

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO  
FACULTAD DE QUIMICA

ESTUDIO ECONOMICO PARA LA INSTALACION  
DE UNA PLANTA PRODUCTORA DE  
TOLUEN-DI-ISOCIANATO

T E S I S  
Que Para Obtener el Título De  
INGENIERO QUIMICO  
P r e s e n t a n

FERNANDO M. SADA RAMOS  
HECTOR ABEL ARTEAGA SUAREZ

México, D. F.

1977



Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

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

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

Tesis 1977  
M-30 31  
FECHA \_\_\_\_\_  
PROC \_\_\_\_\_  
S \_\_\_\_\_



QUÍMICA

**PRESIDENTE            QUIM. JULIO TERAN ZAVALA**

**VOCAL                    QUIM. HECTOR SOBOL ZASLAV**

**SECRETARIO    I. Q. LEOPOLDO RODRIGUEZ SANCHEZ**

**JURADO ASIGNADO 1.- SUPLENTE            QUIM. FERNANDO ITURBE HERMANN**

**2.- SUPLENTE QUIM.    MARGARITA GONZALEZ TERAN**

**SITIO DONDE SE DESARROLLO EL TEMA;**

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO**

**NOMBRE DE LOS SUSTENTANTES**

**FERNANDO M. SADA RAMOS**

**HECTOR ABEL ARTEAGA SUAREZ**

**ASESOR DEL TEMA            I. Q. LEOPOLDO RODRIGUEZ SANCHEZ**

## INTRODUCCION

Debido al incremento de la demanda que se ha observado en los poliuretanos, el consumo del toluen diisocianato, que es una de las materias primas para dicho polímero, ha aumentado en forma considerable.

Teniendo en cuenta que el toluen diisocianato no se produce en México, el presente estudio se efectuó con la finalidad de dar a conocer los atractivos económicos que presenta esta rama de la industria química.

En el primer capítulo se mencionan las características y propiedades que tienen los isocianatos, las especificaciones comerciales del toluen diisocianato (TDI) y la descripción condensada de la formación del poliuretano, empleando TDI.

El segundo capítulo muestra un análisis del mercado del toluen diisocianato, así como diferentes modelos de proyección de demanda para este producto.

En el tercer capítulo se describen las tecnologías utilizadas para la producción del toluen diisocianato y con más detalle se explica la tecnología elegida, citando las condiciones de operación.

El cuarto capítulo trata lo referente a la seguridad requerida para cada material involucrado en el proceso.

En el quinto capítulo, se realiza un estudio económico basándose en los datos obtenidos en los capítulos, finalmente se encuentran las conclusiones y recomendaciones que surgieron del presente estudio, esperando que sean de utilidad para el futuro.

## INDICE

### CAPITULO I

#### GENERALIDADES Y APLICACIONES

- 1 .- GENERALIDADES
- 2 .- REACCIONES DE ISOCIANATOS CON HIDROGENOS ACTIVOS
- 3 .- OBTENCION DE ISOCIANATOS
- 4 .- CARACTERISTICAS DEL TOLUEN DIISOCIANATO
- 5 .- APLICACIONES DEL TOLUEN DIISOCIANATO

### CAPITULO II

#### ANALISIS DE MERCADO

- 1 .- INTRODUCCION
- 2 .- METODO DE REGRESION LINEAL
- 3 .- METODO DE REGRESION MULTIPLE
- 4 .- METODO DE GOMPERTZ
- 5 .- METODO LOGISTICO
- 6 .- METODO EXPONENCIAL
- 7 .- ANALISIS DE LOS MODELOS

### CAPITULO III

#### ANALISIS Y DESCRIPCION DE PROCESO

- 1 .- DESCRIPCION DE LOS PROCESOS
- 2 .- PROCESO DUPONT
- 3 .- PROCESO BAYER
- 4 .- PROCESO MITSUBISHI
- 5 .- ANALISIS DE LOS PROCESOS
- 6 .- DESCRIPCION DEL PROCESO SELECCIONADO
- 6.1. NITRACION
- 6.2. REDUCCION
- 6.3. SINTESIS DE FOSGENO
- 6.4. FOSGENACION
- 6.5. FORMACION DE HCl al 35%
- 7 .- BALANCE DEL MATERIALES

### CAPITULO IV

#### SEGURIDAD INDUSTRIAL

- 1 .-. INTRODUCCION
- 2 .- TOLUENO
- 3 .- ACIDO SULFURICO
- 4 .- ACIDOS NITRICO Y CLORHIDRICO
- 5 .- CLORO

- 6.- MONOXIDO DE CARBONO
- 7.- HIDROGENO
- 8.- ACETONITRILLO
- 9.- ~~ORTO DICLORO~~ BENCENO
- 10.- FOSGENO
- 11.- TOLUEN DIISOCIANATO

## CAPITULO V

### ESTUDIO ECONOMICO

- 1.- PLANTEAMIENTO
- 2.- DESGLOSE Y CALCULO DE GASTOS
- 3.- BALANCE PROFORMA
- 4.- CALCULO DE COSTO DE MATERIAS PRIMAS Y COSTOS DIRECTOS E INDIRECTOS DE PRODUCCION
- 5.- ANALISIS ECONOMICO

## CAPITULO I

### GENERALIDADES Y APLICACIONES

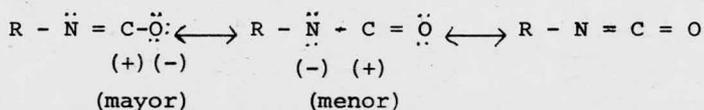
Los isocianatos ( $R-N C O$ ) son tan antiguos como el campo de la química orgánica, Würtz en 1849 sintetizó el primer isocianato, y Hoffman en 1850 descubrió el primer isocianato aromático, sin embargo, no fué sino hasta cien años después cuando estos materiales adquirieron cierta importancia comercial debido principalmente a una innovación en la preparación de plásticos: la poliadición.

La producción de plásticos por el proceso de poliadición con isocianatos fue descubierta en el Laboratorio Central de Investigación de la compañía Bayer en Leverkusen, Alemania, en el año de 1937, dicha poliadición se logra básicamente por la reacción de un diisocianato con un compuesto que contenga uno o más hidrógenos reactivos en su molécula, esta Firma al hacer reaccionar diisocianatos con glicoles obtuvo poliuretanos lineales que se conocieron en el mercado como Igamid y Perlón.

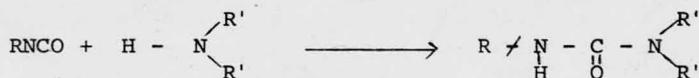
Se ha detectado un incremento muy grande, durante los últimos cuarenta años, en el uso de diisocianatos debido a su adaptación a la síntesis de los polímeros como consecuencia de su reactividad.

Cont...

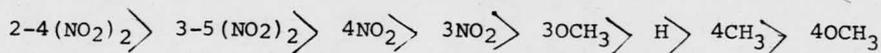
Las reacciones y la reactividad de los grupos isocianatos pueden ser mejor comprendidas si se considerará su estructura electrónica y el efecto en ésta de varios grupos unidos a un átomo de hidrógeno. Tomando en cuenta la resonancia híbrida desde el punto de vista de la teoría orbital molecular, se tiene que el electrón o la densidad de carga negativa es mayor en el oxígeno y menor en el carbón (una carga mayor positiva), siendo el átomo de nitrógeno el intermediario con una densidad de carga neta negativa. A continuación se muestra lo antes mencionado:



La reacción del grupo isocianato con compuestos que tengan enlaces nitrógeno-hidrógeno está gobernada primordialmente por la basicidad o nucleofilidad de la ligadura nitrógeno-hidrógeno, ya que esta reacción involucra el ataque de un radical nucleofílico sobre el carbón electrofílico, de acuerdo a la siguiente reacción:



La actividad de los aril isocianatos se ha encontrado que decrece con respecto a los grupos substituyentes en el orden que a continuación se indica:



mientras que la actividad de la amina aumenta en el mismo orden.

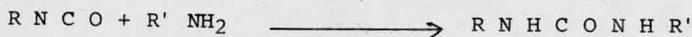
Los isocianatos en la molécula, son particularmente útiles para la formación de grandes moléculas de polímero. Como consecuencia son el primer eslabón de una larga cadena en la industria de los plásticos que conduce al desarrollo de espumas altamente funcionales, elastómeros y recubrimientos.

Los diisocianatos encuentran extensas aplicaciones en la manufactura de espumas poliméricas, fibras, recubrimientos y elastómeros sólidos; ya que reaccionan fácilmente con muchos grupos funcionales teniendo una limitada formación de subproductos indeseables. Los isocianatos líquidos se usan ampliamente en aplicaciones industriales, tal es el caso del Toluen Diisocianato.

#### REACCIONES DE ISOCIANATOS CON HIDROGENOS ACTIVOS

##### Reacciones con aminas primarias

Los isocianatos con aminas primarias dan ureas monosustituídas.



Cont...

### Reacciones con aminas secundarias

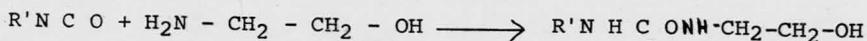
Las aminas secundarias (iminas) reaccionan con los isocianatos para dar bis ureas monosustituídas. Un ejemplo es la Etilen imida.



En este caso, el producto se polimeriza fácilmente por calentamiento. Con catalizador ácido se obtiene una resina dura transparente e insoluble. También, los terpolímeros se forman al agregar una proteína o disulfuro de carbono.

### Reacciones con amino alcoholes

Debido a la gran reactividad de los grupos alquil amino tan semejantes a los alcoholes, los productos de reacción son principalmente ureas y no uretanos (carbamatos).



### Reacción con agua

Los isocianatos reaccionan fácilmente con el agua. Ellos son usualmente higroscópicos y requieren un cuidadoso manejo para evitar el contacto con la humedad. Esto es cierto en los isocianatos aromáticos. Los productos de reacción la amina y el dióxido de carbono. Existe la probabilidad de la formación de un intermediario (ácido carbámico) que es inestable y se descompone como sigue:

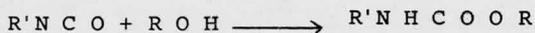


Esta es la reacción básica en las espumas de poliuretano. El espumado se debe al escape del dióxido de carbono y se controla principalmente por la cantidad de agua en comparación con el exceso de isocianato. El producto final tendrá poliureas.

La habilidad del isocianato para dar la amina o la poliurea depende de la velocidad de reacción de la amina o el agua con el isocianato.

#### Reacción con Alcoholes Monohídricos

Los alcoholes primarios y secundarios reaccionan con los isocianatos para dar monouretanos o diuretanos.

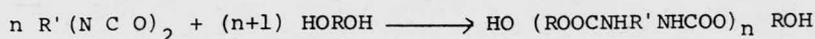


Los alcoholes insaturados también reaccionan, los productos son interesantes homopolímeros y copolímeros.

Con alcoholes terciarios un producto similar se forma siendo la reacción muy lenta y se requieren elevadas temperaturas, causando deshidratación.

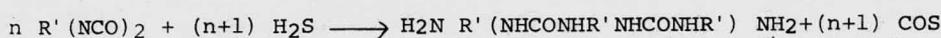
#### Reacciones con Alcoholes Polihídricos

El mayor producto de isocianatos con glicoles, es un poliuretano, donde los grupos terminales dependen del producto que estén en exceso.



### Reacciones con ácido Sulfhídrico y Mercaptanos

Poliureas y sulfuros de carbonilo se producen en la reacción del ácido sulfhídrico e isocianatos.



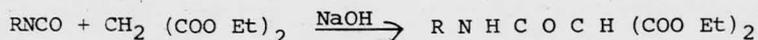
Los mercaptanos reaccionan similarmente con los isocianatos, pero a una velocidad más baja.



### Reacciones con compuestos que contienen grupos metilénicos Activos

Las amidas se producen cuando compuestos que contienen grupos metilénicos activos como enoles, reaccionan con los isocianatos.

Esta reacción en general, requiere la presencia de una base fuerte como el hidróxido de sodio.



### Reacciones con Haluros de Hidrógeno y Cianuros de Hidrógeno

Los haluros de hidrógeno y cianuro de hidrógeno reaccionan fácilmente con los isocianatos para dar monohaluros de carbonilo o mononitrilo de oxamilo respectivamente.



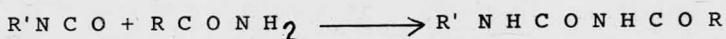
Cont...



Estos productos son inestables al calor.

#### Reacciones con amidas

Las amidas reaccionan con los isocianatos para producir acil ureas.

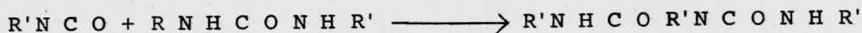


Las acil ureas son capaces de reaccionar posteriormente con los isocianatos para formar polímeros de alto grado de cruzamiento molecular.

Las sulfonamidas reaccionan de una manera similar para producir sólidos infusibles y resinas.

#### Reacciones con Ureas

Las ureas reaccionan con los isocianatos para producir biuret.



#### Reacciones con Uretanos

Alofanato es el producto de la reacción entre un isocianato y un uretano.



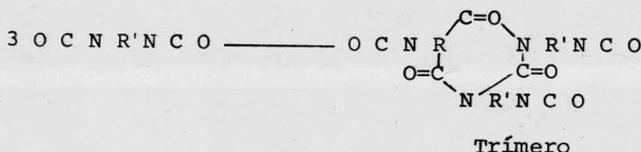
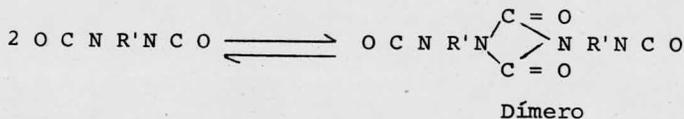
#### Reacción de Polimerización

Una reacción común de los isocianatos es la formación de dímeros y trímeros.

Cont...

Estas reacciones son fácilmente efectuadas con calentamiento y en presencia de catalizadores. Ejemplos de estos últimos, son los peróxidos de hierro, piridina, fenolatos, carbonato de calcio, trietilamina, ácido oxálico, reactivo de Grignard y trialquilfosfinas. Algunos dímeros se forman a temperatura ambiente.

La formación del dímero es una reacción en equilibrio y a altas temperaturas se favorece el monómero.



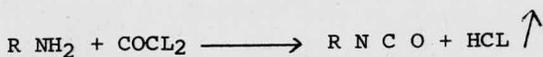
Los cloruros de fósforo y los cloruros de acilos son los más idóneos como inhibidores para estas reacciones.

### Obtención de Isocianatos

Una de las formas que se utilizan para obtener isocianatos es la fosgenación de aminas, basada en el método de Hentschel que se muestra en la Tabla I para la producción de isocianatos o diisocianatos, pueden usarse aminas primarias o diaminas y con menor frecuencia son empleadas también triaminas y poliaminas.

Cont...

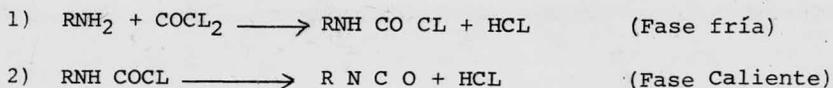
La amina puede ser alifática, aromática o cicloalifática y puede contener grupos substituyentes, tales como; nitro, alkoxy, alcano, halógeno o ester, que no reaccionen con los isocianatos. No afecta para la obtención del isocianato que las aminas contengan átomos diferentes, como nitrógeno, azufre y oxígeno interrumpiendo la cadena de carbonos. Las aminas aromáticas o cicloalifáticas pueden ser de anillo substituído. Se debe tomar en cuenta desde luego que la amina con la que se va a trabajar no sufra cambios en sus propiedades en las condiciones de operación. La reacción general para una amina y el fosgeno, es la siguiente:



La reacción, sin embargo, no procede de forma tan directa como lo indica esta representación. Si se toman pocas precauciones, el isocianato formado puede reaccionar con algunas de las aminas iniciales y formar una urea substituída, como se indicó en la reacción correspondiente. Para evitar reacciones laterales, se han propuesto varios procesos.

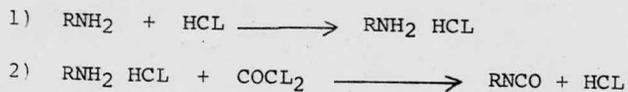
Uno de estos procesos, consiste en llevar a cabo la reacción en dos fases, la primera es realizada en frío a 0°C y la temperatura se incrementa hasta alcanzar la del medio ambiente, con la formación de un cloruro de carbamida y desprendimiento de HCL que tiende a reaccionar con el grupo amino libre y a protegerlo de reacciones laterales.

Posteriormente, la mezcla es calentada para convertir el cloruro de carbamida en el isocianato deseado a una temperatura de 16°C. Estos dos pasos pueden representarse como se muestra a continuación:



Este proceso de dos etapas tiene la desventaja de ser lento y de requerir un control cuidadoso de temperaturas para evitar reacciones indeseables.

Otro método conocido para eliminar reacciones laterales en las que interviene la amina, es hacer que reaccione la amina primero en frío con ácido clorhídrico en forma gaseosa, para formar el clorhidrato con fosgeno, en presencia de un solvente. El clorhidrato es comúnmente preparado en forma de una gruesa masa de cristales que es difícil de agitar, a menos que grandes cantidades de solventes sean empleadas, esto requiere el uso de equipos con gran capacidad para poder usar cantidades elevadas de solvente y evitar la formación de una gruesa capa de cristales que hace imposible la agitación y por lo tanto la reacción con fosgeno procede de una forma lenta y a una velocidad recomendable.



Cont...

Ha sido propuesto también llevar a cabo la reacción entre una amina y el fosgeno en fase vapor. Aunque este proceso es operable aparentemente con aminas simples, no resulta práctico para diaminas o poliaminas que tienen una tendencia a la formación de subproductos indeseables, mucho mayor a la de las monoaminas.

Conforme a lo expuesto anteriormente, el proceso más adecuado para la obtención de isocianatos es el de la formación del clorhidrato de amina, ya que no resulta tan crítico en lo que respecta al control de temperatura y registra los mayores rendimientos de conversión debido a que tiene menor proporción de reacciones laterales.

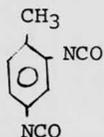
#### Características del Toluen Diisocianato

En el campo de los polímeros sólo los di y poliisocianatos son de interés, ya que son capaces de construir unidades reactivas de materiales de alto peso molecular. Las aplicaciones de los di y poliisocianatos han encontrado un gran desarrollo debido a lo anterior. Los compuestos aromáticos reactivos, lógicamente han recibido una mayor atención, como en el caso de Toluen diisocianato.

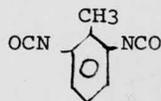
El Toluen diisocianato (TDI) es un líquido transparente, incoloro, con un olor característico picante e irritante.

Cont...

Tiene dos isómeros principales, son:



2-4 Toluen Diisocianato



2-6 Toluen Diisocianato

Debido a que en su estructura se encuentran dos grupos isocianatos, reaccionan fácilmente con cualquier compuesto que tenga un hidrógeno activo.

De los isómeros del Toluen diisocianato, la reactividad del 2-4 TDI es mayor que la del 2-6 TDI; esta diferencia de reactividad es atribuida a diferencia en los electrones de los orbitales "d" en las moléculas y a efectos estéricos.

Dentro del 2-4, el grupo isocianato en la posición para respecto al grupo metilo es aproximadamente 10 veces más reactivo que el grupo isocianato en la posición orto, esto es, a la temperatura ambiente. Sin embargo, la relativa actividad del grupo orto aumenta con la temperatura, por ejemplo: a 90°C, el grupo isocianato en la posición para es solamente siete veces más activo que en la posición orto.

En lo referente a la volatilidad de los diisocianatos, tomando en cuenta que son irritantes de la piel, los ojos y el aparato respiratorio, los diisocianatos alifáticos, tales como el hexametileno

Cont...

diisocianato son mucho más volátiles que el Toluen diisocianato, y como consecuencia mucho más irritantes. La mayoría de los diisocianatos aromáticos son menos volátiles que el TDI y por lo tanto menos irritantes.

En la Tabla II se encuentran las propiedades físicas y características comerciales del Toluen diisocianato.

#### Aplicaciones del Toluen Diisocianato

En México la principal aplicación que tiene el Toluen diisocianato se encuentra en la rama de los uretanos.

Las espumas de poliuretano son el producto de una reacción de polimerización entre una resina polihidroxilada, que generalmente es un poliol y un isocianato, los cuales por acción de un catalizador, un agente surfactante y un agente de soplado forman un plástico celular.

Una de las formas de producción de espumas celulares de poliuretano es aquella en que reacciona Toluen diisocianato con un alcohol di o polifuncional, lo que dá por resultado la formación del poliuretano medular del polímero. Exceso de TDI es usado comúnmente en el lugar de reacción, junto con agua para la formación de dióxido de carbono y aminas. La amina reacciona fácilmente con el TDI introduciendo grupos urea a la cadena de polímeros.

Estos grupos urea y en una menor extensión grupos uretano, pueden reaccionar con exceso de TDI para hacer uniones o eslabones cruzados a la cadena de polímeros. Un compuesto inerte, volátil (fluorocarbón o clorocarbón), sirve como la fuente de gas para formar la espuma. Al ser alcanzado el grado deseado de uniones cruzadas, se detiene la reacción por medio del uso de polioles de variados grupos de funcionalidad.

Las principales reacciones que se efectúan durante la formación de las espumas de poliuretano son:

- |                                      |   |
|--------------------------------------|---|
| 1. Diisocianato + Polialcohol        | Agente de soplado<br>-----▶<br>Catalizador<br>Surfactante |
| Poliuretano + Calor                  |   |
| 2. Diisocianato + Agua               | -----▶ Amina + CO <sub>2</sub> ↑                          |
| 3. Diisocianato + Amina              | -----▶ Urea disubstituída                                 |
| 4. Diisocianato + Urea disubstituída | -----▶ Biuret   |

La reacción fundamental (reacción 1) es exotérmica y el calor generado puede ser usado para vaporizar una fuente de soplado para producir espuma. El CO<sub>2</sub> desprendido por la reacción del diisocianato y el agua puede ser usado para expandir la espuma, ya sea sólo o en combinación del agente de soplado.

