

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA



PROYECTO PARA LA PRODUCCION DE:
3,3' BIS TIO DIPROPIONATO DE DILAURILO

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO
PRESENTA
NEMESIO HERNANDEZ VALDIVIA
MEXICO, D. F. 1982



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.

E

I N D I C E

	Páginas
Dedicatorias.....	A , B, C
Agradecimientos.....	D
Contenido.....	E, F
Capítulo 1 Introducción.....	1
Capítulo 2 Generalidades.....	4
2.1 Definición de un antioxidante.	
2.2 Mecanismo de acción de un antioxidante.	
2.3 Algunas características de antioxidantes	9
2.4 Clasificación de los antioxidantes.....	11
Capítulo 3 Métodos de obtención del 3,3'bis-tio- dipropionato de dilaurilo.....	24
3.1 Síntesis usando acrílo nitrilo.	
3.2 Síntesis usando acrilato de metilo.....	25
3.3 Síntesis usando ácido acrílico.....	26
Capítulo 4 Parte experimental.....	27
Capítulo 5 Análisis de mercado.....	36
5.1 Línea de regresión.	
5.2 Diagrama de dispersión.....	39
Capítulo 6 Diseño del proceso.....	40
6.1 Base del diseño.	
6.2 Diagrama de flujo de proceso.....	44
6.3 Equipo necesario.....	46
6.4 Dimensionamiento del equipo.....	46
Capítulo 7 Consideraciones económicas.....	72
Capítulo 8 Conclusión.....	83
Capítulo 9 Bibliografía.....	84

F
INDICE DE TABLAS

T	Páginas.
TABLA 4.1	28
Estudio de la reacción de síntesis del ácido tio dipropiónico.	
TABLA 4.2	29
Estudio de la esterificación del ácido tio dipropiónico.	
TABLA 4.3	31
Datos de titulación del ácido - tio dipropiónico mezclado con H_2SO_4	
TABLA 7.1.....	81
Cálculo del valor presente neto.	

CAPITULO I

INTRODUCCION.

Dentro de la industria química las sustancias antioxidantes tienen una importancia relevante por lograr controlar reacciones de oxidación en productos autooxidables, impidiendo o retardando la oxidación en una serie de compuestos usados en cosmetología, farmacéuticos, alimenticios ó bien en las materias primas para la producción de productos de utilidad cotidiana como plásticos, elastómeros y productos derivados del petróleo.

El oxígeno del aire puede ser el agente oxidante más importante económicamente ó totalmente perjudicial dependiendo de las condiciones y circunstancias bajo las cuales actúe. Es ventajoso en varias oxidaciones y polimerizaciones de sustancias en la industria, en cambio al no tomarse las precauciones necesarias de control de reacción de oxidación en las sustancias autooxidables sufrirán efectos nocivos que se manifestarán de diferentes maneras, dependiendo del compuesto ó sustancia oxidada.

Las grasas y aceites comestibles al oxidarse se enrancian y adquieren mal olor.

Los aceites lubricantes al ser atacados por el oxígeno del aire precipitan sustancias insolubles causando problemas en el equipo donde se usan.

En las preparaciones farmacéuticas los lípidos tienen un amplio uso, por lo que pueden sufrir deterioración causada por la oxidación si no se les da una atención a su estabilidad.

Los plásticos y elastómeros tienen una particular necesidad de vencer las reacciones que produce el oxígeno del aire durante su proceso y uso.

De esta manera se podría enumerar una serie de efectos -- causados por el oxígeno en sustancias autooxidables, pero con los anteriores el lector se puede dar una idea de la importancia de adicionar un antioxidante adecuado.

En México se fabrica una serie de antioxidantes entre los que tenemos: el 2,6-di-t-butil-p-cresol (BHT); etoxiquinolinas (6-etoxi-2,2,4-trimetil-1,2-dihidroquinolina); fosfito de tris nonil fenilo; octil difenilamina; fenil β naftilamina; 2,2-bis-metilen-(6-t-butil-p-cresol); etc., pero otros antioxidantes - se tienen que importar como es el caso de los ésteres propióni cos, específicamente el 3,3'-bis-tio-dipropionato de dilaurilo- (DLTDP) antioxidante de gran importancia en la industria.

El DLTDP puede actuar sólo ó como sinergista en plásticos, hule ú otros materiales autooxidables como polímeros vinílicos, dienos conjugados (estireno-butadieno), hidrocarburos aromáti cos, grasas lubricantes, aceites lubricantes, resinas (cumaro na-indeno; novolacas, etc.), mejorando su resistencia contra - la degradación oxidativa.

El DLTDP tiene su mayor aplicación en la industria de los plásticos y en la manufactura de materias primas para la fabri cación de resinas sintéticas, como el polietileno baja densi-- dad, polietileno de alta densidad, polipropileno, policloruro de vinilo, poliestireno, polimetacrilato de metilo, poliureta nos, etc..

Su importancia queda de manifiesto al conocer el dato de que la industria de resinas sintéticas contribuye con el 9.0%- aproximadamente al valor total de la producción de la indus- - tria química, correspondiendo con el 10% de la inversión fija- bruta total del sector.¹⁴

Pese a la crisis por la que atraviesa la economía del - - país ha tenido un vigoroso ritmo de expansión, incremento en -

el año de 1979 del 28.8% con una producción total de 719 570-toneladas.¹⁴

Para ayudar a desarrollar una industria química menos de pendiente del exterior es indispensable poder fabricar en México antioxidantes como el DLTDP, evitando de esta manera fugas de dinero por conceptos de importación de productos químicos que se pueden fabricar en el país.

CAPITULO 2

GENERALIDADES

2.1. DEFINICION DE UN ANTIOXIDANTE.

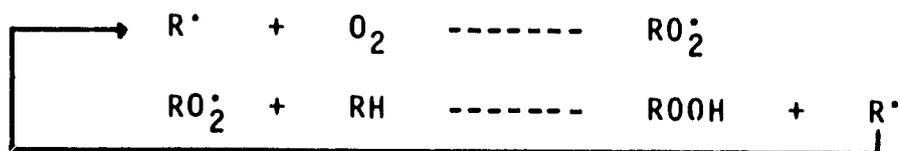
Un antioxidante puede ser definido como la sustancia ca paz de inhibir, oponerse o retardar reacciones de oxidación - promovidas por el oxígeno o peróxidos y los efectos de oxidación en compuestos orgánico autooxidables.

Un antioxidante como compuesto que inhibe la oxidación - se agrega a toda sustancia que pueda ser atacada por el oxígeno cuando se encuentra almacenada ó bien durante su proceso de síntesis.

2.2. MECANISMO DE ACCION DE UN ANTIOXIDANTE.

Las autoxidaciones son reacciones en cadena, de radicales libres, caracterizados por la interacción de los radicales con oxígeno para producir radicales peróxidos, peróxidos-orgánicos y un amplio grupo de productos oxidados estables.

Si representamos la autoxidación de una sustancia por una reacción en cadena del tipo⁹:



Para inhibir una reacción de autoxidación tenemos dos - caminos:

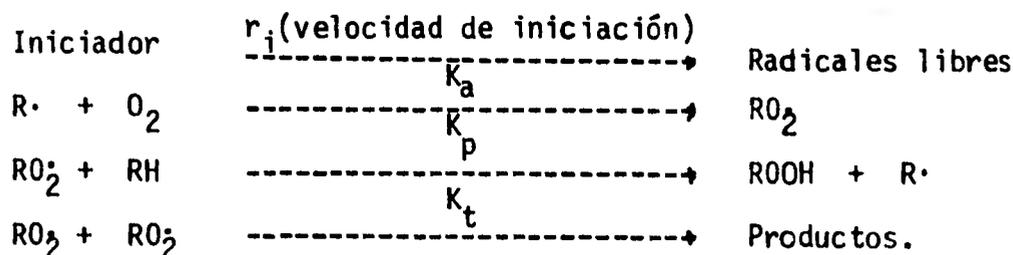
- 1o. Adicionando a la sustancia reactivos que retarden la -- formación de radicales libres.
- 2o. Introduciendo un aceptor de radicales libres.

Como la formación de radicales libres no puede ser supri^u mida el segundo camino es el más efectivo.

Backström estudió los principios generales de termina-- ción en cadena por aceptor de radicales libres en reacciones- de autoxidación..

El primer estudio de cinética detallado lo realizó Bolland oxidando linoleato de etilo con peróxido de benzofilo y usan- do como iniciador el hidro peróxido del linoleato de etilo y- como inhibidor hidroquinona.

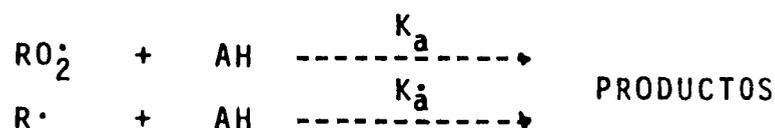
Para poder tener un criterio de lo que pasa en una reac- ción de autoxidación la podemos representar de la siguiente- manera⁹:



$$-d(O_2)/dt = r_u = (r_i/k_t)^{1/2} k_p (RH)$$

Donde r_u = Velocidad de la reacción de inhibición.

Bolland y Ten Have consideraron en presencia de un inhi- bidor las siguientes reacciones:

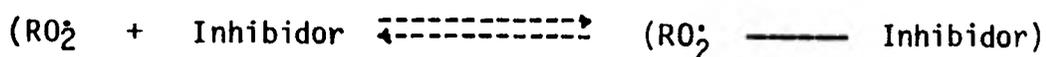


Demostrando que la razón:

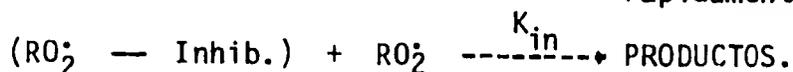
$$(r_a/r_u^2) (RH) (AH) = K_t/K_p K_a = K$$

Tiene un hecho definitivo experimental constante en contraste con un término similar envuelto en K_a el cual no tiene un valor constante. Esto por lo tanto concluye que para todo propósito práctico el acceptor de radicales libres reacciona con el radical RO_2^{\cdot} y no con el radical R^{\cdot} .

Boozer Hammound propone otro mecanismo que involucra formación de un complejo entre el radical RO_2^{\cdot} y el antioxidante y una reacción del complejo con otro radical RO_2^{\cdot} .



Este equilibrio es establecido rápidamente.



En el mecanismo que propone Boozer puede ser que la acción del antioxidante envuelve la formación de complejo con el radical libre únicamente en un número de antioxidantes relativamente regular, a los que refiere Boozer como antioxidantes de "actividad intermedia" y es factible que esta formación del complejo es únicamente de importancia cuando la acción sea de abstracción de hidrógeno, del tipo:



En la actualidad el mecanismo para hidrocarburos está bien establecido y es análogo al mecanismo de reacción en los elastómeros. Generalmente se acepta que la oxidación en hidrocarburos se realiza mediante un mecanismo en cadena de los radicales libres.

Llamemos:

RH = Olefinas con el átomo de hidrógeno en alfa metilénico.

AH = La substancia antioxidante.

ROOH= Hidro peróxido.

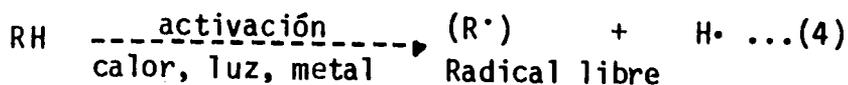
El mecanismo se desarrolla en tres etapas¹⁰.

1o. Iniciación

2o. Propagación

3o. Terminación.

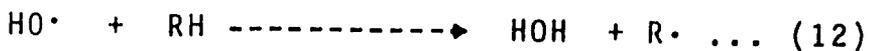
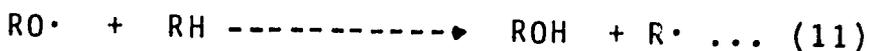
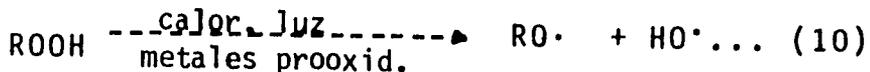
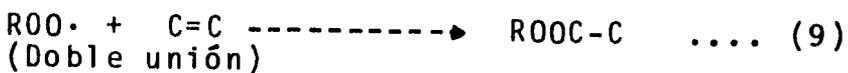
1o. INICIACION.



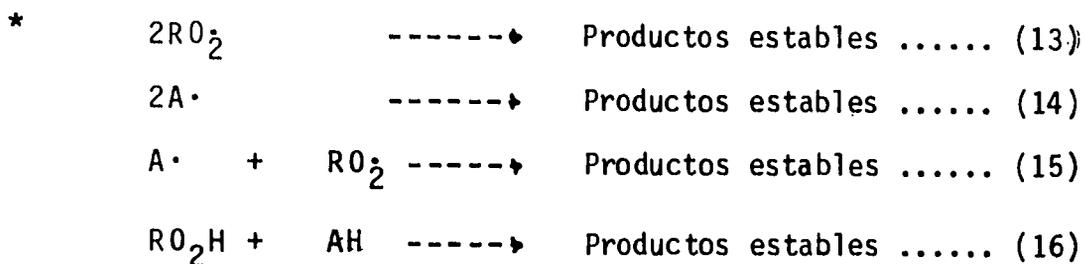
2.- PROPAGACION



Cadena ramificada



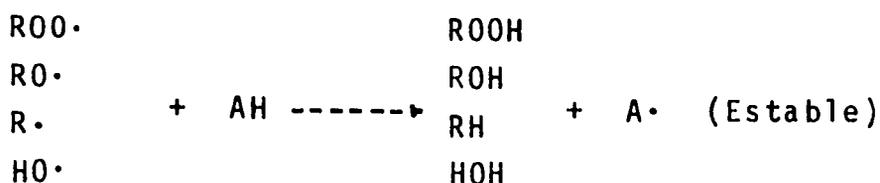
3.- TERMINACION.



(16).- Reacción de destrucción del peróxido.

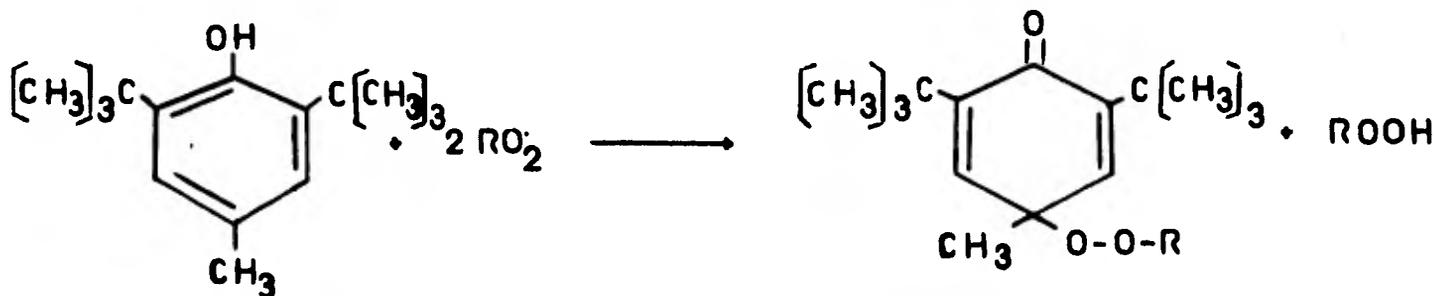
* = Bajo condiciones en que $(R\cdot) \ll (RO_2)$

INHIBICION.

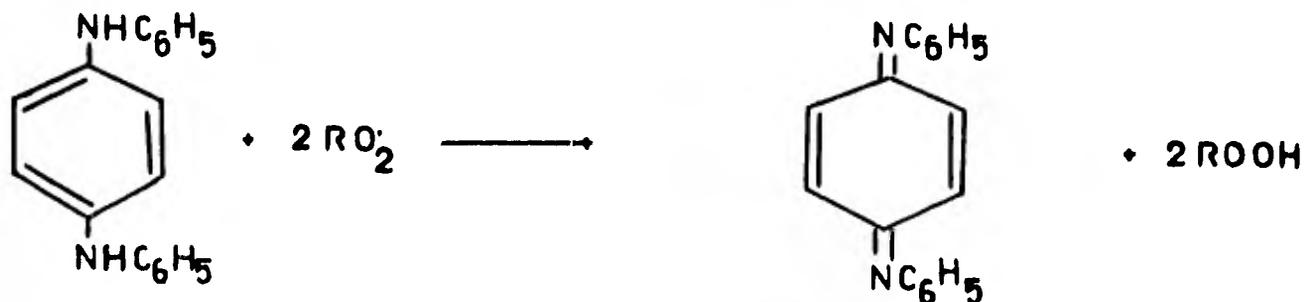


Boozer afirma que los antioxidantes 2,6-di-t-butil-p-cresol (BHT) y el N,N'-difenil-p-fenilendiamina al inhibir una -- sustancia autooxidable sucede de la siguiente manera⁽⁹⁾:

1.- En el BHT



2.- En el N,N'-difenil-p-fenilendiamina



Como conclusión, se tiene que el destino de una molécula de antioxidante no es uniforme y que el producto del análisis llevado a cabo por Boozer va fuertemente en adición hacia el mecanismo postulado por Bolland y Ten Have, según el cual la reacción de inhibición está basada en la abstracción de hidrógenos por un radical RO_2 con la consecuente dismutación del radical semiquinona formado, otro mecanismo efectuado con un número de fenoles y aminas aromáticas envuelve una formación de complejo entre la molécula del inhibidor y el radical RO_2 seguido por la formación de quinonas y en algunos casos productos estables de adición de peróxidos.

