



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

Cálculo de las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial de tereftalato de polietileno (PET).

Castellano Jácome, Nayeli Stefania

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.

14/08/2022

Latacunga

Reporte de verificación de contenido



Castellanos Nayeli.docx

Scanned on: 1:39 August 14, 2022 UTC



Overall Similarity Score



Results Found



Total Words in Text

Identical Words	277
Words with Minor Changes	0
Paraphrased Words	0
Omitted Words	2439



Firmado electrónicamente por:

**FABIAN
MAURICIO
SANTANA ROMO**

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.

C.C.: 1802925139



Website | Education | Businesses



ESPE

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

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 de tereftalato de polietileno (PET).”*** fue realizado por la señorita **Castellano Jácome, Nayeli Stefania**, 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 de 2022.



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

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.

C.C.: 180292513-9



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, **Castellano Jácome, Nayeli Stefania**, con cedula de ciudadanía N° **0504238841** 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 de tereftalato de polietileno (PET).”*** es de mi autoría y responsabilidad, cumpliendo con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, respetando los derechos intelectuales de terceros y referenciando las citas bibliográficas.

Latacunga, 14 de agosto de 2022.

Una firma manuscrita en tinta azul que parece decir 'N Castellano'.

Castellano Jácome, Nayeli Stefania

C. C.: 0504238841



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, **Castellano Jácome, Nayeli Stefania** con cédula de ciudadanía N° **0504238841** 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 de tereftalato de polietileno (PET).”*** en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de mi autoría son de mi responsabilidad.

Latacunga, 14 de agosto de 2022.

Una firma manuscrita en tinta azul que parece decir 'N. Castellano Jácome', rodeada por un óvalo dibujado a mano.

Castellano Jácome, Nayeli Stefania

C. C.: 0504238841

Departamento de Ciencias de la Energía y mecánica**Carrera de Petroquímica****Dedicatoria**

Esta investigación va dedicada en primer lugar a Dios, a mis padres, hermanos y amigos que me dieron aliento, consejos y fuerza para seguir adelante y no decaer en este camino que he decidido tomar como mi sueño y anhelo que hoy se cumple. El mismo que ha requerido de grandes esfuerzos para poder llegar hasta ahora.

Departamento de Ciencias de la Energía y mecánica

Carrera de Petroquímica

Agradecimientos

Agradezco a Dios por haberme otorgado una familia maravillosa quienes han creído en mí siempre, dándome ejemplo de superación, humildad y sacrificio; enseñándome a valorar todo lo que tengo. Porque han fomentado en mí, el deseo de superación y de triunfo en la vida.

A mis padres, Joaquín y Margoth por su confianza, apoyo emocional y económico, que siempre ha sido incondicional para poder cumplir mis metas, sueños y aspiraciones.

A la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, establecimiento con gran trayectoria, la cual me abrió las puertas para continuar con mi formación académica y posteriormente dar el paso al ámbito profesional.

A mi abuela, quien desea verme realizada y me brinda su apoyo para seguir el camino.

A mis herman@s Gabriel, Johel, Katherine, y José quienes han sido parte de la formación de mi vida con sus consejos, enseñanzas y a mis amigos, quienes he considerado como parte de mi familia y han sido un soporte para no darme por vencida.

A mi docente del trabajo de Unidad de Integración Curricular, Fabián Santana, quien tomó gran responsabilidad y constancia para el desarrollo de esta investigación y nos apoyó a cada uno de sus estudiantes para culminar satisfactoriamente este estudio.

ÍNDICE DE CONTENIDO

Carátula	1
Reporte de verificación de contenido.....	2
Certificación	3
Responsabilidad de autoría	4
Autorización de publicación	5
Dedicatoria	6
Agradecimientos.....	7
Índice de contenido	8
Índice de tablas	14
Índice de figuras	16
Resumen.....	18
Abstract	19
Capítulo I: Generalidades.....	20
Introducción.....	20
Antecedentes.....	21
Planteamiento del problema	22
Justificación e importancia	23
Hipótesis	24
Objetivos.....	24
Objetivo General	24
<i>Objetivos Específicos.....</i>	24
Variables de investigación.....	25

<i>Variables Independientes</i>	25
<i>Variables Dependientes</i>	25
Capítulo II: Fundamentación teórica.....	26
Concepto de polímero.....	26
<i>Copolímeros y Homopolímeros</i>	26
<i>Concepto de macromolécula</i>	26
Clasificaciones polímeros	27
<i>Naturales</i>	27
<i>Sintéticos</i>	27
<i>Termoplásticos</i>	27
<i>Elastómeros</i>	28
<i>Termoestables</i>	28
Mecanismos de polimerización	28
<i>Iniciación</i>	28
<i>Propagación</i>	29
<i>Terminación</i>	29
Cinética de polimerización	30
Reacciones de polimerización.....	30
<i>Polimerización en cadena</i>	30
<i>Polimerización por radicales libres</i>	31
<i>Polimerización por condensación</i>	31
<i>Polimerización catiónica</i>	31
<i>Polimerización aniónica</i>	32

Estructura química de los termoplásticos.....	32
<i>Estructura del tereftalato de polietileno y características</i>	32
<i>Estructura química del tereftalato de polietileno.....</i>	32
Propiedades que presenta el tereftalato de polietileno	33
<i>Viscosidad intrínseca del PET</i>	34
<i>Peso molecular</i>	34
<i>Estereoquímica de polímeros</i>	34
<i>Entrecruzamientos.....</i>	35
<i>Ramificaciones.....</i>	35
<i>Aditivos</i>	35
<i>Solidificación</i>	36
<i>Polímeros semicristalinos.....</i>	36
Propiedades térmicas	36
<i>Temperatura de degradación de los polímeros</i>	36
<i>Conductividad térmica y capacidad calorífica del tereftalato de polietileno</i>	36
<i>Temperatura de fusión de los polímeros</i>	37
<i>Temperatura de transición vítrea.....</i>	37
Proceso de producción de PET	37
<i>Precursores químicos para la elaboración del tereftalato de polietileno</i>	39
<i>Procesos de polimerización del PET.....</i>	39
<i>Estequiometría.....</i>	39
<i>Ecuaciones químicas.....</i>	39
<i>Reacciones de combinación y descomposición</i>	40

<i>Reactivo limitante y en exceso</i>	40
<i>Conversión de una reacción</i>	40
<i>Rendimiento teórico y real de una reacción</i>	40
Capítulo III: Metodología.....	41
Revisión del estado del arte de los reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero en cuestión	41
<i>Elaboración de una lista de bibliografía referente al polímero tereftalato de polietileno</i>	42
<i>Comparación de la información con artículos científicos</i>	42
<i>Contraste de la información obtenida con lo reportado por las industrias nacionales e internacionales</i>	43
<i>Reporte mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización</i>	44
Elaboración de tablas de síntesis estequiométrica para cada tipo de metodología encontrada	45
<i>Contraste de la información reportada en las fuentes bibliográficas</i>	46
<i>Elaboración de tablas con respecto a la estequiometría de los artículos y procesos industriales</i>	48
<i>Reporte mediante tablas para cada reacción de polimerización</i>	49
Ejecución balances de masa estructurando la estequiometría propia de cada reacción	50
<i>Búsqueda de las reacciones de polimerización del tereftalato de polietileno (PET)</i>	52
<i>Elaboración un diagrama de la polimerización del tereftalato de polietileno (PET)</i>	53

<i>Reporte de las condiciones específicas del compuesto (PET).....</i>	<i>54</i>
<i>Ejecución de los cálculos del balance global del proceso</i>	<i>55</i>
<i>Búsqueda de todas las variables faltantes para completar el proceso</i>	<i>56</i>
<i>Mejoramiento de las conversiones del polímero con respecto a las variables reportadas.....</i>	<i>57</i>
<i>Reporte mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización.....</i>	<i>58</i>
Explicación y detalle de los rendimientos reportados en la literatura.....	59
<i>Búsqueda de los rendimientos teóricos del polímero en condiciones industriales.....</i>	<i>60</i>
<i>Reporte de las condiciones de los rendimientos en cuanto a las nuevas técnicas o tecnologías utilizadas en la industria.....</i>	<i>61</i>
<i>Elaboración de una tabla de comparación entre los rendimientos de todo lo reportado.....</i>	<i>62</i>
<i>Reporte mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización.....</i>	<i>63</i>
Ejecución de 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>Interpretación de las reacciones químicas y los mecanismos de reacción mediante la ingeniería inversa.....</i>	<i>67</i>
<i>Reporte mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización.....</i>	<i>68</i>

Capítulo IV: Resultados y discusión.....	69
Revisión del estado del arte de los reactivos, catalizadores, coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero tereftalato de polietileno.....	69
<i>Elaboración de una lista de bibliografía referente al polímero tereftalato de polietileno.....</i>	<i>69</i>
<i>Reporte de la información obtenida de los 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.....	74
<i>Elaboración de la estequiometria de los artículos y procesos industriales</i>	<i>76</i>
<i>Reporte de las condiciones específicas de la producción del compuesto PET.....</i>	<i>91</i>
<i>Ejecución de los cálculos del balance global del proceso</i>	<i>92</i>
<i>Búsqueda de todas las variables faltantes para completar el proceso</i>	<i>93</i>
Ejecución de un análisis de retro síntesis online con propósito de comparación..	108
<i>Reporte del producto final.....</i>	<i>109</i>
<i>Búsqueda de una plataforma con el fin de realizar una retro síntesis del producto final.....</i>	<i>110</i>
<i>Interpretación de las reacciones químicas y los mecanismos de reacción mediante la ingeniería inversa</i>	<i>110</i>
Conclusiones.....	112
Recomendaciones.....	113
Bibliografía.....	114
Anexos.....	117

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1 <i>Propiedades del tereftalato de polietileno</i>	33
Tabla 2 <i>Tabla formato de los parámetros en cada ejemplo</i>	46
Tabla 3 <i>Reactivos principales para producción del tereftalato de polietileno</i>	70
Tabla 4 <i>Catalizadores aplicados en el proceso de producción del tereftalato de polietileno</i>	71
Tabla 5 <i>Aditivos aplicados en el proceso de producción del tereftalato de polietileno</i>	72
Tabla 6 <i>Viscosidad intrínseca para cada ejemplo</i>	74
Tabla 7 <i>Viscosidad intrínseca para cada ejemplo</i>	75
Tabla 8 <i>Balance de masa de la composición del tanque mezclador de la pasta</i>	78
Tabla 9 <i>Conversión de las reacciones en el reactor 1 y 2</i>	79
Tabla 10 <i>Balance de masa en el reactor 1</i>	80
Tabla 11 <i>Balance de masa en el reactor 2</i>	82
Tabla 12 <i>Balance de masa en el reactor de prepolimerización</i>	83
Tabla 13 <i>Balance de masa en el reactor de polimerización</i>	84
Tabla 14 <i>Balance de masa en la primera etapa de cristalización</i>	86
Tabla 15 <i>Balance de masa en la primera etapa de cristalización parte 2</i>	86
Tabla 16 <i>Balance de masa en la cristalización y precrystalización</i>	87
Tabla 17 <i>Balance de masa en la etapa final de cristalización</i>	88
Tabla 18 <i>Condiciones específicas de la producción del compuesto PET</i>	91
Tabla 19 <i>Condiciones específicas de la producción del compuesto PET fase sólida</i>	91
Tabla 20 <i>Balance global del proceso</i>	92
Tabla 21 <i>Condiciones de producción según cada autor</i>	93
Tabla 22 <i>Comparación de precios entre catalizadores</i>	94
Tabla 23 <i>Condiciones de operación para cada autor</i>	95
Tabla 24 <i>Balance de masa de la composición del tanque mezclador de la pasta</i>	95
Tabla 25 <i>Conversión de las reacciones en el reactor 1 y 2</i>	96

Tabla 26	Balance de masa en el reactor 1.....	96
Tabla 27	<i>Balance de masa en el reactor 2.....</i>	97
Tabla 28	<i>Balance del reactor 3 pre-polimerización.....</i>	97
Tabla 29	<i>Balance del reactor 4 polimerización.....</i>	98
Tabla 30	<i>Balance de la primera etapa de cristalización.....</i>	98
Tabla 31	<i>Balance de la primera etapa de cristalización parte 2.....</i>	99
Tabla 32	<i>Balance etapas de cristalización y precrystalización.....</i>	99
Tabla 33	<i>Balance etapa final de cristalización.....</i>	100
Tabla 34	<i>Comparación de la producción entre el estándar y la propuesta.....</i>	100
Tabla 35	<i>Balance de masa de la composición del tanque mezclador de la pasta.....</i>	102
Tabla 36	<i>Conversión de las reacciones en el reactor 1 y 2.....</i>	102
Tabla 37	<i>Balance de masa en el reactor 1.....</i>	103
Tabla 38	<i>Balance de masa en el reactor 2.....</i>	103
Tabla 39	<i>Balance del reactor 3 pre-polimerización.....</i>	104
Tabla 40	<i>Balance del reactor 4 polimerización.....</i>	104
Tabla 41	<i>Balance de la primera etapa de cristalización.....</i>	105
Tabla 42	<i>Balance de la primera etapa de cristalización parte 2.....</i>	105
Tabla 43	<i>Balance etapas de cristalización y precrystalización.....</i>	106
Tabla 44	<i>Balance etapa final de cristalización.....</i>	106
Tabla 45	<i>Comparación de la producción estándar, propuesta 1 y 2.....</i>	107
Tabla 46	<i>Rendimientos según cada autor.....</i>	107

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1	<i>Mecanismo de polimerización, iniciación.</i>	29
Figura 2	<i>Mecanismo de polimerización, propagación.</i>	29
Figura 3	<i>Mecanismo de polimerización, terminación.</i>	30
Figura 4	<i>Proceso de producción del tereftalato de polietileno.</i>	38
Figura 5	<i>Búsqueda de información.</i>	41
Figura 6	<i>Bases de datos de revistas y libros</i>	42
Figura 7	<i>Comparación de información.</i>	43
Figura 8	<i>Contraste de la información con industrias nacionales e internacionales</i>	43
Figura 9	<i>Equipos para la producción de polímeros.</i>	45
Figura 10	<i>Selección de un disolvente de acuerdo con la solubilidad de los reactivos.</i>	47
Figura 11	<i>Escalas de temperatura.</i>	48
Figura 12	<i>Elaboración de la tabla con respecto a la estequiometría.</i>	49
Figura 13	<i>Reporte mediante tablas para cada reacción de polimerización.</i>	50
Figura 14	<i>Balance de una ecuación química.</i>	51
Figura 15	<i>Balance de masa de un proceso.</i>	52
Figura 16	<i>Búsqueda de las reacciones de polimerización.</i>	53
Figura 17	<i>Elaboración un diagrama de la polimerización.</i>	54
Figura 18	<i>Condiciones específicas de la producción del PET.</i>	55
Figura 19	<i>Ejecución de los cálculos del balance global del proceso.</i>	56
Figura 20	<i>Búsqueda de todas las variables para completar el proceso.</i>	57
Figura 21	<i>Contraste de los rendimientos del polímero.</i>	58
Figura 22	<i>Reporte mediante según el tipo polimerización.</i>	59
Figura 23	<i>Explicación y detalle de rendimientos y conversión.</i>	60
Figura 24	<i>Flujo de proceso de producción.</i>	61
Figura 25	<i>Reporte de las condiciones.</i>	62
Figura 26	<i>Reporte de las condiciones.</i>	63
Figura 27	<i>Reporte mediante tablas los datos.</i>	64

Figura 28 <i>Proceso de retro síntesis</i>	64
Figura 29 <i>Páginas web de retro síntesis</i>	65
Figura 30 <i>Páginas web de retro síntesis</i>	66
Figura 31 <i>Búsqueda de una plataforma de retro síntesis</i>	67
Figura 32 <i>Reacción mediante la ingeniería inversa</i>	68
Figura 33 <i>Buscador de patentes</i>	69
Figura 34 <i>Producción del tereftalato de polietileno a nivel mundial</i>	73
Figura 35 <i>Primer paso de mecanismo de reacción</i>	109
Figura 36 <i>Segundo paso de mecanismos de reacción</i>	109
Figura 37 <i>Reporte del producto final</i>	110

Resumen

En el presente trabajo se realizó el balance de masa de una planta de producción de tereftalato de polietileno, para ello se realizó una revisión bibliográfica exhaustiva tomando la información de distintos parámetros con el fin de compararla. La producción de tereftalato de polietileno consiste en dos fases, en la primera fase fundida donde se realiza la reacción de esterificación del monómero, prepolimerización y polimerización en cuatro reactores CSTR conectados en serie y cada uno con distintas especificaciones de presión, temperatura, tiempo, conversión entre otras cosas. De la primera etapa se obtiene tereftalato de polietilenoamorfo en estado fundido que pasa a la siguiente fase donde se realiza un proceso de cristalización, pasa por un proceso de lavado, secado, tamizado e ingreso al primero equipo de precristalización y posteriormente al cristizador donde mediante una corriente de aire, a una temperatura específica se solidifica el polímero y se obtiene tereftalato de polietileno cristalino. Se desarrollo una revisión de precios en diferentes casas comerciales para determinar la variación del precio enfocado al catalizador de antimonio por uno de titanio, para el cálculo teórico del balance de masa, se cambió el flujo de entrada del etilenglicol, es decir, por una mol de ácido tereftálico se utiliza 1,5 moles de etilenglicol con el fin de alcanzar una conversión del 95% de la reacción en el primer reactor donde ocurre la reacción de esterificación, en este mismo reactor se propone un segundo calculo teórico por el complemento de Excel solver donde se plantea el objetivo con respecto a la muestra, los parámetros requeridos y se selecciona una maximización óptima del proceso y de esta manera obtener más producción con la misma cantidad de reactivos, además se presenta una recopilación de información de patentes y artículos científicos sobre catalizadores, reactivos, aditivos utilizados en los procesos de producción de tereftalato de polietileno según cada autor. Finalmente se realiza una retrosíntesis mediante el *software SCI Finder* que predice distintas rutas de producción del polímero con el fin de seleccionar una ruta con el mejor rendimiento.

Palabras clave: conversión del tereftalato de polietileno, rendimiento de tereftalato de polietileno, polímero, tereftalato de polietileno, balance de masa

Abstract

In this work the mass balance of a polyethylene terephthalate production plant was carried out, for this purpose an exhaustive bibliographic review was carried out taking the information of different parameters in order to compare them. The production of polyethylene terephthalate consists of two phases, in the first molten phase where the esterification reaction of the monomer, prepolymerization and polymerization is carried out in four CSTR reactors connected in series and each one with different specifications of pressure, temperature, time, conversion, among other things. From the first stage, polyethylene terephthalate is obtained in a molten state which goes to the next stage where a crystallization process is carried out. It goes through a washing, drying, sieving process and enters the first pre-crystallization equipment and then the crystallizer where by means of an air current, at a specific temperature, the polymer solidifies and crystalline polyethylene terephthalate is obtained. For the theoretical calculation of the mass balance, the input flow of ethylene glycol was changed, i.e., for one mole of terephthalic acid, 1.5 moles of ethylene glycol are used in order to achieve a 95% conversion of the reaction in the first reactor where the esterification reaction occurs, In this same reactor a second theoretical calculation is proposed by the complement of Excel solver where the objective with respect to the sample, the required parameters and an optimal maximization of the process is selected and in this way to obtain more production with the same amount of reagents, in addition a compilation of information of patents and scientific articles on catalysts, reagents, additives used in the processes of production of polyethylene terephthalate according to each author is presented. Finally, a retrosynthesis is performed using the SCI Finder software that predicts different polymer production routes to select a route with the best performance.

Keywords: polyethylene terephthalate conversion, polyethylene terephthalate yields, polymer, polyethylene terephthalate, mass balance

Capítulo I

Generalidades

Introducción

La presente investigación se refiere al tema del cálculo de las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial tereftalato de polietileno, que se puede definir como, la base de cálculo para la producción del polímero comercial donde se plasmara distintas rutas de fabricación, ya que es una materia prima que está presente en las actividades cotidianas de nuestro entorno.

En la industria plástica se tiene una serie de procesos que están relacionados con el tratamiento de la materia para producir un cambio de estado, variación de la composición debido a las reacciones químicas durante el proceso de obtención de tereftalato de polietileno, debido a que es un importante reactivo para la producción de envases y botellas sintéticas (Henley & Rosen, 2012).

El tereftalato de polietileno se produce a partir de etilenglicol, ácido tereftálico purificado y aditivos mediante un proceso de polimerización en estado sólido con el fin de alcanzar el peso molecular requerido, el PET pertenece a la familia de los poliésteres termoplásticos, tiene propiedades de resistencia química, peso ligero, estabilidad y rigidez lo cual le da la ventaja de ser un material flexible para ser utilizado ampliamente en varias aplicaciones (Intratec, 2017).

Antecedentes

Los polímeros a base de tereftalato de polietileno o también llamado Dacron tienen una gran versatilidad en sus aplicaciones desde que se desarrollaron por primera vez en el año de 1940 por los científicos Whinfield y Dickson, al principio lo utilizaron como una fibra sintética debido a la orientación uniaxial de la cadena polimérica, y en el transcurso del tiempo se ha ido desarrollando productos de segunda generación basado en la orientación biaxial de la película amorfa extruida, lo cual contribuye a aumentar la cristalinidad y reducir la tendencia a encogerse cuando se calienta (Weber et al., 1992).

A finales de la década de 1960 Du Pont Rynite introdujo el tereftalato de polietileno nucleado como un isómero que contiene un plastificante, el cual se muestra en forma de relleno de fibra de vidrio siendo un material rígido que a altas temperaturas tiende a una deflexión térmica, es dimensionalmente estable y se moldea por soplado, por ende, su principal aplicación se hizo popular para las botellas (Chawla, 2016).

El tereftalato de polietileno se clasifica en tres categorías como es fibra, botellas y de uso industrial. Se puede utilizar para la producción de los envases de alimentos, bebidas, para la fabricación de componentes electrónicos, también fibras para producción de ropa, por lo general, uno de los usos más comunes del PET es la fabricación de botellas de agua potable y éstas se encuentran regularmente ensuciando el medio acuático, por lo cual, se reciclan para ser utilizadas para fabricar prendas (Crawford & Quinn, 2017).

Planteamiento del problema

En este estudio se plantea realizar una exploración bibliográfica, centrándose en las reacciones de polimerización del polímero comercial tereftalato de polietileno, el mismo que mediante diferentes patentes y rutas de fabricación puede tener diferentes rendimientos.