Cont...

Para catalizar el sistema, se emplean dos tipos de catalizadores; aminas terciarias y compuestos organo estanosos, los más frecuentes son la trietilendiamina (dabco) y el octato de plomo.

Estas espumas se caracterizan por su estabilidad estructural, baja conductividad térmica, resistencia ala flama, adhesión a las superficies, fácil fabricación y bajo capital de inversión para su producción.

Debido a la diferencia en la reactividad de los isómeros, las diferentes mezclas de ellos, tienen propiedades considerablemente diferentes, lo cual ha hecho posible utilizar los poliésteres de varios grados de ramificación y de esta manera obtener polímeros de uretano de propiedades variadas. Tres combinaciones de 2-4 y 2-6 Toluen diisocianato son comercialmente importantes, los porcentos que a continuación se dan, son todos en peso; una mezcla de  $80 \pm 2\%$  de 2-4 TDI y  $20 \pm 2\%$  de 2-6 TDI. Una mezcla de  $65 \pm 3\%$  de 2-4 TDI y  $35 \pm 3\%$  de 2-6 TDI y la tercera es de 2-4 TDI prácticamente puro, conteniendo menos de 2.5% de 2-6 TDI. Denominadas estas combinaciones comercialmente como 80, 65 y 100 respectivamente.

Atendiendo la anterior combinación, algunas de las aplicaciones del TDI son: Para el 80, espumas flexibles de poliuretano, para el 65, espumas rígidas y flexibles, sustancias intermediarias, para el 100, espumas, pinturas, adhesivos y elastómeros.

Cabe hacer la aclaración que esta clasificación no es completamente estricta, ya que se pueden utilizar en algunos casos en forma diferente a la indicada.

Tanto el TDI como los diisocianatos en general se utilizan como adhesivos. El hule puede ser unido a sustratos polares con la ayuda de los isocianatos. Los productos de condensación de isocianatos con polímeros que llevan grupos carboxilo u otros que reaccionan con los isocianatos han sido empleados como adhesivos al estar en presencia de sustancias elastómeras. Tales adhesivos pueden ser usados para unir cuerdas de refuerzo a la armazón de hule en la manufactura de llantas. Los diisocianatos son útiles también como agentes de uniones cruzadas en la preparación de compuestos plásticos que tengan átomos de hidrógeno activo.

Otros de los usos del TDI son:

Espumas de resinas alquidálicas, producidas por resinas alquidálicas, Toluen Diisocianato, resinas termoplásticas, catalizadores, como el peróxido de benzoilo y aditivos, tales como el dialil fenil fosfonato, estas espumas se utilizan para aisladores térmicos.

Producción de carbamatos, en donde una mol de 2-4 TDI se hace reaccionar con tres moles de fenol, con o sin el uso de fenol etil como solvente. También se usa para hacer poliésteres modificados.

Para fabricación de grasas lubricantes repelentes al agua, no jabonosas.

Elastómeros de poliuretano sólido y líquido se producen de diisocianato y poliésteres lineales, tales como el adipato de etileno. Estos elastómeros están recibiendo una gran atención, debido a su resistencia y excelente abrasión, resistencia a los aceites y gasolina, etc. Con la adecuada selección de cantidad y tipo de diisocianato por polímero un amplio rango de propiedades es posible en los elastómeros de poliuretano.

Pinturas basadas en la reacción de productos de diisocianatos y poliésteres no modificados, preparados de alcoholes con tres grupos hidroxilos, tal como el trimetilol propano exhiben una formidable adhesión a numerosos materiales, incluyendo plásticos, materiales ligeros, materiales de construcción y fibras sintéticas. Estas pinturas se curan a bajas temperaturas para producir acabados resistentes al agua y a los solventes químicos.

Para la formación de Hylene Tv, se utiliza 2-4 TDI con agua en relación molar 2 a 1. Este producto es un sólido de alto punto de fusión (172 a 178°C) relativamente no irritante y manejable en forma ordinaria, usado como vulcanizador de elastómeros de uretano.

Los nombres comerciales del Toluen diisocianato son:

Acido isocianato 4 metil-m-fenil éster.

4 metil-m-fenilendiisocianato.

2-4 tolylen diisocianato.

m-tolylen diisocianato.

Hylene<sup>R</sup> T.

Hylene<sup>R</sup> T isocianato orgánico

Mondura<sup>R</sup> TDS

Nacconate<sup>R</sup> 100

TDI

La fórmula condensada del TDI es:



TABLA I

## PREPARACION DE ISOMEROS DEL TOLUENO DIISOCIANATO

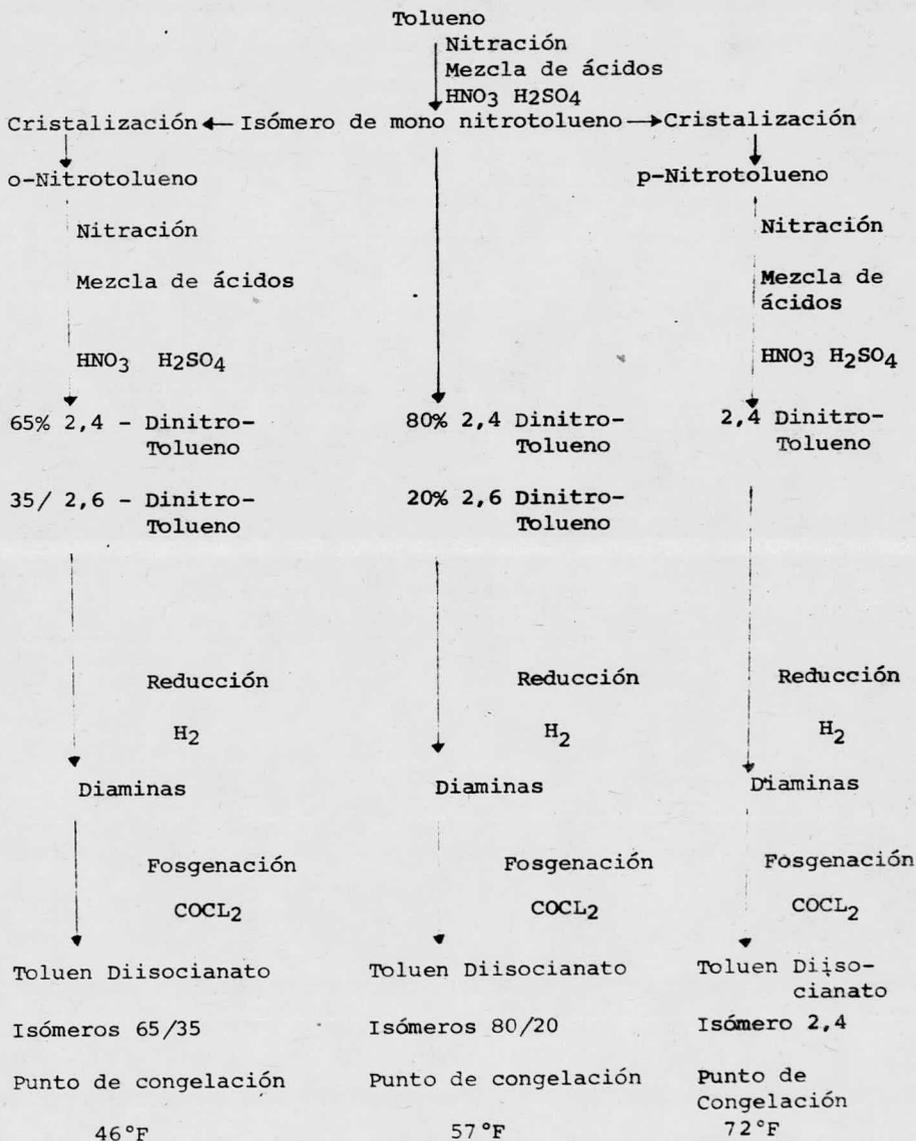


TABLA 2

PROPIEDADES Y CARACTERISTICAS COMERCIALES DEL TDI

	Relación de isómeros		
		80 % 2,4	65% 2,4
	100% 2,4	20 % 2,6	35% 2,6
Estado Físico	Líquido	Líquido	Líquido
Color	Blanco cristalino	amarillo	pálido
Punto de Ebullición (°C) 760 mm	251	251	251
Punto de inflamación(°C)	132	132	132
Punto de Fusión (°C)	19.5-21,5	11,5-13,5	3.5-5,5
Calor de evaporación	144.9 BTU/lb	(120, 180°C)	
Higroscopía	Reacciona con el agua con desprendimiento de CO <sub>2</sub>		
Olor	Irritante y Picante		
Gravedad específica (25°C/15.5°)	1.22	1.22	1.22
Calor específico (77-167°F)	0.375 BTU/lb/°F		
Densidad de vapor (aire 1)	6.0	6.0	6.0
Presión de vapor (MM) (20°C)	0.01	0.01	0.01
Viscosidad (50°C)	1.45 centistokes		
Solubles en:	Acetona, benceno eter, cloro benceno, tetracloruro de carbono, nitro benceno y kerosina		
Punto de solidificación °C	21	9-12	5

## CAPITULO II

### ANALISIS DEL MERCADO

El objetivo de este capítulo es mostrar la demanda del toluen diisocianato, estudiar el comportamiento que ha tenido y en base a esto determinar la tendencia del incremento de consumo en los próximos años.

Hasta la fecha no existe en México planta alguna que fabrique el toluen diisocianato y por lo tanto la demanda nacional se ha satisfecho a base de importaciones, siendo en los últimos años los Estados Unidos de América y la República Federal de Alemania los principales abastecedores de este producto.

Para efectuar el presente estudio sobre la demanda del toluen diisocianato, se tomaron en cuenta las cantidades reportadas en los anuarios estadísticos de importación y exportación de la Secretaría de Industria y Comercio y de la Asociación Nacional de la Industria Química, estos datos se presentan en la Tabla I.

La cantidad observada en el año de 1970 en comparación a los años de 1969 y 1971 es muy elevada, esto se debió a un estado

de escasez mundial del TDI y por lo tanto hubo las denominadas compras de pánico, con la consiguiente baja de la cantidad importada en 1971, debido a exceso de inventario por parte de los consumidores y el aumento que se manifiesta en 1972 es consecuencia del crecimiento normal que presenta la demanda actual.

Es de importancia hacer notar que el empleo principal del toluen diisocianato en México se encuentra en la industria del poliuretano, dentro de esta rama se puede aumentar bastante el consumo de TDI al comercializarse el uso de los colchones de espuma de poliuretano. Debido a lo mencionado anteriormente no es probable el decremento del mercado del TDI, esto se corrobora también con el hecho de que el toluen diisocianato está considerado actualmente en su etapa de despegue y se espera un incremento muy rápido en el consumo para los años venideros.

Con el fin de determinar la tendencia del toluen diisocianato en los próximos años, en base a los datos investigados se utilizaron los siguientes métodos: Regresión Lineal, Regresión Múltiple, de Gompertz, Logístico y Exponencial.

Las formas de cálculo y las consideraciones de cada modelo se muestran a continuación:

Método de Regresión Lineal:

Siendo Y = Kg de TDI/año (valores de las importaciones)  
 X = Número de años (1 a 9)  
 N = Número de datos = 9

Calcular

$\sum X$ ,  $\sum Y$ ,  $\sum XY$ ,  $\sum X^2$ ,  $\bar{X}$ ,  $\bar{Y}$

$$B = \frac{\sum XY - (\sum X)(\sum Y)/N}{\sum X^2 - \frac{(\sum X)^2}{N}}$$

$$a = \bar{Y} - B\bar{X}$$

Los valores de  $a$  y B obtenidos son:

$$a = 85242.5$$

$$B = 230251.3$$

La ecuación general de este modelo es:

$$Y' = a + BX$$

Siendo Y' los valores calculados para la demanda del TDI por año y X el número de años de 1 a 18.

Substituyendo  $a$  y B la ecuación que corresponde a nuestro modelo es:

$$Y' = 85242.5 + 230251.3 X$$

y los datos calculados se muestran en la Tabla II columna A.

La representación gráfica de los resultados se muestra en la Figura II-1

Método de Regresión Múltiple:

Siendo:  $Y$  = Kg de TDI/año  
 $X$  = Número de años (0 a 7)  
 $N$  = Número de datos disponible = 8

Calcular:

$$\Sigma Y, \Sigma X, \Sigma X^2, \Sigma X^3, \Sigma X^4, \Sigma XY \text{ y } \Sigma X^2 Y$$

Substituir en el sistema siguiente de ecuaciones y obtener los valores de  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  que son las constantes de la ecuación general.

$$\Sigma Y = N\alpha + \beta \Sigma X + \gamma \Sigma X^2$$

$$\Sigma XY = \alpha \Sigma X + \beta \Sigma X^2 + \gamma \Sigma X^3$$

$$\Sigma X^2 Y = \alpha \Sigma X^2 + \beta \Sigma X^3 + \gamma \Sigma X^4$$

Para la estimación de la demanda en el futuro se utiliza la siguiente fórmula:

$$Y = \alpha + \beta X + \gamma X^2$$

Substituyendo los valores de  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  la ecuación resultante es:

$$Y = 420,334.416 + 163,713.131 X + 7500.5 X^2$$

Utilizando valores para  $X$  de 0 a 17 se obtienen los valores reportados en la Tabla II columna B. La representación gráfica de estos datos se encuentran en la Figura II-2.

Método de Gompertz:

Siendo Y = kg de TDI/año

Obtener logaritmo de Y, dividir los datos por parejas y calcular la diferencia de cada pareja de datos ( $S_1$ ,  $S_2$  y  $S_3$ ). Posteriormente se utilizan las siguientes fórmulas:

$$d_1 = S_2 - S_1$$

$$d_2 = S_3 - S_2$$

$$c = \left( \frac{d_2}{d_1} \right)^{0.5}$$

$$\text{Log } b = \frac{d_1 (c-1)}{(c^2 - 1)^2}$$

$$\text{Log. } a = \frac{1}{m} \left( S_1 - \frac{d_1}{c^2 - 1} \right)$$

Los valores que resultan de la substitución de los datos de importación son:

$$c = 0.704$$

$$\text{Log. } b = 0.709$$

$$\text{Log. } a = 6.41808$$

Para la estimación de la demanda del mercado se emplea la siguiente fórmula:

$$Y = \text{Antilog} \left[ (\log b) c^x + \log a \right]$$

Para nuestro caso la fórmula que representa el modelo es:

$$Y = \text{antilog} \left[ (-0.709) 0.704^x + 6.41808 \right]$$

Siendo Y los kg de TDI de consumo y X el número de años (0 a 15).

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla II columna C.  
La gráfica de estos datos es la figura II-3.

Método Logístico:

Siendo Y - kg de TDI/año importados

Calcular  $\frac{10^9}{Y}$ , separar los resultados en parejas y sumarlas  
obteniendo  $S_1$   $S_2$  y  $S_3$ , posteriormente calcular:

$$d_1 = S_2 - S_1$$

$$D_2 = S_3 - S_2$$

$$C = \left( \frac{d_2}{d_1} \right)^{0.5}$$

$$b = \frac{d_1 (C-1)}{(C^2 - 1)^2}$$

$$a = \frac{1}{2} \left[ S_1 - \frac{d_1}{C^2 - 1} \right]$$

Los valores obtenidos son:

$$C = 0.522$$

$$b = 1391$$

$$a = 467$$

La ecuación que representa este modelo es:

$$\frac{10^9}{Y} = a + b C^x$$

Substituyendo, resulta:

$$\frac{10^9}{Y} = 467 + 1391 (0.522^x)$$

Siendo X el número de años teniendo numeración progresiva de 0 a 15. Los datos resultantes se muestran en la Tabla III columna A y la gráfica correspondiente es la figura II-4.

Método Exponencial:

Siendo: Y = Cantidad (kg) de TDI/año  
 X = Número de años (0 a 7)  
 N = Número de datos disponible = 8

Calcular:

$$Y^1 = \log Y, \sum X, \sum X^2, \sum XY^1; \bar{X}, \bar{Y}^1, \sum (X-\bar{X})^2 \text{ y } \sum (Y^1 - \bar{Y}^1)^2$$

Substituir en:

$$B = \frac{\sum XY^1 - (\sum X)(\sum Y^1)/N}{\sum X^2 - (\sum X)^2/N}$$

$$A = \bar{Y}^1 - B \bar{X}$$

Los valores de A y B son:

$$A = 5.673$$

$$B = 0.092$$

La ecuación general para predecir la demanda es:

$$Y'' = A + BX = 5.673 + 0.092 X$$

en donde Y = antilog Y'' = Demanda de TDI/año. Siendo X el número de año con numeración de 0 a 17. Los resultados de este modelo se muestra en la Tabla III columna b y la gráfica correspondiente es la figura II-5.

ANALISIS DE LOS MODELOS

Al efectuar el análisis de modelos, se observa que tanto el Logístico como el de Gompertz señalan la vida del TEI como si estuviera en su etapa de maduración, el de Regresión Lineal tiene un coeficiente de correlación muy bajo (0.88) al mismo tiempo manifiesta un crecimiento anual de 7.78%, que no es congruente con el porcentaje de crecimiento de la industria del poliuretano. Como los más idóneos se consideran el método Exponencial y el de Regresión Múltiple, que tienen como características las siguientes:

	<u>Exponencial</u>	<u>Regresión Múltiple</u>
Coefficiente de correlación	0.91	0.905
Porcentaje de crecimiento anual	23.3	9.6
Consumo estimado para 1893 (toneladas)	22,550	6,095

Debido a que los porcentajes que se obtienen son muy diferentes y totalmente opuestos y el coeficiente de correlación en cada caso es muy bajo, o sea que matemáticamente no se ha obtenido una consistencia en los resultados, como consecuencia de las variaciones excesivas que presentan los datos de importación,

se ha considerado que lo más adecuado será considerar un incremento anual que vaya de acuerdo con el desarrollo que tiene la industria del poliuretano que es aproximadamente de un 15% anual.

Tomando en cuenta lo anterior, el consumo estimado para el toluen diisocianato viene dado en la tabla IV y representado en la figura II-6.

La fracción arancelaria del toluen diisocianato es 29.30 A008. Los precios del toluen diisocianato varían al ser diferentes las relaciones de isómeros, los precios de venta son \$9.90/kg para el tipo 80; \$11.60/kg para el tipo 65; y \$18.40/kg para el tipo 100.

Para la localización de la planta del toluen diisocianato se tomaron en cuenta los siguientes factores, considerados como los más determinantes:

Centros de consumo del toluen diisocianato.

Centros de consumo del ácido clorhídrico.

Proveedores de materias primas.

Vías de comunicación de los proveedores a la

Planta y de ésta a los consumidores.

Siguiendo el orden arriba mencionado: Los centros de consumo más importante para el toluen diisocianato se localizan en el Distrito Federal y en el Estado de México.

Existe también un mercado para el TDI en Guadalajara y Monterrey, pero éste es menor con respecto al mencionado al principio. El ácido clorhídrico en solución al 35% es muy utilizado en la industria química por lo que no se considera como un factor decisivo. Los proveedores de las materias primas son los siguientes:

<u>Materia Prima</u>	<u>Proveedor Nacional</u>
Tolueno	PEMEX
Acido Sulfúrico	IRSA
Nitrógeno	AGA MEX
Hidrógeno	AGA MEX
Cloro	PENNWALT, S. A.
Monóxido de carbono	AGA MEX
Acido Nítrico	CYDSA
Orto-dicloro Benceno	PEMEX

El carbón activado, paladio en carbón y acitonitrilo son productos de importación que se obtienen en Estados Unidos de Norteamérica, Inglaterra y República Federal de Alemania. Deberá existir comunicación ferroviaria y por carretera con la Planta con la finalidad de facilitar tanto la recepción de materias primas como la distribución de los productos terminados.

Por lo expuesto, se ha considerado como el lugar más adecuado para la instalación de la fábrica el Estado de México, de preferencia al Norte del mismo, en donde se encuentran varios centros industriales que facilitarán la construcción y el funcionamiento de la planta.