2.3. ALGUNAS CARACTERISTICAS DE LOS ANTIOXIDANTES.

Las sustancias que actúan como antioxidante son susceptibles de oxidarse como se puede ver en el caso de la hidroquinona que se oxida con facilidad, pero que inhibe la autooxidación de sustancias que se encuentran almacenadas como el benzaldehído, monómeros, etc. protegiendo con gran eficiencia aplicándose en cantidades del orden de 0.001%. Además de ser efectivos a concentraciones tan pequeñas, la molécula del inhibidor tiene la propiedad de no consumirse mientras ejerce su efecto protector, demostrándose esto también con la hidroquinona, que de consumirse no podría proteger al benzaldehído ni a cualquier otro producto autooxidable más que en una cantidad equivalente. Lo que sucede es que el antioxidante reac

ciona con los radicales libres intermedios destruyéndolos, de no reaccionar así, sucedería que cada uno de los radicales li bres iniciaría un proceso en cadena que transformaría cientos de moléculas del aldehído en el ácido correspondiente.

Un antioxidante en especial puede ser efectivo para cier tas sustancias dependiendo de sus características, pero para otras no servir ó tener poca efectividad. Así lo afirma - - Shelton Wiekham demostrando que los antioxidantes derivados - de las aminas son más efectivos para inhibir los efectos de - la oxidación en el hule que los compuestos derivados del fe- nol, además afirma que para lograr de un antioxidante su ma-- yor efectividad se debe encontrar su concentración óptima.

Una serie de antioxidantes de gran importancia práctica- los revisa Lundberg midiendo su eficiencia y comparándola con otros para una sustancia dada mediante su período de induc-- ción.

Esta prueba consiste en someter a una sustancia autoxi- dable a una presión de oxígeno con temperaturas superiores al ambiente observando en un lapso un descenso de la presión rei nante, lo que es debido a una absorción de oxígeno dentro del sistema.

Para determinar el período de inducción se hacen varias- pruebas en las que siempre se tardará unos cuantos minutos pa ra iniciarse la absorción de oxígeno. A este tiempo se le da el nombre de período de inducción, que es el período transcu- rrido desde que se inició el calentamiento hasta la rápida ab sorción de oxígeno menos 15 minutos por el tiempo que tarda - en calentarse la bomba de metal y ponerse a la temperatura -- del baño.

El período de inducción se representa por la función:

$$\log y = r + s \log x$$

Donde:

x = concentración del inhibidor.
 r y s = constantes que pueden ser uno u otro positivo ó negativo.

En el año de 1976 Stimel; Jan (Vyzk. Ustav. Kablova Izolantov, Bratislava, Czech)¹⁹; estudiaron los efectos de las impurezas en la eficiencia del antioxidante, observando que la purificación de antioxidantes fenólicos y derivados de las aminas tienen un efecto pequeño sobre su habilidad a prevenir la degradación del polietileno.

Antioxidantes como el BHT y el 2,2-bis metilen (6,t-butyl-p-cresol) sufren una pequeña reducción en su actividad estabilizadora después de purificarse. Estudiaron también los efectos que producen los cambios de temperatura en la actividad de algunos antioxidantes derivados de las aminas como el N,N-difenil-p-fenilendiamina y del antioxidante DLTDPO observando que los cambios de temperatura si tienen un gran efecto en su actividad antioxidante.

El 1979 el Centro de Estudios de Telecomunicaciones de Francia evaluó por métodos de laboratorios a 12 antioxidantes fenólicos y a 2 antioxidantes tio-ester, demostrando que cuando aumenta el peso molecular del antioxidante el coeficiente de difusión y la solubilidad decrecen, estas investigaciones se hicieron usando polietileno.

2.4. CLASIFICACION DE LOS ANTIOXIDANTES.

Se pueden clasificar las sustancias antioxidantes de dos formas, dependiendo del producto al que se aplique ó bien tomando en cuenta la estructura química del antioxidante.

En este estudio se hará primero la clasificación según -

el tipo de estructura, de los antioxidantes más importantes - en la industria química y posteriormente se clasificará según la clase de sustancia a la que se adicione.

a).- CLASIFICACION DEPENDIENDO DEL TIPO DE ESTRUCTURA QUIMICA.¹⁰

ARIL-AMINAS SECUNDARIAS.-		N,N'-Difenil-p-fenilendiamina. N-Fenil-2-naftilamina. Octil difenilamina. N,N'-Difenil-etilendiamina. N-Isopropil-N'-Fenil-p-fenilendiamina.
AMINAS CETONICAS	.-	Productos de reacción de acetona-difenilamina.
DIHIDROQUINOLINAS	.-	2,2',4-trimetil-1,2-dihidroquinolina. 2,2',4-trimetil-6-etoxi-1,2-hidroquinolina.
NAFTILAMINAS	.-	Fenil β -naftilamina.
FENOLICOS		
a).- FENOLES ALQUILADOS.-		2,6-di-t-butil-p-cresol.
b).- BIS-FENOLES	.-	2,2'-bis-metilen-(6-t-butil-p-cresol) 2,2'-bis-butilen-(6-t-butil-m-cresol)
c).- TIO-BISFENOLES	.-	2,2'-bis-tio-(6-t-butil-p-cresol) 4,4'-bis-tio-(6-t-butil-m-cresol)
d).- MULTI-FENOLICOS	.-	1,1,3-tri-(2-metil-4-hidroxi-5-butyl fenil) butano.
ORGANO - FOSFITOS	.-	Fosfito de trisonil fenilo.
TIO - ESTERES	.-	3,3'-bis-tio-dipropionato de dilaurilo-.

b).- CLASIFICACION DE ANTIOXIDANTES DEPENDIENDO DE LA SUBSTANCIA A LA QUE SE APLIQUE.

En esta clasificación se agrupan los antioxidantes dependiendo de las características propias de la sustancia sobre la que actúa. Así podemos tener antioxidantes para plásticos, antioxidantes para hule ó sustancias antioxidantes para alimentos. De esta manera los clasificamos en 6 grupos:

- b.1.- Antioxidantes para elastómeros (HULE).
- b.2.- Antioxidantes para monómeros y polímeros (PLASTICOS).
- b.3.- Antioxidantes para productos derivados del petróleo.
- b.4.- Antioxidantes para alimentos.
- b.5.- Antioxidantes para productos farmacéuticos.
- b.6.- Antioxidantes para cosméticos.

En esta clasificación se hace una pequeña reseña de cada sustancia a la que inhibe y los efectos que produce la oxidación en ellas y se enuncian los antioxidantes más efectivos para inhibir la autoxidación en estas sustancias en especial.

b.1.- ANTIOXIDANTES PARA ELASTOMEROS.

El caucho natural y el sintético, experimentan una paulatina deterioración durante el envejecimiento como consecuencia de los efectos combinados del calor, luz y ozono; al adicionar un antioxidante retarda la absorción del oxígeno y los efectos de la oxidación. En la práctica moderna el antioxidante es una sustancia que no tiene efecto sobre la velocidad de vulcanización pero si retarda el deterioro de las propiedades elásticas causadas por la oxidación. El antioxidante se suele agregar al caucho antes de la vulcanización pues el caucho no sufre deterioro bajo condiciones ordinarias de fabricación ó almacenaje. Los antioxidantes más usados son los derivados de las aminas aromáticas, fenólicos e hidroquinolinas.

El antioxidante se agrega a los elastómeros en cantidades del orden de 0.15%.

Los antioxidantes más usados son²:

- N,N-Difenil etilendiamina.
- N-Isopropil-N-fenil-p-fenilendiamina.
- Fenil β naftilamina.
- Octil difenilamina.
- 2,2,4-trimetil-1,2-dihidroquinolina.
- 3,3-bis-tio-dipropionato de dilaurilo. (DLTDP)

La American Cyanamid Co. U.S demostró que el antioxidante DLTDP es efectivo sólo o como sinergista en hule.

Imanaka, Hiroshi; (Toyobo Co., Ltd), comprobó que la substancia DLTDP al agregarse a los poliesters elastoméricos aumentan su resistencia al calor.

b.2.- ANTIOXIDANTES PARA MONOMEROS Y POLIMEROS.

Los monómeros al ponerse en contacto con el oxígeno del aire sufren reacciones de oxidación, obteniéndose polimerizaciones no deseadas, como es el caso del monómero de estireno que al no tener inhibidor reaccionará con el oxígeno del aire, produciéndose reacciones de polimerización y la formación de poliestireno.

Los polímeros requieren también de un antioxidante durante su manufactura para evitar reacciones que lo deterioren -- por oxidación.

Los antioxidantes requeridos para plásticos varía con la estructura del polímero, los estados insaturados son menos resistentes a la oxidación que los polímeros saturados. Así tenemos los plásticos derivados de los fluoro-carbonados; poliacrílicos; fenolformaldehido; poliesters y las poliamidas que

requieren pequeña estabilización. En cambio los vinílicos, - los poliésteres de alto impacto, los derivados de poliolefinas (polietileno-polipropileno) y los poliacetales necesitan necesariamente de un antioxidante para mantener sus propiedades - útiles, durante la manufactura, proceso y uso.

Los antioxidantes usados para estabilizar los plásticos - son del tipo fenólico ya que las amins tienen uso limitado, - debido a sus propiedades manchantes. Los más usados son los - fenólicos y los derivados de alquil-bis-fenol que pueden usar - se solos ó bien mezclados con antioxidantes órgano-fosfitos ó con el DLTPD para lograr mayor efectividad dependiendo del -- grado de estabilización deseada. Los antioxidantes en plásti - cos se adicionan en cantidades del 0.01 al 1.0%.

Los antioxidantes más usados en plásticos son²:

- 2,2-bis-tio-(6-t-butyl-p-cresol)
- 4,4-bis-tio-(6-t-butyl-m-cresol)
- 2,2-bis-metilen-(6-t-butyl-p-cresol)
- 2,2-bis-butilen-(6-t-butyl-m-cresol)
- 2,6-di-t-butyl-p-cresol.

Buergle, Peter; Maurer, Karl; Alemania²⁸ demostró la uti - lidad del DLTPD en las polimerizaciones parciales de monóme -- ros acrílicos, de tal manera que el industrial puede preparar polimerizaciones parciales del 20-35% y evitar que el monóme - ro continúe polimerizándose con la ventaja de que cuando se - quiera aumentar el peso molecular del polímero se logra con - sólo adicionar un peróxido.

Ikeda, Kasuo de Japón²⁷; comprobó que mejoran la resisten - cia a la degradación por el calor y por la oxidación de un -- grupo de polímeros y copolímeros de hidrocarburos aromáticos, vinílicos y dienos conjugados cuando se usa el antioxidante - fosfito de trisonil fenilo haciendo sinergismo con el DLTPD.

El antioxidante DLTPD es usado como sinergista o bien solo como lo demostró Daido Masuo (Johoku Chemical Industry -- Co.)²⁰ comprobando que para estabilizar poliuretanos el antioxidante DLTPD es más efectivo que el 2,6-di-t-butil-p-cresol (BHT).

b.3.- ANTIOXIDANTES PARA PRODUCTOS DERIVADOS DEL PETROLEO.

Dividiendo los productos derivados del petróleo que pueden sufrir reacciones de autoxidación tenemos:

- b.3.1.- Productos usados como combustible.
- b.3.2.- Productos usados como fluidos hidráulicos.
- b.3.3.- Productos usados como lubricantes.
- b.3.4.- Olefinas y poliolefinas.

En base a esta división se hace un resumen de los antioxidantes más útiles para inhibir las reacciones oxidativas en estos compuestos.

b.3.1.- ANTIOXIDANTES PARA COMBUSTIBLES.

Los combustibles derivados del petróleo se deterioran y disminuyen su eficiencia como consecuencia de reacciones de oxidación.

Las gasolinas sufren los efectos de la deterioración oxidativa que trae como consecuencia cambios en el octanaje y -- formación de gomas que ocasionan problemas en el mecanismo -- del motor, lo que puede ocasionar también en combustibles die sel u otra clase de combustibles que no se estabilicen con un antioxidante adecuado.

Los antioxidantes más usados en combustibles son²:

N,N'-di-sec-butil-p-fenilendiamina.

N,N'-bis-(1,4-dimetil-pentil)-p-fenilendiamina.

N,N-Diisopropil-p-fenilendiamina.

N-nbutil-p-aminofenol.

2,6-di-t-butil-p-cresol.

2,6-di-t-butil-fenol.

Tetracianoetileno.

Hidroxifenoxisilanos.

b.3.2.- ANTIOXIDANTES PARA FLUIDOS HIDRAULICOS.

Los fluídos hidráulicos son productos usados para operar varios componentes mecánicos en tipos de maquinaria, usándose para este servicio fracciones de petróleo y otros materiales como silicones y ésteres, cuyas propiedades dependen del tipo de servicio esperado.

Los materiales ligeros son usados en condiciones inferiores y bajas temperaturas, para condiciones más drásticas se usan materiales con puntos de ebullición más elevados.

Para esta clase de fluídos es necesario adicionar un anti oxidante y evitar así deposiciones que se formen al oxidarse el fluído que puedan inducir a un mal funcionamiento del equipo particularmente en condiciones severas de uso.

Entre los antioxidantes que se usan en fluído hidráulicos tenemos:

2,2-bis-metilen-(6-t-butil-p-cresol)

4,4-bis-tio-(6-t-butil-m-cresol)

Fenil β naftilamina.

b.3.3.- ANTIOXIDANTES PARA LUBRICANTES.

Cuando un aceite lubricante no contiene un inhibidor de oxidación sufre efectos ocasionados por esta reacción que se manifestarán en un aumento de la viscosidad, precipitación de sustancias, etc., que producirán efectos nocivos en el equipo donde se usen.

Cuando adicionamos un antioxidante adecuado evitamos ó -- disminuimos notablemente los efectos de oxidación.

Se cree que la reacción de protección ocurre mediante un mecanismo de radicales libres donde el antioxidante actúa rompiendo la cadena, logrando que la reacción de una molécula con un portador de cadena evite la reacción de oxidación de centenares é incluso de miles de moléculas del lubricante.

La gran lubricación de maquinaria ha desarrollado una técnica de lubricación de una gran importancia.

Para darse una idea del número de lubricantes especializados, nada más la American Petroleum Industry ha producido - - 1,156 grasas en 271 diferentes variedades, considerándose como una grasa a un aceite lubricante convertido en jalea, que está sujeta al ataque del oxígeno.

Entre los antioxidantes que se usan para lubricantes, tenemos los fenólicos, compuestos fosforados, los fenoxisilanos.

Otros antioxidantes usados en formulaciones de lubricantes conocidos en el mercado no son del conocimiento público.

Entre los antioxidantes conocidos tenemos:

2,2-bis-metilen-(6-t-butil-p-cresol)

2,2-bis-metilen-(6-t-butil-m-cresol)

2,2-bis-tio-(6-t-butil-p-cresol)

3,3-bis-tio-dipropionato de dilaurilo.

Kamatsuzaki, Shigehi; Japón²³, comprobaron que el antioxidante I,I-bis-(4-hidroxifenil)ciclohexano mezclado con el DLTD en proporción de (5:95) al adicionarse a bases de grasas y - - aceites, éstas aumentan su resistencia al calor y estabilidad a la oxidación .

La (Maruzen Oil Co., Ltd) Japón²⁴, afirma que los aceites lubricantes conteniendo ésteres ó aceites minerales al mezclarse con el antioxidante DLTD y otro antioxidante aumenta la es

tabilidad contra la oxidación.

b.3.4.- ANTIOXIDANTE PARA OLEFINAS Y POLIOLEFINAS.

Las olefinas y poliolefinas son sustancias fácilmente oxidables por lo que es necesario adicionar un antioxidante para evitar que estas sustancias pierdan sus propiedades. Se usan antioxidantes como la hidroquinona, los hidroxifenoxisilanos, antioxidantes fenólicos, fosfitos, el antioxidante DLTDPe usado como sinergista mezclado con otros antioxidantes.

