

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Química

BALANCE TÉRMICO GENERALIZADO EN UN PROCESO QUÍMICO
OBTENCIÓN DE FENOL

Tesis

Para Examen Profesional

de

Ingeniero Químico

Presentado a la Consideración

del

H. Jurado

José Refugio Servín García

1 9 7 3

M-165672



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

A la memoria de mis padres:

Ma. Isabel García E.

Sabino Servín J.

Con cariño

A mi esposa:

Dra. Ofelia Plaza M.

A mi hijo:

Pedro Antonio

A mi hijo:

Enrique Salvador

A mi hermano:

Antonio Servín G

A mi hermana:

Sor Concepción Servín

A mis primos:

Luis García B

Rubén García B

A mis maestros

Con especial reconocimiento y gratitud:

I.Q. Raul Meyer Stoffel

Q.T. Othón Canales Valverde

A todos mis familiares

y

Amigos



FACULTAD DE QUIMICA
DEPTO. DE PASANTES Y
EXAMENES PROFESIONALES.

FORMA C

Universidad Nacional Autónoma de México (AUTORIZACION PARA ESCRIBIR DEFINITIVAMENTE EL TEMA REVISADO)

C. Director Gral. de Servicios Escolares
Universidad Nacional Autónoma de México,
P r e s e n t e .

Me permito comunicar a usted, que el tema de T E S I S .

Titulado: "BALANCE TERMICO GENERALIZADO EN UN PROCESO
QUIMICO OBTENCION DE FENOL".

que presenta: EL SR. JOSE REFUGIO SERVIN GARCIA

Pasante de la Carrera de: INGENIERO QUIMICO

Fué aceptado por el Jurado nombrado para dicho examen, el cual quedó inte -
grado en la siguiente forma:

Presidente Prof.: RAUL MEYER STOPFEL

V o c a l " : PABLO BARROETA GONZALEZ

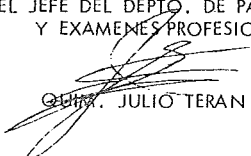
Secretario " : GERARDO BAZAN NAVARRETE

1er. Suplente " : GERARDO RODRIGUEZ ALONSO

2o. Suplente " : ROBERTO ANLRUDE CRUZ

A t e n t a m e n t e
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU "
Cd. Universitaria D.F., a 13 de JULIO de 1973

EL JEFE DEL DEPTO. DE PASANTES
Y EXAMENES PROFESIONALES.


QUIM. JULIO TERAN Z.

I N D I C E

	Página
INTRODUCCION	I
CAPITULO I	
CONCEPTOS GENERALES	1
Laminados Fenólicos	1
Adhesivos Fenólicos	1
Pinturas	2
Industria del Petróleo	2
Productos Químicos	3
CAPITULO II	
OBTENCION DEL FENCL	4
A partir del Cumeno	4
Proceso de Sulfanación	6
De Clorobenceno	7
Proceso Regenerativo	8
CAPITULO III	
ESTUDIO DEL PROCESO	12
Condensador	14
Absorbedor	18
Desabsorbedor	20
Fraccionador	23
CAPITULO IV	
DISCUSION DE RESULTADOS	29
Condensador	29
Absorbedor	29
Desorción	41
Destilación	50
CAPITULO V	
CONCLUSIONES	55

	Página
GRAFICAS	57-A
BIBLIOGRAFIA	58

INTRODUCCION

Aproximadamente el 96% del fenol fabricado se obtiene en forma sintética, estimativamente el 43% de éste fenol sintético se produce por el método del cumeno, considerándose que para 1975 el 65% del fenol sintético se obtendrá por éste método.

La obtención del fenol de fuentes naturales continuará - siendo relativamente pequeña, o sea alrededor de un 4%.

Se estima que el consumo del fenol aumentará a una velocidad de un 5% al año, resultando que para 1975 se tendrá una demanda de 685 millones de kilogramos, comparados con 54 millones de kilogramos en 1965.

La mayor parte del consumo de fenol, corresponde a los -- Estados Unidos de Norteamérica. El material que más afecta el costo de obtención del fenol es básicamente el benceno, en el método del cumeno se obtiene como subproducto acetona, lo cual favorece la economía del proceso.

La gran variedad de materiales derivados del fenol proviene básicamente de la reacción entre el fenol y el formaldehído.

Variando las condiciones de la reacción entre el fenol y el formaldehído, así como el empleo de diferentes catalizadores y - agentes químicos, se producen materiales resinosos con un amplio -- rango de propiedades.

Con el objeto de dar una idea generalizada de los productos que pueden obtenerse, se mencionarán los siguientes:

Productos moldeados y laminados diversos, aislantes para contactos eléctricos, pinturas, adhesivos, estabilizadores, antioxidantes, etc.

Considerando la gran importancia de algunos de éstos productos, se ve la conveniencia de examinar éstos materiales mas ampliamente.

C A P I T U L O I

CONCEPTOS GENERALES

LAMINADOS FENOLICOS

Estos se producen por la saturación o impregnado de materiales base, con soluciones de resinas fenólicas, las cuales curan por la aplicación de calor y presión enlazando así el material base.

Entre los materiales más comunmente usados como base, se encuentran el papel, algodón, lana, fibra de vidrio y asbesto.

Se obtienen diferentes tipos de laminados de acuerdo con la presión a la cual se moldean. Con los laminados de alta presión, se fabrican partes estructurales como barras, cubiertas, tubos, ángulos y canales de diversas formas; encuentran también un uso extensivo en la industria eléctrica como aislantes, pizarrones, contratapas, recipientes químicamente resistentes, etc.

Los laminados de baja presión, requieren de equipo menos complejo y a partir de ellos se obtienen una gran variedad de productos incluyendo cascos de botes, partes de aeroplanos, furgones de equipaje, carrocerías, zapatas de frenos, cañerías y otros materiales diversos.

ADHESIVOS FENOLICOS

Se usan ampliamente en aquellos casos en que se requieren uniones fuertes, durables y resistentes al agua; por ejemplo, en las cubiertas de los barcos y ensambles arquitectónicos; asimismo se em

plea como antiabrasivo en bandas y ruedas de transmisión.

Estos se pueden aplicar líquidos y en algunos casos películas delgadas semisólidas que soportan desde la temperatura ambiente hasta 100°C.

PINTURAS

Los recubrimientos fenólicos han encontrado gran aplicación en aquellos casos donde se aprovecha su alta resistencia a la corrosión, promovida por agentes químicos.

Primordialmente su uso está en la producción de barnices fenólicos y que se utilizan en la fabricación de acabados que se emplean en el revestimiento de tanques, interior de latas para alimentos, envases de pinturas, etc.

La reacción de ciertos fenoles modificados con formaldehído, da lugar a ciertas resinas que mezcladas con barnices alquídicos les imparte una gran flexibilidad, asociada con la resistencia peculiar del fenol. Produciéndose también polímeros de rápido secado, que encuentran aplicación en primers.

INDUSTRIA DEL PETROLEO

El fenol y algunos de sus derivados se utilizan en refinerías como vehículos para favorecer la desorción y eliminar compuestos indeseables de aceites lubricantes.

Es materia prima fundamental para la producción de muchos estabilizadores y antioxidantes para motores que consumen aceite, formándose en éstos una fina película de barro y la corrosión se in

hibe.

En la obtención del tolueno de fracciones del petróleo se obtiene una mezcla de sustancias que no pueden separarse por destilación normal. Con la adición de fenol, las fracciones altas pueden destilarse y el tolueno separarse posteriormente del fenol.

PRODUCTOS QUIMICOS

El ácido salicílico es un producto intermedio de mucha importancia para la síntesis de diferentes compuestos que se elaboran en la industria farmacéutica, su principal uso está en la preparación de compuestos medicinales (aspirinas) y en la industria de perfumes.

El ácido por si mismo, se emplea como inhibidor para la vulcanización del hule. La alquilación del fenol da lugar a compuestos como el p-terbutil fenol, p-sec butil fenol, nonil fenol y amil fenol, etc.

C A P I T U L O II

OBTENCION DEL FENOL

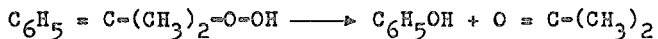
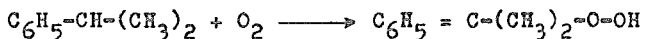
A PARTIR DEL CUMENO

Este proceso se desarrolla en dos pasos distintos,

1.- El cumeno se obtiene por alquilación del benceno cuando éste reacciona con propileno.

2.- El cumeno se oxida dando lugar a un hidroperóxido y del rompimiento de éste se obtiene fenol y acetona.

La reacción que se verifica es la siguiente:



En éste proceso el benceno se mezcla con propileno en un tanque, se agita y la carga resultante se alimenta al reactor.

Se utiliza un catalizador sólido de ácido fosfórico, el cual se encuentra en lechos catalíticos a través del reactor, como la reacción es exotérmica se recomienda adicionar entre los lechos propano para propósitos del control de temperatura.

El destilado producido va al despropanizador, las colas pasan a la columna recuperadora de benceno, eliminándose éste en la parte superior.

El cumeno obtenido se saca por el fondo de la columna y se

purifica en una nueva columna, hasta obtenerse con una pureza de un 99.8%.

En la obtención del fenol el proceso de oxidación se lleva a cabo, en reactores especialmente diseñados para que exista una mezcla íntima de gas y líquido. La reacción se verifica a 260°F y a una presión ligeramente superior a la atmosférica.

