



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA

**“SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DEL ACETATO DE ETILO
Y ACETATO DE N-BUTILO ASÍ COMO SU EVALUACIÓN
TÉCNICO-ECONÓMICA A NIVEL LABORATORIO”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

I N G E N I E R A Q U Í M I C A

P R E S E N T A :

DIANA LUCÍA ALTAMIRANO MAYA

**DIRECTOR: Dr. M. JAVIER CRUZ GÓMEZ.
ASESOR: Dr. NÉSTOR N. LÓPEZ CASTILLO.**



MÉXICO, D.F.

2008



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



Agradecimientos.

Primero que a nadie a Dios.

Por darme la dicha de poder contar con todos mis seres queridos en este logro y por dejar que me cuiden en todo momento esos ángeles que se nos han adelantado.

A mis queridos padres; Margarita Maya y Eduardo Altamirano.

Por darme las bases, los recursos, el tiempo pero sobre todo el amor incondicional durante todo este tiempo. Los quiero mucho de verdad y de todo corazón muchas pero muchas gracias por ser los perfectos padres.

A mi hermanita; Norma Altamirano.

Por hacerme sentir y saber que cuento con la perfecta cómplice para cualquier situación y por darle ese toque de expectativa a mi vida.

A mis tíos Humberto y Rubén Maya.

Por la calidad y cantidad de cuidados que he recibido de sus personas.

A Rodolfo Rojas.

Por demostrarme tantas cosas lindas que tiene la vida y por compartir estos momentos.

A mis amigos de Zaragoza; Edgar Butrón, Juan Fortanel, Omar Vivas y Verónica Hernández.

Por brindarme su apoyo en momentos difíciles y por compartir muchos momentos de dicha.

A todos mis profesores y trabajadores de la FES Zaragoza.

Por ser más que mis compañeros de escuela y trabajo, son mis grandes amigos.

A mis amigos de C.U.; Atziri Bazar, Gerardo Ángeles, Ignacio Pérez y Verónica Bernal.

Por compartir tantas cosas adentro y afuera de la universidad.

Y por último pero no menos importante a mi director de tesis el Doc. Javier Cruz y a mi asesor el Doc. Nestor López.

Por su apoyo, conocimiento, dedicación y tiempo para la elaboración de esta tesis.



ÍNDICE

	PÁGINA
ÍNDICE	i
ÍNDICE DE ESQUEMAS	v
ÍNDICE DE FIGURAS	vi
ÍNDICE DE TABLAS	viii
ABREVIATURAS	x
CAPÍTULO I INTRODUCCIÓN	
1. Introducción	1
1.1 Justificación y problema a resolver	2
1.2 Alcance del proyecto	3
1.3 Objetivo	3
1.4 Objetivos particulares	4
1.5 Hipótesis	4
CAPÍTULO II MARCO TEÓRICO	
2. Marco teórico	5
2.1 Ésteres	5
2.2 Síntesis de los ésteres	6
2.2.1 Los ésteres a partir de cloruros de acilo	6
2.2.2 Los ésteres a partir de anhídridos de ácidos carboxílicos	7
2.2.3 Los ésteres a partir de ácido carboxílico con un alcohol	8
2.3 Principio de Le Châtelier	9
2.4 Caracterización del éster	11
2.4.1 Cromatografía de gases	11
2.4.2 Espectroscopia de infrarrojo	12
2.5 Acetato de etilo	13
2.5.1 Patentes referentes a la producción del acetato de etilo	13
2.6 Acetato de n-butilo	15
2.6.1 Artículos y patente referentes a la síntesis del acetato de n-butilo	15



2.7	Diseño de experimentos	17
2.7.1	Variabilidad	17
2.7.2	Diseños factoriales	17
2.7.2.1	Diseño factorial 2^k	18
2.8	Aspectos de mercado	20
2.8.1	Identificación del producto	20
2.8.2	Análisis de la demanda	20
2.8.3	Análisis de la oferta	21
2.9	Aspectos técnicos	21
2.9.1	Especificaciones del proyecto	21
2.9.2	Estudio de materia prima e insumos	21
2.10	Aspectos económicos	22
2.10.1	Costos de producción	22
2.10.2	Criterios de evaluación económica	23
2.11	Aspectos de impacto ambiental	24
2.11.1	Métodos de evaluación ambiental	24
2.11.2	Método de Leopold	25

CAPÍTULO III DESARROLLO EXPERIMENTAL

3.	Desarrollo experimental	26
3.1	Síntesis de los ésteres	26
3.1.1	Condiciones de reacción	26
3.1.2	Procedimiento para la producción de ambos ésteres	27
3.1.3	Diseño experimental	29
3.1.4	Desarrollo de las condiciones óptimas de la síntesis	32
3.2	Caracterización de los ésteres	33
3.3	Aspectos de de mercado	34
3.3.1	Estudio del acetato de etilo	34
3.3.2	Estudio del acetato de n-butilo	36



3.4 Aspectos técnicos	38
3.4.1 Estudio de la materia prima para la síntesis del acetato de etilo	38
3.4.2 Estudio de la materia prima para la síntesis del acetato de n-butilo	41
3.4.3 Estudio de los insumos	43
3.5 Aspectos financieros	44
3.6 Aspectos del impacto ambiental	46
3.6.1 Normatividad	46

CAPÍTULO IV ANÁLISIS DE RESULTADOS

4. Análisis de resultados	49
4.1 Síntesis de los ésteres	49
4.1.1 Síntesis del acetato de etilo	49
4.1.1.1 Análisis del diseño experimental para el acetato de etilo	50
4.1.1.2 Condiciones óptimas de la síntesis del acetato de etilo	52
4.1.2 Síntesis del acetato de n-butilo	54
4.1.2.1 Análisis del diseño experimental para el acetato de n-butilo	54
4.1.2.2 Condiciones óptimas de la síntesis de acetato de n-butilo	56
4.2 Caracterización de los ésteres	58
4.2.1 Caracterización del acetato de etilo	58
4.2.1.1 Cromatografía de gases	58
4.2.1.2 Espectroscopia de infrarrojo	61
4.2.2 Caracterización del acetato de n-butilo	64
4.2.2.1 Cromatografía de gases	64
4.2.2.2 Espectroscopia de infrarrojo	67
4.2.3 Comparación de las especificaciones requeridas	70
4.3 Aspectos de mercado	71
4.3.1 Estudio del acetato de etilo	71
4.3.2 Estudio del acetato de n-butilo	74



4.4 Aspectos financieros	76
4.4.1 Estado de ganancias y pérdidas	76
4.4.2 Valor Presente Neto	77
4.4.3 Tasa Interna de Retorno	78
4.5 Aspectos del impacto ambiental	79
4.5.1 Normatividad	79
4.5.2 Método de Leopold	79
CAPÍTULO V CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	
5. Conclusiones y recomendaciones	81
5.1 Conclusiones	81
5.2 Recomendaciones	84
BIBLIOGRAFÍA	86
ANEXO A	
StatGraphics Plus	A-1
ANEXO B	
Equipos utilizados en la caracterización	B-1
ANEXO C	
Propiedades generales de reactivos, productos y catalizador	C-1



ÍNDICE DE ESQUEMAS

	PÁGINA
Esquema 2.1 Reacción de la producción de ésteres a partir de cloruros.	6
Esquema 2.2 Reacción de la producción de ésteres a partir de ácidos carboxílicos.	7
Esquema 2.3 Mecanismo de la síntesis de un éster a partir de ácidos carboxílicos.	7
Esquema 2.4 Reacción general de esterificación.	8
Esquema 2.5 Orden decreciente de reactividad para los alcoholes.	8
Esquema 2.6 Orden decreciente de reactividad para los ácidos carboxílicos.	8
Esquema 2.7 Mecanismo de la reacción de esterificación.	9
Esquema 2.8 Reacción química en equilibrio.	9
Esquema 2.9 Reacción de la síntesis del acetato de etilo.	14
Esquema 2.10 Reacción de la síntesis del acetato de n-butilo.	16



ÍNDICE DE FIGURAS

	PÁGINA
Figura 2.1 Diagrama esquemático de un cromatógrafo de gases.	11
Figura 2.2 Cuadro sinóptico de la identificación del producto.	20
Figura 2.3 Cuadro sinóptico de algunos tipos de costos.	22
Figura 3.1 Sistema para la producción de los ésteres.	28
Figura 3.2 Dominio experimental para tres factores.	30
Figura 3.3 Gráfica de los diferentes usos del acetato de etilo.	35
Figura 3.4 Gráfica de las importaciones del acetato de etilo.	35
Figura 3.5 Gráfica de los diferentes usos del acetato de n-butilo..	37
Figura 3.6 Gráfica de las importaciones del acetato de n-butilo.	38
Figura 3.7 Gráfica de la producción del anhídrido acético.	38
Figura 3.8 Gráfica de los usos del etanol.	41
Figura 3.9 Gráfica de la producción del ácido acético.	41
Figura 3.10 Gráfica de los usos del n-butanol.	42
Figura 4.1 Resumen del análisis del 1 ^{er} diseño experimental del acetato de etilo.	50
Figura 4.2 Gráfico probabilístico normal de 1 ^{er} diseño experimental del acetato de etilo.	51
Figura 4.3 Pareto del 1 ^{er} diseño experimental del acetato de etilo.	51
Figura 4.4 Resumen del análisis del 1 ^{er} diseño experimental del acetato de n-butilo.	54
Figura 4.5 Gráfico probabilístico normal de 1 ^{er} diseño experimental del acetato de n-butilo.	55
Figura 4.6 Pareto del 1 ^{er} diseño experimental del acetato de n-butilo.	55
Figura 4.7 Cromatograma de la esterificación del etanol con el anhídrido acético.	58
Figura 4.8 Espectro de masas del etanol.	59
Figura 4.9 Espectro de masas del acetato de etilo.	59
Figura 4.10 Espectro de masas del ácido acético.	60



Figura 4.11 Espectro de infrarrojo para la síntesis del acetato de etilo, lote 1.	61
Figura 4.12 Espectro de infrarrojo para la síntesis del acetato de etilo, lote 4.	62
Figura 4.13 Espectro de infrarrojo para la síntesis del acetato de etilo, lote 6	63
Figura 4.14 Cromatograma de la esterificación del butanol con el ácido acético.	64
Figura 4.15 Espectro de masas del n-butanol.	65
Figura 4.16 Espectro de masas del ácido acético.	65
Figura 4.17 Espectro de masas del acetato de n-butilo.	66
Figura 4.18 Espectro de infrarrojo para la síntesis del acetato de n-butilo, lote 1.	67
Figura 4.19 Espectro de infrarrojo para la síntesis del acetato de n-butilo, lote 3.	68
Figura 4.20 Espectro de infrarrojo para la síntesis del acetato de n-butilo, lote 6	69
Figura 4.21 Gráfica de la demanda del acetato de etilo.	71
Figura 4.22 Gráfica comparativa ente la demanda y la importación del acetato de etilo.	72
Figura 4.23 Gráfica comparativa del costo mundial del acetato de etilo.	73
Figura 4.24 Gráfica de la demanda del acetato de n-butilo.	74
Figura 4.25 Gráfica comparativa ente la demanda y la importación del acetato de n-butilo.	75
Figura 4.26 Gráfica comparativa del costo mundial del acetato de n-butilo.	76
Figura 4.27 Línea del tiempo.	77
Figura 4.28 Fórmula para calcular el valor presente neto.	78
Figura 4.29 Sustitución de la formula y resultado del VPN.	78
Figura 4.30 Sustitución de la formula y resultado de la TIR.	78



ÍNDICE DE TABLAS

	PÁGINA
Tabla 2.1 Fragancias asociadas a algunos ésteres.	5
Tabla 2.2 Algunos ésteres y sus propiedades físicas.	6
Tabla 2.3 Patentes referentes a la síntesis del acetato de etilo.	13
Tabla 2.4 Propiedades del acetato de etilo.	15
Tabla 2.5 Artículos y patente referentes a la síntesis del acetato de n-butilo.	18
Tabla 2.6 Propiedades del acetato de n-butilo.	17
Tabla 2.7 Matriz experimental para diseños factoriales completos 2^2 , 2^3 y 2^4 .	20
Tabla 3.1 Factores y dominio experimental.	30
Tabla 3.2 Matriz de tratamiento del diseño experimental.	31
Tabla 3.3 Orden de los experimentos para el acetato de etilo.	31
Tabla 3.4 Orden de los experimentos para el acetato de n-butilo.	32
Tabla 3.5 Exportaciones mundiales del alcohol etílico sin desnaturalizar, con grado alcohólico volumen mayor a 80%	39
Tabla 3.6 Exportaciones mundiales del alcohol etílico sin desnaturalizar con grado alcohólico volumen menor a 80%	40
Tabla 3.7 Exportadores mundiales de alcohol etílico desnaturalizado	40
Tabla 3.8 Productores estadounidenses del n-butanol.	42
Tabla 3.9 Tarifas de la energía eléctrica.	43
Tabla 3.10 Tarifa del agua.	43
Tabla 3.11 Costos de los reactivos para la síntesis de los ésteres.	44
Tabla 3.12 Consumo eléctrico de los equipos.	45
Tabla 4.1 Resultados del 1 ^{er} desarrollo experimental del acetato de etilo.	49
Tabla 4.2 Resultado del 2 ^{do} desarrollo experimental del acetato de etilo.	52
Tabla 4.3 Rectificación de las condiciones para la síntesis del acetato de etilo.	53



Tabla 4.4	Resultados del 1 ^{er} desarrollo experimental del acetato de n-butilo.	54
Tabla 4.5	Resultado del 2 ^{do} desarrollo experimental del acetato de n-butilo.	56
Tabla 4.6	Rectificación de las condiciones para la síntesis del acetato de n-butilo.	57
Tabla 4.7	Especificaciones del producto del acetato de etilo.	70
Tabla 4.8	Especificaciones del producto del acetato de n-butilo.	70
Tabla 4.9	Productores mundiales del acetato de etilo.	72
Tabla 4.10	Productores mundiales del acetato de n-butilo.	74
Tabla 4.11	Estados financieros de la síntesis del acetato de etilo y acetato de n-butilo	76
Tabla 4.12	Matriz simplificada de la síntesis del acetato de etilo y acetato de n-butilo	80



ABREVIATURAS

FNE	Flujos Netos de Efectivo
ISO	Organización Internacional para la Estandarización
ISR	Impuesto Sobre la Renta
M/N	Moneda Nacional
NOM	Norma Oficial Mexicana
TIR	Tasa Interna de Retorno
VPN	Valor Presente Neto

CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN





1. INTRODUCCIÓN

La industria química es la más globalizada de todas las industrias del mundo, hoy en día la industria química de México ocupa el octavo lugar a nivel mundial, en términos de volúmenes de producción, con ingresos aproximados de 21 mil millones de dólares anuales, se elaboran productos intermedios y terminados que se mueven por todo el planeta con enorme facilidad y con precios que se definen, en términos globales, muchas veces en los mercados de Asia o Europa. ^[1]

El futuro nos llama a crecer como país y México tiene muchas condiciones favorables para hacerlo: hidrocarburos abundantes, tratados comerciales con más de 30 países, un amplio mercado interno y una posición geográfica privilegiada. Sin embargo, ha crecido a un ritmo muy por debajo de su potencial; ello se debe, en gran parte, a que no han crecido los sectores clave, como la Industria Petroquímica y Química, situación que repercute en las cadenas productivas que de ella dependen.

La Industria Química Mexicana tiene que invertir los recursos suficientes para enfrentar en condiciones equitativas a la competencia global internacional, generando así empleo, desarrollo tecnológico e impuestos para nuestro país, lamentablemente la inversión es insuficiente en este sector.

El desarrollo de nuevas tecnología también se logra a través de un equipo de trabajadores altamente calificados. Sin embargo, en un país como el nuestro donde el nivel de sus trabajadores muchas veces no supera la educación elemental, se hace necesario un centro especializado en capacitación.

La falta de mano de obra especializada en México motivó a tres empresas alemanas del ramo químico instaladas en el país a establecer un sistema de formación técnica llamado Centro de Capacitación para la Industria Química, A.C. ^[2]



La industria química juega un papel fundamental en la economía moderna en la industria química mexicana existe una gran demanda de materias primas de origen extranjero, estos materiales constituyen el punto de partida en una serie de reacciones químicas, síntesis y transformaciones que dan origen a nuevos productos utilizados por muchas de las principales industrias de distintos sectores.

Ejemplo de esto son los ésteres de alquilo que han sido aplicados exitosamente en campos tales como alimentos, artes gráficas, automóviles, construcción, artículos deportivos, de entretenimiento, electrónicas, de refrigeración, de seguridad, etcétera. Lotes compuestos requieren, en concreto, como materias primas al acetato de etilo y al acetato de n-butilo.

1.1 Justificación y problema a resolver

Actualmente en nuestro país existe una gran demanda de productos químicos que desafortunadamente no son producidos en el país, por tal motivo como fin de esta tesis se llevó a cabo una investigación para proponer un proceso para la producción del acetato de etilo y del acetato de n-butilo.

Ya que estos ésteres son utilizados como base para lacas, tintas, adhesivos y colorantes, como solvente de pinturas, en la industria de cosméticos y fragancias, se usa en la fabricación de cuero artificial, películas fotográficas y como saborizante artificial. Se espera que su consumo aumente en los próximos años, debido a su bajo impacto ambiental en comparación con otros solventes orgánicos, además de las nuevas y más eficientes tecnologías desarrolladas para su desecho.



1.2 Alcance del proyecto

Determinar una metodología a nivel laboratorio para la producción de acetato de etilo y acetato de n-butilo, buscando las bases técnicas para establecer las condiciones óptimas de reacción.

En todo proyecto se requiere hacer diversos estudios para valorar el éxito o el fracaso de éste. Para el presenta tesis se desarrollaron algunos aspectos de tipo mercantil, técnicos y de forma complementaria los económicos y de impacto ambiental los cuales constituyen una herramienta de prevención y fortalece la toma de decisiones a nivel de proyecto.

1.3 Objetivo

Sintetizar el acetato de etilo y acetato de n-butilo, utilizando los datos experimentales de cantidad de catalizador, temperatura y rendimiento para formar un diseño experimental de tipo factorial 2^k herramienta estadística que tienen como objetivo averiguar si los factores modificados son significativos para el máximo rendimiento de ambas síntesis. Y con un sentido ético de la profesión, analizar para el dicho proceso experimental los aspectos de mercado, técnicos, económicos y de impacto ambiental.



1.4 Objetivos particulares

- ◆ Establecer las condiciones para la síntesis óptima del acetato de etilo y acetato de n-butilo a nivel laboratorio.
- ◆ Recrear las condiciones de reacción como concentración de reactivos, temperatura, tiempo de reacción y concentración de catalizador en la producción de ambos acetatos, aplicando un diseño factorial completo 2^k .
- ◆ Analizar aspectos de mercado, técnico, económico y de impacto ambiental para la producción de los dos ésteres a nivel laboratorio.

1.5 Hipótesis

Mediante un diseño experimental de tipo factorial completo 2^k , se propuso optimizar los rendimientos para la reacción que se llevan a cabo entre anhídrido acético y etanol para producir acetato de etilo, así como la reacción entre ácido acético y n-butanol para obtener acetato de n-butilo; proporcionando rendimientos aceptables cuando las herramientas de *StatGraphics Plus* como la estimación de los efectos de cada variable (cada efecto estimado está dividido por su desviación típica), representan significancia y así determinado las condiciones óptimas de reacción tales como son la concentración de reactivos, cantidad de catalizador, temperatura y tiempo de reacción.

CAPÍTULO II

MARCO TEÓRICO





2. MARCO TEÓRICO

En este capítulo se presentan los fundamentos teóricos relacionados con la producción del acetato de etilo y acetato de n-butilo; de tal manera que permita describir, explicar y predecir el trabajo experimental, para establecer las condiciones de la síntesis de estos ésteres. Posteriormente se describe el fundamento teórico del diseño experimental y su metodología para el desarrollo del mismo, también se definen los elementos teóricos que se toman en cuenta para realizar el desarrollo de algunos aspectos de mercado, técnicos, económico y de impacto ambiental de la síntesis de ambos ésteres a nivel laboratorio.

2.1 Ésteres

Los ésteres han tenido un gran auge en la industria química mundial debido a su gran uso como disolventes para diferentes industrias como la cosmética, alimenticia, electrónica, de recubrimientos, de pinturas, etc.

Al nombrar un éster consta de dos palabras, la primera deriva del ácido carboxílico, eliminando la palabra ácido y cambiando la terminación -ico por la de -ato; la segunda es el nombre del grupo alquilo unido al oxígeno. Los ésteres se caracterizan por sus olores particulares como se puede ver en la Tabla 2.1, regularmente son de olores dulces y agradables.

