



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA

CAMPUS D'ALCOI

*Diseño de un reactor de  
hidroformilación con  
recuperación del  
catalizador para la  
producción de 2-etilhexanol*

---

**MEMORIA PRESENTADA POR:**

*Carmen Catalá Masanet*

**TUTOR:**

*Jaime Lora García*

Grado en Ingeniería Química

Convocatoria de defensa: Junio de 2019

## Resumen

El 2-etilhexanol se produce a partir de olefinas, gas de síntesis e hidrógeno, por la condensación aldólica del n-butiraldehído, seguido por la hidrogenación del hidroxialdehído resultante.

El empleo de este producto se extiende a los sectores de disolventes, sabores y fragancias, y especialmente como un precursor para la producción de emulgentes y plastificantes

En este proyecto se aborda el diseño de un reactor para la transformación de propileno (hidroformilación) para obtener n e iso butiraldehído, que posteriormente se separan mediante destilación. Se trata de un proceso intermedio en el proceso global de obtención de etilhexanol. Las condiciones de operación son de alta presión (10-35 bar) y temperaturas elevadas (100-150 °C), por lo que el diseño mecánico es muy importante.

El objetivo alcanza a dicho diseño dentro de las competencias propias del título de grado en ingeniería química.

La estructura de la memoria incluye el estado del arte de la producción de 2-etilhexanol, así como diferentes alternativas del denominado proceso de hidroformilación. Una vez seleccionado el sistema se planteará el diagrama de flujo completo, las especificaciones del diseño, los balances de materia y energía, así como las líneas de presión y temperatura.

El diseño desde el punto de vista de ingeniería química se abordará mediante la simulación del funcionamiento del reactor con ayuda de MATLAB y PROMAX, mientras que el diseño mecánico se extenderá a la selección de materiales y al sistema de control de seguridad del proceso.

Finalmente se realizará el correspondiente estudio económico para valorar la repercusión de este proceso en la producción de 2-etilhexanol.

Con el trabajo propuesto el alumno podrá desarrollar las competencias asociadas al TFG al máximo nivel.

**Palabras clave:** Hidroformilación, 2-etilhexanol, Butiraldehído, Diseño reactor catalítico

## Summary

2-Ethylhexanol is produced from olefins, synthesis gas and hydrogen by the aldol condensation of n-butyraldehyde, followed by hydrogenation of the resulting hydroxyaldehyde. The use of this product extends to the sectors of solvents, flavors and fragrances, and especially as a precursor to produce emulsifiers and plasticizers.

This project addresses the design of a reactor for the transformation of propylene (hydroformylation) to obtain n and iso butyraldehyde, which are then separated by distillation. This is an intermediate process in the global process of obtaining 2-ethylhexanol. The operating conditions are high pressure (10-35 bar) and high temperatures (100-150 °C), so the mechanical design is very important.

The goal reaches such a catalytic reactor design within the competences of the undergraduate degree in chemical engineering.

The memory structure includes state of the art production 2-ethylhexanol, as well as different alternatives for hydroformylation processes. Once the system is selected, the complete flow diagram, design specifications, mass and energy balances as well as pressure and temperature lines will be considered.

The design from the point of view of chemical engineering will be addressed by simulating the operation of the reactor with the help of MATLAB and PROMAX, while the mechanical design will extend to the selection of materials and the process safety control system.

Finally, the corresponding economic study will be carried out to assess the impact of this process on the production of 2-ethylhexanol.

With the proposed work the student will be able to develop the competences associated with the Final Project at the highest level.

**Key words:** Hydroformylation, 2-Ethylhexanol, Butyraldehyde, Catalytic reactor design

# Índice de general

1.	Introducción al 2-etilhexanol.....	7
1.1.	Usos y aplicaciones.....	7
1.2.	Mercado mundial .....	9
1.3.	Hojas de seguridad .....	10
1.4.	Procesos de producción.....	10
1.4.1.	Historia de la producción de 2-etilhexanol. ....	13
2.	Objetivos.....	15
3.	Diseño del proceso.....	16
3.1.	Diagrama de flujo .....	16
3.2.	Especificaciones del diseño.....	17
3.3.	Cinética .....	18
3.4.	Balance de materia.....	19
3.4.1.	Resultados del balance de materia.....	22
3.4.2.	Simulación con Promax.....	22
3.5.	Líneas de presión y temperatura.....	28
3.6.	Balance de energía en el reactor.....	29
4.	Diseño de ingeniería química.....	31
4.1.	Compresores .....	31
4.2.	Reactor.....	32
4.3.	Intercambiador de calor .....	33
4.4.	Bombas .....	34
4.5.	Separadores .....	35
5.	Diseño mecánico.....	36
6.	Sistemas de control.....	38
7.	Estudio económico.....	39
7.1.	Capital inversión (CAPEX).....	39
7.2.	Costes de operación (OPEX).....	41
7.2.1.	Costes materia prima.....	41
7.2.2.	Agua .....	42
7.2.3.	Electricidad .....	42
7.3.	Costes fijos .....	43
7.4.	Balance total.....	43
8.	Conclusiones.....	45

9.	Bibliografía.....	46
10.	Anexos .....	50
10.2.	Anexo 1. Hojas de seguridad. ....	50
10.2.2.	Propileno .....	50
10.2.3.	Hidrógeno.....	54
10.2.4.	Monóxido de carbono.....	56
10.2.5.	Butiraldehído .....	58
10.3.	Anexo 2. Planos. ....	60
10.3.1.	Plano del reactor .....	60
10.3.2.	Plano distribución en planta.....	61

## Índice de ilustraciones

<i>Ilustración 1. Reacción para la obtención de DEHP</i>	7
<i>Ilustración 2. Reacción de Fischer para la producción de 2-etilhexacrilato</i>	8
<i>Ilustración 3. Reacción de polioxialquilación del 2-EH</i>	9
<i>Ilustración 4. Etapas principales en la producción industrial del 2-etilhexanol.</i>	11
<i>Ilustración 5. Condiciones de operación habituales en la producción de 2-EH [7]</i>	11
<i>Ilustración 6. Diagrama de flujo del proceso de producción de 2-Etilhexanol.</i>	12
<i>Ilustración 7. Reacción de Guerbet aplicada al 2-EH</i>	14
<i>Ilustración 8. Esquema de la planta de producción de n-butanal basado en [13]</i>	16
<i>Ilustración 9. Diagrama para simulación en Promax.</i>	23
<i>Ilustración 10. Set de reacción utilizado en Promax</i>	23
<i>Ilustración 11. Información relativa al reactor.</i>	24
<i>Ilustración 12. Información necesaria en SPLT-100</i>	24
<i>Ilustración 13. Solver caudal molar materia prima.</i>	25
<i>Ilustración 14. Diagrama líneas de presión y temperatura (Anexo 2 Planos)</i>	28
<i>Ilustración 15. Diagrama de flujo de la hidroformilación.</i>	29
<i>Ilustración 16. Ejemplo compresor industrial [23]</i>	31
<i>Ilustración 17. Bomba Pratissoli serie KF [32]</i>	34
<i>Ilustración 18. Ejemplo de separador gas-líquido [18]</i>	35
<i>Ilustración 19. Cabeza Korbogen para tanques a presión</i>	36
<i>Ilustración 20. Plano reactor hidroformilación. Anexo 2 Planos.</i>	37

## Índice de tablas

<i>Tabla 1. Condiciones operación en el reactor según bibliografía [14]</i> .....	17
<i>Tabla 2. Valores ecuación cinética [14,15]</i> .....	18
<i>Tabla 3. Resultados balance de materia resuelto con Matlab. Ensayo 5.</i> .....	22
<i>Tabla 4. Resultados del balance de materia resuelto con Matlab. Ensayo 14.</i> .....	22
<i>Tabla 5. Resultados de la simulación con Promax. Ensayo 5.</i> .....	26
<i>Tabla 6. Resultados de la simulación con Promax. Ensayo 14.</i> .....	27
<i>Tabla 7. Resultados del balance energético del proceso. Ensayo 5.</i> .....	29
<i>Tabla 8. Resultados balance energéticos del proceso. Ensayo 14.</i> .....	29
<i>Tabla 9. Datos del compresor CMPR101</i> .....	31
<i>Tabla 10. Datos del compresos CMPR100</i> .....	31
<i>Tabla 11. Resumen volúmenes reactor hidroformilación</i> .....	32
<i>Tabla 12. Características reactor hidroformilación</i> .....	32
<i>Tabla 13. Parámetros para el cálculo de la transmitancia térmica</i> .....	33
<i>Tabla 14. Área de intercambio de calor necesaria</i> .....	33
<i>Tabla 15. Área de intercambio de calor disponible</i> .....	33
<i>Tabla 16. Caudal necesario para agua de refrigeración en el reactor</i> .....	34
<i>Tabla 17. Características bombas utilizadas [32]</i> .....	34
<i>Tabla 18. Características de los separadores</i> .....	35
<i>Tabla 19. Resumen costes básicos por equipo</i> .....	39
<i>Tabla 20. Costes asociados a los gases de reacción</i> .....	41
<i>Tabla 21. Costes asociados al catalizador</i> .....	42
<i>Tabla 22. Costes asociados al consumo de agua</i> .....	42
<i>Tabla 23. Capital total anual necesario</i> .....	43

# 1. Introducción al 2-etilhexanol

## 1.1. Usos y aplicaciones.

El 2-Etilhexanol es un compuesto transparente, poco soluble en agua, pero soluble en gran parte de disolventes orgánicos. Forma parte del grupo de los llamados alcoholes superiores. Un grupo que engloba alcoholes lineales o ramificados, primarios o secundarios, de entre 6 y 18 átomos de carbono. Estos alcoholes superiores, por lo general, tienen su principal mercado en los plastificantes (cuando hablamos de 6 a 11 átomos de carbono) y detergentes, normalmente de 12 a 18 átomos de carbono.

Los alcoholes superiores raramente se emplean en su forma alcohólica, si no esterificados con diferentes ácidos carboxílicos. Aunque también se transforman para su empleo como detergentes o en otro tipo de aplicaciones.

El 2-EH en su forma alcohólica se incluye en las formulaciones de diésel como aditivo para reducir las emisiones de CO<sub>2</sub>. Pero el 2-EH en su mayoría va a terminar formando parte de diversos plastificantes.

Tiene su principal campo de aplicación cuando se hace reaccionar con ácidos carboxílicos y en especial con el ácido ftálico, generando di-2-etilhexilftalato (DEHP) [7], también llamado bis (2-etilhexil) ftalato, es uno de los componentes plastificantes del PVC. Su adición en distintas proporciones (desde el 5% del contenido del plástico hasta el 40%, aunque no es lo más común), permite que las cadenas de policloruro de vinilo se deslicen más fácilmente entre ellas, pasando de un plástico más duro a uno con mayor flexibilidad. Aunque para este fin se podría utilizar otros plastificantes diferentes, la realidad es que el más utilizado es el DEHP, debido a su bajo precio.

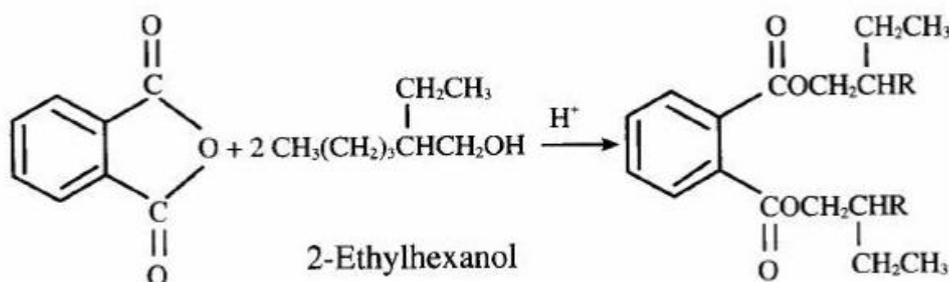


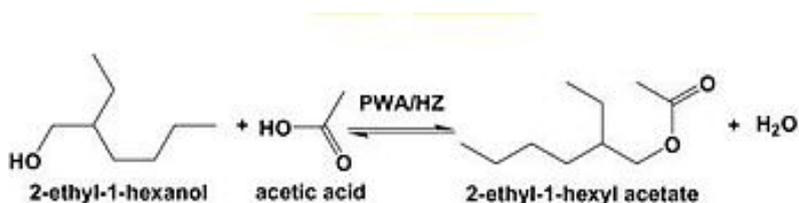
Ilustración 1. Reacción para la obtención de DEHP

El DEHP va a aparecer en gran cantidad de productos finales como las lacas de uñas, adhesivos, manteles, baldosas, ropa, etc. El desarrollo de los procesos productivos para el 2-etilhexanol, por lo tanto, se verá vinculado al auge del uso del PVC como plástico de uso común.

El dioctilftalato (DOP), otro de los plastificantes del PVC, también se obtiene a partir del 2-EH, reaccionando con anhídrido ftálico. Resulta un excelente plastificante y además fisiológicamente inofensivo. Además de como plastificante se han encontrado uso para el DOP

como líquido dieléctrico para condensadores, sustituyendo a otros compuestos prohibidos por tóxicos como es el caso de los difenilos policlorados [1,2].

Otro de los derivados del 2-EH que se obtiene gracias a una reacción con ácidos carboxílicos, es el acetato de 2-etilhexilo. La forma más común de obtención es la esterificación catalítica de Fischer del ácido acético.



*Ilustración 2. Reacción de Fischer para la producción de 2-etilhexacrilato*

Es un monómero usado en la producción de tanto homopolímeros como copolímeros que a su vez son destinados a la producción de adhesivos y aglutinantes de pinturas. Su principal aplicación es precisamente la industria de las pinturas y recubrimientos ya que mejora su fluidez y la formación de una capa lisa y uniforme [3]. Además de ser un buen aditivo en disolventes.

Una ventaja del 2-EH es que es una materia prima accesible con un precio bastante competitivo, sobre todo si se compara con alcoholes más pesados de 11 a 18 carbonos que se suelen utilizar como surfactantes.

Este mercado también es de relevancia en la producción del 2-EH, solamente en productos de limpieza doméstica (detergentes, cosméticos, productos de baño y demás productos de higiene) y limpieza industrial se generan aproximadamente un millón de toneladas de producto y el 60% de la composición de estos productos son surfactantes.

El papel del 2-EH en el mundo de los surfactantes consiste principalmente en ser materia prima de algunos procesos de producción de los principales grupos de tensioactivos. Sobre todo, forma parte de sales orgánicas como el 2-etilhexil sulfato de sodio, y otros tensioactivos aniónicos.

También es posible obtener tensioactivos no iónicos partiendo del 2-EH, mediante reacciones de polioxilación se consiguen este tipo de moléculas. En la imagen vemos la propoxilación del 2-EH, seguida de la polietoxilación, resultando etoxilatos de 2-etilhexanol (EHE<sub>n</sub>) [5,6,7].

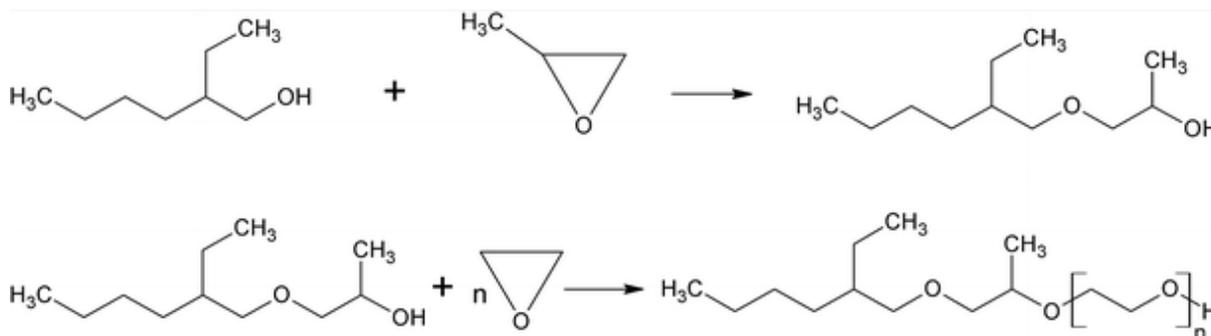


Ilustración 3. Reacción de polioxilación del 2-EH

## 1.2. Mercado mundial

Uno de los alcoholes más importantes en cuanto a valor comercial es precisamente el 2-etilhexanol. Representa el 41% de todos los alcoholes oxo producidos en Europa y el 54% de los producidos en Japón.