El destilado de la oxidación pasa a través de un condensador para la recuperación del cumeno y otros productos orgánicos.

De la oxidación del cumeno se obtiene su hidroperóxido, que se descompone en fenol y acetona en una columna de separación.

El desdoblamiento se verifica por el contacto del hidroperóxido de cumeno con ácido sulfúrico diluido (10-25 %) en un tanque con agitación, a una temperatura de 130 a 150°F.

La conversión del cumeno es muy baja, un análisis de la torre lavadora de agua demuestra que el 76% del cumeno no reacciona y solamente se obtiene el 14% de fenol y 8% de acetona, el resto se considera como impurezas.

Esta mezcla se separa en una serie de columnas de destilación convencionales.

En un sistema de cuatro unidades, la acetona se separa en el destilado de la primera columna, cumeno en la segunda y alfa-metil estireno de la tercera, el fenol producido se separa de la cuarta columna.

Las colas de esta columna contienen acetofenona impurificada con pequeñas cantidades de alquitrán de huya y fenol. De llegar

a existir una concentración notable de éste se procede a un refinamiento y recuperación posterior.

Este proceso del cumeno es extraordinariamente uno de los mejores métodos, el cual es sin embargo el principio de un proceso petroquímico.

PROCESO DE SULFONACION

Los cuatro pasos de éste proceso son:

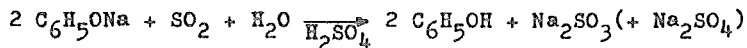
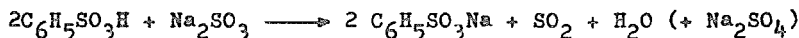
1.- El benceno reacciona con ácido sulfúrico para formar ácido bencen-sulfónico.

2.- El ácido bencen-sulfónico se convierte a bencen-sulfonato de sodio, por reacción con sulfito de sodio.

3.- Por fusión caústica del bencen-sulfonato de sodio, se produce fenato de sodio.

4.- El fenato de sodio se acidifica con dióxido de azufre y una pequeña cantidad de ácido sulfúrico para formar el fenol.

REACCIONES



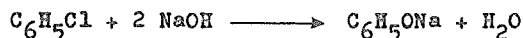
Al final la purificación del fenol, se verifica en una serie de tres columnas.

Grandes cantidades de sulfito y sulfato de sodio, se obtienen como subproducto en el proceso.

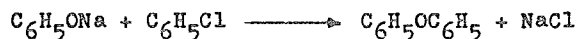
Deben emplearse materiales especiales en el equipo con el objeto de combatir la corrosión.

FENOL DE CLOROBENCENO

La ventaja de emplear el clorobenceno como punto de partida para la obtención del fenol es bastante notoria. Se logró su fabricación en forma industrial en el año de 1917, cuando Aylesworth trató el clorobenceno con solución acuosa de sosa, el proceso se llevó a alta temperatura y presión formándose el fenolato de sodio.



Posteriormente el proceso fué aceptado por la Dow Company y las imperfecciones de su producción fueron corregidas. Uno de éstos era la producción de óxido de difenilo, que necesariamente debía eliminarse.



El problema se resolvió, por la adición a la mezcla de óxido de difenilo en la misma cantidad con que normalmente se formaba, se adicionó el uso de una sal de sodio de un ácido débil (carbonato de sodio), en vez de hidróxido de sodio en presencia de cobre metálico como catalizador, permitiendo la obtención del fenol sin la necesidad de llegar al fenolato de sodio, eliminando también consecuentemente la acidificación.

Ninguna descripción autoritaria de los detalles específicos de la operación, han sido publicados por la Dow.

Esencialmente el método consiste, en tratar conjuntamente clorobenceno con óxido de difenilo y solución de carbonato de sodio a una presión de 3,000 lb. y una temperatura de 320°C. La emulsión resultante se bombea a presión a través de un sistema tubular hecho de cobre, con recirculación y descarga continua de pequeñas porciones equilibradas con la carga que se alimenta.

Los tubos de la autoclave, tienen paredes gruesas de cobre de 1.25 pulgadas de diámetro exterior y el paso de la emulsión a través de ellos, es suficientemente turbulento para mantener en dispersión el líquido orgánico.

El óxido de difenilo a presión moderada sirve como medio de calentamiento; el fenol se forma como tal y no como fenolato y la conversión es aproximadamente cuantitativa.

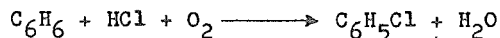
PROCESO REGENERATIVO

El proceso regenerativo o de Rasching para la obtención del fenol se basa en dos procesos bien conocidos.

1.- La producción de clorobenceno, a partir de benceno, ácido clorhídrico y aire.

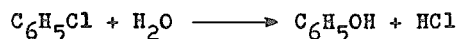
2.- La hidrólisis de clorobenceno con vapor de agua en presencia de un catalizador.

Un exámen de las reacciones, demuestra que los subproductos obtenidos en un paso se usan en el otro.



En el primer paso el ácido clorhídrico se consume y agua se produce; mientras que en el segundo, el agua se consume y el ácido clorhídrico se produce.

Combinando adecuadamente los dos pasos el fenol puede obtenerse más económicamente, consumiendo solamente benceno y oxígeno atmosférico.



Para la recuperación del ácido clorhídrico producido por la hidrólisis, es básico emplear solamente la cantidad limitada de agua en operaciones de lavado, de tal manera que el ácido clorhídrico obtenido se encuentre en solución al 17%, el cual se puede utilizar para la siguiente alogenación del benceno. Visto el proceso con más detalle es como sigue:

Por medio de un ventilador; clorobenceno y agua se envían a través de un calentador en el cual se usa vapor, cuando la mezcla alcanza una temperatura de 500°C se pasa a través del reactor, donde la hidrólisis catalítica se efectúa.

Los catalizadores que se emplean para este propósito son materiales que contienen ácido salicílico activo, o fosfatos de metales alcalino-terreos.

La mezcla de vapores que salen de la cámara catalítica se enfrían en un recuperador de calor, pasándose posteriormente éstos a una torre lavadora construida con materiales a prueba de ácidos.

Se adiciona agua y clorobenceno para eliminar por absorción el ácido clorhídrico; además que se compensa las cantidades que previamente reaccionaron y en ésta forma se equilibra, la mezcla de vapores circulantes.

El exceso de agua y clorobenceno alimentados en la primera torre lavadora para la absorción del ácido clorhídrico, pasan como vapores a un condensador.

El ácido clorhídrico separado de la torre se pasa a un extractor, que previamente se ha llenado con benceno y algo de fenol; la mezcla posteriormente se vaporiza para separar el ácido clorhídrico.

La solución de fenol que se forma en la base de la torre dos se pasa a un extractor y posteriormente se bombea a un equipo de fraccionación. De la base de éste equipo se separa el fenol; la conversión se estima aproximadamente en 10% por paso.

Los vapores de benceno precalentados, se mezclan con ácido clorhídrico de una concentración de 17% y aire, se introducen a un horno de contacto por medio de un soplador. Aquí el benceno se clora aproximadamente a 200°C en la presencia de un catalizador, que puede ser de fierro-cobre ó cobre-cobalto, soportados en tierra florida ó hidróxido de aluminio.

El clorobenceno que se forma tiene una conversión de 12% por paso, se recupera ventajosamente en una torre de destilación fraccionada.

Después de la separación del agua por decantación y del

benceno y diclorobenceno por destilación, se recircula y se emplea en la primera torre lavadora. El benceno inalterado pasa de la columna a un condensador y posteriormente bombeado a un tanque.

Pequeñas cantidades de ácido clorhídrico se pierden en el sistema regenerativo, formándose como subproductos dicloro-benceno y productos policlorados; algo de óxido de difenilo se forma durante el proceso hidrolítico.

Estas pérdidas constituyen las cargas de relleno del sistema.

C A P I T U L O III

ESTUDIO DEL PROCESO

Se hizo énfasis en los métodos que existen para la obtención del fenol, de entre ellos se seleccionó el método de Rasching, para el estudio del proceso.

No se considera que sea el más económico, su enfoque está dirigido a los problemas de Ingeniería que se presentan; los datos de las propiedades físicas de las sustancias que intervienen son escasos.