Con esta información se busca generar los datos necesarios para poder organizar, tabular, procesar, discutir, calcular teóricamente un balance de masa para mejorar la producción y finalmente sacar conclusiones sobre las reacciones específicas del polímero tereftalato de polietileno, de esta forma se podrá generar un resumen enfocándose en las condiciones óptimas de reacción, estequiometría, posibles agentes del tipo catalizador, interpretar los mecanismos de reacción óptimos y que contribuyan a la mejora de la producción del tereftalato de polietileno.

Se busca la implementación del proceso de producción de tereftalato de polietileno, debido a que Ecuador importa todos los insumos para la producción de PET, por lo cual, esta revisión bibliográfica aporta con el balance de masa para determinar un mejoramiento en el proceso, adicional se expone una ruta opcional de retrosíntesis para el proceso.

Justificación e importancia

El tereftalato de polietileno es un precursor químico derivado del petróleo y se procesa en la industria petroquímica, por lo cual, se realiza esta investigación bibliográfica con el fin de recopilar información acerca de proporciones estequiométricas de los reactivos, balances de masa, rendimientos, condiciones de operación y conversiones globales.

El Ecuador actualmente es un exportador de crudo debido a que no posee una industria petroquímica para el procesamiento del mismo, por lo cual, las empresas ecuatorianas tienen la necesidad de importar la mayoría de los precursores, por ejemplo, el tereftalato de polietileno que es la materia prima principal que utiliza fundamentalmente para la producción de botellas, por lo cual, influye en un valor agregado debido al costo de importaciones y transporte.

La asociación de plásticos del Ecuador dirigida por la Escuela Politécnica del Litoral, mantienen una vinculación con la mayoría de empresas del Ecuador que fabrican plásticos a partir de la materia prima previamente importada, debido a que no se fabrica actualmente en el Ecuador ningún precursor a partir del petróleo, por ende, se realiza esta investigación con el fin de aportar el material bibliográfico del cálculo de las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos para la producción del polímero comercial de tereftalato de polietileno, como se indica, el catalizador idóneo y factible económicamente y sus dos revisiones la conversión del proceso, adicionalmente se realiza una retrosíntesis donde nos indica las diferentes rutas de síntesis para la producción de PET.

Hipótesis

Mediante el cálculo de las propiedades estequiométricas, balances másicos, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial tereftalato de polietileno se tiene el propósito de recopilar la información para utilizar en el mejoramiento del proceso de obtención de tereftalato de polietileno, así como en el planteamiento de condiciones para la obtención de nuevas conversiones y rendimientos.

Objetivos

Objetivo General

Calcular las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial tereftalato de polietileno (PET).

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 las tablas de síntesis estequiométrica para cada tipo de metodología encontrada.

Ejecutar balances de masa estructurando la estequiometría propia de cada reacción.

Contrastar los rendimientos teóricos con los reportados en la literatura.

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

Reportar mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización.

Variables de investigación***Variables Independientes***

Rendimientos empleados en la síntesis del polímero comercial Tereftalato de polietileno (PET).

Variables Dependientes

Polímero comercial tereftalato de polietileno (PET).

Capítulo II

Fundamentación teórica

Concepto de polímero

La palabra polímero se deriva del griego Poly y Mers lo cual se traduce en múltiples partes, un polímero es una sustancia natural o sintética la cual está conformada por moléculas. Se le atribuye a su estructura las propiedades únicas que pueden aplicar para distintos usos de la vida cotidiana (Reynoso, 2018).

Un polímero también se lo puede denominar macromolécula debido a que es la unión de varios monómeros, de menor tamaño para formar un polímero con una elevada masa molecular debido a la cantidad de moléculas unidas mediante enlaces químicos de tipo covalentes (Milena, 2019).

Copolímeros y Homopolímeros

Los copolímeros son unidades constitucionales formadas por uno a más monómeros distintos, los cuales están formados por átomos y la unión de monómeros forma una macromolécula, lo contrario de copolímero es un homopolímero que están formado por un compuesto o por una unidad constitucional que se va repitiendo continuamente, por ejemplo, el polietileno, acetato de vinilo, poliestireno entre otros (Pérez, 2004).

Concepto de macromolécula

Las macromoléculas son sustancias químicas que están formadas por átomos iguales o desiguales enlazados entre si mediante enlaces atómicos, por ende, se concatenan múltiples grupos estructurales consecutivamente los cuales están distribuidos en todas las direcciones en el espacio, una macromolécula alcanza un numero de átomos de 1×10^4 a 1×10^8 aproximadamente formando un polímero (Helbing & Burkart, 1985).

Clasificaciones polímeros

Los polímeros pueden clasificarse de acuerdo a su origen de extracción en polímeros naturales y sintéticos, también se clasifican de acuerdo con su comportamiento en termoplásticos, elastómeros y termoestables.

Naturales

Los polímeros naturales se derivaban de materiales que se encuentran en la naturaleza, ya sea de tipo vegetal o animal, por ejemplo, la quitina que se obtiene del exoesqueleto de los cangrejos, paredes celulares de los hongos, la lana, la celulosa para el papel, el caucho natural, y seda para la fabricación de textiles (Besednjak, 2009).

Sintéticos

Los polímeros sintéticos se derivan del petróleo, gas natural y carbón, se obtienen mediante un procesamiento químico en laboratorio o en la industria, es decir, son realizados para cumplir con necesidades previamente planificadas, por ejemplo: el caucho sintético, pinturas, pegamentos, recubrimientos, plásticos, polivinilo, materiales textiles y resinas sintéticas (Besednjak, 2009).

Termoplásticos

Los polímeros termoplásticos tienen la característica principal de fundirse cuando están expuestos a temperaturas altas y endurecerse a bajas temperaturas y nuevamente volver a exponerlos a altas temperaturas sin perder sus propiedades, por lo cual, se utiliza en distintos ámbitos de la industria, su estructura puede ser lineal o ramificada y tiene un alto peso molecular unido mediante fuerzas de Van der Waals, los termoplásticos son cadenas poliméricas que a temperaturas altas tienden a deformarse (Callister, 1996).

Elastómeros

Los polímeros elastómeros cuentan con una estructura flexible debido a que su composición no cuenta con elementos metálicos y las cadenas tienen una distribución de movimiento molecular, además la estructura cuenta con dobles enlaces reticulados en menor extensión con el propósito de proporcionar elongación a la estructura, un polímero elastómero puede ser termoplástico como termoestable (Besednjak, 2009).

Termoestables

Los polímeros termoestables tienen la característica principal que no pueden fluir cuando están sometidos a una temperatura alta, debido a que las moléculas se encuentran entrecruzadas y su estructura está unida mediante enlaces covalentes tipo reticular, se puede mencionar algunos ejemplos de polímeros termoestables como: las resinas de poliéster, resinas fenólicas, entre otras (Besednjak, 2009).

Mecanismos de polimerización

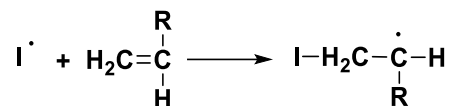
Los mecanismos de polimerización es un proceso químico para formar un polímero a partir de monómeros, este proceso conlleva tres pasos fundamentales como es la iniciación, propagación y terminación.

Iniciación

El primer paso de los mecanismos de polimerización es la iniciación que ocurre mediante la exposición de luz ultravioleta o iniciadores como ácidos de Lewis o reactivos organometálicos con el propósito de adquirir un sitio activo para producir influencia en la velocidad de polimerización, es decir, se forma un radical libre que posteriormente se le adiciona al monómero para obtener una cadena radical (Ebewele, 2000).

Figura 1

Mecanismo de polimerización, iniciación.



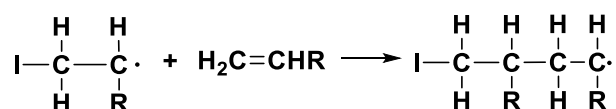
Nota. El gráfico representa la adición del radical indicador a la molécula del monómero de vinilo. Adaptado de *Polymer science and technology*, Tomado de: Robert Oboigbaotor Ebewe, 2000, CRC Press.

Propagación

En el proceso de propagación, cuando tenemos un monómero iniciado se aumenta otras moléculas de monómeros mediante una sucesión rápida, esto sucede mediante la adición de un radical libre al sitio de doble enlace de un monómero, con recuperación de otro radical, por ende, el centro activo se reubica continuamente al final de la cadena polimérica en crecimiento (Ebewe, 2000).

Figura 2

Mecanismo de polimerización, propagación.



Nota. El gráfico representa la propagación del radical en la cadena de crecimiento, el átomo de carbono sustituido es la cabeza y el átomo de carbono no sustituido es la cola. Tomado de: *Polymer science and technology*, por Robert Oboigbaotor Ebewe, 2000, CRC Press.

Terminación

En este punto el proceso de propagación debe concluir, por ende, se destruye el proceso mediante la reacción con otro radical libre. La terminación puede ocurrir por dos

el punto activo al extremo, los monómeros utilizados normalmente deben tener enlaces insaturados o una estructura de anillo con un heteroátomo de oxígeno como, por ejemplo: olefinas, dienos, acetilenos, entre otros, que mediante la polimerizan en cadena para obtener polímeros como el polietileno (Iruin & Fernandez-Berridi, 2019).

Polimerización por radicales libres

En este tipo de polimerización el doble enlace covalente débil se rompe hemolíticamente debido a la reacción con un iniciador de radicales libres, las especies químicas que poseen un número impar de electrones libres como son los peróxidos, hidroperóxidos y los compuestos azoicos que mediante la polimerización por radicales libres se obtendrá compuestos como el poliestireno, poliacetato de vinilo, polietileno ramificado entre otros (Cabildo Miranda et al., 2008).

Polimerización por condensación

También llamada reacción por etapas consiste en la formación de polímeros mediante reacciones químicas intermoleculares en la unidad que se repite, dando como resultado una especie química de bajo peso molecular y como subproducto el agua con un tiempo de velocidad corto, para una molécula con alto peso molecular el tiempo de velocidad es alto, por ejemplo, siliconas, poliésteres, poliamidas, resinas fenólicas, entre otros policondensados (Callister, 1996).

Polimerización catiónica

En la polimerización catiónica se utiliza especies químicas que donan electrones, por ejemplo, el isobutileno y proceso inicia cuando se añade un protón al monómero para establecer un ion carbonio que se une con un contraión, posteriormente comienza la fase de propagación donde se añade un monómero al extremo de la cadena y finalmente la polimerización catiónica termina en un reordenamiento con el fin de ubicar una unidad insaturada al final de la cadena (Ebewele, 2000).

Polimerización aniónica

En la polimerización aniónica se utiliza especies químicas que requieren electrones como el estireno, la reacción inicia con un carbanión al final que se une a un contraión es estado positivo, durante la propagación se añade monómeros por ataque aniónico y termina mediante la adición de una especie química como: dióxido de carbono, metanol, durante este tipo de polimerización se tiene la ventaja de controlar la estructura química y su composición molecular (Ebewele, 2000).

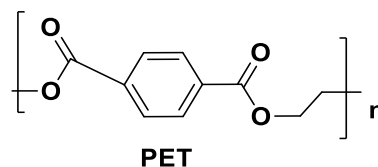
Estructura química de los termoplásticos

Estructura del tereftalato de polietileno y características

El tereftalato de polietileno también denominado politereftalato de etileno, se obtiene mediante la reacción de policondensación entre el ácido tereftálico y el etilenglicol obteniendo un polímero lineal, cuenta con diez átomos de carbono, ocho átomos de hidrógeno y cuatro de nitrógeno, esta cadena se repite muchas veces, las características principales son: bajos costos, fácil procesado y pasividad química (Groover, 1997).

Figura 3

Estructura química del tereftalato de polietileno.



Nota. El gráfico representa la estructura del tereftalato de polietileno. Tomado de *Fundamentos de manufactura moderna: Materiales, procesos y sistemas*, por M. P. Groover, 1997, Pearson Educación.

Tabla 1

Propiedades del tereftalato de polietileno.

Polímero representativo	Tereftalato de polietileno ($C_8H_4O_4$)_n
Símbolo	PET
Método de polimerización	Por etapas (Condensación)
Grado de cristalinidad	De amorfo a 60% de cristalinidad
Módulo de elasticidad	325.000 lb/pulg ² (2300 MPa)
Elongación	200%
Temperatura de transición vítrea	158 °F (70 °C)
Temperatura de fusión	509 °F (265 °C)

Nota. Esta tabla muestra las propiedades químicas correspondientes al tereftalato de polietileno.

Propiedades que presenta el tereftalato de polietileno

Las características del PET se diferencian de acuerdo con el peso molecular, por ejemplo, los que presentan menor peso molecular se denominan grado fibra, con un peso molecular medio se denomina grado película y con un alto peso molecular se denomina grado ingeniería (Canale, 2021).

- Liviano
- Cristalizable
- Alta resistencia al desgaste
- Buena relación costo desempeño
- Buen coeficiente de deslizamiento
- Buena resistencia química y térmica
- Transparencia y brillo con efecto lupa
- Número uno clasificado como reciclable

- Esterilizable por rayos gama y óxido de etileno
- Aprobado para el uso en productos alimenticios
- Apto para la producción de botellas, laminas, planchas y piezas
- Excelentes propiedades mecánicas para el proceso por soplado, inyección y extrusión.

Viscosidad intrínseca del PET

La viscosidad intrínseca es una unidad de medida que determina el volumen que ocupa una molécula con respecto al peso, es decir, a mayor longitud de la cadena polimérica se genera mayores enredos aumentando la viscosidad, por ende, se puede controlar la viscosidad en la etapa de policondensación la y se mide en unidades de decilitros por gramo (Ji, 2013).

La viscosidad intrínseca, es dependiente de la longitud de su cadena polimérica. Por lo cual, cuanto más larga sea la cadena polimérica, la rigidez aumentara en el material al igual que la viscosidad intrínseca. La viscosidad intrínseca del PET de uso general es de $0,8 \pm 0,02$ dl/g que corresponde aproximadamente a 125 unidades repetidas por molécula y un peso aproximado de 24000 g/mol. (García & Naranjo, 2017).

Peso molecular

Los termoplásticos están constituidos por cadenas de polímeros cortas o extensas y dependiendo de la longitud del polímero se determina el grado de polimerización y peso molecular promedio, el cual se determina según la cantidad de cadenas compuestas por átomos con su correspondiente peso atómico expresado en masa y en unidades de gramo sobre mol (Hermida, 2011).

Estereoquímica de polímeros

También denominado tacticidad, nos muestra la orientación en el espacio de los grupos funcionales, la distribución en el espacio se puede clasificar en: asimétricos cuando

los cuatro grupos son distintos, un polímero isotáctico cuando los grupos funcionales están ubicados de manera semejante, un polímero sindiotácticos es cuando los grupos funcionales están ubicados alternativamente y un polímero atáctico cuando los grupos funcionales se encuentran ubicados al azar (Hermida, 2011).

Entrecruzamientos

Los entrecruzamientos de las cadenas en un polímero suceden cuando los enlaces covalentes se unen entre sí para aportar con una característica fundamental de imposibilitar la deformación plástica de los elastómeros, aumenta la temperatura de transición vítrea, resistencia a la tracción, aumenta el peso molecular del polímero, tenacidad y duración de los elastómeros (Hermida, 2011).

Ramificaciones

Las ramificaciones de la cadena polimérica pueden ser cortas y largas dependiendo de esto se le atribuye sus propiedades, por ejemplo: en una cadena de ramificaciones cortas y aleatorias tiene una menor resistencia debida a la perturbación estructural, se reduce el nivel de cristalización, en cambio una cadena de ramificaciones largas tiene mayor resistencia, tenacidad y mayor temperatura de transición vítrea (Hermida, 2011).

Aditivos

Los polímeros termoplásticos requieren se ciertos aditivos de acuerdo al producto que se va a producir para perfeccionar las propiedades y mejorar su utilidad, dentro de los aditivos más comunes tenemos: pigmentos, estabilizantes, agentes antiestáticos, ignífugos o retardantes de la combustión o llama, lubricantes, colorantes, plastificantes y agentes espumantes (Yúfera, 1995).

Solidificación

Un termoplástico cambia de estado líquido a sólido con facilidad cuando dos cadenas de polímeros se alinean muy cercana lo suficiente mediante la actuación de fuerzas de Van der Waals como resultado de movimientos de los electrones para la formación de cristales en forma de láminas, por ejemplo la esferulita la cual es el resultado de la agrupación de varias cadenas con distintas orientaciones (Hermida, 2011).

Polímeros semicristalinos

Cuando un polímero se va enfriando se observa dos regiones la parte amorfa donde las cadenas poliméricas se distribuyen indistintamente en el espacio y la parte cristalina donde las cadenas se ubican de manera ordenada. Debido al cambio de estado de líquido ha sólido el volumen específico va bajando debido al empaquetamiento de las cadenas poliméricas (Ege, 1998).

Propiedades térmicas

Temperatura de degradación de los polímeros

La exposición de un polímero por encima de la temperatura de degradación provoca la fractura de los enlaces covalentes de los átomos como iones libres que conforman una macromolécula, perdiendo peso molecular y terminar con su vida útil, existen dos mecanismos de degradación térmica uno reversible que suele llegar hasta un ablandamiento del polímero y el cambio químico irreversible (Aldabe & Aramendia, 2004).

Conductividad térmica y capacidad calorífica del tereftalato de polietileno

La determinación de la conductividad térmica del tereftalato de polietileno mediante la ley de Fourier y el uso de la simulación térmica con análisis de infinito se tiene un valor de aproximadamente $0,3 \text{ W / mK}$. La capacidad calorífica se define como la cantidad de energía que necesita un proceso y el cambio de temperatura que experimenta dicho

proceso, el tereftalato de polietileno tiene una capacidad calorífica de aproximadamente de 1250 J / g K (Valenzuela, 2020).

Temperatura de fusión de los polímeros

La temperatura de fusión (T_M) nos indica un equilibrio del polímero entre el volumen cristalino y su estado fundido, es decir, la temperatura por debajo de la cual un termoplástico alcanza la zona en que las cadenas se organizan para establecer las regiones cristalinas del polímero, y esto sucede cuando la energía libre de Gibbs es cero, mientras que el peso molecular del polímero se considera independiente (Hermida, 2011).

Temperatura de transición vítrea

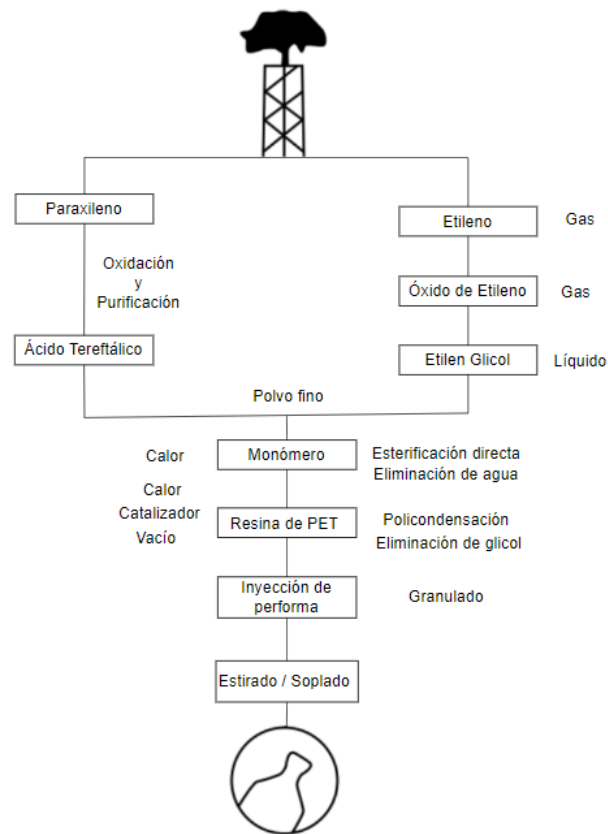
La temperatura de transición vítrea (T_G) indica la transición de un estado elastomérico a un estado vítreo, es decir, pasa de un estado dúctil a frágil y esto tiende a cambiar mediante el grado de ramificación o entrecruzamiento, la temperatura de transición vítrea tiene un coeficiente de baja expansión volumétrica lo cual ocurre en polímeros termoplásticos pero no en polímeros termoestables (Seymour & Carraher, 2021).

Proceso de producción de PET

La producción del PET se realiza a partir de Ácido Tereftálico y Etilenglicol que son reactivos obtenidos del petróleo o gas natural como se indica en la siguiente Figura 4.

Figura 4

Proceso de producción del tereftalato de polietileno.



Nota. El grafico representa la producción del tereftalato de polietileno. Tomado de *Manual de Materiales para la Sustentabilidad* por G. Canale, 2021, Nobuko.

Refinación del petróleo

La refinación del petróleo se realiza con el fin de darle un valor agregado al petróleo mediante la separación de: las fracciones ligeras que tienen menor peso molecular como es el gas licuado de petróleo hasta fracciones pesadas con altos pesos moleculares como son los asfaltos y coque, por ende, mediante la refinación del petróleo se obtiene los precursores bases como son: paraxileno, ácido tereftálico, etileno, óxido de etileno y etilenglicol que son utilizados para la producción de PET (Romo & Romo, 2016).

Precursores químicos para la elaboración del tereftalato de polietileno

Para la elaboración del tereftalato de polietileno, el primer paso es la síntesis del etileno para obtener etilenglicol que reacciona con oxígeno y un catalizador de plata, posteriormente el para-xileno reacciona para producir ácido tereftálico seguidamente pasa a un proceso de esterificación obteniendo tereftalato de dimetilo y finalmente pasa al proceso de polimerización hasta la formación de PET y agua (Rodríguez, 2014).

Procesos de polimerización del PET

El proceso de polimerización consiste en la reacción de un compuesto con dos ácidos como por ejemplo el ácido tereftálico, el cual, posteriormente se esterifica con los dos alcoholes que posee el compuesto etilenglicol, por lo cual, la presencia de los grupos funcionales en la molécula ayuda a la unión con otras cadenas y así extender la longitud del polímero PET, el proceso se realiza en tres etapas que son: pre-polimerización policondensación y polimerización en estado sólido (Romão et al., 2009).

Estequiometría

La estequiometría de una reacción es una relación que se obtiene mediante los coeficientes numéricos de una ecuación química o también denominados cocientes estequiométricos los cuales permiten el cálculo de las moles de una sustancia con relación a los moles de otra sustancia que intervienen en una ecuación química, la base de cálculo se puede escoger en el sistema inglés, internacional, entre otros (Himmelblau, 1997).

Ecuaciones químicas

Una reacción química se representa mediante una ecuación de forma clara y precisa, esta ecuación tiene dos componentes separados mediante una flecha la cual indica si es una reacción reversible, irreversible el sentido de la flecha muestra que produce, la parte izquierda de la ecuación representa los reactivos y la parte derecha los productos, el signo más que se encuentra indica que reacciona con que compuesto (Brown et al., 2004).

