

23  
20j



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

**FACULTAD DE QUÍMICA**

**ESTUDIO TÉCNICO - ECONOMICO SOBRE  
LA FABRICACION DE CLORURO  
DE BENZOILO**

**T E S I S**

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

**Q U I M I C O**

P R E S E N T A :

**MARIA LUZ MATEOS TRIGOS**

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

**1 9 8 8**



**EXAMENES PROFESIONALES  
FAC. DE QUÍMICA**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está 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.

ESTUDIO TECNICO-ECONOMICO SOBRE LA FABRICACION DE  
CLORURO DE BENZOILO

I N D I C E

<u>CAPITULOS</u>	Página
1. INTRODUCCION	1
2. ASPECTOS GENERALES	
2.1 Propiedades físicas y químicas	6
2.2 Reacciones más usuales	6
2.3 Aplicaciones	8
2.4 Métodos de obtención	
2.4.1 De halogenuros de ácido en general	9
2.4.2 De cloruro de benzoilo	11
3. ASPECTOS TECNICOS	
3.1 Introducción	14
3.2 Obtención de cloruro de benzoilo por reacción entre ácido benzoico y tricloruro de fósforo	16
3.3 Obtención de cloruro de benzoilo por reacción entre ácido benzoico y cloruro de tionilo	16
3.3 Obtención de cloruro de benzoilo por reacción entre ácido benzoico y triclorotolueno	17

3.5 Obtención de triclorotolueno por cloración de tolueno	18
3.6 Métodos analíticos utilizados en el control de los productos descritos en la parte experimental	
3.6.1 De materias primas, procesos y productos finales	20
4. ASPECTOS ECONOMICOS	
4.1 Costo de producción	24
4.2 Inversión	32
4.3 Rentabilidad	36
5. CONCLUSIONES	42
6. BIBLIOGRAFIA	44

## INTRODUCCION

## 1. INTRODUCCION

En la industria química de México se presentan actualmente varios retos a enfrentar para poder desarrollar una empresa en forma sana y eficiente. Por un lado, la industria se encuentra con los problemas ocasionados por la crisis económica nacional de los años ochentas tales como la inflación acelerada, mercado contraído, tasas de interés muy altas y poco crédito y por otro la política nacional definida mediante la entrada de México al GATT en que se tendrá en un futuro muy cercano una apertura comercial y una competencia industrial internacional que ya se inició con la disminución de los aranceles a los productos químicos, la eliminación de los precios oficiales y la de los permisos de importación.

Es claro que en un futuro se tendrá más competencia y que para sobrevivir como industria se requiere de una productividad lo más eficiente que sea posible, un respaldo basado en un desarrollo tecnológico local completo y bien organizado y una estrategia de desarrollo y competencia tanto local como internacional bien diseñada. Otros factores como los financieros, laborales y sociales son también muy importantes pero no para considerarse en el presente trabajo.

Parte de esta estrategia industrial, implica un análisis de la posible integración de sus líneas de productos. Esta integración puede ser horizontal ampliando el número de productos a fabricar con objeto de ofrecer un servicio más completo y efi-

ciente o bien en forma vertical ya sea produciendo las materias primas que se requieren en sus procesos fabricando productos secundarios a los que en un momento produce.

En la presente tesis se efectúa un análisis técnico-económico sobre la posible fabricación de un producto, cloruro de benzofilo, que es materia prima para la manufactura de varios productos entre los que está el peróxido de benzofilo, principalmente.

Una parte de la estrategia de la empresa interesada en este trabajo es la de integración por fabricación de sus materias primas y el desarrollo de éste estudio se plantea como requisito para tomar la decisión sobre la inversión requerida para fabricar o no éste producto, en qué volumen y con qué proceso.

El cloruro de benzofilo no se fabrica actualmente en México y es posible que entre los motivos para no hacerlo se encuentre la rentabilidad de una planta que para atender solamente al mercado local, no sea lo suficientemente atractiva por su bajo volumen. Es de imaginar por los posibles materiales que intervienen en los procesos factibles, que el manejo de materiales conlleva un alto riesgo a la vez que una inversión muy considerable. Por otro lado la disponibilidad sin problemas en un mercado cercano a México a un precio que parece razonable desalienta también un proyecto de ésta naturaleza. Las razones anteriores en su conjunto son amplias y bien pueden ser la causa por las que hasta este momento ninguna empresa ha intentado su fabricación. Se espera que en este trabajo se aclaren algunas de las dudas que permitan tomar la decisión sobre la fabricación de éste producto.

La tesis describe primero al producto en lo general tanto en sus propiedades físicas como químicas, sus aplicaciones más usuales y los métodos que se han descrito en la literatura para fabricar éste producto. A continuación se hace un análisis basado en la experimentación en el laboratorio sobre tres métodos que se consideraron dignos de ser estudiados con cierto detalle y el motivo por el cual se ha seleccionado uno de ellos, que es el de la reacción entre triclorotolueno y ácido benzoico como el más apropiado, ampliando el estudio con algunos datos relacionados con la fabricación de estas dos materias primas.

Con la información obtenida se hace un estudio económico preliminar con objeto de determinar un posible costo de producción así como la inversión necesaria y el volumen de producción requerido para tener una rentabilidad apropiada. Finalmente el objetivo deseado es que la información aquí contenida, sea una base sólida para decidir sobre la viabilidad del desarrollo de éste producto a nivel industrial.



## ASPECTOS GENERALES

## 2. ASPECTOS GENERALES

### 2.1 Propiedades físicas y químicas del cloruro de benzolilo

Líquido incoloro de olor picante, lacrimógeno, que con el agua se hidroliza fácilmente formando ácido benzoico y desprendiendo ácido clorhídrico y calor.<sup>(10)</sup>

Soluble en éter, benceno y disulfuro de carbono.