Para resolver éstos problemas de tipo físico-químico se recurrió a ecuaciones aproximadas, las presiones de vapor necesarias se obtuvieron mediante la siguiente ecuación:

$$\ln p_r = -A \frac{(1 - t_r)}{t_r} - e - 20 (t_r - b)^2$$

Para su aplicación se requiere de los siguientes datos:

$T_{eb.} (^{\circ}K)$	$T_{crit.} (^{\circ}K)$	$P_{crit.} (atm.)$	factor b
453.1	562.1	48.6	0.215

Resolviendo se tiene,

$$A = 3.4$$

Los calores específicos se obtuvieron por el método de contribución de grupos, dando lugar a una ecuación empírica del tipo:

$$C_p = a + bt + ct^2$$

Aplicando el método de Hougen & Wattson, se tiene:

Calor específico para el benceno,

$$C_p = -4.20 + 91.3 \times 10^{-3}t - 36.63 \times 10^{-6}t^2$$

Calor específico para el clorobenceno,

$$C_p = -4.61 + 95.65 \times 10^{-3}t - 39.49 \times 10^{-6}t^2$$

Calor específico para el fenol,

$$C_p = -3.63 + 94.64 \times 10^{-3}t - 40.16 \times 10^{-6}t^2$$

Calor específico para el ácido clorhídrico,

$$C_p = 6.70 + 0.84 \times 10^{-3}t$$

Las temperaturas de operación van del rango de 25°C a 500°C. Se calcularon los calores específicos medios y se presentan en la siguiente tabla.

$$\bar{C}_p = \text{cal./g-mol } ^\circ\text{K}$$

Temperatura °C	C ₆ H ₅ OH	C ₆ H ₅ Cl	C ₆ H ₆	HCl	H ₂ O
25	22.07	22.69		6.96	8.024
80	25.87		24.40		8.024
90	27.17	25.49	24.80		8.024
100	27.37	25.99	25.30		8.177
115	27.47		25.60		

120	27.87	26.99	6.97	8.177
150	29.22	28.61		
170	30.37			
180	30.77	30.49		
200	31.57	30.89	6.98	

A partir de los datos obtenidos del Groggins, se tratará - de intepretar el proceso y complementar haciendo muy variadas supo- siciones, con el objeto de dar las razones del comportamiento del equi- po, como son la composición, temperatura y presión que nos permitan - hipotéticamente operar la planta.

Para ésto se requiere practicar balances de material y ener- gía a través de cada una de las operaciones, que se verifican como se demostrará a continuación.

CONDENZADOR (TORRE No. 1)

Balance de material:

Base; 1 hr. de operación

Considerando la ecuación,

$$\frac{dV}{dT} = F_1 + F_2 - F_3 - F_4$$

Se estima que el volumen es constante a través del equipo y que la operación es continua, por lo que:

$$\frac{dV}{dT} = 0$$

Quedándonos finalmente,

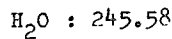
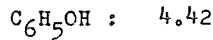
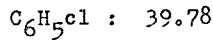
$$F_1 + F_2 = F_3 + F_4$$

Los gases que provienen del reactor donde se efectúa la hidrólisis, pasan a través de un cambiador de calor, que usa como medio de enfriamiento los vapores que salen del absorbedor, por contacto térmico la temperatura final de los gases se abate a 200°C y entran al condensador.

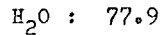
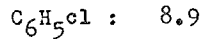
La composición se expresa por el siguiente balance:

Cantidades de entrada en moles/hr.

Fase gaseosa



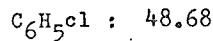
Fase líquida



La operación se verifica a contracorriente, separándose en el fondo del condensador el ácido clorhídrico, en solución al 17% y separándose además 0.17 moles de fenol; éstos valores se dan como dato.

Cantidades de salida en moles/hr.

Fase gaseosa



C_6H_5OH : 4.25

H_2O : 302.46

Fase líquida

C_6H_5OH : 0.17

Hcl : 4.42

H_2O : 21.02

Balance térmico:

Substituyendo los términos del balance de material y sintetizando, se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{d}{dt} (V, C, T) = (m \sum_{i=1}^n C_{pi} T)_{E} - Q - (m \sum_{i=1}^n C_{pi} T)_{S}$$

Donde:

E = corriente de entrada

S = corriente de salida

Q = calor de solución

$\frac{d}{dt} = 0$ (se considera que no hay variación con el tiempo)

C_{pi} = calores específicos de las sustancias que intervienen

Ordenando la ecuación nos queda finalmente,

$$(m \sum_{i=1}^n C_{pi} T)_{E} = Q + (m \sum_{i=1}^n C_{pi} T)_{S}$$

Se conocen los valores de la composición y el único dato - térmico es la temperatura de entrada, es pues conveniente fijar el -

sistema consistentemente; suponiendo la temperatura de entrada del líquido y la salida de éste.

Las condiciones como se lleva el proceso son adiabáticas, el comportamiento de las sustancias se estima sin interacciones, es decir ideal.

Temperatura de salida del gas.

Para su evaluación se necesitan los calores específicos que se presentan.

$$C_p = \text{cal./g-mol } ^\circ\text{K}$$

Temperatura $^\circ\text{C}$	$\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$	$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$	HCl	H_2O
25	22.69		6.98	8.024
200	30.89	31.57		8.177

El calor de solución del ácido clorhídrico al 17% es:

$$n = \frac{83}{17} = 4.88$$

que leído en gráficas de calores de solución del Williams & Johnston nos da:

$$H_s = -15,000 \text{ cal./g-mol}$$

Balance de energía de las corrientes que fluyen al condensador,

$$\begin{aligned} & (8.9)(22.69) \int_{273}^{298} dt + (77.9)(8.024) \int_{273}^{298} dt + (4.42)(6.98) \int_{273}^{473} dt \\ & + (245)(8.17) \int_{273}^{473} dt + (39.78)(30.89) \int_{273}^{473} dt + (4.42)(31.57) \int_{273}^{473} dt \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -66,600 + (4.25)(31.57) \int_{273}^{t_b} dt + (48.68)(30.59) \int_{273}^{t_b} dt + \\
&(302.46)(8.17) \int_{273}^{t_b} dt + (0.17)(31.57) \int_{273}^{298} dt + \\
&(25.61)(15.53) \int_{273}^{298} dt
\end{aligned}$$

Simplificando y resolviendo,

$$t_b = \frac{1.877,467}{4,099} = 458^{\circ}\text{K} = 185^{\circ}\text{C}$$

aquí nada más

ABSORBEDOR (TORRE No. 2)

En éste equipo se separa el fenol de la mezcla de vapores que sale del condensador, la transferencia se verifica del gas al líquido; en el diseño de absorbedores es fundamental el cálculo del solvente, en ésta situación no se requiere ya que se da como dato.

Balance de material:

Base: 1 hr. de operación

La solubilidad del fenol en agua, a 80°C es infinita, de ésto se estima que la absorción es del 99%, las corrientes del sistema se pueden sintetizar como sigue:

Cantidades de entrada en moles/hr.

Fase gaseosa:

$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH} : 4.25$

$\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} : 48.68$

H₂O : 302.46

Fase líquida

C₆H₅OH : 0.08415

H₂O : 445.00

Cantidades de salida en moles/hr.

Fase gaseosa

C₆H₅OH : 0.0425

C₆H₅Cl : 48.68

H₂O : 302.46

Fase líquida

C₆H₅OH : 4.2916

H₂O : 445.00

Balance térmico

El cálculo de la temperatura de salida en la solución -
fenol-agua, se obtiene aplicando la siguiente ecuación,

$$L_2 H_{L2} + G_1 H_{G1} = G_2 H_{G2} + L_1 H_{L1}$$

Donde:

$$H_{L1} = \bar{c}_L M_{av.} (t_L - t_b) + \Delta H_B$$

Para su aplicación disponemos de los siguientes datos in
directos, de los calores específicos.

$$C_p = \text{cal./g-mol } ^\circ\text{K}$$

Temperatura $^\circ\text{C}$	$\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$	$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$	H_2O
110	26.69	27.47	8.17
100	25.99	27.37	
80		25.97	8.024

Cálculo de la temperatura de salida,

$$\begin{aligned}
 & (445)(8.024) \int_{273}^{353} dt + (0.084)(25.97) \int_{273}^{353} dt + (4.25)(27.47) \int_{273}^{383} dt \\
 & + (302.46)(8.17) \int_{273}^{383} dt + (48.68)(26.69) \int_{273}^{383} dt = \\
 & (48.68)(25.99) \int_{273}^{373} dt + (302.46)(8.17) \int_{273}^{373} dt + \\
 & (0.0425)(27.37) \int_{273}^{373} dt + (445)(8.024)(t_L - 273) + \\
 & (4.291)(25.97)(t_L - 273)
 \end{aligned}$$

Simplificando y resolviendo,

$$t_L = \frac{1.337,810}{3,710} = 358^\circ\text{K} = 85^\circ\text{C}$$

DESABSORBEDOR (TORRE No. 3)

Como medio para la desorción del fenol se pasa a contra-corriente vapores de benceno, que actúa como solvente; las cantida-

des que intervienen se presentan mediante el siguiente:

Balance de material

Base: 1 hr. de operación

Cantidades de entrada en moles/hr.

Fase gaseosa

C_6H_5OH : 0.17

C_6H_6 : 53.20

Fase líquida

H_2O : 445.00

C_6H_5OH : 4.2916

Cantidades de salida en moles/hr.

Fase gaseosa

C_6H_5OH : 4.1737

C_6H_6 : 53.20

Fase líquida

H_2O : 445.00

C_6H_5OH : 0.0841

La solución que se forma de fenol-benceno se separa por -
destilación, para tal efecto sumado al balance de material se nece-
sita calcular la temperatura a la que se alimentará al fraccionador.