Reacciones de combinación y descomposición

Una reacción química de combinación es cuando varias sustancias reaccionan entre si para formar un producto, por ejemplo, el magnesio metálico más aire producen óxido de magnesio, a diferencia de las reacciones de descomposición una sustancia se separa en dos sustancias distintas, por ejemplo, el carbonato metálico cuando se expone a temperatura se descompone en óxido metálico y dióxido de carbono (Brown et al., 2004).

Reactivo limitante y en exceso

El reactivo limitante se lo identifica en una reacción química cuando uno de los reactivos se consume antes que los demás, por ende, la reacción no continua es decir finaliza dejando reactivos en exceso o sobrantes, por lo general un reactivo limitante es el que contiene la menor cantidad de moles en la reacción, pero esto no siempre se cumple por lo cual se debe determinar mediante un balance de masa (Brown et al., 2004).

Conversión de una reacción

La conversión de una reacción puede suceder en distintos porcentajes de acuerdo con factores como el equilibrio en las masas reaccionantes, tiempo, cuando existe un exceso de reactivos la conversión alcanza el cien por ciento, es decir, los productos se obtienen directamente, cuando la conversión no es total nos indica que el producto se obtienen con una cantidad mínima de los reactivos (Hougen & Ragatz, 1982).

Rendimiento teórico y real de una reacción

Un rendimiento teórico se calcula estequiométricamente a diferencia del rendimiento real se determina mediante la experimentación, es decir, es el producto que se obtiene cuando sucede la reacción, influye ciertos parámetros como el grado de reversibilidad de la reacción, las condiciones ambientales, método de recuperación del producto, por ejemplo, separación, purificación, destilación y extracción entre otros (Álvarez & Picado, 2008).

Capítulo III

Metodología

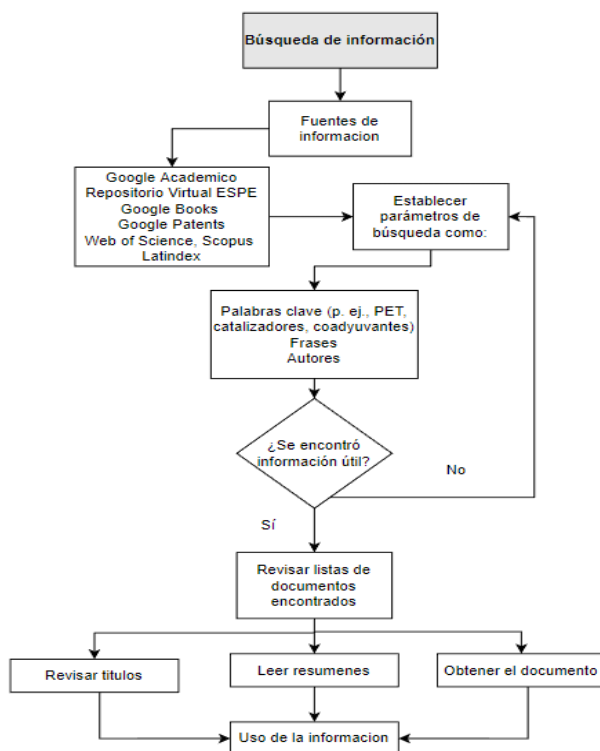
Revisión del estado del arte de los reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero en cuestión

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.

Se realizó la búsqueda y compilación de información, para lo cual, 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 polímero PET en la industria.

Figura 5

Búsqueda de información.



Elaboración de una lista de bibliografía referente al polímero tereftalato de polietileno

Se realizó la lista de contenido bibliográfico donde se estructuró con respecto a información importante sobre el polímero PET, en el que se constituyen datos relacionados a los reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero PET. 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, algunos ejemplos se pueden visualizar en la Figura 5.

Figura 6

Bases de datos de revistas y libros.



Nota. El gráfico representa las bases de datos de revistas y libros que se utilizó para la revisión bibliográfica. Tomado de *Biblioteca Virtual UNIR | Universidad Internacional de La Rioja*. Recuperado 15 de junio de 2022.

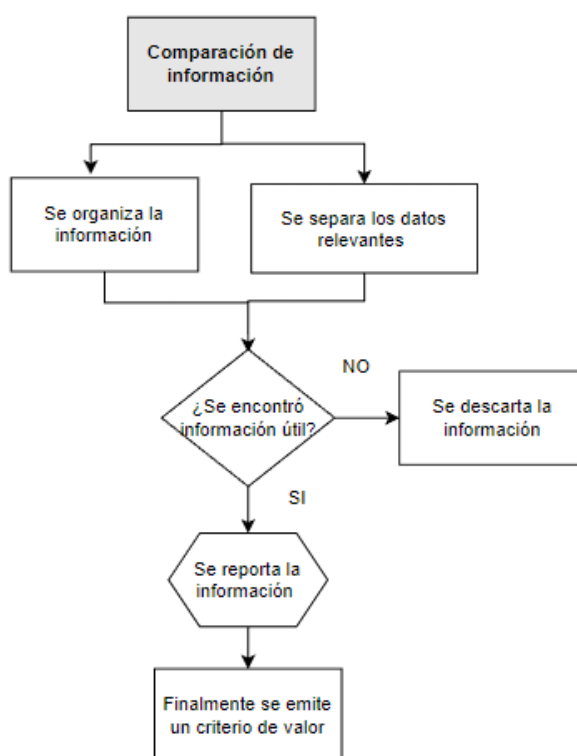
Comparación de la información con artículos científicos

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 polímero PET como se muestra en la figura 6.

El reporte de datos se inició 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. De tal forma 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 teóricas de las reacciones químicas, mismo que cuenta con una sustentación documentada.

Figura 7

Comparación de información.



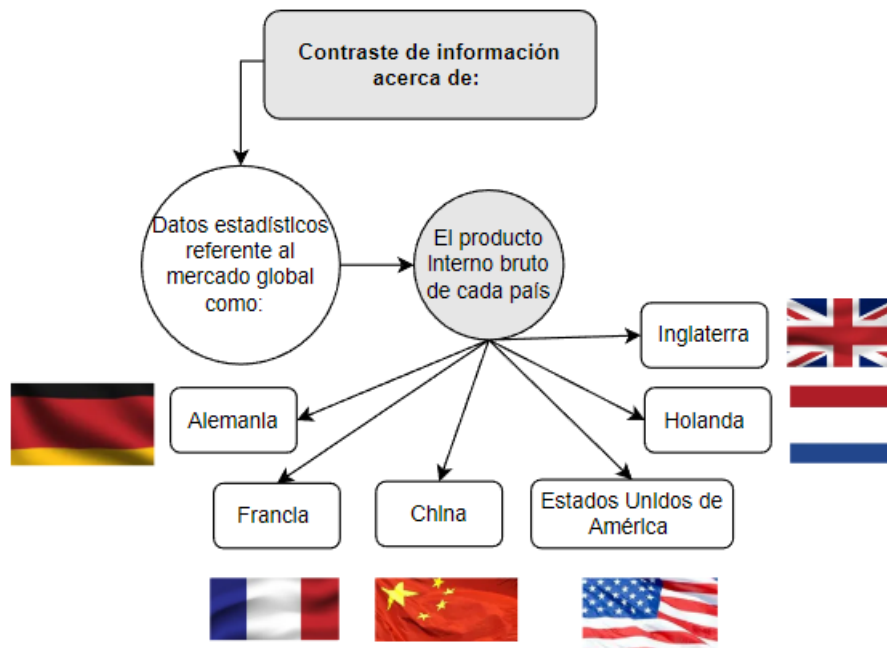
Contraste de la información obtenida con lo reportado por las industrias nacionales e internacionales

Se logró contrastar la situación actual de Ecuador con respecto al uso y fabricación del polímero PET en comparación con el ámbito internacional, se investigaron datos

estadísticos referentes al a 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 Producto Interno Bruto PIB como se indica en el la Figura 7 y la tecnología disponible en cuanto a procesos de producción industrializada de polímeros como se indica en la Figura 8.

Figura 8

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



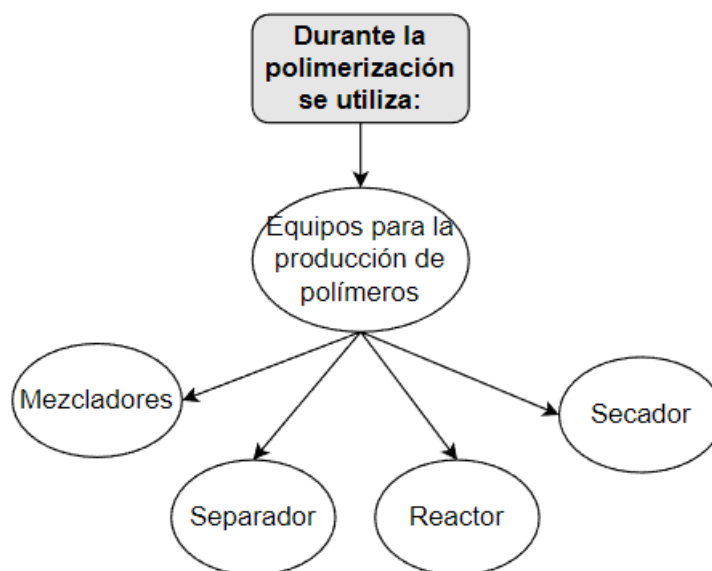
Reporte mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización

La información se presentó de forma secuencial y ordenada mediante el uso de tablas. En cuanto a los procesos industrializados se vieron reflejados en esquemas y diagramas de flujo, por otra parte, se especificó el tipo de maquinaria o equipos esenciales como se muestra en la figura 8 y posteriormente se que ilustraron mediante imágenes. En

cuanto a la representación de ecuaciones y modelos matemáticos, se mostrarán de forma sucesiva con su respectiva numeración.

Figura 9

Equipos para la producción de polímeros.



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 PET, para lo cual se agrupo y se determinó las variaciones existentes significativas las cuales se modificó de acuerdo a cada fuente entre los métodos aplicados en las tablas de acuerdo a las especificaciones en cada ejemplo y se obtuvo un resultado de calidad y favorable en tiempos y costos de producción como se observa en la tabla 2.

Elaboración de una tabla formato

Tabla 2

Tabla formato para la identificación del parámetro a analizar.

Parámetro	Ejemplo 1	Ejemplo 2	Ejemplo 3	Ejemplo 4	Ejemplo 5
Tipo de catalizador	-	-	-	-	-
Disolvente	-	-	-	-	-
Relación molar	-	-	-	-	-
Temperatura	-	-	-	-	-
Tiempo	-	-	-	-	-
Densidad	-	-	-	-	-
Estequiometría	-	-	-	-	-
Cantidad de moles	-	-	-	-	-
Reactivo limitante	-	-	-	-	-
Reactivo en exceso	-	-	-	-	-
Equipos	-	-	-	-	-
Viscosidad intrínseca	-	-	-	-	-
Conversiones	-	-	-	-	-
Rendimientos	-	-	-	-	-

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 como se muestra en la figura 9 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.

Figura 10

Selección de un disolvente de acuerdo con la solubilidad de los reactivos.

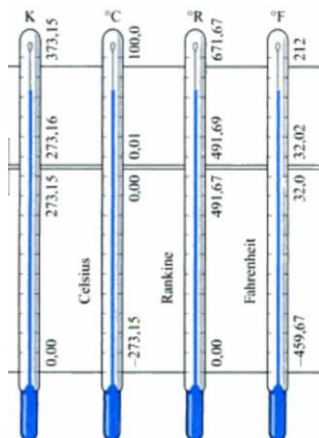


Nota. El gráfico representa la selección de un disolvente de acuerdo con la solubilidad de los. Tomado de: *Principios de química: Los caminos del descubrimiento*, por P. W. Atkins & Jones, 2006, Ed. Médica Panamericana.

Con respecto a la temperatura se determinó mediante una revisión bibliográfica que punto de referencia se toma en las distintas escalas de temperatura como: Kelvin, Celsius, Fahrenheit y Rankine, para escalas de temperatura inusuales como: Réaumur, Delisle 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 11

Escalas de temperatura.



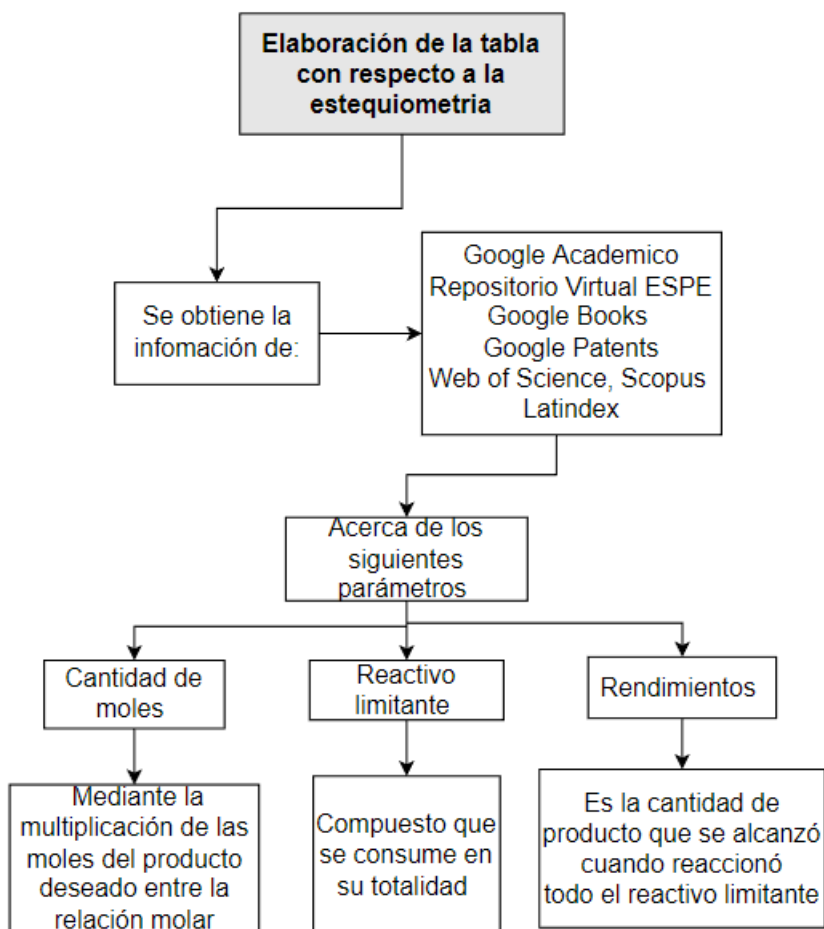
Nota. En el gráfico se representa las escalas de temperatura en los sistemas más utilizados como son: Kelvin, Celcius, Rankine y Fahrenheit. Tomado de *Fundamentos de termodinámica técnica*, por (Moran & Shapiro, 2004), Reverte.

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

Con respecto a la estequiometría de la reacción 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 identifico como el compuesto que se consume en su totalidad y viceversa el reactivo en exceso y se calculó mediante la ecuación estequiométricamente 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 como se muestra en el siguiente en la Figura 11 y durante la elaboración del polímero comercial PET se utiliza varios equipos.

Figura 12

Elaboración de la tabla con respecto a la estequiometría.

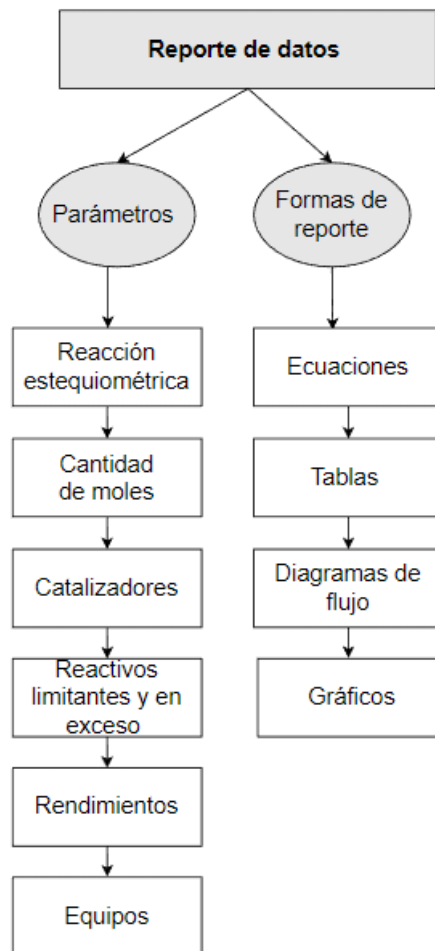


Reporte mediante tablas para cada reacción de polimerización

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.

Figura 13

Reporte mediante tablas para cada reacción de polimerización.



Ejecución balances de masa estructurando la estequiometría 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 (Himmelblau, 1997).

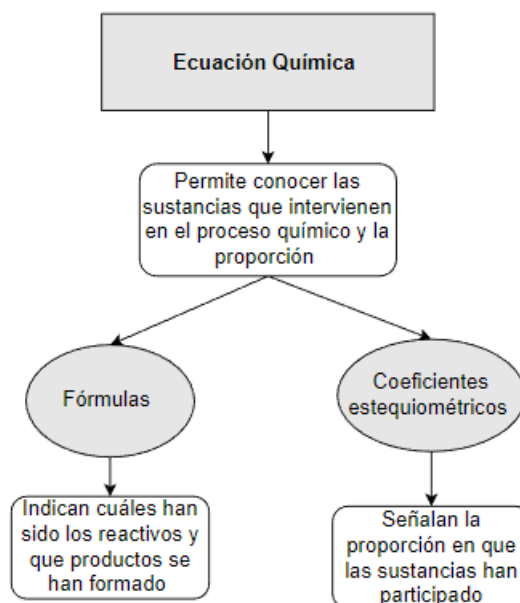
Se desarrollo cálculos donde fue indispensable recolectar información de las cantidades o flujos, tanto de entrada como de salida que intervienen en el proceso, los cuales pueden estar expresados en cantidades de: masa, moles o en volumen. Así como

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 ecuación química 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 como se muestra en la Figura 13, teniendo en cuenta términos como reactivo limitante, reactivo en exceso, coeficiente y cociente estequiométrico.

Figura 14

Balance de una ecuación química.



Los procesos de polimerización se efectuaron bajo el análisis de balance de masa con reacción química, la ecuación que rige a este balance y está dado por:

$$E - S + G - C = A$$

Donde:

E: Entrada del componente

S: Salida del componente

G: Generación

C: Consumo

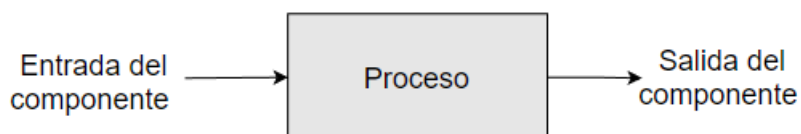
A: Acumulación

En la mayoría de los procesos donde intervinieron 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 en ciertas partes del proceso para minimizar la complejidad de los procesos, todo esto con el fin de obtener corrientes de entrada y salida más sencillos y se pudo realizar el análisis completo del balance de masa en el proceso de polimerización como se indica en la Figura 14.

Figura 15

Balance de masa de un proceso

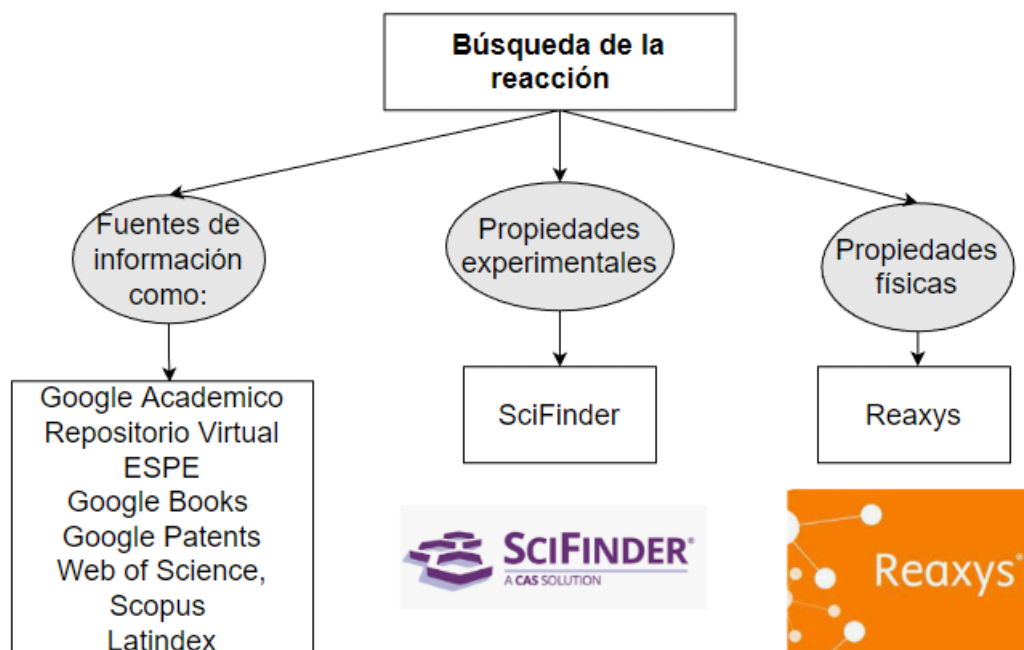


Búsqueda de las reacciones de polimerización del tereftalato de polietileno (PET)

Se buscó y reporto todas las reacciones químicas inmiscuidas en el proceso de polimerización del polímero PET, 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* y *SciFinder - CAS*, como se muestra en la figura 16 las cuales son herramientas que nos facilitaron la búsqueda de estructuras, compuestos, propiedades sustancias y reacciones químicas de los diferentes procesos de polimerización.

Figura 16

Búsqueda de las reacciones de polimerización.