Shinohara, Masami; (Riken Vitamin Oil Co. Ltd), Japón,²⁶ afirman que mezclas de DL- -tecoferol y DLTDPe son usados como estabilizadores del calor para polietileno.

La Mitsubishi Petrochemical Co. Japón²⁵ demostró que poliolefinas como polietileno de alta densidad son clorados en presencia del DLTDPe para uniformizar la cloración.

(Nat. Kuenstliche Alterung Kunstst.,) Alemania dice que algunas combinaciones de antioxidantes como los fosfitos, fenólicos, con el antioxidante DLTDPe se producen excelentes estabilizadores contra la luz para poliolefinas.

b.4.- ANTIOXIDANTES PARA ALIMENTOS.

Literalmente cientos de compuestos antioxidantes tienen que ser propuestos para retardar el deterioro oxidativo de sustancias alimenticias fácilmente autooxidables. Pero por salud únicamente unos pocos pueden ser incorporados a productos destinados al consumo humano ó para usos agropecuarios, ya que la utilización de aditivos en alimentos es necesario sujetarse a regulaciones gubernamentales. Ciertos gobiernos no permiten el uso de antioxidantes, otros solamente permiten los antioxidantes naturales, pero desde que la Food and Drug Administration (FDA) en US permitió la adición de ciertos antioxidantes naturales y sintéticos, su aplicación se ha incrementado, lo que ha dado buenos resultados en países desarrollados -

evitando que los productos alimenticios sufran los efectos de oxidación como es el caso de grasas y aceites, vitaminas, etc..

Rancibidad y deterioración del color son problemas de - - gran importancia causados por la oxidación en grasas y alimentos untuosos. La ranciedad no únicamente causa mal olor y sabor desagradable, sino además afecta el valor nutricional y -- produce efectos fisiológicos. La deterioración oxidativa también induce a la destrucción de vitaminas y ácidos grasos esenciales produciendo efectos toxicológicos de varios tipos, por lo que el uso de antioxidantes naturales y sintéticos hicieron una importante contribución a una mejor nutrición, logrando la conservación de alimentos aumentando su vida media. Cuando -- una sustancia se va a utilizar como antioxidante en productos alimenticios debe de cumplir con los siguientes requisitos⁹:

- 1.- Debe de ser activo en pequeñas concentraciones (0.01 - 0.001%).
- 2.- No debe ser tóxico.
- 3.- Debe de ser fácilmente incorporado al substracto.
- 4.- Debe de ser disponible y a un costo pequeño para que su uso no signifique incremento en el precio.
- 5.- Que al hacer el control del antioxidante sea fácilmente detectado, identificado y medido.

Los antioxidantes naturales y sintéticos más usados para alimentos son:

Acido gálito y galatos.

Nombre químico: ácido 3,4,5-tri-hidroxi benzoico.

Tecoferoles y sus compuestos relacionados.

Hidroxi-anisol butilado (BHA).

Es una mezcla de: 2-t-butil-4-metoxi-fenol.

3-t-butil-4-metoxi-fenol.

Acido nordihidroguaiarético (NDGA).

Nombre químico: 2,3-dimetil-1,4-bis(3,4-dihidroxifenil) butano.

Hidroxi-toluen butilado (BHT).

Nombre químico: 2,6-di-t-butil-p-cresol).

Tioácidos.

Como el 3,3-bis-tio-dipropiónico.

Los antioxidantes pueden ser adicionados directamente a los alimentos ó dentro del material donde se empaacan.

La compañía Evans Chemetic, Inc. US especialista en la fabricación de compuestos orgánicos divalentes sulfurados afirma que el ácido tio-dipropiónico es usado como antioxidante para alimentos y empaques para alimentos, aprobado por la FDA.

b.5- ANTIOXIDANTES PARA PRODUCTOS FARMACEUTICOS.

Las substancias de uso farmacéutico tienen diversas clases de productos, por lo que la deterioración toma varias formas entre las cuales tenemos la deterioración microbiológica - que es común en los productos que contienen carbohidratos y -- proteínas; otra deterioración importante es la oxidativa originada por la utilización de aceites y otros lípidos autoxidables en las preparaciones, causando daños importantes en esta industria. Los aceites y grasas más usados en preparaciones farmacéuticas son el aceite de oliva, aceite de ricino, aceite de almendra, aceite de girasol; la grasa de cerdo, etc.. Existen también otros productos autoxidables que se usan en preparaciones como la vitamina A, que logran su estabilidad cuando se les adiciona un antioxidante.

En la industria farmacéutica lo mismo que en alimentos, -

Los antioxidantes más usados son inofensivos, neutrales en reacciones, insípidos é inodoros, de este modo los antioxidantes aprobados para uso en alimentos también se aplican a los productos farmacéuticos.

Los antioxidantes más usados para esta clase de productos son:

Los α y β naftoles; el propil galato.

Guaiacol ; ésters del ácido gálico.

Hidroxifenoles ; aminas aromáticas.

BHA ; BHT ; NDGA.

3,3'-bis-tio-dipropiónico (ácido).

La compañía Evans Chemetic, inc. US afirma que el ácido 3,3'-bis-tio-dipropiónico se usa como antioxidante en aceites y grasas para la industria farmacéutica, aprobado por la FDA.

b.6.- ANTIOXIDANTES PARA COSMETICOS.

En general la estabilidad de grasas y aceites usados en cosmetología como el aceite de ricino, aceites minerales, aceites de cereales ó la adición de sustancias autoxidables compatibles con ellos envuelve el uso de antioxidantes que eviten interrumpir su eficiencia.

Los antioxidantes usados en alimentos son usados también para los productos de cosmetología como son los fenólicos, BHA; BHT; NDGA ; los polifosfatos especialmente el hexametafosfato; el citrato de estiarilo; el palmitato de ascorbilo que son altamente eficientes en fase acuosa.

El ácido cítrico; ácido ascórbico; los fosfatos solubles en agua, se usan como antioxidantes sinergistas.

La sal de sodio del ácido etilendiaminotetracético es usa da para estabilizar soluciones utilizadas para ondular cabe- - llo.

El benzoato de sodio; alcohol cinámico; eugenol; propil-- hidroxibenzoato, protegen las cremas y lociones contra la de- terioración oxidativa.

Los polifenoles son efectivos para estabilizar cosméticos de tocador contra la luz, (lociones).

Resumen:

El 3,3-bis tío dipropionato de dilaurilo es un antioxidante que puede actuar sólo ó bien haciendo sinergismo con otros- antioxidantes para aumentar la eficiencia contra los efectos - producidos por la oxidación.

El DLTDP se aplica a productos como: elastómeros (hule);- plásticos; polímeros y copolímeros; olefinas y poliolefinas; - grasas y aceites lubricantes; polipropileno; polietileno, etc.

El ácido tío dipropiónico se utiliza como antioxidante pa ra alimentos y productos farmacéuticos, como lo afirma la Cía. Evans Chemetic, inc. U.S.

CAPITULO 3

METODOS DE OBTENCION.

En este estudio se consideran tres métodos para la síntesis del 3,3'-bis-tio-dipropionato de dilaurilo.

3.1.- SINTESIS USANDO ACRILO NITRILO.

3.2.- SINTESIS USANDO ACRILATO DE METILO.

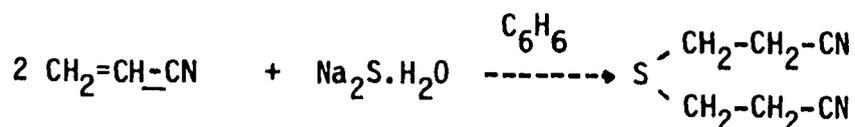
3.3.- SINTESIS USANDO ACIDO ACRILICO.

3.1.- SINTESIS USANDO ACRILO NITRILO.

Medveded. A.I. (URSS).

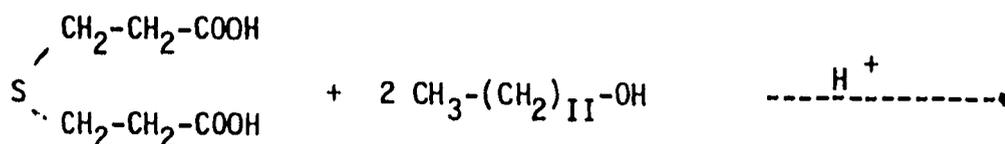
El proceso envuelve reacción de acriló nitrilo con sulfuro de sodio acuoso en seno de benceno.

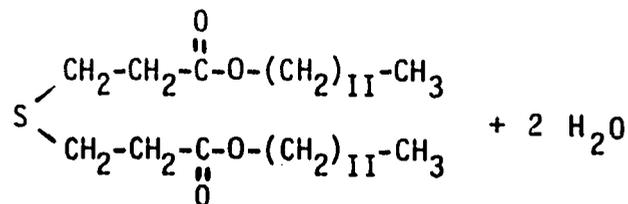
Reacción:



Seguido por una reacción de alcoholisis del tio dinitrilo con alcohol láurico y catalizado con ácido sulfúrico acuoso.

Reacción:



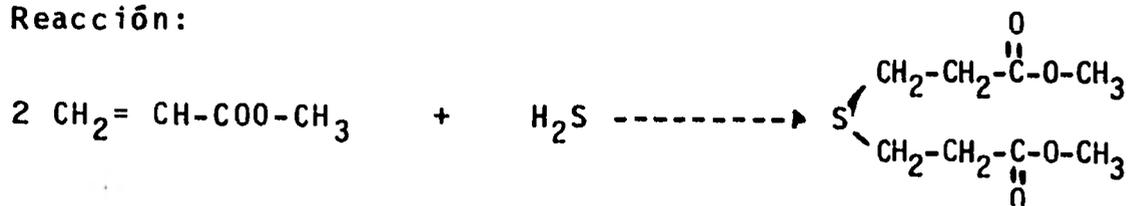


3.2.- SINTESIS USANDO ACRILATO DE METILO.

Medveded. A.I.; Nauchno-Issled. Inst. Khim. Polim. Mater.- (URSS).

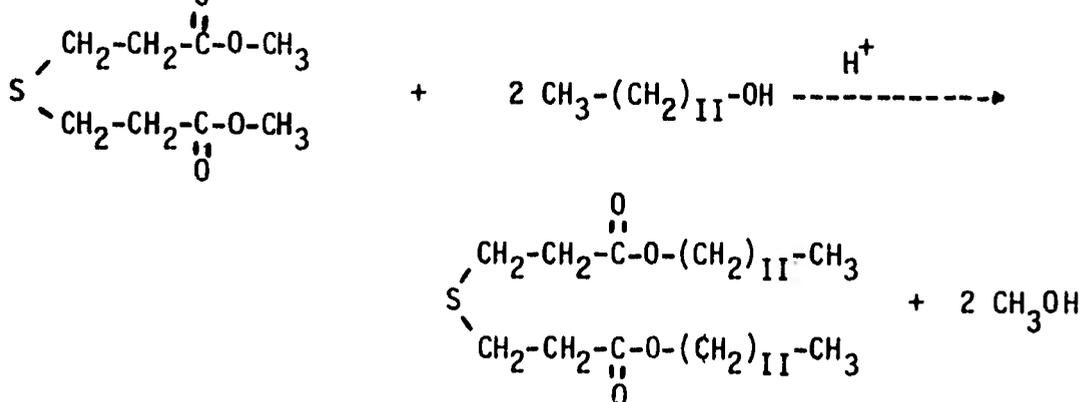
Se reacciona el acrilato de metilo con H_2S en presencia de una resina intercambiadora de iones a temperaturas de 55-65 °C- obteniéndose el tio dipropionato de dimetilo con rendimientos - de 93.16%.

Reacción:



El tio dipropionato de dimetilo se somete a una reacción - de transesterificación con alcohol láurico catalizando con un - ácido inorgánico obteniéndose el éster 3,3'-bis-tio-dipropionato de dilaurilo con rendimientos de 93-96%.

Reacción:

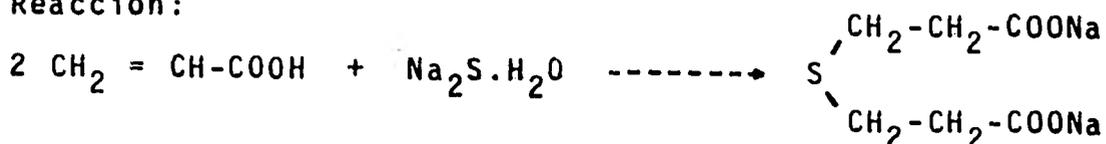


3.3.- SINTESIS USANDO ACIDO ACRILICO.

Del estudio de la American Cyanamid Co. (Brit.).

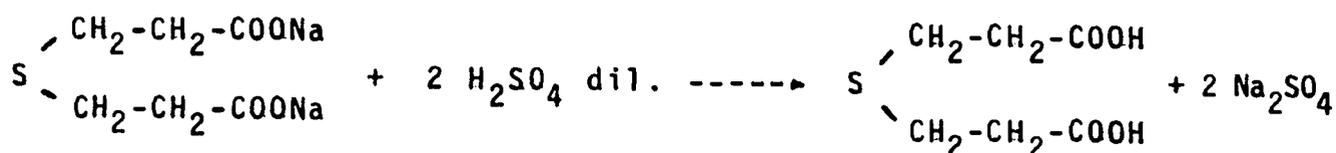
Se realiza la síntesis reaccionando ácido acrílico con $\text{Na}_2\text{S.H}_2\text{O}$ a temperaturas de $85-90^\circ\text{C}$ para obtener el tio-dipropionato de sodio.

Reacción:



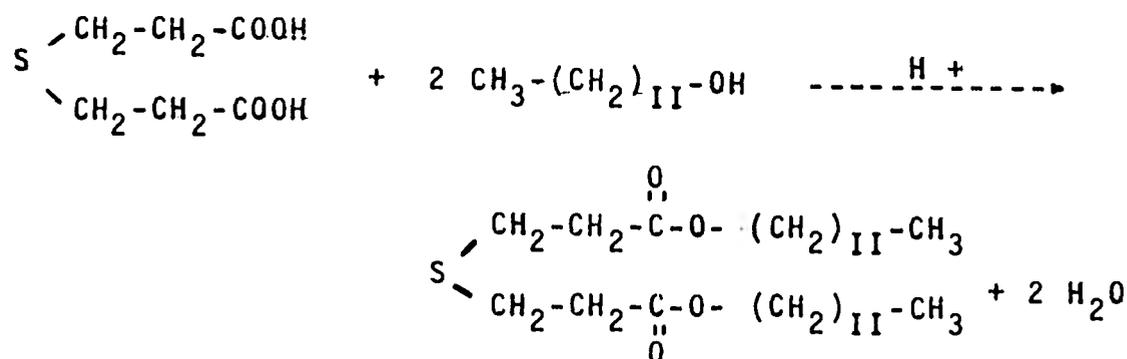
El tio-dipropionato de sodio se acidula con H_2SO_4 al 50% para obtener el ácido tio-dipropiónico con rendimientos del 89%.

Reacción:



El ácido tio-dipropiónico se esterifica con alcohol láurico en seno de un solvente no polar catalizado con un ácido inorgánico a temperaturas de reflujo obteniéndose rendimientos de $\pm 93.5\%$.

Reacción:



CAPITULO 4

PARTE EXPERIMENTAL

En los laboratorios de la sección de Química Experimental de la Facultad de Química (UNAM) se realizó el estudio experimental para la fabricación del 3,3'-bis-tio-dipropionato de dilaurilo.

Trabajándose primordialmente en el 3er. método de síntesis (inciso 3.3 - capítulo 3).

Durante el desarrollo de la síntesis se usaron primeramente reactivos grado Q.P. y posteriormente reactivos grado técnico.

Se modificaron variables como temperatura, concentración de reactivos, tiempos de residencia, hasta llegar a obtener los resultados más óptimos de conversión y rendimientos.

El método de fabricación se realiza en dos etapas:

- a).- Síntesis del ácido tio dipropiónico.
- b).- Esterificación del ácido tio dipropiónico.

a).- SINTESIS DEL ACIDO TIO DIPROPIONICO.

Técnica General.

Se carga el reactor con sulfuro de sodio hidratado, se calienta a 85°C, una vez disuelto el sulfuro de sodio se inicia la agitación. Teniendo controlada la temperatura a 85°C se inicia la adición del ácido acrílico diluido en agua manteniendo la temperatura durante toda la reacción.

La reacción es exotérmica por lo que se debe vigilar la --

temperatura para que no exceda de 90°C.

Terminada la adición del ácido se deja la reacción a 85°C durante un tiempo determinado.