Tabla 2.1 Fragancias asociadas a algunos ésteres. ^[3]

Nombre	Estructura	Fragancias
Formato de etilo	$\text{HCO}_2\text{CH}_2\text{CH}_5$	Ron
Formato de isobutilo	$\text{HCO}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	Arándano
Acetato de n-pentilo	$\text{CH}_3\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	Plátano
Acetato de isopentilo	$\text{CH}_3\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	Pera
Acetato de n-octilo	$\text{CH}_3\text{CO}_2(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3$	Naranja
Butirato de etio	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	Piña
Butirato de n-pentilo	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CO}_2(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	Albaricoque

Las moléculas de un éster se comportan como compuestos menos polares que los ácidos carboxílicos con respecto a las solubilidades y los puntos de ebullición. Los ésteres etílicos de los ácidos carboxílicos, que se muestran en la Tabla 2.2, tienen menor solubilidad en agua que sus ácidos correspondientes o relacionados. [4]

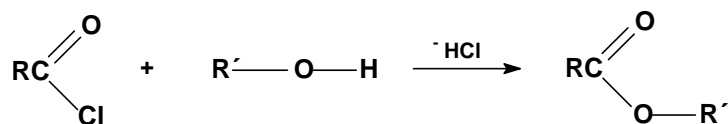
Tabla 2.2 Algunos ésteres y sus propiedades físicas. [4]

Nombre	Estructura	Punto fusión (°C)	Punto ebullición (°C)	Solubilidad (g/100g de H ₂ O) a 20 °C
Esteres etílicos de ácidos carboxílicos de cadena recta RCO ₂ C ₂ H ₅				
Formato de etilo	HCO ₂ C ₂ H ₅	-79	54	-
Acetato de etilo	CH ₃ CO ₂ C ₂ H ₅	-82	77	7.39 (25 °C)
Propionato de etilo	CH ₃ CH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅	-73	99	1.75
Ésteres de ácido acético CH ₃ CO ₂ R				
Acetato de metilo	CH ₃ CO ₂ CH ₃	-99	57	24.4
Acetato de etilo	CH ₃ CO ₂ CH ₂ CH ₃	-82	77	7.39 (25 °C)
Acetato n-propilo	CH ₃ CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	-93	102	1.89

2.2 Síntesis de los ésteres

2.2.1 Los ésteres a partir de cloruros de acilo

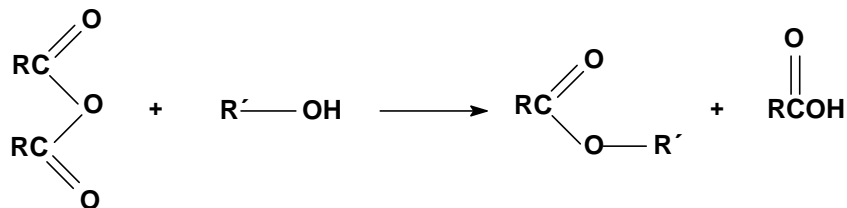
Los ésteres pueden sintetizarse por la reacción de los cloruros de acilo con los alcoholes, puesto que los cloruros de acilo son mucho más reactivos ante la sustitución nucleófila que los ácidos carboxílicos, la reacción de un cloruro de acilo y un alcohol se muestra en el Esquema 2.1. [3]



Esquema 2.1 Reacción de la producción de ésteres a partir de cloruros. [3]

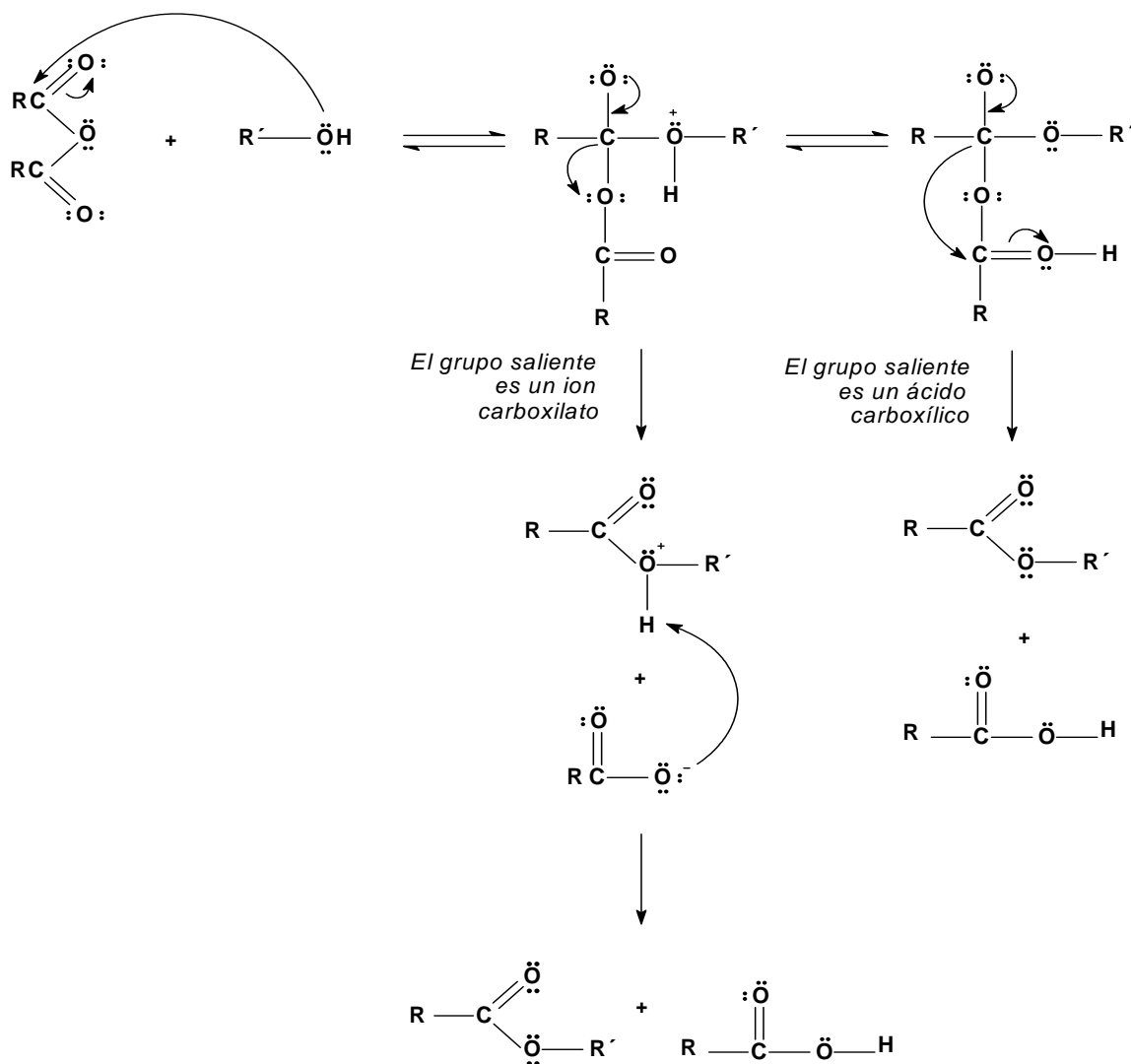
2.2.2 Los ésteres a partir de anhídridos de ácidos carboxílicos

Los anhídridos de ácidos también reaccionan con los alcoholes para formar ésteres en ausencia de un catalizador ácido, como se muestra en el Esquema 2.2. ^[3]



Esquema 2.2 Reacción de la producción de ésteres a partir de ácidos carboxílicos. ^[3]

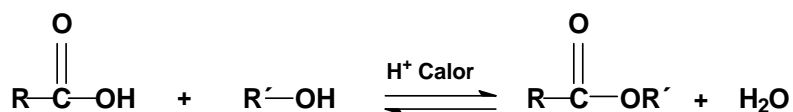
El mecanismo de esta reacción se muestra en el Esquema 2.3.



Esquema 2.3 Mecanismo de la síntesis de un éster a partir de ácidos carboxílicos. ^[3]

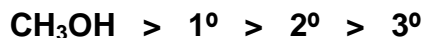
2.2.3 Los ésteres a partir de ácido carboxílico con un alcohol

Un éster de un ácido carboxílico es un compuesto que contiene el grupo $-\text{COO} R$, en donde R puede ser un alquilo o arilo. Un éster se puede formar directamente por reacción de un ácido carboxílico con un alcohol como se ve en el Esquema 2.4, esta reacción es llamada reacción de esterificación.



Esquema 2.4 Reacción general de esterificación. ^[3]

La rapidez a la que se esterifica un ácido carboxílico depende principalmente del impedimento estérico en el alcohol y en el ácido carboxílico. La fuerza ácida del ácido carboxílico solamente desempeña un papel secundario en la rapidez con la que se forma el éster ^[3]. El orden de reactividad de los alcoholes se observa en el Esquema 2.5.



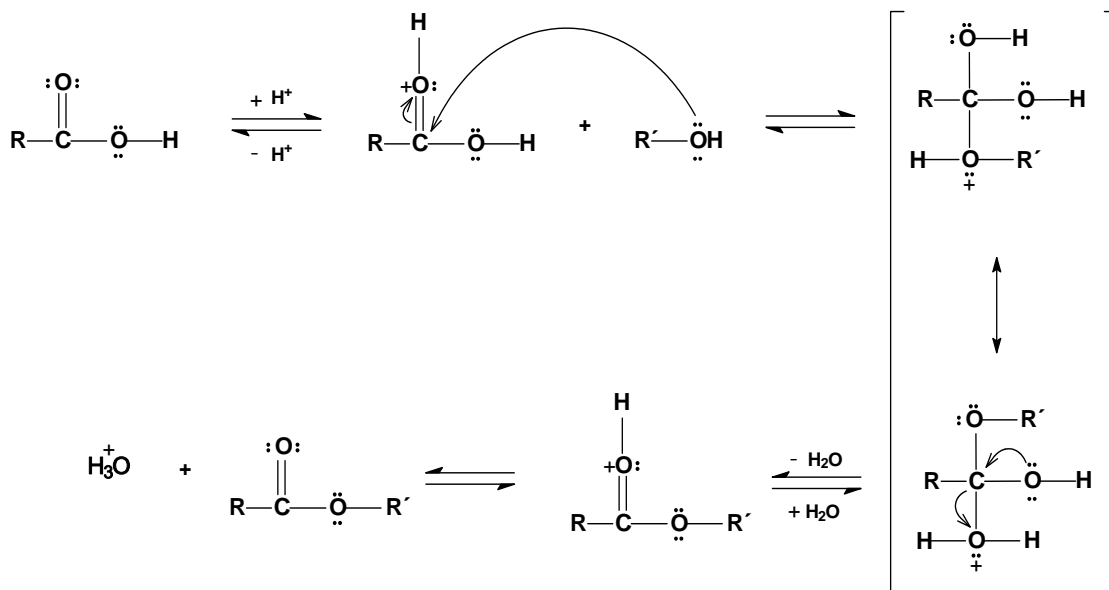
Esquema 2.5 Orden decreciente de reactividad para los alcoholes. ^[3]

Y así mismo la reactividad de los ácidos carboxílicos se indica en el Esquema 2.6.



Esquema 2.6 Orden decreciente de reactividad para los ácidos carboxílicos. ^[3]

La esterificación transcurre a través de una serie de pasos de protonación y desprotonación. Se protona el oxígeno carboxílico, el alcohol nucleofílico ataca el carbono positivo y se elimina agua de la reacción. ^[4] El mecanismo de esta reacción se muestra en el Esquema 2.7.

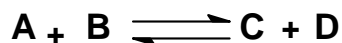


Esquema 2.7 Mecanismo de la reacción de esterificación. [4]

En la reacción de esterificación se rompe el enlace C-O del ácido carboxílico y no el enlace O-H, ni el enlace C-O del alcohol.

2.3 Principio de Le Châtelier

A fines del siglo XIX, el químico francés *Henry Le Châtelier* (1850-1936) postuló que, si sobre un sistema en equilibrio se modifica cualquiera de los factores que influyen en una reacción química, dicho sistema evolucionará en la dirección que contrarreste el efecto del cambio. Supongamos el sistema en equilibrio del Esquema 2.8.



Esquema 2.8 Reacción química en equilibrio. [5]



◆ Cambio de concentración.

Si se agrega alguna de las sustancias reaccionantes, por ejemplo A, se favorece la reacción que tiende a consumir el reactivo añadido. Al haber más reactivo A, la rapidez de reacción hacia los productos aumenta, y como en el estado de equilibrio las velocidades de reacción son iguales en ambos sentidos, se producirá un desplazamiento de la reacción hacia los productos. Es decir, se formará una mayor cantidad de C y D, hasta alcanzar un nuevo estado de equilibrio, de igual modo podemos predecir qué efectos tendría un aumento en la concentración de cualquiera de los productos C ó D. Al aumentar C, por ejemplo, el equilibrio se desplazaría hacia los reactivos, ya que la velocidad de reacción aumentaría en ese sentido hasta alcanzar un nuevo estado de equilibrio.

◆ Cambio de la temperatura.

Si en un equilibrio químico se afecta la temperatura, el sistema se opone al cambio desplazándose en el sentido que absorba calor, esto es, favoreciendo la reacción endotérmica. Por el contrario, al disminuir la temperatura se favorece el proceso que genera calor; es decir, la reacción exotérmica.

◆ Cambio de la presión.

La variación de la presión en un equilibrio, sólo influye cuando intervienen sustancias en estado gaseoso y se verifica una variación en el número de moles entre reactivos y productos. Un aumento de presión favorecerá la reacción que implique una disminución de volumen. En cambio, si se disminuye la presión, se favorecerá la reacción en la que los productos ocupen un volumen mayor que los reactivos.

◆ Catalizadores.

No modifican el sentido del equilibrio, estos afectan la energía de activación tanto a la derecha como a la izquierda, por lo tanto solamente cambian la cantidad de tiempo necesario para alcanzar el equilibrio.^[5]

2.4 Caracterización del éster

2.4.1 Cromatografía de gases

En la cromatografía de gases, un soluto gaseoso es transportado por una fase móvil gaseosa. En la Figura 2.1 se presenta el esquema de un cromatógrafo de gases, se observa que consta de una muestra de líquido volátil se inyecta a través de una septa de goma en un puerto de inyección caliente, recubierto de vidrio o metal, donde se vaporiza la muestra. La muestra es arrastrada rápidamente hacia la columna por un gas portador inerte (que suele ser He, N₂, o H₂), que actúa como fase móvil. Después de pasar por una columna que contiene la fase estacionaria, los solutos separados fluyen por un detector, cuya respuesta se visualiza a una computadora.

No es necesario que la temperatura de la columna sea mayor que el punto de ebullición de todos los solutos. Sólo debe ser lo bastante elevada para que cada soluto tenga suficiente presión de vapor a fin de ser eluido en un tiempo razonable.

El detector se mantiene a mayor temperatura que la columna, de modo que en ésta todos los solutos están en fase gaseosa.^[6]

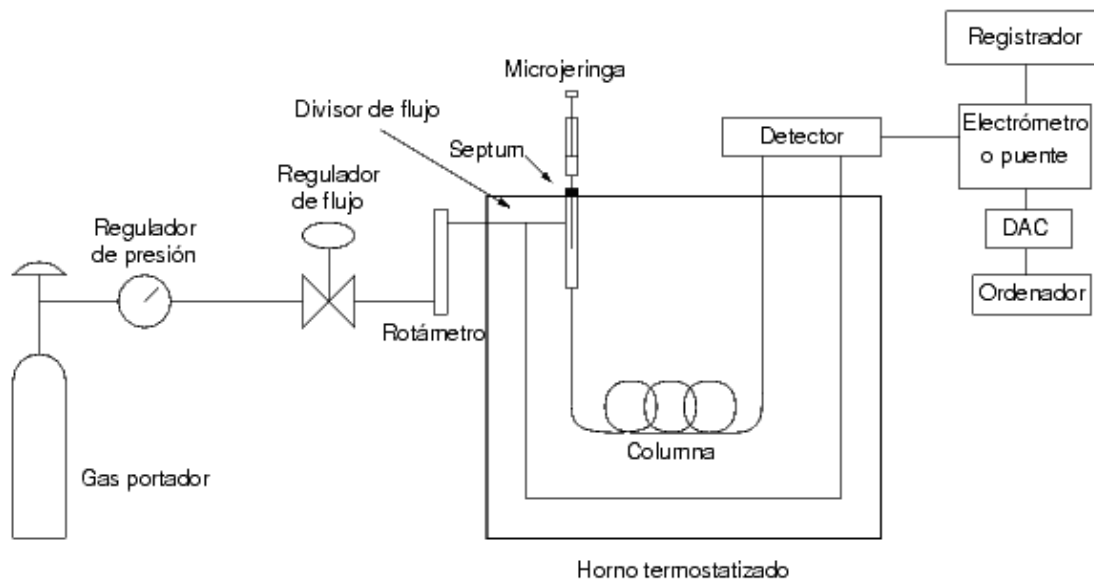


Figura 2.1 Diagrama esquemático de un cromatógrafo de gases.^[6]



2.4.2 Espectroscopia de infrarrojo

La espectroscopia infrarroja es la interacción de la radiación electromagnética de la región infrarroja con la materia. La energía total que poseen los compuestos incluye la llamada energía de traslación, que permite a los compuestos desplazarse en ciertos espacios, la energía rotacional que permite a los compuestos rotar a través de su centro de masa, la energía de vibración, que representa la suma de todas las vibraciones que pueden tener las diferentes uniones químicas y la energía de unión llamada energía electrónica.

La frecuencia de la vibración de las diferentes uniones químicas depende de los átomos involucrados en la vibración y de la constante de fuerza de cada unión, por lo que en un compuesto se tendrán tantas vibraciones diferentes como uniones químicas vibrando a frecuencias diferentes.

La energía, frecuencia y longitudes de onda que posee la radiación del infrarrojo medio coinciden con la energía que utiliza cada unión química para vibrar, de tal modo que, cuando ésta incide sobre ellos, es absorbida por las uniones químicas provocando que continúen vibrando a la misma frecuencia y a una mayor amplitud, pero ahora en niveles cuánticos superiores.^[7]

2.5 Acetato de etilo

2.5.1 Patentes referentes a la producción del acetato de etilo

El acetato de etilo se puede sintetizar a partir de diferentes reacciones como son la hidrogenación o la esterificación, en la Tabla 2.3 se enlistan los diferentes métodos encontrados en la literatura, con el fin de encontrar los rangos de las condiciones óptimas de reacción.

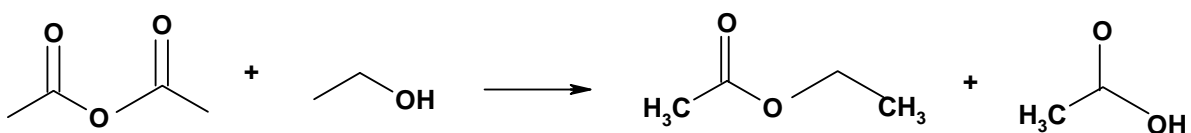
Tabla 2.3 Patentes referentes a la síntesis del acetato de etilo. [8,9 y 10]

Patente	Resumen
Method of producing ethyl acetate and an equipment for carrying out this method [8]	Un método de producción para el acetato de etilo por medio de la reacción del alcohol etílico con el ácido acético y/o anhídrido acético en presencia de un catalizador ácido sólido acompañado por la separación simultánea mediante la destilación de los componentes de la reacción, en los cuales el ácido acético o el anhídrido acético y el alcohol etílico, respectivamente, se introducen por separado en un cociente molar de 1:3.
Process improvement for continuous ethyl acetate production [9]	Un proceso mejorado para la producción de acetato de etilo en el cual se ponen en contacto el ácido acético y el etanol en presencia de un catalizador ácido, destilando los vapores formados y condensándolos para formar una fase orgánica rica en acetato de etilo y una fase acuosa rica en agua, separando las fases y luego destilando cada una para obtener finalmente un acetato de etilo purificado y una corriente de agua con una concentración baja en componentes orgánicos. La mejora radica en dirigir la fase orgánica proveniente de la primera destilación hacia la zona de reacción. Una propuesta alternativa involucra dirigir al menos una porción de la fase orgánica proveniente de la primera destilación hacia una unidad de separación de membrana, la cual remueve el agua y/o el alcohol de la fase orgánica rica en acetato de etilo.

Process for the simultaneous coproduction and purification of ethyl acetate and isopropyl acetate ^[10]

Un proceso para la coproducción simultánea de acetato de etilo y acetato de isopropilo. La reacción de esterificación se lleva a cabo poniendo en contacto el ácido acético con una mezcla de etanol e isopropanol. La reacción de esterificación ocurre en presencia de un catalizador ácido en un sistema de reacción en fase líquida. El producto resultante del primer paso de la reacción es separado y purificado por medio de una destilación para producir acetatos con una pureza mayor al 99.5%.

Con base a las patentes antes mencionadas la reacción que se llevará a cabo para la síntesis del acetato de etilo será a partir de etanol y anhídrido acético como se observa en el Esquema 2.9.



Esquema 2.9 Reacción de la síntesis del acetato de etilo. ^[3]

Esto se debe a que con esta reacción se obtendrá como subproducto el ácido acético y este se ocupará como reactivo en la síntesis del acetato de n-butilo, con esto se pretende reducir el costo total del proyecto.

2.6 Acetato de n-butilo

2.6.1 Artículos y patente referentes a la síntesis del acetato de n-butilo

En la Tabla 2.4 se observa los artículos y la patente que describen los métodos para la síntesis del acetato de n-butilo, así mismo de estos se tomarán los rangos de las condiciones de reacción para el diseño experimental.

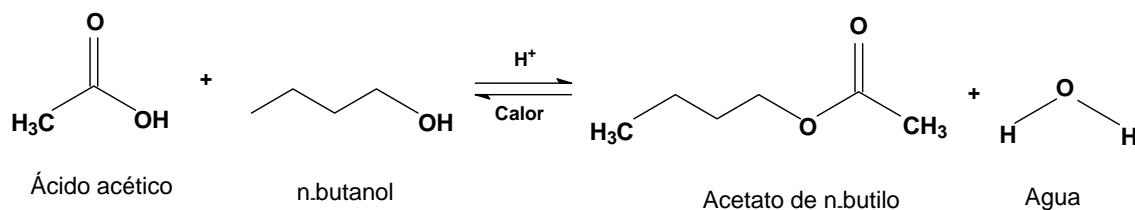
Tabla 2.4 Artículos y patente referentes a la síntesis del acetato de n-butilo. ^[11, 12, 13 y 14]

Patente o artículo	Resumen
Experimentos orgánicos de macroescala y de microescala ^[11]	La producción del acetato de n-butilo por medio de una destilación de una mezcla de n-butanol y del ácido acético, se calienta a 90.7° C y el vapor contiene el alcohol del 8%, el éster del 63%, y el agua del 29%. El vapor es homogéneo, pero cuando se condensa, se separa en dos fases. La capa superior es integrada por el alcohol del 11%, el éster del 86%, y el agua del 3%, pero la capa más baja consiste en el agua del 97% con solamente los rastros del alcohol y del éster.
Obtención de mapas de curvas residuales para la síntesis de acetato de butilo ^[12]	Es este trabajo se estudió en la escala de laboratorio de la síntesis acetato de n-butilo en fase líquida ($P_{atm} = 560$ mmHg), en operación simultánea de reacción y destilación (destilación reactiva batch), utilizando una resina de intercambio catiónico (Lewatit K-2431) como catalizador
Process for preparing esters of carboxylic acids ^[13]	Para un sistema de acetato de butilo donde se lleva a cabo la esterificación del n-butanol y el ácido acético (1:1) y cuando el límite de exposición térmica, es por ejemplo 150 °C, el rango de presiones posibles va de 300 a 2000 mbar con temperaturas de 50 - 60 °C dentro de la columna. La esterificación se lleva a cabo en presencia de un catalizador de esterificación (Lewatit 2631, Bayer).

Estudio de las condiciones de equilibrio químico en la síntesis de acetato de butilo ^[14]

En particular el acetato de n-butilo, sintetizado a partir de ácido acético y n-butanol, las condiciones de operación para evaluar el efecto de las variables de reacción son; relación molar inicial de reactivos ácido/alcohol entre 1:1 y 2:1; temperatura de reacción 73, 80 y 87 °C; carga de catalizador correspondiente en equivalentes ácidos, a concentraciones en peso de H₂SO₄ de 0.5%, 1%, y 2%; velocidad de agitación 800 rpm.

Con referencia a los artículos y la patente, la reacción para la síntesis del acetato de n-butilo se llevará a cabo a partir de ácido acético y n-butanol, la reacción que se lleva a cabo es la que se muestra en el Esquema 2.10.



Esquema 2.10 Reacción de la síntesis del acetato de n-butilo. ^[3]

Como antes se mencionó este ácido acético es el subproducto purificado del Esquema 2.10, antes de ser utilizado se verificará que sea puro por medio de una caracterización en el cromatógrafo de gases.



2.7 Diseño de experimentos

El objetivo de un diseño de experimentos es optimizar un determinado tratamiento en la elaboración de un proyecto de investigación ya sea científico o industrial, basándose en cálculos estadísticos y en la experimentación. Dichos cálculos estadísticos tienen como objetivo averiguar si determinados factores del tratamiento influyen en la variable de interés que se desea conocer.

2.7.1 Variabilidad

Uno de los principales objetivos de los modelos estadísticos y en particular de los modelos de diseño de experimentos, es controlar la variabilidad de un proceso estadístico que puede tener diferente origen.

Variabilidad típica de la naturaleza, es un suceso impredecible e inevitable. Pero todas estas variabilidades dentro de un experimento varias veces repetido pueden fluctuar en torno a un valor central y siguiendo un modelo de probabilidad que será importante estimar.^[15]

2.7.2 Diseños factoriales

Por diseño factorial se entiende aquel en el que se investigan todas las posibles combinaciones de los niveles de los factores en cada ensayo completo o réplica del experimento.

Los diseños factoriales producen experimentos más eficientes, pues cada observación proporciona información sobre todos los factores, y es posible ver las respuestas de un factor en diferentes niveles de otro factor en el mismo experimento. La respuesta a cualquier factor observado en diferentes condiciones indica si los factores actúan en las unidades experimentales de manera independiente. La interacción entre factores ocurre cuando su actuación no es independiente.^[15]

2.7.2.1 Diseño factorial 2^k

Cuando el objetivo es medir cómo influyen k factores en un proceso y descubrir si interaccionan entre ellos, el diseño factorial completo 2^k es la estrategia experimental óptima. Este diseño permite explorar una zona escogida del dominio experimental y encontrar una dirección prometedora para la optimización posterior.