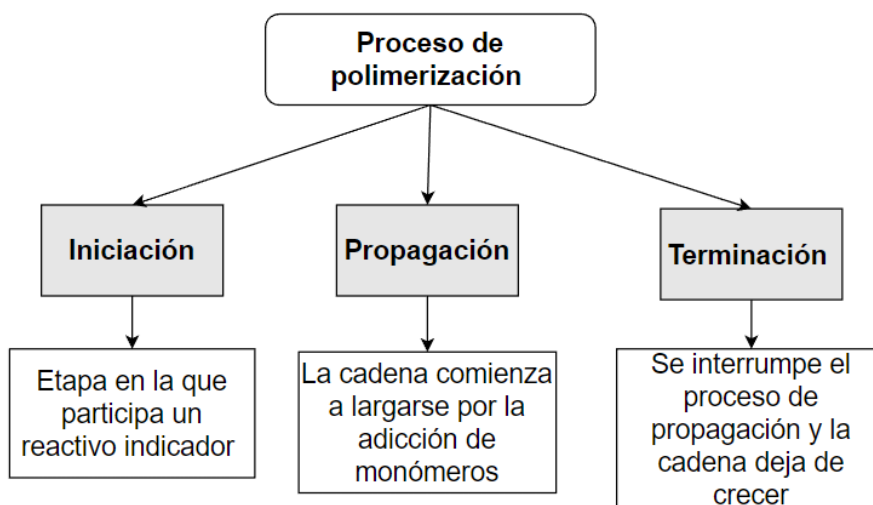


Elaboración un diagrama de la polimerización del tereftalato de polietileno (PET)

De acuerdo a la investigación bibliográfica correspondiente a las vías de fabricación del polímero PET por las diferentes patentes comerciales, se procedió a la elaboración de un diagrama completo del proceso; teniendo 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 como se muestra en la Figura 16 donde se detallaron las condiciones iniciales, finales y todas las variables correspondientes a cada proceso.

Figura 17

Elaboración un diagrama de la polimerización.

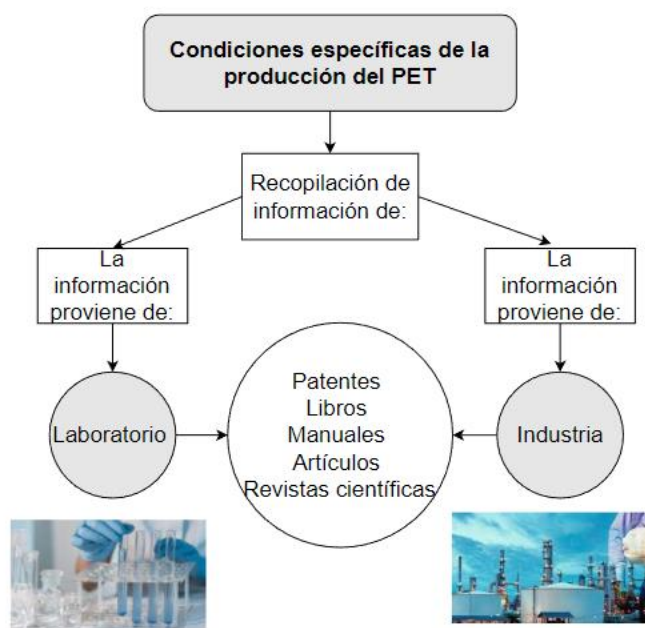


Reporte de las condiciones específicas del compuesto (PET)

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 PET, tomando en cuenta si el proceso se desarrolló en el laboratorio, de manera artesanal o de manera industrial como se muestra en la Figura 17, además se detallará si los equipos utilizados son de uso general o equipos específicos en hojas guías como *MERK*, *SIGMA* y casas comerciales.

Figura 18

Condiciones específicas de la producción del PET.

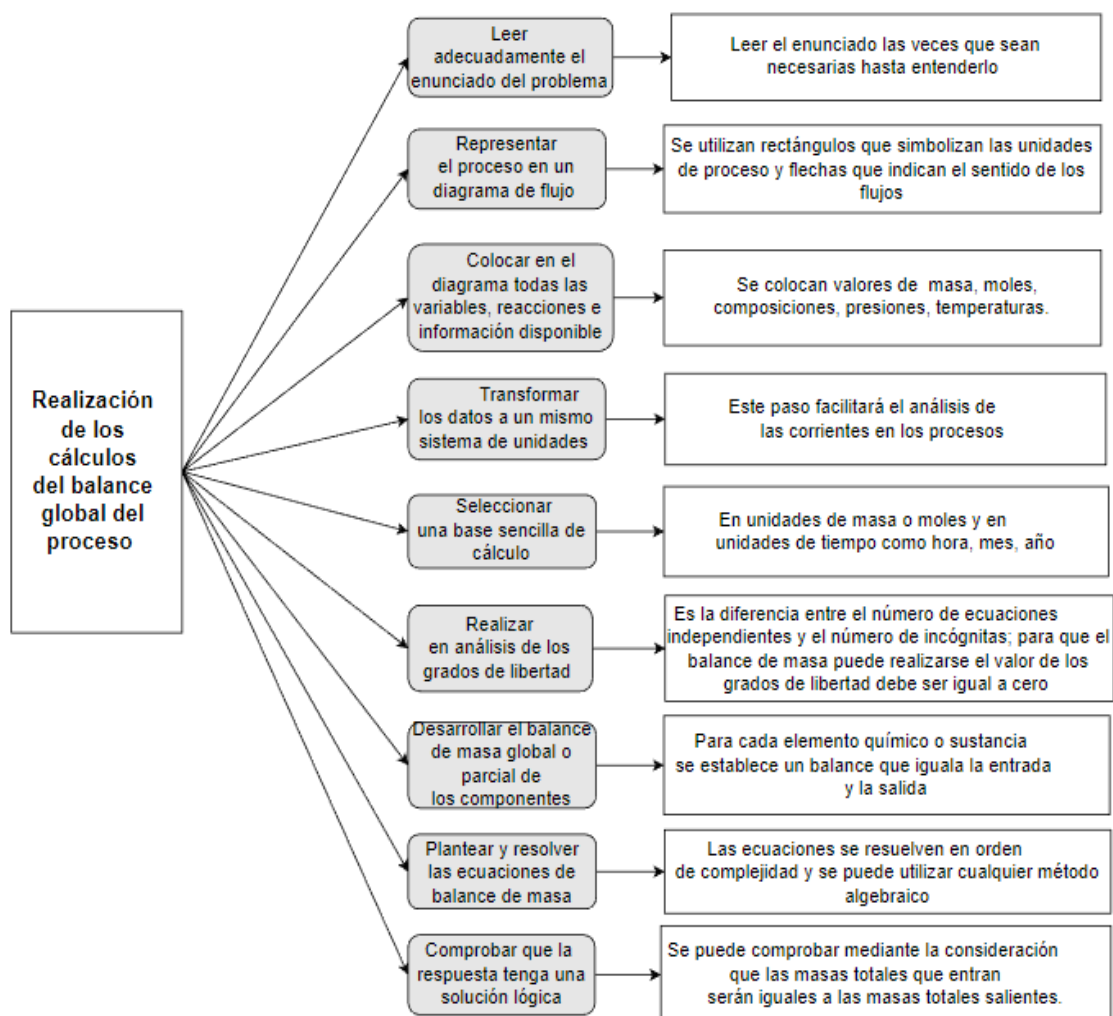


Ejecución de los cálculos del balance global del proceso

Se realizó el cálculo del balance global donde se tomó en cuenta el 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 PET, 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 global, balance para cada reactivo, balance para cada producto y balance para cada átomo que interviene en la reacción como se muestra en la Figura 19.

Figura 19

Ejecución de los cálculos del balance global del proceso.



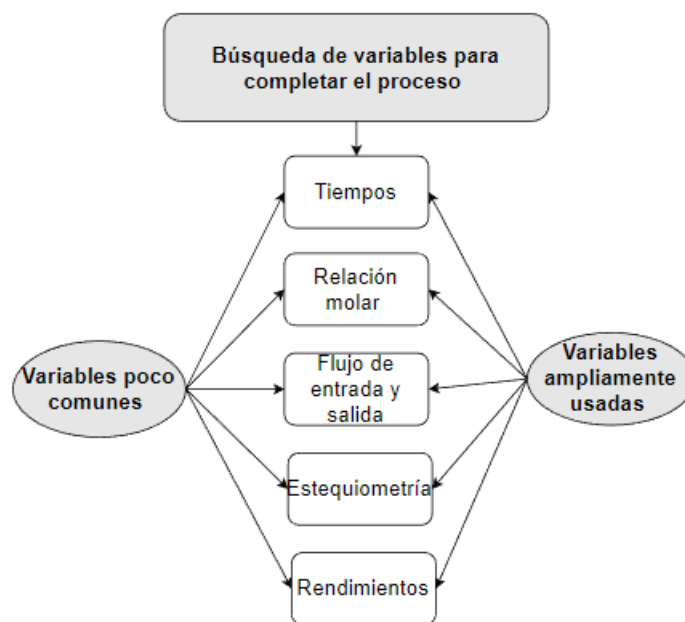
Búsqueda de todas las variables faltantes para completar el proceso

En contraste a las variables reportadas en la fabricación del polímero PET 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 como se observa en la Figura 19.

Figura 20

Búsqueda de todas las variables para completar el proceso.

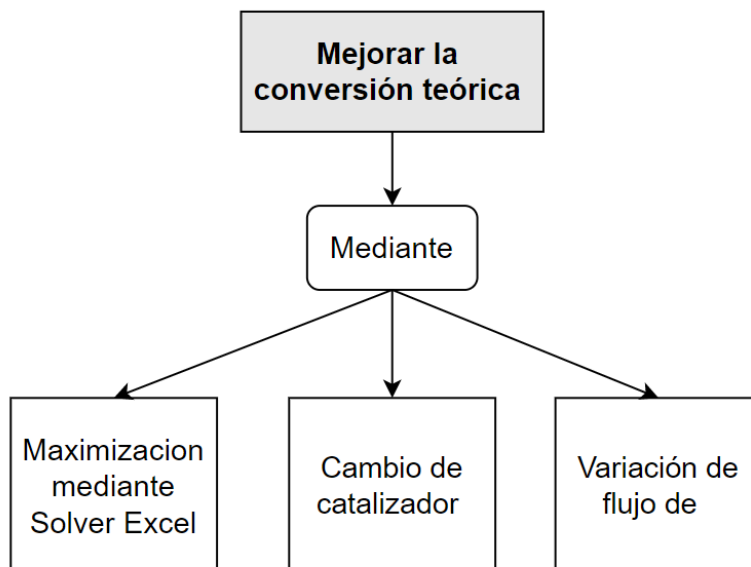


Mejoramiento de las conversiones del polímero con respecto a las variables reportadas

Posteriormente se unificó las variables tanto las reportadas como las propuestas, todo aquello que genero una mejora en la conversión se comparó con la bibliografía revisada, luego de eso se incluyó las variables más actuales, las cuales pueden producir una condición factible para la conversión, aditivos, estequiometría, catalizadores y rendimientos, para hacer una propuesta de mejora para el proceso, con el objetivo de obtener el polímero comercial tereftalato de polietileno disminuyendo los costos de manufactura, costos de mantenimiento y aumentando el tiempo de actividad mejorando la productividad en el proceso, de tal manera se realizó el reporte de los rendimientos mediante tablas de los datos obtenidos para cada reacción de polimerización de manera teórica como se muestra en la Figura 21.

Figura 21

Optimización de rendimientos del polímero.

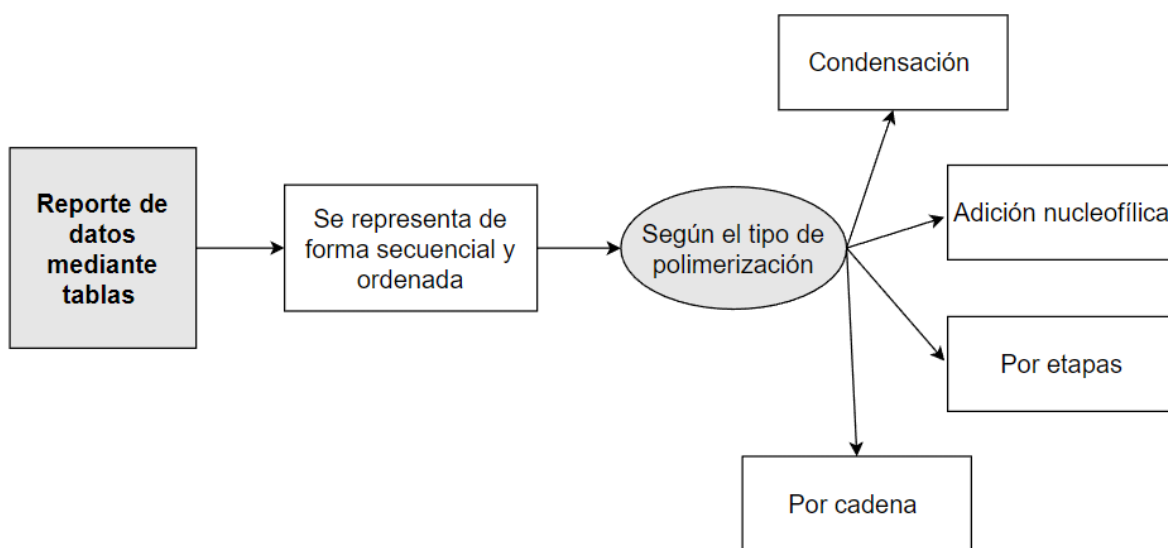


Reporte mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización

En base a la ruta seleccionada se presentará la información de las reacciones empleadas para sintetizar el polímero en cuestión 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, las reacciones de polimerización pueden ser por condensación, adición nucleofílica, por etapas, en cadena como se muestra en la Figura 22.

Figura 22

Reporte mediante según el tipo polimerización.

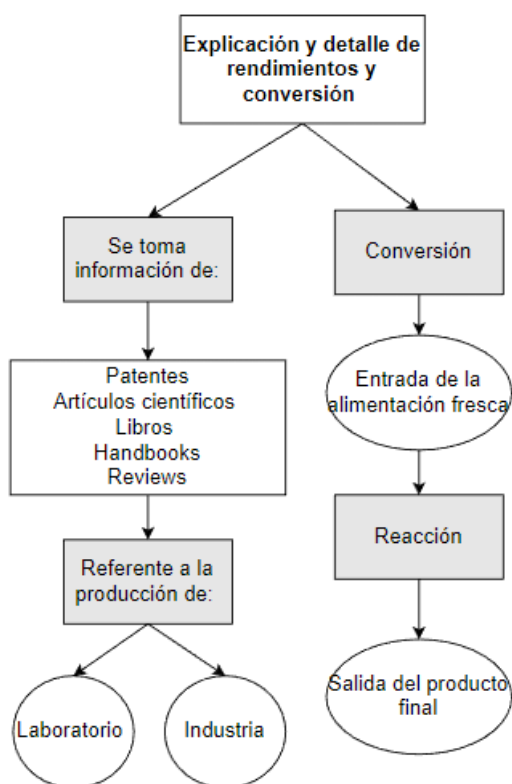


Explicación y detalle de los rendimientos reportados en la literatura

Se contrastó los rendimientos del polímero con respecto a las variables reportadas y propuestas. Para esta sección de la investigación se realizó una búsqueda minuciosa para describir la obtención de las conversiones globales del polímero PET dentro de la industria en las diferentes patentes, artículos científicos, libros, *handbooks* y *reviews*, como también se determinó las conversiones a una escala inferior como en los laboratorios, con el fin de contrastar los rendimientos teóricos con los reportados en la literatura. Las conversiones globales, se obtuvieron hacia el final del proceso dentro de un reactor, es decir, desde el reactivo en la alimentación fresca hasta la salida del producto final, siendo esta diferente a la conversión en cada etapa como se observa en la Figura 23.

Figura 23

Explicación y detalle de rendimientos y conversión.

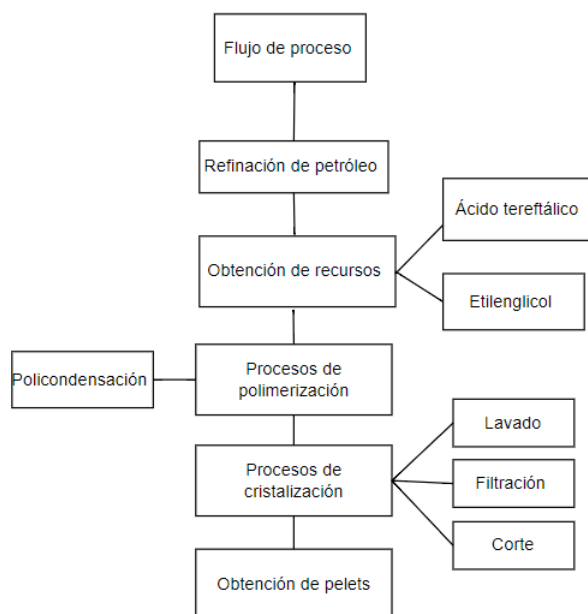


Búsqueda de los rendimientos teóricos del polímero en condiciones industriales

Se buscó de forma 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, se elaboró las tablas de síntesis estequiométrica para cada tipo de metodología encontrada y se ejecutó los 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 que se obtiene el polímero en el laboratorio como se muestra en la Figura 24.

Figura 24

Flujo de proceso de producción.



El objetivo del reporte de estos datos donde se plantea reacciones químicas y relaciones estequiométricas con respecto al polímero y de esta manera se relacionó los datos con los rendimientos o conversiones propias de cada industria dedicada a la producción del polímero PET u obtención realizada en el laboratorio, estos datos se los obtuvo 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

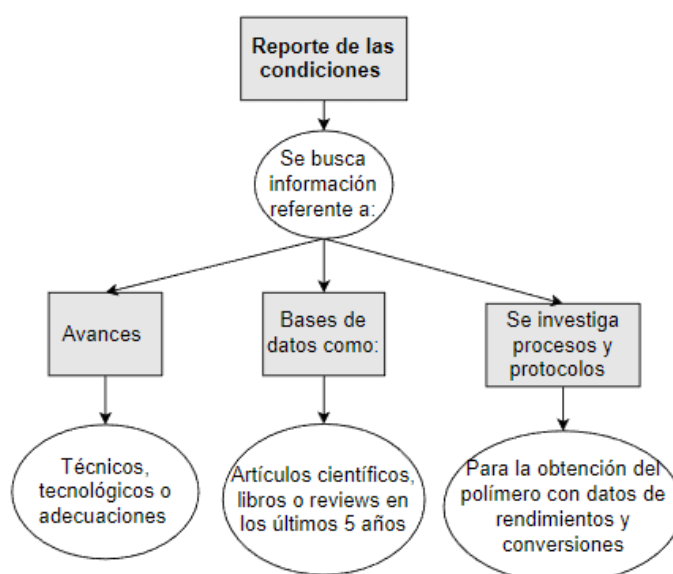
Se enfocó en la descripción de todos los avances técnicos, tecnológicos o adecuaciones que se han propuesto en artículos científicos, libros, *reviews* de los últimos cinco años para los procesos de obtención del polímero, este apartado tiene como finalidad dar realce a las mejoras alcanzadas en los 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.

Se investigó 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 como se muestra en la Figura 25.

Figura 25

Reporte de las condiciones.

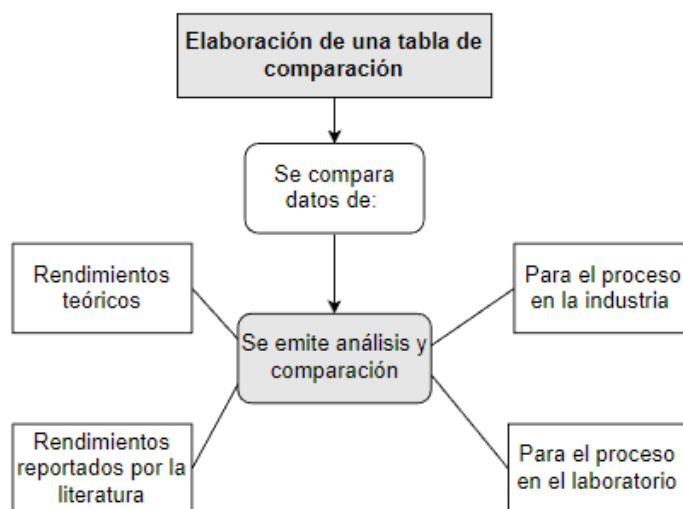


Elaboración de una tabla de comparación entre los rendimientos de todo lo reportado

Se reportó mediante tablas los datos obtenidos para los rendimientos teóricos y reportados en la literatura, con lo cual se realizó una comparación de dichos datos para su respectivo análisis y así se comparó la información de cada proceso tanto en la industria como en el laboratorio, en base a la tabla modelo inicial o formato mencionado en uno de los anteriores apartados como se muestra en la Figura 25.

Figura 26

Reporte de las condiciones.

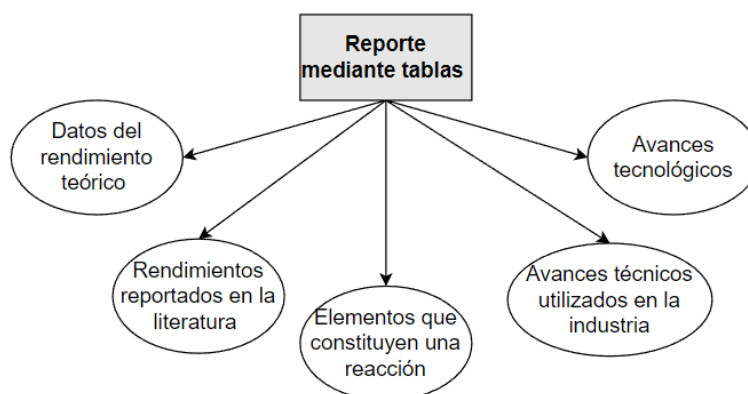


Reporte mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización

En la respectiva ruta que marca las reacciones se obtuvo el polímero y los datos 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 que se utilizó en 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 como se muestra en la Figura 27.

Figura 27

Reporte mediante tablas los datos.

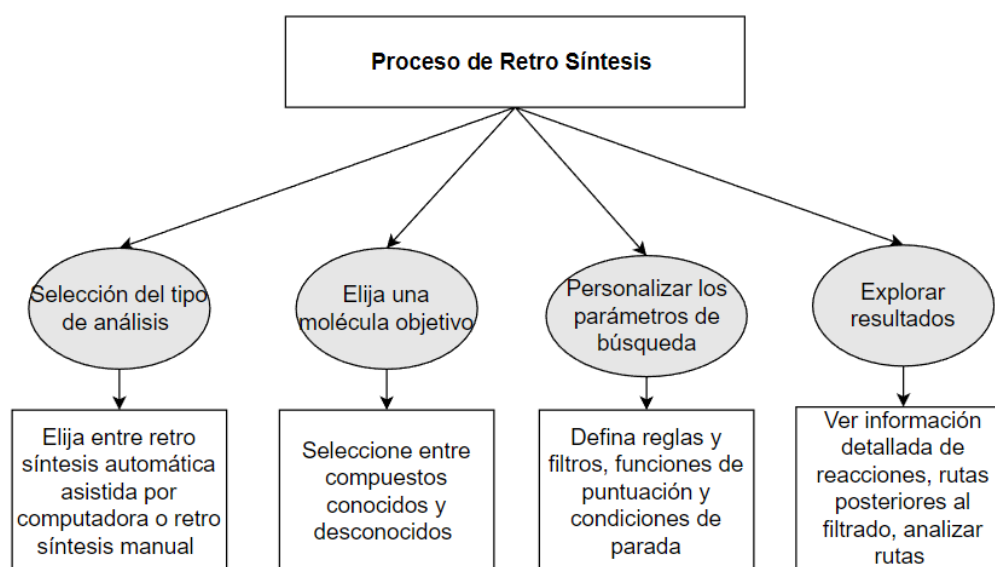


Ejecución de un análisis de retro síntesis online con propósito de comparación.

