

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
CARRERA DE PETROQUÍMICA

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

AUTORA:

Castellano Jácome, Nayeli Stefania

TUTOR:

Ing. Santana Romo, Fabián Mauricio PhD.



INTRODUCCIÓN

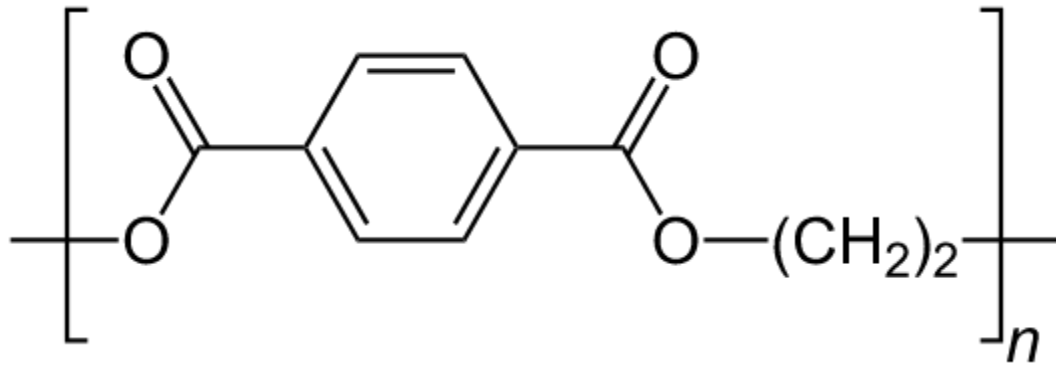
OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

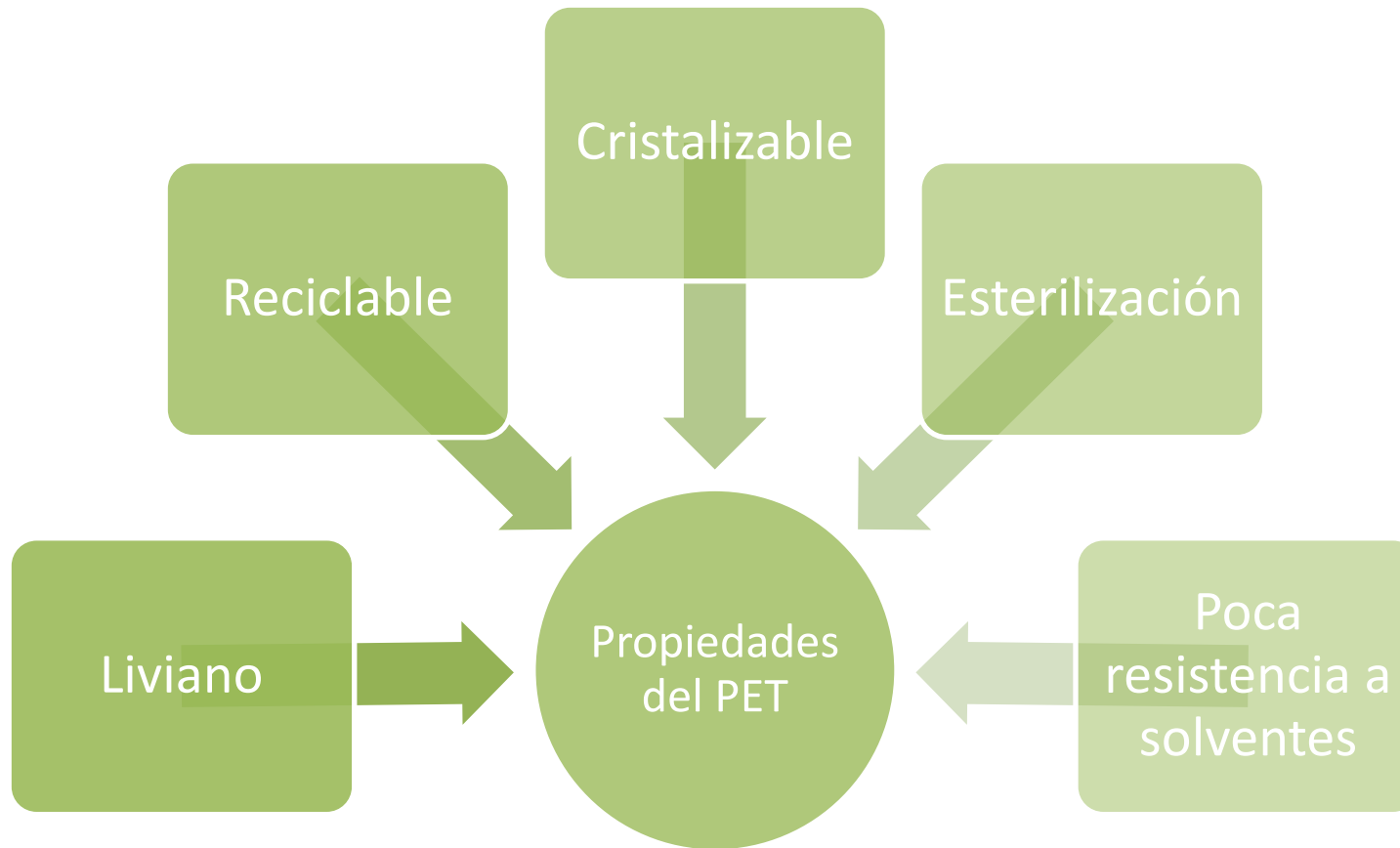
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Tereftalato de polietileno (PET)