Su producción mundial fue en 2009 de 2,8 millones de toneladas, con China a la cabeza como el país que más 2-EH importa, alrededor de 250.000 de toneladas al año. Por el otro lado como productores/exportadores principales, Europa con más de 150.000 de toneladas al año, medio oriente produciendo sobre 70.000 toneladas/año y el resto de Asia, unas 25.000 toneladas/año.

Las principales plantas productoras de Europa se sitúan en Oberhausen, Alemania 300.000 toneladas/año y Mostowa, Polonia con capacidad de producción de 132.000 toneladas/año.

Estudios del 2009, preveían que el consumo de 2-EH en el mundo continuaría aumentando al menos en un 2% por año en la siguiente década, con crecimientos desiguales en diferentes partes del mundo. Mientras que en China se espera un crecimiento de su consumo, que en Europa sería menor, debido a la prohibición de uso del DOP como plastificante en ciertas aplicaciones como juguetes o envases alimenticios, ya que tiene impactos negativos sobre la salud y el medioambiente. Por otro lado, la demanda de otros derivados no perjudiciales del 2-EH aumenta, en particular el 2-etilhexil acrilato.

El reparto en cuanto a aplicaciones queda enormemente descompensado, empleando la mayor parte de la producción de 2-EH como plastificantes: el 93% en Europa, 63% en EE. UU. y 85% en Japón. El resto de la producción va destinada al resto de aplicaciones nombradas: surfactantes, aditivos para combustible diésel, ácido 2-etilhexanoico, etc.

Para hacerse una idea de la importancia del proceso, en 1969 se consumieron unos 4,9 millones de toneladas de propeno en la producción de productos químicos, al menos el 6% se consumió en concreto en la producción de butiraldehídos (producto oxo), que finalmente se emplean para la producción de 2-etilhexanol como producto principal, y butanoles como productos secundarios [1].

El precio de venta del 2-EH, con datos de septiembre de 2013 giraría en torno a 1500 €/tonelada en Europa, precios más bajos que años anteriores (como ya se ha comentado,

debido a un descenso en el consumo de DOP), pero las noticias no fueron malas del todo para los productores de 2-EH ya que también disminuyeron los precios del propileno (materia prima principal) que se sitúa en 1110 €/tonelada en el mismo año [22].

### 1.3. Hojas de seguridad

Los compuestos que se manipulan en este proyecto son propileno y gas de síntesis como materias primas y butiraldehídos como productos obtenidos. En el *Anexo 1* se pueden encontrar las fichas de seguridad.

Todos los componentes gases o líquidos están catalogados como extremadamente inflamables y en contacto con el aire son explosivos, deberán almacenarse y manipularse debidamente en áreas donde no se alcancen temperaturas altas (entre 17-27°C aproximadamente). Ni entren en contacto con el aire o cargas eléctricas.

Deberá existir un sistema de ventilación adecuado en el lugar de trabajo que deberá garantizar la efectiva renovación del aire con el fin de evitar la exposición a altas concentraciones de productos.

En producción, el reactor y recipientes a presión contarán con válvulas de seguridad para evitar peligros en caso de sobrepasar la presión en los tanques.

### 1.4. Procesos de producción

Para la producción del 2-EH existen diversos procesos válidos, pero el que más importancia industrial ha adquirido es el de Ruhrchemie AG o Ruhrchemie AG y Rhône Poulenc SA.

Este proceso consta de tres etapas principales, la primera de ellas y en la que se centra este trabajo, es la hidroformilación del propeno para la obtención del n-butiraldehído. La olefina reacciona con el monóxido de carbono y el hidrógeno, en presencia de un catalizador (normalmente de rodio o cobalto), obteniendo un aldehído con un carbono más que la olefina inicial. Como productos secundarios se obtiene principalmente i-butiraldehído, pero gracias a la selectividad del catalizador se consiguen excelentes relaciones de producto deseado. Varios productores han desarrollado este proceso: Union Carbide/Davy-McKee/ Johnson-Matthey, Celanese, BASF, Mitsubishi Chemicals y Ruhrchemie/Rhone-Poulenc, creando sus particularidades para el proceso en cada caso.

La segunda etapa parte del n-butiraldehído, sobre él se lleva a cabo una reacción de condensación aldólica, catalizada en medio básico a 80-100°C, que tiene como producto el 2-etilhexenal. (Una de las grandes desventajas de este proceso es este medio básico). Mitsubishi Chemical destaca en el desarrollo y la optimización de esta parte del proceso.

Finalmente, el 2-etilhexenal se hidrogena en medio gaseoso con catalizadores de Ni o Cu, para obtener el 2-etilhexanol deseado [1]. Aunque comúnmente se ha hecho así, este proceso

cuenta con sus desventajas como el elevado consumo de energía, o la baja selectividad del producto. Una de las alternativas exploradas hasta ahora es la hidrogenación en fase líquida, que elimina las desventajas de la fase gas, pero añade otras propias de la fase líquida, como que la actividad es menor o se pueden desactivar los catalizadores fácilmente haciéndose la separación de los productos más costosa.

La mezcla de productos resultantes de este proceso se destila 3 veces hasta obtener el 2-EH puro. La selectividad total del proceso ronda el 95% respecto al n-butanal.

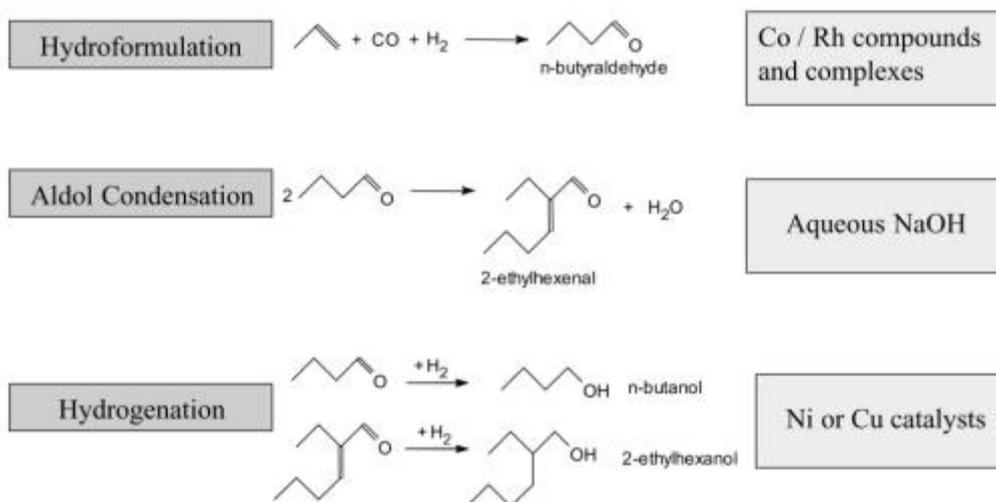


Ilustración 4. Etapas principales en la producción industrial del 2-etilhexanol.

**Table 1** Typical catalysts and conditions for 2-ethylhexanol production

	Catalyst	Temp./°C	Pressure
STEP 1	Rh phosphine	90–120	7–25 bar
STEP 2	NaOH aqueous	80–100	atm
STEP 3	CuO/ZnO or Ni/ Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	135–170 or 100–150	5 bar

Ilustración 5. Condiciones de operación habituales en la producción de 2-EH [7]

Se puede ver el diagrama del flujo del proceso completo en la *ilustración 6*.

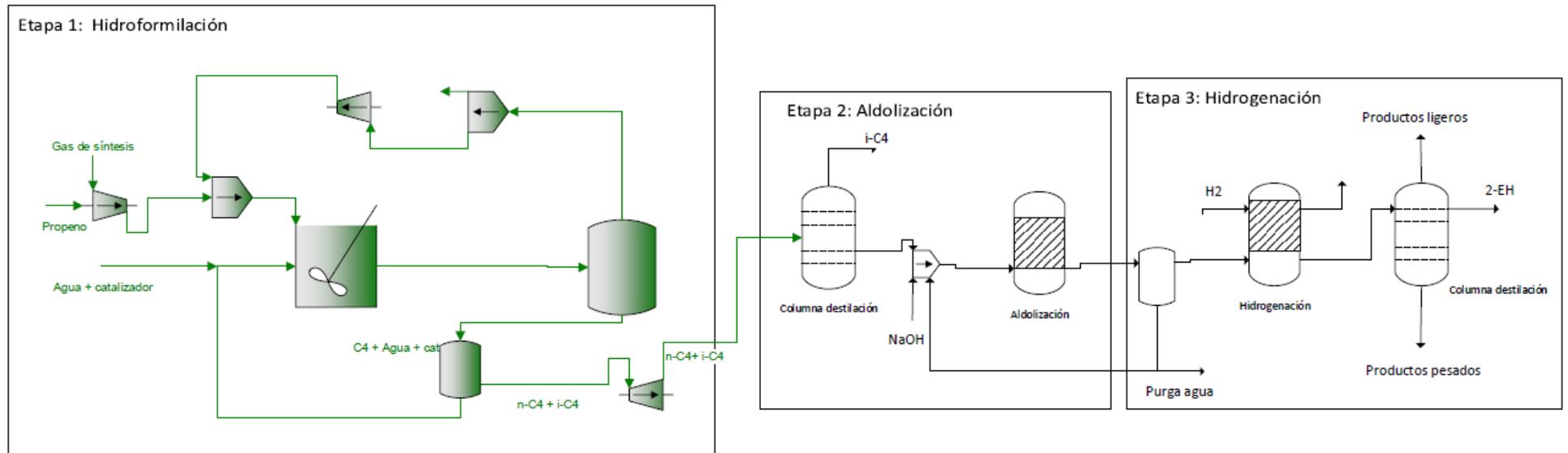


Ilustración 6. Diagrama de flujo del proceso de producción de 2-Etilhexanol.

#### 1.4.1. Historia de la producción de 2-etilhexanol.

Los laboratorios Ruhrchemie AG descubren las reacciones de hidroformilación en 1938, durante 35 años después del descubrimiento la aplicación siguió siendo estrictamente en fase homogénea, obligada por el uso de los catalizadores Co y Rh, en forma de complejos hidrocarbonilo. Una nueva época se abrió en la hidroformilación del propileno cuando en 1982 se empezaron a utilizar ligandos solubles en agua, un descubrimiento iniciado por Rhône-Poulenc y Ruhrchemie AG. El ligando era el TPPTS (Sal trisódica de tri(m-sulfonil)trifenilfosfina) y su implantación se llevó a escala industrial tras solo dos años de desarrollo en plantas piloto en 1984, en una planta de 100000 t/a en Oberhausen, Alemania.

Hoy en día, tras muchos años de experiencia con el proceso Ruhrchemie/Rhône Poulenc se ha demostrado el excelente funcionamiento que se consigue en fase heterogénea con este sistema catalizador soluble en agua.

La primera generación de catalizadores estaba basada en el carbonilo de cobalto sin la utilización de ligando. Siendo las condiciones de operación bastante exigentes y la reactividad del cobalto lenta. Este proceso era utilizado para todo tipo de alquenos y normalmente resultaban productos lineales.

Para los catalizadores de cobalto se utilizaban ligandos alquilfosfina, que no daba buenos resultados con el rodio, hasta que se en la década de los 60, Wilkinson descubre que son las arilfosfinas las que conseguían que el proceso mejorara notablemente en cuanto a condiciones de operación y velocidad de la reacción. Es entonces, cuando la segunda generación de procesos empieza a tener presencia, el rodio es el principal metal utilizado como catalizador, liderado por Celanese en 1974, a la que se sumaron Mitsubishi Chemical Corporation y Union Carbide Corporation en 1978 y 1976 respectivamente. Todos empleando como ligando trifenilfosfina (TPP). Este proceso lo conocemos actualmente como proceso LPO. Sus ventajas, condiciones de operación menos exigentes, mayor rapidez y además el rendimiento de producto por kilo de catalizador era hasta un 10% mayor al obtenido con los catalizadores de la primera generación.

Aunque hoy en día, para la producción de alcoholes detergentes se continúa utilizando el cobalto, en el caso de la hidroformilación de propeno y buteno la sustitución ha sido casi completa por el rodio. Hasta aquí, los catalizadores se habían utilizado en ambos casos (rodio y cobalto) en fase homogénea. En 1984 el panorama cambia, cuando Celanese instala una planta basada en descubrimientos realizados por Ruhrchemie-Rhône Poulenc, un sistema bifásico que contiene catalizador Rodio-TPPTS soluble en agua en la fase acuosa, y en la otra el producto resultante como fase inorgánica.

Aunque para alquenos de cadenas largas las investigaciones continúan, es cierto que en el caso del propeno es difícil mejorar mucho más y para los investigadores la clave es encontrar un catalizador más barato con características similares.

Con esta motivación, se investigan otro tipo de sistemas ligandos que reduzcan costes, reduzcan productos secundarios, sistemas que se descompongan menos o que se recuperen más fácilmente.

En los últimos años, sistemas ligandos fosfo-sulfonados se fueron desarrollando a partir de lo que se conocía del TPPTS. Primero, derivados del bifenil con distintos grados de sulfonación

como el BISBIS o el BISBI, más tarde derivados de binaftil como el BINAS, el más activo y selectivo de los nombrados, su reactividad es unas 10 veces más que el TPPTS, aunque, por otra parte, el sistema BINAS se descompone más fácilmente que el TPPTS, es por esto por lo que ninguno de los nombrados ha sido capaz de desterrar aún al proceso desarrollado por Ruhrchemie-Rhône Poulenc.

Otras líneas de investigación se basan en la posibilidad de introducir la reacción de Guerbet. Esta consiste en la condensación de dos moléculas con grupos hidroxilo, para formar una sola molécula más larga de alcohol. Solo es aplicable a aquellos alcoholes primarios y secundarios que contengan un grupo metileno adyacente al átomo de carbono que contiene el grupo hidroxilo. Para la producción de 2-EH se utilizaría como materia prima el n-butanol.



*Ilustración 7. Reacción de Guerbet aplicada al 2-EH*

Por el momento las investigaciones no han dado resultados muy satisfactorios al respecto. Es el caso por ejemplo de Carlini et Al, en su investigación con el uso de precursores bifuncionales basados en paladio o cobre y butóxido de sodio, obtienen selectividades casi del 100% para el 2-EH y conversiones de hasta el 60% pero, el sistema catalítico sufre una lixiviación del metal que impide que esta aplicación pueda llevarse a escala industrial por el momento [10,11]. Por el momento su aplicación industrial más importante es la producción de biodiesel.

## 2. Objetivos

En este trabajo se va a desarrollar la producción de n-butiraldehído para la elaboración del producto final 2-etilhexanol. Aunque existen diferentes posibilidades para la producción del 2-etilhexanol, finalmente, se ha escogido para el diseño del reactor el proceso que más se usa a escala industrial actualmente, el proceso Ruhrchemie-Rhône Poulenc.

Englobado en este contexto se va a diseñar la unidad de hidroformilación del propileno, la primera de las etapas del proceso, estimando las medidas del reactor y las condiciones de trabajo a las que se va a llevar a cabo la reacción, partiendo de datos experimentales obtenidos en otros estudios.

Una vez diseñada la unidad principal, se realizará una estimación de los equipos secundarios necesarios en la producción del n-butiraldehído para realizar un estudio económico y determinar cuál de las opciones planteadas es la más viable económicamente hablando.

### 3. Diseño del proceso

El proceso a diseñar para la producción del n-butiraldehído se trata del proceso RCH-RP. El complejo catalizador utilizado según este proceso está basado en el rodio:  $\text{RhCl}(\text{CO})(\text{TPPTS})_2 / \text{TPPTS}$ . Como comentado anteriormente, es un sistema catalizador que implica catálisis bifásica heterogénea con recuperación del catalizador mediante decantación tras la reacción, al ser insoluble en componentes orgánicos.

