producción como se observa en la tabla 3. Se podrá modificar las tablas de acuerdo con el reporte de cada patente. En la Figura 13 se tiene los distintos tipos de polimerización en un esquema resumido por (Braun et al., 2013).

**Figura 13***Tipos de polimerización*

*Nota.* Tomado de (Polymer Synthesis: Theory and Practice).

### ***Elaboración de una tabla formato***

Para el reporte de todos los datos en cuanto a estequiometría, propiedades físicas y químicas, se tomó como referencia la Tabla 3, la cual se encuentra en la mayoría de las patentes que se reportan en las bases de datos.

Tabla 3

Ejemplo de tabla formato

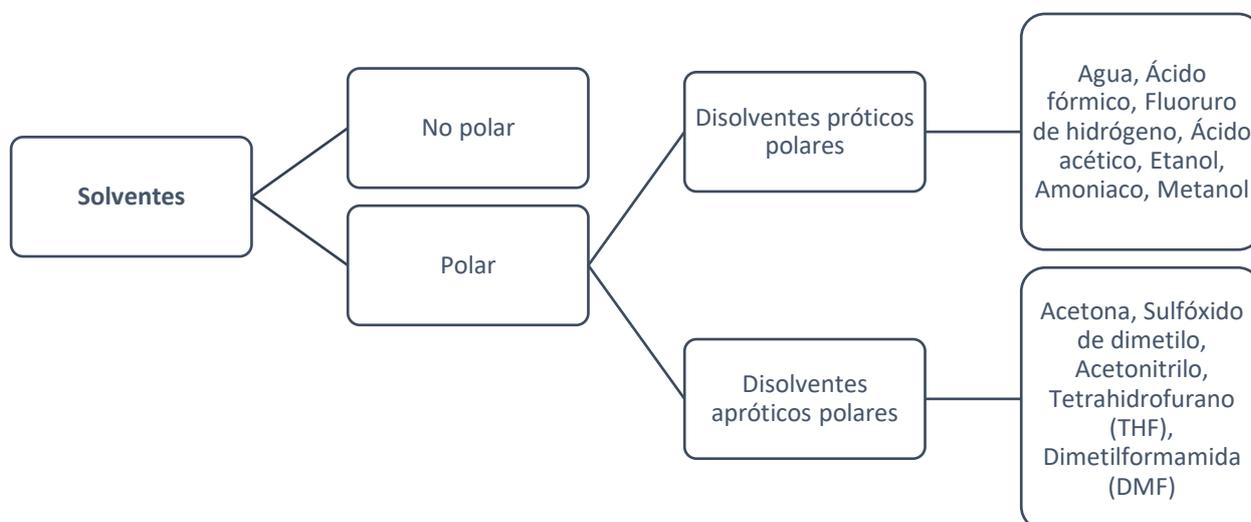
	<i>Ejemplo 1</i>	<i>Ejemplo 2</i>	<i>Ejemplo 3</i>	<i>Ejemplo 4</i>	<i>Ejemplo 5</i>
<i>Tipo de</i>	-	-	-	-	-
<i>Catalizador</i>					
<i>Solvente</i>	-	-	-	-	-
<i>Relación molar</i>	-	-	-	-	-
<i>Temperatura</i>	-	-	-	-	-
<i>Tiempo</i>	-	-	-	-	-
<i>Densidad</i>	-	-	-	-	-
<i>Estequiometría</i>	-	-	-	-	-
<i>Cantidad de moles</i>	-	-	-	-	-
<i>Reactivo limitante</i>	-	-	-	-	-
<i>Reactivo en exceso</i>	-	-	-	-	-
<i>Equipos</i>	-	-	-	-	-
<i>Condiciones</i>	-	-	-	-	-
<i>Conversiones</i>	-	-	-	-	-
<i>Rendimientos</i>	-	-	-	-	-

### **Contraste de la información reportada en las fuentes bibliográficas**

De acuerdo con los parámetros especificados en la tabla se comparó con la información reportada mediante bibliografía según tenemos: el tipo de catalizador en condiciones tales que el catalizador utilizado fue un catalizador idóneo a la reacción, el disolvente se seleccionó según la solubilidad de los reactivos y la temperatura, la relación molar se determinó mediante la relación entre el número de moles de una sustancia con respecto al número de moles de otra sustancia. Según (PSIBERG, 2021) se tienen los disolventes más comunes mostrados en la Figura 14.

**Figura 14**

*Tipos de disolventes*

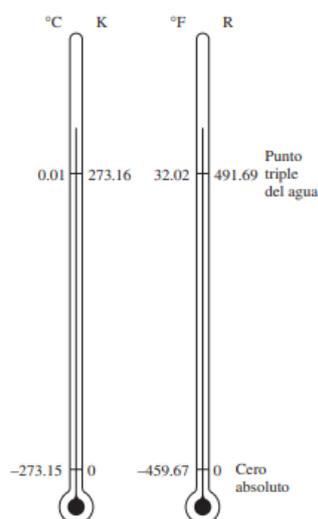


*Nota.* Tomado de (Protic vs Aprotic Solvents with Examples).

La temperatura se la representa según las condiciones expresadas por distintos autores, las escalas de temperatura principales son: Kelvin, Celcius, Fahrenheit y Rankine como se observa en la Figura 15, escalas representadas por (Cengel & Boles, 2014), para escalas de temperatura inusuales como: Réaumur, Delisle, Newton y Leiden se realizó la transformación a escalas de temperatura actuales, el tiempo en el que se desarrolló la reacción se mide en unidades de segundos, minutos u horas y la densidad se obtuvo mediante un picnómetro con la relación entre el volumen con respecto al peso.

## Figura 15

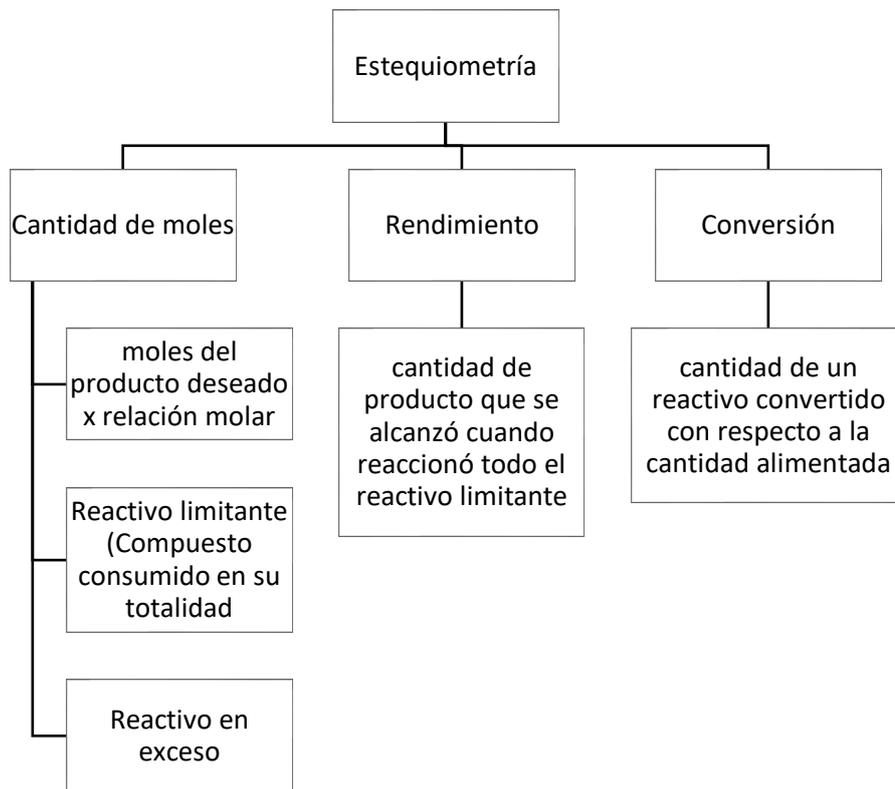
### Comparación de escalas de temperatura



*Nota.* Tomado de (Termodinámica).

### ***Elaboración de tablas con respecto a la estequiometría de los artículos y procesos industriales***

Con respecto a la estequiometría (Figura 16) de la reacción se obtuvo: la cantidad de moles que se determinó mediante la multiplicación de las moles del producto deseado entre la relación molar, el reactivo limitante se lo identificó como el compuesto que se consume en su totalidad y viceversa el reactivo en exceso y se calculó mediante la ecuación estequiométrica ajustada, el rendimiento de una reacción se calculó con la cantidad de producto que se alcanzó cuando reaccionó todo el reactivo limitante, la conversión se determinó mediante la cantidad de un reactivo convertido con respecto a la cantidad alimentada y durante la elaboración del polímero comercial PVC se utiliza varios equipos.

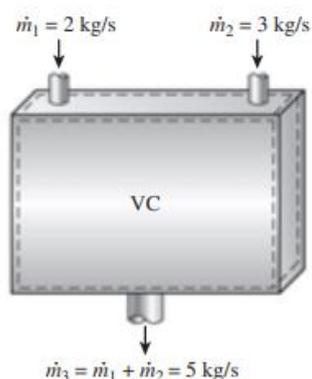
**Figura 16***Estequiometría del polímero*

### **Ejecución de los balances de masa estructurando la estequiometria propia de cada reacción**

Para la ejecución de los balances de masa se realizó una secuencia de pasos en donde se tomó en cuenta cada uno de los componentes que intervinieron en las diferentes etapas del proceso de polimerización; tomando en consideración el cumplimiento de la ley de conservación de la materia la cual postula que la materia no se crea ni se destruye solo se transforma como se observa en la Figura 17, se tiene un diagrama representado por (Cengel & Boles, 2014), en donde se tiene un sistema de flujo estacionario con dos entradas y una salida, este ejemplo puede simular la descripción de un mezclador.

**Figura 17**

*Principio de conservación de la masa para un sistema de flujo estacionario*



*Nota.* Tomado de (Termodinámica).

Para el desarrollo de los cálculos fue indispensable recolectar información de las cantidades o flujos, tanto de entrada como de salida que intervienen en el proceso, los cuales pueden estar expresados en cantidades de: masa, moles o en volumen. Así como también la estequiometría propia de cada reacción, las composiciones de las mezclas y condiciones de operación como: presión, temperatura, tipo de catalizador, entre otros. Para el caso en donde no se especificó la cantidad de reactivos que ingresa al proceso, se seleccionó una base de cálculo en unidades másicas o molares, sobre la cual se realizó todo en análisis del balance de masa para encontrar las diferentes variables del proceso.

La estequiometría de cada reacción se planteó mediante el análisis del número de moles o moléculas de los reactivos y productos que participaron en la reacción química de la obtención del polímero; teniendo en cuenta términos como reactivo limitante, reactivo en exceso, coeficiente y cociente estequiométricos.

Los procesos de polimerización se efectuaron bajo el análisis de balance de masa con reacción química (Felder & Rousseau, 2003), la igualdad que rige a este balance está dado por la Ecuación 14.

$$E - S + G - C = A \quad (14)$$

Donde:

E: Entrada del componente

S: Salida del componente

G: Generación

C: Consumo

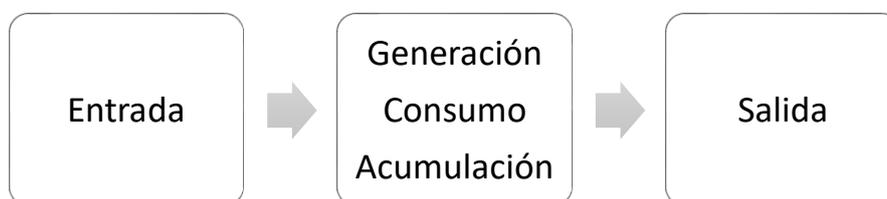
A: Acumulación

En la mayoría de los procesos donde intervienen reacciones químicas se producen productos no deseados, los términos rendimiento y selectividad describen el grado de predominancia de la reacción deseada sobre reacciones secundarias.

De una manera general se empleó el uso de una caja negra para minimizar la complejidad de los procesos, todo esto con el fin de obtener corrientes de entrada y salida más sencillas y poder realizar el análisis completo del balance de masa en el proceso de polimerización.

### Figura 18

*Esquema de un sistema de balance de materia con reacción*



### ***Búsqueda de las reacciones de polimerización del PVC***

La búsqueda y reporte de todas las reacciones químicas inmiscuidas en el proceso de polimerización del polímero PVC, se realizaron en función de las vías de fabricación por las diferentes patentes comerciales; además se emplearon referencias tomadas de libros, manuales, trabajos investigativos, informes, artículos y revistas científicas. Como material

de apoyo se recurrió al uso de plataformas virtuales como Reaxys (Figura 19) (Biblioteca de la Universidad de Murcia, 2022) y Scifinder (Figura 20) (Universidad de Córdoba, 2022), las cuales son herramientas que nos facilitaron la búsqueda de estructuras, compuestos, propiedades, sustancias y reacciones químicas de los diferentes procesos de polimerización.

### **Figura 19**

*Plataforma virtual Reaxys*

The logo for Reaxys, featuring the word "Reaxys" in a bold, orange, sans-serif font. A small registered trademark symbol (®) is located at the top right of the letter 's'.

*Nota.* Tomado de (Demostración de la base de datos de química Reaxys).

### **Figura 20**

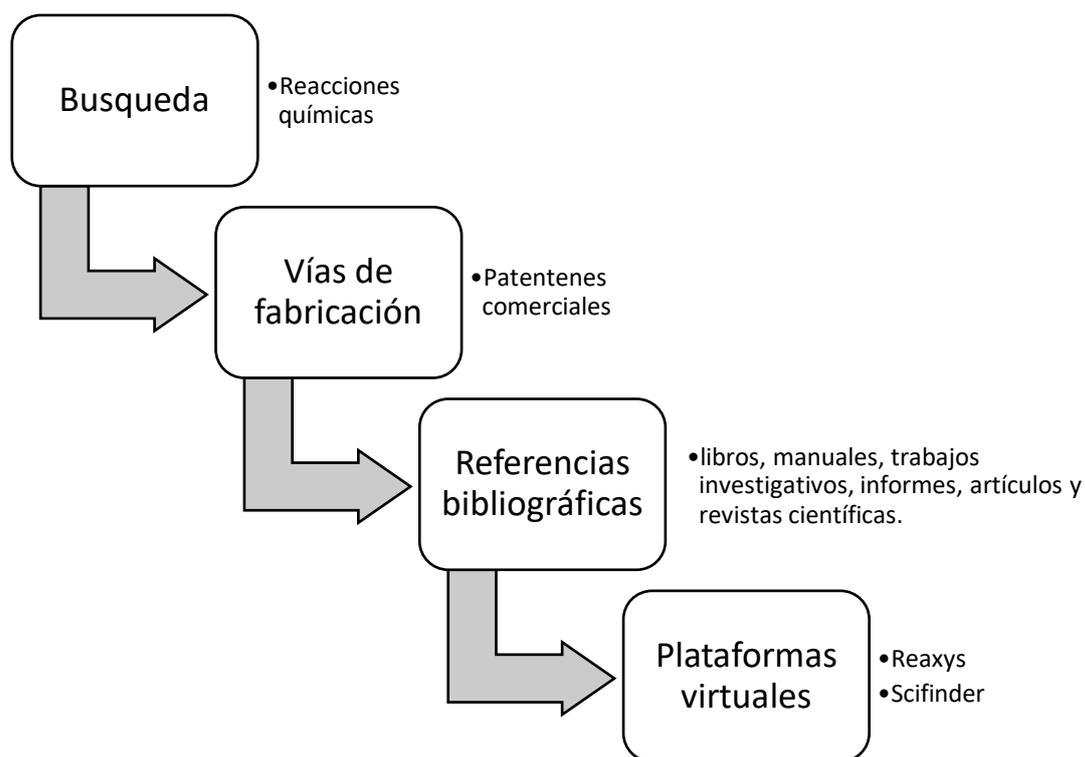
*Plataforma virtual SciFinder*



*Nota.* Tomado de (SciFinder-n).