Peso molecular : 140,57

Punto de ebullición : 197°C

Punto de fusión : de -0.5 a -0.9°C

Índice de refracción a 20°C : 1.5537

Viscosidad a 15°C : 1.3 cP

Gravedad específica a 20°C : 1.212

Presión de vapor a 20°C : 0.4 mm. de Hg.

Punto de ignición : 72°C

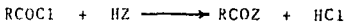
Constante dieléctrica a 20°C : 22.9

Calor de combustión : 782 KCal/Kg

(15)

### 2.2 Reacciones más usuales

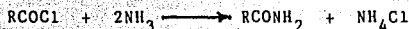
#### 1.- Conversión en ácidos y derivados



a) Conversión en ácidos por hidrólisis



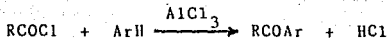
b) Conversión en amidas por amoniólisis



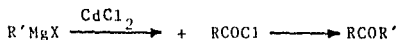
c) Conversión en ésteres por alcoholólisis



2.- Formación de cetonas. Acilación de Friedel y Crafts

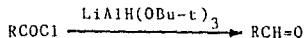


3.- Formación de cetonas. Reacción con compuestos organocádmicos



R' puede ser arilo o alquilo primario

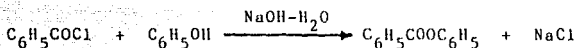
4.- Formación de aldehídos por reducción



R puede ser arilo o alquilo

Los cloruros de ácido aromáticos son considerablemente menos reactivos que los alifáticos. Con agua fría, por ejemplo, el cloruro de acetilo reacciona en forma casi explosiva, mientras que el de benzoilo solo reacciona lentamente.

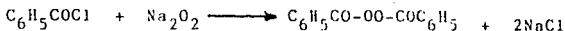
La reacción de cloruros de ácido aromáticos con un alcohol o un fenol se realiza a menudo empleando la técnica de Schotten-Baumann, que es la esterificación en presencia de una base, por lo general hidróxido de sodio acuoso o piridina, que aunque no está clara su función parece que además de neutralizar el cloruro de hidrógeno que se liberaría, cataliza la reacción.



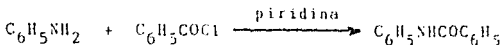
(10)

### 2.3 Aplicaciones

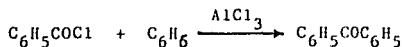
1.- El cloruro de benzoilo es un intermediario para la preparación de peróxido de benzoilo, que se utiliza a su vez como iniciador de polimerización.



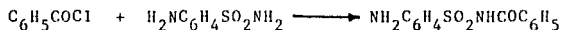
2.- Con anilina reacciona formando benzanilida, usada en la elaboración de perfumes y pinturas.



3.- El cloruro de benzilo reacciona con benceno en presencia de cloruro de aluminio formando benzofenona, que se utiliza como antihistamínico y en la preparación de algunos insecticidas.



4.- Reacciona con p-aminobencensulfonamina para producir la sulfabenzamida correspondiente que tiene aplicación como bactericida y microbicida.



5.- Con resorcinol reacciona para producir benzo-resorcinol utilizado como absorbente de luz uv en la industria de plásticos y de pinturas.



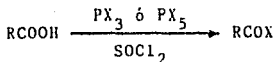
(3)

#### 2.4 Métodos de obtención

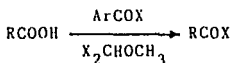
##### 2.4.1 De halogenuros de ácido en general

Los halogenuros de ácido se pueden obtener por varios procedimientos entre los que se encuentran los siguientes:

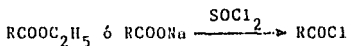
1) Del ácido carboxílico correspondiente y haluros de fósforo ó cloruro de tionilo.



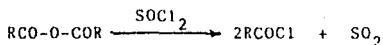
2) De ácidos carboxílicos y halogenuros de ácido ó dihaloéteres alifáticos (alfa, alfa).



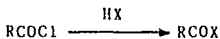
3) De ésteres o sales de ácido con cloruro de tionilo.



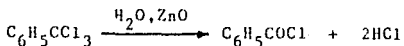
4) De anhídridos de ácido con cloruro de tionilo.



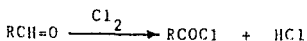
5) Del halogenuro de ácido y un hidrácido por intercambio del halógeno.



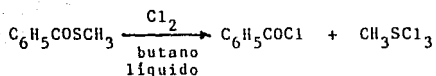
6) De 1,1,1 trihalogenuros como el triclorotolueno.



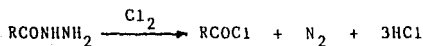
7) De aldehídos.



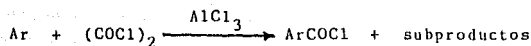
## 8) De tiolésteres.



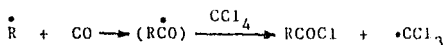
## 9) De hidrazidas.



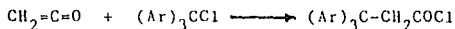
## 10) Con cloruro de oxalilo e hidrocarburos aromáticos.



## 11) Con monóxido de carbono, hidrocarburos y cloro.

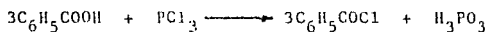


## 12) De cetenas con cloruros de triarilmetano.

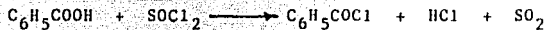


## 2.4.2 Métodos de obtención de cloruro de benzoilo

- 1) Por reacción entre ácido benzoico y tricloruro de fósforo.



2) Por reacción entre ácido benzoico y cloruro de tionilo.