#### 3.1. Diagrama de flujo

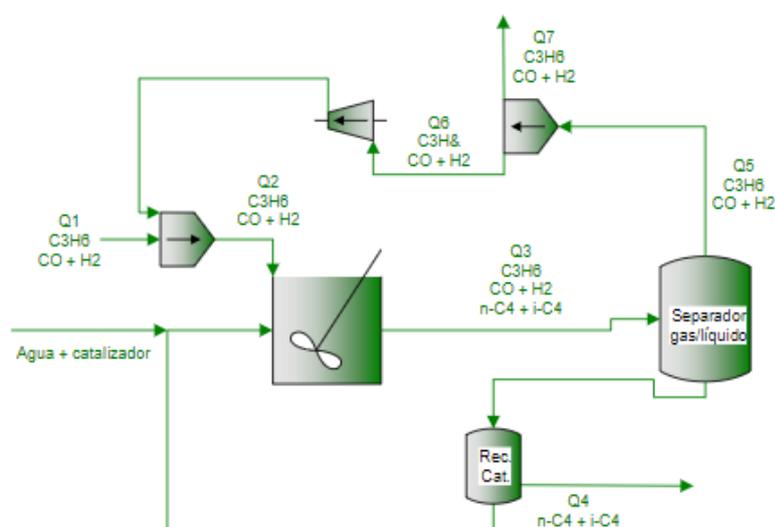
La producción industrial de 2-EH comprende 3 pasos: la hidroformilación del propeno, condensación del n-butanal e hidrogenación del 2-etil-2-hexenal a 2-EH [12].

Dentro de todo el proceso se va a diseñar el reactor de hidroformilación. Partiendo del propeno para la producción del n-butanal.

Se lleva a cabo en base a unas determinadas especificaciones:

- Capacidad de producción de la planta de 2-EH: 20.000 T/año. Aproximadamente según bibliografía, para obtener 855 kg de 2-EH se necesita 1 tonelada de n-butanal. Por tanto, la capacidad de producción de la planta de obtención del aldehído habrá de ser de 23000 Toneladas/año. Finalmente 2650 kg/hora de producción de n-butanal.
- Funcionamiento de la planta: 360 días/año.

En la *ilustración 8* se presenta la adaptación del diagrama de flujo realizada basándose en la bibliografía.



*Ilustración 8. Esquema de la planta de producción de n-butanal basado en [13]*

El proceso se inicia inyectando gas de síntesis y propileno en el reactor (previamente comprimidos a la presión 31 bares, presión de proceso). Se introduce la mezcla en un reactor de mezcla completa (CSTR) que contiene la solución catalítica: agua con catalizador de rodio y ligando sistema TPPTS en concentraciones de  $0,5 \cdot 10^{-3}$  kmol/m<sup>3</sup> y  $30 \cdot 10^{-3}$  kmol/m<sup>3</sup> respectivamente a una temperatura de entre 90-120°C. La reacción entre propileno, H<sub>2</sub> y CO tiene lugar en la fase acuosa, de una forma rápida y sin periodo de inducción, consiguiendo conversiones por paso del 95% y selectividades entre 70 y 98% según las condiciones de operación.

En el mismo reactor y gracias a las propiedades de los componentes de la reacción, se inicia la separación donde el propeno (apolar) difunde en la fase acuosa y los aldehídos y otros posibles productos secundarios (apolares) dejan el agua según se van produciendo. Esta mezcla se despresuriza y se lleva a un separador para terminar de separar ambas fases.

Para este diseño se supone una recuperación del 100% de la fase acuosa junto con el catalizador por decantación. El catalizador fresco se introducirá al reactor de forma periódica para recuperar las pérdidas, teniendo en cuenta una degradación del catalizador muy pequeña menor a  $10^{-9}$  gramos de Rh por cada Kg de n-butanal.

El resto de la mezcla (gaseoso a la salida del reactor) se enfría y se conduce a un separador. Después de esta fase los gases reactivos que no han reaccionado se recirculan en el reactor y la fase orgánica (n-butiraldehído y i-butiraldehído) se lleva a una torre de destilación para continuar con el proceso hasta la obtención del 2-EH. Parte del calor para esta fase de destilación se obtiene del calor que produce la reacción de hidroformilación que es altamente exotérmica.

### 3.2. Especificaciones del diseño

Se escogen dos posibles escenarios para su posterior estudio económico.

Del artículo Chao Yang et al [14], los experimentos número 5 y 14 muestran resultados bien distintos modificando ligeramente las condiciones operativas. El experimento 5 obtiene velocidades de reacción mucho más altas, a cambio de selectividades del n-butiraldehído bajas. Por el contrario, el experimento 14 alcanza velocidades de reacción más bajas pero el producto obtenido es casi puro, por lo que para la utilización del producto en etapas posteriores no sería necesaria la utilización de separadores adicionales.

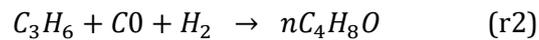
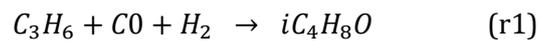
	<b>Experimento 5</b>	<b>Experimento 14</b>
<b>TR (temperatura en el reactor)</b>	383 K	373 K
<b>PR (Presión en el reactor)</b>	31 bar	31 bar
<b>C<sub>Rh</sub> (Concentración catalizador)</b>	$0.5e-3$ kmol/m <sup>3</sup>	$0.5e-3$ kmol/m <sup>3</sup>
<b>C<sub>L</sub> (Concentración ligando)</b>	$15e-3$ kmol/m <sup>3</sup>	$30e-3$ kmol/m <sup>3</sup>
<b>R0 (kmol/(m<sup>3</sup> x s))</b>	$0.3684e-3$	$0.1619e-3$
<b>Selectividad</b>	79.6%	96.8%

Tabla 1. Condiciones operación en el reactor según bibliografía [14]

### 3.3. Cinética

Se trabajará con un sistema catalítico de  $RhCl(CO)(TPPTS)_2/TPPS$  con sistema acuoso. La cinética propuesta por Chao Yang et al [14]. Según las conclusiones de este estudio, la velocidad de reacción depende de la temperatura y la presión, mientras que la concentración de rodio y gas de síntesis no tienen gran relevancia en este aspecto. La concentración del ligando es vital para conseguir las relaciones n/i deseadas, cuanto mayor es la concentración del ligando, mayor es la relación n/i, pero menor es la velocidad de reacción conseguida. Con estas premisas, se han escogido las combinaciones de factores para el diseño del reactor óptimo.

El sistema está formado por agua como disolvente del catalizador (rodio + TPPS) y medio de reacción, gas de síntesis y propeno como reactivos. Como productos se obtienen n-butiraldehído como producto principal e i-butiraldehído como secundario. Por tanto, las reacciones que ocurren en el reactor son dos, la de producción del i-butiraldehído (r1) y la de producción del n-butiraldehído (r2).



La ecuación cinética que determina la velocidad de la reacción de hidroformilación es:

$$r_0 = k * P_{H_2}^{k_1} * P_{CO}^{k_2} * P_{C_3H_6}^{k_3} * C_{Rh}^{k_4} * C_L^{k_5}$$

Donde k se obtiene a partir de la ecuación de Arrhenius.

$$k(T) = A * \exp\left(-\frac{E_a}{R_g T}\right)$$

Donde:

A	$1.286 \times 10^8$
$R_g$ (kJ/mol K)	$8.3144 \times 10^{-3}$
$E_a$ (kJ/mol)	76.78
$k_1$	0.2515
$k_2$	-0.6403
$k_3$	-0.9808
$k_4$	0.9789
$k_5$	-1.188

Tabla 2. Valores ecuación cinética [14,15]

### 3.4. Balance de materia

Se realiza en primer lugar un balance de materia utilizando el programa Matlab, como veremos a continuación se hacen bastantes simplificaciones del modelo para poder resolverlo. En cualquier caso, es útil para conocer el proceso y entender los resultados de la posterior simulación en Promax.

El balance de materia determinará entre otras cosas el volumen de la reacción. Los ficheros utilizados en el cálculo son *BM\_cinetica5.m* para el experimento 5 y *BM\_cinetica14.m* para el experimento 14.

A efectos prácticos, se utilizará el diagrama de flujo propuesto anteriormente en la *Figura 13*, con las siguientes simplificaciones:

- La recuperación del propeno es total en el separador de gases.
- La conversión en el reactor es del 0.95.
- La tasa de recirculación de la purga se fija en 0.93.

#### Cálculo del volumen

$$V = \frac{NB_{4Total}}{r_0 * Selectividad}$$

Donde:

$$NB_{4Total} = \text{Caudal molar total objetivo de } n - \text{butiraldehído} \left( \frac{kmol}{s} \right)$$

Se calculan también las concentraciones del resto de corrientes.

#### Fase líquida

$$Q_4 = \frac{NB_{4T} + IB_{4T}}{den_L}$$

$$NB_4 = \frac{NB_{4T}}{Q_4}$$

$$IB_4 = \frac{IB_{4T}}{Q_4}$$

### Balance en el reactor (Fase gaseosa)

$$Q_2 = \frac{R_0 * V}{\text{conversión} * CO_2}$$

### Cálculo de la cantidad de moles que salen del reactor

$$kmol_3 = (1 - \text{conversión}) * Q_2 * CO_2 + (Q_2 * H_2 - R_0 * V) + (Q_2 * A_2 - R_0 * V * PM_B)$$

$$Q_3 = kmol_3 * 8314 * \frac{T_R}{PLP * 1e6}$$

$$CO_3 = \frac{(1 - \text{conversión}) * Q_2 * CO_2}{Q_3}$$

$$H_3 = \frac{Q_2 * H_2 - R_0 * V}{Q_3}$$

$$A_3 = \frac{Q_2 * A_2 - R_0 * V}{Q_3}$$

$$NB_3 = \frac{NB_{4T}}{Q_3}$$

$$IB_3 = \frac{IB_{4T}}{Q_3}$$

### Cálculo de las corrientes del separador

$$kmol_5 = Q_3 * (CO_3 + H_3 + A_3)$$

$$Q_5 = \frac{kmol_5 * 8314 * T_{amb}}{1 * 1e6}$$

$$CO_5 = \frac{Q_3 * CO_3}{Q_5}$$

$$H_5 = \frac{Q_3 * H_3}{Q_5}$$

$$A_5 = \frac{Q_3 * A_3}{Q_5}$$

$$kmol_4 = Q_3 * (NB_3 + IB_3)$$

### Cálculo de la purga de gases y recirculación

$$Q_7 = tasa_{recirculación} * Q_5$$

$$CO_7 = CO_5$$

$$Q_6 = (1 - tasa_{recirculacion}) * Q_5 * \left( \frac{TR}{T_{amb}} \right) * PLP/PHP$$

$$CO_6 = \frac{CO_5 * Q_5}{Q_6}$$

### Cálculo de las corrientes de entrada al proceso

$$Q_1 = Q_2 - Q_6$$

$$CO_1 = \frac{(Q_2 * CO_2 - Q_6 * CO_6)}{Q_1}$$

$$H_1 = \frac{(Q_2 * H_2 - Q_6 * H_6)}{Q_1}$$

$$A_1 = \frac{(Q_2 * A_2 - Q_6 * A_6)}{Q_1}$$

### 3.4.1. Resultados del balance de materia

	Ensayo 5						
	Q1	Q2	Q3	Q4	Q5	Q6	Q7
Temperatura (K)	383	383	383	343	343	343	343
Presión (bar)	31	31	31	27	27	27	27
Estado físico	Gas	Gas	Gas + líquido	Líquido	Gas	Gas	Gas
Caudal (m3/s)	0,0427	0,0446	0,0951	0,0012	0,0021	0,0019	1,50E-04
[C3H6] (kmol/m3)	0,3002	0,3023	0,0071	0	0,3156	0,3489	0,3156
[CO] (kmol/m3)	0,3002	0,3023	0,0071	0	0,3156	0,3489	0,3156
[H2] (kmol/m3)	0,3002	0,3023	0,0071	0	0,3156	0,3489	0,3156
[nb] (kmol/m3)	0	0	0,1072	8,7947	0	0	0
[ib] (kmol/m3)	0	0	0,0275	2,2553	0	0	0

Tabla 3. Resultados balance de materia resuelto con Matlab. Ensayo 5.

	Ensayo 14						
	Q1	Q2	Q3	Q4	Q5	Q6	Q7
Temperatura (K)	373	373	373	343	343	343	343
Presión (bar)	31	31	31	27	27	27	27
Estado físico	Gas	Gas	Gas + líquido	Líquido	Gas	Gas	Gas
Caudal (m3/s)	0,053	0,0546	0,0762	9,54E-04	0,0018	0,0015	3,73E-02
[C3H6] (kmol/m3)	0,1988	0,2033	0,0073	0	0,3156	0,3583	0,3156
[CO] (kmol/m3)	0,1988	0,2033	0,0073	0	0,3156	0,3583	0,3156
[H2] (kmol/m3)	0,1988	0,2033	0,0073	0	0,3156	0,3583	0,3156
[nb] (kmol/m3)	0	0	0,1339	10,6964	0	0	0
[ib] (kmol/m3)	0	0	0,0044	0,3536	0	0	0

Tabla 4. Resultados del balance de materia resuelto con Matlab. Ensayo 14.

### 3.4.2. Simulación con Promax

Una vez realizados los cálculos con *Matlab*, para conseguir ver resultados más próximos a la realidad, sin las simplificaciones que se han tenido que realizar, se ha simulado el proceso con el simulador de procesos ProMax.

Utilizamos el paquete termodinámico *UNIQUAQ IG*.

El procedimiento para la simulación empieza construyendo el diagrama de flujo. Basándose en la bibliografía y en el diagrama de la *ilustración 8*. Construimos el diagrama de la *ilustración 9*. Imprescindible la inclusión del equipo ficticio RCYL-1, en la corriente de recirculación para que el cálculo sea capaz de converger y de una solución.

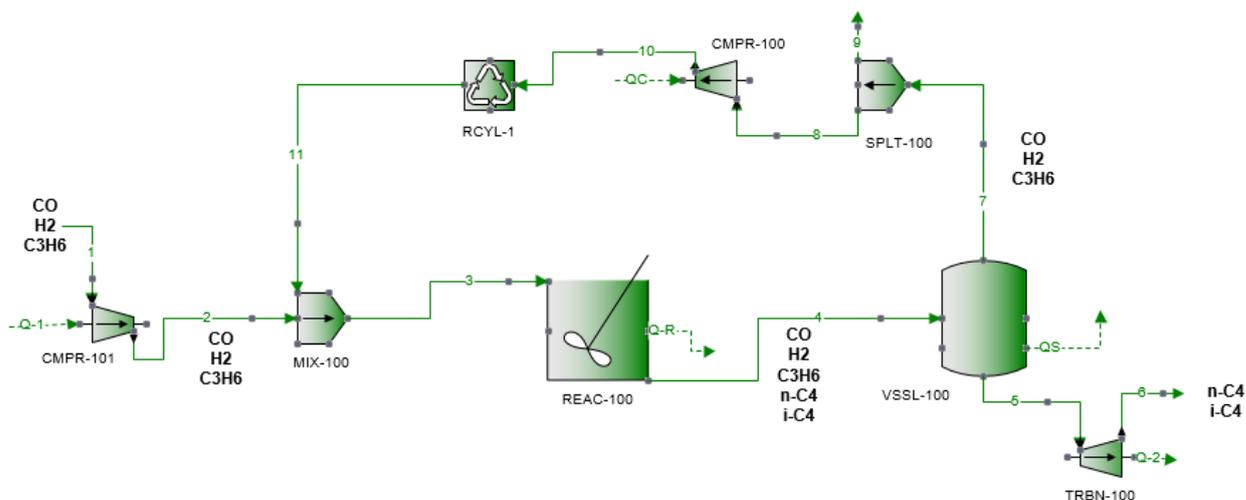


Ilustración 9. Diagrama para simulación en Promax.

A nivel cinético se crea un set de reacciones que incluye la reacción de hidroformilación. Para hacer referencia a la selectividad de los diferentes productos se ajusta la estequiometría de la reacción según la relación que en bibliografía se dice que se obtiene. El resto de los datos necesarios fueron energía de activación, la constante cinética  $k_0$  y la conversión [14].