Se enfría la carga y se adiciona agua sin parar de agitar.

El tio-dipropionato de sodio formado se convierte en el ácido tio-dipropiónico acidulando poco a poco con ácido sulfúrico diluido al 50%.

El ácido tio-dipropiónico precipita, se filtra y se lava con agua para eliminar sales.

Para llegar a completar esta técnica se hicieron varias experimentaciones en el laboratorio, haciéndose un resumen en la tabla 4.1 de las reacciones con mejor rendimiento.

TABLA 4.1. ESTUDIO DE LA REACCION PARA LA OBTENCION DEL ACIDO TIO DIPROPIONICO.

#	Moles de ácido acrílico.	Moles de $\text{Na}_2\text{S}\cdot\text{H}_2\text{O}$	Tiempo de adición del ácido minutos	Temperat. de adición del ácido °C	Punto de Fusión °C	Rendim. %
1	0.2	0.11	30	15-20	-	-
2	0.2	0.11	30	0-15	-	-
3	0.2	0.11	130	85	130-134	31.5
4	0.2	0.120	130	85	130-133	62.0
5	0.2	0.135	130	85	130-133	88.0
6	0.2	0.135	180	85	130-134	89.0

b).- ESTERIFICACION DEL ACIDO TIO DIPROPIONICO.

Técnica.

El ácido tio-dipropiónico se carga húmedo y perfectamente

pesado al reactor y posteriormente se agrega un solvente como tolueno, xileno, benceno, ciclohexano, etc..

Se calienta la carga hasta la temperatura de reflujo para eliminar primeramente la cantidad de agua presente, que se resta del peso de carga original y poder calcular la relación estequiométrica del alcohol láurico necesario para la esterificación.

La reacción se cataliza con ácido sulfúrico conc. y se mantiene la temperatura de reflujo hasta extraer toda el agua de esterificación. Terminada la reacción se enfría el producto y se neutraliza con solución de hidróxido de sodio, se lava para eliminar sales y se destila el solvente a presión atmosférica recuperándose \pm 83.5%. Se destila el alcohol no reaccionado usando una presión de 10 mm Hg y temperaturas de \pm 130°C.

Se obtiene un éster con rendimientos del 93.5%.

TABLA 4.2. ESTUDIO DE LA ESTERIFICACION DEL ACIDO TIO DIPROPIONICO.

REACTIVOS	REACCION # 1	REACCION # 2	REACCION # 3
Acido tio dipropiónico	0.37 moles	0.4 moles	0.26 moles
Alcohol láurico	0.77 moles	0.72 moles	0.46 moles
Ciclohexano	100 ml.	-	-
Tolueno	-	100 ml.	100 ml.
DATOS EXPERIMENTALES			
Temperatura de esterific.	79°C	112 °C	112°C
Tiempo de esterificación	8 hrs.	2 hrs. 50 min.	3 hrs.
Punto de fusión °C	35	33	33
Rendimiento %	93.5	77.83	54.39

En este método de síntesis podemos aumentar hasta un 6% el rendimiento en la obtención del DLTPD si se realiza la esterificación en presencia de las sales, evitando lavar el ácido tio-dipropiónico eliminando de esta manera las pérdidas por solubilidad.

Ya que un gramo de ácido tio dipropiónico se disuelve - en 27 ml. de agua a 25°C, lo que indica que su solubilidad - en agua es bastante grande.

b).- ESTERIFICACION DEL ACIDO TIO DIPROPIONICO EN PRESENCIA DE SALES.

TECNICA GENERAL.

El método se realiza exactamente hasta que se acidula - el tio dipropionato de sodio.

Terminada la acidulación se adiciona a la carga la cantidad de agua necesaria para poder disolver el 70% de las sales agitando. Se saca una muestra del reactor, se filtra, - se seca y se analiza el porcentaje de la mezcla.

Se realiza usando el método de titulación potenciométrica. Titulando el ácido tio dipropiónico y sulfúrico con solución de hidróxido de sodio 0.05 normal y como indicador fenftaleína, usando una cantidad de muestra de 200 mg disuelta en agua.

Con los datos obtenidos en la titulación se traza la curva obteniéndose dos inflexiones que corresponden al volumen del titulante en el punto de equivalencia.

Datos:

pKa del ácido tio dipropiónico	=	4.4
Meq. " " " "	=	0.089
pKa del ácido sulfúrico	=	1.92
Meq. " " " "	=	0.049

$$C_{\%} = \frac{V \times N \times \text{Meq.} \times 100}{\text{Peso de muestra}}$$

Donde:

V = volumen del titulante en el punto de equivalencia.

N = normalidad del titulante.

Meq = miliequivalente del ácido titulado.

TABLA 4.3. DATOS OBTENIDOS DE LA TITULACION DE UNA MUESTRA DE ACIDO TIO-DIPROPIONICO MEZCLADO CON ACIDO SULFURICO.

MI de titulante	p ^H	MI de titulante	p ^H	MI de titulante	p ^H
0.5	2.30	20.0	4.20	39.0	9.90
1.0	2.40	21.0	4.30	40.0	10.00
1.5	2.50	22.0	4.35	41.0	10.10
2.0	2.55	23.0	4.40	42.0	10.20
2.5	2.90	24.0	4.45	43.0	10.30
3.0	3.00	25.0	4.50	44.0	10.40
4.0	3.10	26.0	4.60	45.0	10.50
5.0	3.20	27.0	4.65		
6.0	3.30	28.0	4.70		
7.0	3.40	29.0	4.80		
8.0	3.45	30.0	4.90		
9.0	3.55	31.0	4.95		
10.0	3.60	32.0	5.05		
11.0	3.70	33.0	5.40		
12.0	3.75	34.0	6.90		
13.0	3.80	35.0	8.90		
14.0	3.90	36.0	9.30		
15.0	3.95	37.0	9.60		
16.0	4.00	38.00	9.80		
17.0	4.05				
18.0	4.10				
19.0	4.15				

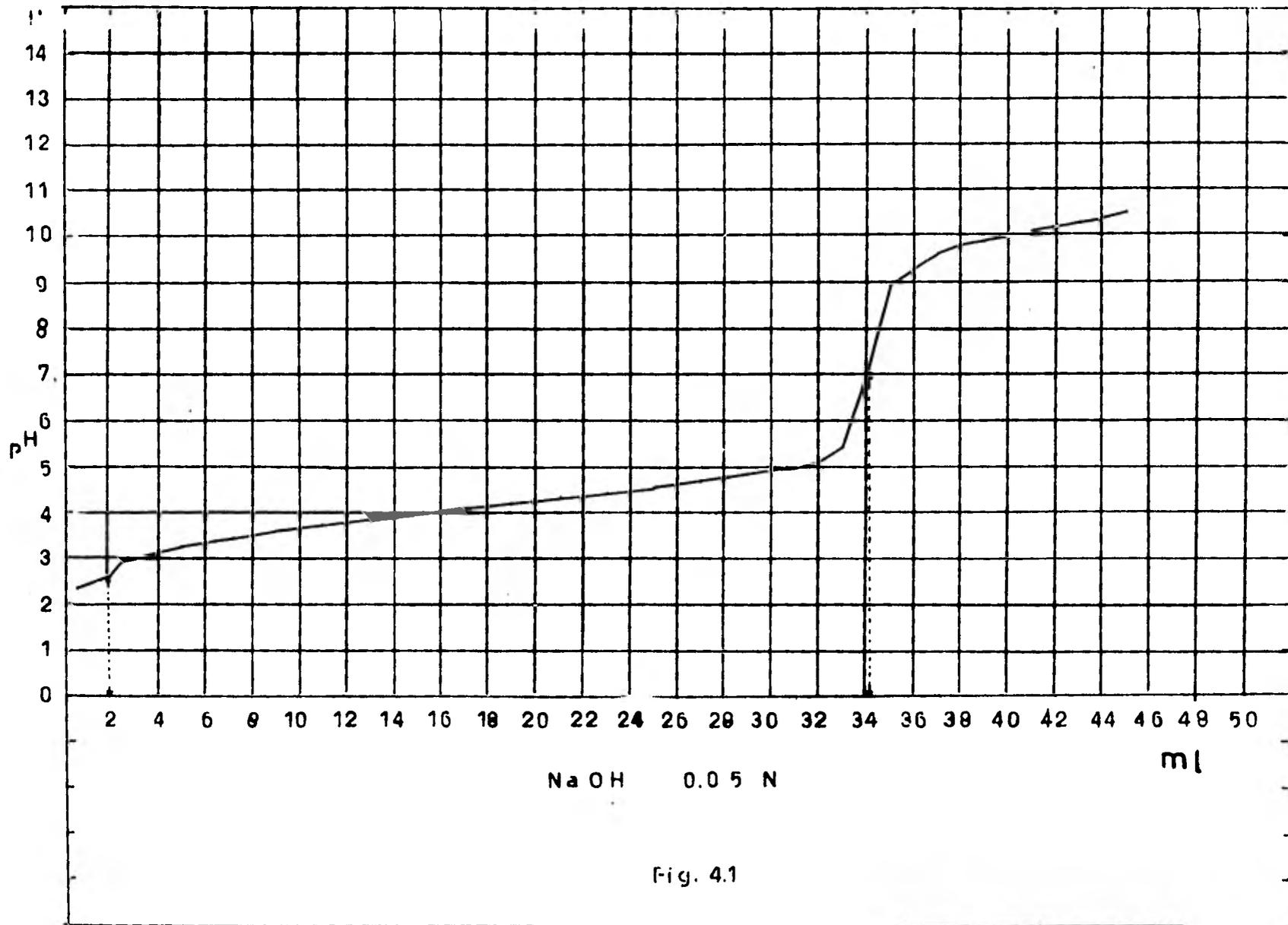


Fig. 4.1

De la fig. 4.1 conocemos:

Volumen de titulante del ácido tio dipropiónico. = 32.2 ml
 " " " " " sulfúrico = 2.0 ml

Cálculo del porcentaje de ácido tio dipropiónico en la mezcla.

$$C_{ATDP} = \frac{32.2 \times 0.05 \times 0.089 \times 100}{0.200}$$

$$C_{ATDP} = 71.645\%$$

Cálculo del porcentaje de ácido sulfúrico en la mezcla.

$$C_{H_2SO_4} = \frac{2.0 \times 0.05 \times 0.049 \times 100}{0.20}$$

$$C_{H_2SO_4} = 2.45\%$$

El ácido tio dipropiónico conteniendo sales, humedad y acidez perfectamente pesado y previamente analizado se carga al reactor. Se agrega el solvente y se calienta hasta la temperatura de reflujo. Se elimina el agua presente en la carga, se pesa y se resta al valor del peso original para conocer con exactitud la cantidad real de carga.

Con el análisis de componentes y el peso real cargado, sabremos que relación molar de alcohol láurico tendremos que adicionar para la esterificación.

El alcohol se agrega a la temperatura de 50°C y se calienta de nueva cuenta el reactor hasta la temperatura de reflujo.

La esterificación termina cuando se ha eliminado toda -

el agua de reacción, lo que se logra en un tiempo de \pm 8 hrs.

Terminada la esterificación se enfría la carga a 55°C y se filtra el producto para eliminar las sales.

El éster libre de sales, se neutraliza con solución de hidróxido de sodio y se lava con agua para eliminar las sales.

Se destila el solvente a presión atmosférica recuperando se \pm 80%. Se destila el alcohol láurico no reaccionado con presión de 10 mm Hg y temperaturas de \pm 130°C .

El residuo es el éster que se obtiene con rendimientos de \pm 98%.

OBSERVACION:

Después de la esterificación por cualquiera de los dos métodos, la formación de emulsiones es un hecho importante que se debe de considerar originado por la presencia de monoéster en el crudo, que al neutralizar con hidróxido de sodio se tiene el tío propionato de sodio que resulta ser un eficaz agente emulsionante y puede formar emulsiones intratables con gran rapidez.

Cuando se usa tolueno como solvente de esterificación -- también ayuda a la formación de emulsiones difíciles de separar, por lo que no es muy recomendable usarlo.

La dificultad de separar y lavar el producto después de neutralizado por la presencia de tales emulsiones aumenta la probabilidad de que el éster quede con reacción alcalina.

Además su efecto es evidente sobre el rendimiento y costo de todo el proceso.

CALIDAD DEL PRODUCTO

El DLTDP es un sólido de color blanco con un punto de fusión de $\pm 38.5^{\circ}\text{C}$. En este producto son tres las propiedades más importantes desde el punto de vista de calidad, olor, color y punto de fusión.

La coloración y el bajo punto de fusión pueden ser originados por el uso de alcohol láurico de mala calidad durante la esterificación.

También puede producirse coloración debido a reacciones secundarias ó por la presencia de pequeñas cantidades de impurezas en las materias primas, tanto en el alcohol como en el ácido orgánico que durante el proceso pueden oxidarse bajo la influencia combinada del ácido mineral caliente y los vestigios de oxígeno molecular que puedan hallarse presentes.

Además es bien sabido que ciertos materiales empleados en la construcción de plantas industriales, tales como hierro y acero dulce han de evitarse al diseñar un reactor de esterificación frenando de esta manera los poderosos efectos promotores de color inherentes a estos iones metálicos.

El bajo punto de fusión es debido al uso de materias primas de baja pureza como alcohol láurico mezclado con otros alcoholes que producirán una mezcla de ésteres y como consecuencia un producto de bajo punto de fusión.

El olor es originado por varias causas. Cualquier índice de acidez después de neutralizar puede producir una reacción de hidrólisis si se somete el producto a temperaturas mayores de 130°C resultando un éster de alto índice de acidez con olor a alcohol libre.

Otra causa que puede producir olor en el éster es el uso de materias primas de mala calidad.

CAPITULO 5

ANALISIS DE MERCADO

Se obtuvieron datos de consumo del DLTDP en las oficinas generales de Pemex, área petroquímica y en el departamento de ventas de Ciba Geigy.

En el año de 1976 se importó	15 toneladas
" " " " 1977 " "	18 "
" " " " 1978 " "	27 "
" " " " 1979 " "	39 "
" " " " 1980 " "	59 "

5.1. Línea de regresión.

Con los datos de consumo se calcula la línea de regresión para estimar la cantidad de DLTDP que se importará, si es que no se llega a producir en México para el año de 1988.

Se calcula la línea de regresión por el método de mínimos cuadrados.

La ecuación de la recta de aproximación por el método de mínimos cuadrados es:

$$Y = a_0 + a_1 X \dots\dots\dots (1)$$

Las ecuaciones normales para la recta de mínimos cuadrados son:

$$\sum Y = a_0 N + a_1 \sum X \dots\dots (2)$$

$$\sum XY = a_0 \sum X + a_1 \sum X^2 \dots\dots (3)$$

X	Y	XY	X ²	Y ²
1	15	15	1	225
2	18	36	4	324
3	27	81	9	729
4	39	156	16	1521
5	59	295	25	3481
$\Sigma X = 15$	$\Sigma Y = 158$	$\Sigma XY = 583$	$\Sigma X^2 = 55$	$\Sigma Y^2 = 6280$

Sustituyendo valores en las ecuaciones 2 y 3 tenemos:

$$5 a_0 + 15 a_1 = 158$$

$$15 a_0 + 55 a_1 = 583$$

$$5 a_0 = 158 - 15 a_1$$

$$a_0 = \frac{158 - 15 a_1}{5}$$

$$15 \left(\frac{158 - 15 a_1}{5} \right) + 55 a_1 = 583$$

$$2370 - 225 a_1 + 275 a_1 = 2915$$

$$a_1 = \frac{545}{50}$$

$$a_1 = 10.9$$

Substituyendo el valor de a_1 en la ecuación (2) tenemos:

$$a_0 = \frac{158 - (15)(10.9)}{5}$$

$$a_0 = - 1.1$$

Sustituyendo el valor de a_0 y a_1 en la ecuación de la recta:

$$Y = - 1.1 + 10.9 X$$

Dando un valor a $X = 13$

$$Y = - 1.1 + 10.9 (13)$$

$$Y = 140.6$$

Coef. de correlación = 0.96

El valor estimado de importación de DLTPD para el año de 1988 será de 140.6 toneladas.