TABLA IIMPORTACIONES DE TOLUEN DIISOCIANATO

<u>Año</u>	<u>Kilogramo Legal</u>	<u>Precio (pesos)</u>
1964	524,000.00	7,871,695.00
1965	540,234.00	7,846,326.00
1966	617,879.00	5,282,955.00
1967	730,641.00	5,720,137.00
1968	1,224,446.00	8,055,653.00
1969	1,433,474.00	13,966,755.00
1970	2,336,747.00	26,414,853.00
1971	1,492,077.00	15,055,336.00
1972	2,528,995.00	20,441,636.00

TABLA II

MODELOS DE REGRESION LINEAL (A)

REGRESION MULTIPLE (B)

GOMPERTZ (C)

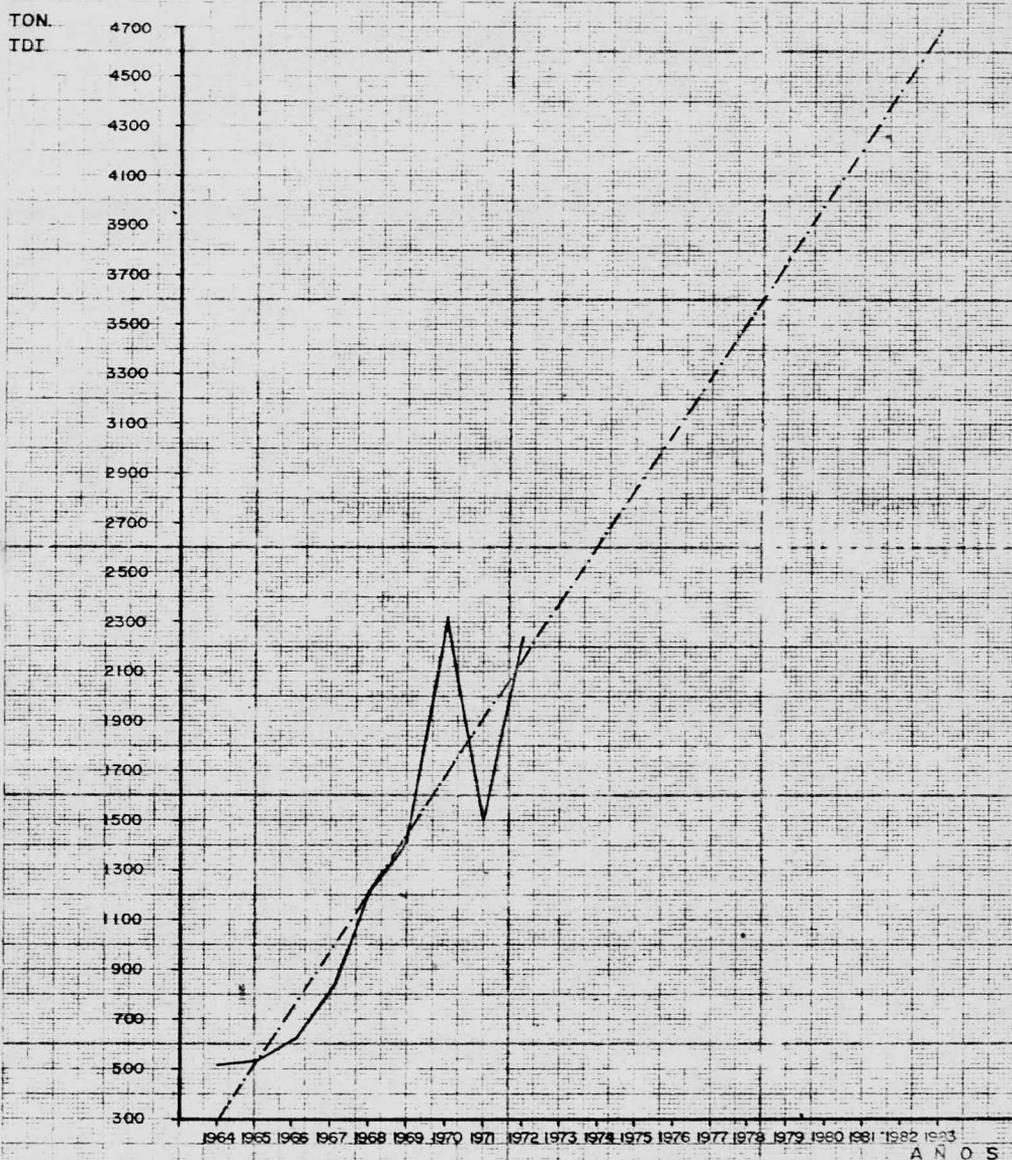
Año	<u>II A</u> Kg	<u>II B</u> Ton	<u>II C</u> Kg
1964	315,494	375	
1965	545,745	559	
1966	775,996	756	511,790
1967	1,006,248	967	835,600
1968	1,236,449	1,190	1,166,000
1969	1,466,750	1,427	1,491,000
1970	1,697,002	1,676	1,754,200
1971	1,927,253	1,938	1,974,000
1972	2,157,504	2,213	2,147,000
1973	2,387,755	2,502	2,277,500
1974	2,618,007	2,803	2,373,000
1975	2,848,258	3,117	2,443,000
1976	3,078,509	3,444	2,494,300
1977	3,308,761	3,784	2,530,400
1978	3,539,012	4,137	2,556,000
1979	3,769,263	4,513	2,574,400
1980	3,999,515	4,882	2,587,400
1981	4,229,766	5,273	2,596,600

TABLA IIIMODELOS LOGISTICO (A) Y EXPONENCIAL (B)

<u>Año</u>	<u>III A</u> Kg	<u>III B</u> Ton
1964		472
1965		578
1966	539,000	709
1967	839,000	868
1968	1,181,000	1,064
1969	1,501,000	1,303
1970	1,743,000	1,596
1971	1,915,000	1,955
1972	1,999.500	2,395
1973	2,079,000	2,943
1974	2,110,000	3,590
1975	2,123,000	4,440
1976	2,132,000	5,400
1977	2,136,000	6,610
1978	2,138,700	8,120
1979	2,140,000	9,990
1980	2,140,400	12,300
1981	2,140,900	14,900

TABLA IVCRECIMIENTO DE 15% ANUAL

<u>Año</u>	<u>Toneladas</u>
1964	730
1965	860
1966	1,010
1967	1,190
1968	1,400
1969	1,658
1970	1,950
1971	2,295
1972	2,700
1973	3,100
1974	3,560
1975	4,100
1976	4,700
1977	5,300
1978	6,100
1979	7,000
1980	8,050
1981	9,300



DATOS CALCULADOS ———  
 DATOS REALES ———

FACULTAD DE QUIMICA UNAM  
 MODELO DE REGRESION LINEAL  
 FIGURA II-1  
 HECTOR ABEL ARTEAGA SUAREZ  
 FERNANDO SADA RAMOS

TON  
TDI

3900  
3700  
3500  
3300  
3100  
2900  
2700  
2500  
2300  
2100  
1900  
1700  
1500  
1300  
1100  
900  
700  
500

1966 1967 1968 1969 1970 1971 1972 1973 1974 1975 1976 1977

AÑOS

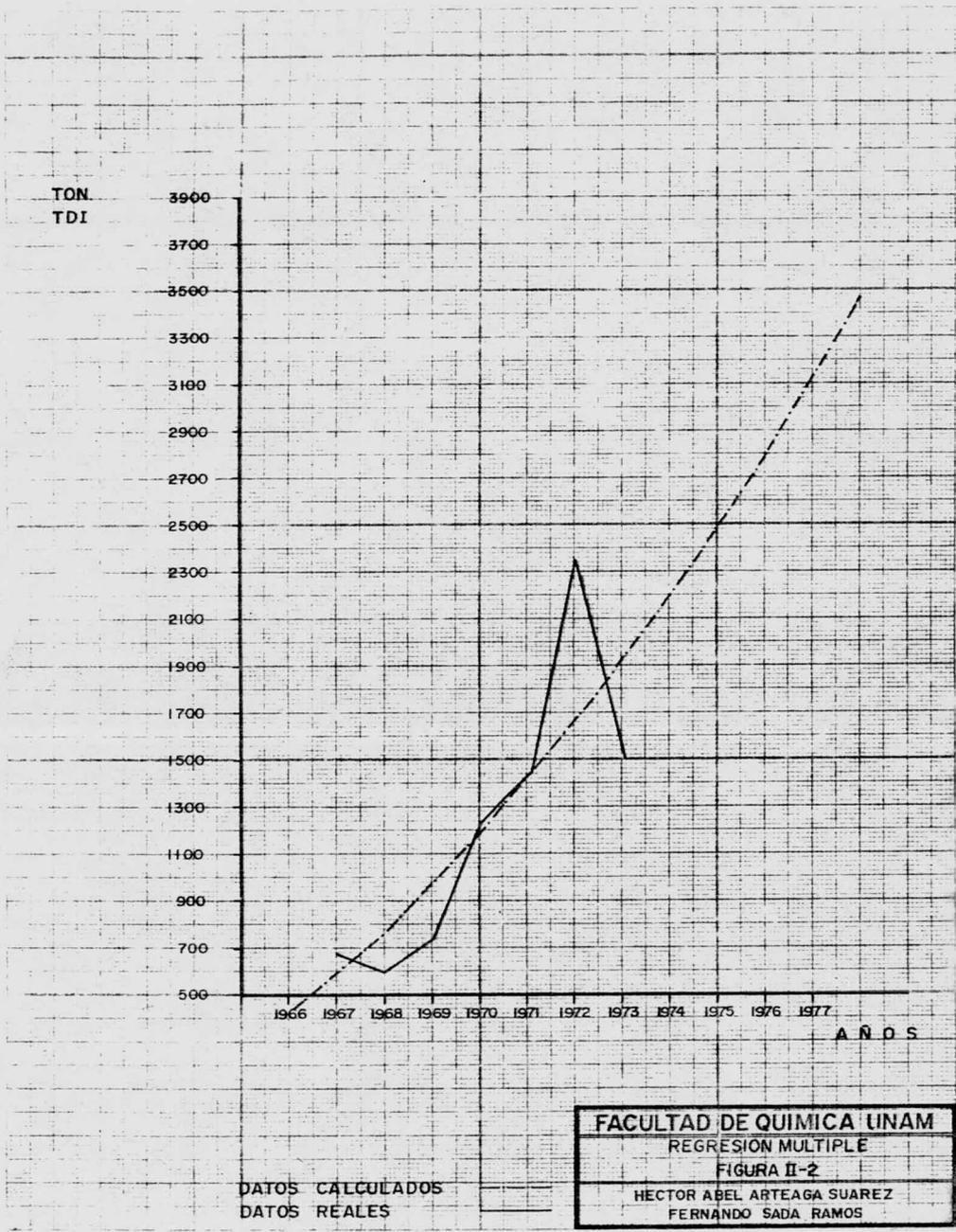
DATOS CALCULADOS  
DATOS REALES

FACULTAD DE QUIMICA UNAM

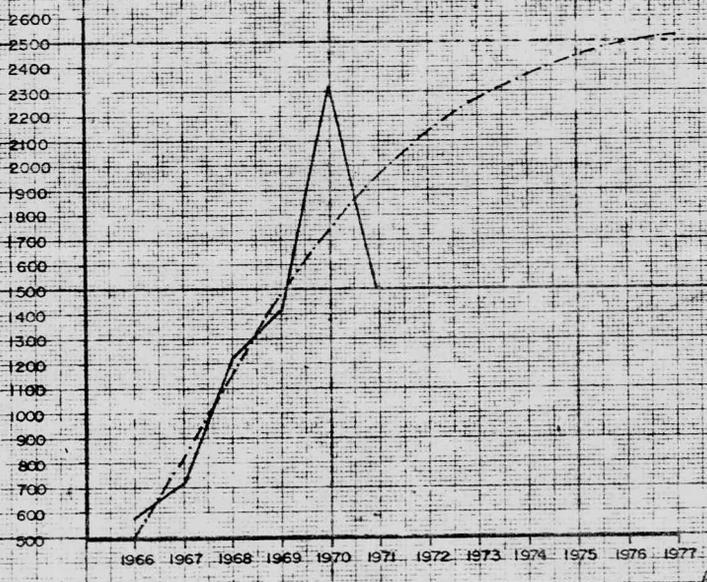
REGRESION MULTIPLE

FIGURA II-2

HECTOR ABEL ARTEAGA SUAREZ  
FERNANDO SADA RAMOS



TON  
TDI



DATOS CALCULADOS  
DATOS REALES

FACULTAD DE QUIMICA UNAM  
MODELO DE GOMPERTZ  
FIGURA II-3  
HECTOR ABEL ARTEAGA SUAREZ  
FERNANDO SADA RAMOS

TON.  
IDI

2600  
2500  
2400  
2300  
2200  
2100  
2000  
1900  
1800  
1700  
1600  
1500  
1400  
1300  
1200  
1100  
1000  
900  
800  
700  
600  
500

1966 1967 1968 1969 1970 1971 1972 1973 1974 1975 1976 1977

AÑOS

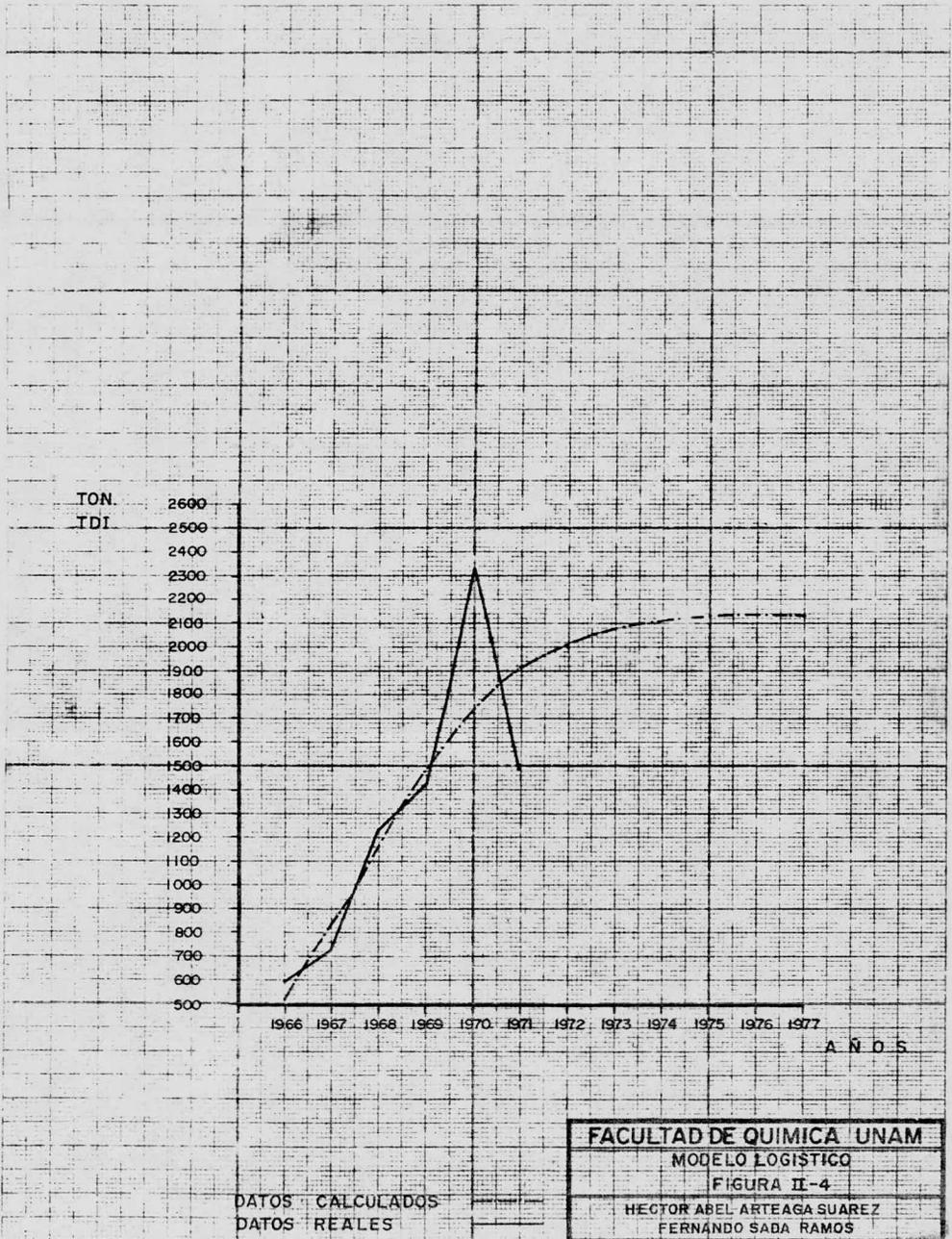
DATOS CALCULADOS  
DATOS REALES

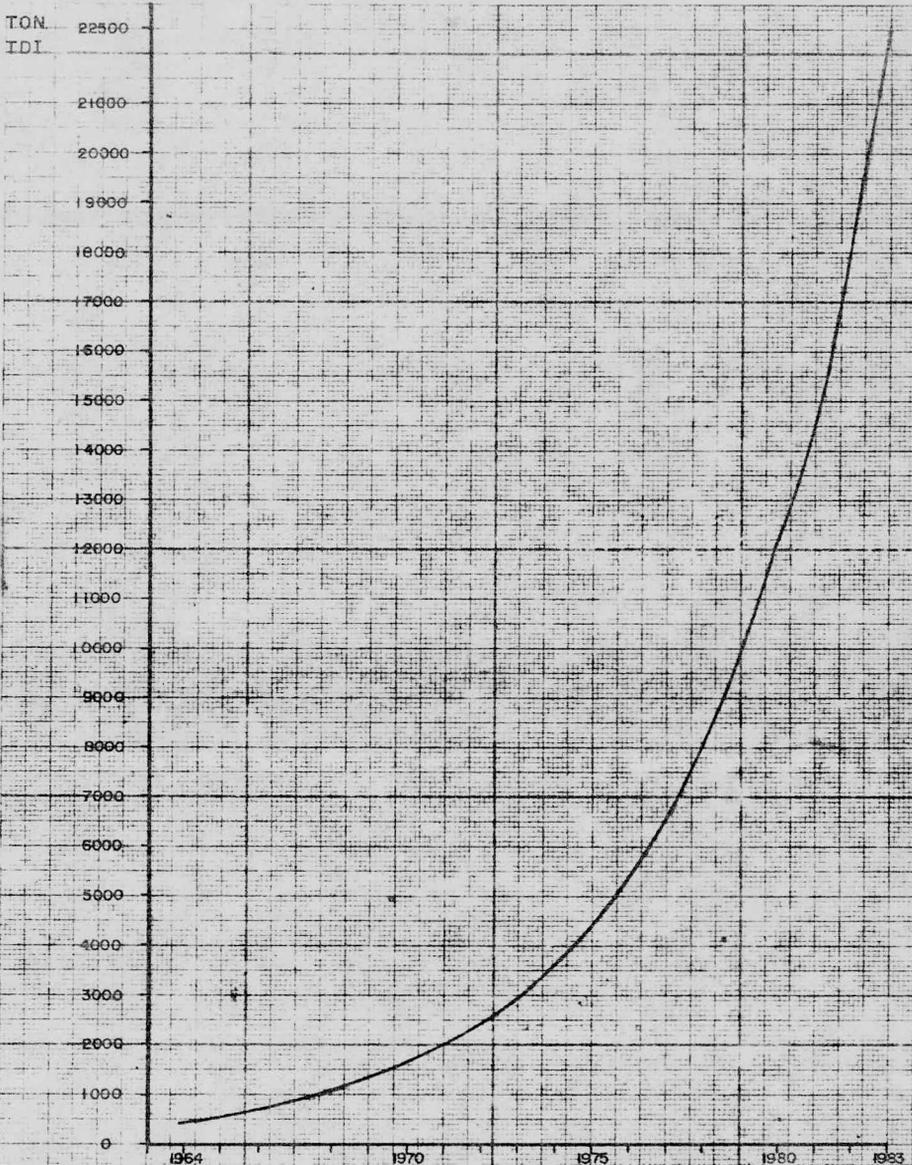
FACULTAD DE QUIMICA UNAM

MODELO LOGISTICO

FIGURA II-4

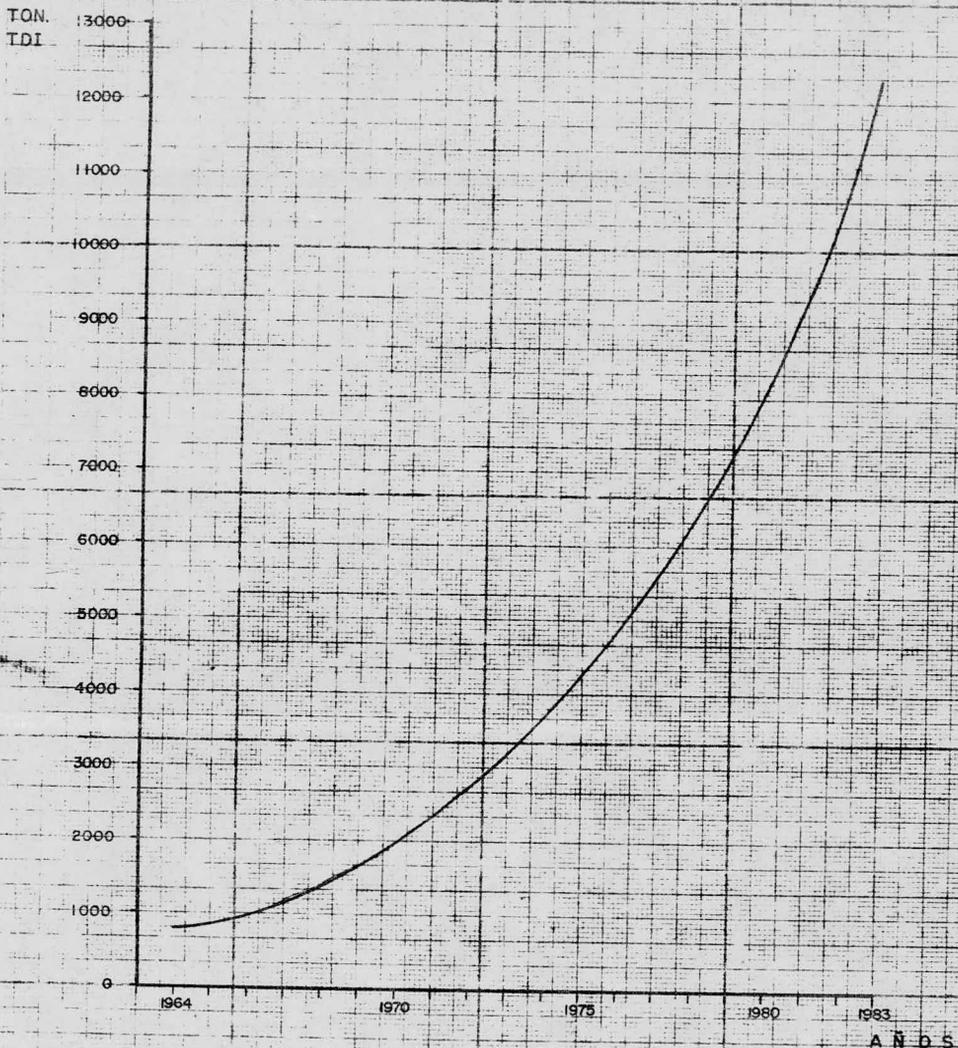
HECTOR ABEL ARTEAGA SUAREZ  
FERNANDO SADA RAMOS





A N O S

FACULTAD DE QUIMICA UNAM  
 MODELO EXPONENCIAL  
 FIGURA II-5  
 HECTOR ABEL ARTEAGA SUAREZ  
 FERNANDO SADA RAMOS



<b>FACULTAD DE QUIMICA UNAM</b>
INCREMENTO DEL 15% ANUAL FIGURA II-6
HECTOR ABEL ARTEAGA SUAREZ FERNANDO SADA RAMOS

### CAPITULO III

#### ANALISIS Y DESCRIPCION DEL PROCESO

En este capítulo se describirán brevemente los procesos más comerciales para la obtención de los isocianatos y se efectuará un análisis de los mismos, con la finalidad de seleccionar aquel que presente las mejores ventajas en cuanto a rendimientos, calidad del producto final y mínimo equipo, para la producción del toluen diisocianato.