Activa	<input checked="" type="checkbox"/>	
Ecuación química	$\text{CO} + \text{H}_2 + \text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow 0,7959 \text{C}_4\text{H}_8\text{O} + 0,2041 \text{C}_4\text{H}_8\text{O}$	
Ecuaciones a utilizar		Directa
Base de concentración		Presión parcial
Unidades de concentración		MPa
Equilibrio	<input type="checkbox"/>	
Fase de la reacción		Total
Constante de velocidad de reacción: $k = k_0 * T^n * \exp(-E_a/(R*T))$		
Componente base de la cinética		Carbon Monoxide
Base de la velocidad de reacción		moles / volumen
Unidades de la velocidad de reacción		kmol/(m <sup>3</sup> *s)
Densidad partícula de catalizador		kg/m <sup>3</sup>
Directa		
Unidades		K
$k_0$		0,0021517
$\ln(k_0)$		-6,1415
$E_a$		83150 kcal/kmol
$E_a/R$		41870,7
$n$		0
Componente base de la conversión		Carbon Monoxide
Unidades		K
A		0,95
B		0
C		0
Prioridad		0
Basado en la alimentación	<input checked="" type="checkbox"/>	

Ilustración 10. Set de reacción utilizado en Promax

Se utiliza un reactor de conversión, que utiliza como información cinética el set de reacciones creado y la conversión asignada.

REAC-100	
Tipo	Conversión
Set de reacciones	Hidroformilacion

Ilustración 11. Información relativa al reactor.

Para que *Promax* pueda resolver el problema planteado la información de las corrientes necesaria ha sido:

- Temperatura y presión de las corrientes 1, 5, 6 y 10.
- Presión de la corriente 4.
- Composición, temperatura y presión de entrada en la corriente 2.
- Porcentaje de separación de la purga (93%) en el separador SPLT-100 (Ilustración 12).

Caída de presión: 0 bar

División de caudales	
Fracciones de las corrientes de salida	%
Fracción a la corriente de proceso 8	93
Fracción a la corriente de proceso 9	7

Ilustración 12. Información necesaria en SPLT-100

Además, se ha incluido una función *solver* en la corriente de alimentación de materia prima, con el fin de que el simulador encuentre que cantidades de materia prima van a ser necesarias para ajustar la cantidad de salida que se desea producir.

The screenshot displays the 'Solver simple' window with the following details:

- Variable calculada:** Nombre: CV1. Botones: Buscar, Reemplazar.
- Error residual:** -2.10029986872015E-05. Botón: Verificar errores.
- Variables medidas:**

Variable	Valor	Unidades
Qnbutsalida	1.01789970013128E-02	kmol/s
- Calculador:**

Estado del solver	Activo
Error	-2,1003e-05
Valor calculado	38,9651 mol/s

Ilustración 13. Solver caudal molar materia prima.

Esta información se puede encontrar en los ficheros *Promax\_run5.pmx* y *Promax\_run14.pmx*, que contienen las simulaciones del proceso utilizadas en este trabajo. Los resultados obtenidos se muestran en las tablas 5 y 6.

3.4.2.1. Resultados de la simulación con Promax. Ensayo 5.

Ensayo 5					
Corriente	1	2	3	4	5
Temperatura (K)	298,15	383	383	383	343
Presión (bar)	1	31	31	31	27
Estado físico	Gas	Gas	Gas	Gas + Líquido	Líquido
Caudal molar (kmol/s)	0,038907	0,038907	0,040362	0,014814	0,01327
Fracción molar Propeno	33,33	33,33	32,185	1,4624	1,4601
Fracción molar H2	33,33	33,33	34,37	7,4157	0,9628
Fracción molar CO	33,33	33,33	33,314	4,5382	1,2002
Fracción molar n-butiraldehído	0	0	0,096221	68,89	76,708
Fracción molar i-butiralhehído	0	0	0,034948	17,694	19,669

Ensayo 5					
Corriente	6	7	8	9	10
Temperatura (K)	298,15	343	343	343	383
Presión (bar)	1	27	27	27	31
Estado físico	Gas + Líquido	Gas	Gas	Gas	Gas
Caudal molar (kmol/s)	0,01327	0,0015667	0,001457	0,00010967	0,001457
Fracción molar Propeno	1,4601	1,4821	1,4821	1,4821	1,4821
Fracción molar H2	0,9628	62,068	62,068	62,068	62,068
Fracción molar CO	1,2002	32,812	32,812	32,812	32,812
Fracción molar n-butiraldehído	76,708	2,669	2,669	2,669	2,669
Fracción molar i-butiralhehído	19,669	0,9694	0,9694	0,9694	0,9694

Tabla 5. Resultados de la simulación con Promax. Ensayo 5.

3.4.2.2. Resultados de la simulación con Promax. Ensayo 14

Ensayo 14					
Corriente	1	2	3	4	5
Temperatura (K)	298,15	373	373	373	343
Presión (bar)	1	31	31	31	27
Estado físico	Gas	Gas	Gas	Gas + Líquido	Líquido
Caudal molar (kmol/s)	0,032034	0,032034	0,033231	0,012189	0,010904
Fracción molar Propeno	33,33	33,33	32,187	1,4383	1,4329
Fracción molar H2	33,33	33,33	34,365	7,3759	0,93496
Fracción molar CO	33,33	33,33	33,326	4,5426	1,1736
Fracción molar n-butiraldehído	0	0	0,11699	83,867	93,372
Fracción molar i-butiralhehído	0	0	0,0054142	2,7767	3,0863

Ensayo 14					
Corriente	6	7	8	9	10
Temperatura (K)	298,15	343	343	343	373
Presión (bar)	1	27	27	27	31
Estado físico	Líquido + Vapor	Gas	Gas	Gas	Gas
Caudal molar (kmol/s)	0,010904	0,0012857	0,0011957	0,0011957	0,0011957
Fracción molar Propeno	1,4329	1,4833	1,4833	1,4833	1,4833
Fracción molar H2	0,93496	62	62	62	62
Fracción molar CO	1,1736	33,115	33,115	33,115	33,115
Fracción molar n-butiraldehído	93,372	3,2517	3,2517	3,2517	3,2517
Fracción molar i-butiralhehído	3,0863	0,1505	0,1505	0,1505	0,1505

Tabla 6. Resultados de la simulación con Promax. Ensayo 14.

### 3.5. Líneas de presión y temperatura

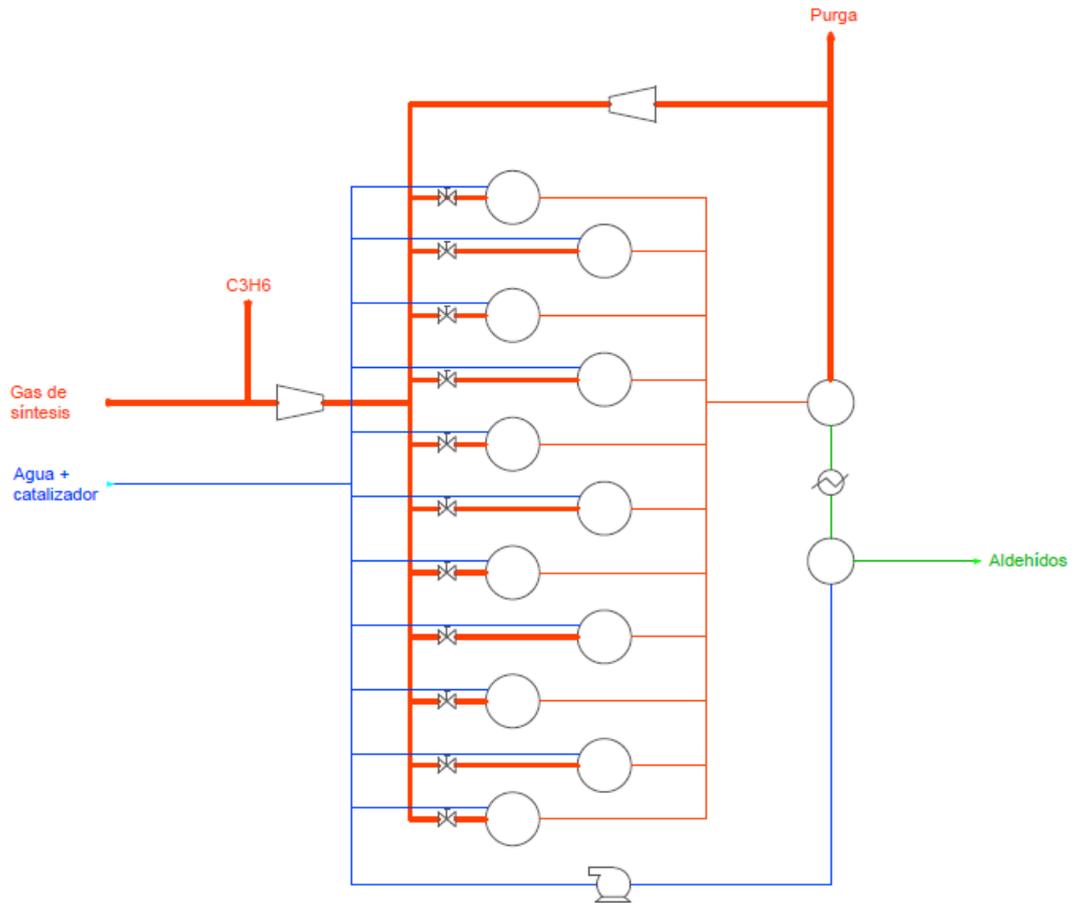


Ilustración 14. Diagrama líneas de presión y temperatura (Anexo 2 Planos)

En todas las etapas del proceso la temperatura es relativamente alta, entre 70-110 °C. Por la línea roja gruesa circulan gases a alta presión (31 bares), en estas líneas de gas será necesario incluir manómetros para el control de la presión y válvulas de seguridad.

Las líneas azul y verde son las que conducen los líquidos, que no requieren de un control especial.

### 3.6. Balance de energía en el reactor

Utilizamos los resultados energéticos que obtenemos de la simulación. Al ser la reacción muy exotérmica tendremos un exceso de energía que podremos reutilizar en el resto de las operaciones que consumen energía térmica, principalmente se emplearía en la etapa de destilación para la separación de los butiraldehídos.

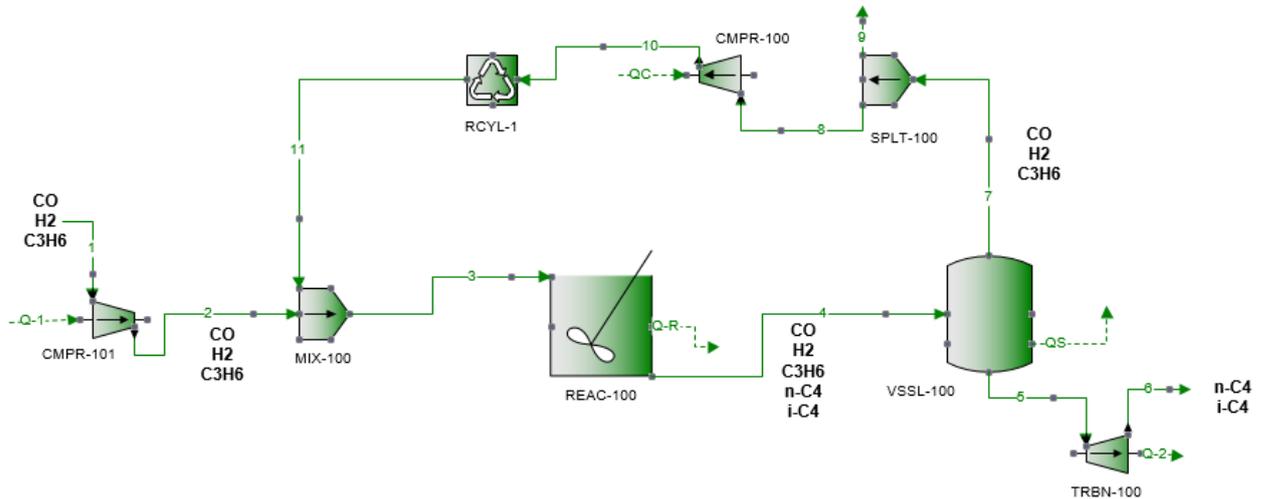


Ilustración 15. Diagrama de flujo de la hidroformilación.

En el diagrama de flujo de la *ilustración 15* las corrientes energéticas son las corrientes punteadas y tienen la dirección de la energía (energía consumida es energía entrante y energía liberada es energía saliente), por tanto, todos los resultados se muestran en positivo pues en el diagrama ya se indica la dirección de la energía.

Los resultados obtenidos son los mostrados en las *tablas 7 y 8*.

QR (KW)	QS (KW)	QC (KW)	Q1 (KW)	Q2 (KW)
1903,1	88,591	1,9239	142,54	96,215

Tabla 7. Resultados del balance energético del proceso. Ensayo 5.

QR (KW)	QS (KW)	QC (KW)	Q1 (KW)	Q2 (KW)
1554,1	52,257	1,1753	102,72	79,167

Tabla 8. Resultados balance energéticos del proceso. Ensayo 14.

Como se puede ver a continuación, el balance neto de energía es positivo.

$$\text{Balance energía neto (kW)} = (QR + QS + Q2) - (Q1 + QC)$$

$$\text{Energía neta sobrante ensayo 5 (kW)} = 1943,44$$

$$\text{Energía neta sobrante ensayo 14 (kW)} = 1581,63$$

Pero no toda la energía sobrante la podemos aprovechar, solamente la QR se podrá aprovechar en las posteriores destilaciones, mediante un intercambiador de calor.

**Balance energía térmica:**

$$\text{Energía térmica aprovechable (kW)} = QR + QS$$

$$\text{Energía térmica aprovechable ensayo 5 (kW)} = 1991,69$$

$$\text{Energía térmica aprovechable ensayo 14 (kW)} = 1606,36$$

Por tanto, a la hora de contabilizar los costes, la energía térmica que podamos aprovechar en etapas posteriores será contabilizada como un beneficio. El único gasto en energía eléctrica será el de los compresores:

$$\text{Consumo energía eléctrica (kW)} = Q1 + QC$$

$$\text{Consumo energía eléctrica ensayo 5 (kW)} = 144,64$$

$$\text{Consumo energía eléctrica ensayo 14 (kW)} = 103,90$$

## 4. Diseño de ingeniería química

### 4.1. Compresores

Se emplearán dos compresores, con el fin de conseguir tener las corrientes a la presión adecuada para cada etapa del proceso.

El compresor de la entrada del proceso ha de ser capaz de alcanzar los 31 bar, así pues, los compresores de pistón son los mejores para trabajar en continuo con estas presiones tan altas.

	Ensayo 5	Ensayo 14
<b>Compresor CMPR101</b>	Tipo pistón	Tipo pistón
<b>Rango presión</b>	1-35 bar	1-35 bar
<b>Potencia (KW)</b>	142	102
<b>Precio</b>	314611 \$	293820 \$

Tabla 9. Datos del compresor CMPR101

	Ensayo 5	Ensayo 14
<b>Compresor CMPR100</b>	Tipo pistón	Tipo pistón
<b>Rango presión</b>	27-31 bar	27-31 bar
<b>Potencia (KW)</b>	1,92	1,17
<b>Precio</b>	288879 \$	288879 \$

Tabla 10. Datos del compresos CMPR100



Ilustración 16. Ejemplo compresor industrial [23]

## 4.2. Reactor

El reactor utilizado para la hidroformilación es de tipo continuo de tanque agitado (CSTR). A continuación, se presentan las características del reactor y una estimación del precio total del conjunto de reactores.

Debido al gran tamaño de la producción será necesario dividir el volumen de reacción en varios reactores que funcionarán en paralelo.

Además, es necesario añadir un volumen de seguridad para los gases, en este caso la relación líquido/gas a la salida del reactor es de un 90/10. Así que aproximadamente al volumen total necesario para que ocurra la reacción añadiremos aproximadamente un 10% para dejar un margen para el movimiento del líquido y seguridad para la presión de los gases.