En estos diseños, cada factor se estudia a sólo dos niveles y sus experimentos contemplan todas las combinaciones de cada nivel de un factor con todos los niveles de los otros factores. La Tabla 2.5 muestra las matrices 2^2 , 2^3 y 2^4 , para el estudio de 2, 3 y 4 factores respectivamente. La matriz comprende 2^k filas que corresponde a los experimentos y k columnas, que corresponden a los k factores en estudio, si se construye en el orden estándar, cada columna empieza por el signo $-$, y se alternan los signos $-$ y $+$.^[16]

Tabla 2.5 Matriz experimental para diseños factoriales completos 2^2 , 2^3 y 2^4 .^[16]

	X_1	X_2
1	-	-
2	+	-
3	-	+
4	+	+

	X_1	X_2	X_3
1	-	-	-
2	+	-	-
3	-	+	-
4	+	+	-
5	-	-	+
6	+	-	+
7	-	+	+
8	+	+	+

	X_1	X_2	X_3	X_4
1	-	-	-	-
2	+	-	-	-
3	-	+	-	-
4	+	+	-	-
5	-	-	+	-
6	+	-	+	-
7	-	+	+	-
8	+	+	+	-
9	-	-	-	+
10	+	-	-	+
11	-	+	-	+
12	+	+	-	+
13	-	-	+	+
14	+	-	+	+
15	-	+	+	+
16	+	+	+	+



Las etapas que deben seguir para una correcta planificación de un diseño factorial completo 2^k son:

1. Planteamiento del problema.

Se debe hacer una lista completa de las preguntas a las que debe dar respuesta el experimento. Se quiere comprobar qué efecto tienen n número de factores y establecer el dominio de cada uno de ellos.

2. Identificar todas las posibles fuentes de variación.

Una fuente de variación es algo que pueda generar variabilidad en la respuesta. Es recomendable hacer una lista de todas las posibles fuentes de variación del problema, distinguiendo aquellas que, a priori, generan una mayor variabilidad.

3. Factores y dominio experimental.

El dominio experimental de un factor continuo se expresa con los valores mínimo y máximo que puede tomar, y se asigna la notación codificada -1 al nivel inferior y $+1$ al superior ($-$ y $+$ para simplificar).

4. Matriz de experimentos.

Representa el dominio experimental combinado para los factores, para conocer el efecto de un factor es suficiente con hacerlo variar entre dos valores.

5. Plan de experimentación y realización de los experimentos.

Se obtiene al reemplazar los valores $-$ y $+$ por los valores de las variables reales, también muestra los rendimientos obtenidos al realizar los experimentos en orden aleatorio

6. Revisar las decisiones anteriores y modificar si es necesario.

Es importante realizar una planificación previa, detallando los pasos anteriores, lo que garantizará que los datos sean utilizados de la forma más eficiente posible.^{[16 y}

17]

2.8 Aspectos de mercado

El objetivo de los aspectos de mercado son determinar la cantidad de bienes y/o servicios provenientes de una nueva unidad productora que, en una cierta área geográfica y bajo determinadas condiciones la comunidad estaría dispuesta para satisfacer sus necesidades. Mediante el desarrollo de los aspectos de mercado, se analizan muchos factores como que producir, para quién, cuanto, a que precio, cuándo, dónde, etc. Entre los puntos básicos a considerar en la realización del estudios de mercado están:^[18]

2.8.1 Identificación del producto

En el mercado, es de suma importancia saber de qué producto se trata, por qué dependiendo del tipo o clase de éste, serán las características en las que se basará el análisis de la demanda y de la oferta, así como factores colaterales que se pueden observar en la Figura 2.2.

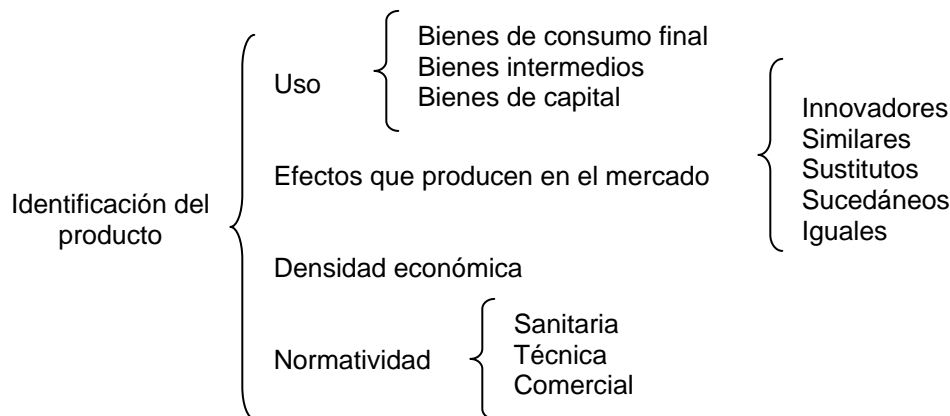


Figura 2.2 Cuadro sinóptico de la identificación del producto. ^[18]

2.8.2 Análisis de la demanda

Conocer la demanda es uno de los requisitos de un estudio de mercado, pues se debe saber cuántos compradores están dispuestos a adquirir el bien y a qué precio. La investigación va de la mano con los ingresos de la población objetivo, con el consumo de bienes sustitutos o complementarios, con determinar las necesidades de los consumidores, los segmentos del mercado y el proceso de compra con el fin de facilitar la adopción de decisiones acertadas de comercialización.



2.8.3 Análisis de la oferta

El examen de la estructura del mercado, se inicia estableciendo la identificación de los competidores, identificando al número, su posición competitiva, el emplazamiento de los mercados, materias primas, participación en el mercado y la probabilidad e importancia que tengan las empresas que posiblemente se introduzcan en el futuro al mercado.

2.9 Aspectos técnicos

Los aspectos técnicos deben ser congruentes con los objetivos del proyecto de inversión y con los niveles de profundidad del estudio en su conjunto, este puede desarrollarse en los niveles de idea, prefactibilidad, factibilidad y proyecto definitivo. Tiene que aportar información cualitativa y cuantitativa respecto a los factores productivos que deberá contener una nueva unidad en operación, esto es: tecnología; magnitud de los costos de inversión; recursos, previsiones para la nueva unidad productiva.

2.9.1 Especificaciones del proyecto

Es una descripción física y química de forma detallada del producto, estas especificaciones se establecen desde el inicio del proyecto para desarrollar o adaptar la tecnología y metodología requerida por el objetivo del proyecto,

2.9.2 Estudio de materia prima e insumos

El volumen y las características de las materias primas disponibles y los insumos son aspectos de suma importancia ya que influyen de manera significativa en la determinación de la selección del proceso, requerimientos, disponibilidad y costos.

En este punto se debe identificar el abasto suficiente en cantidad y calidad de las materias primas que se requiere para el desarrollo del proyecto. De ahí la importancia de conocer a las cantidades de suministros e insumos.

2.10 Aspectos económicos

Los aspectos económicos de un proyecto es una técnica de planeación y tratar el aspecto contable de una manera no es tan rigurosa ya que las cifras se redondean, existen muchos tipos de costos que se aprecian en la Figura 2.3.^[19]

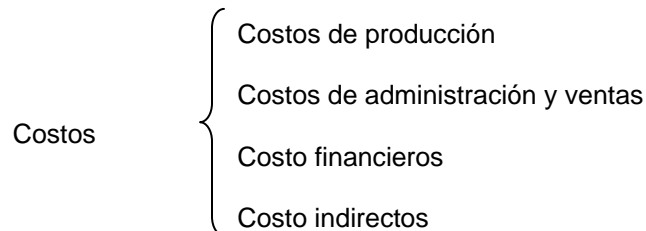


Figura 2.3 Cuadro sinóptico de algunos tipos de costos. ^[19]

2.10.1 Costos de producción

La estimación de los costos es una parte muy importante en el desarrollo de los proyectos, tanto por su efecto en la determinación de la rentabilidad del mismo como por su variedad de elementos que condicionan su producción. Los costos de producción están formados por diferentes componentes como:

- ◆ **Materias primas.**

Son aquellos materiales que forman parte del producto terminado, estos costos incluyen fletes de compra, almacenamiento y manejo.

- ◆ **Mano de obra directa.**

Es la que se utiliza para transformar una materia prima en producto terminado. Se puede identificar con el número de unidades de producción.

- ◆ **Materiales indirectos.**

Estos forman parte auxiliar en la presentación del producto terminado sin ser el producto en sí.



- ◆ **Costos de insumos.**
Todo proceso requiere una serie de insumos para su funcionamiento también llamado insumos auxiliares, como el agua, energía eléctrica, combustible, vapor, detergentes, aire, etc.

- ◆ **Costos de mantenimiento.**
Este servicio se contabiliza por separado, en virtud de las características especiales que se pueda presentar.

- ◆ **Cargos por amortización.**
Este tipo de cargos están utilizados por la ley, en caso de aplicarse a los costos de producción se deberá incluir todo el activo fijo.^[19]

2.10.2 Criterios de evaluación económica

Existen factores para considerar si el proyecto es o no rentable y los criterios de evaluación en el presente trabajo son el Valor Presente Neto (*VPN*) y la Tasa Interna de Retorno (*TIR*).

- ◆ El *VPN* es la suma de todos los beneficios y la resta de los egresos presentes y futuros que existe a lo largo de la vida del proyecto, el valor aconsejable es un diez por ciento y el resultado que arroje el cálculo puede encontrarse en:
 $VPN > 0$. Indica que el proyecto es aconsejable económicamente ya que los beneficios superan los costos actualizados a una tasa constante.
 $VPN < 0$. Los costos superan los beneficios no es aconsejable el proyecto.
 $VPN = 0$. Resulta indiferente realizar el proyecto.

- ◆ La *TIR* es una característica del proyecto y se interpreta como el máximo rendimiento en porcentaje que este ofrece, la tasa interna de retorno es independiente de la de interés. Se dice que un proyecto es aconsejable cuando el valor de la *TIR* en porcentaje es mayor a la tasa fijada por el valuador.

2.11 Aspectos de impacto ambiental

Los aspectos de impacto ambiental es una parte exclusiva de la política ecológica, además es un estudio técnico de carácter interdisciplinario, que incorporado en el procedimiento de la evaluación del impacto ambiental tiene como función identificar, predecir, evaluar y corregir, las consecuencias que derivan de la realización de un proyecto, para cumplir con estos objetivos se cuentan con técnicas de análisis. ^[20]

2.11.1 Métodos de evaluación ambiental

Para evaluar los impactos ambientales se conocen diferentes métodos que van desde los más simples como las listas de verificación hasta los más complejos como los modelos de predicción. Estos modelos se pueden agrupar en:

- ◆ Sistemas de red y gráficos.

Son métodos de identificación que se caracteriza porque ayudan en la determinación de los impactos que pueden ocurrir en el desarrollo de qué proyecto, incluyendo sus dimensiones y tiempo de afectación. Los sistemas más conocidos de este tipo son: las matrices causa–efecto como *Leopold*, *Bereano*, *Sonrensen*, etc.

- ◆ Métodos basados en indicadores, índices e integración de la evaluación.

Estos métodos son de los más conocidos debido a sus características analíticas, esta evaluación se basa en un conjunto de indicadores de impacto ambiental que funciona con parámetros, características y categorías. Los métodos más usados son el *Holines*, *Hil-Schechter*, *Fischer-Davies*, etc.

- ◆ Métodos cuantitativos.

Este permite elegir entre las consecuencias de dos ó más alternativas y responder si los efectos esperados son aceptables, por lo que se ha considerado como una predicción. El más usado de este tipo es el *Batalle-Columbus*. ^[20]



2.11.2 Método de Leopold

El método de Leopold goza de ser el método más utilizado por su simplicidad y efectividad para identificar impactos ambientales, resumiendo en una matriz las acciones del proyecto y los componentes ambientales de tal forma que se define una evaluación cualitativa en importancia.

Este método consiste en un cuadro de doble entrada matriz en el que se disponen como filas los factores ambientales que pueden ser afectados y como columnas las acciones que vayan a tener lugar y que será causa de los posibles impactos.

En este método se fija como un número de acciones posibles 100 y 88 número de factores ambientales, con lo que el número de interacciones posibles será 8800, aunque conviene destacar que, de éstas, son pocas las realmente importantes, pudiendo construir posteriormente una matriz reducida con las interacciones más relevantes.

Las principales ventajas del uso de este método, son los pocos recursos necesarios para su aplicación y su utilidad para la identificación de impactos, entre sus desventajas; se tiene que un impacto se puede contabilizar dos veces, ya que no establece el principio de exclusión y no integra una razón de temporalidad.^[20]

CAPÍTULO III

DESARROLLO EXPERIMENTAL





3. DESARROLLO EXPERIMENTAL

En este capítulo se presenta la metodología para la síntesis del acetato de etilo y acetato de n-butilo comprobando las condiciones óptimas como son la temperatura, el tiempo de reacción, la cantidad molar de reactivos y la cantidad de catalizador. Teniendo estas condiciones de producción para el acetato de etilo y el acetato de n-butilo, se desarrolla algunos aspectos de mercado, técnicos, económico y de impacto ambiental de la síntesis de ambos ésteres.

3.1 Síntesis de los ésteres

3.1.1 Condiciones de reacción

Los rangos de las condiciones de reacción para la producción de los ésteres fueron los reportados en las patentes y artículos mencionados en **2.5.1 Patentes referentes a la producción del acetato de etilo** y **2.6.1 Artículos y patente referentes a la síntesis del acetato de n-butilo**, en estos se describe las condiciones óptimas para la síntesis de ambos ésteres, que estos a su vez serán considerados como los niveles del diseño experimental.

- ◆ Síntesis del acetato de etilo.

La relación molar de anhídrido acético y etanol es de 0.3:1, el tiempo de reacción es de 1 a 2 horas, la temperatura es de 75 a 110 °C, la concentración del catalizador es de 0.1 a 0.2 % p/p. ^[8,9 y 10]

- ◆ Síntesis del acetato de n-butilo.

La relación molar de ácido acético y n-butanol es de 1:1, el tiempo de reacción es de 30 a 60 minutos, la temperatura es de 90 a 120 °C, la concentración del catalizador es igual a la anterior. ^[11, 12, 13 y 14]



3.1.2 Procedimiento para la producción de ambos ésteres

◆ Lista del material.

1. Matraz bola de 500 mL de tres bocas
2. Dos adaptadores con termómetro
3. Tapón
4. Columna de Vigreux
5. Adaptador en “Y”
6. Refrigerante
7. Conector
8. Probeta
9. Vaso precipitado de 500 MI

◆ Lista del equipo.

1. Elevadores
2. Parrilla de agitación
3. Cesta de calentamiento
4. Reóstato
5. Bomba de agua
6. Mangueras
7. Pinzas de tres dedos con nuez

◆ Lista de reactivos.

1. Anhídrido acético
2. Etanol
3. Ácido sulfúrico
4. Ácido acético

◆ Lista de servicios.

1. Agua para enfriamiento
2. Energía eléctrica

◆ **Esquema del sistema.**

El sistema de las reacciones se muestra en la Figura 3.1

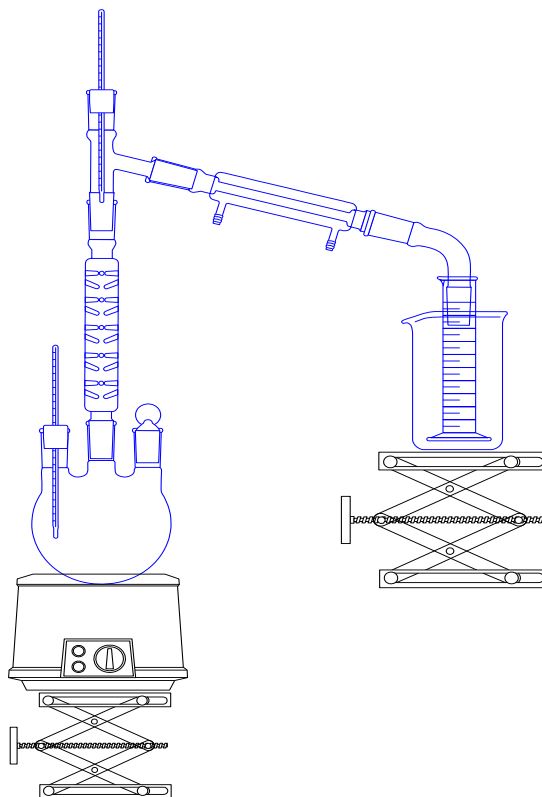


Figura 3.1 Sistema para la producción de los ésteres.

◆ **Metodología.**

1.- Antes de comenzar con la reacción de síntesis del éster, se debe verificar que todo el material se encuentre limpio y seco, asegurarse de que los equipos a utilizar se encuentren bien conectados a la corriente y en buen estado.

2.- Se instala el equipo de destilación que consta de un matraz bola de 500 mL de tres bocas, un adaptador con termómetro, un tapón y una columna de destilación *Vigreux*. En la columna se coloca un adaptador en “Y” para destilación y un adaptador para termómetro, un refrigerante, un colector y un matraz.



3.- Se pesan los reactivos y el catalizador en vasos de precipitado en la campana de extracción, con la protección apropiada de una bata de algodón, lentes y guantes.

4.- Para la síntesis del acetato de etilo, se colocan 0.3 moles de anhídrido acético por 1 mol de etanol y para la síntesis del acetato de n-butilo, se coloca 1 mol de ácido acético por 1 mol de n-butano. Se llevan a cabo las reacciones bajo las condiciones citadas en la Tabla 3.1 Factores y dominio experimental.

5.- Se registraron temperatura y volumen de las diferentes fracciones de la destilación, así mismo se realizó la caracterización por medio del cromatógrafo de gases y el espectrofotómetro.

6.- Con los datos obtenidos de la caracterización se calcularon los rendimientos, los cuales se introducen en la tabla de datos del programa *StatGraphics Plus* para calcular las condiciones de reacción que influyen considerablemente.

3.1.3 Diseño experimental

Como anteriormente se menciona, la parte de la síntesis corresponde a los dos ésteres, es el mismo caso en el diseño experimental ya que la metodología es similar. Los pasos que se siguen en el diseño experimental son los siguientes:

1.- Definir los objetivos del experimento.

- ◆ Demostrar que factores (experimentales) afectan principalmente en la producción del acetato de etilo y acetato de n-butilo.
- ◆ Tener un rendimiento aproximado al 100%.

2.- Corroborar todas las posibles fuentes de variación.

- ◆ Las fuentes de variación pueden ser el tiempo de reacción, la temperatura y concentración del catalizador.

3.- Diseño del tratamiento.

- ◆ Con tres factores, los cuales tendrán dos niveles cada uno, se usó un diseño factorial completo 2^3 . Estos se pueden observar en la Tabla 3.1

Tabla 3.1 Factores y dominio experimental. [8,9, 10, 11, 12, 13 y 14]

Factores	Acetato de etilo		Acetato de n-butilo	
	Dominio experimental		Dominio experimental	
	Nivel (-)	Nivel (+)	Nivel (-)	Nivel (+)
X_1 Tiempo de reacción (mins)	60	120	30	60
X_2 Temperatura ($^{\circ}\text{C}$)	75	110	90	120
X_3 Concentración de catalizador (% p/p)	0.1	0.2	0.1	0.2

4.- Especificar las medidas que se realizarán (“respuesta”).

- ◆ % de rendimiento experimental.

5.- Especificar el modelo.

- ◆ Factorial completo con 3 factores, 2 niveles = 2^3 . Tamaño de la muestra = 8.

6.- Dominio de experimentos.

- ◆ La Figura 3.2 representa el dominio experimental combinado por los tres factores. Cada círculo indica un posible experimento con unos valores concretos de cada factor.

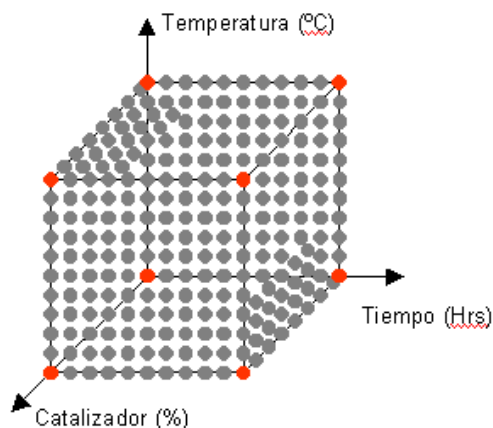


Figura 3.2 Dominio experimental para tres factores. [17]



7.- Matriz del diseño.

- ◆ En el dominio experimental de un factor continuo se asigna la notación codificada - al nivel inferior + al superior, para simplificar, ésta se puede observar en la Tabla 3.2.

Tabla 3.2 Matriz de tratamiento del diseño experimental. ^[17]

	X ₁	X ₂	X ₃
1	-	-	-
2	+	-	-
3	-	+	-
4	+	+	-
5	-	-	+
6	+	-	+
7	-	+	+
8	+	+	+

8.- Realización de los experimentos.

- ◆ Se realizan las ocho reacciones como se muestra en las Tablas 3.3 y 3.4 correspondientes. Se obedece el orden indicado para evitar un error estadístico.

Tabla 3.3 Orden de los experimentos para el acetato de etilo.

Experimentos	Tiempo (Hrs)	Temperatura (°C)	Catalizador (%p/p)
1	1	75	0.2
2	1	110	0.1
3	1	110	0.2
4	2	75	0.1
5	2	110	0.2
6	2	110	0.1
7	2	75	0.2
8	1	75	0.1

Tabla 3.4 Orden de los experimentos para el acetato de n-butilo.

Experimentos	Tiempo (min)	Temperatura (°C)	Catalizador (%p/p)
1	60	90	0.2
2	30	90	0.2
3	30	90	0.1
4	60	120	0.2
5	30	120	0.1
6	60	90	0.1
7	60	120	0.1
8	30	120	0.2

9.- Se realiza el análisis de los resultados.

- ◆ Se calculan los rendimientos, los cuales se introducen en la tabla de datos del programa *StatGraphics Plus* para saber cuales son las condiciones de reacción que influyen considerablemente. En el **Anexo A** se describe el programa.

3.1.4 Desarrollo de las condiciones óptimas de la síntesis

Cuando se finalicen los ocho experimentos de ambos ésteres indicados en las Tablas 3.3 y 3.4, se procede a realizar el análisis de los rendimientos y se obtienen las variables que actúan notablemente en el rendimiento de la síntesis del acetato de etilo y acetato de n-butilo, sabiendo lo anterior si es necesario se desarrolla otra parte experimental para puntualizar las condiciones óptimas de reacción.

Esta parte experimental es para obtener las condiciones óptimas de la síntesis de los ésteres, ya que solo se modifican las variables que faltan por optimizar del anterior análisis de resultados.



3.2 Caracterización de los ésteres

La caracterización de todas las sustancias química utilizadas en esta tesis se realizó mediante:

- ◆ Cromatografía de gases.

El análisis se realizó en un cromatógrafo *HP 6890 GS System* utilizando una columna capilar *HP-5 (crosslinked 5% OH Me Silicone)*, las condiciones de este se pueden observar en el **Anexo B**.

El cromatógrafo tiene acoplado un detector de masas que cuenta con una base de datos de donde se obtiene el espectro de masas de la sustancia química.

- ◆ Espectroscopia de infrarrojo.

La espectroscopia de infrarrojo funciona porque los enlaces químicos tienen frecuencias específicas las cuales vibran correspondientemente a niveles de energía.

Así para la obtención del espectro de los reactivos y productos se utilizó un espectrofotómetro *Varian 800 FT-IR Scimitar*, las condiciones de este se pueden observar en el **Anexo B**.



3.3 Aspectos de mercado

3.3.1 Estudio del acetato de etilo

◆ Uso.

- a) Producción de tintas de impresión para la industria gráfica y solvente de pinturas en industria de pinturas.
- b) En la industria de adhesivos y colas derivados de la celulosa.
- c) En la industria alimenticia, en productos de confitería, bebidas, dulces.
- d) En esencias artificiales de frutas. En la extracción de cafeína a partir del café.
- e) Remoción de sustancias resinosas en la industria del caucho.
- f) En la elaboración de cueros artificiales y para revestir y decorar artículos de cuero.
- g) Disolvente de compuestos utilizados para revestir y decorar objetos de cerámica.
- h) Solvente para la elaboración de varios compuestos explosivos.
- i) En la industria fotográfica, como solvente para la fabricación de películas a base de celulosa.
- j) Ingrediente de preparaciones cosméticas (perfumes, esmaltes, tónicos capilares) y farmacéuticas.
- k) En la industria del papel, para la elaboración de papeles aprestados y para recubrir y decorar objetos de papel.
- l) En la industria textil, para la preparación de tejidos de lana para teñido. En procesos de limpieza y para la elaboración de textiles aprestados.
- m) Reactivo para la manufactura de pigmentos.