Se realizó un análisis de retro síntesis mediante la técnica de la química computacional que determinó el producto final, ya sea una molécula o compuesto, posteriormente se realizó un desglose obteniendo una secuencia de estructuras precursoras ordenadas en pasos de reacción a través del algoritmo; el producto final ingresado al algoritmo se descompone recursivamente hasta obtener unidades funcionales básicas cada vez más sencillas como se muestra en la Figura 28.

Figura 28

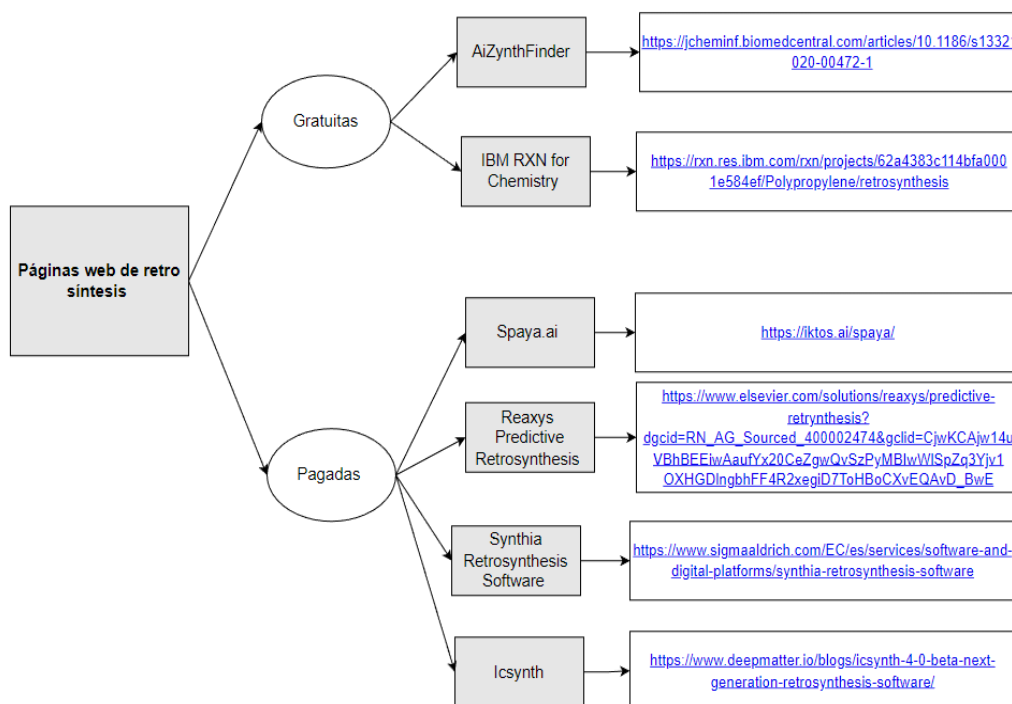
Proceso de retrosíntesis.



El análisis de retro síntesis se conceptualizó de la siguiente manera, en primera instancia se seleccionó la molécula objetivo entre un conjunto de compuestos conocidos y desconocidos, luego se personalizó 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 filtró, clasificó y comparó las diferentes rutas de síntesis que el programa proponga de acuerdo con cada molécula se detalló químicamente para finalmente escoger la ruta de síntesis más rentable, se puede seleccionar una plataforma gratuita o pagada para facilidad del usuario como se muestra en la Figura 29.

Figura 29

Páginas web de retro síntesis.



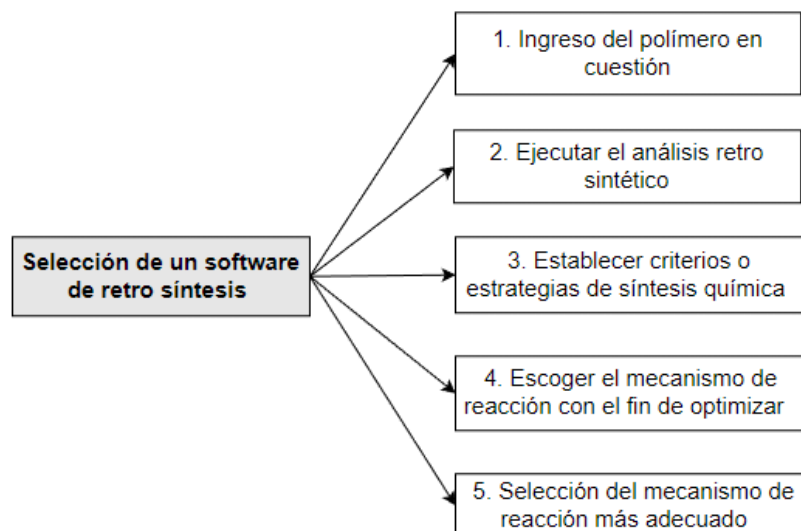
Reporte del producto final

Primero se fijó el polímero correspondiente, posteriormente se obtuvo una o diferentes rutas de síntesis para sintetizar dicho producto final, con los mecanismos de reacción consecutivos para el acoplamiento de las unidades funcionales y activas estos

mecanismos de reacción se emplearon para la generación del polímero deseado considerando criterios o estrategias de síntesis química como se muestra en la figura 30.

Figura 30

Páginas web de retro síntesis.

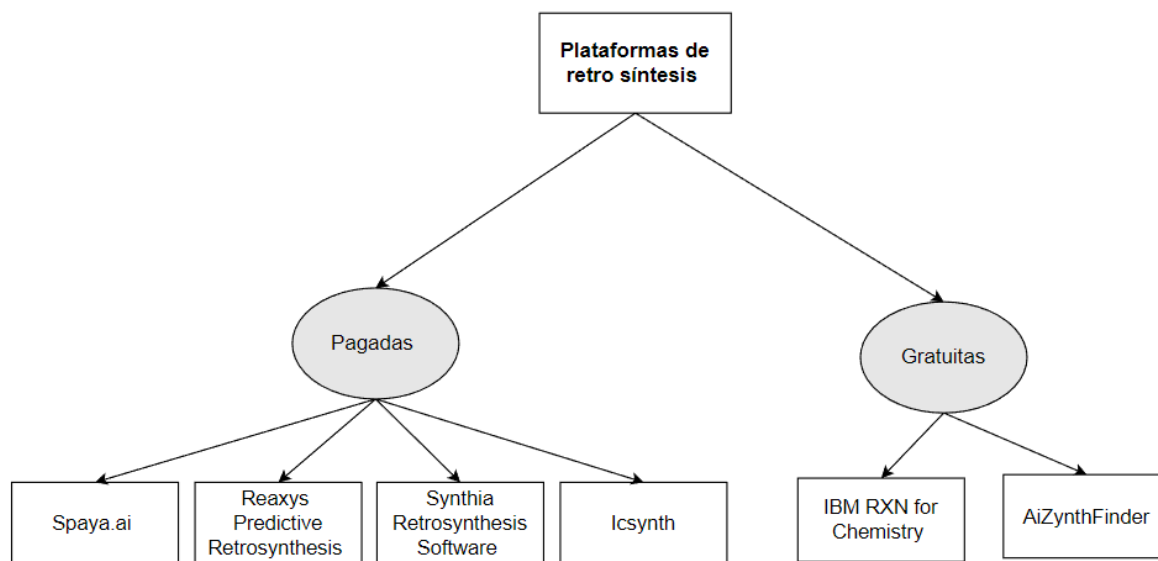


Búsqueda de una plataforma con el fin de realizar una retro síntesis del producto final

El algoritmo gestiona una enorme cantidad de datos basados en la biblioteca y plantillas de reacciones ya conocidas en plataformas pagas y gratuitas como se muestra en la Figura 31; 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 31

Búsqueda de una plataforma de retro síntesis.

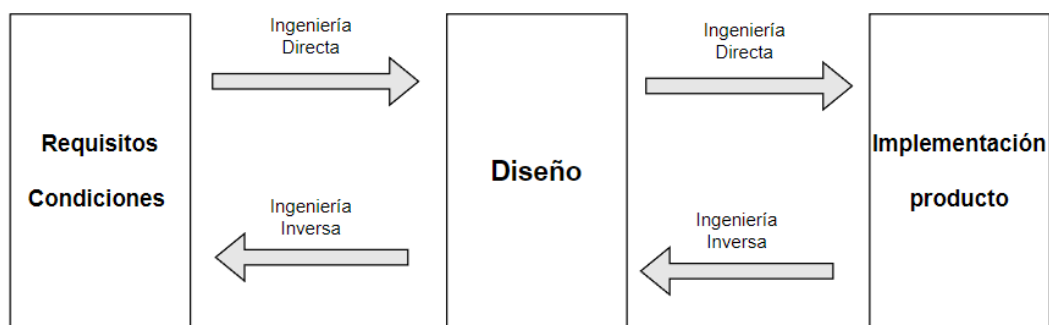


Interpretación de las reacciones químicas y los mecanismos de reacción mediante la ingeniería inversa

Se determinó diferentes alternativas de reacciones químicas que se obtuvieron a través de la ingeniería inversa como se muestra en la Figura 32, lo cual permitió compararas entre si 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 en el proceso de síntesis; estas reacciones químicas se pudieron modificar o simplificar estructuralmente.

Figura 32

Reacción mediante la ingeniería inversa.



Las diferentes alternativas de los mecanismos de reacción química se escogieron bajo diversos criterios que puedan significar una mejora u optimización 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 pudieron 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.

Reporte mediante tablas los datos obtenidos para cada reacción de polimerización

En base a la ruta seleccionada se presentó la información de las reacciones empleadas para sintetizar el polímero en cuestión de forma secuencial y ordenada mediante tablas. Para los procesos industrializados se emplearon esquemas y diagramas de flujo. Los mecanismos de reacción o las diferentes rutas de síntesis se pueden representar en esquemas.

Capítulo IV:

Resultados y discusión

Revisión del estado del arte de los reactivos, catalizadores, agentes coadyuvantes y aditivos a utilizarse en la síntesis del polímero tereftalato de polietileno

La revisión de la información bibliográfica se obtuvo de *Google Patents* como se muestra en la Figura 32, y libros *online* como *Ebook Central* donde se recopiló una lista de catalizadores utilizados en distintos años desde 1999 hasta el 2021 como se muestra en la tabla 3, los aditivos utilizados se identifican según el autor y el año que utiliza en la producción del tereftalato de polietileno según la revisión bibliográfica como se muestra en la Tabla 4, la ruta de fabricación se identifica de acuerdo a los reactivos como se indica en la Tabla 5, no se especifican agentes coadyuvantes en bibliografía solo aditivos para mejorar el proceso.

Figura 33

Buscador de patentes.



Elaboración de una lista de bibliografía referente al polímero tereftalato de polietileno

La producción del tereftalato de polietileno según las patentes revisadas se tiene dos procedimientos comunes los cuales según (Nageswar et al., 2021) y (Rao et al., 2014) mencionan dos rutas de fabricación: la primera con reactivos de ácido tereftálico y etilenglicol mediante una reacción de esterificación directa y la segunda opción, con los reactivos de dimetil tereftalato con etilenglicol mediante una reacción de transterificación como se muestra en la Tabla 3.

Tabla 3

Reactivos principales para producción del tereftalato de polietileno.

Lista bibliográfica	Reactivos
(Rao et al., 2014)	Producción de PET a partir de ácido tereftálico y etilenglicol
(Nageswar et al., 2021)	Producción de PET a partir de dimetil tereftalato (DMT) y etilenglicol

Un catalizador es una sustancia que induce la reacción química pero no está presente en la estequiometría, según la invención de las diferentes patente se utiliza catalizadores idóneos a la reacción, por ejemplo, según (Trojan, 1999) utiliza en el primer paso un catalizador de zinc y en el segundo paso un catalizador de antimonio, según (Konuma, 2012) utiliza un catalizador de antimonio, germanio o titanio, de preferencia para mejorar la transparencia utilizan germanio pero debido a costos esta patente utiliza titanio, según (Rao et al., 2014), (Zohaib et al., 2019) y (Nageswar et al., 2021) utilizan catalizadores de triacetato de antimonio o trióxido de antimonio o basados en antimonio para activar el crecimiento de la cadena e iniciar la reacción de policondensación para alcanzar una reacción rápida pero con la desventaja del color grisáceo como se muestra en las especificaciones de la Tabla 4.

Tabla 4

Catalizadores aplicados en el proceso de producción del tereftalato de polietileno.

Lista bibliográfica	Catalizador
(Trojan, 1999)	Zinc y Antimonio
(Konuma, 2012)	Antimonio/Germanio/Titanio
(Rao et al., 2014)	Triacetato de antimonio o trióxido de antimonio
(Zohaib et al., 2019)	Triacetato de antimonio
(Nageswar et al., 2021)	Antimonio

Los aditivos utilizados en una reacción química tienen el fin de mejorar las propiedades de la reacción, según la patente de (Trojan, 1999) menciona que utiliza un agente secuestrante como es el compuesto de fósforo, según (Konuma, 2012) propone que utilizar un estabilizador de la reacción de policondensación como es el compuesto de fosfato de trimetilo, según (Rao et al., 2014) y (Nageswar et al., 2021) utilizan en sus patentes agentes de corrección de color como el compuesto de cobalto y colorantes como se muestra en la Tabla 5.

Tabla 5

Aditivos aplicados en el proceso de producción del tereftalato de polietileno.

Lista bibliográfica	Aditivos
(Trojan, 1999)	Agente secuestrante: Fosforo
(Konuma, 2012)	Estabilizador: fosfato de trimetilo Agentes de corrección del color, tales como
(Rao et al., 2014)	compuestos de cobalto y otros colorantes solubles
(Nageswar et al., 2021)	Colorantes

Reporte de la información obtenida de los artículos científicos

Según la invención de (Konuma, 2012), se puede elaborar tereftalato de polietileno mediante un catalizador de titanio que es más económico que el compuesto de germanio y que no presenta peligros para la higiene en comparación con un compuesto de antimonio. De acuerdo con la invención de la patente EP 2406299 para la producción de PET a partir etilenglicol y ácido tereftálico, se elimina la turbidez mediante un proceso en el que los compuestos de Sb y P se añaden en la etapa de preparación de una suspensión, esterificación, policondensación en fase de fusión, granulación y policondensación en fase sólida y posteriormente se añade el compuesto de Zn obteniendo una muestra con un color neutro y alta transparencia óptica (Rao et al., 2014).

Según la invención de (Nageswar et al., 2021) nos indica que la producción de tereftalato de polietileno se da mediante una reacción de esterificación que ocurre en dos reactores, es decir, en el primer reactor se alcanza una conversión del 90% y en el segundo reactor una conversión del 96% y en un tercer paso de prepolicondensación el grado de esterificación aumenta hasta un 99%.

Según la patente de (Trojan, 1999) durante la reacción del tereftalato de alquilo con etilenglicol se añade un agente secuestrante a base de fosforo para policondensar el bis-(2-hidroxietil) tereftalato para producir PET y se utiliza un catalizador de zinc.

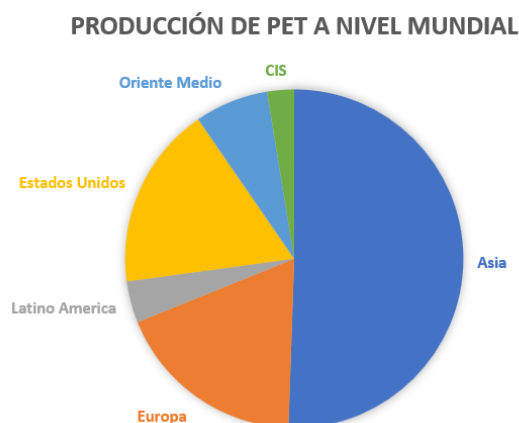
Contraste de la información obtenida con lo reportado por las industrias nacionales e internacionales

Según las estadísticas del mercado mundial de la producción de tereftalato de polietileno que se fabrica en industrias nacionales es cero, debido a que el Ecuador no cuenta con una industria petroquímica para producción de precursores base como es el ácido tereftálico y el etilenglicol, por lo cual, debe comprar los precursores y solo realiza el procesado final, la producción de PET.

A nivel internacional durante el año 2009 tuvo una producción de 15,30 millones de toneladas y se estima un aumento con un crecimiento medio anual del 3,50%, por lo cual, la capacidad mundial tiende a los 24,40 millones de toneladas por año en 2015 y posteriormente en el año 2020 a una tasa interanual del 4,90%, es decir, los productores de PET a nivel mundial según las estadísticas muestra a Asia, Europa, Estados Unidos, Oriente medio, Latino América y la Comunidad de Estados Independientes como se muestra en la Figura 34 (Ji, 2013).

Figura 34

Producción del tereftalato de polietileno a nivel mundial



Nota. El gráfico representa la distribución mundial de la producción del tereftalato de polietileno. Adaptado de *Study on Preparation Process and Properties of Polyethylene Terephthalate (PET)* por Ji, L. N, 2013, *Applied Mechanics and Materials*.

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

Se desarrolla la recopilación de la información de los ejemplos realizados en según cada patente con respecto a la viscosidad intrínseca la cual es una propiedad fundamental para determinar el uso del polímero, ya sea para el uso de botellas de agua, carbonatadas entre otras, se plasma las reacciones con la estequiometría de acuerdo al uso ya sea de laboratorio o industrial.

Elaboración de una tabla formato

Tabla 6

Viscosidad intrínseca para cada ejemplo.

Ejemplos	Tipo de catalizador	Tereftalato de polietileno en estado fundido		Tereftalato de polietileno en fase solida	
		VI	CT	VI	CT
		(dL/g)	(mmol/kg)	(dL/g)	(mmol/kg)
Ejemplo 1	TBMBP	0,49	17	0,75	
Ejemplo 2	TBMBP	0,48	19	0,75	
Ejemplo 3	TBMBP	0,48	22	0,76	
Ejemplo 4	TBMBP	0,52	18	0,76	
Ejemplo 5	TBMBP	0,49	17	0,75	9,70
Ejemplo 6	TBMBP	0,48	19	0,75	10,40
Ejemplo 7	TBMBP	0,48	22	0,76	9,70

Ejemplos	Tipo de catalizador	Tereftalato de polietileno en estado fundido		Tereftalato de polietileno en fase solida	
		VI	CT	VI	CT
		(dL/g)	(mmol/kg)	(dL/g)	(mmol/kg)
Ejemplo 8	TBMBP	0,49	15	0,75	9,50
Ejemplo 9	TBMBP	0,52	18	0,76	8,20
Ejemplo 10	TBMBP	0,52	18	0,77	8,10

Nota. Esta tabla nos indica la viscosidad intrínseca para cada ejemplo en el proceso de producción de PET a partir de etilenglicol y ácido tereftálico según (Rao et al., 2014).

Tabla 7

Viscosidad intrínseca para cada ejemplo.

	Unidad	Ejemplo 1	Ejemplo 2	Ejemplo 3
Polimerización en fase fundida				
Tamaño del lote del PET	(kg)	8	8	50
Contenido de Sb	(ppm)	140	140	140
Contenido de Zn	(ppm)	128	128	128
Adicción de Zn en la etapa		b	b	b
Contenido de P	(ppm)	13	45	45
Adicción de P en la etapa		a	a	a
Reciclado de EG		si	si	si
Tiempo de policondensación	(min)	62	65	98
Tras la policondensación en la fase fusión				
VI	(dl/g)	0,58	0,57	0,58
COOH	(mVal/kg)	46	37	

	Unidad	Ejemplo 1	Ejemplo 2	Ejemplo 3
AA residual en las virutas amorfas	(ppm)	112	78	
Tras la policondensación en la fase solida				
VI	(dl/g)	0,77	0,78	0,78
Placa de ensayo				
Transparencia		LTU	TR	MTR

Nota. Esta tabla nos indica la viscosidad intrínseca para cada ejemplo en el proceso de producción de PET a partir de etilenglicol y ácido tereftálico Tomado de Konuma, 2012.

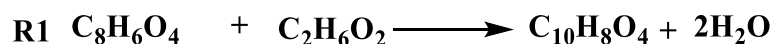
TR Transparente

MTR Muy transparente

LTU Ligeramente turbia

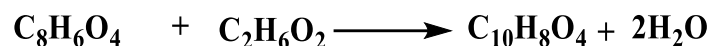
Elaboración de la estequiometría de los artículos y procesos industriales

Se tiene dos reacciones estequiométricas para la producción de tereftalato de polietileno, la R1 es la reacción más utilizada en los procesos industriales debido a que se utiliza como reactivo el PTA que presenta una mayor estabilidad térmica frente al DMT y se obtiene como subproducto el agua. R2 es una reacción alternativa con la cual se produce PET y metanol, no es una reacción preferida por la industria, debido a que el costo de DMT es mayor en comparación al PTA (García & Naranjo, 2017).



Ejecución balances de masa estructurando la estequiometría propia de cada reacción

La estequiometría de la reacción utilizada por (García & Naranjo, 2017) para la producción de PET es la siguiente:



Balance global del proceso

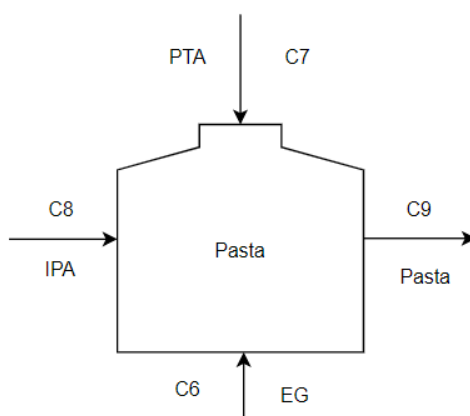
El balance de materia utilizado para la producción de tereftalato de polietileno se realiza mediante un flujo en unidades de toneladas por hora, para lo cual, se utiliza principalmente 15,13 toneladas de PTA por hora, 0,80 toneladas de IPA por hora, 24,18 toneladas de EG por hora y otras sustancias secundarias al proceso como: catalizador, un estabilizador, aceite de calentamiento, agua y aire. El proceso tiene dos fases de producción, la primera donde se produce PET en fase fundida y la segunda donde se obtiene una fase sólida (García & Naranjo, 2017).