	<b>Experimento 5</b>	<b>Experimento 14</b>
<b>Volumen total necesario (m<sup>3</sup>)</b>	34,78	65,08
<b>Volumen con seguridad del 10% (m<sup>3</sup>)</b>	38,26	72,05

*Tabla 11. Resumen volúmenes reactor hidroformilación*

Recurrimos para el diseño de los reactores a los estándares ASME (American Society of Mechanical Engineers), que tiene carcasas normalizadas con medidas estándar de los cilindros de acero que se utilizan para la construcción de tanques, reactores, etc. Según los diámetros de estas listas podremos utilizar los tamaños de 6 y 7 pies, que equivalen a 1,84 y 2,14m, para la carcasa interior (volumen de reacción) y para la carcasa exterior (camisa) respectivamente. Se han escogido estos para evitar tener reactores demasiado pesados de más de 7 m<sup>3</sup> por cada reactor.

El resto del dimensionamiento se ha hecho según la guía ASME para el diseño de tanques a presión y se detalla en el apartado 5 de este trabajo.

Con los datos hallados tras el dimensionamiento podemos estimar el precio del reactor.

	<b>Ensayo 5</b>	<b>Ensayo 14</b>
<b>Tipo de reactor</b>	Agitación y encamisado	Agitación y encamisado
<b>Material</b>	Acero al carbono	Acero al carbono
<b>Temperatura (K)</b>	373	373
<b>Presión de operación (bar)</b>	31	31
<b>Volumen unitario (m<sup>3</sup>)</b>	6,55	6,55
<b>Número reactores</b>	6	11
<b>Precio [2010 US \$]</b>	158.842,89 \$	158.842,89 \$
<b>Total precio equipos [2010 US \$]</b>	953.057,36 \$	1.747.271,36 \$

*Tabla 12. Características reactor hidroformilación*

#### 4.3. Intercambiador de calor

Con el fin de evacuar el calor emitido por la reacción de hidroformilación que es altamente exotérmica. El reactor estará encamisado de forma que podremos aprovechar el calor emitido por la reacción para calentar el agua que se utilizará en la destilación posterior.

Para el cálculo del área total necesaria para el correcto intercambio de calor se utiliza la fórmula:

$$Q = UA * (T_s - T_e)$$

U es la transmitancia térmica y se calcula a partir del espesor de la pared y la conductividad del material, en este caso acero al carbono.

<b>Espesor de la pared del reactor t (m)</b>	0,032
<b>Conductividad λ (W/m<sup>2</sup>K)</b>	52

Tabla 13. Parámetros para el cálculo de la transmitancia térmica

$$U = \frac{1}{Rt} = 1,625 \frac{KW}{m^2K}$$

Donde:

$$Rt = \frac{t}{\lambda}$$

El área necesaria para el intercambio de calor, teniendo en cuenta que la entrada de agua de red será de aproximadamente 20°C (Te), y con la suposición de que el agua saldrá a 90°C (Ts) tras el intercambio. El resultado es:

	<b>Ensayo 5</b>	<b>Ensayo 14</b>
<b>Área de intercambio total (m<sup>2</sup>)</b>	16,73	13,67
<b>Área de intercambio por reactor (m<sup>2</sup>)</b>	2,79	1,25

Tabla 14. Área de intercambio de calor necesaria

Teniendo en cuenta las medidas del reactor, el área de intercambio posible por cada reactor es de:

<b>Altura camisa (m)</b>	2,2
<b>Diámetro reactor (m)</b>	1,84
<b>Área posible de intercambio por reactor (m<sup>2</sup>)</b>	12,65

Tabla 15. Área de intercambio de calor disponible

Por tanto, los reactores tienen el área suficiente de intercambio para hacer posible la evacuación de calor.

Obtenemos el caudal de agua necesario para evacuar el calor, con la fórmula:

$$Q = m_a * C_{p_a} * (T_s - T_e)$$

	Ensayo 5	Ensayo 14
<b>Caudal de agua de refrigeración (kg/s)</b>	1,27	0,53

Tabla 16. Caudal necesario para agua de refrigeración en el reactor

#### 4.4. Bombas

Con el fin de facilitar el movimiento de las corrientes líquidas será necesario introducir bombas en las corrientes de salida del reactor y de recirculación del agua y catalizador.

Bomba	TR 70	KF 40
Corriente	Recirculación agua con catalizador	Q4
Caudal máximo	780 l/min	170 l/min
Presión máxima	220 bar	110 bar
Precio [2010 US \$]	8972 \$	7426 \$

Tabla 17. Características bombas utilizadas [32]



Ilustración 17. Bomba Pratisoli serie KF [32]

#### 4.5. Separadores

Se utilizan dos separadores, el primero de ellos será un separador gas-líquido, capaz de soportar la presión de 27 bar y de mantener la temperatura estable en 343 K, donde la mezcla pueda residir el suficiente tiempo como para llevar a cabo la separación.

El segundo de ellos separará el catalizador y el agua del producto (los butiraldehídos), a temperatura y presión ambiente.

Ambos serán tanques, con la diferencia de que el primero estará encamisado para mantener la temperatura de separación y evacuar el calor desprendido por la descompresión y la separación que recuperaremos en la destilación o en etapas posteriores. El segundo será un tanque con carcasa simple.

En el cálculo del volumen del separador consideraremos un tiempo de residencia de 15 minutos, con este dato y el caudal volumétrico de entrada, el volumen necesario estimado para el separador es de 3,5 m<sup>3</sup>. Los separadores serán cilindros de diámetro 1,84 m y altura 1,7 m.

Tipo de separador	Líquido-gas	Líquido-líquido
Material	Acero al carbono	Acero al carbono
Temperatura de operación (K)	343	273
Presión de operación (bar)	27	1
Volumen (m3)	3,5	3,5
Precio total [2010 US \$]	60243,24 \$	14494,0 \$

Tabla 18. Características de los separadores

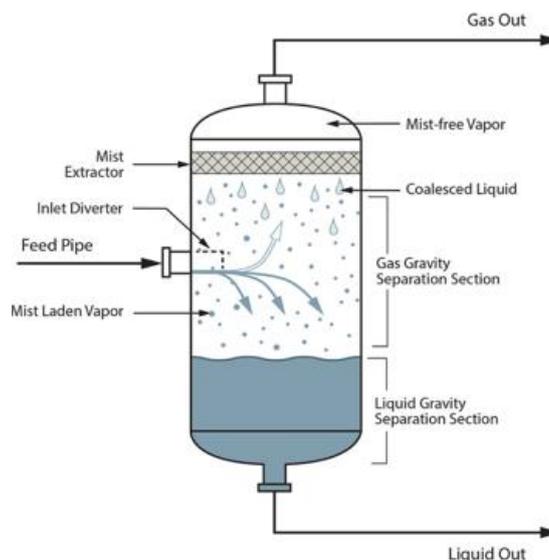


Ilustración 18. Ejemplo de separador gas-líquido [18]

## 5. Diseño mecánico

Para el diseño de la carcasa del reactor CSTR, se han utilizado los diámetros estándar del manual ASME para cilindros de acero. Los cilindros que más se adecuan al diseño propuesto para los reactores de hidroformilación son dos cilindros de 6 y 7 pies (1,84 y 2,14 m) de diámetro exterior, para la carcasa interior y exterior respectivamente (ya que el tanque de reacción está encamisado). Con un grosor de pared de 0,032 m [30].

Para la cabeza se ha escogido el tipo korbogen o toriesférico, que según el manual ASME es el más adecuado para tanques a presiones altas. De acuerdo con las directrices del propio manual se han calculado las medidas de la cabeza, para tener un diseño completo del reactor.

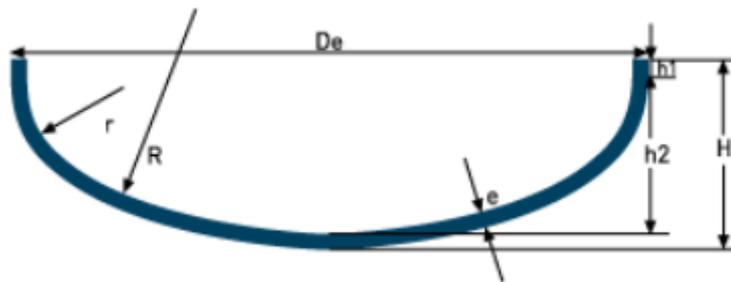


Ilustración 19. Cabeza Korbogen para tanques a presión

$De = \text{diámetro exterior cilindro (m)}$

$S = \text{Esfuerzo de diseño a la tensión}$

$$R = De = 2,14 \text{ m}$$

$$r = 0,06 * R = 0,1284 \text{ m}$$

$$e = \frac{P * R}{S * E + 0,4 * P} = 0,032 \text{ m}$$

$$h1 = 3 * e = 0,096 \text{ m}$$

Se ha calculado también el tamaño de las tuberías de entrada y salida del reactor. Para ello se ha utilizado la siguiente ecuación:

$$D \text{ (mm)} = \sqrt{\frac{4000 * Q \left(\frac{l}{s}\right)}{\pi * V \left(\frac{m}{s}\right)}}$$

Se ha supuesto para ello una velocidad típica para fluidos gaseosos de 10 m/s y para fluidos líquidos 1 m/s [34]. Obtenemos así que los diámetros internos mínimos de las tuberías de entrada al reactor serían de 29,69 mm para la entrada en fase gas y 25,07 mm para la tubería de salida en fase líquido.

Igual que con los cilindros para el tanque de reacción, los diámetros nominales de las tuberías se encuentran normalizados. Se escogen tuberías de 32 mm de diámetro nominal y 42 mm de diámetro exterior, según los estándares ASME/ANSI B36.10M [35].

El volumen de la cabeza es calculado con la siguiente fórmula [34]:

$$V_{cabeza} = 0,1298 * (D_i^3) = 0,55m^3$$

Suponiendo una altura de la carcasa de 2,2m (para ajustar el volumen del reactor al volumen necesario), el volumen de la carcasa es de un total de:

$$V = \pi * r^2 * h = 5,45m^3$$

El volumen total de reacción para cada unidad será de 6,55 m<sup>3</sup>.

Podemos ver las medidas del reactor y su diseño completo en el plano anexo "Reactor de hidroformilación para la producción de 2-EH"

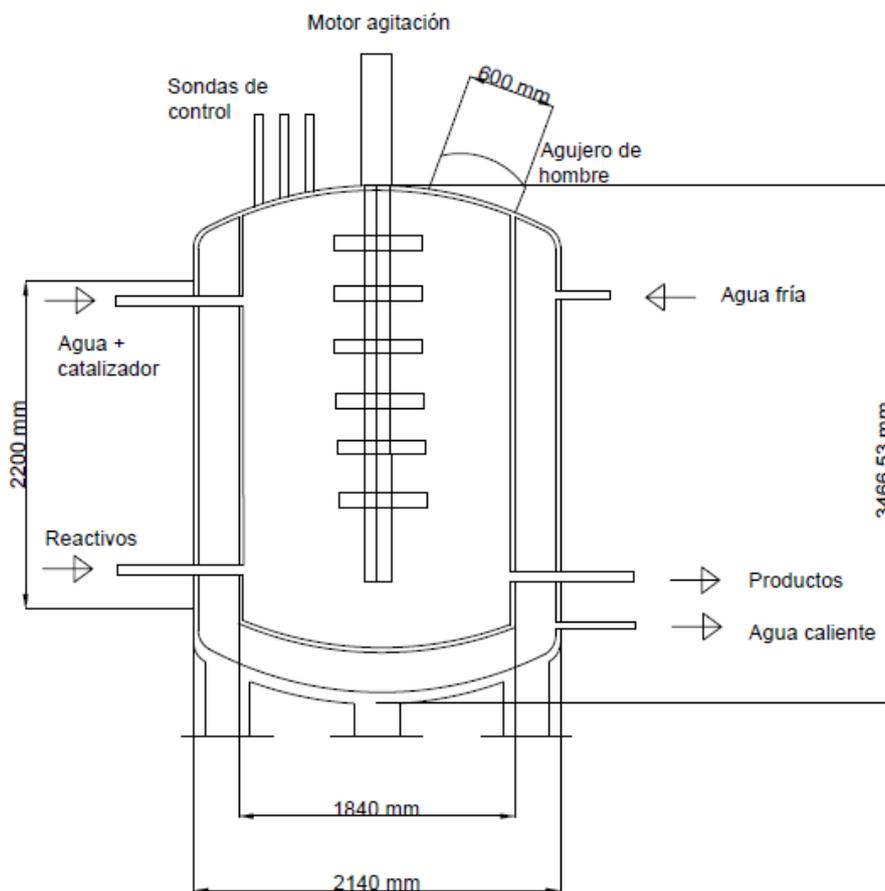


Ilustración 20. Plano reactor hidroformilación. Anexo 2 Planos.

## 6. Sistemas de control

Como comentado anteriormente, será necesario que el proceso incluya válvulas de seguridad en las corrientes gaseosas, se utilizaran en el reactor y separador con el fin de poder evacuar gas en caso de sobrepasar la presión de diseño en una emergencia, además son de obligatorio uso según la legislación, cuando se trabaja a altas presiones [26].

Se incluirán también sistemas de control de temperatura en el reactor, para asegurar que el intercambiador de calor (en forma de camisa), cumple su función y mantiene estable la temperatura del reactor mediante el control del caudal de entrada de agua en la camisa.

Contra la posibilidad de derrames en los diferentes depósitos (reactores y separador) se incluyen balsas de protección, construidas alrededor de los reactores, con capacidad volumétrica para retener una posible fuga de producto y evitar contaminaciones y derrames de líquido.

## 7. Estudio económico

### 7.1. Capital inversión (CAPEX)

La parte del estudio económico se divide en dos partes, el capital que es necesario invertir (CAPEX), es decir costes fijos. Y por otro lado los costes de operación.

El capital de inversión incluye el coste de los equipos, inversión en ingeniería y cargos de contingencia.

En la siguiente tabla se resumen los equipos utilizados en la planta, sus precios base estimados y el capital necesario calculado a partir de factores teóricos.

Equipo	Precio unitario (\$ 2010)	Cantidad	Precio total	Capital necesario
Compresor entrada	293.821,00 \$	1	293.821,00 \$	1.909.836,50 \$
Compresor recirculación	288.879,00 \$	1	288.879,00 \$	1.877.713,50 \$
Separador L-G	60.243,24 \$	1	60.243,24 \$	391.581,06 \$
Separador L-L	14.494,01 \$	1	14.494,01 \$	94.211,04 \$
Bomba	7.425,94 \$	2	14.851,88 \$	96.537,20 \$
Reactores (Ensayo 5)	158.842,89 \$	6	953.057,36 \$	6.194.872,81 \$
Reactores (Ensayo 14)		11	1.747.271,82 \$	11.357.266,82 \$
Total (C <sub>2010</sub> ) Ensayo 5				10.564.752,11 \$
Total (C <sub>2010</sub> ) Ensayo 14				15.727.146,13 \$

Tabla 19. Resumen costes básicos por equipo

Los precios base han sido calculados mediante correlaciones basadas en literatura de ingeniería química, en este caso se ha utilizado la siguiente correlación:

$$C_c = a + bS^n$$

Donde

C<sub>c</sub>=Coste del equipo comprado en base a enero de 2010 (CEPCI<sup>5</sup>=532,9)

a,b = constantes de coste en la tabla (obtenidas de bibliografía [38])

S=parámetro de tamaño, unidades dadas en bibliografía.

n= exponente para el tipo de equipo.