En la Figura 3.3 se observa una gráfica con los porcentajes de los diferentes usos que tiene este éster en el mundo.^[21y 22]

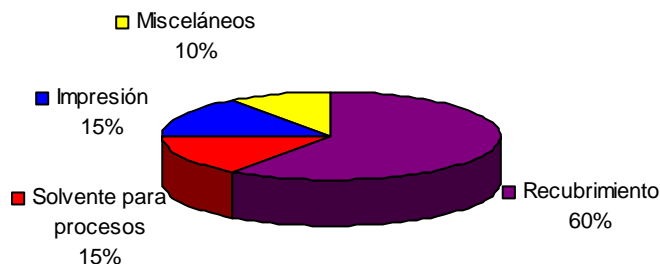


Figura 3.3 Gráfica de los diferentes usos del acetato de etilo.^[21y 22]

◆ Importaciones.

En México hay una escasa producción de acetato de etilo por ello es necesario recurrir a productores extranjeros como son Estados Unidos y Brasil, en la Figura 3.4, se muestra la cantidad de éster suministrado anualmente a nuestro país, que aproximadamente es de 450 toneladas.^[1]

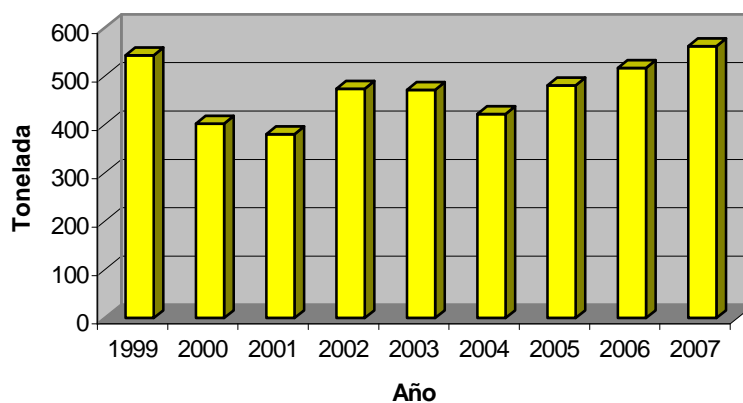


Figura 3.4 Gráfica de las importaciones del acetato de etilo.^[1]



◆ Efectos que produce en el mercado.

Debido a su baja toxicidad y mínimas consecuencias para el medio ambiente, como se puede observar en el **Anexo C**, el acetato de etilo se ha convertido en un reemplazo de solventes tóxicos.

◆ Precio.

El precio más alto del acetato de etilo entre el periodo 2000 y 2006, fue de \$ 0.75 USD/lb y el más bajo fue de \$0.36 USD/lb. ^[23]

3.3.2 Estudio del acetato de n-butilo

◆ Uso.

- a) El acetato de n-butilo se usa como solvente en diferentes procesos, algunos de ellos se enlistan a continuación:
- b)
- c) Producción de tintas de impresión para la industria gráfica.
- d) Producción de thinners y solvente de pinturas en industria de pinturas.
- e) Solvente de lacas para la tinción en industria del cuero.
- f) Solvente para la elaboración de colorantes.
- g) Ingrediente de sabores y esencias frutales.
- h) Solvente para la elaboración de adhesivos.
- i) Ingrediente de preparaciones cosméticas (perfumes, esmaltes y farmacéuticas).
- j) En la industria fotográfica, como solvente para la fabricación de películas a partir de celulosa.

Los porcentajes de su uso mundialmente se pueden observar en la Figura 3.5. [22]

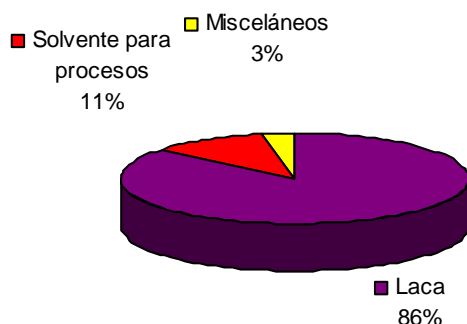


Figura 3.5 Gráfica de los diferentes usos del acetato de n-butilo. [22]

◆ Efectos que produce en el mercado.

Debido a su baja toxicidad y consecuencias para el medio ambiente, el acetato de n-butilo se ha convertido en un reemplazo muy importante del acetato (2-etoxy) de etilo.

◆ Precio.

El precio más alto del acetato de n-butilo, entre el periodo 2000 y 2006, fue de \$0.98 USD/lb y el más bajo fue de \$0.68 USD/lb. [23]

◆ Importaciones.

En la Figura 3.6 se muestra la cantidad de acetato de n-butilo abastecido por Estados Unidos, pero no es el único productor de éster mundial, es seguido por Brasil, Japón y Alemania. Como se puede observar las cantidades han ido en aumento ya que en el 2003 creció a 13,136 y en el año 2007 a 30,491 toneladas. [1]

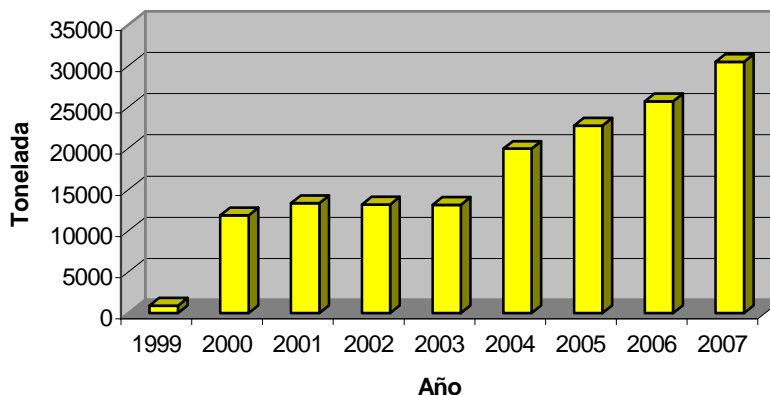


Figura 3.6 Gráfica de las importaciones del acetato de n-butilo. ^[1]

3.4 Aspectos técnicos

3.4.1 Estudio de la materia prima para la síntesis del acetato de etilo

◆ Anhídrido acético.

El precio más alto del anhídrido acético, entre el periodo 2000 y 2007, fue de \$0.54 USD/lb y el más bajo fue de \$0.36 USD/lb. Así mismo, el volumen de producción en México se observa en la Figura 3.7, esta, ha ido en aumento y lo mejor es que se espera que siga esa tendencia. ^[1]

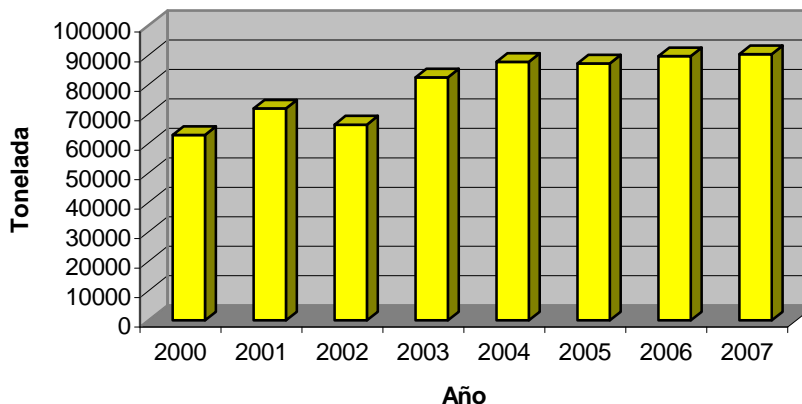


Figura 3.7 Gráfica de la producción del anhídrido acético. ^[1]



◆ Etanol.

Con el fin de analizar la tendencia del comercio mundial del etanol, este se divide en alcohol etílico sin desnaturalizar, con grado alcohólico volumétrico mayor a 80%; alcohol sin desnaturalizar, con grado alcohólico volumétrico menor a 80% con excepción de los licores; y alcohol etílico desnaturalizado de cualquier graduación.

En la Tabla 3.5 se observa que Brasil es el principal exportador de alcohol etílico sin desnaturalizar, su nivel de exportaciones representa el 30.4% del total exportado mundialmente, seguido por el Reino Unido y Francia.^[24]

Tabla 3.5 Exportadores mundiales del alcohol etílico sin desnaturalizar, con grado alcohólico volumétrico mayor a 80%.^[24]

País	Millones de dólares
Brasil	166.3
Francia	136.5
Reino Unido	93.4
Estados Unidos	74.3
Sudáfrica	56.3
Holanda	37
Jamaica	34.3
Alemania	31.5
China	30.8

En la Tabla 3.6 se observa que México fue el principal exportador de alcohol sin desnaturalizar, con grado alcohólico volumétrico menor a 80%; su nivel de exportaciones representa el 20.5%, seguido por Reino Unido y Francia.

Tabla 3.6 Exportadores mundiales de alcohol sin desnaturalizar, con grado alcohólico volumétrico menor a 80%. ^[24]

País	Millones de dólares
México	478.1
Reino Unido	183.3
Francia	161.9
Italia	125.8
Corea del Sur	101.6
China	93
Alemania	68.2
Holanda	64.7
Estados Unidos	43.3
Hong Kong	41.1
Bélgica	36.7

En la Tabla 3.7 se observa que Estados Unidos y Francia participan conjuntamente con el 53.7% del total exportado de alcohol etílico desnaturalizado.

Tabla 3.7 Exportadores mundiales de alcohol etílico desnaturalizado. ^[24]

País	Millones de dólares
Estados Unidos	43.5
Francia	42.3
Alemania	11.8
Bélgica	8.9
Canadá	8.6
Reino Unido	8.1

El etanol tiene diferentes usos en la industria y en la Figura 3.8 se observa algunos de los procesos que consumen una cantidad considerable de este alcohol. [25]

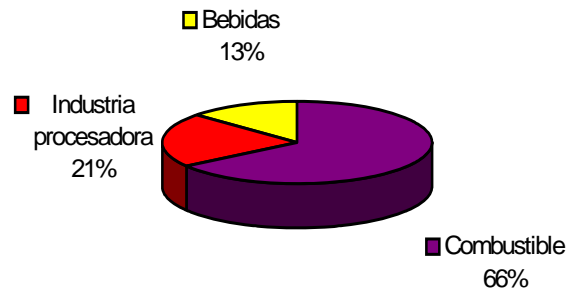


Figura 3.8 Gráfica de los usos del etanol. [25]

3.4.2 Estudio de la materia prima para la síntesis del acetato de n-butilo

◆ Ácido acético.

El precio más alto del ácido acético de grado industrial es de \$0.54 USD/lb y el más bajo es de \$0.36 USD/lb. El volumen de obtención del ácido acético en México se observa en la Figura 3.9 esta muestra un decrecimiento impresionante ya que en el año 2000 se observa una producción de 72,893 toneladas ya que hubo un periodo de rescisión por parte de los inversionistas, que en los últimos siete años no se a podido asemejar. [1]

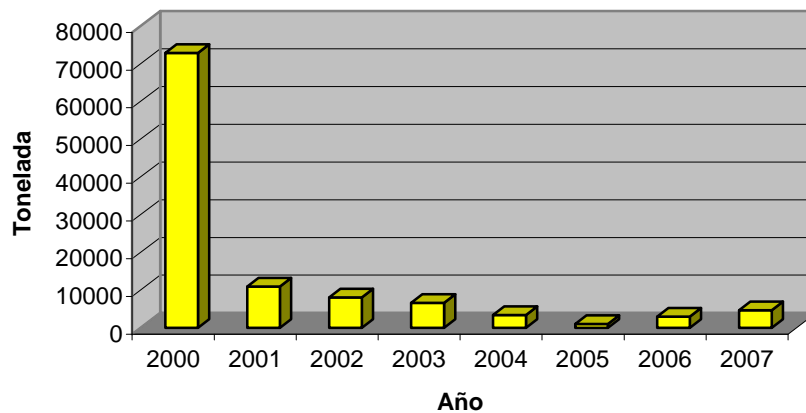


Figura 3.9 Gráfica de la producción del ácido acético. [1]

◆ n-butanol.

El precio del n-butanol para América del norte es de \$132 USD/tonelada; para sur y Centroamérica es de \$135 USD/tonelada. El principal productor mundial es Estados Unidos y en la Tabla 3.8 se enlistan a las industrias que lo obtienen y su capacidad. [26]

Tabla 3.8 Productores estadounidenses del n-butanol. [26]

Productores	Producción (millones de libras)
BASF	465
Celanese	495
Dow Chemical	1160
Eastman Chemical	290

El n-butanol tiene diferentes usos en la industria química y en la Figura 3.10 se observa algunos de los procesos que consumen una cantidad considerable de este alcohol. Como se nota el 14 % del total del n-butanol es para producir el acetato de etilo. [27]

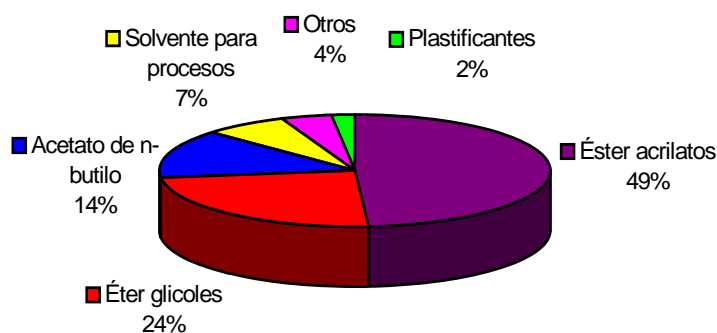


Figura 3.10 Gráfica de los usos del n-butanol. [27]

3.4.3 Estudio de los insumos

◆ Energía eléctrica.

Es utilizada por varios equipos en el laboratorio para la producción de ambos ésteres y las tarifas de la energía eléctrica que se observan en la Tabla 3.9 tomadas por la comisión Federal del Electricidad. ^[28]

Tabla 3.9 Tarifas de la energía eléctrica. ^[28]

Mes	Tarifa por energía (\$/Kwh)
Abril	0.8899
Mayo	0.9230
Junio	0.9736
Julio	1.0158

◆ Agua.

Se utiliza en los refrigerantes para la síntesis de los ésteres y en los servicios adicionales como lavado de material, servios sanitarios, etcétera. La tarifa del agua se observan en la Tabla 3.10 y son obtenidas de la Comisión Nacional del Agua, hay que tomar en cuenta que estas tarifas son bimestrales. ^[29]

Tabla 3.10 Tarifa del agua. ^[29]

Rangos de consumo (m ³)		Consumo	
Inferior	Superior	Cobro mínimo	Por m ³ adicional
0	20	33.54	9.59



3.5 Aspectos financieros

En esta parte del estudio económico solo se describe el costo que tiene la producción del acetato de etilo y acetato de n-butilo, como el procedimiento es similar para los ésteres se comparte el mismo material e insumos.

◆ **Materias primas.**

El costo de los reactivos que se utilizan en la síntesis de los ésteres se observan en la Tabla 3.11, estos se calcularon con la cantidad producida de 501.220 Kg y del acetato de n-butilo de 1,806.550 Kg.

Tabla 3.11 Costos de los reactivos para la síntesis de los ésteres.

Reactivos	Consumo (L/año)	Costo anual (\$/consumo)
Anhídrido acético	50.4	60.00
Etanol	104.4	504.80
n- butanol	76.95	54.93
Ácido sulfúrico	0.288	8.92

Costo total anual de la materia prima \$628.65 M/N

◆ **Material y equipo.**

El sistema utilizado en la síntesis para ambos ésteres está conformado por la siguiente lista:

Material	Equipo
Matraz bola de 500 mL de tres bocas	Elevadores
Dos adaptadores con termómetro	Parrilla de agitación
Tapón	Cesta de calentamiento
Columna de Vigreux	Pinzas de tres dedos con nuez
Adaptador en “Y”	Reóstato
Refrigerante	Bomba de agua
Conector	Mangueras

Costo total del equipo \$6,893.00 M/N



◆ Mano de obra directa.

El proceso de la síntesis de ambos ésteres no es complejo por eso solo se contará con una persona que se encarga de la síntesis, caracterización y envasado, se sugiere que sea un alumno de la carrera de Ingeniería Química.

◆ Costos de insumos.

1.- Energía eléctrica

Se considera que el equipo trabaja ocho horas por día, cinco días a la semana. Como se puede ver en la Tabla 3.12 estos son los equipos que utilizan la energía eléctrica.

Tabla 3.12 Consumo eléctrico de los equipos.

Equipo	Características	Gasto Kw hr	Gasto Kw/día	Gasto Kw/año
Bomba de agua	Vol.127 Amps. 0.5	0.064	0.512	19.2
Reóstato	Vol.120 Amps. 12	1.68	13.44	504
Cesta de calentamiento	Vol.120 Cap. 250	0.18	1.44	54
Parrilla de agitación	Vol.120 Amps. 9.5	1.14	9.12	342
Cromatógrafo HP 6890	Anexo B	8.75	70	840
Espectrofotómetro Varian 800	Anexo B	7.5	60	720

Costo anual por consumo \$2,600.00 M/N

2.- Agua

En este proceso se consume agua que para el refrigerante, el hielo, lavado del material y para servicios adicionales. El consumo anual de agua anual es de aproximadamente 57 m³.

Costo anual por consumo \$520.00 M/N

El costo total anual es de \$10,681.65 M/N.



3.6 Aspectos del impacto ambiental

En esta última parte del desarrollo experimental se tiene las normas como la Norma Oficial Mexicana (*NOM*) y Organización Internacional para la Estandarización (*ISO*), para la producción y comercialización de ambos ésteres, también se describe la metodología de Leopold para el estudio ambiental del proyecto en su totalidad.

3.6.1 Normatividad

◆ Sanitarias.

Estas normas tienen el objetivo de cuidar la seguridad y la salud de quien tenga algún tipo de contacto con los ésteres, estas normas son de tipo potestativo, por que queda a voluntad del individuo de cumplir. Así que si se cumplen, se cuenta con una disminución de accidentes tanto en trabajadores como en los centros de trabajo. Enseguida se enlistan algunas Normas Oficiales Mexicanas.

NOM-010-STPS-1999

Establecer medidas para prevenir daños a la salud de los trabajadores expuestos a las sustancias químicas contaminantes del medio ambiente laboral, y establecer los límites máximos permisibles de exposición en los centros de trabajo donde se manejen, transporten, procesen o almacenen sustancias químicas que por sus propiedades, niveles de concentración y tiempo de exposición.

NOM-018-STPS-2000

Establecer los requisitos mínimos de un sistema para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicas peligrosas, que de acuerdo a sus características físicas, químicas, de toxicidad, concentración y tiempo de exposición, puedan afectar la salud de los trabajadores o dañar el centro de trabajo. ^[30]



◆ Técnicas.

El objetivo de estas normas es facilitar a las empresas metodologías adecuadas para la implantación de un sistema de gestión ambiental y gestión de la calidad. La compatibilidad mundial de tecnología que es alcanzada cuando los productos y servicios son basados en Normas Internacionales, a los clientes les traen más opciones de ofertas y ellos también se benefician de los efectos de competencia entre sus proveedores.

ISO 9000

Es un conjunto de normas de calidad establecidas por la ISO que se pueden aplicar en cualquier tipo de organización. Su implantación en estas organizaciones, aunque supone un duro trabajo, ofrece una gran cantidad de ventajas para sus empresas. Los principales beneficios son la reducción de rechazos e incidencias en la producción o prestación del servicio, el aumento de la productividad, el mayor compromiso con los requisitos del cliente y la mejora continua.

ISO 14000

El objetivo de estas normas es facilitar a las empresas metodologías adecuadas para la implantación de un sistema de gestión ambiental, similares a las propuestas por la serie ISO 9000 para la gestión de la calidad. ^[31]

◆ Comerciales.

El cumplimiento de las reglas comerciales es de suma importancia en el momento que se empieza a mercantilizar el producto, ya que agiliza el movimiento comercial y brinda seguridad al medio que lo transporta.



NOM-003-SCT/2000

La presente Norma Oficial Mexicana establece las características, dimensiones, símbolos y colores de las etiquetas que deben portar todos los envases y embalajes, que identifican la clase de riesgo que representan durante su transportación y manejo las sustancias, materiales y residuos peligrosos.

NOM-004-SCT/2000

Esta Norma Oficial Mexicana establece las características y dimensiones de los carteles que deben portar las unidades vehiculares, camiones, unidades de arrastre, autotanques, carrotanques, contenedores, cisternas, taques portátiles y recipientes intermedios para granel y demás unidades de autotransporte y ferrocarril, a fin de identificar la clase de riesgo de las sustancias, materiales o residuos peligrosos que ese transporta.

NOM-043-SCT/2003

La presente Norma Oficial Mexicana tiene como objetivo establecer la información fundamental que debe contener el Documento de Embarque, relativa a la designación oficial de transporte, identificación de las sustancias, materiales y residuos peligrosos, los riesgos de éstos y las declaraciones que el expedidor realice para su transportación.^[32]

CAPÍTULO IV

ANÁLISIS DE RESULTADOS



4. Análisis de resultados

En este capítulo se presenta los resultados y el análisis de estos mismos, para llegar a las condiciones óptimas de reacción, con ayuda del diseño experimental. Así mismo la corroboración de dichas condiciones, también se observar la caracterización por medio de la cromatografía de gases y de la espectroscopia de infrarrojo de dichas mezclas de reacción.

4.1 Síntesis de los ésteres

4.1.1 Síntesis del acetato de etilo

En la Tabla 4.1 se observan, los ocho rendimientos calculados de los lotes que en el anterior capítulo se describe, las condiciones de reacción y su metodología. Después de tener la variable respuesta se procedió hacia el análisis estadístico.

Tabla 4.1 Resultados del 1^{er} desarrollo experimental del acetato de etilo.

No. De lote	Relación molar Anhidrido & Etanol	Tiempo (min)	Temperatura (°C)	Catalizador (% p/p)	Rendimiento Real (%)
1	0.3 : 1	60	75	0.2	39.3140
2	0.3 : 1	60	110	0.1	86.7826
3	0.3 : 1	60	110	0.2	90.1391
4	0.3 : 1	120	75	0.1	39.0135
5	0.3 : 1	120	110	0.2	95.8386
6	0.3 : 1	120	110	0.1	92.9579
7	0.3 : 1	120	75	0.2	46.8454
8	0.3 : 1	60	75	0.1	37.1884

A cada una de los productos de las reacciones se le realizó una caracterización por medio de una cromatografía de gases y una espectroscopia de infrarrojo para comprobar que son acetato de etilo y ácido acético.

4.1.1.1 Análisis del diseño experimental para el acetato de etilo

Para encontrar los factores de interés con mayor influencia en los experimentos, se realizó este análisis y así mismo se descartaron la o las variables para el diseño de los siguientes lotes en los cuales se obtienen las condiciones óptimas para la síntesis del acetato de etilo.

El siguiente análisis de resultados corresponde al diseño experimental del acetato de etilo en donde se empleó el programa *Statgraphics Plus* como herramienta de apoyo para el análisis estadístico. En la Figura 4.1 se muestran cada uno de los efectos estimados y sus interacciones, que ha detectado el programa.

```
Analysis Summary
-----
File name: C:\Documents and Settings\ceaspa\Escritorio\Lucía
Estimated effects for Rendimiento
-----
average      = 66.0099  +/- 0.772763
A:Tiempo     = 5.30782  +/- 1.54553
B:Temperatura = 50.8392   +/- 1.54553
C:Catalizador = 4.04867   +/- 1.54553
AB           = 0.629575 +/- 1.54553
AC           = 1.30763   +/- 1.54553
BC           = -0.930075 +/- 1.54553
-----
```

Figura 4.1 Resumen del análisis del 1^{er} diseño experimental del acetato de etilo.