**Figura 21**

*Esquema del proceso de búsqueda de reacciones de obtención de PVC*

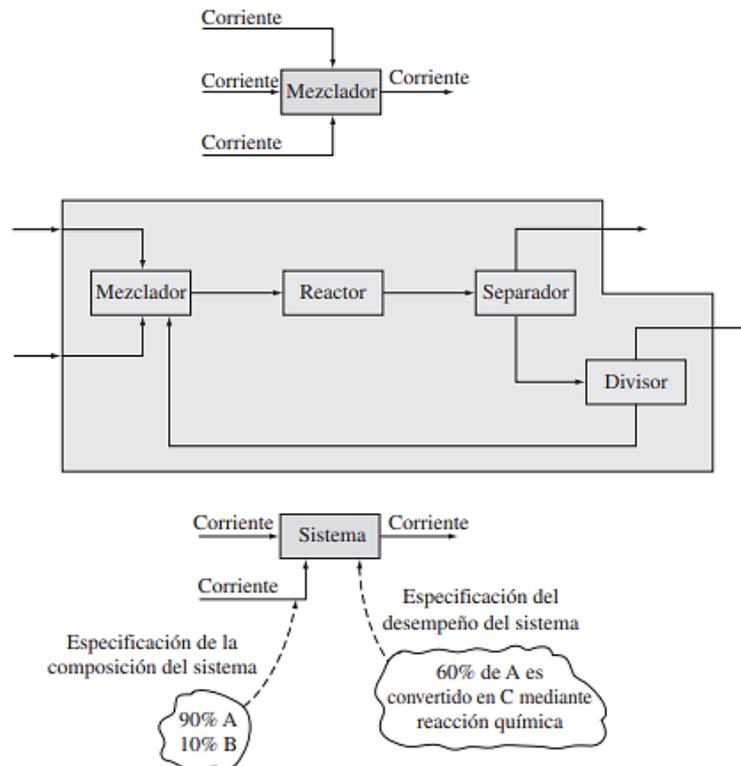


### ***Elaboración de diagramas de la polimerización del compuesto PVC***

De acuerdo a la investigación bibliográfica correspondiente a las vías de fabricación del polímero PVC por las diferentes patentes comerciales, se procedió a la elaboración de un diagrama completo del proceso; como por ejemplo el planteado por (Murphy, 2007) en la Figura 22; así como también se debe tener en cuenta las diversas transformaciones químicas que ocurren en las diferentes etapas a lo largo del proceso de polimerización (iniciación, propagación de la cadena y terminación), donde se detallaron las condiciones iniciales, finales y todas las variables correspondientes a cada proceso.

**Figura 22**

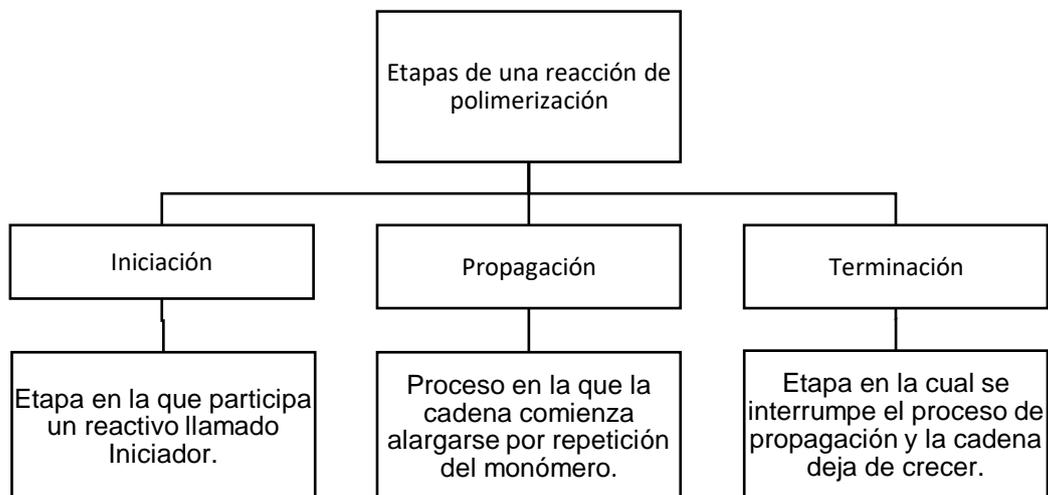
Corrientes y especificaciones, con sus respectivos diagramas de bloques



*Nota.* Tomado de (Introducción a los procesos químicos: principios, análisis y síntesis).

**Figura 23**

Esquema de etapas de una reacción de polimerización

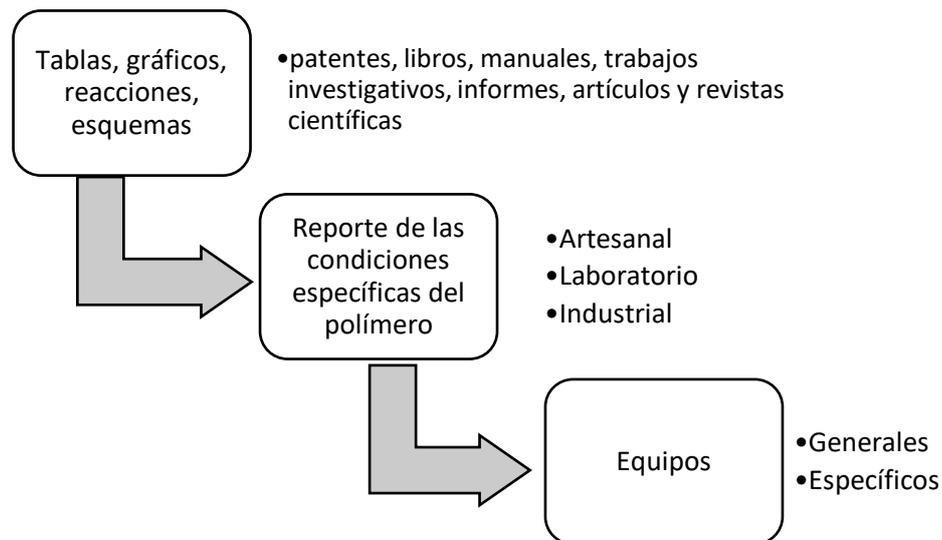


## Reporte de las condiciones específicas del compuesto PVC

A manera de tablas individuales, gráficos, reacciones, esquemas adaptados de patentes, libros, manuales, trabajos investigativos, informes, artículos y revistas científicas se hizo el reporte de las condiciones específicas del compuesto PVC, tomando en cuenta si el proceso se desarrolló de manera artesanal, en el laboratorio o de manera industrial, además se detallará si los equipos utilizados son de uso general o equipos específicos.

**Figura 24**

*Esquema del proceso de reporte de condiciones del PVC*



**Figura 25**

*Ficha Técnica del PVC rígido*

**INDELTEC**  
PIEZAS PLÁSTICAS DE INGENIERÍA

El Policloruro de Vinilo o PVC, es una combinación química entre carbono, hidrógeno y cloro. Es un material termoplástico, es decir, que bajo la acción del calor se reblandece, y puede así moldearse fácilmente; al enfriarse recupera la consistencia inicial y conserva la nueva forma.

Es ligero, inerte y completamente inocuo, resistente al fuego (no propaga la llama), impermeable, aislante (térmico, eléctrico y acústico), resistente a la intemperie, y es un material económico en cuanto a su relación calidad-precio, fácil de transformar y es reciclable.

**PROPIEDADES GENERALES**

- Rango de temperatura de trabajo -15°C +60°C.
- Resistencia, rigidez y dureza mecánicas elevadas.
- Buen aislante eléctrico. Elevada resistencia a sustancias químicas.

**POLICLORURO DE VINILO  
PVC RIGIDO**

**CNICA**

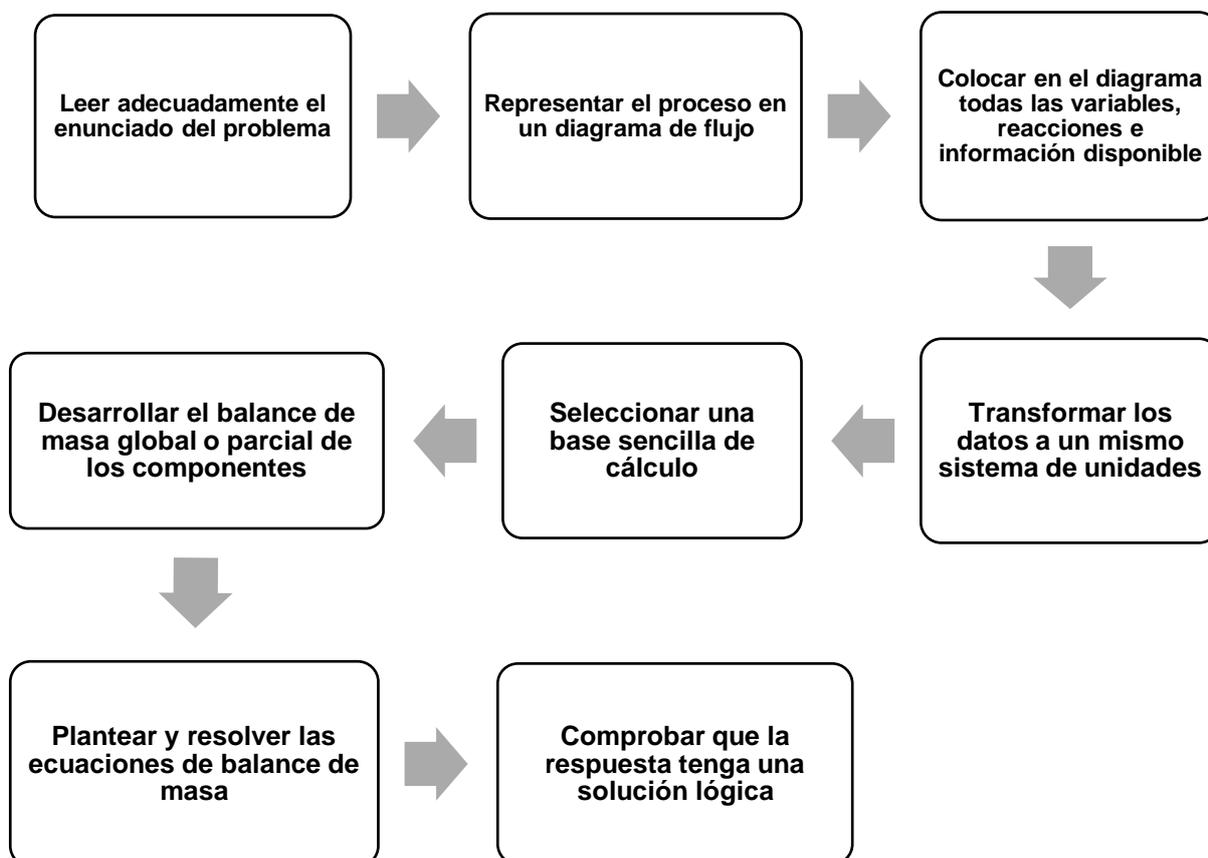
*Nota.* Tomado de (Policloruro de vinilo, PVC rígido).

### **Ejecución de cálculos del balance global del proceso**

Para la realización del cálculo del balance global se tomó en cuenta al proceso desde sus condiciones iniciales como: masa, flujo y estequiometría, para describir la transformación química que ocurren en las diversas etapas, durante la formación del polímero PVC, y describir todo aquello que no forme parte de este producto como subproductos y productos de purga. Se pueden realizar diferentes balances en un proceso como: balance de masa total, balance para cada reactivo, balance para cada producto y balance para cada átomo que interviene en la reacción, el proceso se muestra en la Figura 26, el cual se sigue para la ejecución del balance másico.

**Figura 26**

*Diagrama para la ejecución de un balance de masa*



### ***Búsqueda de todas las variables faltantes para completar el proceso***

En contraste a las variables reportadas en la fabricación del polímero por las diferentes patentes comerciales, se comparó las condiciones que no se encuentran presentes en los demás procesos y se elaboró una lista de variables o condiciones ampliamente usadas y otras poco comunes. Mediante una tabla se detalló las variables que utilizan los diferentes autores como: tipo de catalizador, relación molar, flujo de entrada y salida, estequiometría, conversiones, temperatura, presión, tiempo, rendimientos, entre otras. cuyas variables son independientes de cada proceso y pueden o no estar presentes en las diferentes fuentes de obtención de la información (Figura 27).

### **Figura 27**

*Esquema de variables necesarias para el proceso*

Tipo de catalizador	Relación molar	Flujo de entrada y salida
Estequiometría	Conversiones	Temperatura
Presión	Tiempo	Rendimientos

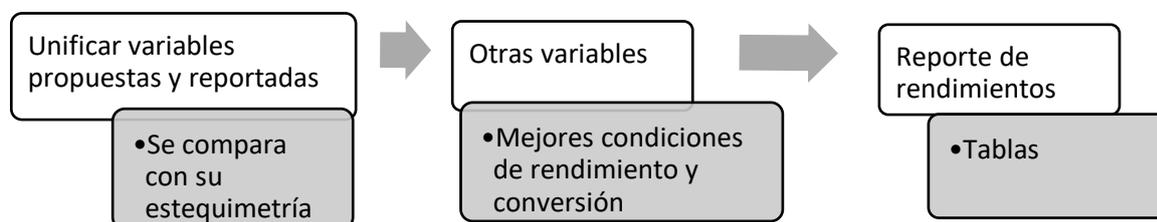
### ***Mejora de rendimientos del polímero con respecto a las variables reportadas***

Una vez unificadas las variables tanto las reportadas como las propuestas, todo aquello que generó el mejor rendimiento y conversión se comparó con su estequiometría. Luego de eso se incluyó las variables más actuales, las cuales pueden producir mayores condiciones de conversión y rendimientos, para hacer una propuesta y mejorar el proceso, con el fin de obtener un polímero con mejores propiedades y características disminuyendo los procesos de manufactura, costes de mantenimiento y aumentando el tiempo de actividad mejorando la productividad en el proceso, al final se realizó el reporte de los

rendimientos mediante tablas de los datos obtenidos para cada reacción de polimerización expuesta en la Figura 28.

### Figura 28

*Esquema de pasos para la mejora de un proceso*

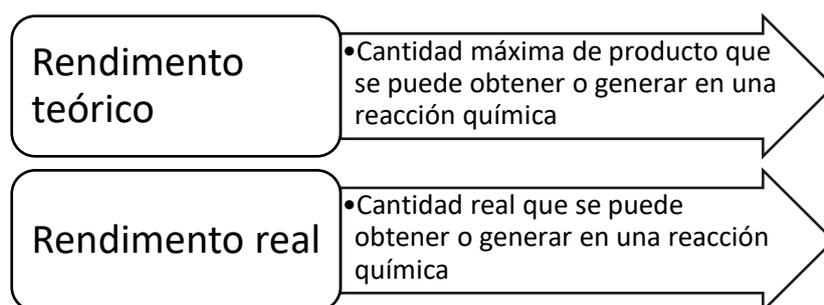


### Explicación y detalle de los rendimientos reportados en la literatura

Comparación de rendimientos del polímero con respecto a las variables reportadas y propuestas. Para esta sección de la investigación se va a realizar una búsqueda minuciosa para describir la obtención de las conversiones globales del polímero dentro de la industria en las diferentes fuentes bibliográficas, como también la determinación de las conversiones a una escala inferior como en los laboratorios, con el fin de contrastar los rendimientos teóricos con los reportados en la literatura (Figura 29). Para la comparación de los rendimientos tanto teóricos como experimentales se realizará una prueba estadística con el fin de analizar los datos para verificar que la hipótesis esté correctamente planteada.