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)

Características que presenta el tereftalato de polietileno



INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

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.

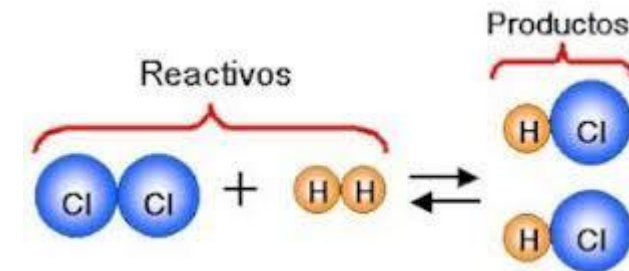
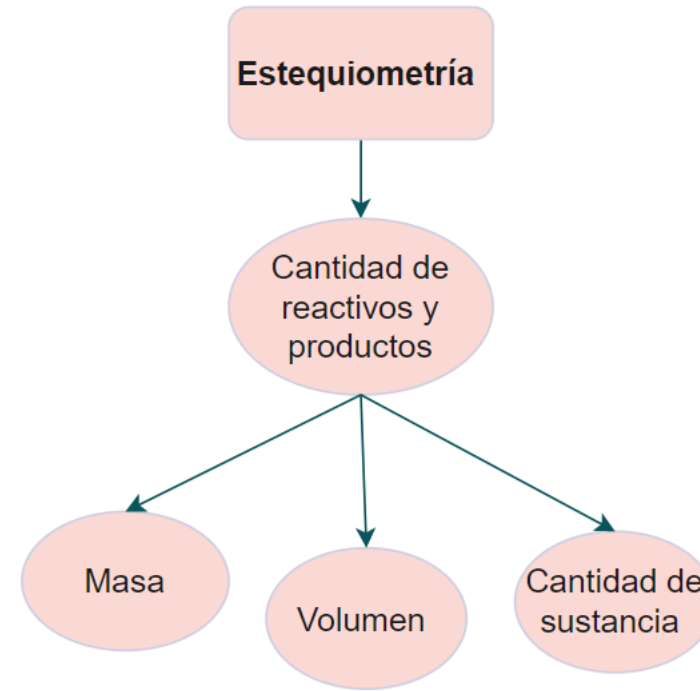
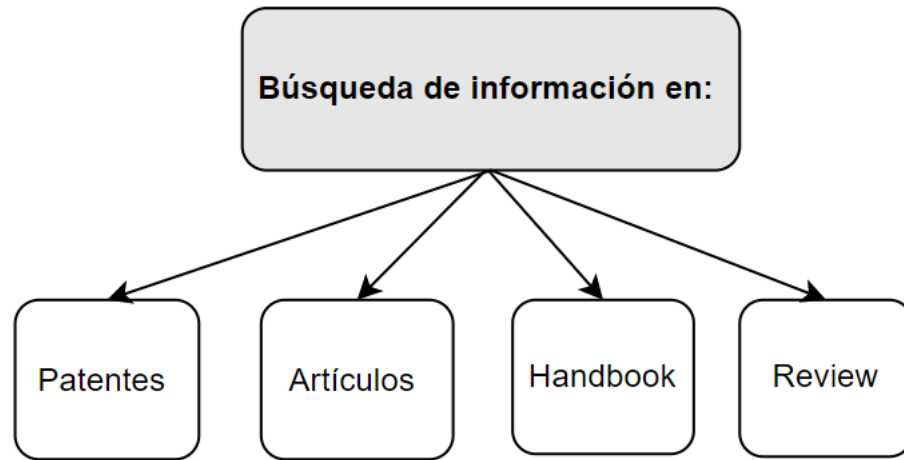
INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