Como se mencionó en el primer capítulo, el método más conocido y eficaz para la producción de isocianatos es la reacción de la amina con el fosgeno, que recibe el nombre de fosgenación.

Existen muchas variantes a este proceso la razón de dichas variantes es que bajo muchas condiciones la reacción produce cantidades apreciables de dímeros y/o polímeros del isocianato a producir. Otro problema que se encuentra en tal proceso es que la reacción del fosgeno con la amina es muy lenta. Además, la pureza del producto final en esas condiciones, no está en muchos casos, de acuerdo con las especificaciones del consumidor. Se han desarrollado un número considerable de procesos en la fase líquida, con el objeto de minimizar dichos problemas.

Los procesos en dos etapas son de importancia considerable. En esos procesos la primera etapa es una reacción inicial entre el fosgeno y la amina primaria conducida entre 0°C y temperatura ambiente en un solvente inerte con el objeto de formar el clorohidrato de la amina. El segundo paso consiste en reaccionar esos productos intermedios con una cantidad mayor de fosgeno a altas temperaturas para producir el isocianato deseado, el ácido clorhídrico producto de la reacción se elimina en esta etapa. Este proceso de dos etapas ha encontrado cierto éxito comercial, sin embargo, del todo o en partes adolece de las desventajas antes enumeradas. Un problema particular es la alta temperatura de la segunda etapa, dicha temperatura favorece la formación de dímeros y/o polímeros. Sin embargo, tiene la gran ventaja de poder adaptarse a ser una operación continua y por tanto se usa con frecuencia para la producción de isocianatos aromáticos.

Otro de los problemas que se presentan en el proceso de dos etapas ocurre en la segunda, los productos intermedios formados por la reacción del fosgeno con la amina primaria (los clorhidratos y Cloruros de carbonil amina) son virtualmente insolubles en el solvente inerte formándose entonces una melaza viscosa, provocando un tratamiento ineficiente de los productos intermedios de la reacción.

Una variación del proceso de dos etapas es el proceso de una etapa en el cual el clorhidrato de la amina aromática es un solvente inerte se trata con fosgeno a una temperatura elevada de 80 a 200°C para convertirlo en un isocianato aromático. Puesto que el clorhidrato de la amina aromática intermedia se produce en el primer paso del proceso es muy similar al segundo paso del proceso dos etapas. Los problemas con este proceso en una etapa son los mismos que los encontrados en el proceso de dos etapas excepto que el clorhidrato de la amina es una masa trabajable.

Otro método para producir isocianatos en forma continua involucra un sistema en cascada, en el cual la amina o su clorhidrato reaccionan con fosgeno en un solvente a temperaturas progresivamente incrementadas en reactores sucesivos. Este método sin embargo, tiene la desventaja que se requiere demasiado espacio y supervisión de cada uno de los reactores y además su productividad no es mayor que la de los métodos enumerados anteriormente.

#### PROCESO DUPONT

En este proceso se obtiene el isocianato haciendo reaccionar una amina aromática o su clorhidrato suspendido en un líquido inerte teniendo éste un punto de ebullición, mayor que el del isocianato que va a producirse, la reacción se lleva a cabo arriba del punto de ebullición del isocianato, pero abajo del punto de ebullición

del solvente, con fosgeno haciendo pasar el mismo dentro de la suspensión y recobrando el isocianato deseado en fase vapor.

El proceso es relativamente simple y puede llevarse a cabo en un reactor el cual pueda calentarse a la temperatura deseada, provisto de un agitador, para asegurar la distribución uniforme de fosgeno gaseoso. Esos reactores deben estar provistos con un tubo que penetre hasta abajo de la superficie del líquido y una salida para remover los vapores a un receptor. Este último se carga con un solvente el cual disuelve el isocianato aromático y se mantiene a temperatura suficientemente alta para prevenir la formación de cloruro de carbamilo por reacción del isocianato con el ácido clorhídrico.

El receptor está provisto de un condensador de reflujo, el cual recircula el solvente y hace pasar el fosgeno y el HCl a un sistema de absorción.

En operación con amina libre, un solvente que posea un rango de ebullición de 350-400°C por ejemplo, se carga dentro del reactor y se calienta hasta una temperatura algo mayor que el punto de ebullición del isocianato que va a prepararse. Se disuelve entonces la amina en un solvente aromático clorinado de bajo punto de ebullición, el cual preferentemente es el mismo que el usado en el receptor y se alimenta en el reactor abajo de la superficie del líquido.

Simultáneamente se introduce una corriente de fosgeno abajo de la superficie de la masa reaccionante. Se forma entonces el isocianato con la liberación del HCl. Puesto que la temperatura de la masa reaccionante está sobre el punto de ebullición del isocianato, éste al formarse inmediatamente se evapora y pasa al recibidor junto con el ácido clorhídrico y el exceso de fosgeno. El isocianato se condensa en el vapor y líquido del solvente en el recibidor y el ácido clorhídrico y el fosgeno se pasan a través del condensador de reflujo a un sistema lavador. El isocianato se obtiene finalmente por destilación, el solvente recuperado se recircula al recibidor. Preferentemente el solvente utilizado para la amina, también ebulle a una temperatura menor que la del reactor de tal forma que también destila al recibidor y no se acumula en el vaso de reacción. Es aparente que este método tiene la ventaja de remover el isocianato inmediatamente de la zona de reacción de tal forma que no hay oportunidad de reaccionar con la amina y cuando se utilizan aminas simples, la conversión al isocianato correspondiente se efectúa con un alto rendimiento. Con los disocianatos las productividades son muy altas hasta 20% mayores que otros procesos.

El solvente para la reacción es preferentemente un hidrocarburo de una fracción de alto punto de ebullición o una fracción aromática clorinada. Puede usarse naftalenos o aromáticos siempre y cuando sean

inertes a los productos y reactivos y entendiéndose que su acción a las temperaturas de reacción no sufran ningún cambio. El punto de ebullición del solvente dependerá del punto de ebullición del isocianato que se formará y de la temperatura de la reacción utilizada. Entonces, el punto de ebullición del solvente necesario será entre 20-50°C mayor que el de la temperatura de la reacción. Generalmente hablando, el punto de ebullición no será menor que 180°C. Las fracciones de hidrocarburos derivados del petróleo son adecuados. O sea que son adecuadas fracciones parafínicas tales como ceras o naftalínicas. También son adecuados hidrocarburos aromáticos derivados del petróleo o por ejemplo p difenilbenceno, difenilmetano y trifenilmetano.

Los hidrocarburos aromáticos pueden ser clorinados para elevar sus puntos de ebullición y también son adecuados para este propósito. La extensión de la clorinación no es crítica. El principal criterio aparte del rango de ebullición es que el solvente debe de ser esencialmente no reactivo hacia el fosgeno, HCl, amina y el isocianato y debe de ser térmicamente estable a la temperatura de la reacción. Los hidrocarburos clorinados preferidos son los bisfeniles tales como los vendidos bajo el nombre comercial de "Aroclor" (Monsanto Co.) y los bencenos clorinados. Los hidrocarburos clorinados preferidos son las fracciones de alto punto de ebullición de naftalenos derivados de aceites asfálticos crudos.

En la preparación de isocianatos de bajo punto de ebullición tales como el MDI, pueden usarse hidrocarburos clorinados simples como el Tricloro Benceno. El solvente para la amina y para colectar el isocianato aromático formado puede también ser hidrocarburo aromático clorinado, pero de bajo contenido de cloro como monoclorobenceno o o-diclorobenceno, deberá de ser de tal rango que destile junto con el isocianato.

Los límites de temperatura no son críticos puesto que únicamente es necesario que la temperatura del solvente de la reacción sea unos pocos grados mayor que el isocianato a ser formado. Altas temperaturas no son preferidas puesto que requieren mayor calentamiento y entonces pueden provocar reacciones laterales. Un rango práctico es desde 1-20°C sobre el punto de ebullición del isocianato. Si la temperatura es demasiado cercana al punto de ebullición del solvente, una cantidad indeseable del solvente de la reacción será destilado sobre el recipiente. La temperatura preferida para operar la reacción es entre 100-300°C. No se recomiendan temperaturas mayores puesto que puede tomar lugar alguna descomposición del isocianato. En general el punto de descomposición del isocianato en particular, determinará el límite superior de temperatura después del cual las productividades de la reacción se ven drásticamente reducidas.

### PROCESO BAYER

Es bien conocido el producir isocianatos aromáticos por reaccionar aminas aromáticas con fósgeno. Al llevar a cabo esta reacción, una solución de fósgeno preparado a partir de fósgeno y un solvente inerte a 0°C y una solución de amina preparada a partir de una amina aromática y un solvente inerte a 70-80°C, se ponen en contacto al agregar la solución de amina caliente a la solución de fósgeno, mientras son agitadas y enfriadas con hielo y sal (llamada fosgenación en frío). La mezcla obtenida entonces se calienta a una temperatura dentro del rango de 50-200°C mientras se introduce el fósgeno y se agita hasta finalizar la fosgenación (también llamada fosgenación en caliente). Posteriormente, el fósgeno disuelto en la mezcla reaccionante se remueve pasando un gas inerte tal como nitrógeno o CO<sub>2</sub> y la mezcla reaccionante se purifica por destilación.

El proceso anterior deberá de ser operado discontinuamente (intermitente). Otra desventaja es que se requiere una gran cantidad de fósgeno líquido para llevar a cabo la fosgenación en frío, en la cual el fósgeno escapa parcialmente en la forma de fósgeno gaseoso en el calentamiento de la mezcla reaccionante, durante el proceso de fosgenación en caliente. Es entonces imposible llevar a cabo el proceso a gran escala, debido a que la gran cantidad de fósgeno involucrada en la reacción es demasiado peligrosa para la operación comercial.

Otra desventaja del proceso es que la recuperación del fósgeno tiene que llevarse a cabo intermitentemente. El método Bayer desarrolla un proceso tal para la producción de isocianatos aromáticos que pueda operar continuamente. Y el cual pueda llevarse a cabo a gran escala.

Tales objetivos son logrados al preparar una suspensión de una amina aromática en su solvente inerte continuamente, reaccionando esta suspensión con fósgeno en frío, pasando la mezcla obtenida entonces en una corriente continua por la parte superior de una torre, la cual se coloca verticalmente a un ángulo oblicuo y calentando a una temperatura de 50 °C a 200 °C, tratando la mezcla obtenida de esta manera con un gas inerte en una columna para remover el exceso de fósgeno disuelto y recobrando el isocianato aromático de la suspensión.

La suspensión de la amina requerida para este proceso puede prepararse disolviéndola en el diluyente, y la solución obtenida enfriada en un aparato tal como en enfriador de tornillo donde gran parte de la amina cristaliza. La mezcla obtenida entonces (los cristales y el licor) puede ser "molineada" de tal forma que se obtengan partículas de un tamaño promedio de 10-50 M. Alternativamente la amina sólida puede primeramente ser pulverizada y entonces diluida para formar una suspensión fina.

El uso de una suspensión fría de la amina tiene la ventaja de que el producto obtenido en la reacción con fósgeno en frío constituye una pasta delgada, la cual puede ser bombeada, esta característica es sumamente importante puesto que permite que la fosgenación sea llevada a cabo en forma continua.

#### PROCESO MITSUBISHI

Este proceso tiene como base, al igual que los anteriores, la reacción de una amina con el fósgeno para obtener de ésta manera el isocianato correspondiente.

En este proceso el isocianato se produce de la siguiente manera:

En un prereactor la amina se disuelve en un solvente y una vez que la solución está preparada es burbujeado en ésta ácido clorhídrico seco y gaseoso con lo que se forma la sal hidrociorada de la amina, lo anterior tiene como finalidad evitar reacciones entre la amina y el isocianato al efectuarse la fosgenación que daría lugar a la formación de ureas (producto indeseable), también se facilita la agitación de la masa de cristales de la sal hidrociorada y con ello se reducen los consumos de energía y servicios, asimismo, facilita la reacción de la amina con el fósgeno, incrementando el rendimiento de la conversión al isocianato.

La solución de sal hidroclorada es conducida a un reactor donde se lleva a cabo la reacción de fosgenación que se efectúa al burbujear fósgeno en la solución y como resultado de dicha reacción se obtiene el isocianato deseado, ácido clorhídrico y el fósgeno que no reaccionó. Parte del ácido clorhídrico desprendido, así como del fósgeno no reaccionante son venteados a una torre de absorción en donde se separa el ácido clorhídrico y el fósgeno una vez terminada la reacción, posteriormente el lodo es llevado a una columna de agotamiento en donde se eliminan el ácido clorhídrico y el fósgeno remanentes, con esto, el isocianato con su solvente puede ser transportado al área de purificación.

para la selección del solvente se utiliza el mismo criterio que el mencionado en el proceso DUPONT. En el proceso Mitsubishi el perfil de temperaturas así como los rangos de presión son menos drásticos facilitando con ello el manejo de los fluidos.

#### Análisis de los Procesos

En los tres procesos descritos anteriormente se obtienen los isocianatos con la calidad requerida por el mercado (de acuerdo a folletos comerciales de compañías que utilizan dichos procesos). Por lo tanto éste no es un punto que influya para la selección de los mismos.

Al analizar cada uno de los procesos, se observa lo siguiente:

#### Proceso DUPONT

Requiere de dos solventes; uno para la amina y otro para la reacción de fosgenación. Ambos son destilados al receptor y para regeneración de los mismos es necesario más equipo aparte del normal para la purificación del isocianato.

Por otro lado, aún cuando el isocianato formado en el reactor es removido del mismo rápidamente, debido a la alta temperatura de operación (350-400°C) es posible pensar en reacciones del isocianato con la amina (formación de ureas) lo que repercute en un abatimiento del rendimiento de la reacción.

#### Proceso BAYER

Se considerará únicamente el proceso continuo, ya que el intermitente no es atractivo desde el punto de vista comercial por los puntos mencionados en la descripción del mismo.

En el proceso continuo se observa que es necesario mayor cantidad de equipo ya que requiere enfriador de tornillo, transporte para la amina cristalizada, molinos y un tanque para formar la suspensión fina.

Debido a que los materiales deben circular por más equipos, es factible pensar en una disminución de rendimiento.

### Proceso MITSUBISHI

En este proceso se observa que las deficiencias mostradas en los anteriores han sido solucionadas satisfactoriamente como lo demuestra lo siguiente:

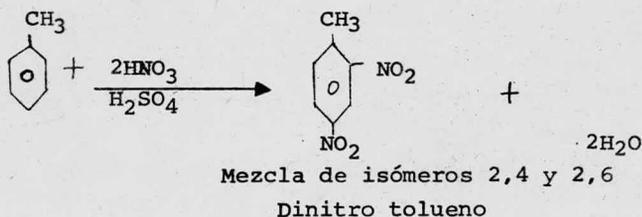
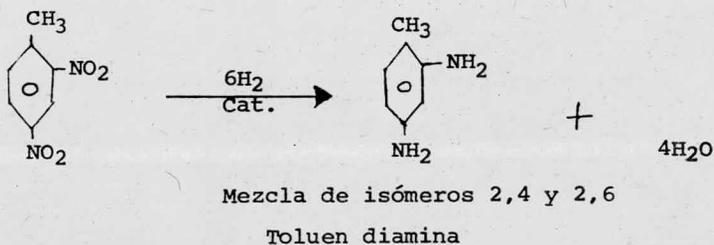
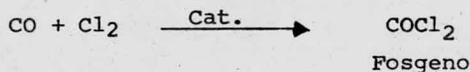
Se utiliza un solo solvente para la reacción de fosgenación, se emplea la sal hidrociorada de la amina lo que evita reacciones laterales indeseables, la reacción es en una fase y no se emplea aminas cristalizadas, por lo que se requiere de menor equipo. Por no tener reacciones laterales y por necesitar de poco manejo de materiales el rendimiento de la reacción es mayor al de los anteriores.

Debido a lo anterior, como conclusión del presente análisis de los procesos se selecciona el proceso Mitsubishi como la mejor tecnología a utilizar para la producción del toluen diisocianato.

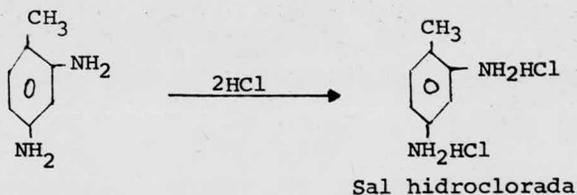
### DESCRIPCION DEL PROCESO

El proceso que a continuación se describe es el de Mitsubishi Chemical Industries Ltd. Se escogió por estar considerado mundialmente como uno de los que tienen mayores rendimientos (81% del teórico), por tener un bajo costo de construcción, ya que utiliza para evitar la corrosión en los equipos que están en contacto con el fósgeno (compuesto formado en el proceso), acero inoxidable auténtico 18-8 y además puede producir el toluen diisocianato en sus diferentes relaciones de isómeros: 80/20; 65/35; 100/0.

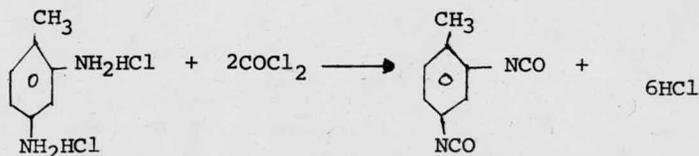
El proceso puede ser dividido en cuatro secciones, de acuerdo a las reacciones principales que se efectúan en cada una de ellas, dichas secciones son: Nitración, reducción, síntesis de fósgeno y fosgenación. Las reacciones características de cada uno de estos pasos se muestran a continuación:

1) NITRACION2) REDUCCION3) SINTESIS DE FOSGENO4) FOSGENACION

a)



b)



Mezcla de isómeros 2,4 y 2,6

Toluen diisocianato

Descripción del proceso por secciones y condiciones de operación.

### 1) NITRACION

A un reactor de acero inoxidable, enchaquetado y provisto de agitador se alimentan: Tolueno, ácido nítrico y ácido sulfúrico, éste último proveniente del reactor de dinitración y los dos primeros de los tanques abastecedores, la temperatura en el mononitrador es de 80°C y está a la presión atmosférica, el producto se pasa a un tanque separador en donde se desecha el ácido gastado, el mononitro tolueno formado es llevado a otro reactor que también tiene agitador y chaqueta, al cual le llega una mezcla de los ácidos nítrico y sulfúrico, enviados éstos por una bomba proporcional desde los tanques abastecedores, la temperatura de operación del reactor es de 90°C y la presión es atmosférica, la solución obtenida en este paso es llevada a un tanque separador, el ácido es recuperado y enviado al reactor de mononitración, el dinitro tolueno producido va a un lavador en donde se le elimina la acidez, lavándolo con agua

tibia, pasa después a un tanque purificador en donde son eliminados por cristalización los isómeros 3,4; 2,3 y 2,5 dinitro tolueno ya que no son convertibles a toluen diisocianato y además interfieren en los pasos del proceso posteriores a la nitración, antes y después del purificador se elimina el agua, tanto la formada en la reacción como la añadida para quitarle la acidez, de esta forma el dinitro tolueno pasa a la sección de reducción con una gran pureza.

## 2) REDUCCION

El dinitro tolueno es solubilizado en acetonitrilo, a esta solución se le agrega posteriormente el catalizador (Paladio en carbón) que se encuentra suspendido en acetonitrilo, esto es alimentado al reactor al cual se introduce una corriente de hidrógeno en exceso, recirculando el que no reacciona, el catalizador es separado de la solución, después del reactor, por medio de un filtro, el catalizador recuperado es enviado al reactor, la temperatura a la cual se lleva a efecto la hidrogenación es de 80°C y la presión de 75 psig, el toluen diamina formado es llevado a la sección de refinamiento.

Para refinar el toluen diamina primero se le separa del solvente en una columna de destilación que opera a 82°C y a presión atmosférica.

Posteriormente se le quita el agua y en la tercera se obtiene el toluen diamina y se desechan los compuestos pesados que contienen básicamente dinitro tolueno que no reaccionó, esta última columna de destilación trabaja a 280 °C y una atmósfera. El solvente recuperado se recircula para hacer la solución con el dinitro tolueno y el toluen diamina purificado se manda a la sección de fosgenación.

### 3) SINTESIS DE FOSGENO

El monóxido de carbono y el cloro ambos en estado gaseoso son alimentados a un reactor que tiene como catalizador carbón activado, opera a una temperatura de 125 °C y con una presión de 20 psig de esta forma se obtiene el fósgeno solo que a una temperatura muy elevada por lo que el gas una vez que sale del reactor se le debe reducir la temperatura para poder utilizarlo en el proceso, posteriormente el fósgeno se envía a la sección de fosgenación.

### 4) FOSGENACION

El toluen diamina es disuelto en orto dicloro benceno y la solución es pasada a un prereactor en donde ácido clorhídrico gaseoso y seco es burbujeado en la mezcla, la finalidad de esta operación es la de aumentar la eficiencia de la fosgenación

evitando que el toluen diisocianato obtenido al final reaccione con la amina y forme ureas, la sal hidroclorada de toluen diamina no reacciona con el toluen diisocianato, la temperatura del prereactor es de 120-130°C.

El lodo de la sal hidroclorada es pasado a un reactor enchaquetado, provisto de agitador, el reactor trabaja con una temperatura que va de 160-175°C y alcanza una presión máxima de 10 psig. El fósgeno es burbujeadado en el lodo de la sal hidroclorada, reacciona con el toluen diamina y forma el toluen diisocianato.