El sistema es inconsistente, unicamente se conoce la tem-

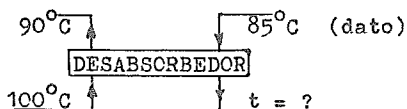
peratura de entrada de la solución fenol-agua, se suponen dos temperaturas y la cuarta se calcula aplicando el,

Balance de energía

El valor de los calores específicos necesarios se dan a continuación.

$$C_p = \text{cal./g-mol } ^\circ\text{K}$$

Temperatura $^\circ\text{C}$	C_6H_6	$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$	H_2O
85	24.70	26.77	8.024
100	25.30	27.37	
110	25.60	27.40	8.177



Aplicando el balance de energía tenemos:

$$(53.20)(25.60) \int_{273}^{383} dt + (0.17)(27.40) \int_{273}^{383} dt +$$

$$(445)(8.024) \int_{273}^{358} dt + (4.291)(26.77) \int_{273}^{358} dt =$$

$$(53.20)(25.30) \int_{273}^{373} dt + (4.173)(27.37) \int_{273}^{373} dt +$$

$$(8.024)(445) \int_{273}^{t_b} dt + (0.08)(27.37) \int_{273}^{t_b} dt$$

Simplificando y resolviendo,

$$t_b = 362^{\circ}\text{K} = 89^{\circ}\text{C}$$

FRACCIONADOR (TORRE No. 4)

Para ser una estimación de sus propiedades intensivas y - extensivas, es forzosamente necesario disponer de las presiones de vapor del benceno y fenol; no se encontró en la literatura presiones de vapor que comprendan el rango necesario, para éste caso específico se estiman de la ecuación aproximada siguiente:

$$\log P_r = -A \left(\frac{1 - t_r}{t_r} \right) - e - 20 (t_r - b)^2$$

De su aplicación se resumen los datos que a continuación se presentan.

Temperatura °C	Presión de vap. C ₆ H ₆ mm.Hg	Presión de vap. C ₆ H ₅ OH mm.Hg	Fracción gaseosa	Fracción líquida
80.1	760.0	15.2	1.0	1.0
100.0	1,344.0	41.3	0.975	0.550
120.0	2,000.0	99.7	0.914	0.348
140.0	3,773.0	207.4	0.771	0.155
160.0	5,536.0	400.0	0.510	0.068
170.0	6,320.0	630.0	0.172	0.0217
180.0	7,880.0	760.0	0.0	0.0

Balance de material

El cálculo de la composición de las corrientes que entran

se obtiene de:

$$F = D + W$$

$$F x_F = D x_D + W x_W$$

$$x_i = \frac{n_i}{n_1 + n_{1+1} + \dots + n_t}$$

Donde F, D, W y x_i significan alimentación, destilado, residuo y fracción mol respectivamente.

Se estima que se obtiene un destilado de 99% rico en benceno y el 1% en el residuo; se alimenta a 100°C al fraccionador y se opera a presión atmosférica.

Composición de la alimentación:

$$x_F = \frac{53.20}{57.373} = 0.925$$

Composición del destilado:

$$x_D = \frac{\frac{99}{78}}{\frac{99}{78} + \frac{1}{94}} = 0.992$$

Composición del residuo:

$$x_W = \frac{\frac{1}{78}}{\frac{1}{78} + \frac{99}{94}} = 0.012$$

Cálculo del destilado y del residuo:

$$57.373 = D + W$$

$$(57.373)(0.925) = D(0.992) + W(0.012)$$

Resolviendo simultaneamente,

$$D = 54.70$$

$$W = 3.116$$

Balance térmico

Balance de entalpia al fraccionador,

$$FH_F + Q = DH_D + WH_W$$

Si la alimentación (F) y el producto (D) son mezclas de líquidos y vapores, cada una de sus entalpias se expresa de sus partes individuales.

$$FH_F = G_F H_{GF} + L_F H_{LF}$$

$$DH_D = G_D H_{GD} + L_D H_{LD}$$

Donde L, se refiere al líquido y G a la porción gaseosa; - cualquiera de las entalpias líquidas incluirá el calor sensible y el de mezcla de los componentes.

$$H_L = \bar{C}_p (t_L - t_O) M_{av.} + \Delta H_s$$

ΔH_s no se tomará en cuenta en los casos que intervenga - por no disponer de datos. La relación de reflujo es,

$$R = \frac{L_0}{D}$$

El calor neto adicionado (Q), dado en cal./hr.m² es el resultante del calor del condensador (Q_c), del calor del rehervidor (Q_B) y la suma de todas las pérdidas de calor que se estiman en cero (Q_L).

Q_C y Q_B se expresan por,

$$Q_C = D [(R+1) H_{G1} - R H_{Lo} - H_D]$$

$$Q_B = D H_D + W H_W + Q_C + Q_L - F H_F$$

Los valores de equilibrio obtenidos se graficaron, facilitándonos el cálculo de los datos indirectos.

$$C_p = \text{cal./g-mol } ^\circ\text{K} = \text{cal./g.}$$

Temperatura $^\circ\text{C}$	C_6H_6		$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$	
	C_p		C_p	
82	24.40		25.97	
88	24.80	67.0	27.17	133.0
100	25.30		27.37	
115		73.0		138.0
140	28.67		28.47	

Entalpia de alimentación

$$H_F = (25.30)(373 - 273) = 2,530 \text{ cal./g-mol}$$

Entalpia de alimentación como líquido saturado

$$\bar{C}_p = \frac{25.97 + 24.40}{2} = 25.18$$

$$H_L = (25.18)(357 - 273) = 2,110 \text{ cal./g-mol}$$

Entalpia de alimentación como vapor saturado

$$H_G = 0.925 [(25.8)(388 - 273) + (74)(78)] +$$

$$(1 - 0.925) [(27.37)(388 - 273) + (138)(94)]$$

$$H_G = 8,486 \text{ cal./g-mol}$$

$$q = \frac{8,486 - 2,530}{8,486 - 2,110} = 0.935$$

$$\frac{q}{q-1} = - \frac{0.935}{0.065} = \text{ang } \text{tg}(-14.2)$$

Moles reflujaados

$$\frac{x_D}{R+1} = 0.9$$

$$R = 0.102 \text{ moles reflujaados/mol destilado.}$$

Considerando un reflujo de 1.5 veces el mínimo

$$R_{op.} = (1.5)(0.102) = 0.153$$

Que corresponde a un valor de

$$\frac{x_D}{R + 1} = 0.795$$

Graficando en su diagrama, encontramos aproximadamente 5.4 etapas teóricas que incluyen el condensador

Aplicación del balance térmico.

Entalpia del destilado:

$$\text{Punto de burbuja : } 82^\circ\text{C}$$

$$\text{Punto de rocío : } 88^\circ\text{C}$$

El destilado se separa del condensador a su punto de burbuja.

$$H_D = H_O = (25.18)(355 - 273) = 2,050 \text{ cal/g-mol}$$

$$H_G = 0.992 [(24.8)(361 - 273) + (67)(78)] + \\ (27.17)(361 - 273) + (133)(94)$$

$$H_G = 7,429 \text{ cal./g-mol}$$

Calor absorbido en el condensador

$$Q_c = 53.25 [(0.153 + 1)(7,429) - (0.153)(2,050) - (2,050)]$$

$$Q_c = 332,000 \text{ cal/hr.}$$

Entalpia del residuo

$$H_W = 3.116(452 - 273) = 568 \text{ cal./g-mol}$$

Por definición

$$Q_L = 0$$

Calor alimentado al rehervidor

$$Q_B = (54.7)(2,050) + (3.116)(568) + \\ 332,000 + 0 - (57,616)(2,530)$$

$$Q_B = 299,790 \text{ cal./hr.}$$

C A P I T U L O I V

DISCUSION DE RESULTADOS

CONDENSADOR (TORRE No. 1)

Sería de interés conocer, como varía la solubilidad del ácido clorhídrico y del fenol con el agua, en función de concentraciones y temperatura; así como, el cálculo de su balance térmico.

Se tiene como datos la composición de los gases y temperatura de entrada al condensador, no se observa de valores de equilibrio como es posible la formación de la solución de ácido clorhídrico al 17% y la disolución de 15.98 lbs. de fenol.

Las condiciones de operación y de diseño, son absolutamente desconocidas; por lo que se estima que los datos son de carácter experimental e imposibilitan hacer variaciones en el condensador.

ABSORBEDOR (TORRE No. 2)

Con el objeto de ver el comportamiento del mismo, se presenta el siguiente estudio:

- 1.- Variación en la temperatura
- 2.- Variación de reactivos
- 3.- Variación de inertes

Se tendrán valores de entalpias para los siguientes casos como medio de comparación. Como referencia se estimará que la mezcla tiene comportamiento ideal, la absorción es del 96% y la presión de operación de 800 mm. Hg, conservándose constante el valor del cloro-

benceno e igual a 48.68 moles.

CASOS	TEMPERATURA °C	VARIACION DE REACTIVOS C ₆ H ₅ OH	VARIACION DE INERTES H ₂ O
I	120	4.80	290.00
II	150	5.35	270.00
III	180	5.90	250.00

El equilibrio en el absorbedor, así como las expresiones básicas que nos relacionan la curva de equilibrio y la de operación son: la presión parcial del soluto gaseoso que está en equilibrio con su líquido, se expresa como el producto de su presión de vapor por la fracción mol en la solución; esto se conoce como la ley de Raoult.

$$P^* = P_{\text{vap.}} \cdot x$$

Los gases que pasan a través del absorbedor, se obtienen de la ecuación,

$$G_s = G(1 - y) = \frac{G}{1 + Y}$$

Cantidad de agua necesaria mínima,

$$L_s = L(1 - x) = \frac{L}{1 + X}$$

Donde:

P^* = Presión parcial (mm.Hg)

G = Moles totales/hr.