De manera paralela se crea el gráfico probabilístico normal como se ve en la Figura 4.2, el cual está diseñado para que los efectos no significativos sobre la variable de interés (% rendimiento) aparezcan alineados hacia la izquierda en el eje de los efectos estandarizados considerando al valor de 20 como punto central (cada efecto estimado está dividido por su desviación típica).

Y por el contrario los que se desplazan hacia la derecha son aquellos que afectan directamente a la variable respuesta. Por lo que se puede ver que el factor de la temperatura es de interés.

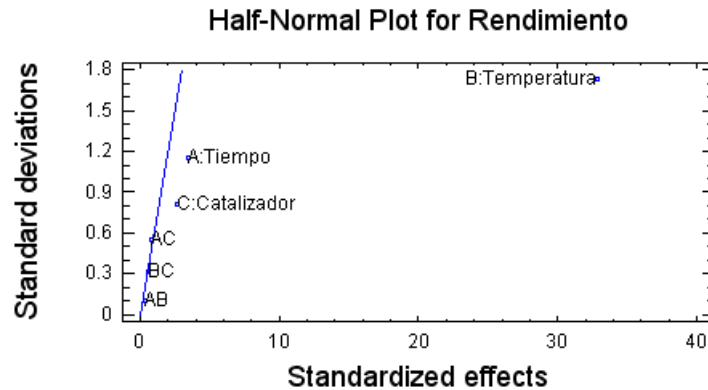


Figura 4.2 Gráfico probabilístico normal del 1^{er} diseño experimental del acetato de etilo.

En la Figura 4.3 se ve una gráfica de pareto, en ella se observan los efectos de los componentes sobre la variable de interés, podemos corroborar, que el efecto de mayor interés es la temperatura.

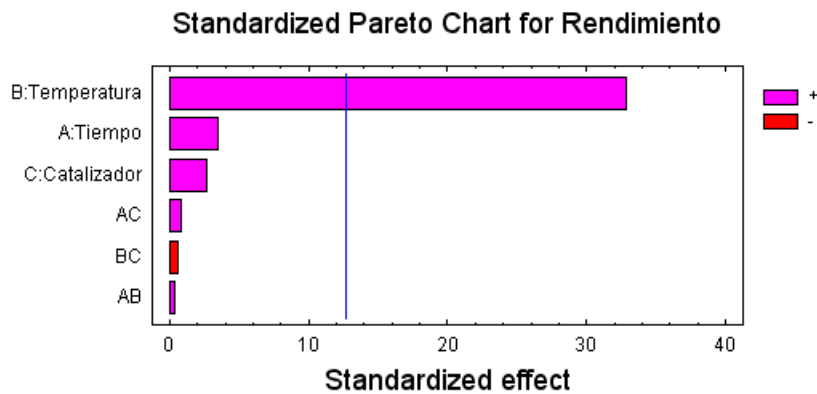


Figura 4.3 Pareto del 1^{er} diseño experimental del acetato de etilo.

4.1.1.2 Condiciones óptimas de la síntesis del acetato de etilo

Una vez finalizado el análisis de los ocho lotes se puede observar en la Figura 4.3 una gráfica en la cual podemos concluir que la variable que actúa notablemente en el rendimiento de la síntesis del acetato de etilo, es la temperatura.

◆ Segundo desarrollo experimental.

Sabiendo la variable de interés, se desarrolló otra serie de lotes y en este desarrollo el objetivo fue obtener las condiciones óptimas de la síntesis del éster, ya que solo se modifica el tiempo de reacción y la concentración del catalizador, dejando fija la relación molar de reactivos y la temperatura de síntesis del éster. Ahora con dos factores, los cuales tienen dos niveles cada uno, se utilizó un método factorial completo con $n=2$ factores, 2 niveles cada uno, 2^2 y el tamaño de la muestra de 4. El resumen se puede observar en la Tabla 4.2.

Tabla 4.2 Resultados del 2^{do} desarrollo experimental del acetato de etilo.

No. De lotes	Relación molar Anhídrido & Etanol	Tiempo (hrs.)	Temperatura (°C)	Catalizador (% p/p)	Rendimiento Real (%)
1	0.3 : 1	60	110	0.1	92.3658
2	0.3 : 1	60	110	0.2	92.9430
3	0.3 : 1	90	110	0.2	95.7914
4	0.3 : 1	90	110	0.1	94.3786

Estos resultados de los cuatro lotes con las condiciones establecidas, con la misma metodología, indican que las reacciones con mayor porcentaje de rendimiento son las que tienen una relación molar de 0.3:1 (anhídrido:etanol), la temperatura de 110°C y la cantidad de catalizador de 0.2% p/p. En los lotes que se tenían que realizar en 2 hrs se terminó la síntesis antes de ese tiempo, la variable del tiempo de reacción no está muy bien definida.

◆ Tercer desarrollo experimental.

Este desarrollo experimental se basó en la medición del tiempo de reacción de todas las síntesis anteriores y como en todas ellas no se llegó hasta las dos horas de reacción se puede concluir que no es necesario continuar trabajando con esta variable ya que por una hora más no se consigue más cantidad de productos que en la primera hora. Además, desde el punto de vista económico, no es factible gastar en energía eléctrica y agua para obtener muy poca cantidad de acetato de etilo y ácido acético.

◆ Rectificación de las condiciones óptimas en la síntesis del acetato de etilo.

Se realizaron seis lotes con las mismas condiciones obtenidas y con la misma metodología para corroborar que los rendimientos reales eran similares, el resumen se puede ver en la Tabla 4.3.

Tabla 4.3 Rectificación de las condiciones para la síntesis del acetato de etilo.

No. lote	Relación molar Anhídrido & Etanol	Tiempo (hrs.)	Temperatura (°C)	Catalizador (% p/p)	Rendimiento Real (%)
1	0.3 : 1	90	110	0.2	94.5216
2	0.3 : 1	90	110	0.2	93.9651
3	0.3 : 1	90	110	0.2	94.7543
4	0.3 : 1	90	110	0.2	94.1628
5	0.3 : 1	90	110	0.2	94.7148
6	0.3 : 1	90	110	0.2	94.7782

Como se puede observar en la Tabla 4.3 las condiciones de reacción son similares y con esto se concluye la parte experimental de la síntesis del acetato de etilo, ahora bien para comprobar que se trata del acetato de etilo y del ácido acético se les realizó una caracterización.

4.1.2 Síntesis del acetato de n-butilo

En la Tabla 4.4 se observan los ocho rendimientos calculados de los diferentes lotes, que es la variable respuesta (% rendimiento de la reacción) para así proceder al análisis estadístico.

Tabla 4.4 Resultados del 1^{er} desarrollo experimental del acetato de n-butilo.

No. lote	Relación molar Acético & n-butanol	Tiempo (min)	Temperatura (°C)	Catalizador (% p/p)	Rendimiento Real (%)
1	0.3 : 0.3	60	90	0.2	29.9390
2	0.3 : 0.3	30	90	0.2	22.2812
3	0.3 : 0.3	30	90	0.1	20.2250
4	0.3 : 0.3	60	120	0.2	83.9000
5	0.3 : 0.3	30	120	0.1	69.3156
6	0.3 : 0.3	60	90	0.1	34.1859
7	0.3 : 0.3	60	120	0.1	80.4618
8	0.3 : 0.3	30	120	0.2	75.2362

4.1.2.1 Análisis del diseño experimental para el acetato de n-butilo

El siguiente análisis de resultados corresponde al diseño experimental del acetato de n-butilo en donde también se empleó el programa *Statgraphics Plus* como herramienta de apoyo para el análisis estadístico. En la Figura 4.4 se muestran cada uno de los efectos estimados y sus interacciones.

```
Analysis Summary
-----
File name: C:\Documents and Settings\ceaspa\Escritorio\Lucía
Estimated effects for Rendimiento
-----
average      = 51.9431  +/- 0.477587
A:Tiempo    = 10.3572  +/- 0.955175
B:Temperatura = 50.5706  +/- 0.955175
C:Catalizador = -1.79203 +/- 0.955175
AB          = -0.452175 +/- 0.955175
AC          = 2.19637  +/- 0.955175
BC          = -2.88738  +/- 0.955175
-----
Standard errors are based on total error with 1 d.f.
```

Figura 4.4 Resumen del análisis del 1^{er} diseño experimental del acetato de n-butilo.

De manera paralela se crea el gráfico probabilístico normal (Figura 4.5) el cual está diseñado para que los efectos no significativos sobre la variable de interés (rendimiento) aparezcan alineados hacia la izquierda en el eje de los efectos estandarizados considerando al valor de 10 como punto central (cada efecto estimado está dividido por su desviación típica) y por el contrario los que se desplazan hacia la derecha son aquellos que afectan directamente a la variable respuesta. Por lo que se puede ver que los factores de tiempo y temperatura son de interés y el factor de cantidad de catalizador con sus interacciones, pueden ser eliminadas del diseño, para seguir con el análisis.

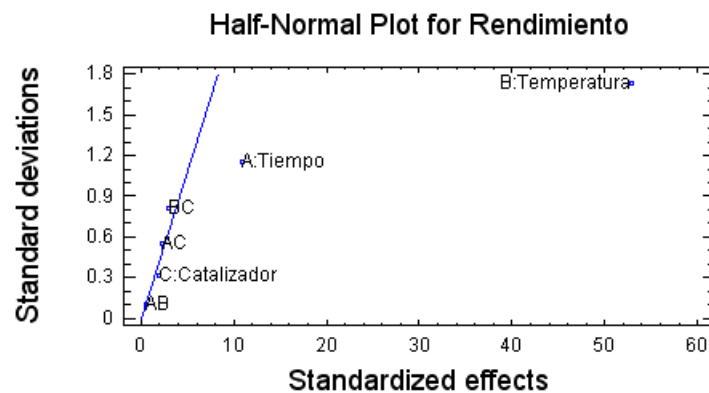


Figura 4.5 Gráfico probabilístico normal del 1^{er} diseño experimental del acetato de n-butilo.

En la gráfica de Pareto se ven los efectos de los componentes sobre la variable de interés (Figura 4.6), podemos corroborar, que los efectos de mayor interés son la temperatura y el tiempo.

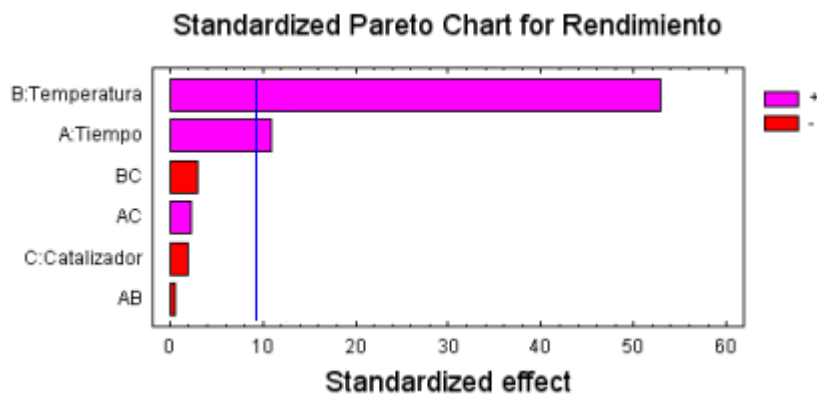


Figura 4.6 Pareto del 1^{er} diseño experimental del acetato de n-butilo.

4.1.2.2 Condiciones óptimas de la síntesis de acetato de n-butilo

Por otra parte la cantidad de catalizador utiliza en las reacciones no se nota definida y por lo tanto se realizó un experimento que puntualice la cantidad.

♦ Segundo desarrollo experimental.

Sabiendo la variable a definir, se desarrolló nuevamente otra parte experimental, en este desarrollo el objetivo fue obtener las condiciones óptimas de la síntesis del éster, y solo se modificó la concentración del catalizador, dejando fija la relación molar de reactivos, el tiempo y la temperatura. Ahora solo se tiene un factor.

Tabla 4.5 Resultados del 2^{do} desarrollo experimental del acetato de n-butilo.

No. Lote	Relación molar Acético & n-butanol	Tiempo (min)	Temperatura (°C)	Catalizador (% p/p)	Rendimiento Real (%)
1	0.3 : 0.3	60	120	0.2	85.7114
2	0.3 : 0.3	60	120	0.1	83.4092
3	0.3 : 0.3	60	120	0.1	82.1675
4	0.3 : 0.3	60	120	0.2	87.3850

En la Tabla 4.5 se observan los resultados de los cuatro lotes con las condiciones establecidas, con la misma metodología y en resumen como se puede ver las reacciones con mayor porcentaje de rendimiento son las que tienen una relación molar de 0.3:03 (ácido acético:n-butanol), el tiempo de reacción 60 min, la temperatura de 110°C y la cantidad de catalizador de 0.2% p/p.

- ◆ Rectificación de las condiciones óptimas de la síntesis del acetato de n-butilo. Se realizaron seis lotes más con las mismas condiciones ya establecidas y con la misma metodología para poder corroborar los rendimientos reales, el resumen se puede ver en la Tabla 4.6.

Tabla 4.6 Rectificación de las condiciones para síntesis de acetato de n-butilo.

No. lote	Relación molar Acético & n-butanol	Tiempo (min)	Temperatura (°C)	Catalizador (% p/p)	Rendimiento Real (%)
1	0.3 : 0.3	60	120	0.2	84.4973
2	0.3 : 0.3	60	120	0.2	84.1857
3	0.3 : 0.3	60	120	0.2	84.5256
4	0.3 : 0.3	60	120	0.2	84.4781
5	0.3 : 0.3	60	120	0.2	84.3682
6	0.3 : 0.3	60	120	0.2	84.5462

Como se puede observar en la anterior tabla, los rendimientos reales son similares y con esto se finaliza la parte experimental de la síntesis del acetato de n-butilo, ahora bien, para demostrar que se trata del acetato de n-butilo y agua se les realiza una caracterización.

4.2 Caracterización de los ésteres

4.2.1 Caracterización del acetato de etilo

4.2.1.1 Cromatografía de gases

En la Figura 4.7 se presenta el cromatograma que pertenece a la mezcla de reacción obtenida de la esterificación del etanol con el anhídrido acético y en el que se pueden apreciar los picos que pertenecen a diferentes especies obtenidas de la reacción, por ejemplo, a los 0.650 minutos aparece la primera señal ancha que corresponde al etanol que forma parte del reactivo que no reaccionó. Posteriormente, aparece una señal a los 0.914 minutos es la que pertenece al acetato de etilo formado. Finalmente a los 1.473 minutos aparece el pico que pertenece al ácido acético subproducto de la reacción.

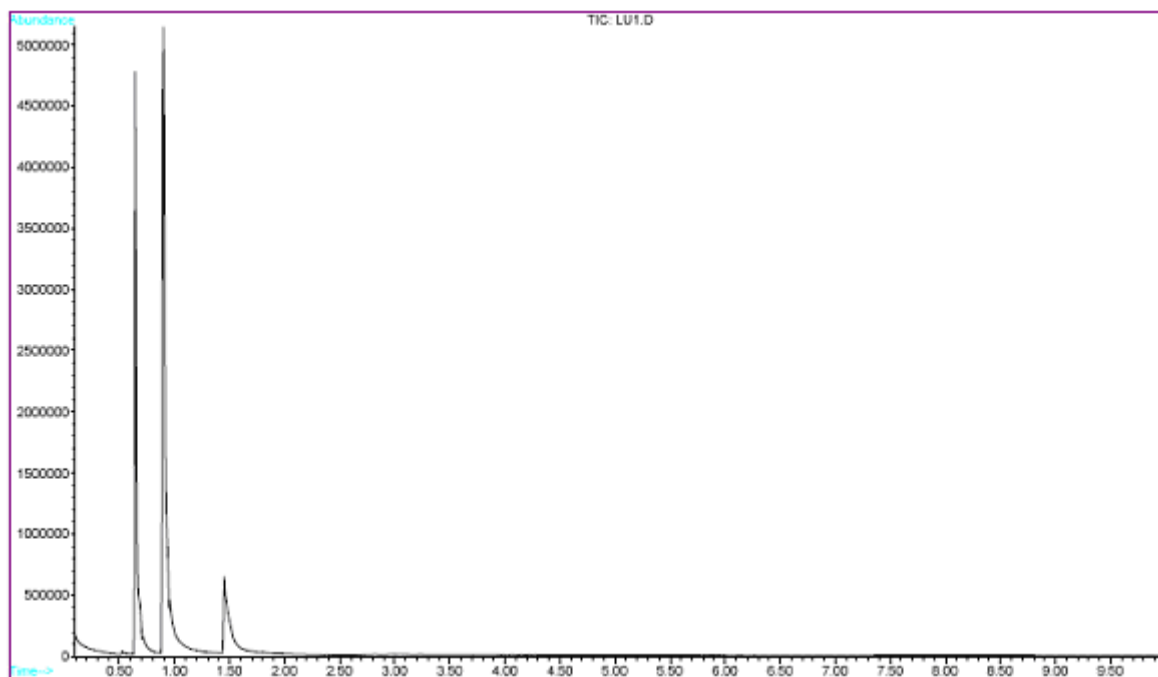


Figura 4.7 Cromatograma de la esterificación del etanol con el anhídrido acético.

Cabe destacar que para los picos obtenidos en el cromatograma se obtuvieron los espectros de masas correspondientes, los cuales se compararon en todo momento con la librería de compuestos que posee el equipo, para así poder identificarlos.

A continuación, se presentan las Figuras 4.8, 4.9 y 4.10 donde se muestra el espectro de masas de cada especie de la mezcla de reacción, así como su estructura molecular correspondiente.



Figura 4.8 Espectro de masas del etanol.

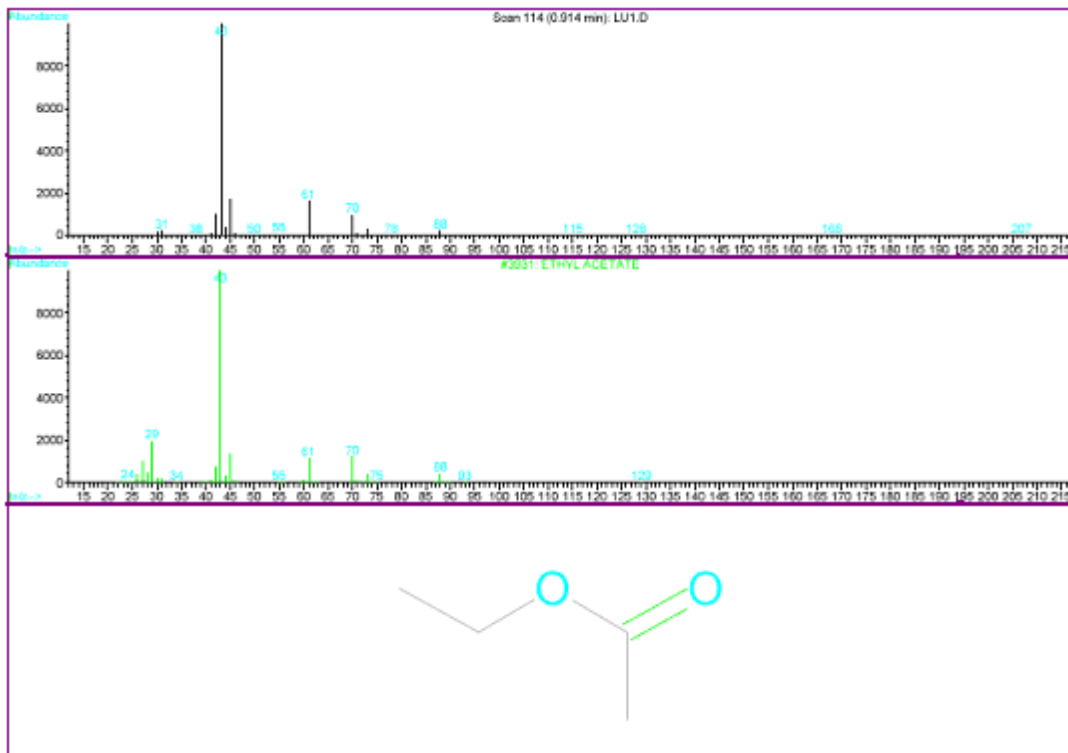


Figura 4.9 Espectro de masas del aceto de etilo.

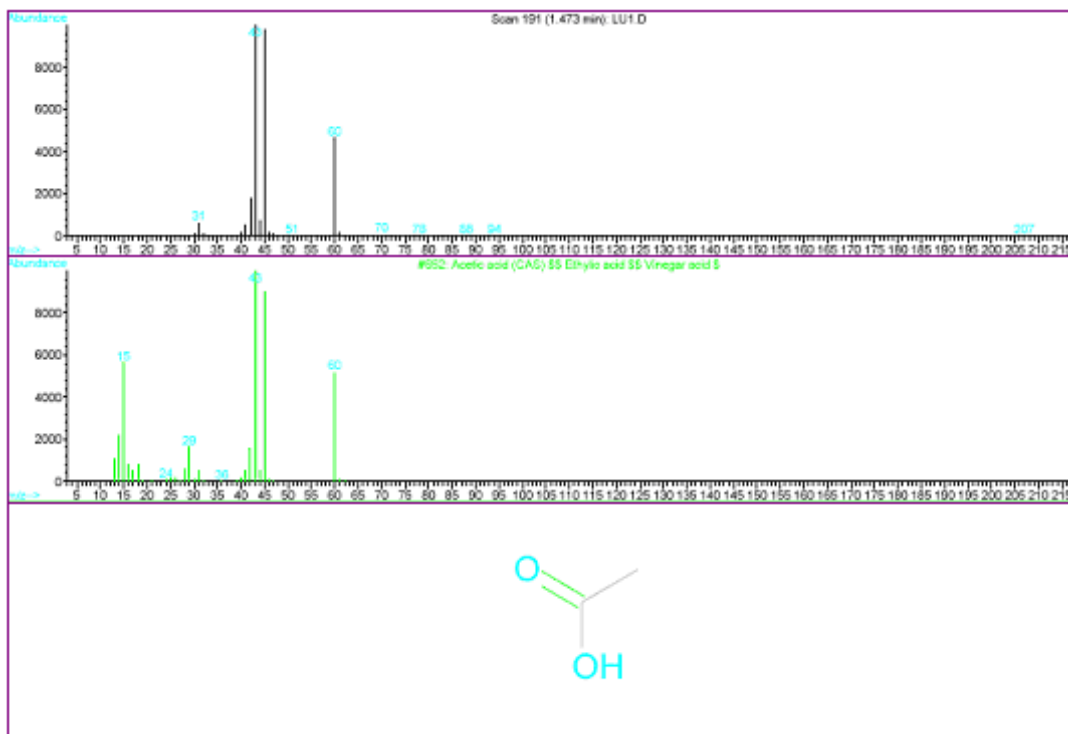


Figura 4.10 Espectro de masas del ácido acético.

4.2.1.2 Espectroscopia de infrarrojo

En la Figura 4.11 se muestra el espectro de infrarrojo para la mezcla de la síntesis del acetato de etilo, proveniente del lote 1. Se observa la banda de 3411 cm^{-1} que pertenece al grupo hidroxilo. También se pueden observar las bandas de 2978 cm^{-1} correspondiente al grupo metilo y su confirmación en la banda de 1376 cm^{-1} , además de la banda de 2901 cm^{-1} que pertenece al grupo metileno.

Se observa también la banda de 1741 cm^{-1} perteneciente al grupo éster. Se observa la banda de 1647 cm^{-1} que pertenece al grupo anhídrido. Se muestra también la banda de 1248 cm^{-1} que pertenece al grupo éter y que es confirmada con la banda de 880 cm^{-1} . Se observa también la banda de 1047 cm^{-1} perteneciente al grupo del alcohol primario.