### Figura 29

*Diagrama de resumen de rendimientos teóricos y reales*



### ***Búsqueda de los rendimientos teóricos del polímero en condiciones industriales y de laboratorio***

Búsqueda específica, en base a la información recopilada en la revisión del estado del arte de las conversiones incluyendo variables tales como reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero, la elaboración de tablas de síntesis estequiométrica para cada tipo de metodología encontrada y la ejecución de balances de masa mediante la estructuración de la estequiometría propia de cada reacción, pero con enfoque en las industrias así como también a una escala menor que la industria, escala referida al proceso de obtención del polímero en el laboratorio.

El objetivo del reporte de estos datos es plantear reacciones químicas y relaciones estequiométricas para la obtención del polímero y así relacionar los datos con los rendimientos o conversiones propias de cada industria dedicada a la producción de este polímero u obtención realizada en el laboratorio, estos datos se los puede obtener en páginas web oficiales de estas industrias o empresas, así como también en artículos científicos relacionados con los rendimientos o conversiones de la producción del polímero en el laboratorio.

### ***Reporte de las condiciones de los rendimientos en cuanto a las nuevas técnicas o tecnologías utilizadas en la industria***

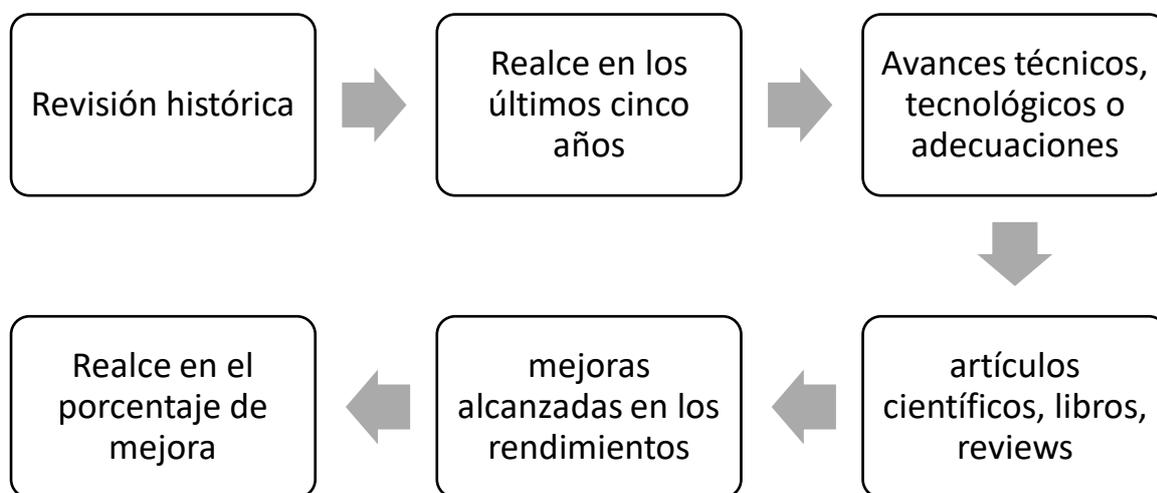
Enfoque en la descripción de todos los avances técnicos, tecnológicos o adecuaciones que se han propuesto en artículos científicos, libros, *reviews* de los últimos cinco años para los procesos de obtención del polímero (Figura 30), este apartado tiene como finalidad dar realce a las mejoras alcanzadas en los rendimientos en el transcurso del tiempo desde la primera vez que se obtuvo el polímero hasta la actualidad, con una revisión histórica con realce en los últimos cinco años.

Investigación de los procesos y protocolos que se ha desarrollado para la obtención del polímero, con datos de rendimientos y conversiones, así como de materia prima

utilizada y productos obtenidos en dichos procesos dando realce al porcentaje de mejora que se ha ido incrementado con el tiempo.

### Figura 30

*Esquema de revisión de las nuevas tecnologías usadas en la industria*

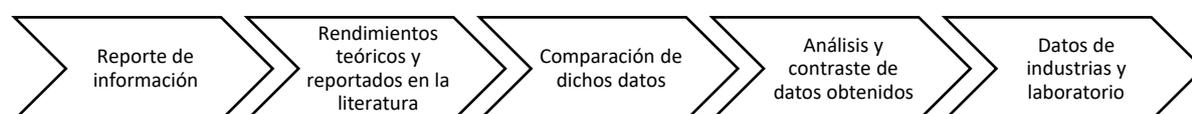


### ***Elaboración de una tabla de comparación entre los rendimientos de todo lo reportado***

Reporte mediante tablas de los datos obtenidos para los rendimientos teóricos y reportados en la literatura con el fin de realizar una comparación de dichos datos para su respectivo análisis y poder contrastar la información de cada proceso tanto en la industria como en el laboratorio, en base a la tabla modelo inicial o formato mencionada en uno de los anteriores apartados. Las tablas reportadas están sujetas a cambios según lo que se encuentre en la bibliografía (Figura 31).

### Figura 31

*Esquema de elaboración de una tabla de comparación entre los rendimientos*



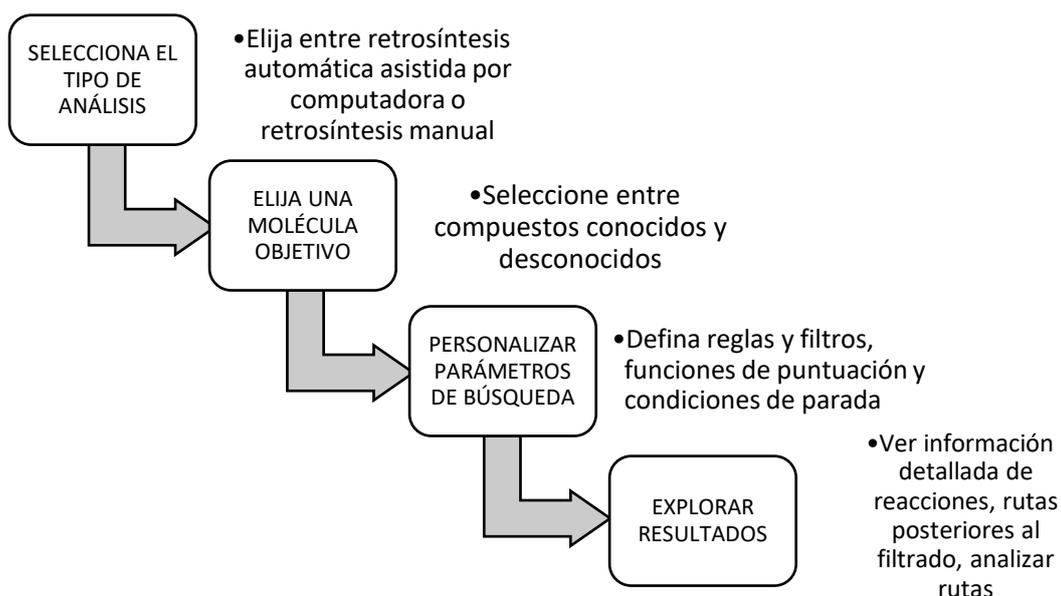
## Ejecutar un análisis de retro síntesis online con propósito de comparación

El análisis de retro síntesis es una técnica que utiliza la química computacional en donde un determinado producto final, molécula o compuesto, se desglosa obteniendo en una secuencia de estructuras precursoras ordenadas en pasos de reacción a través del algoritmo; este producto final ingresado al algoritmo se descompone recursivamente hasta obtener unidades funcionales básicas cada vez más sencillas (Figura 32).

El algoritmo gestiona una enorme cantidad de datos basados en la biblioteca y plantillas de reacciones ya conocidas; una síntesis tendrá una o más de una posible ruta de síntesis que se presentará en una venta de resultados. El objetivo de un análisis de retro síntesis es la simplificación estructural. Esta técnica ayuda a descubrir diferentes alternativas de síntesis y compararlas siguiendo criterios de sencillez y lógica.

### Figura 32

*Esquema de como ejecutar un análisis de retrosíntesis*



El análisis de retro síntesis se conceptualiza a continuación, en primera instancia se debe seleccionar la molécula objetivo entre un conjunto de compuestos conocidos y desconocidos, para luego personalizar los parámetros de búsqueda estableciendo diversos factores como pueden ser el umbral de precio de las materias primas, condiciones de

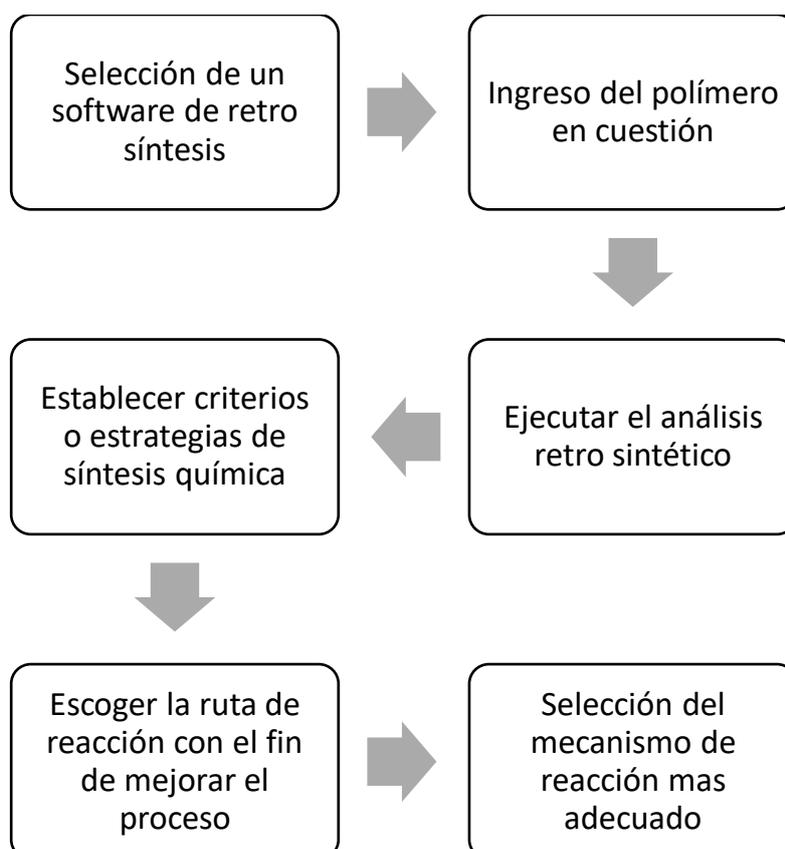
parada de la reacción, grupos funcionales específicos, materiales de partida conocidos o desconocidos. Posteriormente se filtrará, clasificará y compara las diferentes rutas de síntesis que el programa proponga, cada molécula se detallará químicamente para finalmente escoger la ruta de síntesis más rentable.

### **Reporte del producto final**

Una vez fijado el polímero correspondiente se obtendrá una o diferentes rutas de síntesis para sintetizar dicho producto final, con los mecanismos de reacción consecutivos para el acoplamiento de las unidades funcionalizadas y activas estos mecanismos de reacción se emplearán para la generación del polímero deseado considerando criterios o estrategias de síntesis química (Figura 32).

### **Figura 33**

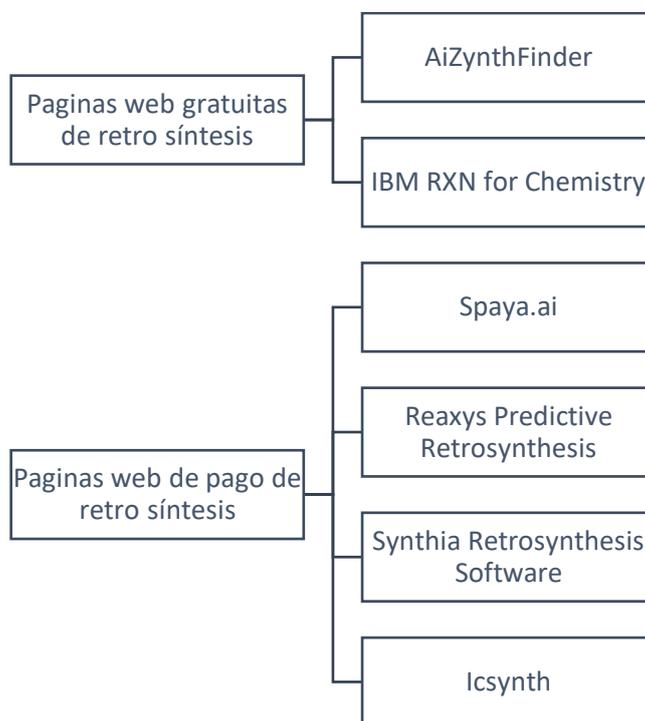
*Esquema de reporte de producto final*



**Búsqueda de una plataforma con el fin de realizar una retro síntesis del producto final**

**Figura 34**

*Esquema de páginas web de retrosíntesis*



**Interpretar las reacciones químicas y los mecanismos de reacción mediante la ingeniería inversa**

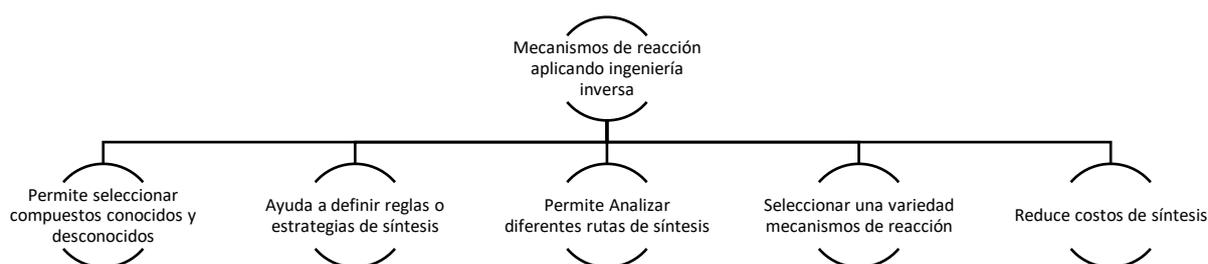
Las diferentes alternativas de reacciones químicas obtenidas a través de la ingeniería inversa, permiten compararlas entre sí tomando en cuenta criterios de costos, disponibilidad de materias primas o versatilidad de las unidades funcionales básicas que permitan aprovecharlas por completo en los pasos de reacción consecutivos, recirculando o purgando las materias primas o desechos los mismos que se podrán purificar o pre purificar durante el proceso de síntesis; estas reacciones químicas también se podrán modificar o simplificar estructuralmente.

Las diferentes alternativas de los mecanismos de reacción química se escogerán bajo diversos criterios que puedan significar una mejora para la obtención del polímero, a partir de las unidades fundamentales o monómeros que reaccionen en los pasos

consecutivos, como por ejemplo las reacciones *tandem* o también conocidas como efecto cascada o efecto domino se podrían aprovechar planificando la construcción de estructuras, a partir de materiales y reactivos accesibles que se adapten a las necesidades de la estrategia de síntesis propuesta para obtener el producto deseado o polímero en cuestión, en la Figura 35 se tiene un esquema explicativo de los mecanismos de reacción.