3) Por reacción entre ácido benzoico y triclorotolueno.





### ASPECTOS TECNICOS

### 3. ASPECTOS TECNICOS

#### 3.1 Introducción

Después de revisar cuidadosamente la literatura existente se decidió experimentar tres métodos de obtención de cloruro de benzoilo (2,13,14):

El primero de ellos, la reacción entre el ácido benzoico y el tricloruro de fósforo, el cual después de algunas pruebas fué abandonado debido a la poca solubilidad del ácido benzoico en el tricloruro de fósforo. Además desde el punto de vista económico, si consideramos el alto precio del ácido benzoico, esto hace que este proceso no tenga interés comercial.

El segundo método probado fué la reacción entre el ácido benzoico y el cloruro de tionilo el cual produce cloruro de benzoilo en condiciones razonables de temperatura y sin problemas de aislamiento del material. Dado que el rendimiento es relativamente bajo, del orden de 60%, aún pensando que éste proceso pueda optimizarse, se abandonó al considerar que el precio del ácido benzoico es muy cercano al del cloruro de benzoilo. Por otro lado, los subproductos como dióxido de azufre y ácido clorhídrico son difícilmente aprovechables, aparte de la toxicidad conocida de estos materiales y la dificultad para separar gases a nivel industrial.

El tercer método fué la reacción entre el triclorotolueno (11) y el ácido benzoico el cual consistió en adicionar gradualmente

el triclorotolueno sobre el ácido benzoico a una temperatura superior a los 130°C y seguir por cromatografía de gases la formación del cloruro de benzilo. Una vez terminada la reacción, el producto se separa de la mezcla por destilación. El resultado obtenido después de varias pruebas indican un rendimiento satisfactorio comercialmente y una operación que podría escalarse al nivel industrial con problemas aparentemente menores o controlables.

Por lo anteriormente expuesto, éste último método se considera como el adecuado para ser utilizado a nivel industrial.

Las materias primas requeridas en éste proceso son el triclorotolueno y el ácido benzoico, las cuales a su vez pueden obtenerse de la siguiente manera: por cloración de tolueno en un proceso controlado se pueden formar distintos derivados clorados que son, el monoclorotolueno o cloruro de bencilo, el diclorotolueno o cloruro de benzal y el triclorotolueno. <sup>(6)</sup>

Esta operación permite, según se efectúe, producir uno o varios de éstos tres productos y en el caso que nos interesa por cloración exhaustiva y dando el tiempo suficiente a la reacción es posible obtener únicamente el triclorotolueno, el cual si es necesario, puede purificarse por destilación ya que los puntos de ebullición de los tres derivados clorados así lo permiten. A su vez, dependiendo de consideraciones económicas el ácido benzoico puede prepararse por hidrólisis simple de cloruro de benzilo por métodos conocidos. <sup>(11)</sup>

Se realizaron varios experimentos sobre los métodos antes

descritos y a continuación se dan como ejemplo los más significativos y que permitieron llegar a conclusiones para continuar con la evaluación técnico-económica, motivo de éste trabajo.

### 3.2 Obtención de cloruro de benzoílo por reacción entre ácido benzoico y tricloruro de fósforo

En un matraz de fondo redondo de 3 litros de capacidad provisto de un refrigerante, termómetro y trampa para capturar el ácido clorhídrico, se colocan 157.9 g. (1.15 moles) de tricloruro de fósforo, grado técnico y se calientan hasta alcanzar una temperatura de 62°C. El sistema se agita magnéticamente y se añaden lentamente por medio de un embudo, 312 g. (2.55 moles) de ácido benzoico, grado técnico. La adición se lleva a cabo en un tiempo aproximado de 2 horas y manteniendo la temperatura de 62°C.

El transcurso de la reacción se sigue por el aspecto que presenta la mezcla, la cual en un tiempo de 8 horas no llega a la solubilidad deseada. Se observa un residuo de ácido benzoico en cantidades considerables en el fondo del matraz por lo que se suspende el experimento.

La reacción se efectúa al 35 y al 50% de exceso de tricloruro de fósforo con respecto al ácido benzoico pese a lo cual no se llegan a los resultados esperados de solubilidad.

### 3.3 Obtención de cloruro de benzoílo por reacción entre ácido benzoico y cloruro de tionilo.

Con el mismo equipo que en el experimento anterior se procede a cargar 254.6 g. (2.14 moles) de cloruro de tionilo, grado técnico (35% de exceso con respecto al ácido benzoico). Se inicia el calentamiento al tiempo que se adicionan lentamente 193.6 g. (1.58 moles) de ácido benzoico, grado técnico. La temperatura se lleva a 60°C y se observa una rápida disolución del ácido benzoico.

La reacción se sigue por cromatografía de gases, hasta la aparición del cloruro de benzoilo y la desaparición del ácido benzoico, así como por la densidad que iba presentando la mezcla de reacción.

Después de 4 horas de reacción a 60°C de temperatura se suspende el calentamiento.

El producto se aísla de la mezcla de reacción por destilación fraccionada a una temperatura de 83°C y una presión de 10 mm. de Hg. Se obtienen 147 g. de cloruro de benzoilo que corresponde a un rendimiento de 65.9%.

La pureza se calcula en 98% por cromatografía de gases.

3.4 Obtención de cloruro de benzoilo por reacción entre ácido benzoico y triclorotolueno.

En un matraz de fondo redondo de 3 litros de capacidad, adaptado con un condensador para reflujo, termómetro y trampa para capturar el ácido clorhídrico que se genere, se colocan 212.4 g. (1.74 moles) de ácido benzoico, grado técnico. Se calienta,

con agitación magnética, hasta que se funde completamente el ácido, aproximadamente a 130°C, después de lo cual se añade gota a gota mediante un embudo de adición, 340 g. (1.74 moles) de triclorotolueno técnico (99%), durante 2.5 horas.