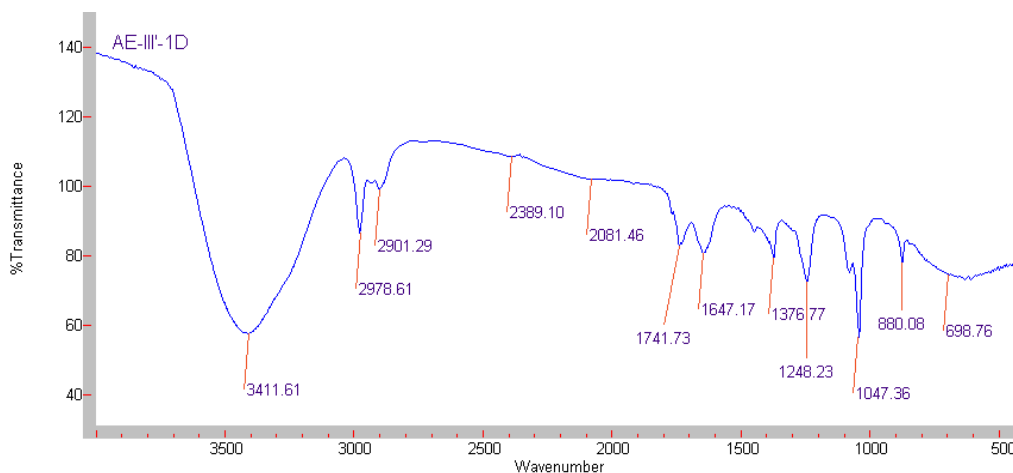


Figura 4.11 Espectro de infrarrojo para la síntesis del acetato de etilo, lote 1.

En la Figura 4.12 se muestra el espectro de infrarrojo para la mezcla de la síntesis del acetato de etilo, proveniente del lote 4. Se observa la banda de 3411 cm^{-1} que pertenece al grupo hidroxilo. También se pueden observar las bandas de 2978 cm^{-1} correspondiente al grupo metilo y su confirmación en la banda de 1377 cm^{-1} .

Se observa también la banda de 1725 cm^{-1} perteneciente al grupo éster. Se observa la banda de 1638 cm^{-1} que pertenece al grupo anhídrido. Se muestra también la banda de 1255 cm^{-1} que pertenece al grupo éter y que es confirmada con la banda de 879 cm^{-1} . Se observa también la banda de 1047 cm^{-1} perteneciente al grupo del alcohol primario y la banda de 1086 cm^{-1} que corresponde al alcohol secundario.

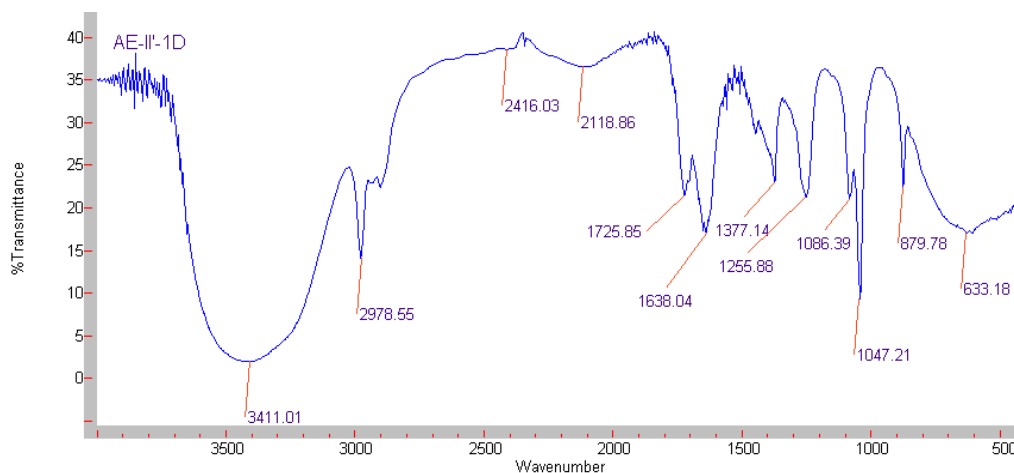


Figura 4.12 Espectro de infrarrojo para la síntesis del acetato de etilo, lote 4.

En la Figura 4.13 se muestra el espectro de infrarrojo para la mezcla de la síntesis del acetato de etilo, proveniente del lote 6. Se observa la banda de 3433 cm^{-1} que pertenece al grupo hidroxilo. También se pueden observar las bandas de 2978 cm^{-1} correspondiente al grupo metilo y su confirmación en la banda de 1376 cm^{-1} , además de la banda de 2906 cm^{-1} que pertenece al grupo metileno con su confirmación en la banda de 1449 cm^{-1} .

Se observa también la banda de 1735 cm^{-1} perteneciente al grupo éster. Se observa la banda de 1647 cm^{-1} que pertenece al grupo anhídrido. Se muestra también la banda de 1253 cm^{-1} que pertenece al grupo éter y que es confirmada con la banda de 880 cm^{-1} . Se observa también la banda de 1047 cm^{-1} perteneciente al grupo del alcohol primario, y la banda de 1089 cm^{-1} que pertenece al alcohol secundario.

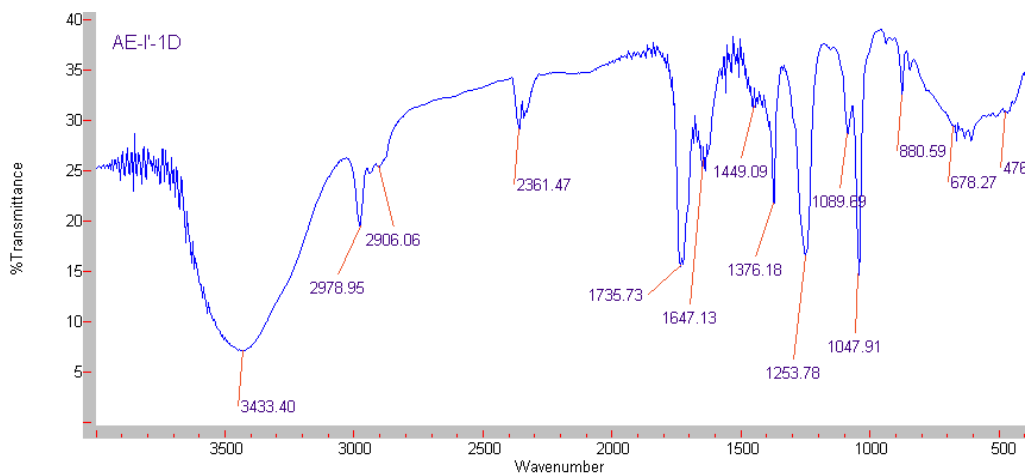


Figura 4.13 Espectro de infrarrojo para la síntesis del acetato de etilo, lote 6.

4.2.2 Caracterización del acetato de n-butilo

4.2.2.1 Cromatografía de gases

En la Figura 4.14 se presenta el cromatograma de gases que pertenece a la mezcla de reacción obtenida de la esterificación del n-butanol con el ácido acético y en el que se pueden apreciar los picos que pertenecen de las diferentes especies obtenidas de la reacción, por ejemplo, a 0.650 minutos sale la señal que pertenece al etanol, impureza del reactivo o subproducto de la reacción. A los 1.494 minutos aparece la primera señal ancha que corresponde al n-butanol, y a los 1.625 minutos aparece el pico correspondiente al ácido acético, estas señales forman parte de los reactivos que no reaccionaron. Y finalmente la señal que aparece a los 3.105 minutos es la que pertenece al acetato de butilo formado.

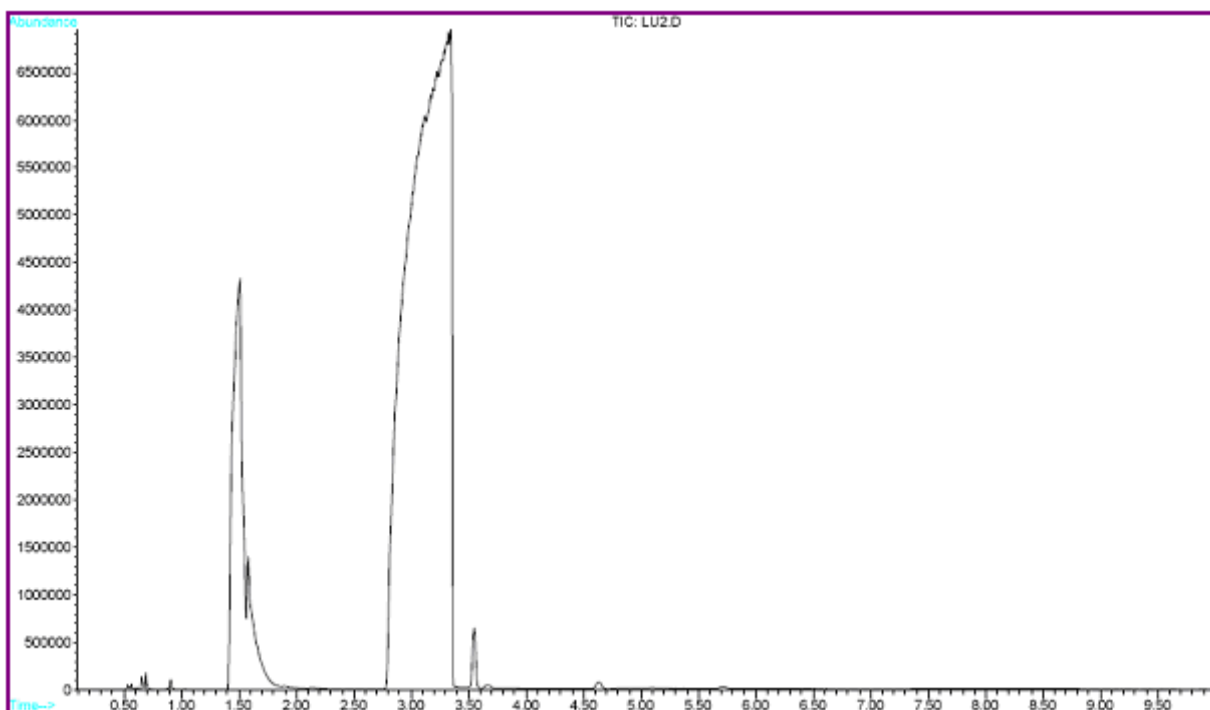


Figura 4.14 Cromatograma de la esterificación del n-butanol con el ácido acético.

Cabe destacar que para los picos obtenidos en el cromatograma se obtuvieron los espectros de masas correspondientes, los cuales se compararon en todo momento con la librería de compuestos que posee el equipo, para así poder identificarlos. A continuación, se presentan las Figuras 4.15, 4.16 y 4.17 donde se muestra el espectro de masas de cada especie de la mezcla de reacción, así como su estructura molecular correspondiente.

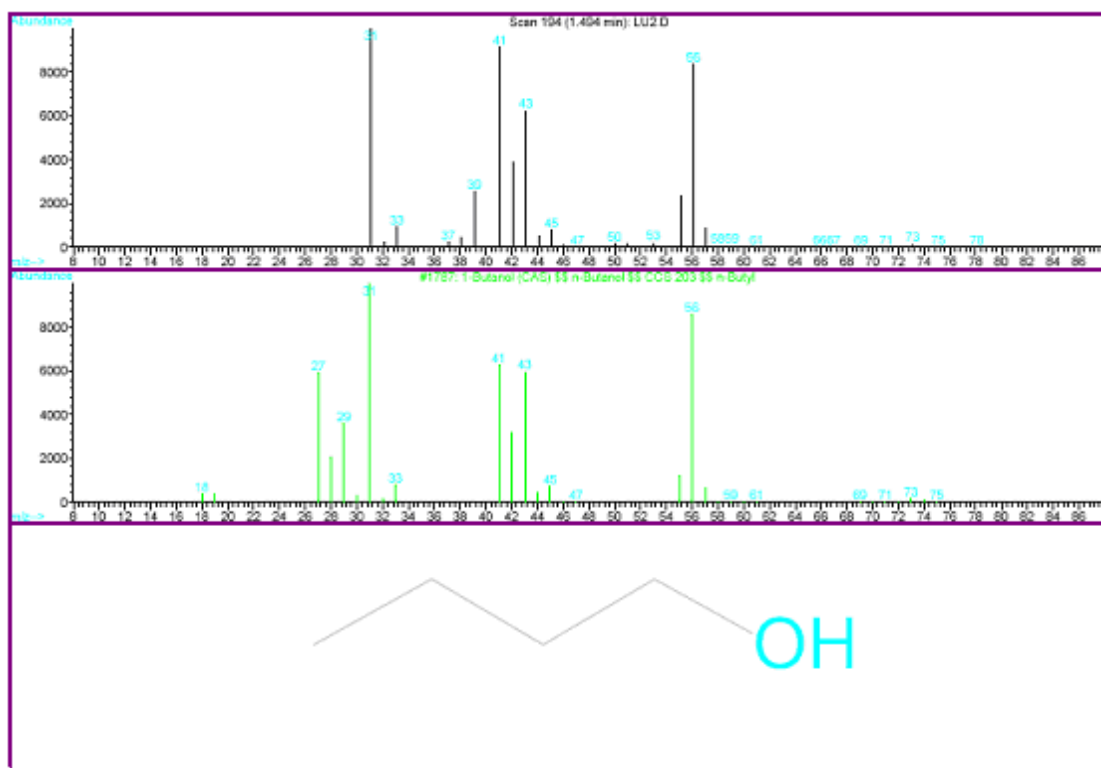


Figura 4.15 Espectro de masas del n-butanol.

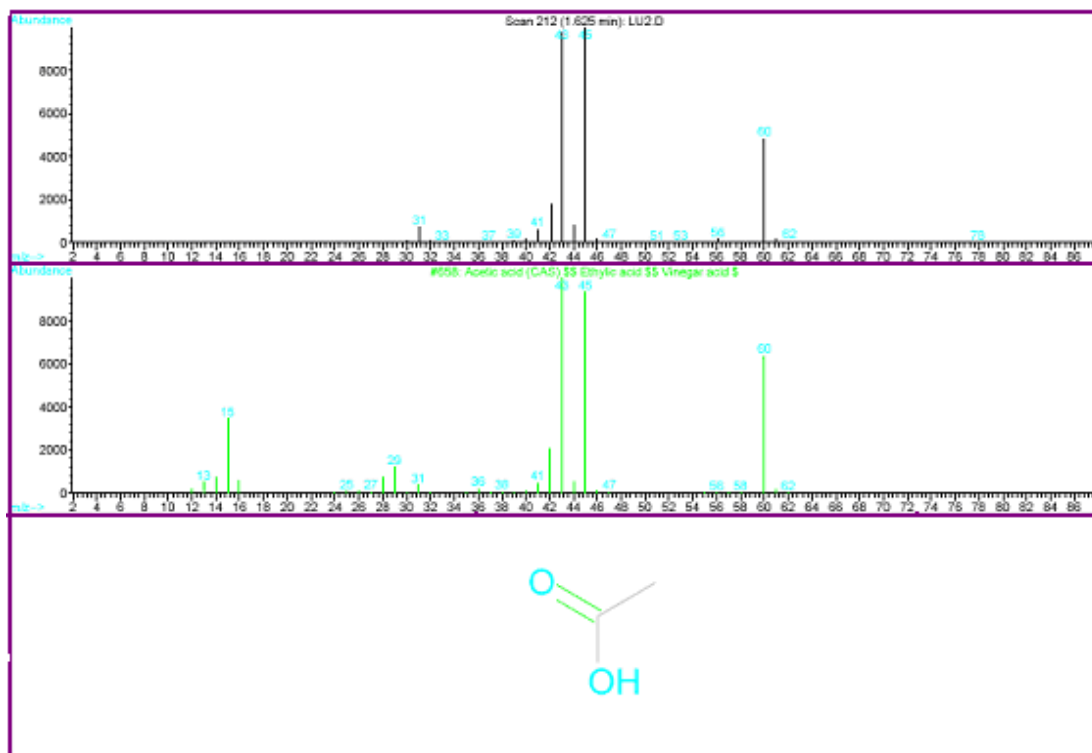


Figura 4.16 Espectro de masas del ácido acético

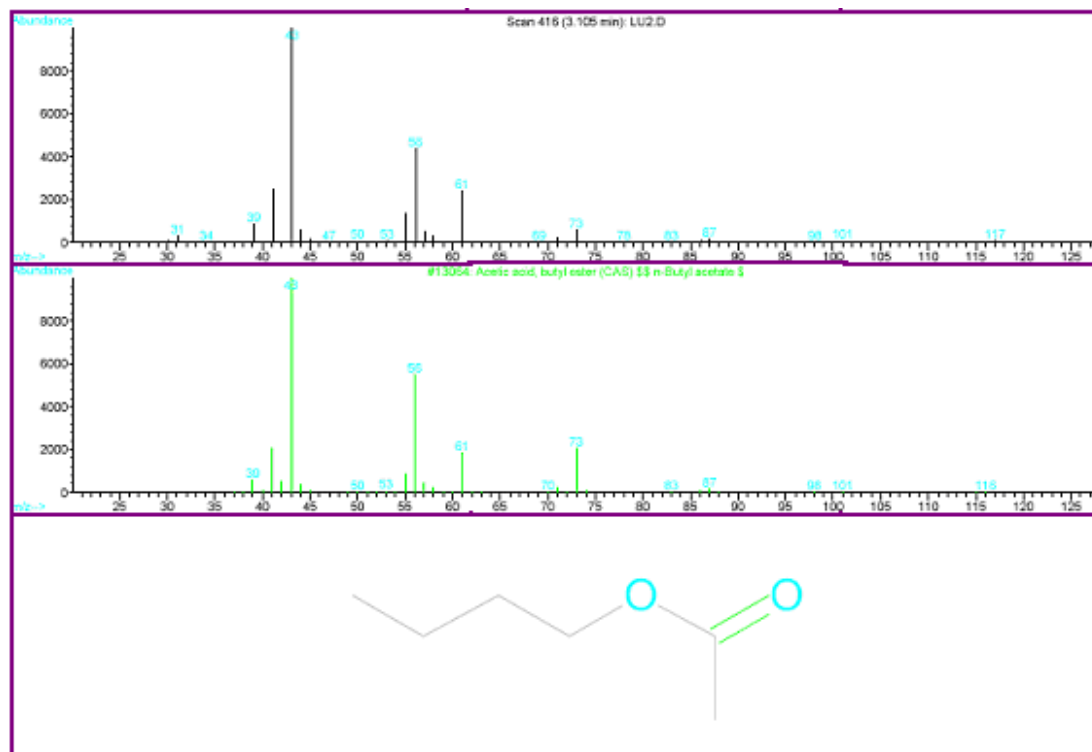


Figura 4.17 Espectro de masas del acetato de n-butilo.

4.2.2.2 Espectroscopia de infrarrojo

La Figura 4.18 muestra el espectro de infrarrojo para la mezcla de la síntesis del acetato de n-butilo, proveniente del lote 1. Donde se pueden observar las bandas de 2963 cm^{-1} y 2876 cm^{-1} correspondientes a los grupos metilos y metilenos, junto con sus confirmaciones en las bandas de 1366 cm^{-1} y 1466 cm^{-1} respectivamente.

Se observa también la banda de 1743 cm^{-1} perteneciente al grupo éster. Se muestra también la banda de 1243 cm^{-1} que pertenece al grupo éter y que es confirmada con la banda de 951 cm^{-1} . Se observan también las bandas de 1042 cm^{-1} y 1066 cm^{-1} , pertenecientes al grupo de alcohol primario y alcohol secundario respectivamente.

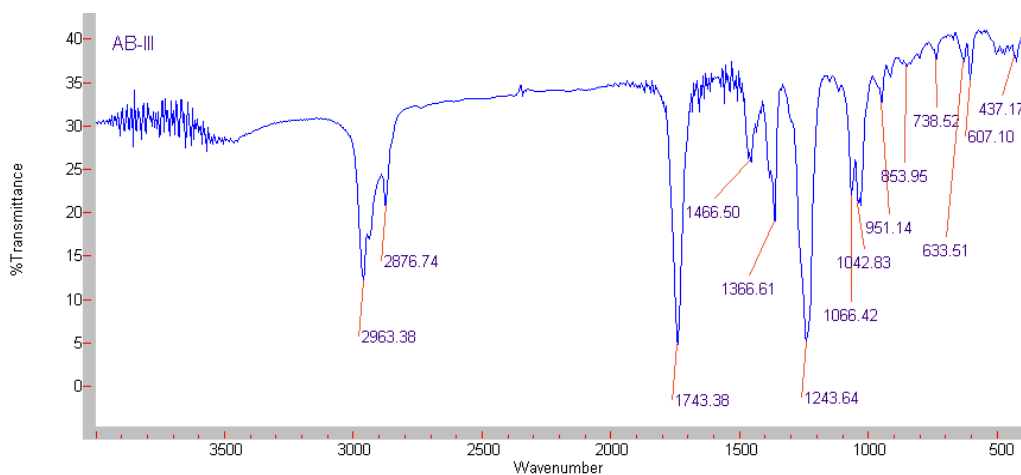


Figura 4.18 Espectro de infrarrojo para síntesis del acetato de n-butilo, lote 1.

La Figura 4.19 muestra el espectro de infrarrojo para la mezcla de la síntesis del acetato de n-butilo, proveniente del lote 3. Se observa la banda de 3395 cm^{-1} que pertenece al grupo hidroxilo. También se pueden observar las bandas de 2962 cm^{-1} y 2875 cm^{-1} correspondientes a los grupos metilos y metilenos, junto con sus confirmaciones en las bandas de 1366 cm^{-1} y 1466 cm^{-1} respectivamente.

Se observa también la banda de 1743 cm^{-1} perteneciente al grupo éster. Se muestra también la banda de 1244 cm^{-1} que pertenece al grupo éter y que es confirmada con la banda de 955 cm^{-1} . Se observan también las bandas de 1044 cm^{-1} y 1070 cm^{-1} , pertenecientes al grupo de alcohol primario y alcohol secundario respectivamente.

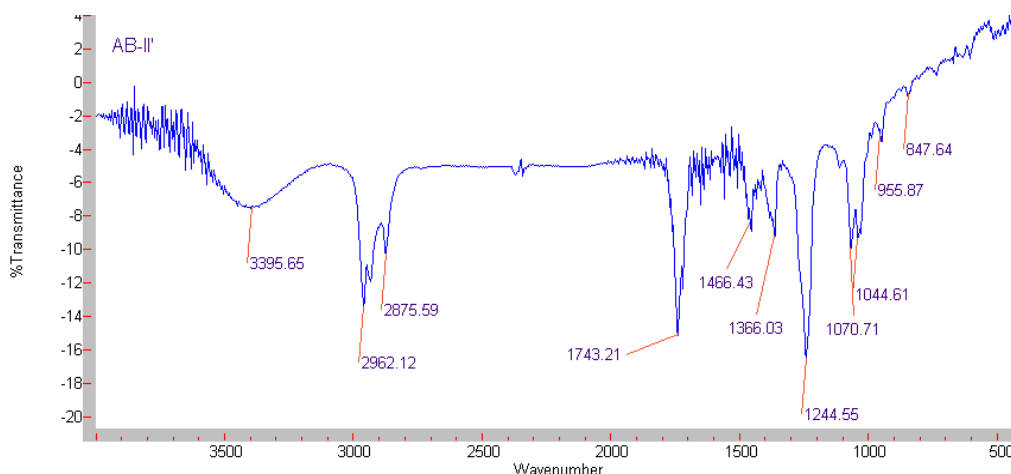


Figura 4.19 Espectro de infrarrojo para síntesis del acetato de n-butilo, lote 3.

La Figura 4.20 muestra el espectro de infrarrojo para la mezcla de la síntesis del acetato de n-butilo, proveniente del lote 6. Se observa la banda de 3401 cm^{-1} que pertenece al grupo hidroxilo. También se pueden observar las bandas de 2961 cm^{-1} y 2875 cm^{-1} correspondientes a los grupos metilos y metilenos, junto con sus confirmaciones en las bandas de 1367 cm^{-1} y 1466 cm^{-1} respectivamente.

Se observa también la banda de 1743 cm^{-1} perteneciente al grupo éster. Se muestra también la banda de 1244 cm^{-1} que pertenece al grupo éter y que es confirmada con la banda de 955 cm^{-1} . Se observan también las bandas de 1043 cm^{-1} y 1071 cm^{-1} , pertenecientes al grupo de alcohol primario y alcohol secundario respectivamente.