**Figura 35**

*Esquema de interpretación de reacciones y sus mecanismos*



### **Reporte mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización**

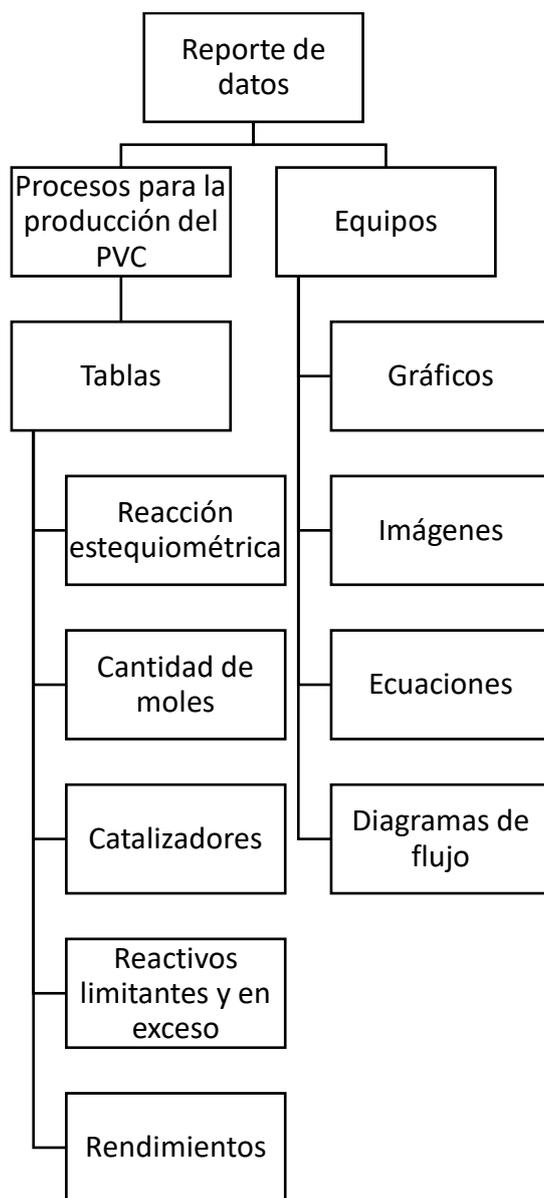
La información se presentará de forma secuencial y ordenada mediante tablas. En cuanto a los procesos industrializados se verán reflejados en esquemas y diagramas de flujo, por otra parte, en caso de ser necesario especificar el tipo de maquinaria o equipos esenciales se ilustrarán mediante imágenes. En cuanto a la representación de ecuaciones y modelos matemáticos, se mostrarán de forma sucesiva con su respectiva numeración.

Se tiene los datos obtenidos de balances de masa los cuales se los recuperó mediante tablas para su respectivo ordenamiento en el proceso de síntesis del PVC y de su respectiva reacción de polimerización, mientras que para dinamizar los balances tanto globales como por cada etapa se realizó un diagrama de bloques para mejor entendimiento de los flujos y fracciones másicos o molares, conversiones y condiciones de cada entrada y salida del proceso.

Se plasmó los datos recopilados de los procesos de forma sistemática mediante tablas acerca de los parámetros utilizados durante la producción del polímero, de acuerdo con la revisión bibliográfica, donde se indica la reacción estequiométrica, cantidad de moles, catalizadores, reactivos limitantes y en exceso, rendimientos y los equipos utilizados para la elaboración del polímero, se representó mediante gráficos, ecuaciones y diagramas de flujo.

Para la respectiva ruta que marca las reacciones para obtener el polímero y datos obtenidos en cuanto a los rendimientos teóricos y reportados en la literatura, se realizó tablas con el fin de dar un orden lógico y secuencial a cada elemento que constituyen dichas reacciones. En cuanto a las tecnologías utilizadas dentro de la industria se lo refleja en esquemas o diagramas de flujo, para la especificación de los equipos se los reporta en imágenes. Para ecuaciones, modelos matemáticos o reacciones se los enumera de forma sucesiva y cita dentro del escrito.

Mediante tablas gráficos, esquemas, se reporta la información de la reacción del polímero en cuestión para poder comparar, ordenar y resumir datos según la ruta seleccionada para la síntesis del PVC. Se presentó de forma ordenada la retro síntesis planteada en tablas y esquemas de los resultados obtenidos en los softwares gratuitos utilizados.

**Figura 36***Reporte final de datos*

## Capítulo IV

### Resultados y discusión

#### Revisión el estado del arte de los reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero en cuestión

Se revisó exhaustivamente en las bases de datos, así como en indexaciones de revistas para obtener la información bibliográfica acerca de la síntesis del polímero y el estado del arte de los componentes necesarios, así como también se obtuvo rutas de síntesis e información de los componentes desarrollados en la industria mediante patentes internacionales debido a que el PVC se lo fabrica en su mayoría en Estados Unidos, China y países europeos, por lo que estos datos se los recabo en la plataforma web *Google Patents* como se muestra en la Figura 37.

#### Figura 37

*Google Patents*



*Nota.* Tomado de (Google imágenes).

#### **Creación y elaboración de la lista de bibliografía referente al polímero**

Se recolectó información con base en palabras clave para la búsqueda de esta, en la Tabla 4 se tiene los artículos científicos y en la Tabla 5 se recolectó libros relacionados con la química de los polímeros en general y del PVC con su respectivo DOI (*Digital Object Identifier*) e ISBN (*International Standard Book Number*), con estos códigos se verificó la validez y confiabilidad de la información obtenida. Con el fin de revisar información más actual se tomó como base el año 2000 hasta publicaciones más recientes.

**Tabla 4***Referencias bibliográficas de polímeros (artículos científicos)*

<b>Referencias bibliográficas</b>	<b>Revista</b>
(Akovali, 2012)	Elsevier
(Liu et al., 2020)	Resources, Conservation and Recycling
(Olatunji, 2016)	Natural Polymers: Industry Techniques and Applications
(Endo, 2002)	Progress in Polymer Science
(Saeki & Emura, 2002)	Progress in Polymer Science

**Tabla 5***Referencias bibliográficas de polímeros (libros)*

<b>Referencias bibliográficas</b>	<b>Editorial</b>
(Koltzenburg et al., 2017)	Springer
(Daub & Seese, 2005)	Pearson Educación
(Kricheldorf et al., 2005)	Marcel Dekker
(Nass, 1992)	CRC Press
(Nicholson, 2017)	Royal Society of Chemistry
(Rodriguez et al., 2015)	CRC Press

Para la comparación de datos de composiciones, rendimientos y propiedades mecánicas, físicas y químicas se obtuvieron las diferentes patentes registradas en la tabla 6 que tienen ciertas diferencias entre si según su fabricante, así se pudo realizar una comparación de las diferentes características que tiene el PVC en cada caso.

**Tabla 6***Patentes relacionadas con PVC*

<b>Patente</b>	<b>Número</b>
(Amano et al., 1990)	EP0433754A1
(Jianhua & Qihua, 2012)	CN103059466B
(Chesler et al., 1973)	US4110527
(Martyak & Nicholas, 2010)	WO2010084130A1
(Seymour, 1955)	US2831843
(Nicholas & Martyak, 2010)	US8562858B2
(Marshall et al., 1978)	US4187363A
(Toshihiko & Amano, 1995)	US5883209

**Contraste y comparación de la información con artículos científicos****Tabla 7***Comparación de métodos de polimerización por radicales de cloruro de vinilo*

<b>Factor</b>	<b>Método de polimerización</b>			
	<b>Masa</b>	<b>Solución</b>	<b>Emulsión</b>	<b>Suspensión</b>
Solubilidad del iniciador	Soluble en VC	Soluble en VC	Insoluble en VC	Insoluble en VC
Aditivo	Ninguno	Solvente	Agua, emulsionante	Agua, agente dispersante
Agitación	No necesario	No necesario	Necesario	Necesario
Control de temperatura	Difícil	Posible	Fácil	Fácil
Aislamiento de PVC	Recuperación de VC	Eliminación de disolvente	Eliminación de emulsionante	Eliminación de agente dispersante
Tamaño de partícula de PVC ( $\mu\text{m}$ )	60-300	<0,1	0,1	20-300

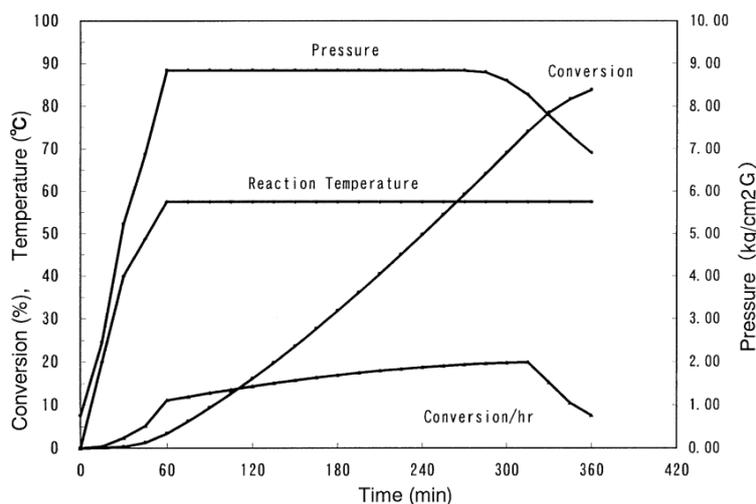
*Nota.* Tomado de (Synthesis and structure of polyvinyl chloride).

En la Tabla 7 se compara los diferentes métodos de polimerización por radicales para el cloruro de vinilo (VC). Aunque la polimerización en masa parece ser el método más simple para la preparación de PVC, la polimerización en suspensión se usa preferentemente industrialmente para evitar el riesgo de explosión asociado con el proceso de polimerización en masa (Endo, 2002).

La Figura 38 indicó un perfil general de presión de reacción, temperatura de reacción, conversión por hora y conversión acumulada en función del tiempo, en donde se pudo observar que en el momento en que la presión de reacción desciende hasta un cierto valor, se detiene la reacción de polimerización, así como también la temperatura de reacción asciende hasta un tiempo de 60 minutos aproximadamente y luego se mantiene constante (Saeki & Emura, 2002).

### Figura 38

*Perfil general de la reacción de polimerización en suspensión*



*Nota.* Tomado de (Technical progresses for PVC production).

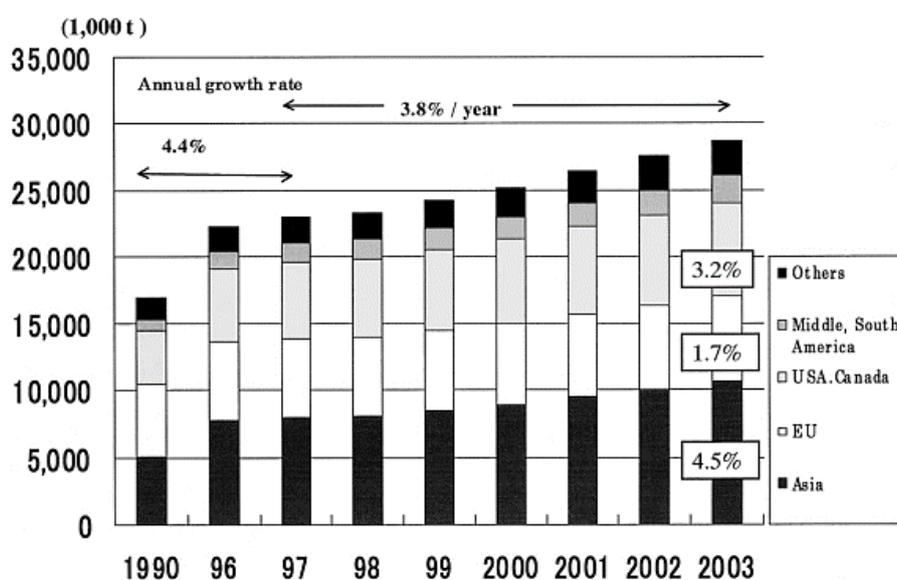
### ***Contraste de la información obtenida con lo reportado por las industrias nacionales e internacionales***

La figura 39 muestra una tendencia de la demanda mundial de PVC de 1990 a 1997 y una predicción hasta 2003. La tasa de crecimiento anual de la demanda mundial de PVC

entre 1990 y 1997 fue del 4,4%. La tasa de crecimiento moderado después de 1997 fue pronosticada como 3,8% por año. En América del Norte, la demanda de PVC crece continuamente alrededor del 3 % anual. Se prevé que la tasa de crecimiento de Europa occidental sea del 1,7 % anual. En Asia, la tasa de crecimiento es tan grande como 4,5% (Saeki & Emura, 2002).

**Figura 39**

*Demanda mundial del PVC*



*Nota.* Tomado de (Technical progresses for PVC production).

En la Tabla 8 se indica el cambio en el número de productores de PVC en Estados Unidos, Europa y Japón después de 1980. Los productores de PVC en estas regiones se unieron y racionalizaron la producción del polímero y el número resultante de productores de PVC disminuyó en gran escala. Esto significa que la industria del PVC de estos países industrializados se ha desarrollado (Saeki & Emura, 2002).

**Tabla 8***Número de productores de PVC*

	1980	1996	2000
USA	21	13	12
Europa occidental	22	13	8
Japón	16	11	7

*Nota.* Tomado de (Technical progresses for PVC production).

En la Tabla 9 se muestra la participación de cada proceso de polimerización en el caso del PVC hasta el 2002, en donde el proceso más predominante es el de suspensión. Esto se debe a que las aplicaciones más comunes, como la extrusión de perfiles de tuberías, películas y láminas, se fabrican con resina básica fabricada mediante un proceso de suspensión. La resina de la polimerización en masa también es para esta aplicación. Recientemente, el PVC de proceso a granel se consume como PVC especial de alta pureza. La participación del proceso a granel en el mundo es de alrededor del 10%. En Japón, no existe un proceso a granel para el PVC (Saeki & Emura, 2002).

**Tabla 9***Participación en los procesos de producción de PVC (%)*

	A nivel mundial	USA	Japón
Polimerización por suspensión	80	75	93
Polimerización en microsuspensión		3	5
Polimerización en emulsión	12	12	2
Polimerización a granel	8	10	0

*Nota.* Tomado de (Technical progresses for PVC production).

En Ecuador no se encontró información acerca de la producción de PVC en la zona debido a que aquí en el país las empresas suelen comprar el polímero en bruto y a granel para su posterior tratamiento de extracción y de transformación de dicho polímero.

Según el (Ministerio de Industrias y Productividad, 2015) la manufactura en Ecuador se basa en la transformación dentro de la cadena de valor de la industria de los plásticos, en donde, esta etapa conforma las resinas de PVC en productos finales. En el país suele ser utilizado el PVC principalmente como tuberías y entre las empresas principales de elaborar las tuberías están Amanco Plastigama y Plásticos Rival.

### **Elaboración de tablas de síntesis estequiométrica para cada tipo de metodología encontrada**

Mediante la búsqueda bibliográfica en patentes de la industria de los polímeros, en específico del PVC, así como de artículos científicos, se determinó datos de estequiometría para la obtención del PVC mediante la polimerización por suspensión, debido a que es la más usada en el caso de dicho polímero.

### ***Elaboración de una tabla de formato***

Se realizó una tabla formato basada en las patentes encontradas para la obtención del polímero la cual se encuentra en el apartado de metodología (Tabla 3), en donde en algunas patentes se encontraron varias pruebas realizadas con el fin de mejorar sus propiedades físicas como la resistencia a los rayos UV, así como también la mejora de rendimientos para el PVC con diferentes aditivos.

### ***Contraste de la información reportada en las fuentes bibliográficas***

Para el proceso de polimerización de PVC se recopiló los datos de los diferentes aditivos, agentes de suspensión, reactivos, catalizadores, solventes y condiciones que son llevados a cabo por las diferentes industrias para obtener el polímero, así como también la conversión con la que trabaja cada industria, en la Tabla 10 se compiló estos datos de distintas patentes las cuales tratan de la polimerización del cloruro de vinilo.