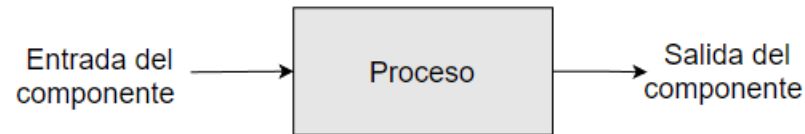
ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES



Balance de Masa

Ley de la conservación de la materia



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

Rendimiento

Real

Teórico

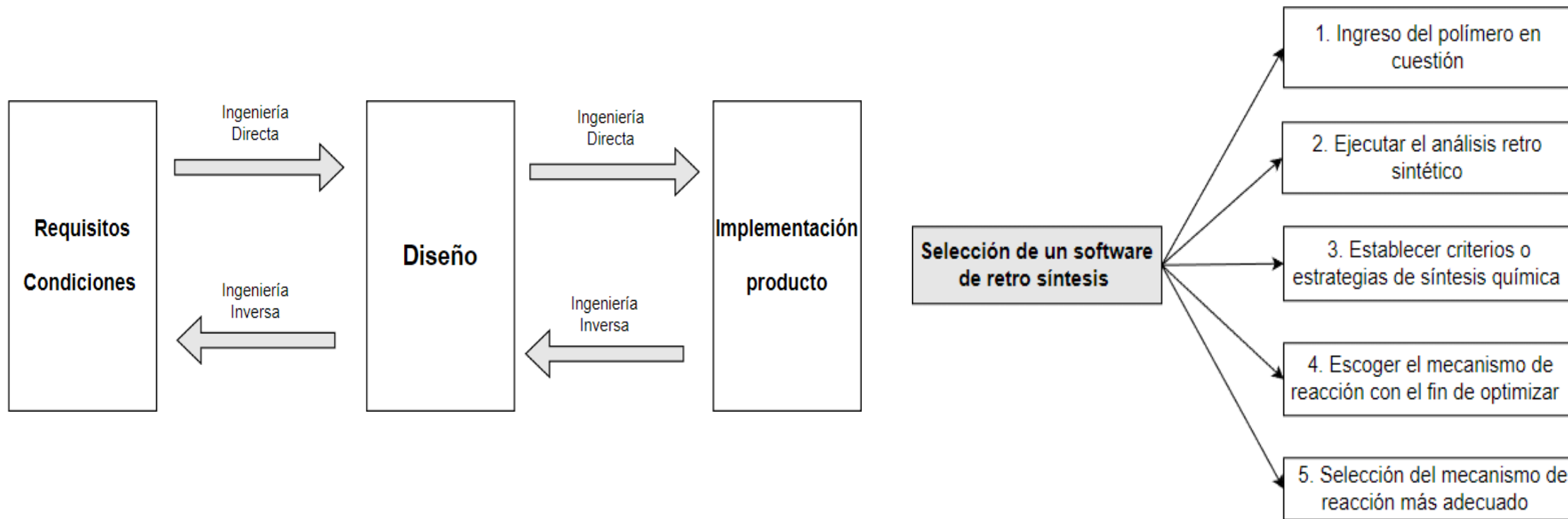
Rendimiento real ≤ Rendimiento teórico

Conversión

Cantidad de reactivo consumido

Cantidad de reactivo alimentado





INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

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

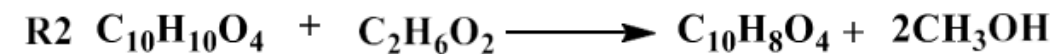
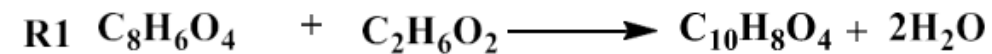
Catalizadores aplicados en el proceso de producción del tereftalato de polietileno