Fase fundida

La primera fase de producción de PET se realiza mediante la preparación de los compuestos químicos que se van a utilizar, adecuación de equipos, preparación de la pasta, reacción de esterificación en el reactor uno y dos, posteriormente pasa a una etapa de prepolimerización y polimerización para la obtención de un polímero amorfo.

Balance en el tanque mezclador de la pasta

La preparación de la pasta se da mediante la mezcla de los principales compuestos como es el ácido tereftáico, ácido isoftálico y etilenglicol que posteriormente esta corriente se alimenta al primer reactor de esterificación mediante el uso de una bomba.



$$E - S + G - C = 0$$

$$E = S$$

$$C1 + C2 + C6 = C9$$

$$15,13 \frac{\text{ton}}{\text{h}} + 0,80 \frac{\text{ton}}{\text{h}} + 3,98 \frac{\text{ton}}{\text{h}} = 19,91 \frac{\text{ton}}{\text{h}}$$

Tabla 8

Balance de masa de la composición del tanque mezclador de la pasta.

Elemento	Corriente ton/h					
	C6	C7	C8	C9	Entrada	Salida
IPA	-	-	0,80	-	0,80	-
PTA	-	15,13	-	-	15,13	-
EG	3,98	-	-	-	3,98	-
Pasta	-	-	-	19,91	-	19,91
Total	3,98	15,13	0,80	19,91	19,91	19,91

Balance reactor 1 de esterificación

La esterificación se desarrolla en dos reactores, mediante la reacción entre el ácido tereftálico y etilenglicol obteniendo un monómero y agua, en el primer reactor se introduce la pasta, la relación de PTA con el EG es, por cada mol de PTA se introducen 2,60 moles de EG, el exceso de EG se debe a que es necesario para desplazar la reacción de esterificación a la derecha, se tiene una corriente de purga del agua obtenida y del EG que no reacciona se envía para un sistema de reciclo y adicionalmente el reactor tiene una manta calefactora que funciona con aceite HTM para alcanzar la temperatura de reacción.

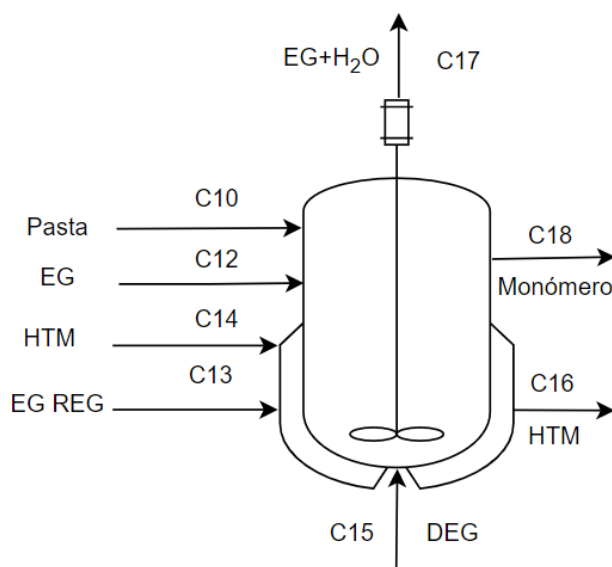


Tabla 9

Conversión de las reacciones en el reactor 1 y 2.

		PTA	EG	Monómero	Agua	X
Reacción	Entrada	15,13	14,06	-	-	0,90
1	Salida	1,51	3,86	22,10	3,02	0,90
Reacción	Entrada	1,51	3,86	22,10	-	0,95
2	Salida	0,08	2,89	24,25	0,33	0,95

Balance de masa en el reactor 1



PTA

$$E - S + G - C = 0$$

$$E = S + C$$

$$X_{PTA} C_{10} = C_{18} + C$$

$$(0,76)(19,91) \frac{\text{ton}}{\text{h}} = 1,51 \frac{\text{ton}}{\text{h}} + C$$

$$C = 13,62 \frac{\text{ton}}{\text{h}}$$

EG

$$E - S + G - C = 0$$

IPA

$$E - S + G - C = 0$$

$$E = C$$

$$X_{IPA} C_{10} = C$$

$$(0,04)(19,91) \frac{\text{ton}}{\text{h}} = C$$

$$C = 0,79 \frac{\text{ton}}{\text{h}}$$

DEG

$$E - S + G - C = 0$$

$$E = S + C$$

$$C13 + C12 + C10 \cdot X_{PTA} = C17 + C18 + C$$

$$(0,76 + 9,32 + 3,98) \frac{\text{ton}}{\text{h}} = (0,45 + 3,41) \frac{\text{ton}}{\text{h}} + C$$

$$C = 10,20 \frac{\text{ton}}{\text{h}}$$

PET

$$E - S + G - C = 0$$

$$S = G$$

$$C18 = G$$

$$G = 21,94 \frac{\text{ton}}{\text{h}}$$

$$E = C$$

$$C15 = C$$

$$C = 0,51 \frac{\text{ton}}{\text{h}}$$

H₂O

$$E - S + G - C = 0$$

$$S = G$$

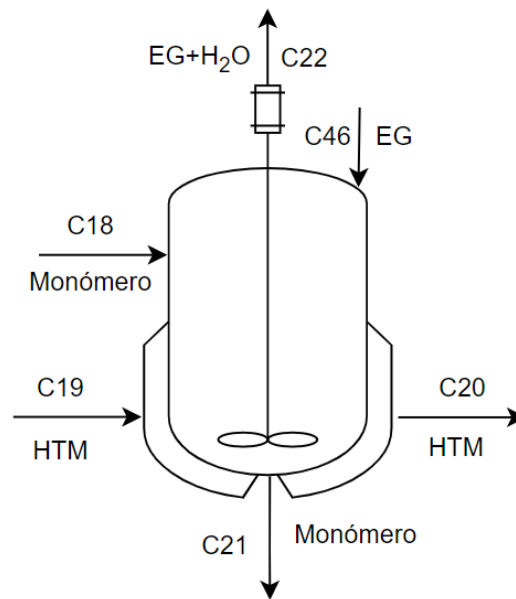
$$C17 = G$$

$$G = 3,11 \frac{\text{ton}}{\text{h}}$$

Tabla 10*Balace de masa en el reactor 1.*

Elemento	Corrientes ton/h									Entrada	Salida
	C10	C12	C13	C14	C15	C16	C17	C18			
PTA	15,13	-	-	-	-	-	-	1,51		15,13	1,513
IPA	0,80	-	-	-	-	-	-	-		0,80	-
EG	3,98	9,32	0,76	-	-	-	0,45	3,41		14,06	3,86
DEG	-	-	-	-	0,51	-	-	-		0,51	-
HTM	-	-	-	15,40	-	15,40	-	-		15,35	15,35
H2O	-	-	-	-	-	-	3,02	-		-	3,02
Monómero	-	-	-	-	-	-	-	22,10		-	22,10
Total	19,91	9,32	0,76	15,40	0,51	15,40	3,47	27,02		45,85	45,85

Balance del reactor 2 de esterificación



EG

$$E - S + G - C = 0$$

$$E - S = C$$

$$C = (C18 + C46) - C22$$

$$C = \left(3,41 \frac{\text{ton}}{\text{h}} + 0,60 \frac{\text{ton}}{\text{h}} \right) - 2,89 \frac{\text{ton}}{\text{h}}$$

$$C = 1,12 \frac{\text{ton}}{\text{h}}$$

Monómero

$$E - S + G - C = 0$$

$$E - S = G$$

$$G = C21 + C18$$

$$G = (24,25 - 21,94) \frac{\text{ton}}{\text{h}} = 2,31 \frac{\text{ton}}{\text{h}}$$

PTA

$$E - S + G - C = 0$$

$$E = C$$

$$C18 = C$$

$$C = 1,59 \frac{\text{ton}}{\text{h}}$$

H₂O

$$E - S + G - C = 0$$

$$G = S$$

$$S = 0,33 \frac{\text{ton}}{\text{h}}$$

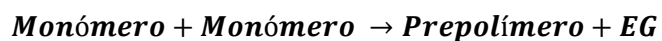
Tabla 11

Balance de masa en el reactor 2.

Elemento	Corrientes ton/h						Entrada	Salida
	C18	C19	C46	C20	C21	C22		
PTA	1,51	-	-	-	-	-	1,51	-
EG	3,41	-	0,60	-	-	2,89	4,01	2,89
HTM	-	1,46	-	1,46	-	-	1,46	1,46
H2O	-	-	-	-	-	0,30	-	0,30
Impurezas	-	-	-	-	-	0,08	-	0,08
Monómero	22,1	-	-	-	24,35	-	22,10	24,35
Total	27,02	1,46	0,6	1,46	24,35	3,27	29,08	29,08

Balance del reactor 3 pre-polimerización

En el reactor tres se produce prepolímero y etilenglicol a partir de dos monómeros, adicionalmente se introduce una corriente de regeneración de etilenglicol y aditivos como colorantes, un catalizador y un estabilizador y se tiene una corriente de salida de agua y etilenglicol y una corriente de alimentación de prepolímero al reactor cuatro.



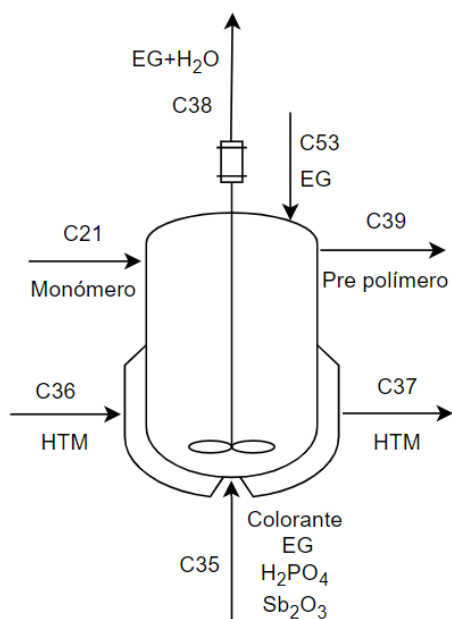


Tabla 12

Balance de masa en el reactor de prepolimerización.

Elemento	Corrientes ton/h							Entrada	Salida
	C21	C35	C36	C53	C37	C38	C39		
EG	-	-	-	0,45	-	0,50	-	0,45	0,5
Colorante	-	0,06	-	-	-	-	-	0,06	-
H3PO4	-	4×10^{-4}	-	-	-	-	-	4×10^{-4}	-
Sb2O3	-	6×10^{-3}	-	-	-	-	-	6×10^{-3}	-
HTM	-	-	5,48	-	5,48	-	-	5,48	5,48
Monómero	24,35	-	-	-	-	-	-	24,35	-
Prepolimero	-	-	-	-	-	-	22,91	-	22,91
Impurezas	-	-	-	-	-	1,44	-	-	1,44
Total	24,35	0,06	5,48	0,45	5,48	1,94	22,91	30,33	30,33

Balance del reactor 4 polimerización

La etapa final de la fase fundida es la polimerización donde a partir del prepolímero se produce PET amorfo y etilenglicol, el reactor tiene tres corrientes de ingreso que es el prepolímero, etilenglicol y HTM y tres corrientes de salida que es etilenglicol, prepolímero, impurezas, HTM y PET amorfo.

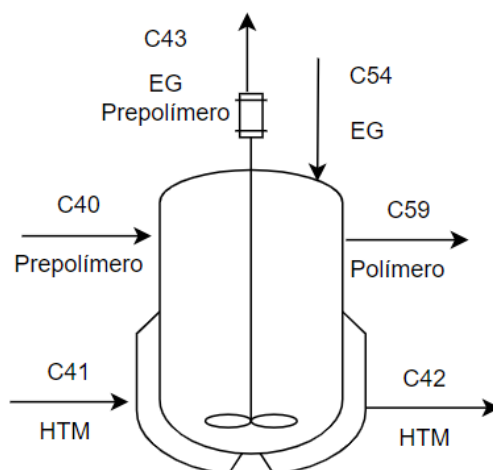
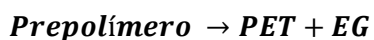


Tabla 13

Balance de masa en el reactor de polimerización.

Elemento	Corrientes ton/h						Entrada	Salida
	C40	C41	C54	C42	C43	C59		
EG	-	-	0,09	-	0,25	-	0,09	0,25
HTM	-	1,48	-	1,48	-	-	1,48	1,48
Prepolímero	22,91	-	-	-	-	-	22,91	-
Impurezas	-	-	-	-	0,63	-	-	0,63
Polímero	-	-	-	-	-	22,12	-	22,12
Total	22,91	1,48	0,09	1,48	0,88	22,12	24,48	24,48

Fase sólida

La segunda fase de la producción de PET es la fase sólida, donde se consigue aumentar el peso molecular de las cadenas poliméricas, es decir, el grado de polimerización alcanza hasta 120 unidades promedio de polímero cristalino a partir de la fase fundida, las etapas más representativas de este proceso son en el equipo de precristalizador y posteriormente pasa a un cristalizador y finalmente se obtiene un sólido con un aumento de viscosidad y cristalización, en forma de *pelets* de color blanco no adheridos entre sí.

Balance de la primera etapa de cristalización

La primera etapa de cristalización es alimentada por la corriente del reactor cuatro a una bomba, posteriormente se utiliza un filtro que envía a un sistema de lavado, cortado, secado y una fracción de la corriente sale como polímero amorfo que se almacena en un silo y el resto de la corriente se alimenta a la siguiente etapa de precristalización.

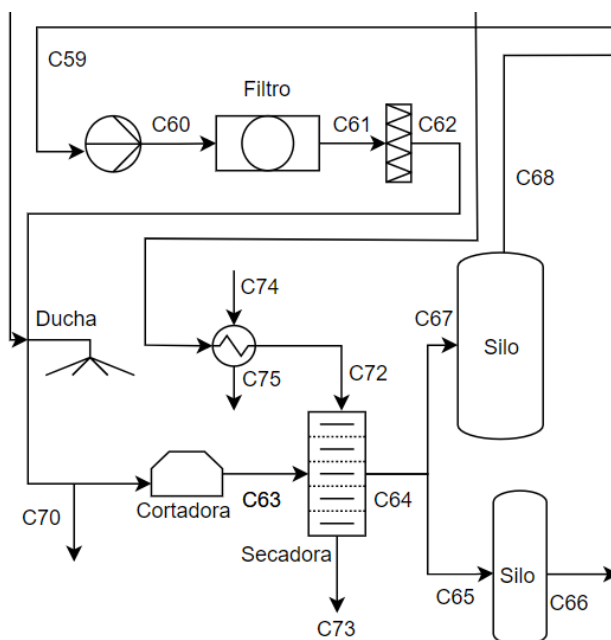


Tabla 14

Balance de masa en la primera etapa de cristalización.

Elemento	Corrientes ton/h						
	C59	C60	C61	C62	C63	C64	C65
Agua	-	-	-	-	0,19	-	-
P. Amorfo	22,03	22,03	22,03	22,03	22,03	22,03	1,10
P.Cristalino	-	-	-	-	-	-	-
HTM	-	-	-	-	-	-	-
Total	22,03	22,03	22,03	22,03	22,22	22,03	1,10

Tabla 15

Balance de masa en la primera etapa de cristalización parte 2.

Elemento	Corrientes ton/h						
	C66	C67	C68	C70	C72	C73	C74
Agua	-	-	-	37,53	-	0,19	-
P. Amorfo	1,10	20,93	20,93	-	-	-	-
P.Cristalino	-	-	-	-	22,89	24,89	24,89
HTM	-	-	-	-	-	-	11,61
Total	1,10	20,93	20,93	37,53	22,89	25,08	36,50

Balance etapas de cristalización y precrystalización

La corriente proveniente de polímero amorfo se envía a una unidad de precrystalización que trabaja con aire y una temperatura de 170 °C, posteriormente se envía a un equipo de cristalización y se obtiene un polímero cristalino de 130 °C, para alcanzar esta temperatura se utiliza un sistema de caldera e intercambiadores de calor.

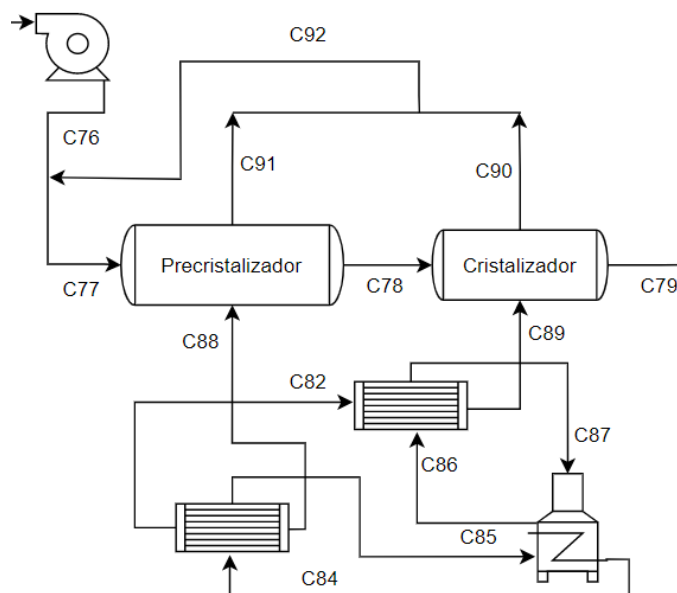


Tabla 16

Balance de masa en la cristalización y precristalización.

Elemento	Corrientes ton/h						
	C76	C77	C78	C79	C82	C84	C85
Aire	-	36,25	34,96	-	1,54	18	18
P. Amorfo	20,93	25,82	23,24	-	-	-	-
P. Cristalino	-	-	-	20,93	-	-	-
Impurezas	-	-	-	-	-	-	-
Total	20,93	62,07	58,2	20,93	1,54	18	18

Elemento	Corrientes ton/h						
	C86	C87	C88	C89	C90	C91	C92
Aire	12	12	2,31	1,5	34	1,54	37,7
P. Amorfo	-	-	-	-	-	-	-
P. Cristalino	-	-	-	-	-	-	-
Impurezas	-	-	-	-	2,3	2,58	4,89
Total	12	12	2,31	1,5	36	4,12	42,59

Balance etapa final de cristalización

El balance final de la etapa de cristalización comprende una serie de intercambiadores que tienen la función de incrementar la temperatura que ingresa al reactor para la formación de *pelets* cristalizados, la corriente que sale del reactor se introduce a una

refrigeradora con el fin de bajar la temperatura ya que el siguiente equipo es un silo de almacenamiento de PET fundido.

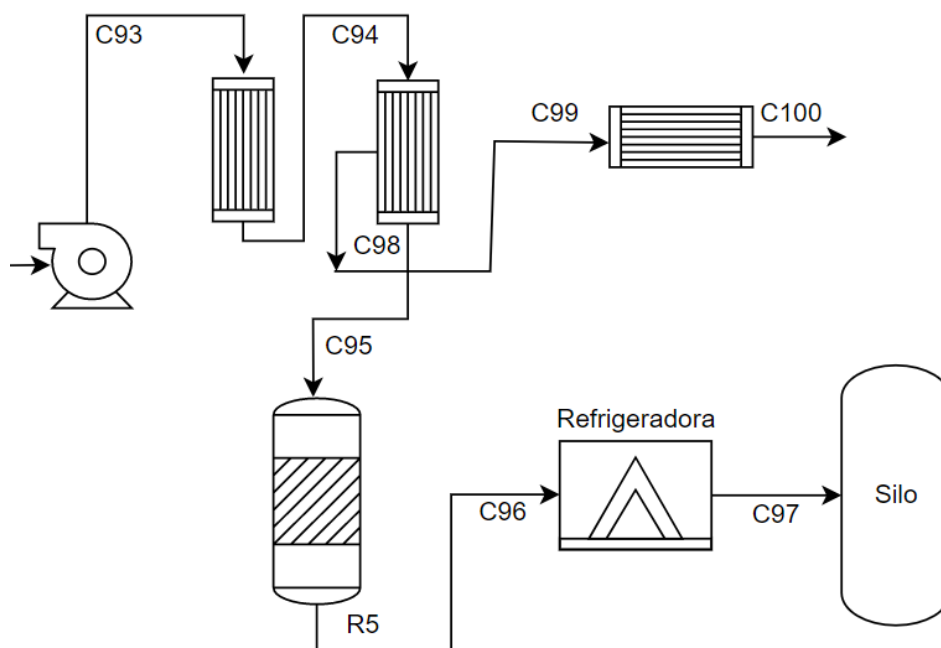


Tabla 17

Balance de masa en la etapa final de cristalización.

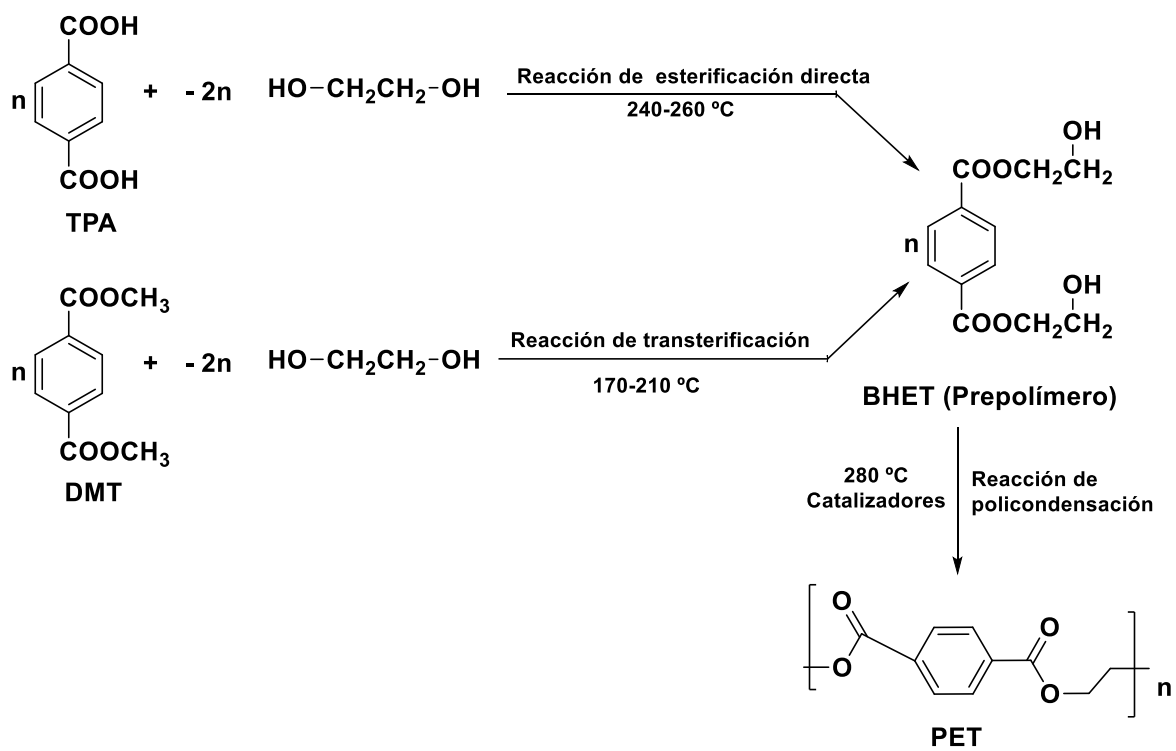
Elemento	Corrientes ton/h							
	C93	C94	C95	C96	C97	C98	C99	C100
P. Cristalino	20,93	20,51	20,10	19,70	19,70	-	-	-
Impurezas	-	-	-	-	-	0,41	0,41	0,40
Total	20,93	20,51	20,10	19,70	19,70	0,41	0,41	0,40

Búsqueda de las reacciones de polimerización del tereftalato de polietileno (PET)

Se tiene dos reacciones de polimerización la primera reacción se produce a partir de ácido tereftálico y etilenglicol produciendo PET y agua mediante una reacción de esterificación directa, la segunda reacción a partir de dimetiltereftalato y etilenglicol produciendo PET y metanol mediante una reacción de transesterificación.