G_s = Moles de gas seco/hr.

y = Fracción mol en el gas

x = Fracción mol en el líquido

X,Y = Relaciones mol de líquido y gas respectivamente

El equilibrio, se puede obtener aplicando la ecuación:

$$\frac{Y}{1 + Y} = K \left(\frac{X}{1 + X} \right)$$

K, se puede definir como la relación de la presión de vapor por la de operación.

Para obtener la cantidad de agua necesaria en la operación, se tomará para todos los casos 1.5 L_g (mínima).

Aplicando las ecuaciones mencionadas tenemos,

CASO I

Datos para el balance de material

y	Y ₁	Y ₂	X	G	G _B
0.014	0.0142	0.000568	0.122	343.48	329

Valores calculados para la curva de equilibrio

X	Y
0.00467	0.000568
0.03900	0.004568
0.06480	0.008568
0.01038	0.012568
0.13010	0.014200

De la gráfica No. 1 se obtiene el valor de X al equilibrio

$$X_1 = 0.12892 \text{ moles de fenol/moles de agua}$$

$$X_2 = 0.00117 \text{ moles de fenol/moles de agua}$$

Cantidad mínima de agua para la absorción

$$L_S = 329 \left(\frac{0.014200 - 0.000568}{0.12892 - 0.00117} \right)$$

Donde:

$$L_S = 35.4 \text{ moles de agua/hr.}$$

Cantidad de agua para la operación

$$L_{S \text{ op.}} = (1.5)(35.4) = 53.1 \text{ moles de agua/hr.}$$

Consecuentemente

$$X_1 \text{ op.} = \frac{329(0.013363)}{53.10117}$$

$$X_1 \text{ op.} = 0.085$$

Balance térmico

Se considerará que la solución es ideal, el calor integral de solución es cero ($\Delta H_S = 0$) y que no hay interacciones por la - velocidad de absorción del soluto, posible vaporización de solvente, ni cambios por la velocidad de transferencia de calor entre el gas y el líquido, junto con los balances de entalpia.

Estimando condiciones de operación adiabática, se mostrará las diferentes temperaturas mediante el diagrama siguiente:



Balance de material

Cantidades de entrada en moles/hr.

Fase gaseosa

C_6H_5Cl : 48.68

C_6H_5OH : 4.80

H_2O : 290.00

Fase líquida

H_2O : 53.1

C_6H_5OH : 0.00117

Cantidades de salida en moles/hr.

Fase gaseosa

C_6H_5Cl : 48.68

C_6H_5OH : 0.192

H_2O : 290.00

Fase líquida

H_2O : 53.1

C_6H_5OH : 4.608

Valor de los calores específicos para el balance de ener-

gía.

$$C_p = \text{cal./g-mol } ^\circ K$$

Temperatura °C	C ₆ H ₅ Cl	C ₆ H ₅ OH	H ₂ O
120	26.99	27.87	8.177
100	25.99	27.37	
80		25.97	8.024

Ecuación del balance de energía

$$L_2 H_{L2} + G_1 H_{G1} = G_2 H_{G2} + L_1 H_{L1}$$

Donde:

$$H_{L1} = c_l(t_b - t_o)M_{av.} + \Delta H_S$$

$$c_l M_{av.} = C_p H_2O P M_{H_2O} (x) + C_p C_6H_5OH P M_{C_6H_5OH} (1 - x)$$

El valor de la temperatura a la salida del absorbedor se presenta por el siguiente cálculo

$$\begin{aligned} & (48.68)(26.99) \int_{273}^{393} dt + (4.8)(27.87) \int_{273}^{393} dt + \\ & (290)(8.117) \int_{273}^{393} dt + (53.1)(8.024) \int_{273}^{353} dt + \\ & (0.00117)(25.97) \int_{273}^{353} dt = (48.68)(25.99) \int_{273}^{373} dt + \\ & (0.192)(27.37) \int_{273}^{373} dt + (290)(8.117) \int_{273}^{373} dt + \\ & (21.13)(57.708)(t_b - 273) \end{aligned}$$

Simplificando y resolviendo

$$t_b = \frac{458,750}{1,219} = 371^\circ\text{K} = 98^\circ\text{C}$$

El resultado no es satisfactorio, practicamente el agua - está en su punto de ebullición; y mas si a ésto se le sumara el calor integral de solución. Lo cual indica que las cantidades alimentadas al absorbedor, son inoperantes.

CASO II

Se considera para éste una temperatura de alimentación de 150°C .

La composición al absorbedor es,

Substancia	mol	fracción mol
$\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$	48.68	0.15080
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$	5.35	0.01658
H_2O	270.00	0.83600
Total	324.06	1.00338

Datos para el balance de material

Y	Y_1	Y_2	K	G_s	G
0.01658	0.0168	0.000652	0.378	648.06	638

Valores calculados para la curva de equilibrio

X	Y
0.001738	0.000652
0.012500	0.004652
0.022350	0.008652

0.034500 0.012652

0.044600 0.016340

De la gráfica No. 2 se obtiene el valor de X al equilibrio,

$X_1 = 0.043380$ moles de fenol/mol de agua

$X_2 = 0.000638$ moles de fenol/mol de agua

Cantidad mínima de agua para la absorción

$$L_s = 326 \left(\frac{0.01520}{0.04165} \right) = 128 \text{ moles de agua}$$

Cantidad de agua para la operación

$$L_{s \text{ op.}} = 182 \text{ moles de agua}$$

Su concentración de fenol se da por,

$$X_1 = 326 \left(\frac{0.01520}{182} \right) = 0.0285$$

Balance de material

Cantidades de entrada en moles/hr.

Fase gaseosa

C_6H_5Cl : 48.68

C_6H_5OH : 5.35

H_2O : 270.00

Fase líquida

H_2O : 182

$$C_6H_5OH : 0.2054$$

Cantidades de salida en moles/hr.

Fase gaseosa

$$C_6H_5Cl : 48.68$$

$$C_6H_5OH : 0.2140$$

$$H_2O : 270.00$$

Fase líquida

$$H_2O : 182$$

$$C_6H_5OH : 5.3414$$

Balance térmico

Cálculo de la temperatura a la salida del absorbedor

$$C_p = \text{cal./g-mol } ^\circ K$$

Temperatura $^\circ C$	C_6H_5Cl	C_6H_5OH	H_2O
150	28.61	29.20	8.177
100	25.99	27.37	
80		25.97	8.024

Datos que se aplicarán en el balance de energía

$$(48.68)(2861) \int_{273}^{423} dt + (5.35)(29.20) \int_{273}^{423} dt +$$

$$(270)(8.177) \int_{273}^{423} dt + (182)(8.024) \int_{273}^{353} dt +$$

$$(0.2054)(25.97) \int_{273}^{353} dt = (48.68)(25.99) \int_{273}^{373} dt +$$

$$(0.2140)(27.37) \int_{273}^{373} dt + (270)(8.177) \int_{273}^{373} dt +$$

$$(187.3)(19.00)(t_b - 273)$$

Simplificando y resolviendo

$$t_b = \frac{1.285,551}{3,560} = 364^{\circ}\text{K} = 91^{\circ}\text{C}$$

CASO III

Se alimenta en éste, a una temperatura de 180°C que corresponde al punto de ebullición del fenol.

Composición al absorbedor

Substancia	moles	fracción mol
$\text{C}_6\text{H}_5\text{cl}$	48.68	0.16070
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$	5.90	0.0194
H_2O	250.00	0.824

Datos indirectos para la absorción

y	Y_1	Y_2	K	G_s	G
0.01941	0.01981	0.0007924	0.99	304.58	295

Valores calculados para la curva de equilibrio

X	Y
0.000774	0.000768
0.004830	0.004768

0.008880	0.008768
0.012900	0.012768
0.016900	0.016768
0.019400	0.019180
0.020000	0.019310

De la gráfica No. 3 se obtiene el valor de X al equilibrio

$$X_1 = 0.0199$$

$$X_2 = 0.000510$$

Agua empleada para absorción mínima

$$L_s = (295) \left(\frac{0.019018}{0.01939} \right) = 290$$

Agua para la operación

$$L_s \text{ op.} = 442 \text{ moles de agua/hr.}$$

Su concentración de fenol

$$X_1 = 0.0123$$

Balance de material

Cantidades de entrada en moles/hr.

Fase gaseosa

$$C_6H_5Cl : 48.68$$

$$C_6H_5OH : 5.90$$

$$H_2O : 250.00$$

Fase líquida

$$C_6H_5OH : 0.227$$

$$H_2O : 442.00$$

Cantidades de salida en moles/hr.

Fase gaseosa

$$C_6H_5Cl : 48.68$$

$$C_6H_5OH : 0.236$$

$$H_2O : 250.00$$

Fase líquida

$$C_6H_5OH : 5.891$$

$$H_2O : 442.00$$

Balance térmico

Los calores específicos son los mismos de los casos anteriores, excepto el siguiente,

$$C_p = \text{cal./g-mol } ^\circ K$$

Temperatura	C_6H_5Cl	C_6H_5OH	H_2O
$180^\circ C$	30.49	30.77	8.177

Cálculo de la temperatura a la salida del absorbedor

$$(48.68)(30.49) \int_{273}^{453} dt + (5.90)(30.77) \int_{273}^{453} dt +$$
$$(250)(8.177) \int_{273}^{453} dt + (442)(8.024) \int_{273}^{353} dt +$$

$$(0.227)(25.97) \int_{273}^{353} dt = (48.68)(25.99) \int_{273}^{373} dt +$$

$$(0.236)(27.37) \int_{273}^{373} dt + (18.9)(454.400) \int_{273}^{t_b} dt$$

Simplificando y resolviendo

$$t_b = \frac{3.903,030}{11,000} = 355^{\circ}\text{K} = 82^{\circ}\text{C}$$

Se observa que éstos resultados concuerdan con las cantidades que se dan como dato en el Groggins, del método de Rasching.