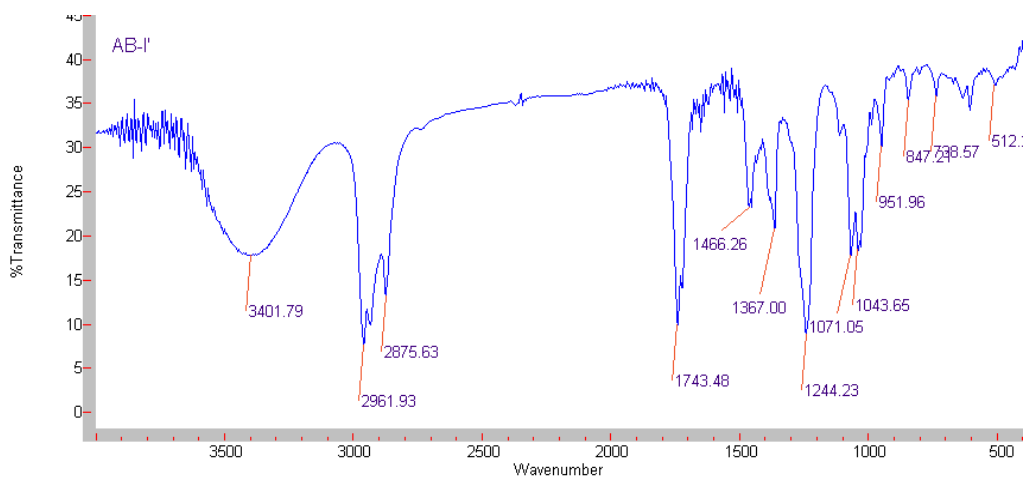


Figura 4.20 Espectro de infrarrojo para síntesis del acetato de n-butilo, lote 6.

4.2.3 Comparación de las especificaciones requeridas

En la Tabla 4.7 se muestran las especificaciones requeridas del acetato de etilo, comparadas con las propiedades reales, que estas son un promedio de 18 mediciones que se realizaron a los lotes que anteriormente se mencionaron.

Tabla 4.7 Especificaciones del producto del acetato de etilo.

Especificaciones	Requerida	Real
Punto de ebullición (°C)	77.06	77
Color	Transparente	Transparente
Estado de agregación	Líquido	Líquido
Olor	Dulce	Dulce
Peso de un galón (lb)	7.519	7.52

En la Tabla 4.8 se observa las especificaciones solicitadas del éster, comparadas con las propiedades reales, que estas a su vez son un promedio de lotes anteriormente mencionados.

Tabla 4.8 Especificaciones del producto del acetato de n-butilo.

Especificaciones	Requerida	Real
Punto de ebullición (°C)	125.97	124
Color	Transparente	Transparente
Estado de agregación	Líquido	Líquido
Olor	Dulce	Dulce
Peso de un galón	7.348	7.35

4.3 Aspectos de mercado

4.3.1 Estudio del acetato de etilo

◆ Análisis de la demanda

En la Figura 4.21 se observa la demanda en México del acetato de etilo, en el año 2000 tuvo un decaimiento de casi el 65% con respecto al año 1999 donde se tenía una demanda de 10690 toneladas. ^[1]

Esta disminución continuó hasta el año 2002 con 6323 toneladas del éster, esto se puede deber al cambio del titular del poder ejecutivo y en consecuencia hubo un periodo de rescisión por parte de los industriales ya que esperaban la estabilidad del país. Del año 2003 hasta el 2007 se tiene una tendencia en aumento y es muy probable que continúe así.

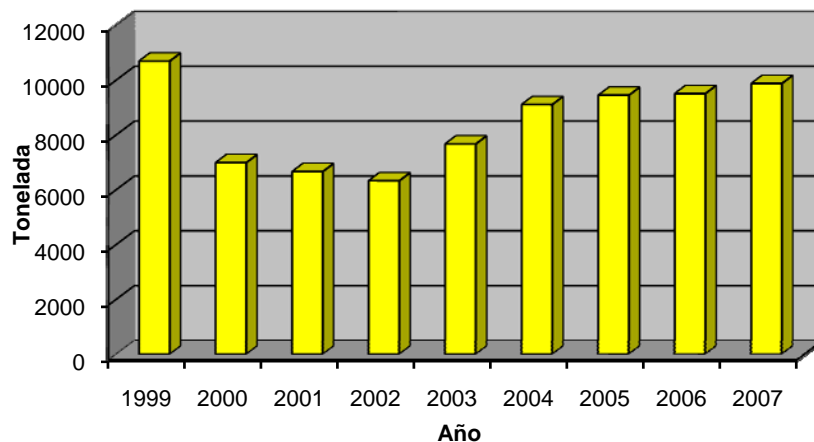


Figura 4.21 Gráfica de la demanda del acetato de etilo. ^[1]

◆ Análisis de la oferta

En la Tabla 4.9 se observan los principales países que exporta este éster a nuestro país, están situados por su posición competitiva.

Tabla 4.9 Productores mundiales del acetato de etilo. ^[26]

País	Cantidad (tonelada)	Costo (dólar/tonelada)
Estados Unidos	10146493	92.25
Brasil	40000	100.21
Reino Unido	930	411.54
Alemania	112	415.25
Sudáfrica	26	125.78
Dinamarca	24	241.68
Japón	16	161.65

◆ Análisis comparativo

En la Figura 4.22 se observa la cantidad de acetato de etilo que el sector mexicano está dispuesto a comprar en cada año citado, a los diversos precios posibles. Y también la cantidad importada a nuestro país anualmente.

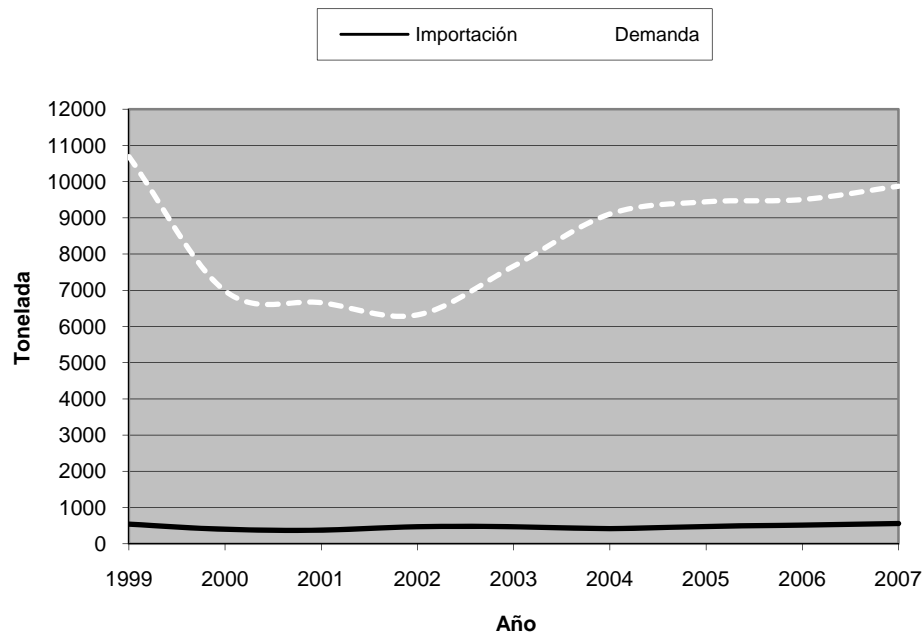


Figura 4.22 Gráfica comparativa entre la demanda y la importación del acetato de etilo.

Se observa que en el año 2000 se tuvo una disminución muy notable tanto en la demanda con un 333% como en la importación con un 333% menos que en el año pasado y bueno esto se debe como se a mencionadazo a la crisis económica que sufrió este país. Además de en los próximos dos años aumenta el precio y la cantidad de la demanda disminuye esto es bien conocido como la ley de la demanda.

La demanda está representada por una serie de posibles alternativas que correlacionan las diferentes solicitudes con los distintos niveles de precios presentados.

En la Figura 4.23 se observa la comparación de los costos mundiales que tiene el acetato de etilo y el caso de Estados Unidos es país que más bajo tiene el precio y esto se debe a que comercia a escala internacional especializándose en producir los bienes en los que tiene ventaja absoluta, es decir, los que produce con menores costes que el resto de los países.

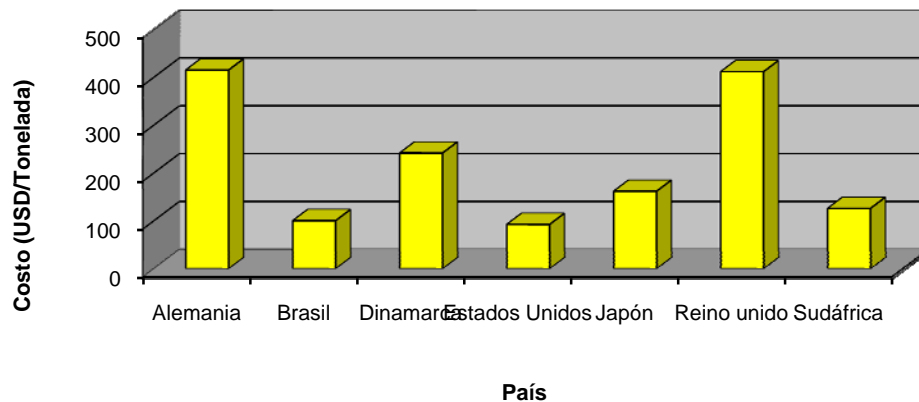


Figura 4.23 Gráfica comparativa del costo mundial del acetato de etilo. ^[26]

4.3.2 Estudio del acetato de n-butilo

◆ Análisis de la demanda

En la Figura 4.24 se observa la demanda en México que en el año 2000 tuvo un decaimiento de casi el 68% con respecto al año 1999 donde se tenía una demanda de 115 884 toneladas, esta cantidad se iguala hasta el año 2004 y desde esta fecha hasta el 2007 se marca una tendencia en aumento. Esto es se debe a que el acetato de n-butilo está reemplazando a otros disolventes.

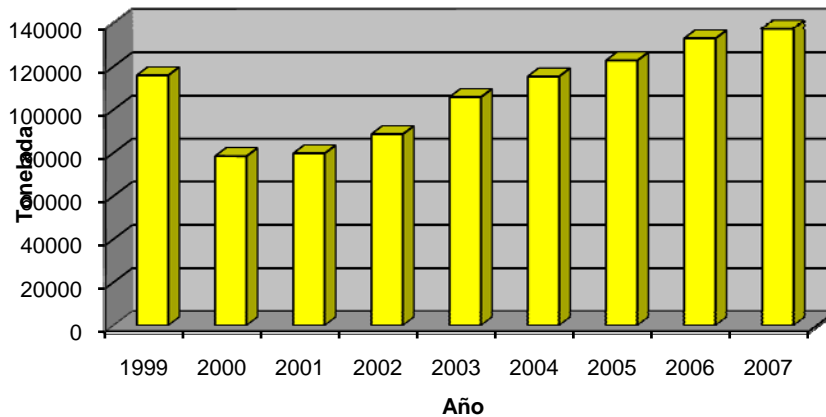


Figura 4.24 Gráfica de la demanda del acetato de n-butilo. ^[1]

◆ Análisis de la oferta

Es la Tabla 4.10 se observa los países que exportan este éster a nuestro país, identificando su posición competitiva y participación en el mercado.

Tabla 4.10 Productores mundiales del acetato de n-butilo. ^[26]

País	Cantidad (tonelada)	Costo (dólar/tonelada)
Estados Unidos	13255762	110.36
Brasil	20000	142.99
Japón	4370	327.39
Alemania	5	346.90

◆ Análisis comparativo

En la Figura 4.25 se observa la cantidad de acetato de etilo demandada y la cantidad importada a nuestro país anualmente. La demanda no es una simple cantidad de producto, sino que es toda una relación de las cantidades de una mercancía que los compradores están dispuestos a adquirir a los diversos precios posibles, por unidad de tiempo.

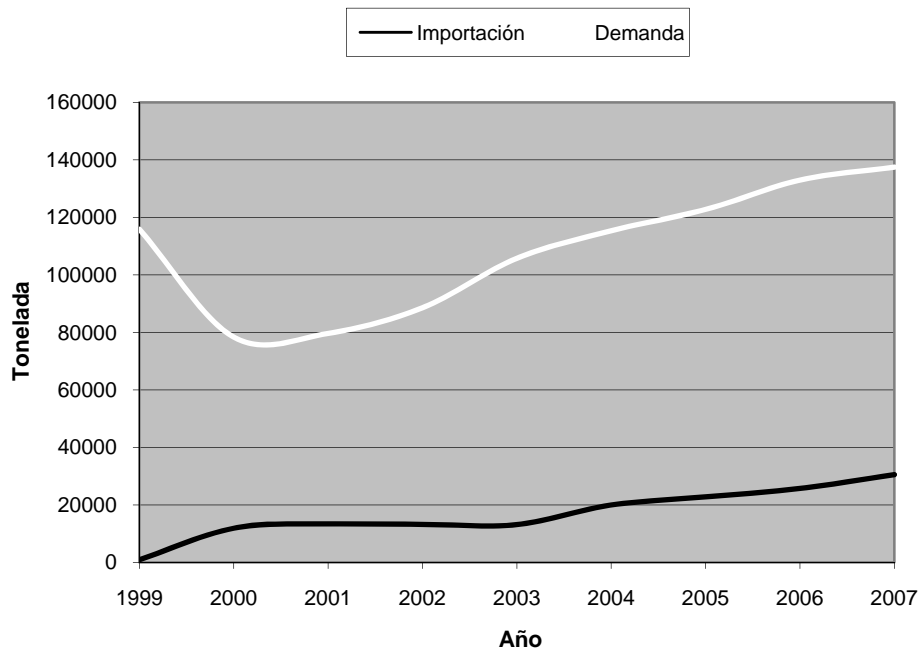


Figura 4.25 Gráfica comparativa entre la demanda y la importación del acetato de n-butilo.

En la Figura 4.26 se observa la comparación de los costos mundiales que tiene el acetato de n-butilo y como es de notar no hay tantos países compitiendo.

Por una parte tenemos a los países de América que son Estados Unidos y Brasil con un precio similar y por el otro lado a Japón y Alemania con un precio similar pero ente ellos dos; ya que comparando a estos cuatro se nota una gran diferencia inclusive mayor que el 100% del costo en dólares por tonelada.

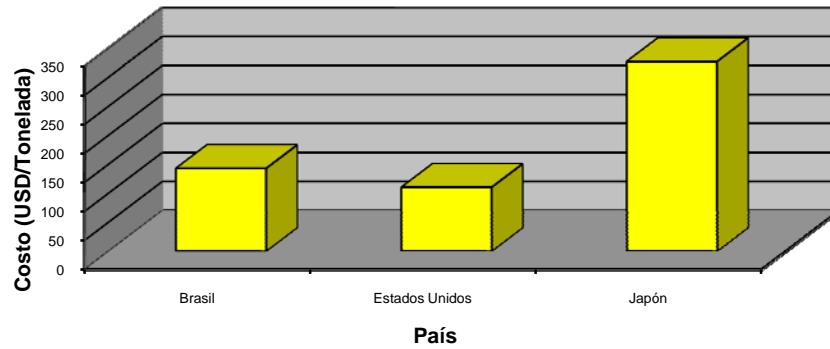


Figura 4.26 Gráfica comparativa del costo mundial del acetato de n-butilo. ^[26]

Esto se debe a que Estados Unidos es un país que tiene que exportar productos para poder financiar las importaciones de otros que los demás producen con menos costes y además comparte el mismo continente con Brasil.

4.4 Aspectos financieros

4.4.1 Estado de ganancias y pérdidas

En la Tabla 4.11 se observa los estados más significativos referente a los aspectos financieros, realizado a la síntesis de ambos ésteres como un proyecto en conjunto. Cabe aclarar que para este cálculo el precio del acetato de etilo es de \$0.15 USD/lb y la cantidad producida es de 501.220 Kg/año; del acetato de n-butilo es de \$0.15 USD/lb y el monto producido es de 1,806.550 Kg/año.

Tabla 4.11 Estados financieros de la síntesis del acetato de etilo y acetato de n-butilo.

Concepto	Cantidad
Inversión total	9681.65
Costo de operación total anual	3748.65
Ventas totales anuales	10189
Utilidad bruta anual	6440.35
Utilidad neta anual (ISR 0.34)	4250.631

La evaluación de proyectos por medio de métodos matemáticos-financieros es una herramienta de gran utilidad para la toma de decisiones por parte de los administradores financieros, ya que un análisis que se anticipe al futuro puede evitar posibles desviaciones y problemas en el largo plazo.

4.4.2 Valor presente neto

El método del *VPN* es muy utilizado porque todos los ingresos y egresos futuros se transforman a pesos de hoy, y así puede verse fácilmente si los ingresos son mayores que los egresos.

En la Figura 4.27 se observa una línea de tiempo en la cual destaca la inversión total de \$9,681 M/N, con Flujos Netos de Efectivo (*FNE*) en cinco años y una tasa de oportunidad del 10%.

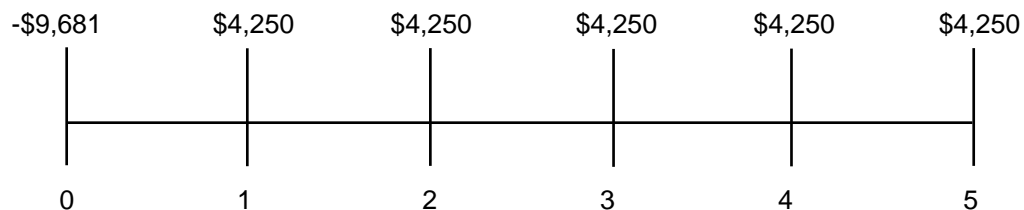


Figura 4.27 Línea del tiempo.

Según la línea del tiempo, la inversión inicial aparece en el periodo 0 y con signo negativo, esto se debe a que se hizo un desembolso de dinero por \$9,681 M/N y por lo tanto debe registrarse como tal, las cifras de los *FNE* de los periodos 1 al 5, son positivas; esto quiere decir que en cada periodo los ingresos de efectivo son mayores a los egresos o salidas de efectivo.

Como el dinero tiene un valor en el tiempo, se procederá ahora a conocer cuál será el valor de cada uno de los *FNE* en el periodo cero. Dicho de otra forma, lo que se pretende es conocer el valor de los flujos de efectivo pronosticados a pesos de hoy

y, para lograr este objetivo, para ello se utilizó la fórmula que se observa en la Figura 4.28.

$$VPN = I - \sum_{i=1}^n \frac{F}{(1+i)^i}$$

Figura 4.28 Fórmula para calcular el valor presente neto.

En la Figura 4.29 se puede observar la sustitución de los datos y el resultado de este cálculo

$$VPN = 9,681 - \left[\frac{4,250}{(1+0.1)^1} + \frac{4,250}{(1+0.1)^2} + \frac{4,250}{(1+0.1)^3} + \frac{4,250}{(1+0.1)^4} + \frac{4,250}{(1+0.1)^5} \right]$$

$$VPN = +6429.84$$

Figura 4.29 Sustitución de la formula y resultado del VPN.

4.4.3 Tasa interna de retorno

La *TIR* es aquella tasa que está ganando un interés sobre el saldo no recuperado de la inversión en cualquier momento de la duración del proyecto. Para su cálculo se tomó en cuenta la Figura 4.27 ya que desde el punto cero se plantea la ecuación que se observa en la Figura 4.30. Así como su resultado después de haber realizado unos cálculos matemáticos, y finalmente obtener la tasa.

Este valor indica que el proyecto es aconsejable ya que el valor es mayor que la tasa fijada que es del 10%

$$0 = -9,681 + \frac{4,250}{(1+i)^1} + \frac{4,250}{(1+i)^2} + \frac{4,250}{(1+i)^3} + \frac{4,250}{(1+i)^4} + \frac{4,250}{(1+i)^5}$$

$$i = 0.3357$$

$$TIR = 33.57\%$$

Figura 4.30 Sustitución de la formula y resultado de la TIR.



4.5 Aspectos del impacto ambiental

4.5.1 Normatividad

Las normas sanitarias establecen las medidas para prevenir daños a la salud de los trabajadores expuestos a los ésteres, establecen los límites máximos permisibles de exposición en los centros de trabajo donde se manejan, transportan, procesan o almacenan. De igual manera establecen los requisitos mínimos de un sistema para la identificación, que de acuerdo a sus características físicas, químicas, de toxicidad, concentración y tiempo de exposición, se requiera.

Las normas técnicas dan como resultado muchos beneficios como es la reducción de rechazos e incidencias en la producción, el aumento de la productividad, el mayor compromiso con los requisitos del cliente y la mejora continua.

En el ámbito comercial las normas establecen las características, dimensiones, símbolos y colores de las etiquetas que deben portar todos los envases, que identifican la clase de riesgo que representan los ésteres durante su transportación y manejo.

4.5.2 Método de Leopold

El proceso de síntesis y caracterización del acetato de etilo y acetato de n-butilo presenta más factores a favor que en contra, es por ello que es un proceso amable con el medio ambiente, razón importante y necesaria para implementar este proceso.

En esta tesis se utilizó un método modificado y basado en la matriz de Leopold que identifica y pondera una evaluación, la relación de interacciones en una matriz se acentúa en magnitud e importancia, de tal modo que al leer una matriz se entienden los aspectos que más se afectan, en la tabla se lee el resumen solo con signos positivos o negativos, cuando favorece o afecta respectivamente y una celda vacía cuando es indistinto.

En la Tabla 4.12 se puede ver que el factor y el concepto más preocupante es el transporte del material no es muy bueno ya que tiene una notable mayoría de daños, pero estos se pueden disminuir logrando que cuando se solicite el material se pida en conjunto la materia prima de otros proyectos para hacer que en un solo viaje se abastezca lo mayor posible.

Tabla 4.12 Matriz simplificada de la síntesis del acetato de etilo y acetato de n-butilo.

Factores ambientales	Acciones del proyecto									
	Localización de laboratorio	Transporte del material	Manejo de los reactivos	Requerimientos de insumos	Requerimientos de servicios	Almacenamiento de material	Producción	Mantenimiento del equipo	Caracterización	Envasado del producto
Calidad de aire	+	-	+			+	+	+	+	+
Nivel de polvo	+					+	+	-	+	+
Nivel de olores	+		+		+	+	-	+	+	-
Nivel de ruido	+	-	+		+	+	+	+	+	+
Ecosistema de aire	+	-	+	+				+		+
Demanda de flora y fauna	+		+				+	+		+
Zona urbana	+	+		+	+	+				
Red de abastecimiento	+	-	+	+	+			+		+
Factor educativo	+					+	+		+	
Salud	+		+		+	+	-		+	+
Estructura ocupacional	+	+	-	+		-	+	+	+	-
Total de impacto positivo	11	2	7	4	5	7	6	7	7	7
Total de impacto negativo	0	4	1	0	0	1	2	1	0	2

CAPÍTULO V

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES





5. Conclusiones y recomendaciones

En este capítulo se presentan las conclusiones y recomendaciones del proyecto de tesis, a estas se llegaron después de haber realizado el análisis de resultados que se describe en el capítulo anterior.

5.1 Conclusiones

La reacción de síntesis a partir del anhídrido acético y del etanol para la producción de acetato de etilo con una relación molar de 0.3 anhídrido acético y 1 etanol, un tiempo de reacción de 90 minutos, una temperatura de mezcla de 110 °C y una alimentación de 0.2% p/p de ácido sulfúrico como catalizador. Da como resultado un 94% rendimiento experimental.

La reacción de síntesis a partir del ácido acético y del n-butanol para la obtención de acetato de n-butilo con una relación molar de 1 ácido acético y 1 n-butanol, un tiempo de reacción de 60 minutos, una temperatura de mezcla de 120 °C y una alimentación de 0.2% p/p de ácido sulfúrico como catalizador. Proporciona como resultado un 84% rendimiento experimental.