Figura 34

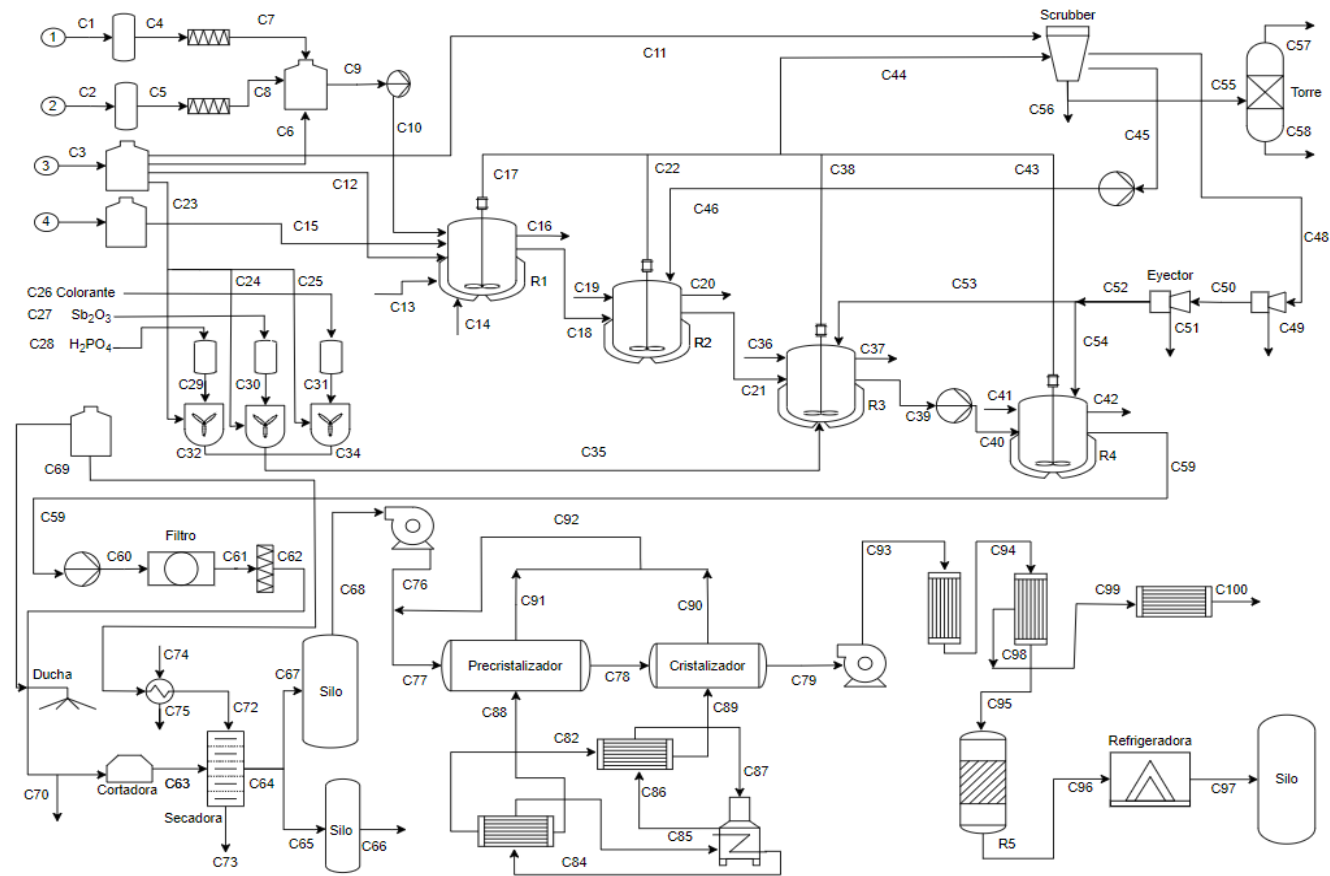
Reacciones de polimerización del PET.



Nota. Ruta de síntesis de la producción del PET. Adaptado de *Mecanismos de Degradación e sua Reciclagem*, Tomado de Romão et al., 2009, Unicam.

Figura 35

Elaboración un diagrama de la producción del tereftalato de polietileno (PET).



Nota. Diagrama de producción de PET. Adaptado de *Ingeniería básica de una planta de producción de Polietileno Tereftalato*, Tomado de García, M. de la O., & Naranjo, M. 2017, Universidad de Sevilla.

Reporte de las condiciones específicas de la producción del compuesto PET

Para la producción de PET durante la fase fundida se tiene las siguientes condiciones específicas de los cuatro reactores CSTR en serie que trabajan en estado estacionario, donde se especifica los parámetros de temperatura, presión, tiempo de reacción y la conversión se indica en la Tabla 18.

Tabla 18

Condiciones específicas de la producción del compuesto PET.

Parámetro	Reactor 1	Reactor 2	Reactor 3	Reactor 4
Temperatura (°C)	260	265	285	290
Presión (atm)	1,10	0,40	0,04	0,001
Tiempo de Rx (h)	3,50	1	1	1
Conversión (%)	90	95	94	98

Las condiciones específicas en la fase sólida se tienen en los equipos de cristalización, precristalización, caldera, reactor y en los intercambiadores donde se calienta el aire para la cristalización mediante los parámetros de temperatura tiempo.

Tabla 19

Condiciones específicas de la producción del compuesto PET fase sólida.

Equipo	Temperatura (°C)	Tiempo (h)
Precristalizador	170	4
Cristalizador	170	1
Caldera	179,9	-
Reactor 5	200	0,33
Intercambiadores	210	-

Ejecución de los cálculos del balance global del proceso

El balance global de materia del sistema se realiza en todo el proceso, donde se indica todas las corrientes de ingreso como también las corrientes de salida del proceso, por ende, la suma de todas las corrientes que ingresan al proceso debe ser la misma cantidad que sale como producto transformado, impurezas entre otras cosas.

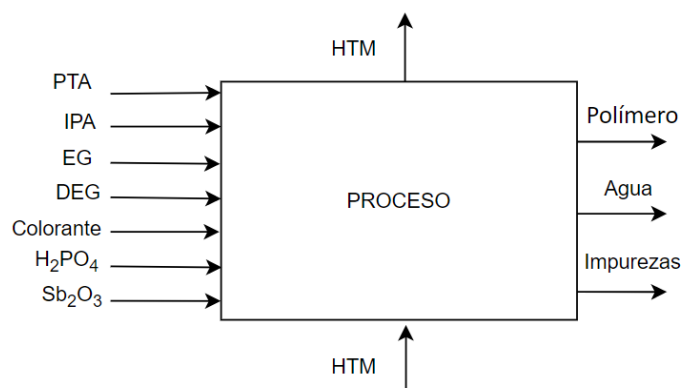


Tabla 20

Balance global del proceso.

Compuesto	Ton/h	
	Entrada	Salida
PTA	15,13	-
IPA	0,8	-
EG	24,18	10,16
DEG	0,51	-
HTM	35,38	35,38
Colorante	0,06	-
Sb₂O₃	6×10^{-3}	-
H₂PO₄	4×10^{-4}	-
Impurezas	-	7,38
Polímero	-	19,7
Agua	-	3,45
Total	76,07	76,07

Búsqueda de todas las variables faltantes para completar el proceso

- Para que haya un desplazamiento de la reacción a la derecha sucede mediante la extracción del agua.
- Bajar la presión en el segundo reactor de la fase fundida facilita el pase de los monómeros y oligómeros provenientes del primer reactor.
- La temperatura del reactor alcanza aproximadamente los 285 °C, mediante el aceite de calentamiento HTM.
- Los *pelets* se clasifican en una tamizadora según el tamaño

Optimización del catalizador

El balance de masa realizado en el reactor tres de pre-policondensación utiliza como catalizador óxido de antimonio según (García & Naranjo, 2017), para lo cual, se propone la utilización de un catalizador de butóxido de titanio en base a la patente ES2378403 realizada por (Konuma, 2012) para mejorar los costos de producción.

Se realiza una comparación de los parámetros de producción del compuesto del polímero tereftalato de polietileno como es la temperatura, presión, tiempo, viscosidad intrínseca, cantidad de material para una hora de producción y la conversión como se indica en la Tabla 21.

Tabla 21

Condiciones de producción según cada autor

Condiciones	García & Naranjo, 2017	Konuma, 2012
Temperatura °C	285	276,50
Presión (atm)	0,04	0,0006
Tiempo (h)	1	1

Condiciones	García & Naranjo, 2017	Konuma, 2012
IV fase fundida	0,25	0,48
Cantidad (kg)	6	4
Conversión (%)	94	90

Tabla 22

Comparación de precios entre catalizadores.

		Antimony(III) oxide, 99%		Tetrabutoxytitanium	
Cas Number		1309-64-4		5593-70-4	
Cantidad		100g		100g	
Proveedor / Costo		<i>AK Scientific</i>	\$ 70,00	<i>AK Scientific</i>	\$ 56,00
Tiempo	Cantidad g/h	Precio \$	Cantidad g/h	Precio \$	
1 g/h	6000	4200	4000	2240	
1 mes	18000	12600	12000	6720	
6 meses	48000	33600	32000	17920	
1 año	84000	58800	56000	31360	
Proveedor / Costo		<i>Fisher scientific</i>	\$ 70,50	<i>Fisher scientific</i>	\$ 36,40
Tiempo	Cantidad g/h	Precio \$	Cantidad g/h	Precio \$	
1 g/h	6000	4230	4000	1456	
1 mes	18000	12690	12000	4368	
6 meses	48000	33840	32000	11648	
1 año	84000	59220	56000	20384	

El consumo de óxido de antimonio en un año de producción es de 58800 dólares cuando se adquiere el reactivo de la casa comercial *AK Scientific* y se ahorra un 46,47% con el uso de un catalizador de tetraóxido de titanio adquirido en la misma casa comercial. Adicionalmente se compara con la casa comercial *Fisher Scientific* donde el precio es de

59920 dólares en un año de consumo del reactivo óxido de antimonio y con el uso de un nuevo catalizador hay un ahorro de 65,57%.

Maximización de la conversión en el primer reactor

La conversión del primer reactor alcanza el 90% según (García & Naranjo, 2017) y se alcanza una conversión del 95% según (Konuma, 2012) para lo cual se va a modificar ciertos parámetros como la temperatura, la relación de reflujo de la cantidad de etilenglicol por mol de ácido tereftálico y presión como se muestra en la Tabla 23.

Tabla 23

Condiciones de operación para cada autor.

Condiciones	García & Naranjo, 2017	Konuma, 2012
Temperatura °C	260	275
Presión (atm)	1,10	2,96
Tiempo (h)	3,50	4
Cantidad de EG por mol de PTA	1,20	1,50
Conversión (%)	90	95

Balance de masa para una conversión del 95%

Tabla 24

Balance de masa de la composición del tanque mezclador de la pasta.

Elemento	Corriente ton/h				Entrada	Salida
	C6	C7	C8	C9		
IPA	-	-	0,80	-	0,80	-
PTA	-	15,13	-	-	15,13	-
EG	4,97	-	-	-	4,97	-
Pasta	-	-	-	20,90	-	20,90
Total	4,97	15,13	0,80	20,90	20,90	20,90

Tabla 25

Conversión de las reacciones en el reactor 1 y 2.

		PTA	EG	Monómero	Agua	X
Reacción	Entrada	15,13	15,05	-	-	0,95
1	Salida	0,75	4,25	24,37	1,51	0,95
Reacción	Entrada	0,75	4,25	24,37	-	0,95
2	Salida	0,08	3,61	26,05	0,15	0,95

Tabla 26

Balance de masa en el reactor 1.

Elemento	Corrientes ton/h								Entrada	Salida
	C10	C12	C13	C14	C15	C16	C17	C18		
PTA	15,13	-	-	-	-	-	-	0,75	15,13	0,75
IPA	0,80	-	-	-	-	-	-	-	0,80	-
EG	4,97	11,64	0,94	-	-	-	0,56	4,25	17,55	4,81
DEG	-	-	-	-	0,51	-	-	-	0,51	-
HTM	-	-	-	15,35	-	15,35	-	-	15,35	15,35
H2O	-	-	-	-	-	-	1,51	-	-	1,51
Monómero	-	-	-	-	-	-	-	26,92	-	26,92
Total	19,91	9,32	0,76	15,40	0,51	15,40	1,96	28,52	49,34	49,34

Tabla 27

Balance de masa en el reactor 2.

Elemento	Corrientes ton/h						Entrada	Salida
	C18	C19	C46	C20	C21	C22		
PTA	0,76	-	-	-	-	-	0,76	-
EG	4,25	-	0,74	-	-	3,61	4,99	3,61
HTM	-	1,46	-	1,46	-	-	1,46	1,46
H2O	-	-	-	-	-	0,15	-	0,15
Impurezas	-	-	-	-	-	0,03	-	0,03
Monómero	26,92	-	-	-	28,88	-	26,92	28,88
Total	31,93	1,46	0,70	1,46	28,88	3,79	34,13	34,13

Tabla 28

Balance del reactor 3 pre-polimerización.

Elemento	Corrientes ton/h							Entrada	Salida
	C21	C35	C36	C53	C37	C38	C39		
EG	-	-	-	0,56	-	0,64	-	0,56	0,64
Colorante	-	0,06	-	-	-	-	-	0,06	-
H3PO4	-	4x10 ⁻⁴	-	-	-	-	-	4x10 ⁻⁴	-
Sb2O3	-	6x10 ⁻³	-	-	-	-	-	6x10 ⁻³	-
HTM	-	-	5,47	-	5,48	-	-	5,47	5,48
Monómero	28,85	-	-	-	-	-	-	28,85	-
Prepolímero	-	-	-	-	-	-	27,11	-	27,11
Impurezas	-	-	-	-	-	1,71	-	-	1,71
Total	28,85	0,06	5,47	0,56	5,48	2,35	27,11	34,94	34,94

Tabla 29

Balance del reactor 4 polimerización.

Elemento	Corrientes ton/h						Entrada	Salida
	C40	C41	C54	C42	C43	C59		
EG	-	-	0,11	-	0,31	-	0,11	0,31
HTM	-	1,48	-	1,48	-	-	1,48	1,48
Prepolímero	27,17	-	-	-	-	-	27,17	-
Impurezas	-	-	-	-	0,74	0,12	-	0,86
Polímero	-	-	-	-	-	26,11	-	26,11
Total	27,17	1,48	0,11	1,48	1,05	26,23	28,76	28,76

Tabla 30

Balance de la primera etapa de cristalización.

Elemento	Corrientes ton/h						
	C59	C60	C61	C62	C63	C64	C65
Agua	-	-	-	-	0,19	-	-
P. Amorfo	26,11	26,11	26,11	26,11	26,11	26,11	1,30
P.Cristalino	-	-	-	-	-	-	-
HTM	-	-	-	-	-	-	-
Total	26,11	26,11	26,11	26,11	26,30	26,11	1,30

Tabla 31

Balance de la primera etapa de cristalización parte 2.

Elemento	Corrientes ton/h						
	C66	C67	C68	C70	C72	C73	C74
Agua	-	-	-	37,53	-	0,19	-
P. Amorfo	1,30	24,81	24,81	-	-	-	-
P.Cristalino	-	-	-	-	22,89	24,89	24,89
HTM	-	-	-	-	-	-	11,61
Total	1,30	24,81	24,81	37,53	22,89	25,08	36,50

Tabla 32

Balance etapas de cristalización y precristalización.

Elemento	Corrientes ton/h						
	C76	C77	C78	C79	C82	C84	C85
Aire	-	36,25	34,96	-	1,54	18	18
P. Amorfo	24,81	30,6	27,55	-	-	-	-
P. Cristalino	-	-	-	24,81	-	-	-
Impurezas	-	-	-	-	-	-	-
Total	24,81	62,07	58,2	24,81	1,54	18	18

Elemento	Corrientes ton/h						
	C86	C87	C88	C89	C90	C91	C92
Aire	12	12	2,31	1,5	34	3,6	37,7
P. Amorfo	-	-	-	-	-	-	-
P. Cristalino	-	-	-	-	-	-	-
Impurezas	-	-	-	-	2,7	3,1	5,79
Total	12	12	2,31	1,5	36	4,12	42,59

Tabla 33*Balance etapa final de cristalización.*

Elemento	Corrientes ton/h								
	C93	C94	C95	C96	C97	C98	C99	C100	
P. Cristalino	24,81	24,31	23,83	23,35	23,35	-	-	-	
Impurezas		-	-	-	-	0,49	0,48	0,47	
Total	24,81	24,31	23,83	23,35	23,35	0,49	0,48	0,47	

Como se indica en la Tabla 31 la producción de PET estándar en una hora de producción es de 19,70 ton/h en la propuesta se obtiene una producción de 23,35 ton/h, por ende, se tiene un incremento de producción con la propuesta de 3,65 ton/h de producción que al año representaría solo de incremento 31974 ton/año.

Tabla 34*Comparación de la producción entre el estándar y la propuesta.*

Componente	Producción ton/h	
	Estándar	Propuesta
Monómero	22,10	26,92
polímero amorfo	20,93	24,81
polímero cristalino	19,70	23,35

Maximización de la conversión en el primer reactor

La conversión del primer reactor alcanza el 90% según (García & Naranjo, 2017) y se pretende maximizar al 95% según (Konuma, 2012) para lo cual, se utiliza la herramienta Solver de Excel lo cual permite realizar un análisis y determinar el valor máximo manteniendo los flujos de entrada y modificando otras celdas para determinar la solución óptima del proceso de producción de PET.

Primero establecemos el objetivo, es decir seleccionamos la celda que queremos que cumpla una restricción en este caso nuestra función objetivo será maximizar la producción del monómero del primer reactor, cambiando la celda de la conversión la cual está directamente relacionado con las restricciones que se plantean, la primera restricción es que el valor de la conversión debe ser mayor o igual a 0,90 y la segunda restricción es que el valor de la conversión debe ser menor o igual que 0,95 y finalmente ponemos revolver para obtener la solución más óptima con las restricciones propuestas.

Figura 36

Parámetros de Solver Excel.

Parámetros de Solver

Establecer objetivo:

Para: Máx Mín Valor de:

Cambiando las celdas de variables:

Sujeto a las restricciones:

-
-

Convertir variables sin restricciones en no negativas

Método de resolución:

Método de resolución

Seleccione el motor GRG Nonlinear para problemas de Solver no lineales suavizados. Seleccione el motor LP Simplex para problemas de Solver lineales, y seleccione el motor Evolutionary para problemas de Solver no suavizados.

Balance de masa para una conversión del 95%**Tabla 35***Balance de masa de la composición del tanque mezclador de la pasta.*

Elemento	Corriente ton/h					Entrada	Salida
	C6	C7	C8	C9			
IPA	-	-	0,80	-		0,80	-
PTA	-	15,13	-	-		15,13	-
EG	3,98	-	-	-		3,98	-
Pasta	-	-	-	19,91		-	19,91
Total	3,98	15,13	0,80	19,91		19,91	19,91

Tabla 36*Conversión de las reacciones en el reactor 1 y 2.*

		PTA	EG	Monómero	Agua	X
Reacción	Entrada	15,13	14,06	-	-	0,95
1	Salida	0,75	3,40	24,37	1,51	0,95
Reacción	Entrada	0,75	3,40	24,37	-	0,95
2	Salida	0,08	2,88	26,20	0,15	0,95

Tabla 37

Balance de masa en el reactor 1.

Elemento	Corrientes ton/h								Entrada	Salida
	C10	C12	C13	C14	C15	C16	C17	C18		
PTA	15,13	-	-	-	-	-	-	0,75	15,13	0,75
IPA	0,80	-	-	-	-	-	-	-	0,80	-
EG	3,98	9,32	0,76	-	-	-	0,45	3,40	14,06	3,85
DEG	-	-	-	-	0,51	-	-	-	0,51	-
HTM	-	-	-	15,35	-	15,35	-	-	15,35	15,35
H2O	-	-	-	-	-	-	1,51	-	-	1,51
Monómero	-	-	-	-	-	-	-	24,37	-	24,37
Total	19,91	9,32	0,76	15,40	0,51	15,40	1,96	28,52	45,83	45,83

Tabla 38

Balance de masa en el reactor 2.

Elemento	Corrientes ton/h						Entrada	Salida
	C18	C19	C46	C20	C21	C22		
PTA	0,75	-	-	-	-	-	0,75	-
EG	3,40	-	0,60	-	-	2,88	5,00	2,88
HTM	-	1,46	-	1,46	-	-	1,46	1,46
H2O	-	-	-	-	-	0,15	-	0,15
Impurezas	-	-	-	-	-	0,89	-	0,89
Monómero	24,37	-	-	-	26,20	-	24,37	26,20
Total	28,50	1,46	0,60	1,46	26,20	3,92	31,58	31,58

Tabla 39

Balance del reactor 3 pre-polimerización.

Elemento	Corrientes ton/h							Entrada	Salida
	C21	C35	C36	C53	C37	C38	C39		
EG	-	-	-	0,45	-	0,50	-	0,45	0,50
Colorante	-	0,06	-	-	-	-	-	0,06	-
H3PO4	-	4x10 ⁻⁴	-	-	-	-	-	4x10 ⁻⁴	-
Sb2O3	-	6x10 ⁻³	-	-	-	-	-	6x10 ⁻³	-
HTM	-	-	5,47	-	5,48	-	-	5,47	5,48
Monomero	26,20	-	-	-	-	-	-	26,20	-
Prepolímero	-	-	-	-	-	-	24,65	-	24,65
Impurezas	-	-	-	-	-	1,55	-	-	1,55
Total	26,20	0,06	5,47	0,56	5,48	2,35	27,11	32,20	32,20

Tabla 40

Balance del reactor 4 polimerización.