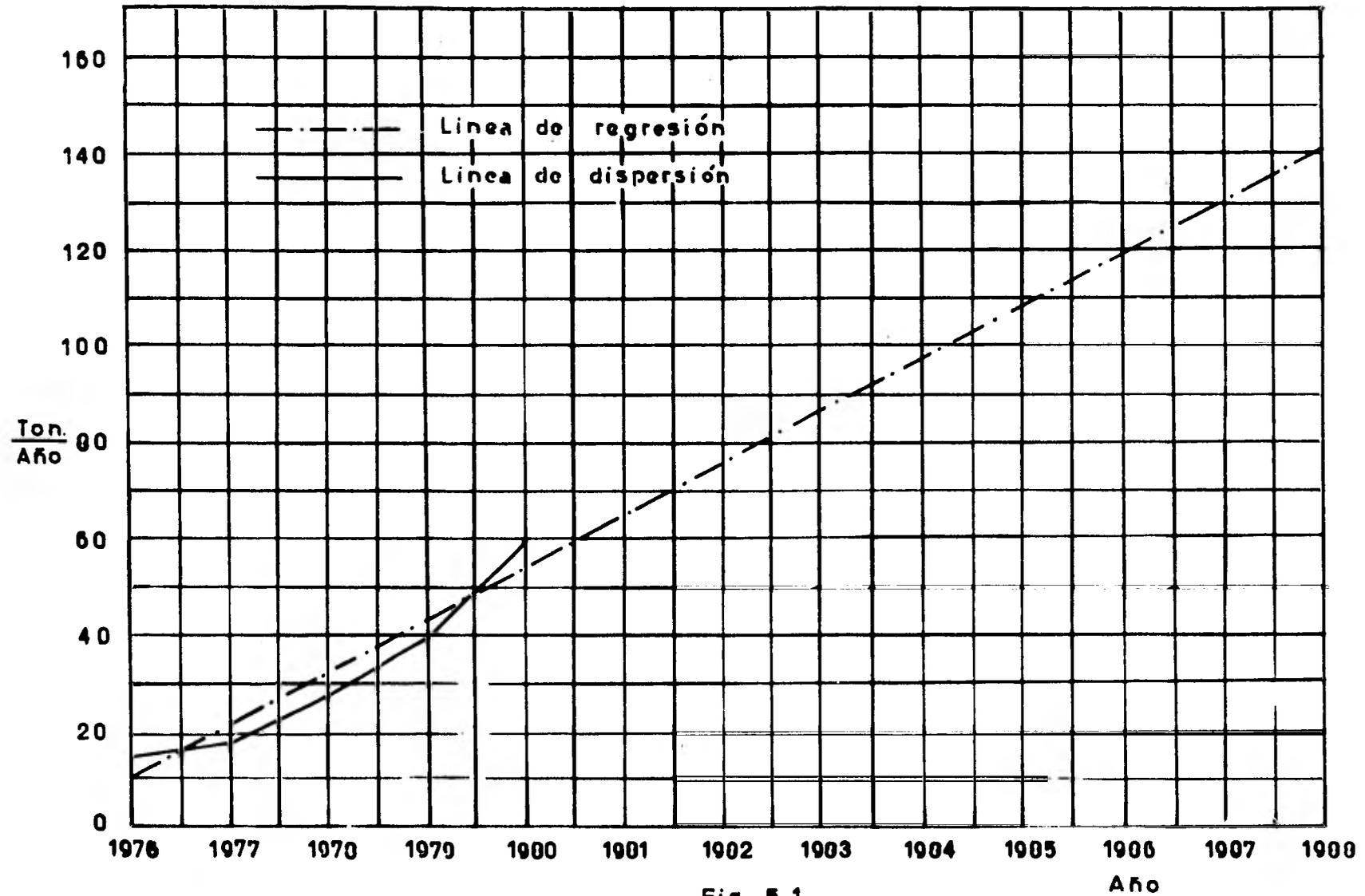


Fig. 5.1

CAPITULO 6

DISEÑO DEL PROCESO.

Para el diseño del proceso se seleccionó el método de -
síntesis de DLTPD usando ácido acrílico.

Este método resulta el más viable debido a que las mate-
rias primas que se utilizan son más baratas y el tiempo de -
reacción es una tercera parte menor que los otros dos méto-
dos indicados en los incisos 3.1 y 3.2 del capítulo 3.

SECUENCIA DE ACTIVIDADES DEL DISEÑO DEL PROCESO.

- 6.1. BASE DEL DISEÑO
- 6.2. DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO.
- 6.3. EQUIPO NECESARIO.
- 6.4. DIMENSIONAMIENTO DEL EQUIPO.

6.1. BASE DEL DISEÑO.

Como base del diseño se tiene:

- a).- Cantidad de producto deseado.
- b).- Materias primas necesarias para la síntesis.
- c).- Temperaturas y presiones.

a).- Cantidad de producto deseado.

Según la tendencia de la fig. 5.1, la demanda en el mer-
cado será de 140 toneladas para el año 1988.

Teniendo un tiempo laborable de 250 días/año.

Se tendrá una producción por día de:

$$140 \frac{\text{ton}}{\text{año}} \times \frac{1 \text{ año}}{250 \text{ días}} = 0.560 \text{ ton/día.}$$

Producción por día = 0.560 ton.

Tiempo de proceso = 16 horas

b).- Materias primas necesarias para la síntesis.

Se conoce la cantidad de materias primas/lote, haciendo un balance de material.

Base: 1 día.

Producción = 560 Kg

Peso molecular del DLTDP = 514

$$\text{Relación molar} = \frac{560}{514}$$

$$\text{Reacción molar} = 1.08949$$

El % de conversión total en la reacción es ± 83.21

Que corresponde entre un 17 y 20.24% de materias primas-que no reaccionan.

Con estas bases se calcula la cantidad de cada uno de -- los reactantes.

b.1. Cálculo de la cantidad de ácido acrílico.

$$\text{Relación molar del ácido acrílico} = 1.08949 \times 1.2024 = 1.31$$

$$\text{Peso molecular del ácido acrílico} = 72$$

$$\begin{aligned} \text{Cantidad de ácido acrílico necesario} &= 1.31 \times 2 \times 72 && = 188.64 \text{ grs} \\ &188.64 \times 1000 && = 188.64 \text{ Kg} \end{aligned}$$

b.2 Cálculo de la cantidad de sulfuro de sodio.

Se agrega un exceso del 35%.

$$\text{Relación molar} = 1.31 \times 1.35 = 1.7685$$

$$\text{Peso molecular} = 240$$

$$\begin{aligned} \text{Cantidad de sulfuro de sodio} &= 1.7685 \times 240 = 424.44 \text{ grs} \\ &= 424.44 \times 1000 = 424.44 \text{ Kg} \end{aligned}$$

b.3 Cálculo de la cantidad de ácido sulfúrico

$$\text{Peso molecular del ácido sulfúrico} = 98$$

$$\begin{aligned} \text{Cantidad de ácido sulfúrico necesario} &= 1.7685 \times 98 = 173.313 \text{ grs} \\ &= 173.313 \times 1000 = 173.3 \text{ Kg} \end{aligned}$$

b.4 Cálculo de la cantidad de ácido tio-dipropiónico.

$$\text{Peso molecular del ácido tio-dipropiónico} = 178$$

Cantidad teórica de ácido tio-dipropiónico.

$$1.31 \times 178 = 233.18 \text{ grs} \times 1000 = 233.18 \text{ Kg}$$

En la reacción se obtiene un rendimiento respecto al teórico del 89%.

$$233.18 \times 0.89 = 207.530 \text{ Kg}$$

b.5 Cálculo de la cantidad de alcohol láurico.

$$\text{Relación molar} = 207.530/178 = 1.1659 \times 2 = 2.3318$$

$$\text{Peso molecular del alcohol láurico} = 186$$

$$\begin{aligned} \text{Cantidad de alcohol láurico necesario} &= 2.3318 \times 186 = 433.715 \text{ grs} \\ &= 433.715 \times 1000 = 433.7 \text{ Kg} \end{aligned}$$

b.6 Cálculo de la cantidad de tio-dipropionato de dilaurilo.

$$\text{Peso molecular del éster} = 514$$

$$\begin{aligned} \text{Cantidad teórica de DLTP} &= 1.1659 \times 514 = 599.2726 \text{ grs} \\ &= 599.2726 \times 1000 = 599.2726 \text{ Kg} \end{aligned}$$

Se obtiene un rendimiento respecto al teórico de 93.5%.

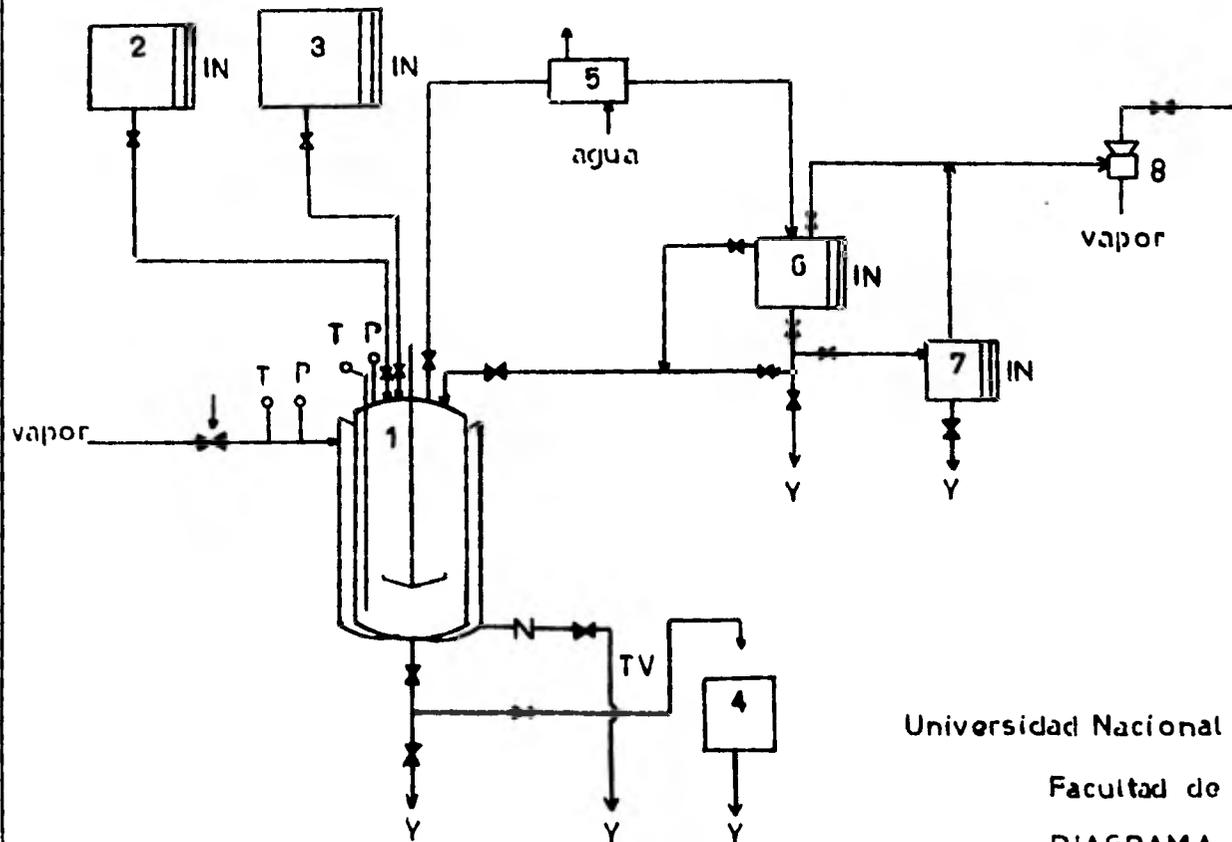
$$599.272 \times 0.935 = 560.319 \text{ Kgs.}$$

Materias primas necesarias para obtener 560 Kg de DLTPD.

Acido acrílico.....	188.640	Kg
Sulfuro de sodio ($\text{Na}_2\text{S}\cdot 9\text{H}_2\text{O}$)	424.440	"
Acido sulfúrico 98%	173.313	"
Alcohol láurico	433.715	"
Solvente (no polar).....	360.000	Litros

c).- Temperaturas y presiones.

El proceso de síntesis se desarrolla con temperaturas - de 90-105°C y presión atmosférica.



Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Química

DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO

Escala 1:50

Nemesio Hernández Valdivia

DESIGNACIONES DEL EQUIPO.

- 1 Reactor con agitación y chaqueta
- 2 Tanque dosificador para ácido sulfúrico
- 3 Tanque dosificador para ácido acrílico
- 4 Centrífuga
- 5 Condensador
- 6 Tanque de recirculación
- 7 Tanque colector
- 8 Bomba de vacío ó eyector.

INSTRUMENTOS DE MEDICION.

Símbolo	Instrumento
P	Manómetro
T	Termómetro
IN	Indicador de nivel.

SIMBOLOS DE VALVULAS

Símbolo	Tipo de válvula
	Válvula de retención
	Válvula de compuerta
	Válvula de globo
	Válvula de aguja
TV	Trampa de vapor

6.3. EQUIPO NECESARIO.

Equipo que se necesita para el proceso:

- 1.- Reactor vidriado provisto de agitador y chaqueta.
- 2.- Tanque dosificador en acero inoxidable 316 para ácido sulfúrico.
- 3.- Tanque dosificador en acero inoxidable 316 para ácido acrílico.
- 4.- Tanque para recirculación en acero inoxidable 316.
- 5.- Condensador horizontal 1-2.
- 6.- Bomba de vacío ó eyector.
- 7.- Centrífuga en acero inoxidable.

6.4. DIMENSIONAMIENTO DEL EQUIPO.

6.4.1. Cálculo de las Dimensiones del Reactor.

El reactor deberá ser vidriado de forma cilíndrica con fondo y tapa toriesférica.

Capacidad mínima necesaria del reactor.

La capacidad mínima se calcula de la siguiente manera:

$$\text{Acido acrílico} = \frac{188.640}{1.060} = 178.000 \text{ Litros}$$

$$\text{Agua de dilución para el acrílico} = 178.000 \quad "$$

$$\text{Acido sulfúrico} = \frac{173.313}{1.83} = 94.706 \quad "$$

$$\text{Agua de dilución para el sulfúrico} = 94.706 \quad "$$

$$\text{Sulfuro de sodio} = \frac{424.44}{1.165} = 364.326 \text{ Litros}$$

$$\text{Agua que se agrega al reactor después de la reacción} \dots\dots\dots = 150.000 \text{ Litros}$$

$$\text{CARGA TOTAL} \dots\dots\dots = 1\ 060.500 \quad "$$

Dando un espacio libre al reactor para espumas y agitación del 20%.

$$1.060.500 \times 1.20 = 1\ 272.600 \text{ litros.}$$

$$\begin{aligned} \text{Capacidad del reactor} &= 1\ 272.600 \text{ litros} \\ &= 1.2726 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

Fórmula para calcular el volumen y espesor del reactor.

Volumen del reactor.

$$V_R = \frac{\pi D^2 h}{4} + \frac{\pi D^3}{12} \dots\dots\dots (1)$$

Espesor del reactor.

$$t = \frac{P D}{f E - 0.6 P} \dots\dots\dots (2)$$

Donde:

V_R = Volumen del reactor.

t = Espesor, plg. .

P = Presión de diseño, lb/plg².

D = Diámetro interno del reactor, plg.

f = Máxima tensión admisible del material, lb/plg²

E = Eficiencia de la junta, %

Cálculo del diámetro del reactor y su espesor.

Cálculo del diámetro del reactor.

Sustituyendo el valor del volumen mínimo necesario en la fórmula (1) tenemos:

$$V_R = 1.2726 \text{ m}^3.$$

$$\frac{\pi D^2 h}{4} + \frac{\pi D^3}{12} = 1.2726$$

De acuerdo a las casas constructoras, $h = 2D$. ($h =$ altura).

Para que el cuerpo del reactor esté más en contacto con el calor.

Substituyendo la altura (h) en la fórmula (I) por $2D$ tenemos:

$$\frac{\pi D^2 2D}{4} + \frac{\pi D^3}{12} = 1.2726$$

Substituyendo en la fórmula anterior el valor de π

$$\frac{3.1416 D^2 2D}{4} + \frac{3.1416 D^3}{12} = 1.2726$$

$$\frac{18.8496 D^3}{12} + \frac{3.1416 D^3}{12} = 1.2726$$

Despejando el diámetro tenemos:

$$D^3 = \frac{1.2726 \times 12}{21.9912}$$

$$D^3 = 0.6944$$

$$D = 0.886$$

Diámetro del reactor = 0.886 metros.

Altura del reactor = $2D = 1.772$ metros.

Cálculo del espesor del reactor.

Datos:

$D = 0.886$ mts = 34.88 plg.

$f = 12,650$ lb/plg²; acero al carbón (A-283 C).

$P = 10$ atm. = 10.33 Kg/cm² = 146.892 lb/plg²,

Presión de operación = 1 atm = 1.033 Kg/cm²

$E = 85\%$

$$t = \frac{146.892 \times 34.88}{12,650 \times 0.85 - 0.6 \times 146.892}$$

$t = 0.480$ plg.