Parte del fósgeno que no reaccionó y parte del ácido clorhídrico formado en la reacción o desprendido de la sal hidroclorada son venteados directamente del reactor a una línea que viene de la columna de agotamiento, el lodo que sale del reactor llega a una columna de agotamiento en donde se separa el ácido clorhídrico y el fósgeno, a esta columna llega una corriente de nitrógeno que tiene como función arrastrar los gases desprendidos. Después hay tres columnas de destilación, en la primera se evapora el orto dicloro benceno y opera a 179°C y una atmósfera, el solvente es recirculado para hacer la solución con el toluen diamina.

En la segunda columna se eliminan los compuestos ligeros como orto dicloro benceno y ureas de bajo peso molecular que son resultado de la reacción de agua y toluen diisocianato, esta torre trabaja a 240°C. La tercera columna tiene una temperatura de 251°C, aquí se desechan ureas de alto peso molecular (formadas por toluen diisocianato y toluen diamina) y biurets y se obtiene por el domo de la torre el toluen diisocianato purificado.

5) Formación de la Solución de Acido Clorhídrico al 35%

La línea que lleva el fósgeno y al ácido clorhídrico proveniente del venteo del reactor y de la columna de agotamiento, llega a una torre de absorción en donde se separa el fósgeno del ácido clorhídrico, éste último sale seco y una tercera parte pasa al prereactor, lo demás se va a otra columna de absorción en donde es formada la solución de ácido clorhídrico al 35% utilizando para esto agua demineralizada, este es el único subproducto del proceso. El fósgeno que se separó en la primera columna de absorción es llevado a una columna de destilación en donde se le separa el ácido clorhídrico que contiene, el fósgeno sale por el domo y se manda a la tubería que va hacia el reactor de fosgenación.

En la figura No. 1 se encuentra el diagrama de bloques y la figura No. 2 corresponde al diagrama de flujo que representa el proceso.

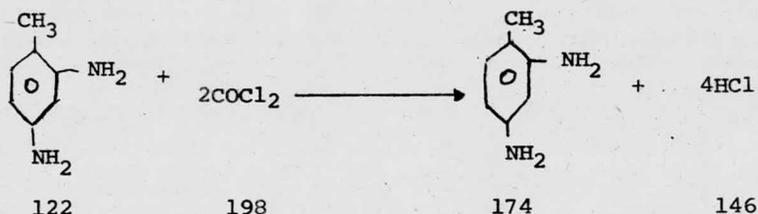
BALANCE DE MATERIALES

El balance de materiales que a continuación se presenta tiene como base 1000 kg de toluen diisocianato, los rendimientos de las reacciones, en escala industrial, fueron obtenidos en la literatura.

Base 1000 kg de toluen diisocianato.

a) Reacción de fosgenación:

Rendimiento 90%



$$\frac{1000 \text{ kg. TDI}}{0.90} = 1111.12 \text{ kg de TDI (teórico)}$$

Cantidades necesarias de:

Toluen diamina

$$\frac{122 \text{ kg de TDA}}{174 \text{ kg de TDI}} \times 1111.12 \text{ kg de TDI} = 779.06 \text{ kg de TDA}$$

Fosgeno

$$\frac{198 \text{ kg de COCl}_2}{174 \text{ kg de TDI}} \times 1111.12 \text{ kg de TDI} = 1264.38 \text{ kg de COCl}_2$$

Orto dicloro benceno (ODB)

La relación de disolución es: 62 partes de TDA en 490 partes de ODB.

$$\frac{490 \text{ kg de ODB}}{62 \text{ kg de TDA}} = 779.06 \text{ kg de TDA} = 6157.08 \text{ kg de ODB}$$

Acido clorhídrico producido

$$\frac{146 \text{ kg de HCl}}{174 \text{ Kg de TDI}} \times 1111.12 \text{ kg de TDI} = 932.32 \text{ kg de HCl}$$

La cantidad calculada de ácido clorhídrico es en base a la estequiometría de la reacción, pero se debe considerar que por cada molécula de toluen diisocianato se desprenden dos moléculas de ácido clorhídrico que se encuentran formando la sal hidróclorica del toluen diamina, por lo que realmente se desprenden 6 moléculas de HCl por cada molécula de TDI, con un peso de 219, por lo tanto:

Acido clorhídrico total

$$\frac{219 \text{ kg de HCl}}{174 \text{ kg de TDI}} \times 1111.12 \text{ kg de TDI} = 1398.48 \text{ kg de HCl}$$

b) Síntesis de Fósgeno

Rendimiento 99%



$$28 \quad 71 \qquad \qquad \qquad 98$$

$$\frac{1264.38 \text{ kg de COCl}_2}{0.99} = 1277.15 \text{ kg de COCl}_2 \text{ (teórico)}$$

Se introduce al reactor de fosgenación un 3% de exceso de fósgeno, no se añade una cantidad mayor por razones de seguridad, por lo tanto la cantidad teórica total es de 1317.15 kg de COCl<sub>2</sub>.

Cantidades necesarias de:

Monóxido de carbono

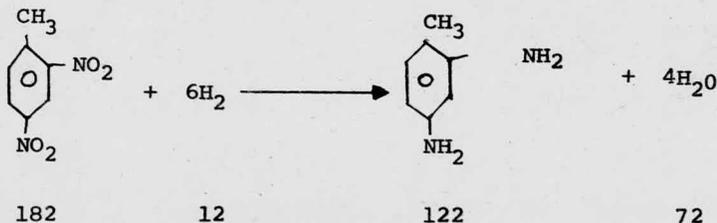
$$\frac{28 \text{ kg de CO}}{99 \text{ kg de COCl}_2} \times 1317.15 \text{ kg de COCl}_2 = 372.52 \text{ kg de CO} \\ 314.90 \text{ M}^3 \text{ de CO}$$

Cloro

$$\frac{71 \text{ kg de Cl}_2}{99 \text{ kg de COCl}_2} \times 1317.15 \text{ kg de COCl}_2 = 944.62 \text{ kg de Cl}_2$$

c) Reacción de Reducción

Rendimiento 99%



$$\frac{779.06 \text{ kg de TDA}}{0.99} = 786.93 \text{ kg de TDA (teórico)}$$

Cantidades necesarias de:

Dinitro tolueno (DNT)

$$\frac{182 \text{ kg de DNT}}{122 \text{ kg de TDA}} \times 786.93 \text{ kg de TDA} = 1173.95 \text{ kg de DNT}$$

Hidrógeno (H<sub>2</sub>)

$$\frac{12 \text{ kg de H}_2}{122 \text{ kg de TDA}} \times 786.93 \text{ kg de TDA} = 77.40 \text{ kg de H}_2 \\ 909.45 \text{ M}^3 \text{ n de H}_2$$

Se añade 5% de exceso con lo que se tiene un total de 81.36 kg

ó 956 M<sup>3</sup>n de hidrógeno.

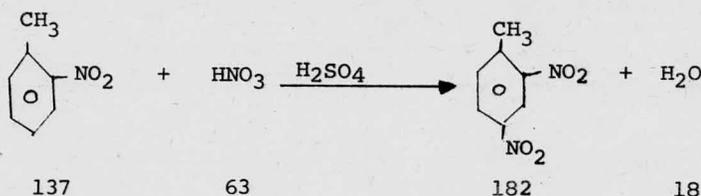
## Acetonitrilo (ACN)

La relación de disolución es de 75 partes de DNT por 380 partes de ACN.

$$\frac{380 \text{ kg de ACN}}{75 \text{ kg de DNT}} \times 1173.95 \text{ kg de DNT} = 5948.01 \text{ kg de ACN}$$

d) Reacción de Dinitrición

Rendimiento 95%



$$\frac{137 \text{ kg de MNT}}{0.99} = 1235.74 \text{ kg de DNT (teórico)}$$

Cantidades necesarias de:

Mononitro tolueno (MNT)

$$\frac{137 \text{ kg de MNT}}{182 \text{ kg de DNT}} \times 1235.74 \text{ kg de DNT} = 930.20 \text{ kg de MNT}$$

Acido nítrico (HNO<sub>3</sub>)

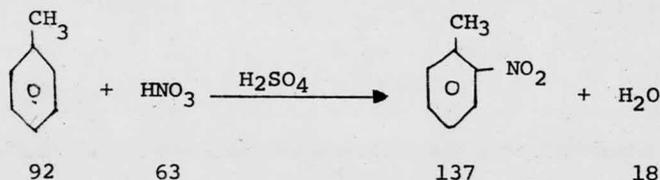
$$\frac{63 \text{ kg de HNO}_3}{182 \text{ kg de DNT}} \times 1235.74 \text{ kg de DNT} = 427.75 \text{ kg de HNO}_3$$

Agua producida

$$\frac{18 \text{ kg de H}_2\text{O}}{182 \text{ kg de DNT}} \times 1235.74 \text{ kg de DNT} = 122.21 \text{ kg de H}_2\text{O}$$

e) Reacción de mononitración

Rendimiento 96%



$$\frac{930.20 \text{ kg de MNT}}{0.96} = 968.96 \text{ kg de MNT (teórico)}$$

Cantidades necesarias de:

Tolueno

$$\frac{92 \text{ kg de tolueno}}{137 \text{ kg de MNT}} \times 968.96 \text{ kg de MNT} = 650.69 \text{ kg de tolueno}$$

Acido nítrico

$$\frac{63 \text{ kg de HNO}_3}{137 \text{ kg de MNT}} \times 968.96 \text{ kg de MNT} = 445.58 \text{ kg de HNO}_3$$

Agua producida

$$\frac{18 \text{ kg de H}_2\text{O}}{137 \text{ kg de MNT}} \times 968.96 \text{ kg de MNT} = 127.31 \text{ kg de agua}$$

Acido nítrico total:

Para mononitración -- 445.58

Para dinitración -- 427.75

Total 873.33 kg de HNO<sub>3</sub>

Con 5% de exceso se requiere la cantidad de 919.3 kg de ácido nítrico.

Acido sulfúrico:

De acuerdo a una formulación estándar para las mezclas de ácidos en la nitración que a continuación se muestra, la cantidad de

ácido sulfúrico es:

Formulación para dinitración:

Acido sulfúrico -- 54.4% en peso

Acido Nítrico -- 32.0% en peso

Agua -- 13.6% en peso

Exceso del 3% de ácido sulfúrico se requiere para la mononitración

$$\frac{0.544 \text{ kg de H}_2\text{SO}_4}{0.32 \text{ kg de HNO}_3} \times 427.75 \text{ kg de HNO}_3 = 727.17 \text{ kg de H}_2\text{SO}_4$$

Con 3% de exceso se tiene la cantidad de 747 kg de ácido sulfúrico.

f) Cantidad producida de ácido clorhídrico en solución al 35%.

Como se observó al principio del balance de materiales en la reacción de fosgenación se forman 6 moléculas de ácido clorhídrico por cada molécula de toluen diisocianato, de estas 6 sólo se utilizan dos para la formación de la sal hidrociorada, por lo que las dos terceras partes de la cantidad total de ácido clorhídrico generado se emplean para la formación de la solución al 35% de ácido clorhídrico.

Cantidad generada en la sección de fosgenación 1398.48 kg de HCl.  $1398.48 \text{ kg de HCl} \times \frac{2}{3} = 932.32 \text{ kg de HCl}$

Con 932.32 kg de HCl se obtienen 2663.77 kg de solución al 35% de ácido clorhídrico.

g) Consumo y costo de combustible por tonelada de toluen diisocianato. De acuerdo a la patente de Mitsubishi Chemical Industries Ltd. la cantidad de energía necesaria a suministrar para la producción de 1000 kg de toluen diisocianato es de  $4.28 \times 10^6$  Kcal.

Por conveniencia en la capacidad calorífica y en el costo se recomienda usar como combustible un hidrocarburo pesado, siendo el energético idóneo para este caso el combustóleo, ya que reúne las características antes mencionadas.

Propiedades del combustóleo:

Gravedad específica      0.98

Capacidad calorífica    17500 BTU/lb.

Costo                      \$ 70.50/M<sup>3</sup>

Cálculo de la necesaria de combustóleo por tonelada de TDI.

Densidad

$$62.4 \text{ lb/ft}^3 \times 0.98 = 61.152 \text{ lb/ft}^3 = 979.37 \text{ kg/M}^3$$

Capacidad calorífica

$$17500 \text{ BTU/lb} \quad 9702 \text{ Kcal/Kg.}$$

Kg requeridos de combustóleo por tonelada de TDI

$$\frac{4.28 \times 10^6 \text{ Kcal}}{9702 \text{ Kcal/Kg}} = 441.15 \text{ kg.}$$

Metros cúbicos de combustóleo por tonelada de TDI

$$\frac{441.15 \text{ kg}}{979.37 \text{ kg/M}^3} = 0.45 \text{ M}^3$$

Costo de combustóleo por tonelada de TDI

$$0.45 \text{ M}^3 \times \$ 70.50/\text{M}^3 = \$31.725.$$

Cuadro de materias primas empleadas para la producción de una tonelada de Toluen diisocianato.

Tolueno	650.69 kg
Acido nítrico	919.30 kg
Acido sulfúrico	747.00 kg
Cloro	944.62 kg
Hidrógeno	956.00 M <sup>3</sup> n
Monóxido de carbono	314.90 M <sup>3</sup> n
Orto dicloro benceno	
Necesario	6157.08 kg
Pérdida	11.00 kg
Acetonitrilo	
Necesario	5948.01 kg
Pérdida	10.40 kg

### Servicios

Los principales lugares de consumo de servicios se indican a continuación:

Vapor:

Accionadores de las bombas de relevo (turbinas)

Chaquetas de reactores de: Mononitración

Dinitración

Hidrogenación

Síntesis de fósgeno

## Fosgenación

Tanque lavador

Siete rehervidores de las torres de destilación

Envenado de las líneas de proceso

Agua

Chaquetas de reactores.

Seis condensadores

Tres enfriadores

Tanque lavador

Limpieza

Agua demineralizada:

Formación de ácido clorhídrico al 35%

Combustible:

Calderas

Gas inerte:

Columna de agotamiento

Interior de los reactores

Almacenamiento de Toluen diisocianato.

Aire:

Para instrumentos y limpieza

Especificaciones del Toluen diisocianato y del ácido clorhídrico.

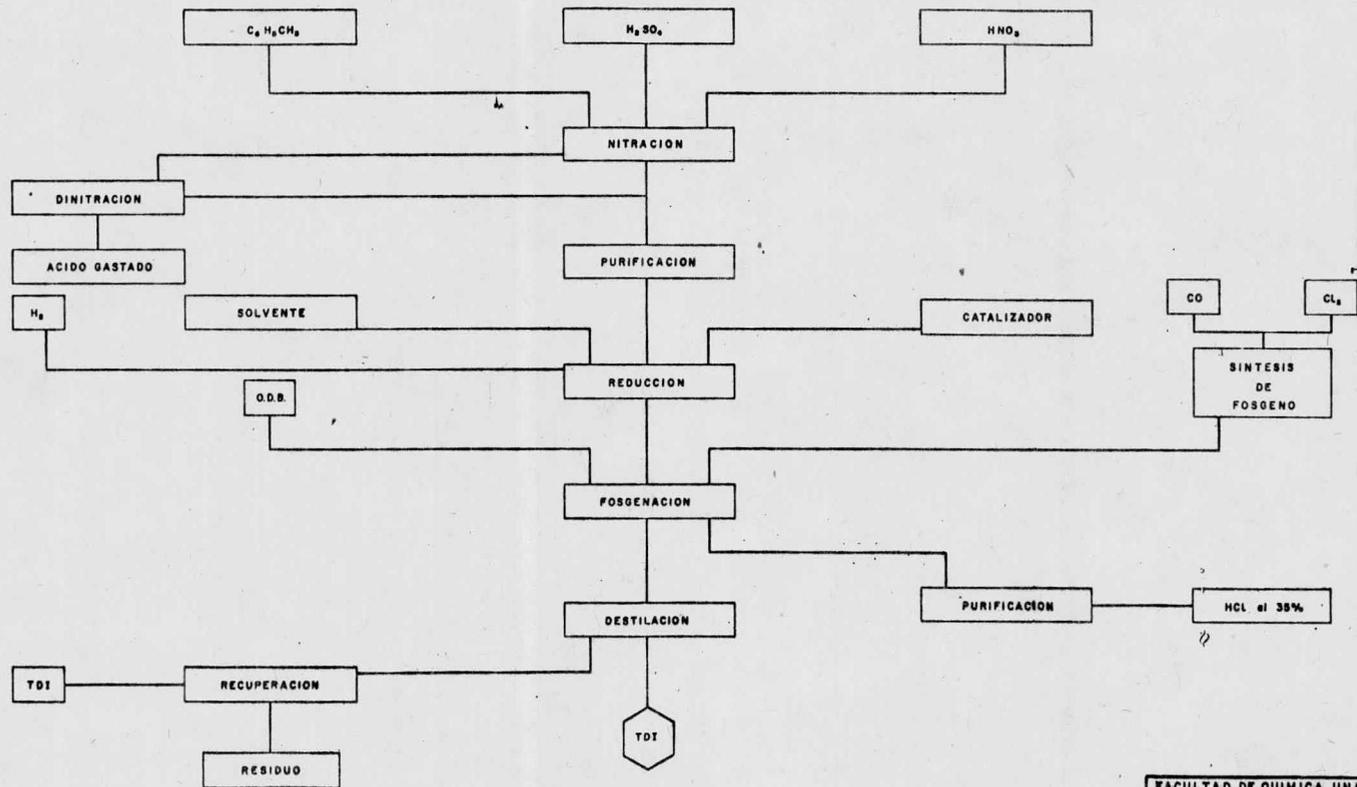
(Todos los porcentajes están dados en peso).

TOLUEN DIISOCIANATO

Pureza	99.5% mínimo
Acidez	0.01 - 0.0005% como HCl (ajustable)
Cloro total	0.08% máximo como monocloro benceno
Cloruros hidrolizables	0.01 = 0.0005% como Cl <sub>2</sub> (ajustable)
Color	APHA # 15 máximo
Isómeros	80/20; 65/35; 100/0

ACIDO CLORHIDRICO

Pureza	35% mínimo
Fe	0.002% máximo
Residuos de ignición	0.01% máximo
Metales pesados	0.0002% máximo
As	0.0002% máximo
Impurezas orgánicas	0.0003% máximo



FACULTAD DE QUIMICA UNAM.  
 DIAGRAMA DE BLOQUES  
 FIGURA No. 1  
 HECTOR ABEL ARTEAGA SUAREZ  
 FERNANDO SADA RAMOS



## CAPITULO IV

### SEGURIDAD

Un aspecto de primordial importancia en las plantas químicas como se ha observado a través del tiempo, es la seguridad industrial, debido a la toxicidad de los materiales que se utilizan en la fabricación del toluen diisocianato, es de importancia el tratar lo referente a las normas de seguridad que atañen el manejo de dichos compuestos.

Con la finalidad de brindarle al personal y al equipo la mayor proyección contra accidentes, a continuación se expone el análisis de la toxicidad, explosividad e inflamabilidad de las materias primas y productos terminados involucrados en este proceso, que son:

Tolueno

Acido Sulfúrico

Acido Nítrico

Acido Clorhídrico

Cloro

Monóxido de Carbono

Hidrógeno

Acetonitrilo

Orto diclorobenceno

Fosgeno

Toluen diisocianato

## TOLUENO:

El tolueno (Toluol o Metil Benceno), es un líquido incoloro, con un característico olor aromático agradable. Sus vapores tienden a fluir hacia las partes bajas, debido a que su densidad es de 3.14 (aire = 1). Su densidad con respecto al agua es 0.866 a 20° C. Es un líquido inflamable, cuya temperatura de inflamación en copa cerrada es de 4.4° C y la de autoignición de 552° C. Con el aire forma mezclas explosivas en porcentajes de 1.27% a 7% en volumen. Este compuesto químico cuando es expuesto al calor, puede reaccionar violentamente con materiales oxidantes.

El tolueno es un producto irritante para las vías respiratorias, los ojos y la piel. En altas concentraciones y con exposiciones prolongadas causa dolor de cabeza, náuseas, desvanecimientos y pérdida del sentido, pudiendo presentarse en casos extremos parálisis del sistema respiratorio.

Se considera como límite de tolerancia para una jornada normal, la concentración de 200 p.p.m.

En el caso de almacenar tambores u otros recipientes que contengan tolueno, deberá hacerse en locales bien ventilados y construidos con materiales no combustibles.

El tolueno es un líquido inflamable, por lo tanto su manejo y uso requiere de las precauciones usuales para este tipo de producto.

A temperaturas ordinarias desprende vapores tóxicos.

El personal que maneje habitualmente tolueno, contará con goggles, mascarilla con cartucho o equipo de respiración con alimentación forzada.

El tolueno es un producto químico poco tóxico; sin embargo, bajo ciertas circunstancias puede ser peligroso, por lo que es necesario reducir al mínimo la exposición a sus vapores y al líquido.

El tolueno es fácilmente absorbido por el sistema gastrointestinal, los pulmones y la piel. Parte del tolueno es eliminado por los pulmones y un gran porcentaje por la orina.

Los riesgos más significativos cuando se maneja tolueno se presentan cuando se tienen prolongadas exposiciones con vapores de tolueno, contacto prolongado de tolueno líquido con la piel y directo con los ojos.

La exposición a altas concentraciones de vapores de tolueno da como resultado un efecto narcótico poderoso. Bajo estas condiciones y en exposiciones prolongadas se pueden llegar a presentar la parálisis del sistema respiratorio y aún puede ocurrir la muerte.

Cuando se tienen concentraciones que pasen de 200 p.p.m. los síntomas son: disturbios transitorios del sistema nervioso central y somnolencia.