Elemento	Corrientes ton/h						Entrada	Salida
	C40	C41	C54	C42	C43	C59		
EG	-	-	0,09	-	0,29	-	0,09	0,29
HTM	-	1,48	-	1,48	-	-	1,48	1,48
Prepolímero	24,65	-	-	-	-	-	24,65	-
Impurezas	-	-	-	-	0,62	-	-	0,58
Polímero	-	-	-	-	-	23,83	-	23,83
Total	24,65	1,48	0,11	1,48	1,05	26,23	26,20	26,20

Tabla 41*Balance de la primera etapa de cristalización.*

Elemento	Corrientes ton/h						
	C59	C60	C61	C62	C63	C64	C65
Agua	-	-	-	-	0,19	-	-
P. Amorfo	23,83	23,83	23,83	23,83	23,83	23,83	1,19
P.Cristalino	-	-	-	-	-	-	-
HTM	-	-	-	-	-	-	-
Total	23,83	23,83	23,83	23,83	24,02	23,83	1,19

Tabla 42*Balance de la primera etapa de cristalización parte 2.*

Elemento	Corrientes ton/h						
	C66	C67	C68	C70	C72	C73	C74
Agua	-	-	-	37,53	-	0,19	-
P. Amorfo	1,19	22,63	22,63	-	-	-	-
P.Cristalino	-	-	-	-	22,89	24,89	24,89
HTM	-	-	-	-	-	-	11,61
Total	1,19	22,63	22,63	37,53	22,89	25,08	36,50

Tabla 43

Balance etapas de cristalización y precrystalización.

Elemento	Corrientes ton/h						
	C76	C77	C78	C79	C82	C84	C85
Aire	-	36,25	34,96	-	1,54	18	18
P. Amorfo	22,63	27,92	25,13	-	-	-	-
P. Cristalino	-	-	-	22,63	-	-	-
Impurezas	-	-	-	-	-	-	-
Total	22,63	62,51	58,2	22,63	1,54	18	18

Elemento	Corrientes ton/h						
	C86	C87	C88	C89	C90	C91	C92
Aire	12	12	2,31	1,5	34	3,6	37,7
P. Amorfo	-	-	-	-	-	-	-
P. Cristalino	-	-	-	-	-	-	-
Impurezas	-	-	-	-	2,5	2,7	5,28
Total	12	12	2,31	1,5	36,5	4,12	42,59

Tabla 44

Balance etapa final de cristalización.

Elemento	Corrientes ton/h							
	C93	C94	C95	C96	C97	C98	C99	C100
P. Cristalino	22,63	22,18	21,74	21,30	21,30	-	-	-
Impurezas		-	-	-	-	0,45	0,44	0,43
Total	22,63	22,18	21,74	21,30	21,30	0,45	0,44	0,43

Se compara los tres métodos de maximización, el estándar con una conversión del 90%, la propuesta uno para una conversión del 95% que se modifica el flujo de etilenglicol con respecto al ácido tereftálico de entrada según (Konuma, 2012) y para la propuesta dos

se mantienen los flujos de entrada y se maximiza la producción según el componente de Excel Solver.

Tabla 45

Comparación de la producción estándar, propuesta 1 y 2.

Componente	Producción ton/h		
	Estándar	Propuesta 1	Propuesta 2
Monómero	22,10	26,62	24,37
Polímero amorfo	20,93	24,81	22,63
Polímero cristalino	19,70	23,35	21,30

Búsqueda de los rendimientos teóricos del polímero

El rendimiento teórico de para la producción de PET según (García & Naranjo, 2017) reporta un valor de 82%, seguidamente según (Zohaib et al., 2019) reporta un valor del 93% y según (Konuma, 2012) de 87%, es decir, de acuerdo con la estequiometría, obtenemos con la reacción balanceada el rendimiento que es lo máximo que podemos obtener, como se muestra en la tabla 46 según la producción de los diferentes autores.

Tabla 46

Rendimientos según cada autor.

Rendimiento real %	Autor
82	(García & Naranjo, 2017)
93	(Zohaib et al., 2019)
87	(Konuma, 2012)

Rendimiento teórico %	Autor
85	(García & Naranjo, 2017)
94	(Zohaib et al., 2019)
90	(Konuma, 2012)

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

- Adición de un sistema de calentamiento con aceites menos costosos para alcanzar la temperatura de reacción adecuada para la producción.
- Utilización de catalizadores basados en titanio, germanio, aluminio entre otros.
- Uso de reactores en serie, para mejorar el costo de producción.
- El transporte de PTA es más barato debido a la densidad que es de 1,0 ton/m³ a diferencia que si se utiliza un reactivo de DMT la densidad es de 0,50 ton/m³.
- Las nuevas técnicas implementadas también corresponden al uso de catalizadores como titanio, germanio, aluminio, entre otros.

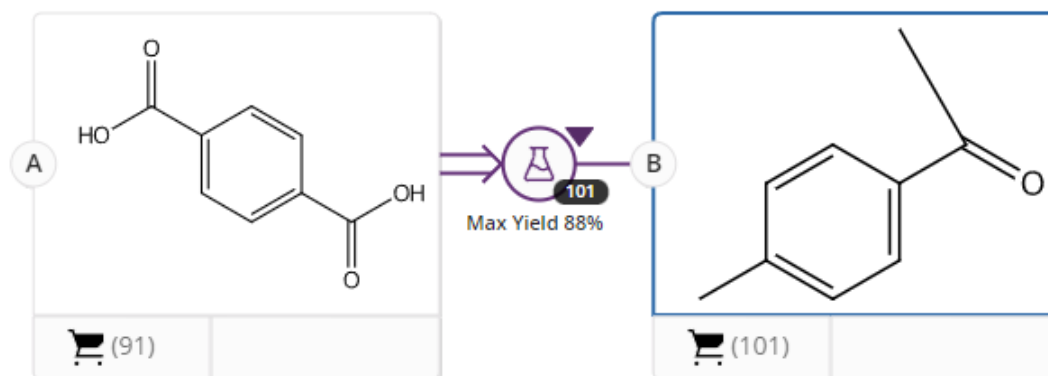
Ejecución de un análisis de retro síntesis online con propósito de comparación.

El análisis de retro síntesis para la molécula de PET nos indica una ruta sintética con múltiples pasos de reacciones, para cada una se indica el rendimiento que se obtendrá con dicha síntesis de reacción que se utiliza para sintetizar la unidad monomérica del polímero.

Un método de síntesis se muestra en la Figura 35 donde el primer paso de reacción es emplear el ácido p-toluico, para sintetizar ácido terftálico con un rendimiento máximo del 88% con respecto a estos reactivos.

Figura 35

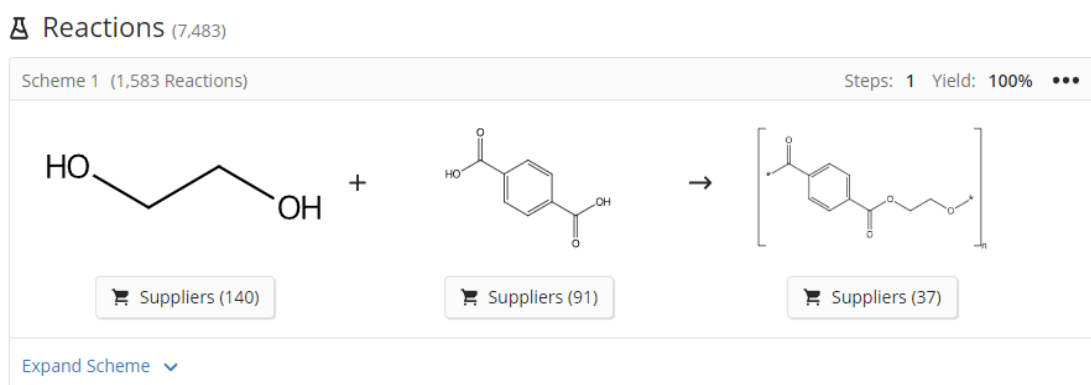
Primer paso de mecanismo de reacción.



Como segundo paso de mecanismos de reacciones se emplea: etilenglicol, ácido tereftálico, para sintetizar la unidad polimérica de tereftalato de polietileno como se indica en la Figura 36 con un rendimiento del 100%.

Figura 36

Segundo paso de mecanismos de reacción.

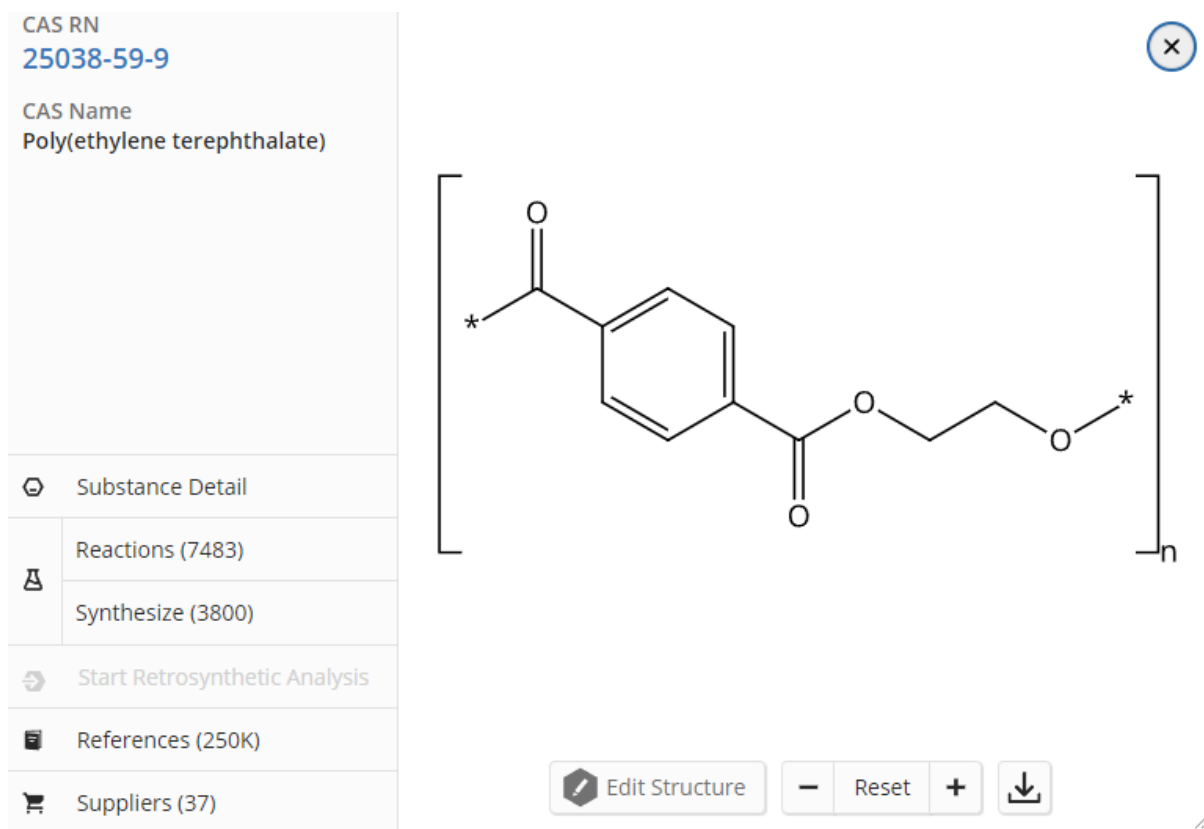


Reporte del producto final

Como producto final se reporta la unidad polimérica de tereftalato de polietileno como se indica en la Figura 37.

Figura 37

Reporte del producto final.

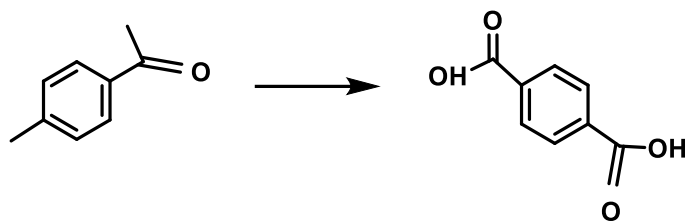


Búsqueda de una plataforma con el fin de realizar una retro síntesis del producto final

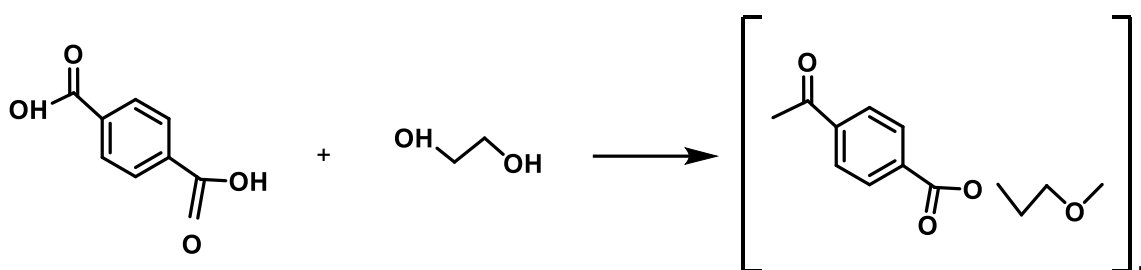
La plataforma seleccionada es *SciFinder – CAS* porque es una herramienta que tiene sus bases de datos actualizadas continuamente y además se encuentra indexada con las industrias, mediante el código CAS y se muestra las casas comerciales donde podemos adquirir el reactivo presentado en la síntesis.

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

La síntesis seleccionada muestra como primer paso de reacción es una deshalogenación reductiva catalizada con plata, empleando el ácido p-toluico, para sintetizar ácido terftálico como se puede observar en la siguiente reacción, obteniendo un rendimiento del 68%.



El segundo paso de reacciones se da con el catalizador acetato de antimonio; durante un tiempo 6 h, a una temperatura de 210 °C entre el ácido terftálico y el etilenglicol para formar la unidad polimérica de tereftalato de polietileno, como se pude observar en la siguiente reacción.



Conclusiones

- La implementación de un catalizador basado en tetraóxido de titanio como menciona (Konuma, 2012) en sustitución del óxido de antimonio, se realiza mediante una búsqueda en diferentes proveedores de químicos, siendo el precio más factible de \$36,40 de la casa comercial *Fisher Scientific*, lo cual se compara con el catalizador de antimonio que en la misma casa comercial el precio es de \$70,50 con una diferencia de \$34,10 dólares.
- Se modifica la cantidad de etilenglicol por mol de ácido tereftálico para contrastar la bibliografía de (García & Naranjo, 2017) y (Konuma, 2012) y se obtiene una producción estándar que es de 19,70 ton/h con una conversión del 90% y con la propuesta se llega a una producción de 23,35 ton/h con una conversión del 95% teniendo una diferencia entre el estándar y la propuesta de 3,65 ton/h de producción.
- Se implementa el uso de la herramienta *Solver* de Excel lo que facilita encontrar un resultado adecuado dentro de los parámetros establecidos, obteniendo una nueva conversión con la misma cantidad de materia prima, para pasar de una conversión del 90% a 95% mejorando la producción de 19,70 ton/h a 21,30 ton/h que representa en una hora de producción un aumento de 1,60 ton/h.
- Con la información de fuentes bibliográficas revisadas se contrasto la búsqueda para así determinar qué parámetros poder comparar como es la conversión, costos de producción del catalizador y rutas de síntesis.
- Con el mejoramiento del catalizador la viscosidad intrínseca aumenta y por ende se tiene un mayor grado de polimerización obteniéndose mayor peso molecular.

Recomendaciones

- Implementar la parte experimental con el fin de analizar las propiedades del producto obtenido.
- Se recomienda verificar los costos de los catalizadores con diferentes proveedores de químicos para determinar la variación de precios.
- Optar por el uso de simuladores como SciFinder – CAS que permite obtener más rutas de síntesis y acceso a casas comerciales que disponen de los reactivos necesarios.
- Plasmar información de bases bibliográficas de los últimos 5 años para verificar los avances más recientes.
- Se recomienda el uso de otros catalizadores como: titanio, aluminio y germanio con el fin de mejorar las propiedades físicas del polímero que se va a obtener

Bibliografía

- Aldabe, S., & Aramendia, P. (2004). *Química 2. Química en acción*. Ediciones Colihue SRL.
- Álvarez, M., & Picado. (2008). *Química i*. EUNED.
- Atkins, P. (2007). *Química Física*. Ed. Médica Panamericana.
- Atkins, P. W., & Jones, L. (2006). *Principios de química: Los caminos del descubrimiento*. Ed. Médica Panamericana.
- Besednjak, A. (2009). *Materiales Compuestos*. Univ. Politècnica de Catalunya.
- Biblioteca Virtual UNIR | Universidad Internacional de La Rioja*. (s. f.). Recuperado 15 de junio de 2022, de <https://recursosbiblioteca.unir.net/biblioteca/serviciosBiblioteca.html>
- Brown, T. L., Jr, H. E. L., Bursten, B. E., & Burdge, J. R. (2004). *Química: La Ciencia Central*. Pearson Educación.
- Cabildo Miranda, P., Claramunt Vallespí, R., Escolástico León, C., Esteban Santos, S., Farrán Molares, Á., García Fernández, Á., López García, C., Pérez Esteban, J., Pérez Torralba, M., Gutierrez, D., Castillo, D., & Cornago Ramírez, P. (2008). *Reciclado Y Tratamiento de Residuos*. Editorial UNED.
- Callister, W. D. (1996). *Introducción a la ciencia e ingeniería de los materiales. II*. Reverte.
- Canale, G. (2021). *Manual de materiales para la sustentabilidad*. Nobuko.
- Caselles, P. M. J., Rosa, G. A. M., Mariano, M. M., & Jesús, S. H. (2015). *Química Aplicada a la Ingeniería*. Editorial UNED.
- Chawla, K. (2016). *Fibrous Materials*. Cambridge University Press.
- Crawford, C. B., & Quinn, B. (2017). Physiochemical properties and degradation. En *Microplastic Pollutants* (pp. 57-100). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-809406-8.00004-9>
- Ebewele, R. O. (2000). *Polymer science and technology*. CRC Press.
- Ege, S. (1998). *Química orgánica tomo 2*. Reverte.

- García, M. de la O., & Naranjo, M. (2017). *Ingeniería básica de una planta de producción de Polietileno Tereftalato* [Universidad de Sevilla].
<https://biblus.us.es/bibing/proyectos/abreproy/91113/fichero/TFGdefinitivo.pdf>
- Groover, M. P. (1997). *Fundamentos de manufactura moderna: Materiales, procesos y sistemas*. Pearson Educación.
- Helbing, W., & Burkart, A. (1985). *Química. Tablas para laboratorio e industria*. Reverte.
- Henley, E. J., & Rosen, E. M. (2012). *Cálculo de balances de materia y energía*. Reverte.
- Hermida, É. (2011). *09 Polimeros Guía Didáctica*. StuDocu.
<https://www.studocu.com/latam/document/universidad-de-el-salvador/quimica/09-polimeros/9377797>
- Himmelblau, D. M. (1997). *Principios básicos y cálculos en ingeniería química*. Pearson Educación.
- Hougen, O. A., & Ragatz, R. A. (1982). *Principios de los procesos químicos balances de materia y energía, VOL 1*. Reverte.
- Intratec. (2017). *Polyethylene Terephthalate Production Process Cost Analysis PET E12A*. Intratec.
- Iruin, J. J., & Fernandez-Berridi, M. J. (2019). *Fundamentals de Ciencia de Polimeros: Un Texto Introductorio*. CRC Press.
- Konuma, S. (2012). *Método para producir tereftalato de polietileno* (Patent N.º ES2378403).
https://patentscope.wipo.int/search/es/detail.jsf?docId=ES45793255&_cid=P10-L4NLQM-05346-1
- Milena, G. V., Tania. (2019). *Polímeros: Generalidades y tendencias de investigación en Colombia*. Editorial Universidad del Cauca.
- Moran, M. J., & Shapiro, H. N. (2004). *Fundamentos de termodinámica técnica*. Reverte.
- Nageswar, P. R., Sabavath, G., & Paul, S. (2021). Impact of MTA blend percent in melt spinning process and polyester properties. *SN Applied Sciences*, 3.
<https://doi.org/10.1007/s42452-020-04090-2>

- Pérez, J. A. G. (2004). *Panorama actual de la química farmacéutica*. Universidad de Sevilla.
- Rao, M. V., Al-Munif, M., & Bashir, Z. (2014). *Proceso para hacer tereftalato de polietileno.: Patentados.com* (Patent N.º EP09075114). <https://patentados.com/2013/proceso-para-hacer-tereftalato>
- Reynoso, S. L. (2018). *Los Polímeros Plásticos: Los Conceptos Básicos que debes conocer durante y al salir de la Universidad*. Sara L Reynoso.
- Rodríguez, J. F. C. (2014). *Acondicionado de materiales termoplásticos para su transformación. QUIT0209*. IC Editorial.
- Romão, W., Spinacé, M. A. S., & Paoli, M.-A. D. (2009). Poli(tereftalato de etileno), PET: Uma revisão sobre os processos de síntese, mecanismos de degradação e sua reciclagem. *Polímeros*, 19(2), 121-132. <https://doi.org/10.1590/S0104-14282009000200009>
- Romo, D., & Romo, D. (2016). Refinación de petróleo en México y perspectiva de la Reforma Energética. *Problemas del desarrollo*, 47(187), 139-164.
- Seymour, R. B., & Carraher, C. E. J. (2021). *Introducción a la química de los polímeros*. Reverte.
- Trojan, K. L. (1999). *Production of polyethylene terephthalate* (United States Patent N.º US5898059A). <https://patents.google.com/patent/US5898059A/en>
- Valenzuela, E. E. M. (2020). *La investigación en ingeniería: Análisis y solución de casos desde el aula*. Editorial Autores de Argentina.
- Weber, R. J., Perkins, D. N., & Perkins, D. N. (1992). *Inventive Minds: Creativity in Technology*. Oxford University Press.
- Yúfera, E. P. (1995). *Química orgánica básica y aplicada: De la molécula a la industria*. vol 2. Reverte.
- Zohaib, H., Iqra, K., Hafiza, Z., Yasir, M., & Awais, A. (2019). *Production of Poly Ethylene Terephthalate (PET) resin from PTA and EG. (By Polymerization)* [NFC Institute of Engineering and Fertilizer Research]. <https://pdfcoffee.com/production-of-polyethylene-terephthalate-pet-resin-from-pta-and-eg-pdf-free.html>

Anexos