= 1.223 cm.

Cálculo del espesor de la tapa del reactor.

Fórmula para calcular el espesor de tapas toriesféricas³⁰.

$$t = \frac{P L M}{2SE - 0.2P}$$

Donde:

t = espesor, plg.

P = presión de diseño, lb/plg².

L = radio de la corona para tapas toriesféricas, plg.

M = factor para tapas toriesféricas, L/r.

S = máxima tensión admisible del material, lb/plg².

E = eficiencia de la junta, %

Datos:

$$D = 35 \text{ plg.}$$

$$L = 35 \text{ "}$$

$$r = 3.5 \text{ "}$$

$$P = 146.89 \text{ lb/plg}^2.$$

$$S = 12650 \text{ lb/plg}^2 \text{ (A-283 C) De la tabla UCS-23.}$$

Código ASME, Sección VIII.
Vasijas a presión.

$$E = 1.0, \text{ tapa sin costura.}$$

$$L/r = \frac{35}{3.5} = 10 \text{ y de la tabla UA-4.2, Código ASME.}$$

Sección VIII.
Vasijas a presión.

$$M = 1.54$$

$$t = \frac{146.89 \times 35 \times 1.54}{2 \times 12650 \times 1.0 - 0.2 \times 146.89}$$

$$t = 0.316 \text{ plg.}$$

Para comprobar el valor del espesor de la tapa, se hace el cálculo de la presión máxima de trabajo admisible.

Fórmula para calcular la presión de tapas toriesféricas³⁰.

$$P = \frac{2 S E t}{L M + 0.2 t}$$

$$P = \frac{2 \times 12650 \times 1.0 \times 0.316}{35 \times 1.54 + 0.2 \times 0.316}$$

$$P = 148.153 \text{ lb/plg}^2.$$

Espesores definitivos para el reactor.

El espesor para el envolvente ; $t = 1/2$ plg.

El espesor para la tapa; $t = 1/2$ plg.

El espesor para el fondo; $t = 1/2$ plg.

El reactor tendrá un espesor definitivo de $1/2$ plg.

Soportes del reactor.

En la selección del tipo de soportes para un reactor a presión, se deben tomar en cuenta varios factores.

- a).- Disponibilidad del suelo donde se desea instalar.
- b).- Localización del reactor conforme a variables de operación.
- c).- Tamaño del reactor.
- d).- Materiales de construcción.

En nuestro caso se tiene un reactor vidriado con capacidad de 1 500 litros, con un diámetro de 35 plg. y una altura de 70 plg.

Para este reactor se pueden usar soportes de cuatro tirones (agarraderas) con platos horizontales firmes.

6.4.2. CALCULO DE LAS DIMENSIONES DE LOS TANQUES DE ALMACENAMIENTO.

Se necesitan tanques de almacenamiento para:

- a).- Acido acrílico
- b).- Acido sulfúrico
- c).- Ciclohexano.

Bases para el cálculo de las dimensiones de los tanques.

$$\text{Area superficial} = \pi D h + \frac{2 \pi D^2}{4} \dots\dots\dots (3)$$

área del cilindro * área de las tapas

$$\text{Volumen del tanque}^1 = \frac{\pi D^2}{4} \times h \dots\dots\dots (4)$$

Despejando la altura (h) de la fórmula (4) .tenemos:

$$\text{Altura} = h = \frac{4 V}{\pi D^2} \dots\dots\dots (5)$$

Fórmula para calcular el diámetro del tanque.

$$\text{Diámetro} = h = \sqrt[3]{\frac{4 V}{\pi}} \dots\dots\dots (6)$$

Fórmula para calcular el espesor de los tanques.

$$t = \frac{P D}{2SE-P} + C \dots\dots\dots (7)$$

Fórmula para calcular la presión total ejercida por el líquido.

$$P = P_0 + \rho h' \dots\dots\dots (8)$$

Donde:

t = espesor, plg.

P = presión total ejercida por el líquido, lb/plg².

P₀ = presión atmosférica (0.79 Kg/cm²)

- h' = altura del líquido, cm.
 ρ = densidad del líquido, Kg/m³.
 D = diámetro interno, plg.
 S = esfuerzo permisible del material, lb/plg².
 E = eficiencia de la junta, %.
 C = tolerancia debida a la corrosión, plg.

a).- Dimensiones del tanque de almacenamiento para ácido acrílico.

Acido acrílico / carga = 178.000 litros

Acido acrílico necesario para 15 días.

$$\begin{aligned}
 178.0 \times 1.2 \times 15 &= 3\ 204 \text{ litros} \\
 &= 3.204 \text{ m}^3.
 \end{aligned}$$

Volumen necesario para el tanque = 3.204 m³.

Cálculo de la altura del tanque.

$$\text{Altura} = \sqrt[3]{\frac{4 \times 3.204}{3.1416}} = 1.5978$$

$$\begin{aligned}
 \text{Altura del tanque} &= 1.5978 \text{ m.} \\
 &= 62.905 \text{ plg.}
 \end{aligned}$$

$$\text{Altura del líquido} = h' = \sqrt[3]{\frac{4 \times 2.670}{3.1416}} = 1.5036$$

Altura del líquido = 1.5036 m.

Presión total ejercida por el líquido.

$$\begin{aligned}
 P &= 0.79 + 0.001060 \times 150.36 = 0.9493 \text{ Kg/cm}^2 \\
 &= 13.500 \text{ Lb/plg}^2.
 \end{aligned}$$

Cálculo del espesor del tanque.

$$t = \frac{13.500 \times 62.905}{2 \times 18.750 \times 0.80 - 13.500} + 0.125$$

$$t = 0.1533 \text{ plg.}$$

$$= 0.389 \text{ cm.}$$

b).- Dimensiones del tanque de almacenamiento para ácido sulfúrico.

$$\text{Acido sulfúrico/carga} = 95.523 \text{ litros}$$

Acido sulfúrico necesario para 15 días.

$$95.523 \times 1.20 \times 15 = 1.719.5 \text{ litros.}$$

$$= 1.720 \text{ m}^3$$

$$\text{Volumen necesario} = 1.720 \text{ m}^3.$$

Cálculo de la altura del tanque.

$$\text{Altura} = \text{diámetro} = \sqrt[3]{\frac{4 \times 1.720}{3.1416}} = 1.2986$$

$$\text{Altura del tanque} = 1.2986 \text{ m.}$$

$$= 51.125 \text{ plg.}$$

$$\text{Altura del líquido} = h = \sqrt[3]{\frac{4 \times 1.4328}{3.1416}} = 1.2218$$

$$\text{Altura del líquido} = 1.2218 \text{ m.}$$

Presión total ejercida por el líquido.

$$P = 0.79 + 0.00183 \times 122.18 = 1.0136 \text{ Kg/cm}^2$$

$$= 14.413 \text{ Lb/plg}^2$$

Cálculo del espesor del tanque.

$$t = \frac{14.413 \times 51.125}{2 \times 18750 \times 0.80 - 14.413} + 0.125$$

$$t = 0.1495 \text{ plg.}$$

$$= 0.378 \text{ cm.}$$

c).- Dimensiones del tanque de almacenamiento para ciclohexano.

Ciclohexano/carga = 360 litros

Ciclohexano necesario para 15 días.

$$\begin{aligned} 360 \times 1.20 \times 15 &= 6,480 \text{ litros.} \\ &= 6,480 \text{ m}^3. \end{aligned}$$

Cálculo de la altura del tanque.

$$\text{Altura del tanque} = \text{diámetro} = \sqrt[3]{\frac{4 \times 6.480}{3.1416}} = 2.0206$$

$$\begin{aligned} \text{Altura del tanque} &= 2.0206 \text{ m.} \\ &= 79.55 \text{ plg.} \end{aligned}$$

$$\text{Altura del líquido} = h' = \sqrt[3]{\frac{4 \times 5.400}{3.1416}} = 1.9015$$

$$\text{Altura del líquido} = 1.9015 \text{ m.}$$

Presión total ejercida por el líquido.

$$\begin{aligned} P &= 0.79 + 0.000779 \times 190.15 = 0.9381 \text{ Kg/cm}^2. \\ &= 13.339 \text{ lb/plg}^2. \end{aligned}$$

Cálculo del espesor del tanque.

$$t = \frac{13.339 \times 79.55}{2 \times 12\,650 \times 0.80 - 13.339} + 0.125$$

$$t = 0.1774 \text{ plg.}$$

$$= 0.4507 \text{ cm.}$$

6.4.3. CALCULO DE LAS DIMENSIONES DE LOS TANQUES DOSIFICADORES.

Se necesitan dos tanques dosificadores en el proceso:

Tanque dosificador para el ácido acrílico.

Tanque dosificador para el ácido sulfúrico.

Dimensiones del tanque dosificador para ácido acrílico.

Acido acrílico/carga = 178.0 litros.

Agua de dilución = 178.0 litros.

Volumen necesario = 356.0 litros.

Dando una tolerancia al volumen del tanque del 20%.

$$356.0 \times 1.20 = 427.200 \text{ litros.}$$

$$\text{Capacidad necesaria} = 0.4272 \text{ m}^3.$$

Cálculo de la altura del tanque

$$\text{Altura} = D = \sqrt[3]{\frac{4 \times 0.4272}{3.1416}} = 0.8163$$

Altura del tanque = 0.8163 mt

= 32.137 plg.

$$\text{Altura del líquido} = h' = \sqrt[3]{\frac{4 \times 0.356}{3.1416}} = 0.7681$$

$$h' = 0.7681 \text{ m.}$$

Presión total ejercida por el líquido.

$$P = 0.79 + 0.001029 \times 76.81 = 0.8690 \text{ Kg/cm}^2$$

$$= 12.36 \text{ lb/plg}^2.$$

Cálculo del espesor del tanque.

$$t = \frac{12.36 \times 32.137}{2 \times 18\,750 \times 0.80 - 12.36} + 0.125$$

$$t = 0.1382 \text{ plg.}$$

$$= 0.3510 \text{ cm.}$$

Dimensiones del tanque dosificador para el ácido sulfúrico.

Acido sulfúrico/carga = 95.0 litros.

Agua de dilución = 95.0 litros.

Volumen = 190.0 litros.

Dando una tolerancia a la capacidad del tanque del 20%.

$$190 \times 1.20 = 228 \text{ litros.}$$

$$\text{Capacidad necesaria} = 0.228 \text{ m}^3.$$

Cálculo de la altura del tanque.

$$\text{Altura} = D = \sqrt[3]{\frac{4 \times 0.228}{3.1416}} = 0.6621$$

$$\text{Altura del tanque} = 0.6621 \text{ m}$$

$$= 26.066 \text{ plg.}$$

$$\text{Altura del líquido} = h' = \sqrt[3]{\frac{4 \times 0.190}{3.1416}} = 0.623$$

$$\text{Altura del líquido} = 0.623 \text{ m}$$

Presión total ejercida por el líquido.

$$\begin{aligned} P &= 0.79 + 0.001391 \times 0.623 = 0.7908 \text{ Kg/cm}^2 \\ &= 11.245 \text{ Lb/plg}^2. \end{aligned}$$

Cálculo del espesor del tanque.

$$t = \frac{11.245 \times 26.066}{2 \times 18\,750 \times 0.80 - 11.245} + 0.125$$

$$t = 0.1347 \text{ plg.}$$

$$= 0.3423 \text{ cm.}$$

6.4.4. CALCULO DE LAS DIMENSIONES DEL TANQUE DE RECIRCULACION.

Cantidad de ciclohexano/carga = 360 litros.

Se carga al reactor el 75% del ciclohexano (270 litros).

Se carga al tanque de recirculación el 25% (90 litros).

Cálculo del agua que se obtiene de la reacción.

Peso del ácido tio-dipropiónico por esterificar = 207.530 Kg

$$\text{Relación molar} = \frac{207.530}{178} = 1.1658$$

$$\text{Agua de reacción} = 1.1658 \times 2 \times 18 = 41.97$$

$$\text{Agua de reacción} = 41.97 \text{ litros.}$$

Capacidad del tanque.

Agua de reacción	=	42.0	litros.
Ciclohexano	=	90.0	"
Total	=	132.0	"

Dando una tolerancia del 20%.

$$132.0 \times 1.20 = 158.4 \text{ litros.}$$

Capacidad del tanque	=	158.4	litros.
	=	0.1584	m ³ .

Cálculo de la altura del tanque

$$\text{Altura} = D = \sqrt[3]{\frac{4 \times 0.1584}{3.1416}} = 0.5864$$

$$\begin{aligned} \text{Altura del tanque} &= 0.5864 \text{ m} \\ &= 23.099 \text{ plg.} \end{aligned}$$

$$\text{Altura del líquido} = h' = \sqrt[3]{\frac{4 \times 0.132}{3.1416}} = 0.5518$$

$$\text{Altura del líquido} = 0.5518 \text{ m.}$$

Presión total ejercida por el líquido.

$$\begin{aligned} P &= 0.79 + 0.000779 \times 55.18 = 0.8329 \text{ Kg/cm}^2 \\ &= 11.8438 \text{ Lb/plg}^2. \end{aligned}$$

Cálculo del espesor del tanque.

$$t = \frac{11.844 \times 23.099}{2 \times 18\,750 \times 0.80 - 11.844} + 0.125 = 0.134$$

$$\begin{aligned} t &= 0.134 \text{ plg.} \\ &= 0.340 \text{ cm.} \end{aligned}$$

6.4.5. CÁLCULO DE LA POTENCIA DE LAS BOMBAS.

Fórmula para calcular la potencia de las bombas.

$$PB = \frac{0.02894 W^3}{D^5 \rho^2} + \frac{1.98 W^{2.54} \mu^{0.42}}{D^{4.58} \rho^2}$$

Donde:

- PB = potencia de la bomba.
 W = gasto, Kg/seg. ; lts/hr.
 ρ = densidad, Kg/lt. ; Kg/m³.
 μ = viscosidad, cps.
 D = diámetro de la tubería, plg.

Cálculo de la potencia de la bomba para mover ácido acrílico.

Datos:

- μ 20°C = 1.2 centipoises = 0.0012 Kg/m.seg.
 ρ 20°C = 1.060 Kg/lt. = 1 060 Kg/m³.
 D = 1.0 plg. = 0.0254 m.
 W = 0.500 Kg/seg. = 1 698 lts/hr.

$$PB = \frac{0.02894 \times 0.500^3}{(0.0254)^5 (1\ 060)^2} + \frac{1.98 (0.500)^{2.54} (0.0012)^{0.42}}{(0.0254)^{4.58} (1\ 060)^2}$$

$$PB = 0.668 \text{ HP}$$

Cálculo de la potencia de la bomba para mover ácido sulfúrico.

Datos:

$$\mu_{20^{\circ}\text{C}} = 26 \text{ centipoises} = 0.026 \text{ Kg/m. seg.}$$

$$\rho_{20^{\circ}\text{C}} = 1.84 \text{ Kg/lt.} = 1\,840 \text{ Kg/m}^3.$$

$$D = 1.0 \text{ Plg.} = 0.0254 \text{ m}$$

$$W = 0.600 \text{ Kg/seg.} = 1\,173.9 \text{ litros/hr.}$$

$$PB = \frac{0.02894 W^3}{D^5 \rho^2} + \frac{1.98 W^{2.54} \mu^{0.42}}{D^{4.58} \rho^2}$$

$$PB = \frac{0.02894 (0.600)^3}{(0.0254)^5 (1\,840)^2} + \frac{1.98 (0.600)^{2.54} (0.026)^{0.42}}{(0.0254)^{4.58} (1\,840)^2}$$

$$PB = 0.872 \text{ HP.}$$

Cálculo de la potencia de la bomba para mover ciclohexano.

Datos:

$$\mu_{20^{\circ}\text{C}} = 1.02 \text{ centipoises} = 0.00102 \text{ Kg/m. seg.}$$

$$\rho_{20^{\circ}\text{C}} = 0.779 \text{ Kg/lt.} = 779 \text{ Kg/m}^3.$$

$$D = 0.0254 \text{ m}$$

$$W = 0.550 \text{ Kg/seg.} = 2\,478 \text{ litros/hr.}$$

$$PB = \frac{0.02894 (0.550)^3}{(0.0254)^5 (779)^2} + \frac{1.98 (0.550)^{2.54} (0.00102)^{0.42}}{(0.0254)^{4.58} (779)^2}$$

$$PB = 1.47 \text{ HP.}$$

6.4.6. CALCULO DEL CONDENSADOR PARA EL CICLOHEXANO.

Se usará un condensador horizontal 1-2 para condensar 3,000 lb/hr. de ciclohexano que proviene del reactor que opera a 14.9 lb/plg. g, a cuya presión hierve a 204.8 °F. Usando agua de enfriamiento de 82.5°F. Con un factor de obstrucción de 0.003 y una caída de presión permitida de 1.0 lb/plg² para el vapor y de 5.0 lb/plg² para el agua.