Los efectos crónicos generales originados por la exposición al tolueno durante periodos prolongados son diferentes grados de fatiga, insomnio, alteración del sistema nervioso y pérdida del apetito.

En la piel, las exposiciones prolongadas y repetidas de tolueno líquido, pueden producir resequedad y posteriormente dermatitis.

El tolueno deberá ser manejado de manera que el personal no tenga contacto en forma excesiva con los vapores del producto. Se evitarán las atmosferas contaminadas con vapores de tolueno, que suelen formarse en los locales cerrados en que se maneja este producto, cuando no se cuenta con la ventilación adecuada. Se evitará el contacto prolongado y repetido del tolueno líquido con la piel. El personal que maneje tolueno usará el equipo de protección.

En las áreas que se maneje tolueno existirán regaderas de seguridad fácilmente accesibles, colocadas en sitios estratégicos y que siempre se encuentren en buenas condiciones de funcionamiento, así como fuentes para lavado de los ojos en buenas condiciones de operación.

En caso de accidente, debe impartirse primeros auxilios a toda persona que haya estado en contacto con tolueno; retirarla de inmediato del área contaminada y llamar a un médico tan pronto -

como sea posible, explicándole la naturaleza del caso y la exposición que sufrió el paciente.

Toda la ropa contaminada con tolueno líquido será eliminada inmediatamente, incluyendo los zapatos y no se usará hasta que se encuentre libre de tolueno. Todos los sitios en que la piel haya sido afectada deben lavarse con agua, por lo menos durante 15 minutos, después de lo cual se lavará con agua y jabón. El tratamiento subsecuente lo establecerá el médico.

Si el producto ha estado en contacto con los ojos, se lavarán éstos con agua, manteniéndose los párpados abiertos durante la irrigación, para asegurar el contacto del agua con los tejidos de la superficie del ojo y de los párpados.

Si persiste la irritación ocular, debe recurrirse a un segundo periodo de irrigación de 15 minutos y consultar inmediatamente al médico especialista.

Si alguna persona llega a ingerir tolueno en estado líquido, aunque no exista antídoto específico para contrarrestar los efectos tóxicos del tolueno, deberá suministrarse un emético. Si el paciente no ha perdido el conocimiento, darle un vaso con agua caliente con aproximadamente una cucharada de sal o agua de jabón. En caso necesario se inducirá el vómito. Llamar al médico inmediatamente. Durante todo el tiempo de espera, mantener al paciente caliente.

Si el accidentado se encuentra inconsciente, no se le suministrará ninguna substancia; el paciente deberá recostarse sin almohada; debiendo mantenersele caliente y en reposo, en caso de que perdiera el conocimiento, proceda como sigue:

- a) Acostarlo boca abajo, con la cara hacia el lado izquierdo y extraerle de la boca cualquier objeto que contenga.
- b) Si no respira normalmente deberá proporcionarsele respiración artificial, cuando sea posible, suministrar oxígeno, ésto último sólo lo efectuará una persona que esté familiarizada con su uso.

#### ACIDO SULFURICO:

El ácido sulfúrico es un líquido incoloro a la temperatura y presión ambiente y es más pesado que el agua. Es altamente corrosivo, particularmente a concentraciones de 77%, corroe los metales con excepción del oro, iridio y rodio, dando lugar al desprendimiento de hidrógeno.

En contacto con la piel y ojos ocasiona serias quemaduras; ingerido puede causar graves daños, incluso la muerte; la inhalación de sus vapores produce severas lesiones a los pulmones.

El área de almacenamiento se localizará de preferencia en lugares abiertos o en edificios bien ventilados. Las estructuras que soporten carga en los edificios, deberán estar protegidos con pintura resistente al ácido.

El ácido sulfúrico no deberá almacenarse con o cerca de combustibles y otros agentes oxidantes, particularmente junto a materiales orgánicos y nitratos, carburos, cloratos, etc.

Todas las instalaciones eléctricas de los lugares donde se almacene ácido sulfúrico, serán herméticos; los cables quedarán alojados en conductores rígidos metálicos con recubrimiento resistente a los ácidos.

Los tanques para almacenar ácido sulfúrico estarán provistos de un desfogue de tamaño suficiente que, en caso de derrames, descargue a un colector o bien a otro lugar seguro; también deberán contar con un registro de diámetro suficiente, para que en caso de ser necesario, pueda entrar un hombre, equipado con arnés de rescate o cinturón de seguridad, con cable de vida y equipo de protección respiratoria.

Los pisos de las áreas de almacenamiento de ácido sulfúrico, se construirán con ladrillo resistente al ácido y sus drenajes no descargarán conjuntamente con otras corrientes que contengan sulfuros, cianuros, etc.

Debido a sus propiedades fuertemente irritantes y corrosivas, el ácido sulfúrico se manejará en sistemas cerrados, para evitar contacto con el líquido o sus vapores e impidiendo toda clase de fugas en el equipo o recipientes que contengan este producto.

El ácido sulfúrico no es un material combustible; sin embargo, ataca a la mayoría de los metales, liberando hidrógeno, que puede formar mezclas explosivas con el oxígeno del aire; también puede llegar a provocar un incendio al reaccionar, en altas concentraciones, con materiales oxidantes y combustibles.

El ácido sulfúrico en soluciones concentradas destruye rápidamente los tejidos al entrar en contacto con éstos, la exposición repetida con soluciones diluidas puede llegar a causar dermatitis; en cambio en los ojos ocasiona graves trastornos, incluso la pérdida total de la vista; la inhalación de sus vapores o niebla afecta considerablemente el tracto respiratorio superior y a los tejidos de los pulmones.

El ácido sulfúrico no constituye un riesgo grave si los trabajadores son adecuadamente instruidos y supervisadas las labores que involucran el manejo de este compuesto.

La máxima concentración de ácido sulfúrico permitida en el ambiente para trabajar 8 horas diarias sin perjuicio para la salud es de  $1 \text{ mg/m}^3$ .

Las personas que hayan tenido contacto con el ácido sulfúrico deberán colocarse de bajo de una regadera de seguridad para lavar las partes contaminadas con agua en abundancia, mientras tanto se despoja al paciente de sus ropas lo más rápidamente posible.

Como ayuda a este primer auxilio puede utilizarse jabón para lavar las partes quemadas, recibirán un tratamiento médico similar al utilizando para el tratamiento de quemaduras térmicas.

Si llega a caer ácido sulfúrico en los ojos, éstos se irrigarán con agua por lo menos durante 15 minutos. Los párpados se separarán de los ojos durante la irrigación, para asegurar el contacto del agua con los tejidos de éstos y los propios párpados. Tan pronto como sea posible, se consultará al médico, de preferencia un especialista. Si después de la irrigación continúan las molestias, una segunda irrigación será necesaria durante 15 minutos más. Se puede aplicar a los ojos, como primer auxilio, de 2 a 3 gotas de un anestésico líquido y a continuación protegerlos con un parche. No se aplicarán aceites ni ungüentos oleosos.

Si alguna persona llegara a ingerir ácido sulfúrico tomará inmediatamente grandes cantidades de agua, con el objeto de reducir la concentración. Una vez hecho esto, puede dársele a tomar leche de magnesia o agua de cal para neutralizar el ácido. No debe provocarse el vómito ni hacer lavado de estomago. También recibirá atención médica inmediatamente.

Las personas que inhalen vapores de ácido sulfúrico serán trasladadas a zonas no contaminadas; se llamará inmediatamente a



QUÍMICA

médico, quien las mantendrá en observación con el fin de atenderlo en caso de presentarse una reacción pulmonar. Si se disponen de los medios necesarios, una persona capacitada o un médico, pueden suministrar oxígeno al paciente. Si no respira, deberá aplicarse un método artificial para iniciar la respiración.

El personal debe estar instruido acerca de los procedimientos establecidos para casos de emergencia y sobre la forma de proporcionar primeros auxilios en caso de contacto con el ácido o sus vapores.

#### ACIDOS NITRICO Y CLORHIDRICO:

Las precauciones en el manejo, almacenamiento y los primeros auxilios mencionados para el ácido sulfúrico aplican también para los ácidos nítrico y clorhídrico; ya que son materiales corrosivos y por lo tanto requieren de los mismos cuidados al trabajar con ellos, así como atención médica similar a la que se emplea con los accidentados con ácido sulfúrico.

#### CLORO:

El cloro es un gas a la temperatura y presión ambiente; de color amarillo verdoso y olor picante y sofocante que produce tos y lágrimas. Es más pesado que el aire. (Densidad 3.209 gr/lit a 0° C y 1 ATM).

Se maneja en recipientes herméticos, bajo la forma de gas, pero siempre existe en ellos tanto la fase líquida como la fase gaseosa.

Su presión de vapor en estado líquido es de 3.617 atmosferas.

En estado líquido el cloro tiene color ambarino claro, hierve a  $-34.05^{\circ}\text{C}$  y es más denso que el agua: 1.468 gr/lit a  $0^{\circ}\text{C}$ .

Este elemento químico, ya sea en forma de líquido o gas, no es explosivo ni inflamable, sin embargo, a semejanza del oxígeno es capaz de reaccionar enérgicamente con ciertas sustancias, dando origen a la combustión.

La evaporación de un volumen de cloro líquido produce alrededor de 450 volúmenes de gas.

Las mezclas de hidrogeno y cloro en que cualquiera de los dos elementos esté presente en más de 5% en volumen, reaccionan con violencia explosiva, formando ácido clorhídrico.

El cloro líquido es irritante para la piel; el contacto prolongado con esta sustancia produce quemaduras y causa daños graves en los ojos. El cloro gaseoso es un irritante enérgico que en concentraciones superiores a 15 p.p.m. irrita las membranas mucosas y el sistema respiratorio.

La menor concentración de cloro que puede percibirse mediante el olfato, es de 3.5 p.p.m. a partir de esta concentración, empieza a ocasionar molestias respiratorias. La máxima concentración permitida de este elemento para una jornada de trabajo es de 1 p.p.m. En casos extremos, la dificultad para respirar producida por este elemento puede llegar a causar la muerte —

por sofocamiento; en cambio no es una sustancia que cause intoxicaciones crónicas, ni se le conoce efectos acumulativos.

El cloro se clasifica como un gas comprimido no inflamable.

Los vapores de cloro son altamente irritantes al sistema respiratorio y de 3 a 5 p.p.m. en volumen de aire, son fácilmente advertidos por cualquier persona. En concentraciones superiores el efecto altamente irritante de este gas hace imposible que una persona pueda permanecer en dicha atmosfera. En presencia de concentraciones de cloro superiores a 5 p.p.m. se producen irritaciones en las membranas mucosas, el sistema respiratorio y la piel; en concentraciones mayores, causa irritación de los ojos, tos y dificultad para respirar. Si la exposición o las concentraciones son excesivas, se producirá una excitación general en la persona afectada, irritación de garganta, estornudos, salivación copiosa y vómitos. En casos extremos, la dificultad para respirar puede llegar a tal punto que provoque la muerte por sofocación.

En las áreas donde se maneje cloro deben existir regaderas de seguridad fácilmente accesibles en sitios destacados y que siempre se encuentren en buenas condiciones. También se instalarán fuentes para lavado de los ojos mantenidas en buenas condiciones de operación.

En caso de accidente, retirar al paciente del área contaminada y tener presente que la atención médica inmediata de las personas expuestas al cloro es de vital importancia.

El tratamiento es sintomático y no hay ningún antídoto conocido para el cloro, hasta la fecha. Si ha cesado la respiración, se dará al paciente respiración artificial inmediata. Si se dispone de un aparato inhalador de oxígeno, se administrará oxígeno, siempre que la aplicación la haga una persona familiarizada con la operación del aparato. El suministro de oxígeno no durará más de una hora de tratamiento continuo, después de cada hora se interrumpirá y continuará si las condiciones del paciente lo permiten. Para prevenir el desarrollo de una congestión severa de los pulmones (edema pulmonar), proporcionar oxígeno puro tan pronto como sea posible.

Cuando el cloro líquido entra en contacto con los ojos, aunque sea en cantidades muy pequeñas deben lavarse éstos durante 15 minutos con agua abundante manteniendo los párpados abiertos durante la irrigación, para asegurar el contacto del agua con los tejidos de la superficie del ojo y de los párpados. Si persiste la irritación ocular, recurrir a un segundo periodo de irrigación de 15 minutos y consultar inmediatamente al médico especialista. Si el cloro líquido o agua de cloro contamina la piel o la ropa, se usará inmediatamente la regadera de emergencia. La ropa debe quitarse bajo la regadera, y hay que lavar la piel con agua y jabón en abundancia.

Aunque debido a sus propiedades físicas es extremadamente difícil que alguna persona llegue a ingerir cloro, en caso de que esto suceda, si la persona que lo ha ingerido permanece consciente, se le debe hacer beber inmediatamente copiosas cantidades de agua de cal, leche de magnesia o agua pura, si las otras sustancias no están a mano. No se usarán soluciones de bicarbonato de sodio. Nunca trate de hacer ingerir a un paciente que está inconsciente. Es posible que se produzcan vómitos espontáneamente, pero no hay que hacer ningún intento para inducir al vómito.

Si alguna persona llega a estar seriamente expuesta a la acción del cloro, trasladarla inmediatamente a un área no contaminada. Si la respiración no ha cesado se acostará boca arriba con la espalda y cabeza levantadas. Se mantendrá caliente y en reposo, usando cobertores para cubrirlo en caso necesario. Si el paciente ha cesado de respirar, se le suministrará respiración artificial inmediatamente y atención médica a la mayor brevedad posible.

#### MONOXIDO DE CARBONO:

El monóxido de carbono es un gas incoloro, inodoro e insípido. Se asemeja al nitrógeno en varias propiedades físicas tales como el punto de fusión, punto de ebullición, densidad, calor específico, ambos tienen el mismo peso molecular, mismo número de valencia de electrones y estructura electrónica semejante.

Esta similitud se termina aquí, ya que mientras el nitrógeno no es inflamable, es inerte, y no tóxico, el monóxido de carbono es inflamable, químicamente reactivo y muy venenoso. El monóxido de carbono es inflamable en presencia de aire y oxígeno produciendo dióxido de carbono con un calor de reacción de 123.642 BTU/lb mol, esta reacción procede en forma explosiva si los gases son mezclados en proporciones estequiométricas. Los límites inferior y superior de inflamabilidad del monóxido de carbono en aire son 12.5 y 74% en volumen respectivamente, cuando está saturado con vapor de agua a temperatura ambiente.

Aunque el manejo del monóxido de carbono es peligroso debido a su inflamabilidad y reactividad química, su toxicidad representa un peligro mayor. El monóxido de carbono es clasificado como un asfixiante químico que produce una acción tóxica cuando se combina con la hemoglobina de los glóbulos rojos para formar un compuesto relativamente estable denominado carboxy hemoglobina. Aún en pequeñas cantidades el monóxido de carbono al estar presente en el aire puede causar reacciones tóxicas ya que tiene gran afinidad por la hemoglobina (300 veces mayor que la del oxígeno), y al combinarse con ésta impide a la sangre la entrega de oxígeno a los tejidos. La máxima concentración de monóxido de carbono permisible en el ambiente durante una jornada de 8 horas es de 50 p.p.m.

Concentraciones de 0.02% produce leves síntomas tóxicos durante varias horas. Dolor de cabeza y malestar son resultados de una exposición de 2 a 3 horas con una concentración de 0.04%, con 0.06% estos síntomas tóxicos aparecen después de una hora. Las concentraciones de 0.1 a 0.2% producen leves palpitaciones del corazón después de media hora de exposición, una tendencia a tambalearse después de hora y media, confusión mental y dolor de cabeza, náuseas como resultado de 2 horas de inhalación. A una concentración de 0.25% usualmente produce inconsciencia al estar en contacto con el monóxido de carbono durante media hora. Inhalaciones en concentraciones de 0.4% puede resultar fatal en menos de 1 hora. Inhalaciones de altas concentraciones puede producir repentinos e inesperados colapsos. Careciendo de olor y color el monóxido de carbono no advierte su presencia.

El monóxido de carbono no es deshechado o destruido por el cuerpo. El CO es gradualmente eliminado a medida que aire libre de CO es inhalado, las personas accidentadas con CO deben recibir primeros auxilios antes de la llegada del médico.

Es extremadamente importante acelerar la eliminación del CO de la corriente sanguínea debido a su acción venenosa. Cualquier síntoma de envenenamiento con CO debe suministrarse inmediatamente aire fresco, mantener cubierto el cuerpo, colocar a la persona boca abajo y con la cara volteada a un lado.

Si respira se debe suministrar oxígeno conteniendo 7 al 10% de  $\text{CO}_2$ . La inhalación de oxígeno puro elimina más rápidamente el CO que el aire fresco, mezcla de oxígeno y  $\text{CO}_2$  actúa como un agente respiratorio poderoso y un estimulante cardíaco, induciendo respiraciones profundas y rápida ventilación de los pulmones.

La administración de  $\text{O}_2$  solo, después de una severa asfixia no demuestra efectividad, ya que la víctima generalmente respira deficientemente.

Si el paciente no respira, se debe iniciar inmediatamente respiración artificial con administración intercalada de mezcla  $\text{O}_2$  y  $\text{CO}_2$ . La inhalación de esta mezcla debe continuarse de 15 a 30 minutos después del retorno de la respiración espontánea. El tratamiento posterior consiste en tomar medidas preventivas para evitar la neumonía. Las drogas son poco eficientes en el tratamiento de envenenamiento con CO.

Respuestas fisiológicas a diferentes concentraciones de monóxido de carbono.

% en volúmen	ppm (molar)	Respuesta y tiempo de exposición
0.005	50	Exposición permisible para 8 horas de trabajo
0.02	200	Produce sintoma tóxico leve durante varias horas
0.04	400	Dolor de cabeza y malestar después de 2-3 horas

% en volúmen	ppm (molar)	Respuesta y tiempo de exposición
0.06	600	Dolor de cabeza y mal-estar después de 1 hora
0.1- 0.2	1000-2000	Palpitaciones del corazón, desequilibrio y confusión mental (1/2 a 2 horas)
0.2 - 0.25	2000-2500	Produce inconsciencia después de 1/2 hora
0.4 arriba	4000-arriba	Muerte en menos de 1 hora

#### HIDROGENO:

El hidrogeno es un gas incoloro con punto de fusión de  $-259.18^{\circ}\text{C}$  punto de ebullición  $-252.8^{\circ}\text{C}$ , límite superior de explosividad 74.2%, límite inferior de explosividad 4.1%, densidad 0.099 gr/lit, temperatura de autoignición  $585^{\circ}\text{C}$ , reacciona violentamente con materiales oxigenados.

Este compuesto es inflamable y explosivo al ser expuesto al calor o la flama, para combatir el fuego ocasionado por hidrogeno se usa dióxido de carbono o espuma química.

Al existir una inhalación ligera se observan rápidamente alteraciones, las que desaparecen al terminar la exposición.

No existen reportes de daños graves por exposiciones prolongadas.

Debido a su inflamabilidad no se usa comercialmente en estado líquido.

## ACETONITRILLO ( $\text{CH}_3 - \text{CN}$ )

El acetonitrilo es un líquido incoloro con olor aromático, punto de fusión  $-41^\circ \text{C}$ , punto de ebullición  $80.1^\circ \text{C}$ , punto de inflamación  $5.6^\circ$  (copa abierta), densidad  $0.7868$  a  $20^\circ/20^\circ \text{C}$ , densidad de vapor  $1.42$ .

Este producto es inflamable, explosivo y tóxico.

El acetonitrilo en contacto con flama o calor puede inflamarse o explotar por reacción con agentes oxidantes. En contacto con materiales alcalinos puede polimerizarse o descomponerse en forma explosiva. Cuando es calentado hasta la descomposición emite vapores de cianidas, las cuales reaccionan con agua, vapor o ácidos que producen vapores tóxicos inflamables que reaccionan vigorosamente con materiales oxidantes.

Para combatir el fuego originado por acetonitrilo se utiliza espuma química, dióxido de carbono, polvo químico o tetracloruro de carbono.

Debe almacenarse en recipientes herméticos y alejados del calor

El valor límite para una jornada de trabajo es de 40 parte por millón, recomendado por la Conferencia Americana Gubernamental de Higienistas Industriales.

#### ORTO DICLORO BENCENO:

Es un líquido incoloro con punto de fusión de  $-17.5^{\circ}\text{C}$ , punto de ebullición  $180-183^{\circ}\text{C}$ , punto de congelación  $-22^{\circ}\text{C}$ , punto de inflamación  $66.1^{\circ}\text{C}$ , densidad 1.307 a  $20^{\circ}\text{C}$ , temperatura de autoignición  $647^{\circ}\text{C}$ , límite inferior de explosividad 2.2%, límite superior de explosividad 9.2%.

El orto dicloro benceno es un irritante poderoso, puede causar la muerte o lesiones permanentes, después de una corta exposición a pequeñas cantidades.

Por ingestión moderada puede lesionar el hígado y el riñón además de irritar las membranas mucosas.

La Conferencia Americana Gubernamental de Higienistas Industriales recomienda 50 partes por millón como el límite permisible para una jornada de trabajo.

Es inflamable al ser expuesto al calor o la flama, reacciona vigorosamente con materiales oxigenados. Para combatir el fuego provocado por el orto dicloro benceno se usa agua, espuma  $\text{CO}_2$ , polvo químico ó  $\text{CCL}_4$ .

Debe almacenarse en lugar fresco, alejado de líneas eléctricas y su manejo requiere de equipo aterrizado.

#### FOSGENO:

Se considera que el compuesto químico de mayor peligro para —

su manejo es este proceso, es el fosgeno, de aquí que deben de extremarse las precauciones de seguridad.

El fosgeno es de un color amarillo pálido, o verde al tener impurezas, tiene un olor fuerte y sofocante, parecido al heno recién segado. Es soluble en hidrocarburos aromáticos, alifáticos y clorados, ácidos orgánicos y esteres. Puede considerarse como cloruro de ácido carbónico y como tal es muy activo químicamente.