El transcurso de la reacción se sigue por cromatografía de gases, hasta que después de 11 horas de reacción se detiene la agitación y se enfría el sistema.

El producto obtenido se recupera por destilación de la mezcla de reacción a una temperatura de 60°C y 9 mm. de Hg. de presión. Se obtienen 429.4 g. de cloruro de benzoilo que corresponde a un rendimiento de 89.6%.

La pureza del cloruro de benzoilo así obtenido es de 99% calculada por cromatografía de gases.

Nota: con el uso del catalizador adecuado se puede reducir el tiempo de reacción con los mismos resultados de pureza.

### 3.5 Obtención de triclorotolueno por cloración de tolueno.

En un matraz Morton de 3 litros de capacidad, equipado con termómetro, refrigerante y sistema de entrada para el cloro, se colocan 1250 g. (13.6 moles) de tolueno, grado técnico. El matraz se ilumina con un reflector de 500 Watts para llevar a cabo la reacción. Se comienza el calentamiento suavemente hasta alcanzar una temperatura de 65°C y entonces se comienza la cloración a un ritmo lento y constante. Al poco tiempo se apaga el calentamiento dejando el reflector muy cerca del matraz de reacción

y manteniendo la adición de cloro en forma constante.

La reacción se lleva a cabo en un tiempo aproximado de 25 horas manteniendo una temperatura de 75°C.

El transcurso de la reacción se sigue por cromatografía de gases, índice de refracción y densidad de la mezcla.

El producto se aísla de la mezcla de reacción por destilación fraccionada a una temperatura de 83°C y 15 mm. de Hg. de presión.

Se obtienen 1676 g. (8.6 moles) de triclorotolueno que corresponde a un rendimiento del 63%.

La pureza se calcula en 99% por cromatografía de gases. También se emplean para la identificación los valores para la sustancia pura tales como, densidad e índice de refracción, siendo estos de :<sup>(8)</sup>

	Valor obtenido	Valor esperado
Densidad	1.37	1.375
Índice de refracción	1.557	1.5578

### 3.6 Métodos analíticos utilizados en el control de los productos descritos en la parte experimental

#### 3.6.1 De materias primas, procesos y productos finales

El tolueno se caracterizó <sup>(8)</sup> por su densidad =  $0.866 \text{ g/cm}^3$ ; y su índice de refracción = 1.4967; así como por su punto de ebullición =  $110.6^\circ\text{C}$ . Siendo el producto utilizado el fabricado y vendido por Petróleos Mexicanos cubre satisfactoriamente las propiedades anteriores y para su caracterización a nivel industrial se propone utilizar el índice de refracción y su punto de ebullición como técnicas rápidas; aparte un cromatograma de gases o espectro en el infrarrojo pueden ofrecer ventajas adicionales para detectar alguna impureza indeseable y asegurar en forma rápida la caracterización inequívoca de esta materia prima.

El cloro puede analizarse <sup>(9)</sup> en cuanto a su humedad y en el residuo que deja al evaporarse. Para estos propósitos se toma una muestra en un matraz especial, se permite la evaporación del cloro y el residuo se pesa, posteriormente se purga con nitrógeno seco pasando el gas con la humedad residual a través de una trampa de perclorato de magnesio que absorbe el agua. <sup>(1)</sup>

Por diferencia de peso se obtiene el resultado de estos dos valores y por cromatografía del residuo se puede obtener información sobre algunas impurezas menores, en caso de interesar esta información.

Para el propósito de este trabajo se tomó como válido el valor dado por el fabricante de 99.3% de pureza.



El ácido benzoico se analizó <sup>(8)</sup> por su punto de fusión que siendo de 122.4°C se consideró satisfactorio por coincidir con el informado en la literatura.

El triclorotolueno obtenido por cloración del tolueno se puede caracterizar por las siguientes propiedades físicas <sup>(8)</sup>: densidad = 1.3756 g/cm<sup>3</sup>; índice de refracción = 1.5578 y punto de ebullición = 220.8°C. Aparte utilizando la cromatografía de gases en las condiciones que a continuación se describen para el cloruro de benzóilo, se puede obtener información adicional sobre las impurezas presentes.

El producto obtenido en este trabajo presentó una pureza del 99%, siendo las impurezas el diclorobenzal y otra que no fué identificada.

El cloruro de benzóilo se caracterizó <sup>(8)</sup> por su densidad = 1.207 g/cm<sup>3</sup> y su índice de refracción = 1.5557. Además se utilizó la técnica de espectroscopía al infrarrojo con los siguientes resultados <sup>(18)</sup>:

Vibración longitudinal C-H aromático:	3080 cm <sup>-1</sup>
Vibración longitudinal del carbonilo:	1790 y 1760 cm <sup>-1</sup>
Anillo aromático:	1600 y 1460 cm <sup>-1</sup>
C-H aromático fuera del plano:	690-680 cm <sup>-1</sup>

La mejor forma de determinar la pureza del cloruro de benzóilo es por cromatografía de gases <sup>(5)</sup> ya que se observa claramente

la presencia de algunas impurezas que pudiera contener, principalmente compuestos clorados ya sea en la cadena alifática o en el anillo aromático.

Los resultados obtenidos por ésta técnica muestran que el producto tiene una pureza del 99% mostrando como impureza al triclorotolueno únicamente.

El procedimiento y las condiciones utilizadas en ésta técnica fueron las siguientes :

Cromatógrafo Perkin-Elmer modelo 3920 B

Columna de acero inoxidable

Longitud: 2 metros. Diámetro interno: 1/8 de pulgada.