**Tabla 10***Comparación de la información de diferentes patentes*

<b>Patente</b>	<b>Agentes de suspensión</b>	<b>Catalizadores</b>	<b>Conversión (%)</b>	<b>Solvente</b>
(Amano et al., 1990)	Alcohol polivinílico (PVA)	-		Agua
(Seymour, 1955)	Proteína o goma	peróxido de hidrógeno y persales,	80-85	Agua
(Chesler et al., 1973)	PVA, celulosa	peróxidos orgánicos, peroxidicarbonatos, hidroperóxidos y azo compuestos.	-	-
(Marshall et al., 1978)	PVA o gelatina, bicarbonato de sodio	Peróxidos	75-95	Agua
(Toshihiko & Amano, 1995)	PVA, celulosa	-	75-98	Agua
(Martyak & Nicholas, 2010)	PVA	-	60-85	Metanol

***Elaboración de tablas con respecto a la estequiometría de los artículos y procesos industriales***

En la Tabla 11 se detallan algunas propiedades del PVC modificado de la patente presentada por (Jianhua & Qihua, 2012) en donde se toman en cuenta solamente las propiedades principales que cambiaron luego de una exposición al sol por 240 horas.

Tabla 11

*Propiedades físicas del PVC modificado resistente a los rayos UV*

<b>Elementos de prueba</b>	<b>Valor</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>
	<b>estándar</b>				
<b>Envejecimiento con Luz UV</b>	≥504	1008	1008	1008	1008
<b>(h)</b>					
<b>Rendimiento tras 240 h de exposición a la luz solar</b>					
<b>Resistencia a la flexión</b>	≥15,0	45,7	47,5	50,6	53,4
<b>(MPa)</b>					
<b>Alargamiento a la rotura</b>	≥150	294	298	306	317
<b>(%)</b>					
<b>Deformación térmica (°C)</b>	≥50.0	114.1	117.2	-30	-30
<b>Temperatura de fragilidad</b>	≤-20	-25	-25	-30	-30
<b>por impacto (°C)</b>					

*Nota.* Tomado de (Ultraviolet-proof environmental-friendly polyvinyl chloride (PVC) modified material and preparation method thereof).

Se encontró en otro proceso de polimerización patentado por (Marshall et al., 1978) que para mejorar la conversión de CVM a PVC, los autores utilizaron uno de los agentes modificadores preferidos usados hasta ahora en la producción de PVC modificado, el cual fue el tricloroetileno (TCE). En donde se realizaron varios ensayos con diferentes agentes de transferencia de cadena, en donde se tomó en consideración solo los que aportaron una conversión más alta (Tabla 12).

**Tabla 12**

*Comparación de TCE con aldehídos como agentes de transferencia de cadena*

<b>Ejemplo No.</b>	<b>8149</b>	<b>8331</b>	<b>8338</b>	<b>8330</b>
<b>Aditivo de carga</b>	TCE	IBA	IBA	IBA
<b>Partes, monómero pph</b>	1	0,5	0,25	0,5
<b>NaHSO<sub>3</sub>, monómero pph</b>	-	-	-	0,183
<b>Reacción</b>				
<b>Tiempo de reacción, h</b>	13	12	12	11
<b>Conversión, %</b>	92	88	95	93
<b>Tasa de polimerización, #/h</b>	1,21	1,16	1,25	1,34
<b>Producto Viscosidad inherente</b>	0,731	0,665	0,752	0,629

*Nota.* Tomado de (Vinyl chloride polymerization method).

La reacción de polimerización es un proceso por lotes, en donde ingresa la materia prima en el reactor y finaliza al descargar la suspensión de PVC después de la polimerización. En el reactor con chaqueta de enfriamiento y agitador se cargan agua pura, CVM y un coloide protector (agente de suspensión). El CVM se dispersa en agua por agitación. El reactor se calienta hasta una cierta temperatura. Al agregar el iniciador o también conocido como catalizador de polimerización, se inicia la polimerización por radicales de CVM. La receta típica de polimerización se muestra en la Tabla 13 propuesta en el artículo científico por (Saeki & Emura, 2002).

**Tabla 13***Receta de polimerización en suspensión del CVM*

<b>Grado de polimerización 1000 (valor K: 66)</b>	
CVM	100 partes
Agua (desmineralizada)	120 partes
Agente de suspensión (PVA, etc.)	0,05 – 0,10 partes
Iniciador (compuestos de peroxi, etc.)	0,03 – 0,16 partes
Temperatura de polimerización	57 °C
Conversión	85 – 90%
Presión al final de la polimerización	5 kg/cm <sup>3</sup>
Tiempo de polimerización	8 h

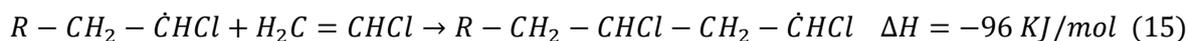
*Nota.* Tomado de (Technical progresses for PVC production).

### **Ejecución de los balances de masa estructurando la estequiometría propia de la reacción**

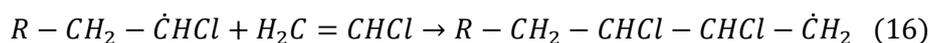
Para obtener los balances de masa en cada módulo del proceso de obtención de PVC primero se procedió a encontrar la reacción química de polimerización, la cual ocurre mediante el proceso por adición de radicales libres, en donde se tiene los pasos de iniciación, propagación y terminación, pero en general se consideró la reacción global planteada por (Kricheldorf et al., 2005), y el proceso se lo realizó en base a lo planteado por (Beltrán & Campoy, 2016) para poder compararlo luego con una mejor conversión producto de la adición de otros aditivos utilizados por diferentes empresas.

### **Búsqueda de la reacción química de elaboración de la polimerización para el polímero PVC**

El método más común para obtener el PVC es la polimerización por radicales libres del VC. De acuerdo con la facilidad de división homolítica del enlace  $\pi$  en el monómero, la polimerización por radicales tiene lugar en presencia de sistemas de iniciación adecuados. Después del paso de iniciación, el crecimiento de la cadena tiene lugar rápidamente. Según muestra la Reacción 15 (Kricheldorf et al., 2005).



Sin embargo, durante la polimerización VC, el monómero tiene aún otra posibilidad de reacción con el macrorradical, la reacción 15 es una adición de cabeza a cola, mientras que la Reacción 16 conduce a una estructura de cabeza a cabeza. La adición cabeza a cabeza se ve limitada por razones de estabilización estérica y de resonancia por la separación de sus sustituyentes (Kricheldorf et al., 2005).

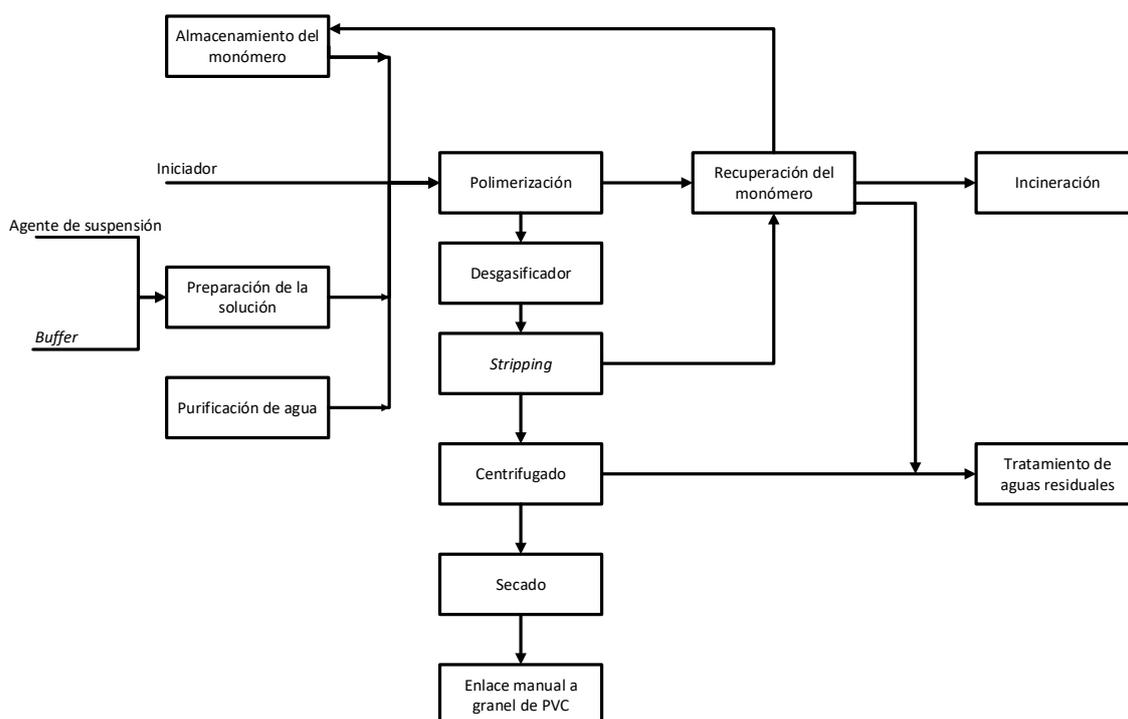


### **Elaboración de un diagrama de acuerdo con el proceso de polimerización del compuesto PVC**

Para el proceso de obtención del PVC, el método más común utilizado en la industria de los polímeros es el de suspensión y (Nass, 1992) nos plantea un diagrama de bloques en el cual se describen las entradas y salidas del proceso en la Figura 40.

**Figura 40**

*PVC por proceso de suspensión, diagrama de flujo de bloques*

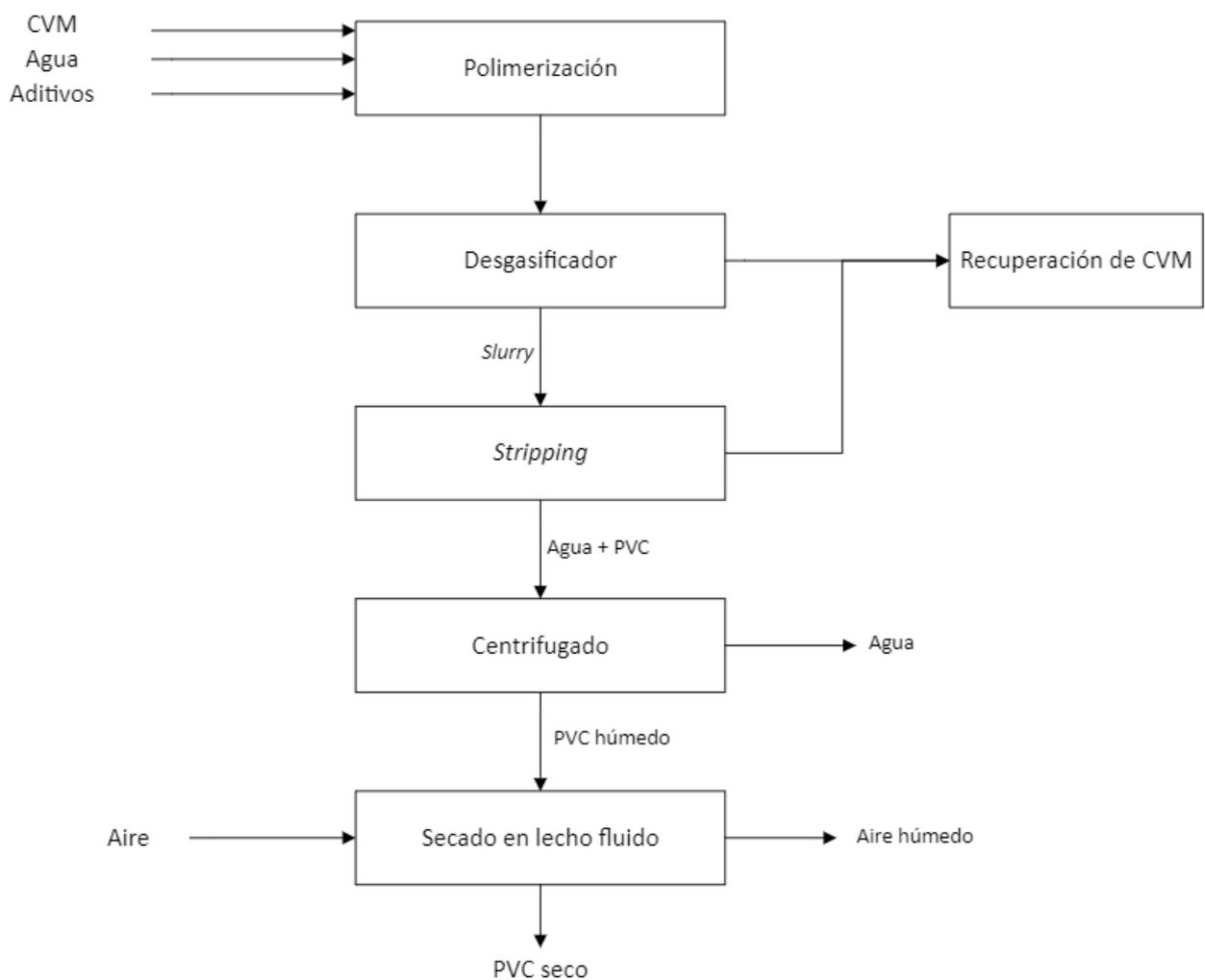


*Nota.* Tomado de (Encyclopedia of PVC: Compounding Processes, Product Design, and Specifications).

Según lo reportado por (Nass, 1992) existen tres módulos principales en el proceso de polimerización de CVM para la obtención de PVC el primero es de polimerización y *stripping*, el segundo es de deshidratación y secado y el último es de la recuperación del monómero VC.

### Figura 41

*Diagrama de bloque del proceso de PVC simplificado*



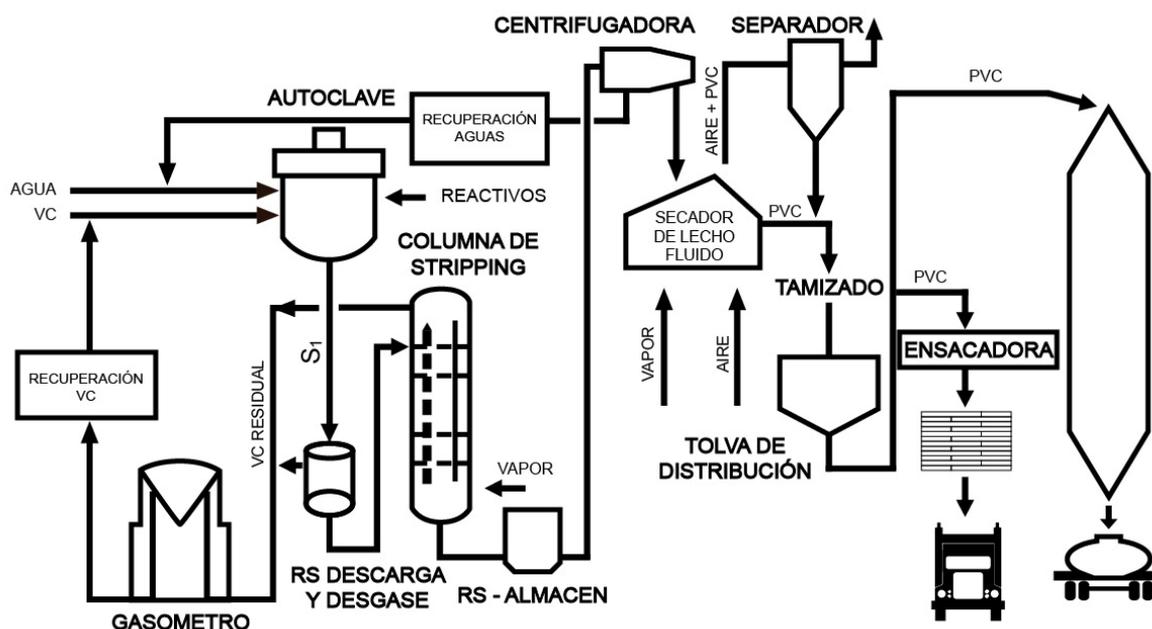
*Nota.* Tomado de (Guía de mejores técnicas disponibles en España del sector de DCE, CVM y PVC).