Suponiendo que se usan tubos de 1.75 pies de largo, tubos de 3/4 plg D.E, 16 BWG, arreglados en triángulo de 15/16 plg.

1.- Balance de calor.

Ciclohexano.

$$Q = W\lambda \dots\dots\dots(1)$$

Donde: Q = Flujo de calor, Btu/hr.

λ = Calor latente de condensación, Btu/lb.

W = Peso de flujo del fluido caliente, lb/hr.

Datos: λ = 165 Btu/lb.

W = 3,000 Lb/hr.

Q = 3,000 Lb/hr x 165 Btu/hr.

Q = 495,000 Btu/hr.

Cantidad de agua requerida: (w), lb/hr.

$$Q_c = W_{H_2O} (H_b - H_a) \dots\dots\dots (2)$$

$$W_{H_2O} = Q_c / (H_b - H_a) \dots\dots\dots (3)$$

Donde: Q_c = Carga de calor al condensador, Btu/hr.

H_a = Entalpia del agua a la temperatura de entrada,
Btu/lb.

H_b = Entalpia del agua a la temperatura de salida,
Btu/lb.

Datos: $H_a = 50.5$ Btu/lb (a 82.5°F)

$H_b = 73.0$ Btu/lb (a 105°F)

$W_{H_2O} = 495,000$ Btu/hr / (73.0 Btu/lb - 50.5 Btu/lb)

$W_{H_2O} = 22,000$ lb/hr.

Agua. ; $Q = w c (t_1 - t_2)$

Donde: w = Peso del fluido frio, lb/hr.

c = Calor específico del fluido frío, Btu/(lb)($^\circ\text{F}$)

t_1 = Temperatura de salida del fluido frio, $^\circ\text{F}$.

t_2 = Temperatura de entrada del fluido frio, $^\circ\text{F}$.

$Q = 22,000$ lb/hr. x 1 Btu/(lb) ($^\circ\text{F}$) x ($105.0^\circ\text{F} - 82.5^\circ\text{F}$)

$Q = 495,000$ Btu/hr.

2.- Diferencia verdadera de temperatura.

Fluido caliente		Fluido frio	
204.8	Alta Temp.	105.0	99.8
204.8	Baja Temp.	82.5	122.3
0.0	Diferencia.	22.5	22.5

$$t = \text{MLDT} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{2.3 \log. (T_1 - t_2) / (T_2 - t_1)}$$

$$t = \frac{99.8 - 122.3}{2.3 \log. 99.8/122.3} = 110.83 \text{ } ^\circ\text{F.}$$

$$t = 110.83 \text{ } ^\circ\text{F}$$

3.- Coeficiente de transferencia de calor de diseno (U_D).

Suponiendo $U_D = 80 \text{ Btu}/(\text{hr})(^\circ\text{F})$

a).- Clculo de la superficie de transferencia de calor.

$$A = \frac{Q}{U_D \Delta t} = \frac{495,000}{80 \times 110.83} = 55.8287$$

$$A = 55.8287 \text{ pies}^2.$$

b).- Clculo del nmero de tubos.

No. de tubos = (Area de transmisin)/(Area de transferencia/tubo) x (Longitud /tubo).

$$\text{Area de transmisin} = 55.8287 \text{ pie}^2$$

$$\text{Area de transferencia} = 0.0598 \text{ m}^2/\text{m} = 0.1963 \text{ pie}^2/\text{pie.}$$

$$\text{Longitud de tubo} = 1.75 \text{ pie.}$$

$$\text{Nmero de tubos} = \frac{55.8287}{1.75 \times 0.1963} = 162.51$$

$$\text{Nmero de tubos} = 162.51$$

De la tabla # 9 y 10 del Kern, para una cantidad de 162.5 - tubos, 2 pasos, 3/4 D.E en arreglo triangular de 15/16, la-

cantidad más cercana es de 160 tubos, que corresponde a una coraza de 15 1/4 plg. D.I.

c).-Coeficiente de transferencia de calor corregido (U_D).

$$A = 160 \times 1.75 \times 0.1963 = 54.964 \text{ pie.}$$

$$U_D = \frac{Q}{A \times \Delta t} = \frac{495,000}{54.964 \times 110.83} = 81.258$$

$$U_D = 81.258 \text{ Btu/(hr) (}^\circ\text{F)}.$$

Fluido frio: tubos, agua.

4).- Area de flujo por tubo, a_t

De tabla # 10 (Kern)

$$a_t = 0.032 \text{ plg}^2$$

$$a_t = \frac{N_t a_t}{144 n} = \frac{160 \times 0.032}{144 \times 2}$$

$$a_t = 0.1677 \text{ pie lineal.}$$

5).- Masa velocidad, G_t .

$$G_t = \frac{W}{a_t}$$

$$G_t = \frac{22,000}{0.1677} = 131,186$$

$$G_t = 131,186 \text{ Lb/(hr)(pie)}^2$$

Velocidad, V

$$V = \frac{G_t}{3,600 \phi}$$

Fluido caliente: coraza, ciclohexano

4).- Espaciado de los deflectores.

7,7 y 7 plg igual a 21 plg.

ó 2 deflectores y 3 cruces para flujo de lado a lado.

$$a_s = \frac{ID \times C^{\prime} B.}{144 P_T}$$

C^{\prime} = espaciado entre los tubos, plg.

B = espaciado de los deflectores.

$$a_s = \frac{15.25 \times 0.1875 \times 7}{144 \times 0.937} = 0.1483$$

$$a_s = 0.1483 \text{ pie}^2$$

5).- Masa velocidad, G_s .

$$G_s = \frac{W}{a_s} = \frac{3,000}{0.3126}$$

$$G_s = 9,596.9 \text{ Lb/(hr)(pie)}^2$$

Fluido frío: tubos, agua.

$$V = \frac{131,196}{3,600 \times 62.5}$$

$$V = 0.5830 \text{ pps.}$$

6).- Para $t_a = 102.5 \text{ }^\circ\text{F}$

Viscosidad, μ

$$\mu = 0.55 \text{ cps} \times 2.42$$

$$\mu = 1.331 \text{ lb(pie)(hr)}$$

7.- Diámetro interior del tubo, D.

$$D = 0.62/12 = 0.0517$$

$$D = 0.0517 \text{ pie.}$$

Tabla # 10 (Kern).

8.- Número de Reynolds, Re_t .

$$Re_t = \frac{D G_t}{\mu}$$

(Para caída de presión solamente).

$$Re_t = \frac{0.0517 \times 131,186}{1.331}$$

$$Re_t = 5,096.$$

9.- Cálculo de h_i cuando se refiere al diámetro interior, h_{i0} .

De la fig. # 25 (Kern) se obtiene el valor de $h_i = 340 \text{ Btu/(hr)(pie}^2\text{)(}^\circ\text{F)}$.

Fluido caliente: coraza, ciclohexano

$G_B =$ (Para caída de presión solamente).

6).- Carga de condensados para tubos horizontales, G'' .

$$G'' = \frac{W}{L N_t^{2/3}} = \frac{3,000}{1.75 \times 160^{2/3}}$$

$$G'' = 58.363 \text{ (lb)/(hr)(pie lineal)}.$$

7).- Suponiendo el valor promedio del coeficiente de película condensante entre dos puntos, \bar{h} .

$$\bar{h} = 150 \text{ Btu/(hr)(pie}^2\text{)(}^\circ\text{F)}$$

$$\bar{h} = h_o$$

8).- Cálculo de la temperatura de la pared del tubo, t_w .

$$t_w = \text{ }^\circ\text{F}$$

$$t_w = t_a + \frac{h_o}{h_{i0} + h_o} (T_v - t_a)$$

$$t_w = 102.5 + \frac{150}{281 + 150} (204.8 - 102.5)$$

$$t_w = 138.0 \text{ }^\circ\text{F}$$

9).- Temperatura de la película, t_f .

$$a).- t_f = \frac{T_v + t_w}{2} = \frac{204.8 + 138}{2}$$

$$t_f = 171.45 \text{ }^\circ\text{F}$$

Fluido frío: tubos, agua.

$$h_{io} = \frac{h_i \times ID}{OD}$$

$$h_{io} = \frac{340 \times 0.62}{0.75}$$

$$h_{io} = 281.06 \text{ Btu}/(\text{hr})(\text{pie}^2)(^\circ\text{F})$$

Fluido caliente: coraza, ciclohexano.

b).- Conductividad térmica.

$$K_f = 0.092 \text{ Btu}/(\text{hr})(\text{pie}^2)(^\circ\text{F}/\text{pie}).$$

c).- Gravedad específica.

$$s_f = 0.78$$

d).- Cálculo de \bar{h} .

Se puede obtener el valor por medio de la ecuación:

$$\bar{h} \times \left(\frac{\mu_f^2}{K_f^3 \rho_f^2 g} \right)^{1/3} = 1.5 \left(\frac{4 G''}{\mu_f} \right)^{-1/3}$$

Se puede sacar el valor de la gráfica # 12.9 (Kern)

$$\bar{h} = 185 \text{ Btu}/(\text{hr})(\text{pie}^2)(^\circ\text{F})$$

CAIDA DE PRESION

10).-

I.- Número de Reynolds en los tubos. 1).- A $T_v = 204.8^\circ\text{F}$

$$Re_t = 5,096$$

Factor de fricción:

De la fig. # 26 (Kern)

$$f = 0.00034 \text{ pie}^2/\text{plg}^2.$$

II.- Caída de presión en los tubos.

a).- Viscosidad del vapor

$$\mu_v = 0.0085 \text{ cps. De tabla # 15 (Kern)}$$

$$\mu_v = 0.0085 \times 2.42 = 0.020$$

$$\mu_v = 0.020 \text{ lb}/(\text{pie})(\text{hr}).$$

Fluido frío: tubos, agua.

$$\Delta P_t = \frac{f G_t^2 L n}{5.22 \times 10^{10} D s \phi_t}$$

$$\phi_t = (\mu/\mu_w)^{0.14}$$

$$\Delta P_t = \frac{0.0034 (131,186)^2 \times 1.75 \times 2}{5.22 \times 10^{10} \times 1.0 \times 1.0 \times 0.005}$$

$$\Delta P_t = 0.07846 \text{ Lb/plg.}^2$$

III.- Caída de presión de regreso.

$$\Delta P_r = \frac{4n}{s} \times \frac{v^2}{2g}$$

$$\Delta P_r = \left(\frac{4 \times 2}{1}\right) \left(\frac{(0.583)^2}{2 \times 32.2}\right)$$

IV.- Caída de presión total.

$$\Delta P_T = \Delta P_t + \Delta P_r$$

$$P_T = 0.0422 + 0.0784$$

$$P_T = 0.1202 \text{ lb/plg.}^2$$

Fluido caliente: coraza, ciclohexano.

b).- Diámetro equivalente para transf. de calor y caída de presión.

(D_e) se obtiene de la fig. # 28

(Kern) $d_e = 0.55 \text{ plg.}$

$$D_e = 0.55/12 = 0.0458 \text{ pie.}$$

c).- Número de Reynolds en la coraza.

$$Re_s = \frac{D_e \times G_s}{\mu} = \frac{0.0458 \times 9.597}{0.0205}$$

$$Re_s = 21,441$$

Factor de fricción, se obtiene de la fig. 29 (Kern)

$$f = 0.0018 \text{ pie}^2/\text{plg.}^2$$

II'.- Cálculo del número de cruces.

$$(N + 1) = 2 + 1 = 3$$

Peso molecular del ciclohexano = 84.16

$$\begin{aligned} \text{a).- Densidad } \rho &= \frac{84.16}{359(704/492)(14.7/29.7)} \\ &= 0.3310 \text{ lb/pie}^3. \end{aligned}$$

b).- Gravedad específica,

$$s = \frac{0.3310}{62.5} = 0.0053$$

$$s = 0.0053$$

Fluido frío: tubos, agua.

Fluido caliente: coraza, ciclohexano.

c).- Diámetro de la coraza.

$$D_s = 15.25 \text{ plg} = 15.25/12 = 1.27 \text{ pie.}$$

III'.- Caída de presión de la coraza.

$$\Delta P_s = 1/2 \frac{f G_s^2 D_s (N + 1)}{5.22 \times 10^{10} D_e s}$$

$$\Delta P_s = 1/2 \frac{0.0018(9.597)^2 (1.27)(3)}{5.22 \times 10^{10} \times 0.0458 \times 0.005}$$

$$\Delta P_s = 0.025 \text{ lb/plg}^2.$$

11.- Basándose en el valor de $\bar{h} = 185$ en lugar del valor de 150, no es necesario el cálculo del nuevo valor de t_w y t_f para lograr un valor más exacto de \bar{h} . No es necesario debido a que las propiedades del condensador no cambiarán de una forma radical.

12.- Coeficiente total limpio.

$$U_c = \frac{h_{io} h_o}{h_{io} + h_o} = \frac{281 \times 185}{281 + 185} = 111.6$$

$$U_c = 111.6 \text{ Btu}/(\text{hr})(\text{pie}^2)(^\circ\text{F}).$$

13.- Factor de obstrucción.

$$R_d = \frac{U_c - U_D}{U_c U_D} = \frac{111.6 - 81.258}{(111.6)(81.258)} = 0.00334$$

$$R_d = 0.00334 \text{ (hr)(pie}^2\text{)(}^\circ\text{F)/Btu.}$$

SUMARIO

1.-	Coeficiente de transferencia de calor en general (exterior); h.		
	$h = \text{Btu}/(\text{hr})(\text{pie}^2)(^\circ\text{F})\dots\dots\dots$	281	185
2.-	Coeficiente limpio de transferencia de calor; U_c .		
	$U_c = \text{Btu}/(\text{hr})(\text{pie}^2)(^\circ\text{F})\dots\dots\dots$		111.6
3.-	Coeficiente de transferencia de calor de diseño; U_D .		
	$U_D = \text{Btu}/(\text{hr})(\text{pie}^2)(^\circ\text{F})\dots\dots\dots$		81.258
4.-	Factor de obstrucción combinado calculado; $R_{d.c}$.		
	$R_{d.c} = (\text{hr})(\text{pie}^2)(^\circ\text{F)/Btu}\dots\dots\dots$		0.00334
5.-	Factor de obstrucción combinado requerido; $R_{d.r}$.		
	$R_{d.r} = (\text{hr})(\text{pie}^2)(^\circ\text{F)/Btu} \dots\dots\dots$		0.003
6.-	Caída de presión calculada; P		
	$P = \text{lb/plg}^2. \dots\dots\dots$	0.120	0.025
7.-	Caída de presión permitida.....	5.0	1.0

Tubos	Coraza
Número de tubos = 160; Longitud = 1.75 pie; Espaciado 15/16; en triángulo.	Diámetro interior = 15 1/4 plg. Espaciado de los deflact. = 7 plg.
Diámetro externo = 3/4 plg.; BWG = 16 BWG; Pasos = 2	Pasos = 1

CAPITULO 7

CONSIDERACIONES ECONOMICAS.

Se hace una estimación de la inversión ó capital que se necesita para la explotación de la planta y conocer la rentabilidad que nos demostrará la factibilidad de hacer esta inversión.

INVERSION TOTAL.- La inversión total comprende la inversión de instalación + la inversión de explotación.

INVERSION DE INSTALACION.- Comprende la inversión fija + la inversión secundaria.

INVERSION DE EXPLOTACION.- Se consideran 6 meses del costo de fabricación.

INVERSION DE INSTALACION.

a).- Inversión Fija.- En esta inversión tenemos el costo de adquisición del equipo, costo de instalación, costo del terreno donde se va a instalar el equipo, costo de edificios.

1.- Costo de adquisición del equipo.

Reactor vidriado de forma cilíndrica con fondo y tapa toriesférica con capacidad de 1,500 litros y provisto de agitador.....\$ 1 500 000.00

Tanque de almacenamiento para ácido sulfúrico con capacidad de 2,000 litros en acero inoxidable T-316..... \$ 78 500.00

Tanque de almacenamiento para ácido acrí

lico con capacidad de 3,500 litros en - acero inoxidable T-316.....	\$	145 600.00
Tanque de almacenamiento para ciclohexa- no con capacidad de 6,500 litros en ace- ro al carbón A-283-C	\$	54 800.00
Tanque dosificador para ácido acrílico - con capacidad de 500 litros en acero ino xidable T-316.....	\$	19 300.00
Tanque dosificador para ácido sulfúrico- con capacidad de 300 litros en acero ino xidable T-316.....	\$	17 300.00
Tanque de recirculación con capacidad de 200 litros en acero inoxidable T-316....	\$	15 500.00
Condensador de coraza en acero inoxida-- ble.....	\$	95,000.00
Centrífuga de diámetro de 60 cm. en ace- ro inoxidable	\$	50,000.00
Bomba de vacío.....	\$	65 000.00
Bomba para mover ácidos de 2.5 HP	\$	74 664.00
Bomba para mover ciclohexano de 2.0 HP..	\$	71 914.00
Costo de adquisición del equipo.....	\$	<u>2 187 578.00</u>

Para la instalación del equipo se considera un 40% del -

costo de adquisición del equipo.