Fase estacionaria: OV-17 3% sobre Chrom W-AW-DNCS, 80/100

Gas acarreador: nitrógeno a un flujo de 30 ml/minuto

Detector de ionización de flama

Temperaturas de trabajo: columna: 120°C

inyector: 210°C

detector: 210°C

Se inyectaron 2 microlitros cada vez a una atenuación de 32 y en un rango de 100. La velocidad de la carta: 15 mm/minuto.

### ASPECTOS ECONÓMICOS



Si los precios de las materias primas son superiores al precio del producto final y aparte se pierde una mol de HCl en el proceso es obvio que no sería costeable el producirlo en esta forma, o sea adquiriendo comercialmente los materiales.

De aquí parte la consideración de iniciar la fabricación de cloruro de benzoilo a partir de tolueno y cloro.

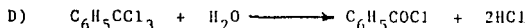
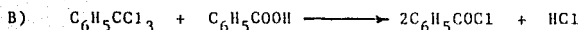
Los precios internacionales de estos materiales son :

Cloro : 360 Ps/Kg

Tolueno : 1566 Ps/Gal equivalente a 413 Ps/l = 466 Ps/Kg

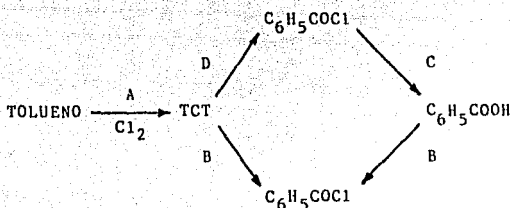
Si partimos de la idea de que el cloro vale 360 Ps/Kg y el tolueno 466 Ps/Kg en principio se ve factible obtener un cloruro de benzoilo a un precio menor de 2257 Ps/Kg.

La química de este proceso sería la siguiente : (15)



Al examinar la reacción A se ve que sería un buen principio para obtener triclorotolueno. Este a su vez se hidrolizaría en medio acuoso para dar cloruro de benzoilo y éste a su vez el ácido benzoico.

El esquema que se contempla es el siguiente :

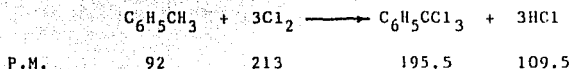


Para propósitos de trabajo vamos a determinar primero el costo del proceso A en que se obtiene el triclorotolueno; con éste costo podemos determinar el costo de ácido benzoico vía los procesos D y C tomándolos como un solo proceso sin aislar el cloruro de benzoilo, en este caso un producto intermediario. Ya teniendo los costos teóricos de triclorotolueno y de ácido benzoico se hará el estudio económico integral del proceso B.

Otra alternativa es efectuar la cloración (proceso A) y posteriormente la hidrólisis (proceso D) y detener éste proceso en la etapa de cloruro de benzoilo sin que éste pase a ácido benzoico.

Este proceso sería menos recomendable ya que formaría por cada mol de TCT una mol de cloruro de benzoilo y dos moles de HCl que se tendrían que absorber, mientras que en el proceso B se forman dos moles de cloruro de benzoilo y solo una mol de HCl lo cual parece más conveniente para el propósito que se busca en el presente trabajo.

Determinación del costo directo de fabricación del triclorotolueno :

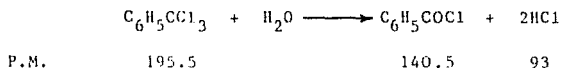


Los datos experimentales preliminares indican que esta reacción se puede optimizar hasta un 90% de rendimiento por lo que en la ecuación anterior se obtendría  $195.5 \times 0.9 = 175.95$  y para obtener una tonelada de producto se requeriría  $1000/175.95 = 5.683$  veces más o sea :

		<u>KG/TON</u>	<u>PESOS/KG</u>	<u>PESOS/TON</u>
Tolueno	$5.683 \times 92 =$	522.8	466	243,620
Cloro	$5.683 \times 213 =$	1210.5	360	435,780
Total	=			679,400

El costo de materia prima es entonces de 679 Ps/Kg lo que debe permitir la obtención del cloruro de benzoilo a un costo menor al de su precio internacional de 2257 Ps/Kg.

Si el proceso D fuera factible tendría la siguiente rentabilidad :







Con un rendimiento de 90% se obtendría  $273 \times 0.9 = 245.7$  y para una tonelada de producto requerimos 4.07 veces lo que la estequiometría indica.

	<u>KG/TON</u>	<u>PESOS/KG</u>	<u>PESOS/TON</u>
TCT $4.07 \times 195.5 =$	795.7	679	540,280
AB $4.07 \times 122 =$	496.5	1209	600,506
Total =			1140,566

El costo de materia prima total sería de 1141 Ps/Kg que es aproximadamente la mitad del valor comercial del producto deseado.

#### CONSIDERACIONES PARA FIJAR ALGUNOS PARAMETROS DE COSTO

(19)  
Para propósitos de cálculo del costo de algunos materiales a fabricar en planta, se ha considerado tomar el costo directo de producción basado en materias primas + servicios + gastos de personal de producción y técnico directamente relacionado con estos procesos. Se obtiene de acuerdo a la experiencia actual de una planta operando, lo siguiente :

#### SERVICIOS

En el año de 1987 se tiene presupuestado gastar en :

Fuerza (electricidad)	52,800 MMPs *
Combustibles	47,170 "
Agua	5,000 "

\* millones de pesos

para producir aproximadamente 1700 toneladas de productos diversos por lo que el promedio de los servicios por tonelada es :

Fuerza	$52,800/1700 = 31$ Ps/Kg
Combustibles	$47,170/1700 = 28$ "
Agua	$5,000/1700 = 3$ "
Total	62 "