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

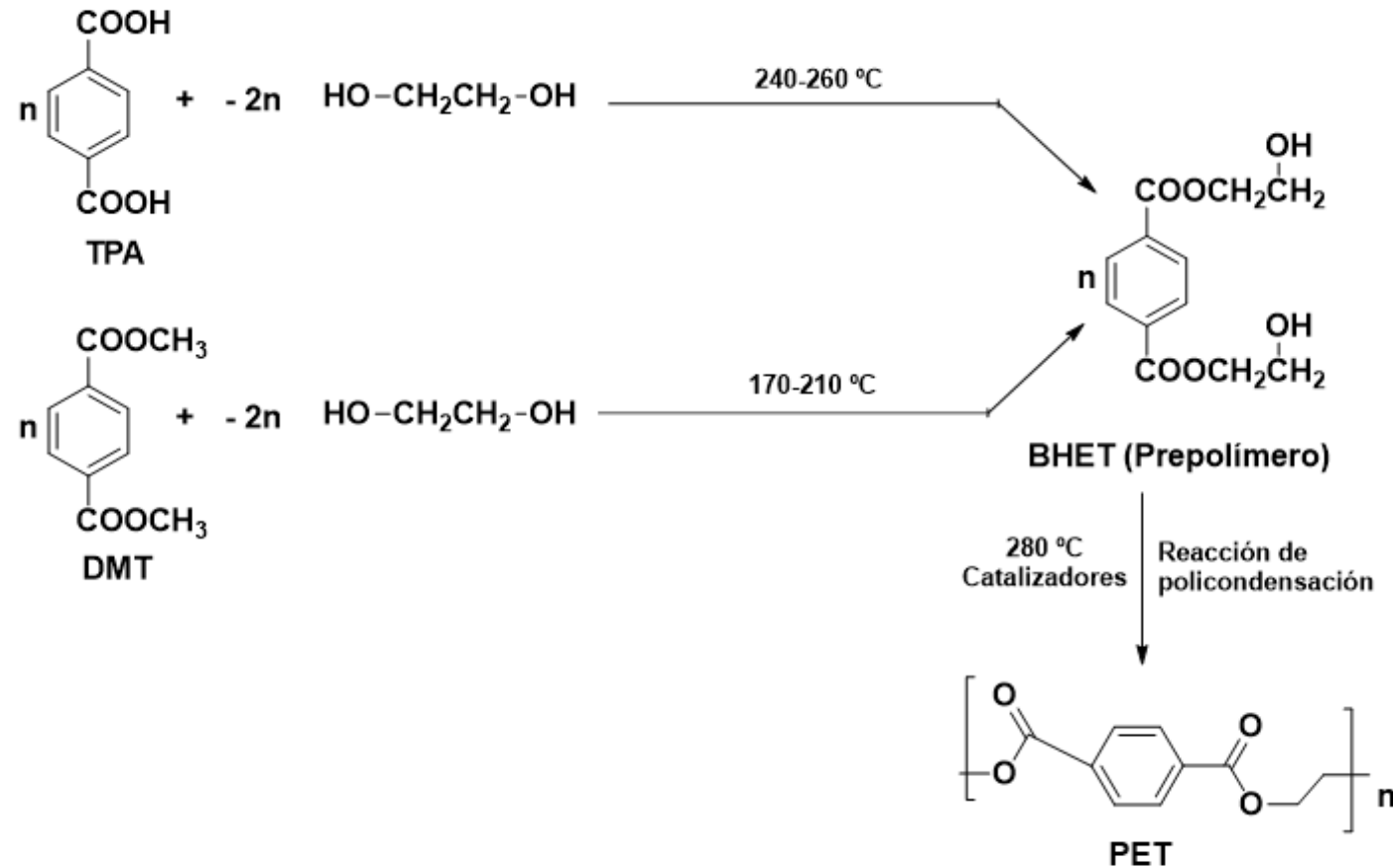
Aditivos aplicados en el proceso de producción del tereftalato de polietileno