2.- Costo de instalación.....	\$	875 031.20
3.- Costo del equipo instalado	\$	3 062 609.20
4.- Costo del terreno.- Adquiriendo una superficie de 4,000 m ² para la sección industrial y sección administrativa con un precio \$ 500.00/m ²	\$	2 000 000.00

5.- Costo de edificios.

Para la sección industrial se considera un costo por m² construido de \$1,900.00 y para la sección administrativa de -- \$ 2,300.00.

Sección industrial 30 x 30 x 1900 =	\$	1 710 000.00
Sección administrativa 15 x 10 x 2300 =	\$	345 000.00
Costo de edificios.	\$	2 055 000.00

Arreglo de terreno.- En esto se incluye banquetas, alumbrado, etc. Se considera un 5% del costo de adquisición del terreno.

Arreglo de terreno	\$	100 000.00
--------------------------	----	------------

Costo de tubería.- Se considera un 6% del costo del equipo ya instalado.

Costo de tubería	\$	183 756.50
------------------------	----	------------

Costo de instalación eléctrica.- Se considera el 15% del costo de adquisición del equipo principal, esto incluye transformadores y líneas de corriente.

Costo de instalación eléctrica.....	\$	328 136.00
-------------------------------------	----	------------

Costo de servicios.- Incluye vapor, electricidad, agua. Se considera un 40% del costo de adquisición del equipo.

Costo por servicio,..... \$ 875 031.00

Costos por aparatos de medición.- Se considera un 5% del equipo principal ya instalado.

Costos por aparatos de medición \$ 153 130.46

INVERSION FIJA \$ 8 757 662.50

b).- Inversión secundaria.- Incluye los gastos de ingeniería y desarrollo que se consideran en un 30% de la inversión fija; gastos del contratista que se consideran un 10%; y el margen de seguridad que se considera un 20%.

Inversión secundaria = 8 757 662 x 0.60 = \$ 5 254 597.20

Inversión fija \$ 8 757 662.50

Inversión secundaria \$ 5 254 597.20

INVERSION DE INSTALACION..... \$14 012 259.70

COSTO DE FABRICACION.- Incluye mano de obra, materias primas, refacciones y servicios, depreciación, costo de energía eléctrica.

a).- Mano de Obra.

Para fabricar 560 Kg/día es necesario 2 obreros y un supervisor por turno que cubrirán 250 días al año.

Se necesita trabajar 2 turnos/día.

Salario por obrero \$ 260.00/día.

Salario por supervisor.. \$ 500.00/día.

Al trabajador se le pagan 2 días de descanso por cada 5 días trabajados, lo que representa en un año 365 días pagados.

Salario de los obreros	365 x 4x260=	379 600.00
Salario de los supervisores	365 x 2x500=	365 000.00
Salario total.....		\$ 744 600.00
Prestaciones al trabajador (10% del salario).		
Prestaciones.....		\$ 74 460.00
Mano de obra.....		\$ 819 060.00

b).- Materias primas.

Se debe de producir 140 toneladas al año.

Materias primas necesarias.

Acido acrílico.....	47 160 Kg x 49.00/Kg =	\$ 2 310 840.00
Sulfuro de sodio.....	106 110 " x 17.00/Kg =	\$ 1 803 870.00
Acido sulfúrico 98%..	43 328 " x 3.90/Kg =	\$ 168 980.18
Alcohol láurico.....	108 428 " x 39.00/Kg =	\$ 4 228 692.00
Ciclohexano.....	90 000 Ltsx 17.00/Kg =	\$ 1 530 000.00
Precio de la materia prima		\$10 042 382.00

c).- Refacciones y servicios.- Se consideran en un 10% de la inversión fija.

Refacciones y servicios.....	\$ 875 766.00
------------------------------	---------------

d).- Costo de la energía eléctrica.- Considerando que se tiene en la planta 50 HP tendremos:

$$50 \text{ HP} \times \frac{0.746 \text{ Kw}}{\text{HP}} = 37.3 \text{ Kw}$$

$$37.3 \text{ Kw} \times \frac{2.40 \text{ \$}}{\text{Kwh}} \times \frac{6000 \text{ h}}{1 \text{ año}} = \$ 537 120$$

Costo de la energía	\$ 537 120/año
---------------------------	----------------

e).- Depreciación.- Se considera un 10% del costo del equipo -- instalado + un 5% del costo de la construcción.

Depreciación del equipo.....	\$	306 260.90
Depreciación de la construcción.....	\$	102 750.00
DEPRECIACION	\$	409 010.00
COSTO DE FABRICACION.....	\$	12 683 340.00
INVERSION DE EXPLOTACION.....	\$	6 341 670.00
INVERSION TOTAL. = Inversión de instalación + Inversión de explotación.		
INVERSION TOTAL. = 14 012 259 + 6 341 670 =	\$	20 353 929.00
INVERSION TOTAL.....	\$	20 353 929.00

Sobre la inversión total se considera que los intereses - que ésto causa son alrededor del 10%, por lo que la inversión - total real será:

INVERSION TOTAL REAL..... \$ 22 389 322.00

GASTOS ANUALES.

1.- Costo de fabricación.....	75%	\$ 12 683 340.00
2.- Los gastos de administración, gastos financieros y gastos de ventas; suman aproximadamente el 33% de los costos de fabricación.		
Gastos de administración. } Gastos financieros } Gastos de ventas. } 25%	\$ 4 185 502.00
Gastos anuales = 12 683 340.00 + 4 185 502.00 =	\$	16 868 842.00
GASTOS ANUALES.....	\$	16 868 842.00

VENTAS

Las ventas serán de 140 toneladas/año.

El precio del mercado de DLTDP es de \$ 280.00/kg

Ventas = 140 000 x 280 = 39 200 000.00

VENTAS..... \$39 200 000.00

UTILIDAD BRUTA.

Utilidad bruta = Ventas - Gastos anuales.

Utilidad bruta = 39 200 000 - 16 868 842 = \$22 331 158.00

UTILIDAD BRUTA..... \$22 331 158.00

UTILIDAD NETA.

Utilidad neta = Utilidad bruta - Impuestos.

Impuestos = Se consideran en un 43% de la
utilidad bruta.

Impuestos = 22 331 158 x 0.43 = 9 602 397.00

Utilidad neta = 22 331 158 - 9 602 397 = \$12 728 760.00

UTILIDAD NETA\$12 728 760.00

RENTABILIDAD SOBRE LA INVERSION.

La rentabilidad indica el beneficio que se obtiene por cada peso invertido.

$$\text{Rentabilidad} = \frac{\text{Utilidad neta} \times 100}{\text{inversión total}}$$

$$\text{Rentabilidad} = \frac{12\,728\,760 \times 100}{22\,389\,322} = 56.85\%$$

COSTO POR KILO.

$$\text{Costo por Kilo} = \frac{\text{Gastos anuales}}{\text{Producción anual}}$$

$$\text{Costo por Kilo} = \frac{16\ 868\ 842}{140\ 000} = 120.49$$

COSTO POR KILO.....\$ 120.49

AMORTIZACION.

Se calcula la amortización sobre la base de 10 años.

$$\text{Amortización} = \frac{\text{Inversión fija}}{\text{Número de años}}$$

$$\text{Amortización} = \frac{8\ 757\ 662}{10} = 875\ 766.25$$

AMORTIZACION\$ 875 766.25/año

PERIODO DE RECUPERACION.

Período de recuperación.- Es el tiempo que ha de transcurrir para recuperar la inversión.

$$\text{Período de recuperación} = \frac{\text{Inversión total}}{\text{Utilidad neta} + \text{Amortización}}$$

$$\text{Período de recuperación} = \frac{22\ 389\ 322}{13\ 604\ 526} = 1.645$$

PERIODO DE RECUPERACION..... 1.645 años.

VALOR PRESENTE NETO (VPN).

El cálculo del valor presente neto de proyectos es probablemente la técnica sofisticada de presupuesto de capital que se utiliza más comúnmente.

VPN = Valor presente de entradas en efectivo - Inversión neta.

El criterio para tomar decisiones cuando se utiliza el valor presente neto de "aceptación - rechazo" es: Si el $VPN \geq 0$, - aceptar el proyecto; de otra manera rechazar el proyecto.

Si el VPN es mayor o igual a cero, la empresa obtiene un - rendimiento igual o mayor que el rendimiento requerido o costo- de capital.

El costo de capital es la tasa de rendimiento que debe ob- tener una empresa sobre sus inversiones para que su valor en el mercado permanezca sin alteración.

CALCULO DEL VALOR PRESENTE NETO.

Valor presente neto = (Ingreso anual x Factor de anualidad^a) -
Inversión neta.

Valor presente de ingresos = (Ingreso anual x Factor de anuali-
dad^a).

Valor presente neto = Valor presente de ingresos - Inversión -
neta.

V.P. de ingresos = 12 728 760 x 6.145 = 78 218 230.

V.P. de ingresos \$ 78 218 230.00

VALOR PRESENTE NETO = 78 218 230 - 22 389 322 = \$ 55 828 908.00

VALOR PRESENTE NETO \$ 55 828 908.00

CALCULO DEL VALOR PRESENTE NETO CON UN COSTO DE CAPITAL DEL 10%.

Valor presente de entradas en efectivo =

Entradas a caja x Factor de V.P.^b.

El VPN se calcula en la siguiente tabla.

^a Dato que se obtiene de la tabla A-4 para 10 años y 10% (APENDICE)²⁹

TABLA 7.1. CALCULO DEL VALOR PRESENTE NETO.

Año	Entradas a caja (1)	Factor de V.P. ^b (2)	Valor presente de entra- das en efectivo. (1)x(2) (3)
1	\$ 15 313 880	0.909	\$ 13 919 408
2	13 340 064	0.826	11 018 893
3	13 340 064	0.751	10 018 388
4	13 340 064	0.683	9 111 263
5	13 340 064	0.621	8 284 179
6	13 340 064	0.564	7 523 796
7	12 704 823	0.513	6 517 574
8	9 528 617	0.467	4 449 864
9	9 528 617	0.424	4 040 133
10	8 639 200	0.386	3 334 731
			<u>3 334 731</u>
			\$ 78 218 229

VALOR PRESENTE NETO = 78 218 229 - 22 389 322 = 55 828 907

VALOR PRESENTE NETO = \$ 55 828 907

TASA INTERNA DE RENDIMIENTO (TIR)

La tasa interna de rendimiento o criterio de rentabilidad se cita muy frecuentemente como base para evaluar alternativas de inversión.

Se define como la tasa de descuento que hace que el valor presente de entradas de efectivo sea igual a la inversión neta relacionada con un proyecto.

Cuando se utiliza la TIR para tomar decisiones de "acepta-

^b Dato que se obtiene de la tabla A-3 para el año dado y 10%. (APENDICE)²⁹

ción-rechazo" el criterio es el siguiente: Si la TIR \geq costo de capital, aceptar el proyecto; de otra manera rechazar el proyecto.

Para que un proyecto sea aceptable, la TIR debe ser mayor o por lo menos igual al costo de capital o tasa de oportunidades de la empresa. Esto garantiza que la empresa gane más que el rendimiento requerido.

Cálculo de la TIR para una serie compuesta de flujo de caja.

Paso 1.- Sumando los flujos de caja del primero al décimo año da como resultado los flujos de caja totales de \$122 415 460 los cuales cuando se dividen entre el número de años en la vida del proyecto da como resultado una anualidad fingida de - - -- \$ 12 241 546.

Paso 2.- Dividiendo la erogación inicial de \$ 22 389 322 - entre la entrada de efectivos promedio anual a caja de - - - - \$12 241 546, se origina un período "fingido" o período de recuperación promedio de 1.82 años.

Paso 3.- En la tabla A-4^a el valor más cercano a 1.82 para 10 años es de 2.4 o sea el factor para una tasa de 40%.

El proyecto es aceptable ya que la TIR es mayor de 40%, y el costo de capital (10%) es menor que la TIR.

El proyecto es aceptable también, ya que su valor presente neto es mayor a cero.

CONCLUSIONES

Es importante mantener las condiciones de operación citadas anteriormente (temperaturas, concentración de reactivos), además controlar la calidad de las materias primas para evitar formación de reacciones secundarias que puedan repercutir en la calidad del producto y disminución del rendimiento del producto final.

Un aspecto importante en el diseño del equipo, es el de poder producir otros productos en las instalaciones, como plásticos u otros productos que durante su fabricación envuelvan reacciones de esterificación que puedan alcanzar las condiciones requeridas de operación sin hacer ningún cambio en el sistema.

De las materias primas que se necesitan para la elaboración del DLTDP, el sulfuro de sodio es de importación, el ácido acrílico lo fabricará Pemex en su planta de San Martín Texmelucan Puebla.

El alcohol láurico, ácido sulfúrico y ciclohexano son de fabricación nacional.

BIBLIOGRAFIA

- 1.- Process Equipment Design
Autor: Brownell- Young
Editorial: Wiley & Sons, Inc.
- 2.- Chemical and Process Technology Encyclopedia
Autor: Douglas M. Considine.
Editorial: Mc. Graw-Hill Book Company.
- 3.- Chemical Engineers' Handbook
Autor: Robert H. Perry.
Quinta Edición.
Editorial: Mc. Graw Hill-Book Company.
- 4.- The Merck Index.
Novena Edición.
Editorial: Merck & Co., Inc.
- 5.- Encyclopedia of Chemical Processing and design.
Autor: John J. Mcketta.
Volumen # 2
Editorial: Marcel Dekker, Inc.
- 6.- Antioxidant-Syntheses and Applications.
Autor: J. C. Johnson.
Editorial: Noyes Date Corporation.
- 7.- Dictionary of organic compound.
Volumen # 5
Autor: Oxford University.
Editorial: University Press.

- 8.- Chemical Reactor Design for Process Plants.
Autor: Howard F. Rase.
Volumen 1 y 2
Editorial: Wiley-Interscience Publication.
- 9.- Autoxidation and Antioxidants.
Volumen 1 y 2
Autor: W. O. Lunberg.
Editorial: Interscience Publishers.
- 10.- The Encyclopedia of chemistry.
Autor: G. L. Clark.
Editorial: Reinhold Publishing Corporation.
- 11.- Procesos de transferencia de calor.
Autor: Donald Q. Kern.
1a. Edición.
Editorial Continental, S. A.
- 12.- Bennett, Scolah; J. Chem. Soc. 196, (1927).
- 13.- Gresham et; J. Am. Chem. Soc., 70, (1948).
- 14.- Anuario de la Industria Química Mexicana. (1980).
Editado por: la Asociación Nacional de la Industria Química (ANIQ)
- 15.- American Cyanamid Co. Brit.; C.A., 41, 3119, (1947).
- 16.- B. F. Goodrich Co. Brit.; C.A., 43, 5795, (1949).
- 17.- Medvedev, A. I., URSS., C.A., 80, 95190a, (1974).
- 18.- Medvedev, A. I., Romanchenko., URSS.; C.A., 82, 155241w, (1975).
- 19.- Stimel, Jan., Czech.; C.A., 87, 24127u, (1977).
- 20.- Ikeda, Kazuo; Japón.; C.A., 84, 45357p, (1976).
- 21.- Daido Mazuo; Japón. ; C.A., 88, 192078t, (1978).

- 22.- Rosenkranz; Thomas Francis; U.S.; C.A., 88, 30395s,(1978).
- 23.- Jurgelionyte, A.; Kaikaris, P.; URSS.; C.A., 88, 74974j,
(1978).
- 24.- Komatsuzaki, Shigehi; Japón; C.A., 88, 173320z, (1978).
- 25.- Uematsu, Takao; Japón; C.A., 89, 14932h, (1978).
- 26.- Nakagawa, Mikio; Japón; C.A., 91, 92770f, (1979).
- 27.- Shinohara, Masami; Japón; C.A., 91, 21894p, (1979).
- 28.- Buergle, Peter; Alemania; C.A., 92, 77169u, (1980).
- 29.- Finanzas - Administración.
Autor: Gitman, Lawrence L.
- 30.- ASME Boiler and pressure vessel code, 1962.
Sección VIII ;
Unfired Pressure Vessels.