DESORCION (TORRE No. 3)

CASO I

La solución del fenol-agua, entra al equipo a 98°C a la presión atmosférica y un gasto de 57.8 moles; en la operación se pasan vapores de benceno a contracorriente a 100°C .

Se estima como en todos los casos, que la absorción es del 96%, para obtener los valores de equilibrio necesarios, requerimos de los datos indirectos:

Presión de vapor del agua a $98^{\circ}\text{C} = 730 \text{ mm.Hg}$

Presión de vapor del fenol a $98^{\circ}\text{C} = 41.3 \text{ mm.Hg}$

Presión de vapor del benceno a $100^{\circ}\text{C} = 1,344 \text{ mm.Hg}$

Por lo expuesto, el agua a 98°C practicamente se encuentra a su punto de ebullición, si bien el fenol puede difundirse en benceno, es tambien factible una pésima desorción del fenol, ya que por arrastre se tendria al final, en la parte superior del equipo -

una mezcla de tres componentes al arrastrarse vapores de agua.

Concluyendo, para el caso I la cantidad de agua que se alimenta y las temperaturas empleadas son inoperantes.

CASO II

La solución fenol-agua, entra al equipo a 91°C y a la presión atmosférica, con un gasto de 187.00 moles; como disolvente del fenol, se manda a contracorriente vapores de benceno a 100°C .

Los datos son:

Concentración a la entrada

$$X_2 = 0.085 \text{ moles de fenol/mol de agua}$$

Concentración a la salida

$$X_1 = 0.0006 \text{ moles de fenol/mol de agua}$$

Presión de vapor del benceno a $100^{\circ}\text{C} = 1.775 \text{ atm}$.

Curva de equilibrio

$$\frac{Y}{Y + 1} = 1.775 \left(\frac{X}{X + 1} \right)$$

De su aplicación se tabulan los datos

X	Y
0.0006	0.00106
0.0056	0.00990
0.0106	0.01795
0.0156	0.02840
0.0206	0.03740

0.0256 0.04640

0.0306 0.05580

De la gráfica No. 4 se obtiene

$$Y_2 = 0.0480$$

Cantidad mínima de benceno

$$G_s = 182 \left(\frac{0.0285 - 0.0006}{0.04800} \right) = 104 \text{ moles de benceno/hr.}$$

Cantidad de benceno para la operación, considerando 1.1
el mínimo

$$G_{s \text{ op}} = (104)(1.1) = 114 \text{ moles de benceno/hr.}$$

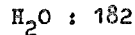
Balance de material

Cantidades de entrada en moles/hr.

Fase gaseosa

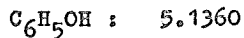


Fase líquida



Cantidades de salida en moles/hr.

Fase gaseosa



Fase líquida

$$H_2O : 182$$

$$C_6H_5OH : 0.2054$$

Balance de energía

El sistema es inconsistente, para su resolución se consideró que la solución fenol-agua, entra a $91^{\circ}C$; que es el único dato.

En la operación se pasa a contracorriente vapores de benceno a $100^{\circ}C$ estimándose que sale a $95^{\circ}C$, lo cual nos dará un gradiente de $5^{\circ}C$ en la parte superior del equipo.

El calor latente de evaporación del fenol (λ) a $90^{\circ}C$ es de 137 cal./g.

Los calores específicos para estas temperaturas, se han mencionado anteriormente.

Cálculo de la temperatura de salida de la solución

$$\begin{aligned} & (114)(25.30) \int_{273}^{373} dt + (182)(8.024) \int_{273}^{364} dt + \\ & (5.3414)(27.17) \int_{273}^{364} dt = (114)(25.0) \int_{273}^{368} dt + \\ & (5.136)(27.25) \int_{273}^{368} dt + (137)(94) + \\ & (182)(8.024) \int_{273}^{t_b} dt + (0.2054)(27.17) \int_{273}^{t_b} dt \end{aligned}$$

Simplificando y resolviendo

$$t_b = \frac{537,960}{1,465} = 366^\circ\text{K} = 93^\circ\text{C}$$

La relación de benceno a fenol, es muy alta y afecta considerablemente su separación en el fraccionador.

CASO II-B

Para lograr la reducción de benceno se alimentará a 120°C cuya presión de vapor, en atmósferas es de 2.64

La curva de equilibrio es

$$\frac{Y}{Y+1} = 2.64 \left(\frac{X}{X+1} \right)$$

De su aplicación se tabulan los datos

X	Y
0.0006	0.0016
0.0056	0.0150
0.0106	0.0286
0.0156	0.0428
0.0206	0.0568
0.0256	0.0710
0.0306	0.0853

De la gráfica No. 5 se obtiene

$$Y_2 = 0.0752$$

Cantidad mínima de benceno

$$G_B = \frac{0.0285 - 0.0006}{0.0752} = 64 \text{ moles de benceno/hr.}$$

Cantidad de benceno para la operación

$$G_{s \text{ op.}} = (64)(1.1) = 70.0 \text{ moles de benceno/hr.}$$

El resultado no es satisfactorio, la cantidad de benceno se redujo; pero su relación continúa alta. Se hará la variación si guiente.

CASO II-C

Se alimenta benceno a 140°C , su presión en atmósferas es de 4.98.

La curva de equilibrio es

$$\frac{Y}{Y + 1} = 4.98 \left(\frac{X}{X + 1} \right)$$

De su aplicación se obtubieron los datos

X	Y
0.0006	0.0030
0.0056	0.0286
0.0106	0.0559
0.0156	0.0830
0.0206	0.1110
0.0256	0.1420
0.0285	0.1595
0.0306	0.1735

Los valores no se graficaron, considerando que en los casos II y II-B, las curvas de operación son casi paralelas a las de equilibrio.

Se obtiene el valor de,

$$Y = 0.1595$$

Cantidad mínima de benceno

$$G_s = 182 \left(\frac{0.0279}{0.1595} \right) = 31.6 \text{ moles de benceno/hr}$$

Cantidad de benceno para la operación

$$G_{s \text{ op.}} = (31.6)(1.1) = 34.1 \text{ moles de benceno/hr.}$$

La cantidad obtenida nos dá un gasto con una relación - benceno-fenol más aceptable que en todos los ensayos tratados, en la misma forma a través de los distintos casos se mostró como in - fluye el efecto de la presión.

Balance térmico

Para efectuarlo se hace el sistema consistente, suponiendo una temperatura a la salida de los vapores de 110°C .

Cálculo de la temperatura de salida de la solución

$$\begin{aligned} & (34.1)(27.2) \int_{273}^{413} dt + (182)(8.024) \int_{273}^{364} dt + \\ & (5.3414)(27.17) \int_{273}^{364} dt = (5.136)(27.47) \int_{273}^{383} dt + \\ & (34.1)(26.3) \int_{273}^{383} dt + (137)(94) + \\ & (182)(8.024) \int_{273}^{t_b} dt + (0.02054)(27.17) \int_{273}^{t_b} dt \end{aligned}$$

Simplificando y resolviendo,

$$t_b = \frac{539,200}{1,465} = 368^\circ\text{K} = 95^\circ\text{C}$$

CASO III

En este caso entra el benceno a 120°C , su presión de vapor en atmósferas es de 2.64.

La curva de equilibrio es:

$$\frac{Y}{Y+1} = 2.64 \left(\frac{X}{X+1} \right)$$

De su aplicación se obtuvieron los datos

X	Y
0.0005	0.0014
0.0030	0.0080
0.0055	0.0148
0.0080	0.0217
0.0105	0.0283
0.0130	0.0353

Los valores calculados se graficaron; de esto se encontró -
que,

$$Y = 0.0345$$

Benceno mínimo necesario

$$G_s = 442 \left(\frac{0.0118}{0.0346} \right) = 148 \text{ moles de benceno/hr.}$$

Benceno de operación

$$G_{s \text{ op.}} = (148)(1.1) = 163 \text{ moles de benceno/hr.}$$

Conviene aplicar el benceno a una temperatura más alta, -

con el objeto de reducir su gasto.

CASO III-B

Se aplica una temperatura de 140°C y su presión de vapor en atmósferas es de 4.98

La curva de equilibrio es,

$$\frac{Y}{Y+1} = 4.98 \left(\frac{X}{X+1} \right)$$

De su aplicación se obtuvieron los datos,

X	Y
0.0005	0.0025
0.0030	0.0150
0.0055	0.0282
0.0080	0.0415
0.0105	0.0553
0.0130	0.0695

De su aplicación se encontró,

$$Y = 0.0667$$

Benceno mínimo necesario

$$G_s = 442 \left(\frac{0.0118}{0.0667} \right) = 78 \text{ moles de benceno/hr.}$$

Benceno para la operación

$$G_s \text{ op.} = (78)(1.1) = 86 \text{ moles de benceno/hr.}$$

De esto se obtiene que para una temperatura del benceno - de 120°C, se necesitan 148 moles, al incrementarse a 140°C se redu-

ce a 78 moles; cantidad que dá una relación benceno-fenol alta.