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

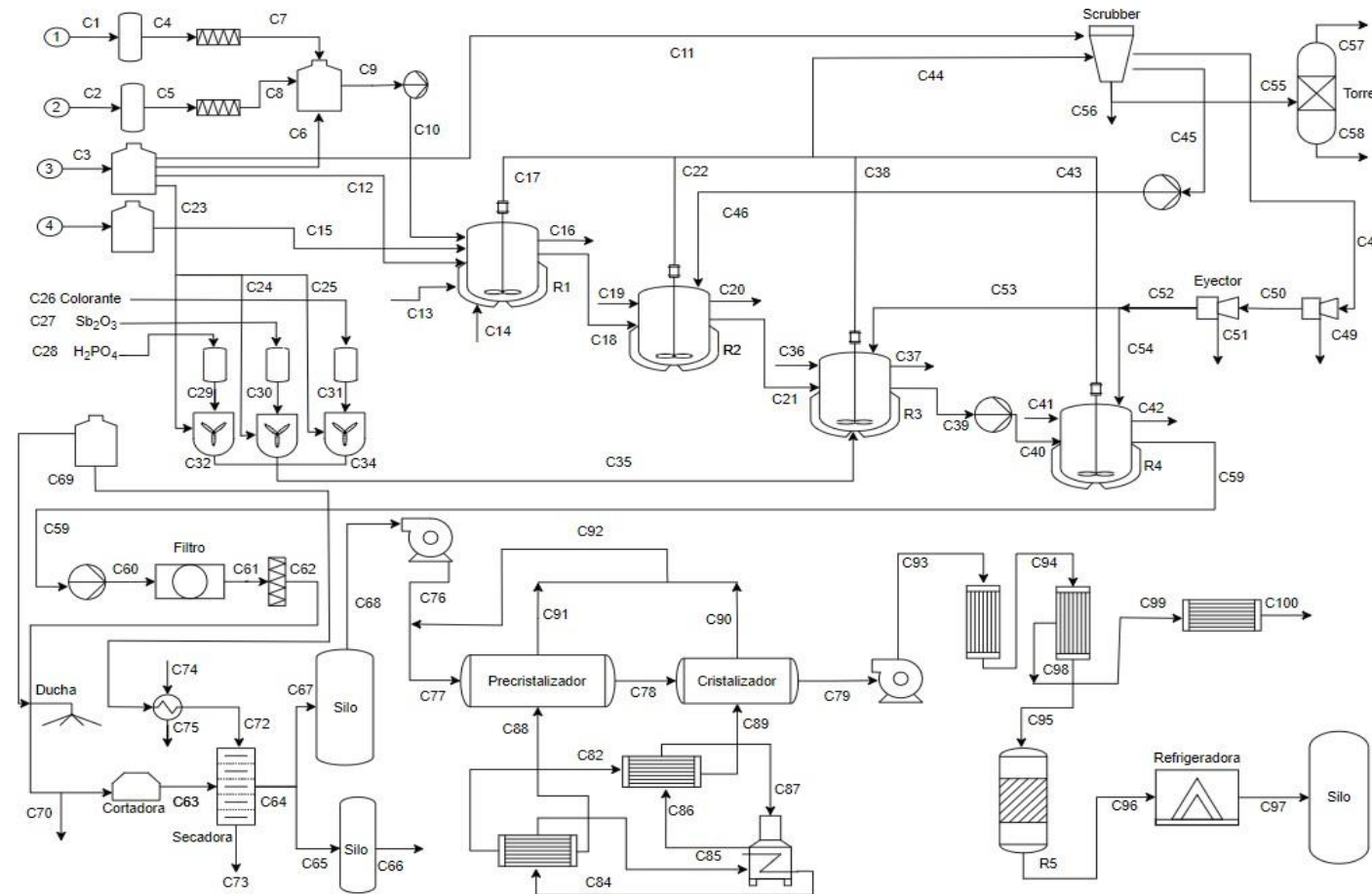
Elaboración de la estequiometria de las reacciones de producción de PET



Reacciones de producción de PET

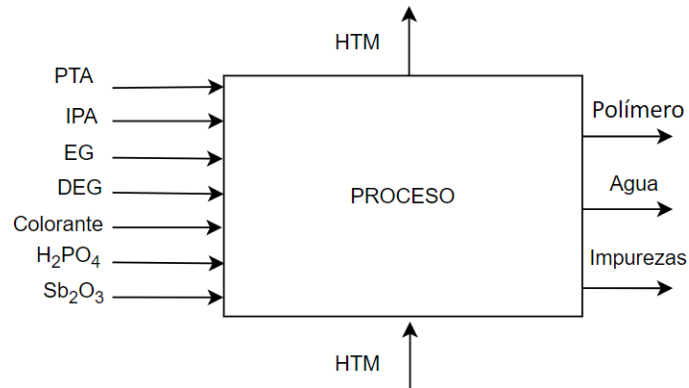


*Elaboración de un
diagrama de proceso de
producción de PET*



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. 2012, Universidad de Sevilla.