En la Figura 41 se realizó el diagrama de procesos para la obtención de la resina de PVC en suspensión la cual es la más utilizada en España según lo mencionado por (Canales, 2003) en su reporte para el Ministerio de Medio Ambiente es ese país, y por lo investigado en la bibliografía se tomó en consideración esta técnica de obtención de PVC.

En la Figura 42 se adaptó un diagrama de proceso para la obtención del PVC, siendo este el tercer proceso en la planta de fabricación del polímero, después del proceso de electrólisis una sal (salmuera), para poder obtener cloro, la cual pasa al proceso de obtención del PVC (Solvay, 2014), siendo este el proceso que se trató en este estudio, por lo cual se obvió los otros dos procesos.

**Figura 42**

*Diagrama de proceso de obtención del PVC*



*Nota.* Tomado de (Declaración ambiental 2014. Complejo Solvin Martorell).

### **Reporte de las condiciones específicas del compuesto PVC**

Según lo mencionado por (Beltrán & Campoy, 2016) se tienen las condiciones de trabajo para este proceso mostradas en la Tabla 14, se tomó en cuenta que la reacción de

polimerización es altamente exotérmica por lo cual se desprende una gran cantidad de calor el cual es de 1525 kJ/kg, y las partículas de PVC obtenidas en el proceso son de entre 50 y 200  $\mu\text{m}$ .

**Tabla 14**

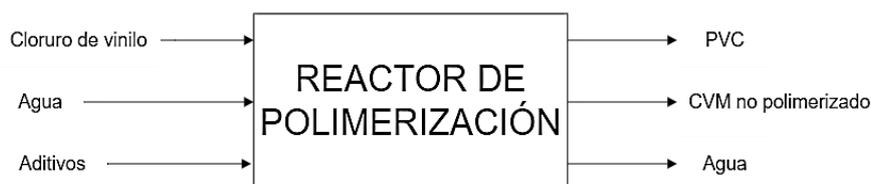
*Condiciones de trabajo de la polimerización por suspensión de PVC*

Condiciones de trabajo	Valor de operación	Rango
Temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ )	50	35 - 70
Presión (bar)		4 - 12
Conversión (%)	85	75 - 95
Tamaño de partícula ( $\mu\text{m}$ )		50 - 200
Calor desprendido (kJ/kg)	1525	
Contenido de humedad (%)		20 - 33
Cantidad de aire ( $\text{Nm}^3/\text{h}$ )		20 000 – 50 000
Temperatura del aire ( $^{\circ}\text{C}$ )		50 - 70
Tiempo de residencia (min)		10 - 20

*Nota.* Tomado de (Ingeniería básica de una planta de producción de policloruro de vinilo (PVC) granular).

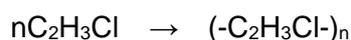
### ***Elaboración de los cálculos del balance global del proceso***

Para el balance de masa se detectó varios módulos para la simplificación del mismo, por lo que se dividió en las siguientes secciones: polimerización en suspensión en donde se encuentra la parte del reactor de polimerización (Figura 43), desgasificado (Figura 44), stripping (Figura 45), centrifugado y secado (Figura 46) (Beltrán & Campoy, 2016).

**Figura 43***Reactor de polimerización*

*Nota.* Tomado de (Ingeniería básica de una planta de producción de policloruro de vinilo (PVC) granular).

Con la reacción principal se obtuvo la siguiente relación estequiométrica:



$F_{\text{CVM}_0}$	-
-x	+x
$F_{\text{CVM}_0} - x$	x

Siendo  $F_{\text{CVM}_0}$  el flujo molar inicial de CVM alimentado al reactor de polimerización procedente de la planta de producción del monómero; y  $x$  es la cantidad de kmol/año de CVM que reaccionan. Este reacción tiene un 85% de conversión de CVM a PVC por lo que se realizó los cálculos presentados en las ecuaciones (19), (23) y (25) (Beltrán & Campoy, 2016).

Cálculo:

$$F_{\text{CVM}_0} = 1,063 \times 10^6 \frac{\text{kmol}}{\text{año}} \quad (17)$$

$$m_{\text{CVM}_0} = 1,063 \times 10^6 \frac{\text{kmol}}{\text{año}} \times 62,5 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \times \frac{1 \text{ t}}{1000 \text{ kg}} = 66437,5 \frac{\text{t}}{\text{año}} \quad (18)$$

$$x_{\text{CVM}} = \frac{x}{F_{\text{CVM}_0}} \quad (19)$$

$$0,85 = \frac{x}{1,063 \times 10^6 \text{ kmol/año}} \quad (20)$$

$$x = 903\,550 \frac{\text{kmol}}{\text{año}} = F_{PVC} \quad (21)$$

$$m_{PVC} = 903\,550 \frac{\text{kmol}}{\text{año}} \times 62,5 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} = 56471875 \frac{\text{kg}}{\text{año}} \times \frac{1\,t}{1000\,kg} = 56471,875 \frac{t}{\text{año}} \quad (22)$$

$$F_{CVM} = F_{CVM_0} - x \quad (23)$$

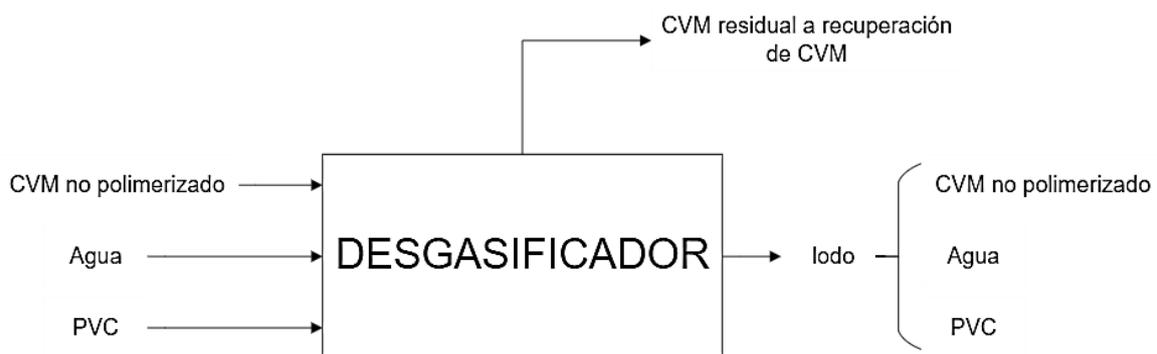
$$F_{CVM} = 1,063 \times 10^6 \frac{\text{kmol}}{\text{año}} - 903\,550 \frac{\text{kmol}}{\text{año}} = 159\,450 \frac{\text{kmol CVM no polimerizado}}{\text{año}} \quad (24)$$

$$m_{CVM} = 159\,450 \frac{\text{kmol CVM no pol.}}{\text{año}} \times 62,5 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \times \frac{1\,t}{1000\,kg} = 9965,6 \frac{t\,CVM\,no\,pol.}{\text{año}} \quad (25)$$

$$m_{H_2O} = 130 \frac{m^3\,H_2O}{1\,t\,CVM} \times \frac{66437,5\,t\,CVM}{\text{año}} = 8,64 \times 10^6 \frac{m^3\,H_2O}{\text{año}} = 8,64 \times 10^6 \frac{t\,H_2O}{\text{año}} \quad (26)$$

#### Figura 44

##### Desgasado



*Nota.* Tomado de (Ingeniería básica de una planta de producción de policloruro de vinilo (PVC) granular).

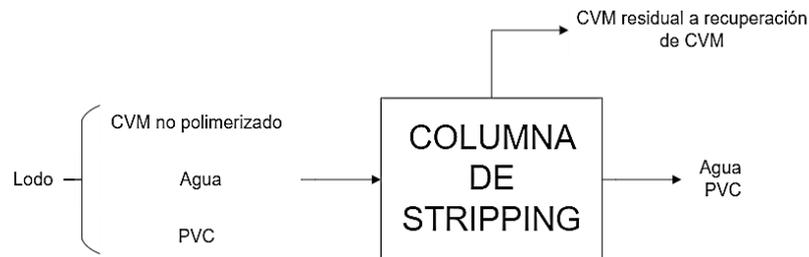
Cálculos:

Según (Beltrán & Campoy, 2016) la corriente de salida del desgasificador es un lodo o suspensión, compuesta por agua, PVC y el 50% de CVM sale para su recuperación y el otro 50% forma parte de la suspensión, se obtienen los flujos máxicos del monómero en las ecuaciones (27) y (28).

Cálculo:

$$F_{CVM_{Desg}} = 50\% \text{ de } 9965,6 \frac{t \text{ CVM no polim.}}{\text{año}} = 4982,8 \frac{t \text{ CVM no polim.}}{\text{año}} \quad (27)$$

$$F_{CVM_{Desg}} = F_{CVM_{residual}} \text{ para recuperación} \quad (28)$$

**Figura 45***Stripping*

*Nota.* Tomado de (Ingeniería básica de una planta de producción de policloruro de vinilo (PVC) granular).

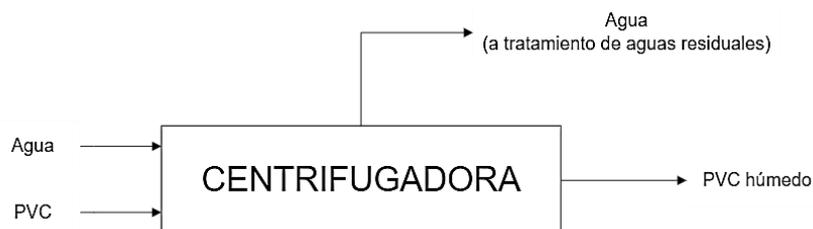
Cálculo:

$$E = S \quad (29)$$

$$F_{CVM} = F_{CVM_{residual}} + F_{CVM_{Desg}} \quad (30)$$

$$F_{H_2O \text{ entrada}} = F_{H_2O \text{ salida}} \quad (31)$$

$$F_{PVC \text{ salida}} = F_{PVC \text{ salida}} \quad (32)$$

**Figura 46***Centrifugado*

*Nota.* Tomado de (Ingeniería básica de una planta de producción de policloruro de vinilo (PVC) granular).

Cálculo:

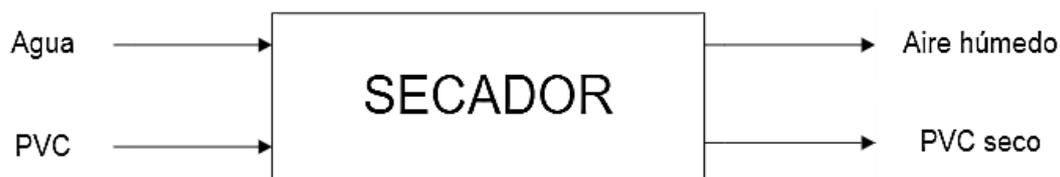
$$E = S \quad (33)$$

$$F_{H_2O \text{ entrada}} = F_{H_2O \text{ salida}} \quad (34)$$

$$F_{PVC \text{ salida}} = F_{PVC \text{ húmedo salida}} \quad (35)$$

### Figura 47

Secado



*Nota.* Tomado de (Ingeniería básica de una planta de producción de policloruro de vinilo (PVC) granular).

Cálculo:

$$F_{PVC_{seco}} \approx 99\% \text{ de } F_{PVC_{húmedo}} = 99\% \text{ de } F_{PVC} \quad (36)$$

$$F_{PVC_{seco}} = 0.99 \left( 903\,550 \frac{\text{kmol PVC}}{\text{año}} \right) = 894\,514,5 \frac{\text{kmol PVC}}{\text{año}} \quad (37)$$

$$F_{PVC_{seco}} = 894\,514,5 \frac{\text{kmol PVC}}{\text{año}} \times 62,5 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \times \frac{1 \text{ t}}{1000 \text{ kg}} = 55\,907,2 \frac{\text{t PVC}}{\text{año}} \quad (38)$$

### **Búsqueda de todas las variables faltantes para completar el proceso**

Para realizar un proceso de obtención de PVC con mayor conversión y así obtener un flujo de salida de PVC seco mayor al ya obtenido con la conversión del 85%, se propuso agregar un agente de transferencia de cadena como es el butiraldehído, el cual en el proceso es removido por un tratamiento con bisulfito de sodio, lo cual permite obtener una resina de PVC más estable y con mejores propiedades físicas, así como también reacciona

con el bisulfito de sodio por lo que da como resultado un polímero libre de olor y con estabilidad mejorada, para esto se tiene una receta de preparación en la Tabla 15 propuesta por (Marshall et al., 1978).

**Tabla 15**

*Receta para preparar resina de PVC modificado*

<b>Receta</b>	<b>Partes</b>
CVM	100
H <sub>2</sub> O	142
Agente de suspensión	0,45
Catalizador	0,15
Bicarbonato de sodio	0,15
Agente de transferencia de cadena	0,30

*Nota.* Tomado de (Vinyl chloride polymerization method).

***Mejora de rendimientos del polímero con respecto a las variables reportadas y propuestas***

Para obtener un rendimiento mejorado del proceso de obtención de PVC se aumentó como agente de transferencia de cadena, el IBA en donde se obtiene una conversión del 95%, con un tiempo de reacción de 12 horas y una tasa de polimerización de 1,25, en donde la tasa de polimerización es una aproximación calculada, la cual consiste en dividir la cantidad de polímero total producido por el tiempo de reacción total, pph indica partes por cien partes (Marshall et al., 1978) y así se obtuvo los resultados mostrados en la Tabla 23 mediante los balances de masa reportados en uno de los apartados anteriores, pero con el cambio de conversión de 85 a 95%. Mediante la ecuación 39 se determinó el rendimiento del proceso global de obtención de PVC.

$$\% \text{ rendimiento} = \frac{\text{Flujo molar del producto}}{\text{Flujo molar de la alimentación}} \times 100\%$$

**Tabla 16***Rendimientos globales para cada conversión de CVM a PVC*

<b>Flujo de entrada de CVM (kmol/año)</b>	<b>Conversión (%)</b>	<b>Flujo de salida de PVC seco (kmol/año)</b>	<b>Rendimiento (%)</b>
1063000	85	894514,5	84,15
1063000	95	999751.5	94,05

**Explicación y detalle de los rendimientos reportados en la literatura**

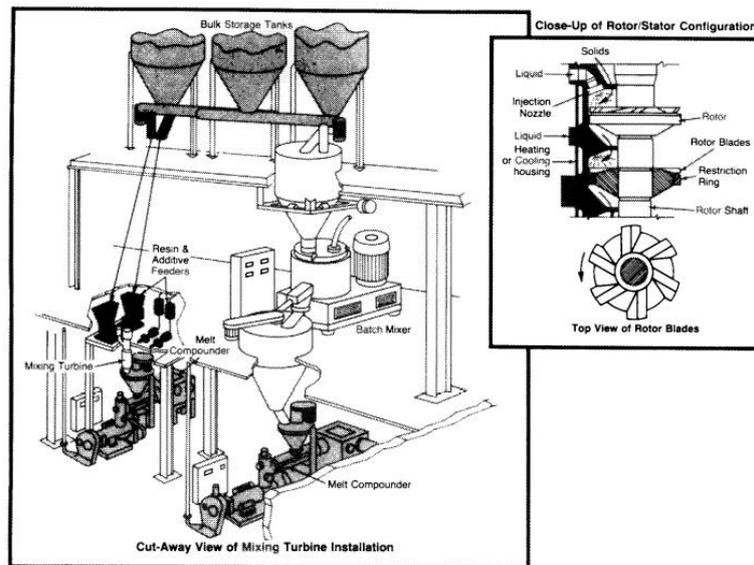
En cuanto a los resultados obtenidos para los rendimientos de la obtención del PVC no se encontró información en patentes y/o artículos científicos del PVC, debido a que suelen ser datos variables de acuerdo a la metodología utilizada por las industrias, a su vez suelen ser datos confidenciales por parte de las empresas, con respecto a los datos de rendimiento teóricos se reportó una comparación y la eficiencia del proceso de polimerización por suspensión bajo el dominio de la prueba estadística.