En bases a estos costes de equipos calculados anteriormente, se calculan mediante el método factorial propuesto por Hand (1958), el coste total de la inversión. Cada parte de la inversión se contempla mediante un factor sugerido por la bibliografía con la siguiente fórmula.

$$C = \sum_M C_C \left( (1 + f_p) f_m + (f_{er} + f_{el} + f_i + f_c + f_s + f_i) \right)$$

Donde  $C_{CICS}$  = Coste del equipo comprado en acero al carbono

M = número total de equipos

$f_p$  = factor de instalación para tuberías

$f_{er}$  = factor de instalación para montaje de equipos

$f_{el}$  = factor de instalación para trabajos eléctricos

$f_i$  = factor de instalación para instrumentación y control de proceso

$f_c$  = factor de instalación para obras de ingeniería civil

$f_s$  = factor de instalación para estructuras y edificios

$f_i$  = factor de instalación para revestimiento, aislamiento o pintura

Finalmente, este valor se actualiza con el CEPCI (*chemical engineering plant cost index*)

$$C_{2019} = C_{2010} * \frac{CEPCI_{2019}}{CEPCI_{2010}} = C * \frac{619.2}{532.9}$$

El coste asociado a los equipos para la planta en los dos supuestos es de:

$$C_{2019}(5) = 11.956.468,38 \$.$$

$$C_{2019}(14) = 17.798.915,05 \$.$$

Esto, más el capital circulante calculado como un porcentaje de la inversión de capital fijo (tomaremos un 15% como estimación [38]), cubre los gastos corrientes de funcionamiento, y nos da como resultado un valor CAPEX de:

$$C_{2019}(5) = 13.749.938,64 \$$$

$$C_{2019}(14) = 20.468.752,30 \$$$

## 7.2. Costes de operación (OPEX)

### 7.2.1. Costes materia prima

La principal materia prima utilizada es propileno cuyo coste es de 1110 \$/tonelada en 2013 [21]. También el gas de síntesis con precios entre 24.46 \$ y 90.09 \$, escogeremos una media (57,275 \$ por tonelada) teniendo en cuenta que el precio esta determinado por el precio del gas natural y este es tremendamente voluble en el 2013.

Para la producción estimada, tomando el consumo de materias primas del balance de materia en *Promax*. Obtenemos los siguientes consumos.

Costes materia prima	\$/año (ensayo 5)	\$/año (ensayo 14)
Propileno	18.822.917,19 \$	15.497.810,92 \$
Gas de síntesis	1.387.114,51 \$	1.142.077,93 \$

Tabla 20. Costes asociados a los gases de reacción

$$\text{Costes Reactivos} = Q_R \left( \frac{\text{kmol}}{\text{s}} \right) * M_R \left( \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \right) * t_{\text{prod}} * C_R \left( \frac{\$}{\text{kg}} \right)$$

Dado que el rodio se recupera, necesitaremos exclusivamente la cantidad que cabe en los reactores más el margen de el tanque de recuperación, para asegurar que se mantiene la misma cantidad en todo el circuito. El consumo será considerado 0 pues se la pérdida de catalizador es de menos de  $10^{-9}$  gramos de rodio por cada kg de n-butanal obtenido [1].

El coste del rodio, el metal más caro del mundo a 10 de mayo de 2019 el coste es de 2950\$/onza [16].

La cantidad aproximada necesaria para poner en marcha la instalación será de 2,202 kg para el ensayo 5 y de 3,887 para el ensayo 14.

$$\text{Costes Rh} = [Rh] \left( \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right) * V_{\text{reactores+separator}} (\text{m}^3) * M_{\text{tppts}} \left( \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \right) * C_{\text{tppts}} \left( \frac{\$}{\text{kg}} \right)$$

Para el ligando tppts no se encuentran precios oficiales de forma que tomaremos como precio orientativo 100 \$/kg según Van Leewen et Al. [13].

$$\text{Costes } tppts = [TPPTS] \left( \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right) * V_{\text{reactores+separador}} (\text{m}^3) * M_{tppts} \left( \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \right) * C_{tppts} \left( \frac{\$}{\text{kg}} \right)$$

	Coste ensayo 5 (\$ mayo de 2019)	Coste ensayo 14 (\$ mayo de 2019)
<b>Rodio</b>	20.8847,88	36.8661,08
<b>Ligando TPPTS</b>	21.894	77.296

Tabla 21. Costes asociados al catalizador

### 7.2.2. Agua

Es necesario una corriente de agua para la refrigeración de los reactores. Los caudales anteriormente calculados son 1,27 kg/s para el ensayo 5 y 0,53 kg/s por cada reactor. En total, 7,62 kg/s en el ensayo 5 y 5,83kg/s de agua en el ensayo 14. Según el precio de usos industriales el precio del agua para grandes consumos será de 0,5016 €/m<sup>3</sup> [8]. Aunque este consumo no es real pues el agua se recirculará, siendo el consumo menor. Estimaremos el consumo de agua reduciéndolo a un mes (30 días) de producción por año.

Costes agua (€)

$$= \text{Consumo agua} \left( \frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right) * 3600 \frac{\text{s}}{\text{h}} * 24 \frac{\text{h}}{\text{día}} * 30 \text{ días} * \text{Precio agua} \left( \frac{\text{€}}{\text{m}^3} \right)$$

	Coste del agua (€/año)
<b>Ensayo 5</b>	9.907,12
<b>Ensayo 14</b>	7.579,9

Tabla 22. Costes asociados al consumo de agua

### 7.2.3. Electricidad

Aunque en esta planta existen pocos equipos que utilicen energía, las compresiones a altas presiones conllevan un gran gasto energético. Para estimar este coste utilizamos la tarifa 6.4 A de Iberdrola [29], donde para potencias superiores a 145 kW, el precio de la electricidad anual se puede estimar de la siguiente manera:

$$160 \text{ kW} * 6.319 \frac{\text{€}}{\text{kW} * \text{año}} + 160 \text{ kW} * 4.048e^{-3} \left( \frac{\text{€}}{\text{kW} \cdot \text{h}} \right) * 24 * 365 = 5673,68 \text{ €/año}$$

### 7.3. Costes fijos

Son los que incluyen mano de obra, mantenimiento y los gastos financieros.

Se estiman como una fracción de la inversión CAPEX, un 3% para procesos que manejan gases y líquidos. Esto es un total de:

$$C_{\text{fijo}(5)} = 412.498,16 \text{ €}$$

$$C_{\text{fijo}(14)} = 614.062,57 \text{ €}$$

Por último, calcularemos la amortización del capital con un plazo de 15 años e interés del dinero 5,28, según el ICO a mayo de 2019 [28].

$$C_{RF} = \frac{((1 + i)^n - 1)}{(i * (1 + i)^n)} = 11,42$$

Puesto que la cantidad imputada como coste fijo anual es:

$$\text{Coste fijo anual} = \frac{C_{CAPEX}}{C_{RF}}$$

Los costes fijos asociados al funcionamiento de la fábrica serán de 1.349.889,88 € para el ensayo 5 y 2.009.504,36 € para el ensayo 14.

### 7.4. Balance total

Finalmente, con todos los costes calculados anteriormente podemos realizar la suma de los costes anuales para obtener un dato que poder comparar.

$$\begin{aligned} \text{Capital total anual (\$)} \\ &= \text{Coste fijo anual (capital)} + \text{Coste fijo anual (operación)} \\ &+ \text{Consumos} \end{aligned}$$

	<b>Capital total anual (\\$)</b>
<b>Ensayo 5</b>	21.820.841,26
<b>Ensayo 14</b>	19.160.135,87

Tabla 23. Capital total anual necesario

Con estos resultados podemos decir que las condiciones de operación elegidas para el proyecto serían las del ensayo 14. Se puede ver que puede ser mucho más beneficioso económicamente utilizar concentraciones mayores de sistema catalizador por el ahorro en materias primas que supone. Ya que el coste en materias primas es el paquete con más peso dentro de los costes totales del proyecto.

Los costes en equipamiento son superiores cuando las velocidades de reacción se ven reducidas al aumentar la concentración de catalizador, pero la selectividad obtenida en el ensayo 14, es tan elevada (96.8%) que permite compensar sin problemas el incremento de coste en equipamiento, reduciendo los costes en materias primas, además de en etapas posteriores abaratar o incluso se podría llegar a eliminar, la etapa de destilación posterior para separar ambos aldehídos.

No podemos llegar a una conclusión en cuanto a la rentabilidad del proceso solamente habiendo diseñado una de las etapas, para ello, se tendrá que diseñar el resto de las etapas y hacer el cálculo completo. Pero podemos hacer una estimación, por cada tonelada de n-butanal producida se puede llegar a fabricar 855 kg de 2-Eh según bibliografía [1]. De forma que, con una producción anual de 20000 toneladas de butanal, obtendríamos 17100 toneladas de 2-EH que se podrían comercializar a precio de 1500 €/ton.

$$17100 \frac{\text{ton (2EH)}}{\text{año}} * 1500 \frac{\text{€}}{\text{ton}} - 19160135,87 \frac{\text{\$}}{\text{año}} * 0,89 \frac{\text{€}}{\text{\$}} = 8.597.479,08 \text{ €/año}$$

Que supone un margen de 8.597.479,08 €/año para invertir en el resto de equipamiento donde llevar a cabo el resto de las operaciones de aldolización e hidrogenación, ya que en este caso la inversión necesaria en materias primas será muy baja, solamente en la hidrogenación se aporta hidrogeno. Por tanto, se podría casi predecir que el proceso es perfectamente rentable bajo estas condiciones.

## 8. Conclusiones

El proceso de producción del 2-EH, es un proceso que ha evolucionado mucho a lo largo del tiempo, sobre todo, en la etapa de la hidroformilación. Siempre en busca de la mejora de uno de sus grandes retos, encontrar el mejor catalizador, con posibilidad de una separación sencilla, con velocidades altas de reacción y selectividades altas que eviten la producción del producto secundario principal (el iso-butanal). Hoy en día, el proceso Ruhrchemie consigue acercarse bastante a estos objetivos y por ello es el proceso más utilizado para el fin propuesto.

Dentro de este proceso y según se ha confirmado en bibliografía, se obtienen resultados muy diferentes según el uso que se haga del catalizador y del ligando (rodio con ligando TPPTS). Se ha querido comparar que efectos tiene en el diseño de la parte de la hidroformilación, variar ligeramente las concentraciones del sistema catalizador, con el fin de escoger cual sería más factible llevar a cabo.

Los resultados obtenidos tras el cálculo de costes muestran que es mucho más beneficioso económicamente utilizar las condiciones de operación del ensayo 14, por el ahorro en materias primas que supone y el posible abaratamiento de etapas posteriores, como la separación de ambos aldehídos. El diseño del reactor y la planta finales se pueden ver en los planos adjuntos.

Además, el precio de venta del 2-EH, superior al de las materias primas permite hacer una estimación y afirmar que efectivamente el proceso según se ha planteado puede llegar a ser viable, aunque evidentemente se tendrá que diseñar el resto de las etapas y hacer el cálculo completo.

De manera general, en este trabajo se han podido trabajar y afianzar muchas de las competencias recibidas durante los estudios en el grado de ingeniería química, se resumen en un mismo proyecto búsqueda de información, planteamiento y resolución de problemas, diseño de instalaciones y estimación de costes asociados a instalaciones químicas.

## 9. Bibliografía

- [1] Matar, P., & Hatch, P. (2001). *Chemistry of Petrochemical Processes* (2nd ed.). Burlington: Elsevier Science.
- [2] Oxea, the oxo people (2018). "Ficha de datos de seguridad n-Butiraldehído"  
<<https://www.oxea-chemicals.com/download/wercs/MTA0NTAjZXMicHMjZWVzIzE1MTg2MDQzODlwMDAjb3hIYSMxI0Q=/10450-es-ps-es.pdf>>
- [3] Icis, Chemical Report (2009). *2-Ethylhexanol (2-EH) Uses and Market Data*  
<<https://www.icis.com/resources/news/2007/11/05/9075782/2-ethylhexanol-2-eh-uses-and-market-data/>>
- [4] Patidar, P., & Mahajani, S. (2012). Entrainer-Based Reactive Distillation for the Synthesis of 2-Ethylhexyl Acetate. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51(26), 8748-8759.
- [5] Hreczuch, W., Dąbrowska, K., Chruściel, A., Sznajdrowska, A., & Materna, K. (2016). 2-Ethylhexanol Derivatives as Nonionic Surfactants: Synthesis and Properties. *Journal of Surfactants and Detergents*, 19(1), 155-164.
- [6] Zhang, Xie, Song, Xing, Kong, Li, & He. (2016). Extraction of boron from Salt Lake brine using 2-ethylhexanol. *Hydrometallurgy*, 160, 129-136.
- [7] Kelly, G., King, F., & Kett, M. (2003). Waste Elimination in Condensation Reactions of Industrial Importance. *ChemInform*, 34(19), ChemInform, 05/13/2003, Vol.34(19).
- [8] Canal de Isabel II (2018). *Tarifas 2018*.  
<[https://www.canaldeisabelsegunda.es/documents/20143/45257/Folleto\\_Tarifas\\_2018+%281%29.pdf/64c18c47-39ae-49fb-2bc2-f7178dcf69c5](https://www.canaldeisabelsegunda.es/documents/20143/45257/Folleto_Tarifas_2018+%281%29.pdf/64c18c47-39ae-49fb-2bc2-f7178dcf69c5)>
- [9] Liu, Sw, Xie, Cx, Yu, St, Liu, Fs, & Song, Zq. (2011). Hydrogenation of 2-Ethylhexenal Using Thermoregulated Phase-Transfer Catalyst for Production of 2-Ethylhexanol. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 50(4), 2478-2481.
- [10] Miller, R., & Bennett, G. (1961). Producing 2-Ethylhexanol by the Guerbet Reaction. *Industrial & Engineering Chemistry*, 53(1), 33-36.

[11] Selective synthesis of 2-ethyl-1-hexanol from n-butanol through the Guerbet reaction by using bifunctional catalysts based on copper or palladium precursors and sodium butoxide. Carlo Carlini, Alessandro Macinai, Anna Maria Raspolli, Galletti Glauco Sbrana.

[12] Li, Y., Liu, X., An, H., Zhao, X., & Wang, Y. (2016). One-Pot Sequential Aldol Condensation and Hydrogenation of n-Butyraldehyde to 2-Ethylhexanol. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 55(22), 6293-6299.

[13] Leeuwen, P., & EbscoHost. (2005). *Homogeneous Catalysis: Understanding the Art*

[14] Kinetics of hydroformylation of propylene using RhCl(CO)(TPPTS)<sub>2</sub>/TPPTS complex catalyst in aqueous system, Chao Yang, Zai-Sha Mao, , Yuefa Wang, Jiayong Chen

[15] Bernas, A. Y., Mäki-Arvela, P., Salmi, T., Murzin, D., and Lehtonen, J. (2008). Kinetic modeling of propene hydroformylation with Rh/TPP and Rh/CHDPP catalysts. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 47(13), 4317-4324.