Balace de masa de la producción de PET



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

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	-
Sb ₂ O ₃	6x10 ⁻³	-
H ₂ PO ₄	4x10 ⁻⁴	-
Impurezas	-	7,38
Polímero	-	19,7
Agua	-	3,45
Total	76,07	76,07

Balance de masa de la producción de PET contrastando la bibliografía, en el flujo

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

de entrada

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

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

Maximización de la producción de PET mediante el uso de la herramienta Solver Excel

Excel Solver Parameters																		
File	Home	Insert	Page Layout	Formulas	Data	Review	View	Help	Tell me what you want to do									
AD4																		
1	Materias Primas						Aceite de calentamiento				Aditivos		Conversion					
2	PTA	15,13					R1	15,4			Colorante	0,06	R1	0,95				
3	IPA	0,8					R2	1,46			Catalizador	0,006	R2	0,95				
4	EG	24,18					R3	5,48			H2PO4	0,4						
5	DEG	0,51					R4	1,48			Aire 1	22,89						
6											Aire 2	24,89						
7											Aire 3	36,25						
8																		
9																		
10																		
11																		
12																		
13																		
14										14,1				1,96	28,5			
15																		
16																		
17	Elemento	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8	C9	C10	C11	C12	C13	C14	C15	C16	C17
18	IPA		0,8			0,80			0,8	0,8	0,8							
19	PTA	15,13			15,1			15,1		15,1	15,1							
20	EG			24,2			3,98			3,98	3,98	7,62	9,318972	0,759				0,45
21	Pasta										19,9							
22	DEG															0,51		
23	HTM														15,4		15,4	
24	H2O																	1,513

Parámetros de Solver

Establecer objetivo:

Para: Máx Min 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.

Maximización de la producción de PET mediante el uso de la herramienta Solver Excel

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

		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	

*Precio del catalizador
de producción de PET*

Comparación del rendimiento real y teórico en la producción de PET


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)

CAS Scifinder

Retrosynthesis

Draw or import a structure to perform a retrosynthetic analysis. Learn more about Retrosynthesis searching.

Enter a CAS Registry Number, SMILES, 

Draw or change atoms or bonds.

Molecular Formula: Zoom: 100%

Start Retrosynthetic Analysis

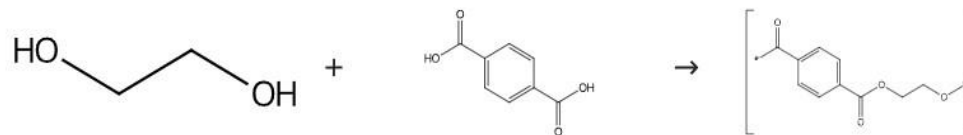
Recent Search History

View All Search History

Reactions (7,483)

Scheme 1 (1,583 Reactions)

Steps: 1 Yield: 100%

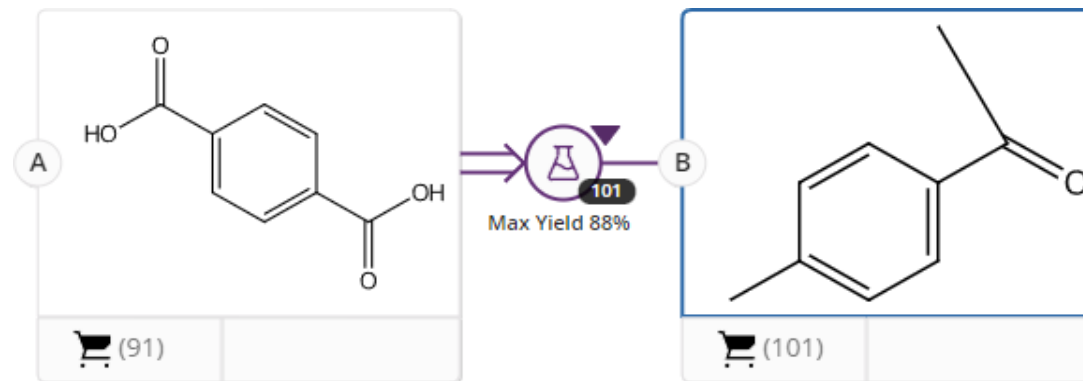


Suppliers (140)

Suppliers (91)

Suppliers (37)

Expand Scheme



INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

- 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 en diferentes proveedores de químicos, siendo el precio mas 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 contrastó 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.

- 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

GRACIAS