Mano de obra  $125.800$  MMPs/1700 = 74 Ps/Kg

Personal técnico para :

Supervisión	$12.000$ MMPs/1700 = 7 Ps/Kg
Control de calidad	$15.000$ MMPs/1700 = 9 Ps/Kg
Total	90 Ps/Kg

Total Servicios 62 Ps/Kg

Total mano de obra y personal técnico 90 Ps/Kg

Total de servicios, mano de obra y personal t. 152 Ps/Kg

El costo de producción en Ps/Kg de las materias primas será :

	COSTO MATERIA PRIMA	COSTO SERVICIOS Y M.OBRA+P.T.	COSTO DIRECTO PRODUCCION
Triclorotolueno:	679	152	831
Acido benzoico :	1209	152	1361

y el costo directo de producción del cloruro de benzóilo sería:

	KG/TON	COSTO DIR. PROD	COSTO Ps/TON
Triclorotolueno:	795.7	831	661,226
Acido benzoico :	496.5	1361	675,736
Total :			1336,962

El costo de producción por kilogramo es de 1,337 pesos en Diciembre de 1987.

Otros gastos relacionados con producción :

Mantenimiento :

Se considera 5% anual en base a la inversión total del equipo de proceso. En este caso es de 20 MMPs/año.

Depreciación :

Se consideró como 10% anual del valor de la inversión total del equipo de proceso. En este caso es de 40 MMPs/año.

Otros gastos de producción :

Se engloban aquí los gastos generales de administración, de planta, vigilancia, seguridad, limpieza, etc., que por experiencia se tomó como un 40% del costo de mano de obra y personal técnico, siendo entonces de  $90 \times 0.4 = 36$  Ps/Kg.

#### VENTAS

La fabricación de cloruro de benzóilo tiene como propósito obtener una mayor integración de la empresa que esta consideran-

(7)  
do la implementación de éste proyecto. Parte del volúmen producido se utilizará en México y el resto se exportará principalmente a Estados Unidos de Norteamérica o se venderá localmente.

La venta o uso local en México se considera de 500 ton/año y una cantidad equivalente sería para exportación. De la cantidad local se tiene asegurada la utilización interna de la mitad del volúmen o sea 250 ton/año. De acuerdo con estos escenarios las posibles ventas tienen 3 alternativas. La primera de 250 ton/año asegurada, la segunda de 500 ton/año con alta probabilidad si el precio es ligeramente menor al internacional puesto en México y la tercera por 1000 ton/año si se logra la exportación de 500 toneladas anuales a precios competitivos internacionalmente.

#### 4.2 Inversión

Tomando en cuenta el trabajo realizado y la experiencia en el manejo de equipo como el que requiere este proceso, es aconsejable el material de vidrio como equipo base. Debido a la formación de ácido clorhídrico durante la reacción todo el equipo debe ser resistente a éste ácido mineral, además de presentar la capacidad para realizar las operaciones de adición de reactivos, calentamiento controlado, agitación, reflujo, destilación, absorción de gases, vacío, etc. Se propone un reactor versátil (16) de vidrio con su columna de rectificación y receptor de destilados como el adecuado y con la versatilidad necesaria en el ma-

(17)  
 nejo de materiales corrosivos, auxiliado por servicios de calentamiento y vacío.

Para poder tener un volúmen adecuado de producción se ha pensado en un reactor para la reacción y otro para la destilación que pudieran alternarse y dar versatilidad a la operación. Se proponen dos reactores tipo Pfaudler de 1000 galones, vidriados, con los accesorios antes descritos.

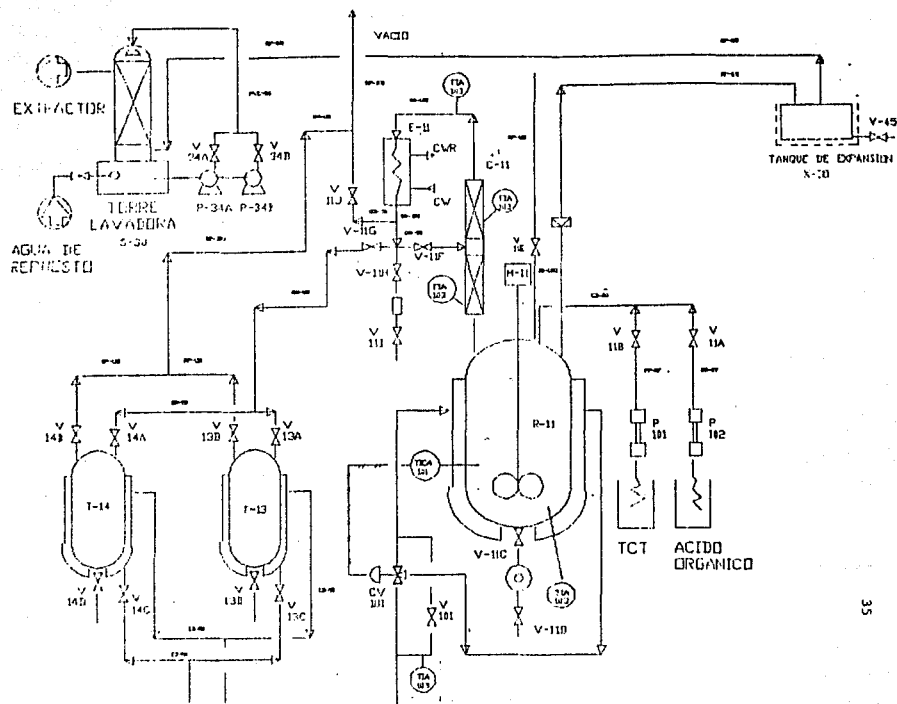
Para propósitos de cálculo todo se ha llevado a precios de Diciembre de 1987, lo cual permite estudiar la rentabilidad del proyecto en ese momento y hacer las sugerencias pertinentes. (7)