[16] BASF SE (2019). *Engelhard Industrial Bullion (EIB) Prices*.  
<<https://apps.catalysts.basf.com/apps/eibprices/mp/>>

[17] ResearchGate. Pei, P, Korom. S, Ling. K, Nasah. J,. *Cost comparison of syngas production from natural gas conversion and underground coal gasification* (2014).  
<[https://www.researchgate.net/publication/265687040\\_Cost\\_comparison\\_of\\_syngas\\_production\\_from\\_natural\\_gas\\_conversion\\_and\\_underground\\_coal\\_gasification](https://www.researchgate.net/publication/265687040_Cost_comparison_of_syngas_production_from_natural_gas_conversion_and_underground_coal_gasification)>

[18] PetroSkills, John M.Campbell (2015). Parámetros de dimensionamiento separadores Gas-líquido. <<http://www.jmcampbell.com/tip-of-the-month/spanish/?p=1487>>

[19] Linde group (2012). Hoja de seguridad del material (SDS) propileno. <[http://www.linde-gas.ec/en/images/HOJA%20DE%20SEGURIDAD%20PROPILENO\\_tcm339-98248.pdf](http://www.linde-gas.ec/en/images/HOJA%20DE%20SEGURIDAD%20PROPILENO_tcm339-98248.pdf)>

[20] Instituto nacional de seguridad e higiene en el trabajo (2003). *Fichas internacionales de seguridad química*.  
<<http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/501a600/nspn0559.pdf>>

- [21] Intratec. *Polymer grade propylene price history & forecast*.  
<<https://www.intratec.us/chemical-markets/polymer-grade-propylene-price>>
- [22] Tecnon OrbiChem (2013). *Chem-net facts. Chemical market insight and foresight 2-Ethylhexanol*. <[http://www.orbichem.com/userfiles/CNF%20Samples/2eh\\_13\\_11.pdf](http://www.orbichem.com/userfiles/CNF%20Samples/2eh_13_11.pdf)>
- [23] Repsol (2019). Gama compresores. < <https://www.repsol.com/es/productos-y-servicios/lubricantes/industria/gama-compresores/index.cshtml>>
- [24] Luyben, W.L. (2016). Economic trade-offs in acrylic acid reactor design. *Computers and Chemical Engineering*, 93, 118-127.
- [25] Luyben, W.L., (2013). *Distillation Design and Control Using Aspen Simulation*, 2nd ed. Wiley.
- [26] Instituto nacional de seguridad e higiene en el trabajo (1998). *NTP 342: Válvulas de seguridad (I): características técnicas*.  
<[http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/NTP/Ficheros/301a400/ntp\\_342.pdf](http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/NTP/Ficheros/301a400/ntp_342.pdf)> (12/04/2019)
- [27] Underwriters Laboratory, Inc., UL 142, "Steel aboveground Tanks for Flammable and Combustible Liquids." (1984)  
<[http://www.eeaa.gov.eg/ehsims/main/wastes/storage\\_table1.pdf](http://www.eeaa.gov.eg/ehsims/main/wastes/storage_table1.pdf)>
- [28] Ministerio de economía y empresa (2019). *ICO empresas y emprendedores 2019*.  
<<https://www.ico.es/web/ico/ico-empresas-y-emprendedores/-/lineasICO/view?tab=tipolInteres>> [Consultado a 13/09/2019]
- [29] Iberdrola S.A.U. Tarifas vigentes de electricidad (2014).  
<<https://www.iberdrola.es/empresas/informacion/mercado-energetico>> [Consultado a 12/05/2019]
- [30] Denver Mineral engineers, INC. Process fabricators INC. *Tank and vessel handbook*.  
<<http://www.denvermineral.com/Pdfs/TankVesselHandbook.pdf>>

[31] Academia Edu. *Pressure vessel code. ASME section VIII Division 1.*  
<[https://www.academia.edu/36356547/PRESSURE\\_VESSEL\\_CODE\\_ASME\\_SECTION\\_VIII\\_DIVISION\\_1\\_Introduction\\_to\\_ASME\\_Codes\\_Section\\_I\\_to\\_Section\\_XII](https://www.academia.edu/36356547/PRESSURE_VESSEL_CODE_ASME_SECTION_VIII_DIVISION_1_Introduction_to_ASME_Codes_Section_I_to_Section_XII)>

[32] Bastan tecnologías (2017). *Catálogo general 2017-2018.*  
<<http://www.bastan.es/catalogos-pdf/archivos-pdf/limpieza-industrial/1-catalogo-limpieza-industrial-bastan-es-2017-2018.pdf>> (20/04/2019)

[33] Santos maquinaria eléctrica S.L (2017). *Catálogo electrobombas.*  
<<http://www.santosmaquinaria.es/productos/electrobombas.pdf>>

[34] Universitat autònoma de Barcelona. Siero. B, García. G, Servera. M, Tkatchenko. R, Ferra. R., (2016). *Manual de càlculo, capítol XI (planta de producció d'àcid fòrmic).*  
<[https://ddd.uab.cat/pub/tfg/2016/168367/TFG\\_FormicCompany\\_v11.pdf](https://ddd.uab.cat/pub/tfg/2016/168367/TFG_FormicCompany_v11.pdf)>

[35] ArcelorMittal, Projects Oil & Gas. *Pipe Schedules (according to ASME/ANSI B36.10M).*  
<<http://ds.arcelmittal.com/repository/Projects%20Oil%20and%20Gas/Pipe%20Schedule.pdf>>

[36] Introducing TPPTS and related ligands for industrial biphasic processes. Boy Cornils, Emile G. Kuntz.

[37] TCI Chemicals (India) Pvt. Ltd. (CAS RN:63995-70-0 Product Number:T218) quotation.  
<<https://www.tcichemicals.com/eshop/en/in/commodity/T2187/?jsessionid=FE9B4A2C019E5BD81CD8EC967311B1A4>>

[38] Gavin Towler & Ray Sinnott, *Chemical Engineering Design Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design.* ISBN 978-0-08-096659-5 Ed. Elsevier (USA) 2013.

## 10. Anexos

10.2. Anexo 1. Hojas de seguridad.

10.2.2. Propileno

**PROPILENO**

ICSC: 0559

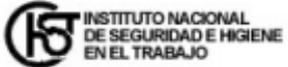






**MINISTERIO DE TRABAJO Y ASUNTOS SOCIALES ESPAÑA**

Metiletileno  
Propeno  
Metiletano (botella)  
 $C_3H_6 / CH_2CHCH_3$   
Masa molecular: 42.1



Nº CAS 115-07-1  
Nº RTECS UC6740000  
Nº ICSC 0559  
Nº NU 1077  
Nº CE 601-011-00-9



TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS
<b>INCENDIO</b>	Extremadamente inflamable.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar.	Cortar el suministro; si no es posible y no existe riesgo para el entorno próximo, dejar que el incendio se extinga por sí mismo; en otros casos apagar con polvo, dióxido de carbono.
<b>EXPLOSION</b>	Las mezclas gas/aire son explosivas.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. Evitar la generación de cargas electrostáticas (por ejemplo, mediante conexión a tierra) si aparece en estado líquido.	En caso de incendio: mantener fría la botella rociando con agua pero NO en contacto directo con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.
<b>EXPOSICION</b>			
• <b>INHALACION</b>	Somnolencia. Sofocación (Véanse Notas).	Ventilación.	Aire limpio, reposo. Respiración artificial si estuviera indicada. Proporcionar asistencia médica.
• <b>PIEL</b>	EN CONTACTO CON LÍQUIDO: CONGELACION.	Guantes aislantes del frío.	EN CASO DE CONGELACION: aclarar con agua abundante, NO quitar la ropa. Proporcionar asistencia médica.
• <b>OJOS</b>	Véase Piel.	Gafas ajustadas de seguridad, o pantalla facial.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
• <b>INGESTION</b>		No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	
<b>DERRAMES Y FUGAS</b>		<b>ALMACENAMIENTO</b>	
<b>ENVASADO Y ETIQUETADO</b>			

Evacuar la zona de peligro. Consultar a un experto. Ventilar. Eliminar todas las fuentes de ignición. NO verter NUNCA chorros de agua sobre el líquido. (Protección personal adicional: traje de protección completo incluyendo equipo autónomo de respiración).	A prueba de incendio. Mantener en lugar fresco.	NU (transporte): Clasificación de Peligros NU: 2.1 CE: símbolo F+ R: 12 S: 2-9-16-33
<b>VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE</b>		
<b>ICSC: 0559</b>	Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © CE, IPCS, 2003	



## Fichas Internacionales de Seguridad Química

### PROPILENO

ICSC: 0559

<b>D A T O S I M P O R T A N T E S</b>	<b>ESTADO FISICO; ASPECTO</b> Gas licuado comprimido incoloro.	<b>VIAS DE EXPOSICION</b> La sustancia se puede absorber por inhalación.
	<b>PELIGROS FISICOS</b> El gas es más denso que el aire y puede extenderse a ras del suelo; posible ignición en punto distante. y puede acumularse en las zonas más bajas produciendo una deficiencia de oxígeno. Como resultado del flujo, agitación, etc., se pueden generar cargas electrostáticas.	<b>RIESGO DE INHALACION</b> Al producirse pérdidas en zonas confinadas este gas puede originar asfixia por disminución del contenido de oxígeno del aire.
<b>PROPIEDADES FISICAS</b>	<b>PELIGROS QUIMICOS</b> Reacciona violentamente con oxidantes originando peligro de incendio y explosión.	
	<b>LIMITES DE EXPOSICION</b> TLV: A4 (ACGIH 2003) MAK no establecido.	
	Punto de ebullición: -48°C Punto de fusión: -185°C Densidad relativa (agua = 1): 0.5 Solubilidad en agua: escasa Presión de vapor, kPa a 25°C: 1158	Densidad relativa de vapor (aire = 1): 1.5 Punto de inflamación: gas inflamable Temperatura de autoignición: 460°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 2.4-10.3 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 1.77
<b>DATOS AMBIENTALES</b>		
<b>NOTAS</b>		
Altas concentraciones en el aire producen una deficiencia de oxígeno con riesgo de pérdida de conocimiento o muerte. Comprobar el contenido de oxígeno antes de entrar en la zona. Con el fin de evitar la fuga de gas en estado líquido, girar la botella que tenga un escape manteniendo arriba el punto de escape.		
Ficha de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-137. Código NFPA: H 1; F 4; R 1;		
<b>INFORMACION ADICIONAL</b>		

Los valores LEP pueden consultarse en línea en la siguiente dirección: <http://www.mtas.es/insht/practica/vias.htm>

Última revisión IPCS: 1998

Traducción al español y actualización de valores límite y etiquetado:  
2003  
FISQ: 6-161

**ICSC: 0559**

**PROPILENO**

© CE, IPCS, 2003

**NOTA LEGAL  
IMPORTANTE:**

Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. Su posible uso no es responsabilidad de la CE, el IPCS, sus representantes o el INSHT, autor de la versión española.

### 10.2.3. Hidrógeno

<b>HIDROGENO</b>		<b>ICSC: 0001</b>	
		<b>Marzo 2002</b>	
<b>CAS:</b>	1333-74-0	<b>H<sub>2</sub></b>	
<b>RTECS:</b>	MW8900000	<b>Masa molecular: 2.0</b>	
<b>NU:</b>	1049		
<b>CE Índice Anexo I:</b>	001-001-00-9		
<b>CE / EINECS:</b>	215-605-7		
<b>TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN</b>	<b>PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS</b>	<b>PREVENCIÓN</b>	<b>PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS</b>
<b>INCENDIO</b>	Extremadamente inflamable. Muchas reacciones pueden producir incendio o explosión.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar.	Cortar el suministro; si no es posible y no existe riesgo para el entorno próximo, dejar que el incendio se extinga por sí mismo; en otros casos apagar con agua pulverizada, polvo, dióxido de carbono.
<b>EXPLOSIÓN</b>	Las mezclas gas/aire son explosivas.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas. No manipular las botellas con las manos grasientas.	En caso de incendio: mantener fría la botella rociando con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.
<b>EXPOSICIÓN</b>			
<b>Inhalación</b>	Asfixia.	Sistema cerrado y ventilación.	Aire limpio, reposo. Respiración artificial si estuviera indicada. Proporcionar asistencia médica.
<b>Piel</b>	Congelación grave.	Guantes aislantes del frío.	Proporcionar asistencia médica.
<b>Ojos</b>		Gafas de protección de seguridad.	
<b>Ingestión</b>			
<b>DERRAMES Y FUGAS</b>	<b>ENVASADO Y ETIQUETADO</b>		
Eliminar toda fuente de ignición. Evacuar la zona de peligro. Consultar a un experto. Ventilar. Eliminar el vapor con agua pulverizada.	<b>Clasificación UE</b> Símbolo: F+ R: 12 S: (2)-9-16-33 <b>Clasificación NU</b> Clasificación de Peligros NU: 2.1		
<b>RESPUESTA DE EMERGENCIA</b>	<b>ALMACENAMIENTO</b>		
Ficha de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-20S1049 Código NFPA: H 0; F 4; R 0;	A prueba de incendio. Mantener en lugar fresco.		
<b>IPCS</b> International Programme on Chemical Safety    			
Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © IPCS, CE 2005			

VÉASE INFORMACIÓN IMPORTANTE AL DORSO

<b>DATOS IMPORTANTES</b>	
<p><b>ESTADO FÍSICO; ASPECTO:</b> Gas comprimido inodoro e incoloro.</p> <p><b>PELIGROS FÍSICOS:</b> El gas se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas. El gas es más ligero que el aire.</p> <p><b>PELIGROS QUÍMICOS:</b> El calentamiento intenso puede originar combustión violenta o explosión. Reacciona violentamente con aire, oxígeno, halógenos y oxidantes fuertes, originando peligro de incendio y explosión. Los metales catalizadores tales como el platino o el níquel aumentan este tipo de reacciones.</p> <p><b>LÍMITES DE EXPOSICIÓN:</b> TLV: asfixiante simple (ACGIH 2002).</p>	<p><b>VÍAS DE EXPOSICIÓN:</b> La sustancia se puede absorber por inhalación.</p> <p><b>RIESGO DE INHALACIÓN:</b> Al producirse una pérdida de gas se alcanza muy rápidamente una concentración nociva de éste en el aire.</p> <p><b>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN:</b> Asfixiante simple. Véanse Notas.</p>
<b>PROPIEDADES FÍSICAS</b>	
<p>Punto de ebullición: -253 °C Densidad relativa de vapor (aire = 1): 0.07</p>	<p>Punto de inflamación: gas inflamable Temperatura de autoignición: 500-571 °C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 4-76</p>
<b>DATOS AMBIENTALES</b>	
<b>NOTAS</b>	
<p>Altas concentraciones en el aire producen una deficiencia de oxígeno con riesgo de pérdida de conocimiento o muerte. Comprobar el contenido de oxígeno antes de entrar en la zona. A concentraciones tóxicas no hay alerta por el olor. Medir concentraciones de hidrógeno con un detector de gas adecuado (un detector de gas inflamable normal no es adecuado).</p>	
<b>INFORMACIÓN ADICIONAL</b>	
<p>Límites de exposición profesional (INSHT 2011):</p> <p>Notas: Asfixiante simple</p>	
<b>Nota legal</b>	<p>Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. Su posible uso no es responsabilidad de la CE, el IPCS, sus representantes o el INSHT, autor de la versión española.</p>
© IPCS, CE 2005	

10.2.4. Monóxido de carbono

<b>MONÓXIDO DE CARBONO</b>		<b>ICSC: 0023</b>	
		<b>Abril 2007</b>	
Óxido de carbono		Óxido carbónico	
<b>CAS:</b>	630-08-0      CO		
<b>RTECS:</b>	FG3500000      Masa molecular: 28		
<b>NU:</b>	1016		
<b>CE Índice Anexo I:</b>	006-001-00-2		
<b>CE / EINECS:</b>	211-128-3		
<b>TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN</b>	<b>PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS</b>	<b>PREVENCIÓN</b>	<b>PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS</b>
<b>INCENDIO</b>	Extremadamente inflamable. El calentamiento intenso puede producir aumento de la presión con riesgo de estallido.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar.	Cortar el suministro; si no es posible y no existe riesgo para el entorno próximo, dejar que el incendio se extinga por sí mismo; en otros casos apagar con dióxido de carbono, agua pulverizada, polvo.
<b>EXPLOSIÓN</b>	Las mezclas gas/aire son explosivas.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas.	En caso de incendio: mantener fría la botella rociando con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.
<b>EXPOSICIÓN</b>		<b>¡EVITAR LA EXPOSICIÓN DE MUJERES (EMBARAZADAS)!</b>	<b>¡CONSULTAR AL MÉDICO EN TODOS LOS CASOS!</b>
<b>Inhalación</b>	Dolor de cabeza. Confusión mental. Vértigo. Náuseas. Debilidad. Pérdida del conocimiento.	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Respiración artificial si estuviera indicada. Proporcionar asistencia médica. Ver Notas.
<b>Piel</b>			
<b>Ojos</b>			
<b>Ingestión</b>			
<b>DERRAMES Y FUGAS</b>		<b>ENVASADO Y ETIQUETADO</b>	
¡Evacuar la zona de peligro! Eliminar toda fuente de ignición. Consultar a un experto. Protección personal: equipo autónomo de respiración. Ventilar.		<b>Clasificación UE</b> Símbolo: F+, T; R: 12-23-48/23-61; S: 53-45 Nota: E <b>Clasificación NU</b> Clasificación de Peligros NU: 2.3; Riesgos Subsidiarios de las NU: 2.1 <b>Clasificación GHS</b> Peligro Gas extremadamente inflamable. Contiene gas a presión; puede explotar si se calienta. Mortal si se inhala. Puede perjudicar la fertilidad o dañar el feto si se inhala. Puede provocar daños en la sangre si se inhala. Provoca daños en la sangre y en el sistema nervioso central tras exposiciones prolongadas o repetidas.	
<b>RESPUESTA DE EMERGENCIA</b>		<b>ALMACENAMIENTO</b>	
Ficha de Emergencia de Transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-20S1016 o 20G1TF. Código NFPA: H3; F4; R0;		A prueba de incendio. Mantener en lugar fresco. Mantener en lugar bien ventilado.	
<b>IPCS</b> International Programme on Chemical Safety 			
Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © IPCS, CE 2007			

**VÉASE INFORMACIÓN IMPORTANTE AL DORSO**

## DATOS IMPORTANTES

**ESTADO FÍSICO; ASPECTO:**

Gas comprimido, incoloro, inodoro e insípido.