De datos termodinámicos se observa, que al aumentar la temperatura la solubilidad de un soluto disminuye, es factible que pudiera ocurrir éste fenómeno al incrementarse la temperatura del benceno, no obstante se acepta que las condiciones de idealidad supuestas se cumplen; en la imposibilidad de obtener valores experimentales

Sin embargo no debe perderse de vista el efecto que causaría gradientes de temperatura muy amplios.

Definitivamente, se considera que hipotéticamente las condiciones del caso II y sus variantes II-B y II-C, son las que representan mejor la operación y se continuará con ellos el estudio.

DESTILACION (TORRE No. IV)

CASO II

Temperatura de alimentación 95°C,

Composición:

	moles	frac. mol
C_6H_6	104,000	0.953
C_6H_5OH	5,136	0.047

Considerando que se obtiene un destilado del 96% rico en benceno y el 1% en el residuo.

Fracción mol destilado,

$$X_D = 0.985$$

Fracción mol residuo

$$X_W = 0.0125$$

Cálculo del destilado y del residuo,

$$D = (109.136) \left(\frac{0.953 - 0.0125}{0.985 - 0.0125} \right)$$

$$D = 101.886$$

$$W = 7.25$$

El residuo rico en fenol, contiene el 40% de benceno, las proporciones obtenidas requieren definitivamente una nueva destilación.

Para evitar que se retrabaje la mezcla anterior, se vé la necesidad de idealizar el sistema, fijando condiciones de separación mas eficientes.

Aplicando el caso II-C se obtendrá para el destilado un benceno rico en 99% y el 0.5% en el residuo.

Fracción mol del destilado,

$$X_D = 0.992$$

Fracción mol del residuo

$$X_W = 0.006$$

Cálculo del destilado y del residuo,

$$D = (39.236) \left(\frac{0.873 - 0.006}{0.992 - 0.006} \right)$$

$$D = 34.20$$

$$W = 5.036$$

Datos indirectos para el cálculo de entalpías,

Entalpías líquidas

$$H_L = C_P(t - 273) + \Delta H_S$$

$$\Delta H_S = 0 \quad (\text{por no tener datos})$$

Entalpias gaseosas

$$H_G = y [C_p(t - 273) + \lambda PM] + (1 - y) [C_p(t - 273) + \lambda PM]$$

Temperatura °C	C ₆ H ₆		C ₆ H ₅ OH	
		C _p		C _p
83	65	24.30	136	25.97
107	72	25.30	130	27.37
117	74	25.60	126	27.50
127	78	26.90	122	28.50

Donde,

$$\lambda = \text{cal./gr.}$$

Las presiones de vapor para el sistema benceno-fenol, se calcularon en el capítulo III, se grafican nuevamente y del diagrama de equilibrio, se hacen los cálculos pertinentes; en especial se obtendrá el valor de reflujo.

Generalizando, se aplican las ecuaciones y las mismas con sideraciones a los casos mencionados, como se extracta a continua - ción.

	ALIMENTACION (H _F)	LIQUIDO SATURADO (H _L)	VAPOR SATURADO (H _G)	$\frac{q}{q-1}$	$\frac{X_D}{R+1}$
CASO II	2,370	2,120	8,630	-24	0.99

CASO II-E	2,660	2,170	9,220	-15	0.95
CASO II-C	2,800	2,200	10,180	-12	0.93

Punto de burbuja del destilado : 81°C

Punto de rocío del destilado : 84°C

El calor al condensador (Q_C) se obtiene de,

$$Q_C = D [(R + 1)H_G - RH_{Lo} - H_D]$$

Se hace la consideración que no hay pérdida de calor -- ($Q_L = 0$) y por un balance total se calcula el calor del rehornador (Q_B).

$$Q_B = DH_D + WH_W + Q_C + Q_L - FH_F$$

Para completar el balance térmico del fraccionador se calcula H_D y H_G

$$H_D = (24.40)(353 - 273) + 0 = 1,970 \text{ cal./g-mol}$$

Si el destilado se separa a su punto de burbuja se puede tener que $H_D = H_{Lo}$

De la lectura en la gráfica de presión constante y tra -- zando las distintas concentraciones y reflujos, se obtiene aproximá damente el número de platos teóricos.

Los resultados pueden representarse mas objetivamente, como se muestra en la siguiente tabla.

	$R_{\min.}$	$R_{cp.}$	$\frac{X_D}{R + 1}$	No. de platos	Q_C	Q_B
CASO II	0.0023	0.003	0.987	8	575,000	559,000
CASO II-B	0.0043	0.066	0.925	7	417,000	437,500
CASO II-C	0.0785	0.118	0.890	6	207,000	193,500

C A P I T U L O V

CONCLUSIONES

La obtención del fenol presenta en su estudio diversas - operaciones unitarias, necesitándose un análisis cuidadoso en su - elaboración, el rendimiento es bajo lo que obliga a recirculacio - nes de material que aumenta la complejidad del equipo y costos.

Teóricamente a partir de consideraciones físico-químicas, se puede predecir si existe o no la formación de un producto; la - optimización, requiere de la integración conjunta de estudios teóri - cos y su comprobación mediante planta piloto.

El método de Rasching estudiado, aporta algunos datos - que permitieron hacer consideraciones en determinados casos, como se hizo en todo el sistema de extracción del fenol.

Con el objeto de presentar, en la forma mas simple las - mejores condiciones de separar el fenol, se practicaron tres ensa - yos que permitieron ver como opera el equipo en distintas condicio - nes.

En la absorción, se vio que los gases de los cuales se - absorbe el fenol tienen una composición muy semejante. Se hizo va - riar su temperatura y a medida que ésta se incrementa, aumentó el requerimiento de agua de un rango mínimo que alcanza a vaporizarse con la temperatura de los gases de entrada, hasta un máximo que da una solución casi infinita de fenol en agua.

En la desorción del fenol, cuando la presión de vapor del benceno aumenta, el gasto de éste disminuye; como se puede apreciar en el caso II y sus variantes II-B y II-C.

De no lograrse adecuadamente la extracción del fenol trae consigo un sinnúmero de consecuencias, que aumenta la complejidad del equipo incluyendo tamaños exagerados o nulos; ésto se refleja también en la destilación ya que si se alimenta una mezcla de benceno-fenol, donde el primero está en gran exceso, se tendrá que la composición en la alimentación es casi igual a la composición del destilado, dando lugar a una separación compleja.

En cuanto a la reacción del fenol, se comprobó que es exotérmica y que ocurre cuando se llega a su energía de activación.

La obtención en sí del fenol queda limitada a estimar una conversión, los datos acerca de la reacción se desconocen, consecuentemente al no tener las constantes de velocidad de reacción se presenta una situación difícil en la obtención del BALANCE TERMICO GENERALIZADO, al no encontrarse los datos pertinentes del reactor.

El sistema de cambiadores de calor no se menciona en el estudio, ya que sin conocer los valores reales de temperaturas, se limita y hace más erróneo el análisis, si casi todo para complementarse debe suponerse.

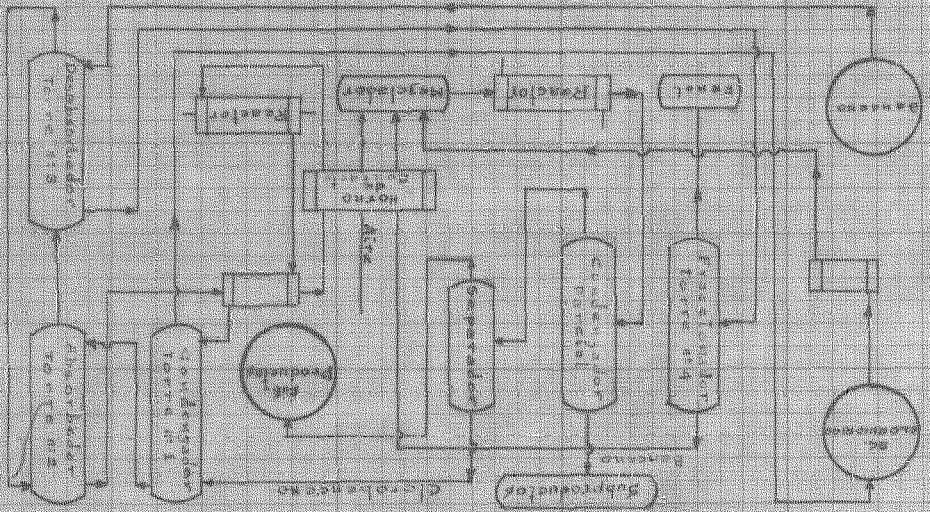
En forma general se presentó, un análisis detallado de la condensación, absorción, desorción, destilación y calor de reacción del fenol.