EQUIPO DE PROCESO	COSTO EN MMPs
2 reactores	78
4 recibidores de vidrio	47
2 condensadores	24
2 equipos de vidrio	64
2 bombas de alimentación	2
tubería	24
equipo eléctrico	13
instrumentación	6
construcción	12
<u>servicios auxiliares</u>	
caldera	4
sistema de calentamiento	20
sistema de enfriamiento	7
sistema de vacío	50

sistema de tratamiento de efluentes gaseosos	8
subtotal	359
imprevistos 12%	43
TOTAL	402

El total de la inversión, incluyendo un 12% para imprevistos es aproximadamente de 400 millones de pesos, aunque es obvio que en una época de alta inflación como la que se tiene ahora dependiendo del momento en que se efectúe el gasto habrá variaciones importantes.

A continuación se dá un esquema del equipo con las partes principales que lo componen :



## 4.3 Rentabilidad

ALTERNATIVAS DE VENTA Y RENTABILIDAD

	<u>CASO 1</u>	<u>CASO 2</u>	<u>CASO 3</u>
1) <u>Ventas anuales / Kg</u>	250,000	500,000	1,000,000
2) Precio promedio de venta en Ps/Kg	2,257	2,257	2,144
3) Valor de la venta en MMPs	564.250	1,128.500	2,144.150

Costo de producción

4) NP + m.o. + p.t. en Ps/Kg	1,337	1,337	1,337
5) Otros gastos de producción en Ps/Kg	36	18	9
6) Depreciación anual (40 MM) en Ps/Kg	160	80	40
7) Costo de producción Ps/Kg	1,533	1,435	1,386
8) Costo de producción total para el volumen considerado en MMPs	383.250	717.500	1,386
9) Utilidad bruta (3-8) MMPs	181.000	411.000	758.150

Gastos

10) De venta, 2% s/venta MMPs	11.285	22.570	42.883
11) De administración, 3% s/venta	15.927	33.855	64.324



12) De I/D/ST, 1.5% s/venta	8.464	16.927	32.162
13) Total de gastos (10+11+12)	36.676	73.320	139.360
14) Utilidad de operación (9-13)	144.240	337.680	618.790
15) Reparto de utilidades ,			
10% de (14)	14.424	33.768	61.879
16) Impuestos, 42% s/14 MMPs	60.581	141.825	259.892
17) Impuesto + R.U. (15+16)	75.005	175.593	321.771
18) Utilidad neta (14-17) MMPs	69.235	162.087	297.019
19) Inversión en MMPs	400	400	400
20) Rentabilidad (18/19)x100	17.3%	40.5%	74.2%
21) Años para recuperar la inversión	5.8	2.5	1.3

Nota. En este capítulo los pesos se indican sin decimales, aproximando a la unidad en las operaciones aritméticas efectuadas y los millones de pesos se indican con 3 cifras decimales.

Alternativas de venta y rentabilidad.- explicación de la tabla.

1,2) Para propósitos de analizar la rentabilidad del proyecto se analizan tres alternativas de venta. La primera o caso 1 en la tabla anterior supone una venta de 250 toneladas por año que siendo la cantidad necesaria para uso interno de la empresa se considera como segura ya que se lograría la integración que sería el objetivo principal para llevar a cabo este proyecto. El caso 2 supone la venta de otras 250 toneladas adicionales lo que podría lograrse en el mercado interno más ventas a otras empresas que utilizan este producto. El precio de venta en esta alternativa se consideró también el del precio internacional debido a que el comprador en México se aborrraría fletes y gastos de importación por lo cual preferiría este producto al precio indicado. El caso 3 implica aparte de capturar el mercado local, la exportación de 500 toneladas por lo cual el precio de venta se ajusta a un 90% del precio internacional, dado que para efectuar esta venta se requerirá un precio de venta atractivo aparte de posibles impuestos de importación de terceros países.

3) En las condiciones anteriores los precios de venta posibles serían para :

- caso 1        \$2,257.00 Ps/Kg  
              y un total para 250 ton. de 564 MMPs
- caso 2        \$2,257.00 Ps/Kg  
              y un total para 500 ton. de 1128 MMPs
- caso 3        \$2,144.00 Ps/Kg  
              y un total para 1000 ton. de 2144 MMPs

- 4) Materia prima + mano de obra + personal técnico se estima en 1337 Ps/Kg.
- 5) Otros gastos de producción.- para el caso 1 se tomó el promedio actual que es de 36 pesos y para los casos 2 y 3 se disminuyó en forma proporcional al volumen producido.
- 6) La depreciación utilizada fué siguiendo el método tradicional a razón de un 10% anual del monto de la inversión, en este caso de 40 millones por año. De aquí se nos permite obtener el dato del costo por depreciación por kilo en los tres casos considerados.
- 7) El costo total de producción corresponde a la suma de los renglones 4,5 y 6.
- 8) Este renglón se obtiene de multiplicar el costo total de producción por el volumen considerado en los tres casos.
- 9) La utilidad bruta se obtiene al restar al costo de producción total al valor de la venta.
- 10) Gastos de venta.- se tomó como un 2% del precio de venta.
- 11) Gastos de administración.- se tomó como un 3% del precio de venta.
- 12) Gastos de investigación, desarrollo y servicio técnico.- se tomó como un 1,5% del precio de la venta.
- 13) El total de gastos corresponde a la suma de los conceptos 10,11 y 12.
- 14) La utilidad de operación es la resta del total de gastos a la utilidad bruta.
- 15) El reparto de utilidades se calculó en forma tradicional como el 10% de la utilidad de operación.