Como medida de precaución, dentro del reactor de síntesis de fosgeno, no debe haber oxígeno debido a que puede reaccionar con el monóxido de carbono y formar dióxido de carbono, retardando la velocidad de reacción, tampoco debe haber hidrógeno, y a que con el cloro se produce ácido clorhídrico.

Después de la exposición a concentraciones bajas de fosgeno, el gusto del humo del tabaco resulta desagradable. La exposición a concentraciones moderadas provoca molestias que producen un efecto posterior, los síntomas subjetivos de la exposición original pueden volverse a sentir cuando el olor a hierba contada es intenso.

Dentro de las investigaciones reportadas para la medición cuantitativa de fosgeno en el aire y los efectos del mismo, se tienen los siguientes datos:

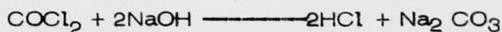
Olor perceptible a 0.0044 mg/lit

Irritación de los ojos, nariz y garganta a 0.0044 mg/lit. Concentración letal calculada para el hombre a 0.11 mg/lit durante 30 min.

Concentración máxima segura para la exposición durante el trabajo es de 0.004 mg/lit (0.1 ppm).

En el caso de que una persona sea afectada por la acción del fosgeno no se permitirá ninguna actividad física. Si la respiración se ha detenido se debe proporcionar respiración artificial por cualquier método efectivo, inmediatamente se llamará a un médico. Cuando hay respiración o ha sido restaurada debe ser administrado oxígeno, durante el tiempo que sea necesario para mantener el color normal de la piel. Se ha comprobado que los mejores resultados son obtenidos cuando los pulmones irritados son trabajados con oxígeno bajo una presión de 4 cm. de agua. También el respirar oxígeno bajo presión es útil como una ayuda en la prevención del edema pulmonar, el cual ocurre después de haber respirado un irritante químico. Tomando en cuenta lo anterior, se debe proveer al personal con máscara que tenga exhalación con presión.

Si llegara a existir un deshecho de fosgeno no se debe permitir que este vaya a drenajes o alcantarillas, lo que debe hacerse es mezclarse con un lavador cáustico, por las ventajas que presenta por su bajo costo de producción y resistencia a la congelación, se utiliza por lo general el hidróxido de sodio, con el cual se lleva a efecto la siguiente reacción:



En la planta se instalará una torre de lavado cáustico a un lado del reactor de síntesis de fosgeno, estos equipos estarán interconectados, para tener la facilidad de enviar el fosgeno a la torre en caso de emergencia.

#### TOLUEN DIISOCIANATO:

Aún cuando el toluen diisocianato no tiene la toxicidad del fosgeno debe de seguirse las indicaciones de seguridad que se implanten, ya que de no efectuarse así se producirán accidentes que son relativamente fáciles de evitar.

Como en otras industrias químicas las reglas comunes de: no ingerir el material, no inhalar los vapores o derramar el producto en la piel son también aplicados al TDI. En el caso de que sea ingerido, aún cuando este producto es moderadamente tóxico, produce una irritación severa y probablemente, una acción corrosiva en el estómago, por lo tanto se debe beber grandes cantidades de agua con sal, inducir el vómito, tomar un purgante y llamar al médico.

Análogamente el derramamiento en la piel producirá irritación e inflamación local del área expuesta, a menos que el TDI sea eliminado inmediatamente y la piel lavada completamente, si la exposición es grande las regaderas de seguridad deben ser usadas inmediatamente, estas condiciones indican que precauciones rígidas de limpieza y seguridad deben ser empleadas.

La toxicidad del TDI al ser ingerido o derramado en la piel es baja, aún cuando las cantidades de este compuesto sean grandes, pero el TDI es nocivo para los tejidos del ojo, como resultado de reacción con el fluido del ojo que puede causar deshidratación del tejido y ocasionar daños en la córnea. En ese caso el TDI debe ser desalojado inmediatamente por medio de un enjuague con una corriente de agua que dura al menos 15 min. La persona afectada debe ser enviada a un oculista.

Los vapores del TDI al ser inhalados pueden producir sensibilización alérgica del tracto respiratorio, similar al asma, irritación de garganta y tos. La mayor parte de las personas se recuperan al ser removidos de la fuente de origen de la irritación, algunas personas, sin embargo desarrollan un aumento a la sensibilidad del TDI.

Inicialmente fue sugerido que 0.1 ppm de TDI en el aire pudiera ser usado como un nivel de trabajo seguro, en la actualidad están propuestas 0.05 y aún 0.02 ppm, este último es el límite del umbral asentado por la reunión de 1971 de la Conferencia Americana de Higienistas Industriales Gubernamentales. Se ha encontrado que 0.4 ppm es el nivel más bajo detectado por el olor y en 0.5 ppm ocurre irritación de la nariz y garganta.

La primera precaución en cualquier trabajo que incluya el manejo tanto de fosgeno como toluen diisocianato es examinar al personal potencial especialmente a aquellos que pueden estar en contacto —

directo con estos, al existir cualquier historia previa de asma, lesiones bronquiales u otros desordenes respiratorios, el personal que manifieste dichos cuadros clínicos debe ser rechazado.

Un sistema de ventilación adecuado debe ser instalado. Un buen punto de partida es mantener un mínimo de velocidad aerea lineal, bajo condiciones de trabajo normal, de 12 m/min usando este punto como base el aire puede ser muestreado en las diferentes secciones de operación para ver cual es la concentración del TDI y el fosgeno. El sistema de ventilación debe ser diseñado de tal forma en que no puedan existir flujos cruzados. Se recomienda el uso de campanas o chimeneas arriba del equipo. Los ductos agotadores descargarán a una altura adecuada arriba del edificio, teniendo especial cuidado en evitar que el aire fresco con que se surten los abastecedores no incluyan gases expulsados en los agotadores.

Como equipo de protección para el trabajador aparte de las máscaras citadas con anterioridad, deben usar anteojos de seguridad con protección lateral en prevención de derramamientos o salpicaduras. Es también recomendable usar delantales de caucho o neopreno, así como guantes del mismo material, lona o piel. Una vez contaminados dichos guantes deben ser desechados. Además es necesario utilizar botas de caucho.

Facilidades adecuadas deben ser previstas para la descontaminación

de áreas de trabajo, en caso de derramamientos estas deben incluir un drenaje adecuado, mangueras y cubetas, y un decontaminante eficaz consistente en una solución acuosa de amoniaco al 5%, conteniendo 10% de alcohol que estará a la mano para un accidente.

Ni agua ni ácidos deben ser añadidos al TDI, ya que reaccionan con desprendimientos de monóxido de carbono, lo cual puede producir ruptura de tanques o tambores de almacenamiento. Similarmente materiales alcalinos tales como hidróxido de sodio o potasio reaccionan violentamente. Regaderas de seguridad deben estar en el área de trabajo, así como aparatos para enjuagar los ojos, con el fin de permitir al personal lavar derramamientos de toluen diisocianato.

El toluen diisocianato debe ser almacenado lejos del calor y de la humedad a temperaturas entre 15 y 35° C, los recipientes deben ser purgados con nitrógeno seco para proteger al TDI, teniendo cuidado de ventilar el área para eliminar los vapores y proteger al personal.

Equipo de protección para el personal:

- a) Uniformes de trabajo
- b) Equipo de respiración artificial, con oxígeno a una presión de exhalación de 4 cm de agua
- c) Anteojos de seguridad con protección lateral
- d) Botas de caucho

- e) Guantes de neopreno, lona y piel
- f) Delantales de neopreno
- g) Cascos de seguridad
- h) Goggles
- i) Caretas para los cascos

Se deberá instalar equipo adecuado para la protección contra incendios, de acuerdo a las normas establecidas por la National Fire Protection Association.

CAPITULO V

ESTUDIO ECONOMICO

I. PLANTEAMIENTO

Como resultado de la investigación y el análisis del mercado, teniendo la posibilidad de conseguir la tecnología para la fabricación del Toluen Disocianato, calcular consumos y costos de materias primas, mano de obra, terreno, edificio y gastos generales, a continuación se presenta un estudio económico en base a los puntos mencionados anteriormente, con la finalidad de calcular la inversión requerida y la rentabilidad de este proyecto.

Desde el punto de vista inversión, es necesario efectuar ésta en un plazo de dos años ya que es el tiempo estimado para la instalación y erección de la Planta.

II. DESGLOSE Y CALCULO DE GASTOS

La inversión nos llevaría dentro del primer año de instalación a las siguientes cifras que satisfacen las necesidades para este período.

a) Terreno

Dadas las características de la Planta y previendo futuras expansiones se ha fijado un terreno de 10,000 mt<sup>2</sup> como el

área necesaria para dicha Planta, mismo que podría localizarse en algún parque industrial de los creados por el Gobierno Federal con un costo aproximado de \$ 1,000,000.00.

b) Edificios

Se considera que las áreas expuestas a continuación reúnen los requisitos de funcionalidad y seguridad, por lo que se han dividido en: Producción, almacenamiento, oficinas, laboratorio, servicio y mantenimiento.

El costo de las diferentes construcciones tiene un monto aproximado de \$3,600,000.00, ya que la mayor parte del equipo se encuentra a la intemperie.

Se ha destinado un área libre de 3,000 mt<sup>2</sup> que permita cubrir futuras expansiones.

La inversión de las construcciones deberá realizarse de la siguiente manera: \$ 2,160,000.00 el primer año y el saldo (\$ 1,440,000.00) en el segundo año.

c) Costo de la Planta

El costo de la Planta se estimó de la siguiente manera: En la revista Japan Chemical Week se encontró el dato del costo y capacidad de la Planta de Mitsubishi Chemical Ind. LTD,

se seleccionó esta compañía en base al análisis de los diversos procesos realizados en el Capítulo No. 3. Los valores reportados son: Costo 2,500 millones de yens para una capacidad de 7,000 toneladas anuales, de acuerdo a la ecuación 1 y con la corrección de los índices de Marshal & Stevens se obtuvo la cantidad de \$174,000,000.00 correspondiente a una capacidad de 9,300 toneladas anuales.

Ecuación 1

$$C_2 = C_1 \left( \frac{CI_2}{CI_1} \right)^{0.6}$$

Donde

$C_2$  = Costo de la Planta a la capacidad deseada.

$C_1$  = Costo de la Planta de la capacidad conocida

$CI_1$  = Capacidad instalada

$CI_2$  = Capacidad deseada

De acuerdo a los porcentajes reportados en el artículo antes mencionado del total de la inversión \$139,200,000.00 corresponden al costo del equipo y \$34,800,000.00 a gastos de instalación. De las cantidades mencionadas se erogarán el primer año \$69,600,000.00 para equipo y \$17,400,000.00 para gastos de instalación. El remanente será cubierto en el segundo año de construcción.

d) Muebles y equipos de oficina y transportes

Se estima que para el inicio de la operación de la Planta se gastarán \$250,000.00 en muebles y equipo de oficina y \$300,000 en equipo de transporte, que deberán comprarse en el segundo año.

III. BALANCES PROFORMA

De acuerdo a las cifras antes citadas a continuación se incluyen balances proforma en miles de pesos de los dos años de instalación.

Balance general proforma después del primer año de instalación:

Bancos	340	
Terreno	1,000	
Edificios	2,160	
Maquinaria	69,600	
Gastos de intalación	17,400	Capital 90,500
	<hr/>	<hr/>
	90,500	90,500

Balance general proforma después del segundo año de instalación:

Bancos	350	
terreno	1,000	
Edificios	3,600	
Maquinaria	139,200	
Muebles y Equipo		
de oficina	250	
Equipo de transporte	300	
Gastos de instalación	34800	Capital 179,500
	<hr/>	<hr/>
	179,500	179,500

Los balances presentados muestran la necesidad de que los accionistas inviertan la suma de \$90,500,000.00 en el primer año de instalación y que el capital social total representado por la cifra de \$179,500,000.00 quede totalmente invertido en el segundo año.

Sería adecuado contar con la totalidad del capital social en efectivo sin perjuicio de que se obtenga algún financiamiento externo en el caso de que los accionistas no pudieran hacer la inversión global.

#### IV. CALCULO DEL COSTO DE MATERIAS PRIMAS Y COSTOS DIRECTOS E INDIRECTOS DE PRODUCCION

A continuación se calcula el costo de materias primas por tonelada de Tóluen Diisocianato basado en las cantidades obtenidas en el balance de materiales del Capítulo 3.

<u>Materias Primas</u>	<u>Precio</u>	<u>Consumo por ton de TDI</u>	<u>Costo/ton TDI</u>
Tolueno	\$ 492.-/ton	650.69 Kg	\$ 970.83
HNO <sub>3</sub>	\$ 2000.-/ton	919.30 kg	\$ 1838.60
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	\$ 425.-/ton	747.00 kg	\$ 317.48
CL <sub>2</sub>	\$ 1400.-/ton	944.60 kg	\$ 1322.44
H <sub>2</sub>	\$ 0.02/M <sup>3</sup> N	956.00 M <sup>3</sup> N	\$ 19.12
C <sub>2</sub>	\$ 360.-/ton	314.90 M <sup>3</sup> N	\$ 134.11
C. Activado	\$ 8390.-/ton	0.50 kg	\$ 4.19
ODB	\$ 1800.-/ton	11.00 kg	\$ 19.80
Acetonitrilo	\$ 6610.-/ton	10.40 kg	\$ 68.74
N <sub>2</sub>	\$ 7.57/M <sup>3</sup> LIQ.	200 M <sup>3</sup> N	\$ 2.72
<b>TOTAL:</b>			<b>\$ 4698.03/ton TDI</b>

En la Tabla V-1 se muestran los costos de producción calculados en base a los pronósticos del análisis del mercado efectuado en el capítulo 2, se encuentran detallados los costos de producción directos e indirectos, que fueron calculados de la forma que a continuación se describe:

a) Mano de Obra Directa

Para la funcionalidad de la Planta se consideró conveniente el número de 20 personas por turno, esta cantidad es la requerida debido al alto grado de instrumentación y automatización electrónica con que cuenta el paquete de Tecnología a utilizar.

No se requiere mano de obra especializada, ya que el entrenamiento proporcionado por la compañía será suficiente para la operación segura y eficaz de la Planta.

La distribución del personal por turno será de la siguiente manera:

	<u>Sueldo/mes</u>
1 Supervisor de Producción	\$10,000.00
1 Supervisor de Mantenimiento	\$10,000.00
10 Operadores	\$ 4,000.00 c/u
7 Ayudantes	\$ 2,000.00 c/u
1 Almacenista	\$ 3,000.00

Lo que representa \$4,004,000.00 anualmente por 4 grupos (80 personas), se prevee un aumento del 10%/año y las cantidades resultantes se encuentran en la Tabla V-1.

b) Mano de Obra Indirecta

Se calculó de acuerdo al organigrama que se presenta en el Anexo V-3 y los sueldos están repartidos de la siguiente manera:

	<u>Sueldo/mes</u>
Gerente General	\$ 30,000.00
Gerente de Ventas	\$ 20,000.00
Gerente Administrativo	\$ 20,000.00
Gerente de Producción	\$ 20,000.00
Ingeniero en Sistemas	\$ 18,000.00
Ingeniero Instrumentista	\$ 12,000.00
Ingeniero Eléctrico	\$ 12,000.00
2 Ingenieros Mecánicos	\$ 12,000.00 c/u
2 Ingenieros Químicos	\$ 12,000.00 c/u
Programador	\$ 6,000.00
3 Vendedores	\$ 5,000.00 c/u
Contador	\$ 12,000.00
3 Secretarias	\$ 4,000.00 c/u
Cajero	\$ 5,000.00
3 Choferes	\$ 1,600.00 c/u
3 Empleados	\$ 1,200.00 c/u
2 Laboratoristas	\$ 1,500.00 c/u
1 Químico	\$ 5,000.00

Estas percepciones representan un gasto para la compañía de \$ 3,187,600.00 por año, considerando un aumento global del 10% anual en los sueldos, las cantidades de cada año se muestran en la Tabla V-1.

De Mitsubishi Chemical Ind. LTD se obtuvieron los siguientes datos de consumo de servicios con los que se calcularon los valores reportados en la Tabla V-1 para los gastos por concepto de servicios.

c) Electricidad

2500 kw-hr/ton TDI.

A un costo de \$0.32/kw-hr resulta un consumo de \$800.00/ton de TDI, este precio por las cantidades producidas anualmente nos proporciona el costo del consumo de energía eléctrica.

d) Agua

Se utilizan 8.5 ton de agua/ton de TDI, a un precio de \$3.20/M<sup>3</sup> representa un gasto en agua de \$27.20/ton de TDI, al multiplicar este valor por las toneladas de TDI producidas se obtiene la erogación que implica el consumo del agua.

e) Vapor

Son necesarias 12.5 ton de vapor/ton TDI. El vapor tiene un costo de \$10.00/ton, por lo que se gastan \$125.00 en vapor por cada tonelada de Toluen Diisocianato.

f) Combustible:

El consumo y costo de combustible se calculó en el capítulo 3.

g) Seguros y Refacciones

Para estimar el costo de seguros y refacciones se siguió el criterio reportado en diferentes artículos del Hydrocarbon Processing en donde mencionan que es conveniente considerar el 2.5% del costo del equipo como el monto de seguros y refacciones.

h) Prevención Social

Representa el 15% de la mano de obra.

i) Depreciación de Maquinaria

De acuerdo a la vida útil del equipo, la depreciación del mismo se estima en un 9% anual del costo del equipo, lo que representa \$ 12,700.00/año.

j) Depreciación del Edificio

La depreciación de los edificios es del 7% anual, lo que corresponde en nuestro caso a \$ 252,000.00/año.

k) Amortización de Gastos de Instalación

La amortización de los gastos de instalación es del 5% anual, por lo que serán \$ 1,740,000.00/año.

V. ANÁLISIS ECONOMICO

Por medio del paquete de programas para computadora que Industrias Resistol, S.A., ha formulado para evaluación económica de proyectos y utilizando los datos generados en el presente trabajo, se obtuvieron los estados y análisis financieros:

- A) Proyección del Costo de Producción.
- B) Estado de Pérdidas o Ganancias.
- C) Análisis del Flujo de Efectivo.
- D) Estudio de la Sensibilidad del Proyecto.

A) Proyección del Costo de Manufactura.

El cálculo del costo de producción se muestra en la tabla V-1, de donde se obtienen los siguientes datos:

<u>Año</u>	<u>Costo de Producción ( \$/Ton. )</u>
1977	11,270.-
1978	10,830.-
1979	10,360.-
1980	9,960.-
1981	9,590.-
1982	9,250.-
1983	9,370.-
1984	9,500.-
1985	9,640.-
1986	9,740.-
1987	9,960.-

B) Estados de Pérdidas o Ganancias

De acuerdo al estudio de la sensibilidad del proyecto, combinado con el estado de pérdidas o ganancias, se ha llegado a la conclusión de que los precios de venta para el producto y subproducto del presente proyecto serán de:

.....

Toluen Diisocianato \$ 18,930.-/Ton.

Acido Clorhídrico \$ 1,070.-/Ton.

Con los que la inversión es económicamente atractiva, estos costos representan un aumento del 16% en comparación al precio de importación del Toluen Diisocianato.

Tomando en cuenta lo anterior al calcular el estado de pérdidas y ganancias se obtienen los siguientes datos, correspondientes a la Rentabilidad sobre la Inversión Fija Total (RSI).

<u>Año</u>	<u>RSI (%)</u>
1977	5.62
1978	7.97
1979	10.23
1980	12.65
1981	15.32
1982	18.35
1983	18.27
1984	18.15
1985	18.01
1986	17.83
1987	17.63

El estado de Pérdidas o Ganancias se encuentra en la tabla V-2.

#### C) Análisis del Flujo de Efectivo

Con base en los datos obtenidos en el Estado de Pérdidas o Ganancias, se realizó el análisis del flujo de efectivo que se encuentra en la tabla V-4.

De este análisis se obtuvieron los valores para los índices que se mencionan a continuación:

1) Rentabilidad, descontando flujo de efectivo.-	16.51 %
2) Valor Presente Neto del Proyecto.-	25.41
3) Tiempo de la Recuperación de la Inversión.-	8.60 Años
4) Tiempo de Recuperación de la Inversión, descontando el Costo de Capital.-	11.46 Años.

Al analizar los índices resultantes del Estado de Pérdidas o Ganancias, así como del Flujo de Efectivo, se observa que se tienen rentabilidades altas, un valor presente neto, no solo positivo sino alto y que los tiempos de recuperación de la inversión no son grandes si se tiene en cuenta la magnitud de la inversión, debido a lo expuesto anteriormente es posible predecir que el proyecto es económicamente atractivo para los inversionistas.

#### D) Estudio de la Sensibilidad del Proyecto.

El estudio de la sensibilidad del proyecto se realizó tomando como base el resultado del Valor Presente Neto ( VPN ), obtenido en el flujo de efectivo y observando la variación del VPN al cambiar el valor de los conceptos mencionados a continuación (al variar cualquiera de ellos los demás permanecen constantes):

- 1) Vida del Proyecto
- 2) Volúmen de Ventas
- 3) Precio de Venta
- 4) Inversión Inicial

1) Sensibilidad a la Vida del Proyecto.

No. de períodos	VPN	Variación (%)
10	16.24	-36.06
9	5.62	-77.89
8	-6.67	-126.30
7	-20.89	-187.24
6	-37.29	-246.81
5	-56.51	-322.45
4	-75.69	-397.93
3	-94.96	-473.78

Los resultados de la sensibilidad a la Inversión Inicial, Volumen de Ventas y Precio de Venta, se encuentran en la figura V-1, el presente estudio muestra que el proyecto es muy sensible a las cuatro variables analizadas, por lo que es recomendable evitar fluctuaciones en los conceptos mencionados.

En todas las proyecciones realizadas, enlistadas anteriormente, se consideró que la saturación de la capacidad de la planta sucederá a los 6 años de operación, por lo que los otros cinco incluidos en dichas proyecciones la planta operará a su máxima capacidad, pero el mismo tiempo se tomó en cuenta que un 30% de las utilidades anuales se utilizarán para futuras expansiones.