***Reporte de las condiciones de los rendimientos en cuanto a las nuevas técnicas o tecnologías utilizadas en la industria***

Para la obtención de PVC se utiliza varios equipos entre los principales se tiene el mezclador continuo de PVC en la extrusora con sistemas de medición dedicados ha atraído la atención de los fabricantes de equipos. Mediante el uso de una nueva turbina mezcladora, Buss-Condux ha introducido una alimentación de mezcla seca continua a un mezclador de masa fundida. Este enfoque ahorra espacio, como se muestra en la Figura 48 (Nass, 1992).

## Figura 48

### Mezclador continuo de mezcla en seco

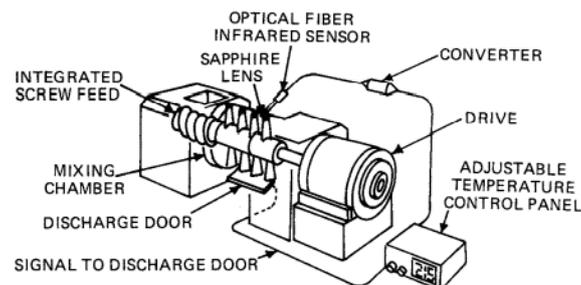


Nota. Tomado de (Encyclopedia of PVC: Compounding Processes, Product Design, and Specifications).

Otro ejemplo de equipos innovadores de PVC es el uso del *Gelimat*, originalmente diseñado y fabricado por *Draiswerke GmbH* y modificado por los miembros de *Synergistics*, *Carlew* y *Cary Chemicals* (Figura 49). Esta máquina permite ciclos de fundente de muy breve duración para PVC flexible (Nass, 1992).

## Figura 49

### Sistema de mezcla *Gelimat*, un proceso de mezcla de ultra alta velocidad



Nota. Tomado de (Encyclopedia of PVC: Compounding Processes, Product Design, and Specifications).

**Análisis de la conversión y flujos de entrada para el agente de transferencia de Cadena (IBA).**

Para conocer la dependencia de las conversiones y los flujos con relación al agente de cadena (IBA) se plantean varios tratamientos con variación en los flujos de entrada del proceso y conversiones, como se muestra en la tabla 16.

Existen dos fuentes de variabilidad, flujo de entrada y conversión, generando la posibilidad de ocho tratamientos para analizar. El método estadístico seleccionado que mejor se adapta para el tipo de datos obtenidos es el ANOVA que se basa en realizar análisis por fuentes de variabilidad, planteando las siguientes hipótesis:

$$H_0: T_1=T_2=T_3=T_4=T_5=T_6=T_7=T_8=0$$

$$H_1: T_1 \neq T_2 \neq T_3 \neq T_4 \neq T_5 \neq T_6 \neq T_7 \neq T_8 \neq 0$$

**Tabla 17**

*Tratamientos con variación de flujos y conversiones*

<b>Conversiones</b>	<b>Flujo de entrada</b>	<b>Flujo mejorado</b>	<b>Tratamiento</b>
85 (C1)	8703312.5 (F1)	55907.1563	T1
85 (C1)	11314306.3 (F2)	72679.3031	T2
86 (C2)	8703312.5 (F1)	56564.8875	T3
86 (C2)	11314306.3 (F2)	73534.3538	T4
88 (C3)	8703312.5 (F1)	57880.35	T5
88 (C3)	11314306.3 (F2)	75244.455	T6
95 (C4)	8703312.5 (F1)	62484.4688	T7
95 (C4)	11314306.3 (F2)	81229.8094	T8

Para determinar la factibilidad del uso del modelo estadístico ANOVA se debe comprobar los supuestos del modelo por medio de la gráfica de residuos (figura 50), observando que

se cumplen los supuestos de normalidad, varianza constante e independencia, demostrando que los residuales se pueden ver como una muestra aleatoria de una distribución normal. La tabla de ANOVA generada (Tabla 17) muestra valores p de cero, por lo que se debe rechazar la hipótesis nula y realizar una prueba de rangos múltiples.

La comparación o prueba de rangos múltiples usado es el método de Tukey, que consiste en comparar las diferencias entre medias muestrales, obteniendo la tabla 18 y 19 y la gráfica 51, en la que se observa que la conversión máxima que se puede alcanzar es del C4 correspondiente al 95% y es diferente a las demás conversiones que estadísticamente se relacionan entre si C1, C2, C3 y los flujos de entrada son distintos entre sí.

### Figura 50

Gráfica de residuos 4 en 1

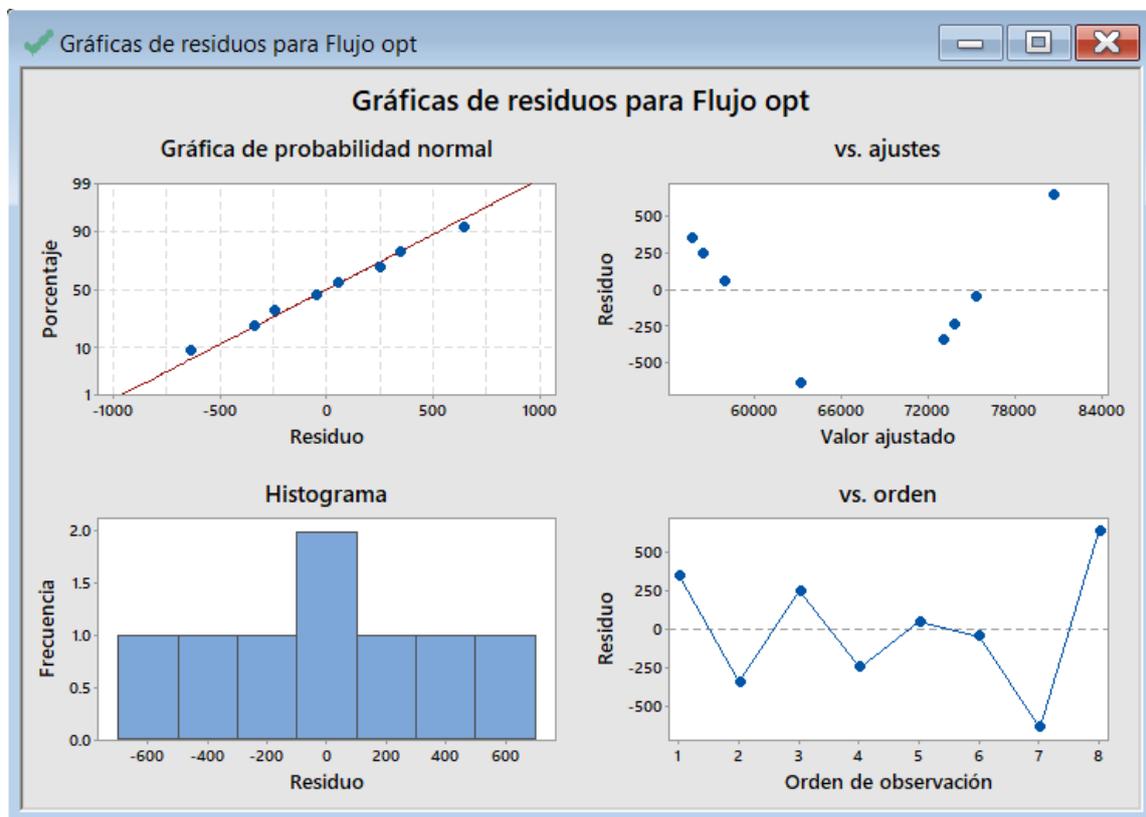


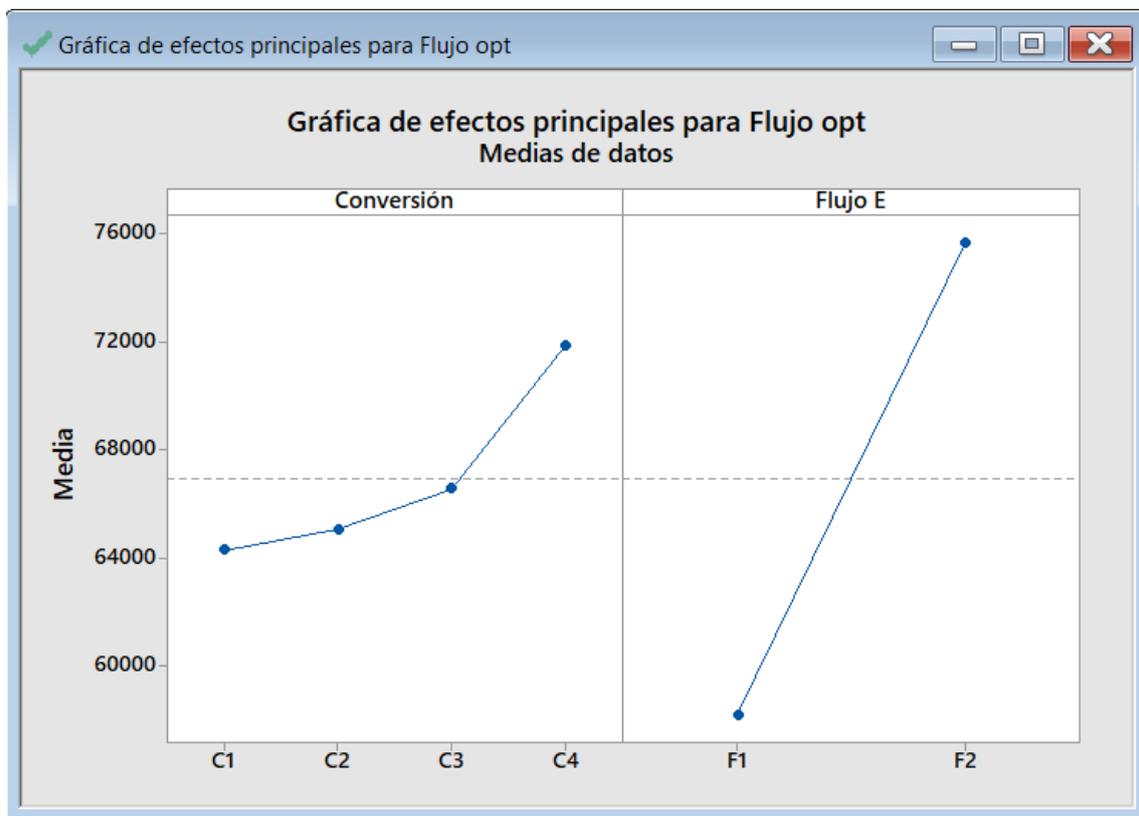
Tabla 18

Análisis de varianza

Fuente	Grados de libertad	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Conversión	3	69799525	23266508	58.78	0.004
Flujo entrada	1	609896301	609896301	1540.77	0.000
Error	3	1187516	395839		
Total	7	680883341			

Figura 51

Gráfica de efectos principales



**Tabla 19**

*Comparación por parejas de Tukey: conversión*

<b>Conversión</b>	<b>N</b>	<b>Media</b>	<b>Agrupación</b>
C4	2	71857.1	A
C3	2	66562.4	B
C2	2	65049.6	B
C1	2	64293.2	B

**Tabla 20**

*Comparación por parejas de Tukey: Flujo de entrada*

<b>Flujo</b>	<b>N</b>	<b>Media</b>	<b>Agrupación</b>
F2	4	75672.0	A
F1	4	58209.2	B

### **Ejecutar un análisis de retro síntesis online con propósito de comparación**

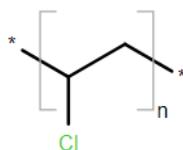
Se realizó tres retrosíntesis en donde, la primera no es confiable, la segunda no es estadísticamente comprobable y la tercera se acerca más a la confiabilidad, se utilizó dos plataformas con el fin de comparación, estas son *SciFinder* e *IBM RXN for Chemistry*.

### **Reporte del producto final**

Mediante la plataforma IBM RXN se ingresó la estructura de la unidad repetitiva con el fin de obtener la retrosíntesis del PVC, la Figura 52 muestra los datos de la reacción con un rendimiento del 100%, la confiabilidad, así como el total de pasos en el proceso.

## Figura 52

Target de la molécula de PVC



### **Búsqueda de una plataforma con el fin de realizar una retro síntesis del producto final**

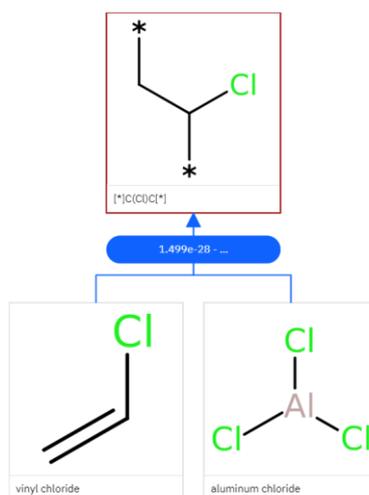
Para la ejecución de la retrosíntesis se eligió la plataforma virtual que tienen como herramienta este proceso para poder verificar los reactivos y productos intermedios de la reacción, este programa online es IBM RXN for Chemistry.

### **Interpretar las reacciones químicas y los mecanismos de reacción mediante la ingeniería inversa**

En la ejecución de la retrosíntesis, se obtuvo un resultado más confiable en el programa en línea IBM RXN for Chemistry, debido a que en este se pudo ingresar el *target* como un polímero, es decir, dibujar la unidad repetitiva entre corchetes con un grado de polimerización  $n$  como se observa en la Figura 52, por lo que se obtuvo como resultado los reactivos de cloruro de vinilo y cloruro de aluminio como se observa en la Figura 54.