En este trabajo se llevó a cabo la caracterización del acetato de etilo de cada una de las reacciones de las cuales podemos mencionar que los resultados obtenidos por medio de la cromatografía de gases, en el que se pueden apreciar los picos que pertenecen a diferentes especies obtenidas de la reacción, aparece una señal a los 0.914 minutos que pertenece al acetato de etilo formado, posteriormente a los 1.473 minutos aparece el pico que pertenece al ácido acético subproducto de la reacción. Y por otro lado la espectroscopia de infrarrojo demuestra que entre un rango de 1735 y 1740 cm^{-1} pertenecen al grupo éster. Por lo que se asegura con certeza que el compuesto analizado es el acetato de etilo.



De todas las síntesis realizadas se efectuaron los estudios de la caracterización del acetato de n-butilo en la cromatografía de gases se observó que a los 3.105 minutos es el pico perteneciente al acetato de n-butilo formado. Asimismo en la espectroscopia de infrarrojo especifica que a 1743 cm^{-1} perteneciente al grupo éster. Y con base a esto se confirma que el compuesto es el acetato de n-butilo.

De los aspectos de mercado se puede afinar que el acetato de etilo y el acetato de n-butilo describen un comportamiento ascendente de la demanda en nuestro país en los últimos años, lo cual es de suponer una demanda de mercado igualmente positiva. Cabe pensar que dicho comportamiento podría atribuirse a la necesidad internacional de sustituir otros disolventes industriales más amigables con el medio ambiente. En la demanda de ambos ésteres presentan una reducción en el año 2000 esto se puede observar mucho mejor en capítulo anterior y esta acción se debe al cambio del titular del poder ejecutivo y en consecuencia hubo un periodo de rescisión por parte de los inversionistas ya que esperaban la estabilidad del país.

También, se puede concluir que el escenario de comercialización de los ésteres, interviene la variación que se da por efecto de los volúmenes consumidos, es decir que a mayor volumen de compra se debe obtener un menor precio. Con esta circunstancia es como se satisfacen las necesidades de los consumidores frente a la oferta de los colosales vendedores, como son *Celanese* y *Dow Chemical* en el caso de acetato de etilo y para el acetato de n-butilo son *BASF* y *Sasol North America*.

Otra parte muy importante de los aspectos técnico son las normas mexicanas (*NOM*), que contienen la información, requisitos, especificaciones y metodología, para su manejo, transporte y comercialización en el país, Estas son, en consecuencia, de aplicación nacional y obligatoria. Las normas internacionales (*ISO*) que se describen en este trabajo son la herramienta fundamental para el desarrollo industrial y comercial de los ésteres, sirven como base para mejorar la calidad en la gestión, en el diseño y fabricación del acetato de etilo y acetato de n-butilo, aumentando la competitividad en los mercados nacionales e internacionales.



En los aspectos financieros las técnicas de evaluación son herramientas de uso general, ya que lo mismo pueden aplicarse a inversiones industriales, que de servicios El *VPN* y la *TIR* se mencionan juntos porque en realidad es el mismo método, sólo que sus resultados se expresan de manera distinta. Recuérdese que el valor presente neto es de 6429.84 y se concluye que el proyecto es aconsejable económicamente ya que los beneficios superan los costos actualizados a una tasa constante, la tasa interna de rendimiento es 33.57% y este valor indica que el proyecto es aconsejable ya que el valor es mayor que la tasa fijada que es del 10% Como se puede observar los valores arrojados del estudio económico son alentadores ya que los datos de consumo y precios del acetato de etilo y acetato de n-butilo han estado a la alza en los últimos trimestres del 2008.

Pero esto puede mejorar mucho con una mayor producción de ambos ésteres ya que eso se vería reflejado en el precio, es lógico que al iniciar esta parte del trabajo, el futuro inversionista advierta la inconveniencia de proseguir y el estudio le habrá servido para no arriesgar en una empresa que fuera a resultar improductiva al competir con gigantes compañías como son; *BASF* y *Celanese*. Se puede tomar la decisión de no depender exclusivamente de la participación en un mercado libre, sino que puede proponerse romper un monopolio o un oligopolio locales, lo cual tendrá su grado de dificultad, pero puede lograrse.

Para conocer los factores que pueden afectar al medio ambiente causado por el proceso de la síntesis y caracterización del acetato de etilo y acetato de n-butilo, se utilizó una matriz de Leopold modificada con esto se sabe que los impactos ambientales provocados en el medio son los factores de estructura ocupacional y el transporte de la materia prima, estos tienen posibles soluciones para disminuir su efecto negativo.



Se logró sintetizar el acetato de etilo y acetato de n-butilo, obteniendo el máximo rendimiento con las condiciones óptimas de reacción, una vez finalizada esta etapa se presentaron los resultados de los estudios y por ello se puede concluir de forma general que si es arriesgado invertir en proyectos en nuestro país; ya que la expectativa y el miedo por una probable inestabilidad en el futuro, se hace palpable entre la sociedad mexicana y extranjera, solo basta recordar las crisis económicas de fin de los períodos presidenciales que se han vivido.

Se presenta en el mundo una nueva economía donde las empresas más inteligentes, veloces y flexibles se comen a las más grandes pero lentas y rígidas; la velocidad y capacidad de respuesta al cambio es una nueva fuente de ventaja competitiva. En México se requieren estrategias que permitan el desarrollo competitivo de los sectores productivos, sustentados en empresas competitivas en el mercado tanto interno como externo, con grandes series productivas y mayor valor agregado, donde las acciones de los sectores público, privado y social permitan llevar a cabo una inserción activa de las empresas mexicanas a la globalización.

5.2 Recomendaciones

- ◆ Mantener cada uno de los reactivos en buen estado, procurando colocarlos en lugares frescos y bien cerrados. Asegurarse que los equipos de calentamiento como son la canastilla y el reóstato, no cambiarlos ya que al tener el rango de temperatura conocido en uno de ellos no es igual a otro aun cuando es de la misma marca.
- ◆ En el caso de este proyecto, la variable más difícil de controlar fue la adición de la cantidad requerida de catalizador; ya que se estuvo trabajando con cantidades alrededor de 0.001 mL. Y se considera que este fue un factor a la hora de realizar los experimentos de ambos ésteres para no obtener los tiempos de reacción iguales.



- ◆ Como ya es bien sabido la formación de un Ingeniero Químico es multidisciplinaria, ya que no solo tiene que ver con el rendimiento de la reacción química o las conclusiones de los estudios de mercado, estudios técnicos o incluso estudios económicos, sino que va más allá, se necesita evaluar y concluir de manera verídica si el proyecto es amable con el medio ambiente ya que no basta solo cumplir las normas sino también con la humanidad.
- ◆ Con base a los resultados obtenidos que se establece en este trabajo se puede darle el seguimiento de ponerlo en marcha ya que finalmente este proyecto no se pudo concretar. Ya que lo más recomendable es producir ambos ésteres en mayor cantidad para tener mejores beneficios económicos.

BIBLIOGRAFÍA





Bibliografía

- [1] “La industria química en México”, edición 2007, serie de estadística sectoriales INEGI.
- [2] <http://www.invdes.com.mx/anteriores/Julio2005/htm/ceciq.html>
- [3] Solomons Graham T. W., “Química orgánica”, 8ª edición, J. Wiley, New York, 2004.
- [4] Wingrove Alan S., “Química orgánica”, Harla, 1984.
- [5] Smith William R., “Análisis del equilibrio en reacciones químicas. Teoría y algoritmo”, Limusa, México, 1987.
- [6] Harris Daniel C., “Análisis Químico Cuantitativo”, Grupo Editorial Iberoamericano, México, 1992.
- [7] Silverstein Robert M., “Spectrometric, identification of organic compounds”, 3ª edición, John Wiley & Sons, Inc, USA, 1974.
- [8] Litvinov Jiri Kolena and Teplice Jaromir Lederer, “Method of producing ethyl acetate and an equipment for carrying out this method” United States Patent, Patent Number 6,693,213, Oct. 11, 2000.
- [9] Horan Kimberly Ann and Murphy Carl David, “Process improvement for continuous ethyl acetate production” United States Patent, Patent Number 5,768,021, Sep. 29, 1999.
- [10] R. Jay Warner, “Process for the simultaneous coproduction and purification of ethyl acetate and isopropyl acetate” United States Patent, Patent Number 6,765,110, Jul. 20, 2004.
- [11] L. Williamson, “Macroscale and Microscale Organic Experiment”, 2ª edición, Houghton Mifflin, 1994.
- [12] Londoño Á. O., Leiva L. F. y Carballo S. L. M., “Obtención de mapas de curvas residuales para la síntesis de acetato de butilo”, aceptado en julio 20 de 2006.
- [13] Bessling Bernd, Welker Rüdiger and Werner Jean, “Process for preparing esters of carboxylic acids” United States Patent, Patent Number 6,028,215, Feb. 22, 2000.



- [14] Alvaro O., Leiva F. y Boyacá A., “Estudio de las condiciones de equilibrio químico en la síntesis de acetato de butilo”.
- [15] Walpole Myers., “Probabilidad y estadística para ingenieros”, 6^a edición, Prentice-Hall Hispanoamérica, 1999.
- [16] Montgomery Douglas C., “Diseño y análisis de experimentos”, 2^a edición, Limusa Wiley, 2004.
- [17] Box, George E. P., “Estadística para investigadores, introducción al diseño de experimentos y análisis de datos y construcción de modelos”, Reverte, México, 1999.
- [18] López-Barajas Zayas Emilio, “Formación de formadores: planificación diseño y evaluación de proyectos y programas”, UNED, Madrid, 1995.
- [19] Baca Urbina Gabriel, “Formación y evaluación de proyectos”, 5^a edición McGraw Hill, México, 2006.
- [20] Conesa Fernanda-Victoria Vicente, “Guía metodológica para la evaluación del impacto ambiental”, Mundi-Prensa, Madrid, España.
- [21] Kumar, Anil. Fundaments of polymer engineering. Segunda edición, Marcel Pekker Inc. 2003
- [22] Ullmann’s. Encyclopedia of industrial chemistry. Quinta edición, UCH Publischers. 1998.
- [23] Kirchner Mark, “Ethyl acetate”, Chemical Market Reporter, Jul. 30, 2006.
- [24] <http://www.marketresearchanalyst.com/>
- [25] [http://www.bp.com/home.do?categoryId=1,](http://www.bp.com/home.do?categoryId=1)
Última actualización: Jueves 19 de Junio del 2007 a las 9:25 PM por WebMaster
- [26] “Anuario Estadístico del Comercio Exterior de los Estados Unidos Mexicanos” edición 2006, INEGI.
- [27] Kirchner Mark, “n-butanol”, Chemical Market Reporter, Jan. 30, 2006.
- [28] <http://www.cfe.gob.mx/es/InformacionAICliente/conocetutarifa/>,
Última actualización: Lunes 10 de Marzo del 2008.
- [29] <http://www.cna.gob.mx/eCNA/Espaniol/Directorio/Default.aspx>,
Última actualización: Miércoles 4 de Junio del 2008.



- [30] <http://www.stps.gob.mx/>
- [31] <http://www.iso.org/iso/about/discover-iso9000-iso14000.htm>
- [31] <http://www.economia.gob.mx/>

ANEXO A

STATGRAPHICS PLUS





StatGraphics Plus

El tratamiento de un diseño factorial con *StatGraphics Plus* tiene dos fases, el diseñar un experimento y el de analizar los resultados de este. Algunas de las características de esta herramienta son:

- ◆ Selecciona el número de experimentos.
- ◆ Da a conocer las confusiones posibles entre efectos.
- ◆ Hace notar las posibles interacciones entre cada variable.
- ◆ Contrasta los efectos significativos.
- ◆ Analiza los resultados de un experimento factorial de manera igual que un análisis ANOVA multifactorial.
- ◆ Estima la recta de regresión.
- ◆ Proporciona las estimaciones de los efectos en cada variable.
- ◆ Apoya a discriminar entre efectos significativos y no significativos cuando no hay grados de libertad.
- ◆ Ayuda a establecer las condiciones óptimas del experimento.
- ◆ Además de su fácil manejo.

ANEXO B

EQUIPOS UTILIZADOS EN LA CARACTERIZACIÓN





Equipos utilizados en la caracterización

Para la cromatografía de gases se utilizó un equipo HP 6890 GS System utilizando una columna capilar HP-5 (crosslinked 5% OH Me Silicone). Y las condiciones de este cromatógrafo son:

- ◆ Temperatura del horno: inicial 40 °C, rampa de 15 °C/min hasta 150 °C.
- ◆ Split: 10:1.
- ◆ Tiempo de análisis: 10 min.
- ◆ Temperatura del inyector: 25 °C.
- ◆ Gas de arrastre: Helio.

Para la espectroscopia de infrarrojo se utilizó un equipo Varian 800 FT-IR Scimitar y las condiciones de este espectrofotómetro son:

- ◆ Temperatura: 20 °C
- ◆ Ventana de: Selenuro de sodio.
- ◆ Barridos: 20.

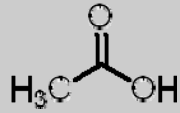
ANEXO C

PROPIEDADES GENERALES DE
REACTIVOS, PRODUCTOS Y
CATALIZADOR





Propiedades generales de reactivos, productos y catalizador.

Nombre Ácido acético	Fórmula molecular C ₂ H ₄ O ₂ CH ₃ COOH	Forma estructural 
Nº cas 64-19-7		
Estado de agregación	Apariencia	Peso molecular
Líquido	Incoloro	60.05
Punto de fusión (°C)	Punto de ebullición (°C)	Densidad (g/cm³) a 20 °C
16.6	188.1	1.049
Δ_fH⁰_{líquido} (kJ/mol)	Δ_fG⁰_{líquido} (kJ/mol)	Cp. Liq. (J/mol K)
-432.25	-374.27	123.10
Cp/R= a0+a1T+a2T²+a3T³+a4T⁴	Temperatura crítica (K)	Presión crítica (bar)
a0= 4.375 a1X10 ³ = -2.397 a2 X10 ⁵ = 6.757 a3 X10 ⁸ = -8.764 a4 X10 ¹¹ =3.478	594.45	57.90

Solubilidad con agua

Es miscible con el agua, pero también con el alcohol y éter. Insoluble en sulfuro de carbono.

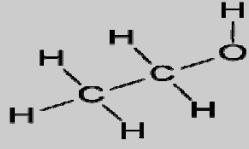
Equipo de protección personal

Aparato de respiración autónomo con mascarilla facial completa y traje protector completo implícito.

Riesgos de fuego y explosión

No presenta ningún peligro extraordinario de incendio. El producto es no inflamable, si se ve envuelto en un incendio, extinguir el fuego con polvo seco, espuma o dióxido de carbono.



Nombre Etanol	Fórmula molecular C_2H_6O	Forma estructural 
Nº cas 67-17-5		
Estado de agregación Líquido	Apariencia Incoloro	Peso molecular 46.07
Punto de fusión (°C) -114.1	Punto de ebullición (°C) 78+	Densidad (g/cm³) a 20 °C 0.789
$\Delta_f H^0_{\text{líquido}}$ (kJ/mol) -234.95	$\Delta_f G^0_{\text{líquido}}$ (kJ/mol) -167.73	Cp liq (J/mol K) 112.25
Cp/R= $a_0+a_1T+a_2T^2+a_3T^3+a_4T^4$ a0= 4.396 a1X10 ³ = 0.0628 a2 X10 ⁵ = 5.546 a3 X10 ⁸ = -7.024 a4 X10 ¹¹ = 2.685	Temperatura crítica (K) 513.92	Presión crítica (bar) 61.48

Solubilidad con agua

Da una mezcla azeotrópica con un contenido de aproximadamente el 96 % de etanol.

Equipo de protección personal

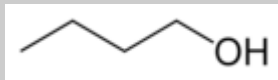
Para manejar este producto es necesario utilizar bata y lentes de seguridad, en un área bien ventilada. Cuando el uso es constante, es conveniente utilizar guantes. No utilizar lentes de contacto al trabajar con este producto.

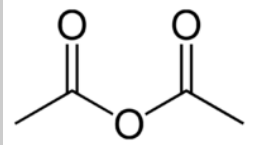
Riesgos de fuego y explosión

Por ser un producto inflamable, los vapores pueden llegar a un punto de ignición, prenderse y transportar el fuego hacia el material que los originó. Los vapores pueden explotar si se prenden en un área cerrada y pueden generar mezclas explosivas e inflamables con el aire a temperatura ambiente.

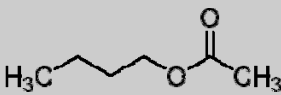
Los productos de descomposición son monóxido y dióxido de carbono.



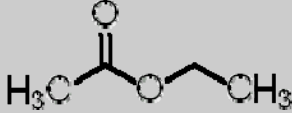
Nombre n-butanol	Fórmula molecular C ₄ H ₁₀ O CH ₃ (CH ₂) ₃ OH	Forma estructural 
Nº cas 71-36-3		
Estado de agregación Líquido	Apariencia Incoloro	Peso molecular 74.123
Punto de fusión (°C) -89.5	Punto de ebullición (°C) 117.2	Densidad (g/cm³) a 20° C 0.8095
Δ_fH⁰_{líquido} (kJ/mol) -274.60	Δ_fG⁰_{líquido} (kJ/mol) -150.17	C_p liq (J/mol K) 177.06
C_p/R= a₀+a₁T+a₂T²+a₃T³+a₄T⁴ a ₀ = 4.467 a ₁ X10 ³ = 16.395 a ₂ X10 ⁵ = 6.688 a ₃ X10 ⁸ = -9.690 a ₄ X10 ¹¹ = 3.864	Temperatura crítica (K) 563.05	Presión crítica (bar) 44.23
Solubilidad con agua		
Nueve mililitros es miscible con 100 ml de agua (a 25°C), y es también soluble en metanol, etanol y otros solventes orgánicos.		
Equipo de protección personal		
Para manejar este producto es necesario utilizar bata y lentes de seguridad, en un área bien ventilada		
Riesgos de fuego y explosión		
Inflamable, mantener alejado de fuentes de ignición, pueden llegar a prenderse y transportar el fuego hacia el material que los originó. Los vapores pueden explotar si se prenden en un área cerrada y pueden generar mezclas explosivas e inflamables con el aire a temperatura ambiente.		

Nombre Anhídrido acético	Fórmula molecular $C_4H_6O_3$ $(CH_3CO)_2O$	Forma estructural 
N° CAS 108-24-7		
Estado de agregación Líquido	Apariencia Incoloro	Peso molecular 102.1
Punto de fusión (°C) -73	Punto de ebullición (°C) 139	Densidad (g/cm³) a 20 °C 1.08
Solubilidad		
Es miscible con en agua hasta aproximadamente un 2,6%, pero inmisible, alcoholes, oxidantes fuertes, ácido crómico, aminas, cáusticos fuertes.		
Equipo de protección personal		
Aparato de respiración autónomo con mascarilla facial completa y traje protector completo.		
Riesgos de fuego y explosión		
Los vapores del producto forman con aire mezclas inflamables o explosivas a temperatura ambiente, además, pueden alcanzar fuentes de ignición distantes, se acumulan en áreas bajas y se concentran en áreas confinadas.		



Nombre Acetato de n-butilo	Fórmula molecular $C_6H_{12}O_2$ $CH_3COO(CH_2)_3CH_3$	Forma estructural 
Nº cas 123-86-4		
Estado de agregación Líquido	Apariencia Incoloro	Peso molecular 116.16
Punto de fusión (°C) -76.3	Punto de ebullición (°C) 126.0	Densidad (g/cm³) a 20° C 0.881
$\Delta_f H^0$ líquido (kJ/mol) -485.30	$\Delta_f G^0$ líquido (kJ/mol) -312.10	Temperatura crítica (K) 579.00
	Presión crítica (bar) 30.90	
Solubilidad en el agua 7g es miscible con 1 L de agua (a 20°C),		
Equipo de protección personal Se recomienda usar guantes protectores, gafas ajustadas de seguridad, o protección ocular combinada con la protección respiratoria.		
Riesgos de fuego y explosión Es inflamable, se debe evitar las llamas, no producir chispas y no fumar. En caso de que incendio utilizar espumas resistentes al alcohol, polvo y dióxido de carbono. Por encima de 22°C puede formarse mezclas explosivas vapor/aire.		



Nombre Acetato de etilo	Fórmula molecular $C_4H_8O_2$ $CH_3COOCH_2CH_3$	Forma estructural 
Nº cas 141-78-6		
Estado de agregación	Apariencia	Peso molecular (g/mol)
Líquido	Incoloro	88.106
Punto de fusión (°C)	Punto de ebullición (°C)	Densidad (g/cm³) a 20 °C
-84.0	77.65	0.902
$\Delta_f H^0_{\text{líquido}}$ (kJ/mol)	$\Delta_f G^0_{\text{líquido}}$ (kJ/mol)	Cp liq. (J/mol K)
-444.50	-328.00	170.60
Cp/R= $a_0+a_1T+a_2T^2+a_3T^3+a_4T^4$	Temperatura crítica (K)	Presión crítica (bar)
a0= 10.228 a1X10 ³ = -14.948 a2 X10 ⁵ = 13.033 a3 X10 ⁸ = -15.736 a4 X10 ¹¹ =5.999	523.20	38.30

Solubilidad con agua

Un mililitro es miscible con 10 ml de agua (a 25°C), su solubilidad aumenta al bajar la temperatura. Miscible en etanol, acetona, cloroformo y éter.

Equipo de protección personal

Para el uso de este producto químico es necesario en un lugar bien ventilado, utilizando bata, lentes de seguridad y, si es necesario, guantes de hule natural o neopreno (no usar PVC) para evitar un contacto prolongado de este producto con la piel.

Riesgos de fuego y explosión

El acetato de etilo es un producto inflamable y volátil por lo que existen riesgos de fuego y explosión. Sus vapores pueden llegar a un punto de ignición, prenderse y transportar el fuego al lugar que los originó además, puede explotar si se prenden en un área cerrada. Puede generar mezclas explosivas con aire a temperatura ambiente.



Nombre Ácido sulfúrico	Fórmula molecular	Forma estructural
Nº cas 7664-93-9	H_2SO_4	$\begin{array}{c} O \\ \\ HO-S-OH \\ \\ O \end{array}$
Estado de agregación	Apariencia	Peso molecular
Líquido	Incoloro	98.1
Punto de fusión (°C)	Punto de ebullición (°C)	Densidad (g/cm³) a 20 °C
9.85	336.85	1.8

Solubilidad

Completamente miscible con el agua solo que es exotérmico. Soluble con alcohol etílico (descompone a éste).

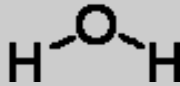
Equipo de protección personal

Usar siempre protección personal, gafas de seguridad con protección lateral, guantes, ropa protectora, respirador con filtro para vapores ácidos.

Riesgos de fuego y explosión

No es inflamable, ni combustible, pero diluido y al contacto con metales produce hidrógeno el cual es altamente inflamable y explosivo. Puede encender materiales combustibles finalmente divididas. Los contenedores pueden explotar durante un incendio si están expuestos al fuego o por contacto con el agua por alta liberación del calor.



Nombre Agua	Fórmula molecular H ₂ O	Forma estructural 
Nº cas 7732-18-5		
Estado de agregación Líquido	Apariencia Incoloro	Peso molecular 18.02
Punto de fusión (°C) 0	Punto de ebullición (°C) 100	Densidad (g/cm³) a 20° C 1.0
Δ_fH⁰_{líquido} (kJ/mol) -241.81	Δ_fG⁰_{líquido} (kJ/mol) -228.42	C_p liq. (J/mol K) 75.29
C_p/R= a₀+a₁T+a₂T²+a₃T³+a₄T⁴ a ₀ = 4.395 a ₁ X10 ³ = -4.186 a ₂ X10 ⁵ = 1.405 a ₃ X10 ⁸ = -1.564 a ₄ X10 ¹¹ = 0.632	Temperatura crítica (K) 647.14	Presión crítica (bar) 220.64
Solubilidad		
Las sustancias solubles en agua son aquellas que presentan las mismas características polares.		