**PELIGROS FÍSICOS:**

El gas se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas. El gas penetra fácilmente a través de paredes y techos.

**PELIGROS QUÍMICOS:**

Puede reaccionar violentamente con oxígeno, acetileno, cloro, flúor, óxido nítrico.

**LÍMITES DE EXPOSICIÓN:**

TLV: 25 ppm como TWA; BEI establecido; (ACGIH 2006).  
MAK: 30 ppm, 35 mg/m<sup>3</sup>; Categoría de limitación de pico: II(1);  
Riesgo para el embarazo: grupo B; BAT establecido (DFG 2008).

**VÍAS DE EXPOSICIÓN:**

La sustancia se puede absorber por inhalación.

**RIESGO DE INHALACIÓN:**

Al producirse una pérdida de gas, se alcanza muy rápidamente una concentración nociva de éste en el aire.

**EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN:**

La sustancia puede afectar a la sangre, dando lugar a carboxihemoglobinemia y a alteraciones cardíacas. La exposición a elevados niveles puede producir la muerte. Se recomienda vigilancia médica.

**EFFECTOS DE EXPOSICIÓN PROLONGADA O REPETIDA:**

La sustancia puede afectar al sistema cardiovascular y al sistema nervioso central. Puede producir alteraciones en la reproducción humana.

## PROPIEDADES FÍSICAS

Punto de ebullición: -191 °C  
Punto de fusión: -205 °C  
Solubilidad en agua, ml/100 ml a 20 °C: 2,3  
Densidad relativa de vapor (aire = 1): 0,97

Punto de inflamación: gas inflamable  
Temperatura de autoignición: 605 °C  
Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 12,5-74,2

## DATOS AMBIENTALES

## NOTAS

El monóxido de carbono es un producto de la combustión incompleta del carbón, petróleo, madera. Está presente en los humos de escape de vehículos y en el humo de tabaco. Está indicado un examen médico periódico dependiendo del grado de exposición. A concentraciones tóxicas no hay alerta por el olor. En caso de envenenamiento con esta sustancia es necesario realizar un tratamiento específico; así como disponer de los medios adecuados junto a las instrucciones correspondientes. Esta ficha ha sido parcialmente actualizada en noviembre de 2008: ver Límites de exposición.

## INFORMACIÓN ADICIONAL

Límites de exposición profesional (INSHT 2011):

VLA-ED: 25 ppm; 29 mg/m<sup>3</sup>

Notas: sustancia tóxica para la reproducción humana de categoría 1A.

VLB: 3,5% de carboxihemoglobina en hemoglobina total; 20 ppm de CO en la fracción final del aire exhalado (aire alveolar). Notas F, L.

**Nota legal**

Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. Su posible uso no es responsabilidad de la CE, el IPCS, sus representantes o el INSHT, autor de la versión española.

## 10.2.5. Butiraldehído

<b>BUTIRALDEHÍDO</b>		<b>ICSC: 0403</b>	
		<b>Abril 2006</b>	
Butanal		Aldehído butílico	
<b>CAS:</b>	123-72-8	<b>C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O / CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CHO</b>	
<b>RTECS:</b>	ES2275000	<b>Masa molecular: 72,1</b>	
<b>NU:</b>	1129		
<b>CE Índice Anexo I:</b>	605-006-00-2		
<b>CE / EINECS:</b>	204-646-6		
<b>TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN</b>	<b>PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS</b>	<b>PREVENCIÓN</b>	<b>PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS</b>
<b>INCENDIO</b>	Altamente inflamable.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar.	Espuma, polvo, dióxido de carbono.
<b>EXPLOSIÓN</b>	Las mezclas vapor/aire son explosivas.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. NO utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular.	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.
<b>EXPOSICIÓN</b>			
<b>Inhalación</b>	Tos. Dolor de garganta.	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo.
<b>Piel</b>	Enrojecimiento.	Guantes protectores.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar con agua abundante o ducharse.
<b>Ojos</b>	Enrojecimiento. Dolor.	Gafas de protección de seguridad.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
<b>Ingestión</b>	Sensación de quemazón.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. Reposo.
<b>DERRAMES Y FUGAS</b>		<b>ENVASADO Y ETIQUETADO</b>	
Protección personal: respirador de filtro para gases y vapores orgánicos. NO permitir que este producto químico se incorpore al ambiente. Recoger, en la medida de lo posible, el líquido que se derrama y el ya derramado en recipientes herméticos. Absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte y trasladarlo a un lugar seguro.		<b>Clasificación UE</b> Símbolo: F R: 11; S: (2-)9-29-33 <b>Clasificación NU</b> Clasificación de Peligros NU: 3 Grupo de Envasado NU: II <b>Clasificación GHS</b> Peligro Líquido y vapores muy inflamables. Puede ser nocivo en caso de ingestión. Puede ser nocivo en contacto con la piel. Provoca irritación ocular grave. Nocivo para los organismos acuáticos.	
<b>RESPUESTA DE EMERGENCIA</b>		<b>ALMACENAMIENTO</b>	
Ficha de Emergencia de Transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-30S1129. Código NFPA: H3; F3; R0;		A prueba de incendio. Separado de materiales incompatibles. Ver Peligros Químicos. Mantener en lugar fresco. Mantener en la oscuridad. Almacenar en un área sin acceso a desagües o alcantarillas.	
<b>IPCS</b> International Programme on Chemical Safety			
			
			
Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © CE, IPCS, 2006			

VÉASE INFORMACIÓN IMPORTANTE AL DORSO

## DATOS IMPORTANTES

**ESTADO FÍSICO; ASPECTO:**

Líquido incoloro, de olor acre.

**PELIGROS FÍSICOS:**

El vapor es más denso que el aire y puede extenderse a ras del suelo; posible ignición en punto distante.

**PELIGROS QUÍMICOS:**

La sustancia probablemente pueda formar peróxidos explosivos. La sustancia puede polimerizar. Reacciona con aminas, oxidantes, bases fuertes y ácidos.

**LÍMITES DE EXPOSICIÓN:**

TLV no establecido.

MAK no establecido.

**VÍAS DE EXPOSICIÓN:**

La sustancia se puede absorber por inhalación del vapor y por ingestión.

**RIESGO DE INHALACIÓN:**

No puede indicarse la velocidad a la que se alcanza una concentración nociva en el aire por evaporación de esta sustancia a 20°C.

**EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN:**

La sustancia irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio.

## PROPIEDADES FÍSICAS

Punto de ebullición: 74,8°C

Punto de fusión: -99°C

Densidad: 0,8 g/cm<sup>3</sup>

Solubilidad en agua, g/100 ml: 7

Presión de vapor, kPa a 20°C: 12,2

Densidad relativa de vapor (aire = 1): 2,5

Punto de inflamación: -12°C c.c.

Temperatura de autoignición: 230°C

Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 1,9-12,5

Coefficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 0,88

## DATOS AMBIENTALES

La sustancia es nociva para los organismos acuáticos.

## NOTAS

Antes de la destilación comprobar si existen peróxidos; en caso positivo eliminarlos. Esta ficha ha sido parcialmente actualizada en agosto de 2007: ver Almacenamiento.

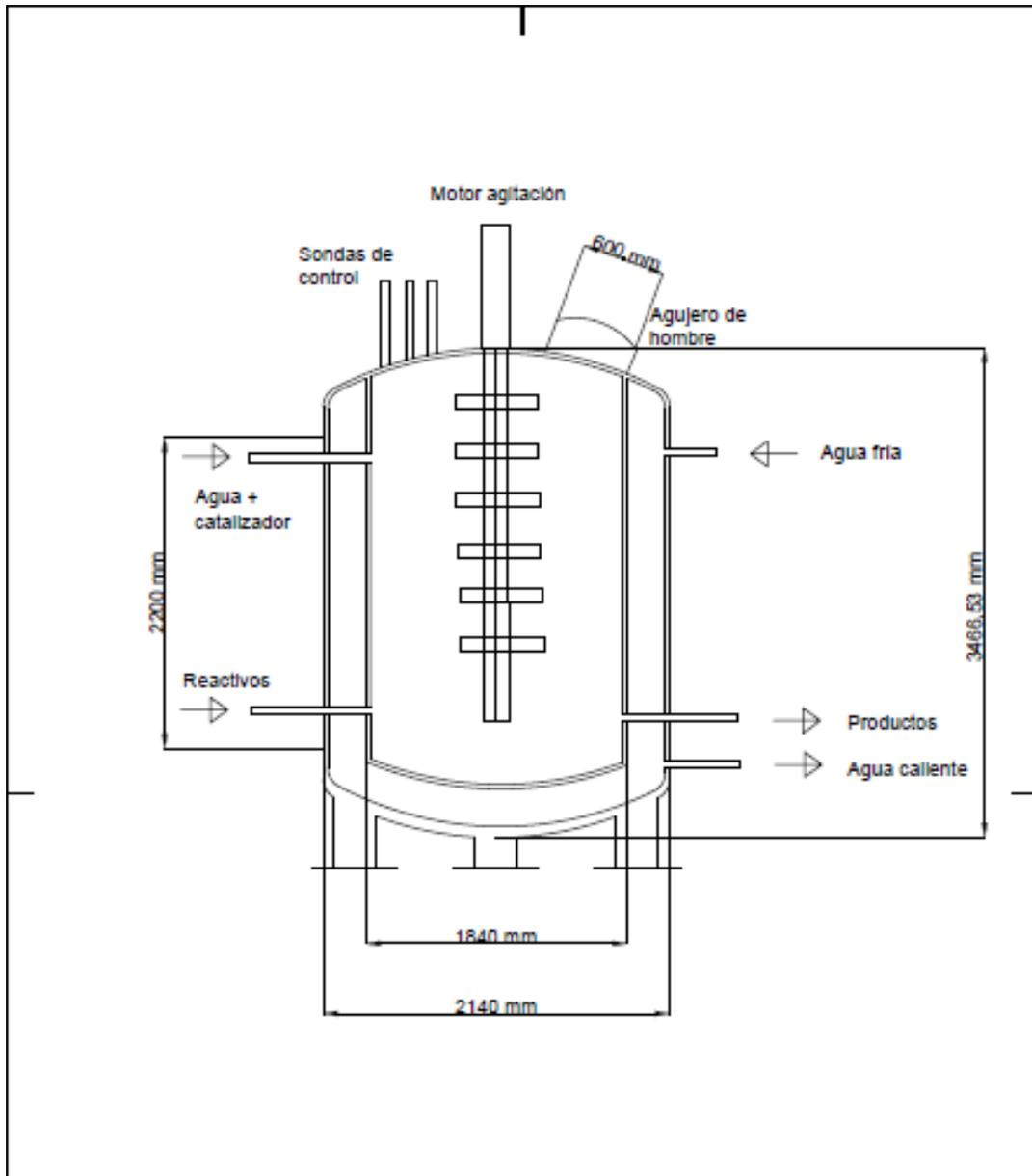
## INFORMACIÓN ADICIONAL

**Nota legal**

Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. Su posible uso no es responsabilidad de la CE, el IPCS, sus representantes o el INSHT, autor de la versión española.

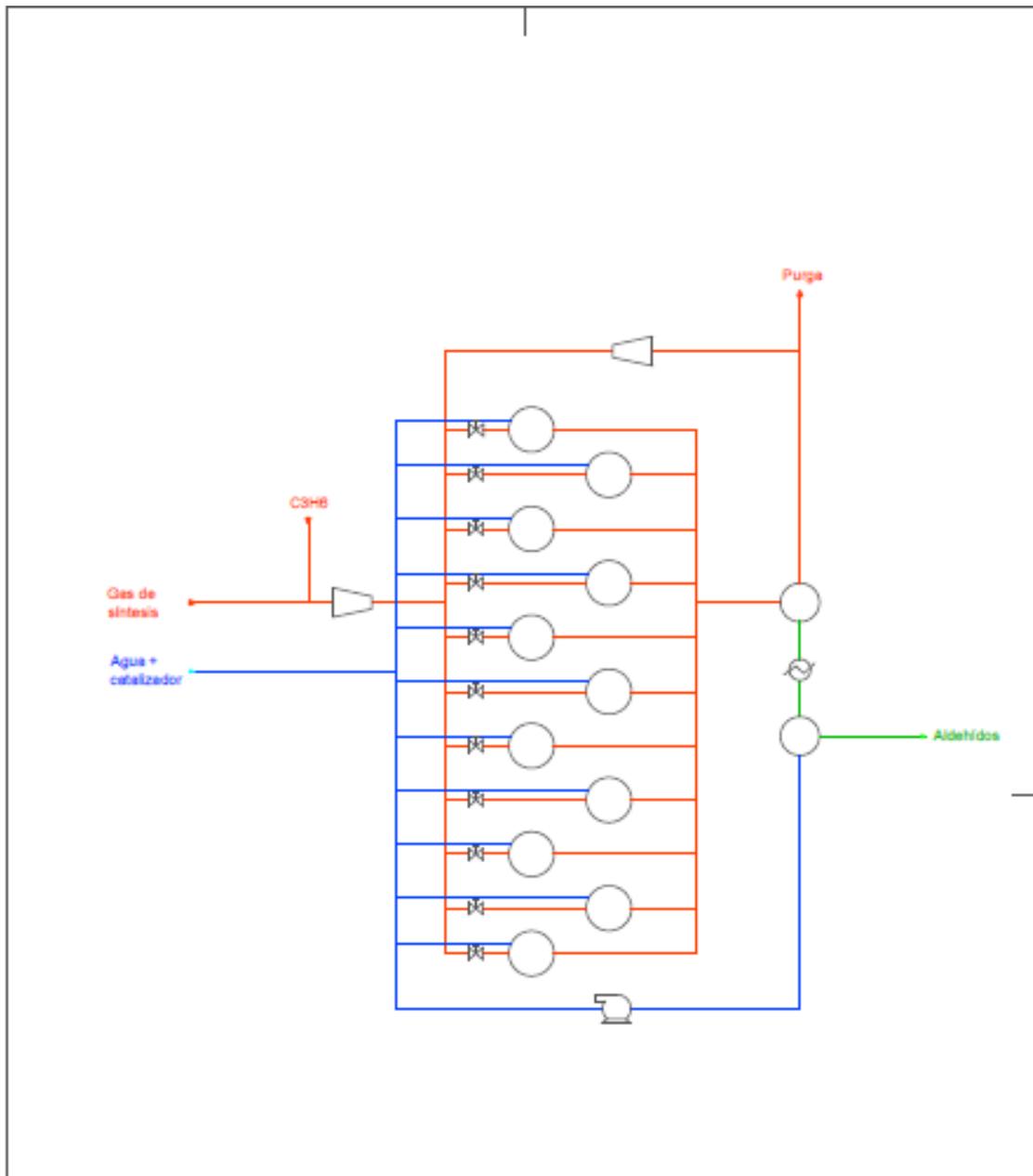
10.3.Anexo 2. Planos.

10.3.1. Plano del reactor



TIPO DE DOCUMENTO: Planos anexos	TÍTULO DEL DOCUMENTO:	ESCALA
DEPARTAMENTO: EPSA UPV	Reactor de hidroformilación para la producción de 2-EH	1:40
CREADO POR: Carmen Catalá Masanet		
APROBADO POR:	PROPIETARIO Carmen Catalá Masanet	Revisión: 1
		Fecha: 01/05/2019
		Hoja 1

10.3.2. Plano distribución en planta



TIPO DE DOCUMENTO: Planos anexos	TÍTULO DEL DOCUMENTO: Distribución en planta	ESCALA: 1:300
DEPARTAMENTO: EPSA UPV		
CREADO POR: Carmen Catalá Masanet		
APROBADO POR:	PROPIETARIO: Carmen Catalá Masanet	REVISIÓN: 1
		Fecha: 19/05/2019 Hoja 2