## Figura 53

Retrosíntesis de PVC realizada en IBM RXN



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

Con relación a los cálculos realizados en el balance de materia con una conversión de CVM a PVC del 85% se obtuvo los siguientes resultados:

**Tabla 21**

*Datos del reactor obtenidos del balance de masa*

Reactor					
Entradas			Salidas		
Comp	Corrientes	Caudales máxicos (ton/año)	Comp	Corrientes	Caudales máxicos (ton/año)
CVM	1	66437,5	PVC	4	56471,875
Agua	2	8636875	CVM no polimerizado	5	9965,625
Aditivos	3		Agua	6	8636875
TOTAL		8703312,5	TOTAL		8703312,5

**Tabla 22**

*Datos del desgasado obtenidos del balance de masa*

Desgasificador					
Entradas			Salidas		
Comp	Corrientes	Caudales máxicos (ton/año)	Comp	Corrientes	Caudales máxicos (ton/año)
PVC	4	56471,87	PVC	7	56471,87
Agua	6	8636875	Agua	7	8636875
CVM no polimerizado	5	9965,62	CVMdesg	7	4982,81
			CVMresidua	8	4982,81
TOTAL		8703312,5	TOTAL		8703312,5

Tabla 23

Datos del Stripping obtenidos del balance de masa

<b>Stripping</b>					
<b>Entradas</b>			<b>Salidas</b>		
<b>Comp</b>	<b>Corrientes</b>	<b>Caudales másicos (ton/año)</b>	<b>Comp</b>	<b>Corrientes</b>	<b>Caudales másicos (ton/año)</b>
PVC	7	56471,87	PVC	9	56471,87
Agua	7	8636875	Agua	9	8636875
CVMdesg	7	4982,81	CVMresidua	10	4982,81
<b>TOTAL</b>		<b>8698329,68</b>	<b>TOTAL</b>		<b>8698329,68</b>

Tabla 24

Datos del centrifugado obtenidos del balance de masa

<b>Centrifugado</b>					
<b>Entradas</b>			<b>Salidas</b>		
<b>Comp</b>	<b>Corrientes</b>	<b>Caudales másicos (ton/año)</b>	<b>Comp</b>	<b>Corrientes</b>	<b>Caudales másicos (ton/año)</b>
PVC	9	56471,87	PVC húmedo	11	56471,87
Agua	9	8636875	Agua	12	8636875
<b>TOTAL</b>		<b>8693346,87</b>	<b>TOTAL</b>		<b>8693346,87</b>

Tabla 25

Datos del secado obtenidos del balance de masa

<b>Secador</b>					
<b>Entradas</b>			<b>Salidas</b>		
<b>Comp</b>	<b>Corrientes</b>	<b>Caudales másicos (ton/año)</b>	<b>Comp</b>	<b>Corrientes</b>	<b>Caudales másicos (ton/año)</b>
PVC húmedo	11	56471,87	PVC seco	13	55907,15
Aire seco	12	0	Aire húmedo	14	564,71
<b>TOTAL</b>		<b>56471,87</b>	<b>TOTAL</b>		<b>56471,87</b>

Tabla 26

Flujos másicos para la obtención del PVC con una conversión del 95%

<b>Reactor</b>					
<b>Entradas</b>			<b>Salidas</b>		
<b>Comp</b>	<b>Corrientes</b>	<b>Caudales másicos (ton/año)</b>	<b>Comp</b>	<b>Corrientes</b>	<b>Caudales másicos (ton/año)</b>
CVM	1	66437,5	PVC	4	63115,62
Agua	2	8636875	CVM no polimerizado	5	3321,87
Aditivos	3		Agua	6	8636875
<b>TOTAL</b>		<b>8703312,5</b>	<b>TOTAL</b>		<b>8703312,5</b>
<b>Desgasificador</b>					
PVC	4	63115,62	PVC	7	63115,62
Agua	6	8636875	Agua	7	8636875
CVM no polimerizado	5	3321,87	CVMdesg	7	1660,93
			CVMresidua	8	1660,93
<b>TOTAL</b>		<b>8703312,50</b>	<b>TOTAL</b>		<b>8703312,50</b>
<b>Stripping</b>					
PVC	7	63115,62	PVC	9	63115,62
Agua	7	8636875	Agua	9	8636875
CVMdesg	7	1660,93	CVMresidua	10	1660,93
<b>TOTAL</b>		<b>8701651,56</b>	<b>TOTAL</b>		<b>8701651,56</b>
<b>Centrifugado</b>					
			PVC húmedo	11	63115,62
PVC	9	63115,62	Agua	12	8636875
Agua	9	8636875			
<b>TOTAL</b>		<b>8699990,63</b>	<b>TOTAL</b>		<b>8699990,63</b>
<b>Secador</b>					
PVC húmedo	11	63115,625	PVC seco	13	62484,4688
Aire seco	12	0	Aire húmedo	14	631,15625
<b>TOTAL</b>		<b>63115,625</b>	<b>TOTAL</b>		<b>63115,625</b>

## Capítulo V

### Conclusiones y Recomendaciones

#### Conclusiones

- En esta investigación bibliográfica se indagó acerca de todo lo referente al polímero industrial PVC, desde su estructura hasta su proceso de obtención, con sus respectivos equipos, módulos y sus concernientes rendimientos, llevando a la comparación de distintas fuentes bibliográficas referente a la estequiometría empleada en cada proceso de las diferentes patentes, así como de artículos científicos que sirvieron como base para dar una correcta estructura a la síntesis de estos datos obtenidos.
- Se recolectó información necesaria para la ejecución de los balances de masa, encontrando que los diagramas de bloques son similares en la mayoría de fuentes bibliográficas, coincidiendo que el PVC se obtiene generalmente a gran escala mediante la técnica de polimerización por suspensión, misma que forma parte del proceso de crecimiento de la cadena mediante radicales libres, debido a su condición física de agitación mecánica generalmente el agua es utilizada como un solvente al ser un producto abundante y fácil de conseguir, por lo que se abaratan costos en comparación con otras técnicas.
- Se determinó que el proceso de obtención de PVC maneja una buena gestión ambiental debido a su bajo impacto con el medio ambiente, se encontró en patentes que este material cada vez es modificado para ser más estable y su huella de carbono sea menor, debido a que lo hacen más resistente a ciertas condiciones físicas, como la resistencia a los rayos UV, a la abrasión, a altas temperaturas, entre otros, haciendo que este material sea más duradero para evitar su desecho de manera constante.
- Se compararon patentes y artículos científicos, determinando que en la mayoría de los estudios se utilizó como solvente el agua, como agente de transferencia de

cadena aldehídos y etilenos, como agentes de suspensión alcohol polivinílico o celulosas de distintos tipos, como catalizadores peróxidos orgánicos, peroxidicarbonatos, hidroperóxidos y azo compuestos, el CVM en general tiene una conversión del 85 al 95% a PVC, tomando al agente de suspensión al IBA para mejorar el proceso con una conversión de hasta el 95% llegando a obtener un mayor flujo de salida de PVC (62484,468 t/año) en comparación con la conversión del 85% (55907.156 t/año).

- Se recolectó información de las primeras patentes existentes, puesto que en estas se presenta toda la información necesaria para la ejecución de los balances de masa en el presente trabajo como la estequiometría, se encontraron varias pruebas realizadas y recetas de la obtención del polímero en cuestión, las patentes actuales realizan pruebas de carácter físico modificando las propiedades del PVC para darle mayor estabilidad, basadas en antecedentes de patentes de investigaciones previas.
- La técnica estadística análisis de varianza ANOVA muestra la influencia del isobutiraldehído (IBA) en el aumento de la conversión para valores mayores al 85%, en la que según Tukey la conversión máxima que se alcanza es de 95% pero no existe relación alguna con el aumento en los flujos de entrada, es decir, sin importar los flujos de entrada la conversión máxima siempre será del 95%. Con el aumento de la conversión debido al agente IBA, el flujo del producto PVC tiene también un incremento, ampliando los ingresos económicos por concepto de venta en relación al valor monetario que se tiene por el proceso convencional.

## Recomendaciones

- Realizar una investigación más a fondo del tema con relación a la estequiometría, en este caso siendo mejor hacer pruebas experimentales para poder obtener pesos moleculares promedios y ser más exacto en cuanto a estos datos, lo que lleva a un trabajo experimental y no bibliográfico.
- Para futuras investigaciones de este tema se recomienda optimizar el proceso de manera más amplia con la adición de equipos extras o su vez eliminar equipos con el fin de reducir costos de operación o aumentar los mismo con el fin de incrementar la obtención del producto y por ende las ganancias en esta industria de la producción del polímero comercial PVC.
- Utilizar plataformas de retrosíntesis en la carrera de petroquímica, debido a su utilidad para conocer los reactivos que se requeridos para un compuesto que se esté analizando, mediante el software SciFinder se muestra la ruta de síntesis, además de los costos de cada reactivo y producto, con sus respectivas patentes.
- Se recomienda a la Universidad de las Fuerzas Armadas actualizar la licencia con SciFinder debido a que, en el transcurso de la ejecución de este trabajo, ya no se tuvo acceso a esta plataforma, por lo que se optó por utilizar un software alternativo como es IBM RXN que no es tan completo como SciFinder.

## Bibliografía

- Akovali, G. (2012). Plastic materials: polyvinyl chloride (PVC). In *Toxicity of Building Materials* (pp. 23–53). Elsevier. <https://doi.org/10.1533/9780857096357.23>
- Amano, Tadashi, Shimosakunobe, Takatsu-ku, Kawasaki-shi, & Kanagawaken(JP). (1990). *Method for the suspension polymerization of vinyl chloride monomer* (Patent No. EP0433754A1).
- Beltrán, C., & Campoy, M. (2016). *Ingeniería básica de una planta de producción de policloruro de vinilo (PVC) granular*. Universidad de Sevilla.
- Bhatia, S. (2016). Natural polymer drug delivery systems: Nanoparticles, plants, and algae. *Natural Polymer Drug Delivery Systems: Nanoparticles, Plants, and Algae*, 1–225. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-41129-3>
- Biblioteca de la Universidad de Murcia. (2022). *Demostración de la base de datos de química Reaxys*. [https://www.um.es/web/biblioteca/novedades/-/asset\\_publisher/XFPBg3QULTgS/content/id/14006635](https://www.um.es/web/biblioteca/novedades/-/asset_publisher/XFPBg3QULTgS/content/id/14006635)
- Braun, D., Cherdrón, H., Rehahn, M., Ritter, H., & Voit, B. (2013). *Polymer Synthesis: Theory and Practice*. Springer Berlin Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-28980-4>
- Canales, C. (2003). *Guía de mejores técnicas disponibles en España del sector de DCE, CVM y PVC*. <https://prtr-es.es/Data/images//Guía MTD en España del sector de DCE, CVM y PVC-37E0EED6B528E04F.pdf>
- Carraher Jr., C. E. (2003). *Polymer Chemistry* (6th ed.). Marcel Dekker, Inc. <https://doi.org/10.1201/b15405-10>
- Cengel, Y. A., & Boles, M. A. (2014). *Termodinámica* (8th ed.). The McGraw-Hill Companies, Inc.
- Chesler, E. T., Goodman, D., & Lapkin, M. (1973). *Vinyl chloride polymerization using*

*selected amounts of air, oxygen or nitrogen* (Patent No. US4110527).

Corporación Financiera Nacional. (2021, September). *Ficha sectorial. Fabricación de productos de plástico*. <https://www.cfn.fin.ec/wp-content/uploads/downloads/biblioteca/2021/fichas-sectoriales-3-trimestre/Ficha-Sectorial-Fabricacion-de-Productos-de-Plastico.pdf>

Daub, G. W., & Seese, W. S. (2005). *Química* (8th ed.). Pearson Educación.

Ebewele, R. O. (2000). Polymer science and technology. In *Polymer Science and Technology*. CRC Press LLC. [https://doi.org/10.1016/0261-3069\(95\)90127-2](https://doi.org/10.1016/0261-3069(95)90127-2)

Ekos. (2018, March 5). *Producción de plásticos: Un pilar para el encadenamiento productivo*. <https://www.ekosnegocios.com/articulo/produccion-de-plasticos-un-pilar-para-el-encadenamiento-productivo>

Endo, K. (2002). Synthesis and structure of poly(vinyl chloride). *Progress in Polymer Science*, 27(10), 2021–2054. [https://doi.org/10.1016/S0079-6700\(02\)00066-7](https://doi.org/10.1016/S0079-6700(02)00066-7)

Eskilsen, B. (2008). Global PVC markets: threats and opportunities. *Plastics, Additives and Compounding*, 10(6), 28–30. [https://doi.org/10.1016/S1464-391X\(08\)70226-5](https://doi.org/10.1016/S1464-391X(08)70226-5)

Felder, R. M., & Rousseau, R. W. (2003). *Principios elementales de los procesos químicos* (3rd ed.). Editorial Limusa S.A. De C.V.  
<https://books.google.com.ec/books?id=HKmKOWAACAAJ>

Jianhua, N., & Qihua, Z. (2012). *Ultraviolet-proof environmental-friendly polyvinyl chloride (PVC) modified material and preparation method thereof* (Patent No. CN103059466B).

Kochnev, A. M., Stoyanov, O. V., Zaikov, G. E., & Akhmetkhanov, R. M. (2016). Compositional Analysis of Polymers: An Engineering Approach. In *AAP Research Notes on Polymer Engineering Science & Technology*. CRC Press.

Koltzenburg, S., Maskos, M., & Nuyken, O. (2017). *Polymer Chemistry*. Springer.

- Kricheldorf, H. R., Nuyken, O., & Swift, G. (2005). *Handbook of polymer synthesis* (2nd ed.). Marcel Dekker.
- Liu, Y., Zhou, C., Li, F., Liu, H., & Yang, J. (2020). Stocks and flows of polyvinyl chloride (PVC) in China: 1980-2050. *Resources, Conservation and Recycling*, 154(May 2019). <https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2019.104584>
- Marshall, R. A., Smith, E. S., & Cich, F. A. (1978). *Vinyl chloride polymerization method* (Patent No. US4187363A).
- Martyak, & Nicholas, M. (2010). *Process for the polymerization of vinyl chloride* (Patent No. WO2010084130A1).
- Ministerio de Industrias y Productividad. (2015, May). *Industria de transformación de plásticos en Ecuador*. [https://servicios.produccion.gob.ec/siipro/downloads/temporales/21\\_1\\_Industria de transformacion de plasticos en Ecuador.compressed.pdf](https://servicios.produccion.gob.ec/siipro/downloads/temporales/21_1_Industria%20de%20transformacion%20de%20plasticos%20en%20Ecuador.compressed.pdf)
- Murphy, R. M. (2007). *Introducción a los procesos químicos: principios, análisis y síntesis*. McGraw-Hill Interamericana. <https://books.google.com.ec/books?id=x8KrNwAACAAJ>
- Mutha, N. H., Patel, M., & Premnath, V. (2006). Plastics materials flow analysis for India. *Resources, Conservation and Recycling*, 47(3), 222–244. <https://doi.org/10.1016/J.RESCONREC.2005.09.003>
- Nass, L. I. (1992). *Encyclopedia of PVC: Compounding Processes, Product Design, and Specifications* (2nd ed., Vol. 3). CRC Press.
- Nicholas, M., & Martyak. (2010). *Process for the polymerization of vinyl chloride* (Patent No. US8562858B2).
- Nicholson, J. (2017). *The chemistry of polymers* (5th ed.). Royal Society of Chemistry.
- Olatunji, O. (2016). Natural polymers: Industry techniques and applications. *Natural*

*Polymers: Industry Techniques and Applications*, 1–370. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-26414-1>

PSIBERG. (2021, November 22). *Protic vs Aprotic Solvents (with Examples)*.

<https://psiberg.com/protic-vs-aprotic-solvents/>

Rodriguez, F., Cohen, C., Ober, C. K., & Archer, L. A. (2015). *Principles of polymer systems* (6th ed.). CRC Press.

Saeki, Y., & Emura, T. (2002). Technical progresses for PVC production. *Progress in*

*Polymer Science*, 27(10), 2055–2131. [https://doi.org/10.1016/S0079-6700\(02\)00039-4](https://doi.org/10.1016/S0079-6700(02)00039-4)

Seymour, D. C. (1955). *Polymerization of vinyl chloride* (Patent No. US2831843A).

Skoog, D. A., West, D. M., Holler, F. J., & Crouch, S. R. (2015). *Fundamentos de química analítica* (9th ed.). Cengage Learning Editores, S.A.

Solvay. (2014). *Declaración ambiental 2014. Complejo Solvin Martorell* .

<https://docplayer.es/40290713-Complejo-solvin-martorell-informacion-ambiental-del-ano.html>

Toshihiko, N., & Amano, T. (1995). *Vinyl chloride polymerization with carboxylic acid ester of polyol and suspension agents* (Patent No. US5883209A).

Universidad de Córdoba. (2022). *SciFinder-n*. <https://biblioguias.uco.es/scifinder>

Universidad de Oviedo. (2022). *Instituto de Investigación e Innovación Educativa INIE - Indexación*. <https://inie.uniovi.es/aulaabierta/historico>

Watson, I. A., Wang, J., & Nicolaou, C. A. (2019). A retrosynthetic analysis algorithm implementation. *Journal of Cheminformatics*, 11(1), 1–12.

<https://doi.org/10.1186/s13321-018-0323-6>

## Anexos