16) Los impuestos se tomaron como un 42% de la utilidad de operación aunque con el nuevo régimen fiscal pueden disminuir hasta 35% en 1991.

17) Este renglón se obtiene al sumar el valor del impuesto y el reparto de utilidades.

18) La utilidad neta se calcula al restar de la utilidad de operación, la suma de los impuestos más el reparto de utilidades.

19) La inversión para este tipo de planta se calcula en 400 millones de pesos, según se explicó anteriormente.

20) La rentabilidad se calcula dividiendo la utilidad neta entre la inversión inicial. Se expresa en porciento del dinero que se invirtió y que se recupera en un año de operación para cada uno de los casos considerados.

21) Los años para recuperar la inversión se obtienen dividiendo  $100 / \text{rentabilidad anual} \times 100$ .

## CONCLUSIONES

## 5. CONCLUSIONES

1.- El proceso de fabricación más económico para producir cloruro de benzilo es por reacción entre ácido benzoico y tricloro-tolueno.

2.- Dado el precio comercial del ácido benzoico y del tricloro-tolueno se requiere fabricarlos a partir de tolueno con objeto de abaratar el proceso.

3.- Por las propiedades físicas y químicas de los materiales necesarios en el proceso, en particular cloro y de los subproductos como el ácido clorhídrico, se requiere una planta especial de alta resistencia química a estos agentes. Todo esto aumenta el costo de esta planta hasta cerca de los 400 millones de pesos a Diciembre de 1987.

4.- Se consideran tres tipos de casos, la producción y venta de 250, 500 y 1000 toneladas por año. En todos los casos es rentable la inversión pero para el caso número 1 de 250 toneladas por año se considera baja la rentabilidad para la industria química de especialidades.

5.- Se recomienda fijar como objetivo la venta del caso número 3 de 1000 toneladas por año recurriendo al mercado local y a la exportación de 500 toneladas anuales.

6.- En resumen ésta tesis recomienda este proyecto como viable y sugiere efectuar el estudio de la ingeniería de detalle así como el de mercadotecnia y de investigación de proceso que permitan afinar todos los aspectos técnicos y económicos para tomar la decisión final en cuanto a la realización de éste proyecto.

**BIBLIOGRAFIA**

## 6. BIBLIOGRAFIA

- 1) Annual Book of A.S.T.M. standards  
American Society for testing and materials  
Volume 15.05  
U.S.A. (1984)  
pp. 505-9
- 2) Bockmann, W. and Honung, R. Bayer aktiengesellschaft. Germany  
"Photolytic process for the continuous production of benzo-  
trichloride with a low benzal chloride content."  
Oct.22,1971. June 6,1972. Appl. No:294,129. Germany 1972  
U.S. patent No: 3,816,287.
- 3) Buheler, C.A. and Pearson, D.E.  
Survey of Organic Syntheses  
John Wiley and Sons  
U.S.A. (1970)  
pp. 859-73
- 4) Fieser, L.F. and Fieser, M.  
Reagents for Organic Synthesis  
John Wiley and Sons  
U.S.A. (1967)  
p. 50



- 5) Fritz, J.S. and Schenk, J.K.

Química Analítica Cuantitativa

3ª Edición

Ed. Limusa

México (1979)

pp. 445-66

- 6) Groggins, P.H.

Unit processes in Organic Synthesis

Fifth Edition

Mc. Graw Hill Book Co., Inc.

N.Y. (1958)

pp. 204-302

- 7) Guía para la formulación y evaluación de proyectos de inversión. FONEP (Fondo Nacional de Estudios y Proyectos).  
México (1984)

- 8) Index Merck

10ª Edición

Publicado por Merck and Co., Inc.

N.Y. (1983)

- 9) Kirk-Othmer  
Encyclopedia of Chemical Technology  
Third Edition. Volume 1  
John Wiley and Sons  
U.S.A. (1979)  
p. 847
- 10) *ibid.*, Volume 3  
p. 786
- 11) *ibid.*, Volume 5  
pp. 828-38
- 12) Marketing Reporter  
Week prices for Chemicals  
September, 1987  
U.S.A.
- 13) Mayor, R.H. The Goodyear Tire and Rubber Co. Ohio U.S.A.  
"Side chain halogenation of substituted aromatic compounds."  
Sept. 28, 1954. July 22, 1958. Appl. No: 458,982. U.S.A. 1958  
4 pp. U.S. patent No: 2,844,635.
- 14) Miller, G. Diawood Alkali Co. Ohio U.S.A.  
"Method of chlorinating aliphatic chain substituted aromatic hydrocarbons."

Oct.13,1958. Apr.27,1959. Appl. No: 803,946. U.S.A. 1959  
10 pp. U.S. patent No: 2,994,653.

- 15) Morrison,R.T. y Boyd,R.N.

Química Orgánica

3ª Edición

Fondo Educativo Interamericano, S.A.

U.S.A. (1976)

pp. 685-6

- 16) Sax,N.I.

Dangerous Properties of Industrial Materials

Sixth Edition

Van Nostrand Reinhold Co., Inc.

U.S.A. (1984)

- 17) Sconce,J.S.

Chlorine. Its manufacture, properties and uses

Robert E. Krieger Publishing Co.

N.Y. (1972)

pp. 21-80 y 834-63

- 18) Silverstein, R.M., Bassler, C.G. and Morrill, T.C.  
Spectrometric identification of Organic Compounds  
Third Edition  
John Wiley and Sons  
U.S.A. (1974)  
p. 104
- 19) Valle-Riestra, J.F.  
Project Evaluation in the Chemical Process Industries  
Mc. Graw Hill Book Co.  
U.S.A. (1983)