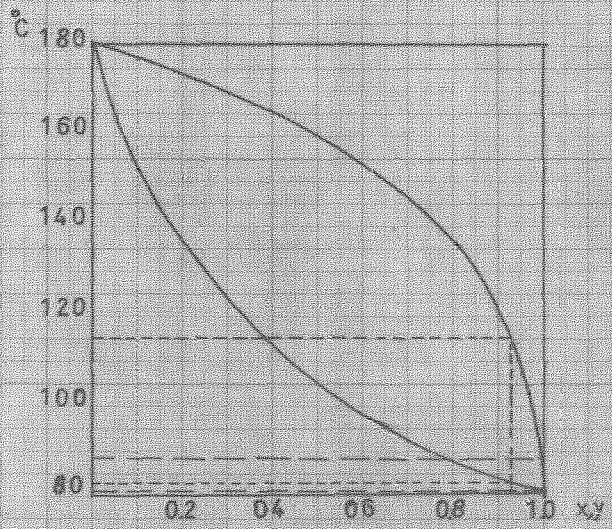
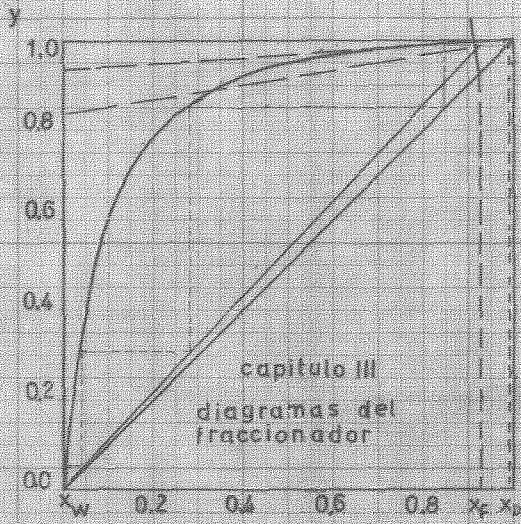
Así pues, variando adecuadamente temperaturas y flujos y conociéndose los grados de eficiencia de cada uno de los equipos del sistema, puede llegarse a la optimización.

=====

====

Diagrama de flujo para la obtención del fenol, por el método de Raschig.





(1×10^{-2}) Y

1.6568

1.2568

0.8568

0.4568

0.0568

0.467

3.967

7.467

10.97

14.47

X
(1×10^{-2})

capítulo IV
gráfica nº1

(1×10^{-2}) Y

1.6652

1.2652

0.8652

0.4652

0.0652

0.1738

1.2738

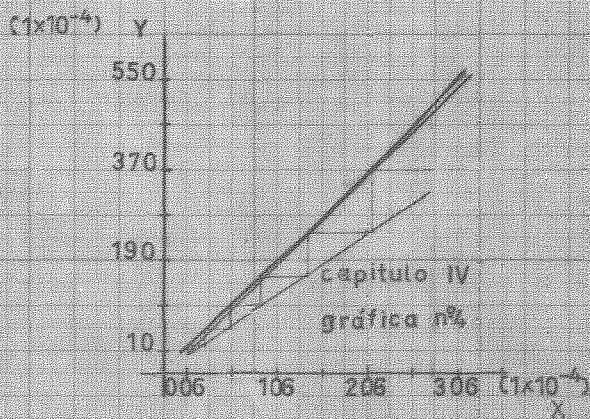
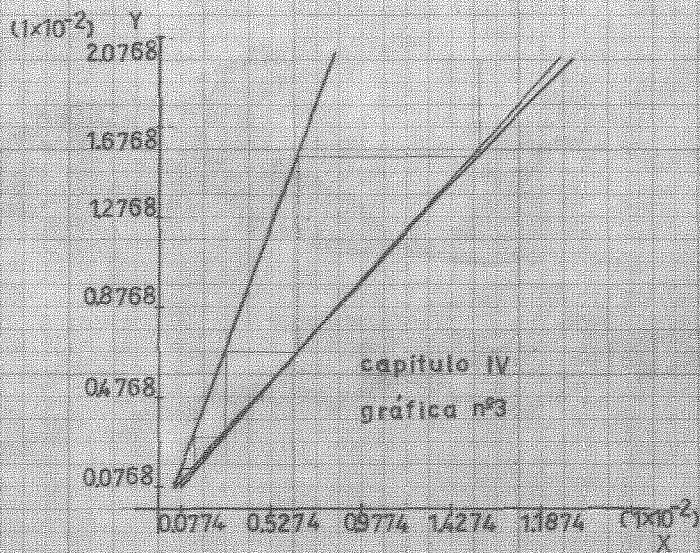
2.3738

3.4738

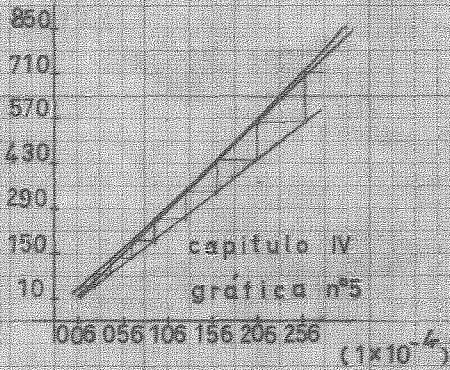
4.5738

X
(1×10^{-2})

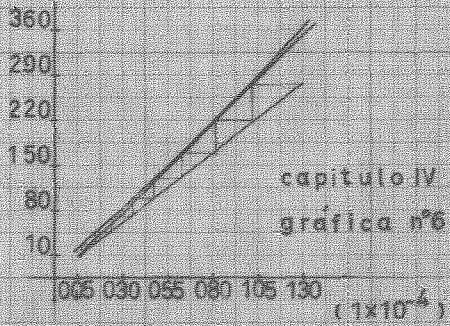
capítulo IV
gráfica nº2

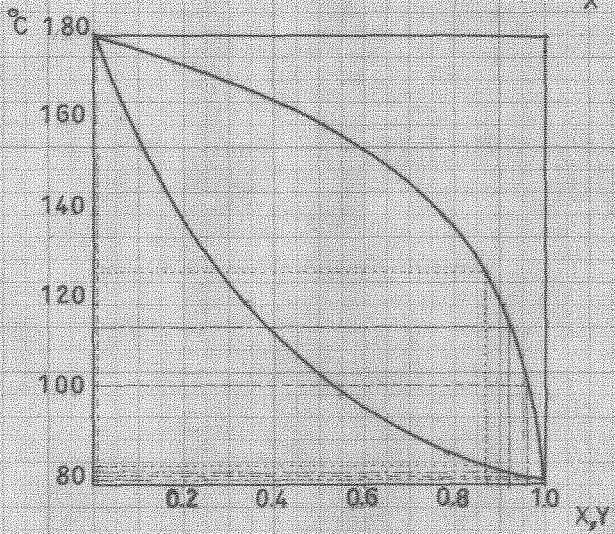
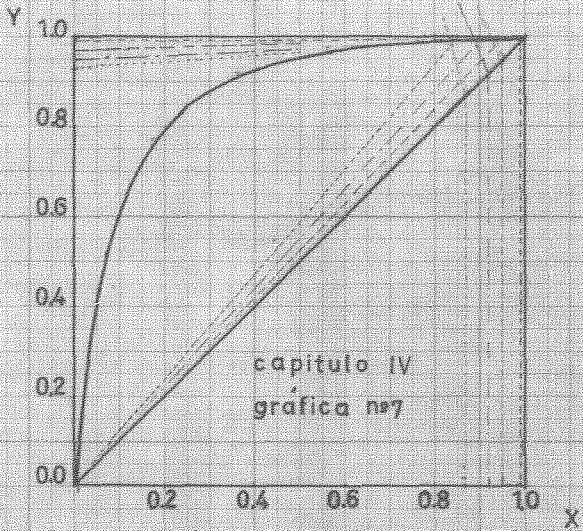


(1×10^{-4})



(1×10^{-4})





B I B L I O G R A F I A

- 1.- Raw material for the phenol
Chemical Industry
P.W. Sherwood
Ind. Chem. 38-S519-19
- 2.- Phenol, How, Where, Who Future
R.S. Stobaugh
Hydrocarbon Processing &
Petroleum Refiner 45 : 143-52 jun°66
- 3.- Phenol, Manufacture
A.S. Bancion
Chemical Engineering 48 : 31-S jan°67
- 4.- Phenol Extraction
M.W. Kellogg Co.
Hydrocarbon Processing &
Petroleum Refiner 44-222-S°66
- 5.- Principios de operaciones unitarias
Alan S. Foust.
Primera edición
Cia. Editorial Continental S.A.

1964

6.- Unit Processes In Organic Syntesis

P.H. Groggins

Third Edition

McGraw-Hill Book Company Inc.

1958

7.- Chemical Process Principles

Part. I

Material and Energy Balances

Hougen & Wattson

John Wiley

1956

*8.- Chemical Process Principles

Part II

Thermodynamics

Hougen & Wattson

Second Edition

John Wiley

1966

*9.- Principles of Phisical Chemistry

Maron & Prutton

Third Edition

The McMillan Company

1958

- *10.- Material & Energy
Balance Computations
Ernest J. Henley
1968
- *11.- Unit Operations of Chemical Engineering
Warren L. McCabe
McGraw-Hill Book Company
1956
- 12.- International Critical Tables
of Numerical Data
Vol V
Physics, Chemistry and Tecnology
McGraw-Hill Book Company Inc.
- *13.- Chemical Engineering Hand-Book
John H. Perry
Fourt Edition
McGraw-Hill Book Co.
- 14.- Modeling and Simulation
in Chemical Engineering
Roger G. Franks
Wiley-Interscience
1972

15.- Mass-Transfer Operations

Robert F. Treybal

McGraw-Hill Book Co.

1956

16.- Stoichiometry for

Chemical Engineers

Williams G. Johnson

McGraw-Hill Book Co.

1958