De acuerdo a lo que se vió en el desarrollo del presente capítulo, los estudios económicos realizados muestran que la inversión es recuperada en

un tiempo relativamente corto, con buena rentabilidad y valor presente neto, lo que la hace atractiva para los posibles inversionistas.

PROYECCION DEL COSTO DE MANUFACTURATABLA V - 1

	1977	1978	1979	1980
Costo de materias primas	23.89	26.94	31.00	35.58
Empaque y/o envase	3.08	3.47	4.00	4.50
Mano de obra y gastos	4.00	4.40	4.84	5.33
Costo de servicios	4.85	5.47	6.30	7.23
Costo de Almacenaje	0.30	0.30	0.30	0.30
Costo de las Ventas	36.13	40.59	46.44	53.02
Costo (x/unidad)	7.16	7.13	7.09	7.05
Margen Bruto ( x )	64.21	64.34	64.55	64.73
Depreciación	15.77	15.77	15.77	15.77
Mantenimiento y Rep.	X 1.30	X 1.30	X 1.30	X 1.30
Supervisión y otros Indirectás	3.69	4.01	4.36	4.74
Gastos Indirectos	20.76	21.07	21.43	21.81
Costo de Manufactura	56.88	61.66	67.87	74.83
Costo (x/unidad)	X 11.27	X 10.83	X 10.36	X 9.96
Precio de Venta (x/u)	20.00	20.00	20.00	20.00
Margen s/c Manuf. (x)	43.65	45.83	48.19	50.22

1981	1982	1983	1984	1985	1986	1987
46.91	47.27	47.27	47.27	47.27	47.27	47.27
5.27	6.09	6.09	6.09	6.09	6.09	6.09
5.86	6.45	7.09	7.80	8.58	9.44	10.39
8.31	9.61	9.61	9.61	9.61	9.61	9.61
<u>0.30</u>	<u>0.30</u>	<u>0.30</u>	<u>0.30</u>	<u>0.30</u>	<u>0.30</u>	<u>0.30</u>
<b>60.66</b>	69.72	70.36	71.07	71.85	72.71	<b>73.65</b>
7.02	6.98	7.05	7.12	7.19	7.20	7.38
64.91	65.10	64.77	64.42	64.03	63.60	63.12
15.77	15.77	15.77	15.77	15.77	15.77	15.77 ✓
1.30	1.30	1.30	1.30	1.30	1.30	1.30
<u>5.17</u>	<u>5.63</u>	<u>6.15</u>	<u>6.71</u>	<u>7.34</u>	<u>8.02</u>	<u>8.76</u>
22.23	22.70	23.21	23.78	24.40	25.03	25.84
82.90	92.42	93.58	94.85	96.25	97.79	99.49
9.59	9.25	9.37	9.50	9.64	9.79	9.96 ✗
20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00
52.05	53.73	53.15	52.51	51.81	51.04	50.19

Cantidades ( x MM )

## ESTADO PROFORMA DE PERDIDAS O GANANCIAS

TABLA V- 2

	1977	1978	1979	1980	1981	1982	1983	1984	1985	1986	1987
Volumen (M.M. Unids.)	5.05	5.69	6.55	7.52	8.64	9.99	9.99	9.99	9.99	9.99	9.99
Precio de Venta ( x/u )	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00
Venta Neta Facturada	100.94	113.82	131.00	150.32	172.88	199.74	199.74	199.74	199.74	199.74	199.74
Venta Neta	95.89	108.13	124.45	142.80	164.24	189.75	189.75	189.75	189.75	189.75	189.75
Costo de las Ventas	36.13	40.59	46.44	53.02	60.66	69.72	70.36	71.07	71.85	72.71	73.65
Gastos de Arranque y Proyecto	2.30										
Utilidad Bruta	57.47	67.54	78.01	89.79	103.57	120.04	119.39	118.68	117.90	117.04	116.10
Gastos Indirectos <i>Prod.</i>	20.76	21.07	21.43	21.81	22.23	22.70	23.21	23.78	24.40	25.08	25.84
Gastos de Administración de Ventas	4.53	4.91	5.43	6.01	6.69	7.49	7.49	7.49	7.49	7.49	7.49
Cargos Financieros	9.33	8.69	8.10	7.54	7.01	6.54	5.75	4.96	4.18	3.39	2.61
Utilidad A. Impuestos	22.85	32.86	43.05	54.43	67.64	83.31	82.93	82.45	85.83	81.07	80.16
ISLR + Rep. Utils.	11.43	16.43	21.53	27.21	33.82	41.65	41.47	41.22	40.91	40.54	40.08
UTILIDAD NETA	11.43	16.43	21.53	27.21	33.82	41.65	41.47	41.22	40.91	40.54	40.08

Caja y Bancos	0.92	0.97	1.10	1.25	1.42	1.61	1.64	1.66	1.69	1.72	1.75
Inventarios Totales	3.69	4.07	4.67	5.33	6.11	7.03	7.08	7.14	7.20	7.27	7.35
Cuentas Por Cobrar	23.01	25.94	29.86	34.26	39.41	45.53	45.53	45.53	45.53	45.53	45.53
Cuentas Por Pagar	<u>2.94</u>	<u>3.31</u>	<u>3.81</u>	<u>4.38</u>	<u>5.03</u>	<u>5.82</u>	<u>5.82</u>	<u>5.82</u>	<u>5.82</u>	<u>5.82</u>	<u>5.82</u>
Capital de Trabajo	24.67	27.67	31.81	36.46	41.89	48.34	48.42	48.50	48.59	48.69	48.80
Inversión Fija	<u>178.60</u>										
Inversión Total	203.27	206.27	210.41	215.06	220.49	226.94	227.02	227.10	227.19	227.29	227.40
Activo Fijo Neto	162.83	147.06	131.29	115.52	99.79	83.99	68.22	52.45	36.68	20.91	5.14
Activo Neto Total	X 190.45	178.05	166.92	156.37	146.68	138.15	122.46	106.77	91.10	75.43	59.77
Rent. s/Inversión Total	5.62	7.97	10.23	12.65	15.34	18.35	18.27	18.15	18.01	17.83	17.63

ANALISIS DEL FLUJO DE EFECTIVOTABLA V - 3

	1976	1977	1978	1979	1980
Inversión Fija	178.60	0.00	0.00	0.00	0.00
Cambio en C. Trabajo	0.00	24.67	3.00	4.14	4.65
Dividendos a Pagar	<u>0.00</u>	<u>0.00</u>	<u>4.57</u>	<u>6.57</u>	<u>8.61</u>
Egresos Totales	178.60	24.67	7.57	10.71	13.26
Utilidad Neta	0.00	11.43	16.43	21.53	27.21
Depreciación	<u>0.00</u>	<u>15.77</u>	<u>15.77</u>	<u>15.77</u>	<u>15.77</u>
Ingresos Totales	0.00	27.20	32.20	37.29	42.98
Flujo Efectivo Neto	-178.59	2.52	24.63	26.59	29.72
Flujo Efectivo Acum.	-178.59	-176.07	-151.44	-124.85	-95.13
Flujo Efe. s/c Finan.	-178.59	7.19	33.55	37.21	42.10
Flujo Efe. Descontado al Costo de Capital	-155.52	4.85	19.86	19.32	19.18
Valor Presente Neto	-155.52	-159.67	-130.81	-111.48	-92.30
Costo de Capital	14.00 %				

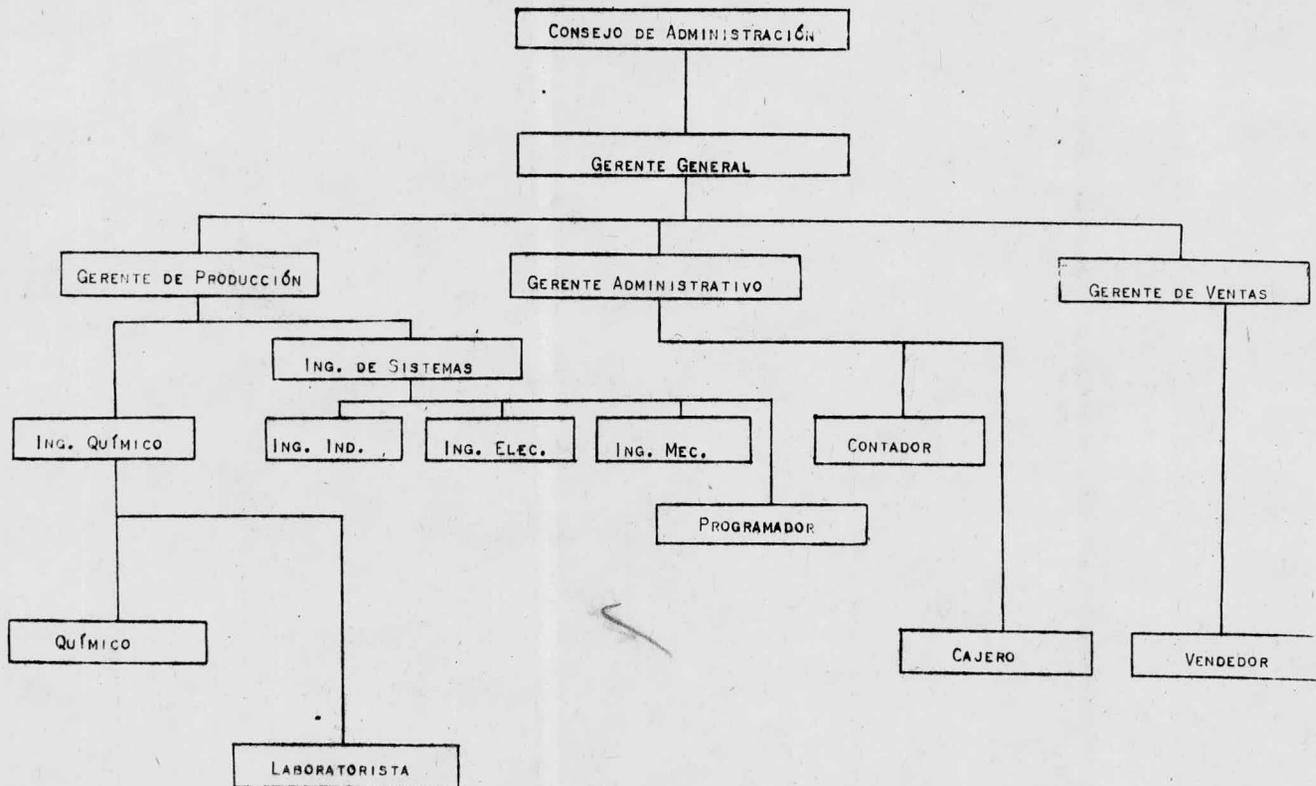
## ++ INDICES ++

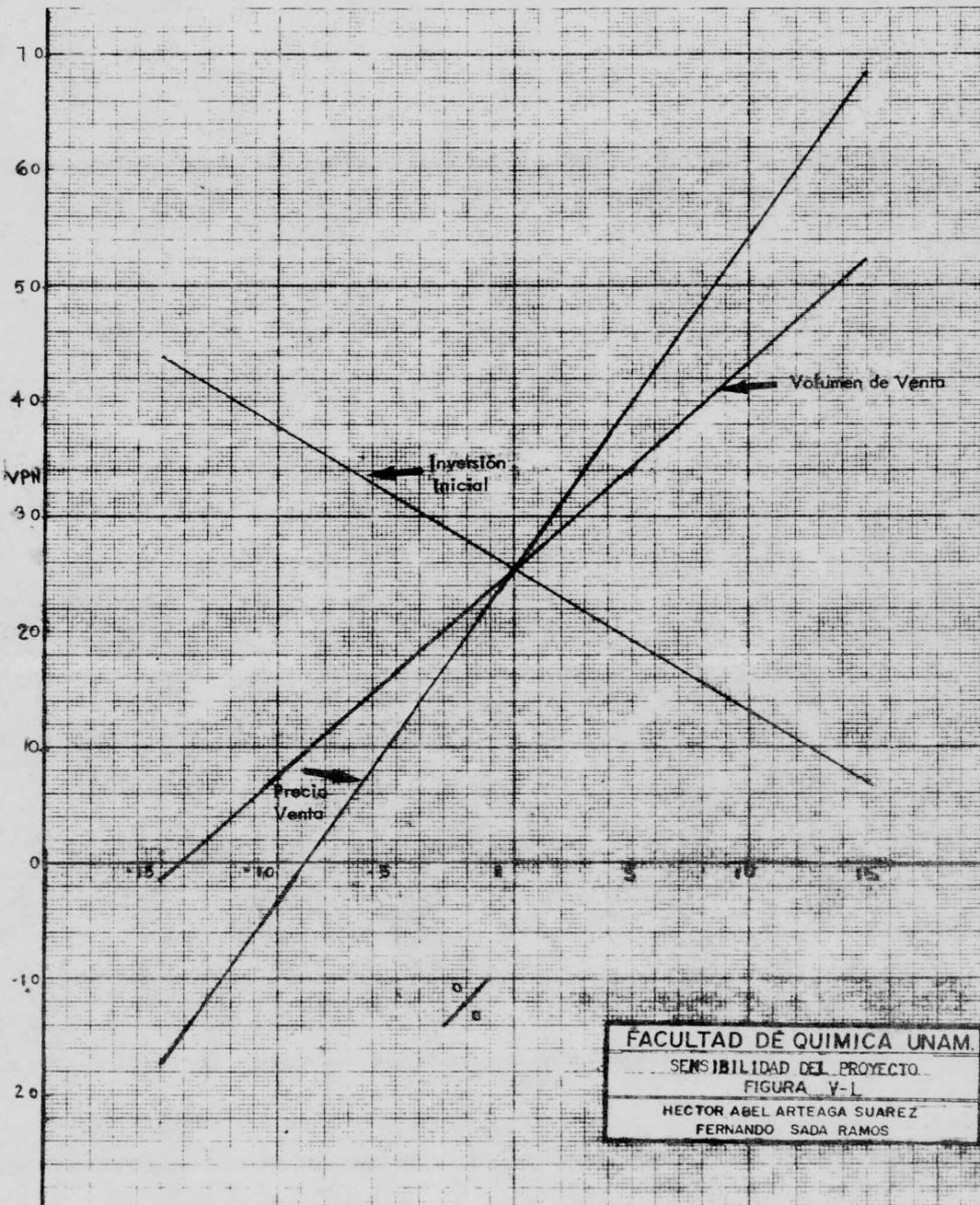
Valor Presente Neto del Proyecto	25.41
Rentabilidad Interna Descontando el Flujo de Efectivo ( % )	16.51
Recuperación de Inversión ( años )	8.60
Recuperación de Inversión Descontando el Flujo de Efectivo	11.49

1981	1982	1983	1984	1985	1986	1987
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5.43	4.46	0.08	0.08	0.09	0.10	-48.68
<u>10.89</u>	<u>13.52</u>	<u>16.66</u>	<u>16.59</u>	<u>16.49</u>	<u>16.37</u>	<u>32.25</u>
16.31	19.98	<b>16.74</b>	16.67	16.58	16.47	16.43
33.82	41.65	41.47	41.22	40.91	40.54	40.08
<u>15.77</u>						
49.59	57.42	57.24	56.99	56.68	56.31	55.85
33.28	37.44	40.50	40.32	40.10	39.84	72.22
-61.05	24.41	16.08	56.40	<b>96.50</b>	136.34	208.64
47.67	54.23	60.04	59.39	58.68	57.90	105.84
19.05	19.01	18.46	16.02	13.89	12.02	19.27
-73.25	-54.24	-35.78	-19.76	- 5.87	6.14	25.41

cantidades ( x MIA )

TABLA V - 3





FACULTAD DE QUIMICA UNAM.  
 SENSIBILIDAD DEL PROYECTO.  
 FIGURA Y-1  
 HECTOR ABEL ARTEAGA SUAREZ  
 FERNANDO SADA RAMOS

## CAPITULO VI

### CONCLUSIONES

1. El Toluen Diisocianato tiene importancia comercial debido a su gran reactividad con compuestos que contengan hidrógenos activos en su molécula.
2. El método más utilizado para la obtención de diisocianatos es la fosgenación de una amina (método de Hentschel).
3. La principal aplicación en México para el Toluen Diisocianato es la formación de espumas de poliuretano mediante su reacción con un polialcohol.
4. El Toluen Diisocianato se encuentra comercialmente en tres relaciones de isómeros: 65, 80 y 100 cada una se utiliza para la obtención de productos con características diferentes (espumas rígidas, semirígidas y flexible, adhesivos, elastómeros y pinturas).
5. La demanda para el Toluen diisocianato se incrementa cada año lo que asegura un mercado permanente y creciente para este producto.
6. El proceso Mitsubishi es el más adecuado para la producción de toluen diisocianato, ya que aparte de cumplir con los

requisitos de calidad y rendimiento (81% del teórico) es el método que involucra la compra de menor cantidad de equipo para su funcionamiento.

7. La mayoría de las materias primas presentan riesgos por lo que respecta a seguridad durante su manejo y almacenamiento. Sin embargo, siguiendo las normas de seguridad descritas para cada producto es factible procesar estas materias con el mínimo de riesgos para el personal y el equipo.
8. El estudio económico muestra que el proyecto tiene buena rentabilidad (hasta 18.35% en el sexto año), un valor presente neto de 25.41, recuperación de la inversión en 8.6 años, este conjunto de datos indican que el proyecto es económicamente rentable.
9. El estudio de sensibilidad del proyecto indica que éste es muy sensible a variaciones de: vida del proyecto, precio de venta, volumen de venta e inversión inicial, por lo que deberá cuidarse cualquier variación que se presente en alguno de los conceptos mencionados.
10. Tomando en cuenta lo expresado anteriormente, la conclusión a la que se ha llegado en la presente tesis es la recomendación de la pronta instalación de una planta productora de Toluen Diisocianato, lo que representaría creación de nueva fuente de trabajo, evitaría fugas de divisas, aparte de ser una inversión atractiva para los posibles accionistas.

## BIBLIOGRAFIA

- 1.- Gibson, Duckham y Fairbairn "The Products of Nitration of Toluene"  
J. AM. Chem. Soc. 270, 1922
- 2.- Kirk y Othmer "Encyclopedia of Chemical Technology"  
Vol. 8 Pag. 581  
Vol. 12 Pag. 56
- 3.- Sauders J. H. "Polyurethanes"  
Interscience Publishers (1962)
- 4.- Arnold R. G. y Nelson J.A. "Chemistry of Organic Isocyanates"  
Elastomer Chemicals Department  
Report HR-2 E.I. Dupont de Nemours  
& Co., Inc.
- 5.- Kenji Sato "Make More TDI and Less Polymer"  
Hydrocarbon Processing Vol. 45 No.11  
Pag 177-179 (nov. 1966)
- 6.- Basf-Wyandotte "Technical Data of Toluene Diisocyanate"  
1968
- 7.- Carl F. Irwin "Preparation of Polyamine Hydrochlorides and Polyisocyanates"  
Patente U.S. 2,644,007  
Junio 30, 1953
- 8.- William W. Pritchard "Preparation of Aromatic Isocyanates"  
Patente U.S. 3,576,836  
Abril 27, 1971
- 9.- Murray R. Spiegel "Probability and Statistics" Schaumm's  
outline series in mathematics. Mc Graw-  
hill Book Company (1975)
- 10.- Murray R. Spiegel "Statistics"  
Schaum's outline series  
Schaum's publishing Company  
(1961)
- 11.- Dr. K. H. Eisenmann "Poliuretanos-Materias Primas y  
Materias Auxiliares"  
Revista Alemana de la Producción,  
Transformación y Aplicación de Plás-  
ticos.  
Octubre 1973 Pág. 161-167

- 12.- James Thomas Tolley,  
Jong Chul Park, Eugene  
Bernard Rella "Procedimiento para la producción  
de Diisocianatos de 2,4-tolueno pu-  
rificado y una mezcla de Diisocia-  
nato de 2-4 tolueno y Diisocianato  
2-6 tolueno, conteniendo 65 + 3%  
del primero".  
Para Allied Chemical Corporation.  
Marzo 1964, México, D.F.
- 13.- R. G. Arnold, J.A. Nelson  
y J. J. Jerbanc "Recent Advances in Isocyanate  
Chemistry"  
Chemical Review, Mayo 1956
- 14.- Mitsubishi Chemical  
Industries LTD "Toluene Diisocyanate" Hydrocarbon  
Processing .  
November, 1971
- 15.- Petroleos Mexicanos "Manejo, Transporte y Almacena-  
miento de Acido Sulfúrico"  
Norma D III-25 Marzo 1971
- 16.- Lyle F. Albright "Process for Nitration of Aromatic  
Hydrocarbon.  
Chemical Engineer Ing. Mayo, 1966  
Pag 161-164.
- 17.- Manufacturing Chemists'  
Association "Properties and Essential Information  
for Safe Handling and Use of Tol en  
Diisocianato"  
1959
- 18.- R. C. Hanze "Obtención de Dinitrotolueno"  
Patente US 3,178,481  
Abril 13, 1965
- 19.- D. E. Graham "Preparation of Toluene Diamine"  
Patente US 3,213, 141  
Octubre 19, 1965
- 20.- R. B. Mc Dougall "Preparation of Toluene Diisocyanate".  
Patente US 3,210,586  
Octubre 5, 1965
- 21.- F. C. Maxon Jr. "Physiological Effect Respiratory  
Irritation from Toluene Diisocyanate"  
Archives Environmental Health  
Mayo 1964. Pag. 755-758.

- 22.- J. A. Zapp Jr. "Diisocyanates: Toxicology".  
AMA Archives Industrial Health  
Marzo 1959.
- 23.- National Fire Protection Association Fire Protection Guide on Hazardous  
Materials.
- 24.- N. Irving Sax Dangerous Properties of Industrial  
Materials.  
Van Nostrand Reinhold  
Company, New York